

## 第7回大型計算成果発表会

### 電子計算機センター 第7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	昭和62年9月9日（水） 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	大野 公男、佐々木 不可止、田中 皓、野呂 武司、野村 力、竹下 幸一、長内 有、村上 明德、寺嶋 秀美、庄田 孝行、山本 裕一、村上 弘、望月 祐志、阪井 健男、岩城 宏明、青木 仁（北大 理） 分子のSFC-CI計算
10:05	中辻 博、北尾 修、中尾 武寿、小森 正敏、伊沢 勝、中井 浩巳（京大 工） 励起分子と触媒系の電子状態と化学反応
10:35	大沢 映二、J. RUDZINSKI、D. BARBIRIC（北大 理） 有機化学にたいする計算科学的手法の適用
11:05	森永 正彦、加藤 正人、上村 高敏（豊橋技科大 生産システム工学系） 遷移金属化合物および合金の電子構造
11:35	片岡 洋右、辰巳 武、岡本 博文、松本 充弘、木村 光男（京大 理）、岡田 謙吉（岐阜大 教養） 固体メタンおよび水の物性の研究
12:35	田仲 二郎、田中 智津子（名大 理）、平尾 公彦（名大 教養） 近赤外部におけるラマン効果によるポリアセチレンの構造の研究 - ポリアセチレンのモデル分子の分子軌道計算 -