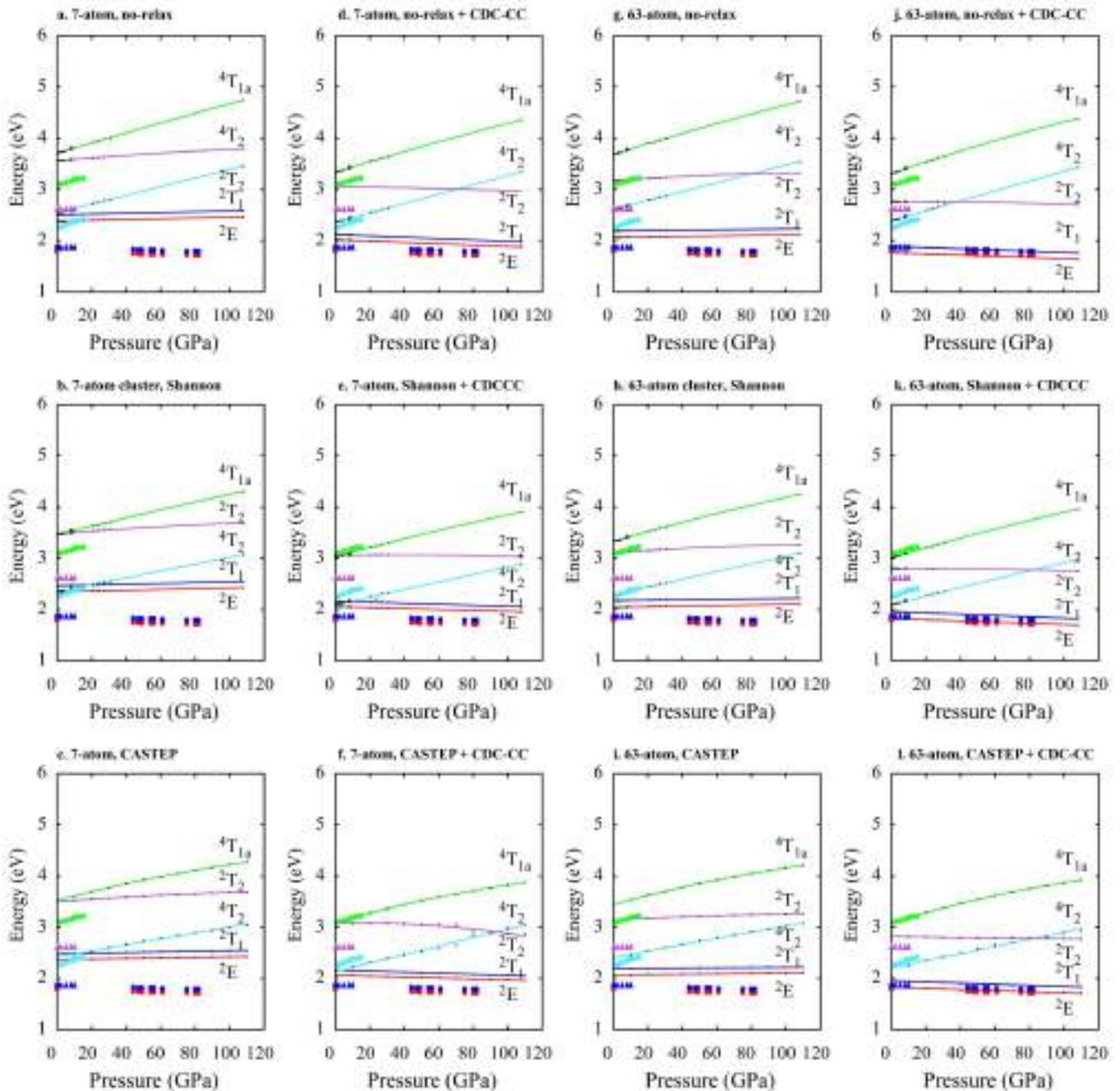


# DV- $X\alpha$ 研究協会会報

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

Vol.34, No.1&2 (2021)



# DV-X $\alpha$ 研究協会会報

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

Vol. 34, No. 1&2 (2021)

## 目次

2021 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	1
第 33 回 DV-X $\alpha$ 研究会開催報告	3
・ ・ ・ プログラム	5
・ ・ ・ 写真	15
・ ・ ・ 報告書目次	16
・ ・ ・ 報告書査読あり論文	17
・ ・ ・ 報告書査読なし論文・研究ノート	153
研究協会活動報告	204
・ ・ ・ 2020 年度 DV-X $\alpha$ 研究協会総会議事録	205
・ ・ ・ 2021 年度 DV-X $\alpha$ 研究協会総会議事録	212
・ ・ ・ DV-X $\alpha$ 研究協会役員名簿	219
・ ・ ・ (別紙) 2018 年度決算報告	220
・ ・ ・ (別紙) 2019 年度決算報告	222
・ ・ ・ (別紙) 2020 年度決算報告	224
DV-X $\alpha$ 研究協会賛助会員の募集趣意書	226
DV-X $\alpha$ 研究協会事務局より	228
【会告】第 6 回協会賞、第 15 回学術賞、第 14 回功績賞、第 26 回奨励賞受賞候補者の募集	231
【会告】第 34 回 DV-X $\alpha$ 研究会開催のご案内	233
編集後記	裏表紙

編集 DV-X $\alpha$  研究協会

プログラム

招待講演 45分 (35分 + 10分)  
 受賞講演 45分 (35分 + 10分)  
 口頭発表 20分 (15分 + 05分)  
 ポスター発表 3分プレビュー + 60分発表

令和3年8月28日(土)

8:30	Zoom 入室開始、講演者の画面共有の確認
8:50	事務連絡
9:00	開会の挨拶 小和田善之 (兵庫教育大学)
	座長：栗崎敏 (福岡大学)
9:05	口頭発表 O01 金属を内包した超原子様クラスターM@Ga <sub>12</sub> の超原子様軌道の周期性 石井知彦 (香川大学)
9:25 連続発表	口頭発表 O02 放射光軟 X 線吸収分光と第一原理計算による砂糖 (スクロース) の状態分析 口頭発表 O03 放射光軟 X 線吸収分光と第一原理計算によるナノダイヤモンドの局所構造解析 村松康司 (兵庫県立大学)
9:55	休憩
	座長：中川克己 (MO BASICS Research)
10:05	受賞者の紹介及び受賞理由の説明 中川克己 (MO BASICS Research)
10:10	受賞講演 A01 DV-X $\alpha$ 分子軌道法を用いた金属イオンおよび金属錯体の溶存構造解析法の確立 栗崎敏 (福岡大学)
10:55	受賞講演 A02 経路積分分子動力学法を用いた NH <sub>4</sub> <sup>+</sup> - H <sub>2</sub> O の理論計算 桑畑和明 (横浜市立大学)
11:40	記念撮影 (Zoom のギャラリービュー)
11:45	休憩
	座長：下山巖 (日本原子力研究開発機構)
13:00	招待講演者の紹介 下山巖 (日本原子力研究開発機構)
13:05	招待講演 I01 重アクチノイド Fm, Md, No および Lr の第一イオン化エネルギー測定 佐藤哲也 (日本原子力研究開発機構)
13:50	招待講演 I02 経路積分法と水素材料への応用 志賀基之 (日本原子力研究開発機構)

14:35	休憩
	座長：村松康司（兵庫県立大学）
14:45	ポスター発表ショートプレゼンテーション（一人3分）
(3分)	P01 岩絵具として用いられる塩基性炭酸銅(II)の電磁波スペクトルと分子軌道計算 藤原学（龍谷大学）
(3分)	P02 TiB <sub>2</sub> の格子伸縮による状態密度マッピング特性 小野孝文（一関工業高等専門学校）
(3分)	P03 糖アルコールの電子状態計算及び電子論的超分子合成 廣瀬稜（香川大学）
(3分)	P04 ドーブセリア結晶の太陽熱二段階酸化還元反応における格子定数変化の電子論的解明 井宗祐梨菜（香川大学）
(3分)	P05 アルキル鎖長の異なる希少糖誘導体の結晶安定性 松本真緒（香川大学）
(3分)	P06 エチル-L-ソルボシドの結晶構造と電子構造 永山夏美（香川大学）
(3分)	P07 分子動力学法により決定した局所構造に基づく 3d 遷移金属発光中心の電子状態計算 市川丈一郎（山形大学）
(3分)	P08 超原子 Al <sub>13</sub> を含む超原子分子の構造と超原子結合軌道 堀内宏太郎（香川大学）
(3分)	P09 八面体六配位金属錯体における構造変化とスピン状態の変化 杉山歩（香川大学）
(3分)	P10 固体中水素結合の放射光軟 X 線吸収分析に向けた MD/DFT 計算 平松佳恵（兵庫県立大学）
(3分)	P11 軟 X 線吸収分光法と第一原理計算による黒鉛層間化合物(GIC)の局所構造解析 増谷公太（兵庫県立大学）
(3分)	P12 分子軌道計算による非鉛ペロブスカイト圧電体の海洋資源を有効利用する設計指針の提案 藤谷惇（福岡大学）
(3分)	P13 第一原理計算によるシス型直鎖アルケンの XANES 解析

	丸山瑠菜 (兵庫県立大学)
(3分)	P14 第一原理計算による長鎖脂肪族炭素の C K 端 XANES シミュレーション 田中利幸 (兵庫県立大学)
(3分)	P15 Y <sub>3</sub> Al <sub>5-x</sub> Ga <sub>x</sub> O <sub>12</sub> 中の Pr <sup>3+</sup> , Nd <sup>3+</sup> における 4f-5d 遷移エネルギーの第一原理研究 小幡勇人 (関西学院大学)
(3分)	P16 ホウ酸化物中 Eu <sup>2+</sup> における 4f <sup>7</sup> -4f <sup>6</sup> 5d <sup>1</sup> 遷移エネルギーの第一原理計算条件の最適化 堀浩之 (関西学院大学)
(3分)	P17 第一原理計算及び機械学習による ペロブスカイト型酸化物中の Ce <sup>3+</sup> イオンにおける 4f-5d 遷移エネルギーの予測 岡村竜徳 (関西学院大学)
(3分)	P18 第一原理計算と機械学習を用いた C <sub>4v</sub> 対称の局所構造をもつ酸化物中 Mn <sup>4+</sup> における発光準位エネルギーの予想 田中周馬 (関西学院大学)
	※講演中止
(3分)	P20 タンパク質結晶構造を用いた生体内ハロゲン結合の指標開発 松島綾美 (九州大学)
15:45	休憩
16:00 (60分)	ポスター発表 (奇数番号)、ブレイクアウトルーム
17:00 (60分)	ポスター発表 (偶数番号)、ブレイクアウトルーム
18:00	終了

令和3年8月29日(日)

8:30	Zoom入室開始、講演者の画面共有の確認
8:50	事務連絡
	座長：松沢英世（北里大学）
9:00	口頭発表 O04 1次元凹凸周 C <sub>60</sub> ポリマー薄膜内のナノ空間特異反応場を用いた二酸化炭素固定 尾上順（名古屋大学）
9:20	口頭発表 O05 量子状態の水による車の排気ガスからの酸素の生成及び汚染土壌の放射能低減 杉原淳（一般社団法人グリーンアースアゲイン）
9:40	口頭発表 O06 DV-X $\alpha$ 法の新展開－磁場が印加された分子への適用－ 中川克己（MO BASICS Research）
10:00	口頭発表 O07 CsCl 型金属化合物の電子状態と化学結合 足立裕彦（京都大学）
10:20	休憩
	座長：龍崎奏（九州大学）
10:30	口頭発表 O08 高効率水素発生を目的とした酸化セリウム結晶におけるドーピング効果 西村学章（香川大学）
10:50	口頭発表 O09 機械学習型線形回帰に基づく結晶構造の全エネルギー予測 野田祐輔（岡山県立大学）
11:10	口頭発表 O10 ヘキサシアノ鉄(III)イオンの磁気円二色性 松沢英世（北里大学）
11:30	口頭発表 O11 Li <sub>2</sub> S-P <sub>2</sub> S <sub>5</sub> 系固体電解質表面への水分子の吸着と反応性 小和田善之（兵庫教育大学）
11:50	休憩
	座長：本塚智（九州工業大学）
13:00	受賞者の紹介及び受賞理由の説明 オーラル・ポスター優秀発表賞受賞者の報告 本塚智（九州工業大学）
13:10	受賞講演 A03 A Study on the Optical Characteristics of Transition Metal Ions in $\alpha$ -Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> using DV-X $\alpha$ and DVME Methods Mega Novita（Universitas PGRI Semarang） （受賞講演 A03 は、本人から事前に申請がありましたので、実行委員会は録音・録画を許可しております。どうかご理解を頂けましたら幸いです。なお、支障がございましたら、録画の間、カメラをオフにさせていただいても差し支えあり

	ません)
13:55	受賞講演 A04 Chemically Induced Permittivity-change (CIP) 効果の発見 龍崎奏 (九州大学)
14:40	授賞式
14:55	休憩
15:00 (目安)	DV-X $\alpha$ 研究協会 2020 年度総会
16:30 (目安)	休憩
16:40 (目安)	DV-X $\alpha$ 研究協会 2021 年度総会
18:10 (目安)	閉会の挨拶 水野正隆 (大阪大学)

<編集後記>

DV-X $\alpha$  研究協会会報 Vol. 34 をお届けします。コロナウィルスは相変わらず収束の兆しが見られませんが、コロナに負けず、コロナを言い訳にせず、研究を継続していく真の意味の研究協会であり続けるべく、皆様、引き続きご協力をよろしくおねがいします。2021年度は研究会をオンラインにて実施しました。地理的な要因が無くなり、全国各地からその場で研究会に参加していただくことが出来ました。功績賞を受賞された Universitas PGRI Semarang の Mega Novita 先生の受賞講演時には、インドネシアからも多数の先生方にご参加いただきました。オンライン開催ならではのメリットだと思います。

今号の表紙は、その Mega Novita 先生にお願いしました。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 編集委員長代理  
香川大学 創造工学部  
先端材料科学領域 石井 知彦  
ishii.tomohiko@kagawa-u.ac.jp

DV-X $\alpha$  研究協会会報, Vol. 34 No.1&2 (2021)

---

2021年12月13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先端材料科学領域

石井知彦研究室 内

---

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

Vol. 34, No. 1&2 (2021)

©The Society for Discrete Variational X $\alpha$ ,

Kagawa, 2021 ISSN 1346-5015