

## 第 16 回理論化学討論会 プログラム

講演時間	口頭発表	15 分 (発表 12 分+討論 3 分)
	ポスター発表	90 分

<< 5 月 15 日(水) >>

12:00-12:45 受付

12:45-14:00 口頭発表 A

座長：山田篤志

- 1L01 片岡 洋右, 山田 祐理 (法政大生命)  
完全固体・液体の状態方程式 v5
- 1L02 伊藤 暁, 奥村 久士 (分子研)  
新たな拡張アンサンブル法：レプリカ置換法
- 1L03 望月 建爾 (総研大物理), 松本 正和 (岡大理), 大峯 巖 (分子研)  
分子動力学計算による氷 *I<sub>h</sub>* の均質融解過程の分子メカニズムの解明  
(※発表者依頼による講演題目変更, 4 月 30 日)
- 1L04 二村 佑樹 (名大院工), 王 琳 (上海交通大), 吉井 範行 (名大院工), 藤本 和士 (名大院工), 岡崎 進 (名大院工)  
分子動力学計算に基づいたイオン性および非イオン性球状ミセル表面の構造とダイナミクスに関する球面調和関数解析
- 1L05 河合 信之輔, 寺本 央, 小松崎 民樹 (北大電子研)  
生体分子の長時間ダイナミクスと実効的自由度

14:00-14:15 休憩

14:15-15:30 口頭発表 B

座長：重田育照

- 1L06 中農 浩史 (京大院工), 山本 武志 (京大院理)  
電荷密度を用いた平均場 *QM/MM* 自由エネルギー計算
- 1L07 志賀 基之 (原子力機構)  
分子交換対称性を考慮した *QM/MM* 分子動力学法
- 1L08 青野 信治 (京大福井セ), 中垣 雅之 (京大福井セ), 榊 茂好 (京大福井セ)  
*Mn(III)*- および *Ni(II)*-salen 錯体の局在・非局在性吸収スペクトルと溶媒効果
- 1L09 笠原 健人 (京大院工), 佐藤 啓文 (京大院工, 京都大 触媒・電池元素戦略ユニット)  
リチウムイオン二次電池の電解質溶液中におけるビニレンカーボネート分解反応に関する理論的研究
- 1L10 松村 祥宏 (京大院工), 佐藤 啓文 (京大院工, 京都大学 触媒・電池元素戦略ユニット)  
分子の構造揺らぎに対する溶媒和効果の積分方程式理論

15:30-15:45 休憩

15:45-17:00 口頭発表 C

座長:志賀基之

- 1L11 花崎 浩太, 高塚 和夫 (東大院総合文化)  
一般化した Floquet 法による強レーザー場中の電子-核非断熱動力学
- 1L12 斉田 謙一郎, Dmitrii V. Shalashilin (リーズ大化)  
多配置 Ehrenfest 法による非断熱化学動力学
- 1L13 山田 篤志 (名大院工), 山内 隆義 (名大院工), 岡崎 進 (名大院工), 大戸 達彦 (東大院工), 山下 晃一 (東大院工), 渡邊 一也 (京大院理), 松本 吉泰 (京大院理)  
経路積分影響関数理論を用いた銅基板表面上のセシウム原子の位相緩和およびエネルギー緩和の研究
- 1L14 金 賢得 (京大院理), 小林 洋一 (トロント大化学), 玉井 尚登 (関学理工)  
*Evidence of Phonon-Assisted Auger Recombination and Multiple Exciton Generation in Semiconductor Quantum Dots Revealed by Temperature-Dependent Phonon Dynamics*
- 1L15 小泉 健一 (東大院工), Mauro Boero (IPCMS), 重田 育照 (阪大基礎工), 押山 淳 (東大院工)  
*Car-Parrinello 分子動力学法によるグラフェン表面の酸素プラズマエッチングの反応機構とその自由エネルギーバリアの解明*

17:00-18:30 ポスターセッション 1 (あいれふ 1F, あいれふプラザ)

<< 5 月 16 日(木) >>

9:30-10:45 口頭発表 D

座長:中田彩子

- 2L01 杉本 学, 岩根 陵 (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
- 2L02 三嶋 謙二 (東大先端研), 木下 卓巳 (東大先端研), 林 倫年 (台湾大学擬態中心), 瀬川 浩司 (東大先端研), 山下 晃一 (東大院工), Sheng Hsien Lin (National Chiao Tung University)  
スピン-軌道相互作用を考慮したルテニウム錯体吸収スペクトルの摂動計算
- 2L03 森田 将人, 藪下 聡 (慶應大理工)  
基底関数の軌道指数を用いた振動数依存分極率の解析接続法による光イオン化断面積の変分的計算
- 2L04 中條 恵理華, 増田 友秀, 藪下 聡 (慶大院理工)  
 $Ln(COT)_2$  錯体 ( $Ln=La\sim Lu$ ) の電子状態に関する理論的研究
- 2L05 畑中 美穂 (京大福井謙一研究セ), 前田 理 (北大院理), 諸熊 奎治 (京大福井謙一研究セ)  
ランタノイド触媒を用いる水中向山アルドール反応の機構と立体選択性

10:45-11:00 休憩

11:00-12:00 口頭発表 E

座長：杉本学

- 2L06 山崎 馨, 新津 直幸, 中村 堯祉, 菅野 学, 河野 裕彦 (東北大院理)  
高強度近赤外パルスによるフラーレン  $C_{60}$  の分子内振動エネルギー再分配過程の制御
- 2L07 高橋 まさえ (東北大院農)  
分散力補正第一原理計算と弱い水素結合のテラヘルツ帯伸縮振動
- 2L08 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), Sotiris S Xantheas (PNNL)  
 $\alpha$ -,  $\beta$ -,  $\gamma$ -シクロデキストリンの分子内及び分子間相互作用に関する理論化学的研究
- 2L09 中田 彩子 (物材機構), D. R. Bowler (ロンドン大), 宮崎 剛 (物材機構)  
第一原理  $O(N)$  計算プログラム CONQUEST における局所軌道の最適化手法の開発

12:00-13:30 休憩

13:30-15:00 ポスターセッション2(あいろん1F, あいろんプラザ)

15:00-16:45 口頭発表 F

座長:常田貴夫

- 2L10 佐甲 徳栄 (日大理工)  
二電子原子における共役フェルミ孔と角度相関
- 2L11 小林 正人 (早大高等研)  
Hartree-Fock-Bogoliubov 法を用いた量子化学計算の検討
- 2L12 小柳 勝彦, 北 幸海, 山田 健太, 川島 雪生, 立川 仁典 (横浜市大院生命ナノ)  
エキゾチック分子系の理論化学

座長:佐藤啓文

- 2L13 重田 育照 (阪大院基礎工・CREST JST), 馬場 剛史 (阪大院基礎工), 奥野 克樹 (阪大院基礎工), 桑原 弘幸 (阪大院基礎工), 中村 亮太 (阪大院基礎工), 岸 亮平 (阪大院基礎工), 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2
- 2L14 常田 貴夫 (山梨大燃研), 中田 彩子 (物材研)  
内殻・価電子軌道エネルギーを定量的に与える理論
- 2L15 岩田 末廣 (慶應大理工)  
水クラスター( $H_2O$ )<sub>n</sub> ( $n \leq 16$ )の水素結合ネットワーク内の水分子のタイプと分散項・電荷移動項の相関
- 2L16 吉澤 一成, 瀬本 貴之, 辻 雄太 (九大先導研)  
接着の分子理論

17:00-18:00 理論化学研究会総会

18:30-20:30 懇親会

於・やさい家めい BASSIN

福岡市中央区1-9-6 3 プラザホテル天神1F

TEL 092-739-3210

<< 5月17日(金) >>

9:30-10:45 口頭発表 G

座長:市川和秀

3L01 大西 拓 (三重大院工)

量子化学計算によるナトリウムイオン伝導体のマテリアルデザイン

3L02 飯田 健二, 安池 智一, 信定 克幸 (分子研)

開放系に対する量子化学的手法を用いた金電極への銀イオンのアンダーポテンシャルデポジションに関する理論的研究

3L03 岩佐 豪, 中嶋 敦 (慶大理工, JST-ERATO)

二成分超原子クラスターの異種二量体・三量体の構造と電子物性

3L04 甲田 信一, 高塚 和夫 (東大院総合文化)

量子散逸系における多次元波動力学の半古典近似

3L05 高 敏 (北大院理), 前田 理 (北大院理), Lyalin Andrey (京大触媒), 武次 徹也 (北大院理)

*Finding chemical bond activation pathway catalyzed by metal clusters: A case study of  $H_2$  dissociation on  $Au_n$  ( $n = 1 - 11$ )*

10:45-11:00 休憩

11:00-12:00 口頭発表 H

座長:武次徹也

3L06 立花 明知 (京大院工)

量子電子スピン渦理論

3L07 瀬波 大土, 立花 明知 (京大院工)

*Rigged QED* に基づく光子の相互作用と時間発展

3L08 市川 和秀, 福田 将大, 立花 明知 (京大院工)

*Rigged QED* における電子質量に対する自己エネルギーの寄与について

3L09 迫田 憲治, 池上 勇人, G. A. Pino, C. Jouvret, C. Dedonder, 関谷 博 (九大院理)

7-アザインドール・水 1 : 3 クラスターの光異性化と励起状態3重プロトン移動

12:00-13:30 休憩

## 13:30-15:00 口頭発表 I

座長:中井浩巳

- 3L10 田村 宏之 (東北大WP I), 濱田 幾太郎 (東北大WP I), Hui Shang (東北大院理), 男庭 一輝 (東北大院理), Tienan Jin (東北大WP I), 浅尾 直樹 (東北大WP I), 山本 嘉則 (東北大WP I), Kanagasekaran Thangavel (東北大院理), 下谷 秀和 (東北大院理), 池田 進 (東北大WP I), 谷垣 勝己 (東北大WP I)  
*有機結晶の発光スペクトルの理論研究:  $\pi$  共役面の湾曲による発光強度の向上*
- 3L11 中村 正人 (日大理工), 市村 淳 (JAXA, 宇宙科学研)  
*多価に帯電した多環芳香族炭化水素クラスターの安定性*
- 3L12 沢邊 恭一, 吉川 幸男, 薩摩 篤 (名大院工)  
 *$CeO_2(110)$  表面におけるシアノピリジンの水和反応に関する理論研究*
- 3L13 Giorgi Giacomo (東大院工, 東大先端研), 藤沢 潤一 (東大先端研), 瀬川 浩司 (東大先端研), 山下 晃一 (東大院工)  
*Unraveling the Adsorption Mechanism of Aromatic and Aliphatic Diols on  $TiO_2$  Surface: A DFT analysis*
- 3L14 神坂 英幸 (東大院理), 水口 奈々子 (東大院工), 山下 晃一 (東大院工), 長谷川 哲也 (東大院理)  
*第一原理計算を用いた F ドープ  $TiO_2$  系のキャリア活性化率と  $TiOF_2$  生成の熱力学*
- 3L15 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)  
*高スピンナイトレン化合物の零磁場分裂テンソルにおける重原子効果の理論的研究*

## ポスターセッション1 (5月15日 17:00~18:30)

- 1P01 土井富 一城 (九大先導研), 蒲池 高志 (九大先導研), 虎谷 哲夫 (岡山大工), 吉澤 一成 (九大先導研)  
*QM/MM 計算による変異型ジオールデヒドラーゼの解析*
- 1P02 大村 周 (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), 河野 裕彦 (東北大院理), 小関 史朗 (大阪府大院理)  
*高次高調波発生における時間依存分子軌道の多電子ダイナミクス*
- 1P03 木下 啓二, 川上 貴資, 伊藤 章, 吉村 翔平, 北河 康隆, 山中 秀介, 奥村 光隆 (阪大院理)  
*フェナレニル骨格を持つ芳香族炭化水素の電気伝導性に関する理論研究*
- 1P04 篠原 大明, 工藤 貴子 (群馬大院理工)  
*密度汎関数法による環状シロキサン化合物の励起エネルギーに対する水溶媒および置換基効果の研究*
- 1P05 大野 公一 (東北大院理)  
*マルチノード対応 GRRM プログラムの開発*
- 1P06 Lucie Szabov (カレル大/物材機構), Oleksander Stetsovych (カレル大), Filip Dvorak (カレル大), Matteo Farnesi Camellone (CNR DEMOCRITOS,IOM/SISSA), Josef Myslivecek (カレル大), Vladimir Matolin (カレル大), Stefano Fabris (CNR DEMOCRITOS, IOM/SISSA), Yoshitaka Tateyama (物材機構/JST さきがけ)  
*DFT+U study of Cu/CeO<sub>2</sub> model catalysts*
- 1P07 堀 優太, 井田 朋智, 水野 元博 (金沢大院自然)  
*分子二量体間のプロトン移動における透熱ポテンシャル*
- 1P08 奥野 克樹, 重田 育照, 岸 亮平, 中野 雅由 (阪大院基礎工)  
*ジアリールエテン誘導体の熱的安定性と芳香族性の相関*
- 1P09 太田 千裕 (お茶大理), 大塚 美穂 (お茶大院人間文化創成科学), 土田 敦子 (お茶大院人間文化創成科学), 池田 洋輔 (中大理工), 伊藤 彰 (中大理工), 武藤 雄一郎 (東理大理), 石井 洋一 (中大理工), 鷹野 景子 (お茶大院人間文化創成科学)  
*Ru 錯体における内部アルキン/ビニリデン異性化反応の理論的研究 -配位子の立体的および電子的效果-*
- 1P10 井田 朋智 (金沢大院自然)  
*電子伝播関数法におけるスピンスケール補正*
- 1P11 塚本 晋也, 榊 茂好 (京大福井謙一研究セ)  
*ボランあるいはシリル配位子を軸上に持つ三方両錘型コバルトおよび鉄錯体の CASSCF 研究*
- 1P12 山口 真 (FC-Cubic), 大平 昭博 (産総研)  
*電解質膜中の二核鉄(III)錯体の密度汎関数法計算*
- 1P13 新見 佳祐 (北大院総合化学), 中山 哲 (北大院理), 小野ゆり子 (北大院理), 武次 徹也 (北大院理)  
*マトリックス中における希ガス化合物の第一原理スペクトルシミュレーション*
- 1P14 伊藤 章, 川上 貴資, 木下 啓二, 吉村 翔平, 北河 康隆, 山中秀介, 奥村 光隆 (阪大院理)  
*分子磁性体 Pd(dmit)<sub>2</sub> のラマン・IR スペクトルに関する分子軌道法を用いた解析*
- 1P15 中島 薫, 中嶋 克宏, 大槻 幸義, 河野 裕彦 (東北大院理)  
*最適レーザーパルスによる同位体選択的な分子整列*

- 1P16 山木 大輔 (RIST)  
差密度行列解析の置換基効果・分子間相互作用への適用
- 1P17 緒方 勇大, 大道 雅史, 川島 雪生, 立川 仁典 (横浜市大生命ナノ)  
*ab initio* 経路積分分子動力学法を用いた低障壁水素結合を持つプロトン化リシンの解析
- 1P18 福田 将大, 市川 和秀, 立花 明知 (京大院工)  
*Rigged QED* に基づくスピントルクダイナミクスと分子キラリティの理論的研究
- 1P19 佐藤 彩 (北大院総合化学), 原渕 祐 (北大院理), 大谷 優介 (理研 AICS), 武次 徹也 (北大院理)  
励起プロトン移動によるトンネル分裂の第一原理計算: トロポロンへの適用
- 1P20 埴崎 寛雄, 市川 和秀, 立花 明知 (京大院工)  
電子ストレステンソル密度を用いた結合次数についての理論的研究
- 1P21 村岡 慧, 守橋 健二 (筑波大院化)  
制約密度汎関数計算を用いた極性溶媒中の分子内電子移動過程
- 1P22 吉田 将隆, 中島 薫, 大槻 幸義, 河野 裕彦 (東北大院理)  
フェムト秒パルスと THz パルスを組み合わせた CO 分子の配向制御: 最適化シミュレーションとモデルパルス解析
- 1P23 岡井 昌幸 (北大院総合化学), 中山 哲 (北大院理), 山崎 祥平 (弘前大院理工), 武次 徹也 (北大院理)  
QM/MM-MD シミュレーションによるチミン分子の光励起緩和過程に関する理論的研究
- 1P24 石橋 千晶 (千葉工大院工), 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)  
 $F(H_2O)_n^-$  および  $Cl(H_2O)_n^-$  ( $n=1-7$ ) クラスターの水素結合における電荷移動項と分散項の関係
- 1P25 吉村 翔平, 伊藤 章, 木下 啓二, 川上 貴資, 北河 康隆, 山中 秀介, 奥村 光隆 (阪大院理)  
金属錯体のゼロ磁場分裂定数  $D$  の分子軌道法による計算
- 1P26 福田 幸太郎 (阪大院基礎工), Benoît CHAMPAGNE (ナミュール大学), 信末 俊平 (阪大院基礎工), 清水 章弘 (阪大院基礎工), 戸部 義人 (阪大院基礎工), 中野 雅由 (阪大院基礎工)  
五員環及び六員環からなる二次元環状縮環共役炭化水素の開殻性及び第二超分極率に関する理論的研究
- 1P27 北河 康隆, 畑ヶ 宇宙, 松井 亨, 川上 貴資, 山中 秀介, 奥村 光隆 (阪大院理)  
CuM 錯体の有効交換積分値計算における汎関数および基底関数依存性
- 1P28 長谷川 淳也 (北大触媒センター)  
凝集系における分子の励起状態に関する理論的研究
- 1P29 西川 直宏 (名大院理), Phuong Nguyen (IBPC), Philippe Dereumaux (IBPC), 岡本 祐幸 (名大院理)  
フォールディング病メカニズム解明に向けた分子動力学計算
- 1P30 伊藤 聡一, 松井 啓史, 中野 雅由 (阪大院基)  
オリゴアセンの一電子および二電子励起状態に関する光学特性のサイズ依存性について
- 1P31 小木曾 陽司, 瀬波 大土, 立花 明知 (京大院工)  
電気双極子モーメントとスピントルクについての理論的研究

- 1P32 高田 崇二郎, 瀬波 大土, 立花 明知 (京大院工)  
*Rigged QED* に基づく光子による相互作用についての理論的研究
- 1P33 松岡 貴英, 藪下 聡 (慶大院理工)  
半古典論による *ICI* 分子の光解離過程における量子干渉効果の評価
- 1P34 中野 匡彦 (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)  
一般化スピン軌道に対応した分割統治法に基づく大規模電子相関計算手法の開発
- 1P35 田中 友貴, 高田 崇二郎, 瀬波 大土, 立花 明知 (京大院工)  
*Primary Rigged QED* に基づく量子状態の時間発展に関する研究
- 1P36 北村 勇吉, 竹中 規雄, 長岡 正隆 (名大・情報科学)  
微視的溶媒和を考慮した溶液中振動数解析ルーチンの開発: 中性型グリシン配座異性体への適用
- 1P37 藤原 慎吾, 秋山 良 (九大院理)  
生理条件での酸性タンパク質の会合における多価カチオンの効果
- 1P38 久保田 陽二 (九大理), 吉森 明 (九大理), 松林 伸幸 (京大化研), 鈴木 誠 (東北大工), 秋山 良 (九大理)  
分子動力学シミュレーションで探るハイパーモバイル水
- 1P39 阿部 穰里 (首都大), G. Gopakumar (首都大), B. P. Das (Indian Institute of Astrophysics), 舘脇 洋 (名古屋市大), D. Mukherjee (Indian Association for the Cultivation of Science), 波田 雅彦 (首都大)  
電子の電気双極子モーメント(*EDM*)探査のための 4 成分相対論的分子理論法の確立と応用



## ポスターセッション 2(5月16日 13:30~15:00)

- 2P01 菅野 龍馬, 井田 朋智, 瀬尾 倂介, 水野 元博 (金沢大院自然)  
分子動力学法による *Ferredoxin-NADP<sup>+</sup>-Reductase* の変異体構造解析
- 2P02 白井 聡一, 前川 佳史, 後藤 康友, 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 Ru 錯体の電子状態解析
- 2P03 Zdenek Futera (慶大理工/物材機構 MANA), 袖山 慶太郎 (京大 ESICB/物材機構 MANA), 館山 佳尚 (物材機構/JST さきがけ/京大 ESICB)  
*Double-QM/MM Method and its Application to Donor-Acceptor Electron Transfer in Solution*
- 2P04 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
- 2P05 後瀉 敬介 (富士フイルム株式会社), 袖山 慶太郎 (京都大 触媒・電池ユニット, 物質・材料研究機構 MANA), 奥野 幸洋 (富士フイルム株式会社), 館山 佳尚 (京都大 触媒・電池ユニット, 物質・材料研究機構 MANA, JST さきがけ)  
第一原理分子動力学計算によるリチウムイオン二次電池電解液及び添加剤の分解反応解析
- 2P06 田代 基慶 (分子研), 江原 正博 (分子研), 久間 晋 (岡山大極限量子), 宮本 祐樹 (岡山大自然), 笹尾 登 (岡山大極限量子), 植竹 智 (岡山大理), 吉村 太彦 (岡山大理)  
*Molecular iodine for neutrino mass spectroscopy: ab initio calculation of spectral rate*
- 2P07 柴山 総一郎, 安藤 嘉倫, 岡崎 進 (名大院工)  
分子動力学計算を用いた胸腺細胞の癌化に伴う細胞膜物性変化の起源の解明
- 2P08 石村 和也 (分子研)  
超並列量子化学計算プログラムの開発
- 2P09 小関 史朗, 鍵田 侑希, 麻田 俊雄 (阪府大院理)  
OLED に用いられる白金錯体の燐光過程に関する理論的研究
- 2P10 嶺澤 範行 (京大福井セ)  
線形応答自由エネルギーと *SF-TDDFT* 法を組み合わせた最小自由エネルギー交差点の探索
- 2P11 酒井 章吾, 矢田 睦美 (岐阜大工)  
光環化付加反応機構の位置選択性に関する理論的研究: 2-ピリドンとアクリル酸メチル
- 2P12 新井 健太, 大槻 幸義, 河野 裕彦 (東北大院理)  
光格子に捕捉された *KCs* 分子量子ビットに対するミリ秒演算パルスの数値設計
- 2P13 樋口 恒 (東大院工), 平野 敏行 (東大生研), 佐藤 文俊 (東大生研)  
グリッドフリー交換相関計算法の精度に関する研究
- 2P14 高木 望, 榊 茂好 (京大・福井謙一記念研究センター)  
ゲルマニウム(II)ヒドリド化合物による二酸化炭素およびイミン転換触媒サイクルの理論予測
- 2P15 中野 雅由, 福田 幸太郎, 伊藤 聡一, 松井 啓史, 米田 京平, 岸亮平, 重田 育照 (阪大院基礎工)  
含典型元素四員環ジラジカル系の開殻一重項性と三次非線形光学物性
- 2P16 岸 亮平, 村田 裕介, 重田 育照, 中野 雅由 (阪大院基礎工)  
時間依存密度汎関数法に基づく量子マスター方程式法による動的第一超分極率の計算・解析法の開発

- 2P17 宮本 英宜, 福田 将大, 市川 和秀, 立花 明知 (京大院工)  
曲がった空間における *Rigged QED* の理論的研究
- 2P18 松崎 黎, 藪下 聡 (慶大院理工)  
複素基底関数法における基底関数セットの最適化
- 2P19 小池 千明 (北大院総合化学), 前田 理 (北大院理), 武次 徹也 (北大院理)  
反応経路自動探索法によるオレフィンメタセシス反応経路の配位子依存性の検討
- 2P20 相川 小春, 鞆津 典夫, 守橋 健二 (筑波大院化)  
CDFT 計算を用いた PPV 三重項電子移動過程の配向依存性
- 2P21 福田 良一 (分子科学研究所) 江原 正博 (計算科学研究センター)  
*Theoretical study on electronic excited states of free-base porphyrin-Ar<sub>2</sub> van der Waals complexes*
- 2P22 中垣 雅之, 青野 信治, 榎 茂好 (京大福井セ)  
金属サレン錯体の電子構造: 局在・非局在性に関する支配因子
- 2P23 米澤 康滋 (近大先端研)  
マルチカノニカル分子動力学法による RNA ポリメラーゼ-C 末端領域の構造空間探索
- 2P24 菅原 道彦 (慶大院理工)  
位相緩和制御のためのレーザーパルス設計
- 2P25 小山田 隆行, 立川 仁典 (横浜市大院・生命ナノ)  
アルカリ金属水素化分子への陽電子束縛機構における電子-陽電子相関の役割
- 2P26 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)  
グローバル反応経路地図の上での反応速度解析: ブタジエンの光解離への応用
- 2P27 藤岡 蔵, 北 幸海, 立川 仁典 (横浜市大院理)  
量子モンテカルロ法を用いた多原子分子の高精度振動状態解析
- 2P28 佐々木 岳彦, 松居 幸 (東大院新領域)  
*GRRM 1 1* による Ru 単核錯体の酸化反応機構の研究
- 2P29 村岡 梓 (明大理工), Kamel Boukheddaden (Versailles 大)  
 $Fe_2^+$  白金シアノ錯体結晶の 3 次元構造ナノ粒子における表面効果
- 2P30 澤田 裕 (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), 山門 英雄 (和歌山大システム工), 大野 公一 (豊田理研, 量子化学探索研究所)  
一般化した超球面探索法によるバッキングムポテンシャルを用いた結晶構造探索
- 2P31 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 (2) - 電子的記述子の検討
- 2P32 小川 光博, 岩井 志帆, 隅本 倫徳, 堀 憲次 (山口大院理工)  
QM/MC/FEP 法を用いた Prilezhaev 反応に及ぼす溶媒効果の理論的研究
- 2P33 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)  
随伴座標展開-漸化関係式法に基づく一般縮約ガウス関数に対応した電子反発積分手法の開発
- 2P34 河東田 道夫, 中嶋 隆人 (理研 AICS)  
MP2 法と分散力補正 DFT 法によるナノグラフェン表面間の  $\pi$ - $\pi$  相互作用解析
- 2P35 小野 純一 (分子研), 安藤 耕司 (京大院理)  
水中の水素結合組換えダイナミクスの準量子的波束分子動力学シミュレーション
- 2P36 寺前 裕之 (城西大理), 長岡 伸一 (愛媛大理), 長嶋 雲兵 (産総研)  
分子軌道法による HF, LiH, HeH<sup>+</sup> の双極子モーメント

- 2P37 川畑 雄一, 秋山 良 (九大院理)  
分子シミュレーションを用いたイオンの部分モル体積の評価
- 2P38 井上 頌基, 鈴木 聡, 渡邊 祥弘, 中野 晴之 (九大院理)  
相対論的分子軌道法における種々の2成分法の近似精度について
- 2P39 藤井 洋介, 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イオン結合の理論的研究