DV−Xα研究会 優秀発表賞

DV-Xα 研究協会

2022 年度（令和 4 年度） 第 34 回 DV-Xα 研究会（龍谷大学）

優秀発表賞	九州大学	伊藤 琴音
	Poster-03-s	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
優秀発表賞	関西学院大学	本田 衛
	Poster-09-s	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
優秀発表賞	香川大学	松本 真緒
	Oral-05-s	希少糖の結晶形成における電子状態の解明
優秀発表賞	兵庫県立大学	田中 利幸
	Poster-01-s	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 CK 端 XANES 解析

2023 年度（令和 5 年度） 第 35 回 DV-Xα 研究会（九州工業大学）

優秀発表賞	龍谷大学	小川 颯太
	Os-01	希配位ドナーの異なる平面四配位型シッフ塩基錯体の X 線光電子スペクトルと DV-Xα 分子軌道計算
優秀発表賞	兵庫県立大学	豆崎 実夢
	Ps-04	第一原理計算による Cellulose の CK 端 XANES 解析
優秀発表賞	九州大学	伊藤 琴音
	Ps-13	第一原理計算によるタンパク質/リガンド相互作用の評価

2024 年度（令和 6 年度） 第 36 回 DV-Xα 研究会（福岡大学）

優秀発表賞	香川大学	高下 朋子
	O-4S	Molecular orbital calculations and Full Interaction Maps (FIMs) of aldohexoses
優秀発表賞	香川大学	石川 舞
	P-7S	Controlling of Ligand Field Splitting and SCO by Distortion of Tetra-Coordinated Co(II) Complexes
優秀発表賞	関西学院大学	真砂 俊希
	P-4S	A_2BWO_6 中における U^{6+} の電荷移動遷移の第一原理計算
優秀発表賞	香川大学	髙田 龍之介
	P-9S	Molecular orbitcal calculations and Hirshfeld surface analysis of D,L-tagatose

---

2025 年度（令和 7 年度）第 37 回 DV-Xα 研究会（インドネシア）
（8th International Conference on DV-Xα Method）

優秀発表賞　Ryunosuke Takata (Kagawa University)：
Intramolecular Charge Distribution and Its Influence on Crystal Structure in Ketohexoses [Oral]

優秀発表賞　Tomoki Kobayashi (Kwansei Gakuin University)：
Analysis of the Luminescence Mechanism of Ni^{2+} in Crystals and Construction of a New Indicator for Nephelauxetic Effect by First-Principles Calculations and Machine Learning [Oral]

優秀発表賞　Haruka Ono (Kwansei Gakuin University)：
Analysis of Visible Absorption Spectra in Natural Spinel Crystals by First-Principles Calculations [Poster]

優秀発表賞　Arisa Ida (Kwansei Gakuin University)：
First-principles Calculation of the Color of Color-Change Sapphire [Poster]

2026 年度（令和 8 年度） 第 38 回 DV-Xα 研究会（九州工業大学）

優秀発表賞	香川大学	高下 朋子	
	Oral-01-S	BOP 解析に基づく糖結晶における水素結合強度と物性の相関	
優秀発表賞	関西学院大学	奈良 麻央	
	Oral-03-S	第一原理計算および機械学習を用いたガーネット型酸化物結晶中 Tb^{3+} における $4f^8$-$4f^7 5d^1$ 吸収エネルギーの予測	
優秀発表賞	九州工業大学	竹永 晴樹	
	Poster-01-S	鉄の新生表面における黒鉛のベーサル面の配向に対する酸素の影響	
優秀発表賞	九州工業大学	加藤 天音	
	Poster-11-S	β-Ga_2O_3 の表面状態に対する酸・アルカリ溶液処理の影響	