

第 34 回 DV-X α 研究会・総会（龍谷大学）プログラム

9/8（木）

9 : 45	事務連絡
9 : 50	開会挨拶： 石井 知彦（香川大学、DV-X α 研究協会会長）

10 : 00- 11 : 00 座長：石井 知彦（香川大学）	
10 : 00	Oral-01 森永 正彦（名古屋産業科学研究所） 「金属中の格子欠陥の周りの原子変位と自己拡散」
10 : 15	Oral-02 足立 裕彦（京都大学名誉教授） 「金属ホウ化物の化学結合」
10 : 30	Oral-03 松沢 英世（北里大学） 「アセンおよび金属ポルフィリンの励起状態計算」
10 : 45	Oral-04 尾上 順（名古屋大学） 「The uptake characteristics of Prussian blue nanoparticles for platinum-group elements toward recycling of precious metals from nuclear and electronic wastes」
11 : 00 - 11 : 15 休 憩	

11 : 15 - 12 : 15 座長：本塚 智（九州工業大学）	
11 : 15	Oral-05-s 松本 真緒（香川大学） 「希少糖の結晶形成における電子状態の解明」
11 : 30	Oral-06-s 平松 佳恵（兵庫県立大学） 「砂糖の融点変動要因解明に向けたスクロス分子の MD/DFT 計算」
11 : 45	Oral-07 関根 理香（静岡大学） 「機械学習による 1 価金属クラスターのグラフ理論的解析」
12 : 00	Oral-08 小和田 善之（兵庫教育大学） 「DV-X α 計算支援環境 on Mac の開発」
12 : 15 - 12 : 25 集合写真撮影	
12 : 25 - 13 : 15 昼 休 み	

13 : 15 - 14 : 30 座長：村松 康司（兵庫県立大学）	
13 : 15	Oral-09 竹村 翔太（関西学院大学） 「第一原理計算による CaF ₂ 中 Eu ²⁺ における バンドギャップ中のエネルギー準位位置の予測」
13 : 30	Oral-10 石井 知彦（香川大学） 「超原子 Al ₁₃ を含む超原子分子の電子構造」
13 : 45	Oral-11 本塚 智（九州工業大学） 「鉄/黒鉛界面の酸素が黒鉛のベーサル面の配向に及ぼす作用の解明」
14 : 00	Oral-12 小和田 善之（兵庫教育大学） 「硫化物系 Li ⁺ イオン固体電解質表面に吸着した水分子の電子状態」
14 : 15	Oral-13 栗崎 敏（福岡大学） 「DV-ME 法を用いたニッケル水和錯体の溶存構造解析」
14 : 30 - 14 : 50 休 憩	

14 : 50 - 15 : 42 座長 : 栗崎 敏 (福岡大学)	
14 : 50	Poster-01-s 田中 利幸 (兵庫県立大学) 「軟 X 線吸収分光法と第一原理計算による長鎖脂肪族炭素の C K 端 XANES 解析」
14 : 53	Poster-02-s 本安 律稀 (香川大学) 「Alkyl-sorboside の単結晶 X 線構造解析と電子状態計算」
14 : 56	Poster-03-s 伊藤 琴音 (九州大学) 「生体内ハロゲン結合の指標開発を目指した第一原理計算」
14 : 59	Poster-04 小野 孝文 (一関高専) 「TiB ₂ の格子伸縮による状態密度ピークシフト解析」
15 : 02	Poster-05-s 真砂 俊希 (関西学院大学) 「第一原理計算と機械学習を用いたペロブスカイト型酸化物中の Mn ⁴⁺ イオンにおける発光エネルギーの予測」
15 : 05	Poster-06-s 田中 周馬 (関西学院大学) 「SrTiO ₃ 中 Mn ⁴⁺ における d-d 遷移の第一原理計算 およびクラスターサイズ依存性の解析」
15 : 08	Poster-07-s 杉村 怜音 (関西学院大学) 「OLCAO 法と DV-X α 法を用いたガーネット型結晶における エネルギー構造の第一原理計算」
15 : 11	Poster-08-s 西村 学章 (香川大学) 「セリアの水素発生効率の遷移金属ドーピングによる効果」
15 : 14	Poster-09-s 本田 衛 (関西学院大学) 「第一原理計算と機械学習を用いたペロブスカイト型酸化物結晶中 Ce ³⁺ における 4f-5d 遷移エネルギーの予測」
15 : 17	Poster-10-s 岡田 紗也香 (関西学院大学) 「SrSO ₄ 中の Eu ²⁺ における第一原理計算およびクラスターサイズ依存性の解析」
15 : 20	Poster-11-s 岡村 竜徳 (関西学院大学) 「第一原理計算及び機械学習による Y ₃ Al _{5-x} Ga _x O ₁₂ 中の Tb ³⁺ における 4f-5d 遷移エネルギーの予測及び電子状態解析」
15 : 23	Poster-12-s 杉山 歩 (香川大学) 「八面体六配位錯体における構造変化とスピン状態の変化」
15 : 26	Poster-13-s 宇田 真之介 (兵庫県立大学) 「第一原理計算によるイミダゾリウム系イオン液体の軟 X 線吸収スペクトル解析」
15 : 29	Poster-14 藤原 学 (龍谷大学) 「シッフ塩基配位子の平面 4 配位ニッケル(II)・銅(II)・亜鉛(II)錯体の X 線光電子スペクトルと分子軌道計算」
15 : 32 - 15 : 50 事務連絡・休憩	
15 : 50 - 17 : 30 ポスター発表 (45 分×2)	
奇数番号 : 15 : 50 - 16 : 35 Sozo Square 2 偶数番号 : 16 : 40 - 17 : 30 Sozo Square 1	

9/9 (金)

9:00	事務連絡
9:10 - 9:40 座長：表彰委員会委員長	
9:10	Award-01【奨励賞受賞講演】 西村 学章 (香川大学) 「高効率水素発生を目的とした酸化セリウムに関する理論的研究」
9:40 - 10:40 座長：藤原 学 (龍谷大学)	
9:40	招待講演-01 上野 貢生 (北海道大学) 「光を蓄えるナノ構造による分光分析化学」
10:40 - 10:50 休憩	
10:50 - 11:50 座長：糟野 潤 (龍谷大学)	
10:50	招待講演-02 永谷 広久 (金沢大学) 「ソフト界面における電荷移動反応の分光電気化学解析」
11:50 - 13:00 昼休み	
13:00 - 13:30 表彰委員会報告・表彰式	
13:30 - 15:30 総会	
13:30	開会挨拶：石井 知彦 (香川大学、DV-X α 研究協会会長)
	総会 (議長選出・議事・会計監査・報告)
15:20	閉会挨拶：石井 知彦 (香川大学、DV-X α 研究協会会長)