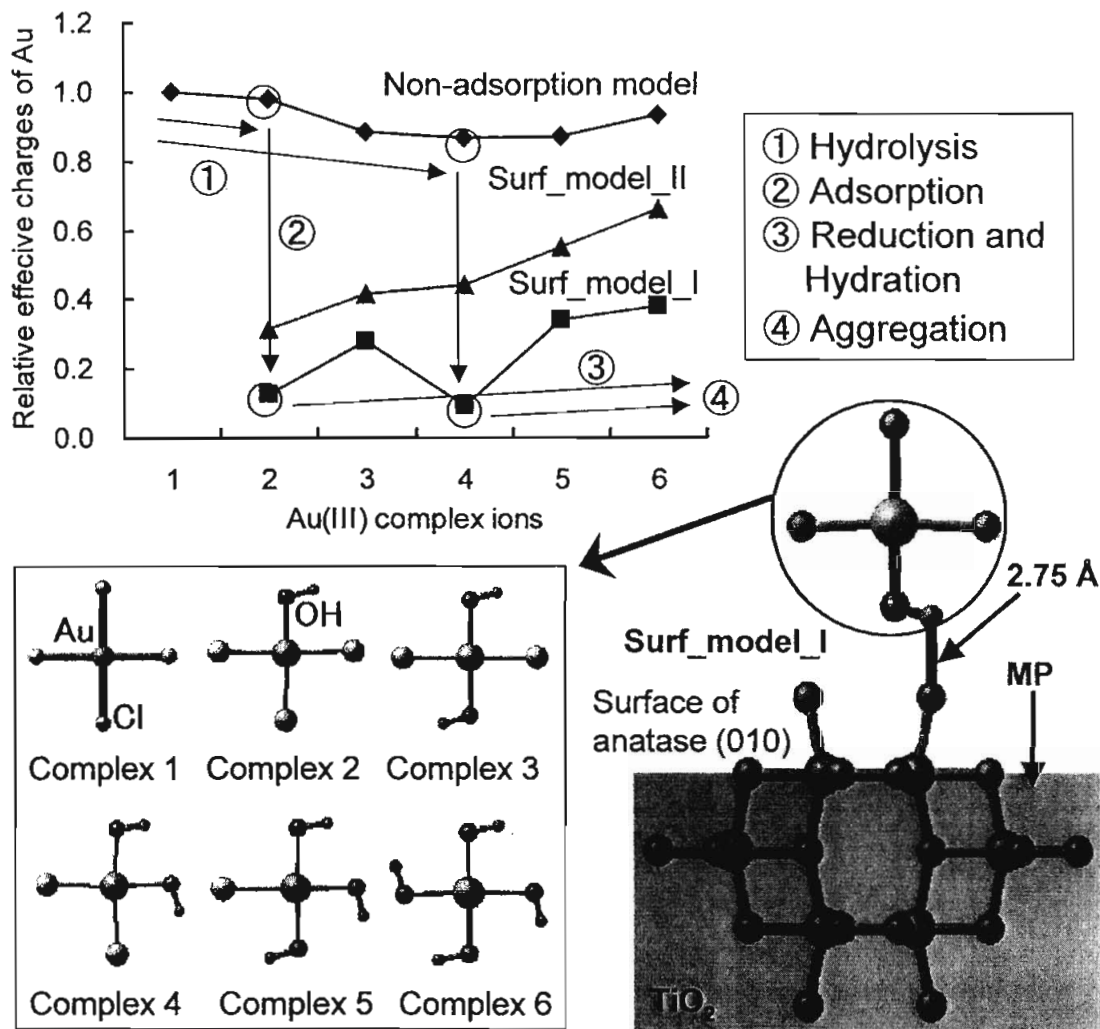


DV- $X\alpha$ 研究協会会報

Bulletin of the Society for Discrete Variational $X\alpha$

Vol.17, No. 1 (2004)



Adsorption and Reduction of Au(III) Ions onto Anatase (010) Surface

DV- $X\alpha$ 研究協会会報

Bulletin of the Society for Discrete Variational $X\alpha$

Vol. 17, No. 1 (2004)

目次

2004 年度 学術賞、功績賞、奨励賞、特別賞	1
・ ・ ・ DV- $X\alpha$ 研究協会各賞選考について 向山 毅	1
・ ・ ・ 第 4 回 DV- $X\alpha$ 研究協会学術賞 那須三郎	2
・ ・ ・ 第 3 回 DV- $X\alpha$ 研究協会功績賞 早藤貴範	4
・ ・ ・ 第 10 回 DV- $X\alpha$ 研究協会奨励賞 松尾修司	6
・ ・ ・ 第 10 回 DV- $X\alpha$ 研究協会奨励賞 金 洋洙	9
・ ・ ・ DV- $X\alpha$ 研究協会特別賞 中松博英	13
第 17 回 DV- $X\alpha$ 研究会報告書	
・ ・ ・ 第 17 回 DV- $X\alpha$ 研究会開催報告	18
・ ・ ・ プログラム	20
・ ・ ・ 参加者名簿	24
・ ・ ・ 集合写真	27
・ ・ ・ 講演番号 Index	29
・ ・ ・ 研究会報告書 A-01~A-10, B-01~B-10, B-13~B-17, C-01~C-07, P-01~P-02	31
	(B-03 以後は No.2 に掲載予定です)
事務局移転のお知らせ	180

編集 DV- $X\alpha$ 研究協会

口頭発表

8月4日

13:10~14:30

座長：石井知彦

- A-01 招待講演：半経験的モデルを用いた物性の研究
○澤田信一
関西学院大理工
- A-02 特別講演：MD Simulations of Biological Ion Channels
○Titus A. Beu
Tokyo Institute of Technology, Research Lab. for Nuclear Reactors
- A-03 硫化物系リチウムイオン伝導体の化学結合解析と材料設計の試み
○小和田善之*, 岡本幹*, 田中功**, 足立裕彦**, 辰巳砂昌弘***, 南努***
*兵庫教大・**京大院工・***阪府大工
- A-04 TiCにおける炭素空孔の安定化機構の解明
○水野正隆, 荒木秀樹, 白井泰治
阪大・工

14:45~15:45

座長：小和田善之

- A-05 ジメチルエーテル (DME) 改質の解析
○福島公親
東芝 IEC
- A-06 希少糖の電子状態
○石井知彦*, 小橋健一*, 山岡祐也*, 山地理嗣*, 深田和宏**, 川浪康弘**, 何森健**
*香川大院工, **香川大農
- A-07 波動関数の三次元可視化による有機磁性体のスピン間相互作用の制御
○山岡祐也, 近藤和志, 石井知彦
香川大学大学院工学研究科材料創造工学専攻
- A-08 DV-X α 法によるF₄TCNQのELNES計算
○越野雅至, 倉田博基, 磯田正二
京大化研

16:00~17:30

座長：小笠原一禎

- A-09 基調講演：第一原理DVX α 計算専用計算機EHPC-DVX α の開発
○佐々木徹*, 長嶋雲兵**, 塚田捷***
* (株) アプリオリ・マイクロシステムズ,
** (独) 産業技術総合研究所グリッド研究センター, ***早稲田大学理工学研究科
- A-10 招待講演：DVSCATのPCクラスタシステムへの実装
○甲斐宗徳*, 野村重孝**, 遠藤三郎**
*成蹊大工, **東京理科大工

8月5日

9:00~10:15

座長：尾上順

- B-01 Mg-Zn 2成分系の熱分光
○森下政夫, 香山滉一郎
兵庫県立大学大学院工学研究科
- B-02 8-キノリノールを配位子とする酸素架橋モリブデン三核錯体の電子状態
○坂根弦太, 川崎秀樹, 柴原隆志
岡山理大理
- B-03 錯体系水素化物(NaAlH₄, LiAlH₄, LiBH₄, LiNH₂)の化学結合
○吉野正人, 小宮健嗣, 新里喜文, 高橋義孝, 湯川宏, 森永正彦
名古屋大工
- B-04 非相対論電子状態計算によるチタニア表面への金(III)イオンの吸着還元挙動の理論的解釈
○松尾修司*, 杉野友紀**, 岡上吉広**, 脇田久伸*,****, 横山拓史***
*福岡大高能研, **九大理, ***九大院理, ****福岡大理
- B-05 Ni系一次元錯体ハルデンギャップ化合物の電子状態
○福家之和, 石井知彦
香川大学大学院 工学研究科 材料創造工学専攻

10:30~12:00 座長：早藤貴範

B-06 基調講演：リチウムイオン二次電池の現状と将来
○西美緒
ソニー (株)

B-07 招待講演：電池機能材料と DV-X α 法による電子状態計算
○小槻勉
阪市大・院・工

13:40~14:40 座長：杉原淳

B-08 カーボンナノパーティクルの構造と生成メカニズムの解明
○小橋健一*, 石井知彦*, 目黒多賀志**
*香大院工, **理研

B-09 Electronic structure and X-ray absorption near-edge structure of
amorphous Zr oxide and Hf oxide thin films
○ Sung Kwan Kim*, Yangsoo Kim*, Jongin Hong*, Minsang Lee**,
Hyunchul Ko*** and Kwangsoo No*
*Dep. of Mat. Sci. & Eng., KAIST, **Materials Research Center., LUXPIA Co.,Ltd.,
***Dep. of Elec. & Comp. Eng., Univ. of South Alabama

B-10 First Principles Calculations of Formation energies and Electronic State of
Li (Ni,Mn)O₂ cathode materials for Li ion batteries
○ Youngah Jeon*, Yangsoo Kim*, Sung Kwan Kim*, Minsang Lee**,
Jaechun Leeand*** and Kwangsoo No*
*Dep. of Mat. Sci. & Eng., KAIST, **Materials Research Center., LUXPIA Co.,Ltd.,
***Dep. of Elec. & Comp. Eng., Univ. of South Alabama

14:55~16:25 座長：向山毅

池田重良先生叙勲挨拶
○池田重良
大阪大学名誉教授 (DV-X α 研究協会 顧問)

B-12 基調講演：DV-X α 十世
○足立裕彦
京都大学

B-13 招待講演：足立裕彦先生との DV-X α クラスタ計算
○那須三郎
阪大大学院基礎工 物質創成専攻

16:40~18:00 座長：脇田久伸

B-14 招待講演：足立先生から教わった「DV-X α 」精神について
○塩川正二
日本電気株式会社

B-15 招待講演：DV-X α 法の最初期導入期の記憶 (若き日の足立先生の下で)
○堀利匡
広島大学 HiSOR

B-16 特別講演：相対論 DV-ME 法を用いた CrO₂ の Cr L₂₃ X線吸収端微細構造における
磁気円二色性の第一原理計算
○小笠原一禎*, 池野豪一**, 足立裕彦***
*関西学院大理工, **京大院工, ***京大工

B-17 招待講演：DV-X α 法による合金設計
○森永正彦
名古屋大学大学院工学研究科・高等研究院

8月6日

9:00~10:00座長：水野正隆

C-01 遷移金属酸化物の電子構造
○関広美*, 高瀬孝雄*, 杉原淳**
*京セラ(株)総合研究所, **湘南工科大マテリアル工学科

C-02 ZnO の熱電特性と電子構造
○杉原淳*, 山本昌弘**, 中村文志***
*湘南工科大学・マテリアル工学科, **多摩川電器株式会社, ***日下レアメタル研究所

- C-03 酸化亜鉛中の欠陥とその発光
○大橋直樹
物質・材料研究機構 物質研究所
- C-04 DV-X α 法による蛍光体の電子構造
○吉田尚史*, 小笠原一禎**
*NEC ライティング, **関西学院大理工

10:10~10:55 座長：河合潤

- C-05 正方晶 WO₃ 薄膜のフォトリソリズムと DV-X α 法によるその現象解析
○中川晃一, 松田範久, 松本皓永, 松本節子
明治大院理工
- C-06 アクチノイド置換 MgO の電子状態
○田中久美子***, 平田勝**, 関根理香*
*静岡大学, **原研
- C-07 SrTiO₃ の電子状態計算
○内藤俊輔, 杉原淳, 眞岩宏司
湘南工科大学大学院工学研究科材料工学専攻

ポスター発表

- P-01 BaMgAl₁₀O₁₇:Eu²⁺における Eu L₂-edge XANES スペクトルの第一原理計算
○豊島広朗, 小笠原一禎
関西学院大理工
- P-02 LiYF₄ 中のランタニドイオン及びアクチニドイオンにおける
f-d 遷移スペクトルおよび多重項構造の第一原理計算
○渡邊真太*, 石井琢悟**, 小笠原一禎**
*関西学院大院理工, **関西学院大理工
- P-03 格子緩和を考慮した Cr³⁺:Al₂O₃ における多重項構造及び吸収スペクトルの第一原理計算
○佐々木朋美*, 渡邊真太**, 小笠原一禎***
*関西学院大理, 関西学院大院理工**, 関西学院大理工***
- P-04 格子緩和を考慮したアレキサンドライトの第一原理計算
○谷口リエ*, 渡邊真太**, 小笠原一禎***
*関西学院大理, 関西学院大院理工**, 関西学院大理工***
- P-05 YBO₃ 結晶中の Tb³⁺ における多重項構造の第一原理計算
○寺本龍介*, 小笠原一禎**, 吉田尚史***
*関西学院大理, **関西学院大理工, ***NEC ライティング
- P-06 YVO₄ 結晶中の希土類イオンにおける多重項構造の第一原理計算
○藤川和浩*, 豊島広朗**, 小笠原一禎***
*関西学院大理, **関西学院大院理工, ***関西学院大理工
- P-07 Si₃N₄ 結晶中の Eu イオンにおける多重項構造の第一原理計算
○眞野光徳*, 豊島広朗**, 小笠原一禎**
*関西学院大理, **関西学院大院理工
- P-08 Er₂O₃ からの吸収スペクトルの計算
○下出晃広*, 吉野正人*, 周震*, 豊島広朗**, 小笠原一禎**, 森永正彦*
*名古屋大工, **関西学院大理工
- P-09 種々の構造を有する亜鉛(II)錯体の合成とそれらの X 線光電子スペクトル
○野津智博, 宮武智弘, 藤原学, 松下隆之
龍谷大理工
- P-10 油性錯体 [Mo₆S₄(tpz)₆] の電子状態
○山内剣*, 赤司治夫*, 坂根弦太**
*岡山理大自然研, *岡山理大理
- P-11 単核および二核鉄(III)シッフ塩基錯体における構造と電子状態との相関
根来世・井上幸春・浅田英幸・○藤原学・松下隆之
龍谷大理工
- P-12 金属中の局在電子の磁性に関する DVX α 計算
○伊藤伸一
京都教育大学

- P-13 金，白金二元系クラスターの構造及び安定性
○森澤貴紀*，関根理香**
*静大院理，**静大理
- P-14 γ-ウラン—4d,5d 遷移金属合金の電子構造
○栗原正義*，平田勝**，尾上順***，中松博英****
*㈱日環協，**原研東海，***東工大原子炉研 (COE)，****京大化研
- P-15 2価ノーベリウム水和イオンの電子状態
○平田勝*，田中久美子*，永目諭一郎*，J.Anton**，B. Fricke**
*日本原子力研究所，**カッセル大学
- P-16 Well potential をいかに決めるか? ~ AgI 結晶における well potential の検討へ
○小和田善之，岡本幹
兵庫教大
- P-17 析出の核生成自由エネルギーの第一原理計算
○西谷滋人*，世古敦人**，弓削是貴**，田中功**，足立裕彦**
*関学・理工，**京大・工
- P-18 物質化学的視点による電子計算機と人間の比較
○高原渉
阪大工
- P-21 ホウ素ドーパダイヤモンド半導体の電子構造計算
○村松康司*，飯原順次**
*原研関西研，**住友電工
- P-22 半導体クラスタにおける点欠陥集合体の電子状態 (12)
○高尾将和，佐藤大輔，大森謙吾，川西浩之，早藤貴範
関西学院大院理
- P-23 半導体クラスタにおける点欠陥集合体の電子状態 (13)
○大森謙伍，川口真寛，高尾将和，佐藤大輔，川西浩之，早藤貴範
関西学院大院理
- P-24 半導体クラスタにおける点欠陥集合体の電子状態 (14)
○川西浩之，佐藤大輔，高尾将和，大森謙伍，早藤貴範
関西学院大院理
- P-25 半導体クラスタにおける点欠陥集合体の電子状態 (15)
○佐藤大輔，川西浩之，大森謙伍，高尾将和，早藤貴範
関西学院大院理
- P-27 ペロブスカイト及び関連酸化物の電子状態計算 (2)
○石角圭佑，中尾亮，高橋功，寺内暉，早藤貴範
関西学院大院理
- P-28 ペロブスカイト及び関連酸化物の電子状態計算 (3)
○中尾亮，石角圭佑，高橋功，寺内暉，早藤貴範
関西学院大院理
- P-29 In_2O_3 中へのドーピング効果とその電子状態 (3)
○富田匠，山下和芳，早藤貴範
関西学院大院理
- P-30 Effect of Position of Substituted Atoms on Electronic Structure of
Lead Zirconate Titanate Ceramics using DV-X α Method
○ Yun Seok Kim*，Yang Soo Kim*，Sung Kwan Kim*，Minsang Lee**，
Hyunchul Ko*** and Kwangsoo No*
*Dep. of Mat. Sci. & Eng., KAIST, **Materials Research Center., LUXPIA Co.,Ltd.,
***Dep. of Elec. & Comp. Eng., Univ. of South Alabama
- P-31 Chemical bonding and electronic state in cuprous and cupric oxide using DV-X α method
○ Youngha Kim*，Yang Soo Kim*，Sung Kwan Kim*，Yung-Hee Han**，
Sang-Chul Han**，Tae-Hyun Sung**，Lee, Min-Sang***，Hyunchul Ko**** and Kwangsoo No*
*Dep. of Mat. Sci. & Eng., KAIST, **Korea Electric Power Research Institute,
***Materials Research Center., LUXPIA Co.,Ltd.,
****Dep. of Elec. & Comp. Eng., Univ. of South Alabama
- P-32 Electronic structure of CaRuO_3 for buffer layer between superconductor and metal substrates
○ Han Jong Paik*，Yangsoo Kim*，Sung Kwan Kim*，Minsang Lee**，
Hyunchul Ko*** and Kwangsoo No*
*Dep. of Mat. Sci. & Eng., KAIST, **Materials Research Center., LUXPIA Co.,Ltd.,
***Dep. of Elec. & Comp. Eng., Univ. of South Alabama

第 17 回 DV-X α 研究会報告書

Reports of 17th DV-X α Annual Meeting

目次

頁	番号	講演者氏名	頁	番号	講演者氏名	頁	番号	講演者氏名
31	A-01	澤田信一	70	B-01	森下政夫	122	B-13	那須三郎
33	A-02	Titus Beu	73	B-02	坂根弦太	129	B-16	小笠原一禎
38	A-03	小和田善之	78	B-03	吉野正人	134	B-17	森永正彦
42	A-04	水野正隆	84	B-04	松尾修司	137	C-01	関広美
47	A-05	福島公親	88	B-05	福家之和	141	C-02	杉原淳
51	A-06	石井知彦	93	B-06	西美緒	149	C-04	吉田尚史
56	A-07	山岡祐也	97	B-07	小槻勉	154	C-05	中川晃一
60	A-08	越野雅至	102	B-08	小橋健一	160	C-06	田中久美子
64	A-09	佐々木徹	107	B-09	SungKwan Kim	164	C-07	内藤俊輔
65	A-10	甲斐宗徳	116	B-10	Youngah Jeon	169	P-01	豊島広朗
						173	P-02	渡邊真太

※第一著者（講演者）の名前のみしめしました。

※ B-12、P-03～32 の講演番号の報告書は No.2 に掲載予定です。

< 編集後記 >

今号の表紙は福岡大学高機能物質研究所の松尾修司さんにお願ひしました。

本号の発行が大幅に遅れてしまったことをお詫びいたします。

会報についてのご意見は遠慮なく下記へお寄せください。

静岡大学 理学部化学科 関根理香

電子メール scrseki@ipc.shizuoka.ac.jp

DV-X α 研究協会会報, Vol. 17, No. 1 (2004)

2005年 3月 1日 発行
編集者 DV-X α 研究協会
発行人 DV-X α 研究協会
発行所 DV-X α 研究協会
〒520-0016 大津市比叡平3丁目53・12
振替 01010-5-52330 番 DVXA 研究協会
印刷所 黒船印刷株式会社
〒422-8033 静岡市登呂二丁目4番25号
電話 054-286-0236

Bulletin of the Society for Discrete Variational X α

Vol. 17, No. 1 (2004)

©The Society for Discrete Variational X α , Ohtsu, 2004

ISSN 1346-5015



DVX α