

庄司光男 (公募 A 班)

2021 年度 会議発表

1. Mitsuo Shoji, "QM/MM study of the large conformational change of quinone cofactor during the catalytic cycle of bacterial copper amine oxidases", 2022 LBNL/CSA - Tsukuba/CCS Collaboration Meeting (USA, CA, online, 3/24/2022) invited
2. 庄司光男, "自然・半導体・分子触媒で利用可能な多様な水分解反応機構の解明", I4LEC 第 4 回公開シンポジウム (日本, 淡路夢舞台国際会議場, 2022/3/2)
3. 庄司光男, 村川武志, 重田育照, 林秀行, 岡島俊英, "銅アミン酸化酵素におけるトパキノン補酵素のコンフォメーション制御機構", 量子生命科学先端フォーラム 2021 冬の研究会 (日本, online, 2021/12/17)
4. 宮川晃一, 庄司光男, 重田育照, 山口兆, "光化学系 II の酸素発生中心における S1 状態の中間体構造の DFT と CC 法による解析", 量子生命科学先端フォーラム 2021 冬の研究会 (日本, online, 12/16/2021)
5. 三嶋謙二, 庄司光男, M. Boero, 重田育照, "電子エネルギー移動における光合成 C-フィコシアニン生物学的起源の一考察", 量子生命科学先端フォーラム 2021 冬の研究会 (日本, online, 12/16/2021)
6. 庄司光男, 三嶋謙二, 宮川晃一, 堀優太, 重田育照, "GLAS 法による分子構造及び化学反応経路の探索", 日本コンピュータ化学会 2021 年秋季年会 (日本, online, 11/2/2021)
7. 宮川晃一, 川上貴資, 庄司光男, 磯部寛, 山口兆, 重田育照, "光化学系 II における酸素発生中心の S1 状態での中間体構造の電子状態の DFT と CC 法による解析", 日本コンピュータ化学会 2021 年秋季年会 (日本, online, 11/2/2021)
8. 三嶋謙二, 梅名泰史, Mauro Boero, 重田育照, 庄司光, "線形型フェルスター理論を用いた, フィコシアノビリンの電子励起エネルギー移動に関する理論的研究", 日本コンピュータ化学会 2021 年秋季年会 (日本, online, 11/2/2021)
9. 庄司光男, 村川武志, 重田育照, 林秀行, 岡島俊英, "銅含有アミン酸化酵素におけるセミキノンラジカル生成機構の理論解明", 量子生命科学会第 3 回大会 (日本, online, 9/16/2021)
10. 庄司光男, 村川武志, 重田育照, 林秀行, 岡島俊英, "銅含有アミン酸化酵素のプロトン化状態についての QM/MM 解析", 第 47 回生体分子科学討論会 (日本, online, 6/4/2021)
11. 庄司光男, 村川武志, 重田育照, 林秀行, 岡島俊英, "銅含有アミン酸化酵素におけるセミキノンラジカル生成機構についての理論的解明", 第 23 回理論化学討論会 (日本, online, 5/14/2021)