

ポスター発表

第1日 <5月24日(木)> 17:10 – 18:30

- 1P01 ○中井 浩巳 (早大先進理工、早大理工研、JST-CREST)
核・電子軌道 (NOMO) 法における振動波動関数の解析
- 1P02 ○樽見 望都 (早大先進理工)、小林 正人 (早大高等研)、中井 浩巳 (早大先進理工・早大理工研・JST-CREST)
開殻 APSG 波動関数を参照とした多体摂動計算
- 1P03 ○鈴木 健生、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)
距離分割・スピンスケーリングを用いた RPA 相関エネルギーの開発と数値検証
- 1P04 ○岩佐 豪、中嶋 敦 (慶大理工、JST-ERATO)
金属内包シリコンケージクラスターのヘテロ二量体・三量体の電子物性
- 1P05 ○河合 宏樹、大戸 達彦、山下 晃一 (東大院工)
電極ナノギャップ中の C_{60} がもたらす電気伝導スイッチング機構に関する理論的研究
- 1P06 ○屋内 一馬 (北大院総化)、島田 遼太郎、湊瀬 啓太 (北大院工)、堺井 亮介 (旭川高専)、佐藤 敏文、覚知 豊次、佐藤 信一郎 (北大院工)
ウレア基オリゴフェニル化合物系のアニオン認識による電子状態および分子構造変化に対する理論的研究
- 1P07 ○塚本 晋也、榊 茂好 (京大福井謙一研究セ)
 $Au(I)$ - $Cu(I)$ 相互作用を含む多核金属錯体の発光メカニズムと金属間相互作用
- 1P08 ○山口 真 (FC-Cubic)
塩化水素および硫化水素への電子付加による共有結合性ダイマーラジカルアニオンの形成
- 1P09 ○吉川 武司 (早大先進理工)、小林 正人 (早大高等研)、中井 浩巳 (早大先進理工)
DC-SAC-CI 法による光活性タンパクの励起状態計算
- 1P10 ○河村 俊秋、阿部 穰里 (首都大院理工)、斎藤 雅一 (埼玉大院理工)、波田 雅彦 (首都大院理工)
鉛原子を含む5員環化合物の NMR スペクトルに関する量子化学的研究

- 1P11 ○近藤 有輔（北大院総化）、野呂 武司（北大院理）、武次 徹也（北海道大学大学院理学研究院）
CeF 分子の電子構造と化学結合に関する理論的研究
- 1P12 ○河東田 道夫、中嶋 隆人（理研 AICS）
2 成分相対論的結晶軌道法の開発
- 1P13 ○池田 裕治、瀬波 大土、立花 明知（京大院工）
局所的な電気伝導特性の計算のための伝導状態の電子構造計算手法について
- 1P14 ○埜崎 寛雄、市川 和秀、立花 明知（京大院工）
電子ストレステンソルによる金属結合の理論的研究
- 1P15 加藤 祥平（岐阜大院工）、○酒井 章吾（岐阜大工）
アセチレン類三量体による[2+2+2]反応機構に関する理論的研究
- 1P16 ○堀 優太、井田 朋智、水野 元博（金沢大院・自然）
イミダゾールのプロトン移動におけるポテンシャル曲面
- 1P17 ○大野 公一（豊田理研）
量子化学探索の効率化と超並列化
- 1P18 ○青木 龍太郎、伊藤 悠太（新潟大院自然）、小関 史朗（阪大院理）、藤村 勇一（東北大院理）、島倉 紀之（新潟大理）
強レーザーによるエチレン分子の解離過程の理論的研究
- 1P19 ○荒井 雄太（東北大院理）、島倉 紀之（新潟大理）、河野 裕彦（東北大院理）
強レーザー場中におけるジメチルエーテルの超高速水素マイグレーションの理論的研究
- 1P20 ○池田 旭伸、新津 直幸、河野 裕彦（東北大院理）、Stephan Irle（名古屋大理）
ポリヒドロキシフラーレンの脱水反応に関する理論的研究
- 1P21 ○中村 堯祉、新津 直幸、菅野 学、河野 裕彦（東北大院理）
光励起炭素クラスターの解離ダイナミクス
- 1P22 ○中島 薫、中嶋 克宏、大槻 幸義、河野 裕彦（東北大院理）
分子整列制御を利用するレーザー同位体分離の最適化シミュレーション

- 1P23 ○新井 岳 (北大院総合化学)、中山 哲、山崎 祥平、武次 徹也 (北大院理)
チミン分子の溶液内超高速無輻射失活に関する理論的研究：励起状態 QM/MM-MD シミュレーション
- 1P24 ○米澤 康滋 (近大高圧蛋白研、阪大蛋白研)
リモネンエポキシド加水分解酵素の分子動態
- 1P25 ○鈴岡 大樹、高橋 英明、石山 達也、森田 明弘 (東北大院理)
分極モデルと溶液理論による溶媒和自由エネルギー計算の方法論の開発とその応用
- 1P26 ○吉川 信明、石山 達也、森田明弘 (東北大院理)
相間移動触媒のイオン輸送と界面の微視的構造および電気二重層形成の効果
- 1P27 ○瀬本 貴之、辻 雄太、吉澤 一成 (九大先導研)
金属/エポキシ樹脂界面の接着機構に与える水分子の影響
- 1P28 松本 望、薩摩 篤、○沢邊 恭一 (名大院工)
ニトリルの水和反応における O/Ag、Ag₂O 表面の酸素による促進効果に関する理論研究
- 1P29 篠原 大明、○工藤 貴子 (群馬大院工)
密度汎関数法計算による環状シロキサン化合物の水溶媒中での構造と励起エネルギーの研究
- 1P30 ○長谷川 淳也 (京大福井研)、河津 励 (CMSI)
凝集系における分子の励起状態：局在化軌道を用いた分子間相互作用の解析
- 1P31 ○谷 亮輔 (北大院総合化学)、原渕 祐、中山 哲、野呂 武司、武次 徹也 (北大院理)
分子クラスターに対する第一原理非調和振動分光計算
- 1P32 ○新見 佳祐 (北大院総合化学)、中山 哲、小野 ゆり子、武次 徹也 (北大院理)
マトリックス中における希ガス複合体の振動スペクトルシミュレーション

第2日 <5月25日(金)> 17:05 – 18:25

- 2P01 ○中野 雅由、南 拓也、伊藤 聡一、岸 亮平、重田 育照 (阪大院基礎工)
一次元テトラジカル系の三次非線形光学物性の開殻因子依存性
- 2P02 ○寺前 裕之 (城西大院理)、丸尾 容子 (NTT環境エネルギー研)
エタノールアミン・ジエタノールアミンの構造に関する分子軌道計算
- 2P03 ○沖山 佳生、渡邊 千鶴 (東大生研)、福澤 薫 (みずほ情報総研、東大生研)、望月 祐志
(立教大理、東大生研)、中野 達也 (国立衛研、東大生研)、田中 成典 (神戸大院シス情)
FMO 計算プログラム ABINIT-MP(X)の新しい機能
- 2P04 ○渡邊 千鶴 (東大生研)、福澤 薫 (みずほ情報総研、東大生研)、中野 達也 (国立衛研、
東大生研)、望月 祐志 (立教大、東大生研)、梅沢 洋二 (微化研)、西尾 元宏 (CHPI 研究
所)
FMO4 法と新規フラグメント分割法に基づく Grb2 SH2 ドメイン-トリペプチド複合体の
CH/ π 相互作用解析
- 2P05 ○北河 康隆、安田 奈都美、畑ヶ 宇宙、松井 亨、川上 貴資、山中 秀介、奥村 光隆 (阪
大院理)
ハイブリッド DFT 法における HF 交換項の混合割合と有効交換積分値
- 2P06 ○樋山 みやび (名大院情報科学)、秋山 英文 (東大物性研)、山田 健太、古賀 伸明 (名
大院情報科学)
密度汎関数法による pKa 値をもちいたホタルルシフェリン蛍光スペクトルの解析
- 2P07 ○古濱 彩子、白石 寛明、今村 隆史 (国立環境研究所)、武次 徹也 (北大院理)
アミンとオゾン・OH との複合体の構造予測
- 2P08 ○南 拓也、伊藤 聡一、岸 亮平、重田 育照、中野 雅由 (阪大院基礎工)
開殻因子に基づくシングレットフィッション分子の理論設計
- 2P09 ○奥野 克樹、重田 育照、岸 亮平、宮坂 博、中野 雅由 (阪大院基礎工)
ジアリールエテン誘導体の励起状態安定構造解析：開環反応量子収率の支配因子
- 2P10 ○中野 匡彦、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)
スピン依存 2 成分相対論に基づく電子相関計算手法の開発

- 2P11 ○中嶋 裕也、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)
局所ユニタリー変換を用いた無限次 Douglas-Kroll 法による高速な構造最適化手法の開発
- 2P12 ○清野 淳司、中野 匡彦、中井 浩巳(早大先進理工、早大理工研、JST-CREST)
QED 効果を取り入れた 2 電子 Gaunt-Pauli 近似の精度検証
- 2P13 ○相川 小春、守橋 健二(筑波大院化)
CDFT 計算による PPV の三重項電子移動過程の解析
- 2P14 ○河津 励(分子研、京大福セ)、長谷川 淳也(京大福セ、京大工、量化研)
三重項励起エネルギー移動のトンネル経路
- 2P15 ○福田 将大、市川 和秀、立花 明知(京大院工)
Rigged QED に基づくスピンドYNAMIKSの数値シミュレーション
- 2P16 ○宮里 敏秀、瀬波 大土、池田 裕治、立花 明知(京大院工)
Rigged QED に基づく原子・分子の誘電応答に関する数値シミュレーション
- 2P17 ○高田 崇二郎、宮里 敏秀、池田 裕治、瀬波 大土、立花 明知(京大院工)
Rigged QED に基づく原子核場の挙動とその統計性に関する理論的研究
- 2P18 ○松岡 貴英、大西 紗代、藪下 聡(慶大院理工)
ICI の光解離生成物 CI が示す角運動量分極と解離方向異方性に関する理論的研究
- 2P19 ○菅原 道彦(慶大院理工)
レーザーパルス列による分子振動位相緩和過程の制御
- 2P20 ○今村 穰(早大先進理工)、初井 宇記(理研播磨研究所)
多重内殻イオン化状態の理論的研究：XFEL の時間構造測定の実現可能性
- 2P21 ○山崎 馨、河野 裕彦(東北大院理)、見附 孝一郎(分子研)
グリーン関数法によるスマネンの紫外光電子スペクトルの帰属
- 2P22 ○小山田 隆行、大村 周(東北大院理)、加藤 毅(東大院理)、河野 裕彦(東北大院理)
多配置時間依存 Hartree-Fock 法の開発と分子の光イオン化ダイナミクス其自然軌道解析
- 2P23 ○大村 周、小山田 隆行、河野 裕彦(東北大院理)、加藤 毅(東大院理)、小関 史朗(大阪府大院理)
多電子ダイナミクスにおける時間依存分子軌道の化学ポテンシャル解析

- 2P24 ○小関 史朗、鎌田 尚也、鍵田 侑希、麻田 俊雄 (大阪府立大学)
有機 EL 材料分子における燐光過程の理論的考察
- 2P25 ○櫻井 耕司 (阪府大院理)、麻田 俊雄、小関 史朗 (阪府大院理、RIMED)
QM/MM MD 法を用いたリチウム電池の正極における電解液分解反応に関する理論的解析
- 2P26 ○河田 真治、小森 美佳、藤本 和士、吉井 範行、岡崎 進 (名大工)
all-atom モデルを用いた分子動力学計算による球状ミセル形成過程の分子論的研究
- 2P27 瀬高 悠太、○吉井 範行、藤本 和士、岡崎 進 (名大工)
分子動力学計算による球状ミセルの構造とダイナミクスについての球面調和関数解析
- 2P28 ○長谷 有悟、早木 清吾、佐藤 啓文 (京大院工)
ホスホール誘導体が示すソルバトクロミズムに関する分子論的研究
- 2P29 ○松村 祥宏、飯田 健二、佐藤 啓文 (京大院工)
水中におけるアニリンのイオン化と溶媒和ダイナミクスに関する理論的研究
- 2P30 ○松井 亨 (阪大院理)、馬場 剛史 (阪大院基礎工)、安田 奈都美 (阪大院理)、神谷 克政
(筑波大数物)、北河 康隆 (阪大院理)、重田 育照 (阪大院基礎工)、奥村 光隆 (阪大院
理)
アミノ酸側鎖の酸解離定数の新規算出法とその応用
- 2P31 ○中川 節子 (金城学院大)
分極ポテンシャルによる核酸の相互作用エネルギーの再現性
- 2P32 ○辻 雄太 (九大先導研)、Aleksandar Staykov (I2CNER)、吉澤 一成 (九大先導研)
 π スタック分子ダイオード