

# 口頭発表プログラム

1日目 5/18(月)

10:00-10:10(10分) 開会挨拶

10:10-11:30(80分) 口頭発表(1L01-1L04)

1L01	増井 陸	Mechanism of protecting a functional protein identified by quantum-HPC hybrid workflow
1L02	杉崎 研司	ハミルトニアンシミュレーションに基づく量子選択配置間相互作用法の開発
1L03	佐藤 健	古典計算可能な変分量子ソルバー
1L04	Furukawa, Naoki	Quantum-Selected Configuration Interaction based on Orbital-Optimized Pair Ansatz

11:30-12:40(70分) 休憩(昼食)

12:40-14:00(80分) 口頭発表(1L05-1L08)

1L05	高塚 和夫	理論化学における量子entanglementとdetanglement: $H_2 + \rightarrow H^{0.5++} H^{0.5+}$ は正しいか?
1L06	山田 篤志	Maxwell方程式と半古典電子力場モデルを結合した分子シミュレーションの開発とシリコン薄膜のレーザーアブレーション
1L07	大谷 優介	有機材料の光誘起変形をもたらす電子励起状態ダイナミクスのTD-DFTB-MDシミュレーション解析
1L08	Mineo Hirobumi	Unidirectional pi-electron rotations for the helical-photo-dressed states in aromatic ring molecules

14:00-14:10(10分) 休憩

14:10-15:30(80分) 口頭発表(1L09-1L12)

1L09	砂賀 彩光	変分的振動理論に基づくメタノールの振動状態と遷移強度
1L10	吉田 悠一郎	Seniority-zero spaceに基づくQSCI法の改良とQSCI-AFQMC法への応用
1L11	曲 立豪	反応空間投影法に基づく酵素反応の経路分岐制御機構の解明
1L12	宮本 孟	量子リソース理論に基づく一重項分裂の収率上限に関する理論研究

15:30-15:40(10分) 休憩

15:40-17:00(80分) 口頭発表 国際交流セッション 1(1L01,1L13-1L15)

1L01	Jer-Lai Kuo	Ab Initio Algorithms to Link Potential Energy Surfaces with Experimental Vibrational Spectra
1L13	Thomsen, Bo	Enabling Large Scale Path Integral Simulations of Water using GPUs
1L14	Glover, William, J	Water Catalyzes the Decay of a Ground-State Twisted Intermediate During the Electronic Relaxation of Uracil
1L15	Tiwari, Ashwani, Kumar	Dynamics of Water Dissociation on Metal Surfaces

17:00-17:10(10分) 休憩

17:10-18:30(80分) 口頭発表 国際交流セッション 2(1L02,1L03,1L16,1L17)

1L02	Tsai, Hui-Hsu, Gavin	Accelerating Photovoltaic Discovery: Navigating Uncharted Molecular Space via Generalizable Graph Deep Learning
1L03	Lin, Kun-Han	Understanding Gas Sensing through Multiscale Simulations of Impurity-Modulated Charge Transport
1L16	Tsai, Min-Yeh	Diffusion with a Twist: Multiscale Simulations Reveal Interfacial Energy Landscapes Governing Amyloid- $\beta$ Dynamics
1L17	Tsai, Ming-Kang, Brad	Low-Dimensional Molecular Representations for Efficient Predicting the Photophysical Properties of Organometallics

## 2日目 5/19(火)

9:00-10:20(80分) 口頭発表(2L01-2L04)

2L01	日沼 洋陽	原子拡散係数の統計分布による拡散挙動の検出
2L02	水流 翔太	S <sub>1</sub> /S <sub>0</sub> 円錐交差を記述する単参照結合クラスター理論
2L03	Nguyen, Thanh Phuc	Variational Ground State of Strongly Coupled Systems
2L04	甲田 信一	一般的かつスケラブルな原子マッピング

10:20-10:30(10分) 休憩

10:30-11:50(80分) ポスター発表1 (P101-P139)

本資料後半のポスター発表プログラムにて掲載

11:50-12:50(60分) 休憩(昼食)

12:50-14:20(90分) 産学特別セッション(IL04-IL07)

IL04	鷺津 仁志	企業・大学の経験に基づく研究ベースト型研究室の創生
IL05	松下 雄一郎	境界を越える楽しさ: 量子コンピュータを用いた基礎研究からビジネスへ
IL06	本田 康	理論化学・計算化学の産業界への普及の取り組み
IL07	河東田 道夫	学術界から産業界へと広がる理論化学者の多様なキャリアの選択肢

14:20-14:30(10分) 休憩

14:30-15:50(80分) 口頭発表(2L05-2L08)

2L05	池田 龍志	静電相互作用と整合する原子特徴量モデルの開発と機械学習力場への応用
2L06	黒田 直也	原子核応用のための97元素を網羅する汎用機械学習原子間ポテンシャルの開発
2L07	高木 牧人	Sn系およびSr系ペロブスカイト表面における欠陥とパッシベーションに関する理論的研究
2L08	松本 健太郎	オレフィン重合触媒におけるイオン対活性種会合体の構造と安定性に対する理論的研究

15:50-16:00(10分) 休憩

16:00-16:50(50分) 奨励賞受賞講演(IL08,IL09)

IL08	住谷 陽輔	量子化学計算を基盤とした理論開発: 反応経路探索法・速度論解析法・接着分子理論
IL09	堤 拓朗	低次元反応空間に基づく反応動力学解析法の開発と応用

16:50-17:00(10分) 休憩

17:00-17:50(50分) 理論化学会総会

17:50-18:00(10分) 移動

18:00-20:00(120分) 懇親会

## 3日目 5/20(水)

9:00-10:20(80分) 口頭発表(3L01-3L04)

3L01	平野 智倫	エネルギー分布の重なりに立脚した効率的な振動差スペクトル計算手法の開発
3L02	桑畑 和明	ミュオニウム化分子のHFCCにおける多自由度量子効果の役割
3L03	三浦 伸一	メタン分子をドーブしたパラ水素クラスターの構造と超流動性
3L04	笠原 健人	状態間遷移の積分方程式理論

10:20-10:30(10分) 休憩

10:30-11:50(80分) ポスター発表2(P201-P239)

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3(P301-P339)

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	松岡 和	パーチャル配位子法と反応経路自動探索法の統合による新反応設計・触媒最適化手法の開発と応用
3L06	永島 佑貴	分子振動を利用した有機光反応:理論提案と実験的検証
3L07	田中 佑一	Ansa-zirconocene触媒によるプロピレン重合の立体規則性の再現:REMD-RM法とその適用
3L08	永井 哲郎	アニオン交換膜のFaber-Ziman型部分構造因子に基づくX線散乱解析

15:50-16:00(10分) 閉会挨拶