

ポスター発表1日目(9月27日, 16時から)

【固体物性】

- 1P001 長鎖アルキル鎖を持つナイロンモデル化合物の結晶構造と相転移挙動 (阪大院理) 桑原 一郎, 川口 辰也, 金子 文俊
- 1P002 延伸ポリエチレンの変形保持機構の解明 (阪大院理¹, 三井化学(株)²) 川口 辰也¹, 藤隠 一郎², 金子 文俊¹
- 1P003 モリブデン - オキソ4核クラスターを内包する金属ポルフィリンナノチューブの構造と性質 (九大院理) 原田 了輔, 大川 尚士, 小島 隆彦
- 1P004 2成分分子性アモルファス物質の構造緩和と新たな特異温度 (学習院大理) 武井 応樹, 仲山 英之, 石井 菊次郎
- 1P005 配座異性体間の非平衡が引き起こす特異的な状態変化 (学習院大理) 堺 圭亮, 仲山 英之, 石井 菊次郎
- 1P006 [(PyO)(H/D)][AuCl₄] (PyO = C₅H₅NO) 結晶の不整合相転移 (日大院総合基礎科学¹, 東工大院理工²) 渡辺 潤¹, 秋山 栄吾¹, 藤森 裕基¹, 浅地 哲夫¹, 小國 正晴²
- 1P007 パラフェニレンジアミン誘導体とテトラハロパラベンゾキノンの水素結合を導入した有機電荷移動錯体の光学的性質 (熊本大院自) 永石 賢英, 藤本 斉, 松崎 晋
- 1P008 層状ペロブスカイト型化合物(4-CIPh(CH₂)_nNH₃)₂MX₄ (M = Pb, Sn; X = Br, I)の発光スペクトル (東大物性研¹, 日大自然研², 日大文理³, 北大院理⁴) 鈴木 浩一^{1,2}, 和田 章³, 浅地 哲夫³, 藤代 史³, 望月 章介³, 内藤 俊雄⁴, 稲辺 保⁴, 山室 修¹
- 1P009 分子間水素結合を有するクロラニル酸およびプロマニル酸-ジアジニウム系錯体の誘電挙動と結晶構造 (東大物性研¹, JST,CREST², 東邦大理³, 沼津高専⁴) 鈴木 秀明^{1,2}, 木村 伸也^{1,2}, 森 初果^{1,2}, 持田 智行³, 仁平 貴明⁴
- 1P010 Al/2-amino-4,5-dicyanoimidazole/Al素子における不揮発性メモリ効果 (DNP-RDC¹, 千葉大工²) 加納 正隆¹, 織戸 聖子², 鶴岡 義秋¹, 上野 信雄²
- 1P011 メリト酸アニオンの自己集合を利用した水素結合ネットワークの構築 (北大院理¹, 北大創成²) 峯廻 洋美¹, 内藤 俊雄^{1,2}, 稲辺 保¹
- 1P012 Anomalous magnetic properties of Ni nanowire arrays in an anodic porous alumina template (慶大理工¹, JST-CREST²) Seung Hun Huh¹, 中嶋 敦^{1,2}
- 1P013 Fabrication of high-density ferromagnetic nanowire arrays by laser plasma deposition into nanohole arrays (慶大理工¹, JST-CREST²) Seung Hun Huh¹, 田口 洋介¹, 直野 泰知¹, 川端 小百合¹, 中嶋 敦^{1,2}
- 1P014 直鎖アルキルインドリン-TCNQ縮合化合物の構造と物性 (京大院理) 榎本 雄一郎, 西村 一国, 本田 元気, 齋藤 軍治
- 1P015 直鎖アルキルインドリン-TCNQ縮合化合物の熱的性質と延性 (京大院理) 西村 一国, 本田 元気, 榎本 雄一郎, 齋藤 軍治
- 1P016 ガラス内部でのフェムト秒レーザー誘起構造変化のリアルタイム観測 (京大院理) 坂倉 政明, 寺嶋 正秀
- 1P017 偏光・寿命幅フリーX線吸収分光の銅高温超伝導体への応用 (東北大多元研¹, 東大生研², JASRI³, 東北大金研⁴) 武田 留美¹, 林 久史¹, 川田 雅輝¹, 佐藤 敦¹, 宇田川 康夫¹, 七尾 進², 河村 直己³, 池内 和彦⁴, 上藤 哲嗣⁴, 山田 和芳⁴
- 1P018 白金錯体薄膜に対するずれ応力効果の定量化 (山口東理大基礎工¹, 室蘭工大工², 分子研³, 兵庫県立大理⁴) 井口 眞¹, 河村 大輔¹, 永岡 敦¹, 籾内 一博¹, 林 純一², 城谷 一民², 薬師 久弥³, 川村 春樹⁴
- 1P019 高分子・固体の非線形光学材料の理論的設計方法の開発 (九大院総理工¹, 科技機構PRESTO²) 大西 真一¹, Gu Feng Long², 青木 百合子^{1,2}
- 1P020 バナジウム錯体における光励起構造のX線解析 (東工大院理工) 星野 学, 植草 秀裕, 大橋 裕二

【伝導性・磁性物質】

- 1P021 多孔質固体中に生成する酸素単分子鎖の構造決定 (横市大院総理) 中田 栄一, 高見澤 聡
- 1P022 GaNおよびAlNナノワイヤーの電子物性に関する第一原理解析 (京大院工) 土井 謙太郎, 東植 伸之, 川上 佳彦, 中村 康一, 立花 明知
- 1P023 有機伝導体結晶内の分子クラスターに関する分子軌道法による大規模計算 (阪大院理) 川上 貴資, 谷口 岳志, 庄司 光男, 北河 康隆, 奥村 光隆, 山口 兆
- 1P024 マンガンポルフィリン・TCNE一次元錯体の磁氣的相互作用に関する理論的研究 (阪大院理) 小泉 健一, 庄司 光男, 北河 康隆, 山口 兆
- 1P025 分子軌道法による高スピンカルベン/ナイトレン分子系の電子的励起状態解析 (阪市大院理) 杉崎 研司, 豊田 和男, 佐藤 和信, 塩見 大輔, 工位 武治
- 1P026 ポルフィリン系分子ワイヤーの量子輸送過程に関する理論的研究 (九大先導研) 濱山 慎也, 多田 朋史, 近藤 正一, 吉澤 一成

【クラスター】

- 1P027 ポリマー被覆PdCuナノ粒子の水素吸蔵特性 (九大院理) 山内 美穂, 北川 宏
- 1P028 アセチリド化合物より合成した機能性ナノ合金の構造 (分子研) 岡部 智絵, 西條 純一, 十代 健, 西 信之
- 1P029 クロムクラスターイオンの光解離分光 ((株)コンボン研¹, 東大院理², 豊田工大³) 間嶋 拓也¹, 登野 健介², 寺崎 亨³, 近藤 保³
- 1P030 液滴レーザー蒸発質量分析装置の開発 ((株)コンボン研¹, 豊田工大²) 河野 淳也¹, 近藤 保²
- 1P031 赤外レーザー照射による液体分子線からのクラスターイオン生成機構 ((株)コンボン研¹, 豊田工大²) 外山 南美樹¹, 河野 淳也¹, 真船 文隆², 近藤 保²
- 1P032 コバルトクラスターイオン上における一酸化窒素の反応 - 水素原子導入によるサイズ特異的な反応促進の解明 ((株)コンボン研¹, 豊田工大², (株)豊田中研³) 半村 哲¹, 市橋 正彦², 渡邊 佳英³, 磯村 典武³, 近藤 保²
- 1P033 内殻励起吸収分光法による、エタノールクラスターの電子状態の局所的観測 (JASRI/SPring-8¹, 兵庫県立大理², 広大院理³) 為則 雄祐¹, 山口 拓也², 岡田 和正³, 田林 清彦³, 下條 竜夫², 本間 健二²
- 1P034 分子へのLi⁺付着: 付着イオンの構造と結合エネルギー (アネルバテクニクス(株)¹, 東農工大院²) 中村 恵¹, 塩川 善郎¹, 藤井 敏博¹, 高柳 正夫², 工藤 聡², 中田 宗隆²
- 1P035 軟X線光励起によるアセトニトリルクラスターの光化学反応メカニズム (広島大院理¹, 広島大HSRC²) 原田 知恵¹, 多田 修悟¹, 青山 淳一¹, 田林 清彦^{1,2}, 齊藤 昊¹, 吉田 啓晃^{1,2}, 和田 眞一^{1,2}, 平谷 篤也^{1,2}, 田中 健一郎^{1,2}
- 1P036 固体アルゴン中におけるSn、Pb原子及び小クラスターとCOとの反応 (産総研¹, 神戸大院自然²) 江 凌^{1,2}, 徐 強^{1,2}
- 1P037 固体アルゴン中における第11族金属原子及び小クラスターとCOとの反応 (産総研¹, 神戸大院自然²) 江 凌^{1,2}, 徐 強^{1,2}
- 1P038 アニリン・水・芳香族クラスターカチオンの赤外前期解離反応のプロトンアフィニティ依存性 (産総研) 中永 泰介, Naveed K. Piracha, 永井 秀和
- 1P039 水和ペプチドイオンの光解離過程 (神戸大理¹, 横浜市大理²) 森 啓輔¹, 藤原 亮正¹, 柴田 洋平¹, 岩岡 咲枝¹, 野々瀬 真司², 富宅 喜代一¹
- 1P040 光イオン化質量分析法によるアルカリ金属原子 ビニル化合物クラスターの異性体構造の研究 (東北大院理) 中川原 若奈, 古屋 亜理, 角山 寛規, 美齊津 文典, 大野 公一
- 1P041 Al⁺-(CH₃OH)_nの赤外光解離分光 (東北大院理¹, 東大院総合², 分子研³) 古屋 亜理¹, 鶴田 護¹, 中川原 若奈¹, 美齊津 文典¹, 大野 公一¹, 井口 佳哉^{2,3}, 十代 健³, 西 信之³
- 1P042 単分散金ナノクラスターの調製と水中触媒作用 (分子研¹, 千葉大工², 総研大³, CREST⁴) 角山 寛規¹, 櫻井 英博¹, 一國 伸之², 根岸 雄一^{1,3}, 佃 達哉^{1,3,4}

- 1P043 チオール分子で保護された貴金属クラスターの化学組成と電子状態 (分子研・総研大) 根岸雄一, 佃達哉
- 1P044 $(CS_2)_2^-$ の構造異性体とその光解離過程 (東大院総合) 松山 靖, 中西 隆造, 井口 佳哉, 永田 敬
- 1P045 銅アセチリドクラスターの電子状態と幾何構造 (分子研) 十代 健, 西條 純一, 根岸 雄一, 佃 達哉, 永瀬 茂, 西 信之
- 1P046 Direct Observation of Aromatic C-H...X Hydrogen Bonds by Fluorescence-Detected Infrared Spectroscopy (東北大院理¹, 広島大院理²) Vaidyanathan Venkatesan¹, 藤井 朱鳥¹, 江幡 孝之², 三上 直彦¹
- 1P047 Ultraviolet and Infrared Laser Spectroscopic Study on Excited State Proton Dislocation in Microsolvated Salicylic Acids (東北大院理¹, 広島大院理²) Abou El-Nasr Eman¹, 藤井 朱鳥¹, 矢作 徹¹, 江幡 孝之², 三上 直彦¹

【赤外・ラマン分光】

- 1P048 マトリックス単離法による $BX_3(X=F, Cl)$ - アセトニトリル分子錯体の研究: マトリックス効果及びルイス酸の影響 (岩手大工) 服部 竜一, 鈴木 映一, 清水 健司
- 1P049 基板上に配列した凝集銀ナノ粒子およびその表面増強ラマン散乱 (慶大理工) 堀本 訓子, 石川 延明, 中嶋 敦
- 1P050 Kr- $^{12}C^{18}O_2$ の赤外ダイオードレーザー分光 (城西大理) 紺野 東一, 福田 真一, 尾崎 裕
- 1P051 2次元振動波動関数を用いた $Ar-CO_2$, $(CO_2)_2$ の構造の同位体効果の計算 (城西大理) 尾崎 裕, 紺野 東一, 福田 真一
- 1P052 過渡蛍光検出赤外分光法を応用したファーフィールド赤外超解像顕微分光 (東工大資源研¹, オリンパス先進技術研²) 酒井 誠¹, 大森 努¹, 川島 安武¹, 武田 朗宏¹, 渡邊 武史¹, 池滝 慶記², 藤井 正明¹
- 1P053 ONIOM法によるロドプシン蛋白質中のレチナールの基準振動解析 (広島大院理¹, 広島大 QuLiS²) 吉田 弘^{1,2}, 橋本 貴世¹, 原田 隆範², 松原 世明²
- 1P054 ナフタレンとピフェニルのラジカルアニオンの赤外吸収スペクトルと電子-分子振動相互作用 (埼玉大理¹, 埼玉大²) 原田 智久¹, 坂本章¹, 田隅 三生²
- 1P055 ジオキサンハイドロパーオキシドの振動スペクトル (産総研爆発安全) 藤原 英夫, 松永 猛裕
- 1P056 Computational Study of the Hexamethylbenzene-Tetracyanoethylene Charge-Transfer Complexes (神戸大分子フォト¹, JST-CREST², 国立台湾大³) Md. Humayun Kabir^{1,2}, 林 倫年³, 富永 圭介^{1,2}
- 1P057 1,2-ジメチルヒドラジンのトンネル異性化速度の同位体効果 (東農工大院BASE) 市村 康治, 二見 能資, 工藤 聡, 中田 宗隆
- 1P058 低温希ガスマトリックス中でのエチルアミンの赤外吸収スペクトルの可逆的变化 (東農工大院BASE) 二見 能資, 工藤 聡, 中田 宗隆
- 1P059 $NgNiCO$, $NgNiN_2$, $NgCoCO$ ($Ng=He, Ne, Ar$)に関する理論的研究 (分子研¹, お茶大理²) 小野 ゆり子¹, 武次 徹也²
- 1P060 HClの回転スペクトルの観測とNon-Born-Oppenheimer Hamiltonianによる解析 (城西大院理) 上原 博通, 堀合 公威, 梅田 秀
- 1P061 希ガス水素化物のフーリエ変換型赤外発光分光(1) ArH の4p-5s, 5p-6sバンドの解析 (ハリコフ大¹, ヘイロフスキー研², 岡山大理³) Oleg Baskakov¹, Svata Civis², 川口 建太郎³
- 1P062 同位元素置換トランス-スチルベンS1状態の計算ラマンスペクトルと非真性共鳴条件下での実測ラマンスペクトル (埼玉大理¹, 富士写真フィルム², 埼玉大³) 田中 文芸¹, 河戸 孝二², 坂本章¹, 古屋 和彦², 田隅 三生³
- 1P063 紫外・可視・近赤外波長可変ピコ秒時間分解ラマン分光装置の開発 (東大院理) 高田 雄太, 勇崎 健郎, 岩田 耕一, 浜口 宏夫
- 1P064 低温アルゴンマトリックス中の3-クロロアセチルアセトンと3-メチルアセチルアセトンの光異性化 (東農工大院BASE) 箕浦 由貴子, 工藤 聡, 中田 宗隆

- 1P065 非平衡水和電子からのフェムト秒時間分解共鳴ラマンスペクトル：プローブ波長依存性 (理研) 水野 操, 山口 祥一, 田原 太平
- 1P066 CH₃SOOラジカルのマトリックス単離赤外スペクトル (東工大院理工) 辻 和秀, 麻生 陽一郎, 河合 明雄, 渋谷 一彦
- 1P067 マトリックス単離法による2-クロロ-4-メトキシフェノールの光反応 (東農工大院BASE¹, 広島大 Q u L i S²) 西野 悟史¹, 赤井 伸行², 工藤 聡¹, 中田 宗隆¹
- 1P068 p-トルイジンの光反応についてのマトリックス単離赤外分光法および量子化学計算による研究 (広島大QuLiS¹, 広島大院理²) 赤井 伸行¹, 吉田 弘^{1,2}, 大野 啓一², 相田 美砂子^{1,2}
- 1P069 NCSラジカルの時間分解赤外ダイオードレーザー分光(2) (九大院理) 池田 誠規, 田中 桂一
- 1P070 近赤外領域(1.6 μm帯)における二酸化炭素の吸収線プロファイルの精密測定 (産総研) 疋田 利秀, 山田 耕一
- 1P071 オープンパスFTIR-CT法を用いた2次元ガスマッピング - 新規光学系を用いた分布画像歪みの改善 - (東農工大院農¹, 東農工大院共生科学技術²) 小林 大起¹, 吉村 季織², 高柳 正夫², 山田 晃²
- 1P072 赤外分光法及び量子化学計算法による生分解性ポリマー中のCH...O水素結合の研究 (関西学院大理工¹, チェコ共和国科学院², P & G³) 佐藤 春実¹, Jiri Dybal², 村上 留美¹, 野田 勇夫³, 尾崎 幸洋¹
- 1P073 オキサアルカノール同族体のコンホメーションと融解挙動 (広島大院理) 西平 佳奈, 福原 幸一, 江幡 孝之
- 1P074 アルキル/トリオリゴオキシエチレン系ブロック化合物の超高压赤外スペクトル (広島大院理) 萩原 辰徳, 福原 幸一, 江幡 孝之
- 1P075 ビフェニルキャップピチオフエンのカチオン種の振動スペクトル (早大理工¹, 京都工繊大繊維²) 鎌田 祐亮¹, 本多 光太郎¹, 古川 行夫¹, 堀田 収²
- 1P076 -アラニン結晶のラマンスペクトルに及ぼす圧力効果 (福岡大理) 蓼原 由樹子, 仁部 芳則, 島田 廣子
- 1P077 ダイマー計算による固体TCNQの赤外吸収スペクトルの再現 (和歌山大院システム工¹, 和歌山大システム工²) 光山 佳成¹, 山門 英雄²

【マイクロ波分光・電子線回折】

- 1P078 開殻ラジカルAr-HO₂のFTMW及びFTMW二重共鳴分光 (東大院総合) 舟戸 涉, 須磨 航介, 住吉 吉英, 遠藤 泰樹
- 1P079 炭素鎖ラジカルC₄ClのFTMW分光 (東大院総合) 加藤 かおる, 住吉 吉英, 遠藤 泰樹
- 1P080 CH₃OOラジカルの回転スペクトルの解析 (東大院総合¹, 総研大²) 加藤 かおる¹, 住吉 吉英¹, 遠藤 泰樹¹, 廣田 榮治²
- 1P081 マイクロ波分光によるCH₃-C(:O)-NCOの分子構造 (上智大理工) 内田 祐作, 豊田 真行, 久世 信彦, 酒泉 武志
- 1P082 CoNOの振動励起状態のミリ波分光 (九大院理) 坂元 愛, 林 雅人, 原田 賢介, 田中 桂一
- 1P083 H₂CCDラジカルの核スピン相互作用 (九大院理¹, NIST²) 林 雅人¹, Richard Lavrich², 原田 賢介¹, 田中 桂一¹, 田中 武彦¹
- 1P084 Ne-HCNの分子間ポテンシャル (九大院理¹, 分子研², 九大情基センター³) 原田 賢介¹, 田中 桂一¹, 南部 伸孝², 青柳 睦³
- 1P085 振動スペクトルと気体電子線回折による(E)型アセトフェノンオキシムの分子構造の研究 (上智大理工¹, 北大院理²) 井上 茂紀¹, 森 崇顕¹, 久世 信彦¹, 酒泉 武志¹, 大橋 修¹, 武島 嗣英², 江川 徹², 小中 重弘²
- 1P086 NH₂Clの重水素置換体のマイクロ波スペクトル (東京農工大¹, 放送大院², 東工大院理³, 上智大理工⁴) 増子 栄一¹, 濱田 嘉昭², 溝口 麻雄³, 久世 信彦⁴, 酒泉 武志⁴
- 1P087 フーリエ変換マイクロ波分光によるジメチルエーテル・ネオン錯体分子の回転スペクトル (神奈川工大¹, 金沢大理², 総研大³) 森田 康理¹, 川嶋 良章¹, 大橋 信喜美², 廣田 榮治³

- 1P088 講演中止
- 1P089 水銀光増感反応を用いた高圧域でのラジカル分子の圧力幅測定 (東大院理工) 溝口 麻雄, 近藤 勝也, 金森 英人
- 1P090 量子凝縮相中における分子のマイクロ波分光(2) - バルク液体ヘリウム中におけるアンモニアの反転スペクトルの観測 - (原研基礎セ) 石黒 正純, 荒殿 保幸
- 1P091 N-メチルアニリンのフーリエ変換マイクロ波スペクトル (金沢大院理) 青山 純平, 那須 寛, 久保田 祐次, 藤竹 正晴, 大橋 信喜美

【理論化学】

- 1P092 局在化磁性軌道法による添加物系強磁性体の磁気特性 (三菱電機先端総研) 信時 英治, 豊島 利之
- 1P093 第一原理計算による結晶カルコゲン化合物の構造と振動物性の研究 (京大院理¹, 東大院理²) 松井 正冬¹, 中村 和磨², 井川 淳志
- 1P094 磁性と超伝導における多重バンド効果 (金沢大院自然) 長尾 秀実
- 1P095 Tetrathiapentalene (TTP) クラスタにおける非線形光学特性の理論的研究 (阪大院理¹, 阪大院基礎工²) 山田 悟¹, 中野 雅由², 岸 亮平², 新田 友茂², 山口 兆¹
- 1P096 零磁場分裂定数の第一原理計算による算出 (阪大院理) 武田 亮, 山中 秀介, 山口 兆
- 1P097 単分子螺旋スピン状態の相対論効果 (阪大院理) 武田 亮, 山中 秀介, 山口 兆
- 1P098 リング型分子集合体からなる直線型および分岐型ナノ構造体におけるエキシトン移動 (阪大院理¹, 阪大院基礎工²) 高畑 昌弘¹, 中野 雅由², 山田 悟¹, 岸 亮平², 新田 友茂², 山口 兆¹
- 1P099 I₃の光解離 生成物I₂の電子状態とその生成機構 (慶大理工¹, 東大院総合²) 小鷲 聡美¹, 大野 智代¹, 菅原 道彦¹, 中西 隆造², 齋藤 直哉², 永田 敬², 藪下 聡¹
- 1P100 誘導ラマン断熱通過と多光子過程の競合に関する理論的研究 (金沢大院自然) 杉森 公一, 伊藤 智哉, 小谷 公子, 長尾 秀実, 西川 清
- 1P101 誘導ラマン断熱通過法による連続状態を経由する状態遷移のシミュレーション (金沢大院自然¹, 金沢大理²) 伊藤 智哉¹, 杉森 公一¹, 小谷 公子², 長尾 秀実¹, 西川 清¹
- 1P102 Ionisation of hydrogen atom in the presence of intense chirped laser pulse (東大院工¹, Univ. Delhi²) Vinod Prasad¹, 山下 晃一¹, Kriti Batra², Man Mohan²
- 1P103 金属表面の光化学反応と電子ダイナミクスにおける第一原理計算方法の開発 (東大院工) 中村 恒夫, 山下 晃一
- 1P104 レーザーパルスを用いたキラル分子モーターの量子制御に関する理論的研究 (東北大院理¹, トロント大理²) 八巻 昌弘¹, 保木 邦仁², 藤村 勇一¹
- 1P105 アントラセン-クラウンエーテル複合分子の蛍光スイッチングに関する理論的研究 (熊本大院自然) 櫻井 英夫, 相良 安寛, 杉本 学
- 1P106 Open-Shell SAC/SAC-CI法の様々な系への応用 (京大福井センター) 大塚 勇起, 中辻 博
- 1P107 時間依存振動CI法の開発と振動緩和ダイナミクスへの応用 (東大総合) 八木 清, 高塚 和夫
- 1P108 Linear-scaling formation of the Kohn-Sham Hamiltonian: application to the calculation of molecular properties in large molecules (東大院工¹, Univ. of Oslo²) Mark A. Watson¹, Trygve Helgaker², 平尾 公彦¹
- 1P109 経路積分を用いた新しい量子遷移状態理論とその溶液中プロトン移動反応への応用 (京大院理) 山本 武志
- 1P110 QTMに基づく量子波束のダイナミクス (金沢大院自) 松本 大輔, 井田 朋智, 加藤 信彦, 遠藤 一央
- 1P111 セル化した振幅項のない擬相関関数理論の開発 (東大院総合) 山下 雄史, 高塚 和夫
- 1P112 多重極子近似を用いたFMO法の高速度化 (豊橋技科大¹, JST², フロリダ大³) 野中 尋史¹, 杉木 真一郎^{1,2}, 平田 聡³, 関野 秀男¹
- 1P113 RISM-SCF法を用いたDMABN分子のTICT状態生成過程の解析 (京大院理) 嶺澤 範行, 加藤 重

樹

- 1P114 酵素モデル化合物の電子移動反応：RISM-SCF法によるアプローチ (京大院理) 東 雅大, 加藤重樹
- 1P115 溶媒効果を含んだ分子振動ハミルトニアン構成 (京大院理) 青野 信治, 加藤 重樹
- 1P116 水溶液中におけるイオン - 水分子間の相互作用に関する理論化学的研究 (広島大院理¹, 広島大QuLiS²) 田中 雅人¹, 相田 美砂子^{1,2}
- 1P117 アンモニアの水和過程に関する理論的研究 (名大院情報) 長尾 浩道, 永江 有起彦, 小谷野 哲之, 長岡 正隆
- 1P118 水溶液中におけるNi(II)の電子状態緩和の理論研究 (京大院理¹, 分子研²) 井内 哲¹, 森田 明弘², 加藤 重樹¹
- 1P119 AIMDシミュレーションにおけるSCF収束性の向上 (2) (早大理工) 渥美 照夫, 中井 浩巳
- 1P120 ab initio NOMO法における回転運動の取り扱い (早大理工) 星野 稔, 宮本 開任, 中井 浩巳
- 1P121 第一原理から導かれた新しいIQM/MM法 II (名大院情報) 安田 耕二, 山木 大輔
- 1P122 第一原理経路積分分子動力学法によるH₅⁺クラスターの量子揺らぎに関する研究 (科技機構¹, 産総研², 奈良女子大理³) 太田 靖人^{1,2}, 太田 浩二², 衣川 健一³
- 1P123 Theoretical Studies on Trimerization of Acetylene in the Presence of the Rhodium Catalysts. The Effect of Changing the Ligand (名大院人情¹, 名大院情²) AbdelRahman Dahy¹, 古賀 伸明²
- 1P124 複素STO/GTO基底を用いた光イオン化断面積の変分計算 (慶大理工) 森田 将人, 藪下 聡
- 1P125 C-H...O型水素結合における幾何学的同位体効果の理論的研究(3) (立教大理¹, 産総研², 横浜市大院理³) 宇田川 太郎¹, 石元 孝佳², 常盤 広明¹, 立川 仁典³, 長嶋 雲兵²
- 1P126 メチルリチウムクラスターの会合状態の理論的研究 (名大院情報科学) 太田 雄介, 出村 彰光, 岡本 拓也, 長岡 正隆
- 1P127 Xe流体中におけるポジトロンの基底および励起状態 ~ 波動関数法と経路積分法による複合アプローチ ~ (豊橋技科大工) 墨 智成, 関野 秀男
- 1P128 局在化軌道を用いた効率的な電子相関理論の開発と応用 (京大院工) 中尾 嘉秀, 榊 茂好
- 1P129 Gauss-FE混合基底法における基底の構成と計算効率 (豊田中研) 山川 俊輔, 兵頭 志明
- 1P130 大規模分子の物性値計算に向けた長距離補正時間依存密度汎関数法の開発 (東大院工¹, 豊橋技科大²) 神谷 宗明¹, 前田 康行², 関野 秀男², 常田 貴夫¹, 平尾 公彦¹
- 1P131 DNAおよび人工DNA中の電荷移動に関する理論的研究 (東大院工¹, 産総研計算²) 島崎 智実¹, 浅井 美博^{1,2}, 山下 晃一¹
- 1P132 [Ru(CN)₅NO]²⁻の安定および準安定構造と光誘起遷移過程の理論的研究 (北大院理) 石川 岳志, 田中 皓

ポスター発表2日目（9月28日，16時から）

【赤外・ラマン分光】

- 2P001 スピネル $MgAl_2O_4$ の振動解析と赤外強度(富山大理¹，埼玉大理²) 林 祐一郎¹，金坂 績¹，森岡 義幸²
- 2P002 単一銀ナノ凝集体の局在表面プラズモン共鳴と表面増強ラマン散乱強度，電荷移動発光強度の関係(関学大理工) 吉川 泰生，橋本 和宏，伊藤 民武，尾崎 幸洋
- 2P003 近接場ラマン分光における局在表面プラズモンの干渉(産総研-界面ナノ) 二又 政之
- 2P004 化学的に装飾した銀プローブによる近接場ラマン測定(理研¹，阪大工²) 齊藤 結花¹，村上 貴¹，井上 康志^{1,2}，河田 聡^{1,2}
- 2P005 銀微粒子表面に吸着したサッカリン陰イオンの振動スペクトルとその吸着構造(石巻専修大理工) 今井 良香
- 2P006 長鎖ジアセチレン誘導体の光重合に伴う色相転移と赤外・ラマン分光法による構造解析(埼玉大理) 森 和彦，藤森 一希，中原 弘雄，坂本章
- 2P007 マトリックス単離赤外分光法による酸化チタン光触媒反応の解析 - アルコールについて - (広島大院理¹，広島大QuLiS²) 沖村 真理¹，赤井 伸行²，勝本 之晶¹，大野 啓一¹
- 2P008 振動分光法を用いたアクリルアミド系高分子側鎖の溶媒和についての研究(広島大院理¹，関学大理工²，神戸大院自³) 勝本 之晶¹，田中 丈幸³，尾崎 幸洋²，大野 啓一¹
- 2P009 クロロホルムと1,4-ジオキサンの会合に関する赤外分光研究(広島大院理¹，広島大QuLiS²) 高尾 尊司¹，Nikolay Goutev¹，松浦 博厚¹，菅田 宏²，大野 啓一¹
- 2P010 近赤外及び赤外分光法による無極性溶媒中におけるアルコール分子の混合状態の研究(関学大理工) 三上 由帆，池羽田 晶文，橋本 千尋，尾崎 幸洋
- 2P011 ラマンバンド形をプローブとした水溶液中における硫酸塩のピコ秒会合・解離ダイナミクス(東大院理) 渡辺 大助，浜口 宏夫
- 2P012 イオン液体の液体構造と回転異性体間のエネルギー差(東大院理) 小澤 亮介，林 賢，Saha Satyen，浜口 宏夫
- 2P013 磁性イオン液体[bmim]FeCl₄の分光学的性質と構造(東大院理) 林 賢，Saha Satyen，小澤 亮介，浜口 宏夫
- 2P014 ELUCIDATION OF STRUCTURE OF FUNCTIONALIZED IONIC LIQUIDS BY RAMAN SPECTROSCOPY AND X-RAY CRYSTALLOGRAPHY(東大院理) Saha Satyen，林 賢，小澤 亮介，浜口 宏夫
- 2P015 イオン性液体のテラヘルツ誘電応答の探求(阪大レーザー研) 山本 晃司，萩行 正憲
- 2P016 KOCN - KSCN系水溶液におけるC N伸縮振動の線型とカップリング(富山大理) 小林 香織，金坂 績
- 2P017 直鎖と折れ曲がったポリエチン分子における"共役"と"電子吸収"，"C=C伸縮ラマン振動数"の関係(埼玉大理¹，埼玉大²) 藤森 一希¹，坂本章¹，田隅 三生²
- 2P018 エネルギー移動スペクトログラム(ETS)による化学反応の解析(早大理工) 山内 佑介，中井 浩巳
- 2P019 ベンゼン誘導体のラマンスペクトル：異常に強い低振動数スペクトル線の観測と解析(東北大院理) 磯貝 悠美子，山北 佳宏，大野 公一
- 2P020 一連の部分重水素化ヘキサ酸ナトリウムの振動スペクトル解析(名工大院工) 加賀 啓太，三島 宏之，山本 靖，多賀 圭次郎，吉田 忠義
- 2P021 振動分光法を用いた生体適合性高分子の分子構造研究 [4] 一般化二次元相関分光法による温度依存赤外スペクトルの解析(関西学院大理工¹，P & G²) 森田 成昭¹，野田 勇夫²，尾崎 幸洋¹
- 2P022 赤外分光法によるポリペプチドの三重ヘリックス構造形成過程の研究(関学大院理工) 橋本 千尋，滝川 恭子，尾崎 幸洋

- 2P023 タバコ由来カルモジュリン(NtCaM)のCa²⁺結合による構造変化：赤外，CD，蛍光分光法による研究 (埼玉大理¹，東大院農²，東医歯大教養³，農業生物資源研⁴，東理大理工⁵，慈恵医大⁶) 鈴木七緒^{1,2}，奈良雅之³，湯本史明^{2,6}，加藤有介²，永田宏次²，大橋祐子⁴，朽津和幸⁵，坂本章¹，田之倉優²
- 2P024 時空間分解ラマン分光による出芽酵母生細胞内部構造変化の分子レベル追跡 (東大院理) 内藤康彰，辛島健，山本正幸，浜口宏夫
- 2P025 近赤外ラマン分光法を用いた薬剤によるDNAのB型からA型への構造転移 (東大院理) 勇崎健郎，浜口宏夫
- 2P026 波長可変レーザーを用いたラマン散乱直接イメージング法の開発 (東大院理) 福住裕ノ介，加納英明，浜口宏夫
- 2P027 時空間分解ラマン分光による分裂酵母の細胞周期の分子レベル観察：*in vivo*でのミトコンドリアの呼吸活性度の可視化 (東大院理) 黄郁珊，辛島健，山本正幸，浜口宏夫

【クラスター】

- 2P028 Na_m⁻(H₂O)_nクラスターの光電子脱離分光 (神戸大院自然¹，神戸大理²) 宮田知代子¹，藤原亮正¹，富宅喜代一^{1,2}
- 2P029 [Benzene-(MeOH)_n]⁺クラスターイオンの赤外及び可視・紫外分光 クラスター構造とクラスター内プロトン移動反応 (東北大院理¹，京大院理²，広島大院理³) 榎本怜子¹，宮崎充彦²，藤井朱鳥¹，江幡孝之³，三上直彦¹
- 2P030 分子クラスターを用いたCH - 相互作用の研究～ベンゼン誘導体 - メタンの赤外分光～ (東北大院理¹，京大院理²，広島大院理³) 森田宗一¹，藤井朱鳥¹，宮崎充彦²，江幡孝之³，三上直彦¹
- 2P031 アントラセン誘導体巨大クラスター負イオンの光電子分光：電子の局在性に対する置換基効果 (慶大理工¹，JST-CREST²) 安藤直人¹，松本由生乃¹，中村恒幸¹，三井正明¹，中嶋敦^{1,2}
- 2P032 金属原子をドーピングしたケイ素クラスターの電子的安定性 (慶大理工¹，JST-CREST²) 小安喜一郎¹，阿久津稔¹，跡部純子¹，三井正明¹，中嶋敦^{1,2}
- 2P033 微細構造を有する基板上に構築された粒径選別ナノ粒子物質系の生成 (慶大理工¹，JST-CREST²) 直野泰知¹，川端小百合¹，Huh Seung Hun¹，田口洋介¹，三井正明¹，中嶋敦^{1,2}
- 2P034 シリコン(111)-7x7表面に担持された単一白金クラスターの電子構造の空間分解測定 (豊田工大¹，(株)コンボン研²) 安松久登¹，早川鉄一郎²，小泉真一²，近藤保¹
- 2P035 グラファイト表面上のタングステンクラスターと超構造のSTM観測 ((株)コンボン研¹，豊田工大²) 早川鉄一郎¹，安松久登²，小泉真一¹，近藤保²
- 2P036 チオカルボニル分子を用いた金ナノ粒子の創製 (愛知教育大¹，分子研²) 日野和之¹，中野博文¹，西信之²
- 2P037 マイクロ波照射下における銀ナノ材料の作製 (九大院総理工¹，九大先導研²，CREST³) 西澤幸¹，橋本昌幸¹，辻剛志^{1,2,3}，辻正治^{1,2,3}
- 2P038 非経験的分子軌道法によるAl_mNa_n (m=1,2; n=1-8)クラスターへのH原子吸着に対する理論研究 (千葉工大¹，東理大理工²) 松澤秀則¹，佐藤和博²，宇井幸一²，井手本康²，小浦延幸²
- 2P039 気相中におけるMg⁺(NH₃)_nの溶媒和構造 (九大院理¹，分子研²) 宗豊¹，寺原一崇¹，大橋和彦¹，井口佳哉²，西信之²，関谷博¹
- 2P040 大サイズプロトン付加水クラスターの赤外分光 水素結合ネットワーク構造のサイズ依存性 (京大院理¹，東北大院理²，広大院理³) 宮崎充彦²，藤井朱鳥²，江幡孝之³，三上直彦²
- 2P041 気相クラスター中での水和電子の生成初期過程 (神戸大理¹，神戸大院自然²) 荒西研吾²，岡井信裕²，富宅喜代一¹
- 2P042 単層カーボンナノチューブの成長制御(3) (東京都立大院理¹，産総研²，荏原製作所³) 鈴木信三¹，牧田靖規¹，青木陽介¹，朝井信行¹，片浦弘道²，長澤浩³，阿知波洋次¹
- 2P043 コロナ放電下にて生成される酸化物フラーレンクラスターに関する研究 (中大理工¹，理研²，分子研³) 田中秀樹¹，武内一夫²，根岸雄一³，佃達哉³
- 2P044 アセトンクラスターの内殻励起状態の研究 (兵庫県立大院物質¹，広大院理²，JASRI/SPring8³)

山口 拓也¹, 下條 竜夫¹, 本間 健二¹, 岡田 和正², 田林 清彦², 為則 雄祐³

2P045 アデニン類及びそのクラスターのレーザー脱離超音速分子線分光 (横浜市大総合理) 富岡 あづさ, 岩瀬 英二郎, 片山 匠, 三枝 洋之

【生体関連】

2P046 金微粒子のレーザーアブレーションによる金 DNA複合体の形成 ((株)コンポン研¹, 東大², 豊田工大³) 武田 佳宏¹, 真船 文隆², 近藤 保³

2P047 脂質膜中の光合成アンテナ複合体LH2の単一分子分光 (東工大院理工¹, 名工大物質工²) 内山大輔¹, 星野 創¹, 松下 道雄¹, 末守 良春², 出羽 毅久², 南後 守²

2P048 分子拡散測定によるポリペプチド鎖の二次構造変化の研究 (京大院理) 井上 圭一, 岩谷 健二郎, 馬殿 直樹, 寺嶋 正秀

2P049 拡散係数変化から見たタンパク質構造変化 (京大院理) 馬殿 直樹, 寺嶋 正秀

2P050 軟X線分光学的なアプローチによる放射線DNA損傷の研究 (原研保健物理部¹, 原研先端基礎センター²) 藤井 健太郎¹, 赤松 憲¹, 横谷 明德²

2P051 PYPの光サイクルにおけるダイナミクスの理論的研究 (名大院理) 神谷 基司, 斉藤 真司, 大峯 巖

2P052 銅蛋白アズリンの緩和過程に関する理論的研究 (金沢大院自然¹, 金城大社会福祉²) 杉山 歩¹, 珠久 智史¹, 齋藤 大明², 長尾 秀実¹, 西川 清¹

2P053 分子の動きは超空間における「ヒモ」である: コンフォメーション空間多様体のパーコレーション解析 (徳島大薬¹, 高知大理², 東和工大³, 徳島大工⁴, 東理大薬⁵) 後藤 了¹, 小松 和志², 宗像 達夫³, 堀 均⁴, 寺田 弘⁵

2P054 ミスマッチのあるDNA二重鎖の電子状態と電流電圧特性の解析 (豊橋技科大院知識¹, 神戸大院自然科学²) 夏目 貴行¹, 出立 兼一¹, 田中 成典², 栗田 典之¹

2P055 癌転移抑制剤の電子状態計算(2): ウロキナーゼの特性解析 (豊橋技科大院¹, 浜松医大²) 津村 直哉¹, 杉浦 史卓¹, 小林 浩², 栗田 典之¹

2P056 癌転移抑制剤の電子状態計算(1): 生理的物質ピクニンの特性解析 (豊橋技科大院¹, 浜松医大²) 杉浦 史卓¹, 津村 直哉¹, 小林 浩², 栗田 典之¹

2P057 1重鎖及び2重鎖DNAの構造と電子物性の理論的解析 (豊橋技科大院工¹, 神戸大院自然科学²) 出立 兼一¹, 夏目 貴行¹, 田中 成典², 栗田 典之¹

2P058 密度汎関数法によるラクトースリプレッサーとDNA間の特異的相互作用の解析 (豊橋技科大院) 松岡 誠, 仙石 康雄, 関野 秀男, 栗田 典之

2P059 密度汎関数理論による -N-アセチルノイラミン酸のコンホメーション解析 (岐大院連農¹, CREST², 岐大地域科学³, 愛知教大自然科学⁴) 澤田 敏彦^{1,2}, 橋本 智裕³, 中野 博文⁴, 重松 幹二¹, 石田 秀治¹, 木曾 眞^{1,2}

2P060 分子動力学法を用いたアズリン主鎖の集団モード解析 (金城大¹, 金沢大院自然²) 齋藤 大明¹, 杉山 歩², 長尾 秀実², 西川 清²

2P061 植物体内におけるエチレン生合成機構に関する理論的研究3 (立教大理¹, 分子研²) 伊藤 三香¹, 李 秀栄², 常盤 広明¹

2P062 ChickenSWS1 visual pigmentとそのS90C置換体の量子化学計算 (エモリー大化¹, エモリー大生物²) 大宮 和浩¹, 諸熊 奎治¹, Yokoyama Shozo²

2P063 フラグメントMO法によるDNAとエストロゲン受容体の相互作用解析 (産総研¹, 科技振², 富士総研³, 神戸大⁴, 国立衛研⁵, カロリンスカ研究所⁶) 渡邊 寿雄^{1,2}, 稲富 雄一^{1,2}, 福澤 薫³, 田中 成典⁴, 中野 達也⁵, Nilsson Lennart⁶, 長嶋 雲兵¹

2P064 NADH-シトクロムb5還元酵素の構造と機能についての理論的研究 (阪府大総科¹, 岡山理科大², 分子研³) 麻田 俊雄¹, 西本 吉助², 小関 史朗¹, 永瀬 茂³

2P065 ドーパミン -モノオキシゲナーゼによるC-H結合活性化機構に関する理論的研究 (九大先導研) 木原 直樹, 蒲池 高志, 塩田 淑仁, 吉澤 一成

- 2P066 DNA中における8-oxodGのコンフォメーションについての理論化学的研究 (広大院理¹, 広島大QuLiS²) 吉田 智喜^{1,2}, 相田 美砂子^{1,2}
- 2P067 プロリンのシス - トランス異性化反応についての理論化学的研究 (広島大院理¹, 広島大QuLiS², 藤沢薬品(株)化学研³) 原田 隆範^{1,2}, 白井 文幸³, 相田 美砂子^{1,2}
- 2P068 アレルゲン活性糖鎖HPG- 2-N6アナログのコンフォメーション解析 (東和工大¹, 徳島大薬²) 宗像 達夫¹, 後藤 了², 藤本 照也¹, 加藤 裕子¹
- 2P069 Met-エンケファリン立体構造に及ぼす補償溶質エクトインの尖鋭化効果 (名大院情報) 神藤 洋一, 優 乙石, 長岡 正隆
- 2P070 複素環配位子まで非局在化する銅(II)錯体の磁性軌道 (北大院理) 武田 定, 丸田 悟朗

【計算化学】

- 2P071 金属錯体における励起状態の失活過程に関する理論的研究 (大阪府立大院理) 松下 武司, 麻田 俊雄, 小関 史朗
- 2P072 遷移金属錯体上の水素移動反応の電子的過程 (京大院工) 大西 裕也, 中尾 嘉秀, 佐藤 啓文, 榊 茂好
- 2P073 金属間直接結合を持つ二核錯体と架橋二核錯体の構造と電子状態 (京大院工) 齋藤 健, 中尾 嘉秀, 佐藤 啓文, 榊 茂好
- 2P074 ハロゲン化ニッケルNiXの電子状態に関する理論的研究 (静岡大理¹, 静岡大工², 静岡大機器分析セ³) 山崎 恵美¹, 石田 俊正², 岡林 利明³, 谷本 光敏¹
- 2P075 NiO₂の電子構造とNiO₂の光電子分光の同定 (北大院理¹, 北大理², 駒大苫小牧³) 田中 皓¹, 山田 哲也², 関谷 雅弘^{1,3}
- 2P076 大規模酵素反応のメカニズム解明へ向けた取り組み (広島大院理, 広島大QuLiS) 松原 世明, 相田 美砂子
- 2P077 CYP3A4によるカルバマゼピン酸化機構 (千葉大院薬¹, 千葉大病院薬²) 畑 晶之¹, 田中 良和¹, 京田 直子¹, 刑部 泰輔¹, 幸 瞳¹, 石井 伊都子¹, 北田 光一², 根矢 三郎¹, 星野 忠次¹
- 2P078 FMOによるFKBPとリガンドの相互作用解析 (京大院薬¹, 産総研²) 村田 克美¹, 仲西 功¹, Dmitri G. Fedorov², 北浦 和夫^{1,2}
- 2P079 生分解性プラスチック分解酵素の反応機構についての計算化学的手法による解析 (広島大院理¹, 広島大QuLiS², 産総研³, 酒総研⁴) 榮 慶丈^{1,2}, 相田 美砂子^{1,2}, 近藤 英昌³, 正木 和夫⁴, 家藤 治幸⁴
- 2P080 DFT計算によるDMFC (メタノール直接分解型燃料電池) の負極上での触媒反応の解析 (NEC基礎研) 友成 六美
- 2P081 無機錯体[Cu(II)(N,N'-diethylethylenediamine)₂]²⁺の光誘起構造異性、光誘起相における新しい構造の発見 (九大院総理工) 石井 和美, 森 寛敏, 三好 永作
- 2P082 炭素ドーピングしたルチル型およびアナターゼ型酸化チタンの光学応答に関する研究 (東大工) 神坂 英幸, 足立 貴久, 山下 晃一
- 2P083 アズリンの電子状態計算II (金大院自然) 珠久 智史, 杉森 公一, 杉山 歩, 長尾 秀実, 西川 清
- 2P084 強磁性Fe₃Si結晶の表面電子状態についての密度汎函数計算 (九大院総理工) 執行 大輔, 森 寛敏, 吉武 剛, 三好 永作
- 2P085 Rh錯体触媒を用いたアルキンのシリルホルミル化反応機構の理論的研究 (名大院工) 越智 紀章, 沢辺 恭一, 松田 勇, 正畠 宏祐
- 2P086 Theoretical study of the spin-forbidden reaction of the transition metal complex (東大院工¹, ルンド大²) 土屋 敬史¹, Bjorn O. Roos²
- 2P087 FeO⁺によるベンゼンの水酸化反応に関する理論的研究 (九大先導研) 鈴木 邦彦, 塩田 淑仁, 吉澤 一成
- 2P088 金表面へのTTFの吸着に関する理論的研究 (京大院工¹, JST,CREST²) 林 正史¹, 任 化為¹, 久保 亜依子¹, 笹野 博之¹, 御崎 洋二¹, 田中 一義^{1,2}
- 2P089 遷移金属水素化物の解離エネルギー曲線 . III . Groups 6 and 7 monohydrides (阪府大総) 小

関 史朗

- 2P090 ホスフェニウム配位子をもつモリブデ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¹, 阪市大院理²) 鷹野 景子¹, 小野 綾子¹, 角越 美紀¹, 中沢 浩²
- 2P091 Creutz-Taube型錯体における電子の局在性に関する理論的研究 (京大院工) 横川 大輔, 中尾 嘉秀, 佐藤 啓文, 榊 茂好
- 2P092 シリル架橋二核ロジウム錯体の配位子と置換基による構造制御に関する理論的研究 (京大院工¹, 熊本大総情セ², 東工大資源研³) 隅本 倫徳¹, 武蔵 泰雄², 中尾 嘉秀¹, 佐藤 啓文¹, 榊 茂好¹, 小坂 田 耕太郎³
- 2P093 進化的計算法を用いた2次元振動状態計算法の開発 (慶大理工) 中田 雄介, 菅原 道彦, 藪下 聡
- 2P094 有効ポテンシャルを用いた量子ダイナミクスの方法における非線形演算子問題 (ACT-JST¹, 奈良女大理²) 堀越 篤史^{1,2}, 衣川 健一²
- 2P095 フランシウム, ラジウムのモデル内殻ポテンシャルの開発とその応用 (九大院総理工) 安島 英孝, 三好 永作
- 2P096 固有値問題の解法における基底関数ネットワーク構成法とパラメータ最適化改善法 (電通大物質) 佐野 達司
- 2P097 QEq-GB法による溶媒和自由エネルギーの計算 (豊橋技科大¹, 科技振²) 中山 尚史^{1,2}, 後藤 仁志¹
- 2P098 コリスミ酸のクライゼン転位及び脱離反応の溶媒効果; DFT-GB法による解析 (筑波大化) 高田 真吾, 守橋 健二
- 2P099 溶液内置換反応における溶媒分子の挙動についてのQM/MM-MC法を用いた研究 (広島大院理¹, 広島大QuLiS², 立教大³) 大久 真幸^{1,2}, 相田 美砂子^{1,2}, 山高 博³
- 2P100 Ferrate(VI)によるアルコール - アルデヒド転換反応の理論的解析 (九大先導研) 向野 智久, 蒲池 高志, 吉澤 一成
- 2P101 水中における胆汁酸塩の分子動力学シミュレーション (大分大教育¹, 分子研²) 中島 俊男¹, 岩橋 建輔², 岡崎 進²
- 2P102 水素結合に基づく分子カプセル形成機構の理論的考察 (分子研) 李 秀栄, 永瀬 茂
- 2P103 ジアリアルエテンを用いた分子スイッチングに関する電子論的研究 (熊本大院自然科学) 杉本 学, 相良 安寛, 櫻井 英夫
- 2P104 トルエンカチオンラジカルの擬回転と異性化反応のポテンシャルエネルギー曲面 (筑波大化) 高橋 央宜, 富谷 廣紀, 守橋 健二
- 2P105 高次元アルゴリズムによるn-C₄F₁₀とn-C₅F₁₂のコンホマー探索 (城西大理) 石井 圭一, 斉藤 豊, 八幡 大輔, 寺前 裕之
- 2P106 メチルアントラセンのメチル基の内部回転ポテンシャルの理論的研究 (九大院理) 中垣 雅之, 西 依理子, 迫田 憲治, 西 香織, 中野 晴之, 関谷 博
- 2P107 ポリチオフェンのポーラロン: DFT計算ならびにENDOR実験 (産総研ナノテク¹, 名大工², 東工大資源化学研³) 下位 幸弘¹, 阿部 修治¹, 坂中 敏展², 丸本 一弘², 黒田 新一², 小久保 尚³, 山本 隆一³
- 2P108 ケイ素 - ケイ素三重結合種の構造と物性の理論予測 (分子研) 高木 望, 永瀬 茂
- 2P109 単環状ボロンクラスタージカチオンの芳香族性 (明治薬大) 溝口 則幸
- 2P110 ナノサイズ分子の電子スペクトルの理論的研究 - ポリピロール, エチレンブリッジポリピロールなど (埼玉大院理工¹, 岡山理科大²) 藤井 秀彦¹, 野口 文雄¹, 時田 澄男¹, 西本 吉助²
- 2P111 電荷移動に起因する化学発光の励起過程に関する理論的研究 (阪大院理) 磯部 寛, 鷹野 優, 奥村 光隆, 山口 兆
- 2P112 - 相互作用によりプロトン移動の制御は可能か? サリチリデンアニリン誘導体の電子状態解析 (九大院総理工) 西野 裕美, 森 寛敏, 三好 永作
- 2P113 フラーレン, カーボンナノチューブ等の遷移金属錯体に関する理論的研究 (京大院工) 亀野

優, 中尾 嘉秀, 佐藤 啓文, 榊 茂好

- 2P114 分子内相互作用の理論解析(名大院情) 山田 健太, 古賀 伸明
2P115 密度汎関数法によるvan der Waals相互作用の理論的研究(東大院工) 佐藤 健, 常田 貴夫, 平尾 公彦

【磁気共鳴】

- 2P116 ラダーポリマーのAB効果とNMR化学シフト(京大院理) 久保 厚
2P117 分子軌道計算を用いた液晶高分子トランスエステル化に関する理論的解析(金沢大院自然科学¹, アクロン大²) 木村 雄一¹, 鈴木 陽¹, 本崎 弥¹, 水野 元博¹, 遠藤 一央¹, Chang Dae Han²
2P118 ab initio MO計算によるSiO₂化合物の紫外可視吸収スペクトルの研究(金沢大理) 後藤 英貴, 遠藤 一央
2P119 ベタインオキソ酸(HXO₄, X = Cl, I, Re) 塩-水和物の相転移と分子運動の研究(阪大院理¹, 阪大博物館²) 前沢 秀俊¹, 宮久保 圭祐¹, 上田 貴洋^{1,2}, 江口 太郎^{1,2}
2P120 波状水素結合を有する結晶の¹H MAS NMRスペクトル(横市大院総合理) 本多 尚, 中野 亮, 姜 真臻
2P121 ¹H NMRによる層状ペロブスカイト型化合物(CICH₂CH₂NH₃)₂MCl₄ (M = Hg, Pb)の陽イオンダイナミクスの研究(東大物性研¹, 日大自然研², 日大文理³, 岡山大理⁴, 広島大院理⁵, 筑波大院数理⁶, 物材機構⁷) 鈴木 浩一^{1,2}, 齋藤 秀晃³, 坂本 優子³, 浅地 哲夫³, 石田 祐之⁴, 大木 寛⁵, 石丸 臣一⁶, 池田 龍一⁷, 山室 修¹
2P122 4-n-アルコキシ安息香酸-4,4'-ジピリジル 2:1化合物の結晶構造と分子運動(岡大理¹, 岡山理大自然科学研²) 田淵 陽平¹, 赤司 治夫², 石田 祐之¹
2P123 A₃InX₆(A=Li,Na,X=Cl,Br)におけるカチオン伝導体探索と伝導機構(広島大院理) 熊野 圭司, 山田 康治
2P124 イオン交換可能な層状化合物KTiNbO₅における層間分子・イオンの挙動(広島大院理) 河口 誉元, 脇本 直樹, 大木 寛, 山田 康治
2P125 ¹³C NMRの常磁性シフトを用いたCe₂@C₈₀の構造研究(都立大院理¹, 筑波大化²) 市川 岳史¹, 兒玉 健¹, 三宅 洋子¹, 鈴木 信三¹, 東 維成¹, 西川 浩之², 池本 勲¹, 菊地 耕一¹, 阿知波 洋次¹

【その他(磁気科学など)】

- 2P126 光触媒反応の磁場効果(2)(埼玉大理) 若狭 雅信, 須田 幸子
2P127 亜鉛ポルフィリン-C₆₀連結化合物の光誘起電子移動反応に対する磁場効果:鎖長と温度の効果(九大院工) 原田 聡子, 米村 弘明, 森部 真也, 山田 淳
2P128 強磁場下におけるポリスチレン球の動的散乱(学習院大理) 小泉 禅, 仲山 英之, 石井 菊次郎
2P129 BMDCMの気相紫外光電子分光(京大化研) 山口 高歩, 平松 孝章, 吉田 弘幸, 佐藤 直樹
2P130 キラルなヘテロポリモリブデン酸の光学分割と結晶構造(京大院人環) 高橋 弘樹
2P131 Windows環境における計測プログラミング(広島市大情報) 藤原 久志, 石渡 孝
2P132 新規含セレン縮合芳香族化合物ベンゾ[1,2-b:4,5-b']ジセレノフェン(BDS)誘導体の合成とFET特性(広島大院工・総科) 近田 安史, 瀧宮 和男, 大坪 徹夫, 功刀 義人
2P133 オリゴマーをリガンドに導入したトリスオルトメタル化イリジウム(III)錯体の合成と物性(広島大院工¹, 阪大産研², CREST³) 本田 千恵¹, 瀧宮 和男¹, 大坪 徹夫¹, 安蘇 芳雄^{2,3}
2P134 CdTeナノ微粒子のフェムト秒レーザー分光(関西学院大院理工) 中山 純一, 玉井 尚登

ポスター発表3日目（9月29日、16時20分から）

【伝導性・磁性物質】

- 3P001 メソ位直結型アンチモン(V)ポルフィリンダイマー ビラジカルのスピン間相互作用 (東大院総合) 相坂 剛充, 中崎 城太郎, 瀬川 浩司
- 3P002 TCNQ薄膜を用いた電界効果トランジスタ 動作機構の解明と新規素子の開発 (早大理工¹, 早大ナノテク研究所²) 川口 順二¹, 細井 宜伸¹, 古川 行夫¹, 筒井 謙², 和田 恭雄²
- 3P003 マクロサイクリックトリスTTF誘導体の合成とその電荷移動錯体からなるLB膜の作製 (北大院地球環境¹, 北大電子研², CREST³, 北大VBL⁴, 南デンマーク大⁵) 梶原 鉄平¹, 加藤 恵一^{2,4}, 芥川 智行^{1,2,3}, 中村 貴義^{1,2,3}, J. Becher⁵
- 3P004 低分子有機ゲル形成物質を用いたLB法によるナノワイヤの作製 (北大院地球環境¹, 北大電子研², CREST-JST³, 野口研⁴) 網島 亮¹, 芥川 智行^{1,2,3}, 中村 貴義^{1,2,3}, 唐沢 知博⁴, 川上 宏子⁴, 戸潤一 孔⁴
- 3P005 Pyrrolo-TTF・TCNQ誘導体LB膜の構造と導電性 (北大院地球環境¹, 北大電子研², CREST³, 南デンマーク大⁴) 山階 維騎¹, 内潟 昌則², 芥川 智行^{1,2,3}, 中村 貴義^{1,2,3}, Jan Becher⁴
- 3P006 フェニレンジアミン - ケギン型ポリオキソメタレート錯体の結晶構造と磁性 (北大電子研¹, 北大院地球環境², CREST, JST³) 芥川 智行^{1,2,3}, 遠藤 大五郎², 中村 貴義^{1,2,3}
- 3P007 複素環配位子をもつCu(II)錯体における電子スピン密度分布 (北大院理) 大桃 貴之, 丸田 悟朗, 武田 定
- 3P008 ナノサイズの反強磁性物質のスピン状態 (北大院理) 鷲谷 隆太, 丸田 悟朗, 武田 定
- 3P009 Sn-I系ペロブスカイト型化合物を用いた有機・無機複合層状化合物の構造と電気物性 (北大院理¹, 北大創成²) 小原 玲奈¹, 内藤 俊雄^{1,2}, 稲辺 保¹
- 3P010 ベンゼンポリカルボン酸の自己集合能を利用した ラジカル分子の配列制御 (北大院理¹, 北大創成²) 塩野 和彦¹, 内藤 俊雄^{1,2}, 稲辺 保¹
- 3P011 フタロシアニン系伝導体 $[PXX]_2[Fe^{III}(Pc)(CN)_2] \cdot CH_3CN$ の結晶構造と電気物性 (北大院理¹, 北大創成²) 石川 学¹, 内藤 俊雄^{1,2}, 稲辺 保¹
- 3P012 固体高分解能NMRによるピリダジン架橋銅(II)錯体の電子スピン密度分布と磁氣的相互作用経路の決定 (北大院理) 山田 哲也, 丸田 悟朗, 武田 定
- 3P013 一次元鎖状ジカチオンを用いた陰イオンラジカル塩の作成 (北大院理¹, 北大創成²) 佐々木 真吾¹, 内藤 俊雄^{1,2}, 稲辺 保¹
- 3P014 Cu(II)イオンが組み込まれた一次元ビスオキサト白金錯体における伝導性の圧力効果 (筑波大化¹, 東大物性研², 物構研³, 九大院理⁴) 山本 千尋¹, 西川 浩之¹, 辺土 正人², 上床 美也², 澤 博³, 北川 宏⁴, 大塩 寛紀¹
- 3P015 立体障害を導入した新規含窒素有機伝導体の合成とその伝導度および構造 (東大物性研¹, JST,CREST², 東邦大院理³) 市川 俊¹, 木村 伸也^{1,2}, 前島 倫子³, 森 初果^{1,2}, 森山 広思³
- 3P016 放射光を用いて行った一次元導体 $TPP[M^{III}(Pc)(CN)_2]_2$ のエックス線回折実験 (東大物性研¹, 物構研², 北大院理³) 松田 真生¹, 吉田 剛介¹, 田島 裕之¹, 河村 幸彦², 澤 博², 内藤 俊雄³, 稲辺 保³
- 3P017 新規有機超伝導体 $-((R,S)\text{-DMBEDT-TTF})_2PF_6$ の構造と物性 (東大物性研¹, 東邦大院理², JST, CREST³, 東工大院理工⁴) 前島 倫子^{1,2}, 千葉 竜麻^{1,2}, 吉見 一慶¹, 鈴木 秀明^{1,3}, 木村 伸也^{1,3}, 森 初果^{1,3}, 山浦 淳一¹, 川本 正⁴, 森 健彦⁴, 森山 広思², 西尾 豊², 梶田 晃示²
- 3P018 PROXYLラジカル部位を分子内に有する新規な非対称型有機ドナーの合成および物性 (東大院理¹, 阪府大先端研², 分子研³, JST CREST⁴) 草本 哲郎¹, 藤原 絵美子¹, 小林 昭子¹, 藤原 秀紀^{2,4}, 小林 速男^{3,4}
- 3P019 ゲスト分子を含んだ多孔質錯体ジシアナミド鉄(II)ピリミジンの磁気相転移の圧力依存性 (電通大量子物質) 石田 尚行, 油座 謙次, 野上 隆
- 3P020 磁性軌道の直交を目指したスピロ型錯体の構造と磁氣的性質 (電通大量子物質) 岡澤 厚, 石田 尚行, 野上 隆

- 3P021 di-2-pyridyl ketoximateを用いた3d-4fヘテロ金属多核錯体の構造と磁性 (電通大量子物質) 森文仁, 石田 尚行, 野上 隆
- 3P022 非対称ドナーDMETを有する新規電荷移動型金属錯体の合成と物性 (都立大院理¹, 名大院工², CREST³) 梅宮 将充¹, 高石 慎也^{1,3}, 宮坂 等¹, 杉浦 健一¹, 山下 正廣^{1,3}, 伊東 裕², 黒田 新一²
- 3P023 カルコゲン原子を含む有機半導体材料の電子構造 (ソニーマテリアル研) 国清 敏幸, 鶴川 彰人
- 3P024 シアノ基またはピフェニル基置換TTF誘導体薄膜 (東工大院理工) 野田 文平, 勝原 真央, 青柳 勲, 森 健彦, 田口 智裕, 神林 琢也, 石川 謙, 竹添 秀男
- 3P025 セレンを含むTMET-TTP誘導体の合成と構造 (東工大院理工¹, 京大院工², 広大院工³) 坂東 祥匡¹, 芦沢 実¹, 森 健彦¹, 御崎 洋二², 田中 一義², 瀧宮 和男³, 大坪 徹夫³
- 3P026 有機強磁性半導体、(エチレンジチオテトラチアフルバレノキノン-1,3-ジチオールメチド)₂・FeBr₄塩の誘電性質 (阪府大先端研¹, 東北大院理², CREST-JST³) 杉本 豊成^{1,3}, 松本 拓也¹, 藤原 秀紀^{1,3}, 根岸 英一², 藪田 俊², 豊田 直樹²

【表面・界面】

- 3P027 Alq₃/LiF/Al界面の構造と電子状態に関する理論的研究 (阪大産研¹, 産総研²) 柳澤 将¹, 森川 良忠^{1,2}
- 3P028 和周波発生分光法によるアルミナ/PET接合界面の分子挙動 (産総研) 宮前 孝行, 野副 尚一
- 3P029 NEXAFS分光でみた金属/Alq₃界面の電子構造 (千葉大工¹, 東北大通研², 名大院理³, 理研フロンティア⁴, 山形大工⁵, NCSU⁶, 名大物国研⁷) 横山 高博¹, 石井 久夫², 松家 則孝³, 金井 要³, 伊藤 英輔⁴, 藤森 厚裕⁵, 荒木 暢⁶, 大内 幸雄³, 奥平 幸司¹, 関 一彦⁷, 上野 信雄¹
- 3P030 湿式法によるAu(111)面上のチオフェン自己組織化膜の構造 (東大院理¹, 物構研², 産総研³) 佐古 惠理香¹, 中井 郁代¹, 南部 英², 近藤 寛¹, 中村 徹³, 太田 俊明¹
- 3P031 可視光照射によるTiO₂(001)表面上での吸着分子の光反応過程のSTM観察 (東大院理) 有賀 寛子, 生井 勝康, 岩澤 康裕
- 3P032 Fe/Cu(100)表面吸着水分子スピン偏極に対する薄膜モルフォロジーの影響 (物材機構) 倉橋 光紀, 鈴木 拓, 山内 泰
- 3P033 チタニルフタロシアニンの雰囲気によるドーピング効果 (名大院理¹, 名大物質国際研²) 西 寿朗¹, 金井 要¹, 大内 幸雄¹, 関 一彦^{1,2}
- 3P034 電子・イオン・コインシデンス分光法を用いたフッ素系高分子の内殻電子励起に由来するイオン脱離の研究 (千葉大工¹, 千葉大院自然², 分子研³, 物構研⁴) 奥平 幸司^{1,2}, 八木 秀樹², 渡辺 崇宏², 解良 聡^{1,2,3}, 小林 英一⁴, 間瀬 一彦⁴, 上野 信雄⁴
- 3P035 TiO₂(110)表面上のギ酸分解反応過程のin-situ STM観察 (東大院理¹, 産総研², 東大院新領域³) 相澤 正樹¹, 高橋 一徹¹, 森川 良忠¹, 生井 勝康¹, 佐々木 岳彦³, 岩澤 康裕¹
- 3P036 水分子が吸着したNi(111)-2x2-Oの表面X線回折による構造解析 (慶大理工¹, SPring8²) 中村 将志¹, 山崎 瑞穂¹, 伊藤 正時¹, 坂田 修身²
- 3P037 講演中止
- 3P038 蒸気吸着過程でミクロ細孔中に生成するエタノール水素結合二量体の観察 (横市大院総理) 齋藤 晃央, 高見澤 聡
- 3P039 Study on formation of small, thin and smooth islands of TiO₂ on silicon substrate (東工大院理工) Petr Vassiliev, 福井 賢一, 榎 敏明
- 3P040 Synthesis of silver nanorods and observation of spatially-resolved surface plasmon absorption by near-field microscopy (分子研¹, ソウル国立大², 延世大³) Jong Kuk Lim^{1,2,3}, 井村 考平¹, 永原 哲彦¹, Seong Keun Kim², Dongho Kim³, 岡本 裕巳¹
- 3P041 TTF誘導体が吸着した金ナノ粒子の調製とその性質 (茨城大院理) 大貫 剛人, 五十嵐 勇樹, 川上大輔, 泉岡 明
- 3P042 アミノスルフィドを用いた金ナノ粒子の選択的調製 (茨大理工) 石田 光男, 泉岡 明
- 3P043 ステアリン酸誘導体分子集合膜のSTM観察 (いわき明星大理工) 勝又 春次

- 3P044 ベシクル間静電相互作用を用いたジャイアントベシクルによる分子輸送 (東大院総合) 鈴木健太郎, 菅原 正
- 3P045 ^{129}Xe NMRによる C_{12}E_5 系マイクロエマルション微細構造の検討 (富山大教¹, 阪大博物館², 阪大院理³) 片岡 弘¹, 一明 大輔¹, 上田 貴洋^{2,3}, 宮久保 圭祐³, 江口 太郎^{2,3}
- 3P046 金属・石英表面上に吸着した芳香族カルボン酸の状態解析と光誘起電子移動 (鹿児島大理) 蔵脇 淳一, 垂門 麻美, 楠元 芳文
- 3P047 Au(111)面にflat-on配向で吸着させた共役アルカジン単分子層の電気化学反応と構造変化 (東京農工大工¹, 北里大理²) 辻 敬太¹, 遠藤 理¹, 尾崎 弘行¹, 真崎 康博²
- 3P048 近赤外ポンプパルス照射による $c(4 \times 2)$ -CO/Ni(111)の吸着サイト間移動の時間分解SFG観察 (東工大資源研¹, 法政大情報²) 久保田 純¹, 依田 英介¹, 平岡 史歩¹, 和田 昭英¹, 堂免 一成¹, 狩野 覚²
- 3P049 赤外 - 可視和周波混合分光法を用いたイオン液体 $[\text{C}_n\text{MIM}]\text{BF}_4$ の気/液界面構造におけるアルキル鎖長依存性 (名大院理¹, 名大物質国際研², 北大院地環³, 東大院理⁴, Sogang大⁵) 岩橋 崇¹, 遠山 達哉¹, 金井 要¹, 関 一彦², 大内 幸雄¹, 飯森 俊文³, 浜口 宏夫⁴, Doseok Kim⁵
- 3P050 1-ナフトールによる硝酸処理したカーボンナノファイバー表面状態の評価 (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
- 3P051 光電子放射顕微鏡による有機薄膜上の金属微細構造 (千葉大工¹, 分子研²) 富山 直之¹, 山本 勇¹, 塩野入 正和¹, 解良 聡², 奥平 幸司¹, 上野 信雄¹
- 3P052 Alq_3 超薄膜の二次元構造および電子状態 (千葉大工¹, 分子研²) 花谷 俊広¹, 藤井 邦治¹, 片桐 史雅¹, 解良 聡^{1,2}, 奥平 幸司¹, 上野 信雄¹
- 3P053 HREELSによるフタロシアニン薄膜の振動構造 (千葉大工¹, 分子研²) 藤井 邦治¹, 藤田 美里¹, 花谷 俊広¹, 片桐 史雅¹, 解良 聡^{1,2}, 奥平 幸司¹, 上野 信雄¹
- 3P054 光電子型極端軟X線定在波法の開発 (東大院理¹, NTT-AT², 産総研³) 横田 玲夫奈¹, 近藤 寛¹, 中井 郁代¹, 島田 透¹, 長坂 将成¹, 太田 俊明¹, 竹中 久貴², 中村 徹³
- 3P055 C/W(110)表面の電子構造と水素吸着:角度分解光電子分光による研究 (東大院理) 池内 淳一, 登野 健介, 近藤 寛, 太田 俊明
- 3P056 Si(111)7x7表面上のベンゼン及びトルエンの吸着構造 (広大院理¹, JST研究活用成果プラザ広島²) 関谷 徹司¹, 富本 博之², 隅井 良平¹, 佐古 恵理香¹, 和田 真一¹, 田中 健一郎¹
- 3P057 界面和周波発生におけるバルク四重極効果の理論 (分子研) 森田 明弘
- 3P058 アルカンチオール誘導体自己集合化膜 / 水界面の分子動力学法による研究 (産総研・RICS / SYNAP) 吉田 孝史, 篠田 渉, 都築 誠二, 三上 益弘

【反応素過程】

- 3P059 炭素・酸素内殻励起領域におけるPMMA薄膜からの中性脱離反応の研究 (広大院理) 松本 吉弘, 和田 真一, 河野 美鈴, 関谷 徹司, 田中 健一郎
- 3P060 エステル基で修飾した自己組織化単分子膜での炭素、酸素内殻励起に伴うイオン脱離反応過程の定量的解析 (広大院理) 木崎 寛之, 和田 真一, 隅井 良平, 松本 吉弘, 飯塚 陽一, 関谷 徹司, 田中 健一郎
- 3P061 PMMA薄膜の内殻励起電子分光の研究 (広大院理) 飯塚 陽一, 和田 真一, 村上 晴輝, 隅井 良平, 輪木 覚, 関谷 徹司, 田中 健一郎
- 3P062 電子 - イオン・コインシデンス法によるメチルエステル修飾した自己組織化単分子膜の内殻励起イオン脱離反応機構に関する研究 (広大院理) 土江 弘晃, 南部 佑介, 和田 真一, 関谷 徹司, 田中 健一郎
- 3P063 静電型イオン蓄積リングによるビーム周回実験 (都立大院理) 佐藤 絢子, 神野 智史, 高雄 智治, 小俣 有紀子, 田沼 肇, 東 俊行, 城丸 春夫, 奥野 和彦, 小林 信夫, 阿知波 洋次, 兒玉 健
- 3P064 COの $\text{C}1s$ 内殻励起光電子スペクトルにおけるサテライトバンドの振動状態とその励起エネルギー依存性 (兵庫県立大¹, 分子研², JASRI³) 下條 竜夫¹, 町田 雅武¹, 本間 健二¹, 繁政 英治², 中村 永研², 小杉 信博², 為則 雄祐³

- 3P065 速度分解ペニングイオン化電子分光法に基づく分子軌道の空間分布の決定 (東北大院理) 山崎優一, 前田 理, 大野 公一
- 3P066 3次元ペニングイオン化電子分光法による立体反応ダイナミクス: 角度/衝突エネルギー分解電子スペクトル観測の試み (東北大理¹, 東北大院理²) 半澤 義紀¹, 岸本 直樹², 大野 公一²
- 3P067 三重同時計測法による配向水素分子の(e,2e)散乱立体ダイナミクス (分子研¹, 東北大多元研², Oxford大³) 高橋 正彦^{1,2}, 渡辺 昇^{1,2}, Yugal Khajuria¹, 宇田川 康夫², John Eland³
- 3P068 Double ionization of He by (e,3-1e) at large momentum transfer (分子研¹, 東北大多元研², Moscow State大 SISN³, Moscow State大物理⁴, JINR⁵) Y. Khajuria¹, 渡辺 昇^{1,2}, 高橋 正彦^{1,2}, 宇田川 康夫², Yu. V. Popov³, K. A. Kouzakov⁴, P. S. Vinitzky⁴, O. Chuluunbaatar⁵
- 3P069 希ガスマトリックス内OCSのS 2p励起状態 (分子研¹, 総研大²) 瀬戸山 寛之¹, 初井 宇記^{1,2}, 小杉 信博^{1,2}
- 3P070 Ar固体のAr 2p-4s内殻励起状態の温度依存性 (分子研¹, 総研大²) 初井 宇記^{1,2}, 瀬戸山 寛之¹, 小杉 信博^{1,2}
- 3P071 気相におけるFeOラジカルの反応性についての研究3 (日女大理) 樋口 容子, 山北 奈美, 今城 尚志
- 3P072 衝撃波管による高エネルギー物質NTOの熱分解反応の研究 (広大院理¹, 防大応化², 東北大流体研³) 浅野 広巳¹, 安永 健治², 高橋 修¹, 小池 亨², 河野 雄次³, 齊藤 昊¹, 田林 清彦¹
- 3P073 c-C₄F₈プラズマ下流に存在する中性化学種のLi⁺イオン付着質量分析 (九大院総理工) 奥村 洋史, 古屋 謙治, 雪田 忍, 原田 明
- 3P074 ArFエキシマレーザーによるNOxの分解機構 (九大院総理工¹, 九大先導研², CREST³) 野田 健二¹, 迫 寛之¹, 濱上 太郎², 辻 剛志^{1,2,3}, 辻 正治^{1,2,3}
- 3P075 赤外高強度フェムト秒レーザーによる有機多価イオンの生成 (阪市大院理) ハッ橋 知幸, 中島 信昭
- 3P076 シクロデキストリン・ナノキャピティに包接された分子のCT状態生成のダイナミクス (東工大大院理工) 松下 慶寿, 鈴木 正, 市村 禎二郎
- 3P077 Flavonoid の抗酸化反応におけるトンネル効果の研究 (愛媛大理) 垣内 拓大, 小原 敬士, 長岡 伸一, 向井 和男
- 3P078 CHラジカル燃焼反応の回転状態依存と分子配向効果 (阪大院理) 長町 有起, 大山 浩, 池尻 和正, 渡辺 大裕, 笠井 俊夫
- 3P079 Ar(³P)+CF₃X(X=H,Br)反応の磁気量子数及び衝突エネルギー依存性 (阪大院理) 渡辺 大裕, 大山 浩, 高橋 学, 笠井 俊夫
- 3P080 ハロゲン化炭化水素の193nmで生成するCl(²P_{3/2})およびCl(²P_{1/2})の絶対量子収率 (名大院理¹, 名大STE研²) 竹谷 文一^{1,2}, 高橋 けんし^{1,2}, 松見 豊^{1,2}
- 3P081 塩素原子Cl(²P_{3/2})およびCl(²P_{1/2})とアルコールの反応 (名大院理¹, 名大STE研²) 竹谷 文一^{1,2}, 高橋 けんし^{1,2}, 松見 豊^{1,2}
- 3P082 イオン衝突で生成した2価ベンゼンの解離 (都立大院理) Veshapidze Giorgi, 松岡 登行, 初田 良平, 城丸 春夫, 阿知波 洋次
- 3P083 分子2電子励起状態ダイナミクス研究のための第2世代コインシデンス電子エネルギー損失分光システムの開発 (東工大大院理工) 中里 智治, 小田切 丈, 福澤 宏宣, 宮城 晴英, 河内 宣之
- 3P084 エタノールの強光子場誘起解離性イオン化反応: レーザーパルス波形依存性 (東大院理¹, 慶大理工²) 板倉 隆二^{1,2}, 山内 薫¹, 矢澤 洋紀², 岡本 達佳², 田辺 孝純², 山中 美緒², 神成 文彦²
- 3P085 軟X線領域の強光子場と分子の相互作用: H₂, D₂の解離性イオン化 (東大院理¹, 理研²) 星名 賢之助¹, 菱川 明栄¹, 佐甲 徳栄¹, 山内 薫¹, 高橋 栄治², 鍋川 康夫², 緑川 克美²
- 3P086 強磁場中での光励起分子のダイナミクス研究のための分子線装置の製作 (物材機構 強磁場セ) 木村 恭之, 北濱 康孝, 高澤 健
- 3P087 NO二量体の紫外光解離の実時間観測: 励起波長依存性に関する研究 (理研¹, アムステルダム大²) 坪内 雅明¹, Cornelis A. de Lange², 鈴木 俊法¹

- 3P088 強光子場による分子配向と分子パラメータの非対称性 (東大院理) 竹本 典生, 佐甲 徳栄, 山内 薫
- 3P089 高速内部転換する多原子分子系の電荷雲の制御 (理研¹, 東大工²) 鈴木 喜一¹, 山下 晃一²
- 3P090 中性子コンプトン散乱によるサブフェムト秒核ダイナミクスの理論的研究 (東北大院理¹, ベルリン自由大学²) 須藤 雅彦¹, 田名部 誠一¹, 河野 裕彦¹, 藤村 勇一¹, Joern Manz²
- 3P091 III-V族窒化物結晶成長時の寄生反応におけるt-ブチル置換基効果 (京大院工) 岡田 敬信, 土井 謙太郎, 中村 康一, 立花 明知
- 3P092 ナフタレン陽イオンを介する水素分子生成反応の理論的解析 (静岡大理¹, 静岡大工²) 平間 睦¹, 石田 俊正², 相原 惇一¹
- 3P093 局所内挿法による多原子系の反応ポテンシャル面 (静岡大工¹, Northwestern大化学²) 石田 俊正¹, George C. Schatz²

【理論化学/計算化学】

- 3P094 解析的微分による化学シフトの相対論的效果の計算 (北見工大) 工藤 慶一, 福井 洋之
- 3P095 O(³P)+O₂衝突過程に対するスピン軌道相互作用の効果 (マックスプランク研) 田代 基慶, Reinhard Schinke
- 3P096 *ab initio* 経路積分法による二水素結合機構およびその同位体効果の解析 (横浜市大理¹, 原研², JST PRESTO³) 林 愛子¹, 志賀 基之², 立川 仁典^{1,3}
- 3P097 水素移動反応における速度論的同位体効果に関する理論的研究 (JST¹, 立教大理², 横市大理³, 産総研⁴) 石元 孝佳¹, 常盤 広明², 立川 仁典³, 長嶋 雲兵⁴
- 3P098 経路積分分子動力学法による比熱の精密計算 (原研¹, 産総研²) 志賀 基之¹, 篠田 渉²
- 3P099 *ab initio* 分子軌道法によるCoCNの分子定数の予測 (産総研グリッド研¹, 筑波大数理²) 長嶋 雲兵^{1,2}, 福井 玲^{1,2}, 平野 恒夫¹
- 3P100 光異性化反応HFC=N FC=NHに関する理論的研究 (お茶大理¹, 埼玉大理²) 赤塚 真史子¹, 武次 徹也¹, 高柳 敏幸²
- 3P101 電子励起状態における第一原理シミュレーション: スチルベンの*cis-trans*異性化反応 (お茶大院物質科学) 渡邊 由美子, 武次 徹也
- 3P102 溶液内電子状態間交差に対する理論的アプローチ: RISM-SCF法の適用 (京大院理) 山崎 祥平, 加藤 重樹
- 3P103 積分方程式理論における溶媒和自由エネルギー表式の比較と検討 (名大院情報科学) 佐藤 和人, 天能 精一郎
- 3P104 Fragment MO法による局所構造最適化に関する考察 (豊橋技科大¹, 科技団², 神戸大³) 杉木 真一郎^{1,2}, 栗田 典之¹, 関野 秀男¹, 田中 成典³
- 3P105 フラグメント分子軌道法による高次の物性量算定 (豊橋技科大¹, JST²) 澤田 寛明¹, 杉木 真一郎^{1,2}, 関野 秀男¹
- 3P106 DFT法における交換汎関数の長距離補正による分極率の計算 (豊橋技科大¹, 東大²) 前田 康行¹, 神谷 宗明², 関野 秀男¹
- 3P107 分子間相互作用研究のための高精度計算ライブラリの開発 (北教大釧路) 小原 繁
- 3P108 相関用分極関数を付随したモデル内殻ポテンシャル(MCP)の基底関数の提案 (青森大¹, 北大院理², 九大院総理工³, 富士総研⁴, アルバート大⁵) 長内 有¹, 野呂 武司², 森 寛敏³, 平山 亮³, 本田 宏明⁴, M. Klobukowski⁵, 三好 永作³
- 3P109 変分崩壊のない4成分相対論的基底関数II (九大院理¹, 名市大²) 渡辺 祥弘¹, 舘脇 洋²
- 3P110 原子の電子間角度の上界と下界 (室蘭工大) 古賀 俊勝, 松山 永
- 3P111 直流電場下における水素分子の第2イオン化過程に対する正準変換遷移状態理論 (京大院理¹, ウェストバージニア大², ジョージア工大³) 河合 信之輔¹, Charles Jaffé², Turgay Uzer³
- 3P112 CAS-VB法と*ab initio*分子動力学を用いた反応過程における化学結合の記述 (九州大院理) 野口 奈央, 中野 晴之

- 3P113 観測・デコヒーレンスを利用した量子制御 (慶大理工) 菅原 道彦
- 3P114 水溶液中におけるヨウ素分子イオンの超高速光解離のレーザー最適制御：混合量子・古典分子動力学シミュレーション (東北大院理) 大槻 幸義, 西山 嘉一, 加藤 毅, 藤村 勇一
- 3P115 *ab initio* 量子波束法の開発 - 多電子構造の動力的シミュレーション - (横浜市大理¹, 原研², JST PRESTO³) 朽津 敬史¹, 志賀 基之², 立川 仁典^{1,3}
- 3P116 フェムト秒ポンプ-ダンプ-プローブ光電子分光による基底状態プロトン移動の実時間観測 (東大院理¹, 東大院総合²) 新崎 康樹¹, 山崎 健太郎¹, 高塚 和夫^{1,2}
- 3P117 振動励起の効果を考慮した波束法による解離性再結合反応 $\text{HCNH}^+ + e^-$ の分岐比に関する理論的研究 (お茶大理¹, 東大院工²) 石井 啓策¹, 武次 徹也¹, 山下 晃一²
- 3P118 2成分ボーズ・アインシュタイン凝縮ガスにおけるシュレーディンガーの猫状態の生成・崩壊・復活現象の量子位相ダイナミクス (阪大院基礎工¹, 阪大院理²) 中野 雅由¹, 岸 亮平¹, 新田 友茂¹, 山口 兆²
- 3P119 Linear vibronic coupling modelによるポリオキシベンゼンラジカルカチオンの振電相互作用の計算および蛍光挙動の解析 (金沢大理¹, 京工織大工芸²) 加藤 信彦¹, 松本 大輔¹, 井田 朋智¹, 遠藤 一央¹, 一ノ瀬 暢之²
- 3P120 時間依存密度汎関数法を用いたポルフィリン二量体の電荷移動状態に関する理論的研究 (東北大院理) 中井 克典, 加藤 毅, Riadh Sahnoun, 河野 裕彦, 藤村 勇一
- 3P121 強レーザー場によるイオン化の光電子スペクトルの理論計算 分子内電子ダイナミクスの効果 (東北大院理¹, Bielefeld大²) 菅野 学¹, 加藤 毅¹, 河野 裕彦¹, F. H. M. Faisal², 藤村 勇一¹
- 3P122 アームチェア型ナノチューブにおける許容遷移の偏光特性に関する理論的研究 (信州大繊維) 野村 泰志, 藤田 紘也, 成田 進, 渋谷 泰一
- 3P123 CrNの電子構造 (東京農大) 阪井 健男
- 3P124 SiとCの¹D^oと³D^oの電子状態について (名市大システム自然科学¹, 中京大教養²) 森山 浩子¹, 山本 茂義², 館脇 洋¹
- 3P125 半古典スペクトルの新しい計算法と古典軌道によるスペクトルの起源の解明 (東大院総合) 牛山 浩, 高塚 和夫
- 3P126 ダイレクトアルゴリズムSAC/SAC-CI法の応用 (京大院工) 福田 良一, 中辻 博
- 3P127 N,N-ジメチルアミノフェニルアセチレンの光化学的挙動に関する理論的研究 (秋田大工学資源) 天辰 禎晃
- 3P128 Highly Charged States of C₆₀ Molecule: a DFT Study (東北大院理) Riadh Sahnoun, 河野 裕彦, 藤村 勇一
- 3P129 二核二電子分子のシュレーディンガー方程式のFree ICI法による解 (京大院工) 黒川 悠索, 中嶋 浩之, 中辻 博
- 3P130 SAC/SAC-CI法の解析的エネルギー微分の一般式 (京大院工¹, 京大福井セ²) 長谷川 淳也¹, 中辻 博^{1,2}
- 3P131 少数電子原子のシュレーディンガー方程式を解く：Free ICI法による解法 (京大院工) 中嶋 浩之, 黒川 悠索, 中辻 博
- 3P132 局所射影軌道を用いた摂動展開に適しているゼロ次ハミルトニアンを選択 (広島大QuLiS¹, 九大情基セ²) 岩田 末廣¹, 永田 武史²
- 3P133 時間依存変分法における波動関数の感度方程式 (室蘭工大) 太田 勝久

ポスター発表4日目 (9月30日, 15時20分から)

【伝導性・磁性物質】

- 4P001 ベンゾテトラチアフルバレンチオキノン-1,3-ジチオールメチドとその関連するドナー分子の FeX_4 塩の伝導・磁気性質 (阪府大院工¹, 阪府大先端研², CREST-JST³, 理研⁴) 平岡 崇志¹, 藤原 秀紀^{2,3}, 杉本 豊成^{2,3}, 野口 悟^{1,3}, 川又 修一¹, 石田 武和^{1,3}, 香取 浩子⁴
- 4P002 アルキルピリジニウム置換フェルダジラジカルの $\text{Ni}(\text{dmit})_2$ 塩の構造・磁性・伝導性 (愛媛大理¹, 広島大理²) 向 恭平¹, 芝 大介¹, 小原 敬士¹, 東 長雄¹, 向井 和男¹, 奥田 一樹², 井上 克也²
- 4P003 (EDO-TTF)₂SbF₆の構造と物性 (京大院理¹, 京大低物セ², 京大院工ネ科³) 添田 雅也¹, 矢持 秀起², 斎藤 軍治¹, 松本 一彦³, 萩原 理加³
- 4P004 フッ化四ケイ素雲母層間における長鎖アルキルジアミン-ジアンモニウム系の構造とプロトン伝導性 (防大応化¹, 筑波大化²) 篠原 絵美¹, 梅村 泰史¹, 石丸 臣一²
- 4P005 BESTと四面体アニオンとの分子性伝導体の構造及び物性 (分子研& JST, CREST¹, 東大院理²) 崔 亨波¹, 大坪 才華¹, 岡野 芳則¹, 高橋 一志¹, 小林 速男¹, 小林 昭子²
- 4P006 環状チアジラジカルBDTAがつくる錯体の多次元構造と物性 (名大院理¹, 名大物質国際研²) 梅園 義勝¹, 藤田 渉², 阿波賀 邦夫¹
- 4P007 ハロゲン置換環状チアジラジカルとその部分酸化塩の合成と物性 (名大院理¹, 物質国際セ²) 田中 利幸¹, 藤田 渉², 阿波賀 邦夫¹
- 4P008 ニトロキシラジカルを含んだドナー分子の合成と物性 (分子研&JST CREST¹, 総研大物理², 阪府大先端研³, 東大院理⁴) 大坪 才華^{1,2}, 崔 亨波¹, 高橋 一志¹, 小林 速男^{1,2}, 藤原 秀紀³, 藤原 絵美子⁴, 小林 昭子⁴
- 4P009 キラル磁性体の構造と磁性に関する研究 (総研大¹, 広大院理², 都立大院理³, ILL⁴, Zaragoza Univ.⁵) 沼田 陽平¹, 奥田 一樹¹, 井上 克也², 吉田 祐輔³, 菊地 耕一³, Garry McIntyre⁴, Clara Gonzalez⁴, Javier Campo⁵, Fernando Paracio⁵
- 4P010 核酸塩基を置換基として有する基底3重項ピラジカルの合成と磁性 (阪市大院理¹, 科学技術振興機構さきがけ²) 田中 啓之¹, 塩見 大輔^{1,2}, 伊瀬 智章^{1,2}, 佐藤 和信¹, 工位 武治¹
- 4P011 核酸塩基を導入したニトロニルニトロキシドモノラジカルの構造と磁性 (阪市大院理¹, 科学技術振興機構さきがけ²) 野崎 幹人¹, 伊瀬 智章^{1,2}, 塩見 大輔^{1,2}, 佐藤 和信¹, 工位 武治¹
- 4P012 フェナレニルを基盤とした安定中性ラジカル: 溶液および固体状態における構造変化とサーモクロミズム (阪大院理¹, 科技機構さきがけ², 阪市大院理³, 九大院理⁴, 東大新領域⁵, 横浜国大工⁶, 東工大理⁷, リガク⁸) 鈴木 修一¹, 森田 靖^{1,2}, 福井 晃三², 中澤 重顕³, 北川 宏⁴, 岸田 英夫⁵, 岡本 博⁵, 内藤 晶⁶, 関根 あき子⁷, 大橋 裕二⁷, 城 始勇⁸, 佐々木 勝成⁸, 佐藤 和信³, 塩見 大輔³, 工位 武治³, 中筋 一弘¹
- 4P013 カーボンナノチューブの磁気配向と温度変化 (広大院理) 藤原 昌夫, 谷本 能文
- 4P014 クロム3価イオンを含む新規キラル磁性体の構造と物性 (広大理) 越智 康博, 山田 公一, 井上 克也
- 4P015 Mo^V を用いたキラルマグネットの作成 (広島大¹, 総研大²) 東川 大志¹, 山田 公一¹, 奥田 一樹², 沼田 陽平², 井上 克也¹
- 4P016 ランタノイドを含むシアノ架橋キラル磁性体の合成と磁気及び光学的性質 (広島大院理) 山田 公一, 井上 克也
- 4P017 重水素化MDT-TSF(メチレンジチオテトラセレナフルバレン)のラジカル塩の物性 (広大院工¹, 阪大産研 CREST²) 古家 圭人¹, 瀧宮 和男¹, 大坪 徹夫¹, 安蘇 芳雄²
- 4P018 BDH-TTPおよびDHOT-TTPの FeX_4 (X = Cl, Br)塩の構造と物性 (兵庫県立大院理¹, 都立大院理²) 山田 順一¹, 梶田 憲一¹, 坏 広樹¹, 中辻 慎一¹, 菊地 耕一²
- 4P019 有機安定ラジカルアニオンTEMPO-N(CH₃)COCH₂SO₃とその電荷移動塩の構造と物性 (兵庫県立大院理) 坏 広樹, 山田 順一, 中辻 慎一
- 4P020 フェロセン誘導体アニオンを対イオンとして含む有機伝導体 -(BEDT-TTF)₄(Fc-(CONHCH₂SO₃)₂)₂·4H₂Oの構造と物性 (兵庫県立大院理) 古田 圭吾, 坏 広樹, 山田 順一, 中辻

慎一

- 4P021 窒素系架橋配位子で部分置換した新規Mn12核錯体の合成と単一分子磁性 (近畿大理工¹) 鍋井淳宏¹, 黒田 孝義¹, 前川 雅彦¹, 宗像 恵¹
- 4P022 ジチオオキサミダト銅錯体におけるプロトン輸送特性 (九大院理¹, 阪大院理², 筑波大化³, 物材機構⁴) 長尾 祐樹¹, 小島 隆彦¹, 北川 宏¹, 久保 孝史², 中筋 一弘², 石丸 臣一³, 池田 龍一⁴
- 4P023 MMX-Chain錯体Pt₂(C₂H₅CS₂)₄IIにおけるX線散漫散乱の圧力依存性 (九大院理¹, 物構研²) 小林厚志¹, 北川 宏¹, 若林 裕助², 澤 博²
- 4P024 直鎖型部分酸化複核白金錯体の合成と電子物性 (九大理) 松林 高紀, 小林 厚志, 小島 隆彦, 北川 宏
- 4P025 新規なPDT-TTP系導体の構造と物性 (京大院工¹, JST-CREST²) 大仁 將揮¹, 村上 康浩¹, 西田 元哉¹, 御崎 洋二¹, 田中 一義^{1,2}
- 4P026 BTM-TTP塩の構造と物性 (京大院工¹, JST-CREST²) 野田 真奈美¹, 御崎 洋二¹, 田中 一義^{1,2}
- 4P027 MCl₄(M=Ga, Fe)を対イオンとしたCHTM-TTP系伝導体の構造と物性 (京大院工¹, JST-CREST², 東工大院理工³) 御崎 洋二¹, 吉田 真司¹, 野田 真奈美¹, 谷口 正輝¹, 中野 義明^{1,2}, 伊藤 彰浩^{1,2}, 田中 一義^{1,2}, 森 健彦³

【液体・溶液】

- 4P028 配向J会合体の作成と分光測定 (物材研) 北濱 康孝, 木村 恭之, 高澤 健
- 4P029 液相相分離の新しい検出方法の開発と各種溶液の相図の作成 (千葉大理¹, 千葉大VBL², British Columbia大³, 千葉大院自然科学⁴) 加藤 仁¹, 片柳 英樹², 古賀 精方³, 西川 恵子⁴
- 4P030 ディスコティック液晶 (C₁₃H₂₇COO)₆-truxeneの相転移と粘性 (福岡大理¹, 岐阜大工²) 祢宜田 啓史¹, 川野 ちはる¹, 守屋 慶一²
- 4P031 高温高圧下での分光セルの開発と応用 Co²⁺の水和構造変化 (京大院理¹, 京大IIC², 奈良女³) 藤澤 知績¹, 丸 恵美¹, 網田 富士嗣¹, 木村 佳文², 原田 雅史³
- 4P032 ゆらぎに基づいた超臨界流体におけるエントレーナ効果の解析 (千大院自) 中川 真人, 新井 亜沙子, 森田 剛, 西川 恵子
- 4P033 超臨界流体中でのレーザーアブレーションによる金ナノ粒子の選択的創製 (千葉大院自然¹, 千葉大理²) 野口 和馬¹, 齋藤 健一²
- 4P034 小角X線散乱法による高温高圧アルコール水溶液のゆらぎ (千葉大院自然科学) 森田 剛, 西川 恵子
- 4P035 超臨界状態におけるベンゼン/水均一相のゆらぎ構造解析 (千葉大院自然科学) 松井 仁司, 新井 亜沙子, 森田 剛, 西川 恵子
- 4P036 小角X線散乱法による超臨界キセノンのゆらぎ構造の解析 (千葉大院自然) 高橋 宜弘, 田中 良忠, 森田 剛, 西川 恵子
- 4P037 X線をプローブとした超臨界二酸化炭素 - ナフタレン系の密度、溶解度、ゆらぎ構造の解析 (千葉大院自然科学) 田中 良忠, 中川 真人, 森田 剛, 西川 恵子
- 4P038 エタノール水溶液におけるOHプロトンの交換速度定数と縦緩和速度 (立教大理) 清水 千種, 市川 有二郎, 秋山 稔
- 4P039 水の水素結合ネットワークの顕著な濃度依存性 有機溶媒中における水の振動結合音 ($\nu_2 + \nu_3$) の近赤外吸収スペクトル変化 (千葉大院自然¹, 千葉大理³) 南 孝将², 齋藤 健一², 西川 恵子¹
- 4P040 超臨界溶液における溶質 溶媒間の引力・斥力相互作用 - 溶媒によるラマンスペクトルのシフトと振動緩和 - (千葉大院自然¹, 千葉大理²) 佐々木 順悟¹, 齋藤 健一², 西川 恵子¹
- 4P041 超臨界シクロヘキサンのラマンスペクトルの密度依存性 - 骨格伸縮振動バンドの線形と偏光解消度 - (千葉大院自然¹, 千葉大理²) 大竹 恵子¹, 齋藤 健一², 西川 恵子¹
- 4P042 イオン液体中での拡散ダイナミクスに関する研究 (京大院理¹, 京大IIC²) 福田 将典¹, 木村 佳文², 寺島 正秀¹

【電子スペクトル】

- 4P043 プロトン移動型レーザ色素薄膜の誘導放出特性 (信州大繊維) 坂井 賢一, 続木 武雄, 伊藤 恵啓, 市川 結, 谷口 彬雄
- 4P044 芳香族分子固体における中赤外自由電子レーザー誘起プロセス (東大院理¹, 東大物性研², 東理大理³, 東理大理工⁴, 東理大総合研⁵) 登野 健介¹, 鈴木 孝宗², 尾藤 宏達¹, 近藤 寛¹, 太田 俊明¹, 佐藤 伸¹, 濱口 宏夫¹, 小城 吉寛³, 築山 光一³, 黒澤 雅宏⁴, 中井 浩二⁴, 岩田 章⁵, 黒田 晴雄⁵
- 4P045 赤外自由電子レーザーによる気相アンモニア分子の振動励起過程 (東理大理) 小城 吉寛, 川下 雅史, 築山 光一
- 4P046 NOのRydberg状態における一光子レーザー駆動四波混合過程 (東理大理) 小田部 やよい, 小城 吉寛, 築山 光一
- 4P047 ハロゲン化炭化水素と塩素原子の電荷移動錯体生成 (京都大院工¹, 広島市大情報科学²) 伊藤 有輝¹, 江波 進一¹, 橋本 訓¹, 川崎 昌博¹, 中野 幸夫², 石渡 孝²
- 4P048 ジェット冷却された7-アザインドール・水クラスターの分光学的研究 励起状態多重プロトン移動反応は生じているか (九大院理) 原 暁彦, 迫田 憲治, 関谷 博
- 4P049 孤立気相中における2-ヒドロキシキノリンダイマーの励起状態2重プロトン移動反応の分光学的研究 (九大院理) 馬場園 誠, 迫田 憲治, 関谷 博
- 4P050 孤立気相中の3-メチル-7-アザインドール二量体の励起状態ダブルプロトン移動 分子の対称性とエキシトン相互作用 (九大院理¹, 東大院総文², 分子研³) 原 暁彦¹, 河本 裕介¹, 三好 理子¹, 迫田 憲治¹, 大橋 和彦¹, 井口 佳哉², 西 信之³, 関谷 博¹
- 4P051 ピコ秒時間分解赤外・紫外ポンププローブ法による気相ベンジルアルコール類のOH伸縮振動の分子内振動緩和の実時間観測 (東北大院理¹, 広島大院理²) 山田 勇治¹, 江幡 孝之²
- 4P052 生体関連分子の気相分光のための超臨界流体ジェット法の開発 (東工大資源研¹, JST/PRESTO²) 石内 俊一^{1,2}, 藤井 正明¹
- 4P053 ジェット冷却されたcarvoneの多光子イオン化スペクトル (北大院理) 江川 徹, 峯山 政宏, 山本 大輔
- 4P054 非経験的分子軌道法によるダイオキシンの蛍光量子収率に関する考察 - 励起状態における構造緩和について - (阪市大院理) 古藤 輝明, 豊田 和男, 佐藤 和信, 塩見 大輔, 工位 武治
- 4P055 CO分子とCO₂分子の内殻光電子振動分光と内殻イオン化状態の構造 (東北大多元研¹, ウブサラ大², 広大院理³, 上智大理工⁴, SPring-8/JASRI⁵) 松本 真¹, 藤原 克利¹, Johan Soderstrom², 角南 哲志³, 田原 史崇³, 吉田 啓晃³, 田中 隆宏⁴, 中川 一樹⁴, 北島 昌史⁴, 田中 大⁴, Alberto De Fanis⁵, 為則 雄祐⁵, 上田 潔¹
- 4P056 低密度分子雲における未同定線の観測と強度相関 (岡山大院理¹, 岡山大理², 岡山天体物理観測所³, ヘイロフスキー研究所⁴) 多田 裕之¹, 川口 建太郎², 泉浦 秀行³, Svatopluk Civic⁴, Tereza Sedivcova⁴
- 4P057 ヨウ素分子の1_u(¹D) - 2_g(¹D)イオン対状態間の摂動 (広島市大情報) 笠口 博美, 中野 幸夫, 石渡 孝
- 4P058 学習アルゴリズムを用いた電子スペクトルの回転解析 (広島市大情報) 田吹 修宏, 福島 勝, 石渡 孝
- 4P059 2波長Dip分光法を応用したファーフィールド超解像顕微鏡の開発(VII) -高繰り返し計測システムの構築- (東工大資源研¹, オリンパス(株)²) 渡邊 武史¹, 池滝 慶記², 藤井 正明¹
- 4P060 2波長Dip分光法を応用したファーフィールド超解像顕微鏡の開発 -点像分布関数の理論的考察- (オリンパス¹, 東工大²) 池滝 慶記¹, 渡邊 武史², 酒井 誠², 石内 俊一², 藤井 正明²
- 4P061 フェノール-d₆分子のドップラーフリー高分解能分光 (神戸大分子フォト¹, 京大院理²) 豊谷 仁男¹, 笠原 俊二¹, 馬場 正昭², 加藤 肇¹
- 4P062 Doppler-free two-photon excitation spectroscopy and the Zeeman effect of the 14₀1₀ of C₆D₆ molecule (神戸大分子フォト¹, 京大院理²) Baek Dae Yul¹, 御園 雅俊¹, 大久保 光士¹, 馬場 正昭², 加藤 肇¹
- 4P063 分子線を用いた重水素化ベンゼン分子の高分解能分光と磁場効果 (神戸大分子フォト¹, 京大院理²) 土肥 敦之¹, 笠原 俊二¹, 馬場 正昭², 加藤 肇¹

- 4P064 多光子共鳴イオン化法によるアセチレンgerade Rydberg状態の研究 (東工大院理工) 三澤 健太郎, 辻 和秀, 河合 明雄, 渋谷 一彦
- 4P065 SEP分光法によるC₃Nラジカルの A² 状態の観測 (東大院総合) 本良 千隼, 住吉 吉英, 遠藤 泰樹
- 4P066 アセトンHOMOの電子運動量分布の衝突エネルギー依存性 (東北大多元研¹, 分子研²) 趙 泰慶¹, Yugal Khajuria², 渡辺 昇¹, 高橋 正彦¹, 宇田川 康夫¹
- 4P067 分子内電荷移動反応における構造変化の直接観測-シアノフェニルジシランの過渡赤外分光- (東北大院理) 杉山 益之, 石川 春樹, 瀬高 渉, 吉良 満夫, 三上 直彦
- 4P068 アズレンメチル誘導体のS₁電子状態における内部転換速度 (日大工) 沼田 靖, 豊島 哲, 奥山 克彦, 安並 正文, 鈴鹿 敢
- 4P069 ポリマー中におけるアズレン電場吸収、電場発光スペクトルの特異的な温度依存性 (北大院地球環境¹, 北大電子研²) 吉沢 友和¹, 太田 信廣^{1,2}
- 4P070 アセトアルデヒドの光解離反応速度の量子化学計算による考察 (農工大連合院¹, 農工大農², 農工大院共生科学技術³) 増子 栄一¹, 松野 裕子², 高柳 正夫³
- 4P071 スチルバゾリウムベタインの電子スペクトルと量子化学計算(2) (東農工大BASE¹, 東農工大連合院², 東農工大院共生科学技術³) 山本 いづみ¹, 増子 栄一², 高柳 正夫³
- 4P072 1,4-ナフトキノン類の双極子モーメント(3) (弘前大院理工) 佐藤 岳彦, 喜多 昭一, 森 聡明, 須藤 進

【励起状態動力学】

- 4P073 ピロール・アンモニアクラスターの光誘起水素原子移動反応 (広島大院理¹, 東北大院理², パリ南大学³, ポーランド科学アカデミー⁴) 江幡 孝之¹, 三上 直彦², C. Dedonder-Lardeux³, C. Jouvet³, A. L. Sobolewski⁴
- 4P074 Third-order nonlinear properties of CdTe nanoparticles by femtosecond Z-scan and four-wave mixing spectroscopy (関西学院大院理¹, 国立産総研²) Pan Lingyun¹, 中山 純一¹, 玉井 尚登¹, 鎌田 賢司²
- 4P075 フェムト秒過渡二色性測定によるポリ(N - ビニルカルバゾール)系におけるホール非局在化過程溶媒効果 (阪大院基礎工¹, 極限セ², 阪大V B L³) Khan Sazzadur Rahman^{1,2,3}, 石橋 千英^{1,2}, 伊藤 冬樹^{1,2,3}, 宮坂 博^{1,2}
- 4P076 超高速分光法による糖水溶液中の分子ダイナミクスの測定 (阪大院基礎工) 小笠原 麻友, 中川 佑歌子, 剣持 淳也, 松田 広久, 長澤 裕, 岡田 正, 宮坂 博
- 4P077 ポンプ・白色プローブ時間分解近接場顕微鏡のポルフィリンJ-会合体へ適用 (分子研) 永原 哲彦, 井村 考平, 岡本 裕巳
- 4P078 開口カンチレバー式フェムト秒時間分解走査型近接場光学顕微鏡の開発：時間分解能の評価 (産総研¹, NEDO²) 古部 昭広¹, 玉城 喜章^{1,2}, 加藤 隆二¹
- 4P079 低密度励起ダイナミクス観測のための高感度過渡吸収分光計の開発 (産総研) 村井 美紀, 玉城 喜章, 古部 昭広, 渡邊 禎之, 加藤 隆二
- 4P080 高感度可視・近赤外過渡吸収分光による多層構造有機薄膜の電荷分離過程の追跡 (産総研) 渡邊 禎之, 村井 美紀, 古部 昭広, 玉城 喜章, 加藤 隆二
- 4P081 紫外極短パルス光の位相変調の試み (理研・分子分光¹, 理研・レーザー物理工学²) 竹内 佐年¹, 石井 邦彦¹, 須田 亮², 緑川 克美², 田原 太平¹
- 4P082 ピロール環を有するカルコン類縁体の分子内水素結合と光異性化反応ダイナミクスの研究 (筑波大化) 金田 芳, 新井 達郎
- 4P083 デンドリマー光エネルギー捕集の初期過程：1,3,5-Tris(phenylethynyl)benzeneの電子励起状態の構造とダイナミクス (東大院理¹, 理研²) 野本 知理¹, 細井 晴子², 藤野 竜也², 田原 太平², 浜口 宏夫¹
- 4P084 電子励起アセチレンのungerade振動準位構造の赤外-紫外 2重共鳴分光 (日女大理¹, 城西大理², UBC³) 山北 奈美¹, 今城 尚志¹, 土屋 荘次², Anthony J. Merer³
- 4P085 低温固体中におけるICT現象 - ジメチルアミノベンゾニトリルとシアノフェニルピロールにつ

いて - (日大工) 小館 知史, 鈴鹿 敢

- 4P086 金ナノロッドのプラズモンモードマッピングと時間分解近接場分光 (分子研) 井村 考平, 永原 哲彦, 岡本 裕巳
- 4P087 非走査型フェムト秒蛍光二次元イメージ顕微鏡の開発 (理研) 藤野 竜也, 藤間 卓也, 田原 太平
- 4P088 アロエサポナリンの光化学反応の研究 (愛媛大理¹, 愛媛大支援セ², 産総研³) 日野 めぐみ¹, 竹本 真唯¹, 倉光 誠¹, 藤井 亜紀子¹, 長岡 伸一¹, 榎本 茜², 宇野 英満², 長嶋 雲兵³
- 4P089 光音響分光法によるシアノフェノール類の励起状態プロトン移動反応の研究 (群馬大工) 金子 茂夫, 塩原 悟, 吉原 利忠, 飛田 成史
- 4P090 o-アミノアセトフェノン誘導体の励起状態緩和過程: メチル基の面外振動の寄与 (群馬大工) 島田 博文, 中村 昭仁, 小野寺 達司, 村野 真也, 吉原 利忠, 飛田 成史
- 4P091 機能性置換基の導入によるポリシランの耐光性向上の機構 (群馬大工) 堀内 宏明, 趙 常礼, 奥津 哲夫, 平塚 浩士
- 4P092 ベンジルシラン誘導体の特異な励起状態 (群馬大工) 平塚 浩士, 米元 篤史, 草刈 伸治, 堀内 宏明, 奥津 哲夫, 工藤 貴子
- 4P093 レーザー多光子励起によるフォトクロミック反応ダイナミクス: フルギド類 (阪大院基工¹, 極限セ², 横国大院工³) 石橋 千英^{1,2}, 村上 昌孝¹, 宮坂 博^{1,2}, 横山 泰³
- 4P094 フラボノール誘導体のピコ秒時間分解蛍光スペクトル - 電荷移動・プロトン移動の温度依存性 - (東工大資源研¹, 法政大情²) 鈴木 亜弥¹, 蛭間 愛美¹, 狩野 覚², 和田 昭英¹
- 4P095 フェムト秒パルス最適化波形整形システムの高出力化およびペリレンの発光増大に関する考察 (東工大資源研¹, 法政大情²) 尾竹 郁也¹, 狩野 覚², 和田 昭英¹
- 4P096 分子振動波束のレーザー最適制御理論 (東大院工) 鈴木 進吾, 山下 晃一
- 4P097 円錐交差を通したロドプシンのフェムト秒異性化反応の量子制御 (東北大院理¹, ミュンヘン工科大²) 安部 真由美¹, 大槻 幸義¹, 藤村 勇一¹, Wolfgang Domcke²
- 4P098 N₂⁺イオンの内部原子価状態と解離ダイナミクス (九大院総理工¹, 青森大²) 平山 亮¹, 柴崎 昭宏¹, 長内 有², 三好 永作¹
- 4P099 スピン軌道相互作用を考慮したCI計算によるBiH分子のポテンシャル曲線とその解離ダイナミクス (九大院総理工¹, 北大院理²) 柴崎 昭宏¹, 山本 典史¹, 野呂 武司², 三好 永作¹
- 4P100 3次元ポテンシャルに基づくSiH₂(A, B)状態の解離過程 (新潟大理¹, 分子研²) 徳江 郁雄¹, 山崎 勝義¹, 南部 伸孝²
- 4P101 シクロヘキサジエンの光開環反応の反応動力学 (分子研¹, 静岡大²) 田村 宏之¹, 南部 伸孝¹, 中村 宏樹¹, 石田 俊正²

【理論化学/計算化学】

- 4P102 9-ビニルアントラセンの捩れ振動に関する量子化学計算 (星薬大) 坂田 健
- 4P103 特定の反応物と生成物とを結ぶ遷移状態の効率的探索法の開発: 超球面探索法の応用 (東北大院理) 大野 公一, 前田 理
- 4P104 節領域計数による分子軌道の分類 (中京大情報¹, 中京大教養², 名市大自然³) 秦野 やす世¹, 山本 茂義², 館脇 洋³
- 4P105 第2周期原子(Si, P, S)核上のスピン密度計算とLPN解析 (筑波大化) 下堂 靖代, 守橋 健二
- 4P106 二体のスピン相関関数とMEDF法を用いた有効交換積分値に関する理論的研究 (阪大院理) 北河 康隆, 山中 秀介, 武田 亮, 庄司 光男, 小泉 健一, 山口 兆
- 4P107 デンドリティック系における非線形光学特性に関する理論的研究 (阪大院基礎工¹, 阪大院理²) 岸 亮平¹, 中野 雅由¹, 新田 友茂¹, 高畑 昌弘², 山口 兆²
- 4P108 キノイド型ポルフィリンダイマーの電子状態と非線形光学応答に関する理論的研究 (新日鐵先端研¹, 北九市大国際環境工², 京大院工³) 松崎 洋市¹, 野上 敦嗣², 田中 一義³
- 4P109 有機EL錯体 2-(o-hydroxyphenyl)benzoxazole の電子構造: 置換基と溶媒効果が配位構造に及ぼす影響 (九大院総理工) 森 寛敏, 樗木 久之, 山本 典史, 三好 永作

- 4P110 遺伝的アルゴリズムによるベンゼンクラスターの構造最適化(北大院理) 竹内 浩
- 4P111 有限温度における水クラスターのグラフ表現を用いた解析(広大院理・広島大QuLiS) 三宅 敏子, 相田 美砂子
- 4P112 Ni、Pd、Pt金属クラスターと水素分子の相互作用の理論的研究(筑波大化¹, 科技振², 産総研グリッド³) 増山 敬¹, 渡邊 寿雄², 稲富 雄一², 長嶋 雲兵^{1,3}
- 4P113 錯体型ホスト化合物における金属-金属間相互作用に関する理論的研究(名工大院工) 和佐田 祐子, 上村 哲也, 船橋 靖博, 小澤 智宏, 実川 浩一郎, 増田 秀樹
- 4P114 亜鉛二価イオンとピリジン系溶媒分子の配位構造に関する量子化学的考察(岐大地域科学¹, 名工大院理², 名大院理³) 添田 正樹¹, 和佐田 裕昭¹, 和佐田 祐子², 橋本 智裕¹, 舟橋 重信³
- 4P115 銅表面上のNOの拡散メカニズムのDFTモデル計算(北大院工¹, 京大VBL²) 井山 哲二¹, 川畑 弘², 田地川 浩人¹
- 4P116 計算化学的手法によるCX₂O (X = F or Cl) の気相加水分解反応の解析:カルボニルハライド類の環境動態に関する考察(産総研) 内丸 忠文, 都築 誠二, 杉江 正昭, 徳橋 和明, 関屋 章
- 4P117 [M=CH₂]⁺ (M=Cr,Mn,Fe) の解離曲線に関する理論的研究(三重大工) 桂田 武治, 車 匡史, 勝田 直樹, 佐藤 寛之, 三谷 昌輝, 吉岡 泰規
- 4P118 Quantum chemical study of the interaction of short-chain poly(oxyethylene)s with water in the solution(広島大院理) Wahab Shaheda, 原田 隆範, 松原 世明, 相田 美砂子
- 4P119 水のイオン積 Kw の理論計算(名大院理) 矢ヶ崎 琢磨, 斉藤 真司, 大峰 巖
- 4P120 Isobaric-multithermalアンサンブルでのL-J流体の液体-固体相転移の研究(中京大教養¹, 分子研², 総研大³) 六車 千鶴¹, 岡本 祐幸^{2,3}
- 4P121 S_N2反応への溶媒効果: Direct Ab-initio Trajectory Study(北大院工) 田地川 浩人
- 4P122 ヘテロ原子を含むケイ素環状化合物の分解反応のab initio分子軌道計算による研究(群馬大院工) 根川 岳之, 工藤 貴子
- 4P123 (z)-1,2,4,6-Heptatetraene とそのヘテロ置換体の電子環化反応はペリ環状反応または擬ペリ環状反応? (岐阜大工) 酒井 章吾
- 4P124 SH4マルチプロセッサシステムに対応した分子軌道計算プログラムの開発と並列性能評価(CREST, JST¹, 産総研GTRC², 富士総研³, 九大院シ情⁴) 梅田 宏明^{1,2}, 稲富 雄一^{1,2}, 本田 宏明^{3,4}, 長嶋 雲兵^{1,2}
- 4P125 タンパク質の全電子自動計算を目指したProteinDF用GUIの開発(東大生研) 西村 康幸, 吉廣保, 西野 典子, 上野 哲哉, 佐藤 文俊
- 4P126 密度汎関数法によるインスリン6量体の全電子計算(アドバンスソフト¹, 日立機研², 東大生研³) 稲葉 亨^{1,2}, 佐藤 文俊³, 柏木 浩^{1,3}
- 4P127 Projection法を用いたFMO-MOの計算(産総研¹, 筑波大システム情報², JST,CREST³) 稲富 雄一^{1,3}, 櫻井 鉄也^{2,3}, 長嶋 雲兵^{1,3}
- 4P128 FMOに基づくPost-HF計算の試み# 1(アドバンスソフト¹, 東大生産研², 国立衛生研³, 産総研⁴) 望月 祐志^{1,2}, 中野 達也³, 小池上 繁¹, 甘利 真司², 北浦 和夫⁴
- 4P129 酵素反応におけるタンパク質の役割: Chorismate Mutase の酵素触媒機構について(産総研 計算科学) 石田 豊和, Dmitri G. Fedorov, 北浦 和夫
- 4P130 ONIOM法によるprotonated Schiff base of retinalの電子状態計算(エモリー大化) 大宮 和浩, 諸熊 奎治
- 4P131 酸素分子の付加した酸化型シトクロムc酸化酵素の密度汎関数計算(三重大工) 三谷 昌輝, 羽場 優樹, 吉岡 泰規
- 4P132 炭酸脱水酵素(CAI)の反応機構に関する理論的研究(京大院工) 北田 哲也, 中尾 嘉秀, 佐藤 啓文, 榊 茂好
- 4P133 計算化学によるプロテインキナーゼCのリガンドの分子設計 その2 (NEC基礎・環境研¹, 京大院農²) 津田 健一郎¹, 中川 優², 入江 一浩²