

## 第 29 回 DV-X $\alpha$ 研究会 プログラム

8 月 8 日 (月)

9 : 20 ~ 9 : 30 開会の挨拶・連絡事項

9 : 30 ~ 10 : 50 オーラル発表 I 座長 坂根 弦太 (岡山理科大学)

O-1 濱中 颯太 (兵庫県立大工)

「第一原理計算によるホウ素ドーピンググラファイトの XANES シミュレーションと局所構造解析」

O-2 中村 亮太 (龍谷大理工)

「酒石酸およびそのアルカリ金属塩の電子状態 (5)」

O-3 常田 且 (香川大院工)

「歪みのパラメータ  $\tau_5$  による配位子場分裂の制御」

O-4 竹村 翔太 (関西学院大理工)

「電荷移動遷移の配置間相互作用計算における分子軌道波動関数の影響」

10 : 50 ~ 11 : 00 休憩

11 : 00 ~ 12 : 00 SPD 部会セッション 進行 小和田 善之 (兵庫教育大)

主な内容

1. spd 部会の活動について・はじめての電子状態 第 2 版 (仮) の内容の紹介
2. nonrel 改定の話、ニホニウムに対応 (周期表全元素に対応!)
3. windows 版 GUI バージョン dvscat の紹介
4. Mac 版、Linux 版、PES および SXS の整備状況の紹介

12 : 00 ~ 13 : 00 写真撮影・昼食

13 : 00 ~ 14 : 00 招待講演 座長 高橋 昌男 (東京工科大工)

I-1 山本知之 (早大理工)

「機能性酸化物における微量添加元素の局所環境解析」

14 : 00 ~ 14 : 10 休憩

14 : 10~14 : 55 ポスターレビュー (3 分/1 件) 進行 渡邊 真太 (名古屋大院工)

14 : 55~16 : 10 ポスター発表 (P-1~P-15)

16 : 10~17 : 50 オーラル発表 II 座長 小笠原 一禎 (関西学院大理工)

O-5 渡邊 真太 (名古屋大院工)

「硝酸水溶液中での Pd イオンの化学形態およびプルシアンブルーナノ粒子への Pd イオンの吸着特性の解析」

O-6 石井 知彦 (香川大工)

「分子軌道計算を用いた酸解離定数の理論予測」

O-7 松沢 英世 (北里大理)

「サンドイッチ型ポルフィリン類二量体の Through-Metal 相互作用と励起電子構造」

O-8 小和田 善之 (兵庫教育大)

「DV-X $\alpha$ 法による LiNbO<sub>3</sub> コーティング膜の XPS および XANES の理論解析」

O-9 下山 巖 (原子力機構 量子ビーム応用研究センター)

「グラファイト基板上のポリジメチルシラン薄膜の窒素ドーピングによる配向制御」

18 : 00~20 : 00 懇親会 (東京工科大厚生棟にて)

8 月 9 日 (火)

9 : 00 ~ 10 : 00 オーラル発表Ⅲ 座長 石井 知彦 (香川大工)

O-10 中川 克己 (MO BASICS Research)  
「炭化水素分子の NMR スピン結合定数の計算」

O-11 小笠原 一禎 (関西学院大理工)  
「動的配列変数を用いた SCAT プログラムの開発」

O-12 杉原 淳 (杉原科学技術研究所)  
「非分子そして非イオン状態の水のための DV-X $\alpha$ 法」

10 : 00 ~ 10 : 10 休憩

10 : 10 ~ 10 : 55 第 5 回協会賞 受賞記念講演 座長 小和田 善之 (兵庫教育大)  
A-1 向山 毅 (京都大学名誉教授)  
「DV-X $\alpha$ 法とハンガリー」

10 : 55 ~ 11 : 40 第 21 回奨励賞 受賞記念講演 座長 藤原 学 (龍谷大理工)  
A-2 柴 弘太 (物質・材料研究機構)  
「無機粒子形成過程における DV-X $\alpha$ 計算の活用と粒子成長制御技術への応用」

11 : 40 ~ 11 : 50 休憩

11 : 50 ~ 12 : 50 総会

12 : 50 閉会挨拶

ポスター発表 (8 日 14:55~16:10)

- P-1 清岡 洋紀 (関西学院大理工)  
「エメラルドの色についての第一原理計算」
- P-2 加藤 瞳 (関西学院大理工)  
「アレキサンドライトの色の第一原理計算」
- P-3 寺内 理紗 (関西学院大理工)  
「エスコライトの色の第一原理計算」
- P-4 大内 貴仁 (兵庫県立大工)  
「第一原理計算によるオレイルアミンの XANES 解析」
- P-5 太田 雄規 (兵庫県立大工)  
「酸化黒鉛系炭素の C K 端 XANES における酸素官能基の構造」
- P-6 三村 真成美 (香川大院工)  
「有機化合物における不斉炭素上電荷密度の空間螺旋性と旋光度」
- P-7 福井 喬太 (龍谷大理工)  
「モリブデンブルー法に用いられるモリブデンおよびヘテロ原子の電子状態の解明 (2)」
- P-8 桑畑 和明 (横浜国立大院)  
「水クラスター表面における H+CO の活性化エネルギー変化とそのメカニズム」
- P-9 小野 孝文 (一関高専専攻科)  
「VB<sub>2</sub> および NbB<sub>2</sub> の電子密度解析」
- P-10 鎌倉 達也 (香川大院工)  
「希少糖単糖およびデオキシ糖における水素結合ネットワークとエネルギー準位の比較」
- P-11 田口 弘明 (香川大院工)  
「DV-X $\alpha$ 法を用いた希少糖分子及びデオキシ糖分子の電子状態比較」

P-12 片岡 卓也 (長岡技科大工)

「陽イオン界面活性剤と水酸アパタイトの界面相互作用解析とユウロピウム (III) 含有発光ナノ材料への応用」

P-13 Mega Novita (関西学院大理工)

「First-Principles Calculation of  $4f^n - 4f^{n-1}5d$  Transition Energy of Trivalent Lanthanides Ions in  $\text{CaF}_2$ 」

P-14 藤原 学 (龍谷大理工)

「奈良絵本『伊勢物語』に用いられた赤色系混合顔料の電子状態 (2)」

P-15 中野 浩嗣 (関西学院大理工)

「第一原理計算に基づいた  $C_{4v}$  対称の  $\text{CrO}_6^{9-}$  クラスタにおける結晶場パラメータと局所構造の関係」