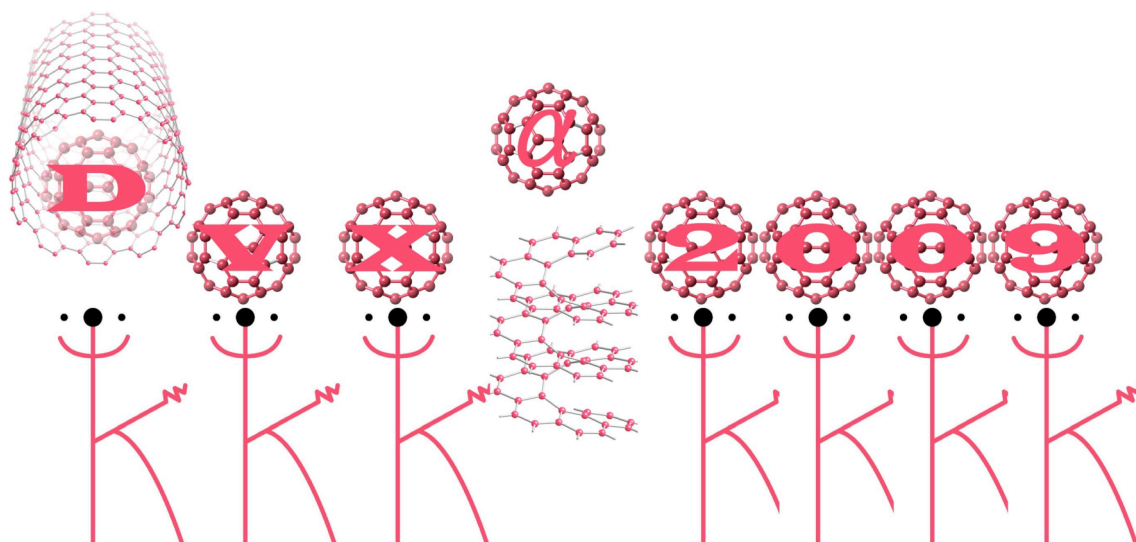




DVX α 2009

第 22 回 DV-X α 研究会

(The 22nd Annual Meeting of the Society for DV-X α Japan)

August 5 - 7, 2009

Kagawa University, Takamatsu (Kagawa), Japan

DV-X α 研究協会

(The Society for Discrete Variational X α)

第 22 回 DV-X α 研究会

会期：2009 年 8 月 5 日（水）～8 月 7 日（金）

会場：香川大学幸町キャンパス

研究交流棟 5 階 研究者交流スペース（受付・オーラル発表）

6 階 生涯学習教育研究センター

第一講義室、第二講義室（ポスター会場）

大学会館 1 階 食堂（懇親会）

（621 講義室）（予備）

〒760-8522 香川県高松市幸町 1-1

講演時間：招待講演 30 分（講演 24 分+質疑応答 5 分+交代 1 分）

一般講演 12 分（講演 8 分+質疑応答 3 分+交代 1 分）

主催	DV-X α 研究協会
共催	香川大学
協賛	（社）日本化学会
	（社）日本分析化学会
	錯体化学会
	（社）日本物理学会
	（社）応用物理学会
	（社）日本金属学会
	（社）日本鉄鋼協会
	（社）日本機械学会
	（社）日本材料学会
	（社）日本原子力学会
	（社）日本表面科学会
	（社）電気学会
	（社）電気化学会
	（社）日本セラミックス協会
	日本高圧力学会
	日本希土類学会
	日本放射光学会
	日本結晶学会
	日本鉱物科学会
	炭素材料学会
協力	香川大学国際交流基金
	（財）高松観光コンベンション・ビューロー

第 22 回 DV-X α 研究会プログラム

8/5

12:50	事務連絡
13:00	開会挨拶： 森永 正彦（名古屋大学、DV-X α 研究協会会長）

13:10-13:46 座長： 森下 政夫（兵庫県立大学）	
13:10	Spectroscopy-01 村松 康司（兵庫県立大学大学院工学研究科物質系工学専攻） 「黒鉛系炭素材料の CK 端 X 線吸収スペクトルにおける π^* ピークの広がり」
13:22	Spectroscopy-02 栗崎 敏（福岡大学理学部化学科） 「軟 X 線吸収分光法を用いた塩化ナトリウム水溶液中のナトリウムイオンのキャラクタリゼーション」
13:34	Spectroscopy-03 石井 知彦（香川大学工学部材料創造工学科） 「DV-X α 分子軌道法を用いた金属錯体の物性の自在制御」

13:50-14:26 座長： 水野 正隆（大阪大学）	
13:50	Spectroscopy-04 下村 健太（兵庫県立大学大学院工学研究科物質系工学専攻） 「DV-X α 分子軌道法を用いた炭化バナジウム(VC)の放射光軟 X 線スペクトル解析」
14:02	Spectroscopy-05 天野 泰至（兵庫県立大学大学院工学研究科物質系工学専攻） 「カーボンナノホーンに取り込まれた窒素の放射光軟 X 線状態分析」
14:14	Material-01 下山 巖（日本原子力研究開発機構量子ビーム応用研究部門） 「グラファイト中の B, N ドーピングによる 5 員環形成」

14:40-16:40 曲面量子系シンポジウム シンポジウム提案者： 尾上 順（東京工業大学）	
14:40	Invite-01（招待講演） 尾上 順（東京工業大学原子炉工学研究所） 「古くて新しいカーボン：新たな曲面量子系への展開」
15:10	Invite-02（招待講演） 戸田 泰則（北海道大学大学院工学研究科応用物理学専攻） 「光励起によるトポロジカル物性の探索」
15:40	Invite-03（招待講演） 吉岡 英生（奈良女子大学大学院人間文化研究科複合現象科学専攻） 「一次元電子系の電子状態ーピーナツ型 C ₆₀ ポリマーの解明に向けてー」
16:10	Invite-04（招待講演） 島 弘幸（北海道大学大学院工学研究科応用物理学専攻） 「曲面型ナノ構造体が示す特異な電子伝導」

16:50-17:40 ポスタープレビュー 進行： 石井 知彦（香川大学）
Poster-01 足立 裕彦（京都大学） 「交換相互作用およびフェルミ孔についての一考察」
Poster-02 藤原 学（龍谷大学理工学部物質化学科） 「カルボン酸リチウムの化学構造モデルとそれらの電子状態」
Poster-03 鈴木 知史（日本原子力研究開発機構原子力基礎工学研究部門） 「Am 酸化物の X 線吸収スペクトルと電子状態解析」
Poster-04 平手 博（名古屋大学大学院工学研究科マテリアル理工学専攻） 「 NaAlH_4 の分解反応に対する金属塩化物触媒の定量的評価」
Poster-05 山口 壮二郎（関西学院大学大学院理工学研究科化学専攻） 「第一原理による II-VI 半導体中 Co^{2+} の包括的な解析」
Poster-06 岩瀬 元希（福岡大学大学院理学研究課程化学専攻） 「軽元素を組み込んだ可視光応答型酸化チタンの合成と電子構造」
Poster-07 花房 篤志（兵庫県立大学大学院工学研究科物質系工学専攻） 「DV-X α 分子軌道法を用いたホウ素注入黒鉛の放射光軟 X 線スペクトル解析」
Poster-08 井上 夏樹（兵庫県立大学大学院工学研究科物質系工学専攻） 「DV-X α 分子軌道法による酸化カーボンブラックの軟 X 線吸収スペクトル解析」
Poster-09 片山 哲也（兵庫県立大学大学院工学研究科物質系工学専攻） 「DV-X α 分子軌道法によるフラーレン重合体の電子状態計算」
Poster-10 西岡 顕教（関西学院大学大学院理工学研究科情報科学専攻） 「準 1 次元シリコン半導体の電子状態」
Poster-11 窪内 裕太（広島大学大学院工学研究科物質化学システム専攻） 「 $\text{LNO}(\text{LiNi}_{0.84}\text{Co}_{0.16}\text{O}_2)$ に添加された Nb の Li 脱離に伴う局所構造変化」
Poster-12 國分 伸一郎（福岡大学大学院理学研究科化学専攻） 「X 線吸収分光法による佐賀県反射炉由来の鉄滓と鉄塊片の状態分析」
Poster-13 平山 須美子（関西学院大学理工学部化学科） 「希土類鉄ガーネットの希土類 $\text{M}_{4.5}$ 端における磁気円二色性スペクトルの予測」
Poster-14 南野 祐大（関西学院大学理工学部化学科） 「Colquiriite 型フッ化物中の Cr^{3+} における吸収スペクトルの第一原理計算」
Poster-15 東浦 一樹（関西学院大学理工学部化学科） 「ルビーとエスコライトにおける多重項構造及び吸収スペクトルの第一原理計算」
Poster-16 宗和 賢吉（関西学院大学理工学部化学科） 「ホウ酸化物中の Ce^{3+} における 4f-5d 吸収スペクトルの第一原理計算」

Poster-17 堀川 孟（関西学院大学理工学部化学科） 「ガーネット型結晶中の Cr^{3+} の吸収スペクトルの第一原理計算」
Poster-18 萩森 建（関西学院大学理工学部化学科） 「 LiCaAlF_6 および LiSrAlF_6 中の Ce^{3+} による吸収スペクトルの第一原理計算」
Poster-19 園田 耕平（香川大学工学部材料創造工学科） 「メタロセンの電子構造と分子軌道の可視化」
Poster-20 渡辺 洋平（香川大学工学部材料創造工学科） 「フォトクロミック化合物の構造変化に伴う電子構造の変化」
Poster-21 渡邊 僚介（香川大学工学部材料創造工学科） 「有機磁性体における分子内 ferro, antiferro 発現メカニズムの解明」
Poster-22 松原 由樹（関西学院大学理工学部化学科） 「アルカリ土類ケイ酸塩中の Ce^{3+} における吸収スペクトルの第一原理計算」

17:40	事務連絡
17:40-19:10 ポスターセッション	
18:30-21:30 運営委員・常任幹事合同委員会（運営委員、常任幹事のみ）	

8/6

8:50	事務連絡
9:00-9:48 座長： 坂根 弦太（岡山理科大学）	
9:00	Spectroscopy-06 劔持 雅弘（香川大学大学院工学研究科材料創造工学専攻） 「銅二核錯体における発光スペクトルの電子論的考察」
9:12	Magnetism-01 松居 悠（京都大学大学院工学研究科材料工学専攻） 「Pt-Fe 系合金の相安定性に対する磁気効果の第一原理計算」
9:24	Magnetism-02 田原 康宏（香川大学大学院工学研究科材料創造工学専攻） 「配位結合型人工 DNA における強磁性的相互作用メカニズムの解明」
9:36	Metal Complex-01 藤原 学（龍谷大学理工学部物質化学科） 「酸素架橋二核鉄(III)錯体の配位構造と電子状態」

9:50-10:38 座長： 中川 克己（キヤノン）	
9:50	Metal Complex-02 片岡 創（香川大学大学院工学研究科材料創造工学専攻） 「五重結合を有する二核金属錯体の電子構造と配位環境依存性」
10:02	Theory-01 福島 公親（東芝原子力エンジニアリングサービス(株)新型炉技術部） 「Gaussian Quadrature 法による原子間相互作用ポテンシャルの解析」
10:14	Theory-02 弓削 是貴（京都大学大学院工学研究科材料工学専攻） 「可変格子クラスター展開法に基づく多元合金の相安定性の予測」

10:26	Material-02 神原 将郎（関西学院大学大学院理工学研究科情報科学専攻） 「Si-ULSI の微細化限界を打破する新規ドーパントの探索」
10:50-11:20 座長： 小笠原 一禎（関西学院大学）	
10:50	Invite-05（招待講演） 阿部 穰里（首都大学大学院理工学研究科化学専攻） 「相対論を厳密に考慮した電子相関法：4成分 Dirac 法に基づく多参照摂動論の開発」
11:20-11:50 座長： 森永 正彦（名古屋大学）	
11:20	Japanese-Korean DV-Xα Joint Session Invite-06（招待講演） Myung-Chul Chang (President of DV-Xα Society in Korea) Dep. of Mater. Sci. & Engineer., Kunsan Natl. Univ., Korea “DV-X α Approach for the Structure of Al ₂ TiO ₅ at Room Temperature and at 600°C”
11:50-12:00 集合写真撮影	
12:50	事務連絡
13:00-14:00 座長： 石井 知彦（香川大学）	
13:00	Invite-07（招待講演） Timo Jacob, Inst. of Electrochem., Univ. of Ulm, Germany “Bridging the Gap between Nanoparticles and Single Crystal Surfaces”
13:30	Japanese-Korean DV-Xα Joint Session Invite-08（招待講演） Dong-Yoon Lee, Korea Electrotech. Res. Inst., Korea “Theoretical Evaluation on Catalytic Effect of Carbon Nanotube with Iodide/Triiodide Absorbed on Surface Defects”
14:10-14:52 座長： 杉原 淳（杉原科学技術研究所、湘南工科大学）	
14:10	Japanese-Korean DV-Xα Joint Session Invite-09（招待講演） Yang-Soo Kim, Korea Basic Sci. Inst., Korea “Theoretical Study on the Correlation between the Nature of Atomic Li Intercalation and Electrochemical Reactivity in TiS ₂ and TiO ₂ ”
14:40	Material-03 森下 政夫（兵庫県立大学大学院工学研究科物質系工学専攻） 「長周期金属間化合物 Mg ₂ Zn ₁₁ の熱分光」
15:00-15:36 座長： 安井 潤（キャノン）	
15:00	Material-04 西田 隆彦（関西学院大学大学院理工学研究科情報科学専攻） 「ペロブスカイト及び関連酸化物の電子状態計算(8)」
15:12	Material-05 山本 堅一（関西学院大学大学院理工学研究科情報科学専攻） 「異なる表面構造の BaTiO ₃ による強誘電性」
15:24	Material-06 岸野 正剛（福井工業大学工学部電気電子情報工学科） 「歪 Si 結晶におけるエネルギーバンドスプリットの相対論 DV-X α 法による検討」

15:40-16:28 座長： 村松 康司（兵庫県立大学）	
15:40	Material-07 西尾 直之（関西学院大学大学院理工学研究科情報科学専攻） 「4H-SiC 結晶における N クラスタのコ・ドーピング法による制御」
15:52	Material-08 畑中 宏之（関西学院大学大学院理工学研究科情報科学専攻） 「格子間不純物を持つ Si クラスタの電子状態計算」
16:04	Material-09 杉原 淳（杉原科学技術研究所、湘南工科大学） 「水の DV-X α 法による解析と画期的な応用」
16:16	Material-10 小和田 善之（兵庫教育大学大学院学校教育研究科） 「相対論 DVME 法によるリン酸塩ガラス中の Nd ³⁺ イオンの電子状態」

16:40-18:10 spd部会主催企画 「spd部会活動5年の歩みとその未来（仮称）」 spd 部会主催企画代表者： 小和田 善之（兵庫教育大学）	
18:10	事務連絡

18:30-20:30 懇親会

8/7

8:50	事務連絡
9:00-11:50 総会、受賞講演、グループ研究報告	
11:50	閉会挨拶： 脇田 久伸（福岡大学、DV-X α 研究協会会長代理）

13:00-15:00 無料 DV-X α 講習会
