

## 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15日(火)

座長 吉井 範行

- 12:40 1L01 ○甲田信一, 齊藤真司(分子研, 総研大)  
時計タンパク質 KaiC の一方向的アロステリに関する反応モデル構築に基づく考察
- 13:00 1L02 ○伊藤暁(分子研, 総研大), 奥村久士(分子研, 総研大)  
水溶液表面及び水中での A $\beta$  単量体に関する分子動力学シミュレーション
- 13:20 1L03 ○丸山豊(理研 AICS), 光武亜代理(慶應大理工)  
シニョリン蛋白質の構造安定性と主鎖側鎖の寄与

休憩(13:40-13:50)

座長 石塚 良介

- 13:50 1L04 ○高橋まさえ(東北大院農)  
テラヘルツ分光スペクトルに観測される分子間振動とその非調和性の第一原理計算による研究
- 14:10 1L05 ○小泉 健一(分子研, 京大 ESICB), 畠山 允(理研), Mauro Boero(ストラスブール大), 信定 克幸(分子研, 京大 ESICB), 堀 裕和(山梨大), 御園生 拓(山梨大), 中村振一郎(理研)  
Ab initio liquid water を用いた光励起されたポルフィラ-334 分子からのエネルギー緩和のダイナミクスの考察
- 14:30 1L06 ○剣持貴弘(同志社大生命医), 吉川祐子(同志社大生命医), 吉川研一(同志社大生命医)  
多価カチオンによる DNA の折り畳み転移: 2価と3価の拮抗的作用の謎に迫る

休憩(14:50-15:00)

座長 藤本 和士

- 15:00 1L07 ○片岡洋右(法大生命)  
ファンデルワールズ式による Li と氷の相図
- 15:20 1L08 ○吉井範行(名大院工計算セ, 名大院工), 安藤嘉倫(名大院工計算セ), 岡崎 進(名大院工, 名大院工計算セ)  
高速多重極展開法の適用可能なシミュレーションセル形状の拡張
- 15:40 1L09 ○浦野諒(名大工), 吉井範行(名大工), 篠田 渉(名大工), 岡崎進(名大工)  
高速多極子展開法(FMM)をもちいた荷電系の自由エネルギー計算法

休憩(16:00-16:10)

座長 伊藤 暁

- 16:10 1L10 ○藤本和士, 服部智成, 篠田 渉, 岡崎 進(名大院工)  
ガラス状高分子 PMMA の衝撃破壊に関する分子論的研究
- 16:30 1L11 ○石塚 良介(阪大院基礎工, 京大 ESICB), 尾崎 泰助(東大物性研), 松林 伸幸(阪大院基礎工, 京大 ESICB)  
オーダーN法を用いた MD/DFT 自己無撞着法による分子力場構築
- 16:50 1L12 ○高橋英明(東北大院理), 神戸宏之(東北大院理), 森田明弘(東北大院理)  
拡張型 QM/MM 法の方法論開発とその応用
- 17:10 **ポスター発表(奇数番号)**

5月16日(水)

座長 大塚 勇起

- 9:40 2L01 ○松下 雄一郎(東大院工), 小杉 太一(東大院工), 西 紘史(東大院工), 古川 頼誉(東大院工)  
CCSD 法による一電子スペクトルの計算: 孤立原子への適用
- 10:00 2L02 ○松下 雄一郎(東大院工), 小杉 太一(東大院工), 西 紘史(東大院工), 古川 頼誉(東大院工)  
CCSD 法に立脚した周期物質の準粒子バンド構造
- 10:20 2L03 ○ラドーツキ ベンツェ (神戸大学), 天能 精一郎(神戸大学)  
Investigations of the unlinked contributions in stochastic perturbation theory

休憩(10:40-10:50)

座長 伊藤 聡一

- 10:50 2L04 ○大塚 勇起(北大触媒研)  
Monte Carlo correction CI (MC3I) 法と MC3I Perturbation Theory (PT)法の開発と応用
- 11:10 2L05 ○杉崎 研司(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: 多配置波動関数の効率的生成法
- 11:30 2L06 ○黒川 悠索(QCRI), 中嶋 浩之(QCRI), 中辻 博(QCRI)  
Free Complement 法による二原子分子の基底・励起状態のポテンシャルカーブの計算
- 11:50 2L07 中嶋 浩之, 黒川 悠索, 中辻 博(量子化学研究協会研究所)  
FC-CF 理論に基づく簡単な分子の変分解と exact 解の計算

休憩(12:10-13:10)

13:10 ポスター発表(偶数番号)

座長 齊田 謙一郎

- 14:40 2L08 ○永海貴識(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), Benoît Champagne(ナミュール大化学), Vincent Liégeois(ナミュール大化学)  
磁場誘導電流の量子化学計算に基づいた開殻一重項分子における芳香族性の検討
- 15:00 2L09 ○高椋章太, 中野雅由(阪大院基礎工)  
アルカリ土類金属逆サンドイッチ錯体におけるジラジカル因子と三次非線形光学特性についての理論的研究
- 15:20 2L10 ○五十幡 康弘(早大理工総研), 大山 拓郎(早大先進理工), 速水 雅生(早大先進理工), 清野 淳司(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)  
2成分 picture change 補正相対論的密度汎関数理論の開発

休憩(15:40-15:50)

座長 庄司 光男

- 15:50 2L11 ○佐藤有汰留, 阿部穰里, 波田正彦(首都大院・理)  
バクテリアによるウラン同位体分別の理論的研究
- 16:10 2L12 ○近藤 有輔(北大院理), 小林 正人(北大院理), 赤間 知子(北大院理), 野呂 武司(北大院理), 武次 徹也(北大院理)  
CeX (X=F,H)の擬縮退電子状態に対するスピン軌道相互作用を考慮した精密計算
- 16:30 2L13 ○伊藤 広伸(静岡大教育), 鳥居 肇(静岡大教育)  
水素結合形成した水分子の静電分極による電子密度変化の解析と分極モデルの開発
- 16:50 2L14 ○竹中 将斗(北大院総化), 岩佐 豪(北大院理, 京大 ESICB), 武次 徹也(北大院理, 京大 ESICB)  
非一様電場下でのラマン分光計算手法の開発

休憩(17:10-17:20)

座長 杉崎 研司

- 17:20 2L15 ○齊田 謙一郎(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), 岡田 治樹(北大院理), 前田 理(北大院理)  
結晶中におけるベンゼン分子の項間交差経路の系統的探索
- 17:40 2L16 ○庄司光男(筑波大)、常盤恭樹(筑波大, 東北大)、山崎笙太郎(筑波大)、栢沼愛(筑波大)、重田育照(筑波大)  
分子構造探索および反応経路探索のための新手法(GLAS 法)の提唱
- 18:00 2L17 ○堤 拓朗(北大院総合化学), 原渕 祐(北大院理・JST さきがけ), 小野ゆり子(北大院理), 前田 理(北大院理), 武次徹也(北大院理)  
静的反応経路網に基づく AIMD 古典軌道解析
- 18:20 2L18 ○大野公一(量子化学探索研、東北大院理), 高田谷吉智(和歌山大システム工), 山門英雄(和歌山大システム工)  
分子クラスターの構造探索および安定性の検討:ホルムアルデヒド2-4量体

理論化学研究会総会(18:40~)

懇親会

5月17日(木)

座長 菅野 学

- 9:40 3L01 ○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)  
電子の往復運動に駆動されるプロトンポンプの化学的な機構について: 非断熱電子動力学による解析
- 10:00 3L02 ○高塚和夫(京大福井センター)  
Jahn-Teller, Hellmann-Feynman, 多次元非断熱動力学
- 10:20 3L03 ○小林 理(横市大), 南部 伸孝(上智大院), 立川 仁典(横市大院)  
溶媒存在下における励起寿命

休憩(10:40-10:50)

座長 甲田 信一

- 10:50 3L04 ○立花 明知(京大)  
量子電磁力学(QED)による二重スリット現象ならびに EPR 観測における粒子の位置情報の決定論的予言
- 11:10 3L05 ○福田 将大(東大物性研), 馮 凌瑜(東大新領域), 藪押 慶祐(東大新領域), 杉本 宜昭(東大新領域), 尾崎 泰助(東大物性研)  
DFT による原子間力顕微鏡の探針と結晶表面の原子間の化学結合力の評価
- 11:30 3L06 ○花崎 浩太(京大福井センター), 河野 裕彦(東北大院理)  
熱浴自由度と結合した非断熱動力学の経路積分定式化
- 11:50 3L07 ○菅野 学(東北大院理), Benoit Mignolet(Univ. of Liege), Françoise Remacle(Univ. of Liege), 島倉 紀之(新潟大院), 小関 史朗(阪府大院理), 河野 裕彦(東北大院理), 藤村 勇一(東北大院理, 台湾国立交通大)  
光励起ピラジンの超高速無輻射失活過程: 核波束動力学と光電子スペクトル計算による解析

休憩(12:10-13:30)

座長 中農 浩史

- 13:30 3L08 ○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)  
非対称コマ分子の最適整列制御と時間分解 X 線回折像のシミュレーション
- 13:50 3L09 ○米原文博(理化学研究所), 中嶋隆人(理化学研究所)  
分子集合系における光励起電子動力学の解明に向けた量子動力学法の開発
- 14:10 3L10 ○佐藤 健, パサック ヒマドリ, 織茂 悠貴, 石川 顕一(東大院工)  
多電子ダイナミクスのための時間依存結合クラスター理論の開発

休憩(14:30-14:40)

座長 森 俊文

- 14:40 3L11 ○三浦伸一(金沢大理工)  
変分経路積分分子動力学法の開発と分子系への応用
- 15:00 3L12 ○大場優生(横市大院生命ナノ), 小林理(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合物の解析
- 15:20 3L13 ○辻 雄太(九大先導研), 吉澤 一成(九大先導研)  
酸化イリジウム表面でのメタンの CH 結合活性化についての理論的研究

休憩(15:40-15:50)

座長 辻 雄太

- 15:50 3L14 ○白井聡一, 佐藤俊介, 鈴木登美子, 陣内亮介, 大庭伸子, 旭良司, 森川健志(豊田中研)  
Ru 錯体/N-Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> 複合型 CO<sub>2</sub> 還元光触媒の電子状態に対する Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> 表面 NH<sub>3</sub> 吸着の影響

- 16:10 3L15 松三 勇介(京大院工), ○中農 浩史(京大院工、ESICB), 佐藤 啓文(京大院工, ESICB)  
金属電極-電解液界面電子移動に対する QM/MM 自由エネルギー計算
- 16:30 3L16 ○大越 昌樹(早大先進理工, 京大 ESICB), 周 建斌(早大理工総研), 中井 浩巳(早大先進理工, 京大 ESICB, 早  
大理工総研, JST-CREST)  
Na イオン二次電池用高濃度電解液におけるキャリアイオン拡散の理論的解析

## ポスター発表

第一日目(15日)奇数番号；第二日目(16日)偶数番号

- [P1] ○宮崎 玲(北大院総合化学), 金 雄傑(東大院工), 吉井 大地(東大院工), 谷田部 孝文(東大院工), 山口 和也(東大院工), 水野 哲孝(東大院工), 長谷川 淳也(北大触媒研)  
金クラスター触媒によるピペリドンの脱水素機構：荷電状態と反応活性の関連性について
- [P2] ○伊勢家 正裕(北大), 中山 哲(北大, さきがけ), 長谷川 淳也(北大)  
金属ドーブされた酸化セリウムを用いた 低級アルカンの C-H 結合活性化に関する理論的研究
- [P3] ○杉山 利行(北大院総合化学), 中山 哲(北大触媒研, JST さきがけ), 長谷川 淳也(北大触媒研)  
固体酸化触媒を用いた二酸化炭素とメタノールからのジメチルカーボネート合成に関する第一原理計算
- [P4] ○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 MP2 計算における相関バッファ領域の自動決定
- [P5] ○岩佐 豪(北大院理, 京大 ESICB), 海老澤 修一(北大理), 武次 徹也(北大院理, 京大 ESICB)  
近接場光と分子の相互作用：多重極ハミルトニアンと最小結合ハミルトニアンの比較
- [P6] ○小西 里緒(北大院総合化学), 高 敏(北大院理, 京大 ESICB), 堤 拓朗(北大院総合化学), 小野 ゆり子(北大院理), 原淵 祐(北大院理), 武次 徹也(北大院理, 京大 ESICB)  
振動マッピング-AIMD 法による動的エネルギー分割の試み
- [P7] ○大場 祐汰(北大総化), 小林 正人(北大院理, 京大 ESICB), 武次 徹也(北大院理, 京大 ESICB)  
4f 電子の凍結近似による希土類錯体の簡便な基底・励起電子状態計算
- [P8] ○織田 耕平(北大院総化), 堤 拓朗(北大院総化), 古屋 謙治(九州大基幹), 武次 徹也(北大院理)  
固有反応座標に基づく  $CF_2CFO^+$  解離過程の理論的研究
- [P9] ○岩淵 雄太(北大院総化), 高 敏(北大院理, 京大 ESICB), 武次 徹也(北大院理, 京大 ESICB, NIMS GREEN)  
Pd クラスター触媒による C-X 結合解離反応の理論的研究
- [P10] ○住谷 陽輔, 前田 理(北大院理)  
反応経路自動探索を応用した速度論的安定性の解析法：長寿命ヘキサシラベンゼン誘導体の設計
- [P11] ○高木 牧人(北大院総化), 住谷 陽輔(北大院理), 前田 理(北大院理)  
人工力誘起反応法による結晶の速度論的安定性の予測： $C_{60}$ (Z-Carbon) への適用
- [P12] ○杉山 佳奈美(北大院総化), 高木 牧人(北大院総化), 住谷 陽輔(北大院理), 齊田 謙一郎(北大院理), 前田 理(北大院理)  
Pt(111) 面上の CO 酸化反応：反応経路地図とその速度論的解析
- [P13] ○市野 智也(北大院理), 高木 牧人(北大院総合化学), 前田 理(北大院理)  
ファネル間の構造遷移に対する Bronsted-Evans-Polanyi 関係：遷移金属六量体による結合活性化反応での検証
- [P14] ○鈴木 机倫(北大院理), 前田 理(北大院理, NIMS), 諸熊 奎治(FIFC)  
多構造マイクロ反復法を用いた乳酸脱水素酵素の反応経路解析
- [P15] ○柴田洋平(富士フイルム株式会社), 原淵祐(北大院理, JST さきがけ), 網和宏(富士フイルム株式会社), 市野智也(北大院理), 前田理(北大院理)  
内部転換経路の系統的探索に基づくクマリン誘導体の蛍光量子収率溶媒依存性及び置換基依存性の解析
- [P16] ○長谷川 太祐(物質・材料研究機構), 高木 牧人(北大院総化), 住谷 陽輔(北大院総化), 前田 理(北大院理)  
グローバル相転移反応経路地図を利用した非晶質固体生成モデルによる非晶質炭素の構造・物性の予測
- [P17] ○岸本 直樹(東北大院理), 和泉 廣樹(東北大理), 坂本 純平(東北大院工), 李 晶(東北大院工), 大矢 豊大(東北大院工), 岡部 朋永(東北大院工)  
化学反応経路探索法を用いたフェノール樹脂形成初期過程の研究
- [P18] ○岡田 朝彦, 及川 啓太, 花崎 浩太, 菅野 学, 河野 裕彦(東北院理)  
ヒドロキシルラジカル発生の励起状態ダイナミクスと DNA 鎖切断のシミュレーション
- [P19] ○落合 宏平(東北大院理), 中村 公亮(東北大院理), 山崎 馨(東北大金研), 菅野 学(東北大院理), 高梨 司(東北大多元研), 福澤 宏伸(東北大多元研), 遠野 健介(JASRI), 永谷 清信(京大院理), 上田 潔(東北大多元研), 河野 裕彦(東北大院理)

XFEL 誘起クーロン爆発の動力学モデルの開発とヨウ素含有分子および C<sub>60</sub> フラーレンへの応用

- [P20] ○荒川 侑太, 吉田 将隆, 大槻 幸義, 河野 裕彦(東北大院理)  
非対称コマ分子の整列制御の最適化シミュレーション: アラニンへの応用
- [P21] 田代 智大, 吉田 将隆, ○大槻 幸義(東北大院理)  
IBr 光解離の動的シュタルク最適制御
- [P22] ○古濱 彩子, 林 岳彦, 山本 裕史(国立環境研究所)  
オオミジンコ急性毒性値を用いた魚類慢性毒性予測モデルの検証
- [P23] ○河本 奈々(早大先進理工), 吉川 武司(早大先進理工), 小野 純一(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)  
分割統治型時間依存密度汎関数強束縛法に基づく大規模励起状態ダイナミクス
- [P24] ○Toni M. Maier(早大先進理工), Yasuhiro Ikabata(早大理工総研), Hiromi Nakai(早大先進理工, 早大理工総研, 京大 ESICB)  
Local Hybrid Functionals within the Infinite-Order Douglas-Kroll-Hess Method
- [P25] ○土井 俊輝(早大先進理工), 吉川 武司(早大先進理工), 中井 浩巳(早大先進理工, 早大理工総研, 京大 ESICB)  
有限温度における時間依存密度汎関数法の開発
- [P26] ○稲森 真由(早大先進理工), 五十幡 康弘(早大理工総研), 王 祺(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)  
円錐交差構造における電子状態に関する理論的研究
- [P27] ○小野 純一(早大先進理工), 西村 好史(早大理工総研), 黄 毅聰(早大先進理工), 鹿又 宣弘(早大先進理工), 中井 浩巳(早大先進理工, 早大理工総研, 京大 ESICB)  
重み付きヒストグラム解析法のメタダイナミクスへの拡張とシクロファン異性化反応への応用
- [P28] ○清野 淳司(早大理工総研, JST さきがけ), 影山 椋(早大先進理工), 藤波 美起登(早大先進理工), 五十幡 康弘(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)  
機械学習による半局所運動エネルギー密度汎関数の開発: 計算精度の記述子依存性
- [P29] ○藤波 美起登(早大先進理工), 清野 淳司(早大理工総研, JST さきがけ), 中井 浩巳(早大先進理工, 早大理工総研, 京大 ESICB)  
機械学習を用いた反応条件最適化シミュレータの開発
- [P30] ○菅野 翔平, 今村 穰, 波田 雅彦(首都大院理工)  
機械学習を用いた新規ペロブスカイト太陽電池材料の大規模探索
- [P31] ○宮本 優弥, 波田 雅彦(首都大院理)  
特異値分解によって得られる自然摂動軌道による NMR 化学シフトの解析
- [P32] ○菅沼 麻莉奈, 今村 穰, 波田 雅彦(首都大院理)  
非フルーレン系有機薄膜太陽電池材料の理論的探索
- [P33] ○中谷 直輝(首都大院理), 下西 隆(東北大院理), 古家 健次(筑波大), 羽馬 哲也(北海道大)  
星間空間における氷表面への原子・分子の吸着エネルギーの系統的予測
- [P34] ○石原 剛輝(上智大院理工), 石本 修一(日本ケミコン(株)), 久保田 智志(日本ケミコン(株)), 藤田 正博(上智大院理工), 南部 伸孝(上智大院理工)  
Li<sup>+</sup>を添加した柔粘性イオン結晶の内部構造動力学
- [P35] ○高久 ゆりか, 南部 伸孝(上智大学院理工学研究科)  
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
- [P36] ○石井 桐子(横浜市大院生命ナノ), 立川 仁典(横浜市大院生命ナノ, 横浜市 DS センター), 北 幸海(横浜市大院生命ナノ)  
高精度非調和振動状態解析に向けた backflow 相関因子の開発
- [P37] ○Narissa Kanlayakan (Department of Chemistry in Chiang Mai Univ.), 大場 優生 (横浜市大院生命ナノ), Nawee Kungwan (Department of Chemistry in Chiang Mai Univ.), 立川 仁典 (横浜市大院生命ナノ・横浜市 DS センター)  
Path integral molecular dynamics simulations for muoniated thioketone radicals.

- [P38] ○土肥 海人(横浜市大院生命ナノ), 立川 仁典(横浜市大院生命ナノ, 横浜市大 DS センター), 北 幸海(横浜市大院生命ナノ)  
アセトアルデヒド分子への陽電子束縛に対する H/D 同位体効果の理論的解析
- [P39] ○石村 和也(分子研)  
Python を用いた大規模並列量子化学計算プログラム SMASH の制御
- [P40] ○伊藤 聡一(分子研, 計算科学研究センター, ESICB, 総研大)  
色素ヘリカル集合系におけるキラル発光の励起子カップリングによる解析
- [P41] ○山内 仁喬(総研大, 分子研), 奥村 久士(総研大, 分子研)  
定温定圧アンサンブルにおける効率的なシミュレーション手法の開発
- [P42] ○山口 毅(名大院工)  
液体のドメイン構造の粘度への影響-イオン液体と高級アルコールの比較
- [P43] 島 航平(名大院工), 浦野 諒(名大院工), 藤本 和士(名大院工), 篠田 渉(名大院工), ○岡崎 進(名大院工)  
電解質水溶液中に浸された荷電球殻内に生成される負圧について
- [P44] ○安藤嘉倫(名大院工・計算セ), 坂下達哉(名大院工), 吉井範行(名大院工・計算セ), 岡崎進(名大院工)  
大規模分子動力学計算高速化のための新規 MPI 通信方法の開発
- [P45] ○稲井 直人(名大院理), 横川 大輔(名大院理, WPI-ITbM)  
RISM-SCF-SEDD 法を用いたソルバトクロミズムに関する理論的研究
- [P46] ○Ryosuke Shimizu (Graduate School of Science, Nagoya Univ.), Takeshi Yanai (Graduate School of Science, Nagoya Univ.; WPI-ITbM; PRESTO), Yuki Kurashige (Graduate School of Science, Kyoto Univ.), Daisuke Yokogawa (Graduate School of Science, Nagoya Univ.; WPI-ITbM)  
Combining RISM and CASPT2 for calculating fluorescent molecules with higher accuracy
- [P47] ○宮崎 かすみ(東大院工), 竹中 規雄(名大院情報, 京大 ESICB), 藤江 拓哉(名大院情報), 渡部 絵里子(東大院工), 山田 裕貴(東大院工, 京大 ESICB), 山田 淳夫(東大院工, 京大 ESICB), 長岡 正隆(名大院情報, 京大 ESICB, CREST-JST)  
*trans/cis* ブチレンカーボネート電解液中で形成される SEI 膜の相違とその微視的起源
- [P48] ○伊藤元博(名大院情報, NTN), 鈴木雄一(名大院情報), 張賀東(名大院情報), 長岡正隆(名大院情報, 京大 ESICB, CREST-JST)  
QM 法を用いた潤滑油分子の分解過程における水素発生機構に関する理論的研究
- [P49] ○高橋 由芽(名大院情報), 栗崎 以久男(名大院情報, CREST), 長岡正隆(名大院情報, CREST)  
塩素イオンによるヘモグロビンのアロステリック制御に関する理論的研究
- [P50] ○Zizhen Rao(名大院情報学), Shanghua Xing(名大院情報学), 高柳 昌芳(滋賀大 DS 教育研究センター), 長岡 正隆(名大院情報学, 京大 ESICB, JST-CREST)  
Model preparation of radical polymerization of PMMA toward prediction of tacticity by Red Moon methodology
- [P51] ○高柳 昌芳(滋賀大 DS 教育研究センター, 理研 AIP), 清水 昌平(滋賀大 DS 学部, 理研 AIP), 長岡 正隆(名大院情報学, 京大 ESICB, JST-CREST)  
局所データモデリング法に基づく力場パラメータ最適化プログラムの開発
- [P52] ○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)  
NO<sub>2</sub> アニオンの光電子スペクトル: SAC-CI 理論研究
- [P53] ○松澤 優太, 倉重 佑輝(京大院理)  
光励起によるオリゴアセンの電子スピン偏極の機構解明
- [P54] ○西尾宗一郎, 倉重佑輝(京大院理)  
分子集合体の高精度励起状態計算に向けた低階数型波動関数理論の開発
- [P55] ○松崎 黎, 高塚和夫(京大福井センター)  
非断熱過程における電子と原子核のフラックス
- [P56] ○西本 佳央(京大福井センター)  
密度汎関数強束縛法と周期的境界条件を組み合わせる実装
- [P57] ○Jing Lu (FIFC, Kyoto Univ.), Kazuya Ishimura (IMS), and Shigeyoshi Sakaki\* (FIFC, Kyoto Univ.)



Capability of Pt55 and Ru13@Pt42 Catalysts toward the Oxygen Reduction Reaction: A First-principle Study

[P58] **ORong-Lin Zhong, Shigeyoshi Sakaki (FIFC, Kyoto Univ.)**

Regioselectivity of SP3 C-H activation of N-heterocycles by iridium(III) boryl complexes.

[P59] **OJia-Jia Zheng (FIFC, Kyoto Univ.), Shinpei Kusaka (KUIAS-iCeMS, Kyoto Univ.), Ryotaro Matsuda (Dept. Appl. Chem., Nagoya Univ.), Susumu Kitagawa (KUIAS-iCeMS, Kyoto Univ.), Shigeyoshi Sakaki (FIFC, Kyoto Univ.)**

Separation of 1, 3-Butadiene and trans-2-Butene by a Soft Metal-Organic Framework: A Three-Layer ONIOM-type Computational Investigation

[P60] **中垣 雅之, 青野 信治, 榑 茂好 (京大福井センター)**

結晶中でのニッケル(II)-キノノイド錯体のスピン転移を伴うベイポクロミズムの理論研究

[P61] **松井 正冬 (京大 ESICB), 榑 茂好 (京大福井センター, 京大 ESICB)**

埋め込みクラスターモデルによる構造最適化と担持金属触媒への応用

[P62] **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), 榑 茂好 (京大 FIFC, 京大 ESICB)**

コアシェル型  $Cu_{32}M_6$  クラスター ( $M = Ru, Rh, Os, Ir$ ) による NO-CO 触媒反応の理論研究

[P63] **福田 良一 (京大触媒・電池元素戦略拠点)**

L-アミノ酸の真空紫外円二色性スペクトルに関する理論的研究

[P64] **中谷 佳萌 (京大院工), 福田 良一 (京大 ESICB)**

アントラセンシクロファン異性化反応に対する圧力効果 : XP-PCM による研究

[P65] **吉田 悠一郎 (京大院工), 井内 哲 (名大院情報), 佐藤 啓文 (京大院工, 京大 ESICB)**

溶液中におけるかご型球状錯体の安定性評価

[P66] **由本 美香 (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)**

溶液中の D-B-A 分子系の電子カップリング計算

[P67] **橋本 康汰, 天野 健一, 石原 平, 西 直哉, 作花 哲夫 (京大院工)**

シリカ基板近傍におけるポリスチレン粒子数密度分布の解析 : 原子間力顕微鏡によるフォースカーブからの逆計算

[P68] **古川 暁之, 天野 健一, 西 直哉, 作花 哲夫 (京大院工)**

高分子電解質を添加したコロイド分散液中の基板近傍におけるコロイド粒子の数密度分布

[P69] **清水 智規, 伊藤 圭人, 瀬波 大士 (京大院工)**

自然界におけるホモカイラリティの起源に関する鏡像異性体の電子カイラリティの理論的研究

[P70] **野曾原 直之, 瀬波 大士 (京大院工)**

平面構造の炭素材料におけるスピン渦と電流の比例関係

[P71] **松永 隼治, 瀬波 大士 (京大院工)**

アルミニウムナノワイヤの電気伝導における化学結合の理論的研究

[P72] **高橋 俊貴, 瀬波 大士 (京大院工)**

電子の電気双極子モーメントの測定における有効電場と分子内部の電子スピントルク

[P73] **森 勇介, 金 鋼, 松林 伸幸 (阪大院基礎工)**

ジペプチドの構造変化における反応経路と反応座標

[P74] **増谷 佳一 (阪大院基礎工), 山守 優 (AIST), 金 鋼 (阪大院基礎工), 松林 伸幸 (阪大院基礎工)**

MD シミュレーションを用いた  $\beta$  シート凝集の自由エネルギー解析

[P75] **菊辻 卓真, 金 鋼, 松林 伸幸 (阪大院基礎工)**

自由エネルギー曲面の鞍点を通らない反応経路の検出 : 水中における水素結合破断の非アレニウスの挙動

[P76] **山本 直樹, 松林 伸幸 (阪大院基礎工)**

結晶界面への分子吸着に対して溶媒が及ぼす効果のエネルギー論

[P77] **北村 美玖, 石井 良樹, 松林 伸幸 (阪大院基礎工)**

溶媒和自由エネルギー解析における空間分割法の導入

- [P78] ○原 健太, 石井 良樹, 松林 伸幸(阪大院基礎工)  
メゾ不均一性をもつ3成分系とミセル系の溶解性と拡散性の比較
- [P79] ○新田 孝志, 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アミロイドβ凝集の構造およびエネルギー解析
- [P80] ○中野 雅由(阪大院基礎工)  
モンテカルロ波動関数法によるシングレットフィッシュンダイナミクス
- [P81] ○北河 康隆(阪大院基礎工), 加藤 恵一(東北大院理), 山下 正廣(東北大院理), 中野 雅由(阪大院基礎工)  
テルビウム(III)フタロシアニンダブルデッカー型錯体の分子内磁氣的相互作用に関する理論研究
- [P82] ○岸 亮平, 當波 孝凱, 山根 正暉, 中野 雅由(阪大院基礎工)  
開殻分子を含む共有結合性有機構造体部分構造の三次非線形光学特性についての理論研究
- [P83] ○當波 孝凱, 永海 貴誠, 山根 正暉, 岸 亮平, 中野 雅由(阪大院基礎工)  
シングレットフィッシュンによるペンタセン二量体の線形及び非線形光学特性に関する理論研究
- [P84] ○窪田 善之(関西電力技研)  
PbO<sub>2</sub>の基本物性の第一原理計算
- [P85] ○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(3)
- [P86] ○小関 史朗, 麻田 俊雄(阪府大院理), 藤村 勇一, 菅野 学, 河野 裕彦(東北大院理)  
OLEDに用いられる遅延蛍光過程の理論解析の試み
- [P87] ○米澤 康滋(近大先端研)  
ベイズ推定によるon-the-fly平均構造-共分散行列による数理解析手法の開発
- [P88] ○太田 幸宏(RIST神戸センター), 志賀 基之(JAEA)  
Gentlest Ascent Dynamics法による遷移状態探索: 周期系への適用
- [P89] ○河東田 道夫(RIST, 早大理工総研), 田代 基慶(東洋大理工), 今村 穰(首都大院理)  
ボウル型トリカルコゲナスマネンを基本π骨格とする共有結合性有機構造体の構造・電子機構の理論的研究
- [P90] ○土持 崇嗣(神大シス情), 天能 精一郎(神大科技イノベ)  
スピン対称性を復元した結合クラスター近似の導出と縮退系への適用
- [P91] ○福原 大輝, 赤瀬 大, 相田 美砂子(広島大院理, 広島大 QUL /S)  
水溶液中におけるTMGの構造および水分子との水素結合ネットワークに関する理論化学的研究
- [P92] 大山 佳寿子(九大院理), 山本 典史(千葉工大工), 中田 宗隆(東京農工大院BASE), ○関谷 博(九大院理)  
結晶中の4-アミノ-6-オキソピリミジンの二重水素結合ネットワークにおける協同効果
- [P93] ○Haris Mahyuddin (IMCE, Kyushu Univ), Aleksandar Staykov (I2CNER, Kyushu Univ), Yoshihito Shiota (IMCE, Kyushu Univ), Kazunari Yoshizawa (IMCE, Kyushu Univ)  
Plausible Mechanisms for Molecular Oxygen Activation over Dicopper and Tricopper Species in MOR Zeolite
- [P94] ○濱本 信次(熊本大院自然), 河津 貴大(熊本大院自然), 山道 伸彦(熊本大院自然), 井川 和宣(九大先導研), 友岡 克彦(九大先導研), 荒江 祥永(熊本大院自然), 入江 亮(熊本大院自然), 藤本 斉(熊本大院自然)  
Azapicene及びホウ素錯体の電子物性に関する理論的研究
- [P95] ○東 雅大(琉大理), 斉藤 真司(分子研, 総研大)  
高効率ポテンシャル関数生成手法による光捕集複合体中の色素の励起エネルギーの大きさと揺らぎの定量的評価
- [P96] ○比嘉 未香子(琉大理), 根木 秀佳(琉大院理工), Idam Hermawan(琉大院理工), Peni Ahmadi(琉大院理工), 田中 淳一(琉大理), 東 雅大(琉大理)  
新規天然有機物の立体構造の理論的解析
- [P97] ○Chan, Bun (Nagasaki University)  
Computational Thermochemistry for Every Need