

第10回理論化学討論会

講演要旨集

会期 2007年5月14日(月)～16日(水)

会場 名古屋大学野依記念学術交流館
(名古屋市千種区不老町)

主催 日本化学会理論化学研究会 共催 分子科学研究所

第10回理論化学討論会

主催 日本化学会理論化学研究会

共催 分子科学研究所

会期 2007年5月14日(月)～16日(水)

会場 名古屋大学野依記念学術交流館

(名古屋市千種区不老町)

日程

5月14日(月)

口頭発表(午前)	9:00～12:10
口頭発表(午後)	13:40～17:20
ポスターセッション	17:30～19:00

5月15日(火)

口頭発表(午前)	9:00～12:20
口頭発表(午後)	13:30～16:30
ポスターセッション	16:40～18:10
懇親会	18:30～20:30

5月16日(水)

口頭発表(午前)	9:00～12:10
口頭発表(午後)	13:40～16:20

第10回理論化学討論会

主催 日本化学会理論化学研究会 共催 分子科学研究所

会期 2007年5月14日(月)～16日(水)

会場 名古屋大学野依記念学術交流館
(名古屋市千種区不老町)

講演時間

a 講演 (30分: 発表23分、討論7分)

b 講演 (20分: 発表17分、討論3分)

第1日【5月14日(月)】

座長: 長岡正隆

- 9:00 **1A1b** 時間依存多電子波動関数の自然軌道解析
(東大院理、東北大院理)○加藤毅、山内薫、河野裕彦
- 9:20 **1A2b** 核・電子の量子効果を考慮した多成分密度汎関数理論の開発
(横浜市大院理、JST-PRESTO)○宇田川太郎、立川仁典
- 9:40 **1A3b** 強レーザー場を用いた多準位量子系の分布動力学制御
(慶大院理工)○菅原道彦、玉木麻耶、藪下聡
- 10:00 **1A4a** 非断熱過程あるいは量子古典混合表現における一般化された古典力学
(東大院総合文化)○高塚和夫

10:30～10:40 休憩

座長: 加藤 毅

- 10:40 **1B1a** 強レーザーパルスによって生成する超多価フラーレンカチオンの振動・解離過程 第一原理分子動力学によるシミュレーション
(東北大院理、核融合科学研)○中井克典、新津直幸、河野裕彦、藤村勇一、田中基彦
- 11:10 **1B2b** 量子トラジェクトリ法を用いた2次元波束ダイナミクスシミュレーション
(金沢大院自然)○松本大輔、林幸一郎、井田朋智、遠藤一央
- 11:30 **1B3b** キュムラント展開法による半古典動力学理論の構築とその応用
(東大院工、筑波大 TARA センター)○宮地秀明、重田育照、平尾公彦
- 11:50 **1B4b** 時間依存波束計算法を用いた水の熱外中性子散乱断面積の評価
(東北大院理)田名部誠一、○保木邦仁、河野裕彦、藤村勇一

12:10～13:40 休憩

座長: 北尾 修

- 13:40 **1C1b** 最適制御シミュレーションを使ったデコヒーレンス抑制機構の解析
(東北大院理, JST-CREST) ○大槻幸義
- 14:00 **1C2b** 解離性再結合反応 $\text{CH}_3^+ + \text{e}^-$ の *ab initio* 分子動力学シミュレーション
(北大院理, 東大院工) 小林雄太, 中山哲, 野呂武司, 石井啓策, ○武次徹也
- 14:20 **1C3a** 擬 1 次元ナノ空間に拘束された電子の局在電子モード
(日大理工) ○佐甲徳栄

14:50~15:00 休憩

座長: 武次徹也

- 15:00 **1D1b** NEGF-based *ab initio* 法に基づいた単一分子の非弾性電気伝導に関する理論的研究
(産総研・計算科学, JST-CREST) ○島崎智実, 浅井美博
- 15:20 **1D2a** 色素増感太陽電池での光誘起電子移動: Modified Sakata-Hashimoto-Hiramoto Model (MSHH)
(産総研) ○北尾 修, 柳田 真利, 小野澤(小松崎) 伸子, 杉原 秀樹
- 15:50 **1D3a** Giant SAC/SAC-Cl 法を用いた分子性結晶の電子状態
(京大院工, 量子化学研究協会) ○宮原友夫, 福田良一, 中辻博

座長: 佐甲徳栄

- 16:20 **1E1b** Divide-and-conquer 法に基づいた $O(N)$ 電子相関計算
(早大先進理工) ○小林正人, 赤間知子, 今村穰, 中井浩巳
- 16:40 **1E2b** 有効ポテンシャルを用いた置換基のモデル化による大規模遷移金属錯体の高精度計算
(京大院工) ○大西裕也, 中尾嘉秀, 佐藤啓文, 榊 茂好
- 17:00 **1E3b** 共鳴理論に基づいた分子軌道型波動関数の新規解析法
(京大院工) ○池田昌司, 中尾嘉秀, 佐藤啓文, 榊茂好

17:20~17:30 休憩

17:30~19:00 ポスターセッション1(1P01-1P47)

第2日【5月15日(火)】

座長: 今村 穰

9:00 **2A1a** Slater 軌道に対する四中心電子反撥積分の解析表示式
(東理大理)○石田和弘

9:30 **2A2b** 多参照摂動論に対する F12 修正
(名大院情報科学)○天能精一郎

9:50 **2A3b** 非摂動論的物質構造計算
(国立長寿医療センター研究所、産業医科大学)松浦弘幸、○野田信雄、
小井手一晴、根本哲也、伊藤安海、中野正博

10:10 **2A4b** 最適化された複素基底関数による光イオン化断面積の量子化学計算
(慶大理工)○森田将人、藪下聡

10:30~10:40 休憩

座長: 石田和弘

10:40 **2B1a** 複素型双直行スプラインウェーブレット基底による時間依存シュレーディンガー方程式
解法
(豊橋技科大)○関野秀男、佐野直樹

11:10 **2B2b** ウェーブレットを用いた TDHF/TDDFT 実時間シミュレーション
(豊橋技科大)○濱田信次、関野秀男

11:30 **2B3a** Field theoretical study of chemical interaction: new reactivity indices in terms of
the Rigged QED
(京大院工)Pawel Szarek, ○立花明知

12:00 **2B4b** 無限次 FW 変換法の多電子系への拡張—相対論的 2 電子変換理論の検討
(首都大院理工)○清野淳司、波田雅彦

12:20~13:30 休憩

座長: 石田干城

13:30 **2C1a** Off Diagonal Long Range Order
(金沢大名誉教授)○青野茂行

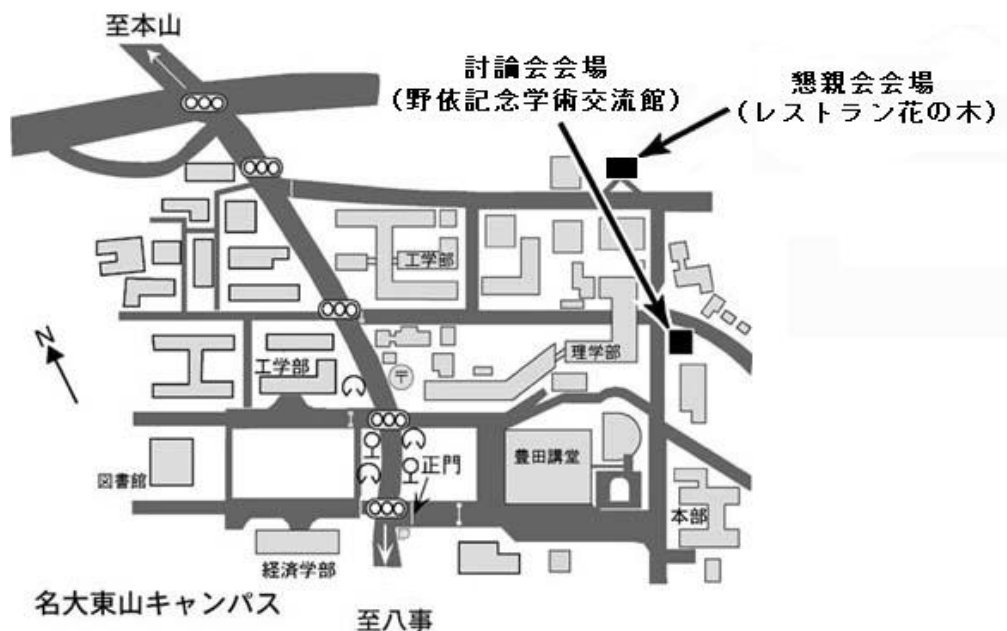
14:00 **2C2b** 多次元分光シグナルでみる凝縮相量子動力学
(京大院理)○石崎章仁、谷村吉隆

14:20 **2C3b** 光合成アンテナなどの分子凝集体における超高速量子コヒーレント輸送
(京大院理、Korea Univ.)○金賢得、谷村吉隆、Minheang Cho

14:40~14:50 休憩

座長： 関野秀男

- 14:50 **2D1a** シスチルベン超高速光異性化反応における核波束ダイナミクスとポテンシャル形状：フェムト秒時間領域振動分光実験による研究
(理研)○竹内佐年、田原太平
- 15:20 **2D2a** Building Molecular Modeling Strategy: Charge Response Kernel Comprising Density Functional Theory and the Treatment of Conformational Effect on it
(分子研)○石田干城、森田明弘
- 15:50 **2D3b** QM/MM'-MC 法を用いた水溶液中におけるハロゲン求核置換反応の自由エネルギーマップ
(広島大院理、広島大 QuLiS)○大久真幸、相田美砂子
- 16:10 **2D4b** 電子の広がりを露に取り込んだ RISM-SCF 法と 3 次元溶媒和構造を効率的に与える積分方程式理論の開発
(京大院工)○横川大輔、佐藤啓文、榊茂好
- 16:30~16:40 休憩
- 16:40~18:10 ポスターセッション2(2P01-2P46)
- 18:30~20:30 懇親会(グリーンサロン東山 レストラン花の木)



第3日【5月16日(水)】

座長: 金 賢得

9:00 **3A1b** 電子-核混合系の DFT に基づく流体水素の金属-非金属転移の理論解析
(豊橋技科大,CREST-JST)○墨 智成,関野 秀男

9:20 **3A2b** 溶液中の化学反応的描像による量子古典混合系シミュレーションの構築
(分子研)○山田篤志,岡崎進

9:40 **3A3b** 準量子的時間依存ハートリー法によるプロトン移動反応速度の解析
(京大院理)○作道直幸,安藤耕司

10:00 **3A4a** ペプチド鎖の赤外・偏光ラマン・2次元赤外スペクトルの時間領域計算とダイナミクスの理論的解析
(静岡大教育)○鳥居 肇

10:30~10:40 休憩

座長: 鳥居 肇

10:40 **3B1a** 分子動力学を用いた水素-グラファイト反応の研究
(名大院理,核融合研)○伊藤篤史,中村浩章,高山有道

11:10 **3B2b** Quasi-classical direct ab initio MD 法を用いた多原子分子の IR および Raman スペクトル
(広島大院理・広島大 QuLiS)○山田朋範,相田美砂子

11:30 **3B3b** エクトイン水溶液中のタンパク質表面における選択的水和発現機構の分子論的考察
(名大院情報科学)○優乙石,長岡正隆

11:50 **3B4b** ホスフェニウム錯体とシリレン錯体の構造に関する量子化学的研究
(お茶大院人間文化,阪市大院理)○土田敦子,中沢浩,鷹野景子

12:10~13:40 休憩

座長: 墨 智成

13:40 **3C1b** ProteinDF システムによるタンパク質電子構造解析
(東大情基,東大生研,日立機械)○佐藤文俊,稲葉亨,井原直樹,恒川直樹,
西野典子,西村康幸,平野敏行,吉廣保,柏木浩

14:00 **3C2b** 蛋白質中長距離電子移動反応でおこる Condon 近似の破れについての理論的研究
(名城大院総合学術)○西岡宏任,垣谷俊昭

14:20 **3C3b** DFTB-D modeling of metalized DNA
(名大高等研究院・名大院理)○Stephan IRLE

14:40~14:50 休憩

座長： 佐藤文俊

- 14:50 **3D1a** B12 補酵素におけるコバラミンの役割—ラジカル機構か？協奏機構か？
(九大先導研、岡山大工)○吉澤一成、蒲池高志、Pawel M. Kozlowski、
虎谷哲夫
- 15:20 **3D2b** ONIOM 分子動力学法のシチジンデアミナーゼによる脱アミノ化反応への応用
(広島大院理・QuLiS)○松原世明、相田美砂子(広島大院理・QuLiS)
- 15:40 **3D3b** Protein Effects on the Redox Reactions in Isopenicillin N Synthase - Insights
from ONIOM QM/MM Calculations
(Fukui Institute for Fundamental Chemistry, Kyoto University)
○Marcus Lundberg, Keiji Morokuma
- 16:00 **3D4b** 酵素反応の詳細な理解に向けて:QM/MM+全電子計算によるタンパク質環境の解析
(産総研・計算科学)○石田豊和

座長一覧

5月14日		5月15日		5月16日	
長岡正隆	9:00~10:30	今村 穰	9:00~10:30	金 賢得	9:00~10:30
加藤 毅	10:40~12:10	石田和弘	10:40~12:20	鳥居 肇	10:40~12:10
北尾 修	13:40~14:50	石田干城	13:30~14:40	墨 智成	13:40~14:40
武次徹也	15:00~16:20	関野秀男	14:50~16:30	佐藤文俊	14:50~16:20
佐甲徳栄	16:20~17:20				

ポスターセッション1 (5月14日(月) 17:30~19:00)

- 1P01** R行列法を用いた電子・分子衝突過程の研究
(京大福井センター)○田代基慶、諸熊奎治
- 1P02** 双極子モーメントを再現する有効電荷決定法
(京大院工)○佐藤啓文、榊茂好
- 1P03** Spin-flip CI法による一重項ジラジカル分子の静的第二超分極率計算
(阪大院基礎工)○岸亮平、中野雅由、竹部晶仁、梅崎慎也、名手将人、高橋英明
- 1P04** 正準変換電子相関理論:一般化 normal order 公式による変換理論の開発
(分子研、Cornell 大)○柳井 毅、Garnet Kin-Lic Chan
- 1P05** Grimme の SCS-MP2 に関する一考察
(早大理工)○中井 浩巳
- 1P06** 長距離相互作用補正を考慮した密度汎関数法による(超)分極率算定に関する研究
(豊橋技大院、豊橋技大、University of California-Santa Barbara)○松本啓紀、
関野秀男、Sean BONNESS、Bernard KIRTMAN
- 1P07** 大規模分子系の電子状態計算に向けたスケーラブルなクーロン行列計算法の開発
(東大院工、JST CREST) ○倉重佑輝、中嶋隆人、平尾公彦
- 1P08** 実時間発展 TDHF/TDDFT を用いた励起状態計算
(早大先進理工)○赤間 知子、中井 浩巳
- 1P09** 分子内分極を考慮した分極一電子ポテンシャル最適化法と分極力場
(金城学院大学、Royal Institute of Technology)○中川節子、Pekka Mark、Hans Ågren
- 1P10** 二成分混合溶媒の液-液相分離臨界点近傍における高分子挙動の理論的研究
(豊橋技科大、CREST-JST)○小林 一彦、墨 智成、関野 秀男
- 1P11** Poisson-Boltzmann 誘電連続モデルを用いたイオン対の水和自由エネルギーの解析
(阪府大院理)○麻田俊雄、白井靖弘
- 1P12** 多成分分子軌道法を用いた水素分子のエネルギー計算
(産総研、JST-CREST、横浜市大、九大)○石元孝佳、立川仁典、稲富雄一、梅田宏明、
渡邊寿雄、長嶋雲兵
- 1P13** 分子の形の振動安定性と幾何学的反応速度論の試み
(京大福井センター)○柳尾朋洋
- 1P14** 分子の電子状態と振動状態を用いた量子ゲートの最適制御
(東大院工、JST-CREST)○三嶋謙二、山下晃一
- 1P15** スピン軌道相互作用を含む遷移双極子モーメントの計算方法
(慶大院理工)○畑中美穂、岩松望、藪下聡
- 1P16** マルチウェーブレット基底による超分極率の算定
(豊橋技科大、Cornell University、Oak Ridge National Laboratory)○加藤哲也、前田康行、
柳井毅、R.J.Harrison、関野秀男
- 1P17** ICI 法による核の動きを含んだ計算
(京大院工)○土方優 中嶋浩之 中辻博

- 1P18** 表面における電子フォノン相互作用に関する理論的研究
(東大院工)○野島彰紘、山下晃一
- 1P19** 発表中止
- 1P20** ホスホールおよびチオフエンを含む新規ポルフィリン類似金属錯体の構造、反応と電子状態
(京大院工)○越智紀章、中尾嘉秀、佐藤啓文、榊茂好、宮島徹、俣野善博
- 1P21** 遷移金属とベンゼンから成るサンドイッチクラスターの電子状態についての理論的研究
(慶大院理工)○後藤綾美、藪下聡
- 1P22** 遷移金属錯体の d-d 及び CT 吸収スペクトルの振動子強度に関する理論的研究
(京大院工)○榮代良典、中尾嘉秀、佐藤啓文、榊茂好
- 1P23** 燐光性ピリジンチオラト架橋白金(II)二核錯体の項間交差に関する理論的研究
(京大院工)○齋藤健、中尾嘉秀、榊茂好
- 1P24** On the fullerene formation mechanism by means of Benzene combustion: MD study
(Fukui Institute for Fundamental Chemistry, Kyoto University)○Biswajit Saha,
Stephan Irle, Keiji Morokuma
- 1P25** 多環芳香族炭化水素の遷移金属錯体: 結合性と配位位置に関する理論的研究
(京大院工)○菊盛千紗、中尾嘉秀、佐藤啓文、榊茂好
- 1P26** ゼスレン系の三次非線形光学効果の理論研究
(阪大院基礎工)○中野雅由、岸亮平、竹部晶仁、梅崎慎也、名手将人、高橋英明
- 1P27** 和周波発生分光でプローブされる水溶性界面の電気二重層構造
(東北大院理)石山達也、○森田明弘
- 1P28** ナノピラーを用いたマイクロチップ電気泳動の計算機シミュレーション
(豊橋技科大、JST-CREST)○内田雄介、墨智成、関野秀男
- 1P29** 氷の融解過程に関する理論研究
(名大院理、名大物国セ、分子研)○望月建爾、松本正和、齋藤真司、大峯巖
- 1P30** MO/MC 法を用いた溶媒効果に関する理論的研究 ~Diels-Alder 反応への応用~
(山口大院理工、山口大工)○隅本倫徳、山口徹、三木史人、堀憲次
- 1P31** I_3 の光解離過程に関する動力学研究
(慶大院理工、東大院総合)○小鷲聡美、大野智代、菅原道彦、中西隆造、齋藤直哉、永田敬、
藪下聡
- 1P32** MD 及び DFT 計算による DNA 二重鎖の水和構造とその電子状態の解析
(豊橋技科大、プエルトリコ大)○塚本貴志、Yasuyuki Ishikawa、夏目貴行、
出立兼一、栗田典之
- 1P33** 密度汎関数によるミスマッチのある LNA-DNA 二重鎖の電子状態解析
(豊橋技科大、プエルトリコ大)○夏目貴行、Yasuyuki Ishikawa、出立兼一、塚本貴志、
栗田典之
- 1P34** 光合成反応中心における電子移動のエナジェティクスに関する理論的研究
(京大院工)○清田泰臣、藤本和宏、長谷川淳也、中辻博

- 1P35** モデルチャネルにおけるイオン透過機構;アニオンを付加したカーボンナノチューブにおける K^+ イオンのダイナミクスとイオン透過に関する自由エネルギー面
(名大院理、分子研)○炭竈享司、斉藤真司、大峰巖
- 1P36** バクテリオロドプシンの光サイクルにおけるレチナール分子のカラー・チューニング:SAC-CI 法による研究
(京大院工)○浅井康太、長谷川淳也、藤本和宏、中辻博
- 1P37** 生体内過酸化水素をセンシングする蛍光プローブ分子の励起状態と発光メカニズム
(熊本大院自然科学)○二宮寿一、杉本 学
- 1P38** An Alternative Mechanism of Tryptophan Metabolism? DFT Study on A Missing Piece in Our Understanding of Heme Chemistry
(京都大学福井謙一記念研究センター、播磨研究所放射光科学総合研究センター)○鍾龍華、杉本宏、城宜嗣、諸熊奎治
- 1P39** 発表中止
- 1P40** ヒトインスリン二量体のダイナミクス解析
(東大工、東大生研、東大情基)○伊藤宏比古、恒川直樹、佐藤文俊
- 1P41** 超球面探索法と熱力学シミュレーションを用いた水素結合クラスターの構造解析
(東北大院理)○前田理、大野公一
- 1P42** Global Search for the Dehydrogenation Pathway of Amine-Borane Adduct: An Application of the Scaled Hypersphere Search Method
(東北大院理)○Yi Luo, Satoshi Maeda, Koichi Ohno
- 1P43** タンパク質構造変動に伴うポケット形状変化の動的表示
(東京大学大学院新領域創成科学研究科基盤情報学専攻、東京大学生産技術研究所、東京大学情報基盤センター)○石川寛人、西村康幸、吉廣保、佐藤文俊
- 1P44** 分子磁化率の計算における First-order basis function(FOBF)の有効性
(首都大院理工)○三宅伸尚、吉澤輝高、本田康、波田雅彦
- 1P45** 多孔性配位高分子結晶 CPL-1 に対する酸素分子吸蔵に関する理論的研究
(名大院情報科学)○人見晴子、太田雄介、長岡正隆、松田亮太郎、北川進
- 1P46** sII クラスタ構造をとる水分子の水素原子の初期位置を与える方法
(国立長寿医療センター研究所、産業医科大学保健情報学部)○小井手一晴、根本哲也、野田信雄、松浦弘幸、中野正博
- 1P47** スピン射影法を用いた構造最適化法の開発とラジカル種への適用
(阪大院理)○北河康隆、齋藤徹、伊藤正秀、川上貴資、奥村光隆、山口兆

ポスターセッション2 (5月15日(火) 16:40~18:10)

- 2P01** Fragment MO 法によるスペクトル予測
(豊橋技科大院)○仙石康雄、若林一、関野秀男
- 2P02** New implementation of QM/MM methods using modified generalized hybrid orbitals (GHO)
(名大院情報科学、慶北大、理研)○J. Jung, C.-H. Choi, 杉田有治、天能精一郎
- 2P03** 2次・3次摂動に基づく基底・励起状態での CCSD 法へのエネルギー補正
(東大院工、フロリダ大)○塩崎亨 平尾公彦 平田聡
- 2P04** Laplace-AO MP2 法によるポテンシャル曲面の計算: 計算精度の評価
(分子研)○河東田道夫、永瀬茂
- 2P05** 多参照摂動法による内殻励起スペクトルに関する理論的研究
(株式会社豊田中央研究所)○白井聡一、倉本圭
- 2P06** 交換相関ポテンシャル計算高精度化に向けた単中心積分数値計算法の研究
(東大生研)○平岡克章、井原直樹、平野敏行、佐藤文俊
- 2P07** 相対論的 Dual-Level 密度汎関数法の開発
(東大院工)○水上渉 中嶋隆人 平尾公彦
- 2P08** 分子内相互作用の理論解析
(名大院情報科学)○山田健太、古賀伸明
- 2P09** 高濃度電解質溶液の電気伝導度分散の統計力学理論
(名大院工)○山口毅、松岡辰郎、香田忍
- 2P10** 経路積分影響汎関数理論を用いた熱浴中の二自由度系におけるデコヒーレンス過程の解析
(分子研)○三上泰治、岡崎進
- 2P11** 凝集反応系における分子熱浴の励起・緩和過程の取り扱い
(名大院情報科学)○岡本拓也、長岡正隆
- 2P12** 射影演算子を用いた粗視化粒子モデルの構築
(株)豊田中央研究所)○金城友之、兵頭志明
- 2P13** 量子波束によるプロトン移動反応の理論的研究
(金沢大院自然)○林幸一郎、松本大輔、井田朋智、遠藤一央
- 2P14** 水素分子二電子励起状態の複素座標法計算における基底関数の最適化
(慶大院理工)○前川智亮、森田将人、藪下聡
- 2P15** 1,3-ジニトロベンゼンラジカルアニオンの構造に関する量子化学計算
(お茶大院人間文化、理研)○栢沼愛、細井晴子、古谷明子、鷹野景子、益田祐一
- 2P16** 多電子系シュレーディンガー方程式の解析解法: 高度な並列化計算
(京大院工、量子化学研究協会)○中嶋浩之、石川敦之、中辻博
- 2P17** 第二周期元素を含む物質のオーজে電子スペクトルの理論的解析
(金沢大院自然)○高木裕介、加藤謙一、井田朋智、遠藤一央
- 2P18** パルス面積の概念を用いた多準位系のレーザー量子制御
(慶大理工)○常盤浩太郎、菅原道彦、藪下聡

- 2P19** ab initio 分子軌道法による NaN, MgN, KN, CaN の分光定数の理論的予測
(東大院工、北大院理)○石井啓策、武次徹也、山下晃一
- 2P20** Transition metal complexes of Si analogue of π -allyl
(Graduate School of Engineering, Kyoto University)○Mausumi Ray, Yoshihide Nakao,
Hirofumi Sato, and Shigeyoshi Sakaki
- 2P21** SAC/SAC-CI 法による超微細結合定数及び金属錯体のスペクトルに関する理論研究
(京大院工、量子化学研究協会)○福田良一、早木清吾、江原正博、中辻博
- 2P22** 六配位鉄(II)および鉄(III)錯体の光誘起スピン転移に関する理論的研究
(京大院工)○安東秀峰、中尾嘉秀、佐藤啓文、榊茂好
- 2P23** 希土類サンドイッチクラスターの電子状態と幾何構造についての理論的研究
(慶大院理工、JST-CREST)○増田友秀、細谷夏樹、中嶋敦、藪下聡
- 2P24** o-キシリレンの光励起電子環状反応機構に関する理論的研究
(岐阜大工学部応用化学)山田豊和、○酒井章吾
- 2P25** N₂O と CO₂ の内殻電子過程における構造緩和に関する理論的研究
(京大院工)○玉置亮太、江原正博、福田良一、中辻博
- 2P26** 有機ナノ回線の可能性について
(豊橋技科大)○林浩三、谷林慧
- 2P27** 高分子電解質ナフィオン中でのプロトン移動の第一原理分子動力学シミュレーション
(産総研、豊田中研)○崔隆基、土田英二、池庄司民夫、山川俊輔、兵頭志明
- 2P28** 水分子内包フラーレンの振動スペクトルに関する理論的研究
(東大院工)○渡部大地、八木清、平尾公彦
- 2P29** 水中の重炭酸イオン生成に関する理論研究
(京大院工)○飯田健二、横川大輔、佐藤啓文、榊茂好
- 2P30** プロトン化水クラスター(H₃O)⁺(H₂O)_{n-1}(n=4~6)の条件付水素結合パターンと安定構造
(広島大院理、広島大 QuLiS)○杰力 買合木提江、三宅敏子、相田美砂子
- 2P31** ICI の光分解生成物が持つ角運動量ベクトルの空間分布に関する理論的研究
(慶大院・理工)大西 紗代、○藪下 聡
- 2P32** QM/MM-ER 法によるタンパク質中の補酵素の還元反応に伴う自由エネルギー変化の計算
(阪大院基礎工)○高橋英明、大野 創、堀 拓実、古川信一、岸 亮平、中野雅由
- 2P33** レチノイド X レセプターとコアクチベーターの相互作用に関する理論的研究
(神戸大院人間発達環境学、JST-CREST, みずほ情報総研, 立教大理, 国立衛研)
○伊藤三香、福澤薫、望月祐志、中野達也、田中成典
- 2P34** 蛍光蛋白質の発光色制御に関する分子設計
(京大院工)○長谷川淳也、伊瀬豪彦、藤本和宏、B. Swerts、中辻博
- 2P35** 生体化学センサーアクリジン型蛍光プローブ分子の光電子過程
(京大院工、京大福井セ、量子化学研究協会)○江原正博、堀川武則、中辻博、王子田彰夫、
濱地格

- 2P36** MP2, DFT 及び ONIOM 法を用いたウラシル塩基の水和構造の解析
(豊橋技科大院工、プエルトリコ大)○出立兼一、中津泰輔、夏目貴行、塚本貴志、Yasuyuki Ishikawa、栗田典之
- 2P37** Mechanism for Biosynthesis of Antibiotics in Isopenicillin N Synthase Studied by Active-site and QM/MM methods
(Fukui Institute for Fundamental Chemistry, Kyoto University)
○Marcus Lundberg, Keiji Morokuma
- 2P38** リガンド光解離により生じる MbCO 構造変形の理論的解析
(名大院情報科学)○高柳昌芳、奥村博人、長岡正隆
- 2P39** プロトン移動による核酸塩基対の電気伝導度の変化
(東大院工、筑波大数理物質科学研究科先端学際領域センター)○松井 亨、重田育照、平尾公彦
- 2P40** 超球面探索法に基づく高次ポテンシャル関数の構築と振動解析への応用
(東北大院理)○渡辺 暢、前田 理、大野公一
- 2P41** 超球面探索法を用いた $\text{LiF}(\text{H}_2\text{O})_n$ ($n=1-6$) クラスターの構造と Li-F 切断反応経路の解析
(東北大理・東北大院理)○長田有人、前田理、渡辺暢、大野公一
- 2P42** The Rigged QED density interpretation of physical-chemical properties of molecules and chemical processes
(Department of Micro Engineering, Kyoto University)○Pawel Szarek、立花明知
- 2P43** 複雑系での形成パターンと個体間相互作用の相関に関するシミュレーション解析
(熊本大院自然科学)○松尾昭昌、杉本 学
- 2P44** 種々のカルコゲン化合物の吸収および円二色性スペクトルに関する理論的研究
(首都大院理工、京大院工)○本田康、栗原篤史、波田雅彦、中辻博
- 2P45** アンモニアイオン化反応における水和構造変化とエネルギー的安定性の解析
(名大院情報科学)○小谷野哲之、竹中規雄、中川幸紀、長岡正隆
- 2P46** 金クラスターと吸着分子の相互作用に関する理論的研究
(阪大院理)○奥村光隆、北河康隆、川上貴資、山口兆