

## 第13回大型計算成果発表会

### 電子計算機センター 第13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5年9月10日（水） 9:40～12:15

場 所 分子研 研究棟 101号室

## プログラム

9:40	挨拶 センター長
9:45	森永 正彦、江崎 尚和、井上 聡、斉藤 淳一、湯川 宏、高橋 泰夫、南部 智慧、福森 淳三（豊技大 工） 遷移金属化合物および合金の電子構造 -軽合金の機械的性質への応用-
10:15	石田 俊正（静大 教養） 高励起状態の関与する化学反応の理論的研究
10:45	田隅 三生、吉川 行夫、岡本 裕巳、島居 肇、坂本 章、山北 佳宏、増田 聡、内田 靖恵、横沼 奈美（東大 理） 種々の巨大分子とそのモデル化合物の構造と振動スペクトル
11:15	中辻 博、杉本 豊成、波田 雅彦、中井 浩己、江原 正博、福西 快文、吉本 正美、阿井 敏通、東大路 卓司、森田 裕史、安田 耕二、小川 博司、高橋 一、田中 陽子、長谷川 淳也（京大 工） 励起状態と表面-分子相互作用系の電子状態と化学反応
11:45	能勢 修一、米沢 富美子、中西 秀、五味 壮平、小松川 浩、青木 圭子、藤原 進、土井 茂生、八木 裕子、寺尾 豊（慶大 理工）、山口 俊夫（東女医大 物理） 電子状態も考慮した分子動力学シミュレーションによる固体物性の研究 -カルコゲン系の電子状態と構造-