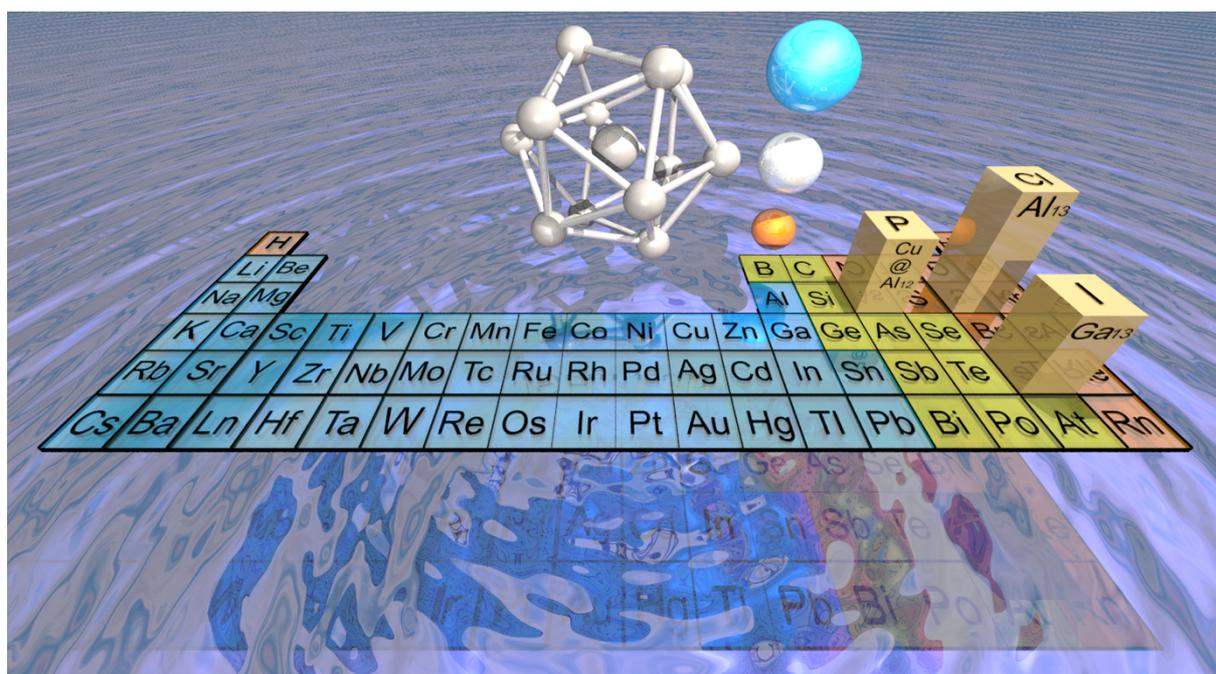


# DV-X $\alpha$ 研究会

## 2021

### オンライン



DV-X  $\alpha$  研究協会

令和3年8月28日(土)、29日(日)

会期：2021年8月28日（土）、29日（日）

会場：オンライン（Zoom）

オンラインによる開催ではありますが、通常の対面での研究会と同じ雰囲気を実施したいと思えます。つきましては個人情報の取り扱いにご注意の上、各自、カメラを常にオンにしてご参加ください。背景が映り込みますので、適宜、Zoomのバーチャル背景などの機能をご利用ください。ネットワーク回線が不安定な場合には、参加者にカメラをオフにするようお願いさせて頂く場合がございます。マイクは発言される時以外には常にミュートにしてください。なお、記念撮影以外、録音や録画は一切禁止します。

ミーティング ID パスコード	参加登録を済ませ、参加費をお支払いいただいた方のみ8月22日以降にお知らせします。Zoomに参加される場合には、必ず表示名を「氏名(所属)」にするようお願いいたします。お名前が確認できない場合には入室できません。
入室時のお願い	Zoom爆弾を避けるために、必ずZoomの表示名を「氏名(所属)」に変更して入室してください。お名前が確認できない場合には入室できません。

#### 発表の方法について

##### 【招待講演、受賞講演、口頭発表】

発表はZoomの画面共有機能を用いて行います。使用するファイルはpptファイルやpdfファイルなど、お好きな形式のものをお使い下さい。スケジュールがタイトですので時間厳守をお願いします。それぞれの発表において

- 1 鈴・・・発表終了2分前
- 2 鈴・・・発表終了
- 3 鈴・・・質疑応答終了

の合図を行います。なおZoomの画面共有は事前に確認を行うようお願いいたします。ブレイクアウトルームの31番から50番までを開放していますので、ご自由にお使い下さい。

##### 【ポスター発表】

ポスター発表の方は全員、14時45分から一人3分ずつ、ポスター発表ショートプレゼンテーションを行っていただきます。プログラムがタイトですので時間を厳守してください。その後、ポスター発表は

- 奇数の方：16時から1時間
- 偶数の方：17時から1時間

それぞれのZoomのブレイクアウトルームに分かれて行います。ポスター発表という名称ですが、Zoomのブレイクアウトルームにおいて画面共有機能を用いて行います。プレゼンとはどのようなファイルを用いても構いません。pptファイルを用いてもpdfファイルでも、またその他でも構いません。多くの方に聞いていただけるように、一度の説明は7分発表 + 3分質疑応答 = 合計10分程度の長さで、これを5,6回繰り返すようお願いいたします。

参加登録締切： 2021年8月10日(火)

参加費振込締切： 2021年8月10日(火)

参加登録フォーム

[https://forms.office.com/Pages/ResponsePage.aspx?id=3nVDI1CDKEiNt7Yd\\_X1R6ikmQE\\_I1hVIiYRfcx7fGX5U0VhZM0tE0UtJMzY4MzMyQU1FRjZDVFRNC4u](https://forms.office.com/Pages/ResponsePage.aspx?id=3nVDI1CDKEiNt7Yd_X1R6ikmQE_I1hVIiYRfcx7fGX5U0VhZM0tE0UtJMzY4MzMyQU1FRjZDVFRNC4u)



主催	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 堀内宏太朗（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)
(3分)	P19 Creation of energy maps and machine learning modeling of CrO <sub>6</sub> clusters with C <sub>4v</sub> symmetry Zhao Mengqi (関西学院大学)
(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）
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)

## ブレイクアウトルーム一覧

ルーム 1	P01 (ポスター発表)、藤原学 (龍谷大学)
ルーム 2	P02 (ポスター発表)、小野孝文 (一関工業高等専門学校)
ルーム 3	P03 (ポスター発表)、廣瀬稜 (香川大学)
ルーム 4	P04 (ポスター発表)、井宗祐梨菜 (香川大学)
ルーム 5	P05 (ポスター発表)、松本真緒 (香川大学)
ルーム 6	P06 (ポスター発表)、永山夏美 (香川大学)
ルーム 7	P07 (ポスター発表)、市川丈一郎 (山形大学)
ルーム 8	P08 (ポスター発表)、堀内宏太郎 (香川大学)
ルーム 9	P09 (ポスター発表)、杉山歩 (香川大学)
ルーム 10	P10 (ポスター発表)、平松佳恵 (兵庫県立大学)
ルーム 11	P11 (ポスター発表)、増谷公太 (兵庫県立大学)
ルーム 12	P12 (ポスター発表)、藤谷惇 (福岡大学)
ルーム 13	P13 (ポスター発表)、丸山瑠菜 (兵庫県立大学)
ルーム 14	P14 (ポスター発表)、田中利幸 (兵庫県立大学)
ルーム 15	P15 (ポスター発表)、小幡勇人 (関西学院大学)
ルーム 16	P16 (ポスター発表)、堀浩之 (関西学院大学)
ルーム 17	P17 (ポスター発表)、岡村竜徳 (関西学院大学)
ルーム 18	P18 (ポスター発表)、田中周馬 (関西学院大学)
ルーム 19	P19 (ポスター発表)、Zhao Mengqi (関西学院大学)
ルーム 20	P20 (ポスター発表)、松島綾美 (九州大学)
ルーム 21	×使用できません (Staff ONLY) 表彰委員会専用
ルーム 22	×使用できません (Staff ONLY)
ルーム 23	×使用できません (Staff ONLY)
ルーム 24	×使用できません (Staff ONLY)
ルーム 25	×使用できません (Staff ONLY)
ルーム 26	×使用できません (Staff ONLY)
ルーム 27	×使用できません (Staff ONLY)
ルーム 28	×使用できません (Staff ONLY)
ルーム 29	×使用できません (Staff ONLY)
ルーム 30	×使用できません (Staff ONLY)
ルーム 31	画面共有の確認や研究者同士の情報共有の場としてご自由にお使い下さい。
ルーム 32	画面共有の確認や研究者同士の情報共有の場としてご自由にお使い下さい。
ルーム 33	画面共有の確認や研究者同士の情報共有の場としてご自由にお使い下さい。
ルーム 34	画面共有の確認や研究者同士の情報共有の場としてご自由にお使い下さい。
ルーム 35	画面共有の確認や研究者同士の情報共有の場としてご自由にお使い下さい。
ルーム 36	画面共有の確認や研究者同士の情報共有の場としてご自由にお使い下さい。
ルーム 37	画面共有の確認や研究者同士の情報共有の場としてご自由にお使い下さい。
ルーム 38	画面共有の確認や研究者同士の情報共有の場としてご自由にお使い下さい。
ルーム 39	画面共有の確認や研究者同士の情報共有の場としてご自由にお使い下さい。
ルーム 40	画面共有の確認や研究者同士の情報共有の場としてご自由にお使い下さい。
ルーム 41	画面共有の確認や研究者同士の情報共有の場としてご自由にお使い下さい。

ルーム 42	画面共有の確認や研究者同士の情報共有の場としてご自由にお使い下さい。
ルーム 43	画面共有の確認や研究者同士の情報共有の場としてご自由にお使い下さい。
ルーム 44	画面共有の確認や研究者同士の情報共有の場としてご自由にお使い下さい。
ルーム 45	画面共有の確認や研究者同士の情報共有の場としてご自由にお使い下さい。
ルーム 46	画面共有の確認や研究者同士の情報共有の場としてご自由にお使い下さい。
ルーム 47	画面共有の確認や研究者同士の情報共有の場としてご自由にお使い下さい。
ルーム 48	画面共有の確認や研究者同士の情報共有の場としてご自由にお使い下さい。
ルーム 49	画面共有の確認や研究者同士の情報共有の場としてご自由にお使い下さい。
ルーム 50	画面共有の確認や研究者同士の情報共有の場としてご自由にお使い下さい。

# アブストラクト 招待講演

アブストラクト  
受賞講演

# アブストラクト 口頭発表

# アブストラクト ポスター発表