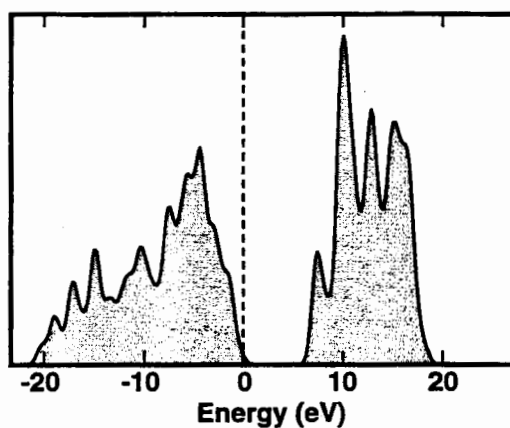
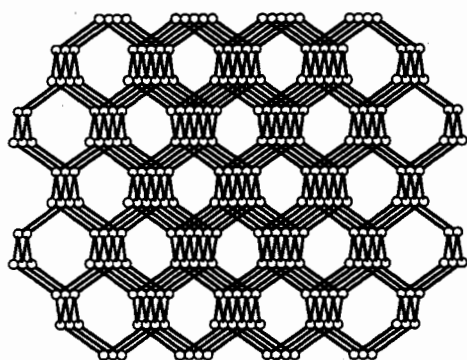


DV- $X\alpha$ 研究協会会報

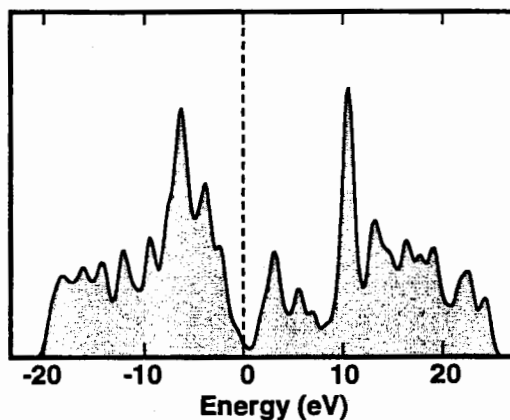
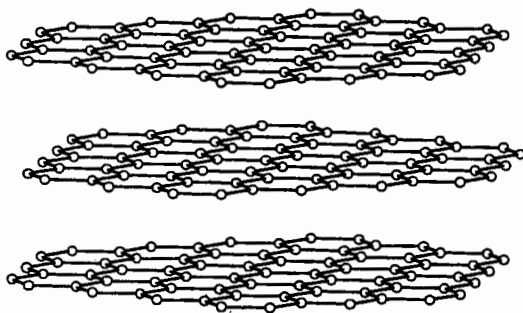
Bulletin of the Society for Discrete Variational $X\alpha$

Vol. 9, No. 2 (1996)

Diamond



Graphite



DV- $X\alpha$ 研究協会会報

Bulletin of the Society for Discrete Variational $X\alpha$

Vol. 9, No. 2 (1996)

第9回DV- $X\alpha$ 研究会プログラム

96年年会報告書 一般講演 (B1~C9)

第10回DV- $X\alpha$ 研究会 開催のご案内

第3回「DV- $X\alpha$ 研究協会奨励賞」受賞候補者の募集

DV- $X\alpha$ 研究協会 会員募集のご案内

DV- $X\alpha$ 研究協会 入会申込書

学生会員の方へ (学生会員確認書の提出のお願い)

プログラム (DV- $X\alpha$ ・symorb) 申込書

DV- $X\alpha$ 法を用いた論文リスト

DV- $X\alpha$ 法に関する別刷り提出のお願い

DV- $X\alpha$ 研究協会事務局より

DV- $X\alpha$ 研究協会 役員名簿

第9回 DV-X α 研究会 プログラム

DV-X α

会期： 1996年 8月8日(木)～10日(土)

会場： 大阪電気通信大学 四条畷キャンパス

〒575 大阪府四条畷市清滝 1130-70

電話 0720-76-3319 (会期中のみ設置)

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下さい)

講演時間： 特別講演 35, 60分 (質疑応答10分を含む)

依頼講演 20, 30分 (質疑応答5分を含む)

要約講演 3分 (発表のみ、

質疑はポスターセッションまたはコメント時間に行ってください)

コメント (講演のまとめと質疑)

< 8月8日(木) >

10:00～10:10 開会の挨拶 谷口 一雄

10:10～10:40 <座長： 山本 知之>

- | | | |
|----|-------------------|---|
| A1 | 繁實 章夫 (京大化研) | 分子の shake-up 遷移確率 |
| A2 | 山本 知之 (早大理工) | 多重電離状態の蛍光収率に現れる化学結合効果 |
| A3 | 松本 修治 (岡山大学) | 酸化物ガラスの光電子スペクトル |
| A4 | 伊田 英紀 (京大工) | MgO 中の遷移金属不純物による光学遷移の理論計算(II) |
| A5 | 柴垣 茂樹 (住友金属未来技術研) | 半導体 SrTiO ₃ セラミックスの O 1s XPS スペクトル |
| A6 | 向山 毅 (京大化研) | 未定 |

コメント (A1～6)

10:40～11:15 <座長： 広津 孝弘>

- | | | |
|----|-----------------|--|
| A7 | 市枝 信之 (京都工繊大工芸) | DV-X α 法を用いたイオン溶媒相互作用の評価 |
| A8 | 平田 勝 (原研大洗研) | 相対論DV-DS法による硝酸アクチニル抽出剤錯体の電子状態計算 |
| A9 | 尾関 徹 (兵庫教育大自然系) | UV-vis吸収スペクトルとDV-X α 法によるCrO ₄ ²⁻ , MoO ₄ ²⁻ イオン水和構造の考察 |

☆ 依頼講演 20分

- | | | |
|-----|--------------|-------------------------|
| A10 | 森下 政夫 (姫工大工) | 製鉄製鋼スラグ中の酸素イオンの存在形態と反応性 |
|-----|--------------|-------------------------|

コメント (A7～10)

11:15~11:45 <座長： 逸見 義男>

- A11 森永 正彦 (名大工) 水素吸蔵合金の電子状態
A12 逸見 義男 (神戸製鋼材料研) DV-X α 法による銅2元固溶合金の導電率と強度の予測の試み

☆ 依頼講演 20分

- A13 稲場 秀明 (川崎製鉄技術研) 合金の生成エンタルピーとDV-X α 法で計算したパラメーターとの相関
コメント (A11~13)

11:45~13:00 昼食

13:10~13:30 <座長： 関根 理香>

- A14 水野 正隆 (京大工) 岩塩型化合物/鉄界面の化学結合状態
A15 水野 敬広 (日本ガイシ材料研) NiO表面への分子吸着シミュレーション
A16 大場 史康 (京大工) ZnO 表面の電子状態計算
A18 田中 功 (京大工) 学部3年生にDV-X α 法を教える

コメント (A14~18)

13:20~14:00 <座長： 福島 公親>

☆ 依頼講演 20分

- A19 中村 淳 (早大理工) GaAs(III)A-2x2表面の構造安定性とその電子論的起源
A20 仁村 幹彦 (帝人システムテクノロジー) Si化合物のDensity of States
A21 申 宇 (名大工) Porous SiC の電子構造

コメント (A19~21)

14:10~15:10 ポスターセッション (発表番号奇数の方は、なるべくポスターの前にいて下さい。)
コーヒーその他のサービスあります。

15:10~15:20 休憩

15:20~16:30 <座長： 安井 潤>

☆ 特別講演 35分

- A22 林田 敏明 (高輝度光科学研究センター) SR光を利用した研究の現状・将来とDV-X α 計算への期待

☆ 特別講演 35分

- A23 足立 裕彦 (京大工) DV-X α 法の新展開

コメント (A22~23)

16:30~16:40 事務連絡

移動

18:00~20:00 懇親会

< 8月9日(金) >

9:00~9:10 事務連絡

9:10~10:10 <座長: 河合 潤>

☆ 依頼講演 20分

- | | |
|---------------------|---|
| B1 村松 康司 (NTT境界領域研) | 軟X線発光・吸収分光法による有機シリコン化合物の電子状態分析 |
| B2 鈴木 知史 (京大化研) | 金属銅のXANES |
| B3 吉矢 真人 (京大工) | Si系セラミックスの電子線エネルギー損失吸収端近傍微細構造の理論計算 |
| B4 兼吉 高宏 (兵庫県工業技術セ) | MGしたグラファイト粉末のX線放射スペクトルの解析 |
| B5 横溝 臣智 (福岡大理) | 銅(II)複核錯体のCuK α -XANES スペクトル解析 |
| B6 伊藤 伸一 (鹿児島大工) | 分子軌道法による希土類多重項の計算 |
| B7 河合 潤 (京大工) | コバルト酸化物, 特にLaCoO ₃ のスピン状態 |
| B8 宋 斌 (大阪電通大) | TiO ₂ のTiL _{2,3} X線放出スペクトルの解析 |
| B9 林 久史 (東北大科学計測研) | DV-X α 法によるK α 線低エネルギーサテライトの解釈 |

コメント (B1~9)

10:10~10:40 コーヒーブレイク

10:40~11:35 <座長: 松永 克志>

☆ 依頼講演 30分

- | | |
|----------------------|---|
| B10 三浦 薫 (ソニー中央研) | リチウムイオン2次電池正極材料: Li _x Mn ₂ O ₄ の電子状態 |
| B11 中松 博英 (京大化研) | CeO ₂ の電子構造 |
| B12 福島 公親 (東芝 研究開発セ) | 超伝導体中磁束のピン止め中心の解析 |
| B13 米倉伊佐久 (湘南工科大材料工) | PbZrO ₃ 置換体の電子構造 |
| B14 松永 克志 (京大工) | ハロゲン化銀中の点欠陥の電子状態 |
| B15 池田 隆司 (東工大理) | アルカリ土類フロライドの電子状態 |

コメント (B10~15)

11:35~11:45 写真撮影

11:45~13:00 ランチタイム

13:00~14:00 <座長: 藤間 一美>

☆ 特別講演 60分

- | | |
|--------------------------|---|
| B16 Turgut Bastug (京大化研) | Applications of Relativistic DV-X α Method for Heavy Molecules and Ion Atom Collisions. (DV-X α and Related Activities in Kassel) |
|--------------------------|---|

14:00~15:00 <座長: 向山 毅>

☆ 特別講演 60分

- | | |
|-----------------------------------|---------------------------|
| B17 Agnes Nagy (L. Kossuth Univ.) | Density Functional Theory |
|-----------------------------------|---------------------------|

- 15:00~15:20 コーヒーブレイク
- 15:20~16:30 パネルディスカッション 「DV-X α と物理量 ～物性物理～」
- 16:30~16:40 事務連絡
- 16:40~17:40 ポスターセッション (発表番号偶数の方は, なるべくポスターの前にいて下さい。)
コーヒーその他のサービスあります。
- 18:30~ 運営委員会, 常任幹事会 (関係者のみ)

< 8月10日(土) >

9:00~9:10 事務連絡

9:10~9:50 <座長: 高橋 昌男>

☆ 依頼講演 20分

- | | | |
|----|------------------|----------------------|
| C1 | 石川 英明 (富士通研究所) | 高精度数値計算を用いた分子軌道法 |
| C3 | 関根 理香 (静岡大理) | 金属炭化物の電子状態-TiCとUCの相違 |
| C4 | 高橋 昌男 (阪大産研) | 遷移金属窒化物の耐酸化性と熱的安定性 |
| C5 | 石井 知彦 (いわき明星大理工) | Eu-Se・MBE薄膜の電子構造 |
| C6 | 金 洋洙 (京大工) | 遷移金属ジカルコゲナイドの電子状態 |

コメント (C1~C6)

9:50~10:20 コーヒーブレイク

10:20~11:00 <座長: 坂根 弦太>

☆ 依頼講演 30分

- | | | |
|----|---------------|--------------------------------|
| C7 | 脇田 久伸 (福岡大理) | 金属錯体の溶存構造とDV-X α 計算 |
| C8 | 小橋 裕之 (岡山理大理) | 硫黄/酸素架橋を持つモリブデンクラスター錯体の振動子強度計算 |
| C9 | 坂根 弦太 (岡山理大理) | ジフェニルジチオレンを配位子とするモリブデン錯体の電子状態 |

コメント (C7~9)

11:00~11:30 総 会

11:30~12:00 会議のまとめ、その他

DV-X α 研究協会会報, Vol. 9, No. 2(1996)

1996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
〒532 大阪市淀川区西中島5丁目6-16
新大阪大日ビル10階 1001号
泉科学振興財団気付
DV-X α 研究協会事務局
振替 01010-5-52330番 DVXA研究協会
印刷所 研恒社

Bulletin of the Society for Discrete Variational X α
Vol. 9, No. 2(1996)

©The Society for Discrete Variational X α , Osaka, 1996

D X α