

# 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  
奨励賞受賞講演・産学連携セッション：30分（発表25分＋討論5分）

5月13日（木）

座長 庄司 光男（筑波大，さきがけ）

- 9:00 1L01     ○望月 祐志（立教大理，東大生産研），奥脇 弘次（立教大理），畑田 峻（立教大理），秋澤 和輝（立教大理），福澤 薫（星薬科大，東大生産研，東北大院工），半田 佑磨（星薬科大），川嶋 裕介（星薬科大），古明地 勇人（産総研），坂倉 耕太（FOCUS），渡邊 啓正（HPC システムズ），田中 成典（神戸大院情報）  
スーパーコンピュータを用いた新型コロナウイルスの関連タンパク質の大規模FM0計算
- 9:20 1L02     ○小野 純一（京大 ESICB，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）  
SARS-CoV-2 メインプロテアーゼのプロトン化状態に関する量子分子動力学シミュレーション
- 9:40 1L03     ○八木 清（理研），杉田 有治（理研）  
分子動力学計算プログラム GENESIS における QM/MM 法の開発と応用
- 10:00 1L04     ○Thomsen Bo（Japan Atomic Energy Agency），Motoyuki Shiga（Japan Atomic Energy Agency）  
Ab-Initio Calculation of the Autoionization Product of Water using Path Integral Molecular Dynamics

休憩（10:20-10:30）

座長 五十幡 康弘（豊橋技科大 IMC）

- 10:30 1L05     ○志賀 基之，小林 恵太，奥村 雅彦，永井 佑紀（日本原子力研究開発機構）  
自己学習ハイブリッドモンテカルロ法の提案
- 10:50 1L06     ○杉崎 研司（阪市大院理，JST さきがけ，CQuERE/TCG-CREST），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）  
スピン状態間エネルギー差の直接計算量子アルゴリズムの開発
- 11:10 1L07     ○難波 知太郎（東北大院理），吉田 将隆（東北大院理），大槻 幸義（東北大院理）  
機械学習によるレーザー誘起の分子3次元整列の制御ランドスケープ図の予測

- 11:30 1L08 ○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)  
FC-sij 変分理論に現れる新しい2中心  $r(iA, B)$  項を含む積分の計算法とプログラム  
開発
- 11:50 1L09 ○中嶋 浩之, 中辻 博 (量子化学研究協会研究所)  
Non-B0 FC-LSE 理論によるシュレーディンガー解の精密計算

**休憩 (12:10-13:10)**

**13:10 ポスター発表 (1日目)**

**座長 横川 大輔 (東大院総合文化)**

- 14:40 1L10 ○高塚 和夫, 新崎 康樹 (京大福井センター)  
フロンティア軌道理論の70年: 電子相関と非断熱相互作用の下の反応論へ
- 15:00 1L11 ○高久 ゆりか, 南部 伸孝 (上智大院理工)  
メチルアミンの真空紫外光解離過程における非断熱非経験的分子ダイナミクス
- 15:20 1L12 ○神山 昇大, 高久 ゆりか, 南部 伸孝 (上智大院理工)  
アクリジニウムエステルの化学発光機構に現れる項間交差過程における溶媒効果  
の理論的解析
- 15:40 1L13 ○松井 正冬 (産総研 CD-FMat), 中村 恒夫 (産総研 CD-FMat)  
銀ナノ粒子プラズモニック光学応答における形状・凝集効果の理論的解析

**休憩 (16:00-16:10)**

**奨励賞受賞講演**

**座長 森田 明弘 (東北大院理, 京大 ESICB)**

- 16:10 1S01 ○土持 崇嗣 (神戸大学)  
対称性の破れと復元を基盤とした新規な分子軌道理論の系統的展開
- 16:40 1S02 ○原淵 祐 (北大院理, WPI-ICReDD, ERATO 前田化学反応創成知能プロジェクト)  
分子の光応答を包括的に理解するための理論計算手法の開発と光機能性分子への  
応用

## 5月14日(金)

### 座長 辻 雄太 (九大先導研)

- 9:00 2L01 ○岩佐 豪 (北大院理, 北大 WPI-ICReDD, 京大 ESICB, JST さきがけ), 竹中 将斗 (北大院総化), 武次 徹也 (北大院理, 北大 WPI-ICReDD, 京大 ESICB)  
近接場ラマンのための理論開発と光 STM-TERS への応用
- 9:20 2L02 ○Ayaki Sunaga (Kyoto Univ.), Maen Salman (Paul Sabatier Univ.), Trond Saue (Paul Sabatier Univ.)  
Relativistic molecular calculations of spectroscopic constants and chemical bondings including QED effects
- 9:40 2L03 ○鳥居 肇 (静岡大工), 鶴川 竜太 (静岡大工)  
水の OH 伸縮モードの水素結合形成による振動数シフトに関する静電相互作用モデルと非静電的メカニズム
- 10:00 2L04 ○山田 篤志 (筑波大計セ)  
Maxwell+ 分極力場 MD マルチスケールシミュレーションの開発と DCMBI 結晶の瞬間誘導ラマン散乱誘起テラヘルツ波発生プロセスの解析

### 休憩 (10:20-10:30)

### 座長 山田 篤志 (筑波大計セ)

- 10:30 2L05 ○片岡 洋右 (法大生命)  
定圧分子動力学法によるアルゴンの沸点における気液平衡
- 10:50 2L06 ○永井 哲郎 (東大新領域), 藤本 和士 (名大工), 岡崎 進 (東大新領域)  
位置に依存した拡散係数の新規評価手法の開発: 大規模不均一系における物質輸送解明にむけて
- 11:10 2L07 ○平野 智倫 (東北大院理), 森田 明弘 (東北大院理, 京大 ESICB)  
多次元自由エネルギー計算による液液界面における電子移動反応機構の解明
- 11:30 2L08 鈴木 大輔 (金沢大数物), 鈴木 大介 (金沢大数物), ○三浦 伸一 (金沢大数物)  
ガウス型統計集合に基づくレプリカ交換法の開発と一次相転移系への適用
- 11:50 2L09 ○矢木 智章 (京大院工), 佐藤 啓文 (京大院工, 京大 ESICB, 京大福井記念センター)  
重み付き密度近似に基づく自由エネルギー汎関数の自己無撞着な構成

### 休憩 (12:10-13:10)

13:10 ポスター発表 (2日目)

### 産学連携セッション

座長 中野 雅由 (阪大院基礎工, 阪大 CSRN, 阪大 IQB, 阪大 ICS)

14:40 2S01 ○松崎 洋市 (日本製鉄)  
量子化学計算の産業応用に関する事例紹介と産学連携への提言

15:10 2S02 ○四橋 聡史 (パナソニック)  
HPC 基盤と機械学習を活用した非線形光学応答材料の探索スキームの構築

### 休憩 (15:40-15:50)

座長 茂本 勇 (東レ)

15:50 2S03 ○窪田 善之 (関西電力)  
水溶液中での第一原理的自由エネルギー計算の適用例

16:20 2S04 ○佐藤 徹 (京都大学)  
京都大学福井謙一記念研究センターにおける産学連携活動

16:50 2S05 ○中村 振一郎 (理化学研究所)  
計算科学を通してみる産業界の近未来  
～産官学を経験した一量子化学徒の眼に映るもの～

### 休憩 (17:20-17:30)

### 理論化学会総会 (17:30-18:30)

### 懇親会 (19:00-21:00)

## 5月15日(土)

**座長 岩佐 豪** (北大院理, 北大 WPI-ICReDD, 京大 ESICB, JST さきがけ)

- 9:00 3L01 ○白井 聡一 (豊田中研), 稲垣 伸二 (豊田中研)  
多参照摂動法によるピレンおよびピレン誘導体の励起状態に関する理論的研究
- 9:20 3L02 ○Nguyen Thanh Phuc (京大院工)  
Molecular Polariton: from chemical reactivity control to superreaction
- 9:40 3L03 ○當波 孝凱 (阪大院基礎工), 杉森 亮太 (阪大院基礎工), 宮本 孟 (阪大院基礎工), 岡田 健治 (阪大院基礎工), 坂井 亮太 (阪大院基礎工), 中野 雅由 (阪大院基礎工, 阪大 CSRN, 阪大 QIQB, 阪大 ICS)  
一重項分裂ダイナミクスに対する外部静電場印加効果に関する理論研究
- 10:00 3L04 ○宮本 孟 (阪大院基礎工), 岡田 健二 (阪大院基礎工), 徳山 和明 (阪大院基礎工), 中野 雅由 (阪大院基礎工, 阪大 CSRN, 阪大 QIQB, 阪大 ICS)  
ペンタセン環状分子集合系における一重項分裂ダイナミクスの分子配向・集合系サイズ依存性の理論研究

休憩 (10:20-10:30)

**座長 岸 亮平** (阪大院基礎工, 阪大 QIQB)

- 10:30 3L05 ○辻 雄太 (九大先導研), 吉澤 一成 (九大先導研)  
最低被占軌道について
- 10:50 3L06 ○長谷部 匡敏 (北大院総合化学), 海老澤 修一 (北大院総合化学), 堤 拓朗 (北大院理), 常田 貴夫 (神大院イノベ, 北大院理), 武次 徹也 (北大院理, 北大 ICRReDD)  
反応性軌道エネルギー論の展開: 電子論とエネルギー論の関係性
- 11:10 3L07 ○黒田 直也, 瀬波大土 (京大院工)  
極性多原子分子における時間・空間反転対称性破れのエネルギーシフトの解析
- 11:30 3L08 ○加藤 毅 (東大院理), 齊藤 真司 (分子研)  
密度方程式による Kohn-Sham ポテンシャルの厳密密度汎関数化
- 11:50 3L09 ○井上 頌基 (理研 R-CCS), 中嶋 隆人 (理研 R-CCS)  
実在的電荷分布の原子核モデルを用いた効率的な解析的核引力積分の計算法

休憩 (12:10-13:10)

**座長 原 祐 (北大院理, WPI-ICReDD, ERATO 前田化学反応創成知能プロジェクト)**

- 13:10 3L10 ○石井 良樹 (兵庫県大院情報), 松林 伸幸 (阪大院基礎工), 鷺津 仁志 (兵庫県大院情報)  
ナノ水圏材料の分子モデリングと局所物性解析
- 13:30 3L11 ○北村 勇吉 (静岡大工, 名大院情), Carlos Bistafa (名大院情), 長岡 正隆 (名大院情, 京大 ESICB, 名大価値創造研究センター)  
配置選択スキームによる定 pH ハイブリッド MC 法の開発: 振動・電子遷移スペクトルへの応用
- 13:50 3L12 ○饒 子禎 (名大院情), 高柳 昌芳 (滋賀大 DS センター, 理研 AIP, JST-CREST), 長岡 正隆 (名大院情, 名大価値創造研究センター, 京大 ESICB, JST-CREST)  
ラジカル重合シミュレーションによる立体規則性の再現および微視的機構の解釈
- 14:10 3L13 ○大谷 優介 (東北大金研), 中村 文哉 (東北大金研), 王 楊 (東北大院工), 尾澤 伸樹 (東北大 NiCHE), 久保 百司 (東北大金研)  
炭化ケイ素の摩擦界面で起こる潤滑膜自己形成の化学反応ダイナミクス

**休憩 (14:30-14:40)**

**座長 八木 清 (理研)**

- 14:40 3L14 ○春田 直毅 (京大福井セ, 京大院工, 京大 ESICB), Paulo Filho Marques de Oliveira (アルビ国立高等鉱業学校, サンパウロ大学), Alain Chamayou (アルビ国立高等鉱業学校), 佐藤 徹 (京大福井セ, 京大院工, 京大 ESICB), 田中 一義 (京大福井セ), Michel Baron (アルビ国立高等鉱業学校)  
ジベンゾフェナジンのメカノケミカル合成における特異な反応経路の発現メカニズム
- 15:00 3L15 ○高橋 聡 (東大院総合文化), 立石 友紀 (京大 iCeMS), 菊池 勇 (東大院総合文化), 新津 敬介 (東大院総合文化), 佐藤 啓文 (京大院工, 京大 ESICB, 京大福井センター), 平岡 秀一 (東大院総合文化)  
Pd<sub>6</sub>L<sub>4</sub> 正方ピラミッド錯体形成の意外な自己集合経路
- 15:20 3L16 ○永幡 裕 (北大 ICRReDD), 武次 徹也 (北大理, 北大 ICRReDD), 前田 理 (北大理, 北大 ICRReDD), 小松崎 民樹 (北大電子研, 北大 ICRReDD)  
反応ネットワークの観測時間階層構造と各階層の類似部分構造

**休憩 (15:40-15:50)**

**座長 小林 正人** (北大院理, 北大 WPI-IGReDD)

- 15:50 3L17 ○井内 哲 (名大院情報), 古賀 伸明 (名大院情報)  
動力学計算のための鉄(II)錯体の電荷移動励起状態と d-d 励起状態を同時計算する  
モデルハミルトニアン
- 16:10 3L18 ○浦谷 浩輝 (早大先進理工), 森岡 俊貴 (早大院先進理工), 吉川 武司 (東邦大  
薬), 中井 浩巳 (早大院先進理工, 早大理工総研, 京大 ESICB)  
分割統治型励起状態計算に基づく非断熱分子動力学法: 凝縮系における無輻射失活  
過程への展開
- 16:30 3L19 ○中井 浩巳 (早大理工総研, 早大先進理工, 京大 ESICB), 西村 好史 (早大理工総  
研), 吉川 武司 (東邦大薬), 浦谷 浩輝 (早大先進理工), 五十幡 康弘 (豊橋技科  
大 IMC), 河本 奈々 (早大先進理工), 稲森 真由 (早大先進理工)  
DCDFTBMD プログラムによる励起状態ダイナミクス研究への展開

## ポスター発表 1 日目 (5 月 13 日)

- 1P01 宮越 洸二 (北大院総化), ○小林 正人 (北大院理, 北大 WPI-ICReDD), 齊田 謙一郎 (北大院理), 小野寺 陽平 (京大複合研), 志賀 元紀 (岐阜大工), 小原 真司 (物材機構), 武次 徹也 (北大院理, 北大 WPI-ICReDD)  
パーシステンス・ダイアグラムを用いた準安定結晶とガラスの「穴」の比較
- 1P02 ○村山 武来 (北大院総化), 青木 雅允 (北大院理), 石橋 卓 (北大院理), 中村 壮伸 (産総研), 寺本 央 (関大システム理工), 小林 正人 (北大院理, 北大 WPI-ICReDD, 京大 ESICB), 武次 徹也 (北大院理, 北大 WPI-ICReDD, 京大 ESICB)  
パーシステント・ホモロジーに基づく反応経路地図に対する特徴量の創出と分類
- 1P03 ○佐久川 丈 (北大院総合化学), 堤 拓朗 (北大院理), 岩淵 雄太 (北大院総合化学), 齊田 謙一郎 (北大院理), 武次 徹也 (北大院理, 北大 ICReDD)  
氷表面における水素原子生成ダイナミクスの理論的研究
- 1P04 ○山口 毅 (名大院工)  
高級アルコールの不均一構造のダイナミクスと溶質拡散のカップリング
- 1P05 ○田中 美帆 (名大院情), 高橋 由芽 (名大院情), 高見 慧 (名大院情), 北村 勇吉 (名大院情, 静岡大工), 長岡 正隆 (名大院情, 京大 ESICB, 名大価値創造研究センター)  
ヘモグロビンのアロステリック制御に関する時系列解析: T 状態安定化に対する塩素イオンの役割
- 1P06 ○川瀬 智元 (名大院情報), 田中 佑一 (名大院情報), 長岡 正隆 (名大院情報, 名大価値創造研究センター, 京大 ESICB)  
Li イオン電池における固体電解液相関膜の形成過程に対する電極電位依存性: 高電位における還元反応の頻度増加と膜厚化
- 1P07 ○松倉 里紗 (近大院生物理工), 宮下 尚之 (近大院生物理工)  
HSP90 の分子動力学シミュレーションとドメインスワッピングの機能
- 1P08 ○吉成 啓人 (茨大院理工), 城塚 達也 (茨大院理工)  
電子状態計算によるアナターゼ型酸化チタンにおける光触媒活性の解析
- 1P09 ○甘水 君佳 (阪大院基礎工), 佐藤 宏賢 (阪大院基礎工), 長 奎吾 (阪大院基礎工), 北河 康隆 (阪大院基礎工, 阪大 CSRN, 阪大 QIQB), 中野 雅由 (阪大院基礎工, 阪大 CSRN, 阪大 QIQB, 阪大 ICS)  
分子回路設計を目指した [18] アヌレンの単分子電気伝導に関する理論研究



- 1P10 ○吉田 航 (阪大院基礎工), 松井 啓史 (大安研), 杉森 亮太 (阪大院基礎工), 岸 亮平 (阪大院基礎工, 阪大 QIQB), 中野 雅由 (阪大院基礎工, 阪大 QIQB, 阪大 CSRN, 阪大 ICS)  
対称 1 次元 4 サイト 4 電子原子価結合配置間相互作用 (VBCI) モデルを用いたテトララジカ  
ロイドにおける開殻性と三次非線形光学物性の相関の解析
- 1P11 ○徳山 和明 (阪大院基礎工), 宮本 孟 (阪大院基礎工), 岡田 健治 (阪大院基礎工), 中野 雅  
由 (阪大院基礎工, 阪大 CSRN, 阪大 QIQB, 阪大 ICS)  
ペンタセン一次元集合系モデルにおける一重項分裂ダイナミクスの分子配置依存性に関する  
理論研究
- 1P12 ○北河 康隆 (阪大院基礎工, 阪大 CSRN, 阪大 QIQB), 甘水 君佳 (阪大院基礎工), 佐藤 宏  
賢 (阪大院基礎工), 長 奎吾 (阪大院基礎工), 中野 雅由 (阪大院基礎工, 阪大 CSRN, 阪大  
QIQB, 阪大 ICS)  
金属有機構造体 (MOF) の吸蔵分子による磁性変化に関する理論研究
- 1P13 ○池内 雅登 (阪大院基礎工), 岸 亮平 (阪大院基礎工, 阪大 QIQB), 杉浦 亮介 (阪大院基礎  
工), 吉田 航 (阪大院基礎工), 清水 陽介 (阪大院基礎工), 正田 迅己 (阪大院基礎工), 中  
野 雅由 (阪大院基礎工, 阪大 CSRN, 阪大 QIQB, 阪大 ICS)  
反芳香族分子の  $\pi$  三量体における構造, 芳香族性, 開殻性の相関に関する理論研究
- 1P14 ○杉森 亮太 (阪大院基礎工), 當波 孝凱 (阪大院基礎工), 中野 雅由 (阪大院基礎工, 阪大  
CSRN, 阪大 QIQB, 阪大 ICS)  
ジアザジボラ置換アントラセンの一重項分裂誘起三次非線形光学特性に関する理論研究
- 1P15 ○大城 海 (北大院総化), 高 敏 (北大触媒所), 長谷川 淳也 (北大触媒所)  
 $\text{Fe}/\text{SO}_4^{2-}/\text{CeO}_2$  触媒を用いた  $\text{NH}_3$ -SCR メカニズムに関する理論的研究
- 1P16 ○矢田 達寛 (京大福井セ, 京大院工), 春田 直毅 (京大福井セ, 京大院工, 京大 ESICB), 佐  
藤 徹 (京大福井セ, 京大院工, 京大 ESICB)  
化学反応における領域同位体効果
- 1P17 ○植松 祐輝 (九州大理)  
過剰イオンを持った水滴中のイオン分布
- 1P18 ○高野 恵未依, 武藤 克也, 阿部 二郎 (青学大理工)  
ビフェニル架橋型イミダゾール二量体の熱異性化反応経路の DFT 計算
- 1P19 ○藤澤 遼 (早大先進理工), 五十幡 康弘 (豊橋技科大 IMC), 藤波 美起登 (早大先進理工),  
清野 淳司 (早大先進理工, 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)  
k 最近傍法とアンサンブル学習を用いた機械学習型電子相関モデルの適用領域判定手法
- 1P20 ○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)  
富岳での大規模計算に向けた量子分子動力学シミュレーションプログラム DCDFTBMD の高度化

- 1P21 ○近藤 僚哉 (北大院総合化学), James N. Taylor (北大電子研), Jean-Emmanuel Clement (北大 ICreDD), 水野 雄太 (北大電子研, 北大院総合化学, 北大 ICreDD), 藤田 克昌 (大阪大工), 原田 義規 (京都府立医大), 小松崎 民樹 (北大電子研, 北大院総合化学, 北大 ICreDD)  
ラマン分光イメージングにおける化学的空間不均一性の情報理論解析
- 1P22 ○山下 晃一 (京大 ESICB), 金子 正徳 (京大 ESICB)  
強誘電性ペロブスカイト物質の電子-フォノン相互作用とフレリッヒ・ポーラロン伝導
- 1P23 ○矢吹 志保 (東大総文), 横川 大輔 (東大総文)  
不均一溶媒中での *p*-ニトロアニリンの吸収の非理想性に関する RISM 法を用いた研究
- 1P24 ○梁 有希 (神大院イノベ)  
量子コンピュータの虚時間発展による電子状態へのアプローチ
- 1P25 ○森 悠登 (神大院システム)  
多参照ユニタリ結合クラスター変分量子回路
- 1P26 ○福田 良一 (京都大学触媒・電池元素戦略研究拠点)  
Pair coupled-cluster 法の解析的エネルギー微分法と分子構造最適化
- 1P27 ○伊藤 琢磨 (北大院総化), 原淵 祐 (北大院理, 北大 ICreDD, JST-ERATO), 前田 理 (北大院理, 北大 ICreDD, JST-ERATO)  
動的経路分岐を含む反応経路網の構築と速度論解析: 分子内 Diels-Alder 反応への応用
- 1P28 ○山田 一雄, 松林 伸幸 (阪大院基礎工)  
全原子モデル chain increment 法を用いたポリマーブレンド相溶性解析
- 1P29 ○古宮 直樹 (阪大院基礎工), 笠原 健人 (阪大院基礎工), 松林 伸幸 (阪大院基礎工)  
ガン関連タンパク質 MDM2 のリガンド結合能に対する共溶媒効果の自由エネルギー解析
- 1P30 ○向井 陵 (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)  
分子動力学シミュレーションによる 2 成分ハイドロゲル系の全原子解析 All-atom analysis of two-component hydrogel systems using molecular dynamics simulation
- 1P31 ○沖田 和也 (阪大院基礎工), 笠原 健人 (阪大院基礎工), 松林 伸幸 (阪大院基礎工)  
エネルギー表示の拡散方程式理論の開発
- 1P32 ○加藤 亮 (阪大院基礎工), 笠原 健人 (阪大院基礎工), 松林 伸幸 (阪大院基礎工)  
バイオ関連分子に対する空間分割溶媒和エネルギー論
- 1P33 ○吉田 如寛 (京大院工), 瀬波 大士 (京大院工)  
電気伝導現象における電子テンション密度のスピンの依存成分に関する理論的研究
- 1P34 ○西本 佳央 (京大院理)  
CASPT2 の解析的勾配

- 1P35 ○鈴木 和磨 (東北大院理), 菅野 学 (東北大院理), 河野 裕彦 (東北大院理)  
分子構造対応のデカルト座標ガウス基底を用いた分子波動関数  
—反応経路上の効率的展開—
- 1P36 ○Ekaterina Gracheva (University of Tsukuba, NIMS), Guillaume Lambard (NIMS), Sadaki Samitsu (NIMS), Keitaro Sodeyama (University of Tsukuba, NIMS), Ayako Nakata (University of Tsukuba, NIMS)  
Polymers linear thermal expansion coefficient prediction by machine learning tool  
SMILES-X
- 1P37 ○下岡 稔 (名大院工), 藤本 和士 (名大院工)  
PMMA の溶剤塗布による破壊の分子シミュレーション
- 1P38 露木 雅文 (慶大院理工), 古館 駿貴 (慶大院理工), 久賀谷 有人 (慶大院理工), ○藪下 聡 (慶大院理工)  
アルコール類 OH 基の伸縮振動の基音・倍音吸収強度に関する線形応答関数を用いた理論研究
- 1P39 ○藪 俊佑 (京大院工), 佐藤 啓文 (京大院工, 京大 ESICB, 京大福井センター), 東 雅大 (京大院工, 京大 ESICB, JST さきがけ)  
分子動力学シミュレーションによる光捕集複合体 LH2 の吸収スペクトルの解析
- 1P40 ○木村 南 (京大院工), 佐藤 啓文 (京大院工), 東 雅大 (京大院工)  
ポルフィリン-フラレン連結分子の励起状態特性に関する理論計算
- 1P41 ○中谷 佳萌 (京大院工), 東 雅大 (京大院工, 京大 ESICB), 福田 良一 (京大 ESICB), 佐藤 啓文 (京大院工, 京大 ESICB, 京大福井セ)  
非直交軌道の第二量子化演算子による価電子構造と化学結合の解析
- 1P42 ○今村 洸輔 (京大院工), 東 雅大 (京大院工, 京大 ESICB), 佐藤 啓文 (京大院工, 京大 ESICB, 京大福井センター)  
溶媒和ヒドリドイオンの化学シフト推定: フッ化物イオンとの比較研究
- 1P43 ○高松 晃彦 (京大院工), 福田 良一 (京大院工, 京大 ESICB), 東 雅大 (京大院工), 佐藤 啓文 (京大院工)  
3D-RISM 理論による Pt (111) 面に吸着した芳香族化合物の溶媒和構造解析

## ポスター発表 2 日目 (5 月 14 日)

- 2P01 ○海老澤 修一 (北大院総合化学), 長谷部 匡敏 (北大院総合化学), 堤 拓朗 (北大院理), 常田 貴夫 (神大院イノベ, 北大院理), 武次 徹也 (北大院理, 北大 IReDD)  
反応経路に付随する活性軌道の抽出
- 2P02 ○岩田 健一郎 (北大院総合化学), 堤 拓朗 (北大院理), 齊田 謙一郎 (北大院理), 宮崎 充彦 (お茶大基幹自然科学), 武次 徹也 (北大院理, 北大 WPI-IReDD)  
フェノール-アンモニアクラスターの励起状態プロトン共役電子移動ダイナミクスの解明
- 2P03 ○善行 哲平 (北大総合化学院), 竹中 将斗 (北大総合化学院), 武次 徹也 (北大院理, 北大 WPI-IReDD, 京大 ESICB), 岩佐 豪 (北大院理, 北大 WPI-IReDD, 京大 ESICB, JST さきがけ)  
近接場赤外吸収分光法の理論計算手法の汎用化
- 2P04 ○Nisrine Sakaki (Nagoya University), Amine Bouibes (Nagoya University), Masataka Nagaoka (Nagoya University)  
Microscopic Analysis of the SEI Film Stability towards Optimizing Salt Concentration in Non-flammable Electrolyte: Role of Organic Layer on the Ductility of Salt-based SEI Film
- 2P05 ○八十島 克尚 (名大院情), 三澤 奈々 (名大院情), 鈴木 雄一 (名大院情), 長岡 正隆 (名大院情, JST-CREST, 京大 ESICB, 名大価値創造研究センター)  
(Pyridylamido)Hf 触媒による連鎖移動型オレフィン重合反応の全原子シミュレーション: 触媒構造がモノマー消費速度に及ぼす立体的影響
- 2P06 ○南 知香 (近大院生物理工), 柳野 賀緒梨 (近大院生物理工), 宮下 尚之 (近大院生物理工)  
粗視化モデルシミュレーションを用いた脂質分子と  $\gamma$  切断酵素との相互作用研究
- 2P07 ○大多和 克紀 (近大院生物理工), 松倉 里紗 (近大院生物理工), 宮下 尚之 (近大院生物理工), 原田 龍一 (東北大院医), 木村 裕一 (近大院生物理工), 古本 祥三 (東北大 CYRIC)  
モノアミン酸化酵素 B (MAO-B) の薬剤結合部位の動力学とその PET トレーサー-SMBT-1 との相互作用
- 2P08 ○坂井 亮太 (阪大院基礎工), 岡田 健治 (阪大院基礎工), 宮本 孟 (阪大院基礎工), 中野 雅由 (阪大院基礎工, 阪大 GSRN, 阪大 QIQB, 阪大 ICS)  
高効率シングレットフィッシュンに向けた 5 員環・7 員環含有縮環共役分子系についての理論研究
- 2P09 ○岸 亮平 (阪大院基礎工, 阪大 QIQB), 正田 迅己 (阪大院基礎工), 横山 麻紗子 (阪大院基礎工), 吉田 航 (阪大院基礎工), 清水 陽介 (阪大院基礎工), 池内 雅登 (阪大院基礎工), 中野 雅由 (阪大院基礎工, 阪大 GSRN, 阪大 QIQB, 阪大 ICS)  
スピン非制限 CC2 法による一重項開殻分子系の三次非線形光学物性計算についての理論研究

- 2P10 ○正田 迅己 (阪大院基礎工), 岸 亮平 (阪大院基礎工, 阪大 QIQB), 池内 雅登 (阪大院基礎工), 清水 陽介 (阪大院基礎工), 杉浦 亮介 (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, 阪大 CSRN, 阪大 QIQB, 阪大 ICS)  
一次元  $\pi$  積層開殻分子集合系における開殻性と三次非線形光学物性の相関についての理論研究
- 2P11 ○長 奎吾 (阪大院基礎工), 北河 康隆 (阪大院基礎工, 阪大 CSRN, 阪大 QIQB), 中野 雅由 (阪大院基礎工, 阪大 CSRN, 阪大 QIQB, 阪大 ICS)  
3つのアセチルアセトナト配位子を有するジスプロシウム (III) 錯体の電子状態に関する理論研究
- 2P12 ○清水 陽介 (阪大院基礎工), 岸 亮平 (阪大院基礎工, 阪大 QIQB), 吉田 航 (阪大院基礎工), 池内 雅登 (阪大院基礎工), 正田 迅己 (阪大院基礎工), 中野 雅由 (阪大院基礎工, 阪大 CSRN, 阪大 QIQB, 阪大 ICS)  
Dicyclopenta-fused acene の 2 電子酸化還元状態およびヘテロ置換系における開殻性の鎖長依存性についての理論研究
- 2P13 ○岡田 健治 (阪大院基礎工), 坂井 亮太 (阪大院基礎工), 中野 雅由 (阪大院基礎工, 阪大 CSRN, 阪大 QIQB, 阪大 ICS)  
湾曲型ペリレン及びペロピレン類縁体の電子状態の理論的解析とシングレットフィッシュンへの応用
- 2P14 ○宮崎 玲 (北大触媒研), 大野 祥平 (阪大院薬), 有澤 光弘 (阪大院薬), 長谷川 淳也 (北大触媒研)  
還元的脱離過程によって決定される触媒サイクル: Ni 錯体触媒による C-O 結合活性化を介した分子内環化反応メカニズムの理論的研究
- 2P15 ○千葉 卓紘 (北大院総化), 飯田 健二 (北大触媒研), 長谷川 淳也 (北大触媒研)  
担持 Pt 触媒を用いたメタン水蒸気改質反応における電場の役割に関する理論的研究
- 2P16 ○池田 京, 塩田 淑仁, 吉澤 一成 (九大先導研)  
RuI 置換型 Keggin-type ポリ酸が触媒する水中での選択的ベンゼン水酸化反応の提案
- 2P17 ○古濱 彩子 (国立医薬品食品衛生研究所), 林 岳彦 (国立環境研究所), 山本 裕史 (国立環境研究所)  
魚類生活初期段階試験で得られる慢性毒性を予測するモデルの開発と評価
- 2P18 ○吉川 武司 (東邦大薬, 早大理工総研), 五十幡 康弘 (豊橋技科大 IMC), 中井 浩巳 (早大先進理工, 早大理工総研, 京大 ESICB), 小川 賢太郎 (東邦大薬), 坂田 健 (東邦大薬)  
スピン反転法に基づく凍結軌道解析を用いた S0/S1 円錐交差構造の理論的解明
- 2P19 ○水野 雄太 (北大電子研/WPI-ICReDD, JST さきがけ), 小松崎 民樹 (北大電子研/WPI-ICReDD)  
イジング計算機を用いた化学反応ネットワーク上の反応経路解析

- 2P20 ○田中 綾一 (北大院総合化学), 水野 雄太 (北大電子研/ICReDD), 堤 拓朗 (北大院理), ミカイル チツペロ (ICReDD), 武次 徹也 (北大院理/ICReDD), 小松崎 民樹 (北大電子研/ICReDD)  
主成分分析による自由度の削減手法の開発 : [1, 3]シグマトロピー転移の類似反応を例に
- 2P21 ○石井 玲音 (東北大院理), 難波 知太郎 (東北大院理), 大槻 幸義 (東北大院理), 香月 浩之 (奈良先端大), 大森 賢治 (分子研)  
非共鳴レーザーパルスを用いる新規の位相緩和抑制法の提案 : 最適制御アプローチ
- 2P22 ○根岸 直輝 (東大院総合文化), 横川 大輔 (東大院総合文化)  
RISM-MP2-cSED 法による自由エネルギー勾配の定式化と, 溶液内 Diels-Alder 反応への適用
- 2P23 ○庄司 光男 (筑波大, さきがけ), 村川 武志 (OMPU), 重田 育照 (筑波大), 林 秀行 (OMPU), 岡島 俊秀 (阪大産研)  
銅含有アミン酸化酵素におけるセミキノラジカル生成機構についての理論的解明
- 2P24 ○下元 勇真 (神大院システム情報学)  
多体展開による量子コンピュータシミュレーション
- 2P25 ○西巻 大成 (神大院システム)  
変分量子回路を用いた物性値の評価
- 2P26 ○小和田 光瑠 (東北大院農), 陳 思樊 (東北大院農), 菅野 翔 (東北大農), 高橋 まさえ (東北大院農)  
水和イオン含有チアミン結晶の低振動吸収スペクトルの第一原理計算
- 2P27 ○岡田 拓明 (北大院・総化), 前田 理 (北大院・理, 北大・WPI-ICReDD, JST-ERATO, NIMS)  
クライゼン転位に対する反応障壁データベースの構築とその化学的および数値的検証
- 2P28 ○六辻 晶大 (北大院総化), 齊田 謙一郎 (北大院理), 前田 理 (北大院理, 北大 ICReDD, JST-ERATO, NIMS)  
分割外挿法と交差点探索を用いる電子移動反応速度の簡便計算
- 2P29 ○昌山 廉 (阪大院基礎工), 沖田 和也 (阪大院基礎工), 笠原 健人 (阪大院基礎工), 松林 伸幸 (阪大院基礎工)  
再帰確率理論に基づく分子会合過程の分子動力学解析
- 2P30 ○田中 泉利 (阪大院基礎工), 笠原 健人 (阪大院基礎工), 石井 良樹 (兵庫県大院情), 松林 伸幸 (阪大院基礎工)  
結晶成長過程の全原子 MD 解析
- 2P31 ○肥喜里 志門 (阪大院基礎工), 松林 伸幸 (阪大院基礎工)  
尿素添加による Lysozyme-(GlcNac)<sub>3</sub> 結合親和性変化の自由エネルギー解析

- 2P32 ○長村 悠平 (阪大院基礎工), 渡邊 望美 (阪大院基礎工), 笠原 健人 (阪大院基礎工), 松林 伸幸 (阪大院基礎工), 馬越 大 (阪大院基礎工)  
脂質膜の水素結合性に及ぼす塩効果の動力学解析
- 2P33 ○菊辻 卓真 (阪大院基礎工), 金 鋼 (阪大院基礎工), 松林 伸幸 (阪大院基礎工)  
過冷却水中での水素結合破断に伴う多体構造変化: マルコフプロセスで記述する遷移ネットワーク
- 2P34 ○小嶋 秀和, 半田 和也, 山田 一雄, 松林 伸幸 (阪大院工)  
共重合体高分子膜の透過性評価における高分子構造の検討
- 2P35 ○山田 真行 (東大院情理), 寺田 透 (東大院農), 清水 謙多郎 (東大院農)  
FMO 法と効率的サンプリング手法を組み合わせた反応経路解析
- 2P36 ○大谷 優太郎 (都立大院理), 中谷 直輝 (都立大院理), 波田 雅彦 (都立大院理)  
多参照波動関数としての二電子占有 DMRG-CI 法の開発
- 2P37 ○松村 祥宏 (分子研), 斉藤 真司 (分子研, 総研大)  
確率的に揺らぐ速度係数に基づくタンパク質の構造動力学解析
- 2P38 ○高林 侑示 (京大院工), 佐藤 啓文 (京大院工, 京大 ESICB, 京大福井セ), 東 雅大 (京大院工, 京大 ESICB, JST さきがけ)  
非断熱分子動力学法による光合成色素の励起状態緩和ダイナミクスの解析
- 2P39 ○飯田 凌生 (京大院工), 佐藤 啓文 (京大院工, 京大 ESICB, 京大福井センター), 東 雅大 (京大院工, 京大 ESICB, JST さきがけ)  
光合成細菌の反応中心内の色素の電子状態の理論解析
- 2P40 ○右京 陸 (京大院工), 山口 滋 (理研・環境資源科学研究センター), 佐藤 啓文 (京大院工, 京大 ESICB, 京大福井センター), 東雅大 (京大院工, 京大 ESICB)  
酵素反応のエナンチオ選択性向上を目指した理論解析
- 2P41 ○高橋 健 (京大院工), 中農 浩史 (京大院工, 京大 ESICB), 佐藤 啓文 (京大院工, 京大 ESICB, 京大福井セ)  
定電位平均場 QM/MM 法による酸化還元電位と電極界面の分子構造の決定
- 2P42 ○仲 啓志 (京大院工), 佐藤 啓文 (京大院工, 京大 ESICB, 京大福井セ), 東 雅大 (京大院工, 京大 ESICB)  
分子動力学シミュレーションによる光捕集複合体クロロソームに含まれる色素集合体の解析