

講演プログラム

口頭発表: 20分(発表15分+討論5分) ポスター発表: 90分

5月27日(月)

座長 土持 崇嗣

- 12:40 1L01 ○中辻 博(QCRI), 中嶋 浩之(QCRI), 黒川 悠素(QCRI)
シュレーディンガー方程式の正確な解法に基づく新しい量子化学の建設
- 13:00 1L02 ○中嶋 浩之, 黒川 悠素, 中辻 博(量子化学研究協会・研究所)
FC理論による exact に至る計算のための Slater 型関数の積分法とプログラムの開発
- 13:20 1L03 ○西本 佳央(京大福井セ)
多参照摂動理論(PC-NEVPT2)による解析的勾配の開発

休憩(13:40-13:50)

座長 小林 正人

- 13:50 1L04 ○五十幡 康弘(早大理工総研), 櫛嶋 拓朗(早大先進理工), 清野 淳司(早大理工総研, JST-PRESTO), 吉川 武司(早大理工総研), 中井 浩巳(早大理工総研, 早大先進理工, 京大 ESICB)
相関エネルギー密度の完全基底極限に基づく機械学習型電子相関モデルの開発
- 14:10 1L05 ○春田 直毅(東工大, JST-ERATO, 京大福井セ), 塚本 孝政(東工大, JST-ERATO), 葛目 陽義(東工大, JST-ERATO), 神戸 徹也(東工大, JST-ERATO), 山元 公寿(東工大, JST-ERATO)
金属クラスターの異常な軌道縮退とハミルトニアンの方学的対称性
- 14:30 1L06 ○杉崎 研司(阪市大院理), 中澤 重顕(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)
量子コンピュータ上での波動関数のスピン量子数決定法

休憩(14:50-15:00)

座長 加藤 毅

- 15:00 1L07 ○花崎 浩太(京大福井センター), 高塚 和夫(京大福井センター)
相対論的な電子-核結合動力学の定式化
- 15:20 1L08 ○山本 憲太郎(京大福井セ), 高塚 和夫(京大福井セ))
一方向的なプロトン移動の化学的な機構について: 非断熱電子動力学による研究
- 15:40 1L09 ○河津 励(理研), 飯高 敏晃(理研)
高圧氷相における量子揺らぎ運動エネルギーの計算

休憩(16:00-16:10)

座長 藤田 貴敏

- 16:10 1L10 ○岸 亮平(阪大院基礎工), 鎌田 賢司(産総研・無機機能材料), 久保 孝史(阪大院理), 中野 雅由(阪大院基礎工, 分子研)
フェナレニル骨格を持つ開殻分子からなる一次元周期系の電子構造と光応答特性についての理論研究
- 16:30 1L11 ○當波 孝凱(阪大院基礎工), 永海 貴識(阪大院基礎工), 岡田 健治(阪大院基礎工), 吉田 航(阪大院基礎工), 中野 雅由(阪大院基礎工, 分子研)
一重項分裂により生成する相関三重項対状態の非線形光学特性に関する理論研究
- 16:50 1L12 ○高橋 聡(東大院総合文化), 佐々木 悠矢(東大院総合文化), 佐藤 啓文(京大院工, 京大 ESICB), 平岡 秀一(東大院総合文化)
配位自己集合過程の実時間追跡
- 17:10 **ポスター発表(奇数番号)**

5月28日(火)

座長 原 遡 祐

- 9:00 2L01 ○飯田 健二(分子研), 野田 真史(筑波大)
銀ナノ粒子-酸化チタンヘテロ構造における光誘起電子移動ダイナミクス
- 9:20 2L02 ○藤田 貴敏(分子研)
フラグメント分子軌道法に基づいた GW 法の開発と有機材料への応用
- 9:40 2L03 ○中垣 雅之(京大福井セ), 青野 信治(LIST), 加藤 昌子(北大院理), 榎 茂好(京大福井セ)
QM/MM 法を用いた Pt(II)-ピリジン錯体の結晶中の発光スペクトルの温度変化に関する理論的研究
- 10:00 2L04 ○白井 聡一(豊田中研), 脇 稔(豊田中研), 前川 佳史(豊田中研), 山田 有理(豊田中研), 稲垣 伸二(豊田中研)
メソ多孔ピリジンシリカ上に形成された金属錯体の電子状態に対する細孔表面の効果

休憩(10:20-10:30)

座長 渡邊 宙志

- 10:30 2L05 ○吉井 範行(名大院工計算セ), 安藤 嘉倫(名大院工計算セ), 坂下 達哉(玉川大), 岡崎 進(名大院工)
高速多重極展開法における圧力テンソル計算のベクトル表示による高速化
- 10:50 2L06 ○藤本 和士(名大院工), 湯之也(名大院工), 篠田 渉(名大院工), 岡崎 進(名大院工)
ガラス状高分子の衝撃破壊に関する分子論的研究
- 11:10 2L07 ○吉森 明(新潟大学理), Roland R.Netz (Freie Universität Berlin)
外場による溶液中の分子摩擦の増幅
- 11:30 2L08 ○大谷 優介(東北大金研), 許 競翔(東北大金研), 高橋 直己(東北大金研), 赤上 研太(東北大院工), 足立 幸志(東北大院工), 久保 百司(東北大金研)
ケイ素系セラミックスが水中で発現する超低摩擦のメカニズム: 機械におけるなじみ現象の理解に向けた計算と実験の連携
- 11:50 2L09 中村 正人(日大理工)
水銀クラスター多価イオンの分裂の実験結果の解析

休憩(12:10-13:10)

13:10 ポスター発表(偶数番号)

座長 藤本 和士

- 14:40 2L10 ○片岡 洋右(法大生命)
分子動力学法による気液平衡
- 15:00 2L11 ○山田 一雄(阪大院基礎工), 松林 伸幸(阪大院基礎工)
分子動力学シミュレーションを用いた二成分高分子ブレンドの相溶性評価手法の開発
- 15:20 2L12 向田 夏規(金沢大院自然), ○三浦 伸一(金沢大理工)
モデル蛋白質のポテンシャルエネルギー地形とフォールディング転移

休憩(15:40-15:50)

座長 石田 豊和

- 15:50 2L13 ○森 俊文(分子研, 総研大), 齊藤 真司(分子研, 総研大)
プロリン異性化酵素の動的反応機構と構造励起状態の重要性
- 16:10 2L14 ○丸山 豊(理研 R-CCS), 光武 亜代理(明大理工)
8 番目のアミノ酸の変異によるシニョリンの構造安定性の変化
- 16:30 2L15 ○浦野 諒(名大工), 吉井 範行(名大工), 篠田 渉(名大工), 岡崎 進(名大工)
B 型肝炎ウイルス(HBV)に対する薬剤分子の肝細胞中でのカプシド内部への吸収に
関する自由エネルギー計算

休憩(16:50-17:00)

17:00-18:00 理論化学研究会総会

18:30-20:00 懇親会 (会場: レストラン・エルム)

5月29日(水)

座長 寺本 央

9:00 3L01 ○大野 公一(量子化学探索研, 東北大院理), 沖 卓人(和歌山大システム工), 山門 英雄(和歌山大システム工)

分子集団の構造と反応の探索: アセチレン分子集合体

9:20 3L02 ○海老澤 修一(北大総合化学院), 堤 拓朗(北大総合化学院), 武次 徹也(北大総合化学院, 北大院理, Institute for Chemical Reaction Design and Discovery (WPI-ICReDD))

非調和下方歪みに基づくポテンシャルエネルギー超曲面の代数幾何的解析

座長 森 俊文

9:40 3L03 ○志賀 基之(原子力機構)

自由エネルギー面上の鞍点探索法の開発

10:00 3L04 ○James Nicholas Taylor(北大電子研), Menahem Pirchi, Gilad Haran(ワインズマン研究所), 小松崎 民樹(北大電子研/ICReDD)

アデニレートキナーゼの一分子観察データから再構成するエネルギー地形の階層性

10:20 3L05 ○Thomsen Bo (Japan Atomic Energy Agency)

Describing Molecular Potential Energy Surfaces Using General Functions

休憩(10:40-10:50)

座長 堀 優太

10:50 3L06 ○松原 世明(神奈川大理)

SN2 反応の分子動力的考察 — 化学反応はいかにして起こるか —

11:10 3L07 ○佐藤 玄(千葉大院薬, 理研), 山崎 真巳(千葉大院薬), 内山 真伸(東大院薬, 理研)

テルペン生合成での多段階カスケード反応の理論解析と実験的改変

11:30 3L08 ○渡邊 一樹(阪大院薬), 諏訪 志典(阪大院薬), 川嶋 裕介(阪大院薬), 田 雨時(阪大院薬), 川下 理日人(近畿大理工), 高木 達也(阪大院薬)

ロジウム触媒による環化付加反応の計算化学的検討

11:50 3L09 ○宮崎 玲(北大院総合化学), 金 雄傑(東大院工), 吉井 大地(東大院工), 谷田部 孝文(東大院工), 山口 和也(東大院工), 水野 哲孝(東大院工), 長谷川 淳也(北大触媒研)

OMS-2 担持 Au 触媒におけるピペリドン分子の C-H 結合活性化機構に関する理論的研究

休憩(12:10-13:10)

座長 岩佐 豪

- 13:10 3L10 ○池田 京(九大先導研), 堀 優太(九大先導研), Muhammad Haris Mahyuddin(九大先導研), 塩田 淑仁(九大先導研), Aleksandar Staykov(九大 I2CNER), 松本 崇弘(九大院工), 吉澤 一成(九大先導研), 小江 誠司(九大院工)
イリジウム錯体の H-H 結合開裂と O-O 結合形成に関する理論的研究
- 13:30 3L11 ○江木晃人(九大先導研), 池田京(九大先導研), 田中宏昌(大同大教養), 塩田淑仁(九大先導研), 有川康弘(長崎大院工), 吉澤一成(九大先導研)
二核ルテニウム錯体上での亜硝酸イオン還元反応メカニズムの理論的研究
- 13:50 3L12 ○小泉 健一(理研), 信定 克幸(分子研), Mauro Boero (IPCMS)
第一原理分子動力学法とレアイベントサンプリング法の結合による Cu/CeO₂ 表面の CO 酸化反応促進メカニズムの解明
- 14:10 3L13 ○中田 彩子(物材機構), 宮崎 剛(物材機構)
大規模 DFT 計算による Pd@Ag コアシェルナノ粒子触媒の構造・電子状態解析

休憩(14:30-14:40)

座長 岸 亮平

- 14:40 3L14 ○石井 良樹(阪大院基礎工), 松林 伸幸(阪大院基礎工)
第一原理 DFT 計算を用いたイオン液体の非分極力場の開発
- 15:00 3L15 ○矢木智章(京大院工), 佐藤啓文(京大院工, 京大 ESICB)
相互作用点モデルに基づいた分子性液体の古典密度汎関数理論の定式化と自由エネルギー表式
- 15:20 3L16 ○米谷 慎(産総研)
MD/DFT/MC 連携による有機半導体材料結晶多形移動度の比較検討

休憩(15:40-15:50)

座長 中田 彩子

- 15:50 3L17 ○浦谷 浩輝(早大院先進理工), 周 建斌(早大理工総研), 中井 浩巳(早大院先進理工, 早大理工総研, 京大 ESICB)
分割統治型密度汎関数強束縛法によるペロブスカイト太陽電池材料におけるポーラロン形成動力学シミュレーション
- 16:10 3L18 ○渡邊宙志, Qiang Cui(慶應大 KQCC)
Quantum mechanics/molecular mechanics における定量的なアーティファクトの解析と adaptive QM/MM 法における補正
- 16:30 3L19 ○秋永 宜伸((株)ヴァイナス), 中野 達也(国立食品衛生研), 福澤 薫(星薬科大, 東大生産研), 加藤 幸一郎(みずほ情報総研), 望月 祐志(立教大, 東大生産研)
FMO 計算における SP2 炭素原子でのフラグメント分割

ポスター発表

第一日目 (5月27日) 奇数番号; 第二日目 (5月28日) 偶数番号

- P1** ○沖 卓人 (和歌山大院システム工), 箕土路 祐希 (和歌山大院システム工), 高田谷 吉 (和歌山大院システム工), 山門 英雄 (和歌山大院システム工), 大野 公一 (量子化学探索研究所, 東北大院理)
RNM 近似を用いた充填率関数による結晶構造候補の探索
- P2** ○山門 英雄 (和歌山大院システム工, 和歌山大院システム工), 沖 卓人 (和歌山大院システム工), 箕土路 祐希 (和歌山大院システム工), 高田谷 吉智 (和歌山大院システム工)
近似包絡面を絞ることによる原子配列候補の探索
- P3** ○倉奥 大樹 (琉大院理), 東 雅大 (京大院工)
立体選択的な有機フッ素化反応における水の添加効果の 3D-RISM-SCF 法による解析
- P4** ○比嘉 未香子 (琉球大院理工), 東 雅大 (京大院工)
水溶液中の金三量体錯体の電子状態に関する理論的研究
- P5** ○加藤 拓己 (MDR), 奥脇 弘次 (立教大理), 山崎 清仁 (OpenQL プロジェクト), 望月 祐志 (立大理, 東大生産研), 湊 雄一郎 (MDR)
量子シミュレータ環境 Blueqat を用いた量子化学計算の試み
- P6** ○井上 頌基 (理研 R-CCS), 中嶋隆人 (理研 R-CCS)
Dirac-Fock 演算子の Douglas-Kroll 変換および IOTC 変換
- P7** ○米原 丈博, 中嶋 隆人 (理化学研究所 計算科学研究センター)
局所透熱表示と射影演算子を用いた自己参照型非線形電子動力学の効率的解法
- P8** ○三澤 奈々 (名大院情報), 鈴木 雄一 (名大院情報), 長岡 正隆 (名大院情報, JST-CREST)
(pyridylamido) Hf (IV) 触媒による α -オレフィン挿入反応における対アニオンの役割: 電子的効果と動的効果
- P9** ○北村 勇吉 (名大院情報), 吉田 正一 (名大院情報), 長岡 正隆 (名大院情報, 京大 ESICB, JST-CREST)
水和アルミニウム錯体系での多段階プロトン化と水和数変化: 量子力学法に基づいた定 pH 法の開発
- P10** 松本 健太郎 (名大院情報), ○鈴木 雄一 (名大院情報), 高柳 昌芳 (滋賀大 DS センター, 理研 AIP, JST-CREST), 古賀 伸明 (名大院情報, JST-CREST), 長岡 正隆 (名大院情報, JST-CREST)
Red Moon 方法論を用いた(pyridylamido)Hf(IV)触媒によるエチレン重合シミュレーション
- P11** ○沢邊 恭一, 田村 武裕, 薩摩 篤 (名大院工)
Ag ナノ粒子の双晶構造における CO 酸化反応活性向上に関する理論研究
- P12** ○弦巻 周平 (名大院工), 浦野 諒 (名大院工), 藤本 和士 (名大院工), 篠田 渉 (名大院工), 岡崎 進 (名大院工)
不均一系の物質輸送の理解に向けた小分子の位置に依存する自己拡散係数評価方法の確立

- P13** ○石川 博章 (名大院工), 藤本 和士 (名大院工), 湯 之也 (名大院工), 岡崎 進 (名大院工)
非晶高分子の圧縮破壊に関する分子論的研究
- P14** ○和田 諒 (北大院総合化学), 堤 拓朗 (北大院総合化学), 新田 優輝 (北大院工), 関川 太郎 (北大院工), 武次 徹也 (北大院総合化学, 北大院理, 北大 WPI-ICReDD)
o-ニトロフェノールの励起状態分子内プロトン移動と光解離過程に対する理論的研究
- P15** ○Liming Zhao (北大総化), Akira Nakayama (北大触媒研), Koji Oohora (阪大院工), Hiroyuki Meichin (阪大院工), Takashi Hayashi (阪大院工), Jun-ya Hasegawa (北大触媒研)
Controlled intersystem crossing in iron porphycene substituted myoglobin for cyclopropanation reaction: a theoretical study
- P16** ○高 敏 (北大触媒研), 大保政貴 (北大院総合化学), 長谷川淳也 (北大触媒研)
Origin of the enantioselectivity of Ru (III) -Chiral disulfonate hybrid catalysis for C-H bond functionalization
- P17** ○Manussada Ratanasak (北大触媒研), Shinji Tanaka (名大院理), Masato Kitamura (名大院理), Jun-ya Hasegawa (北大触媒研)
Mechanistic Study of the Asymmetric Dehydrative Allylative Cyclization of Alcohols to Cyclic Ethers Catalyzed CpRu Complex of Chiral Picolinic Acid-type Ligand
- P18** ○Fuyu Yin, Min Gao (北大触媒研), Akira Nakayama (北大触媒研), Jun-ya Hasegawa (北大触媒研)
Ligand Controlled Intersystem crossing of hydrogen binding reaction on Metallocene
- P19** ○伊勢家 正裕 (北大総化), 中山 哲 (北大触媒研, さきがけ), 長谷川 淳也 (北大触媒研)
金属ドーブされた酸化セリウムによるメタンの C-H 結合活性化に関する理論的研究
- P20** ○市野 智也 (北大院理), 前田理 (北大院理, WPI-ICReDD, NIMS)
金属六量体クラスターの反応性に関する研究: CO による NO_x 還元に対する活性評価と BEP 関係
- P21** ○ Andrey Lyalin (Hokkaido University, Japan), Vladimir Kuznetsov (St. Petersburg State University, Russia), Akira Nakayama (Hokkaido University, Japan), Igor Abarenkov (St. Petersburg State University, Russia), Ilya Tupitsyn (St. Petersburg State University, Russia), Igor Gabis (St. Petersburg State University, Russia), Kohei Uosaki (NIMS, Japan) and Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University)
Soft X-ray Emission Spectroscopy of Crystalline and Amorphous Li-Si Alloys in Lithium-Ion Batteries Anode
- P22** ○赤間 知子 (北大院理), 武次 徹也 (北大院理)
演算子変換を用いた効率的時間発展: 3 項間漸化式法の拡張

- P23** ○住谷 陽輔 (北大院理), 前田 理 (北大院理, WPI-ICReDD, NIMS)
反応速度論に基づく複雑反応経路ネットワークの解析: 反応機構の抽出
- P24** ○高木 牧人 (北大院理), 前田 理 (北大院理, WPI-ICReDD, NIMS)
人工力誘起反応法を用いた高圧条件下での結晶構造探索
- P25** ○堤 拓朗 (北大院総合化学), 小野 ゆり子 (北大 WPI-ICReDD), 荒井 迅 (中部大創発
学術院), 武次徹也 (北大院総合化学, 北大 WPI-ICReDD, 北大院理)
多次元データ縮約法による動的反応経路の可視化
- P26** ○坂坂 龍 (北大院総合化学), 中山 哲 (北大触媒研・JST さきがけ), 田村 正純 (東北大
院工), 中川 善直 (東北大院工), 冨重 圭一 (東北大院工), 長谷川 淳也 (北大触媒研)
単核 $\text{ReO}_x/\text{CeO}_2$ 触媒による脱酸素脱水反応の理論的研究
- P27** ○藤森 俊和 (北大院総化), 小林 正人 (北大院理, 北大 WPI-ICReDD), 武次 徹也 (北
大院理, 北大院総化, WPI-ICReDD)
分割統治エネルギー勾配計算に対するバッファ領域自動制御法の開発
- P28** ○高原 里奈 (北大院総化), 岩佐 豪 (北大院理), 武次 徹也 (北大院理)
金チオラートクラスターの触媒機構の解明に向けた理論的研究
- P29** ○毛利 広野 (北大院総化), 岩佐 豪 (北大院理), 武次 徹也 (北大院理)
金属クラスターを用いたアンモニア分解反応経路の探索
- P30** ○竹中 将斗 (北大院総化), 岩佐 豪 (北大院総化, 北大院理, 京大 ESICB), 武次 徹也 (北
大院総化, 北大院理, 京大 ESICB)
プラズモン増強ラマン分光法における電磁気学的増強に関する理論研究
- P31** ○岩佐 豪 (北大院理), 武次 徹也 (北大院理)
金錯体二量体の励起状態計算: CC2 法と DFT-D3 法の比較検討
- P32** ○杉山 佳奈美 (北大院総化), 斉田 謙一郎 (北大院理), 前田 理 (北大院理, WPI-ICReDD,
NIMS)
Rh (111) および Pt (111) 面上の CO-NO 反応経路ネットワークの比較
- P33** ○大場 祐汰 (北大院総化), 小林 正人 (北大院理, 北大 WPI-ICReDD), 武次 徹也 (北
大院理, 北大院総化, 北大 WPI-ICReDD)
希土類錯体の 4f 軌道凍結近似計算と回転最適化による改良
- P34** ○名畑 壺志 (北大院総化), 斉田 謙一郎 (北大院理), 石谷 治 (東工大), 前田 理 (北
大院理, WPI-ICReDD, NIMS)
Re (I) 錯体を用いた CO_2 還元反応機構に関する理論的研究
- P35** ○田代 啓介 (北大院総化), 小林 正人 (北大院理, 北大 WPI-ICReDD, 京大 ESICB), 中
島 清隆 (北大触媒研), 武次 徹也 (北大院理, 北大 WPI-ICReDD, 京大 ESICB)
ヒドロキシメチルフルフラールの不安定性: 系統的計算化学に基づく研究

- P36** ○伊藤 琢磨 (北大院総化), 原渕 祐 (北大院理, JST さきがけ), 前田 理 (北大院理, WPI-ICReDD, NIMS)
分岐反応における AFIR 経路と IRC 経路の比較: 1-メチレン-4-ビニリデンシクロヘキサンの[3,3]シグマトロピー転移への応用
- P37** ○織田 耕平 (北大院総化), 堤 拓朗 (北大院総化), 古屋 謙治 (九州大基幹), 武次 徹也 (北大院理, 北大院総化, 北大 WPI-ICReDD)
CF₃⁺-CO 衝突反応の動力学: 固有反応座標と AIMD 解析
- P38** ○宮越 洗二 (北大院総化), 小林 正人 (北大院理, 北大 WPI-ICReDD), 小野寺 陽平 (京大複合研, 物質機構), 小原 真司 (物質機構), 武次徹也 (北大院理, 北大 WPI-ICReDD)
MgO-SiO₂ 系高温融体の系統的 DFTB-MD シミュレーションとパーシステント・ホモロジー解析: ガラスへのなりやすさの理解にむけて
- P39** ○正村 太一 (北大院総化), 斉田 謙一郎 (北大院理), 前田 理 (北大院理, WPI-ICReDD NIMS)
Au(111), Pt(111), Pd(111), Cu(111) 面における H₂+O₂ 反応経路の比較
- P40** ○王 奔 (北大院総化), 高 敏 (北大院総化, 北大触媒研), 武次 徹也 (北大院総化, 北大院理, 北大 WPI-ICReDD)
Theoretical study on aryl isocyanides adsorbed on the Pt (111) surface
- P41** ○小野 ゆり子 (北大 WPI-ICReDD), 八木 清 (理研), 高柳 敏幸 (埼玉大理), 武次 徹也 (北大院総化, 北大院理)
Ar-PtCO の振動スペクトルにおける異常な希ガス効果
- P42** ○鈴木 机倫 (WPI-ICReDD), 前田 理 (北大院理, WPI-ICReDD, NIMS)
量子力学的に静電場を考慮した多構造マイクロ反復法への拡張とクライゼン転移反応への応用
- P43** 原田 芽生 (北大薬), ○小林 正人 (北大院理, 北大 WPI-ICReDD), 安藤 完太 (北大院薬), 高倉 栄男 (北大院薬), 小川 美香子 (北大院薬), 武次 徹也 (北大院理, 北大 WPI-ICReDD)
がん光免疫療法薬剤 IR700 の細胞障害機構に関する計算化学的研究
- P44** ○斉藤 真司 (分子研)
Supercooled water: Structure, dynamics, thermodynamics, and glass transition
- P45** ○池田 浩人 (福岡大薬), 大波多 友規 (福岡大薬), 湯川 美穂 (福岡大薬), 堤 広之 (福岡大薬), 藤澤 雅夫 (近畿大生物理工), 安藝 初美 (福岡大薬)
カテキンのガロイル基が β-シクロデキストリンによるカテキンの包接複合体形成に与える影響
- P46** ○張 大鵬 (東北大院理), 岸本 直樹 (東北大院理), 三宅 亮介 (お茶の水女子大基幹研究院)
巨大環状金属錯体内トリペプチド配位子の立体配座異性体の量子化学探索研究

P47 ○鈴木 和磨 (東北大院理), 荒井 雄太 (東北大院理), 菅野 学 (東北大院理), 河野 裕彦 (東北大院理)

位相空間上のガウス基底を用いた波束動力学法の開発: 電子および核ダイナミクスへの適用

P48 ○難波 知太郎 (東北大院理), 吉田 将隆 (東北大院理), 河野 裕彦 (東北大院理), 大槻 幸義 (東北大院理)

畳み込みニューラルネットワークを用いた非対称コマ分子の3次元整列制御の最適化

P49 ○荒川 侑太, 吉田 将隆, 大槻 幸義 (東北大院理)

非対称コマ分子の3次元整列の最適制御シミュレーション

P50 ○前田 憲哲 (東北大院理), 菅野 学 (東北大院理), 中島 祐司 (東北大院理), 伊藤 悠吏 (東北大院理), 奥津 賢一 (東北大院理), 中野 元善 (東北大院理), 大下 慶次郎 (東北大院理), 美齊津 文典 (東北大院理), 河野 裕彦 (東北大院理)

断熱勾配の時間微分を用いた Surface-Hopping 法の分子会合体への適用: $(\text{CO}_2)_2^+$ の光解離

P51 ○加藤 毅 (東大院理), 山内 薫 (東大院理)

時間依存多電子系波動関数を記述するための有効ポテンシャル理論

P52 ○鬼頭 (西岡) 宏任 (JST さきがけ, 筑波大計算セ), 重田 育照 (筑波大計算セ), 伊藤 繁 (名大院・理・物理), 木村 明洋 (名大院・理・物理)

ヘリオバクテリ反応中心の励起子相互作用計算

P53 ○西澤 宏晃 (筑波大・計セ), 重田 育照 (筑波大・計セ)

拘束条件付き DFTB-MD 計算に対するエネルギー保存の検証

P54 ○堀 優太 (筑波大計算科学セ, 九大先導研), 阿部 司 (九大先導研), 塩田 淑仁 (九大先導研), 重田 育照 (筑波大計算科学セ), 伊東 忍 (阪大院工), 吉澤 一成 (九大先導研)
銅-酸素錯体によるカルボニル化合物の触媒的 C-C 結合形成反応の機構解析

P55 ○山内 仁喬 (総研大, ExCELLS, 分子研), 奥村 久士 (ExCELLS, 分子研, 総研大)

レプリカ置換法による α シヌクレインフラグメント 2 量体形成シミュレーション

P56 ○白男川 貴史 (総研大), 江原 正博 (総研大, 分子研, 京大 ESICB)

分子集合体の光学物性の励起子分解解析法の開発と改良指針への応用

P57 ○小野 純一 (早大理工総研), 岡田 千果 (早大先進理工), 西村 好史 (早大理工総研), 中井 浩巳 (早大理工総研, 早大先進理工, 京大 ESICB)

DC-DFTB-MD 法によるバクテリオロドプシンの長距離プロトン移動反応の理論的解析

P58 ○吉川 武司 (早大理工総研), 土井 俊輝 (早大先進理工), 中井 浩巳 (早大理工総研, 早大先進理工, ESICB)

有限温度法に基づく単参照型励起状態計算手法の開発

P59 ○清野 淳司 (早大理工総研, JST さきがけ), 影山 椋 (早大先進理工), 藤波 美起登 (早大先進理工), 五十幡 康弘 (早大理工総研), 中井 浩巳 (早大先進理工, 早大理工総研, 京大 ESICB)

機械学習型半局所的運動エネルギー汎関数に基づく orbital-free 密度汎関数理論の開発

- P60** ○中村 海里 (早大先進理工), 清野 淳司 (早大理工総研,JST さきがけ), 中井 浩巳 (早大先進理工,早大理工総研,京大 ESICB)
インフォマティクス手法による結合エネルギー密度解析の高精度化
- P61** ○Ladoczi Bence, Seiichiro Lenka Ten-no (神大科学技術イノベ, 神大システム情報)
Stochastic perturbation theory in a limited configuration space
- P62** ○伊藤 広伸 (静岡大工), 鳥居 肇 (静岡大工)
水素結合形成した水の OH 伸縮振動モードに対する外部電場効果のメカニズムにおける電子密度変化の役割に関わる理論的解析
- P63** ○土持 崇嗣 (神大システム情報), 天能 精一郎 (神大科学技術イノベ, 神大システム情報)
拡張 Koopmans 定理を用いた強相関係におけるイオン化ポテンシャルの計算
- P64** ○鳥居 肇 (静岡大工)
ハロゲン結合形成の振動分光学的検出可能性についての理論的解析
- P65** ○野地 隼平 (新潟大理), 吉森 明 (新潟大理), 植松 勇一郎 (九州大理)
角度依存の積分方程式による分子液体のダイナミックスの理論
- P66** ○石田 豊和 (産総研, 未利用熱技術組合), 稲垣 泰一 (分子研), 馬場 哲也 (未利用熱技術組合)
Computational Modeling of Thermal Energy Storage Materials
- P67** ○宮本 優弥, 波田 雅彦 (首都大院理)
表面増強ラマン散乱の化学的増強効果における汎関数依存性: 自然摂動軌道による解析
- P68** ○麻田 俊雄 (阪府大院理), 小関 史朗 (阪府大院理)
アモルファス相におけるホール移動度の算出法の開発と機械学習への展開
- P69** ○小関 史朗, 澤田 望実, 治田 守, 麻田 俊雄 (阪府大院理)
NEB 法を用いた電子的励起状態における反応経路の探索
- P70** ○治田 守 (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)
フリーエンドアルゴリズムの改良による遷移状態の効率的な探索手法の開発
- P71** ○林 亮秀 (阪大院理), 山本 旭 (京大院人), 吉田 寿雄 (京大院人), 奥村 光隆 (阪大院理)
第一原理分子動力学法を用いたエチレン水素化反応における吸着形態及び吸着過程の研究
- P72** ○中野 雅由 (阪大院基礎工,分子研), 岡田 健治 (阪大院基礎工), 當波 孝凱 (阪大院基礎工), 永海貴識 (阪大院基礎工)
環状分子集合系のシングレットフィッシュンダイナミックスの理論研究
- P73** ○森 勇介 (阪大院基礎工), 岡崎 圭一 (分子研), 金 鋼 (阪大院基礎工), 松林 伸幸 (阪大院基礎工)
ジペプチドの異性化過程を記述する反応座標の探索: コミッターと最尤推定法の融合
- P74** ○八十島 亘宏 (阪大院基礎工), 松林 伸幸 (阪大院基礎工)
高分子/水界面へのアミノ酸アナログの吸着自由エネルギー評価

- P75 ○小嶋 秀和 (阪大院基礎工), 半田 和也 (阪大院基礎工), 山田 一雄 (阪大院基礎工), 松林 伸幸 (阪大院基礎工)
同一組成で構造が異なる共重合体の吸水に対する自由エネルギー解析
- P76 ○岡田 健治 (阪大院基礎工), 當波 孝凱 (阪大院基礎工), 永海 貴識 (阪大院基礎工), 中野 雅由 (阪大院基礎工, 分子研)
ペンタセン二量体モデルのシングレットフィッション速度に対する摂動論の適用性: 量子マスター方程式法による検証
- P77 ○原 健太 (阪大院基礎工), 石井 良樹 (阪大院基礎工), 松林 伸幸 (阪大院基礎工)
3成分溶媒における疎水性分子の拡散性と溶解性の分子論
- P78 ○大隅 理佐, 山田 一雄, 松林 伸幸 (阪大院基礎工)
分子動力学シミュレーションを用いた PVA ハイドロゲルの分子レベル解析
- P79 ○阪口 敦哉 (阪大院基礎工), 山田 一雄 (阪大院基礎工), 松林 伸幸 (阪大院基礎工)
疎水ポリマーおよび親水ポリマーにおける吸水性の微視的集合様態への依存性
- P80 ○諏訪原 一輝 (阪大院基礎工) 松林 伸幸 (阪大院基礎工)
小ペプチドのスタック構造形成に対する 共溶媒効果の相互作用解析
- P81 ○大門 翔太 (阪大院基礎工), 水野 英如 (東大院総合文化), 金 鋼 (阪大院基礎工), 松林 伸幸 (阪大院基礎工)
分子動力学シミュレーションによるシリカガラスの振動状態密度解析
- P82 ○山本 直樹 (阪大院基礎工), 松林 伸幸 (阪大院基礎工)
溶媒効果を取り入れた分子動力学シミュレーションによる固液界面への分子吸着の平衡論と動力的解析
- P83 ○古濱 彩子, 林 岳彦, 山本 裕史 (国立環境研究所)
一般工業化学物質の影響評価を行うための魚類初期生活段階 (ELS) 毒性予測モデルの開発
- P84 ○北河 康隆 (阪大院基礎工), 多田 隼人 (阪大院基礎工), 江良 伊織 (阪大院基礎工), 藤井 琢也 (阪大院基礎工), 池永 和輝 (阪大院基礎工), 中野 雅由 (阪大院基礎工, 分子研)
多核金属錯体の電子状態・スピン状態と電気伝導性の関係
- P85 ○福原 大輝 (広島大院理, 広島大 QuLiS), 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)
TMG が水を強く保持する能力に関する理論化学的研究
- P86 伴野 航大, ○山崎 祥平 (弘前大院理工)
インディゴとその異性体の無放射失活機構
- P87 ○水上 渉 (九大総理工), 御手洗 光祐 (阪大院基礎工, Qunasys), 中川 裕也 (Qunasys), 楊天任 (Qunasys), 大西 裕也 (JSR)
軌道を最適化した変分量子固有値法の開発と多参照摂動論への接続
- P88 ○田中 靖也, Muhammad Haris Mahyuddin, 塩田 淑仁, 吉澤 一成 (九大先導研)
Revisiting the mechanism of methane activation by Zn-ZSM-5 Zeolite

- P89** ○ Chisa Higuchi (a,b), Dragos Horvath (b), Gilles Marcou (b), Kazunari Yoshizawa (a), Alexandre Varnek (b) [(a) IMCE, Kyushu Univ., (b) Universite de Strasbourg]
A QSPR Study of the Glass Transition Temperatures of Linear Polymers and Cross-linked Epoxy Resins
- P90** ○ 岡澤 一樹 (九大先導研), 辻 雄太 (九大先導研), 吉澤 一成 (九大先導研)
 π 共役系の導電経路と伝導度の関係に関する理論的研究
- P91** ○ 吉田 将隆 (九大先導研), 辻 雄太 (九大先導研), 吉澤 一成 (九大先導研)
5d 遷移金属表面による触媒的窒素固定の理論的研究
- P92** ○ 堀 幹矢 (九大院工), 辻 雄太 (九大先導研), 吉澤 一成 (九大先導研)
ルビジウム亜酸化物の電子状態に関する理論的研究
- P93** ○ 末武 鋭也 (金沢大院自然), 杉澤 宏樹 (金沢大院自然), 堀 優太 (筑波大計算科学セ), 井田 朋智 (金沢大院自然), 水野 元博 (金沢大ナノマリ)
分子動力学法を用いた有機酸複合体中イミダゾールの分子運動解析
- P94** ○ 井田 朋智 (金沢大), 西田 愛美 (金沢大), 堀 優太 (筑波大)
ギ酸分解の化学反応ネットワーク
- P95** ○ 松倉 里紗 (近大院生物理工), 望月 和人 (電通大院情報理工), 古江 祐也 (近大院生物理工), 宮下 尚之 (近大生物理工, 電通大院情報理工), 瀧 真清 (電通大院情報理工), 渡辺 信一 (電通大院情報理工)
中分子薬剤と Hsp90 との相互作用
- P96** ○ 福田 良一 (京大 ESICB), 梶谷 暁 (京大工)
メトキシ置換 2-(2-hydroxyphenyl) benzimidazole 異性体の励起状態分子内プロトン移動反応における溶媒効果及び置換基効果
- P97** ○ 中村 康一 (京都先端科学大)
電子状態計算による置換 Bi-Te 系熱電変換材料のフォノンと熱物性解析
- P98** ○ 松永 隼治 (京大院工), 瀬波 大土 (京大院工)
平面構造材料における電気伝導中のローレンツ力密度とテンション密度の理論的研究
- P99** ○ 清水 智規 (京大院工), 瀬波 大土 (京大院工)
鏡像異性体における電子カイラリティの理論的研究
- P100** ○ Kaho Nakatani (Grad. School of Eng., Kyoto Univ.), Ryoichi Fukuda (ESICB, Kyoto Univ.)
The mechanism of triplet-sensitized isomerization of stilbene
- P101** ○ 橋本 康汰 (京大院工), 天野 健一 (名城大農), 西 直哉 (京大院工), 作花 哲夫 (京大院工)
コロイド粒子間の相互作用に対する界面活性剤の影響: 積分方程式理論を用いた計算
- P102** ○ 高橋 健 (京大院工), 中農 浩史 (京大院工), 佐藤 啓文 (京大院工)
電極-電解液界面電子移動に対する電解液の電子分極効果

- P103** ○吉田 悠一郎 (京大院工), David J. Wales (ケンブリッジ大化)
Energy landscapes for complexes of a cyclic peptide and an ion
- P104** ○高木 望 (京大 ESICB), 福田 良一 (京大 ESICB), 江原 正博 (分子研, 京大 ESICB), 榑 茂好 (京大 FIFC, 京大 ESICB)
4d 金属クラスター M_{13} , M_{55} ($M = Ru, Rh, Pd, Ag$) への NO 分子吸着構造と反応性に関する電子論的理解
- P105** ○近藤 有輔 (京大 ESICB), 岩佐 豪 (北大院理, WPI-ICReDD, 京大 ESICB), 武次 徹也 (大院理, WPI-ICReDD, 京大 ESICB)
金属クラスター触媒による NO 還元反応に関する理論的研究
- P106** ○Jia-Jia Zheng, Susumu Kitagawa, Shigeyoshi Sakaki (京大 FIFC, 京大 ESICB)
Diffusion-Regulated Gas Adsorption into Metal-Organic Framework: Computational Study Using An ONIOM-type Method Consisting of MP2.5 and PBE-D3
- P107** ○Qiao-Zhi Li, Shigeyoshi Sakaki (Fukui Institute for Fundamental Chemistry, Kyoto University)
Theoretical Study on C-F σ -Bond Activation by Rh (PXP) Complexes ($X = B, Al, Ga$)
- P108** ○Bo Zhu, Masahiro Ehara, and Shigeyoshi Sakaki (ESICB, Kyoto University)
Reaction Mechanism on Propene Oxidation on M_{55} Cluster ($M = Pd, Rh$): Theoretical Study of Differences between Pd and Rh Clusters
- P109** 杉浦 啓太 (岐阜大院工), 鈴木 机倫 (北大院理), 立川 仁典 (横浜市大院生命ナノ, 横浜市大院 DS センター), ○宇田川 太郎 (岐阜大工)
多成分量子力学 CI-NEB および CI-String 法の高速化と応用計算
- P110** ○窪田 善之 (関西電力技研), 田中 篤嗣 (関西電力技研), 吉田 洋之 (関西電力技研)
鉛蓄電池の正極界面での反応
- P111** ○石井 桐子 (横浜市大院生命ナノ), 立川 仁典 (横浜市大院生命ナノ, 横浜市大 DS), 北 幸海 (横浜市大院生命ナノ)
Backflow 変換を用いた新規振動座標による高精度非調和振動状態理論の開発
- P112** ○大場 優生 (横浜市大院生命ナノ), 小林 理 (横浜市大院生命ナノ), 立川 仁典 (横浜市大 DS センター)
経路積分分子動力学法を用いたミューオニウム化分子の理論計算
- P113** ○黒川 悠索 (量子化学研究協会・研究所), 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)
Chemical Formula Theory と Free Complement 法による原子・分子の基底・励起状態の変分法による計算
- P114** ○中川裕也, 山本貴博 (株式会社 QunaSys)
量子コンピュータのシミュレータ Qulacs を用いた量子化学計算