

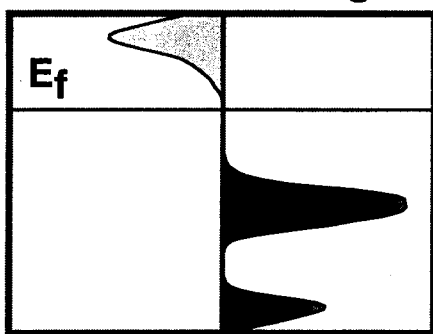
DV-X α 研究協会会報

Bulletin of the Society for Discrete Variational X α

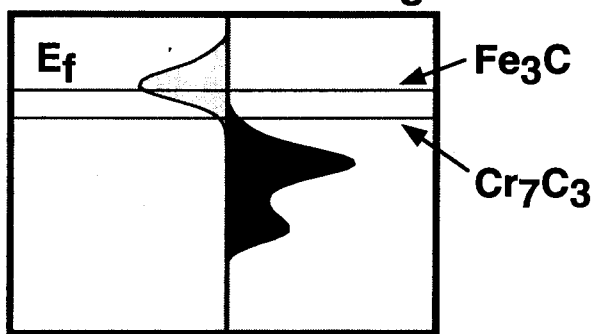
Vol.8, No.2 (1995)

• Bonding in Pure Carbide

Metal-C Bonding

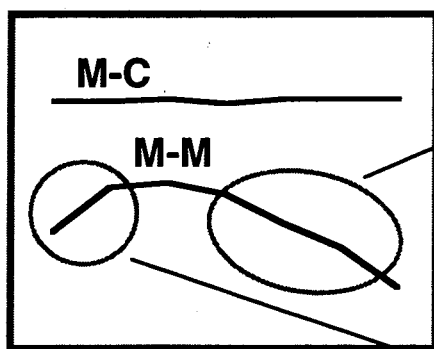


Metal-Metal Bonding

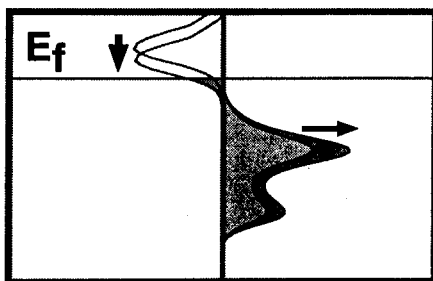
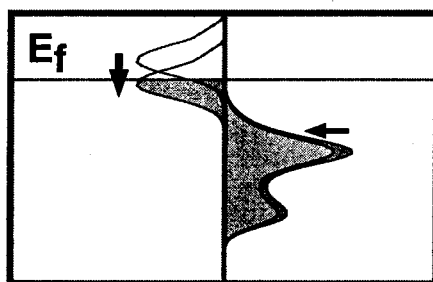


• Effect of Solutes

Bond Overlap
Population



Ti V Cr Mn Fe Co Ni
Solute Atom



DV-X α 研究協会会報

Bulletin of the Society for Discrete Variational X α
Vol. 8, No. 2 (1995)

第8回 DV-X α 研究会プログラム

95年年会報告書 一般講演 (No.9、22~50)

(No.1~21はVol.8, No.1に掲載)

遷移状態の計算について

第9回 DV-X α 研究会 開催のご案内

第2回 「DV-X α 研究協会奨励賞」受賞候補者の募集について

第1回 International Workshop on DV-X α Method 開催のおしらせ

第11回 「相対論効果」研究部会報告

DV-X α 研究協会 会員募集のご案内

DV-X α 研究協会 入会申込書

学生会員の方へお願い (学生会員の確認について)

プログラム (DV-X α ・symorb)申込書

DV-X α 法に関する別刷り提出のお願い

DV-X α 研究協会 役員名簿

第8回 DV-X α 研究会プログラム

会期： 1995年 8月3日(木)～5日(土)

会場： 福岡大学文系センター4階 第4会議室
〒814-80 福岡市城南区七隈 8-19-1

敬称略

登壇者のみ記載(共同研究者は当日の発表または報告書をご覧ください)

講演時間： 特別講演 45分 (発表40分、質疑応答5分)

招待講演 30分 (発表25分、質疑応答5分)

一般講演 5分 (発表のみ、質疑はポスターセッションにて行って下さい)

8月3日(木)

13:00～13:10 開会の挨拶 脇田久伸

13:10～14:25 <座長： 河合 潤>

*特別講演 1

宇田応之 (早大理工) 特性X線、オージェ電子スペクトル解析へのDV-X α 法の利用と問題点

*招待講演 1

松永克志 (京大工) イオン結晶中の格子欠陥の電子論的研究

14:25～14:45 コーヒーブレイク

14:45～15:20 <座長： 田中 功>

1. 松尾修司 (福岡大理) 分子パッキング構造を形成する平面性窒素四配位ニッケル(II)錯体のXANESスペクトル解析
2. 山本知之 (早大理工) 価電子帯がらみのオージェ電子スペクトルの解析
3. 鈴木達彦 (早大理工) 硫黄化合物の価電子帯XPSスペクトルの解析
4. 高橋昌男 (阪大産研) X線分析とMO計算によるTin-AlN固溶体薄膜の腐食挙動の研究
5. 足立裕彦 (京大工) 光電子スペクトルの第一原理計算
6. 中島崇之 (京大工) TiO₂及びSrTiO₃の電子線エネルギー損失分光微細構造(ELNES)
7. 吉矢真人 (京大工) α -quartzのX線吸収スペクトルの理論計算

15:20～15:55 <座長： 坂根弦太>

8. 繆 強 (京大工) 計算によるMoS₄²⁻と[(NC)CuS₂MoS₂]²⁻クラスターの可視紫外吸収スペクトル
9. 向山 毅 (京大化研) 3d遷移金属化合物のK α /K β X線強度比はなにでできるか
10. 中松博英 (京大化研) XANESと原子間距離 4f軌道の特徴
11. 宋 斌 (電通大工) SO₂のX線放出スペクトルの計算
12. 繁實章夫 (京大理) ニッケル(II)シッフ塩基錯体の結晶構造とモデル計算

13. 鈴木知史 (京大理) 金属銅のX線吸収スペクトル
14. 兼吉高宏 (兵庫県立工技セ) DV-X α 法による窒化ホウ素X線放射スペクトルの検討
15:55~16:30 <座長: 松永克志>
15. 小和田善之 (兵教大) DV-X α クラスター法によるテルライトガラスの構造解析
16. 池田隆司 (東工大) Ag3dXPSの非対称性の評価、BaF₂の電子状態
17. 那須三郎 (阪大基礎工) インビーム・メスbauer分光とDV-X α
18. 安井 潤 (東洋紡績) 2原子分子のX線スペクトル計算
19. 林 久史 (東北大科計研) 放射オージェスペクトル解析へのDV-X α 法の適用
20. 久保和造 (京大工) EELSの測定結果とDV-X α の比較
21. 山口敏夫 (福岡大理) 液体アンモニア中における溶媒和銅(II)イオンのXANESスペクトル解析

16:30~18:00 ポスターセッション

8月4日(金)

9:00~9:10 事務連絡

9:10~10:25 <座長: 足立裕彦>

*特別講演2

朴 順子 (ソウル大) Electric-field induced stains and pyroelectric coefficients in PMN-PT solid solution

*招待講演2

広津孝弘 (四国工技研) 2価遷移金属~ジアミノグリオキシム錯体のスピン相互作用

10:25~10:45 コーヒーブレイク

10:45~11:20 <座長: 広津孝弘>

22. 水野正隆 (京大工) Fe₃Cの電子状態に及ぼす固溶元素の影響
23. 高尾直樹 (京大工) 遷移金属ダイシリサイドの化学結合状態
24. 伊田英紀 (京大工) MgO中の遷移金属による光学遷移の理論計算
25. 姜 暎碩 (ソウル大) BaTiO₃薄膜形成の電子状態
26. 西村 巧 (岡山大工) Ti/Mg二元系クラスターの固溶性とその電子状態
27. 小橋裕之 (岡山理大理) アセチレンを取り込んだ酸素・硫黄架橋モリブデンクラスター錯体の電子状態
28. 今中裕次郎 (岡山理大理) 硫黄架橋混合金属サンドイッチキューバン型クラスター錯体 [(H₂O)₉Mo₃S₄MS₄Mo₃(H₂O)₉]⁸⁺ (M=Mo, Sn, Sb, Hg)の電子状態

11:20~11:55 <座長： 三浦 薫>

29. 中嶋尚之 (早大理工) InSb(111)A-2x2 表面上における α -Sn安定成長のメカニズム
30. 中村 淳 (早大理工) GsAs{111}極性界面の電子論的評価
31. 丸山陸弘 (東工大理) $M(\text{bpy})_2(\text{CN})_2$ (M=Fe, Ru, Os) 錯体の電子状態
32. 金原康治 (東工大理) 遷移金属錯体の (d,d^{*}) 遷移状態
33. 樋野村徹 (阪大基礎工) α -Fe の磁氣的性質
34. 川崎晋司 (信州大繊維) C₆₀F_x の分子構造
35. 関根理香 (東工大理) 遷移金属炭化物の化学結合の解明

11:55~13:25 ランチタイム

13:25~14:25 ポスターセッション

14:25~14:35 事務連絡

36. 森永正彦 (名古屋大工) 金属間化合物の結晶構造マップ
37. 石井知彦 (東工大理) 平面分子Au₂Cl₆ の電子状態
38. 森下政夫 (姫路工大) 鉄鋼スラグの電子状態
39. 福島公親 (東芝研究開発セ) ステンレス鋼表面と不純物の相互作用
40. 大橋直樹 (東工大工) DV-X α 法によるダイヤモンド中の欠陥の計算
41. 横井泰治 (東京ガス基礎技研) プロブスカイト型酸化物触媒上でのNO吸着・活性化
42. 中安哲夫 (宇部興産) Ln α -sialon の電子状態

15:10~15:45 <座長： 山本一男>

43. 角田直人 (阪大工) Al 表面上のAu の電子状態
44. 桑原浩史 (京大工) イオン結晶におけるイオン半径と圧縮性に対する電子論的考察
45. 稲場秀明 (川崎製鉄) DV-X α 計算によるパラメーターと熱力学パラメーターとの相関関係
46. 神谷敏夫 (東工大工) DV-X α 基底を用いた第一原理バンド計算による物性計算
47. 藤間一美 (山梨大工) X α 法を用いた分子軌道計算の高精度化の試み
~多中心積分の特徴とその実行~
48. 岩沢美佐子 (ソニー中研) X α 法を用いた分子軌道計算の高精度化の試み VI.
~モデル分子への適用と評価~
49. 栗原正義 金属ウランの電子状態 (1)
50. 尾上 順 (理 研) 結合距離の相対論的变化~Population解析からのアプローチ~

15:50~16:05 総 会
16:05~16:30 写真撮影、コーヒーブレイク
16:30~18:00 ポスターセッション
18:00~20:00 懇 親 会

8月5日(土)

9:00~9:10 事務連絡

9:10~10:40 <座長: 関根理香>

*招待講演3
三浦 薫 (ソニー中研) 強誘電性プロプスカイト型酸化物の電子状態

*招待講演4
田中 功 (京大工) セラミックス粒界研究への電子論の応用

*招待講演5
逸見義男 (神戸製鋼) BCC鉄中の水素の電子状態

10:40~10:50 コーヒーブレイク

10:50~12:20 <座長: 尾上 順>

*招待講演6
山本一雄 (無機材研) 固体表面における低速H⁺イオンの中性化

*招待講演7
平田 勝 (日本原子力研) DV-X α 法を用いた溶媒抽出選択性の電子論的理解

*招待講演8
坂根弦太 (岡山理大理) DV-X α 法による硫黄架橋モリブデンクラスター錯体の特異性の考察

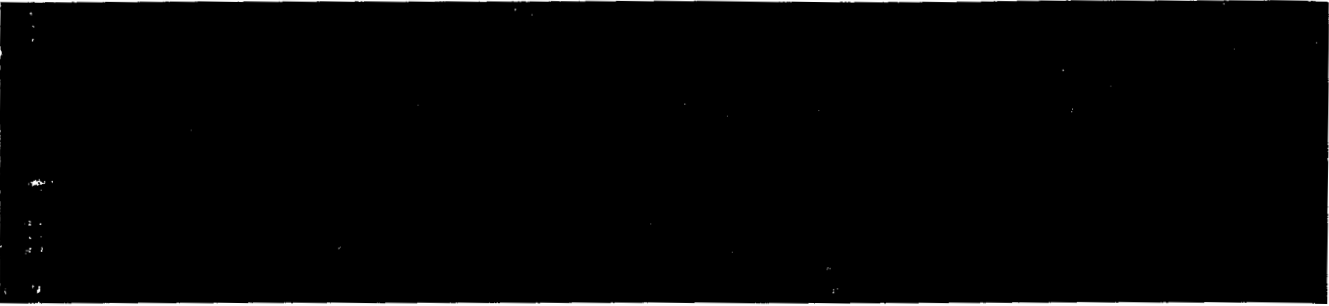
12:20~12:30 会議のまとめ、その他

DV-X α 研究協会会報, Vol. 8, No. 2 (1995)

1995年12月1日 発行

編集者 DV-X α 研究協会
発行人 DV-X α 研究協会
発行所 DV-X α 研究協会
〒606-01 京都市左京区吉田本町
京都大学大学院工学研究科材料工学教室材料設計工学気付
振替 01010-5-52330番 DVXA研究協会
印刷所 コスミック

Bulletin of the Society for Discrete Variational Xa
Vol. 8, No. 2 (1995)
©The Society for Discrete Variational Xa, Kyoto, 1995



DVX α

