口頭発表

5 月 22 日(木)

座長　　安田 耕二

1L01　　〇立花 明知(京大院工)
12:00-　量子電子スピン渦理論における重力波の効果

1L02　　〇瀬波 大土(京大院工)、立花 明知(京大院工)
12:15-　Rigged QED に基づくシミュレーションにおける thermalization とくりこみついて

1L03　　〇市川 和秀(京大院工)、福田 将大(京大院工)、立花 明知(京大院工)
12:30-　4 成分 Rigged QED における遅延ポテンシャル項の計算について

座長　　寺本 央

1L04　　〇杉本 学、井手尾 俊宏、岩根 陵、黒木 孝行、土井 龍大、長屋 秀幸、牧山 恵里香
(熊本大院自然科学)
12:45-　電子状態計算を基盤とする分子データベースシステムの開発と応用

1L05　　〇中田 真秀 (理化学研究所情報基盤センター)
13:00-　第一原理計算による分子の物理化学データベース構築

1L06　　〇金 賢得(京大院理)
13:15-　Auger-Assisted Electron Transfer from Photoexcited Semiconductor Quantum Dot

座長　　高柳 昌芳

1L07　　〇比多岡 清司(九大先導研)、中馬 寛(徳島大院・薬)、吉澤 一成(九大先導研)
13:45-　新しい定量的構造活性相関手法を用いた matrix metalloproteinase-12 阻害剤の作用メカニズムに関する理論的研究

1L08　　〇斎藤 稔(弘前大学理工学研究科)
14:00-　自由エネルギー摂動法による水中のヘモグロビンの酸素親和力の計算

1L09　　〇馬場 剛史(阪大基礎工)、原田 隆平(RIKEN,AICS)、中野 雅由(阪大基礎工)、重田 育照
(筑波大数理物質)
14:15-　大規模構造変化を誘起する MD 手法を利用したナイロンオリゴマー分解酵素の誘導適合過程の解明

座長　　川島 雪生

1L10　　〇森 俊文(分子研)、Qiang Cui(Univ. of Wisconsin-Madison)
14:30-　Integrated Hamiltonian Sampling:効率的な自由エネルギー計算と構造サンプリングに向けたアプローチ

1L11　　〇石田 豊和(産総研ナノシステム)、藤橋 雅宏(京大院理)
14:45-　酵素活性における基質歪みの効果: ODCase の酵素反応を例として

1L12 ○庄司 光男(筑波大数理)、氏家 謙(筑波大数理)、田中 弥(筑波大数理)、栢沼 愛(筑波大シス情)、梅田 宏明(筑波大計算セ)、村川 武志(大阪医大)、林 秀行(大阪医大)、重田 育照(筑波大数理)

15:00- QM/MM 法によるトレオニン合成酵素の反応制御機構の理論解明

座長 横川 大輔

1L13 ○早瀬 修一、野上 敏材、伊藤 敏幸(鳥取大院工)

15:30- 配座変調された分子間相互作用を持つ系に対する Potts モデルの平均場理論:イオン液体への応用

1L14 ○赤瀬 大(広島大院理、広島大 QuLS)、相田 美砂子(広島大院理、広島大 QuLS)、寺前 裕之(城西大理)

15:45- プロトン化水クラスター$H_3O^+(H_2O)_{n-1}$, n=8 の水素結合ネットワークトポロジーと OH 伸縮振動の分類

1L15 ○寺本 央(北大電子研)、戸田 幹人(奈良女理)、小松崎 民樹(北大電子研)

16:00- 生体分子と水の過渡的な集団運動の抽出

座長 井内 哲

1L16 ○山崎 祥平(弘前大院理工)、浦島 周平(横浜市大院生命ナノ)、三枝 洋之(横浜市大院生命ナノ)、武次 徹也(北大院理)

16:15- プリン塩基の光物理的挙動に対する一分子水和の影響

1L17 ○片岡 洋右(法政大生命科学)、山田 祐理(東電大理工)

16:30- 実在液体の状態方程式の基本構造

1L18 河田 真治(名大院工)、藤本 和士(立命館大薬)、○吉井 範行(名大院工計算セ)、岡崎 進(名大院工)

16:45- SDS の会合体間相互作用および会合機構に関する分子動力学計算による研究

5 月 23 日(金)

座長 中田 真秀

2L01 ○大野 公一(東北大院理・量子化学探索研)

9:00- 量子化学計算による効率的立体配座自動探索

2L02 ○永幡 裕(北大生命科学院)、前田 理(北大理)、寺本 央(北大電子研)、Chun-Biu Li(北大電子研)、堀山 貴史(埼玉大情報メディア基盤センター)、武次 徹也(北大理)、小松崎 民樹(北大電子研)

9:15- 複雑分子系における構造異性化反応ネットワークの理解に向けて

2L03 ○前田 理(北大院理)、武次 徹也(北大院理)、諸熊 奎治(京大福井謙一研究セ)

9:30- 単成分人工力誘起反応(SC-AFIR)法

座長 赤間 知子

2L04 ○中井 浩巳(早大先進理工、早大理工研、JST-CREST、京大 ESICB)、石川 敦之(早大理工研、JST-CREST)

9:45- 量子化学的手法による凝縮系の熱力学:理論提案

2L05 ○石川 敦之（早大理工研、JST-CREST）、中井 浩巳（早大先進理工、早大理工研、JST-CREST、京大 ESICB）

10:00- 量子化学的手法による凝縮系の熱力学：実践的応用

座長 樋山 みやび

2L06 小林 倫仁（東北大理）、池田 嘉寿人（東北大理）、Anant Babu Marahatta（東北大院理）、○菅野 学（東北大院理）、瀬高 渉（首都大院都市環境）、河野 裕彦（東北大院理）

10:30- フッ素置換回転子を持つ結晶性分子ジャイロスコープの構造と動力学

2L07 ○宋 鍾元(理研 AICS)、平尾 公彦(理研 AICS)

10:45- 長距離補正密度汎関数法による分子内電荷移動励起と分子間電荷移動励起の違いの解明

2L08 ○松崎 黎、藪下 聡(慶大院理工)

11:00- 複素 STO-NG 基底セットの構築

座長 福田 良一

2L09 ○臼井 孝介（名大院理）、横川 大輔（名大トランスフォーマティブ生命分子研）、イレ ステファン（名大トランスフォーマティブ生命分子研）

11:15- スチルベン骨格を有する分子の 2 光子吸収に関する理論的研究

2L10 ○岸 亮平、森田 啓介、中野 雅由（阪大院基礎工）

11:30- 開殻分子二量体の励起特性の分子配向依存性に関する理論的研究

座長 岸 亮平

2L11 ○甲田 信一、高塚 和夫（東大院総合文化）

14:45- デンドリマー等をモデルする樹状ネットワーク上のハミルトニアンの直鎖分割

2L12 ○長谷川 淳也（北大触媒セ）、石村 和也（分子研 TCCI）

15:00- 凝集系における分子の励起状態と分子間相互作用

2L13 ○福田 良一（分子科学研究所、計算科学研究センター、京都大学 触媒・電池元素戦略ユニット）、江原 正博（計算科学研究センター、分子科学研究所、京都大学 触媒・電池元素戦略ユニット）、Roberto Cammi（パルマ大学）

15:15- 励起スペクトルに対する溶媒効果： 摂動理論に基づく PCM SAC-CI 法の開発

2L14 ○原渕 祐(北大院理)、Kristopher Keipert(アイオワ州立大)、Federico Zahariev(アイオワ州立大)、Mark S. Gordon(アイオワ州立大)、武次 徹也(北大院理)

15:30- Spin-Flip TD-DFT 法に基づく第一原理分子動力学法の開発とシススチルベン光異性化ダイナミクスへの適用

座長 沢邊 恭一

2L15 ○大西 拓（三重大工院）、Trygve Helgaker (CTCC, UiO)

16:00- ペロブスカイト型ジルコニウム酸化物におけるプロトン伝導メカニズムの理論解明

2L16 ○崔 隆基（産総研ナノシステム研究部門）、土田 英二（産総研ナノシステム研究部門）
16:15- アルカリ電解質形燃料電池用電解質膜中での水酸化物イオンの伝導機構

座長 大西 裕也

2L17 ○今村 穣(理研 AICS)、神谷 宗明(岐阜大学、理研 AICS)、中嶋 隆人(理研 AICS)
16:30- 光機能材料に対する 2 成分相対論的時間依存密度汎関数理論の応用

2L18 ○阿部 穣里（首都大化学）、G. Gopakumar（首都大化学）、波田 雅彦（首都大化学）、B. P. Das (Indian Institute of Astrophysics)、館脇 洋（名市大自然科学）、D. Mukherjee (Raman Centerof Atomic Molecular and Optical Sciences、IACS)
16:45- Application of a Relativistic Coupled-Cluster Theory to the Effective Electric Field in YbF

2L19 ○杉崎 研司（阪市大院理）、豊田 和男（阪市大院理）、佐藤 和信（阪市大院理）、塩見 大輔（阪市大院理）、北川 勝浩（阪大院基礎工）、工位 武治（阪市大院理）
17:00- 零磁場分裂テンソルのスピン軌道項の DFT 計算における Corrected-QRO 法の提案

5 月 24 日(土)

座長 吉井 範行

3L01 ○石橋 千晶（千葉工大院工）、折笠 貴美彦（千葉工大工）、岩田 末廣（慶大理工）、尾上 薫（千葉工大院工）、松澤 秀則（千葉工大院工）
9:00- ハロゲンイオンの水和構造：イオン-水および水-水間水素結合ネットワーク

3L02 ○鳥居 肇（静岡大教育）
9:15- 平面分子の面外双極子微分から導出される原子部分電荷に関わる電子密度解析

座長 石村 和也

3L03 ○小林 正人（北大院理）、武次 徹也（北大院理）
9:30- 分割統治(DC)法におけるエネルギー誤差の摂動的算定: DC 計算のオートメーションに向けて

3L04 ○速水 雅生（早大先進理工）、清野 淳司（早大先進理工）、中井 浩巳（早大先進理工、早大理工研、JST-CREST、京大 ESICB）
9:45- 高周期元素を含む化合物に対する電子反撥積分の高速化

3L05 ○高橋 英明（東北大理学研究科）、海野 悟（東北大理学研究科）、森田 明弘（東北大理学研究科）
10:00- Becke-Roussel の交換ホール関数による QM/MM 交換反発ポテンシャルの構築

座長 中嶋 浩之

3L06 ○大西 裕也（神戸大院システム情報学）、石村 和也（分子研）、天能 精一郎（神戸大院システム情報学）
10:30- エネルギー分母を修正した二次摂動論と分散相互作用系への適用

3L07 ○大塚 勇起、天能 精一郎（神戸大学システム情報）
10:45- モデル空間量子モンテカルロ法による基底・励起状態のポテンシャルエネルギー曲線の計算

座長　　大塚　勇起

3L08　　〇黒川　悠索（量子化学研究協会）、　中辻　博（量子化学研究協会）
11:00-　Free Complement 法による水素分子の基底・励起状態のポテンシャルカーブの計算

3L09　　〇中辻　博(量子化学研究協会)、中嶋　浩之(量子化学研究協会)
11:15-　原子・分子のシュレーディンガー解：iExg　法が開く道

3L10　　〇中嶋　浩之(量子化学研究協会・研究所)、中辻　博(量子化学研究協会・研究所)
11:30-　iExg 法による原子・分子のシュレーディンガー解の計算

座長　　藤井　幹也

3L11　　〇赤間　知子、佐藤　紀穂、南部　伸孝（上智大理工）
13:15-　3 項間漸化式に基づく効率的な実時間発展

3L12　　〇花崎　浩太（東大院総合文化）、高塚　和夫（東大院総合文化）
13:30-　Pechukas の経路積分理論を応用した電子-核結合動力学の解析

座長　　山崎　祥平

3L13　　〇水野　雄太(東大院総合文化)、新崎　康樹(東大院総合文化)、高塚　和夫(東大院総合文化)
13:45-　赤外光により誘起された非断熱過程からの発光の理論研究

3L14　　〇斉田　謙一郎、Dmitrii V. Shalashilin（リーズ大化）
14:00-　ピロール分子の励起状態水素脱離ダイナミクス

座長　　高橋　聡

3L15　　〇松岡　雷士（広島大院工）、市原　晃（原子力機構）、瀬川　悦生（東北大院情報科学）、横山　啓一（原子力機構）
14:30-　光パルス列中での二原子分子の回転分布局在化の数理モデル

3L16　　〇大槻　幸義（東北大院理）、布施　泰斗（東北大院理）、後藤　悠（分子研）、香月　浩之（分子研）、大森　賢治（分子研、JST-CREST）
14:45-　超短および高強度レーザーパルスを用いた量子干渉分光法

座長　　宇田川　太郎

3L17　　〇山本　悟（阪市大院理）、中澤　重顕（阪市大院理、FIRST）、杉崎　研司（阪市大院理、FIRST）、佐藤　和信（阪市大院理、FIRST）、豊田　和男（阪市大院理、FIRST）、塩見　大輔（阪市大院理、FIRST）、北川　勝浩（阪大基礎工、FIRST）、工位　武治（阪市大院理、FIRST）
15:00-　分子スピン量子コンピュータにおける断熱的量子アルゴリズムの適用研究

3L18　　〇高橋　聡（東大院総合文化）、高塚　和夫（東大院総合文化）
15:15-　量子波束ダイナミクスと quantum smoothing 機構

3L19　　〇高塚　和夫（東大院総合文化）、　高橋　聡（東大院総合文化）
15:30-　多体量子動力学における量子効果とその解釈

座長　　森　俊文

3L20　　〇藤井　幹也（東大院工）、山下　晃一（東大院工）
16:00-　　１自由度非断熱系の幾何学的量子化

3L21　　〇宇田川　太郎　（岐阜大工）、常田　貴夫　（山梨大燃研）、立川　仁典(横市大)
16:15-　　電子-核相関を評価するための相関汎関数の開発

3L22　　〇緒方　勇大（横浜市大院生命ナノ）、川島　雪生（理研 AICS）、高橋　開人（台湾中央研究院）、立川　仁典（横浜市大院生命ナノ）
16:30-　　原子核の量子効果と温度効果を考慮した $OH^-(H_2O)_2$ クラスターの理論研究

ポスター発表（1 日目）

5 月 22 日(木)

1P01　〇五十幡 康弘(早大先進理工)、中井 浩巳(早大先進理工、早大理工研、JST-CREST、京大 ESICB)
結合エネルギー密度解析を用いた非局所スピン間相互作用の解析

1P02　〇松井 啓史、福田 幸太郎、廣崎 裕多、高椋 章太、伊藤 聡一、中野 雅由（阪大院基礎工）
環状チアジルラジカルダイマーにおける開殻性と第二超分極率の相関

1P03　〇福田 幸太郎（阪大院基礎工）、廣崎 裕多（阪大院基礎工）、高椋 章太（阪大院基礎工）、
中野 雅由（阪大院基礎工）
開殻一重項分子系のジラジカル因子と第二超分極率に対する対称分子内電荷移動の効果

1P04　〇高椋 章太、中野 雅由（阪大院基礎工）
異核遷移金属鎖における開殻一重項性と三次非線形光学特性との相関に対する金属種配列効果

1P05　小嶋 亮平、岡田 智暉、江波 幸樹、和田 亨、〇望月 祐志(立教大理)
1,4,7-トリアザシクロノナン(tacn)を配位子とする白金錯体の電子状態

1P06　〇小関 史朗（阪府大院理）、松本 沙智子（阪府大院理）、麻田 俊雄（阪府大院理）、松下 武司（JNC）
白金錯体における燐光過程に関する再考

1P07　〇吉長 晴信(阪府大院理)、麻田 俊雄(阪府大院理、RIMED)、小関 史朗(阪府大院理、RIMED)、
松下 武司(RIMED、JNC Co.)
青色燐光材料の設計

1P08　〇大塚 美穂（お茶大院人間文化創成科学）、Christophe GOURLAOUEN (University of Strasbourg、CNRS)、Chantal DANIEL (University of Strasbourg、CNRS)、鷹野 景子（お茶大院人間文化創成科学）
異なる溶媒環境における光スイッチ分子 $[Ru(L)_2dppz]^{2+}$ (L = bpy, tap) の 3 重項励起状態に関する理論研究

1P09　〇王 祺(早大先進理工)、五十幡 康弘(早大先進理工)、森田 靖(愛工大工)、中井 浩巳
(早大先進理工、早大理工研、JST-CREST、京大 ESICB)
Photo-absorption properties of pi-stacking structures of trioxotriangulene derivatives

1P10　C. M. Marian (Heinrich Heine Univ.)、〇中川 節子 (金城学院大)、V. Rai-Constapel (Heinrich Heine Univ.)、B. Karasulu、W. Thiel (Max-Planck-Institute)
青緑色領域に吸収をもつフラビン誘導体の光物理：光スイッチの潜在的補因子としてのチオフラビン

1P11　米田 京平（阪大院基礎工）、福田 幸太郎（阪大院基礎工）、伊藤 聡一（阪大院基礎工）、
〇中野 雅由（阪大院基礎工）
フェナレニルラジカルからなる一次元開殻一重項分子集合系の三次非線形光学効果

1P12　○野口 良史、樋山 みやび、秋山 英文、原田 慈久（東大物性研）、古賀 伸明（名大情報科学）
アセトンと酢酸の X 線吸収スペクトルの第一原理計算

1P13　○中條 恵理華、増田 友秀、藪下 聡（慶大院理工）
$Ln(COT)_2^-$錯体の光電子スペクトルにおけるランタノイド依存性の理論的研究

1P14　○大谷 優介（物材機構）、袖山 慶太郎（物材機構）、韓 礼元（物材機構）、館山 佳尚（物材機構）
色素増感太陽電池における Ru 色素の TiO_2 表面吸着様式の再検討：COOH 基と NCS 基

1P15　○栢沼 愛（筑波大システム情報）、Chantal Daniel（CNRS、Univ. of Strasbourg）、Jérôme Fortage（CNRS、Univ. Joseph Fourier）、Thibaut Stoll（Univ. Joseph Fourier）、Alain Deronzier（CNRS、Univ. Joseph Fourier）、Marie-Noëlle Collomb（CNRS、Univ. Joseph Fourier）
Ru 錯体及び Rh 錯体による光触媒水素発生系の反応機構に関する理論的研究

1P16　○白井 聡一（豊田中研、ACT-C）、山田 有理（豊田中研、ACT-C）、前川 佳史（豊田中研、ACT-C）、稲垣 伸二（豊田中研、ACT-C）
メソ細孔有機シリカの細孔表面に形成された金属錯体の電子状態解析

1P17　○沢邊 恭一、薩摩 篤（名大院工）
シアノピリジンの水和反応に対する CeO_2 触媒表面の面方位の違いによる反応性

1P18　○松井 正冬（京大 ESICB）、榊 茂好（京大 FIFC、京大 ESICB）
Rh dimer と $AlPO_4$(110) 表面の相互作用

1P19　○P.K. Sajith (IMCE、Kyushu University)、Yoshihito Shiota (IMCE、Kyushu University)、Kazunari Yoshizawa (IMCE、Kyushu University)
Theoretical study on the role of acidic proton in the decomposition of NO over dimeric Cu(I) active sites in Cu-ZMS-5 catalyst

1P20　○佐々木 岳彦（東大院新領域）、板子 健太郎（東大院新領域）、原田 慧（東大院新領域）
GRRM による Cu(100)および Cu クラスター上の吸着系の研究

1P21　○中村 公亮（東北大院理）、磯部 寛之（東北大院理）、佐藤 宗太（東北大院理）、一杉 俊平（東北大院理）、時子山 宏明（和歌山大院システム工、IQCE 特別研究員）、山門 英雄（和歌山大システム工）、大野 公一（東北大院理、量子化学探索研究所）、河野 裕彦（東北大院理）
カーボンナノチューブベアリングの回転運動機構の理論的解明

1P22　○武次 徹也、原渕 祐、小野 ゆり子、前田 理（北大院理）
反応経路地図への分岐反応経路概念の導入

1P23　○山門 英雄（和歌山大システム工）、澤田 裕（和歌山大院システム工）、勝野 直也（和歌山大院システム工）、大野 公一（東北大院理、量子化学探索研究所）
一般化した超球面探索法による Si 結晶構造の自動探索

1P24　○畑中 美穂（京大福井謙一研究セ）、堀 直也（京大福井謙一研究セ）、前田 理（北大院理）、María Luisa Senent（IEM-CSIC）、Majdi Hochlaf（Université Paris-Est）、諸熊 奎治（京大福井謙一研究セ）
星間空間における炭化水素アニオンの生成機構に関する理論的研究

1P25　杉山 達人（城西大理）、長岡 伸一（愛媛大院理）、長嶋 雲兵（産総研）、○寺前 裕之（城西大院理）
N_2^-および O_2^-の基底状態の diffuse 関数依存性

1P26　武田 直也、○秦野 甯世（中京大情報理工）、山本 茂義、舘脇 洋
原子・分子軌道の節面数の計数と人工的な節の除去

1P27　○沖村 彰彦（阪大院工）、広瀬 喜久治（阪大院工）、後藤 英和（阪大院工）
非直交基底による多電子状態計算手法の開発

1P28　○川島 雪生（理研 AICS）、平尾 公彦（理研 AICS）
長距離補正密度汎関数法における HF 交換積分の解析

1P29　○王 笛申（東大院機械）、平野 敏行（東大生研）、佐藤 文俊（東大生研）
コレスキー分解を用いた大規模電子状態計算の効率的な計算法の開発

1P30　○河東田 道夫、中嶋 隆人（理研 AICS）
京コンピュータを用いたナノ超分子の分子間相互作用エネルギー計算

1P31　○石村 和也(分子研)
巨大分子の構造最適化並列計算プログラム開発

1P32　○中谷 直輝（北大触媒セ）、Brecht Verstichel（Princeton Univ.）、Garnet K.-L. Chan（Princeton Univ.）
汎用テンソルライブラリの開発とテンソルネットワークアルゴリズムへの応用

1P33　○中嶋 裕也（早大先進理工）、清野 淳司（早大先進理工）、中井 浩巳（早大先進理工、早大理工研、JST-CREST、京大 ESICB）
重元素化合物に対する相対論的構造最適化計算(2)

1P34　○浅井 久瑠美(首都大院理工)、阿部 穣里(首都大院理工、JST-CREST)、波田 雅彦（首都大院理工、JST-CREST)、藤井 靖彦(東工大原子炉)
エチレンジアミン四酢酸（EDTA）鉛の同位体交換反応：2成分相対論法による検証

1P35　○曽我 康太（京大院工）、福田 将大（京大院工）、瀬波 大土（京大院工）、立花 明知（京大院工）
電子の電気双極子モーメントによる分子内部のスピントルク

1P36　○宮本 英宜（京大院工）、福田 将大（京大院工）、市川 和秀（京大院工）、立花 明知（京大院工）
曲がった空間における 4 成分 Rigged QED による原子分子系の時間発展シミュレーション

1P37　○田中 友貴（京大院工）、瀬波 大土（京大院工）、立花 明知（京大院工）
Primary Rigged QED シミュレーションにおける thermalization 過程の研究

1P38　○内藤 健人（京大院工）、福田 将大（京大院工）、市川 和秀（京大院工）、立花 明知（京大院工）
4成分 Rigged QED における thermalization の研究

1P39　○福田 将大(京大院工)、市川 和秀(京大院工)、立花 明知(京大院工)
外部電磁場下における Rigged QED の数値シミュレーション

1P40　○谷内 公紀(京大院工)、福田 将大(京大院工)、市川 和秀(京大院工)、立花 明知(京大院工)
4成分 Rigged QED シミュレーションにおける原子核運動の効果の研究

1P41　○田川 啓太郎(京大院マイクロエンジニアリング)、瀬波 大土(京大院マイクロエンジニアリング)、立花 明知(京大院マイクロエンジニアリング)
局所電気伝導率を用いたシリコンナノワイヤーの物性解析

1P42　○埜崎 寛雄(京大院工)、市川 和秀(京大院工)、立花 明知(京大院工)
電子ストレステンソル密度による Ge, Sb, Te 原子を含む化学結合に対する理論的研究

ポスター発表(2 日目)

5 月 23 日(金)

2P01　野口 純樹(京大院工)、○中農 浩史(京大院工)、佐藤 啓文(京大院工)
フェロセン系イオン液体の電子物性に関する理論的研究

2P02　○宮本 洋雄(阪大院基礎工)、横田 泰之(阪大院基礎工)、稲垣 耕司(阪大院工)、森川 良忠(阪大院工)、福井 賢一(阪大院基礎工)
分子動力学法を用いたグラフェン電極系の電位に依存した *Li*ドープイオン液体の挙動解析

2P03　○田中 佑一、吉田 紀生、中野 晴之(九大院理)
RISM-SCF 法によるブルッカーメロシアニンの吸収スペクトルに対する溶媒効果の解析

2P04　○Arifin、Daisuke Yokogawa、Stephan Irle (Nagoya University)
Ab initio study of the glucose anomer distributions in water and ionic liquid

2P05　本田 龍之介、 ○佐藤 啓文(京大院工、京大触媒・電池元素戦略)
積分方程式理論に基づく二次元液晶モデル

2P06　○山田 祐理(東電大理工)、片岡 洋右(法政大生命)
定圧分子動力学シミュレーションによるレナード-ジョーンズ系の相平衡

2P07　○松村 祥宏(京大院工)、佐藤 啓文(京大院工、ESICB)
凝縮系における自己集合過程の分子統計力学理論

2P08　○大滝 大樹(理研)、八木 清(理研)、杉田 有治(理研)、石内 俊一(東工大資源研)、藤井 正明(東工大資源研)
レプリカ交換分子動力学法と非調和振動状態計算によるポリペプチドの構造決定

2P09　○北村 勇吉(名大院情報科学)、竹中 規雄(名大院情報科学、京大 ESICB)、小谷野 哲之(名大院情報科学)、長岡 正隆(名大院情報科学、京大 ESICB、CREST-JST)
溶液中振動スペクトルに対する双振動解析手法の開発

2P10　○米澤 康滋(近大先端研高圧蛋白)
RNA ポリメラーゼ II の C 末端領域の分子シミュレーションによる構造空間解析

2P11　○菅野 龍馬(金沢大院自然)、井田 朋智(金沢大院自然)、瀬尾 悌介(金沢大院自然)、水野 元博(金沢大院自然)
分子動力学法による Ferredoxin-$NADP^+$-Reductase の構造と活性の相関

2P12　西川 直宏（名大院理、分子研）、Phuong NGUYEN（IBPC）、Philippe DERREUMAUX（IBPC）、岡本 祐幸（名大院理、名大院理構セ、名大院工計セ、名大情セ）
アミロイド線維形成メカニズム解明へ向けた分子動力学シミュレーション

2P13　○平尾 昌吾(名大院情報科学)、高柳 昌芳(名大院情報科学、CREST-JST)、長岡 正隆（名大院情報科学、CREST-JST）
グロビンタンパク質におけるリガンド侵入経路の理論的研究

2P14　○高柳 昌芳（名大院情報科学、CREST-JST）、栗崎 以久男（名大院情報科学）、長岡 正隆（名大院情報科学、京大 ESICB、CREST-JST）
T構造ヒトヘモグロビンにおける酸素分子侵入経路の理論的研究

2P15　○竹中 規雄(名大院情報科学、京大 ESICB)、鈴木 雄一(名大院情報科学)、酒井 裕史（名大院情報科学)、長岡 正隆(名大院情報科学、京大 ESICB、CREST-JST)
リチウムイオン電池における固体電解液相間(SEI)膜形成の理論的解析

2P16　○鈴木 雄一(名大院情報科学)、小谷野 哲之(名大院情報科学)、長岡 正隆(名大院情報科学、京大 ESICB、CREST-JST)
芳香族ポリアミド膜の重合反応過程とナノ構造解析: 混合 MC/MD 反応法の適用

2P17　○土井富 一城 (九大先導研)、蒲池 高志（九大先導研）、田中 宏昌（九大先導研）、虎谷 哲夫（岡山大工）、吉澤 一成（九大先導研）
QM/MM 法を用いたジオールデヒドラターゼのグリセロール脱水反応のミューテーション解析

2P18　○吉田 洵也（東京大学大学院工学系研究科機械工学専攻）、平野 敏行（東京大学大学院、生産研）、佐藤 文俊（東京大学大学院、生産研）
酸化型グルコースオキシダーゼの電子状態計算

2P19　○樋山 みやび（東大物性研）、秋山 英文（東大物性研）、古賀 伸明（名大院情報科学）
励起状態の pKa を利用した酸性条件下でのホタルルシフェリン蛍光スペクトルの解析

2P20　○嶺澤 範行(京大福井セ)
GFP 発色団分子の水溶液における円錐交差の理解: SF-TDDFT/LRFE 法

2P21　○宮原 友夫、中辻 博（量子化学研究協会）
キラル理論分子技術、キラサクの生体分子への応用

2P22　○豊田 和男（阪市大院理）、杉崎 研司、佐藤 和信、塩見 大輔、工位 武治
SAC-CI 法を用いた有機分子の三重項励起状態における零磁場分裂テンソルの計算

2P23　○北川 裕也(北大触媒センター)、中山 哲(北大触媒センター)、長谷川 淳也(北大触媒センター)
ヘム錯体における酸素結合過程のポテンシャル面に関する理論的研究

2P24　○宇梶 かすみ、阿部 穣里、波田 雅彦(首都大院理工、JST-CREST)
高スピン Fe(Ⅳ)オキソポルフィリン錯体によるオレフィンのエポキシ化反応

2P25　○中垣 雅之 青野 信治 榊 茂好（京大福井謙一研究セ）
Co(II)錯体の電子状態と分子間相互作用: スピンクロスオーバー現象の発生・阻害因子

2P26　○瀬本 貴之、辻 雄太、田中 宏昌、吉澤 一成（九大先導研）
炭素繊維-エポキシ樹脂接着に関する分子論的研究

2P27　○岩根 陵、杉本 学（熊本大院自然科学）
電子状態計算に基づく分子類似性解析とその応用（3）-Bioisoster に関するクラスター解析

2P28　○黒木 孝行、杉本 学（熊本大院自然科学）
電子状態データ・マイニングによる物性解析（1）-基本アルゴリズム開発と簡単な応用-

2P29　○藤岡 蔵、北 幸海、立川 仁典（横市大院生命ナノ）
量子モンテカルロ法を用いた多原子分子の分光定数に関する理論的解析

2P30　○荒井 雄太、山崎 達人、菅野 学、河野 裕彦（東北大院理）
ガウス基底を用いた多配置核波束動力学法のトンネルダイナミクスへの適用

2P31　○河津 励(東大院総文、横市大院生命ナノ)、三浦 伸一(金大院理工)
ab initio 虚時間離散化経路積分インスタントン法を用いたアンモニア同位体傘反転ゼロ点振動トンネル分裂の定量的再現

2P32　○安藤 耕司（京大院理）
準量子的波束による初期値表示プロパゲータ

2P33　○佐藤 彩(北大院総合化学)、原渕 祐(北大院理)、大谷 優介(物材機構)、武次 徹也(北大院理)
トロポロン分子内励起プロトン移動によるトンネル分裂の AIMD-WKB 計算

2P34　○伊藤 聡一(阪大院基礎工)、中野 雅由(阪大院基礎工)
シングレットフィッション初期過程における分子振動が及ぼす二量体励起状態への効果

2P35　○岩佐 豪(慶大理工)
非一様電場による分子振動励起

2P36　○新井 健太（東北大院理）、大槻 幸義（東北大院理）、河野 裕彦（東北大院理）
光格子中の KCs 分子を用いるスケーラブルな量子計算に向けたマイクロ波パルスの設計

2P37　○吉田 将隆（東北大院理）、中島 薫（東北大院理）、大槻 幸義（東北大院理）、河野 裕彦（東北大院理）
パルスエネルギー固定の最適化シミュレーションの開発：フェムト秒パルスと1サイクル THz パルスによる CO 配向制御への応用

2P38　○安食 徹（東北大院理）、新井 健太（東北大院理）、大槻 幸義（東北大院理）、河野 裕彦（東北大院理）
最適な量子デコヒーレンス抑制法の純粋度を用いた図形的解釈