

第1日(9月27日) 午前

	A会場		B会場		C会場	
	【固体物性】		【クラスター】		【理論化学/計算化学】	
9:00	1A01	新規水素結合型電荷移動錯体の構造と中性-イオン性転移(九大院理 <sup>1</sup> , 阪大院理 <sup>2</sup> ) 柴原 壮太 <sup>1</sup> , 北川 宏 <sup>1</sup> , 久保 孝史 <sup>2</sup> , 中筋 一弘 <sup>2</sup>	1B01	多層サンドイッチ有機金属クラスターの磁場偏向とそのダイナミクス(慶大理工 <sup>1</sup> , ANL <sup>2</sup> , JST-CREST <sup>3</sup> ) 宮島 謙 <sup>1</sup> , Mark B. Knickelbein <sup>2</sup> , 中嶋 敦 <sup>1,3</sup>	1C01	シュレーディンガー方程式を解く: 原子・分子系の解析的波動関数(京大院工 <sup>1</sup> , 京大福井セ <sup>2</sup> ) 中辻 博 <sup>1,2</sup>
9:20	1A02	ジヒドロキシ-p-ベンゾキノン誘導体を用いた水素結合性誘電体の構造と物性(産総研CERC <sup>1</sup> , ERATO-SSS <sup>2</sup> , 東大院工 <sup>3</sup> ) 堀内 佐智雄 <sup>1</sup> , 熊井 玲児 <sup>1</sup> , 沖本 洋一 <sup>1</sup> , 石井 史之 <sup>2</sup> , 永長 直人 <sup>1,3</sup> , 十倉 好紀 <sup>1,2,3</sup>	1B02	有機金属ナノクラスターの自己組織化単分子膜上へのソフトラッキングと吸着状態の解明(慶大理工 <sup>1</sup> , JST-CREST <sup>2</sup> ) 岡田 英嗣 <sup>1</sup> , 土居 真吾 <sup>1</sup> , 長岡 修平 <sup>1</sup> , 松本 剛士 <sup>1</sup> , 三井 正明 <sup>1</sup> , 中嶋 敦 <sup>1,2</sup>	1C02	電子状態理論における重心運動の取り扱いに関する一考察(早大理工) 袖山 慶太郎, 宮本 開任, 星野 稔, 中井 浩巳
9:40	1A03	有機強誘電体フェナジン-クロラニル酸の構造と分極の起源(産総研CERC <sup>1</sup> , ERATO-SSS <sup>2</sup> , 東大院工 <sup>3</sup> ) 熊井 玲児 <sup>1</sup> , 堀内 佐智雄 <sup>1</sup> , 石井 史之 <sup>2</sup> , 永長 直人 <sup>1,3</sup> , 十倉 好紀 <sup>1,2,3</sup>	1B03	Ln-COT一次元多層サンドイッチクラスターの幾何及び電子構造に関する理論研究(慶大理工 <sup>1</sup> , JST-CREST <sup>2</sup> ) 竹上 竜太 <sup>1</sup> , 細谷 夏樹 <sup>1</sup> , 鈴村 淳一 <sup>1</sup> , 中嶋 敦 <sup>1,2</sup> , 藪下 聡 <sup>1</sup>	1C03	DFT計算に対する結合エネルギー密度解析(Bond-EDA)(早大理工) 菊池 那明, 中井 浩巳
10:00	1A04	ホトクロミック化合物サリチリデンアニリン誘導体の3つの多形結晶とその物性(東工大院理) 上本 紘平, 植草 秀裕, 大橋 裕二	1B04	講演中止	1C04	化学的相互作用場の理論的研究(京大院工) 立花 明知
10:20	1A05	不飽和脂質化合物の構造と運動性の相関に関する研究(阪大院理) 秋田 恭世, 川口 辰也, 金子 文俊	1B05	チタンクラスターイオンの衝突反応過程 サイズ効果および酸化による反応性変化(豊田工大 <sup>1</sup> , (株)コンボン研 <sup>2</sup> ) 市橋 正彦 <sup>1</sup> , 半村 哲 <sup>2</sup> , 近藤 保 <sup>1</sup>	1C05	密度汎関数法における長距離相互作用の問題(豊橋技科大) 関野 秀男

10:40	1A06	有機ホウ素ポリマーの フォトルミネッセンス (NT T物性研 <sup>1</sup> , 京大IIC <sup>2</sup> , 京大 院工 <sup>3</sup> ) 藤野 正家 <sup>1</sup> , 古 川 一暁 <sup>1</sup> , 鳥光 慶一 <sup>1</sup> , 山 雄 健史 <sup>2</sup> , 藤田 静雄 <sup>2</sup> , 松 元 深 <sup>3</sup> , 中條 善樹 <sup>3</sup>	1B06	ニッケルクラスターイオン と酸素との反応による選 択的なNi <sub>13</sub> O <sub>8</sub> <sup>+</sup> とNi <sub>16</sub> O <sub>10</sub> <sup>+</sup> の 生成 (産総研ナノテク <sup>1</sup> , ナ ノ機能合成プロ <sup>2</sup> ) 菅原 孝一 <sup>1,2</sup> , 古賀 健司 <sup>1,2</sup>	1C06	タンパク質エネルギー地形 における自由度の縮約化と 時系列解析 (神戸大院自然 <sup>1</sup> , FOM研究所 <sup>2</sup> , ケンブリッジ 大 <sup>3</sup> ) 星野 恭子 <sup>1</sup> , 松永 康 佑 <sup>1</sup> , Mark A. Miller <sup>2</sup> , David J. Wales <sup>3</sup> , 小松崎 民樹 <sup>1</sup>
11:00	1A07	NMRを用いたSm E相にお ける4- <i>n</i> -ブチルチオシア ノピフェニル分子のダイナ ミクスの研究 (筑波大院 数理) 石丸 臣一, 齋藤 一弥	1B07	有限長カーボンナノ チューブにおけるサイズ 依存性 (名城大理工 <sup>1</sup> , 九 大先導研 <sup>2</sup> ) 湯村 尚史 <sup>1</sup> , 野崎 大二郎 <sup>2</sup> , 坂東 俊治 <sup>1</sup> , 吉澤 一成 <sup>2</sup> , 飯島 澄男 <sup>1</sup>	1C07	非断熱現象を利用した分 子設計 (分子研 <sup>1</sup> , 静岡大 工 <sup>2</sup> ) 南部 伸孝 <sup>1</sup> , 石田 俊正 <sup>2</sup> , 中村 宏樹 <sup>1</sup>
11:20	1A08	分子性アモルファス物質 における配座異性体の挙 動 (学習院大理) 仲山 英之, 堺 圭亮, 小林 由佳, 石井 菊次郎	1B08	イオン移動能法およびパ ルスアーク放電法を用い た、ナノカーボン生成機構 の探索 (名大物国セ <sup>1</sup> , 名 大院理 <sup>2</sup> ) 菅井 俊樹 <sup>1</sup> , 篠原 久典 <sup>2</sup>	1C08	分子軌道エンジニアリン グによる単一分子発光素 子の新規提案 (九大先導 研) 野崎 大二郎, 吉澤 一成
11:40	1A09	Krを用いた多孔質ガラス の孔径制御 (慶応大理 工) 柴山 義行, 白浜 圭 也	1B09	多核原子内包フラーレン - 紫外光電子スペクトル と構造・電子状態 - (千 葉大工・千葉大自然) 日野 照純	1C09	混合原子価状態とプロト ン移動の組み合わせによ る新規メモリー分子構築 の可能性 (九大院総理工 <sup>1</sup> , 阪市大院理 <sup>2</sup> ) 森 寛 敏 <sup>1</sup> , 田所 誠 <sup>2</sup> , 三好 永作 <sup>1</sup>
12:00	1A10	有機電界効果トランジス ターからの可視発光の観 察 (総研大 <sup>1</sup> , 分子研 <sup>2</sup> , CREST <sup>3</sup> ) 坂上 知 <sup>1</sup> , 藤 原 栄一 <sup>2</sup> , 山田 亮 <sup>1,2</sup> , 多田 博一 <sup>1,2,3</sup>				

第1日(9月27日) 午前

D会場		E会場			P会場
【マイクロ波分光・電子線回折】					
1D01	CH <sub>2</sub> Brラジカルのマイクロ波スペクトル (JAXA <sup>1</sup> , 福井大 <sup>2</sup> ) 尾関 博之 <sup>1</sup> , 齋藤 修二 <sup>2</sup>			9:00	
1D02	H <sub>2</sub> CN <sup>+</sup> の解離性再結合反応分岐比: サブミリ波分光による研究 (茨城大理) 天竺 堯義, 平尾 強司, 高野 順平			9:20	
1D03	CO二量体のミリ波分光: 新しい状態の観測 (SIMS NRC Canada) 唐 健, A. R. W. McKellar			9:40	
1D04	HO <sub>2</sub> ラジカルの分子構造 (東大院総合) 須磨 航介, 住吉 吉英, 遠藤 泰樹			10:00	
1D05	トンネル効果とエネルギー保存条件 (産総研 <sup>1</sup> , UNB <sup>2</sup> ) 山田 耕一 <sup>1</sup> , Stephen C. Ross <sup>2</sup>			10:20	

1D06	CF <sub>3</sub> SF <sub>5</sub> の分子内運動と回転エネルギー (総研大 <sup>1</sup> , 神奈川工大 <sup>2</sup> ) 廣田 榮治 <sup>1</sup> , 川嶋 良章 <sup>2</sup>			10:40	
1D07	フーリエ変換マイクロ波分光によるCF <sub>3</sub> SF <sub>5</sub> の分子構造と分子内回転 (神奈川工大 <sup>1</sup> , 総研大 <sup>2</sup> ) 安食 賢 <sup>1</sup> , 小池 聡 <sup>1</sup> , 川嶋 良章 <sup>1</sup> , 廣田 榮治 <sup>2</sup>			11:00	
【赤外・ラマン分光】					
1D08	CoNOの <sub>1</sub> バンドの時間分解赤外ダイオードレーザー分光 (九大院理) 副島 武夫, 中島 基, 池田 誠規, 田中 桂一			11:20	
1D09	連続スキャン型FTIR分光器Bruker120HRを用いた時間分解分光とその応用 (岡山大理 <sup>1</sup> , ヘイロフスキー研 <sup>2</sup> ) 濱 陽一 <sup>1</sup> , Svatopluk Civiš <sup>2</sup> , 川口 建太郎 <sup>1</sup>			11:40	
1D10	サブピコ秒時間分解赤外分光法によるタンゲステンカルボニル錯体W(CO) <sub>6-n</sub> (X) <sub>n</sub> の振動ダイナミクス (東大院理) 伴 野 元洋, 佐藤 伸, 岩田 耕一, 浜口 宏夫			12:00	

第1日(9月27日) 午後

	A会場		B会場		C会場	
		【伝導性・磁性物質】		【クラスター】		【理論化学/計算化学】
13:00	1A11	ルベアン酸ポリマーで保護された貴金属ナノ粒子の合成とその水素機能性 (近大応化 <sup>1</sup> , 筑大化 <sup>2</sup> , 阪大理 <sup>3</sup> , 九大理 <sup>4</sup> , NIMS <sup>5</sup> ) 藤島 武蔵 <sup>1</sup> , 池田 龍一 <sup>2</sup> , 久保 孝史 <sup>3</sup> , 中筋 一弘 <sup>3</sup> , 長尾 祐樹 <sup>4</sup> , 山内 美穂 <sup>4</sup> , 板東 義雄 <sup>5</sup> , 北川 宏 <sup>4</sup>	1B11	金ナノ粒子構造のサイズおよび温度依存性 (産総研ナノテク <sup>1</sup> , 産総研計算科学 <sup>2</sup> ) 古賀 健司 <sup>1</sup> , 池庄 司 民夫 <sup>2</sup> , 菅原 孝一 <sup>1</sup>	1C11	自由エネルギー勾配法による水溶液中アンモニアのイオン化過程に関する理論的研究 (名大院情報科学) 永江 有起彦, 大石 祐貴, 長岡 正隆
13:20	1A12	分子ワイヤの電気伝導 (阪大産研 <sup>1</sup> , JST, CREST <sup>2</sup> , オックスフォード大 <sup>3</sup> ) 谷口 正輝 <sup>1</sup> , 藤本 辰彦 <sup>1</sup> , 小嶋 薫 <sup>2</sup> , H. L. Anderson <sup>3</sup> , 川合 知二 <sup>1</sup>	1B12	In-situ XRD study of oxidation process of copper nanoparticles (産総研ナノテク) 陳 軍華, 古賀 健司, 山口 智彦, 菅原 孝一	1C12	第一遷移系列六配位金属イオンの配位子交換反応における結合配位子効果に関する理論的研究 - Fe(III)上での水交換反応 - (名工大院工 <sup>1</sup> , 岐大地域科学 <sup>2</sup> , 名大院理 <sup>3</sup> ) 和佐田 祐子 <sup>1</sup> , 和佐田 裕昭 <sup>2</sup> , 舟橋 重信 <sup>3</sup>
13:40	1A13	ヘキサチオペンタセンの構造と物性 (ソニー(株)マテリアル研) 村上 昌幸, 大田 陽介, 国清 敏幸, 鷓川 彰人	1B13	Effect of Hydrothermal Treatment on the Structure and Electronic Properties of Nanodiamond (東工大院理工 <sup>1</sup> , Ioffe物理工学研究所 <sup>2</sup> ) Marina V. Baidakova <sup>1</sup> , Vladimir Yu. Osipov <sup>1,2</sup> , 高井 和之 <sup>1</sup> , 榎 敏明 <sup>1</sup> , 戸木田 雅利 <sup>1</sup> , 渡辺 順次 <sup>1</sup> , Alexander Ya. Vul <sup>3</sup>	1C13	長鎖のn-alkaneの安定な回転異性体 (自宅) 鈴木 冲
14:00	1A14	ポリヘテロールの芳香性とキノイド性 (早大理工) 成田 裕貴, 武田 京三郎	1B14	chromene-2-one骨格を含む新規な低分子ゲル化剤の物性 (山口大工) 竹中 俊介, 河辺 浩輔, 森田 由紀, 岡本 浩明	1C14	量子化学に基づいた巨大分子計算法の開発 (産総研) Dmitri G. Fedorov, 北浦 和夫
14:20	1A15	Theory of Optical Control of Spin Alignment in Conjugated Molecular Magnets (産総研ナノテク) Huai Ping, 下位 幸弘, 阿部 修治	1B15	アセチリド化合物を用いた機能性ナノ合金の開発と評価 (分子研) 西條 純一, 岡部 智絵, 十代 健, 西 信之	1C15	分子動力学プログラムの開発とProteinDFとの連成 (東大生研 <sup>1</sup> , アドバンスソフト(株) <sup>2</sup> , (株)日立 <sup>3</sup> ) 恒川 直樹 <sup>1</sup> , 井原 直樹 <sup>1</sup> , 稲葉 亨 <sup>2,3</sup> , 佐藤 文俊 <sup>1</sup>

14:40	1A16	有機強磁性体におけるゼ 口磁場分裂パラメーター の第一原理計算 (阪大院 理) 庄司 光男, 小泉 健 一, 浜本 智大, 谷口 岳志, 武田 亮, 北河 康隆, 川上 貴資, 奥村 光隆, 山中 秀 介, 山口 兆	1B16	InPナノ粒子の合成と評価 (東大院工) 松本 太一, 前之園 信也, 山口 由岐 夫	1C16	タンパク質のフォールディ ング解析法とCDスペクトル計 算 (豊橋技科大 <sup>1</sup> , 科技振 <sup>2</sup> , 筑波大情工 <sup>3</sup> , 産総研グリッド <sup>4</sup> ) 後藤 仁志 <sup>1</sup> , 中山 尚史 <sup>1,2</sup> , 中島 佳宏 <sup>3</sup> , 佐藤 三久 <sup>3</sup> , 鎌倉 寿行 <sup>1</sup> , 小畑 繁昭 <sup>1</sup> , 長 嶋 雲兵 <sup>4</sup>
15:00	1A17	光誘起電荷移動型有機 磁性体のモデル分子にお ける電子状態の理論的解 析 (阪大院理) 谷口 岳 志, 川上 貴資, 庄司 光男, 奥村 光隆, 山口 兆	1B17	Pd/Ptコア・シェル型ナノ 粒子の水素吸蔵と構造変 化 (九大院理) 小林 浩 和, 山内 美穂, 北川 宏	1C17	並列処理による分子構造 最適化計算の高速化 グリッドコンピューティング 活用に向けて (情通機 構) 奥野 好成, 益子 信 郎
15:20	1A18	スピン間相互作用経路解 析に基づく有機強磁性高 分子の理論的設計法 (科 技機構PRESTO <sup>1</sup> , 九大工 <sup>2</sup> , 九大院総理工 <sup>3</sup> ) 折本 裕一 <sup>1</sup> , 山口 勝太 <sup>2</sup> , 青木 百合子 <sup>1,3</sup>	1B18	チオール保護金ナノ粒子 のMALDI-TOF質量分析 (産総研・CREST-JST) 多井 豊, 越智 康博, 村上 純一	1C18	量子化学グリッドの構築: 知識と経験の共有・交換 の仕組みの実現、量子化 学手法の普及に向けて (産総研GTRC) 西川 武 志, 伊藤 智, 長嶋 雲兵, 関口 智嗣
15:40	1A19	コラヌレンを基盤とする曲面型中 性開殻 共役系の電子スピン構 造とスピン整列 (科技機構さきが け <sup>1</sup> , 阪大院理 <sup>2</sup> , 阪市大院理 <sup>3</sup> ) 福井 晃三 <sup>1</sup> , 森田 靖 <sup>1,2</sup> , 西田 辰 介 <sup>2</sup> , 小林 忠弘 <sup>2</sup> , 佐藤 和信 <sup>3</sup> , 塩 見 大輔 <sup>3</sup> , 工位 武治 <sup>3</sup> , 中筋 一弘 <sup>2</sup>	1B19	Nalナノ結晶イオンへのメ タノール分子吸着反応 (東北大院理 <sup>1</sup> , 京府大人 環 <sup>2</sup> ) 美齊津 文典 <sup>1</sup> , 鶴 田 護 <sup>1</sup> , 古屋 亜理 <sup>1</sup> , 角山 寛規 <sup>1</sup> , 大野 公一 <sup>1</sup> , リン トゥルオト 正美 <sup>2</sup>		
16:00						
17:40						

第1日(9月27日) 午後

D会場		E会場			P会場
【赤外・ラマン分光】		分子構造総合討論会奨励賞応募講演			
1D11	固体試料を対象とした振動シユタルク効果の新しい測定法 (早大理工) 鈴木 賢司, 古川 行夫	1E11	非直線炭素鎖分子 $C_nH_4^+$ (n=4,6,8) の検出と帰属 (パーゼル大 <sup>1</sup> , Polish Academy of Science <sup>2</sup> ) 荒木 光典 <sup>1</sup> , Harold Linnartz <sup>1</sup> , Pawel Cias <sup>1</sup> , Alexey Denisov <sup>1</sup> , Jan Fulara <sup>2</sup> , Anton Batalov <sup>1</sup> , Ivan Shnitko <sup>1</sup> , John P. Maier <sup>1</sup>	13:00	
1D12	低温マトリックス単離赤外分光法による4-クロロ-1,3-ベンゼンジオール <sup>1</sup> の逐次光反応機構の解明 (東農工大 院BASE <sup>1</sup> , 広島大QuLiS <sup>2</sup> ) 長屋 真紀 <sup>1</sup> , 赤井 伸行 <sup>2</sup> , 工藤 聡 <sup>1</sup> , 中田 宗隆 <sup>1</sup>	1E12	He液滴を用いた分子クラスター中の分子の回転運動の分光学的研究 (南カリフォルニア大) 保科 宏道, Mikhail Slipchenko, Andrey Vilesov	13:20	
1D13	低温アルゴンマトリックス中の3,5-シクロヘキサジエン-1,2-ジイミンの光環化と光異性化 (東農工大 院BASE) 氏家 賢二, 工藤 聡, 中田 宗隆	1E13	赤外多角入射分解分光法によるロイシンファスナー解析 (日大生産工 <sup>1</sup> , 千葉大教育 <sup>2</sup> ) 長谷川 健 <sup>1</sup> , 角田 洋幸 <sup>1</sup> , 山田 哲弘 <sup>2</sup>	13:40	
1D14	低温マトリックス法によるチオホルムアルデヒド-HX(X=Cl, Br)錯体の振動スペクトルとマトリックス効果 (岩手大工) 鈴木 映一, 山崎 正寛, 服部 竜一, 清水 健司	1E14	四次ラマン分光法による色素溶液表面の界面選択的観測 (神戸大 <sup>1</sup> , 広大院理 <sup>2</sup> , CREST <sup>3</sup> ) 藤 芳 暁 <sup>1,3</sup> , 石橋 孝章 <sup>2,3</sup> , 大西 洋 <sup>1,3</sup>	14:00	
1D15	表面増強赤外分光によるPt電極表面における水素吸着と水素反応機構の解析 (北大触媒セ <sup>1</sup> , CREST-JST <sup>2</sup> , 北大院地球環境 <sup>3</sup> ) 大澤 雅俊 <sup>1,2</sup> , 国松 敬二 <sup>1</sup> , 先崎 尊博 <sup>3</sup> , 津島 稔 <sup>2</sup>	1E15	単一銀ナノ粒子凝集体の局在表面プラズモンと表面増強ラマン散乱 (関学理工) 伊藤 民武, 橋本 和宏, 吉川 泰生, 池羽田 晶文, 尾崎 幸洋	14:20	

1D16	ラマン分光法および密度汎関数法によるセラミドの構造研究 (神戸大院自 <sup>1</sup> , 神戸大農 <sup>2</sup> ) 田中 丈幸 <sup>1</sup> , 田中 陽子 <sup>2</sup> , 土橋 慶輔 <sup>1</sup> , 大野 隆 <sup>2</sup> , 幡山 文一 <sup>2</sup>	1E16	ビフェロセン系電荷移動錯体におけるイオン性 - イオン性相転移: その化学制御 (東邦大理 <sup>1</sup> , 東大物性研 <sup>2</sup> ) 持田 智行 <sup>1</sup> , 高澤 孝輔 <sup>1</sup> , 永淵 絵里 <sup>1</sup> , 佐藤 道子 <sup>1</sup> , 西尾 豊 <sup>1</sup> , 梶田 晃示 <sup>1</sup> , 森 初果 <sup>2</sup>	14:40	
1D17	ガラスダイナミクスにおける分子の挙動と二次元分光法 (京大院理 <sup>1</sup> , 名大院理 <sup>2</sup> ) 永田 勇樹 <sup>1</sup> , 谷村 吉隆 <sup>1</sup> , 斉藤 真司 <sup>2</sup>	1E17	ラジカルカチオン塩 BBDTA·GaBr <sub>4</sub> の結晶構造と磁氣的性質 (名大物質国際研 <sup>1</sup> , 名大院理 <sup>2</sup> ) 藤田 渉 <sup>1</sup> , 阿波賀 邦夫 <sup>2</sup>	15:00	
		1E18	溶媒を介した長距離電子移動 (シカゴ大化 <sup>1</sup> , 東北大多元研 <sup>2</sup> , 京大院工 <sup>3</sup> , 分子研 <sup>4</sup> ) 小堀 康博 <sup>1</sup> , 矢後 友暁 <sup>2</sup> , 秋山 公男 <sup>2</sup> , 手老 省三 <sup>2</sup> , 佐藤 啓文 <sup>3</sup> , 平田 文男 <sup>4</sup> , James R. Norris Jr. <sup>1</sup>	15:20	
		1E19	溶媒和ダイナミクス: 時間分解分光実験、RISM-モード結合理論を併用した統括的研究 (阪大先端セ <sup>1</sup> , 名大院工 <sup>2</sup> , 分子研 <sup>3</sup> , 豊田理化研 <sup>4</sup> ) 西山 桂 <sup>1</sup> , 山口 毅 <sup>2</sup> , 平田 文男 <sup>3</sup> , 岡田 正 <sup>4</sup>	15:40	
				16:00	ポスター発表(1P001-1P132)
				17:40	



第2日(9月28日) 午前

	A会場		B会場		C会場	
		【生体関連】		【クラスター】		【理論化学/計算化学】
9:00	2A01	DNAのグアニン並びの ナジェティクス (JST <sup>1</sup> , 筑 波大物質工 <sup>2</sup> ) 横島 智 <sup>1,2</sup> , 吉識 典史 <sup>2</sup> , 八野井 渡 <sup>2</sup> , 岡田 朗 <sup>2</sup>	2B01	銅-スルフィド錯体の ZEKE光電子分光 (産総 研ナノテク部門) 宮脇 淳, 菅原 孝一	2C01	大規模分子系に対する MP2摂動法の開発 (東大 大院工 <sup>1</sup> , JST, PRESTO <sup>2</sup> ) 中嶋 隆人 <sup>1,2</sup> , 平尾 公彦 <sup>1</sup>
9:20	2A02	DNAを活用した色素会合 体の調製 (東大先端研 <sup>1</sup> , 科技機構 <sup>2</sup> ) 榎田 啓 <sup>1</sup> , 浅沼 浩之 <sup>1,2</sup> , 小宮山 真 <sup>1</sup>	2B02	フォントラップ表面分光 法: 外部光共振器への固 体基板挿入効果 (豊田工 大 <sup>1</sup> , (株)コンボン研 <sup>2</sup> ) 寺寄 亨 <sup>1</sup> , 江頭 和宏 <sup>2</sup> , 近 藤 保 <sup>1</sup>	2C02	密度行列Purification法の 改良とその大規模系への 適用 (東大院工) 重田 育照, 平尾 公彦
9:40	2A03	Si(111)表面におけるアミ ノ酸の電子状態変化 (千 葉大理) 小田 将人, 中 山 隆史	2B03	赤外キャピティリングダウ ン分光法によるベンゼン クラスターのCH伸縮振動 の観測 (兵庫県立大理) 松本 剛昭, 本間 健二	2C03	CeからLuのランタノイド元素 に対する相対論効果を考慮 した電子相関用基底関数 (苫駒大 <sup>1</sup> , 北大院理 <sup>2</sup> , 青森大 <sup>3</sup> , 九大院総理工 <sup>4</sup> , 室工大工 <sup>5</sup> ) 関谷 雅弘 <sup>1</sup> , 野呂 武司 <sup>2</sup> , 長内 有 <sup>3</sup> , 三好 永作 <sup>4</sup> , 古賀 俊勝 <sup>5</sup>
10:00	2A04	光を用いたタンパク質結 晶化法の開発 (群馬大 工) 奥津 哲夫, 古田 憲 司, 平塚 浩士	2B04	二酸化炭素 水混合系 アニオンクラスターのイオ ンコア構造と水和形態 (東大院総合 <sup>1</sup> , 分子研 <sup>2</sup> ) 村岡 梓 <sup>1</sup> , 井口 佳哉 <sup>1</sup> , 西 信之 <sup>2</sup> , 永田 敬 <sup>1</sup>	2C04	高速・高並列MP2計算ア ルゴリズム (分子研 <sup>1</sup> , Arkansas大 <sup>2</sup> ) 石村 和 也 <sup>1</sup> , Peter Pulay <sup>2</sup> , 永瀬 茂 <sup>1</sup>
10:20	2A05	フェレドキシンタンパク活 性部位の電子状態と電子 伝達メカニズムの考察 (金沢大自然) 小田 竜 樹, 長尾 秀実, 杉山 歩, 和田 敬四郎	2B05	溶媒和マグネシウムイオン の赤外光解離分光 溶媒 分子の特性に応じた溶媒和 構造 (九大院理 <sup>1</sup> , 分子研 <sup>2</sup> ) 大橋 和彦 <sup>1</sup> , 井口 佳哉 <sup>2</sup> , 宗 豊 <sup>1</sup> , 待永 広宣 <sup>1</sup> , 寺原 一 崇 <sup>1</sup> , 西 信之 <sup>2</sup> , 関谷 博 <sup>1</sup>	2C05	随伴座標展開(ACE)法に よる(sp sp sp sp)型電子 反撥積分の高速計算 (東 京理科大理) 石田 和 弘

10:40	2A06	レチナール光受容体タンパク質の反応動力学に関する理論的研究 (京大福井センター) 林 重彦	2B06	大サイズ $[H(MeOH)_n]^+$ クラスタの赤外分光と水素結合構造 (東北大院理 <sup>1</sup> , 広島大院理 <sup>2</sup> , 京大院理 <sup>3</sup> ) 榎本 怜子 <sup>1</sup> , 宮崎 充彦 <sup>3</sup> , 藤井 朱鳥 <sup>1</sup> , 江幡 孝之 <sup>2</sup> , 三上 直彦 <sup>1</sup>	2C06	露に related スレーター型ジェミナル理論 (名大院情報科学) 天能 精一郎
11:00	2A07	拡散係数変化から見た Phytochromeの光反応構造変化 (京大院理 <sup>1</sup> , KumhoL&E.Lab.Korea <sup>2</sup> ) 永徳 丈 <sup>1</sup> , Xristo Zarate <sup>2</sup> , Gennady V. Kozhukh <sup>2</sup> , Jeong-II Kim <sup>2</sup> , Pill-Soon Song <sup>2</sup> , 寺嶋 正秀 <sup>1</sup>	2B07	レーザー脱離法による DNA塩基クラスタの生成 (横浜市大総合理) 三枝 洋之, 富岡 あづさ, 岩瀬 英二郎, 片山 匠	2C07	リパーゼのアシル化反応におけるコンフォーマーション依存性 (UCLA) 鷹野 優, K. N. Houk
11:20	2A08	センサリーロドプシンII トランスデューサータンパク質複合体の光反応ダイナミクス (京大院理 <sup>1</sup> , 阪大院理 <sup>2</sup> , テキサス大 <sup>3</sup> ) 井上 圭一 <sup>1</sup> , 西奥 義憲 <sup>1</sup> , 森崎 雅世 <sup>2</sup> , 佐々木 純 <sup>3</sup> , 徳永 史生 <sup>2</sup> , 寺嶋 正秀 <sup>1</sup>	2B08	赤外光解離分光法による、水和金属イオンの溶媒和構造と金属挿入反応の研究 (東大院総合 <sup>1</sup> , 分子研 <sup>2</sup> , 理研 <sup>3</sup> , 東北大院理 <sup>4</sup> ) 井口 佳哉 <sup>1,2</sup> , 大下 慶次郎 <sup>2,3</sup> , 美齊津 文典 <sup>4</sup> , 永田 敬 <sup>1</sup> , 西 信之 <sup>2</sup>	2C08	QM/MM法によるフェニルアラニンヒドロキシラーゼのノンヘム鉄活性点の理論的研究 (九大先導研) 塩田 淑仁, 吉澤 一成
11:40	2A09	シトクロムc酸化酵素Cu <sub>6</sub> サイトモデル錯体の反応性と紫外共鳴ラマンバンド強度の励起波長依存性 (岡崎統合バイオ <sup>1</sup> , 九大先導研 <sup>2</sup> ) 長野 恭朋 <sup>1</sup> , 北川 禎三 <sup>1</sup> , 成田 吉徳 <sup>2</sup> , 劉 勁剛 <sup>2</sup>	2B09	クラスタ中での金属イオンの反応と溶媒和の超高速ダイナミクス (神戸大院自然 <sup>1</sup> , 神戸大理 <sup>2</sup> ) 岡井 信裕 <sup>1</sup> , 荒西 研吾 <sup>1</sup> , 富宅 喜代一 <sup>2</sup>	2C09	QM/MM法によるジオールデヒドラターゼの反応機構解明; 活性中心におけるアミノ酸残基の触媒機能 (九大先導研 <sup>1</sup> , 岡大工 <sup>2</sup> ) 蒲池 高志 <sup>1</sup> , 虎谷 哲夫 <sup>2</sup> , 吉澤 一成 <sup>1</sup>
12:00	2A10	ミオグロビンヘム周辺の水素結合ネットワーク (神戸大分子フォト <sup>1</sup> , JSTさきがけ <sup>2</sup> , 九大院工 <sup>3</sup> , 岡崎統合バイオ <sup>4</sup> ) 水谷 泰久 <sup>1,2</sup> , 林 高史 <sup>3</sup> , 原田 勝好 <sup>3</sup> , 中川 知之 <sup>3</sup> , Biswajit Pal <sup>4</sup> , 北川 禎三 <sup>4</sup>	2B10	トルエン二量体の分子間相互作用: 高精度分子軌道法による解析 (産総研計算科学 <sup>1</sup> , 産総研計測 <sup>2</sup> ) 都築 誠二 <sup>1</sup> , 本田 一匡 <sup>2</sup> , 内丸 忠文 <sup>1</sup> , 三上 益弘 <sup>1</sup>	2C10	補償溶質エクトインによるタンパク質近傍水分子の拡散低下 (名大院情) 優 乙石, 長岡 正隆

第2日(9月28日) 午前

D会場		E会場		P会場	
【赤外・ラマン分光】		磁気科学の最前線			
2D01	アルキル/オキシエチレン/アルキルトリブロッキング化合物のコンホメーションと融解挙動 (広島大院理) 寺井 良英, 福原 幸一, 江幡 孝之	2E01	強磁場によりキラリティーを誘導する (広島大院理) 谷本 能文	9:00	
2D02	THFクラスレートハイドレートの低振動数ラマン散乱 (広島大QuLiS <sup>1</sup> , 青学大理工 <sup>2</sup> , 広島大院理 <sup>3</sup> ) 高須 雄一 <sup>1</sup> , 西尾 泉 <sup>2</sup> , 吉田 弘 <sup>1,3</sup>	2E02	強磁場で水の物性を変える (埼玉大理) 中林 誠一郎, 細田 晴輝, 曾越 宣仁	9:20	
2D03	近赤外分光法による下限臨界温度を有する溶液の相溶性と相分離に関する研究 (関学大理工) 池羽田 晶文, 橋本 千尋, 三上 由帆, 尾崎 幸洋			9:40	
2D04	-カロテンのピコ秒時間分解近赤外励起ラマンスペクトルにおける溶媒効果と振電相互作用 (埼玉大理 <sup>1</sup> , 埼玉大 <sup>2</sup> ) 松野 真也 <sup>1</sup> , 坂本章 <sup>1</sup> , 田隅 三生 <sup>2</sup>	2E03	ソフトマテリアルの構造と機能を磁場で操る (信州大理) 尾関 寿美男	10:00	
2D05	単一分子感度SERSにおける金属ナノ粒子の接合部の重要性 (産総研-界面ナノ <sup>1</sup> , 浜松ホト-筑波研 <sup>2</sup> , 産総研-単一分子ラボ <sup>3</sup> ) 二又 政之 <sup>1</sup> , 丸山 芳弘 <sup>2</sup> , 石川 満 <sup>3</sup>			10:20	

2D06	単一分子感度SERSにおける発光スペクトルのオリジンについて (産総研-界面ナノ <sup>1</sup> , 浜松ホト-筑波研 <sup>2</sup> ) 二又 政之 <sup>1</sup> , 丸山 芳弘 <sup>2</sup>	2E04	非磁性体に及ぼす磁場効果:配向, パターニング (都立大院工・物材機構) 木村 恒久	10:40	
2D07	単一銀ナノ凝集体に吸着したポルフィリンの表面増強ラマン散乱 (関学大理工) 橋本 和宏, 伊藤 民武, 吉川 泰生, 尾崎 幸洋	2E05	弱磁性物質に対する磁場の諸効果 水の浮上, 物質分離, 自己組織化 etc (物材機構) 廣田 憲之	11:00	
2D08	フェムト秒表面プラズモン共鳴による金薄膜のコヒーレントフォノンの観測 (理研) 山口 祥一, 田原 太平			11:20	
2D09	タンパク質高次構造ダイナミクスの検出にむけたピコ秒時間分解紫外共鳴ラマン分光装置の製作 (JST CREST <sup>1</sup> , 神戸大分子フォト <sup>2</sup> , JSTさきがけ <sup>3</sup> ) 佐藤 亮 <sup>1,2,3</sup> , 水谷 泰久 <sup>1,2,3</sup>	2E06	反磁性物質の磁気浮上と材料プロセッシング (東北大金研) 茂木 巖, 高橋 弘紀, 淡路 智, 渡辺 和雄, 本河 光博	11:40	
				12:00	

第2日(9月28日) 午後

	A会場		B会場		C会場	
		【磁気共鳴】		【反応素過程】		【理論化学】
13:00	2A11	テンプレート含有ハイシリカフェリエライトのホスト-ゲスト間相互作用解析(東ソー分析セ <sup>1</sup> , 東ソー南陽研 <sup>2</sup> , 広島大院理 <sup>3</sup> ) 岡 秀行 <sup>1</sup> , 笠原 泉司 <sup>1</sup> , 板橋 慶治 <sup>2</sup> , 中野 雅雄 <sup>2</sup> , 大木 寛 <sup>3</sup>	2B11	シュタルク効果を用いた速度選択による低速分子ビームの生成(東工大院理工) 奥田 泰壮, 関口 貴郎, 辻 秀伸, 金森 英人	2C11	分子の回転自由度を露わに考慮した経路積分ハイブリッドモンテカルロ法の開発: 量子液滴内の分子の溶媒和に向けて(分子研) 三浦 伸一
13:20	2A12	無機固体酸塩CsHSO <sub>4</sub> のII相における <sup>1</sup> H緩和とプロトンダイナミクス(産総研計測フロ) 林 繁信, 水野 正城	2B12	交差分子線によるイットリウム原子の反応ダイナミクスの解明: Y(a <sup>2</sup> D <sub>J</sub> )+O <sub>2</sub> (X <sup>3</sup> <sub>g</sub> <sup>-</sup> ) YO(A <sup>2</sup> , X <sup>2</sup> <sub>J</sub> )+O( <sup>3</sup> P <sub>J</sub> ) (兵庫県立大院物質) 東山 友彦, 石田 雅幸, 本間 健二	2C12	ナノサイズ分子系物質における強電子-フォノン相互作用の条件(長崎総科大院新創研) 加藤 貴, 山邊 時雄
13:40	2A13	固体高分解能NMRでみる常磁性結晶における電子スピン密度分布(北大院理) 丸田 悟朗, 森井 邦夫, 大桃 貴之, 山田 哲也, 武田 定	2B13	化学修飾されたDNAでの電荷移動反応(筑波大物質工 <sup>1</sup> , JST <sup>2</sup> ) 岡田 朗 <sup>1</sup> , 横島 智 <sup>1,2</sup>	2C13	ガウス関数展開を用いたグリーン関数法による分子ワイヤーのコンダクタンス計算(東大院工 <sup>1</sup> , CREST <sup>2</sup> , 九大先導研 <sup>3</sup> ) 多田 朋史 <sup>1,2</sup> , 近藤 正一 <sup>3</sup> , 渡邊 聡 <sup>1,2</sup> , 吉澤 一成 <sup>3</sup>
14:00	2A14	偏極溶液分子の核スピンダイナミクス(兵県大院物質) 石川 潔, 山本 貴子, 今井 宏彦, 高木 芳弘	2B14	波長可変高強度フェムト秒レーザーによる有機分子のイオン化/フラグメンテーション(阪市大院理 <sup>1</sup> , レーザー総研 <sup>2</sup> , 阪大院工 <sup>3</sup> ) 村上 政直 <sup>1</sup> , 島田 義則 <sup>2</sup> , 溝口 竜二 <sup>3</sup> , ハッ橋 知幸 <sup>1</sup> , 中島 信昭 <sup>1</sup>	2C14	グリシンオリゴペプチドの分子間相互作用と分子振動の理論的解析(静岡大教育) 鳥居 肇
14:20	2A15	1次元ナノチャンネルに吸着したキセノンが示す <sup>129</sup> Xe化学シフトと分子間相互作用(阪大博物館 <sup>1</sup> , 阪大院理 <sup>2</sup> ) 上田 貴洋 <sup>1,2</sup> , 小林 広和 <sup>2</sup> , 江口 太郎 <sup>1,2</sup>	2B15	Decomposition of N-methylaniline and N,N-dimethylaniline in intense laser fields(東大院理) Liu Peng, 板倉 隆二, 山内 薫	2C15	NOCl分子の共鳴ラマンスペクトルに関する量子動力学的研究(東大院総合 <sup>1</sup> , 京大院理 <sup>2</sup> ) 山下 雄史 <sup>1</sup> , 加藤 重樹 <sup>2</sup>

14:40	2A16	イオン交換Y型ゼオライトにおけるキセノンの吸着挙動の高圧 <sup>129</sup> Xe NMRによる研究 (阪大院理 <sup>1</sup> , 阪大博物館 <sup>2</sup> ) 前澤 国芳 <sup>1</sup> , 上田 貴洋 <sup>1,2</sup> , 宮久保 圭祐 <sup>1</sup> , 江口 太郎 <sup>1,2</sup>	2B16	強レーザー場中におけるエタノール分子解離反応のパルス長依存性の理論的研究 (東北大院理 <sup>1</sup> , 阪府大総科 <sup>2</sup> ) 佐藤 幸男 <sup>1</sup> , 小関 史朗 <sup>2</sup> , 河野 裕彦 <sup>1</sup> , 藤村 勇一 <sup>1</sup>	2C16	CoHのポテンシャル曲線と分光学定数: 計算方法の比較 (産総研グリッド研 <sup>1</sup> , 筑波大数理 <sup>2</sup> , 名古屋市大 <sup>3</sup> , 北大理 <sup>4</sup> ) 福井 玲 <sup>1,2</sup> , 長嶋 雲兵 <sup>1,2</sup> , 舘脇 洋 <sup>3</sup> , 野呂 武司 <sup>4</sup> , 田中 皓 <sup>4</sup> , 平野 恒夫 <sup>1</sup>
15:00	2A17	ナノ細孔内に構築された一次元有機ラジカルスピンの示すスピン間相互作用のESRによる研究 (阪大院理 <sup>1</sup> , 阪大博物館 <sup>2</sup> , 阪大産研 <sup>3</sup> ) 小林 広和 <sup>1</sup> , 上田 貴洋 <sup>1,2</sup> , 宮久保 圭祐 <sup>1</sup> , 江口 太郎 <sup>1,2</sup> , 谷篤史 <sup>1</sup> , 池谷 元何 <sup>3</sup>	2B17	低速He <sup>*</sup> ビーム源を用いた二次元ペニングイオン化電子分光: 原子分子間相互作用の立体異方性 (東北大院理) 堀尾 琢哉, 山崎 優一, 前田 理, 畠本 拓郎, 岸本 直樹, 大野 公一	2C17	強光子場中で形成される共有結合性ヘリウム分子 (東大院総合) 安池 智一, 染田 清彦
15:20	2A18	擬ヤーン・テラー歪みをうけたコバルト(II)オクタエチルポルフィリンの電子状態および分子構造 (阪市大院理 <sup>1</sup> , UBC <sup>2</sup> ) 金城 茂盛, 横倉 直樹 <sup>1</sup> , 松岡 秀人 <sup>1</sup> , 佐藤 和信 <sup>1</sup> , 豊田 和男 <sup>1</sup> , 塩見 大輔 <sup>1</sup> , David H. Dolphin <sup>2</sup> , Wei-Ching Lin <sup>2</sup> , the late Charles A. McDowell <sup>2</sup> , 工位 武治 <sup>1</sup>	2B18	二次元ペニングイオン化電子分光法による遷移金属錯体の電子構造と反応性の研究 (東北大院理) 岸本 直樹, 大野 公一	2C18	強レーザー場中にある原子分子のイオン化過程の振動数依存性 (筑波大物理) 乙部 智仁, 矢花 一浩
15:40	2A19	単結晶ESR及びENDOR法による正方対称銅(II)ポルフィリンの電子構造核スピン(I=1)準位縮重系のENDOR (阪市大院理 <sup>1</sup> , UBC <sup>2</sup> ) 岡内 孝文 <sup>1</sup> , 佐藤 和信 <sup>1</sup> , 豊田 和男 <sup>1</sup> , 塩見 大輔 <sup>1</sup> , 阪本 博一 <sup>1</sup> , 藤本 央 <sup>1</sup> , 工位 武治 <sup>1</sup> , Wei-Ching Lin <sup>2</sup> , David H. Dolphin <sup>2</sup> , the late Charles A. McDowell <sup>2</sup>			2C19	レーザープラズマ中の多価イオンの電子構造の解明 (東大院理) 奥津 浩史, 佐甲 徳栄, 山内 薫
16:00						
17:40						

第2日(9月28日) 午後

D会場		E会場		P会場
【赤外・ラマン分光】		招待講演		
2D11	非線形ラマン信号の空間分布測定による液体・溶液中の局所構造の研究 (東大院理) 重藤 真介, 浜口 宏夫	2S01	分子内電荷移動反応に対する分光的アプローチ 分子内電荷移動にねじれは必要か (東北大院理) 石川 春樹	13:00
2D12	フォトニッククリスタルファイバーを用いた顕微CARS分光法の開発(II) - マルチプレックスCARS顕微鏡の製作- (東大院理) 加納 英明, 浜口 宏夫			13:20
2D13	結晶とウレアクラスレートでの脂肪酸のC=O伸縮の赤外強度と波数シフト (富山大理) 金坂 績, 松澤 幸恵	2S02	光熱分光法による凝縮相でのエネルギー散逸過程の研究 (京大IIC) 木村 佳文	13:40
2D14	溶液・気相の両面から見た7-アザインドールの振動緩和過程 ~ 種々の溶媒による共鳴効果の検証 (東工大資源研) 大森 努, 酒井 誠, 藤井 正明			14:00
【その他(磁気科学)】				
2D15	銀樹成長の磁気配向の機構 (信州大教育 <sup>1</sup> , 広島大院理 <sup>2</sup> ) 勝木 明夫 <sup>1</sup> , 上地 一郎 <sup>2</sup> , 谷本 能文 <sup>2</sup>	2S03	クラスターと固体表面との相互作用: 担持クラスターのサイズ依存特性と衝撃ダイナミクス (豊田工大) 安松 久登	14:20

2D16	Magnetic field effects on the laser-induced movement of photochromic compound in benzene solution (広島大院理) 段文勇, 谷本能文			14:40	
2D17	ドナー - C <sub>60</sub> 系の光誘起電子移動反応に対する磁場効果: 分子系とクラスター系の比較 (九大院工 <sup>1</sup> , 広島大院理 <sup>2</sup> ) 米村 弘明 <sup>1</sup> , 森部 真也 <sup>1</sup> , 黒田 憲寛 <sup>1</sup> , 原田 聡子 <sup>1</sup> , 山田 淳 <sup>1</sup> , 藤原 好恒 <sup>2</sup> , 谷本能文 <sup>2</sup>			15:00	
2D18	強磁場に影響されるゾウリムシの泳動とその磁場強度依存性 (広島大院理) 藤原 好恒, 富重 昌彦, 伊藤 泰宏, 細谷 浩史, 小阪 敏和, 谷本能文			15:20	
				15:40	
				16:00	ポスター発表 (2P001-2P134)
				17:40	



第3日(9月29日) 午前

		A会場	B会場	C会場		
		【伝導性・磁性物質】	【表面・界面】	【理論化学】		
9:00	3A01	一般化フェリ磁性の孤立系モデルにおける交換相互作用と基底スピン状態(阪市大院理 <sup>1</sup> , 科学技術振興機構 <sup>2</sup> ) 前川 健典 <sup>1</sup> , 伊瀬 智章 <sup>1,2</sup> , 塩見 大輔 <sup>1,2</sup> , 佐藤 和信 <sup>1</sup> , 工位 武治 <sup>1</sup>	3B01	NC-AFM及びSTMによるCeO <sub>2</sub> (111)表面での吸着サイト・吸着分子構造及び新規反応機構に関する研究(東大院理) 生井 勝康, 田澤 俊樹, 岩澤 康裕	3C01	SiO <sup>+</sup> の2-4 <sup>2</sup> 状態において断熱ポテンシャル曲線が著しく接近する理由の電子構造からみた説明(大分大) 本城 信光
9:20	3A02	-cyclodextrinに包接されたC <sub>60</sub> アニオン類の多周波ESR、ONIOM法、多電子縮約密度行列法による研究(阪市大院理 <sup>1</sup> , 阪大院理 <sup>2</sup> , 理研 <sup>3</sup> , 近大理工 <sup>4</sup> ) 森 展之 <sup>1</sup> , 福井 晃三 <sup>2</sup> , 中澤 重顕 <sup>3</sup> , 武隈 真一 <sup>4</sup> , 武隈 秀子 <sup>4</sup> , 吉田 善一 <sup>4</sup> , 豊田 和男 <sup>1</sup> , 佐藤 和信 <sup>1</sup> , 塩見 大輔 <sup>1</sup> , 工位 武治 <sup>1</sup>	3B02	超熱O <sub>2</sub> 分子線によるCu(110)酸化過程の光電子分光研究(阪大院理 <sup>1</sup> , 原研放射光 <sup>2</sup> ) 福山 哲也 <sup>1</sup> , 盛谷 浩右 <sup>2</sup> , 岡田 美智雄 <sup>1</sup> , 吉越 章隆 <sup>2</sup> , 寺岡 有殿 <sup>2</sup> , 笠井 俊夫 <sup>1</sup>	3C02	内殻電子束縛エネルギーの計算:GCS-CIに基づく多参照摂動法による方法(豊田中研) 白井 聡一, 兵頭 志明
9:40	3A03	メソ位直結型ポルフィリンダイマー ピラジカルのスピン状態に対する置換基の効果(東大院総合) 中崎 城太郎, 千秋 裕, 瀬川 浩司	3B03	レーザー顕微光電子分光による銅フタロシアニン薄膜の電子状態(理研) 杉山 武晴, 宗像 利明	3C03	開殻分子の内殻励起スベクトルにおける自動イオン化状態の理論計算(分子研 <sup>1</sup> , 総研大 <sup>2</sup> ) 樋山 みやび <sup>1,2</sup> , 小杉 信博 <sup>1,2</sup>
10:00	3A04	一般化フェリ磁性を目指したイミノニトロキッドおよびニトロニルニトロキッドトリラジカル化合物の合成と磁性(阪市大院理 <sup>1</sup> , 科学技術振興機構 <sup>2</sup> ) 伊瀬 智章 <sup>1,2</sup> , 塩見 大輔 <sup>1,2</sup> , 佐藤 和信 <sup>1</sup> , 工位 武治 <sup>1</sup>	3B04	水、メタノールが吸着したTiO <sub>2</sub> (110)表面のsub-10fs時間分解二光子光電子分光(ピッツバーグ大物理) 恩田 健, Bin Li, Hrvoje Petek	3C04	経路積分影響汎関数理論を用いた凝縮相中における溶質分子の振動コヒーレンス動力学的研究(分子研) 三上 泰治, 岡崎 進
10:20	3A05	イオン電荷を有する基底三重項ニトロキッドピラジカルによる超分子有機フェリ磁性体の構築とその磁氣的性質(阪市大院理 <sup>1</sup> , 科学技術振興機構 <sup>2</sup> ) 早川 健一 <sup>1</sup> , 伊瀬 智章 <sup>1,2</sup> , 塩見 大輔 <sup>1,2</sup> , 佐藤 和信 <sup>1</sup> , 工位 武治 <sup>1</sup>	3B05	ペンタセン超薄膜中のHOMOホール-分子振動カップリング(千葉大工 <sup>1</sup> , 千葉大院 <sup>2</sup> , 分子研 <sup>3</sup> ) 山根 宏之 <sup>1</sup> , 深川 弘彦 <sup>2</sup> , 永松 伸一 <sup>1</sup> , 解良 聡 <sup>1,3</sup> , 奥平 幸司 <sup>1,2</sup> , 上野 信雄 <sup>1,2</sup>	3C05	時間依存密度汎関数法(TDDFT)を用いた内殻励起に関する理論的研究(早大理工) 今村 穰, 大塚 教雄, 中井 浩巳

10:40	3A06	単成分有機フェリ磁性体のモデルとなるイミノニトロキシドリラジカルの合成と磁性 (阪市大院理 <sup>1</sup> , 科学技術振興機構 <sup>2</sup> ) 神崎 祐貴 <sup>1</sup> , 伊瀬 智章 <sup>1,2</sup> , 塩見 大輔 <sup>1,2</sup> , 佐藤 和信 <sup>1</sup> , 工位 武治 <sup>1</sup>	3B06	チタニルフタロシアニンの薄膜形成過程における真空準位シフトの定量的解析 (千葉大院 <sup>1</sup> , 千葉大工 <sup>2</sup> , 分子研 <sup>3</sup> ) 深川 弘彦 <sup>1</sup> , 山根 宏之 <sup>2</sup> , 解良 聡 <sup>2,3</sup> , 奥平 幸司 <sup>2</sup> , 上野 信雄 <sup>1,2</sup>	3C06	平面波補助基底を用いた高速クーロン積分計算法の開発 (東大院工 <sup>1</sup> , JST PRESTO <sup>2</sup> ) 倉重 佑輝 <sup>1</sup> , 中嶋 隆人 <sup>1,2</sup> , 平尾 公彦 <sup>1</sup>
11:00	3A07	フォトクロミックジアーレルエテンをインターカレートした層状強磁性体における光磁性の研究 (東大院総合) 大久保 将史, 榎本 真哉, 小島 憲道	3B07	エステル修飾した自己組織化単分子膜における内殻遷移特有の選択的脱離反応 (広大院理 <sup>1</sup> , 広大放射光セ <sup>2</sup> ) 和田 真一 <sup>1,2</sup> , 隅井 良平 <sup>1</sup> , 木崎 寛之 <sup>1</sup> , 松本 吉弘 <sup>1</sup> , 飯塚 陽一 <sup>1</sup> , 関谷 徹司 <sup>1,2</sup> , 田中 健一郎 <sup>1,2</sup>	3C07	核・電子の量子効果を含めた水和クラスターの理論的研究 (横浜市大理 <sup>1</sup> , JST PRESTO <sup>2</sup> , 原研 <sup>3</sup> ) 立川 仁典 <sup>1,2</sup> , 志賀 基之 <sup>3</sup>
11:20	3A08	ジアーレルエテンを用いた磁氣的相互作用の光スイッチング - 反応点炭素の軌道の相互変換を用いた制御 (九大院工・さきがけ) 谷藤 尚貴, 松田 建児, 入江 正浩	3B08	電子・極角分解イオンコインシデンス分光法を用いた凝縮H <sub>2</sub> Oの内殻電子励起脱離の研究 (高エネ研 <sup>1</sup> , 井上財団 <sup>2</sup> , 広島大ナノデバイスセンター <sup>3</sup> , 千葉大工 <sup>4</sup> ) 南部 英 <sup>1</sup> , 小林 英一 <sup>1,2</sup> , 漁 剛志 <sup>3</sup> , 森 正信 <sup>4</sup> , 奥平 幸司 <sup>4</sup> , 上野 信雄 <sup>4</sup> , 間瀬 一彦 <sup>1</sup>	3C08	ギ酸二量体の二重水素移動反応に関する理論的研究 (名工大院工 <sup>1</sup> , 名工大工 <sup>2</sup> ) 志田 典弘 <sup>1</sup> , 北島 阿沙美 <sup>2</sup>
11:40	3A09	二次元キラルフェリ磁性体における構造相転移, 脱水とそれに伴う構造と磁性の変化 (都立大院理 <sup>1</sup> , モスクワ大 <sup>2</sup> , 九工大院工 <sup>3</sup> , 広島大院理 <sup>4</sup> ) 吉田 祐輔 <sup>1</sup> , Ashot Markosyan <sup>2</sup> , 岸根 順一郎 <sup>3</sup> , 井上 克也 <sup>4</sup> , 菊地 耕一 <sup>1</sup>	3B09	Cu(111)表面上における水クラスターのDFT計算および赤外分光 (慶大理工) 中村 将志, 伊藤 正時	3C09	短すぎる遷移金属ラジカルのCN結合距離 (続報) (産総研グリッド研 <sup>1</sup> , 筑波大数理 <sup>2</sup> ) 平野 恒夫 <sup>1</sup> , 福井 玲 <sup>1,2</sup> , 長嶋 雲兵 <sup>1,2</sup>
12:00	3A10	長鎖アルキル基を有するコバルト(II)錯体の逆スピン転移挙動 (九大院理 <sup>1</sup> , 広大院理 <sup>2</sup> , 分子研 <sup>3</sup> , 熊大院理 <sup>4</sup> ) 速水 真也 <sup>1</sup> , 井上 克也 <sup>2</sup> , 秋田 素子 <sup>3</sup> , 小川 芳弘 <sup>4</sup> , 前田 米藏 <sup>1</sup>	3B10	Si(001)表面における水分子の解離反応およびH/D交換反応: 水素結合形成による反応性変化の実験的検討 (理研 <sup>1</sup> , 東大院理 <sup>2</sup> ) 加藤 浩之 <sup>1</sup> , 赤木 和人 <sup>2</sup> , 常行 真司 <sup>2</sup> , 川合 真紀 <sup>1</sup>		
12:30						

第3日(9月29日) 午前

D会場		E会場		P会場	
【反応素過程】		ナノクラスター・ナノ粒子の科学			
3D01	CH <sub>3</sub> F及びCHF <sub>3</sub> 分子の内殻励起リドベルグ状態からのオージェ崩壊過程 (広大院理 <sup>1</sup> , 上智大理工 <sup>2</sup> , SPring-8/JASRI <sup>3</sup> , 東北大多元研 <sup>4</sup> ) 角南 哲志 <sup>1</sup> , 吉田 啓晃 <sup>1</sup> , 田原 史崇 <sup>1</sup> , 北島 昌史 <sup>2</sup> , 田中 隆宏 <sup>2</sup> , 中川 一樹 <sup>2</sup> , 田中 大 <sup>2</sup> , DeFanis Alberto <sup>3</sup> , 藤原 克利 <sup>4</sup> , 松本 真 <sup>4</sup> , 上田 潔 <sup>4</sup>	3E01	有機単分子膜保護金属クラスター: 魔法数サイズ金属クラスターの単離と安定性・電子構造評価 (分子研, 総研大, CREST) 佃 達哉	9:00	
3D02	エステル基をもつ自己組織化単分子膜の酸素内殻励起によるイオン脱離反応 (広大院理) 隅井 良平, 木崎 寛之, 松本 吉弘, 飯塚 陽一, 和田 真一, 関谷 徹司, 田中 健一郎			9:20	
3D03	高温高圧流通型NMRによる化学反応速度の決定 (京大院理) 向出 政伸, 浦崎 洋平, 西川 牧人, 網田 富士嗣, 梶本 興亜, 竹腰 清乃理, 寺尾 武彦	3E02	構造敏感な金クラスターの化学反応性 (産総研環境調和技術) 春田 正毅	9:40	
3D04	クーロン爆発の位相制御 (産総研) 大村 英樹, 中永 泰介, 立矢 正典	3E03	金属ナノ粒子の自在配列制御とナノデバイス応用 (筑波大化学) 寺西 利治	10:00	
3D05	アセチレンの内殻励起状態での価電子・Rydberg励起状態の振電相互作用 (総研大 <sup>1</sup> , 兵庫県立大 <sup>2</sup> , 分子研 <sup>3</sup> ) 益田 周防海 <sup>1</sup> , 下條 竜夫 <sup>2</sup> , 樋山 みやび <sup>1,3</sup> , 小杉 信博 <sup>1,3</sup>			10:20	

3D06	硫化アルキル化合物の光分解反応の位相制御 (産総研) 永井 秀和, 大村 英樹, 中永 泰介	3E04	Quadrupole oscillations and Coulomb-stability of highly charged liquid droplets (イルメノウ工科大物理) Tobias Achtzehn, Denis Duft, Thomas Leisner	10:40	
3D07	回転波束と光電子画像観測による光イオン化動力学研究の新しいアプローチ (理研) 坪内 雅明, 鈴木 俊法			11:00	
【電子スペクトル】					
3D08	電子・振動緩和における回転波束運動のダイナミクス (理研 <sup>1</sup> , Leeds大 <sup>2</sup> ) 坪内 雅明 <sup>1</sup> , Benjamin J. Whitaker <sup>2</sup> , 鈴木 俊法 <sup>1</sup>	3E05	少数多体系の液・固相転移 超流動ヘリウム液滴中の少数クラスターの分光研究から (京大院理) 百瀬 孝昌	11:20	
3D09	N-サリチリデンアニリンのイオン検出フェムト秒時間分解分光 - フォトクロミック反応における高速内部転換の重要性 - (分子研 <sup>1</sup> , 北大電子研 <sup>2</sup> , 東大院総文 <sup>3</sup> , 九大院理 <sup>4</sup> ) 岡部 智絵 <sup>1</sup> , 中林 孝和 <sup>2</sup> , 井口 佳哉 <sup>3</sup> , 西 信之 <sup>1</sup> , 関谷 博 <sup>4</sup>			11:40	
		3E06	電子系有機分子ナノクラスターにおける構造秩序化と電子物性 (慶大理工) 三井 正明	12:00	
				12:30	

第3日(9月29日) 午後

	A会場		B会場		C会場	
	【伝導性・磁性物質】		【表面・界面】		【理論化学/計算化学】	
13:00	3A11	Mn12骨格をもつ半整数スピ単分子磁石の構造と磁性(名大院理 <sup>1</sup> , 分子研 <sup>2</sup> , 東北大金研 <sup>3</sup> ) 蜂須賀秀和 <sup>1</sup> , 阿波賀 邦夫 <sup>1</sup> , 横山 利彦 <sup>2</sup> , 野尻 浩之 <sup>3</sup>	3B11	Si(001)表面における水分子の解離反応およびH/D交換反応:水素結合形成による反応性変化の理論計算による検討(東大院理 <sup>1</sup> , 理研 <sup>2</sup> ) 赤木 和人 <sup>1</sup> , 加藤 浩之 <sup>2</sup> , 川合 真紀 <sup>2</sup> , 常行 真司 <sup>1</sup>	3C11	Reaction Channels on Potential Energy Surface of Some Atmospherically and Astronomically Important Compounds(東大院理) Balazs Hajgato, 前田 理, 大野 公一
13:20	3A12	グリオキシマート架橋配位子を用いた銅とランタノイドを含む金属錯体の構造と磁性(電通大量子物質) 上木 創平, 石田 尚行, 小林 泰子, Muhamad Sahlan, 野上 隆	3B12	過冷却濃厚水溶液からの氷の結晶化過程の中性子散乱(阪大院理 <sup>1</sup> , 高工研 <sup>2</sup> , ケンブリッジ大 <sup>3</sup> ) 稲葉 章 <sup>1</sup> , 崎里 直己 <sup>1</sup> , 大友 季哉 <sup>2</sup> , Anna K. Bickerstaffe <sup>3</sup> , Stuart M. Clarke <sup>3</sup>	3C12	超球面探索法によるアミノ酸の合成・異性化反応経路の探索(東大院理) 前田 理, 大野 公一
13:40	3A13	コバルトおよび酸化コバルトからなるナノ球殻クラスタの磁性(名大院理 <sup>1</sup> , 名城大 <sup>2</sup> ) 吉川 浩史 <sup>1</sup> , 林田 健太 <sup>1</sup> , 小塚 康晴 <sup>1</sup> , 阿波賀 邦夫 <sup>1</sup> , 坂東 俊治 <sup>2</sup> , 飯島 澄男 <sup>2</sup>	3B13	Cu及びAgの(110), (111)単結晶表面上におけるニトロメタンの吸着構造-IRAS法による研究-(早大理工) 瓜生 陽一, 門倉 慶, 笠原 崇廣, 岡泉 智英, 桜田 賢人, 伊藤 紘一	3C13	分子量子コンピュータの最適制御シミュレーション解析(東大院理) 大槻 幸義
14:00	3A14	STMによる擬一次元ハロゲン架橋金属錯体[Ni <sub>1-x</sub> Pd <sub>x</sub> (chxn) <sub>2</sub> Br]Br <sub>2</sub> の局所電子構造の直接的観測(都立大院理 <sup>1</sup> , CREST <sup>2</sup> , 東大新領域 <sup>3</sup> , 名大院工 <sup>4</sup> , Visionarts Research Inc. <sup>5</sup> ) 山下 正廣 <sup>1,2</sup> , 高石 慎也 <sup>1,2</sup> , 宮坂 等 <sup>1</sup> , 杉浦 健一 <sup>1</sup> , 松崎 弘幸 <sup>2,3</sup> , 岸田 英夫 <sup>3</sup> , 岡本 博 <sup>3</sup> , 田中 久暁 <sup>3</sup> , 丸本 一弘 <sup>4</sup> , 伊東 裕 <sup>4</sup> , 黒田 新一 <sup>4</sup> , 高見 知秀 <sup>5</sup>	3B14	Sum-Frequency Vibrational Spectroscopyによるカイラリティプロービング:らせん状共役ポリマー膜のchiral信号の検出(JST横山液晶微界面プロジェクト <sup>1</sup> , 筑波大物質工 <sup>2</sup> , UC, Berkeley <sup>3</sup> ) 大江 昌人 <sup>1</sup> , 横山 浩 <sup>1</sup> , 萬谷 慎一 <sup>2</sup> , 多田 直樹 <sup>2</sup> , 赤木 和夫 <sup>2</sup> , M. A. Belkin <sup>3</sup> , Y. R. Shen <sup>3</sup>	3C14	XH伸縮振動の高次倍音スペクトルの吸収強度に関する理論的考察(慶大理工) 高橋 開人, 菅原 道彦, 藪下 聡
14:20	3A15	分子性磁気伝導体:分子内に正電荷を有する6-オキソフェルダジラジカル類の[Ni(dmit) <sub>2</sub> ] <sub>2</sub> 塩の構造・磁性・伝導性(愛媛大理) 向井 和男, 水口 斉, 仙波 伸得, 小原 敬士, 東長 雄	3B15	赤外-可視和周波混合分光法を用いたイオン液体[BMIM]BF <sub>4</sub> -水混合系の気/液界面構造に関する研究(名大院理 <sup>1</sup> , 名大物質国際研 <sup>2</sup> , 北大院地環 <sup>3</sup> , 東大院理 <sup>4</sup> , Sogang大 <sup>5</sup> ) 大内 幸雄 <sup>1</sup> , 遠山 達哉 <sup>1</sup> , 岩橋 崇 <sup>1</sup> , 金井 要 <sup>1</sup> , 関 一彦 <sup>2</sup> , 飯森 俊文 <sup>3</sup> , 浜口 宏夫 <sup>4</sup> , Doseok Kim <sup>5</sup>	3C15	強光子場における分子の光電子スペクトル表式とその応用(東大院理 <sup>1</sup> , Bielefeld大 <sup>2</sup> ) 加藤 毅 <sup>1</sup> , 河野 裕彦 <sup>1</sup> , 藤村 勇一 <sup>1</sup> , F. H. M. Faisal <sup>2</sup>

14:40	3A16	電子スピンと吸着酸素 スピンの相互作用による ナノグラファイト集合体の 特異な磁気抵抗 (東工大 院理工) 高原 克典, 高 井 和之, 榎 敏明	3B16	赤外外部反射法による表 面固化現象の研究 - 長鎖 n-アルカン液体の自由表 面近傍の温度による構造 変化 - (昭和大教養 <sup>1</sup> , 早大 理工 <sup>2</sup> ) 山本 雅人 <sup>1</sup> , 鈴木 正子 <sup>1</sup> , 木村 哲宏 <sup>2</sup> , 伊藤 紘 — <sup>2</sup>	3C16	理論精密分光: イオン化 状態の振動スペクトル (京大院工) 江原 正博, 大八木 文人, 中辻 博
15:00						
15:10						
16:10						
16:20						
18:00						
18:30						

第3日(9月29日) 午後

D会場		E会場			P会場
【電子スペクトル】					
3D11	BF <sub>3</sub> B 1s内殻励起による角度分解イオン収量スペクトルの再解析 (広大院理 <sup>1</sup> , 東北大多元研 <sup>2</sup> , SPring-8/JASRI <sup>3</sup> ) 松戸 誉央 <sup>1</sup> , 池尻 和正 <sup>1</sup> , 岡田 和正 <sup>1</sup> , 上田 潔 <sup>2</sup> , 為則 雄祐 <sup>3</sup> , 大野 啓一 <sup>1</sup>			13:00	
3D12	内殻正孔動力学を考慮したオージェスペクトル計算 (広島大院理 <sup>1</sup> , スtockホルム大 <sup>2</sup> ) 高橋 修 <sup>1,2</sup> , Michael Odelius <sup>2</sup> , Lars Pettersson <sup>2</sup>			13:20	
3D13	ガス雰囲気下でのシリコンのレーザーアブレーション - 発光スペクトルの導入ガス依存性 - (原研 <sup>1</sup> , 京大エネルギー理工研 <sup>2</sup> ) 佐伯盛久 <sup>1</sup> , 平田 紘一 <sup>2</sup> , 作花 哲夫 <sup>2</sup> , 大場 弘則 <sup>1</sup> , 横山 淳 <sup>1</sup>			13:40	
		招待講演 (14:10 ~ )			
3D14	SAC/SAC-CI法による内殻電子イオン化および励起スペクトルの理論的研究: 精密分子分光と表面科学への応用 (京大院工) 倉本 圭, 江原 正博, 中辻 博	3S01	Molecular spectroscopy and dynamics in helium nanodroplets (プリンストン大化学) Kevin K. Lehmann	14:00	
3D15	電子運動量分光法を用いたNeのサテライト状態の研究 (分子研 <sup>1</sup> , 東北大多元研 <sup>2</sup> ) 渡辺 昇 <sup>1,2</sup> , Khajuria Yugal <sup>1</sup> , 高橋 正彦 <sup>1,2</sup> , 宇田川 康夫 <sup>2</sup>			14:20	

				14:40	
				15:00	
			特別講演		
		3S02	太陽エネルギーを用いる 環境改善・浄化:分子構 造討論会出身の一研究 者の試み (東大先端研) 橋本 和仁	15:10	
				16:10	
				16:20	ポスター発表 (3P001-3P133)
				18:00	
				18:30	懇親会 (リーガロイヤルホテル 広島)



第4日(9月30日) 午前

		A会場	B会場	C会場
		【伝導性・磁性物質】	【表面・界面】	【励起状態動力学】
9:00	4A01	$-d$ 電子系 $-(\text{BDH-TTP})_2\text{FeBr}_4$ の物性(東工大大院理 <sup>1</sup> , 兵庫県立大院理 <sup>2</sup> ) 工藤 智 <sup>1</sup> , 宮崎 章 <sup>1</sup> , 榎 敏明 <sup>1</sup> , 梶田 憲一 <sup>2</sup> , 坏 広樹 <sup>2</sup> , 山田 順一 <sup>2</sup>	4B01 固体清浄表面上の共役アルカジン極薄膜 超高真空STM観察(東京農工大工 <sup>1</sup> , 北里大理 <sup>2</sup> ) 遠藤理 <sup>1</sup> , 大坪 宏彰 <sup>1</sup> , 古田 太郎 <sup>1</sup> , 世良 貴史 <sup>1</sup> , 尾崎 弘行 <sup>1</sup> , 真崎 康博 <sup>2</sup>	4C01 ペリレンノ結晶の蛍光スペクトルにおけるサイズ依存性の機構(阪大院工 <sup>1</sup> , 東北大多元研 <sup>2</sup> , JST-CREST <sup>3</sup> ) 朝日 剛 <sup>1,3</sup> , 松根 英樹 <sup>1,3</sup> , 増原 宏 <sup>1</sup> , 笠井 均 <sup>2,3</sup> , 中西 八郎 <sup>2,3</sup>
9:20	4A02	Quasi-one-dimensional Molecular Magnets Based on $[\text{M}(\text{mnt})_2]^-$ (M = Ni or Pt) Architectural Blocks: Structures and Magnetic Properties (北大電子研) X. M. Ren, 西原 禎文, 芥川 智行, 中村 貴義	4B02 赤外分光法と走査型トンネル顕微鏡によるSi(111)基板上への有機単分子層形成過程の追跡(北大大院理) 瀧口 加奈子, 高草木 達, 魚崎 浩平	4C02 ジフェニルポリエン(二重結合数 $n=3\sim7$ )で観測された出現機構の異なる二種類の $\text{S}_2(1^1\text{Bu})$ 蛍光(広島大総合科学) 伊藤 隆夫
9:40	4A03	$\text{M}(\text{hfac})_2(\text{EDO-pyridine-EDT-TTF})_2$ (M = Cu <sup>II</sup> , Mn <sup>II</sup> )の合成と結晶構造(京大院理 <sup>1</sup> , レンヌ大 <sup>2</sup> ) 太田 明 <sup>1</sup> , Lahcene Ouahab <sup>2</sup> , Stephane Golhen <sup>2</sup> , Olivier Cadot <sup>2</sup> , 吉田 幸大 <sup>1</sup> , 斎藤 軍治 <sup>1</sup>	4B03 三脚型アンカーユニットを含むオリゴチオフェンの合成とそのAu(111)基板上における自己集合単分子膜の性質(広島大院工 <sup>1</sup> , 阪大産研 <sup>2</sup> , CREST <sup>3</sup> ) 大木 洋一郎 <sup>1</sup> , 瀧宮 和男 <sup>1</sup> , 大坪 徹夫 <sup>1</sup> , 安蘇 芳雄 <sup>2,3</sup>	4C03 2発色団分子:2-メチル-1,2,3,4-テトラヒドロイソキノリン(NMTHIQ)の $\text{S}_1$ 状態の計算(名大院理) 金丸 信明
10:00	4A04	屈曲した分子骨格を有するドナー分子のエチレンジオキシ誘導体の合成、構造と物性(阪府大先端研 <sup>1</sup> , CREST-JST <sup>2</sup> ) 藤原 秀紀 <sup>1,2</sup> , 和田 研自 <sup>1</sup> , 杉本 豊成 <sup>1,2</sup>	4B04 有機分子と金属界面の理論的研究:n-アルカン分子の場合(阪大産研 <sup>1</sup> , 産総研 <sup>2</sup> , 東北大通研 <sup>3</sup> , 名大物質国際研 <sup>4</sup> ) 森川 良忠 <sup>1,2</sup> , 石井 久夫 <sup>3</sup> , 関 一彦 <sup>4</sup>	4C04 外部電場によるピレンおよびピレン連結化合物の光励起ダイナミクスの変化-時間分解電場蛍光分光による研究-(北大電子研 <sup>1</sup> , 北大院地球環境 <sup>2</sup> ) 中林 孝和 <sup>1,2</sup> , 森川 武弘 <sup>1</sup> , 太田 信廣 <sup>1,2</sup>
10:20	4A05	イミダゾール修飾型TTFのクロロニル錯体:水素結合型純有機分子性金属の構造と物性(阪大院理 <sup>1</sup> , 京大院理 <sup>2</sup> , 阪市大院理 <sup>3</sup> , 科技団さきがけ <sup>4</sup> ) 村田 剛志 <sup>1</sup> , 森田 靖 <sup>1,4</sup> , 福井 晃三 <sup>4</sup> , 矢持 秀起 <sup>2</sup> , 斎藤 軍治 <sup>2</sup> , 佐藤 和信 <sup>3</sup> , 塩見 大輔 <sup>3</sup> , 工位 武治 <sup>3</sup> , 中筋 一弘 <sup>1</sup>	4B05 酸処理によるカーボンナノファイバーの表面構造変化(信州大工) 久保田 智志, 錦織 広昌, 田中 伸明, 遠藤 守信, 藤井 恒男	4C05 光導電性高分子におけるキャリアのスピンダイナミクスに対する電場効果(阪大VBL <sup>1</sup> , 東北大多元研 <sup>2</sup> ) 伊藤 冬樹 <sup>1</sup> , 生駒 忠昭 <sup>2</sup> , 秋山 公男 <sup>2</sup> , 手老 省三 <sup>2</sup>

10:40	4A06	有機導体(TMTTF) <sub>2</sub> Xの分子構造とスピン構造の相関(分子研) 古川 貢, 原 俊文, 中村 敏和	4B06	ジアルキルジメチルアンモニウム-Au(dmit) <sub>2</sub> LB膜の部分酸化状態(桐蔭横浜大院工) 渡邊 亮, 盛田 伸一, 三浦 康弘, 杉道夫	4C06	近接場分光法による波動関数イメージング(分子研) 井村 考平, 永原 哲彦, 岡本 裕巳
11:00	4A07	"-(ET)(TCNQ)における電荷の不均化の圧力依存性(分子研 <sup>1</sup> , 理研 <sup>2</sup> , 科技园 <sup>3</sup> ) 売市 幹大 <sup>1</sup> , 葉師 久彌 <sup>1</sup> , 山本 浩史 <sup>2,3</sup> , 加藤 礼三 <sup>2,3</sup>	4B07	ジアルキルジメチルアンモニウム-Au(dmit) <sub>2</sub> 塩に基づく導電性LB膜の電気伝導(桐蔭横浜大院工 <sup>1</sup> , 東大物性研 <sup>2</sup> ) 三浦 康弘 <sup>1</sup> , 渡邊 亮 <sup>1</sup> , 盛田 伸一 <sup>1</sup> , 杉道夫 <sup>1</sup> , 辺土 正人 <sup>2</sup> , 上床 美也 <sup>2</sup>	4C07	多光子励起を利用したフェムト秒走査型顕微鏡渡吸収分光装置の開発(産総研) 玉城 喜章, 古部 昭広, 加藤 隆二
11:20	4A08	(BDA-TTP) <sub>2</sub> X (X = TaF <sub>6</sub> , FeBr <sub>4</sub> , GaBr <sub>4</sub> )の構造と物性(兵庫県立大院理 <sup>1</sup> , 都立大院理 <sup>2</sup> ) 山田 順一 <sup>1</sup> , 藤本 和也 <sup>1</sup> , 坏 広樹 <sup>1</sup> , 中辻 慎一 <sup>1</sup> , 西川 浩之 <sup>2</sup> , 菊地 耕一 <sup>2</sup>	4B08	巨大表面電位を発生する極性分子の探索(名大院理 <sup>1</sup> , 名大物質国際研 <sup>2</sup> , 名大高等研究院 <sup>3</sup> , 名大VBL <sup>4</sup> , 東北大通研 <sup>5</sup> ) 関 一彦 <sup>1,2,3</sup> , 金井 要 <sup>1</sup> , 林 直樹 <sup>4</sup> , 鈴木 智将 <sup>1</sup> , 今井 邦博 <sup>1</sup> , 大内 幸雄 <sup>1</sup> , 石井 久夫 <sup>5</sup>	4C08	フェムト秒近赤外分光によるピアントリル誘導体の分子内光電子移動ダイナミクスの観測:対称性の破れが及ぼす効果(東大院理 <sup>1</sup> , 東大院理・スペクトル <sup>2</sup> , Univ. of Hyderabad <sup>3</sup> ) 高屋 智久 <sup>1</sup> , 岩田 耕一 <sup>2</sup> , Satyen Saha <sup>1</sup> , Moloy Sarkar <sup>3</sup> , Anunay Samanta <sup>3</sup> , 浜口 宏夫 <sup>1</sup>
11:40	4A09	セレン原子を有する伝導性単一成分金属錯体の合成、構造と物性(東大院理 <sup>1</sup> , 名大院工 <sup>2</sup> , JASRI <sup>3</sup> , 分子研 <sup>4</sup> , JST, CREST <sup>5</sup> ) 藤原 絵美子 <sup>1</sup> , 小林 昭子 <sup>1</sup> , 藤城 雄一 <sup>2</sup> , 西堀 英治 <sup>2</sup> , 高田 昌樹 <sup>3</sup> , 坂田 誠 <sup>2</sup> , 崔 亨波 <sup>4,5</sup> , 高橋 一志 <sup>4,5</sup> , 小林 速男 <sup>4,5</sup>	4B09	キャリアドーパされた有機半導体薄膜の電子構造(名大院理 <sup>1</sup> , 名大物質国際研 <sup>2</sup> , 名大高等研究院 <sup>3</sup> ) 金井 要 <sup>1</sup> , 西 寿朗 <sup>1</sup> , 田中 仙君 <sup>1</sup> , 井 龜 匡敦 <sup>1</sup> , 関一彦 <sup>1,2,3</sup>	4C09	FEL赤外多光子励起による液相有機分子のプラズマ発光の時間分解測定(東大院理 <sup>1</sup> , 東理大総合 <sup>2</sup> ) 佐藤 伸 <sup>1</sup> , 岩田 耕一 <sup>1</sup> , 浜口 宏夫 <sup>1</sup> , 今井 貴之 <sup>2</sup> , 門脇 徹人 <sup>2</sup> , 岩田 章 <sup>2</sup> , 中井 浩二 <sup>2</sup> , 黒田 晴雄 <sup>2</sup>
12:00	4A10	MDT-TSF系ドナーを用いた有機不整合格子系超伝導体の構造と物性(東工大院理工 <sup>1</sup> , 物材機構 <sup>2</sup> , 九大院理 <sup>3</sup> , 広大院工 <sup>4</sup> ) 川本 正 <sup>1</sup> , 坂東 祥匡 <sup>1</sup> , 森 健彦 <sup>1</sup> , 榎本 健悟 <sup>2</sup> , 鴻池 貴子 <sup>2</sup> , 寺嶋 太一 <sup>2</sup> , 宇治 進也 <sup>2</sup> , 北川 宏 <sup>3</sup> , 瀧宮 和男 <sup>4</sup> , 大坪 徹夫 <sup>4</sup>	4B10	アルコール水溶液の表面とバルクの構造相関 - 熱力学量の比較によるアプローチ - (学習院大理) 矢野 陽子, 飯島 孝夫	4C10	近赤外分光法を用いた粉末試料のフェムト秒時間分解直接吸収測定 TiO <sub>2</sub> およびPt/TiO <sub>2</sub> における電荷担体の動力学(東大院理 <sup>1</sup> , 北大触媒 <sup>2</sup> , 広大院理 <sup>3</sup> , 神戸大理 <sup>4</sup> ) 岩田 耕一 <sup>1</sup> , 高屋 智久 <sup>1</sup> , 浜口 宏夫 <sup>1</sup> , 山方 啓 <sup>2</sup> , 石橋 孝章 <sup>3</sup> , 大西 洋 <sup>4</sup>

第4日(9月30日) 午前

D会場		E会場		P会場
【電子スペクトル】		生命科学と計算化学		
		4E01	生命科学への計算化学からの取り組み(広島大院理, 広島大QuLiS) 相田 美砂子	9:00
4D02	MgNCの基底 $X^2 +$ 状態における分子内異性化反応の分光観測(広島市大情報) 福島 勝, 石渡 孝	4E02	ポストゲノム時代の計算生命科学(原研CCSE, 原研NSRC, 奈良先端大) 郷 信広	9:20
4D03	BrCN <sup>+</sup> イオンの $A^2 + X^2$ 電子遷移の高分解能フーリエ変換発光分光(九大院理) 松尾 牧, 中嶋 吉弘, 小川 友樹, 田中 桂一	4E03	タンパク質のための密度汎関数法プログラムProteinDFシステムの開発(東大生産研 <sup>1</sup> , アドバンスソフト <sup>2</sup> ) 佐藤 文俊 <sup>1</sup> , 井原 直樹 <sup>1</sup> , 上野 哲哉 <sup>1</sup> , 田原 才静 <sup>1</sup> , 恒川 直樹 <sup>1</sup> , 西野 典子 <sup>1</sup> , 西村 康幸 <sup>1</sup> , 平野 敏行 <sup>1</sup> , 吉廣 保 <sup>1</sup> , 稲葉 亨 <sup>2</sup> , 小池 聡 <sup>2</sup> , 西村民男 <sup>2</sup> , 新田 仁 <sup>2</sup> , 西川 宜孝 <sup>2</sup> , 小池 秀耀 <sup>2</sup> , 柏木 浩 <sup>1,2</sup>	9:40
4D04	LIF法を用いたCCSラジカル $E^3 - X^3$ 遷移の観測(東大院工 <sup>1</sup> , 東大院総合 <sup>2</sup> ) 中島 正和 <sup>1</sup> , 三好 明 <sup>1</sup> , 遠藤 泰樹 <sup>2</sup>			10:00
4D05	SiH <sub>2</sub> およびSiD <sub>2</sub> ラジカルB状態のOODR分光(東北大院理) 村本 泰彦, 石川 春樹, 三上 直彦	4E04	非経験的フラグメント分子軌道法に基づいたタンパク質・化学物質相互作用解析システムBioStationの開発(国立衛研 <sup>1</sup> , アドバンスソフト <sup>2</sup> , 産総研 <sup>3</sup> , 東大生産研 <sup>4</sup> ) 中野 達也 <sup>1</sup> , 谷森 泰一郎 <sup>2</sup> , 佐藤 智之 <sup>2</sup> , 福澤 薫 <sup>2</sup> , 小谷野 和郎 <sup>2</sup> , 北浦 和夫 <sup>3</sup> , 望月 祐志 <sup>2</sup> , 小池上 繁 <sup>2</sup> , 中田 琴子 <sup>1</sup> , 愛澤 昌宏 <sup>4</sup> , 甘利 真可 <sup>4</sup> , 張 軍衛 <sup>4</sup> , 岩澤 義郎 <sup>2</sup> , 山口 貴史 <sup>2</sup> , 両宮 克樹 <sup>2</sup> , 加藤 昭史 <sup>2</sup>	10:20

4D06	ナフタレンと重水素化ナフタレンのドップラーフリー2光子吸収スペクトル (神戸大分子フォト <sup>1</sup> , 京大院理 <sup>2</sup> ) 大久保 光士 <sup>1</sup> , 御園 雅俊 <sup>1</sup> , Baek Dae-Yul <sup>1</sup> , 馬場 正昭 <sup>2</sup> , 加藤 肇 <sup>1</sup>	4E05	生体高分子量子シミュレーションツールの開発 (豊橋技科大 <sup>1</sup> , JST <sup>2</sup> , 神戸大 <sup>3</sup> ) 関野 秀男 <sup>1</sup> , 栗田 典之 <sup>1</sup> , 杉木 真一郎 <sup>1,2</sup> , 小川 哲司 <sup>1,2</sup> , 田中 成典 <sup>3</sup>	10:40	
4D07	ドップラーフリー偏光ラベル分光法によるナフタレン分子の超高分解能レーザー分光 (神戸大分子フォト <sup>1</sup> , 京大院理 <sup>2</sup> ) 笠原 俊二 <sup>1</sup> , 豊谷 仁男 <sup>1</sup> , 山脇 三知 <sup>1</sup> , 馬場 正昭 <sup>2</sup> , 加藤 肇 <sup>1</sup>	4E06	量子生物学へのSAC-CI法によるアプローチ (京大院工) 長谷川 淳也	11:00	
4D08	ドナー・アクセプター結合型両性極性分子BMDCMの気相電子吸収スペクトル (京大化研) 平松 孝章, 山本 大祐, 吉田 弘幸, 佐藤 直樹	4E07	タンパク質機能の理解に向けた計算化学的アプローチ (名大院情報科学) 長岡 正隆	11:20	
4D09	二成分混合溶媒中の色素の電子吸収スペクトルと混合溶媒の微視的相分離 (東農工大農 <sup>1</sup> , 東農工大院共生科学技術 <sup>2</sup> ) 金子 聖 <sup>1</sup> , 花見 梢 <sup>1</sup> , 吉村 季織 <sup>2</sup> , 高柳 正夫 <sup>2</sup>			11:40	
				12:00	

第4日(9月30日) 午後

	A会場		B会場		C会場	
	【伝導性・磁性物質】		【液体・溶液】		【励起状態動力学】	
13:00	4A11	立体障害を導入した新規有機超伝導体とその周辺物質の探索(東大物性研 <sup>1</sup> , JST, CREST <sup>2</sup> , 東邦大院理 <sup>3</sup> , 東工大院理工 <sup>4</sup> ) 木村 伸也 <sup>1,2</sup> , 鈴木 秀明 <sup>1,2</sup> , 前島 倫子 <sup>3</sup> , 市川 俊 <sup>1</sup> , 山下 和樹 <sup>3</sup> , 千葉 竜麻 <sup>3</sup> , 吉見 一慶 <sup>1</sup> , 森 初果 <sup>1,2</sup> , 山浦 淳一 <sup>1</sup> , 川本 正 <sup>4</sup> , 森 健彦 <sup>4</sup> , 西尾 豊 <sup>3</sup> , 梶田 晃示 <sup>3</sup> , 森山 広忠 <sup>3</sup>	4B11	イオン液体の凝固・融解過程の解明 - [bmim]Brの soft melting - (千葉大院自然 <sup>1</sup> , 千葉大VBL <sup>2</sup> , 千葉大教育 <sup>3</sup> , UBC <sup>4</sup> , 東大院理 <sup>5</sup> ) 西川 恵子 <sup>1</sup> , 片柳 英樹 <sup>2</sup> , 東崎 健一 <sup>3</sup> , 王 紹蘭 <sup>3</sup> , 稲場 秀明 <sup>3</sup> , 古賀 精方 <sup>4</sup> , 林 賢 <sup>5</sup> , 浜口 宏夫 <sup>5</sup>	4C11	ナノ秒時間分解過渡吸収画像・スペクトル計測装置を用いた励起状態計測(産総研) 加藤 隆二, 玉城 喜章, 村井 美紀, 渡邊 禎之, 古部 昭広
13:20	4A12	含ヨウ素中性分子pBIB類縁体(pBIB = p-bis(iodoethynyl)benzene)に基づく超分子構造を用いた新規多元系有機導体の開発(埼玉大理 <sup>1</sup> , 理研 <sup>2</sup> , JST-CREST <sup>3</sup> ) 高坂 洋介 <sup>1,3</sup> , 山本 浩史 <sup>2,3</sup> , 中尾 朗子 <sup>2,3</sup> , 加藤 礼三 <sup>1,2,3</sup>	4B12	イオン性液体中のラジカルの溶媒和構造(東工大大院理工) 河合 明雄, 秀 森 丈寛, 渋谷 一彦	4C12	縮退四光波混合分光法によるアニソールの光反応(東工大大院理工) 安藤 まやか, 鈴木 正, 市村 禎二郎
13:40	4A13	C <sub>60</sub> -TTFドナー-アクセプター系の合成と物性(筑波大化 <sup>1</sup> , 都立大院理 <sup>2</sup> , 産総研光技術 <sup>3</sup> ) 西川 浩之 <sup>1</sup> , 中村 孝弘 <sup>2</sup> , 板倉 篤志 <sup>2</sup> , 兒玉 健 <sup>2</sup> , 菊地 耕一 <sup>2</sup> , 池本 勲 <sup>2</sup> , 近松 真之 <sup>3</sup> , 吉田 郵司 <sup>3</sup> , 八瀬 清志 <sup>3</sup> , 大塩 寛紀 <sup>1</sup>	4B13	熱力学関数の測定による、イオン液体 - 水系の混合状態の解明(千葉大VBL <sup>1</sup> , 千葉大院自然科学 <sup>2</sup> , 日大生産工 <sup>3</sup> , Roskilde大 <sup>4</sup> , British Columbia大 <sup>5</sup> ) 片柳 英樹 <sup>1</sup> , 霜崎 英紀 <sup>2</sup> , 三木 久美子 <sup>3</sup> , Peter Westh <sup>4</sup> , 古賀 精方 <sup>5</sup> , 西川 恵子 <sup>2</sup>	4C13	シスチルベン光異性化反応の超高速時間分解吸収分光・核波束運動ダイナミクスと吸収ビートの起源(理研) 石井 邦彦, 竹内 佐年, 田原 太平
14:00	4A14	新規マクロサイクリックTTF三量体の合成および薄膜構造の評価(北大VBL <sup>1</sup> , 北大電子研 <sup>2</sup> , CREST <sup>3</sup> , 南デンマーク大 <sup>4</sup> ) 加藤 恵一 <sup>1,2</sup> , 芥川 智行 <sup>2,3</sup> , 中村 貴義 <sup>2,3</sup> , Jan Becher <sup>4</sup>	4B14	拡散係数の時空間依存性を直接測定する新しい蛍光相関分光(理研) 丑田 公規, 益田 晶子, 岡本 隆之	4C14	生体保護物質としての糖ガラスのフォトンエコーによる研究(阪大院基礎工・極研セ) 長澤 裕, 小笠原 麻友, 中川 佑歌子, 森 芳雄, 岡田 正, 宮坂 博
14:20			4B15	超臨界流体におけるゆらぎ構造の普遍性(千大院自) 新井(鮎澤) 亜沙子, 西川 恵子	4C15	銀ナノ微粒子の構造とダイナミクス・フェムト秒レーザー分光による研究(関学大理工) 玉井 尚登, Hnin YuYuKo, 西井 洗人

14:40						
15:00						
15:20						
17:00						

第4日(9月30日) 午後

D会場		E会場		P会場
【電子スペクトル】		生命科学と計算化学		
4D11	赤外分光による2-フルオロピリジン - メタノールクラスターの研究 (福岡大理) 丸井 良介, 仁部 芳則, 島田 廣子	4E08	理論化学の大規模系への展開 (東大院工) 平尾 公彦	13:00
4D12	協同的に進行する励起状態2重プロトン移動反応速度の非線形重水素置換効果 (九大院理) 迫田 憲治, 原 暁彦, 関谷 博	4E09	グリッド環境における計算ナノ科学の方法論 (分子研) 平田 文男	13:20
4D13	ジェット冷却したアミノフェノールのイオン化検出赤外スペクトル-倍音分光による回転異性体の帰属 (東工大資源研 <sup>1</sup> , JST/PRESTO <sup>2</sup> , オタゴ大化 <sup>3</sup> ) 藤井 正明 <sup>1</sup> , 石内 俊一 <sup>1,2</sup> , 篠崎 美名子 <sup>1</sup> , Timothy W. Robinson <sup>3</sup> , Henrik G. Kjaergaard <sup>3</sup>			13:40
4D14	ジェット冷却した <i>o</i> -, <i>m</i> -, <i>p</i> -フルオロアニソールの分子構造と励起状態ダイナミクス (東工大院理工 <sup>1</sup> , 東工大TLO <sup>2</sup> ) 磯崎 輔 <sup>1</sup> , 酒田 耕作 <sup>1,2</sup> , 鈴木 正 <sup>1</sup> , 市村 禎二郎 <sup>1</sup>	4E10	グリッド計算環境における生体分子の分子軌道計算 (産総研グリッド) 長嶋 雲兵	14:00
4D15	超音速ジェット下でのアニソール分子の電子スペクトルと励起状態ダイナミクス (東工大院理工) 松本 龍, 鈴木 正, 市村 禎二郎	4E11	創薬のための計算化学利用における課題 (大鵬薬品(株) <sup>1</sup> , 広島大QuLiS <sup>2</sup> ) 多田 幸雄 <sup>1</sup> , 神沼 二真 <sup>2</sup>	14:20

				14:40	
				15:00	
				15:20	ポスター発表(4P001-4P133)
				17:00	