

# 第 27 回 DV-X $\alpha$ 研究会 プログラム 第 5 版 (作成: 2014 年 7 月 22 日)

8 月 6 日 (水)

12:50–13:00 実行委員長挨拶、事務連絡

13:00–14:40 オーラル発表 5 件 座長：龍崎 奏 (九大先導研)

O-1 13:00–13:20 下山 巖 (日本原子力研究開発機構)

「グラファイト構造ホウ素窒化ホウ素の原子配置に関する分極ルールの再検討」

O-2 13:20–13:40 小和田善之 (兵教大院自然)

「岩塩型構造を有する化合物表面における金属原子の化学結合状態」

O-3 13:40–14:00 許 哲峰 (広大院工)

「高温対応の無鉛はんだ合金の設計と特性」

O-4 14:00–14:20 高嶋明人 (青学大理工)

「密度汎関数法による 1 次元フラーレンポリマーのラマン散乱スペクトルの解析」

O-5 14:20–14:40 吉澤一成 (九大先導研)

「分子伝導の軌道理論」

14:40–14:50 休憩

14:50–16:00 ポスタープレビュー

進行：高嶋明人 (青学大理工)

P-1 ~ P-28 (2 分/人)

16:00–17:30 ポスター発表 (P-1 ~ P-28 : 奇数番 16:00–16:45, 偶数番 16:45–17:30)

8月7日(木)

8:50-9:00 事務連絡

9:00-10:20 オーラル4件

座長：坂根弦太（岡山理大理）

O-6 9:00-9:20 森永正彦（豊田理研）

「原子化エネルギーから見た高圧下でのシリカの相転移と化学結合」

O-7 9:20-9:40 石井知彦（香川大工）

「分子の歪みを考慮した四配位金属錯体における配位子場分裂」

O-8 9:40-10:00 村松康司（兵県大院工）

「ニュースバルの多目的ビームライン BL10 における軟X線分析」

O-9 10:00-10:20 中川克己（MO BASICS Research）

「イオン性結晶におけるエネルギー勾配計算」

10:20-10:40 休憩

10:40-12:00 オーラル5件

座長：栗崎 敏（福岡大理）

O-10 10:40-11:00 鳥本 司（名大院工）

「イオン液体/金属スパッタリング法による  $\text{AuPd@In}_2\text{O}_3$  コアシェル粒子の作製とその電極触媒特性」

O-11 11:00-11:20 田中健太郎（名大院理）

「逐次的ロタキサン形成によるポルフィリンアレイのプログラム構築」

O-12 11:20-11:40 福島公親（東芝原子力エンジニアリングサービス（株））

「SIWB 法を用いた負イオン基底関数生成 well と有限要素法による確認」

O-13 11:40-12:00 野田祐輔（横国大院工）

「1次元 C<sub>60</sub> フラーレンポリマーの電気伝導・熱伝導シミュレーション」

O-14 12:00-12:20 川本大祐 (九大院理)

「相対論効果を考慮に入れた DV-X $\alpha$  法を用いたテトラクロリド金酸イオンの加水分解に伴う電子状態変化」

12:20-13:30 ランチ

13:30-15:30 ポスター発表 (P1-P27: 奇数番 13:30-14:30, 偶数番 14:30-15:30)

15:30-16:00 休憩

16:00-17:00 招待講演 1 件

座長: 尾上 順 (名大工)

I-1 八木伸也 (名大エコトピア研)

「He-path を用いた NEXAFS 法によるスクアレンの加硫反応に関する研究」

17:00-17:10 事務連絡

17:30-19:30 懇親会 (名大内レストラン 花の木)

8月8日 (金)

8:50-9:00 事務連絡

9:00-9:30 特別企画 2 件

座長: 北浦 守 (山形大理)

S-1 9:00-9:15 足立裕彦 (京大名誉教授)

「DV-X $\alpha$  研究における那須三郎先生の業績」

S-2 9:15-9:30 平田 勝 (日本原子力研究開発機構)

「金属ウラン燃料と DV-X $\alpha$  — 栗原博士の研究」

9:35-10:20 受賞講演 1 件

座長: 村松康司 (兵県大院工)

A-1 (奨励賞) 9:35-10:20 弓削是貴 (京大院工)

「第一原理統計熱力学に基づく合金材料設計」

10:20-10:30 休憩

10:30-11:15 受賞講演 1 件

座長：石井知彦 (香川大工)

A-2 (学術賞) 10:30-11:15 小笠原一禎 (関学大院理工)

「第一原理多電子状態計算手法の開発および多重項解析に基づく量子材料科学の開拓」

11:15-12:00 受賞講演 1 件

座長：森永正彦 (豊田理研)

A-3 (協会賞) 11:15-12:00 脇田久伸 (福岡大学名誉教授)

「溶存構造解析精密化を進める DV- $X\alpha$  法の展開と DV- $X\alpha$  研究協会発展への貢献」

12:10-13:00 総会

13:00-13:10 閉会挨拶

## ポスター発表

P-1 Eman Haji (関学大院理工)

「Effects of charge transfer on the centroid shift of the  $4f-5d$  transition of  $Ce^{3+}$  in oxides and fluorides」

P-2 岡田 融 (兵県大院工)

「第一原理計算 CASTEP と DV-X $\alpha$  法によるグラフェンエッジ炭素の CK 端 XANES 解析」

P-3 Fatimah Alluqmani (関学大院理工)

「Multiplet energy level diagrams for  $d^3$  ions under  $D_{3d}$  symmetry in Oxides」

P-4 吉田祐規 (香川大工)

「酸素発生中心  $Mn_4CaO_5$  錯体における構造の歪みと電子状態の変化」

P-5 伊東 茜 (関学大院理工)

「DV-X $\alpha$ 法と配位子場理論に基づく酸化物中  $Cr^{3+}$ ,  $Mn^{4+}$  イオンにおける R ライン及び U バンドエネルギーの予測」

P-6 加藤雅洋 (青学大院理工)

「ラマン分光法における THF-溶媒相互作用の研究」

P-7 吉田朋子 (名大エコトピア研)

「金属酸化物光触媒中の活性種を対象とした構造及び電子状態解析」

P-8 Novita Mega (関学大院理工)

「Effects of Bond Lengths on the Optical Properties of  $Mn^{4+}$  in  $A_2BF_6$ -type Crystals」

P-9 佐藤大樹 (香川大工)

「酸解離定数 pKa の電子論的考察」

P-10 柴 弘太 (物材機構 MANA)

「無機粒子合成における核形成／成長過程の実験研究と DV-X $\alpha$  計算解析によるナノ・バイオテクノロジーへの応用展開」

P-11 小川智史 (名大院工)

「Mg-Pd ナノ粒子の水素吸放出による化学状態変化の XAFS 分析」

P-12 小野孝文 (一関高専)

「層状 AlB<sub>2</sub> の状態密度」

P-13 松隈高広 (関学大院理工)

「第一原理計算に基づく MS(M=Mg, Ca, Sr, Ba)中の Ce<sup>3+</sup>における 4f-5d 遷移スペクトルの解析」

P-14 松沢英世 (北里大理)

「[M<sup>III</sup>(2,2'-bipyridine)<sub>3</sub>]<sup>3+</sup> (M = Fe, Ru, Os) の電子構造と相対論的 DV-X $\alpha$  分子軌道計算」

P-15 植村智之 (兵県大院工)

「DV-X $\alpha$ 分子軌道法による非晶質構造ダイヤモンドの電子状態計算」

P-16 石井 忍 (山形大理)

「電子状態解析に基づく新規オージェーフリー発光物質の探索」

P-17 川本大祐 (九大院理)

「相対論効果を考慮に入れた DV-X $\alpha$  法を用いたテトラクロリド金酸イオンの加水分解に伴う電子状態変化 (O-14)」

P-18 村上竜平 (兵県大院工)

「イオン液体の XANES 測定と電子状態計算」

P-19 中川克己 (MO BASICS Research)

「エネルギー勾配計算の負荷軽減」

P-20 田村 光 (関学大院理工)

「SiAlON 及び CaAlSiN<sub>3</sub> に添加した Ce<sup>3+</sup>, Eu<sup>2+</sup> における吸収スペクトルの第一原理計算」

P-21 渡邊英樹 (名大院工)

「SnTe 半導体に対する低速ネオンイオンの阻止能」

P-22 藤原 学 (龍谷大理工)

「SOD 機能を有する新規銅(II)シッフ塩基錯体の合成と電子状態」

P-23 藤田悦子 (関学大院理工)

「サファイア中の遷移金属イオンの第一原理計算」

P-24 南角和也 (岡山理大院理)

「固体パラ水素中の包摂原子の電子状態-II (2)」

P-25 妹尾辰也 (香川大院工)

「DV-X $\alpha$  法を用いた DL ラセミ型超分子希少糖の結晶構造の安定性」

P-26 野田祐輔 (横国大院工)

「Fermi 準位高状態密度を示す 8 員環欠陥含有カーボンナノ構造体」

P-27 林 孝太郎 (岐阜高専)

「メカノケミカル固相反応によって創出したヒドロキシキノリン/アパタイト複合系・界面相互作用の解明」

P-28 Chan-Seo You (Korea Basic Science Institute)

「Electronic structures of alkaline doped TiO<sub>2</sub> by first-principle methods」