

口頭発表

5月20日(水)

座長 山中 秀介

- 10:00 1L01 ○河東田 道夫(理研 AICS)、中嶋 隆人(理研 AICS)
ペタフロップス級スーパーコンピュータに適した RI-MP2 エネルギー超並列計算アルゴリズム
- 10:15 1L02 ○宋 鍾元(理研 AICS)、平尾 公彦(理研 AICS)
ガウス関数を用いた長距離補正密度汎関数法の加速化
- 10:30 1L03 ○安藤 耕司(京大院理)
量子準量子混合動力学法と確率過程量子による相関効果
休憩(10:45 - 11:00)

座長 石塚 良介

- 11:00 1L04 ○栗崎 以久男(名大院情科、CREST-JST)、高柳 昌芳(名大院情科、CREST-JST)、長岡 正隆(名大院情科、CREST-JST)
トロンビン-基質会合反応にナトリウムイオンが果たす役割
- 11:15 1L05 ○井内 哲(名大院情報科学)、古賀 伸明(名大院情報科学)
スピン状態変化を伴う鉄(II)錯体の励起状態ダイナミクスの分子動力学シミュレーション研究

座長 安藤 耕司

- 11:30 1L06 張 致遠(筑波大計算セ)、原田 隆平(筑波大計算セ)、栢沼 愛(筑波大計算セ)、庄司 光男(筑波大数理)、○重田 育照(筑波大数理)
主成分解析に基づくエントロピー計算に関する一考察
- 11:45 1L07 ○小野 純一(分子研)、高田 彰二(京大院理)、斉藤 真司(分子研、総研大)
多時間相関関数および2次元寿命スペクトルによる階層的構造変化ダイナミクスの解析:
アデニル酸キナーゼへの応用
- 12:00 1L08 ○片岡 洋右(法政大生命)、山田 祐理(東電大理工)
炭化水素の汎用状態方程式と相互作用パラメータの電子数依存性
休憩(12:15 - 13:45)

座長 中嶋 浩之

- 13:45 1L09 ○松井 正冬(京大 ESICB)、榑 茂好(京大 ESICB、京大 FIFC)
 Al_2O_3 および AlPO_4 表面の電子状態と金属クラスターとの相互作用
- 14:00 1L10 ○鳥居 肇(静岡大教育)
水素結合とハロゲン結合による分子振動モードの振動数シフトに関わる理論的解析

座長 重田 育照

- 14:15 1L11 ○辻 雄太(コーネル大)、Roald Hoffmann(コーネル大)、Ramis Movassagh(マサチューセッツ工科大、ノースイースタン大)、Supriyo Datta(パデュー大)
Green 関数の位相が支配する量子干渉現象
- 14:30 1L12 ○Ahmed M. El-Nahas (Faculty of Science, El-Menoufia Univ., IMCE, Kyushu Univ.)、Aleksandar Staykov (WPI-I²CNER)、Kazunari Yoshizawa (IMCE, Kyushu Univ.、WPI-I²CNER)
Electron Transport Through Non-alternant Azulene: DFT, HMO, and NEGF calculations
- 14:45 1L13 ○多田 博一(阪大院基礎工)
単一分子のキャリア輸送特性の計測
休憩(15:00 - 15:15)

座長 中谷 直輝

- 15:15 1L14 ○小林 正人(北大院理)、武次 徹也(北大院理)
有限温度 MP2 法と密度行列 Laplace MP2 法: 関連性と分割統治(DC)計算への適用
- 15:30 1L15 ○中嶋 浩之(量子化学研究協会研究所)、黒川 悠索(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)
有機・無機化合物のシュレーディンガー解の計算: 大きな分子の計算に向けて. I
- 15:45 1L16 ○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)
有機・無機化合物のシュレーディンガー解の計算: 大きな分子の計算に向けて. II

座長 井内 哲

- 16:00 1L17 ○中農 浩史(京大院工、京大 ESICB)、佐藤 啓文(京大院工、京大 ESICB)
平均場 CDFT/MM 法の開発と電子移動反応への応用
- 16:15 1L18 ○兼松 佑典(横浜市大院生命ナノ)、立川 仁典(横浜市大院生命ナノ)
ONIOM(MC_QM:MM)による Photoactive Yellow Protein 内の水素結合の解析
- 16:30 1L19 ○松村 祥宏(京大院工)、佐藤 啓文(京大院工、京大 ESICB)
マスター方程式に基づく八面体型金属カプセル錯体の自己集合過程
休憩(16:45 - 17:00)

座長 中農 浩史

- 17:00 1L20 ○河合 信之輔(静岡大理)、宮崎 裕介(静岡大理)
多自由度系ダイナミクスにおける射影ダイナミクスと環境モード
- 17:15 1L21 岡 真悠子(東大院理)、○神坂 英幸(東大院理)、福村 知昭(東北大院理)、長谷川 哲也(東大院理)
エピタキシャル歪み下における ZrO₂ 系薄膜の構造変化とイオン伝導性に関する第一原理計算

17:30 1L22 ○崔 隆基(産総研)、土田 英二(産総研)、池庄司 民夫(産総研)、大平 昭博(産総研)
固体高分子電解質形燃料電池用電解質膜中で起こるプロトン伝導の第一原理分子動力学シミュレーション

ポスター(17:45 - 19:15)

5月21日(木)

座長 庄司 光男

- 9:00 2L01 ○福田 幸太郎(阪大院基礎工)、中野 雅由(阪大院基礎工)
点電荷 H_4 モデルを用いた対称開殻 $X-\pi-X$ ($X=Donor/Acceptor$) 系の励起プロパティと第二超分極率に関する研究
- 9:15 2L02 ○竹中 規雄(京大 ESICB、名大院情報科学)、鈴木 雄一(名大院情報科学)、酒井 裕史(名大院情報科学)、Purushotham Uppula(名大院情報科学、CREST-JST)、長岡 正隆(京大 ESICB、名大院情報科学、CREST-JST)
二次電池負極表面における固体電解液相間(SEI)膜形成機構の理論的研究
- 9:30 2L03 ○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)
速度論に基づく複雑反応経路網の解析: 異性化反応への応用

座長 松林 伸幸

- 9:45 2L04 ○玉井 良則(福井大院工)
高分子結晶中のキャビティーを利用した高性能 CO_2 分離膜の分子シミュレーション
- 10:00 2L05 ○川勝 年洋(東北大院理)
粒子一連続場ハイブリッド法を用いた高分子/膜系の組織構造と動力学
- 10:15 2L06 肥喜里 志門(横浜市大院生命医)、吉留 崇(東北大院工)、○池口 満徳(横浜市大院生命医)
分子動力学シミュレーションによるエントロピー計算法
- 10:30 2L07 ○金 鋼(新潟大理)
ガラス転移の遅いダイナミクスと動的不均一性: 多点相関関数による解析

休憩(10:45 - 11:00)

座長 塩田 淑仁

- 11:00 2L08 ○畑中 美穂(近大理工)、諸熊 奎治(京大福井謙一記念セ)
発光色が温度に依存するランタノイド化合物: 機構解明と分子設計
- 11:15 2L09 ○鈴木 聡(京大福井謙一記念研究セ)、諸熊 奎治(京大福井謙一記念研究セ)
環境依存発光を示すアセンの消光経路探索
- 11:30 2L10 ○坂口 正貴(立教大理)、福澤 薫(日大松戸歯、東大生産研)、望月 祐志(立教大理、東大生産研)
フラグメント分子軌道計算に基づく光応答タンパク質の励起エネルギーの算定

休憩(11:45 - 13:15)

ポスター(13:15 - 14:45)

座長 畑中 美穂

14:45 2L11 ○大野 公一(東北大院理、量子化学探索研)、佐藤 寛子(国立情報研)、岩本 武明(東北大院理)

炭素の新単体(Prism- C_{2n})2次元周期構造の探索

15:00 2L12 ○寺前 裕之(城西大理)、小宮 和朗(城西大理)、島野 洋祐(城西大薬)、高山 淳(城西大薬)、坂本 武史(城西大薬)

N-メキシ-N-プレニルベンズアミドにおける閉環反応の理論的研究

座長 中野 雅由

15:15 2L13 ○宮坂 博(阪大院基礎工)

高次複合光応答分子系構築のための実験、理論的課題について

15:30 2L14 ○鎌田 賢司(産総研関西セ)

分子構造と二光子吸収特性:実測と理論計算の対比から

15:45 2L15 ○實川 浩一郎(阪大院基礎工)

金ナノ粒子触媒の酸素による活性化

16:00 2L16 ○久保 孝史(阪大院理)、内田 一幸(阪大院理)

フェナレニルラジカルの会合挙動に関する実験的考察

16:15 2L17 三好 宏和(阪大院基礎工)、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)

非交互系一重項ジラジカル性炭化水素の合成と特異な物性

理論化学研究会総会(16:30 -)

懇親会(17:30 - 19:30)

5月22日(金)

座長 河津 励

9:00 3L01 道股 知也(東北大院理)、小林 倫仁(東北大院理)、Wilfredo Credo Chung(東北大院理、DLSU-Manila)、○菅野 学(東北大院理)、瀬高 涉(首都大院都市環境)、河野 裕彦(東北大院理)

フッ素置換回転子を持つ結晶性分子ジャイロスコープのテラヘルツ波駆動ダイナミクス

9:15 3L02 ○藤井 幹也(東大院工)、山下 晃一(東大院工)

非断熱経路積分のエーレンフェスト法への発展

9:30 3L03 ○金 賢得(京大院理、JST さきがけ)

凝縮水素系における核量子性を取り入れた量子分子動力学法の開発

座長 菅野 学

9:45 3L04 ○河津 励(分子研、横市大院生命ナノ)、立川 仁典(横市大院生命ナノ)

フラーレン中の水素分子における同位体効果:経路積分分子動力学法による解析

10:00 3L05 ○伊藤 聡一(阪大院基礎工)、中野 雅由(阪大院基礎工)

一重項分裂初期過程の量子ダイナミクス:振電相互作用の効果

10:15 3L06 ○水野 雄太(東大院総合文化)、新崎 康樹(東大院総合文化)、高塚 和夫(東大院総合文化)

レーザー場によって駆動された非断熱ダイナミクスからの誘導輻射スペクトログラムによる核波束ダイナミクスの観測

休憩(10:30 - 10:45)

座長 杉崎 研司

10:45 3L07 ○中野 匡彦(早大先進理工)、中村 亮太(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)

Kramers 制限を課した相対論的開殻 Hartree-Fock 法の開発

11:00 3L08 ○米田 京平(奈良高専物質工)、福田 幸太郎(阪大院基礎工)、松井 啓史(阪大院基礎工)、中野 雅由(阪大院基礎工)

フェナレニルラジカル二量体における三次非線形光学物性のドナー/アクセプター置換基効果に関する理論研究

11:15 3L09 ○松井 啓史(阪大院基礎工)、福田 幸太郎(阪大院基礎工)、米田 京平(奈良高専物質工)、中野 雅由(阪大院基礎工)

π スタック型チアジラジカル多量体の開殻一重項性と第二超分極率

座長 石村 和也

11:30 3L10 ○岩佐 豪(北大院理)、武次 徹也(北大院理)

非一様電場と分子振動の相互作用と近接場赤外吸収分光への応用

11:45 3L11 ○黒木 菜保子(お茶大院 人間文化創成科学)、川島 愛咲(お茶大院 人間文化創成科学)、森 寛敏(お茶大院 人間文化創成科学)

有効フラグメントポテンシャル法による分子間相互作用の記述精度:ハロゲン結合の場合

12:00 3L12 ○土持 崇嗣(神戸大院システム情報)、Troy Van Voorhis (MIT Chemistry)

時間依存 Projected Hartree-Fock による縮退系の励起状態計算

休憩(12:15 - 13:45)

座長 藤井 幹也

- 13:45 3L13 ○竹内 嵩(日大理工)、大貫 進一郎(日大理工)、佐甲 徳栄(日大理工)
Maxwell-Schrödinger 方程式混合数値解析法による最適制御パルス設計:近接場による入射パルスの局所的な修正
- 14:00 3L14 ○斉田 謙一郎(エディンバラ大)、Adam Kirrander(エディンバラ大)、Dmitrii V. Shalashilin (リーズ大)
AI-MCE 法を用いたシクロヘキサジエン光開環反応ダイナミクスの理論的研究
- 14:15 3L15 新井 健太(東北大院理)、○大槻 幸義(東北大院理)
分子を使った量子演算に対するスケーラブルな実装シミュレーション:縮約ダイナミクスアプローチ

座長 福田 良一

- 14:30 3L16 ○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)
水 6 量体アニオンクラスターの水素結合ネットワークと垂直電子脱離エネルギー
- 14:45 3L17 ○杉崎 研司(阪市大院理)、久本 梨恵(阪市大理)、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)
自然軌道を基にした Pederson-Khanna 法(NOB-PK 法)による Mn(III)錯体の零磁場分裂テンソル計算

休憩(15:00 - 15:15)

座長 赤瀬 大

- 15:15 3L18 ○石村 和也(分子研)
大規模並列量子化学計算プログラム SMASH の開発と公開
- 15:30 3L19 ○福田 良一(分子科学研究所)、江原 正博(分子科学研究所)、Roberto Gammi(パルマ大学)
PCM SAC-CI 法による超高压力下にある分子のモデル化

座長 北河 康隆

- 15:45 3L20 ○立花 明知(京大院工)
量子電子スピン渦理論の実時間シミュレーションにおける中西理論とその課題
- 16:00 3L21 ○瀬波 大土(京大院工)、立花 明知(京大院工)
Rigged QED に基づく演算子と量子状態の時間発展
- 16:15 3L22 ○市川 和秀(京大院工)、福田 将大(京大院工)、内藤 健人(京大院工)、立花 明知(京大院工)
QED による時間発展:演算子の時間発展と波束の時間発展

座長 岸 亮平

16:30 3L23 ○福田 将大(京大院工)、曾我 康太(京大院工)、瀬波 大土(京大院工)、立花 明知(京大院工)

分子内における局所スピントルク分布とその起源

16:45 3L24 ○埜崎 寛雄(京大院工)、瀬波 大土(京大院工)、市川 和秀(京大院工)、立花 明知(京大院工)

ベンゼンジチオールを対象とした局所電気伝導率の計算方法の研究

ポスター発表(1日目)

5月20日(水)

- 1P01 ○吉長 晴信(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)、
松下 武司(JNC Co., RIMED)
配位子および置換基効果に基づく青色燐光 Ir 錯体の理論設計
- 1P02 ○満田 祐樹(阪大院理)、北畑 雅弘(東レ)、川上 智教(東レ)、茂本 勇(東レ)、松林 伸幸(阪大
院基礎工)
ERmod を利用した水・オクタノール分配係数の推算と TI 法との比較
- 1P03 ○宮崎 玲(北大触セ)、中谷 直輝(北大触セ)、長谷川 淳也(北大触セ)、原 賢二(北大触セ)、福
岡 淳(北大触セ)
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
- 1P04 ○大保 政貴(北大触セ)、中山 哲(北大触セ)、長谷川 淳也(北大触セ)、依馬 正(岡大院自然科
学)
第四級アンモニウムヒドロキッド触媒による CO₂ 固定のメカニズム:自由エネルギープロファイルに基
づく解析
- 1P05 ○沢邊 恭一(名大院工)、馬原 優治(名大院工)、大山 順也(名大院工)、薩摩 篤(名大院工)
Ni@Ag バイメタル触媒の CO 酸化反応に関する密度汎関数法計算
- 1P06 ○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
- 1P07 ○五十幡 康弘(早大先進理工)、塚本 祐介(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)
大規模系に対するプロトン束縛エネルギー計算手法の開発とその応用
- 1P08 ○平野 敏行(東大生研)、佐藤 文俊(東大生研)
自由なフラグメント分割可能な QCLO 法プログラムの開発
- 1P09 ○K.S. Sandhya(Nagoya Univ.)、N. Koga(Nagoya Univ.)、M. Nagaoka(Nagoya Univ.)
Stereochemistry of propylene polymerization on C2 symmetric [SiH₂(Ind)₂ZrCH₃]⁺
- 1P10 ○谷内 公紀(京大院工)、埜崎 寛雄(京大院工)、市川 和秀(京大院工)、立花 明知(京大院工)
二原子分子における電子ストレステンソル密度の核間距離依存性の理論的研究
- 1P11 ○佐藤 寛子(国立情報研)、小田 朋宏((株)SRA)、中小路 久美代(京大学際融合)、宇野 毅明
(国立情報研)、岩田 覚(東大情報理工)、大野 公一(東北大院理、量子化学探索研)
データケミストリ:理論化学データを基盤とするインフォマティクスによる新規物質・反応経路の発見
- 1P12 ○金 泰煥(東大院工)、平野 敏行(東大生研)、佐藤 文俊(東大生研)
機械学習を用いたカノニカル分子軌道計算に基づく新規タンパク質形式電荷に関する研究
- 1P13 ○宮崎 かすみ(お茶大院人間文化)、松田 彩(お茶大院人間文化)、森 寛敏(お茶大院人間文化、
JST-CREST)
水素吸蔵特性を示す Ag-Rh 合金ナノ粒子の電子構造: Fermi-Dirac 統計を取り入れた密度汎関数
計算による解析

- 1P14 ○内藤 健人(京大院工)、埜崎 寛雄(京大院工)、市川 和秀(京大院工)、立花 明知(京大院工)
二原子分子の領域エネルギーの核間距離依存性に関する研究
- 1P15 ○草鹿 あゆみ(阪大蛋白研、阪大院理)、中村 春木(阪大蛋白研)、鷹野 優(阪大蛋白研、広市大院情報)
Molecular Tailoring Approach による α ヘリックスに働く相互作用の量子化学的研究
- 1P16 ○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)
電子の電気双極子モーメントの存在により分子内部に誘起されるスピントルク
- 1P17 ○屋内 一馬(北大院総化)、長谷川 淳也(北大触セ)
凝集系における分子の励起状態と分子間相互作用の理論的解析
- 1P18 ○中谷 直輝(北大触媒セ)、長谷川 淳也(北大触媒セ)
密度行列繰込み群による鉄-硫黄クラスターの構造およびスピン状態に関する理論的研究
- 1P19 ○岩撫 徹(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)
核・電子軌道法による陽電子消滅 γ 線スペクトルの系統的解析
- 1P20 ○高椋 章太(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)
遷移金属カルベンカチオンにおける光学特性についての研究
- 1P21 ○松田 彩(お茶大院・人間文化創成科学)、Mariusz Klobukowski(University of Alberta)、森 寛敏(お茶大院・人間文化創成科学、JST-CREST)
三フッ化ランタニドの幾何構造: 4f-in-core MCP 法を応用した大規模量子化学計算による検討
- 1P22 ○江原 正博(分子研)、福田 良一(分子研)、Thomas Sommerfeld(Southeastern Louisiana Univ.)
分子の電子共鳴状態に関する理論研究: Voronoi ポテンシャルを用いた CAP/SAC-CI 法の開発と応用
- 1P23 ○沖村 彰彦(阪大院工)、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
- 1P24 ○安藤 寛太(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)
原子分極の応答核の導入および Class C β -lactamase のアシル化反応への応用
- 1P25 ○大場 優生(横市大院生命ナノ)、河津 励(横市大院生命ナノ)、立川 仁典(横市大院生命ナノ)
経路積分分子動力学法を用いたミューオニウム化アセトンの解析
- 1P26 ○庄司 光男(筑波大数理)、栢沼 愛(筑波大計算セ)、梅田 宏明(筑波大計算セ)、重田 育照(筑波大数理)
分割統治法を用いた初期電子密度行列の構築
- 1P27 ○川上 貴資(阪大院理)、木下 啓二、齋藤 徹、山中 秀介、奥村 光隆、山口 兆
単核錯体の零磁場分裂定数 D の分子軌道法による算出と多変量解析による解析
- 1P28 ○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)
ハロゲン-水クラスター中におけるイオン-水間および水-水間結合の強さを決める因子
- 1P29 ○山下 大貴(阪府大院理)、麻田 俊雄(阪府大院理)、小関 史朗(阪府大院理)
リチウムイオン電池における電解液分解反応に対する電解質分子の影響の理論的解析

- 1P30 ○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)
分子配向の最適化と回転波束からの時間分解 X 線回折像のシミュレーション
- 1P31 ○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)
二重螺旋構造をもつモデル DNA 鎖切断過程の動力学
- 1P32 ○中島 薫(東北大院理)、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
大院理)
パルス伝播効果を含めた最適制御法の定式化: $C^{16}O/C^{18}O$ 同位体混合ガスへの適用
- 1P33 ○佐々木 岳彦(東大院新領域)、山口 有朋(産総研・JST さきがけ)、白井 誠之(岩手大工)
GRRM による高温水中のソルビトールの反応の研究
- 1P34 ○松崎 黎(慶大院理工)、藪下 聡(慶大院理工)
 α -積の意味で規格化された複素 STO-NG 基底の作成とその光イオン化断面積の計算への応用
- 1P35 ○中野 雅由(阪大院基礎工)
非対称開殻分子系の励起エネルギー・励起プロパティの開殻性および磁氣的相互作用との関係
- 1P36 ○米澤 康滋(近大先端研、CREST)
分子動力学シミュレーションによる深海生物 DHFR のダイナミックス研究
- 1P37 ○原渕 祐(北大院理、JST CREST)、武次 徹也(北大院理、JST CREST)、前田 理(北大院理、
JST CREST)
Franck-Condon 領域近傍の最小エネルギー円錐交差・項間交差構造の系統的自動探索: 蛍光量子
収率の予測へ向けて
- 1P38 ○田代 基慶(理研計算科学研究機構)、今村 穰(理研計算科学研究機構)、河東田 道夫(理研計
算科学研究機構)、中嶋 隆人(理研計算科学研究機構)
有機薄膜太陽電池に関連する理論的研究
- 1P39 ○山本 梨奈(北大院、総合化学)、原渕 祐(北大院、理、JST CREST)、武次 徹也(北大院、理)
Spin Flip -TDDFT/MD 法に基づく cis-ジメチルスチルベン光異性化に関する理論的研究
- 1P40 ○佐藤 壮太(北大院総合化学)、原渕 祐(北大院理、JST CREST)、武次 徹也(北大院理)、飯窪
亮(北大院工)、藤原 丈久(北大院工)、関川 太郎(北大院工)
ab initio 分子動力学法に基づく 1,2-ブタジエンの超高速失活過程に関する理論的研究
- 1P41 ○石塚 良介(阪大院基礎工)、松林 伸幸(阪大院基礎工)
イオン液体による二酸化炭素吸収の自由エネルギー解析

ポスター発表(2日目)

5月21日(木)

- 2P01 ○中川 節子(金城学院大)、Oliver Weingart、Christel Marian(Heinrich Heine Univ.)
青色光受容体 LOV ドメインの光サイクル反応に関する QM/MM 研究
- 2P02 原山 麻奈美(東北大理)、○岸本 直樹(東北大院理)、大野 公一(量子化学探索研究所、東北大院理)
GRRMを用いたアミノ酸の配座異性体と遷移状態の効率的自動探索
- 2P03 加藤 幸一郎(みずほ情報総研)、福澤 薫(日大松戸歯、東大生産研)、○望月 祐志(立教大理、東大生産研)
フラグメント分子軌道計算に基づく固体表面とペプチドの相互作用解析
- 2P04 ○高木 望(京大 ESICB)、石村 和也(分子研)、松井 正冬(京大 ESICB)、福田 良一(分子研、京大 ESICB)、松井 亨(理研 AICS)、中嶋 隆人(理研 AICS)、江原 正博(分子研、京大 ESICB)、榊 茂好(京大福井セ、京大 ESICB)
Cu および Cu-Ru 混合金属微粒子の構造、電子状態と CO、NO 吸着特性に関する理論研究
- 2P05 高橋 博一(慶大理工)、高橋 開人(台湾中研院原分所)、○藪下 聡(慶大理工)
量子論および半古典論による分子内 OH 伸縮振動の基音及び高次倍音吸収強度
- 2P06 ○栢沼 愛(筑波大計算セ)、庄司 光男(筑波大数理)、重田 育照(筑波大数理)
ニトリル水和酵素の触媒機構に関する理論的研究
- 2P07 ○時子山 宏明(和歌山大)、山門 英雄(和歌山大)、大野 公一(東北大院理、量子化学探索研)
多角柱型炭素一次元周期構造の探索
- 2P08 ○高木 牧人(北大院総化)、前田 理(北大院理)、武次 徹也(北大院理)
AFIR 法と周期境界条件を用いた結晶構造探索
- 2P09 ○小國 敦(阪大院理)、多田 幸平(阪大院理)、坂田 晃平(阪大院理)、近藤 勇大(阪大院理)、斉藤 徹(阪大院理)、山中 秀介(阪大院理)、川上 貴資(阪大院理)、奥村 光隆(阪大院理)
金触媒を用いたグルコース酸化の理論的研究
- 2P10 ○宮本 洋雄(阪大院基礎工)、横田 泰之(阪大院基礎工)、今西 哲士(阪大院基礎工)、稲垣 耕司(阪大院工)、森川 良忠(阪大院工)、福井 賢一(阪大院基礎工)
古典分子動力学法によるイオン液体／基板界面における分子の秩序化と運動性の評価
- 2P11 ○速水 雅生(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)
重原子化合物の構造最適化計算のための高速な電子反発積分の微分計算アルゴリズムの開発
- 2P12 ○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)
高強度超短パルスによる分子の高次高調波発生の自然軌道解析と制御
- 2P13 ○岩瀬 響(首都大学東京)、橋本 健朗(首都大学東京)
曲線座標系を用いた精密振動解析理論

- 2P14 ○齋藤 徹(阪大院理)、川上 貴資(阪大院理)、山中 秀介(阪大院理)、奥村 光隆(阪大院理)
ケルセチナーゼ模倣錯体の反応機構の理論的研究
- 2P15 ○宇田川 太郎(岐阜大工)、鈴木 机倫(横浜市大院生命ナノ)、立川 仁典(横浜市大院生命ナノ)
多成分分子軌道-NEB 法の開発と分子内水素移動反応への応用
- 2P16 ○藤本 和士(名大院工)、Faten Hakim(名大院工)、小嶋 秀和(名大院工)、安藤 嘉倫(名大院工・
計算セ)、吉井 範行(名大院工・計算セ)、篠田 渉(名大院工)、岡崎 進(名大院工)
ウィルス capsid をモデル化した荷電球殻内における電解質水溶液の物理化学的研究
- 2P17 ○稲田 健(京大院工)、福田 将大(京大院工)、内藤 健人(京大院工)、市川 和秀(京大院工)、立
花 明知(京大院工)
4 成分 Rigged QED における遅延ポテンシャル項の二重指数関数型変換を用いた数値積分につい
て
- 2P18 ○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)
位相空間表示に基づくガウス基底核波束動力学法の改良
- 2P19 ○塩田 淑仁(九大先導研)、高橋 翔也(九大先導研)、小島 隆彦(筑波大数理物質)、吉澤 一成
(九大先導研、京大 ESICB)
Ru オキソ錯体によるメタノール酸化の反応機構解析
- 2P20 ○近藤 勇大(阪大院理)、古賀 裕明(京大触媒電池)、小國 敦(阪大院理)、多田 幸平(阪大院
理)、坂田 晃平(阪大院理)、齋藤 徹(阪大院理)、川上 貴資(阪大院理)、山中 秀介(阪大院理)、
奥村 光隆(阪大院理)
Au/TiO₂ 触媒上での水分子の働きについての密度汎関数法を用いた理論的研究
- 2P21 ○今井 雅也(阪大院基礎工)、横田 泰之(阪大院基礎工)、稲垣 耕司(阪大院工)、森川 良忠(阪
大院工)、福井 賢一(阪大院基礎工)
古典分子動力学法を用いたグラファイト基板と界面を形成する電解質水溶液の構造評価
- 2P22 ○Chantal Barberot (Grad. Schl. of Info. Sci., Univ. of Nagoya, CREST-JST)、Ikuo Kurisaki (Grad.
Schl. of Info. Sci., Univ. of Nagoya, CREST-JST)、Yuichi Suzuki (Grad. Schl. of Info. Sci., Univ. of
Nagoya)、Masataka Nagaoka (Grad. Schl. of Info. Sci., Univ. of Nagoya, CREST-JST)
QM/MM study of CAL-B catalyzed ring-opening polymerization of β -lactam: role of water molecule
on the reaction mechanism
- 2P23 ○吉田 悠一郎(京大院工)、佐藤 啓文(京大院工、京大 ESICB)
分子の対称性と自己集合
- 2P24 ○石田 豊和(産総研・ナノ材料)、久保田 智巳(産総研・バイオメディカル)、白土 東子(感染研・ウ
イルス二部)
ノロウィルス capsid タンパク質と血液型糖鎖抗原との糖鎖認識機構
- 2P25 ○伊藤 祥子(名大院情報科学)、高柳 昌芳(名大院情報科学、CREST-JST)、長岡 正隆(名大院
情報科学、CREST-JST)
シクロデキストリン触媒によるラクトン開環重合反応: MD 法による開始反応の微視的構造解析
- 2P26 ○鹿志村 達彦(慶大院理)、太田 雄介(慶大院理)、池崎 智哉(慶大院理)、藪下 聡(慶大院理)
Dynamical State 表現を用いた ICN 分子の光解離生成物 CN の回転微細構造準位に見られる非統計
性に関する理論的研究

- 2P27 ○田中 友貴(京大院工)、瀬波 大土(京大院工)、立花明知(京大院工)
Primary Rigged QED シミュレーションにおける thermalization 計算手法の研究
- 2P28 ○鈴木 雄一(名大院情報科学)、竹中 規雄(名大院情報科学、京大 ESICB)、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 MC サイクル-実時間対応に関する理論的研究:対向反応への応用
- 2P29 ○山崎 隼也(名大院工)、伊藤 太一(名大院工)、安藤 嘉倫(名大院工、計算セ)、篠田 渉(名大院工)岡崎 進(名大院工)
生体膜における水透過の自由エネルギー解析
- 2P30 ○坂田 晃平(阪大理化)、多田 幸平(阪大理化)、小國 敦(阪大理化)、齋藤 徹(阪大理化)、川上 貴資(阪大理化)、山中 秀介(阪大理化)、奥村 光隆(阪大理化)
金クラスターと保護高分子の水溶液中での配位構造に関する分子シミュレーション
- 2P31 ○松尾 裕樹(九大先導研)、田中 宏昌(触媒・電池元素戦略研究拠点)、今吉 隆治(東大院)、中島 一成(東大院)、西林 仁昭(東大院)・吉澤 一成(九大先導研)
コバルト触媒による窒素固定反応機構に関する理論的研究
- 2P32 ○多田 幸平(阪大院理)、古賀 裕明(京大触媒電池)、近藤 勇大(阪大院理)、坂田 晃平(阪大院理)、小國 敦(阪大院理)、齋藤 徹(阪大院理)、川上 貴資(阪大院理)、奥村 光隆(阪大院理、京大触媒電池)
金担持触媒調製時における共存ハロゲン種の影響に関する密度汎関数理論を用いた研究
- 2P33 ○杉本 学(熊本大院自然科学、分子研)、李 少傑(熊本大工)
チオフェンオリゴマーの分子造形と物性発現に関する理論的研究
- 2P34 ○宮城 公磁(阪大院基礎工)、浅岡 瑞稀(阪大院基礎工)、竹林 拓(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)
ピラゾール架橋 2 核銅(II) 錯体の軌道の位相関係と磁氣的相互作用に関する理論的研究
- 2P35 ○山守 優(阪大院基礎工)、松林 伸幸(阪大院基礎工)、北尾 彰朗(東大分生研)
Temperature Accelerated 法とレプリカ交換法を用いたマルチスケールサンプリング手法 MuSTAR MD
- 2P36 ○南田 有加(阪大院基礎工)、福田 幸太郎(阪大院基礎工)、米田 京平(奈良高専)、中野 雅由(阪大院基礎工)
実在コラヌレン骨格を含む開殻一重項 π 共役系の非線形光学効果に関する研究
- 2P37 ○齋藤 真和(阪大院基礎工)、岸 亮平(阪大院基礎工)、安倍 学(広大院理)、中野 雅由(阪大院基礎工)
1,3-ジラジカル化合物の電子励起および光応答特性に対する理論研究
- 2P38 ○Kai-Min Tu(京大 ESICB)、石塚 良介(阪大基礎工)、松林 伸幸(阪大基礎工)
全原子 MD による中高濃度塩水溶液及びイオン液体の電気伝導度の研究
- 2P39 ○竹林 拓(阪大院基礎工)、北河 康隆(阪大院基礎工)、重田 育照(筑大院数理)、奥村 光隆(阪大院理)、中野 雅由(阪大院基礎工)
ポリアセンを用いた単分子伝導におけるスピン分極の影響

- 2P40 ○浅岡 瑞稀(阪大院基礎工)、宮城 公磁(阪大院基礎工)、竹林 拓(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)
DFT 並びに TD-DFT 法を用いた無置換 BODIPY の光吸収特性に関する研究
- 2P41 ○小林 孝徳(原子力機構)、横山 啓一(原子力機構)
C60 フラーレンのセシウム吸着材としての可能性の理論計算
- 2P42 ○今田 康博(阪大蛋白研、阪大院理)、中村 春木(阪大蛋白研)、鷹野 優(阪大蛋白研、広市大院情報)
ヘムの構造歪みの電子構造への影響に関する理論的研究