

口頭発表プログラム

1 日目 7/22(火)

10:00 - 10:10 (10 分) 開会挨拶

10:10 - 11:30 (80 分) 口頭発表 (1L01-1L04)

1L01	渡邊 宙志	パラメータ化された制御量子ゲートの最適化法量子化学計算への応用
1L02	増井 陸	Chemistry Demonstration on Full-Stack QC-HPC Hybrid Computing System
1L03	杉崎 研司	量子位相推定を用いた full-CI 計算における Trotter 分解の影響について
1L04	吉田 悠一郎	量子選択配置間相互作用法による量子古典ハイブリッド補助場量子モンテカルロ法の改良

11:30 - 13:00 (90 分) 休憩 (昼食)

13:00 - 14:20 (80 分) 口頭発表 (1L05-1L08)

1L05	笠原 健人	膜透過現象を記述する理論的手法の開発
1L06	小林 恵太	二酸化ウランの磁性状態を記述可能な機械学習ポテンシャルの開発
1L07	池田 龍志	静電相互作用をあらわに考慮した機械学習力場の開発
1L08	兼子 祐	分子シミュレーションと機械学習の融合による セルロース溶剤探索

14:20 - 14:30 (10 分) 休憩

14:30 - 15:50 (80 分) 口頭発表 (1L09-1L12)

1L09	日沼 洋陽	固体イオン伝導を聴く
1L10	桑畑 和明	鉄合金中における水素原子拡散の量子効果
1L11	横山 智康	グラフ上のランダムウォークに基づく固体中のイオン伝導解析
1L12	吉澤 一成	黒鉛の層構造に関する考察

15:50 - 16:00 (10 分) 休憩

16:00 - 17:20 (80 分) 口頭発表 国際交流セッション 1 (IL01,IL02, 1L13-1L14)

IL01	Yuan-Chung Cheng	(Invited) Simple Theories for Quantum Dissipative Dynamics and Spectroscopy of Condense-Phase Molecular Systems
IL02	Cheng-chau Chiu	(Invited) Modeling Gas Separation in a Single-File Diffusion System
1L13	Daniel Tianhou Zhang	Algorithmic Advancements in Transition Interface Sampling and Rare Events in Lipid Bilayers
1L14	Bo Thomsen	Nuclear Quantum Effects in Sub- and Supercritical Water

17:20 - 17:30 (10分) 休憩

17:30 - 18:50 (80分) 口頭発表 国際交流セッション 2 (IL03, 1L15-1L17)

IL03	Chen-Hao Yeh	(Invited) Theoretical Investigations of Two-dimensional van der Waal Heterostructures for Photocatalytic Water Splitting
1L15	Amit Shrestha	A DFT Study of Catechol Polymer Adhesion onto γ -Alumina (110) Surfaces
1L16	Mariia Ivonina	Theoretical observation of Ionic Current Discretization in an ionic conductor YSZ: A Structural Fingerprint from KMC Time Series
1L17	Nguyen Thanh Phuc	Semiclassical Truncated-Wigner-Approximation Theory of Molecular Exciton-Polariton Dynamics in Optical Cavities

2日目 7/23(水)

09:00 - 10:00 (60分) 口頭発表 (2L02-2L04)

2L01	多田 幸平	表面吸着を用いた反芳香族分子への磁性特性印可の理論検討
2L02	藤橋 裕太	量子光学技術を利用した時間分解蛍光分光計測の可能性
2L03	藪 俊佑	電荷移動状態の揺らぎを考慮した光捕集アンテナ励起子モデルの開発

10:00 - 10:10 (10分) 休憩

10:10 - 11:30 (80分) ポスター発表 (P101-P127)

本資料後半のポスター発表プログラムにて掲載

11:30 - 13:00 (90分) 休憩 (昼食)

13:00 - 14:40 (100分) 産学特別セッション (IL04-IL08)

IL04	中嶋 裕也	理論と実践の共鳴: 計算化学が創る産学連携と持続可能な未来
IL05	白井 聡一	計算科学で挑む持続可能な社会の実現に向けた取り組み
IL06	原田 洋介	持続的な材料開発において理論化学に求めること
IL07	白鳥 和矢	マルチタスク学習による外挿領域の予測～ ポリマー/低分子間 Flory-Huggins 相互作用パラメータを題材として
IL08	星野 稔	半導体材料の開発加速に向けた分子シミュレーション活用

14:40 - 14:50 (10分) 休憩

14:50 - 16:10 (80 分) 口頭発表 (2L05-2L08)

2L05	市川 雄大	DFT 計算と粗視化モデルによるカゴ状二核パラジウム錯体自己集合過程の解析
2L06	高島 千波	静的電子相関に対する 2 体縮約密度行列に基づく分割統治法
2L07	高塚 和夫	シュレディンガー力学の 2 重構造
2L08	中西 達大	自然反応軌道法に基づく反応経路分岐の機構解析

16:10 - 16:20 (10 分) 休憩

16:20 - 16:50 (30 分) 奨励賞受賞講演 (IL09)

IL09	堀 優太	理論化学計算によるプロトン移動解析と材料設計への展開
------	------	----------------------------

16:50 - 17:00 (10 分) 休憩

17:00 - 18:00 (60 分) 理論化学会総会

18:00 - 20:00 (120 分) 懇親会

3 日目 7/24(木)

09:00 - 10:20 (80 分) 口頭発表 (3L01-3L04)

3L01	平野 智倫	和周波発生における四極子分極の局所場を取り込んだ界面・バルクの統一理論の開発
3L02	高木 牧人	Sn 系ペロブスカイト表面欠陥へのルイス塩基/酸のパッシベーション効果に関する理論的研究
3L03	Huang Ji	Combining Non-orthogonal CI with SCC-DFTB for Field-Induced Charge Transfer Studies
3L04	吉田 将隆	量子化学計算による合金クラスターの透過電子顕微鏡像解析: 三次元構造の再構築と結合性評価

10:20 - 10:30 (10 分) 休憩

10:30 - 11:50 (80 分) ポスター発表 (P201-P227)

本資料後半のポスター発表プログラムにて掲載

11:50 - 13:00 (70 分) 休憩 (昼食)

13:00 - 14:20 (80 分) ポスター発表 (P301-P326)

本資料後半のポスター発表プログラムにて掲載

14:20 - 14:30 (10 分) 休憩

14:30 - 15:50 (80 分) 口頭発表 (3L05-3L08)

3L05	伊藤 琢磨	非調和性を考慮したフェルミの黄金律に基づく簡便な非断熱遷移速度の計算手法の開発
3L06	松岡 和	バーチャル配位子法に基づく最適触媒提案のための数学的枠組みの開発
3L07	難波 知太郎	機械学習による非対称コマ分子のレーザー誘起 3 次元整列の回転ダイナミクスの予測
3L08	高橋 聡	可逆な分子自己集合ネットワークにおける不均一な触媒効果の発現

15:50 - 16:00 (10 分) 閉会挨拶

ポスター発表プログラム

2日目 7/23(水)

10:30 - 11:50 (80分) ポスター発表 (P101-P127)

P101	砂金 珠緒	自己相互作用補正を考慮した第一原理 GW Γ 法の開発
P102	天野 里咲	量子化学計算と電磁場計算の融合へ向けた光-分子相互作用ハミルトニアン構築法
P103	赤津 裕哉	繰込1体縮約密度行列による静的相関の解析
P104	浦谷 浩輝	密に重なった電子状態における非断熱分子動力学計算手法の開発
P105	泉 禎人	分割統治 VQE 計算におけるノイズの影響
P106	西本 佳央	GFN-xTB の解析的二次微分
P107	西島 健矢	RISM 理論を用いた OpenMolcas による量子化学計算
P108	鈴木 さら	剛体回転子-調和振動子モデルに基づく分子構造分布と電子状態計算への適用
P109	岐津 遵	金属表面での CO 分子の吸着・解離反応と状態密度の特性に関する理論的解析
P110	松井 亨	ベイズ最適化を用いた領域分割混成密度汎関数のパラメータ決定法
P111	折本 裕一	機能性材料設計に向けた高速電子状態計算法 Elongation 法の粗視化/機械学習との連携結合
P112	井田 朋智	復元可能フィンガープリント Chain-FP とその応用
P113	中村 泰司	モリブデン錯体による触媒的窒素固定反応の機構解明に向けた理論的研究
P114	呉 英凱	Oxygen Evolution Reaction Performance of Fe/Co-Doped Ni ₃ S ₂ @FeOOH
P115	板倉 央奈	ベンゾフラン合成の理論的研究: Rh 単核錯体と二核錯体の触媒機構
P116	石丸 優樹	金担持 LaNiO ₃ 触媒によるアリルアルコール異性化の理論的研究
P117	鶴田 雅也	反応性軌道エネルギー論 (ROET) による Woodward-Hoffmann 則の検証
P118	藤田 貴敏	フラグメント分子軌道法による励起状態の解析手法
P119	宮本 孟	量子リソース指標を用いた一重項分裂のスピンデコヒーレンス過程に関する理論研究
P120	北野 幸親	近似スピン射影密度汎関数理論を用いた開殻分子性結晶の磁気・電気特性に関する理論研究
P121	西野 康生	反芳香族分子の π 二量体の電子酸化還元状態における電子状態の積層距離依存性に関する理論研究
P122	廣田 陸哉	二量体および表面吸着状態ダブルデッカー型フタロシアニン錯体への DFT+U/plane-wave 法の適用
P123	岡田 健治	量子化学計算によるガリレン錯体の Ga-K 吸収端 XANES の検討
P124	井上 廉	密度汎関数理論法の汎関数が単分子磁石の磁気異方性計算に与える影響の検証
P125	松山 快	PdC _x ナノキューブの構造・電子状態に関する理論研究
P126	松本 優太	ビスペリアズレンへの置換基導入が構造と電子状態に与える影響についての理論研究
P127	林 源太	量子近似最適化アルゴリズムによる結晶中の最適元素配置探索

3日目 7/24(木)

10:30 - 11:50 (80分) ポスター発表 (P201-P227)

P201	橋本 拓也	量子分子動力学法によるセルロースの水熱分解反応に関する理論的研究
P202	西川 琴美	PIMD法を用いたH _n ⁺ クラスターに対する原子核量子効果の解析
P203	河合 優哉	溶液界面グランドカノニカルMDの実装における問題とその解決
P204	水野 雄太	化学反応動力学・速度論の作用素論的力学系解析
P205	束村 晴	化学反応を促進するゆらぎを取り込んだ分子動力学法の開発
P206	田中 輝	ニューラルネットワークポテンシャルを用いたPIMD法による水素結合型強誘電体の理論的解析
P207	大槻 幸義	開放量子系の最適制御: スピン・ボソンモデルにおける最適解探索の超高精度化
P208	石田 大己	核形成過程に対する自由エネルギー解析
P209	岩佐 豪	計算化学と計算電磁気学に基づく近接場IRの理論手法開発
P210	鈴木 皓陽	自由エネルギー計算の拡張に基づく効率的な差スペクトル計算理論の開発
P211	高林 侑示	積分方程式理論を用いた溶液内分子のECDスペクトル計算
P212	菅波 祐介	Oxaza[7]dehydrohelicene 誘導体における円偏光発光特性の支配因子探索: 知識グラフによるアプローチ
P213	柴田 果歩	時間依存密度汎関数理論(TD-DFT)法を用いたテルビウム(III)錯体の円二色性スペクトルに関する理論研究
P214	安池 智一	プレキシトン形成による分子のポテンシャル変形
P215	小林 優斗	ピリミジン塩基の励起状態超高速失活における置換基効果の理論研究
P216	元木 康平	制約付き核電子軌道法によるキラル重医薬品の異性化反応及び電子構造の解析
P217	川崎 愛矢	フェナレニル型配位子を有するガリレンが関与する反応に関する理論研究
P218	松本 健太郎	(Pyridylamido)Hf(IV)錯体の活性種会合体構造の理論的研究
P219	古川 木綿	単核非ヘム鉄錯体による一酸化窒素還元反応に関する理論的研究
P220	築地 洋樹	領域分割混成GGA汎関数を用いた一重項励起状態と三重項励起状態のエネルギーギャップの適切な記述
P221	石川 晃久	CO ₂ 還元触媒MnドーブSrTiO ₃ における不純物準位
P222	原田 茉依	ミオグロビン活性中心の再構成による酸素親和性の制御に関する理論研究
P223	遠山 竣介	通電下における酸素欠陥を有する金属酸化物表面に関する理論計算研究
P224	中辻 賢人	第7周期pブロック元素フッ化物の結合に関する理論的研究
P225	高 海斗	複数のスピンサイトを有するランタノイド錯体における分子内交換相互作用の汎関数依存性
P226	岡澤 一樹	バルビツール酸誘導体のメゾヒエラルキー構造に関する理論的研究
P227	矢野 あかね	貴ガス-遷移金属化合物Ar-MX (X = F, Cl, Br)に関する理論研究

(7/24 ポスター 次ページに続く)

13:00 - 14:20 (80 分) ポスター発表 (P301-P326)

P301	長野 彩奈	インシリコによるフッ素化環状スルホニルアミドのビニル化反応設計
P302	堤 拓朗	人工力誘起反応法を利用した高分子構造異性体の反応性予測モデルの開発:ラジカル重合反応の検討
P303	滝沢 壮永	反応経路ネットワークに対する動力学解析と速度論解析の比較
P304	青木 百合子	プラスチック劣化機構解明と抑制のための量子化学的研究—局所励起計算法—
P305	庄司 光男	光化学系 II と金属錯体における水分解酸素発生機構の相違
P306	石田 豊和	Theoretical insight into catalytic mechanism of GH11 xylanase: ab initio QM/MM modeling based on neutron structure
P307	久保 皓暉	シアノアクリレート系瞬間接着剤の接着機構の解明:密度汎関数理論研究
P308	田中 佑一	Li イオン電池における SEI 膜の力学的特性に対する電極電位の影響
P309	井手本 一慧	炭素繊維強化プラスチック界面で発現する不均一性の統合的理論解析
P310	近藤 翔哉	ベンゼン結晶とトルエン結晶のポテンシャルエネルギーランドスケープ
P311	坂口 智隼	CeO ₂ /メタノール界面における微視的構造の理論的解析
P312	原田 知輝	五員環を含む縮環 π 共役分子系ならびにその拡張系の一、二光子吸収特性に関する理論研究
P313	松田 琢真	添加剤によるグリシン結晶成長制御に対する動力学解析
P314	岡部 涼	脂質二重膜の集合様態と膜内溶質分子の溶解状態の関係性
P315	山下 湧輝	脂質膜物性に対する共溶媒添加効果
P316	陳 元杰	イオン液体中におけるペプチドの自由エネルギー解析
P317	下宮 輝斗	水中の PVA と有機小分子の相互作用に関する自由エネルギー解析
P318	加地 涼真	溶媒和自由エネルギー計算に基づく構造エントロピーの正確な計算手法
P319	一井 桜	水中の PHEMA ブラシに対するペプチドの吸着挙動解析
P320	高山 光男	Dipole-bound anion [H ₂ ⋯HF] ⁻ の生成、構造、安定性
P321	高橋 颯人	センサ・カメラ・分析機器を統合した電子実験ノートへの化学実験自動記録システムの開発
P322	吉川 航平	機械学習を用いた水の異なる温度の構造を区別する特徴量の探索
P323	小柴 拓実	機械学習により効率化された波束動力学法の適用:生体分子における水素移動反応
P324	峯岸 佑典	QM/MM-MD 法によるスチルベン分子の溶液内励起状態動力学シミュレーション
P325	小島 健	OER 電極触媒の活性化機構解明に向けた in-situ ラマンスペクトルの行列分解解析と量子化学的アプローチ
P326	SINGHANEKA Suraj	Machine Learning-Based Acceleration of Crystal Structure Prediction Methods