

～プログラム～

1日目 11月25日(土)

13:00 – 受付開始

13:25 – 開会

Session1 座長：北先生 横浜市立大学

13:30 – 13:40 (10 分) Oral-1 小座間瑛記 埼玉大学 (高柳研) 学部 4 年
脱プロトン化水二量体 H_3O_2^- の Mu 置換による構造変化に関する理論研究

13:40 – 13:50 (10 分) Oral-2 小井土勝一 埼玉大学 (高柳研) 学部 4 年
ピラジン分子に対する H /Mu 付加についての理論研究

13:50 – 14:00 (10 分) Oral-3 佐藤将也 埼玉大学 (前田研) 学部 4 年
任意波形ラジオ波によるラジカル対の反応制御

Session2 座長：中谷先生 首都大学東京

14:00 – 14:10 (10 分) Oral-4 井上界人・新楽望 千葉工業大学 (山本研) 学部 4 年
salen 配位子をもつ Eu(III)錯体の発光特性に関する理論研究

14:10 – 14:20 (10 分) Oral-5 難波美月 千葉工業大学 (山本研) 学部 4 年
プリンヌクレオチド生合成酵素群の分子進化についての理論的研究

14:20 – 14:30 (10 分) Oral-6 守屋颯紀 千葉工業大学 (山本研) 学部 4 年
アントシアニン類の発色機構に関する理論的研究

～休憩 15 分～

Session3 座長：松澤先生 千葉工業大学

14:45 – 14:55 (10 分) Oral-7 熊田大晃 横浜市立大学 (立川・北研) 学部 4 年
経路積分分子動力学法を用いた氷相 II の結晶構造における理論的研究

14:55 – 15:05 (10 分) Oral-8 土肥海人 横浜市立大学 (立川・北研) 学部 4 年
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

15:05 – 15:20 (15 分) Oral-9 村田レオ 首都大学東京 (波田研) 修士 1 年
ハロゲン配位 PbS 量子ドットの電子特性に関する理論的解析

15:20 – 15:35 (15 分) Oral-10 宮本優弥 首都大学東京 (波田研) 修士 2 年
特異値分解を利用した相対論的 NMR 計算における HALA 効果の解析

～休憩 15 分～

Session4 座長：高柳先生 埼玉大学

15:50 – 16:50 (60 分) Invited-1 前田公憲 埼玉大学
動物の磁気感受と低磁場スピン動力学

～休憩 10 分～

17:00 – 18:00 (60 分) Invited-2 田代基慶 東洋大学
有機薄膜太陽電池に関連する理論的研究

18:20 – 19:00 夕食

19:30 – 22:00 懇親会

2 日目 11 月 26 日 (日)

7:00 – 8:00 朝食

Session5 座長：山本先生 千葉工業大学

9:00 – 9:15 (15 分) Oral-11 佐藤丈弘 茨城大学 (森研) 修士 2 年
プロリノール-ホスフィン配位子を用いた銅が触媒する不斉衣笠反応の理論的研究

9:15 – 9:30 (15 分) Oral-12 小澤史章 千葉工業大学 (松澤研) 修士 1 年
Prism 型ハロゲン化物イオン-水 6 量体クラスターを用いた
水素結合ネットワークの理論研究

9:30 – 9:45 (15 分) Oral-13 小野邦彰 横浜市立大学 (立川・北研) 修士 2 年
ベンゼン誘導体に対する陽電子吸着と対消滅機構に関する理論的解析

～休憩 10 分～

Session6 座長：立川先生 横浜市立大学

9:55 – 10:10 (15 分) Oral-13 鈴木健人 埼玉大学 (高柳研) 修士 1 年
RPMD 法によるイオン化ヘリウムクラスターのダイナミクスの解析

10:10 – 10:35 (25 分) Invited-3 長嶋雲兵 FOCUS
Generation of novel equation for molecular boiling point estimation using neural network- Development of computer aided molecular design system: MolWorks –

～休憩 10 分～

Session7 座長：森先生 茨城大学

10:45 – 11:45 (60 分) Invited-4 笹野裕介 東北大学
ある合成化学者による **DFT** 計算の実践-いくつかの独自触媒反応を例として-

11:45 – 閉会