

## 第9回大型計算成果発表会

電子計算機センター 第9回大型計算成果発表会

「使用プログラムの特徴と研究成果の報告」

日 時	平成元年8月17日（木） 9:30～12:35
場 所	分子研 研究棟 101号室

### プログラム

9:30	挨拶 センター長
9:35	塚田 捷、 <u>島 信幸</u> 、田仲 田喜夫、影島 博之、常行 真司（東大 理） 表面・海面・クラスターの電子構造とダイナミクス
10:05	円谷 和雄、 <u>渡辺 誠</u> 、近藤 錠治、青木 優、渡辺 圭一、高木 伸一、小高 秀文、中田 慎二、馬場 秀成（明治大 工） 分子動力学法による過冷却液体の構造変化
10:35	<u>寺倉 清之</u> 、石田 浩、滝沢 聰、小林 一昭（東大 物性研） 固体表面と遷移金属の電子状態 -金属表面でのアルカリ吸着及び $\text{SiO}_2$ の高圧相-
11:05	山口 兆（阪大 基礎工） 金属酸化物のCASSCF CI計算 -磁気的相互作用のab initio計算-
11:35	里子 充敏、 <u>久保 康則</u> （日大 文理） 分子、固体及び表面の電子状態の理論的計算 - $\text{RB}_6$ (R=La,Ce,Pr,Nd)の陽電子消滅-
12:05	平尾 公彦、丹羽 淳、茂木 孝一（名大 教養）、和佐田 裕昭、小畠 繁樹（名大 理） 分子の電子状態と化学反応に関する研究

