〔ポスター発表〕

＜＜第 1 日目　5 月 12 日（木）＞＞　　16:50　～　17:55

1P01　近似スピン射影非制限密度汎関数法 による非局在開殻分子系の光学応答の研究
中野 雅由, ○南 拓也, 岸 亮平、重田 育照（阪大院基礎工)

1P02　CAM-B3LYP 法によるジアリールエテン誘導体の UV-Vis スペクトル計算
○奥野 克樹, 重田 育照, 中野 雅由, 宮坂 博 (阪大院基礎工)

1P03　異種二核錯体(AgCuO2CCH2CH2Ph+)の熱分解に関する質量スペクトルと量子化学反応追跡
○土田 敦子[1]，森 寛敏[1]，George N. Khairallah, Richard A. J. O'Hair [2]　([1]お茶大アカプロ,[2]メルボルン大)

1P04　反対称化強直交ジェミナル積(APSG)法の収束性の改善と開殻系への拡張
○樽見 望都[1]，小林 正人[12]，中井 浩巳[134] ([1]早大先進理工，[2]分子研，[3]早大理工研，[4]JST-CREST)

1P05　フィッツジェラルド - ローレンツ収縮の図形的解釈
○小原 繁 (北海道教育大学釧路校)

1P06　グリコシド結合生成における置換基効果と溶媒効果による安定化に関する理論的研究
○北島 彰人, 酒井 章吾 (岐阜大院工)

1P07　ピレンにおける Stone-Wales 転位の動力学的反応経路： 時間分解パワースペクトルによるトラジェクトリ解析
○山崎　馨[1]，新津 直幸[1]，戸田 幹人[2]，河野 裕彦[1]　([1]東北大院理，[2]奈良女大理)

1P08　[2Fe-2S] ferredoxin 活性中心のイオン化ポテンシャルに対する無機硫黄と Cysteine 残基の効果
○安田 奈都美，齋藤 徹，片岡 祐介，北河 康隆，川上 貴資，山中 秀介，奥村 光隆 (阪大院理)

1P09　プラチン錯体の加水分解反応における溶媒効果
○青野 信治[1], 榊 茂好[1] ([1]京都大学福井謙一記念研究センター)

1P10　ゼロ磁場分裂テンソルの計算法の開発
○吉澤 輝高[1]，中嶋 隆人[2] ([1]京都大学・福井謙一記念研究センター, [2]理化学研究所・計算科学研究機構)

1P11　経路積分モンテカルロ法による水 3 量体における核量子効果の検討

○藤原 崇幸[1]，藤田 貴敏[2]，草 将晃[1]，望月 祐志[13]，田中 成典[4]，志賀 基之[5]
([1]立教大・理，[2]神戸大院人間発達環境，[3]東大生研，[4]神戸大院システム情報学，[5]原子力機構)

1P12 Noble Reaction Features of Bromoborane in Oxidative Addition of B−Br σ−Bond to $M(PMe3)_2$ (M= Pt or Pd): Theoretical Study[1]
○Guixiang Zeng[1], Shigeyoshi Sakaki[1]* ([1] Fukui Institute of Fundamental Chemistry, Kyoto University)

1P13 QM/MM 法を用いた生体分子の電子スペクトルに関する理論的研究
○北川 裕也[1], 秋永 宜伸[2], Jaewoon Jung[2], 天能 精一郎[1] ([1]神大院システム情報, [2]理研)

1P14 ヒドロゲナーゼの水素生成機構の理論化学的研究
○黒田 敬史[1]，平野 敏行[2]，佐藤 文俊[12] ([1]東京大学大学院工学研究科, [2]東京大学生産技術研究所)

1P15 相対論的 FMO-MD シミュレーションによる白金系抗がん剤 cis/trans-platin の微視的水和構造の解析
○平山 奈津実[1]，森 寛敏[2]，古明地 勇人[3]，望月 祐志[4] ([1]お茶の水女子大学，[2]お茶の水女子大学 お茶大アカデミック・プロダクション，[3]産総研，[4]立教大学)

1P16 有機薄膜半導体界面における電荷移動反応の分子配向依存性
○藤井 幹也[1]，山下 晃一[1] ([1]東大院工)

1P17 Broken-Symmetry TDDFT 量子マスター方程式法による 1,3-dipole 系の線形吸収スペクトルの理論研究
○岸本 真悟, 岸 亮平, 奥野 克樹, 重田 育照, 中野 雅由 (大阪大学大学院基礎工学研究科)

1P18 イリジウム錯体の燐光過程における理論的研究
○鎌田 尚也[1]，麻田 俊雄[12]，小関 史朗[12] ([1]阪府大院理，[2]RIMED)

1P19 Pt(PR3)2(AlCl3) (R=H, Me, Ph, Cy) の理論研究：構造、結合、及び M-Al を持つ錯体の理論予測
○塚本 晋也[1]，榊 茂好[1] ([1]京大福井謙一記念研究センター)

1P20 リチウムイオン電池中における電解液分解反応の理論的研究
○櫻井 耕司[1]，麻田 俊雄[12]，小関 史朗[12] ([1]阪府大院理, [2] RIMED)

1P21 楕円状ガウス波束を用いた水の準量子的 MD シミュレーション：核の量子波束の異方性と揺らぎのメカニズム
○小野 純一[1]，安藤 耕司[1] ([1]京大院理)

1P22　7－アザインドール二量体における励起状態二重プロトン移動反応：CASPT2 及び LC-TDDFT 法による機構解明
于 雪芳[1], ○山崎 祥平[1], 武次 徹也[1] ([1]北大院理)

1P23　ICl の光解離生成物が示す角運動量分極に関する理論的研究
○松岡 貴英[1], 大西 紗代[1], 藪下 聡[1] ([1]慶大院理工)

1P24　Ab initio study of F-(H2O)n and Cl-(H2O)n (n=1-4) clusters
○Qi Wang[1], Kimichi Suzuki[2], Masanori Tachikawa[3], Umpei Nagashima[12] ([1]University of Tsukuba, [2]National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST), [3]Yokohama-city University)

1P25　量子古典混合系近似に基づいた分子動力学シミュレーションによる無極性溶媒中における
マロンアルデヒドの 1 次元分子内プロトン移動反応
○小嶋 秀和, 山田 篤志, 岡崎 進 (名大院工)

1P26　量子化学計算による金属/エポキシ樹脂界面の接着機構に関する理論的研究
○瀬本 貴之, 辻 雄太, 吉澤 一成 (九州大学)

1P27　ルテニウム-オキソ錯体によるシクロヘキサンジオールの酸化反応に関する理論的研究
○阿部 誉史 [1], 塩田 淑仁 [1], 小島 隆彦 [2], 吉澤 一成 [1] ([1]九大先導研, [2]筑波大院数理物質)

1P28　4 成分相対論的 GMC-QDPT による原子スペクトルの計算
○鈴木 聡, 渡邉 祥弘, 中野 晴之 (九大院理)

1P29　n 型半導体におけるドナー電子制御レーザー場の理論的設計
○鶴岡 歴人[1], 菅原 道彦[1], 藪下 聡[1] ([1]慶應義塾大学)

1P30　白金錯体を用いた燐光発光材料の配位子および置換基効果の理論的解析
○鍵田 侑希[1], 麻田 俊雄[12], 小関 史朗[12] ([1]阪府大院理, [2] RIMED)

1P31　気相及び I-PVA フィルム中ポリヨウ素の励起エネルギーと遷移モーメントに
関する理論的研究
○今井 章裕, 小鷲 聡美, 藪下 聡 (慶大院理工)

1P32　相対論的分子軌道計算による Hg クラスターの電子構造に関する理論的研究
○佐藤 夏名子[1], 森 寛敏[2] ([1]お茶大院人間文化創成, [2]お茶大アカプロ)

1P33　全対称振動変曲点を有する分岐反応の理論的研究
○原渕 祐[1], 武次 徹也[2] ([1]北大院総合化学, [2]北大院理)

1P34　核酸の分極ポテンシャルの開発
○中川 節子 (金城学院大)

<<第 2 日目　5 月 13 日（木）>>　　13:35　～　14:50

2P01　TD DFT 法による分子内プロトン移動反応に関する研究
○寺前 裕之[1], 長岡 伸一[2], 長嶋 雲兵[3]　([1]城西大院理, [2]愛媛大院理, [3]産総研)

2P02　イオン分子衝突における振動回転励起
○中村 正人[1], 市村 淳[2]　([1]日大理工, [2]JAXA宇宙科学研)

2P03　Highly Accurate Approximate Method for Binding energy of van der Waals Complexes/clusters
○Milind Deshmukh [1], Shigeyoshi Sakaki [1] ([1] Fukui Institute for Fundamental Chemistry, Kyoto University)

2P04　参照軌道を用いる局在化法：励起状態への応用
○長谷川 淳也[1], 河津 励[1], 松田 建児[1] ([1]京大院工)

2P05　トリスビピリジン鉄(II)錯体のポテンシャルモデルの開発と分子動力学シミュレーション
○井内 哲 (名大院情報科学)

2P06　単一分子の量子輸送におけるフロンティア軌道の役割
○辻 雄太 [1], Aleksandar Staykov [1], 吉澤 一成 [1]　([1]九大先導研)

2P07　分子の電子ダイナミクスと自然軌道の化学ポテンシャル
○河野　裕彦[1], 小山田 隆行[1], 加藤 毅[2], 小関 史朗[3] ([1]東北大院理, [2]東大院理, [3]大阪府大院理)

2P08　LiH の分子軌道エネルギー準位図 -　非経験的ハートリー・フォック法を用いて　-
○長嶋 雲兵[1], 寺前 裕之[2], 長岡 伸一[3]　([1]産総研, [2]城西大理, [3]愛媛大院理)

2P09　QM/MM 法によるジオールデヒドラターゼの反応機構に関する研究
○土井富 一城[1], 蒲池 高志[1], 高畑 政典[1], 虎谷 哲夫[2], 吉澤 一成[1] ([1]九大先導研, [2]岡山大工)

2P10　ヨウ素クラスター I_n^-の幾何学構造と結合様式に関する量子化学的研究
○大塚 美穂[1], 森 寛敏[2], 菊池 仁美[1], 鷹野 景子[1]([1]お茶大院人間文化創成科学,[2]お茶大アカプロ)

2P11　ホスフィン配位子を持つモリブデン錯体による窒素分子変換反応機構
○笹田 瑛[1], 田中 宏昌[1], 向野 智久[1], 結城 雅弘[2], 三宅 由寛[2], 西林 仁昭[2], 吉澤 一成[1] ([1]九大先導

研, [2] 東大工)

2P12　イオンによる水の分極応答の分子動力学シミュレーション
○久保田 陽二, 秋山 良 (九大院理)

2P13　DC-MP2 計算の二段階並列アルゴリズムの開発
○河東田 道夫[1], 小林 正人[12], 中井 浩巳[234], 永瀬 茂[1] ([1]分子研, [2]早大先進理工, [3]早大理工研, [4] JST-CREST)

2P14　相対論的量子モンテカルロ法：拡散モンテカルロ法への拡張
○中塚 温[1], 中嶋 隆人[1] ([1]理研・計算科学研究機構)

2P15　新しい FMO/PCM 法の開発と計算
○永田 武史[12], Dmitri G. Fedorov[2], 北浦 和夫[12] ([1]京大院薬, [2]産総研)

2P16　巨大分子系への適用を想定した Franck-Condon 因子評価方法の検討
○山本 拓磨[1], 森田 将人[2], 藪下 聡[1] ([1]慶大院理工, [2]分子研)

2P17　PAHs の分子構造および励起状態ダイナミクスの研究
○小若 泰之[1], 中山 尚史[2], 石元 孝佳[3], 長嶋 雲兵[4], 馬場 正昭[1] ([1]京大院理, [2]コンフレックス, [3]九大稲盛セ, [4]産総研)

2P18　メタノール中でのエチレンの臭素付加反応における理論的研究
○横井 勇人, 佐藤 啓文 (京大院工)

2P19　RuBisCO の炭素固定反応シミュレーション
○堀 将人[1], 平野 敏行[2], 佐藤 文俊[12] ([1]東大院工, [2]東大生研)

2P20　高圧プラスチック氷の相転移ダイナミクス
○樋本 和大, 松本 正和, 田中 秀樹 (岡山大院自然)

2P21　Rotational Relaxation of Solvent Molecules around an ion: Spatial Distribution of Relaxation Time
植松 勇一郎, ○吉森 明 (九大理)

2P22　溶液中での巨大粒子の並進運動に対する共溶媒の効果
○中村 有花, 吉森 明, 秋山 良 (九大院理)

2P23　希ガスイオンクラスターの DC-AIMD シミュレーション

○窪田 崇人[1], 赤間 知子[1], 小林 正人[12], 中井 浩巳[134] ([1]早大先進理工, [2]分子研, [3]早大理工研, [4]JST-CREST)

2P24 非直交基底による多電子状態計算手法の開発
佐々木 晃, 広瀬 喜久治, ○後藤 英和 (阪大院工)

2P25 QM/MM 法を用いた Class C β-ラクタマーゼにおけるアシル化反応の理論的解析
○岡島 利幸[1], 麻田 俊雄[1 2], 小関 史朗[1 2] ([1] 阪府大院理, [2] RIMED)

2P26 Ab initio 分子動力学法によるトンネル効果へのアプローチ: Makri-Miller の半古典法の実装
○大谷 優介, 武次 徹也 (北大院理)

2P27 Ab initio QM/MM-MD 法による中性型グリシン配座異性体の自由エネルギー地形
○北村 勇吉[1], 竹中 規雄 [12], 小谷野 哲之 [12], 長岡 正隆 [12] ([1]名大院情, [2] JST-CREST)

2P28 Ab initio 経路積分およびリングポリマー分子動力学法を用いた銀水和クラスターの解析
小泉 亮人[1], 志賀 基之[21], ○立川 仁典[1] ([1]横浜市大院生命ナノシステム, [2]日本原子力研究開発機構)

2P29 希ガスマトリックス中における振動スペクトルシミュレーション：XeBeO への適用
○新見 佳祐[1], 中山 哲[2], 小野 ゆり子[2], 武次 徹也[2] ([1]北大院総合化学, [2]北大院理)

2P30 拘束条件付き SCF 法を用いた強誘電体に関する理論的研究
○今村 穣[1], 山形 悠也 [1], 中井 浩巳[12] ([1]早大先進理工, [2]早大理工研)

2P31 アダマンタンと水分子に関する水素結合解析
○土居 英男, 大久 真幸, 相田 美砂子 (広島大院理, 広島大 QuL*i*S)

2P32 経路積分法を用いた炭素系水素貯蔵材料の解析
○鈴木 机倫[1], 立川 仁典 [2], 小川 浩 [1], 西原 洋知 [3], 京谷 隆 [3], 長島 雲兵 ([1]産業技術総合研究所, [2]横市大, [3]東北大多元研)

2P33 人工光合成分子の電荷分離状態に関する理論化学的研究
○城野 亮太, 山下 晃一 (東京大学大学院工学系研究科)

2P34 準一次元 q-orientation モデルにおける相転移
○阿部 紀遥, 甲賀研一郎 (岡山大理)