

DV-X α 研究会 優秀発表賞

DV-X α 研究協会

2022 年度(令和 4 年度) 第 34 回 DV-X α 研究会(龍谷大学)

優秀発表賞	九州大学 Poster-03-s	伊藤 琴音 生体内ハロゲン結合の指標開発を目指した第一原理計算
優秀発表賞	関西学院大学 Poster-09-s	本田 衛 第一原理計算と機械学習を用いたペロブスカイト型 酸化物結晶中 Ce ³⁺ における 4f-5d 遷移エネルギーの予測
優秀発表賞	香川大学 Oral-05-s	松本 真緒 希少糖の結晶形成における電子状態の解明
優秀発表賞	兵庫県立大学 Poster-01-s	田中 利幸 軟 X 線吸収分光法と第一原理計算による 長鎖脂肪族炭素の CK 端 XANES 解析

2023 年度(令和 5 年度) 第 35 回 DV-X α 研究会(九州工業大学)

優秀発表賞	龍谷大学 Os-01	小川 颯太 希配位ドナーの異なる平面四配位型シッフ塩基錯体の X 線光電子スペクトルと DV-X α 分子軌道計算
優秀発表賞	兵庫県立大学 Ps-04	豆崎 実夢 第一原理計算による Cellulose の CK 端 XANES 解析
優秀発表賞	九州大学 Ps-13	伊藤 琴音 第一原理計算によるタンパク質/リガンド相互作用の評価

2024 年度(令和 6 年度) 第 36 回 DV-X α 研究会(福岡大学)

優秀発表賞	香川大学 O-4S	高下 朋子 Molecular orbital calculations and Full Interaction Maps (FIMs) of aldohexoses
優秀発表賞	香川大学 P-7S	石川 舞 Controlling of Ligand Field Splitting and SCO by Distortion of Tetra-Coordinated Co(II) Complexes
優秀発表賞	関西学院大学 P-4S	真砂 俊希 A ₂ BWO ₆ 中における U ⁶⁺ の電荷移動遷移の第一原理計算
優秀発表賞	香川大学 P-9S	高田 龍之介 Molecular orbital calculations and Hirshfeld surface analysis of D,L-tagatose

2025 年度(令和 7 年度) 第 37 回 DV-X α 研究会(インドネシア)
(8th International Conference on DV-X α Method)

優秀発表賞	Ryunosuke Takata (Kagawa University):	Intramolecular Charge Distribution and Its Influence on Crystal Structure in Ketohexoses [Oral]
優秀発表賞	Tomoki Kobayashi (Kwansei Gakuin University):	Analysis of the Luminescence Mechanism of Ni ²⁺ in Crystals and Construction of a New Indicator for Nephelauxetic Effect by First-Principles Calculations and Machine Learning [Oral]
優秀発表賞	Haruka Ono (Kwansei Gakuin University):	Analysis of Visible Absorption Spectra in Natural Spinel Crystals by First-Principles Calculations [Poster]
優秀発表賞	Arisa Ida (Kwansei Gakuin University):	First-principles Calculation of the Color of Color-Change Sapphire [Poster]