

- 開催日時 2019年12月14日(土)午後2時 - 15日(日)午後0時
(受付開始 セミナー棟にて 午後1時30分)

- 開催場所 東京理科大学セミナーハウス
(千葉県野田市山崎 2641 東京理科大学野田キャンパス内)
https://www.rs.tus.ac.jp/seminar_house/index.html

東武野田線(アーバンパークライン) 運河駅下車 徒歩 ~15分
常磐自動車道 柏インターから ~10分

- 招待講演(質疑応答を含め60分)

根岸雄一先生(東京理科大学 理学部第一部 応用化学科 教授)

- 発表時間(質疑応答を含む)

4年生	10分(目安 発表7分+質疑応答3分)
修士課程	15分(目安 発表12分+質疑応答3分)
博士課程	20分(目安 発表15分+質疑応答5分)
研究員	30分(時間配分はお任せします)

- 参加費:

教員・研究員等 教授	¥8,500
准教授	¥8,000
助教(研究員)	¥7,500
学生(学部・大学院生)	¥4,000

参加費につきましては、できるだけお釣りのないようお願い致します。

- 宿泊について

宿泊するにあたっては、洗面用具一式(歯ブラシ、タオル類、洗顔石鹸等)、寝間着を持参して下さい。詳細は掲載資料の「東京理科大学セミナーハウス宿泊者心得」を参照して下さい。

～ プログラム ～

1 日目 12月14日(土)

13:00 ～ 受付開始

14:00 ～ 14:15 開会挨拶

Session1 座長：立川仁典 横浜市立大学

14:15 ～ 14:25 (10分) Oral-1 岡本優悟 茨城大学(森研究室) 学部4年

ニッケル触媒を用いた *N*-アシルベンゾイミダゾールの 1,2-水素転位を含む
脱カルボニル化反応に関する理論的研究

14:25 ～ 14:40 (15分) Oral-2 門馬智也 千葉工業大学(松澤研究室) 修士1年

タイタン大気環境中のジアセチレンと 1,3-ブタジエンによるベンゼン生成経路に関する
理論研究

14:40 ～ 14:55 (15分) Oral-3 瀬島大輔 千葉工業大学(松澤研究室) 修士2年

$\text{Cu}_n\text{Al}_{13-n}$ ($n=1-12$) クラスターの幾何構造と電子状態に関する理論研究

14:55 ～ 15:10 (15分) Oral-4 古川千紗 千葉工業大学(松澤研究室) 修士2年

$\text{Na}^+(\text{H}_2\text{O})_6$ クラスター中の水-水間の水素結合に対するイオンの影響に関する理論研究

～ 休憩、集合写真 (20分) ～

Session2 座長：森 聖治 茨城大学

15:30 ～ 15:40 (10分) Oral-5 小林 輝 横浜市立大学(量子物理化学研究室) 学部4年

経路積分分子動力学法を用いた四角酸の H/D 同位体効果の理論的解析

15:40 ～ 15:50 (10分) Oral-6 伊藤駿平 横浜市立大学(量子物理化学研究室) 学部4年

量子モンテカルロ法を用いた $[\text{H}_2^-; \text{e}^+]$ の理論的解析

15:50 ～ 16:05 (15分) Oral-7 杉浦悠太郎 埼玉大学(高柳研究室) 修士1年

量子波束法による陽電子共鳴幅の理論計算

16:05 ～ 16:20 (15分) Oral-8 宮崎貴暉 埼玉大学(高柳研究室) 修士1年

Ne ドープ極低温 He クラスターの非断熱遷移 RPMD シミュレーション

～ 休憩 (10分) ～

Session3 座長：松澤秀則 千葉工業大学

16:30 ～ 17:30 (60分) Invited-1 根岸雄一 教授 東京理科大学
合金クラスターの精密合成と構造・物性

18:00 ～ 19:00 夕食

19:00 ～ 20:00 意見交換会

2 日目 12 月 15 日(日)

8:00 ~ 8:40 朝食

Session4 座長：山本典史 千葉工業大学

9:00 ~ 9:10 (10 分) Oral-9 鈴木春哉 埼玉大学(高柳研究室) 学部 4 年
相関分極ポテンシャルを利用した陽電子束縛エネルギーの理論計算

9:10 ~ 9:20 (10 分) Oral-10 齋藤滉平 埼玉大学(高柳研究室) 学部 4 年
ヘム錯体モデル-O₂ 結合生成におけるスピン反転機構

9:20 ~ 9:30 (10 分) Oral-11 狩野祐来 千葉工業大学(松澤研究室) 学部 4 年
希ガスクラスタールにおける基底関数重ね合わせ誤差の補正方法の検討

9:30 ~ 9:45 (15 分) Oral-12 雨宮弘直 千葉工業大学(松澤研究室) 修士 1 年
電荷移動理論に基づく TCNQ 二量体の赤外吸収強度の増大の理論的解明

~ 休憩 (10 分) ~

Session5 座長：高柳敏幸 埼玉大学

9:55 ~ 10:10 (15 分) Oral-13 道明武信 首都大学東京(理論計算化学研究室) 修士 1 年
星間塵表面におけるメタノール生成経路に関する理論的研究

10:10 ~ 10:30 (20 分) Oral-14 Mohini Yadav 千葉工業大学(山本研究室) 博士 2 年
**Theoretical insights into the mechanism of NA-I117V-Mediated Oseltamivir Resistance
in H5N1 Avian Influenza Virus**

10:30 ~ 10:50 (20 分) Oral-15 古島弥来 横浜市立大学(量子物理化学研究室) 博士 3 年
二硫化炭素二量体の陽電子親和力の理論的解析

10:50 ~ 11:20 (30 分) Oral-16 長谷川太祐 国立研究開発法人 物質・材料研究機構 研究員
人工力誘起反応法を用いた CNT 機能性材料の界面におけるアモルファス炭素構造の探索と
解析

11:20 閉会挨拶

12:00 セミナー終了・解散