

講演プログラム

A 講演:30 分(発表 20 分+討論 10 分) B 講演:20 分(発表 15 分+討論 5 分)

ポスター:90 分(奇数番号 前半 45 分+偶数番号 後半 45 分)

5 月 23 日(月)

8:50

開会挨拶 中井 浩巳

有機化合物

座長:長谷川 淳也(北海道大)

9:00 1A01

○細矢 治夫(お茶大名誉)

共役ポリエンの家系図

9:30 1B02

○市川 滉貴(東大院総合文化)、高塚 和夫(東大院総合文化)

共役ポリエンの光異性化反応の化学修飾による制御に関する理論的研究

9:50 1B03

○高椋 章太、永海 貴識、藤吉 純也、北河 康隆、中野 雅由(阪大院基礎工)

遷移金属-炭素間結合における三次非線形光学特性についての理論研究

10:10 1B04

○田代 基慶(理研 AICS)、河東田 道夫(理研 AICS)、今村 穰(首都大)

PCBM/PCPDTBT 界面における電荷分離・再結合過程に関する理論計算による検討

休憩(10:30 - 10:40)

量子化学基礎

座長:阿部 穰里(首都大学東京)

10:40 1A05

○関野 秀男(SBU, IACS)

量子ウォークの多体系への拡張

11:10 1B06

○中辻 博(量子化学研究協会)

正確な予言的量子化学の展開:巨大分子系をも包含して

11:30 1B07

○中嶋 浩之(量子化学研究協会)、中辻 博(量子化学研究協会)

自由完員関数法に基づく正確な Non-BO 計算の展開

11:50 1B08

○黒川 悠素(量子化学研究協会)、中辻 博(量子化学研究協会)

Free Complement 法による多電子 Harmonium system の研究

休憩(12:10 - 13:10)

ポスター(13:10 - 14:40)

インフォマティクス

座長:小林 正人(北海道大)

14:40 1A09

○清野 淳司(早大理工研)、速水 雅生(早大先進理工)、中嶋 裕也(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)

群知能による凍結内殻ポテンシャル法を参照としたモデルポテンシャル自動決定手法の
開発

15:10 1B10

○袖山 慶太郎(JST さきがけ、NIMS MI2I、京大 ESICB)、五十嵐 康彦(東大新領域)、岡
田 真人(東大新領域)、館山 佳尚(NIMS MI2I、京大 ESICB)

マテリアルズ・インフォマティクスによる二次電池の電解液材料探索

15:30 1A11

○畑中 美穂(近大理工、JST さきがけ)

ランタノイド発光材料の消光経路のデータベース化と発光特性を決定する因子の抽出

休憩(16:00 - 16:10)

生体分子

座長: 藤本 和士(名古屋大)

16:10 1A12

○山守 優(阪大院基礎工)、石塚 良介(阪大院基礎工)、松林 伸幸(阪大基礎工)
分子動力学とエネルギー表示理論を用いた共溶媒変性効果の自由エネルギー解析

16:40 1B13

○栗崎 以久男(名大院情報科学、CREST)、Barberot Chantal(名大院情報科学、CREST)、高柳 昌芳(名大院情報科学、CREST)、長岡 正隆(名大院情報科学、CREST)
トロンビンの Na⁺結合空洞が基質結合ポケットの脱水和に果たす役割

17:00 1B14

菱沼 直樹(東北大院理)、石母田 和樹(東北大院理)、及川 啓太(東北大院理)、○菅野 学(東北大院理)、木野 康志(東北大院理)、秋山 公男(東北大多元研)、河野 裕彦(東北大院理)

DNA 鎖切断の化学反応動力学シミュレーション

休憩(17:20 - 17:30)

液体・溶液(1)

座長: 安藤 耕司(京都大)

17:30 1A15

○石塚 良介(阪大基礎工、京大 ESICB)、松林 伸幸(阪大基礎工、京大 ESICB)
MD/DFT 自己無撞着計算法によるイオン液体の有効電荷解析

18:00 1B16

○片岡 洋右(法大生命)
分子動力学法による荷電コロイド分散系の構造

18:20 1B17

○小林 理(上智大理工)、南部 伸孝(上智大理工)
Particle-mesh Ewald 法の ONIOM 法への応用

5月24日(火)

水素結合系

座長: 重田 育照(筑波大)

8:40 2A01

○赤瀬 大(広島大院理、広島大 QuLiS)、相田 美砂子(広島大院理、広島大 QuLiS)
Fused cube 水 12 量体の水素結合ネットワークの網羅とクラスターの安定性

9:10 2B02

○鳥居 肇(静岡大教育)
分子の伸縮振動モードの振動数とNMR化学シフトに対する水素結合の効果の解析

構造・反応探索

座長: 重田 育照(筑波大)

9:30 2A03

○永幡 裕(北大情報科学)、前田 理(北大理)、寺本 央(北大電子研)、武次 徹也(北大理)、小松崎 民樹(北大電子研)

時間解像度に依存した反応ネットワークの階層的变化とその予測手法の開発

10:00 2B04

○高木 牧人(北大院総合化学)、前田 理(北大院理、JST-CREST)、武次 徹也(北大院理)

人工力誘起反応(AFIR)法の周期系への拡張: 炭素の結晶構造探索への適用

休憩(10:20 - 10:30)

電子材料

座長: 今村 穰(首都大学東京)

10:30 2B05

○白井 聡一(豊田中研)、倉重 佑輝(分子研、JST-PRESTO)、柳井 毅(分子研)
DMRG-CASPT2 によるナフタレン二量体の励起状態計算

10:50 2B06

○松井 啓史、伊藤 聡一、永海 貴識、藤吉 純也、岸 亮平、中野 雅由(阪大院基礎工)
一次元シリコン鎖の三次非線形光学物性に対するジラジカル性および σ/π 共役の効果

- 11:10 2B07 ○島崎 智実(RIKEN-AICS)、中嶋 隆人(RIKEN-AICS)
有機薄膜太陽電池界面における励起子分離過程に関する理論的研究
- 11:30 2B08 ○藤田 貴敏(分子研)
量子開放系の手法を用いた有機半導体の励起ダイナミクスの解析
- 11:50 2B09 相川 小春(筑波大数理)、木村 萌愛(筑波大理工)、鞆津 典夫(筑波大数理、出光興産)、隅田 真人(NIMS)、松井 亨(筑波大数理)、○守橋 健二(筑波大数理)
制約密度汎関数(CDFT)法による有機 EL 分子系の電荷移動過程

休憩(12:10 - 13:10)

ポスター(13:10 - 14:40)

- シミュレーション手法 座長:松林 伸幸(大阪大)**
- 14:40 2B10 ○吉井 範行(名大院工計算セ)、安藤 嘉倫(名大院工計算セ)、岡崎 進(名大院工)
分子動力学計算における高速多重極展開法の拡張
- 15:00 2B11 ○竹中 将斗(北大院総化)、岩佐 豪(北大院理、京大 ESICB)、武次 徹也(北大院理、京大 ESICB)
多重極ハミルトニアンに基づいた赤外吸収分光計算手法への電場計算の導入と応用
- 15:20 2B12 ○米澤 康滋(近大先端研)
差分距離行列情報による蛋白質構造変化探索の新技术
- 15:40 2B13 ○吉田 将隆(東北大院理)、大槻 幸義(東北大院理)、河野 裕彦(東北大院理)
対称コマ分子に対する整列制御の最適化と時間分解 X 線回折像のシミュレーション
- 16:00 2B14 ○藤本 和士(名大院工)、服部 智成(名大院工)、Rajdeep Singh Payal(名大院工)、浅野 裕太(名大院工)、中垣 雅之(京大福井セ)、榊 茂好(京大福井セ)、篠田 涉(名大院工)、岡崎 進(名大院工)
新規ポテンシャルモデルを用いた、非晶高分子の衝撃破壊シミュレーション

休憩(16:20 - 16:30)

- 電子状態理論 座長:河東田 道夫(理研 AICS)**
- 16:30 2A15 ○土持 崇嗣(神大科学技術イノベ)、天能 精一郎(神大科学技術イノベ、神大システム情報)
スピン射影を露わに考慮した配置間相互作用:非直交 Wick 定理と応用
- 17:00 2A16 ○中田 彩子(物材機構)、D. R. Bowler(ロンドン大)、宮崎 剛(物材機構)
マルチサイト法による大規模 DFT 計算の高効率・高精度化
- 17:30 2B17 ○中谷 直輝(北大触媒研)、Garnet K.-L. Chan(Princeton Univ.)
行列積表現による演算子の繰込み群と MPS ライブラリの開発
- 17:50 2B18 ○上島 基之(神大情報シス)、北浦 和夫(京大福井謙一記念研究センター)、天能 精一郎(神大情報シス)
射影 Hartree-Fock 法の構造最適化とその応用

理論化学研究会総会(18:20 - 18:50)

懇親会(19:00 - 21:00)

5月25日(水)

光化学

座長: 福田 良一(分子研)

- 8:40 3A01 ○原 淵 祐(北大院理)、山本 梨奈(北大院総合化学)、齊田 謙一郎(北大院理)、前田 理(北大院理)、武次 徹也(北大院理)
光反応の反応経路自動探索: 内部転換・項間交差・蛍光・りん光過程の包括的解析に向けて
- 9:10 3A02 ○東 雅大(琉大理)、齊藤 真司(分子研、総研大)
分子シミュレーションによる光捕集アンテナ中の色素の励起状態の理論的解明
- 9:40 3A03 ○伊藤 聡一(阪大院基礎工)、永海 貴識(阪大院基礎工)、久保 孝史(阪大院理)、中野 雅由(阪大院基礎工)
分子内シングレットフィッションの電子的相互作用解析と理論設計
- 10:10 3B04 ○鈴木 聡、諸熊 奎治(京大福井謙一記念研究センター)
ビスアルキルアミノアントラセンの凝集誘起発光

休憩(10:30 - 10:40)

触媒・マテリアル

座長: 奥村 光隆(大阪大)

- 10:40 3B05 ○小泉 健一(分子研、京大 ESICB)、信定 克幸(分子研、京大 ESICB)、Mauro Boero (IPCMS)
第一原理分子動力学法による金属有機構造体 (MOF) の水素吸蔵メカニズムの考察
- 11:00 3B06 ○宮崎 玲(北大院総化)、中谷 直輝(北大触媒研)、横谷 卓郎(北大院総化)、中島 清隆(北大触媒研)、福岡 淳(北大触媒研)、長谷川 淳也(北大触媒研)
メソポーラスシリカ白金触媒によるエチレンの酸化メカニズムに関する理論的研究
- 11:20 3B07 ○福田 良一(分子科学研究所、計算科学研究センター、京大触媒・電池元素戦略研究拠点)、江原 正博(計算科学研究センター、分子科学研究所、京大触媒・電池元素戦略研究拠点)
金属微粒子触媒による一酸化窒素の還元分解反応のメカニズム
- 11:40 3B08 ○塚本 晋也(産総研、未利用熱エネルギー革新的活用技術研究組合)、大橋 良央(トヨタ自動車)、石切山 守(トヨタ自動車)、石田 豊和(産総研、未利用熱エネルギー革新的活用技術研究組合)
化学蓄熱材(アルカリ土類水酸化物、炭酸塩)の理論研究

休憩(12:00 - 13:00)

液体・溶液(2)

座長: 石塚 良介(大阪大)

- 13:00 3A09 ○佐藤 竜馬(筑波大計算セ)、鎌田 賢司(産総研無機機能)、岸 亮平(阪大院基礎工)、中野 雅由(阪大院基礎工)、重田 育照(筑波大計算セ、筑波大院数物)
溶媒中における三重項-三重項消滅に基づくフォトン・アップコンバージョン機構に関する研究
- 13:30 3A10 ○志賀 基之(原子力機構)
高温水における多価アルコール脱水反応に関する理論的研究

14:00 3A11 ○渡辺 宙志(東大先端研)、阪野 美紗(東工大)、Tomas Kubar(Karlsruhe Institute of Technology)、Marcus Elstner(Karlsruhe Institute of Technology)、櫻井 実(東工大)
Size-consistent multipartitioning QM/MM method

休憩(14:30 - 14:40)

電子励起状態

座長:藤田 貴敏(分子研)

14:40 3B12

○豊田 和男、松浦 里紗、杉崎 研司、佐藤 和信、塩見 大輔、工位 武治
有機化合物の三重項励起状態におけるゼロ磁場分裂テンソルの SAC-CI 法を用いた理論計算

15:00 3B13

○米原 丈博(東大院総合文化)、高塚 和夫(東大院総合文化)
ホウ素クラスターの高縮重電子励起状態における非断熱電子動力学と電子揺動場

相対論・量子電磁力学

座長:藤田 貴敏(分子研)

15:20 3A14

○立花 明知(京大院工)
アルファ振動子理論における時間依存くりこみとその QED への応用

15:50 3B15

○瀬波 大土(京大院工)、築島 千馬(京大工)、立花 明知(京大院工)
Rigged QED に基づくポジトロニウムの時間発展

16:10 3B16

○砂賀 彩光(首都大院理工)、阿部 穰里(首都大院理工)、Bhanu Pratap Das(東工大大院理工)、波田 雅彦(首都大院理工)
電子 EDM 探査のための相対論的量子化学計算による有効電場の解析

休憩(16:30 - 16:40)

量子ダイナミクス

座長:大槻 幸義(東北大)

16:40 3B17

○高塚 和夫(東大総合文化)
溶媒中の電子移動の非断熱電子動力学: Marcus 理論の分子論

17:00 3B18

○山本 憲太郎(東大院総合文化)、高塚 和夫(東大院総合文化)
Photochemical mechanism of charge separation taken out of water molecule

17:20 3B19

○松岡 貴英(東大院総合文化)、高塚 和夫(東大院総合文化)
強レーザー場中の励起分子からのイオン化過程の非断熱電子動力学

17:40 3B20

○加藤 毅(東大院理)、山内 薫(東大院理)
多配置波動関数に対する新しい有効ポテンシャル理論

18:00

閉会挨拶 中井 浩巳

座長一覧

5月23日(1日目)

長谷川 淳也 (北海道大)	有機化合物 9:00-10:30	阿部 穰里 (首都大学東京)	量子化学基礎 10:40-12:10	小林 正人 (北海道大)	インフォマティクス 14:40-16:00
藤本 和士 (名古屋大)	生体分子 16:10-17:20	安藤 耕司 (京都大)	液体・溶液(1) 17:30-18:40		

5月24日(2日目)

重田 育照 (筑波大)	水素結合系 構造・反応探索 8:40-10:20	今村 穰 (首都大学東京)	電子材料 10:30-12:10	松林 伸幸 (大阪大)	シミュレーション手法 14:40-16:20
河東田 道夫 (理研 AICS)	電子状態理論 16:30-18:10				

5月25日(3日目)

福田 良一 (分子研)	光化学 8:40-10:30	奥村 光隆 (大阪大)	触媒・マテリアル 10:40-12:00	石塚 良介 (大阪大)	液体・溶液(2) 13:00-14:30
藤田 貴敏 (分子研)	電子励起状態 相対論・量子電磁力学 14:40-16:30	大槻 幸義 (東北大)	量子ダイナミクス 16:40-18:00		

ポスター発表(1日目)

5月23日(月) 13:10-14:40

- 1P01 ○赤間 知子(北大院理)、小林 理(上智大理工)、南部 伸孝(上智大理工)、武次 徹也(北大院理)
3 項間漸化式に基づく効率的な時間発展法の開発
- 1P02 ○安藤 耕司(京大理)
局在電子波束と原子価結合法による電子励起状態の記述
- 1P03 ○石川 敦之(早大理工研、京大 ESICB)、出牛 史子(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)
金属ナノ粒子による CO 酸化反応に関する理論的研究 : CO 被覆率及び担体効果 の検討
- 1P04 ○市川 和秀(京大工)、福田 将大(京大工)、立花 明知(京大工)
QED の実時間シミュレーションにおける演算子期待値の時間発展
- 1P05 ○伊藤 圭人(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)
QED の実時間シミュレーションにおける時間発展の二元性に関する研究
- 1P06 ○稲田 健(京大院工)、曾我 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)
キラル分子内部のスピンに関する局所物理量の理論的研究
- 1P07 ○今井 みの莉(早大先進理工)、石川 敦之(早大理工研、京大 ESICB)、中井 浩巳(早大先進理工、早大理工研、JST-CREST、京大 ESICB)
調和近似を超えた液相の比熱の量子化学計算
- 1P08 ○岩瀬 響(首都大院理工)、橋本 健朗(放送大学)
曲線座標を利用した VSCF-CI 計算
- 1P09 ○大田 航(京大院工)、Maxim Shishkin(京大 ESICB)、佐藤 啓文(京大院工、京大 ESICB)
アルカリ金属-黒鉛層間化合物の理論的研究 : Li、Na、K イオン電池負極への応用
- 1P10 安食 徹(東北大院理)、田代 智弘(東北大院理)、○大槻 幸義(東北大院理)、後藤 悠(分子研)、香月 浩之(奈良先端大)、大森 賢治(分子研)
高強度レーザーパルスにより誘起される振動量子ビートシグナルの理論解析
- 1P11 ○大山 拓郎(早大先進理工)、五十幡 康弘(早大先進理工)、清野 淳司(早大理工研)、中井 浩巳(早大先進理工、早大理工研、JST-CREST、京大 ESICB)
Picture change 補正による電子密度を用いた 2 成分相対論的密度汎関数理論の開発
- 1P12 ○Karakkadparambil Sankaran Sandhya, Masayoshi Takayanagi, Nobuaki Koga, Masataka Nagaoka
The dissociation free energy of $[\text{CH}_3\text{B}(\text{C}_6\text{F}_5)_3]^-$ - $[\text{H}_2\text{SiCp}_2\text{ZrMe}(\text{C}_2\text{H}_4)]^+$ ion pair in molecular dynamics simulation
- 1P13 ○笠原 健人(京大院工)、佐藤 啓文(京大院工、京大 ESICB)
分子性液体中における拡散律速反応ダイナミクス
- 1P14 ○河東田 道夫(理研 AICS)、中嶋 隆人(理研 AICS)
二成分相対論的時間依存密度汎関数理論に基づく励起状態超並列計算プログラムの開発
- 1P15 ○菅野 翔平(首都大理工)、今村 穰(首都大理工)、波田 雅彦(首都大理工)
高効率光増感色素の設計に向けたスピン禁制遷移に関する理論的検討

- 1P16 ○金 泰煥(東大院工)、平野 敏行(東大生研)、佐藤 文俊(東大生研)
タンパク質カノニカル分子軌道計算に基づく新規原子電荷を用いた分子動力学シミュレーション
- 1P17 ○黒木 菜保子(お茶大院人間文化創成科学)、森 寛敏(お茶大基幹研究院)
有効フラグメントポテンシャル法による分子シミュレーション:イミダゾリウム系イオン液体の物性評価
- 1P18 ○小林 正人(北大院理、JST さきがけ、京大 ESICB)、武次 徹也(北大院理、京大 ESICB)
多成分系の量子化学計算解析のための XML スキーマの検討
- 1P19 ○坂田 健(星薬大)、結城 雅弘(東大院工)、中島 一成(東大院工)、西林 仁昭(東大院工)
硫黄架橋二核ルテニウム錯体を用いた水素分解反応に関する量子化学的研究
- 1P20 ○沢邊 恭一、瀨瀬 太希、大山 順也、薩摩 篤(名大院工)
Au 双晶ナノクラスターによる触媒反応活性向上因子の理論研究
- 1P21 ○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)、工位 武治(阪市大院理)
多核遷移金属錯体の零磁場分裂テンソルの DFT 計算—その2
- 1P22 ○住谷 陽輔(北大院総合化学)、前田 理(北大院理)、武次 徹也(北大院理)
複雑反応経路網上で起こる単分子解離反応の分岐比の厳密解
- 1P23 ○高木 望(京大 ESICB)、石村 和也(分子研)、松井 正冬(京大 ESICB)、榑 茂好(京大 FIFC、京大 ESICB)
Cu, Ag, Au 金属微粒子表面の電荷分布と吸着特性に関する理論研究
- 1P24 ○陳 躍(北大 触媒研)、榑 茂好(京大 福井センター)、長谷川 淳也(北大 触媒研)
Theoretical study on Sextuple Bond in Dinuclear Transition Metal Complex
- 1P25 ○堤 拓朗(北大院総合化学)、原渕 祐(北大院理)、小野 ゆり子(北大院理)、前田 理(北大院理)、武次 徹也(北大院理)
反応経路地図上の AIMD 古典軌道追跡によるダイナミクスの解析
- 1P26 ○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)
伝播効果を取り入れた非共鳴レーザーパルスの最適制御法の開発
- 1P27 ○中村 康一(京大学際センター、エジプト日本科技大工)
半導体材料の熱電変換特性予測におけるキャリア速度の考察
- 1P28 ○中野 雅由(阪大院基礎工)、永海 貴識(阪大院基礎工)、伊藤 聰一(阪大院基礎工)、久保 孝史(阪大院理)
量子マスター方程式による一重項分裂ダイナミクス:エネルギー適合条件との関係について
- 1P29 ○西川 直宏(名大院理、分子研)、森 義治(分子研)、岡本 祐幸(名大院理、名大院理構セ、名大院工計セ、名大情セ)、奥村 久士(分子研、総研大)
高圧条件下におけるアミロイド線維形成物質の分子メカニズム
- 1P30 ○服部 智成(名大工院)、藤本 和士(名大工院)、Rajdeep Singh Payal(名大工院)、中垣 雅之(京大福井謙一セ)、榑 茂好(京大福井謙一セ)、篠田 渉(名大工院)、岡崎 進(名大工院)
高分子破壊シミュレーションに向けた、新規ポテンシャルモデルの開発
- 1P31 ○平賀 健太(早大先進理工)、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)
2 成分相対論的時間依存密度汎関数理論による内殻励起計算
- 1P32 ○福田 将大(京大院工)、市川 和秀(京大院工)、瀬波 大土(京大院工)、立花 明知(京大院工)
相対論的場の量子論に基づくスピンに関する局所物理量

- 1P33 ○古屋 謙治(九大基幹、総理工)
OCS, CO₂, CS₂二価陽イオンの解離に関する一考察
- 1P34 ○堀 優太(金沢大院自然)、井田 朋智(金沢大院自然)、水野 元博(金沢大院自然)
分子間プロトン移動反応における透熱ポテンシャルおよび量子ダイナミクス
- 1P35 ○松井 正冬(京大 ESICB)、榊 茂好(京大福井セ、京大 ESICB)
Embedded cluster model を用いた担持金属触媒の金属・表面間相互作用の研究
- 1P36 TU Kai-min(京大 ESICB)、石塚 良介(阪大基礎工)、○松林 伸幸(阪大基礎工)
濃厚イオン系における電気伝導度の空間分割解析
- 1P37 ○松村 祥宏(京大院工)、井内 哲(名大院・情報科学)、佐藤 啓文(京大院工、京大 ESICB)
金属-配位子系における自己集合反応のためのモデルハミルトニアン
- 1P38 ○宮崎 かすみ、森 寛敏(お茶大院)
相対論的第一原理計算に基づくサブナノサイズ金属クラスターの大域的構造探索および物性解析:
合金系の検討
- 1P39 ○向井 西夜(デンソー)、伊藤 知樹(デンソー)、森 穂高(デンソー)、泉 龍介(デンソー)、今井 博
和(デンソー)、松林 伸幸(阪大基礎工)
樹脂の吸水能に対する添加剤効果の自由エネルギー解析
- 1P40 王 琳(東北大理)、彭 奇齡(北大触媒研)、叶 深(北大触媒研)、○森田 明弘(東北大理、京大
ESICB)
MD 計算と SFG 分光による有機カーボネート表面構造の研究
- 1P41 ○山口 高正(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)
応答核を用いた水分子の分極ポテンシャル関数の開発とクラスターの構造探索への適応
- 1P42 ○渡邊 恵二郎(北大触媒研)、中谷 直輝(北大触媒研)、東 雅大(琉大理)、中山 哲(北大触媒
研)、長谷川 淳也(北大触媒研)
系間交差を経由する反応経路の理論的研究:モリブデノセンにおける CO と H₂ の結合反応

ポスター発表(2日目)

5月24日(火) 13:10-14:40

- 2P01 今福 裕史(首都大理工)、○阿部 穰里(首都大理工)、Mike W Schmidt(アイオワ州大)、波田 雅彦(首都大理工)
スカラー相対論を考慮した対角ボルン-オッペンハイマー近似補正:重原子系分子への応用
- 2P02 ○石村 和也(分子研)
大規模並列 MP2 エネルギー微分計算アルゴリズムの開発と実装
- 2P03 ○石山 達也(富山大理工)、森田 明弘(東北大院理)
空気/水界面における二次元和周波スペクトルの分子動力学計算
- 2P04 ○市野 智也(北大院理)、武次 徹也(北大院理)、前田 理(北大院理)、大村 智通(京大院工)、杉野目 道紀(京大院工)
有機分子触媒によるピラジン誘導体ジホウ素化の反応機構に関する理論的研究
- 2P05 ○伊東 真吾(名大理学)、Irlé Stephan(名大トランスフォーメティブ生命分子研究所)、岡本 祐幸(名大理学)
レプリカ交換傘サンプル法を用いた密度汎関数強結合近似計算によるフタロシアン鉄錯体の形成メカニズムの解明
- 2P06 ○井上 鑑孝((株)デンソー先端研)、松林 伸幸(阪大基礎工)
FMO/MM-MD 自己無撞着計算法による力場パラメータの高精度化
- 2P07 ○岩佐 豪(北大院理、京大 ESICB)、佐藤 貴暁(北大院総化)、高 敏(北大院理、京大 ESICB)、Andrey Lyalin(GREEN、NIMS)、小林 正人(北大院理、京大 ESICB、JST-PRESTO)、前田 理(北大院理、京大 ESICB、JST-CREST)、武次 徹也(北大院理、京大 ESICB、GREEN)
Cu₁₃ クラスターの構造異性体と NO 吸着解離反応触媒活性
- 2P08 ○内丸 忠文(産総研機能化学、TherMAT)、都築 誠二(産総研機能材料)、陳 亮(産総研機能化学)、水門 潤治(産総研機能化学)
フッ素置換エチレン誘導体の π -結合強度に関する計算化学的解析
- 2P09 ○及川 啓太(東北大院理)、菱沼 直樹(東北大院理)、菅野 学(東北大院理)、木野 康志(東北大院理)、秋山 公男(東北大多元研)、河野 裕彦(東北大院理)
12 塩基対二本鎖 DNA の鎖切断過程:溶媒中のカウンターカチオンの効果
- 2P10 ○大村 周(東北大院理)、河野 裕彦(東北大院理)、小山田 隆行(横市大院生命ナノ)、加藤 毅(東大院理)、中井 克典(東大院理)、小関 史朗(大阪府大院理)
強レーザー場中における二原子分子のトンネルイオン化と高次高調波発生の搬送波位相制御
- 2P11 ○奥脇 弘次(立教大理)、川田 修太郎(立教大理)、望月 祐志(立教大理、東大生産研)、大畠 広介(JSOL)、小沢 拓(JSOL)
FMO 計算を援用する高分子マルチスケールシミュレーション
- 2P12 ○高 敏(北大院理、京大 ESICB)、王 奔(北大院総化)、足立 将(北大院総化)、Lyalin Andrey(GREEN、NIMS)、武次 徹也(北大院理、京大 ESICB、GREEN)
Long range functionalization of h-BN monolayer by carbon doping
- 2P13 ○金子 正徳(東大院工、JST-CREST)、Giacomo Giorgi(東大院工、JST-CREST)、山下 晃一(東大院工、JST-CREST)
DFT 計算を用いた d¹ 型水分解光触媒 Sr_{1-x}NbO₃ の光吸収およびバンド構造

- 2P14 ○川嶋 英佑(東大院工)、藤井 幹也(東大院工)、山下 晃一(東大院工)
有機薄膜太陽電池の電荷分離機構におけるモルフォロジーの影響
- 2P15 ○北河 康隆(阪大院基礎工)、浅岡 瑞稀(阪大院基礎工)、宮城 公磁(阪大院基礎工)、西久保 玲奈(阪大院基礎工)、中野 雅由(阪大院基礎工)
シアン架橋鉄-コバルト4核錯体の電子状態と磁氣的相互作用に関する理論研究
- 2P16 ○工藤 貴子(群大理工)、Michael W. Schmidt(アイオワ州立大)、松永 仁城太(ロングアイランド大)
ケイ素・炭素交互混合アヌレンの励起状態
- 2P17 ○小関 史朗、松永 仁城太、麻田 俊雄
遷移元素におけるスピン軌道相互作用定数について
- 2P18 ○斉田 謙一郎(北大院理)、原淵 祐(北大院理)、前田 理(北大院理)、武次 徹也(北大院理)
レニウム(I)ビピリジリカルボニル錯体の光反応性と項間交差
- 2P19 ○桜庭 俊(東大新領域)、浅井 潔(東大新領域、産総研)、亀田 倫史(産総研)
RNA-RNA の相対結合自由エネルギー計算
- 2P20 ○三瓶 匡史(北大院総合化学)、住谷 陽輔(北大院総合化学)、前田 理(北大院理)、武次 徹也(北大院理)
Friedel-Crafts アルキル化反応の選択性に関する速度論的研究
- 2P21 ○鈴木 雄一(名大院情報科学)、長岡 正隆(名大院情報科学、京大 ESICB、CREST-JST)
混合 MC/MD 反応法における化学反応過程の実時間解釈:二次の可逆反応系への適用
- 2P22 ○曾 桂香(北大理学部)、前田 理(北大理学部)、武次 徹也(北大理学部)、榊 茂好(京大福井センター)
Theoretical Study on Cooperative Catalysis of Constrained Pincer-type Phosphorus Compound: Mechanism, Electronic Process and Prediction
- 2P23 ○田代 智大、吉田 将隆、大槻 幸義、河野 裕彦(東北大院理)
非共鳴パルスによる動的シュタルク効果を用いた IBr の選択的光解離の最適制御
- 2P24 ○築島 千馬(京大大学院工学研究科、量子物性学研)、瀬波 大土(京大大学院工学研究科、量子物性学研)、立花 明知(京大大学院工学研究科、量子物性学研)
Primary Rigged QED 理論に基づいた誘電応答に関する研究
- 2P25 ○中川 節子(金城学院大)、Oliver Weingart、Christel Marian(Heinrich Heine Univ.)
青色光受容体 LOV ドメインの二つの反応経路に関する QM/MM 研究
- 2P26 ○中西 真(京大院工)、瀬波 大土(京大院工)、立花 明知(京大院工)
局所電気伝導率を用いた分子のコンダクタンス評価方法
- 2P27 ○永海 貴識(阪大院基礎工)、伊藤 聡一(阪大院基礎工)、久保 孝史(阪大院理)、中野 雅由(阪大院基礎工)
シングレットフィッションに対する分子間パッキング効果の理論研究
- 2P28 ○中山 哲(北大触媒研)、田村 正純(東北大院工)、清水 研一(北大触媒研)、長谷川 淳也(北大触媒研)
酸化セリウム触媒の酸・塩基特性に関する理論的研究
- 2P29 ○野中 康太郎(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)
分極を考慮した自由エネルギー成分分割法による酵素反応阻害メカニズムの解析
- 2P30 ○野平 博之(埼玉大名誉)、野平 俊之(京都大、エネ研)
Neumann-Wigner および Schrödinger の原論文の記述に関する考察

- 2P31 ○原田 伊織(北大触媒研)、中山 哲(北大触媒研)、長谷川 淳也(北大触媒研)
物性値に拘束条件を課した構造最適化計算手法の開発
- 2P32 ○福田 幸太郎(阪大院基礎工)、藤吉 純也(阪大院基礎工)、永海 貴識(阪大院基礎工)、岸 亮平(阪大院基礎工)、北河 康隆(阪大院基礎工)、中野 雅由(阪大院基礎工)
直線状縮環共役炭化水素系が持つ開殻性と磁気遮蔽テンソルの鎖長依存性についての理論研究
- 2P33 ○藤波 美起登(早大先進理工)、清野 淳司(早大理工研)、中井 浩巳(早大先進理工、早大理工研、JST-CREST、京大 ESICB)
量子化学計算と機械学習を用いた化学反応予測システムの開発
- 2P34 ○藤森 俊和(北大院総合化学)、小林 正人(北大院理、JST さきがけ、京大 ESICB)、武次 徹也(北大院理、京大 ESICB)
階層型バッファ領域を用いた分割統治(DC)法における誤差の自動制御
- 2P35 松田 光希(北大理)、森田 啓嗣(北大理)、原渕 祐(北大院理)、○前田 理(北大院理)、武次 徹也(北大院理)
超配位構造の自動探索
- 2P36 岩崎 冬弥、佐藤 駿伍、○松井 亨、守橋 健二(筑波大院数物)
熱活性型遅延蛍光特性を有する分子の励起状態に関する理論的研究
- 2P37 ○松三 勇介(京大院工)、中農 浩史(京大院工、京大 ESICB)、佐藤 啓文(京大院工、京大 ESICB)
鏡像電荷 MD 法による電極界面の溶媒構造についての研究
- 2P38 ○松本 健太郎(名大院情報科学)、K. S. Sandhya(名大院情報科学、JST-CREST)、高柳 昌芳(名大院情報科学、JST-CREST)、古賀 伸明(名大院情報科学、JST-CREST)、長岡 正隆(名大院情報科学、JST-CREST)
(pyridylamide)Hf(IV)錯体の活性化機構におけるイオンペア解離過程の分子動力的研究
- 2P39 ○宮本 健悟、相田 美砂子
A theoretical study on the base-sequence dependence of the stacking interaction in B-DNA
- 2P40 ○森 義治(分子研)、奥村 久士(分子研、総研大)
熱応答としての一本鎖リボ核酸における構造変化:分子動力学シミュレーションによる研究
- 2P41 ○屋内 一馬(北大院総化)、石村 和也(分子研)、Mike Schmidt(アイオワ州立大学)、Mark Gordon(アイオワ州立大学)、長谷川 淳也(北大触媒研)
凝縮系における電荷分離状態と分極相互作用に関する理論的研究
- 2P42 ○吉田 悠一郎(京大院工)、佐藤 啓文(京大院工、京大 ESICB)
ピラミッド型分子集合体のエネルギー地形
- 2P43 ○渡邊 啓正(量子化学探索研究所)、大野 公一(量子化学探索研究所)
大規模並列環境における NeoGRRM の反応経路自動探索の性能評価