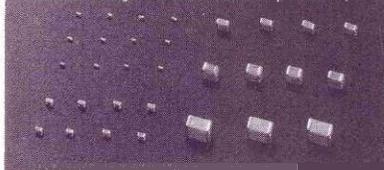


DV- $X\alpha$ 研究協会会報

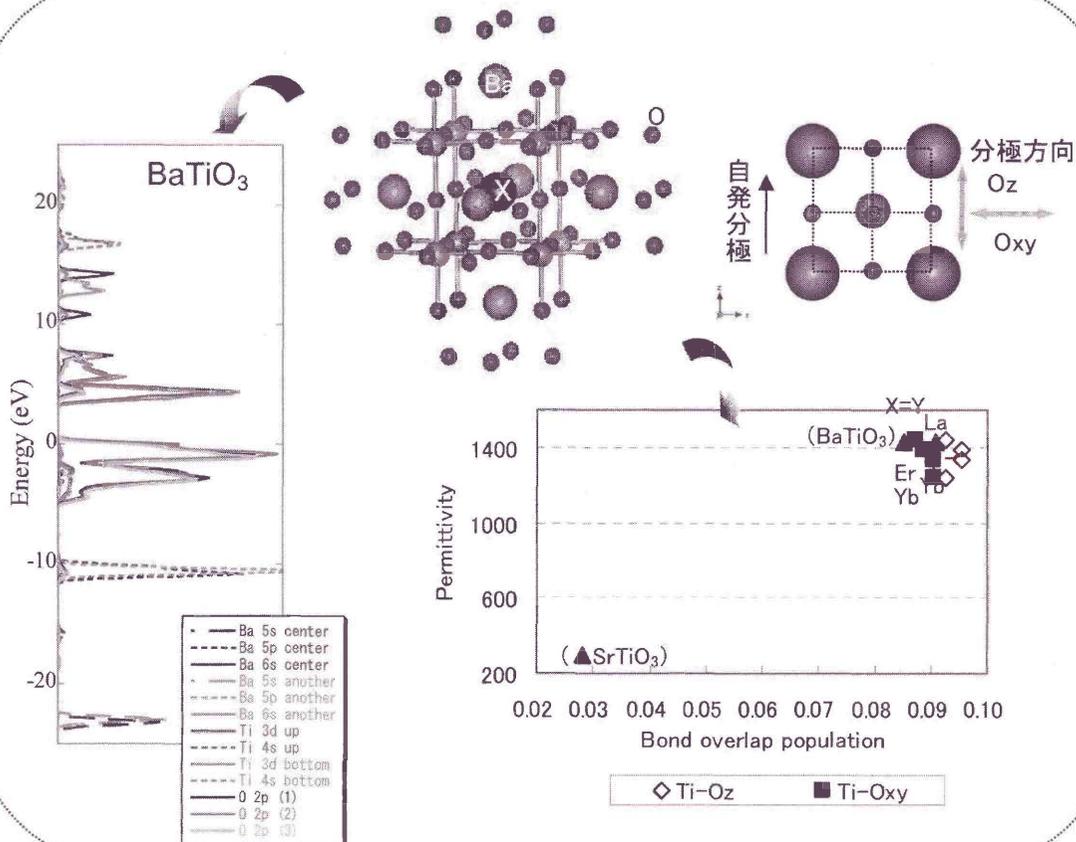
Bulletin of the Society for Discrete Variational $X\alpha$

Vol.18, No.1 (2005)

MLCC: 積層セラミックコンデンサ
(Multi-Layer Ceramic Capacitor)



端子電極



DV-X α 研究協会会報

Bulletin of the Society for Discrete Variational X α
Vol. 18, No. 1 (2005)

目次

2005年度 学術賞、功績賞、奨励賞	1
・ ・ ・ DV-X α 研究協会各賞選考について 早藤貴範	1
・ ・ ・ 第5回 DV-X α 研究協会学術賞 福島公親	2
・ ・ ・ 第11回 DV-X α 研究協会奨励賞 関 広美	4
・ ・ ・ 第4回 DV-X α 研究協会功績賞 関根理香	6
解説記事 Kohn-Sham DFT 法に対するエネルギー密度解析 馬場健、山内佑介、菊池那明、倉林佑二、中井浩巳	7
第18回 DV-X α 研究会報告書	
・ ・ ・ 第18回 DV-X α 研究会開催報告	20
・ ・ ・ プログラム	21
・ ・ ・ 参加者名簿	25
・ ・ ・ 集合写真	28
・ ・ ・ 講演番号 Index	29
・ ・ ・ 研究会報告書・3I-1, 30-1~7, 4I-1・3, 40-1~16, 50-1~50-7 (P-01 以後は No. 2 に掲載予定です)	
【会告】第6回学術賞、第5回功績賞、第12回奨励賞、受賞者候補者の募集	187

編集 DV-X α 研究協会

8月3日(水)

13:00 開会の辞 森永正彦 DV-X α 研究協会会長
尾上 順 第18回 DV-X α 研究会実行委員長

座長(足立裕彦)

13:15 3I-1 吉田英弘(物質材料研究機構)
(招待講演) 酸化物セラミックスの高温変形とドーパント効果: 化学結合状態からのアプローチ

座長(杉原 淳)

13:45 30-1 石角圭佑(関西学院大学)
ペロブスカイト及び関連酸化物の電子状態計算(4)
14:00 30-2 河西宏紀(関西学院大学)
ペロブスカイト及び関連酸化物の電子状態計算(5)
14:15 30-3 高橋義孝(名古屋大学)
ペロブスカイト型水素化物(A MgH_3 , A=Na, K, Rb)の電子状態と相安定性
14:30 30-4 関広美(京セラ株)
2,3価元素を置換したペロブスカイト型酸化物の電子構造
14:45 コーヒーブレイク

座長(福島公親)

15:00 30-5 吉野正人(名古屋大学)
エルビウムをドーブしたペロブスカイト型酸化物の1.5 nm帯の発光と電子状態
15:15 30-6 木下友介(関西学院大学)
ZnO中へのドーピング効果とその電子状態
15:30 30-7 鈴木知史(核燃料サイクル開発機構)
三酸化イオウ電気分解機構の解明
15:45 ポスタープレビュー(ポスター発表者全員)
P-01 Hanjong Paik (KAIST, Korea)
The effect of P-type dopant on electronic structure of zinc oxide using DV-X α calculation method
P-02 Min Jeong Kim (KAIST, Korea)
Electronic structures of doped In $_2$ O $_3$ and ZnO by IVB elements (Si, Ge, Sn and Pb) calculated by DV-X α
P-03 SungKwan Kim (KAIST, Korea)
The electronic structures for the optical absorption spectra of Hf-O-N thin films
P-04 Young-Ah Jeon (KAIST, Korea)
First principles calculations of Li(Ni, Mn, M)O $_2$ (M=various transition metal) cathode materials for Li ion batteries
P-05 Youngha Kim (KAIST, Korea)
Electronic state and Cu K-edge XANES of cuprous and cupric oxide
P-06 Yunseok Kim (KAIST, Korea)
Effect of substitution atom on electronic structure of Bi $_{4-x}$ Ln $_x$ Ti $_3$ O $_{12}$ using DV-X α method
P-07 中川晃一(明治大学)
WO $_3$ 薄膜のフォトクロミズムのDV-X α 法による解析
P-08 田中久美子(静岡大学)
AnO分子とMgO表面上に吸着したAn原子の電子状態の比較

- P-09 北浦 守 (福井工業高等専門学校)
圧電性物質ランガサイトと関連化合物の光学特性と電子状態
- P-10 龍崎奏 (東京工業大学)
In situ photoelectron spectra of fullerene-metallophyrone alternative-deposited thin films
- P-11 上田祥 (横浜国大学)
Calculation of energy bands for peanuts-shaped fused fullerene polymers
- P-12 山内剣 (岡山理科大学)
油性錯体 $[\text{Mo}_3\text{OS}_3(\text{tpzb})_3]^+$ の電子状態
- P-13 山地理嗣 (香川大学)
希少糖の電子状態計算
- P-14 山岡祐也 (香川大学)
単分子磁石の電子状態
- P-15 小橋健一 (香川大学)
フラーレン・ポルフィリン共晶化合物の電子状態
- P-16 工藤大輔 (香川大学)
Mn クラスターの磁性
- P-17 藤原 学 (龍谷大学)
リチウム化合物の X 線光電子スペクトルと分子軌道計算
- P-18 内藤俊輔 (湘南工科大学)
デラフォサイト構造 CuAlO_2 の電子状態計算
- P-19 寺本龍介 (関西学院大学)
遷移金属錯体の分光化学系列に関する吸収スペクトルの第一原理計算
- P-20 渡邊真太 (関西学院大学)
 LiYF_4 中の Pr^{3+} と Nd^{3+} における基底状態及び励起状態吸収スペクトルの第一原理計算
- P-21 藤川和浩 (関西学院大学)
原子・イオンの多重項構造の第一原理計算による解析
- P-22 豊島広朗 (関西学院大学)
青色蛍光体 $\text{BaMgAl}_{10}\text{O}_{17}:\text{Eu}$ における光吸収スペクトルの第一原理計算
- P-23 村松康司 (兵庫県立大学)
炭化ホウ素 (B_4C) の軟 X 線発光スペクトル解析
- P-24 栗原正義 (日環協)
ウラン・アクチノイド合金の電子状態
- P-25 遠藤理恵 (東京工業大学)
DV- $X\alpha$ 法に基づいた色彩を呈する金属間化合物の開発
- P-26 馬場 健 (早稲田大学)
エネルギー密度解析 (EDA) 法の励起状態への拡張
- P-27 倉林佑二 (早稲田大学)
エネルギー密度解析 (EDA) 法の周期系への拡張
- P-28 大村秀之 (キャノン)
DV- $X\alpha$ 計算における 1 中心積分ならびにクーロンポテンシャル計算方法が精度に及ぼす影響
- P-29 関根理香 (静岡大学)
特別ポスター：(故) 中松博英博士と DV- $X\alpha$

ランブセッション

座長 (森永正彦)

16:15 那須三郎 (大阪大学)

(特別講演) Hyperfine Interaction Study of Materials and Related DV- $X\alpha$ Calculation

座長 (河合 潤)

17:15 宇田応之 (早稲田大学)

(特別講演) 考古科学への招待

18:15 ポスターセッション
20:00 終了

8月4日(木)

座長(尾上 順)

10:00 4I-1 佐々木成朗(成蹊大学)
(招待講演) 第一原理計算に基づく動的原子間力顕微鏡シミュレータと
その周辺

座長(安井 潤)

10:30 40-1 中川克己(キャノン㈱)
DV-X α 法による分子中の原子に働く力の計算
10:45 40-2 河合 潤(京都大学)
化学反応に要する時間とエネルギーの不確定性に関する山本悟氏の
学説について
11:00 40-3 福島公親(東芝㈱)
DME(ジメチルエーテル)改質の解析
11:15 40-4 大森謙伍(関西学院大学)
半導体クラスタにおける点欠陥集合体の電子状態(16)
11:30 40-5 東口義経(関西学院大学)
半導体クラスタにおける点欠陥集合体の電子状態(17)
11:45 40-6 川西浩之(関西学院大学)
半導体クラスタにおける点欠陥集合体の電子状態(18)

12:00 昼食

座長(平田 勝)

13:00 40-7 堤 啓(福岡大学)
Co K XANES スペクトル解析法を用いた金属ポルフィリン錯体の
キャラクタリゼーション
13:15 40-8 井上芳樹(福岡大学)
Fe K XANES スペクトル解析法を用いた金属ポルフィリン錯体の
キャラクタリゼーション
13:30 40-9 山重寿夫(福岡大学)
X線分光法およびDV-X α 法を用いた金属ポルフィリン錯体の状態分析
13:45 40-10 松尾修司(福岡大学)
酸素配位アルミニウム錯体の理論的Al K吸収端XANES
14:00 40-11 坂根弦太(岡山理科大学)
モリブデン三核錯体の電子状態に及ぼす配位子の効果
14:15 40-12 小橋健一(香川大学)
フラーレン・ポルフィリン共晶化合物の電子状態
14:30 40-13 石井知彦(香川大学)
単分子磁石の構造と磁性
14:45 40-14 山岡祐也(香川大学)
単分子磁石の電子状態
15:00 コーヒーブレイク

座長 (石井知彦)

15:30 40-15 工藤大輔 (香川大学)

Mn クラスタの磁性

15:45 40-16 杉田一樹 (大阪大学)

Zr₂Ni の過冷却液体からの結晶化における電子状態の変化

座長 (石井知彦)

16:00 4I-2 中井浩巳 (早稲田大学)

(招待講演) Kohn-Sham DFT 法に対するエネルギー密度解析とその応用

座長 (石井知彦)

16:30 4I-3 泉富士夫 (物材機構)

(招待講演) VENUS による結晶・電子構造の3次元可視化

17:00 SPD 部会

DV-X α プログラム公開について

17:15 ポスターセッション

18:00 懇親会 (20:00 終了)

8月5日 (金)

座長 (早藤貴範)

10:00 50-1 吉田尚史 (関西学院大学)

Gd³⁺付活 Y_a13 (BO₃)₄ 蛍光体の Sc³⁺添加効果と電子構造

10:15 50-2 高原渉 (大阪大学)

B1 型遷移金属化合物の分子軌道と超伝導転移温度

10:30 50-3 下地伸明 (琉球大学)

DV-X α 法による銀、銅化合物超イオン導電体の電子状態

10:45 50-4 小和田義之 (兵庫教育大学)

超イオン伝導体中のイオン伝導のモデル化

11:00 50-5 尾上 順 (東京工業大学)

1次元ビーナッツ型 C₆₀ ポリマーの第一原理計算

11:15 50-6 森下政夫 (兵庫県立大学)

Zn₁₇Y₂ の熱分光

11:30 50-7 山地理嗣 (香川大学)

希少糖の電子状態計算

11:45 コーヒーブレイク

12:00 総会、表彰式、閉会の辞

第 18 回 DV-X α 研究会報告書

Reports of 18th 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	3I-1	吉田英弘	89	4O-2	河合 潤	141	4O-14	山岡祐也
38	3O-1	石角圭佑	92	4O-3	福島公親	146	4O-15	工藤大輔
44	3O-2	河西宏紀	96	4O-4	大森謙伍	151	4O-16	杉田一樹
49	3O-3	高橋義孝	101	4O-5	東口 義経	155	5O-1	吉田尚史
52	3O-4	関 広美	106	4O-6	川西浩之	159	5O-2	高原 渉
56	3O-5	吉野正人	111	4O-7	堤啓	164	5O-3	下地伸明
62	3O-6	木下友介	114	4O-8	井上芳樹	168	5O-4	小和田善之
68	3O-7	鈴木知史	118	4O-9	山重寿夫	175	5O-5	尾上 順
73	4I-1	佐々木成朗	121	4O-10	松尾修司	180	5O-6	森下政夫
7	4I-2	中井浩巳	125	4O-11	坂根弦太	183	5O-7	山地理嗣
78	4I-3	泉 富士夫	131	4O-12	小橋健一			
84	4O-1	中川克己	136	4O-13	石井知彦			

※第一著者(講演者)の名前のみしめました。

※ P-01-28 の講演番号の報告書は No.2 に掲載予定です。

<編集後記>

今号の表紙は京セラ株式会社の関 広美さんにお願ひしました。
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. 18, No. 1 (2005)

2005年 12月 22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. 18, No. 1 (2005)
©The Society for Discrete Variational X α , Ohtsu, 2005
ISSN 1346-5015

