

講演プログラム

口頭発表：20分（発表15分＋討論5分） ポスター発表：90分

奨励賞受賞講演（発表25分＋討論5分）

産学連携セッション（基調講演45分（討論含）、招待講演25分（討論含））

5月17日（火）

座長 長岡 正隆（名大院情報・名大価値創造研究センター）

13:00 1L01 ○森 寛敏（中央大理工）、黒木 菜保子（中央大理工/JST ACT-X）、Fabian WEBER（中央大理工）、後藤 大輔（中央大理工）、鈴木 里麻（中央大理工）、高橋 唯華（中央大理工）、渡部 栞（中央大理工）、渡部 尚汰郎（中央大理工）
電子状態計算と機械学習の連携による理論材料化学・化学工学の展開

13:20 1L02 ○黒木 菜保子（中央大理工/JST ACT-X）、渡部 栞（中央大理工）、渡部 尚汰郎（中央大理工）、森 寛敏（中央大理工）
分子シミュレーションと機械学習によるCO₂吸収液体の理論探索

13:40 1L03 ○川島 恭平（九大先導研）、國信 洋一郎（九大先導研）、森 俊文（九大先導研）
シクロデキストリンを用いる位置選択的C-Hトリフルオロメチル化反応の機構解明

休憩（14:00-14:10）

座長 森 寛敏（中央大理工）

14:10 1L04 ○高橋 聡（東大院総合文化）、佐藤 啓文（京大院工、京大ESICB、京大福井センター）、平岡 秀一（東大院総合文化）
配位自己集合における反応経路選択の一般原理の理論

14:30 1L05 ○飯田 健二（北大触媒研）
担持金属クラスターと電解質溶液の界面の不均一な電気二重層の理論的研究

14:50 1L06 ○田中 佑一（名大院情報）、近藤 宙暉（名大院情報）、稲垣 泰一（慶大院理工）、長岡 正隆（名大院情報・名大価値創造研究センター）
Liイオン電池の定電流定電圧充電によるSEI膜形成シミュレーション

休憩（15:10-15:20）

座長 飯田 健二 (北大触媒研)

- 15:20 1L07 永井 哲郎 (東大院新領域), 吉森 明 (新潟大院理), ○岡崎 進 (東大院新領域)
位置に依存する拡散係数とポテンシャルを持つ拡散方程式に従う分子の軌跡を生成する動的モンテカルロ法の新規アルゴリズム
- 15:40 1L08 ○平野 智倫, 矢澤 尚也, 王 琳, 森田 明弘 (東北大院理)
振動差スペクトル計算の劇的な収束加速
- 16:00 1L09 ○近藤 僚哉 (北大院総化), James N. Taylor (北大電子研), Jean-Emmanuel CLEMENT (北大電子研, 北大 ICREDD), 水野 雄太 (北大院総化, 北大電子研, 北大 ICREDD), 藤田 克昌 (阪大院工), 藤田 克昌 (京都府立医大), 小松崎 民樹 (北大院総化, 北大電子研, 北大 ICREDD)
ラマン分光と情報理論を組み合わせた分子データ科学の展開: 空間不均一性に基づく病態の再定義

休憩 (16:20-16:30)

座長 炭竈 享司 (金沢大・ナノ生命科学研究所)

- 16:30 1L10 ○四谷 悠 (名大院情報), 田中 美帆 (名大院情報), 北村 勇吉 (静大工), 長岡 正隆 (名大院情報)
ヒスチジン残基のプロトン化状態が決定するR状態ヘモグロビンの構造安定性
- 16:50 1L11 ○谷本 勝一 (分子研, ExCELLS), 伊藤 暁 (分子研), 奥村 久士 (ExCELLS)
新型コロナウイルスのRNA依存性RNAポリメラーゼによるリガンド認識の分子シミュレーション
- 17:10 1L12 ○伊藤 暁 (分子研), 矢木 真穂 (ExCELLS), 加藤 晃一 (ExCELLS), 奥村 久士 (ExCELLS)
分子動力学シミュレーションとチオフラビンTアッセイによるAβの凝集過程の解明

休憩 (17:30-17:40)

座長 伊藤 暁 (分子研)

- 17:40 1L13 ○白男川 貴史, 長谷川 淳也 (北大触媒研)
構造緩和を考慮した分子の化学空間の探索に基づく機能分子設計法の開発と応用
- 18:00 1L14 ○松岡 和 (北大院理, JST-ERATO), 原渕 祐 (北大院理, 北大 WPI-ICReDD, JST-ERATO), 前田 理 (北大院理, 北大 WPI-ICReDD, JST-ERATO, NIMS)
遷移金属触媒のインシリコ設計を志向したバーチャル配位子法の開発と配位子ス

クリーニングへの応用

- 18:20 1L15 ○林 裕樹, 勝山 瞳, 高野 秀明, 原 澗 祐, 前田 理, 美多 剛 (北大 WPI-ICReDD, JST-ERATO, 北大院理)
量子化学計算を指針としたジフルオロカルベンを用いる三成分反応の設計と具現化

5月18日(水)

座長 志賀 基之(原子力機構)

- 9:00 2L01 ○高塚 和夫(京大福井センター), 新崎 康樹(京大福井センター)
不変一電子描像による化学結合論
- 9:20 2L02 ○中谷 佳萌(京大院工), 東 雅大(京大院工), 佐藤 啓文(京大院工, 京大福井セ)
第二量子化演算子による局所的スピン結合状態の抽出
- 9:40 2L03 ○西尾 宗一郎(京大院理), 倉重 佑輝(京大院理)
Low-rank 型波動関数を用いた分子集合体励起状態のモデルハミルトニアン解析

休憩(10:00-10:10)

座長 立川 仁典(横浜市大)

- 10:10 2L04 ○樋野 健太郎(京都大学院理), 倉重 佑輝(京都大学院理)
局在化振動を利用した Matrix Product State MCTDH の開発
- 10:30 2L05 ○志賀 基之(原子力機構)
経路積分法を用いた量子振動動力学のための新たな近似
- 10:50 2L06 ○Bo Thomsen(JAEA), Motoyuki Shiga(JAEA)
Ab Initio Study of Nuclear Quantum Effects in Water

休憩(11:10-11:20)

座長 春田 直毅(京大福井セ)

- 11:20 2L07 伊藤 駿平(横浜市大), 吉田 大輔(横浜市大), 島崎 智実(横浜市大), 北 幸海(横浜市大), ○立川 仁典(横浜市大)
量子モンテカルロ法を用いた陽電子束縛による二原子分子負イオンの安定性に関する理論的研究
- 11:40 2L08 ○吉田 大輔(理研仁科セ), 北 幸海(横浜市大院生命ナノ), 島崎 智実(横浜市大院生命ナノ), 立川 仁典(横浜市大院生命ナノ)
2成分水素結合クラスターにおける陽電子束縛及び対消滅機構に関する理論研究
- 12:00 2L09 ○浦谷 浩輝(早大先進理工), 中井 浩巳(早大先進理工, 早大理工総研, 京大 ESICB)
非局在化した励起状態を扱えるスケーラブルな Ehrenfest 動力学手法の開発

休憩 (12:20-13:30)

座長 東 雅大 (京大院工)

- 13:30 2L10 ○原 渕 祐 (北大院理, WPI-ICReDD, JST-ERATO), 林 裕 樹 (WPI-ICReDD, JST-ERATO), 高野 秀明 (WPI-ICReDD, JST-ERATO), 美多 剛 (WPI-ICReDD, JST-ERATO), 前田 理 (北大院理, WPI-ICReDD, JST-ERATO)
光電子移動触媒を用いた分子内ヒドロアミノ化反応の触媒サイクル全貌解明
- 13:50 2L11 ○永幡 裕 (北大 ICReDD), 小林 正人 (北大 理), 戸田 幹人 (奈良女理・兵庫県立大情報・北大電子研), 小松崎 民樹 (北大 電子研)
Kinetic disconnectivity graph: エネルギー地形の簡易的可視化法の提案
- 14:10 2L12 ○甲田 信一 (分子研), 齊藤 真司 (分子研)
非線形計画問題汎用ソルバを用いた最小エネルギー経路探索

休憩 (14:30-14:40)

産学連携セッション

- 14:40 開会挨拶 重田 育照 (筑波大)
- 14:45 PL01 基調講演 (電池・触媒分野)
○大谷実 (筑波大学計算科学研究センター)
電気化学界面シミュレーション技術の発展と産学連携
- 15:30 IL01 招待講演 (磁石・半導体材料分野)
○原嶋 庸介 (奈良先端大)
実験と計算科学の融合とデータ同化
- 15:55 IL02 招待講演 (量子コンピュータ分野)
○水上 渉 (阪大 QIQB)
量子コンピューティング分野からみた産官学連携によるディープテック開発の加速

休憩 (16:20-16:30)

- 16:30 IL03 招待講演 (材料科学 DX 分野)
○清野 淳司 (早大院先進理工, 早大理工総研)
ケム・インフォマティクスによる理論化学の DX

16:55 PL02 基調講演（創薬分野）
○福澤薫（大阪大学大学院薬学研究科）
FMO 創薬コンソーシアムにおける産官学連携

17:40 閉会挨拶 藤井 幹也（奈良先端大）

休憩（17:45-17:55）

奨励賞受賞講演

座長 森田 明弘（東北大院理）

17:55 IL04 ○春田 直毅（京大福井セ）
力学的対称性理論・メカノケミストリー・エキシトン動学の確立に向けた
基礎学理の構築

休憩（18:25-18:30）

理論化学会総会（18:30-19:30）

5月19日(木)

座長 井田 朋智(金沢大理工)

- 9:00 3L01 ○高野 秀明, 林 裕樹, 神名 航, 原渕 祐, 前田 理, 美多 剛 (北大 WPI-ICReDD, JST-ERATO, 北大院理)
AFIR 法を用いた立体特異的なペリ環状反応の自動経路探索:天然物の自動探索を目指して
- 9:20 3L02 ○岩佐 豪(北大院理, JST さきがけ), 戸田 敬二郎(北大院総化), 廣瀬 善大(明治大), 数間 恵弥子(理研, JST さきがけ), 金 有洙(理研), 武次 徹也(北大院理)
近接場光によるジメチルジスルフィド光解離反応の理論研究
- 9:40 3L03 ○野宮 海音(都立大院理), 中山 尚史(コンフレックス), 後藤 仁志(豊橋技科大情報メディア), 加藤 昌子(関学大生命環境), 中谷 直輝(都立大院理), 波田 雅彦(都立大院理)
Ni(II)キノノイド錯体のバイポクロミズムに関する理論的研究

休憩 (10:00-10:10)

座長 岩佐 豪(北大院理, JST さきがけ)

- 10:10 3L04 ○佐藤 健(東大院工), 水上 涉(阪大基礎工・阪大 QIQB), 御手洗 光祐(阪大基礎工・阪大 QIQB), 織茂 悠貴(東大院工), 魏 博紀(東大院工), 石川 顕一(東大院工), 菅野 恵太((株) QunaSys), 中川 裕也((株) QunaSys)
量子コンピュータを用いた電子ダイナミクスシミュレーション:時間依存・軌道最適化ユニタリ結合クラスター法の開発
- 10:30 3L05 ○魏 博紀(東大院工), 織茂 悠貴(東大院工), 石川 顕一(東大院工), 川島 雪夫(IBM), Tanvi Gujarati(IBM), 佐藤 健(東大院工)
量子コンピュータを用いた多電子ダイナミクスの第一原理シミュレーション
- 10:50 3L06 ○尾作 知洋(東大院工), 織茂 悠貴(東大院工), 石川 顕一(東大院工), 川島 雪夫(IBM), Tanvi Gujarati(IBM), 佐藤 健(東大院工)
量子コンピュータを用いた水素分子イオンの非断熱シミュレーション

休憩 (11:10-11:20)

座長 佐藤 健 (東大院工)

- 11:20 3L07 ○杉崎 研司 (大阪公立大院理, JST さきがけ, CQuERE/TCG CREST), 酒井 智香子 (物質・材料研究機構), 豊田 和男 (大阪公立大院理), 佐藤 和信 (大阪公立大院理), 塩見 大輔 (大阪公立大院理), 工位 武治 (大阪公立大院理)
量子位相差推定アルゴリズムを用いた full-CI 計算手法の開発
- 11:40 3L08 能條 小夜子 (北大院総化), ○小林 正人 (北大院理・北大 WPI-ICReDD), 米山 亮 (北大院総化), 武次 徹也 (北大院理・北大 WPI-ICReDD)
アニーリング計算機とベイズ最適化を併用した電子相関計算手法の開発
- 12:00 3L09 河井 大輝 (UCSB), ○中川 裕也 (QunaSys)
基底状態波動関数を用いた量子機械学習による励起状態予測

休憩 (12:20-12:30)

座長 本郷 研太 (北陸先端大)

- 12:30 3L10 ○Nguyen Thanh Phuc (京大工)
Bose Enhancement of Excitation Energy Transfer with Molecular-Exciton-Polariton Condensates
- 12:50 3L11 ○黒田 直也 (京大院工), 砂賀 彩光 (京大複合研), 瀬波 大土 (京大院工)
鏡像異性体間エネルギー差の電子励起による増大-カイラル分子の構造に対する依存性-
- 13:10 3L12 ○砂賀 彩光 (京大複合研), 小野 滉貴 (京大理), 田中 実 (阪大理), 高橋 義朗 (京大理)
同位体シフトにおける標準模型を超えた新物理: 相対論に基づく精密計算と解析

ポスター発表 5月20日(金)

前半 (13:00-14:30)

- 1P01 奥脇 弘次 (立教大理), 土居 英男 (立教大理), 太刀野 雄介 (立教大理), 秋澤 和輝 (立教大理), ○望月 祐志 (立教大理, 東大生産研)
FM0-DPD 法による生体関係分子のシミュレーション
- 1P02 ○野本 敦朗 (富士フイルム株式会社), 奥野 幸洋 (富士フイルム株式会社), 柳井 毅 (名古屋大学トランスフォーマティブ生命分子研究所, 名古屋大学大学院化学科), 稲井 直人 (名古屋大学大学院化学科)
XMS-CASPT2 を用いたシンナモイル誘導体の光異性化における置換基・溶媒効果解析
- 1P03 ○桑畑 和明 (横浜市立), 立川 仁典 (横浜市立)
シュウ酸分子の溶媒性に対する量子効果
- 1P04 原 綾汰 (北大院総合化学), ○高 敏 (北大触媒研), 小林 広和 (北大触媒研), 福岡 淳 (北大触媒研), 長谷川 淳也 (北大触媒研)
Rh ドープ Co 微粒子触媒の CH₄ 活性化に関する理論的研究
- 1P05 ○三上 翠跳 (東北大院理), 大槻 幸義 (東北大院理)
最適制御法を用いた NV センターへの量子位相推定アルゴリズムの実装シミュレーション
- 1P06 ○難波 知太郎 (東北大院理), 大槻 幸義 (東北大院理)
レーザー誘起の分子整列制御ランドスケープ図を予測する機械学習モデルの開発
- 1P07 ○大谷 優介 (東北大金研), 久保 百司 (東北大金研)
密度汎関数強束縛分子動力学法による分子結晶の変形/破壊メカニズムの解析
- 1P08 ○岡澤 一樹 (九大先導研), 辻 雄太 (九大院総理工), 吉澤 一成 (九大先導研)
積層 π 共役単分子接合の電気伝導特性に関する理論的研究
- 1P09 ○高橋 健 (京大院工), 佐藤 啓文 (京大院工, 京大 FIFC), 中農 浩史 (産総研)
絶対電位制御 MD 法による電極界面の電位依存性の解析
- 1P10 ○泰井 雅貴 (神大院イノベ), 西巻 大成 (神大院システム), 天能 精一郎 (神大院システム, 神大院イノベ), 土持 崇嗣 (神大院システム, JST さきがけ)
スピン射影演算子を導入したアダプティブな変分量子回路のフェルミ粒子系への適用
- 1P11 ○田中 海斗 (京大院工), 瀬波 大土 (京大院工)
最低空軌道を用いた局所化学ポテンシャルの近似手法

- 1P12 ○Danjo De Chavez (北大触媒), Jun-ya Hasegawa (北大触媒)
Mechanochemical Strain Effects in CO Decomposition Activity of Terrace Ru(0001) and Stepped Ru(1015) Surface
- 1P13 ○吉田 航 (阪大院基礎工), 松井 啓史 (大安研), 中野 雅由 (阪大院基礎工), 岸 亮平 (阪大院基礎工, 阪大 RCSEC, 阪大 QIQB), 北河 康隆 (阪大院基礎工, 阪大 RCSEC, 阪大 QIQB, 阪大 CSRN)
原子価結合理論に基づく多電子第二超分極率密度解析
- 1P14 ○甘水 君佳 (阪大院基礎工), 佐々木 啓介 (阪大院基礎工), 長 奎吾 (阪大院基礎工), 上村 泰吾 (阪大院基礎工), 徳山 和明 (阪大院基礎工), 林 優太 (阪大院基礎工), 津田 雅大 (阪大院基礎工), 中野 雅由 (阪大院基礎工), 岸 亮平 (阪大院基礎工, 阪大 QIQB, 阪大 RCSEC), 北河 康隆 (阪大院基礎工, 阪大 CSRN, 阪大 QIQB, 阪大 RCSEC)
単分子トランジスタ設計指針構築に向けたパドルホイール型二核錯体の単分子電気伝導性に関する理論研究
- 1P15 ○白井 聡一 (豊田中研), 堀場 貴裕 (豊田中研), 平井 宏俊 (豊田中研)
Variational Quantum Deflation 法による内殻励起状態・内殻イオン化状態の量子化学計算
- 1P16 ○堤 拓朗 (北大院理), 藤田 聡文 (北大理), 岩田 健一郎 (北大院総合化学), 小野 ゆり子 (北大 WPI-ICReDD), 武次 徹也 (北大院理, 北大 WPI-ICReDD)
二次元ポテンシャルエネルギー曲面における三経路分岐反応の理論的解析
- 1P17 ○城下 景亮 (九州大院理), 吉田 紀生 (名古屋大院情), 中野 晴之 (九州大院理)
大環状分子の包接による pK_a シフトの QM/MM/3D-RISM 解析
- 1P18 ○上部 岳洋 (九大先導研), 住谷 陽輔 (九大先導研), 辻 雄太 (九大院総合理工), 中村 伸 (九大先導研), 吉澤 一成 (九大先導研)
エポキシ樹脂とアルミナ表面間の接着相互作用に与える水酸基密度の影響: 密度汎関数理論研究
- 1P19 ○大城 海 (北大院総化), 高 敏 (北大触媒研), 長谷川 淳也 (北大触媒研)
酸化セリウム系脱硝触媒のアルカリ金属被毒耐性メカニズムに関する理論的研究
- 1P20 ○藤木 涼 (九州大院理), 伊藤 暁 (分子研), 奥村 久士 (分子研), 吉田 紀生 (名古屋大院情), 中野 晴之 (九大院理)
タンパク質中アミノ酸残基のプロトン化状態を記述するための pH 一定 MD シミュレーションと液体の統計力学理論の組み合わせ手法の新規開発
- 1P21 ○海老澤 修一 (北大院総化), 堤 拓朗 (北大院理), 武次 徹也 (北大院理, ICRReDD)
反応経路に付随する反応活性軌道の解析: 多配置理論への適用
- 1P22 ○八日市屋 朋子 (東京大院工), 池田 龍志 (東京大院工), 中山 哲 (東京大院工)
モリブデンクラスター触媒によるアンモニア合成反応の反応機構解析

- 1P23 ○大島 玲生 (早大先進理工), 高島 千波 (早大先進理工), 中井 浩巳 (早大先進理工, 早大理工総研)
高効率電子相関計算のための2電子相互作用に対するHess法の拡張
- 1P24 ○坂田 健 (東邦大薬), 後藤 優衣 (東邦大薬), 上原 悠莉 (東邦大薬), 小原 汐菜 (東邦大薬), 吉川 武司 (東邦大薬), 西林 仁昭 (東大院工)
光学活性硫黄架橋二核ルテニウム触媒を用いたプロパルギル位置換反応における不斉発現機構に関するDFT計算
- 1P25 池内 雅登 (阪大院基礎工), ○岸 亮平 (阪大院基礎工, 阪大QIQB, 阪大RCSEC), 杉森 亮太 (阪大院基礎工), 中野 雅由 (阪大院基礎工), 北河 康隆 (阪大院基礎工, 阪大QIQB, 阪大RCSEC, 阪大CSRN)
反芳香族分子の近接 π 積層多量体の電子構造に関する理論研究
- 1P26 ○吉田 悠一郎 (阪大QIQB), 吉田 紀生 (名大院情), 水上 渉 (阪大QIQB)
3D-RISM-VQE法による量子計算における溶媒効果の研究
- 1P27 ○鈴木 さら (京大院工), 今村 洸輔 (京大院工), 東 雅大 (京大院工), 佐藤 啓文 (京大院工, 京大FIFC)
 π 共役ホスホール塩の溶液中での構造とその蛍光特性への効果
- 1P28 ○松村 徹平 (阪大院基礎工), 田中 泉利 (阪大院基礎工), 松林 伸幸 (阪大院基礎工)
アスピリン結晶界面における吸着安定性の全原子MD解析
- 1P29 ○松原 優弥 (阪大院基礎工), 昌山 廉 (阪大院基礎工), 笠原 健人 (阪大院基礎工), 松林 伸幸 (阪大院基礎工)
小分子の脂質膜透過過程に関する動力学解析
- 1P30 ○大谷 優太郎, 中谷 直輝, 波田 雅彦 (都立大院理)
DOCI-DMRG-PT2法の開発
- 1P31 ○名畑 亮志 (北大院総化), 前田 理 (北大院理, WPI-ICReDD, NIMS, JST-ERATO)
 TiO_2 表面上におけるギ酸分解反応経路の探索
- 1P32 ○野地 隼平 (新潟大院自然), 吉森 明 (新潟大理), 大貫 隼 (早稲田大), 高野 光則 (早稲田大)
中性粒子の排除体積と溶媒の数密度に起因する中性粒子近傍の分極場ゆらぎの減少
- 1P33 ○向江 謙心 (阪大院基礎工), 小嶋 秀和 (阪大院基礎工), 松林 伸幸 (阪大院基礎工)
小分子のポリマーに対する溶解のMD解析
- 1P34 ○高橋 唯華 (中大理工), 鈴木 里麻 (中大理工), 黒木 菜保子 (中大理工・JST ACT-X), 森 寛敏 (中大理工)
機械学習によるスピン軌道相互作用の迅速予測の検討

- 1P35 ○鳥居 肇 (静岡大)
水分子の静電分極に伴う電子密度変化の特異値分解による解析
- 1P36 ○速水 雅生 (早大理工総研), 小川 陽太郎 (早大先進理工), 中野 匡彦 (早大理工総研,
三菱ケミカルホールディングス), 清野 淳司 (早大先進理工, 早大理工総研)
局所性を利用した機械学習に基づく核磁気遮蔽定数の予測モデルの構築
- 1P37 ○堀 優太 (筑波大・計算セ), 重田 育照 (筑波大・計算セ)
酸化型[NiFe]ヒドロゲナーゼの生成過程と活性中心の構造についての理論的研究

後半 (14:50-16:20)

- 2P01 ○山口 毅 (名大院工)
分子性液体のX線領域の音速分散と長波長極限の縦波粘弾性の比較
- 2P02 石山 達也 (富山大理工), 田原 太平 (理研), ○森田 明弘 (東北大理)
水表面におけるフェノール光化学の超高速反応機構の解明
- 2P03 ○沖田 和也 (阪大院基礎工), 笠原 健人 (阪大院基礎工), 松林 伸幸 (阪大院基礎工)
溶媒和ダイナミクスを記述するためのエネルギー表示を用いた新規ダイナミクス理論の構築
- 2P04 ○酒井 孝徳 (静岡大院工), 鳥居 肇 (静岡大院工)
ハロゲン結合系の静電的異方性とハロゲン原子依存性に対する置換基効果の電子密度に基づく解析
- 2P05 ○田仲 雄一 (京大院工), 佐藤 啓文 (京大院工、京大福井センター), 中農 浩史 (産総研)
可変電圧 MD シミュレーションによる電気化学界面の動的誘電率計算
- 2P06 ○村田 萌 (横浜市大), 陳 弘イ (東大), 小林 理 (横浜市大), 島崎 智実 (横浜市大),
平岡 秀一 (東大), 立川 仁典 (横浜市大)
自己集合性ナノキューブの安定化と分子内包メカニズムの理論的研究
- 2P07 ○藤原 孝太郎 (北大院総化), 西田 叡倫 (北大院総化), 小林 正人 (北大院理・北大WPI-ICReDD), 武次 徹也 (北大院理・北大WPI-ICReDD)
DC-xTB 法: 複合欠陥を含む超大規模系の量子化学計算手法の開発
- 2P08 ○藤澤 遼 (早大先進理工), 藤波 美起登 (早大先進理工), 清野 淳司 (早大先進理工, 早大理工総研), 中井 浩巳 (早大先進理工, 早大理工総研)
機械学習型電子相関モデルの開殻系への拡張

- 2P09 ○加納 吏宮 (奈良先端大物質), 原嶋 庸介 (奈良先端大物質), 吉野 隼矢 (東理大理, 総研院カーボンバリュー), 山口 友一 (東理大理, 総研院カーボンバリュー), 工藤 昭彦 (東理大理, 総研院カーボンバリュー), 藤井 幹也 (奈良先端大物質)
機械学習による水分解光触媒の水素発生量及び酸素発生量の予測
- 2P10 ○横山 麻紗子 (阪大院基礎工), 中野 雅由 (阪大院基礎工), 岸 亮平 (阪大院基礎工, 阪大 QIQB, 阪大 RCSEC), 北河 康隆 (阪大院基礎工, 阪大 QIQB, 阪大 RCSEC, 阪大 CSRN)
多参照摂動論に基づくフェナレニル π 積層集合系の励起特性計算
- 2P11 ○宮本 孟 (阪大院基礎工), 岡田 健治 (阪大院基礎工), 徳山 和明 (阪大院基礎工), 中野 雅由 (阪大院基礎工), 岸 亮平 (阪大院基礎工, 阪大 QIQB, 阪大 RCSEC), 北河 康隆 (阪大院基礎工, 阪大 QIQB, 阪大 RCSEC, 阪大 CSRN)
並列型マルチリング分子集合系モデルにおける一重項分裂ダイナミクスの構造-特性相関に関する理論研究
- 2P12 ○住谷 陽輔 (九大先導研), 辻 雄太 (九大院総合理工), 吉澤 一成 (九大先導研)
エポキシ樹脂の接着力の異方性: 密度汎関数理論研究
- 2P13 ○八十島 克尚 (名大院情報), 三澤 奈々 (名大院情報), 鈴木 雄一 (名大院情報), 古賀 伸明 (名大院情報), 長岡 正隆 (名大院情報)
(Pyridylamido)Hf 触媒による連鎖移動型オレフィン共重合の全原子シミュレーション: モノマー挿入に対する触媒とポリマーの立体効果
- 2P14 ○宇田川 太郎 (岐阜大工), 田中 輝 (岐阜大工), 平野恒夫 (お茶大理), 桑畑 和明 (横浜市大生命ナノ), 立川 仁典 (横浜市大生命ナノ), 馬場 正昭 (京大院理), 長嶋 雲兵 (横浜市大生命ナノ)
ベンゼンおよびベンゼン-d₆ で観測されるほぼ等しい C-H/C-D 結合長に関する経路積分分子動力学法を用いた直接的な考察
- 2P15 ○當波 孝凱 (阪大院基礎工), 中野 雅由 (阪大院基礎工), 岸 亮平 (阪大院基礎工, 阪大 RCSEC, 阪大 QIQB), 北河 康隆 (阪大院基礎工, 阪大 RCSEC, 阪大 QIQB, 阪大 CSRN)
一重項分裂過程に寄与する励起状態の振電相互作用: フラグメント分割法に基づく計算/解析
- 2P16 ○四方 志 (阪大院基礎工), 菊辻 卓真 (阪大院基礎工), 八十島 亘宏 (阪大院基礎工), 金 鋼 (阪大院基礎工), 松林 伸幸 (阪大院基礎工)
分子動力学シミュレーションによるアクリレートポリマー中の水分子挙動に関する解析
- 2P17 ○平瀬ひのき (北大院総化), 飯田健二 (北大触媒研), 長谷川淳也 (北大触媒研)
グラフェン担持 Pt クラスターの酸素吸着による電子構造変化

- 2P18 ○小清水 初花（早大先進理工），小野 純一（早大理工総研），福西 快文（産総研生命工学），中井 浩巳（早大先進理工，早大理工総研）
SARS-CoV-2 メインプロテアーゼの共有結合阻害剤開発に向けたハイブリッド型 *in-silico* 創薬研究
- 2P19 ○米谷 佳晃（量研関西）
分子シミュレーションにおける静電相互作用計算についての理論的検証
- 2P20 ○三松 美香（九工大情報工），大西 到（九工大情報工），吉田 紀生（九大院理），
平田 文男（分子研），入佐 正幸（九工大情報工）
EcoRV による DNA 加水分解におけるプロトン移動の量子化学計算による観察
- 2P21 ○高島 千波（早大院先進理工），中井 浩巳（早大院先進理工，早大理工総研）
無限次 2 成分法における LU 分解を用いた 2 電子積分の実装
- 2P22 ○石田 豊和（産総研），Jerry M. Parks (ORNL)，Jeremy C. Smith (ORNL)
中性子構造と複合シミュレーション解析に基づく GH11 Xylanase の酵素活性機構
- 2P23 ○杉森 亮太（阪大院基礎工），當波 孝凱（阪大院基礎工），吉田 航（阪大院基礎工），
坂井 亮太（阪大院基礎工），中野 雅由（阪大院基礎工），岸 亮平（阪大院基礎工，阪大
QIQB，阪大 RCSEC），北河 康隆（阪大院基礎工，阪大 QIQB，阪大 RCSEC，阪大 CSRN）
対称 2 電子 2 軌道モデルに基づく開殻 BN 置換アントラセンの三次非線形光学特性に関する
理論研究
- 2P24 ○松田 涼太郎（九工大情報工），入佐 正幸（九工大情報工），大西 到（九工大情報工），
三松 美香（九工大情報工）
Scala 言語を用いた生体高分子計算科学ツール STCSB への量子化学計算機能の追加
- 2P25 ○山下 晃一（横市大生命ナノ），金子 正徳（横市大生命ナノ）
ペロブスカイト太陽電池の非鉛化に向けて：シフト電流の第一原理計算の観点から
- 2P26 ○古宮 直樹，笠原 健人，松林 伸幸（阪大基礎工）
共溶媒添加に伴うガン関連タンパク質 MDM2 のリガンド結合親和性変化の定量的評価
- 2P27 ○岡田 健治（阪大院基礎工），中野 雅由（阪大院基礎工），岸 亮平（阪大院基礎工，阪大
QIQB，阪大 RCSEC），北河 康隆（阪大院基礎工，阪大 QIQB，阪大 RCSEC，阪大 CSRN）
ボウル型分子の一次元集合系における一重項分裂に関する理論研究
- 2P28 ○宮澤月樺（北大院総化），前田理（北大院理，WPI-ICReDD）
Ras-GAP 酵素による GTP 加水分解反応経路探索
- 2P29 ○鳥居 真人（阪大院理），川上 貴資（阪大院理），山中 秀介（阪大院理），奥村 光隆（阪
大院理）
リチウムイオン電池の正極材料における DFT を用いた弾性率計算の考察

- 2P30 ○渡部 栞 (中央大理工), 黒木 菜保子 (中央大理工, ACT-X), 森 寛敏 (中央大理工)
第一原理統計熱力学計算による水素結合性混合有機溶媒の CO₂ 吸収能評価: 水添加の影響
- 2P31 ○今泉 伊織 (東北大院理), 平野 智倫 (東北大院理), 森田 明弘 (東北大院理)
溶液界面の構造解明を目的とした新規グラントカノニカル分子動力学法の開発
- 2P32 ○大野 周平 (横浜市大院生命ナノ), 吉田 大輔 (理研仁科セ, 横浜市大院生命ナノ),
山下 琢磨 (東北大高教機構, 東北大院理), 肥山 詠美子 (東北大院理, 理研仁科セ),
立川 仁典 (横浜市大院生命ナノ)
重水素分子イオンにおける電子密度の非対称性
- 2P33 ○元木 康平 (中央大理工), 森 寛敏 (中央大理工)
Nuclear-Electronic Orbital 法によるプロトン移動反応の振動モード依存性の検討
- 2P34 ○山口 徹 (TS テクノロジー), 前山 恵璃 (山口大院創科), 隅本 倫徳 (山口大院創科),
堀 憲次 (TS テクノロジー, 山口大院創科)
QM/MC/FEP 法における楕円体液滴モデルの実装と溶媒効果計算適用例
- 2P35 ○水上 卓 (北陸先端大・マテリアル), ゲン ヴィエット クーン (HPC システムズ),
ダム ヒョウ チ (北陸先端大・知識科学)
水分子の記述子表現による溶液の静的・動的構造
- 2P36 ○笠原 健人 (阪大院基礎工), 昌山 廉 (阪大院基礎工), 沖田 和也 (阪大院基礎工),
松林 伸幸 (阪大院基礎工)
タンパク質 - リガンド結合キネティクスに対する混雑環境効果の定量的解析
- 2P37 ○近藤 宙暉 (名大院情報), 川瀬 智元 (名大院情報), Sakaki Nisrine (名大院情報),
田中 佑一 (名大院情報), 長岡 正隆 (名大院情報, 名大価値創造研究センター, 京大 ESICB)
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