

## 第20回DV-X $\alpha$ 研究会 プログラム

日時: 平成19年8月2日(木)~8月4日(土)

場所: 兵庫教育大学・図書館ライブラリーホール、共通講義棟・106教室、情報処理センター・実習室1

共催: 東京工業大学COE-INES

日時	セッション名	講演題目	発表者	所属	座長
8月2日					
13:00 開会挨拶					
特別セッション1 DV-X $\alpha$ 法-これまでと今後の20年-					
13:05	特別セッション1-1(招待講演)	DV-X $\alpha$ 法の草創期とその後 「DVME法開発の歴史と今後の展開」Development history and future prospects of DVME method	足立裕彦	京都大学名誉教授	名古屋大・森永正彦
13:35	特別セッション1-2(招待講演)		小笠原一禎	関西学院大学大学院	
14:05 コーヒーブレイク					
14:15	一般(分光)(招待講演)	Zr4+共添加YPO4:Mn2+における青色発光増大現象	北浦 守	福井工業高等専門学校	関西学院大・吉田尚史
14:45	一般(分光)1	酸化物中のErの配位数と電子状態および発光スペクトル	吉野 正人	名古屋大学大学院工学研究科	
14:57	一般(分光)2	炭素注入シリコンの化学結合状態解析	村松 康司	兵庫県立大院工	
15:09	一般(分光)3	ダイヤモンド半導体における不純物局所構造と電子構造との相関	村松 康司	兵庫県立大院工	
15:21 休憩					
15:26	一般(分光)4	SCFSを用いた拡張ポルフィリンの電子構造の精密計算	高嶋 明人	香川大学工学部材料創造工学科	
15:38	一般(分光)5	X線光電子分光法を用いたイオン液体の状態分析	田中 大策	福岡大学 理学部 化学科	
15:50	一般(分光)6	大環状ヘキサアザ-ランタニド錯体の合成とそれらのX線光電子スペクトル	藤原 学	龍谷大学理工学部物質化学科	
16:02	一般(分光)7	リチウム-クラウンエーテル錯体の合成とそれらのX線光電子スペクトル	藤原 学	龍谷大学理工学部物質化学科	
16:14 コーヒーブレイク					
16:24	一般(物性)1	基底状態における電子状態と高温における相平衡および物性との関係-絶対零度付近から高温までの標準生成ギブズエネルギーの測定に基づく検討-	森下 政夫	兵庫県立大学大学院工学研究科 大阪電気通信大学大学院工学研究科	関西学院大・小笠原一禎
16:36	一般(物性)2	B/C/N層状化合物の作製と電子構造の評価	黒田 真矢		
16:48	一般(物性)3	三酸化イオウの電極表面上の挙動	鈴木 知史	日本原子力研究開発機構	
17:00	一般(物性)4	第一原理計算によるNi合金磁気モーメントの研究	久保 亮	関西学院大学大学院理工学研究科	
17:12	一般(物性)5	CO2貯留の第一原理電子状態解析	福島 公親	アイテル技術サービス株式会社	
17:24 休憩					
17:29	一般(材料)1	骨伝導メカニズムの解明	石井 知彦	香川大学工学部材料創造工学科	兵庫県立大・森下政夫
17:41	一般(材料)2	シリコンにおけるトライマー・コドーパントの研究	伊藤 和志	関西学院大学理工学研究科	
17:53	一般(材料)3	4H-SiCの低抵抗化の研究(1)	宮田 征典	関西学院大学理工学研究科	
18:05	一般(材料)4	ペロブスカイト及び関連酸化物の電子状態計算(7)	北川 昂人	関西学院大学理工学研究科	
18:17	一般(材料)5	岩塩型低温超電導物質の結合性と転移温度	落合 博昭	関西学院大学理工学研究科	
18:29 終了					
8月3日					
9:00	一般(物性)6	原子化エネルギーによる炭化水素の化学結合の表現	新里 喜文	名古屋大学大学院工学研究科	大阪大学・水野正隆
9:12	一般(物性)7	原子化エネルギーによる酸化物の化学結合の理解	齋藤 由樹	名古屋大学工学研究科	
9:24	一般(物性)8	水素内包フラーレンのインターレイヤーバンドおよび電子状態	津野 直人	香川大学工学部材料創造工学科	
9:36	一般(物性)9	ケイ素-酸素クラスターにおける元素の電子状態-鉱物・岩石と生物の関係について-	高原 渉	大阪大学 大学院工学研究科	
9:48	一般(物性)10	歪みを導入したダイヤモンド結晶のドナー準位の変化についてのマデリングポテンシャルを使ったDVX $\alpha$ 計算	岸野 正剛	福井工大・工学部	
10:00 休憩					
10:05	一般(分光)8	LiYF4中のPr3+における4f 2-4f5d吸収スペクトルの温度依存性とその第一原理 計算による解析	渡邊 真太	関西学院大学大学院理工学研究科	兵庫県立大・村松康司
10:17	一般(分光)9	超軟X線吸収スペクトル解析法を用いたハロゲン化リチウムの状態分析	迫川 泰幸	福岡大学 理学部 化学科	
10:29	一般(分光)10	全電子収量軟X線吸収分光法による炭素表面酸化の状態・定量分析; DV-X $\alpha$ 法による検量線の再現	上田 聡	兵庫県立大院工	
10:41	一般(分光)11	結晶中Mn2+のd-d遷移スペクトルの第一原理計算	甲斐 秀成	関西学院大学大学院理工学研究科	
10:53 コーヒーブレイク					
11:03	一般(分光)12	八面体六配位金属錯体の配位子場分裂とd電子レベル	坪井 紫乃	香川大学工学部材料創造工学科	岡山理科大・坂根弦太
11:15	一般(分光)13	リン酸塩ガラス中の希土類イオンの電子状態と可視・紫外吸収スペクトル	野間祥子	兵庫教育大学	
11:27	一般(分光)14	Ni(111)面上の六方晶窒化ホウ素超薄膜の電子構造	下山 巖	日本原子力研究開発機構	
11:39	一般(分光)15	シリコン固体中の白金クラスター欠陥の光励起STM観察	尾上 順	東京工業大学原子炉工学研究所	
11:51 写真撮影					
12:05 休憩・昼食					
13:15	一般(材料)6	酸化物の量子化学	足立 裕彦	京都大学名誉教授	名古屋大学・吉野正人
13:27	一般(材料)7	窒素添加タングステン酸化物薄膜の電子状態	中川 晃一	明治大学 理工学部	

13:39	一般(材料)8	五重結合を有する二核金属錯体の電子軌道と分子軌道の可視化	渡部 優史	香川大学工学部材料創造工学科	
13:51	一般(材料)9	多重結合を有する二核金属の電子構造と分子軌道の可視化	山崎 ありさ	香川大学工学部材料創造工学科	
14:03	一般(材料)10	アルカリホウ酸塩結晶におけるボレートグループの電子状態と立体構造の関係	間野 晶子		
14:15	一般(材料)11	希少糖の構造と電子状態	佐々野 恵美	香川大学工学部材料創造工学科	
14:27	コーヒーブレイク				
特別セッション2 軌道原子の計算の進展					
14:35	特別セッション2-1(招待講演)	アクチノイド科学の現状と展望(Introductory Talk)	尾上 順	東京工業大学原子炉工学研究所	香川大・石井知彦
15:05	特別セッション2-2(招待講演)	ウラニル(V)錯体の化学-電気化学的調製と諸性質-	池田 泰久	東京工業大学原子炉工学研究所	東京工大・尾上順
15:35	特別セッション2-3	AmO <sub>2</sub> のXANES測定及び解析	西 剛史	日本原子力研究開発機構	
15:47	特別セッション2-4	$\gamma$ -Uへの遷移金属の合金挙動に関する電子論的考察	栗原 正義		
15:59	休憩				
特別セッション3 プログラム開発の現状と将来					
16:15	特別セッション3-1	well potentialのパラメータの検討	小和田善之	兵庫教育大学	香川大・石井知彦
16:27	特別セッション3-2(招待講演)	DV-X $\alpha$ 計算における新規なサンプル点構成法の試み	中川 克己	キヤノン先端技術研究本部	
16:39	特別セッション3-3(招待講演)	DVME法の現状と今後のプログラム開発 Present situation and future program development of the DVME method	吉田 尚史	関西学院大学、NECライティング	
17:09	招待講演(招待講演)	DV-X $\alpha$ 研究協会の20年を振り返って-酒の勢い-	宇田 応之	早稲田大学奈良古美術研	静岡大・関根理香
17:30	終了・移動				
18:30	懇親会				
8月4日					
9:00	特別セッション3-4(招待講演)	配布版DV-X $\alpha$ プログラムの整備	水野 正隆	大阪大学大学院工学研究科	兵庫教大・小和田善之
9:30	特別セッション3-5	教育用F01・F25準備システムeduDVと錯体計算用F05準備システムMAKEF05SCFS	坂根 弦太		
9:42	特別セッション3-6(招待講演)	3次元可視化システムVESTAとDV-X $\alpha$ 法計算支援環境の開発	門馬 綱一	東北大学大学院理学研究科	
10:22	コーヒーブレイク				
10:30	総会				
11:30	受賞講演	奨励賞			
12:00	受賞講演	協会賞			
12:30	閉会・終了				