

ポスター発表 5月19日(金)

前半 (13:00-14:30)

- 1P01 ○稲垣 風花(名古屋大学大学院情報学研究科), 北村 勇吉(静岡大学工学部), 四谷 悠, 長岡 正隆(名古屋大学大学院情報学研究科, 名古屋大学価値創造研究センター)
多プロトン化部位を有するペプチドの pH に依存した立体配座変化とその溶媒和構造: 配置選択定 pH (CS-CpH) 法の適用
- 1P02 ○望月 祐志(立教大理, 東大生産研), 坂倉 耕太(FOCUS), 成瀬 彰(NVIDIA), 古家 真之介(NVIDIA), 下川辺 隆史(東大情基セ), 芝 隼人(東大情基セ), 大島 聡史(九大情基研セ), 星野 哲也(名大情基セ), 片桐 孝洋(名大情基セ)
HF 計算に特化した ABINIT-MP ミニアプリの GPU 化の試み
- 1P03 ○桑畑 和明(横浜市大), 伊藤 繁和(東工大), 立川 仁典(横浜市大)
ミューオニウム化キサンテンチオンの HFCC に対する量子効果
- 1P04 ○五十幡 康弘(豊橋技科大 IMC, 豊橋技科大工), 吉川 武司(東邦大薬), 中井 浩巳(早大先進理工, 早大理工総研), 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 S_0/S_1 円錐交差構造の理論的解明 (2)
- 1P05 ○山口 毅(名大院工), 鄭 誠虎(熊大院薬), 吉田 紀生(名大院情報)
陰溶媒モデルを用いた高分子鎖の分子動力学シミュレーションに対する角運動量と熱浴の影響
- 1P06 ○田川 雄大, 笠原 健人, 松林 伸幸(大阪大院)
全原子 MD によるアモルファス凝集に対する共溶媒効果の自由エネルギー解析
- 1P07 ○丸山 優星, 松原 優弥, 昌山 廉, 笠原 健人, 松林 伸幸(阪大院基礎工)
一般化拡散方程式に基づく会合キネティクスの効率的な解析手法の開発
- 1P08 ○鈴木 健介, 鳥居 肇(静岡大院工)
アセトンの C=O 伸縮振動モードに対する溶液内イオンの影響の理論的解析
- 1P09 ○稲生 喬介, 鳥居 肇(静岡大院工)
ハロゲン結合系における分子間電荷移動と静電相互作用の電子密度に基づく解析
- 1P10 ○Zheng Haojie(東大工), 平野 敏行(東大生研), 田原 才静(東大生研), 佐藤 文俊(東大生研)
Electronic structure of insulin and its analogues bound to IGF-1 receptor by canonical molecular orbital calculations

- 1P11 ○甘水 君佳（阪大院基礎工），西田 光博（阪大院基礎工），佐々木 啓介（阪大院基礎工），津田 雅大（阪大院基礎工），林 優太（阪大院基礎工），本城 一樹（阪大院基礎工），益田 晃希（阪大院基礎工），岸 亮平（阪大院基礎工，阪大 QIQB，阪大 RCSEC，阪大 ICS-OTRI），北河 康隆（阪大院基礎工，阪大 QIQB，阪大 RCSEC，阪大 ICS-OTRI，阪大 SRN-OTRI）
[18]アヌレンへの置換基導入による電子状態変化が電気伝導性に与える影響に関する理論研究
- 1P12 ○住谷 陽輔，吉澤 一成（九大先導研）
密度汎関数理論計算に基づく貴金属補綴材表面上の歯科用接着剤の化学構造変化の解明
- 1P13 ○松原 優弥，昌山 廉，笠原 健人，松林 伸幸（阪大院基礎工）
分子の脂質膜透過ダイナミクスを記述する溶液統計力学理論の開発
- 1P14 ○林 優太（阪大院基礎工），甘水 君佳（阪大院基礎工），佐々木 啓介（阪大院基礎工），津田 雅大（阪大院基礎工），岸 亮平（阪大院基礎工，阪大 QIQB，阪大 RCSEC，阪大 ICS-OTRI），北河 康隆（阪大院基礎工，阪大 QIQB，阪大 RCSEC，阪大 ICS-OTRI，阪大 SRN-OTRI）
ヒドリドが反応に関わる Ir-M（M = Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn）ヘテロ金属二核錯体触媒のフロンティア軌道エネルギー制御に関する理論研究
- 1P15 ○大多和 克紀（総研大，分子研），伊藤 暁（分子研，ExCELLS，総研大），奥村 久士（ExCELLS，分子研，総研大）
生体膜表面に流れを発生させる非平衡分子動力学シミュレーション手法
- 1P16 ○砂崎 慎之介（北大院総化），伊藤 琢磨（北大院総化），原湊 祐（WPI-ICReDD，JST-ERATO），前田 理（北大院理，WPI-ICReDD，JST-ERATO，NIMS）
不斉合成反応に対する反応経路ネットワーク解析手法の開発：プロリン触媒不斉アルドール反応への応用
- 1P17 ○堀 優太（筑波大・計セ），佐藤 綾香（筑波大院・数理），重田 育照（筑波大・計セ）
還元型高電位鉄硫黄タンパク質の鉄硫黄クラスターの電子状態と周囲のアミノ酸が与える影響
- 1P18 ○貞金 輝久，中田 倅暉，須田 佳代，横川 大輔（東大院総文）
溶解度の予測における化学者と機械学習の思考の相違に関する考察
- 1P19 ○高桑 美央，島崎 智実，立川 仁典，北 幸海（横浜市大）
多成分密度汎関数法を用いた EGFP の水素結合構造に関する理論的解析
- 1P20 ○益田 晃希（阪大院基礎工），津田 雅大（阪大院基礎工），甘水 君佳（阪大院基礎工），林 優太（阪大院基礎工），佐々木 啓介（阪大院基礎工），西田 光博（阪大院基礎工），本城 一樹（阪大院基礎工），岸 亮平（阪大院基礎工，阪大 QIQB，阪大 RCSEC，阪大 ICS），北河 康隆（阪大院基礎工，阪大 QIQB，阪大 RCSEC，阪大 ICS，阪大 SRN）

Tb 錯体の置換基が電子状態と磁気異方性に与える影響に関する理論研究

- 1P21 ○岡田 一志 (阪大基礎工), 菊辻 卓真 (阪大基礎工), 岡崎 圭一 (分子研), 森 俊文 (九大先導研), 金 鋼 (阪大基礎工), 松林 伸幸 (阪大基礎工)
ペプチド結合の異性化過程を特徴付ける反応座標: 深層学習による探索
- 1P22 ○吉元 理江 (茨城大院), Attila Taborosi (信州大学先鋭材料研究所), Qiyuan He (大阪大院), 阿野 勇介 (大阪大院), 茶谷 直人 (大阪大院), 森 聖治 (茨城大院)
パラジウム触媒による[3+2]環化付加反応の反応経路及び配向基効果に関する理論的研究
- 1P23 ○津田 雅大 (阪大基礎工), 益田 晃希 (阪大基礎工), 甘水 君佳 (阪大基礎工), 佐々木 啓介 (阪大基礎工), 林 優太 (阪大基礎工), 西田 光博 (阪大基礎工), 本城 一樹 (阪大基礎工), 岸 亮平 (阪大院基礎工, 阪大 QIQB, 阪大 RCSEC, 阪大 ICS-OTRI, 阪大 SRN-OTRI), 北河 康隆 (阪大院基礎工, 阪大 QIQB, 阪大 RCSEC, 阪大 ICS-OTRI, 阪大 SRN-OTRI)
コバルト (II) 単イオン磁石の電子状態と磁性に関する理論研究
- 1P24 ○本城 一樹 (阪大院基礎工), 甘水 君佳 (阪大院基礎工), 林 優太 (阪大院基礎工), 佐々木 啓介 (阪大院基礎工), 津田 雅大 (阪大院基礎工), 西田 光博 (阪大院基礎工), 益田 晃希 (阪大院基礎工), 岸 亮平 (阪大院基礎工, 阪大 QIQB, 阪大 RCSEC, 阪大 ICS-OTRI), 北河 康隆 (阪大院基礎工, 阪大 QIQB, 阪大 RCSEC, 阪大 ICS-OTRI, 阪大 SRN-OTRI)
ニトロゲナーゼのPクラスターの周囲の水素結合が活性中心の電子状態に与える影響に関する理論研究
- 1P25 ○佐々木 啓介 (阪大院基礎工), 甘水 君佳 (阪大院基礎工), 片岡 祐介 (島根大理工), 陳 秀慧 (台北科技大), 許 益瑞 (台北科技大), 岸 亮平 (阪大院基礎工, 阪大 QIQB, 阪大 RCSEC, 阪大 ICS-OTRI), 北河 康隆 (阪大院基礎工, 阪大 QIQB, 阪大 RCSEC, 阪大 ICS-OTRI, 阪大 SRN-OTRI)
架橋配位子に導入した π 共役系の軌道対称性と軌道エネルギーに着目したパドルホイール型ルテニウム二核錯体の酸化還元特性制御に関する理論研究
- 1P26 ○島田 魁智 (阪大院基礎工), 岸 亮平 (阪大院基礎工, 阪大 QIQB, 阪大 ICS-OTRI, 阪大 RCSEC), 北河 康隆 (阪大院基礎工, 阪大 QIQB, 阪大 ICS-OTRI, 阪大 RCSEC, 阪大 SRN-OTRI)
ビス-ペリアズレンの連結二量体モデルにおける構造・電子状態についての理論研究
- 1P27 ○西田 光博 (阪大院基礎工), 甘水 君佳 (阪大院基礎工), 佐々木 啓介 (阪大院基礎工), 津田 雅大 (阪大院基礎工), 林 優太 (阪大院基礎工), 本城 一樹 (阪大院基礎工), 益田 晃希 (阪大院基礎工), 岸 亮平 (阪大院基礎工, 阪大 QIQB, 阪大 RCSEC, 阪大 ICS-OTRI), 北河 康隆 (阪大院基礎工, 阪大 QIQB, 阪大 RCSE, 阪大 ICS-OTRI, 阪大 SRN-OTRI)
ポリアセンの電流-電圧特性におけるヘテロ原子置換効果に関する理論研究
- 1P28 ○薮 俊佑, 佐藤 啓文, 東 雅大 (京大院工)

熱揺らぎと電荷移動を考慮した光合成光捕集アンテナの吸収スペクトルの理論解析

- 1P29 ○折小野 諭, 桑畑 和明, 島崎 智実, 立川 仁典 (横浜市大)
経路積分分子動力学法によるミューオニウム化 N-ヘテロ環カルベンの理論的研究
- 1P30 千葉 卓紘, ○飯田 健二, 古川 森也, 長谷川 淳也 (北大触媒研)
電極電場に誘起される水素移動を利用した水蒸気改質反応に関する理論的研究
- 1P31 ○阿部 祐作 (横浜市大院データサイエンス), 桑畑 和明 (横浜市大), 島崎 智実 (横浜市大), 立川 仁典 (横浜市大)
リン酸水素鉛の相転移に関する同位体効果の理論的解析
- 1P32 ○亀谷 陽平, 池田 京, 塩田 淑仁, 吉澤 一成 (九大先導研)
DFT 計算に基づく銅錯体による亜硝酸還元の研究: プロトン共役電子移動に着目した反応機構解析
- 1P33 ○上部 岳洋, 住谷 陽輔, 吉澤 一成 (九大先導研)
固気界面での接着機構に与える歯科用接着剤の官能基の影響: 密度汎関数理論研究
- 1P34 伊藤 暖 (早稲田大院先進理工, 材物研), 真垣 航大 (山形大理), 中尾 嘉秀 (九産大生命科学), 松本 浩一 (近畿大理工), 安東 秀峰 (山形大院理工)
Prins 環化反応の立体選択性と分子内相互作用の影響
- 1P35 ○田中 輝 (岐阜大), 藪下 ひなた (岐阜大), 桑畑 和明 (横浜市大), 立川 仁典 (横浜市大), 宇田川 太郎 (岐阜大)
経路積分分子動力学法を用いた Curcumin の分子内水素結合構造に関する理論的研究
- 1P36 ○横山 麻紗子 (阪大院基礎工), 岸 亮平 (阪大院基礎工, 阪大 QIQB, 阪大 ICS-OTRI, 阪大 RCSEC), 北河 康隆 (阪大院基礎工, 阪大 QIQB, 阪大 ICS-OTRI, 阪大 RCSEC, 阪大 SRN-OTRI)
開殻フェナレニルπ積層多量体の二光子吸収特性の積層距離依存性についての理論研究
- 1P37 ○高井 範行 (北大院総合化学), 堤 拓朗 (北大院理), 斉田 謙一郎 (北大院理), 常田 貴夫 (北大院理, 神戸大院シス情), 武次 徹也 (北大院理, 北大 WPI-ICReDD)
反応性軌道エネルギー論による金属触媒クロスカップリング反応の電子論的説明
- 1P38 ○高木 牧人, 蓼沼 一輝, 島崎 智実, 立川 仁典 (横浜市大)
経路積分分子動力学法を用いた軽水/重水溶媒中での H^+/D^+ に関する理論的解析
- 1P39 ○岡田 健治 (阪大院基礎工), 岸 亮平 (阪大院基礎工, 阪大 RCSEC, 阪大 QIQB, 阪大 ICS-OTRI), 北河 康隆 (阪大院基礎工, 阪大 RCSEC, 阪大 QIQB, 阪大 ICS-OTRI, 阪大 SRN-OTRI)
ジフェノキノン骨格を含有する縮環系の一重項分裂過程に関与する低励起状態に関する理論研究

後半 (14:50-16:20)

- 2P01 ○金里 脩平 (名大院情報), 八十島 克尚 (名大院情報), 古賀 伸明 (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)
(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 :
Hf 触媒置換基の 1-オクテン挿入反応に及ぼす影響
- 2P02 ○麻田 俊雄, 満田 祐樹 (大阪公立大学)
電荷移動度に対する多体効果の理論的検討
- 2P03 ○岸 亮平 (阪大院基礎工, 阪大 IQB, 阪大 ICS-OTRI, 阪大 RCSEC), 正田 迅己 (阪大院基礎工), 吉田 航 (阪大院基礎工), 北河 康隆 (阪大院基礎工, 阪大 IQB, 阪大 ICS-OTRI, 阪大 SRN-OTRI, 阪大 RCSEC)
一次元開殻分子集合系の開殻性と三次非線形光学物性の解析についての理論研究
- 2P04 ○西田 穀倫 (北大院総化), 藤原 孝太郎 (北大院総化), 小林 正人 (北大院理, 北大 WPI-ICReDD), 武次 徹也 (北大院理, 北大 WPI-ICReDD)
DC-xTB-MD 法: 複合欠陥を含む超大規模系のための汎用的な量子化学計算手法の開発
- 2P05 ○神原 龍冬 (北大院総化), 堤 拓朗 (北大院理) 古屋 謙治 (九大基幹, 九大院総理工), 武次 徹也 (北大院理, 北大 WPI-ICReDD)
直接光イオン化に伴う OCS^{2+} の非断熱遷移分子動力学解析
- 2P06 ○白澤 悠貴 (名大院情報), 川瀬 智元 (名大院情報), 田中 佑一 (名大院情報), 吉田紀生 (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)
Li イオン電池の固体電解液相間膜におけるイオン伝導度: 3D-RISM 法と Q 学習による解析
- 2P07 ○豊嶋 凌我, 亀谷 陽平, 塩田 淑仁, 吉澤 一成 (九大先導研)
DFT 計算に基づく銅錯体による一酸化窒素還元反応機構解析
- 2P08 ○山田 蓮 (北大院総化), 松岡 和 (北大院理, JST-ERATO), 前田 理 (北大院理, 北大 WPI-ICReDD, JST-ERATO)
バーチャル配位子アシストスクリーニングを用いた新規カテラニ型反応の設計
- 2P09 ○安達 友揮, 平野 智倫, 森田 明弘 (東北大院理)
液液界面における界面誘電率の MD シミュレーション
- 2P10 金子 正徳 (横市大院), 小暮 紗奈 (日本女子大), 大森 鈴音 (日本女子大), 村岡 梓 (日本女子大), ○山下 晃一 (横市大院)
二重ペロブスカイト $\text{CsSn}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}\text{I}_3$ の光学物性と欠陥構造

- 2P11 ○菊間 悠矢, 村上 龍大, 松本 直樹, 伊吹 駿一, 高柳 敏幸 (埼玉大院理工)
機械学習を用いた分岐反応の解析
- 2P12 ○遠藤 昂晶, 池田 龍志, 村岡 恒輝, 中山 哲 (東大院工)
酸化セリウム触媒によるニトリル水和反応の多次元自由エネルギー解析
- 2P13 ○杉森 亮太 (阪大院基礎工), 岸 亮平 (阪大院基礎工, 阪大 QIQB, 阪大 ICS-OTRI, 阪大 RCSEC), 北河 康隆 (阪大院基礎工, 阪大 QIQB, 阪大 ICS-OTRI, 阪大 RCSEC, 阪大 SRN-OTRI)
積層反芳香族分子二量体の核独立化学シフト計算
- 2P14 ○尾作 知洋 (東大院工), 織茂 悠貴 (東大院工), 石川 顕一 (東大院工), 佐藤 健 (東大院工), 川島 雪夫 (IBM Quantum), Tanvi Gujarati (IBM Quantum)
量子コンピュータを用いた, 水素分子イオンの電子-核相関ダイナミクスの探索
- 2P15 Amit Shrestha, Yosuke Sumiya, Kazuki Okazawa, Takahiro Uwabe, and Kazunari Yoshizawa (Institute for Materials Chemistry and Engineering, Kyushu University)
Investigation of Adhesion Mechanism of Epoxy Resin with Graphene and Graphene Oxide [Surfaces](#). A Density Functional Theory Study.
- 2P16 ○曲 立豪 (北大院総合化学), 堤 拓朗 (北大院理), 小野 ゆり子 (北大 WPI-ICReDD), 武次 徹也 (北大院理, 北大 WPI-ICReDD)
反応空間投影法による反応経路ネットワークの低次元化: 組み合わせ最適化法による高速化
- 2P17 ○白井 聡一 (豊田中研), 岩切 北斗 (QunaSys), 菅野 恵太 (QunaSys), 堀場 貴裕 (豊田中研), 大宮 慶太 (QunaSys), 平井 宏俊 (豊田中研), 高 翔 (QunaSys)
スピン多重度を指定しない VQE 法による化学反応の理論的解析
- 2P18 ○小澤 二千夏 (中央大院理工), 黒木 菜保子 (中央大学, JST ACT-X), 森 寛敏 (中央大学)
DFTB による電子状態評価 ~生体分子中のハロゲン結合の例~
- 2P19 ○中村 泰司 (九大先導研), 鶴田 裕介 (九大先導研), 江木 晃人 (九大先導研), 田中 宏昌 (大同大教養), 西林 仁昭 (東大院工), 吉澤 一成 (九大先導研)
窒素固定反応におけるプロトン共役電子移動反応の理論研究: メタロセンを用いた反応の電子状態解析
- 2P20 ○張 至宇, 湯 之也, 岡崎 進 (東京大院新領域)
An MD simulation study of the mechanical response of polylactic acid under different various humidity
- 2P21 ○元木 康平 (中央大院理工), 森 寛敏 (中央大理工)
重水素創薬加速のための構造物性相関を志向したサリドマイド類縁体に関する理論的検討

- 2P22 ○木村 美都稀（上智大院理工），南部 伸孝（上智大理工）
S₂電子状態を介した硝酸の光解離過程に関する非断熱 *ab initio* 動力学研究
- 2P23 ○宮本 孟（阪大院基礎工），岡田 健治（阪大院基礎工），岸 亮平（阪大院基礎工，阪大
QIQB，阪大 ICS-OTRI，阪大 RCSEC），北河 康隆（阪大院基礎工，阪大 QIQB，阪大 ICS-
OTRI，阪大 RCSEC，阪大 SRN-OTRI）
有限直鎖分子集合系における局所的な相互作用の変化が一重項分裂ダイナミクスにもたらす
影響についての理論研究
- 2P24 ○村山 武来（北大院総化），小林 正人（北大院理，北大 WPI-ICReDD），青木 雅允（北大院
理），石橋 卓（北大院理），齋藤 琢弥（北大院理），寺本 央（関大システム理工），中村 壮
伸（産総研），武次 徹也（北大院理，北大 WPI-ICReDD）
パーシテント・ホモロジーを用いた反応経路地図からの記述子の創出
- 2P25 ○大坂 龍司，石田 豊和，笠原 健人，松林 信幸（大阪大）
加水分解酵素の機能制御を目指した共溶媒添加効果の全原子 MD による解析
- 2P26 ○鈴木 さら（京大院工），Soni Aman Govind（インド工科大），今村 洸輔（京大院工），
依光 英樹（京大院理），忍久保 洋（名大院工），東 雅大（京大院工），
佐藤 啓文（京大院工，京大福井センター）01
Z- (allyloxycarbonyl) methyl ラジカル環化反応過程における微視的溶媒効果
- 2P27 ○魏 博紀（東大院工），織茂 悠貴（東大院工），石川 顕一（東大院工），川島 雪生（IBM
Quantum），Tanvi Gujarati（IBM Quantum），佐藤 健（東大院工）
量子コンピュータによる Natural-expansion ansatz を用いた多電子系の第一原理シミュレ
ーション
- 2P28 ○堤 拓朗（北大院理），藤田 聡文（北大理），岩田 健一郎（北大院総合化学），小野 ゆり
子（北大 WPI-ICReDD），武次 徹也（北大院理，北大 WPI-ICReDD）
反応空間投影法と Natural Reaction Orbital に基づく非多峰性ペリ環状反応の反応機構解
析
- 2P29 ○俣木 圭太（北大院総合化学），堤 拓朗（北大院理），小野 ゆり子（北大 WPI-ICReDD），
武次 徹也（北大院理，北大 WPI-ICReDD）
反応空間投影法に基づく非多峰性ペリ環状反応の動的効果解析
- 2P30 ○岡田 拓明（北大院・総化），長田 裕也（北大・WPI-ICReDD，JST-ERATO），
前田 理（北大院・理，北大・WPI-ICReDD，JST-ERATO）
ベイズ最適化を用いた置換基組み合わせ最適化法の性能検証：熱的 Huisgen 反応生成物の位
置選択性制御
- 2P31 ○松本 直樹（埼玉大院理工），村上 龍大（埼玉大院理工，上智大理工），

菊間 悠矢（埼玉大院理工），伊吹 駿一（埼玉大院理工），高柳 敏幸（埼玉大院理工）
分子動力学法を用いた Post-Transition State Bifurcation (PTSB) 現象の理論解析

- 2P32 ○織茂 悠貴（東大院工），石川 顕一（東大院工），川島 雪生（IBM Quantum），
Tanvi Gujarati（IBM Quantum），佐藤 健（東大院工）
軌道最適化 Hardware-Efficient Ansatz による多電子ダイナミクスの実時間第一原理計算
- 2P33 ○岡澤 一樹（九大先導研），辻 雄太（九大院総理工），吉澤 一成（九大先導研）
一次元トポロジカル絶縁体モデルに基づいた高伝導性単分子ワイヤーの鎖長-伝導度依存
性：軌道論的理解
- 2P34 ○中山 直哉（阪大院基礎工），岡田 健治（阪大院基礎工），岸 亮平（阪大院基礎工，阪大
QIQB，阪大 ICS-OTRI，阪大 RCSEC），北河 康隆（阪大院基礎工，阪大 QIQB，阪大 ICS-
OTRI，阪大 SRN-OTRI，阪大 RCSEC）
ヘリセン骨格を有する分子の一重項分裂過程に関する電子励起状態についての理論研究
- 2P35 ○近藤 僚哉（北大院総化），James Nicholas Taylor（産総研），水野 雄太（北大電子研，
北大院総化，北大 ICreDD），Jean-Emmanuel Clement（北大電子研，北大 ICreDD），藤田 克
昌（阪大院工），原田 義規（京都府立医大），小松崎 民樹（北大電子研，北大院総化，北大
ICreDD）
ラマン分光組織学-化学-空間情報を用いた情報理論的病態評価-
- 2P36 ○熊谷 拓海（早大院先進理工），中嶋 裕也（早大理工総研・ENEOS 株式会社），
清野 淳司（早大院先進理工・早大理工総研）
複数のスペクトル情報と量子化学計算に基づく化合物の自動同定システムの開発
- 2P37 ○中筋 千尋（阪大院基礎工），岸 亮平（阪大院基礎工，阪大 QIQB，阪大 ICS-OTRI，阪大
RCSEC），北河 康隆（阪大院基礎工，阪大 QIQB，阪大 ICS-OTRI，阪大 SRN-OTRI，阪大
RCSEC），内田 健太（阪大院工），兒玉 拓也（阪大院工，阪大 ICS-OTRI），鳶巣 守（阪大院
工，阪大 ICS-OTRI）
フェナレニル型配位子を有するゲルミン錯体の二量体構造に関する理論研究
- 2P38 ○名畑 亓志（北大院総化），前田 理（北大院理）
一様電場中におけるアジリジン開環反応経路網の系統的探索
- 2P39 ○石田 豊和（産総研/未利用熱技術組合），須田 幸子（未利用熱技術組合），
石村 和也（クロスアビリティ）
計算化学と熱関連材料データベース（PropertiesDBweb）を活用した高密度蓄熱材の探求