

## 第 30 回 DV-X $\alpha$ 研究会プログラム

2017 年 8 月 3 日 (木)

8:55~9:00	開会挨拶	
9:00~10:00 20min	<b>オーラル発表 1</b> <b>O1</b> 中川克己 (MO BASICS Research) NMR 核スピン間結合定数の計算における基底拡張の効果	座長 小和田善之
20min	<b>O2</b> 松沢英世 (北里大学理学部) ポルフィリン J 会合体の分子間共鳴相互作用と励起電子構造	
20min	<b>O3</b> 小泉昭久 (兵庫県立大学物質理学研究科) DV-X $\alpha$ 計算から求めた Fe の磁気コンプトン・プロファイル	
10:00~10:10	休憩	
10:10~12:25 15min	<b>オーラル発表 2 (学生)</b> <b>Os1</b> 竹村翔太 (関西学院大学工学研究科) 点電荷モデルを用いた Ce <sup>3+</sup> における 4f 軌道の結晶場分裂の解析	座長 栗崎 敏, 中川克己
15min	<b>Os2</b> 石川弘通 (大阪電気通信大学工学研究科) 軟 X 線吸収分光法と第一原理計算による B/C/N 材料の電子状態評価	
15min	<b>Os3</b> 中村亮太 (龍谷大学工学部) 酒石酸およびそのアルカリ金属塩の電子状態(7)	
15min	<b>Os4</b> 田口弘明 (香川大学工学研究科) DV-X $\alpha$ 法を用いたラセミ型超分子希少糖及びキラル型希少糖の水素結合比較	
15min	<b>Os5</b> 十河光汰 (香川大学工学研究科) ラセミ化による希少糖分子の結晶構造及び電子状態変化における電子論的考察	
15min	<b>Os6</b> 西田圭佑 (香川大学工学研究科) 酸解離定数 pKa の電子論的予測	
15min	<b>Os7</b> 堤 勇旗 (香川大学工学研究科) 分子の歪みに伴う四配位錯体の電子状態の変化	
15min	<b>Os8</b> 常田 旦 (香川大学工学研究科) 五配位錯体における配位子場分裂の歪みの効果	
15min	<b>Os9</b> 山崎将弥 (香川大学工学研究科) 超原子軌道の分子軌道を用いた概念	
12:25~13:30	昼食	
13:30~14:20 50min	<b>招待講演</b> <b>I1</b> 鷲津仁志 (兵庫県立大学シミュレーション学研究科) トライボロジーや電池を対象とした界面の分子シミュレーション	座長 村松康司
14:20~14:30	休憩(ポスタープレビュー準備)	
14:30~15:20 50min	<b>ポスタープレビュー*</b>	座長 本塚 智
15:20~16:30 70min	<b>ポスター発表*</b>	

16:30~17:30 20min	<b>オーラル発表 3</b> <b>O4</b> 小和田善之 (兵庫教育大学) Li <sub>3</sub> PS <sub>4</sub> 固体電解質の電子状態と電極反応過程の解析	座長 石井知彦
20min	<b>O5</b> 許 哲峰 (広島大学工学研究科) 鉛フリー高温はんだ Bi-Ag-Cu 系合金の特性評価	
20min	<b>O6</b> 森永正彦 (豊田理化学研究所) チタン中の合金元素近傍の局所格子歪とマルテンサイト変態	
17:30~18:00	<b>集合写真撮影および移動</b>	
18:00~20:00	<b>懇親会 (学生会館 1F)</b>	

### \*ポスター発表

<b>P1</b> 小野孝文 (一関高等専門学校) 伸縮性 TiB <sub>2</sub> の状態密度
<b>P2</b> 小野慎司 (仙台高等専門学校) 高压下における AgX (X=Cl, Br, I) のイオン伝導と電子状態
<b>P3</b> 藤原 学 (龍谷大学理工学部) 形式電荷がマイナスであるマンガンイオンを含む錯体および関連化合物の電子状態
<b>Ps1</b> 泉 裕也 (岡山理科大学理学研究科) ケルセチンおよびその白金錯体の電子状態
<b>Ps2</b> 清岡洋紀 (関西学院大学理工学研究科) Sr <sub>6</sub> Y <sub>2</sub> Al <sub>4</sub> O <sub>15</sub> :Ce <sup>3+</sup> における光吸収スペクトルの第一原理計算
<b>Ps3</b> 中野浩嗣 (関西学院大学理工学研究科) 第一原理計算に基づいた C <sub>4v</sub> 対称の CrO <sub>6</sub> <sup>9-</sup> クラスタにおける多重項エネルギーと局所構造の関係
<b>Ps4</b> 山口莉奈 (関西学院大学理工学部) 第一原理計算による 6 配位、D <sub>4h</sub> 対称の環境下の酸化物中 Mn <sup>4+</sup> における発光準位マップの作成
<b>Ps5</b> 阪口智香 (関西学院大学理工学部) 第一原理計算による 6 配位 D <sub>4h</sub> 対称の環境にある酸化物中 Ce <sup>3+</sup> のエネルギーダイアグラムの作成
<b>Ps6</b> 洲戸明穂 (関西学院大学理工学部) 第一原理計算による α-Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> 中 V <sup>3+</sup> における格子緩和効果の解析
<b>Ps7</b> 吉川晃司 (関西学院大学理工学部) 結晶中 Mn <sup>4+</sup> の多重項エネルギー準位におけるマーデルングポテンシャルの効果
<b>Ps8</b> 荻野那美 (関西学院大学理工学部) 酸化物中の Cr <sup>3+</sup> 及び Mn <sup>4+</sup> の多重項準位の第一原理計算におけるクラスターサイズの効果
<b>Ps9</b> 有菌 舜 (岐阜工業高等専門学校機械工学科) DV-Xα 法による BOP 比と金属の弾性定数比の相関
<b>Ps10</b> 吉田勇斗 (広島大学工学研究科) 高温はんだ用 Bi 系合金の作製と特性評価
<b>Ps11</b> 新見卓也 (広島大学工学研究科) Zn-Al 系高温はんだ合金の特性評価
<b>Ps12</b> 清水友理 (兵庫教育大学) 撥水性・滑油性シリカゲル薄膜の作製と表面の電子状態
<b>Ps13</b> 平井佑磨 (兵庫県立大学工学研究科) 第一原理計算による非ベンゼノイド構造の CK 端 XANES 解析
<b>Ps14</b> 吉田圭吾 (兵庫県立大学工学研究科) 第一原理計算による機械研磨 h-BN の酸化構造解析

## 2017年8月4日(金)

9:00~10:00 20min	<b>オーラル発表 4</b> <span style="float: right;">座長 坂根弦太</span> <b>O7</b> 栗崎 敏 (福岡大学理学部) DV-ME 法を用いた遷移金属水和錯体の溶存構造解析  20min <b>O8</b> Mega Novita (University of PGRI Semarang) Calculation of Multiplet Energies of Ruby Under Pressure Based on One-Electron DV-X $\alpha$ Approach  20min <b>O9</b> 小笠原一禎 (関西学院大学理工学部) 新規 Mn <sup>4+</sup> ドープ酸化物蛍光体の理論設計のための、指定した多重項エネルギーを持つ構造を予測するプログラムの開発
10:00~10:10	休憩
10:10~11:00 50min	<b>招待講演</b> <span style="float: right;">座長 小笠原一禎</span> <b>I2</b> 溝口照康 (東京大学生産技術研究所) ELNES/XANES 理論計算と界面構造探索に関する研究
11:00~11:50 50min	<b>第 22 回奨励賞授賞式および記念講演</b> <span style="float: right;">座長 藤原 学</span> <b>A1</b> 高嶋明人 (青山学院大学理工学部) 量子化学計算と振動分光法を用いたナノ材料の構造と機能に関する研究
11:50~12:00	休憩
12:00~13:00 60min	<b>総会</b>
13:00	<b>閉会挨拶</b>