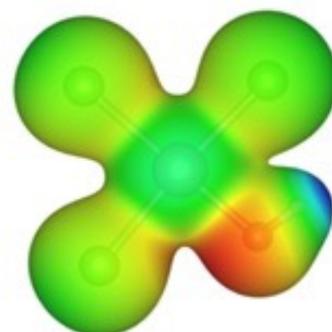
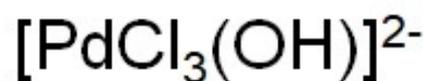
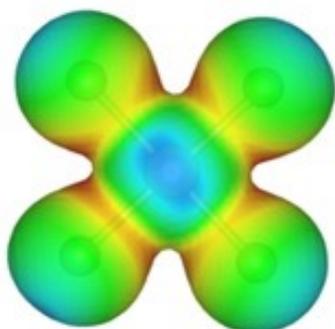


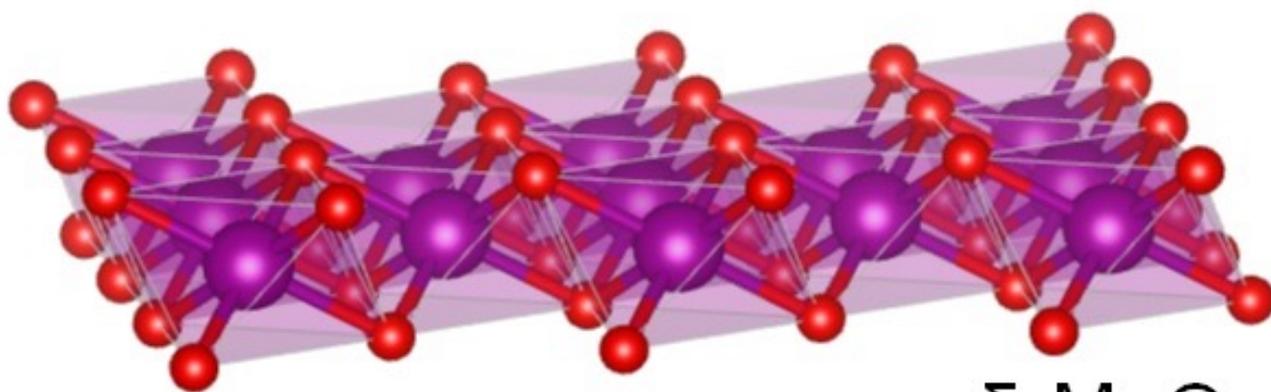
# DV- $X\alpha$ 研究協会会報

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

Vol.36, No.1&2 (2023)



Adsorption



$\delta$ - $MnO_2$

# DV-X $\alpha$ 研究協会会報

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

Vol. 36, No. 1&2 (2023)

## 目次

2023 年度 DV-X $\alpha$ 研究協会表彰委員会活動報告 表彰委員会委員長	栗崎 敏	1
第 35 回 DV-X $\alpha$ 研究会開催報告	本塚 智	2
・・・プログラム		4
・・・参加者名簿		7
・・・報告書目次		8
・・・報告書査読あり論文		9
研究協会活動報告		133
・・・2023 年度 DV-X $\alpha$ 研究協会総会議事録		134
・・・DV-X $\alpha$ 研究協会役員名簿		135
・・・(別紙) 2022 年度決算報告		136
・・・(別紙) DV-X $\alpha$ 研究協会会則 (見え消し)		143
DV-X $\alpha$ 研究協会賛助会員の募集趣意書		159
DV-X $\alpha$ 研究協会事務局より		161
【会告】第 6 回協会賞、第 15 回学術賞、第 14 回功績賞、第 28 回奨励賞受賞候補者の募集		164
【会告】第 36 回 DV-X $\alpha$ 研究会開催のご案内		166
編集後記		裏表紙

編集 DV-X $\alpha$  研究協会

# 第 35 回 DV-X $\alpha$ 研究会・総会（九州工業大学）プログラム

9/7（木）

8 : 50	事務連絡
9 : 00	開会挨拶： 石井 知彦（香川大学、DV-X $\alpha$ 研究協会会長）

9 : 10- 10 : 10 座長：松島 綾美（九州大学）	
9 : 10	<b>I-01</b> 吉田 紀生（名古屋大学） 「生体分子の溶媒和理論に基づく溶液内分子の電子状態理論の構築と応用」
10 : 10 - 10 : 20 休 憩	

10 : 20- 11 : 00 座長：藤原 学（龍谷大学）	
10 : 20	<b>O-01</b> 足立 裕彦（京都大学名誉教授） 「金属水素化物の化学結合」
10 : 40	<b>O-02</b> 石井 知彦（香川大学） 「糖指紋：希少糖分子間に働く水素結合ネットワークの電子構造依存性」
11 : 00 - 11 : 10 休 憩	

11 : 10- 12 : 10 進行：栗崎 敏（福岡大学）	
11 : 10	<b>事例紹介</b> 坂根 弦太（岡山理科大学） 「秀丸エディタ環境の活用法」
12 : 10- 13 : 30 休 憩	

13 : 30 - 14 : 30 座長：石井 知彦（香川大学）	
13 : 30	<b>O-03</b> 中川 克己（関西学院大学） 「Well Potential の質の評価の試み」
13 : 50	<b>O-04</b> Mega Novita（Universitas PGRI Semarang） 「From Data to Insights: Harnessing Deep Learning and Machine Learning for Advancements in Phosphor Materials」
14 : 10	<b>O-05</b> 許 哲峰（燕山大学） 「鉛フリーはんだ用 Bi-Ag 系合金の特性に及ぼす添加元素影響の第一原理計算」
14 : 30- 14 : 40 休 憩	

14 : 40 - 15 : 25 座長：関根 理香（静岡大学）	
14 : 40	<b>Os-01</b> 小川 颯太（龍谷大学） 「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-X $\alpha$ 分子軌道計算」
14 : 55	<b>Os-02</b> 早坂 龍星（山形大学） 「分子動力学法により決定した局所構造に基づく Cr <sup>3+</sup> 発光中心の電子状態計算」
15 : 10	<b>Os-03</b> 山口 歩生（広島大学） 「浮揚溶解した Co 系合金の特性と高温形状記憶適用性」
15 : 25- 15 : 35 休 憩	

15 : 35 - 15 : 25 座長：村松 康司（兵庫県立大学）	
15 : 35	<b>P-01</b> 藤原 学（龍谷大学） 「金属とヒ素化合物との相互作用に関する分析化学的研究」
15 : 38	<b>P-02</b> 斉藤 淳一（日本原子力研究開発機構）

	「イオン注入金属表面の電子状態」
15 : 41	<b>P-03</b> 浪江 将成 (日本原子力研究開発機構) 「金属と吸着した水の電子状態」
15 : 44	<b>P-04</b> 関根 理香 (静岡大学) 「統計的手法を利用した 1 価金属クラスターのグラフ理論解析」
15 : 47	<b>Ps-01</b> 高下 朋子 (香川大学) 「単糖の水素結合ネットワーク」
15 : 50	<b>Ps-02</b> 石川 竜大 (香川大学) 「Sorbose および Sorbose 誘導体の電子状態計算」
15 : 53	<b>Ps-03</b> 本安 律稀 (香川大学) 「Sorbose 及び sorbose 誘導体の単結晶 X 線構造解析と電子状態計算」
15 : 56	<b>Ps-04</b> 豆崎 実夢 (兵庫県立大学) 「第一原理計算による Cellulose の C K 端 XANES 解析」
15 : 59	<b>Ps-05</b> 亀山 杏輔 (龍谷大学) 「過塩素酸塩および関連化合物の時間分解 X 線光電子スペクトル」
16 : 02	<b>Ps-06</b> 田中 凌 (龍谷大学) 「数種のハロゲン化白金の X 線光電子スペクトルと分子軌道計算」
16 : 05	<b>Ps-07</b> 山田 咲樹 (兵庫県立大学) 「第一原理計算による窒素含有黒鉛系炭素の XANES 解析」
16 : 08	<b>Ps-08</b> 濱田 隆暉 (兵庫県立大学) 「第一原理計算による炭化ケイ素の XANES 解析」
16 : 11	<b>Ps-09</b> 岡村 竜徳 (関西学院大学) 「第一原理計算による $\text{Eu}^{2+}$ における異常発光の理論解析」
16 : 14	<b>Ps-10</b> 真砂 俊希 (関西学院大学) 「 $\text{SrO}$ 中のウランイオンにおける光学スペクトルの第一原理計算」
16 : 17	<b>Ps-11</b> 小林 智輝 (関西学院大学) 「第一原理計算及び機械学習を用いたホウ酸化物結晶中の $\text{Ce}^{3+}$ イオンにおける 4f-5d 遷移エネルギーの予測」
16 : 20	<b>Ps-12</b> 田中 周馬 (関西学院大学) 「第一原理計算と機械学習を用いたラッカーパラメータ B,C による遷移金属イオンの解析」
16 : 23	<b>Ps-13</b> 伊藤 琴音 (九州大学) 「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」
16 : 26 - 16 : 30 事務連絡・休憩	
16 : 30 - 18 : 00 ポスター発表 (45 分×2)	
<b>奇数番号</b> : 16 : 30 - 17 : 15 中村記念館 1F ホール	
<b>偶数番号</b> : 17 : 15 - 18 : 00 中村記念館 1F ホール	
18 : 00 - 18 : 20 集合写真撮影 中村記念館 2F	
18 : 20 懇親会 中村記念館 1F ホール	

## 9/8 (金)

8:50	事務連絡
9:00 - 9:40 座長：水野 正隆 (大阪大学)	
9:00	<b>O-06</b> 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(II)」
9:20	<b>O-07</b> 小和田 善之 (兵庫教育大学) 「Li イオン固体電解質の水分子との反応性と第3成分元素の添加効果」
9:40 - 9:50 休 憩	
9:50 - 10:50 座長：小和田 善之 (兵庫教育大学)	
9:50	<b>I-02</b> 小本 祐貴 (大阪大学) 「MCBJ法を用いた単一分子状態識別手法の開発」
10:50 - 11:00 休 憩	
11:00 - 11:30 座長：栗崎 敏 (福岡大学)	
11:00	<b>A-01</b> 川本 大祐 (岡山理科大学) 「貴金属 (Pd, Au) - 塩化物錯体の吸着挙動と配位子交換反応の関係性」
11:30 - 11:50 表彰委員会報告・表彰式	
11:50	閉会挨拶：石井 知彦 (香川大学、DV-X $\alpha$ 研究協会会長)
11:55 - 13:00 休 憩	
13:00 - 14:35 総 会	
13:00	開会挨拶：石井 知彦 (香川大学、DV-X $\alpha$ 研究協会会長)
総会 (議長選出・議事・会計監査・報告)	
14:30	閉会挨拶：石井 知彦 (香川大学、DV-X $\alpha$ 研究協会会長)

# 第35回DV-X $\alpha$ 研究会報告書

Reports of DV-X $\alpha$  2023

## Index

講演番号	発表者 (所属)	ページ	査読
A01	川本 大祐(岡山理科大学)	9	査読あり
O01	足立 裕彦(京都大学名誉教授)	14	査読あり
O02	石井 知彦(香川大学)	22	査読あり
O03	中川 克己(関西学院大学)	29	査読あり
O06	松沢 英世(北里大学)	37	査読あり
O07	小和田 善之(兵庫教育大学)	45	査読あり
Os01	小川 颯太(龍谷大学)	49	査読あり
P01	藤原 学(龍谷大学)	56	査読あり
P02	斉藤 淳一(日本原子力研究開発機構)	64	査読あり
P03	浪江 将成(日本原子力研究開発機構)	72	査読あり
Ps01	高下 朋子(香川大学)	80	査読あり
Ps02	石川 竜大(香川大学)	88	査読あり
Ps03	本安 律稀(香川大学)	93	査読あり
Ps04	豆崎 実夢(兵庫県立大学)	99	査読あり
Ps05	亀山 杏輔(龍谷大学)	103	査読あり
Ps06	田中 凌(龍谷大学)	108	査読あり
Ps07	山田 咲樹(兵庫県立大学)	113	査読あり
Ps08	濱田 隆暉(兵庫県立大学)	119	査読あり
Ps13	伊藤 琴音(九州大学)	122	査読あり
事例報告	坂根 弦太(岡山理科大学)	125	

## <編集後記>

DV-X $\alpha$  研究協会会報 Vol. 36 をお届けします。今年の研究会は、福岡県の九州工業大学において開催することができました。コロナやインフルエンザなどの影響はだいぶ和らぎ、以前と同じ状況に戻りつつあります。我々は、たとえどんな状況においても研究を継続していく学術団体であり続けたいと考えております。皆様、引き続きご協力をよろしくおねがいします。本研究協会では、会員サービスをさらに充実させていきたいと考えております。会員の皆様方から、様々なご意見・ご要望をお寄せいただけましたら幸いです。

今号の表紙は、2023 年度奨励賞を受賞した川本代祐先生（岡山理科大学）にお願いしました。表紙の絵は随時募集していますので積極的な投稿をお待ちしております。

また、公告・広告も受け付けておりますので、公告・広告掲載をご希望の方は編集委員までお問い合わせ下さい。

DV-X $\alpha$  研究協会会報 編集委員長  
香川大学 創造工学部  
材料物質科学領域 石井 知彦  
ishii.tomohiko@kagawa-u.ac.jp

DV-X $\alpha$  研究協会会報, Vol. 36 No.1&2 (2023)

---

2023 年 11 月 27 日 発行

編集者 DV-X $\alpha$  研究協会

発行人 DV-X $\alpha$  研究協会

発行所 DV-X $\alpha$  研究協会

〒761-0396 香川県高松市林町 2217 番地 20

香川大学創造工学部材料物質科学領域

石井知彦研究室 内

---

Bulletin of the Society for Discrete Variational X $\alpha$   
Vol. 36, No. 1&2 (2023)

©The Society for Discrete Variational X $\alpha$ ,  
Kagawa, 2023 ISSN 1346-5015