

講演プログラム

講演時間 口頭発表 a : 25 分 (発表 20 分+討論 5 分) ポスター発表 : 80 分
口頭発表 b : 15 分 (発表 12 分+討論 3 分)

第 1 日 <5 月 24 日 (木) >

セッション 1A 【座長：菅原 道彦 (慶大院理工)】

13:00 1A1b ○前田 理、武次 徹也 (北大院理)、Hongyan Xiao (京大福井謙一研究セ)、諸熊 奎治 (京大福井謙一研究セ、エモリー大化学)
反応経路自動探索法による励起状態ローミング機構の解明

13:15 1A2b ○福田 良一 (分子研、計算科学研究センター)、江原 正博 (計算科学研究センター、分子研)
ポルフィリンにおけるソルバトクロミックシフトの起源

13:30 1A3a ○鈴木 俊法、堀尾 琢哉、鈴木 喜一、足立 俊輔 (京大)
溶媒和電子と電荷移動反応の超高速光電子分光

13:55 1A4a ○高塚 和夫、高橋 聡 (東大院総合文化)
超多体半古典力学の構築

14:20 – 14:30 休憩

セッション 1B 【座長：杉本 学 (熊本大院自然科学)】

14:30 1B1b ○石川 敦之、黒川 悠策、中辻 博 (量子化学研究協会)
シュレーディンガー方程式の FC 法 (自由完員関数法) による解法. I. 収束性の高い方法の検討

14:45 1B2b ○黒川 悠索、石川 敦之、中辻 博 (量子化学研究協会)
シュレーディンガー方程式の FC 法 (自由完員関数法) による解法. II. Gauss 型関数の検討

15:00 1B3b ○今村 穰 (早大先進理工)、中井 浩巳 (早大先進理工、早大理工研、JST-CREST)
Orbital-free 密度汎関数理論における運動エネルギー汎関数に関する研究

- 15:15 1B4b ○大塚 勇起、天能 精一郎 (神戸大システム情報)
露わに電子相関を考慮したスレーター行列式を用いたプロジェクトモンテカルロ
(PMC-SD-F12) 法による高精度計算
- 15:30 1B5b ○中垣 雅之 (京大福井謙一研究センター)、黒川 悠素 (QCRI)、榊 茂好 (京大
福井謙一研究センター)
窒素分子を挟んだ逆サンドイッチ型二核金属錯体の特異的なスピン状態に関する
理論的研究
- 15:45 – 15:55 休憩
- セッション 1C 【座長：小関 史朗 (大阪府立大学)】
- 15:55 1C1b 石川 敦之 (京大院工、量子化学研究協会)、谷村 雄大、中尾 嘉秀、佐藤 啓文 (京
大院工)、○榊 茂好 (福井謙一研セ)
CASVB 法による有機金属化学反応の微視的理解：C-C 結合切断反応への応用
- 16:10 1C2b 野口 純樹、佐藤 啓文 (京大院工)、○中尾 嘉秀 (京大福セ)
オキサラト架橋した多核金属錯体の磁気異方性に関する理論的研究
- 16:25 1C3b ○杉崎 研司、豊田 和男、佐藤 和信、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)
キノイド型電子構造を持つジナイトレン分子の零磁場分裂テンソルの理論的研究
- 16:40 1C4b 水戸 将平、相川 小春、渡邊 礁太郎、○守橋 健二 (筑波大化)
制約密度汎関数法による有機半導体正孔移動度の予測
- 16:55 1C5b ○大西 拓 (三重大院工)、Trygve Helgaker (CTCC、UiO)
ペロブスカイト型チタン酸化物の水素輸送機構の解明 PART II スカンジウムド
ーピング
- 17:10 – 18:30 ポスターセッション

第2日 <5月25日(金)>

セッション 2A 【座長：今村 穰（早大先進理工）】

09:20 2A1b ○重田 育照、馬場 剛史、奥野 克樹、乾 智也、桑原 弘幸、岸 亮平、中野 雅由
(阪大院基礎工)
キュミュラント変数による変分的自由エネルギー解析

09:35 2A2a ○Giacomo Giorgi (東京大院)、Maurizia Palumbo (University of Rome 'Tor Vergata')、
Letizia Chiodo (Italian Institute of Technology)、Angel Rubio (Universidad del País
Vasco UPV/EHU)、Koichi Yamashita (東京大院)
The nature of radiative transitions in TiO₂-based nanosheets

10:00 2A3b ○小嶋 亮平 (立教大院理)、森 寛敏 (お茶大)、望月 裕志、松下 信之 (立教大)、
上ノ原 和佳 (立教大院理)
シス・トランス-プラチンのスピン軌道作用に基づいた励起状態計算

10:15 2A4b ○畑中 美穂 (京大謙一研究セ)、諸熊 奎治 (京大謙一研究セ、エモリー大)
DFT 法および ONIOM 法を用いた一酸化窒素還元酵素の反応機構に関する理論的
研究

10:30 2A5b ○宮原 友夫、中辻 博 (量子化学研究協会研究所、JST-CREST)、和田 健彦 (東
北大多元研)
ウリジン誘導体の円二色性スペクトル：SAC-CI 法による研究

10:45 – 10:55 休憩

セッション 2B 【座長：中野 雅由（阪大院基礎工）】

10:55 2B1b ○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)
大規模・高精度相対論的量子化学理論の開発 (3)：スピン依存相互作用の局所ユ
ニタリー変換

11:10 2B2b ○中嶋 浩之、中辻 博 (量研)
FC LSE 法の解法としての AB 行列法

11:25 2B3a ○瀬波 大土、宮里 敏秀、高田 崇二郎、池田 裕治、立花 明知 (京大院工)
Rigged QED に基づく原子核・電子の時間発展シミュレーション

11:50 2B4a ○市川 和秀、福田 将大、立花 明知 (京大院工)
Rigged QED による原子核運動の時間発展シミュレーション

12:15 – 13:30 昼食

セッション 2C 【座長：長谷川 淳也 (京大福井研)】

13:30 2C1a ○鳥居 肇 (静岡大教育)
低障壁水素結合とプロトン共役電子移動における電子の挙動と赤外強度

13:55 2C2b ○Suehiro Iwata (豊田理研、慶応理工)、Pradipta Bandyopadhyay (JNU)、Sotiris S. Xantheas (PNNL)
The analysis of hydrogen bonding networks in several isomers of (H₂O)₁₁ by the charge-transfer and dispersion energies

14:10 2C3b ○川島 雪生 (横浜市大院生命ナノ)、中野 晴之 (九大院理)、佐藤 健 (東大院工)、八木 清 (イリノイ大)
水六量体アニオンクラスターのアニーリングシミュレーション

14:25 2C4b ○優 乙石、中田 恭子 (青山学院化学・生命)、長岡 正隆 (名大院情報科学)
カークウッド-バフ積分法による蛋白質移相自由エネルギーの計算と映像化:分子クラウドニング効果の微視的理解に向けて

14:40 – 14:50 休憩

セッション 2D 【座長：中井 浩巳 (早大先進理工)】

14:50 2D1a ○杉本 学、岩村 和也 (熊本大院自然科学)
第一原理シミュレーションによる蛍光プローブ分子の電子状態学研究

15:15 2D2b ○鬼頭-西岡 宏任、安藤 耕司 (京大院理)
FMO-LCMO 法を用いた長距離電子移動反応の理論的研究 II

15:30 2D3b ○岸 亮平、岸本 真悟、村田 裕介、伊藤 聡一、山田 大志、重田 育照、中野 雅由 (阪大院基礎工)
一置換および二置換ベンゼン誘導体の動的な第一超分極率の Ab initio MO 量子マスター方程式法による時空間解析

- 15:45 2D4b ○安藤 耕司 (京大院理)
浮動幅可変ガウス波束と原子価結合法による化学結合の記述
- 16:00 – 16:10 休憩
- セッション 2E 【座長：佐甲 徳栄 (日大理工)】
- 16:10 2E1b ○松崎 黎、藪下 聡 (慶大院理工)
複素基底関数法による軌道指数最適化法の開発と光イオン化の角度分布の理論計算への応用
- 16:25 2E2b ○新崎 康樹 (東大院総合)、Kwanghsi Wang、Vincent McKoy (Caltech)、高塚 和夫 (東大院総合)
過渡光電子分光の量子振動波束定式化に現れる電子動力学
- 16:40 2E3a ○佐藤 健、石川 顕一 (東大院工)
強光子場中の多電子ダイナミクス：電離過程を記述するための多配置波動関数理論
- 17:05 – 18:25 ポスターセッション
- 18:30 – 20:30 懇親会 (会場内レストランあすなろ)

第3日 <5月26日(土)>

セッション 3A 【座長：高橋 英明（東北大院理）】

09:20 3A1a ○馬場 正昭（京都大院理）、中山 尚史（コンプレックス）、石元 孝佳（九州大稲盛センター）、長嶋 雲兵（産業技術研究所ナノシステム部門）
ab initio 計算のターゲットとなるべき実験値とは何か

09:45 3A2b ○白井 聡一（豊田中研、JST-CREST）、岩田 末廣（豊田理研）、前川 佳史、谷 孝夫、稲垣 伸二（豊田中研、JST-CREST）
MCQDPT によるパラシクロファンに関する理論的研究

10:00 3A3b ○北 幸海、立川 仁典（横浜市大院・生命ナノ）
Multi-product 展開を用いた Reptation Monte Carlo 法の開発：多原子分子の振動状態への適用

10:15 3A4a ○李 秀栄、二島 涉（理研 ASI）、宮下 尚之（理研 QBiC）、山口 芳樹（理研 ASI）、杉田 有治（理研 ASI、理研 QBiC、理研 AICS）
レプリカ交換分子動力学計算による糖鎖立体構造ダイナミクスの予測

10:40 – 10:50 休憩

セッション 3B 【座長：岸 亮平（阪大院基礎工）】

10:50 3B1b ○出射 早希子、相田 美砂子（広島大院理、広島大 Qulis）
気相中および水溶液中におけるグルコースピラノースの構造と安定性についての理論化学的研究

11:05 3B2b ○福澤 薫（みずほ情報総研、東大生研）、渡邊 千鶴、沖山 佳生（東大生研）、中野 達也（国立衛研）、田中 成典（神戸大院シス情）、望月 祐志（立教大理）
FMO4 法に基づく分子間相互作用の高性能解析

11:20 3B3a ○立花 明知（京大院工）
一般相対性理論に基づく電子スピントルクの新しい描像

11:45 3B4a ○佐甲 徳栄（日大理工）、市村 淳（宇宙研）
ヘリウム様原子と人工原子におけるフントの規則と共役フェルミ孔

12:10 – 13:30 昼食

セッション 3C 【座長：森田 明弘（東北大院理）】

- 13:30 3C1b ○島崎 智実（東北大院工）、赤丸 悟士、阿部 孝之（富山大水素同位体科学センター）、久保 百司（東北大院工）
密度汎関数法に基づいた Ru 固体触媒を用いた二酸化炭素のメタン化反応に関する解析
- 13:45 3C2a ○山下 雄史（東大先端研）、Gregory A. Voth（シカゴ大化学科）
シトクローム c 酸化酵素のプロトン輸送機構： 経験的原子価結合法による研究
- 14:10 3C3b ○小嶋 秀和、山田 篤志、岡崎 進（名大院工）
量子古典混合系近似に基づく分子動力学シミュレーションを用いた無極性溶媒中とプロトン性極性溶媒中における分子内プロトン移動反応解析—反応速度の実験値との対応を中心として—
- 14:25 3C4b ○森 義治（名大院理）、岡本 祐幸（名大院理、名大構造生物研、名大計算科学研）
焼き戻し分子動力学法による水中における分子内プロトン移動反応の解析
- 14:40 – 14:50 休憩

セッション 3D 【座長：安藤 耕司（京大院理）】

- 14:50 3D1b ○小林 千草、杉田 有治（理研、杉田理論分子科学）
カルシウムイオンポンプ内の水素結合ネットワークに関する理論的研究
- 15:05 3D2a ○片岡 洋右、山田 祐理（法政大学生命）
完全固体・完全液体 v2
- 15:30 3D3b ○坂口 俊、森田 明弘（東北大院理）
単分子膜に覆われた液体界面における取り込み確率：分子動力学と Langevin 動力学を用いた計算
- 15:45 3D4b ○高橋 英明、近江 惇、森田 明弘（東北大院理）
QM/MM 法に基づく溶質の電子密度の揺らぎによる溶媒和自由エネルギーの新規な計算法の開発とその応用