

ポスター発表プログラム

2日目 5/19(火)

10:30-11:50(80分)ポスター発表1(P101-P139)

P101	Mokhtar,Benjamin, Ossama	Quantum Jacobi: Hybrid Quantum-Classical Givens Rotations for Reduced Measurement Cost
P102	内山 諒一	機械学習ポテンシャル由来の局所記述子を用いた高効率・高精度な分子物性予測システムの開発
P103	宇田川 太郎	負の熱膨張特性をもつ $H_3Co(CN)_6$ の水素結合構造に対する原子核量子効果およびH/D同位体効果の解析
P104	山下 湧輝	分子動力学法による脂質膜物性に対するアルコール添加効果の解明
P105	Wang, Wei-Hsiang	Free Energy Analysis of Dansylglycine Dissociation from Human Serum Albumin
P106	高山 光男	大気圧低温プラズマ成分(H_2O , H , e^-)からの $[H_2\cdots H_2O]^-(H_2O)_n$ の生成
P107	鈴木 さら	Solvent effect on the excited-state dynamics of an A-D-A quadrupolar molecule
P108	金ヶ崎 晴也	液液界面電子移動を駆動する溶媒ゆらぎの多次元自由エネルギー面計算による解析
P109	多知 裕平	量子位相推定アルゴリズムを用いた超分子アプローチに基づく分子間相互作用エネルギー計算
P110	植田 聖一	トリオキソトリアングレン誘導体-酸素分子複合体におけるスピン混入誤差に関する理論研究
P111	白井 聡一	量子化学計算による金属有機構造体の非線形光学特性の理論的解析
P112	神原 龍冬	強レーザー場と相互作用する分子反応過程解析のための Floquet 理論に基づく非断熱分子動力学理論の開発
P113	Bian, Fei	Atomistic kinetic Monte Carlo analysis for the interplay between Oxygen Reduction Reaction and proton conduction at Pt-Perovskite Interfaces
P114	西野 康生	反芳香族分子からなる対面積層 π -二量体の荷電状態における分子間相互作用に関する理論研究
P115	大橋 尚	ステップ構造を有するPt表面の水素被覆シミュレーションと解析
P116	向原 駿成	分極表面からの水 I_h 成長:トポロジカル欠陥の生成と固固界面エネルギー
P117	松澤 直樹	第一原理計算による新規亜鉛-ピリジン錯体のヨウ素吸着メカニズムの解明
P118	山下 晃一	第一原理計算による正孔注入に基づく分子標的型抗ウイルスメカニズムの解明
P119	中西 達大	ペリ環状反応の遷移状態構造における自然反応軌道解析
P120	川崎 虎太郎	尿素結晶成長の溶媒依存性と界面局所構造の分子動力学解析
P121	河合 優哉	仮想半透膜を介したグランドカノニカルMDの開発と気液界面への展開
P122	大島 玲生	冪等性誤差に基づく占有数最適化の分割統治法への適用
P123	西村 龍星	動的分極率の極を用いた大規模励起状態計算:非双極子摂動による禁制励起状態の検出
P124	前山 友香	ランタノイド結合タンパク質ランモジュリンの金属選択性に関する理論的研究
P125	鈴木 慈大	反応経路分岐を支配する生成物分岐境界の解析
P126	中島 将吾	新規Cubane型CuI錯体の発光機構の理論解析
P127	高橋 朋之	情報エントロピーを用いた局所原子環境記述子の開発と応用:キュバン異性化の反応経路ネットワークへの適用
P128	鶴田 雅也	軌道エネルギー変化の観点からのWoodward-Hoffmann則の再解釈
P129	黒田 峻裕	多様な骨格を有する有機金属触媒の一括探索に向けた特徴量データベースの開発
P130	Song, Yingzhe	アセトニトリル溶液中でのキノリウムイオン類縁体によるベンゼンからフェノールへの直接酸化反応の理論的機構解明
P131	當麻 俊太	脂肪族アミン類の劣化における分子内・分子間の多段階反応経路探索
P132	山崎 光	高分子分解酵素の基質結合特性に対する共溶媒添加効果の分子動力学解析
P133	天野 里咲	量子化学計算とFDTD電磁場計算を融合した光-分子相互作用を用いた一般化遷移モーメント
P134	福居 佳太郎	s-インダセン誘導体の構造と赤外吸収スペクトルについての量子化学計算
P135	山田 大介	反応性軌道エネルギー論による外圏型電子移動反応の再解釈
P136	松崎 洋市	有機半導体光触媒による水分解反応の機構解明
P137	成田 真央	フェニトインとキラルアミンを配位子とする銅(II)錯体のDFT計算
P138	奥谷 星太郎	インフルエンザウイルスのヘマグルチニンのT199I変異に関するMD-FMO連携解析
P139	加藤 大貴	人工分子モーター光異性化における多状態非断熱ダイナミクス

3日目 5/20(水)

10:30-11:50 (80分) ポスター発表2 (P201-P239)

P201	大澤 弘和	水溶性高分子ポリビニルアルコールのガラス転移と関連過程における動的挙動の解析
P202	馬場 玲壮	Block-Encoding法による測定回数削減を目指した変分量子アルゴリズムの開発
P203	清水 良真	分子シミュレーションと深層学習による金属酵素阻害剤の評価
P204	坂本 拓登	外部電場下での酸素欠陥を有するCeO ₂ 表面上における水素移動に関する理論的研究
P205	和田 望	ペロブスカイト水素化物のヒドリド伝導高速化に向けた材料シミュレーション
P206	大石 桃李	NNP分子動力学法による酸化ジルコニウム/水界面の構造およびプロトンダイナミクス解析
P207	元木 康平	同位体効果の電子構造起源: 多成分密度汎関数法による新しい理解
P208	陳 元杰	異なるイオン液体環境下におけるペプチド構造平衡の自由エネルギー解析
P209	Kambale, Eliakim, Mathias	Field-Dependent Redox Thermodynamics of MoO _m H _n Surface Species on Cu(111) and Ni(111) Surfaces under Hydrogen Evolution Conditions
P210	小山 周介	ペプチドのランダム凝集の全原子MD解析
P211	多田 幸平	グランドカノニカルモンテカルロ法を用いた電位シミュレーションにおけるパラメータ決定の手法依存性
P212	白男川 貴史	化学空間における応答物性の反対称性則
P213	高 海斗	4f-2p, -3d系化合物における分子内交換相互作用の汎関数・基底関数依存性
P214	和田 諒	チオフェンの励起状態緩和ダイナミクスに関する理論的研究
P215	柴崎 秀斗	非Aufbau配置に基づくTDDFTによる縮退系の記述
P216	盛田 歩花	脂質二重膜ストーク形成自由エネルギーのモデル依存性と反応座標の検討
P217	内藤 久稔	N成分系ガスハイドレートの構造安定性評価と構造変化剤探索
P218	秋永 ちひろ	極性に応じた強度を示す蛍光ソルバトクロミック色素についての理論的研究
P219	長野 彩奈	トリアゼン化合物を用いた不活性アレーン変換反応の理論設計
P220	杉村 潤輝	機械学習ポテンシャルシミュレーションと振電相互作用解析によるβ-エストロジオールマトリックスにおける発光増強機構の解明
P221	石田 大己	全原子MDを用いたパラセタモールの核形成過程の動力学解析
P222	岡部 涼	全原子MD計算による架橋高分子膜内イオン輸送機構の分子論的解明
P223	岩澤 遥人	ポルフィリン型単原子触媒を用いた二酸化炭素還元反応における反応中心金属の影響に関する理論的研究
P224	尾花 俊輔	ハイゼンベルク描像に基づく非エルミートハミルトニアンの新規量子アルゴリズム
P225	松本 優太	量子化学計算に基づくビスペリアズレンの開殻電子状態に対する置換基導入効果の検討
P226	石丸 優樹	金担持NiO系触媒によるアリルアルコール異性化の理論的研究
P227	米森 朋久	Au/γ-Al ₂ O ₃ 触媒によるCO酸化反応に関する理論的研究
P228	船田 宙軌	外部電場下におけるフラーレン吸着タングステン表面のDFTB計算
P229	坂井 錬	二重CISおよび最大重なり追跡による高精度・低コストな内殻励起状態計算
P230	中島 そら	配位パターン列挙に基づくランタニド錯体のin silico安定構造予測
P231	岡澤 一樹	積層芳香族性を有するπ積層分子接合の電気伝導特性に関する理論的研究
P232	柴田 果歩	置換基導入がBODIPYのフロンティア軌道に与える影響に関する理論研究
P233	島崎 智実	凸クラスタリング回帰を用いたアクリレート系ラジカル反応の解釈的解析
P234	佐伯 修都	溶質の電子状態を考慮した効率的な溶媒和自由エネルギー計算手法の開発
P235	今村 心	DFT計算と動的モンテカルロ法を組み合わせた反応機構解析—高温条件下におけるNドープグラフェンからのN ₂ 生成機構について
P236	Nasu, Ryota	パドルホイール型Ru二核錯体とTCNQ誘導体からなる金属有機構造体の骨格構造変化による電子状態制御に関する理論研究
P237	原田 菜依	タンパク場が再構成ミオグロビンの電子状態に及ぼす影響に関する理論研究
P238	森 惟月	力学作用によって誘起される高分子鎖切断の遷移状態探索
P239	杉下 大樹	擬似ペア行列による2体キュムラントの行列表現

3日目 5/20(水)

13:00-14:20 (80分) ポスター発表3 (P301-P339)

P301	米谷 佳晃	ペリレン誘導体ダイマーの相対配置とエキシトンカップリング
P302	加地 涼真	溶媒和自由エネルギー計算による構造エントロピーの厳密計算法
P303	小柴 拓実	凝縮系核酸塩基対における二重水素移動の多次元波束動力学解析
P304	小磯 太楊	単分子磁石の理論設計に向けた分子振動と磁性の相関に関する理論研究
P305	伊藤 嘉宏	開殻分子ジフルオロキノキサンの単分子電気伝導性に関する理論的研究
P306	奥出 信一郎	光合成で酵素ルビスコが毎秒大気中から固定するCO ₂ 分子の個数の第一原理計算による再現
P307	田中 玲央	通電状態のNi/ZrO ₂ 表面における電子・原子核ダイナミクスに関する理論計算研究
P308	楊 建飛	Enhanced Neural Quantum State for Many Body Simulation
P309	Otani, Yutaro	DOCI多参照摂動法のDMRG法による解法
P310	大東 優太	ポリビニルアルコールが構成する化学ゲル系に対する有機分子種の分配の自由エネルギー解析
P311	石井 良樹	室温イオン液体のMDデータに基づく輸送係数のスパースモデリング
P312	内山 日乃	N ₂ O/Ir ₂ O ₃ の吸着状態及びIRスペクトルの理論研究
P313	岸 亮平	反芳香族分子のπ二量体の電子励起と配置間相互作用についての理論研究: 回転積層の場合
P314	内藤 拓海	位置依存の誘電率依存密度汎関数法による分子-陽電子結合の理論的研究
P315	難波 知太郎	気相反応を利用した誘導結合プラズマ質量分析法における反応解析手法の開発
P316	Okuno, Yukihiko	Accuracy and Potential of Hardware-Efficient Ansätze for Molecular Ground and Excited State Electronic Structure Calculations
P317	Yagi, Takumi	Raman scattering theory based on the Longuet-Higgins representation
P318	笠谷 颯生	分割統治スピン射影UHF法による大規模静的電子相関計算
P319	Shimomiya, Kirato	水中のポリビニルアルコールと有機小分子の相互作用
P320	衣川 翔真	Coポルフィリン錯体触媒の二量体形成に関する理論研究
P321	二瓶 諒	非断熱分子動力学法と二準位モデルに基づく凝縮系電子移動反応の微視的遷移過程の解析
P322	Yeh, Hsing-chen	Comparative Molecular Dynamics Study of Thiazole Orange Binding with G-quadruplex: Impact of K ⁺ and Na ⁺ Ion Environments on Probe Dynamics
P323	Sakamoto, Yusuke	酸化セリウム表面上における水素拡散速度の理論的評価
P324	大久保 明彦	分子動力学シミュレーションを用いた凝縮系を表現する分子記述子の検討
P325	大西 未優	金属クラスターの構造およびサイズ効果に関する理論的研究
P326	小室 洋人	分割統治PBC計算に基づく分子性結晶の局所励起状態計算法の開発
P327	泉 禎人	分割統治VQE計算におけるノイズの影響の検証
P328	重光 保博	吸込項付Smoluchowskiモデルに基づく動的溶媒効果の解析と考察
P329	板倉 央奈	ロジウム錯体によるベンゾフラン合成に関する理論的研究: 複核錯体の触媒活性の起源
P330	浅居 竜一	量子化学計算に基づくメチレン架橋シクロパラフェニレンの発光機構の解明
P331	久保 皓暉	接着界面のはく離過程における多峰的エネルギー地形
P332	大野 未貴	単一アミノ酸変異によるペプチドの膜摂動機構の変化に関する全原子MD解析
P333	藏田 蓮弥	リンカー架橋された異種ペンタセン誘導体二量体における分子内一重項分裂に関する理論研究
P334	赤田 大和	第一原理電気化学計算に適した標準水素電極の絶対電極電位の提案
P335	Hu, Zhengnan	Origin of Efficient Near-Infrared Emission of Triphenylamine-Benzothiadiazole Derivative
P336	橋川 武知	深層強化学習による遷移状態探索法の開発とペプチド分子への適用
P337	堀江 佑太郎	Meta-GGA汎関数に基づくNaCl水溶液の伝導率予測
P338	植田 英豊	温度相転移型液晶系におけるネマチック-等方相転移のMD解析
P339	高 敏	Computational Exploration and Design of Catalytic Reactions