

5月21日 口頭発表

1L01	石田 和弘	NMRスペクトルの相対性理論的理論計算でGauss軌道の使用が何故駄目か
1L02	桑畑 和明	経路積分分子動力学法を用いた高圧水の相転移における量子効果
1L03	杉崎 研司	フラグメント分子軌道法と変分量子アルゴリズムに基づく量子化学計算とユニタリ結合クラスター法におけるTrotter分解の影響について
1L04	藤波 美起登	量子化学計算と機械学習を用いたhelicene類似円偏光発光分子の探索
1L05	高橋 聡	可逆な反応ネットワークにおける経路選択に及ぼす触媒効果
1L06	日沼 洋陽	ヒドリド伝導体LaH ₂ 7.75O _{0.125} のヒドリド拡散機構の解明
1L07	山本 典史	量子化学計算で解き明かす古代ホタルの発光色
1L08	三浦 伸一	超流動ヘリウムナノ液滴内の分子の回転ダイナミクス
1L09	羽飼 雅也	複数のスピン振電相互作用間の協奏的効果を考慮した逆項間交差速度計算法の開発
1L10	池田 龍志	酸化セリウム/水界面におけるプロトンリレーダイナミクスのセミマルコフ過程モデルによる速度論解析
1L11	宮崎 玲	AIによる理論データと実験データの統合: CO ₂ 水素化触媒反応を記述するMaterials Genesの同定
1L12	藤井 幹也	敵対的生成ネットワークを用いた所望物性をみたく新規組成の提案
1L13	Nguyen Thanh Phuc	Semiclassical Truncated-Wigner-Approximation Theory of Molecular-Vibration-Polariton Dynamics in Optical Cavities
1L14	Ming-Kang (Brad) Tsai	Predicting the Molecular Properties by Combining Machine Learning Model and Knowledge Based Featurization
1L15	Ram Kinkar ROY	Investigation of Aggregation-Induced Emission Mechanism of a Styrene Derivative by SF-LG-TDDFT Study Using Optimally Tuned Range Separated Hybrid Functional: A Theoretical Insight
1L16	Jyh-Chiang Jiang	Theoretical study on CH ₄ activation and conversion on Ir/TiO ₂ (110) and RuO ₂ (110) Surfaces
1L17	Chanida Jakkrawhad	FLOW-BASED AMPEROMETRIC SENSOR FOR DEXAMETHASONE DETECTION USING Fe-MOF/GRAPHENE OXIDE COMPOSITES MATERIAL MODIFIED PENCIL GRAPHITE ELECTRODE
1L18	松林 伸幸	ペプチド凝集に対する共溶媒効果の全原子エネルギー論
1L19	Min-Yeh Tsai	Beyond the Surface: Exploring Abeta42 Monomer Behavior on Diverse Fibril Structures

5月22日 口頭発表

2L01	多田 朋史	トポロジカル絶縁体表面における酸素還元反応の第一原理計算
2L02	大谷優介	ニューラルネットワーク分子動力学法による摩擦誘起の化学反応プロセスの解析: 窒化ケイ素水潤滑システムにおける耐荷重性向上添加剤の化学反応
2L03	春田 直毅	メカノケミカルDiels-Alder反応の収率と選択性の起源
2L04	高塚 和夫	電子状態・電子動力学の可聴化: 電子エネルギーの実体論とその表現
2L05	川崎 愛理	強相関電子系に対する低ランクジェミナル理論の開発
2L06	大島 玲生	ギブズ回転と誤差逆伝播法を組み合わせたSCF収束法の開発
2L07	杉森 亮太	透熱基底表示を用いた多参照摂動論計算に基づく近接した反芳香族分子二量体の電子状態解析

5月23日 口頭発表

3L01	峯尾 浩文	Generation of the unidirectional pi-electron rotation in an aromatic ring molecule using the photo-dressed states
3L02	鴨下 正彦	ADAPT-QSCI: 量子選択配置間相互作用法を用いた基底状態のadaptiveな構築手法
3L03	岩切 北斗	量子コンピュータを用いた第一原理準粒子バンド計算の実証
3L04	甲田 信一	高成功率かつ低計算量の両端固定型遷移状態探索
3L05	村山 武来	同種核置換反転異性体を区別した反応経路地図のパーシステント・ホモロジー
3L06	塩田 知弥	汎用NNPの中間層情報の原子レベル記述子としての応用
3L07	松岡 和	Virtual Ligand-Assisted Optimization(VLAO)法の開発とインシリコ触媒設計への応用
3L08	田中 綾一	相空間構造の低次元化による化学反応動力学の解析
3L09	萬代 充裕	MDシミュレーションを用いたCp*Rh(III)錯体連結型人工金属酵素NitrobindinHLH-Cp*Rh(III)における変異の影響評価
3L10	三輪 邦之	非調和格子振動環境における量子系のダイナミクス
3L11	大田 航	フォノンの放出・吸収過程としての無輻射遷移
3L12	永井 哲郎	不均一系における自由エネルギーと拡散係数の機械学習モデル

赤字は 3/31に日程調整のために変更された箇所

青字は 4/1に国際交流セッション設置のために変更された箇所

緑字は4/2以降に変更された箇所

5月22日 産学連携

IL01	今井 良輔	量子誤り耐性計算に向けた量子アルゴリズム・ソフトウェア開発の現状と展望
IL02	岩田 潤一	Quloud –クラウドと量子の時代の計算科学SaaS–
IL03	石田 純一	Matlantisが切り拓く新しい材料科学: 最新の機械学習力場と連携機能
IL04	坂牧 隆司	商用ソフトウェアの継承: 計算化学統合GUI Winmostarを例として

中野雅由先生追悼セッション

IL05	岸 亮平	中野雅由先生と量子化学工学
IL06	久保 孝史	開殻性有機分子の特性を探る理論・合成・測定の三位一体アプローチ

受賞講演

IL07	辻 雄太	化学結合のトポロジーに基づいた物性の理解
------	------	----------------------

5月22日 ポスターセッション1

P101	井上 廉	単分子磁石の理論設計に向けた磁気異方性の計算における密度汎関数法の汎関数依存性に関する理論研究
P102	Chantalaksana Chantarangkul	Theoretical investigations of mononuclear Mn(III) single-molecule magnets
P103	Chantamalinee Chantarangkul	Catalytic study of cuprous oxide nanoparticles embedded in biofunctionalized MIL-100(Fe) with <i>Cryptolepis buchanani</i> Roem. & Schult extract
P104	高 海斗	ニトロキシドラジカルを配位子とするランタノイド錯体の磁気特性に関する理論研究
P105	Tsung-Han Tsai	Simulating C-C Coupling Reaction on Gas Diffusion Electrode Surface Modified with Sodium Perfluoro-1-pentanesulfonate Using DFT/MM
P106	高山 光男	双極子複合体負イオン(H ₂ ・H ₂ O) ⁻ の生成と構造
P107	佐々木 徹	分子内振動 - 分子間振動結合ポテンシャルモデルの構築とベンゼン-メタン分子錯体のIR-UV分光
P108	Mohamed Imran Predhanekar	Theoretical and Spectral investigations into improving battery stability with binary solvent for LiMF ₆
P109	濱口 怜	単分散PEG化分子の鎖長依存的な水溶性の予測と実験科学的検証
P110	園部 芙史	水溶性高分子の親水性の物理化学的解析
P111	下唐湊 祐大	時間依存量子多体問題のための量子動的モンテカルロ法開発
P112	中村 賢	ゆらぎを取り入れた有限温度密度汎関数理論の開発
P113	西本 佳央	IPEAシフトを用いたCASPT2法の解析的エネルギー微分
P114	Jer-Lai Kuo	First-principle exploration on the conformational space of peptides and sugars assisted by neural network potential
P115	大谷 優太郎	DOCI波動関数を参照とする多参照摂動法の開発：DOCI-Fock演算子の導入とRSPTとの比較
P116	樋野 健太郎	第一原理波動関数との積分を志向した行列積表現による機械学習ポテンシャル
P117	峯岸 佑典	ONIOM-AIMD法によるシアニン分子の溶液内励起状態動力学シミュレーション
P118	Chao-Ping Hsu	Fast calculation for couplings of electron transfer
P119	橋口 創一	ベイズ最適化及び進化型アルゴリズムを用いたウルツ鉱型Sc-doped AlNの構造探索研究
P120	西川 琴美	PIMD法によるBiuretおよびBiguanideの分子内水素結合と骨格構造に対する原子核量子効果の解析
P121	浦谷 浩輝	配置状態基底に基づく非断熱分子力学手法の開発
P122	西畑 駿	量子コンピュータによる量子化学計算の数値検証と改良
P123	白井 聡一	分子の電荷を指定しないVQE法による化学反応の理論的解析
P124	西村 龍星	分極率の極探索を用いた励起状態計算における励起配置解析手法
P125	大崎 象平	フラグメント分子軌道法と制約密度汎関数理論を組み合わせたFMO-CDFT法の開発
P126	渡辺 七都稀	機械学習ポテンシャルのための動径分布関数を用いた効率的データサンプリング法
P127	Sheng-Hsuan Hung	Predicting the HOMO-LUMO Gap of Transition Metal Complexes Using Low-Dimensional Information by TM-SchNET Model
P128	高見 哲理	炭素クラスター負イオンC ₆ ⁻ とC ₆ H ⁻ の振電構造に関する理論的研究
P129	Nalinee Kongkaew	Preferential Door for Ligand Binding and Unbinding Pathways in Inhibited Human Acetylcholinesterase
P130	吉田 将隆	遺伝的アルゴリズムと第一原理計算による合金サブナノ粒子構造の準安定構造探索
P131	小川 紘	$\langle I \rangle_{Ab initio}$ DC-PBC法：アモルファスの機能発現を解明する計算化学プラットフォームの確立
P132	Andrey Lyalin	Computational Design of Innovative Electrocatalysts for Hydrogen/Oxygen Energy Conversion Cycle
P133	杉村 怜音	モデルハミルトニアンを用いた[Ni(phen) ₃] ²⁺ のポテンシャルエネルギー面の計算
P134	紀 慧美	SnGe系ペロブスカイトの表面欠陥とバッションに関する理論的研究

注意： P1順序は4/2に変更されています

5月23日 ポスターセッション2

P201	岩佐 豪	実時間実空間TDDFT計算による近接場光励起と光学力
P202	藤橋 裕太	量子もつれ光子対の二光子同時計数検出に基づく時間分解分光の理論的研究
P203	栢沼 愛	亜鉛(II)テトラフェニルポルフィリン触媒を用いたPET-RAFT重合機構に関する理論的研究
P204	中西 達大	Natural Reaction Orbital(NRO)法を用いた経路分岐挙動の電子論的解析
P205	小室 洋人	結晶中で光励起したサリチリデンアニリン分子の反応経路探索
P206	温 祐貴	量子化学計算に基づく銅触媒アジド-アルキン環化付加反応の反応機構解析
P207	竹井 健真	MoO _x 担持金属触媒を用いた選択的水素化分解反応機構の理論的解明
P208	高井 範行	鈴木・宮浦クロスカップリング反応の定量的な電子論解析
P209	杉村 潤輝	ポリオキソメタレート触媒による二酸化炭素固定化に関する理論的研究
P210	田中 輝	遷移金属触媒を用いたH/D交換反応によるD ₂ ガス生成反応の反応機構解析
P211	星野 秀杜	IrおよびRh触媒を用いた8-methylquinolineの位置選択的C-H活性化に関する理論的研究
P212	須田 真一	1,2-Bis(diphenylphosphino)ethane系配位子を対象としたバーチャル配位子の開発
P213	仲 海渡	多次元自由エネルギー面計算を用いた液液界面での多価イオンの輸送におけるイオンペア形成・解離の触媒機構解析
P214	金里 脩平	(Pyridylamido)Hf触媒によるオレフィン重合反応の全原子シミュレーションと重要記述子抽出のための機械学習:触媒置換基が及ぼすポリマー微細構造への影響
P215	曲 立豪	反応空間投影法による生合成反応経路の解析
P216	呉英凱	酸素発生反応における金属酸化物触媒の活性の比較
P217	甘水 君佳	アヌレン分子並列回路モデルの量子干渉と電気伝導特性に関する理論研究
P218	益田 晃希	ジスプロシウム(III)メタロセン錯体の面間距離とエネルギー障壁に関する理論研究
P219	石丸 優樹	Au担持NiO触媒を用いたアリルアルコールの異性化に関する理論的研究
P220	松崎 洋市	有機系人工光合成触媒の反応機構の解明
P221	市川 和秀	結晶構造における元素配置最適化問題のイジングマシンによる効率的解法について
P222	米森 朋久	DFT計算を用いたAu/POM触媒によるCO酸化機構の解明
P223	宮本 孟	異種分子を含む3量体モデルにおける一重項分裂に関する理論研究
P224	川上 貴資	キュバン型多核錯体(YMn ₃ O ₃ , DyMn ₃ O ₃)の単分子磁石発現に関する理論解析
P225	飯田 健二	金属クラスターと分子の相互作用に関する理論的研究
P226	大竹 真愛	第一原理計算を用いたSnGeダブルペロブスカイト太陽電池材料の欠陥構造の解析
P227	村岡 梓	PDCBT/BTAx非フラーレン型有機薄膜太陽電池における自由キャリア生成メカニズム
P228	山下 晃一	Geアロイ化Snペロブスカイトのキャリアダイナミクスの第一原理計算
P229	大城 海	酸化セリウム表面の酸素欠陥を記述する機械学習力場の構築
P230	本城 一樹	ニトロゲナーゼの反応活性中心の周囲環境が電子状態に与える影響に関する理論研究
P231	松田 琢真	添加剤存在下でのグリシン結晶成長制御の全原子MD解析
P232	一井 桜	中性アミノ酸側鎖類似分子のPHEMAブラシに対する吸着挙動の解析
P233	大槻 幸義	非共鳴レーザーパルスによる量子多準位ダイナミクスの最適制御:分子振動ダイナミクスへの応用
P234	吉川 航平	ニューラルネットワークを用いた水の異なる温度の構造を区別する最適な構造指標の探索

P301	荻田 隼輔	ネマチック-等方相転移の強化サンプリングと熱力学による相挙動の詳細な解析
P302	Mrinal Kanti Si	TBA
P303	米谷 佳晃	カットオフで生じる水の層状構造: 周期境界条件なしの場合
P304	上村 哲平	自由エネルギー計算に基づく液液界面のイオン輸送に対する水和効果の解析
P305	熊谷 紘一	Tip-Enhanced SFG分光における和周波発生機構の理論解析
P306	渡邊 夏実	ナフタルイミド誘導体とカルボン酸クラスターの光物性の解析
P307	金丸 雄基	荷電系において溶媒モデルが記述する溶媒静電ポテンシャルの解析
P308	春名 竜征	分子動力学シミュレーションを用いたゲノム編集タンパク質CRISPR Type I-C のダイナミクスとgRNAとの相互作用
P309	橋本 拓也	がん遺伝子産物RASの共有結合阻害に向けたハイブリッド型in silico創薬研究
P310	小柳津 皓介	ビスピリジンヨウ素(I)カチオンにおけるハロゲン結合の電子密度解析
P311	川崎 愛矢	フェナレニル型配位子を有するガリレンの電子励起状態に関する理論研究
P312	戸部 すみれ	量子化学計算を用いたTCNQのソルバクロミズムの機構の解析
P313	岡田 賢	平衡同位体分別係数の迅速計算法
P314	市川 雄大	カゴ状二核パラジウム錯体の自己集合過程のモデル化
P315	西田 光博	ヘテロ原子置換が多環芳香族炭化水素の単分子電気伝導特性に与える影響に関する理論研究
P316	通岡 知輝	Real-space quantum dynamics simulation on NISQ devices
P317	立川 仁典	経路積分分子動力学法によるミューオニウム化N-ヘテロ環カルベンの理論的研究
P318	小柴 拓実	機械学習ポテンシャルによる構造ベースガウス基底展開法の高速度化: H3O+における傘反転振動のトンネル分裂への適用
P319	北村 勇吉	主成分分析を用いた静電記述子の次元縮約による振動スペクトル予測モデルの高精度化
P320	西澤 大輔	電子ダイナミクスシミュレーションによる近接場光局所励起が引き起こす分子内エネルギー伝搬の解析
P321	廣瀬 健	ルイス酸触媒の設計に向けたバーチャルルイス酸の開発
P322	上野 和	反応経路ネットワーク上に存在する潜在的副反応の達成を志向した基質設計とその実験的実証: アルケンのアリールカルボキシル化
P323	山田 蓮	バーチャル配位子法のヒ素配位子への拡張
P324	神原 龍冬	OCS二重イオン化による分解過程の非断熱ダイナミクス
P325	大西 未優	第一原理計算を用いた金属および担持金属クラスターの幾何構造に関する理論的研究
P326	島田 魁智	ビス-ペリアズレン連結二量体の電子構造の荷電状態・スピン状態依存性に関する理論研究
P327	岡部 涼	脂質二重膜内における蛍光プローブの溶解状態および励起エネルギー解析
P328	津村 将弥	半古典プロバゲータを用いた波束ダイナミクスの開発と応用
P329	塩野谷 有丘	β カロテンの可視吸収スペクトルの無極性溶媒中における過剰赤方遷移のQM/MM-MD法を用いた解析
P330	橘川 武知	深層強化学習による二次元モデルポテンシャル上での反応経路探索
P331	堤 拓朗	高分子構造異性体の全列挙プログラムの開発: アミド系高分子への適用
P332	藁谷 広夢	少数の分子物性データに対する転移学習モデルの開発
P333	川音 遼真	機械学習を用いた光拡散板透過光の空間プロファイル予測と加工の度合いの推定

緑字は4/2以降に変更された箇所