

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

5月16日（火）

座長 杉崎 研司

10:00 1L01 ○土持 崇嗣（神大科学技術イノベ）、天能 精一郎（神大科学技術イノベ、神大システム情報）

スピン対称性を露わに考慮した配置間相互作用の結合電子対近似への拡張

10:20 1L02 ○大塚 勇起（北大触媒研）

1次補正をサンプリングした新しい selected CI 法

10:40 1L03 ○中嶋 浩之、黒川 悠索、中辻 博（量子化学研究協会研究所）

FC-LSE 法による原子・分子のシュレーディンガー解の計算 I.

休憩（11:00-11:10）

座長 西本 佳央

11:10 1L04 ○杉崎 研司（阪市大院理）、山本 悟（阪市大院理）、中澤 重顕（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）、工位 武治（阪市大院理）

量子コンピュータによる開殻分子の Full-CI 計算に向けて：量子レジスター上での配置状態関数の効率的生成法

11:30 1L05 ○立花 明知（京大院工）

量子電磁力学(QED)による EPR 観測の新しい予言

11:50 1L06 ○CHAN, Bun (Nagasaki University)

Efficient Computational Methods for the Accurate Calculation of Thermochemical Properties

休憩（12:10-13:10）

13:10 ポスター発表（奇数番号）

座長 大塚 勇起

14:40 1L07 ○西本 佳央（京大福井セ）

巨大拡張系への応用に向けた小数軌道占有数を用いた解析的三次微分

15:00 1L08 ○中田 浩弥、西本 佳央（京都大学）、フェドロフ ドミトリ（産総研）

FM0 法を用いた大規模基準振動解析計算の高速化とその応用

15:20 1L09 ○藤森 俊和（北大院総化）、小林 正人（北大院理、JST さきがけ、京大 ESICB）、武次 徹也（北大院理、京大 ESICB）

分割統治 SCF 計算における誤差の自動制御手法の開発

休憩（15:40-15:50）

座長 河合 信之輔

- 15:50 1L10 ○片岡 洋右 (法大生命)
分子動力学シミュレーションによる種々の結晶の融解エントロピーの密度依存性
- 16:10 1L11 坂下 達哉 (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)、
岡崎 進 (名大院工)
高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト MODYLAS における高速多重極展開法の高速化に向けて
- 16:30 1L12 ○野平 博之 (埼玉大)、野平 俊之 (京大エネ研)
分子振動理論による爆速の考察

休憩 (16:50-17:00)

座長 吉井 範行

- 17:00 1L13 ○永幡 裕 (Johns Hopkins, Chemistry), Rigoberto Hernandez (Johns Hopkins, Chemistry)
再交差のない反応分断面を用いた、熱浴依存反応速度の導出
- 17:20 1L14 ○河合 信之輔 (静岡大理)
水溶液中のイオンペア結合解離ダイナミクスにおける動的自由度の抽出
- 17:40 1L15 ○城塚 達也 (東北大院理)、平野 智倫 (東北大院理)、Michiel Sprik (ケンブリッジ大)、
森田 明弘 (東北大院理、京大 ESICB)
和周波発生分光法における三次の感受率の効果: 水の分子動力学シミュレーションによる研究
- 18:00 1L16 ○栗崎 以久男 (名大院情報, CREST), 高柳 昌芳 (名大院情科, CREST), Barberot Chantal
(名大院情科, CREST), 長岡 正隆 (名大院情報, CREST)
トロンビンのアロステリック制御・再訪

5月17日(水)

座長 横川 大輔

- 09:40 2L01 ○森 俊文(分子研, 総研大), 齊藤 真司(分子研, 総研大)
プロリン異性化酵素 Pin1 における酵素反応の反応ダイナミクス
- 10:00 2L02 ○甲田 信一(分子研), 齊藤 真司(分子研)
時計タンパク質概日リズムの反応モデル
- 10:20 2L03 ○炭竈 享司(福井大医), 老木 成稔(福井大医)
イオンチャネルでのイオン透過を分布関数の時間発展で捉える
- 10:40 2L04 ○宮原 友夫(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)
光駆動イオン輸送ロドプシンのメカニズム: SAC-GI 理論による研究

休憩 (11:00-11:10)

座長 森 俊文

- 11:10 2L05 ○石塚 良介(阪大基礎工, 京大 ESICB), Tu Kaimin(京大 ESICB), 松林 伸幸(阪大基礎工, 京大 ESICB)
MD/DFT 自己無撞着法による機能性流体の物性解析
- 11:30 2L06 ○横川 大輔(名大 ITbM, 名大院理)
溶媒和を考慮した量子化学計算における高精度な自由エネルギー算出を目指して
- 11:50 2L07 ○渡邊 宙志(東大先端研), Kubillus Maximilian(カールスルーエ工大), Tomas Kubar(カールスルーエ工大, 石北 央(東大先端研))
量子化学効果を取り込んだ陽イオンの溶媒和構造とダイナミクス

休憩 (12:10-13:10)

13:10 ポスター発表(偶数番号)

座長 藤井 幹也

- 14:40 2L08 ○伊藤 聡一(阪大院基礎工), 永海 貴識(阪大院基礎工), 中野 雅由(阪大院基礎工)
二重架橋型色素二量体における架橋間量子干渉効果を活用したシングレットフィッシュンおよび三重項-三重項消滅の分子設計
- 15:00 2L09 ○永海 貴識(阪大院基礎工), 伊藤 聡一(阪大院基礎工), 久保 孝史(阪大院理), 中野 雅由(阪大院基礎工)
テリレンのシングレットフィッシュンにおける分子間配置の理論設計
- 15:20 2L10 ○辻 雄太(九大分子システム), Prasad Dasari(インド工科大化学), Sabri Elatresh(コーネル大化学), Roald Hoffmann(コーネル大化学), Neil Ashcroft(コーネル大物理)
結晶構造予測と第一原理計算による新規エレクトロライド材料の探索

休憩 (15:40-15:50)

座長 福田 良一

- 15:50 2L11 ○花崎 浩太 (東北大院理), 河野 裕彦 (東北大院理)
非断熱動力学の代替アルゴリズムに関する研究
- 16:10 2L12 ○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)
非対称コマ分子の3次元整列の最適制御と時間分解X線回折像のシミュレーション
- 16:30 2L13 ○米原 丈博 (理化学研究所 計算科学研究機構), 中嶋 隆人 (理化学研究所 計算科学研究機構)
光エネルギー変換における複合分子系励起電子動力学法の開発
- 16:50 2L14 ○松岡 貴英 (京大福井センター), 高塚 和夫 (京大福井センター)
水分子のイオン化の背景にある非断熱電子動力学: Auger 電子と高強度レーザーによる光電子について

休憩 (17:10-17:20)

座長 辻 雄太

- 17:20 2L15 ○川嶋 英佑 (東大院工), 藤井 幹也 (東大院工), 山下 晃一 (東大院工)
有機薄膜太陽電池の電荷分離機構におけるエントロピーの影響
- 17:40 2L16 ○山本 憲太郎 (京大福井センター), 高塚 和夫 (京大福井センター)
電子波束動力的な電荷分離の機構によって駆動されるMn酸化物中の水の光分解サイクル
- 18:00 2L17 ○飯田 健二 (分子研), 野田 真史 (分子研), 信定 克幸 (分子研)
電界効果や電荷注入によるヘテロ界面系の電子物性制御の理論
- 18:20 2L18 ○今村 穰 (首都大理工), 田代 基慶 (東洋大), 河東田 道夫 (理研 AICS), 波田 雅彦 (首都大理工)
計算科学による高効率な有機薄膜太陽電池材料の探索と設計

理論化学研究会総会 (18:40~)

懇親会 (19:00-20:30)

5月18日(木)

座長 畑中 美穂

- 10:00 3L01 ○窪田 善之(関電技研), Tomas Bucko(Comenius Univ., Slovak Acad. Sci.)
第一原理分子動力学計算によるCO₂吸収液の反応中間生成物の安定性
- 10:20 3L02 ○小泉 健一(分子研, 京大ESICB), 信定 克幸(分子研, 京大ESICB), Mauro Boero
(IPCMS)
第一原理分子動力学法による金属酸化物担体上でのプラチナクラスター凝集過程のシミュレーション
- 10:40 3L03 ○野田 真史(分子研), 山口 真生(東大院工), 信定 克幸(分子研)
金属有機構造体内部における分子の近接場光二倍波励起
- 11:00 3L04 ○河野 裕彦(東北大院理), 中村 公亮(東北大院理), 落合 宏平(東北大院理), 岡田 朝彦(東北大院理), 及川 啓太(東北大院理), 菱沼 直樹(東北大院理), 花崎 浩太(東北大院理), 菅野 学(東北大院理), 高梨 司(東北大多元研), 永谷 清信(京大院理), 上田 潔(東北大多元研)

XFEL 誘起超高速ダイナミクスの実験・理論展開

休憩 (11:20-11:30)

座長 飯田 健二

- 11:30 3L05 ○リントウルオト 正美(京府大生命環境), 山田 知明(京府大生命環境), リントウルオト ユハミカエル(京大院工)
QM/MM 計算による銅、亜鉛を含む活性酸素除去触媒の反応機構の解明
- 11:50 3L06 ○吉村 誠慶(茨城大理), 前田 理(北大院理), 澤村 正也(北大院理), 武次 徹也(北大院理), 諸熊 奎治(京大・福井謙一記念研究センター), 森 聖治(茨城大理)
Rh(I)-BINAP 触媒によるアリルアミンの異性化経路の探索とグラフを用いた経路最適化
- 12:10 3L07 ○住谷 陽輔(北大院総合化学), 前田 理(北大院理)
多成分連結反応の反応経路ネットワークとその速度論的理解: パッセリーニ反応
- 12:30 3L08 ○畑中 美穂(奈良先端大研究推進, JST さきがけ), 日下部 彩(近大理工), 青木 伸(東京理科大薬)
不斉亜鉛触媒を用いるアルドール反応の立体選択性発現機構

ポスター発表

第一日目 (16日) 奇数番号 ; 第二日目 (17日) 偶数番号

- P01 ○東 雅大, 喜屋武 茜, 亀井 翔矢, 與那嶺 綱希, 有光 暁 (琉大理)
シンコナアルカロイド触媒を用いた α, β -不飽和アルデヒドの高立体選択的フッ素化反応に関する理論的研究
- P02 ○蔵本 裕哉, 赤瀬 大, 相田 美砂子 (広島大院理・広島大 QuLiS)
トリメチルアミン-N-オキシドの特異的な溶媒和についての理論化学的研究
- P03 ○今井 拓也, 赤瀬 大, 相田 美砂子 (広島大院理・広島大 QuLiS)
溶媒効果をあらわに取り入れた溶液 NMR 遮蔽定数に関する理論化学的研究
- P04 ○楊 于, 赤瀬 大, 相田 美砂子 (広島大院理・広島大 QuLiS)
Quantum chemical study on the electronic properties of oligoacenes and their isomers.
- P05 ○箕土路 祐希 (和歌山大院システム工), 山門 英雄 (和歌山大院システム工), 大野 公一 (量子化学探索研究所・東北大院理)
RNM 近似下での GSHS 法による炭素結晶の構造探索
- P06 ○樽見 望都, 松崎 洋市, 鈴木 公仁 (新日鐵住金・先端研)
工業プロセスにおけるキノン化合物の酸化還元及び分解反応に関する理論的研究
- P07 ○松崎 洋市 (新日鐵住金先端研)
分子ワイヤを介した非弾性電子トンネリングに関する理論的研究
- P08 ○太田 幸宏 (RIST 神戸センター), 志賀 基之 (原子力機構)
アニオンの複合体中の水素結合におけるプロトン化学シフトの溶媒・温度効果
- P09 ○ラドーツキ ベンツェ (神戸大院システム情報), 天能 精一郎 (神戸大院科学技術イノベ)
Stochastic perturbation theories based on the MSQMC method
- P10 ○小関 史朗 (阪府大院理), 豊田 東雄 (宮城教育), 村松 隆 (宮城教育), 麻田 俊雄 (阪府大院理), 松永 仁城太 (ロングアイランド大学)
Azides および Nitrile Imines 置換体における擬 Jahn-Teller 項の評価
- P11 ○西川 拓哉 (阪府大院理), 竹中 規雄 (名大院情報, 京大 ESICB), 鈴木 雄一 (名大院情報), 金丸 未紀 (阪府大院理), 麻田 俊雄 (阪府大院理), 小関 史朗 (阪府大院理), 長岡 正隆 (名大院情報, 京大 ESICB, CREST-JST)
Li イオン二次電池の正極表面における SEI 膜形成に対する添加剤効果の理論的解析
- P12 ○中野 雅由, 福田 幸太郎, 伊藤 聡一, 松井 啓史, 永海 貴識, 高椋 章太, 西垣 佑亮, 渡部 晃希 (阪大院基礎工)
開殻一重項分子系のジラジカル性およびイオン性因子について
- P13 ○北河 康隆, 名取 圭紀, 寺本 玲奈, 青木 笙悟, 中野 雅由 (阪大院基礎工)
1次元ニッケル3核錯体のスピン状態と電気伝導性に関する理論研究
- P14 ○松井 啓史, 渡部 晃希, 中野 雅由 (阪大院基礎工)
 π ラジカル多量体の非線形光学物性への静電場印加効果
- P15 ○藤吉 純也, 永海 貴識, 松井 啓史, 高椋 章太, 西垣 佑亮, 渡部 晃希, 岸 亮平, 中野 雅由 (阪大院基礎工)
反芳香族ポルフィリンおよびその二量体の開殻性と三次非線形光学特性に関する理論研究
- P16 ○渡部 晃希, 松井 啓史, 伊藤 聡一, 岸 亮平, 中野 雅由 (阪大院基礎工)
環状チアジラジカル二量体の第二超分極率と励起特性に対する電場印加効果の理論研究
- P17 ○西垣 佑亮, 松井 啓史, 高椋 章太, 岸 亮平 (阪大院基礎工), 辻 勇人 (神奈川大理), 中野 雅由 (阪大院基礎工)
炭素架橋オリゴパラフェニレンビニレン類縁体の三次非線形光学物性についての理論研究
- P18 ○名取 圭紀, 青木 笙悟, 北河 康隆, 中野 雅由 (阪大院基礎工)
Ir(III)(ppy)_n(dpm)_{3-n} 錯体の配位種が光特性に及ぼす影響に関する理論研究
- P19 ○青木 笙悟, 名取 圭紀, 北河 康隆, 中野 雅由 (阪大院基礎工)
ボロンジピロメテンのフロンティア軌道に対する置換基効果の理論研究
- P20 ○半田 和也, 松林 伸幸 (阪大院基礎工)

分岐構造を持つポリマー系における吸水能の自由エネルギー解析

P21 ○増谷 佳一, 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 β シート凝集の構造および自由エネルギー解析

P22 ○菊辻 卓真, 金 鋼, 松林 伸幸 (阪大院基礎工)

水の過冷却過程における水素結合破断の理論解析: 2次元反応座標系で遷移状態理論が破綻する例とその原因の追求

P23 ○黒川 悠索, 中嶋 浩之, 中辻 博 (量子化学研究協会・研究所)

FC-LSE法による原子・分子のシュレーディンガー解の計算 II.

P24 ○Jing Lu, Shigeyoshi Sakaki (FIFC, Kyoto Univ.)

A DFT Insight into Core-shell Preferences for Bimetallic $Pt_{42}M_{13}$ (M=Mo, Tc, Ru, Rh, Pd, W, Re, Os, and Ir) Nanoclusters

P25 ○Hong Zheng (FIFC, Kyoto Univ.), Yoshiaki Nakao (Dept. of Material Chemistry, Kyoto Univ.), Shigeyoshi Sakaki (FIFC, Kyoto Univ.)

Why can Rhodium-Aluminum Bonded Complex Cleave very Strong C-O bond: Theoretical Study

P26 ○Jia-Jia Zheng (WPI-iCeMS Kyoto Univ. ・ FIFC Kyoto Univ.), Shinpei Kusaka (WPI-iCeMS, Kyoto Univ.), Ryotaro Matsuda (WPI-iCeMS Kyoto Univ. ・ Dept. Appl. Chem. Nagoya Univ.), Susumu Kitagawa (WPI-iCeMS, Kyoto Univ.), Shigeyoshi Sakaki (FIFC Kyoto Univ.)

CO₂ and C₂H₂ Adsorptions in a Flexible Metal-Organic Framework: A Combined Study of Cluster Model and Periodic Boundary Computational Methods

P27 ○Rong-Lin Zhong (FIFC, Kyoto Univ.), Masahiro Nagaoka (Dept. of Material Chemistry, Kyoto Univ.), Yoshiaki Nakao (Dept. of Material Chemistry, Kyoto Univ.), Shigeyoshi Sakaki (FIFC, Kyoto Univ.)

New Oxidative Addition of Nitrobenzene to Palladium(0) Complex: Characteristic Features in Electronic Process

P28 ○中垣 雅之 (京大福井セ), Ricardo Rodriguez (トゥールーズ大ヘテロ化研), 加藤 剛 (トゥールーズ大ヘテロ化研), 榑 茂好 (京大福井セ)

ルイス塩基安定化シリレン分子を用いた可逆的 Si-Si (H) 結合生成反応の機構解明と制御

P29 ○青野 信治, 中垣 雅之, 榑 茂好 (京大福井セ)

7族、10族金属サレン錯体の一電子酸化体の局在/非局在性電子状態: 吸収スペクトルと溶媒効果

P30 ○Akhilesh K. Sharma, Sho Nakajima, W. M. C. Sameera, Masaharu Nakamura and Keiji Morokuma (FIFC, Kyoto Univ.)

Computational Insights on Mechanism Iron-SciOPP-Catalyzed Alkyl-Aryl Coupling Reaction

P31 ○伊勢川 美穂 (京大福井セ), WMC Sameera (北大理), Akhilesh Sharma (京大福井セ), 小江 誠司 (九大 I2CNER), 諸熊 奎治 (京大福井セ)

ヒドロゲナーゼモデル錯体による水素分子活性化の理論的研究

P32 ○鈴木 聡, 諸熊 奎治 (京大福井セ)

凝集誘起発光を示すアルキルアミノアレーンにおける発光挙動の理論化学的解析

P33 ○中村 康一 (京大国際センター・エジプト日本科技大院工)

電子状態計算による低次元半導体のフォノン伝搬解析

P34 ○梅原 一起 (京大院理)

分子動力学法による水の分子間振動の3次元赤外・ラマン分光解析

P35 ○坂本 想一, 谷村 吉隆 (京大院理)

エキシトン移動結合電子移動反応系のモデル化と量子階層方程式による計算

P36 ○伊藤 圭人, 瀬波 大土 (京大院工)

場の量子論によるキラル分子の電子カイラリティに関する理論的研究

P37 ○野曾原 直之, 築島 千馬, 瀬波 大土, 立花 明知 (京大院工)

Primary Rigged QEDに基づく少数粒子系の時間発展

P38 ○高橋 俊貴, 立花 明知, 市川 和秀, 伊藤 圭人 (京大院工)

QEDに基づく時間依存性ハミルトニアンを用いた時間発展シミュレーションについての研究

- P39 ○築島 千馬, 瀬波 大士 (京大院工)
電気伝導中におけるローレンツ力密度とテンション密度の関係についての理論的研究
- P40 ○橋本 康汰, 天野 健一, 西 直哉, 作花 哲夫 (京大院工)
実験から得られるフォースカーブから平面基板上の溶媒・コロイド粒子の数密度分布を求める分析理論 : 粒子間動径分布関数と OZ-HNC を用いる新手法
- P41 ○笠原 健人 (京大院工), 佐藤 啓文 (京大院工・京大 ESICB)
分子性液体の Smoluchowski 方程式を用いた一分子拡散の記述
- P42 ○矢木 智章 (京大院工), 佐藤 啓文 (京大院工・京大 ESICB)
脂質膜を志向した分子性二次元流体のための積分方程式理論
- P43 ○福田 良一 (京大 ESICB), 江原 正博 (計算科学研究センター・分子研・京大 ESICB)
Cu/Ru 合金クラスターの構造, 電子状態, 触媒活性
- P44 ○高木 望 (京大 ESICB), 石村 和也 (分子研), 福田 良一 (京大 ESICB), 江原 正博 (分子研・京大 ESICB), 榊 茂好 (京大 FIFC・京大 ESICB)
金属微粒子上の NO 二量化反応に関する理論研究
- P45 ○竹中 規雄 (京大 ESICB・名大院情報), 藤江 拓哉 (名大院情報), 長岡 正隆 (名大院情報・京大 ESICB・CREST-JST)
高濃度電解液を用いた Li イオン電池の固体電解液相間(SEI)膜形成機構の理論的解析
- P46 ○山口 毅 (名大院工)
過冷却水におけるずり応力と液体構造のカップリング
- P47 ○伊東 真吾 (名大院理), 岡本 祐幸 (名大院理), Stephan Irle (名大院理・ITbM)
GAMESS パッケージへのレプリカ交換傘サンプリング法およびフラグメント分子軌道レプリカ交換分子動力学法の導入
- P48 ○白井 聡一, 脇 稔, 稲垣 伸二 (豊田中研)
メソ多孔有機シリカの細孔表面に形成された錯体間の電子移動と光触媒活性に関する理論的研究
- P49 ○中川 節子 (金城学院大)
DNA の分極ブロックモデルポテンシャル
- P50 ○鳥居 肇 (静岡大教育)
液体ホルムアミドにおける分子の並進・回転運動に伴う電子の振舞いとテラヘルツスペクトル形状の解析
- P51 ○河津 励 (理研), 立川 仁典 (横浜市大生命ナノ)
C60 フラーレンの量子揺らぎによる内部磁場環境への寄与
- P52 ○鹿志村 達彦, 池崎 智哉, 太田 悠介, 藪下 聡 (慶大院理)
ICN 分子の A バンド光解離生成物 CN の回転微細構造準位分布の非統計性に関する理論的研究
- P53 ○松崎 黎, 藪下 聡 (慶大院理)
複素基底関数法による光イオン化微分断面の計算
- P54 中條 恵理華, 増田 友秀, 古舘 駿貴, ○藪下 聡 (慶大院理工)
 $\text{Ln}(\text{COT})_2^-$ の負イオン光電子スペクトルに関する理論的研究
- P55 ○志賀 基之 (原子力機構)
並列分子シミュレーションコード PIMD について
- P56 ○中谷 直輝 (首都大院理工)
演算子の行列積表現を利用した密度行列繰込み群と並列化
- P57 ○砂賀 彩光, 阿部 穰里, 波田 雅彦 (首都大院理工)
4成分相対論にも適用可能な超微細結合定数の演算子に関する検討
- P58 ○村田 レオ, 今村 穰, 波田 雅彦 (首都大理工)
PbS 量子ドットにおけるパッシベーションに関する理論的検討
- P59 ○菅野 翔平 (首都大理工), 今村 穰 (首都大理工), 佐伯 昭紀 (阪大工), 波田 雅彦 (首都大理工)
ペロブスカイト太陽電池における有機カチオンの回転と無機骨格の振動に関する理論的解析

- P60 ○奥脇 弘次 (立教大理), 土居 英男 (立教大理), 望月 祐志 (立教大理・東大生研), 小沢 拓 ((株)JSOL), 泰岡 顕治 (慶大理工)
FMO 計算に基づくマルチスケールシミュレーション手法の開発と先導的応用
- P61 ○時子山 宏明 (量子化学探索研究所), 渡邊 啓正 (量子化学探索研究所), 大野 公一 (量子化学探索研究所, 東北大院理)
DFT 及び HF 計算レベルでのベンゼンの異性化経路の NeoGRRM を用いた高速自動全探索
- P62 ○坂田 健 (星薬大), 菊池 将馬 (星薬大), 結城 雅弘 (東大院工), 中島 一成 (東大院工), 西林 仁昭 (東大院工)
ペンダントエーテルを有する硫黄架橋二核ルテニウム錯体を用いた水素分解反応に関する DFT 計算
- P63 ○中井 浩巳, 中村 亮太, 中嶋 裕也, 柴田 高範, 高野 秀明 (早大理工)
カチオン性イリジウム触媒を用いた C-H 活性化反応における相対論効果
- P64 ○櫛嶋 拓朗¹, 五十幡 康弘¹, 清野 淳司^{2,3}, 影山 椋¹, 中井 浩巳¹⁻⁴ (¹早大先進理工・²早大理工研・³JST-CREST・⁴京大 ESICB)
インフォマティクスを用いた交換相関汎関数の開発
- P65 ○影山 椋¹, 藤波 美起登¹, 清野 淳司^{2,3}, 五十幡 康弘¹, 中井 浩巳¹⁻⁴ (¹早大先進理工・²早大理工研・³JST-CREST・⁴京大 ESICB) インフォマティクスを用いた運動エネルギー汎関数の開発
- P66 ○速水 雅生¹, 清野 淳司^{2,3}, 中井 浩巳¹⁻⁴ (¹早大先進理工・²早大理工研・³JST-CREST・⁴京大 ESICB)
ユニタリー変換を用いた二成分相対論法におけるゲージ原点非依存な核磁気遮蔽定数計算手法の開発
- P67 ○小野 純一¹, 今井 みの莉¹, 中井 浩巳¹⁻⁴ (¹早大先進理工・²早大理工研・³JST-CREST・⁴京大 ESICB)
DC-DFTB-MD 法によるバクテリオロドプシンのプロトン放出基における振動ダイナミクスの解析
- P68 ○大越 昌樹^{1,4}, 周 建斌², 中井 浩巳¹⁻⁴ (¹早大先進理工・²早大理工研・³JST-CREST・⁴京大 ESICB)
高濃度電解液におけるイオン拡散に関する理論的研究
- P69 黄 毅聰¹, ○西村 好史², 小野 純一¹, 鹿又 宣弘¹, 中井 浩巳¹⁻⁴ (¹早大先進理工・²早大理工研・³JST-CREST・⁴京大 ESICB)
シクロファン異性化反応の密度汎関数強束縛メタダイナミクスシミュレーション
- P70 ○Qi Wang^{1,3}, Yasuhiro Ikabata¹, Junji Seino¹, Hiromi Nakai¹⁻⁴, Yoshiaki Shoji⁵, Takanori Fukushima⁵ (¹早大理工研・²早大先進理工・³JST-CREST・⁴京大 ESICB・⁵東工大化生研)
Room-Temperature Phosphorescence in Heavy-Metal-Free Molecules
- P71 ○周 建斌¹, 中井 浩巳¹⁻⁴ (¹早大理工研・²早大先進理工・³JST-CREST・⁴京大 ESICB)
Automatized DFTB Parameterization for Transition Metals
- P72 ○浦谷 浩輝, 山下 晃一 (東大院工・JST-CREST)
第一原理計算に基づくペロブスカイト型太陽電池の動作機構および性能向上指針に関する研究
- P73 ○三澤 奈々, 藤井 幹也, 新谷 亮, 津田 知拓, 野崎 京子, 山下 晃一 (東大院工)
キノイド型縮環オリゴシロールの共役長に対する特異な LUMO 準位依存性に関する理論的考察
- P74 ○岡島 亮 (東大院総合文化・東大先端研), 山下 雄史 (東大先端研)
抗原抗体界面における塩橋安定性の分子動力学計算による研究
- P75 ○古濱 彩子, 林 岳彦, 山本 裕史, 鎌迫 典久 (国立環境研究所)
急性毒性値を用いたオオミジンコ慢性毒性予測モデルの検証
- P76 ○多田 幸平, 前田 泰, 山崎 眞一, 田中 真悟 (産総研)
炭素電極担持 Rh ポルフィリン錯体の電子状態解析
- P77 中島 薫 (東北大院理), 吉田 将隆 (東北大院理), 中嶋 隆 (京大エネ研), ○大槻 幸義 (東北大院理)
レーザーパルスを用いた同位体選択的な分子整列制御の最適化
- P78 ○田代 智大, 吉田 将隆, 大槻 幸義, 河野 裕彦 (東北大院理)
最適非共鳴レーザーパルス誘起の断熱ポテンシャル曲線を利用した IBr 光解離の制御
- P79 ○鈴木 和磨, 荒井 雄太, 菅野 学, 河野 裕彦 (東北大院理)
ガウス基底波束動力学法のレーザー誘起電子ダイナミクスへの適用
- P80 ○岡田 朝彦, 及川 啓太, 菱沼 直樹, 花崎 浩太, 菅野 学, 河野 裕彦 (東北大院理)
ヒドロキシラジカルが誘起する DNA 鎖切断の動力学シミュレーション

- P81 ○赤間 知子 (北大院理), 小林 理 (横浜市大院生命ナノ), 南部 伸孝 (上智大理工), 武次 徹也 (北大院理)
演算子変換による効率的な時間発展法 : 3 項間漸化式法
- P82 ○小山 拓也 (北大院総合化学), 赤間 知子 (北大院理), 武次 徹也 (北大院理)
第一原理ダイナミクスによる NH_2^+ の解離性再結合反応に関する理論的研究
- P83 ○原渕 祐 (JST さきがけ・北大院理), 斉田 謙一郎 (北大院理), 武次 徹也 (北大院理), 前田 理 (北大院理)
ポテンシャル交差構造探索の新実装 : 勾配射影法と人工力誘起反応法に基づく構造探索
- P84 ○堤 拓朗 (北大院総合化学), 山本 梨奈 (北大院総合化学), 原渕 祐 (北大院理), 武次 徹也 (北大院理)
AIMD/spin-flip TDDFT による α -メチルスチルベンの光異性化ダイナミクスの解明
- P85 ○斉田 謙一郎 (北大院理), 岡田 治樹 (北大院理), 高木 牧人 (北大院総化), 原渕 祐 (北大院理・JST さきがけ), 前田 理 (北大院理)
周期境界条件を課した分子結晶系におけるポテンシャル交差点の系統的探索手法
- P86 ○蝦名 昌徳 (北大院総合化学), 岩佐 豪 (北大院理・京大 ESICB), 武次 徹也 (北大院理・京大 ESICB)
Zn(II) 錯体の励起状態プロトン移動に由来した発光機構の解明
- P87 ○岩佐 豪 (北大院理・京大 ESICB), Andrey Lyalin (NIMS-GREEN), 武次 徹也 (北大院理・京大 ESICB)
Cu/CeO₂ の電子物性と NO 解離反応に対する触媒活性
- P88 ○市野 智也, 前田 理 (北大院理), Duo Wei, Thomas Dombay, Christophe Darcel, Jean-Baptiste Sortais (レンヌ第一大学), Sylviane Sabo-Etienne, Mary Grellier (CNRS, トゥールーズ大学)
スチレンの Fe 触媒-脱水素ヒドロホウ素化に関する理論的研究 : 触媒サイクルと速度論シミュレーション
- P89 ○高 敏 (北大理, ESICB), 中原 真希 (北大院総化), Lyalin Andrey (NIMS GREEN), 武次 徹也 (北大理・京大 ESICB・NIMS GREEN)
h-BN/Au(111) に担持した金クラスターの触媒活性に関する理論的研究
- P90 ○小林 正人 (北大院理・JST さきがけ), 児玉 良輔 (北大理), 武次 徹也 (北大院理)
分割統治 Hartree-Fock-Bogoliubov エネルギー勾配法の開発