

講演プログラム

口頭発表：20分（発表15分 質疑応答4分 交代1分） ポスター発表：80分
奨励賞受賞講演：30分（討論含）

5月18日（月）

開会挨拶（10:00-10:10）

- | | | |
|-------|------|--|
| 座長 | | 大谷 優介（東北大金研） |
| 10:10 | 1L01 | ○増井 陸（Quantinuum K.K.），佐藤 昇（大分大医），山本 憲太郎（Quantinuum K.K.），ピーダーセン 珠杏（Quantinuum K.K.），Ramo, David, Muñoz（Quantinuum）
Mechanism of protecting a functional protein identified by quantum-HPC hybrid workflow |
| 10:30 | 1L02 | ○杉崎 研司（デロイト トーマツ, CQuERE, TCG CREST, 慶大量子セ），菅野 志優（三菱ケミカル, 慶大量子セ），井床 利生（IBM, 慶大量子セ），佐久間 怜（JSR, 慶大量子セ），山本 直樹（慶大情報理工, 慶大量子セ）
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 |
| 10:50 | 1L03 | ○佐藤 健（東大院工），Lang, Haifeng（東大院工），古川 直樹（東大院工），石川 顕一（東大院工），Gujarati, Tanvi（IBM Quantum），Motta, Mario（IBM Quantum），川島 雪夫（IBM Quantum）
古典計算可能な変分量子ソルバー |
| 11:10 | 1L04 | ○Furukawa, Naoki（東大院工），Lang, Haifeng（東大院工），Kawashima, Yukio（IBM Quantum），Gujarati, Tanvi（IBM Quantum），Ishikawa, Kenichi, L（東大院工），Sato, Takeshi（東大院工）
Quantum-Selected Configuration Interaction based on Orbital-Optimized Pair Ansatz |

休憩（11:30-12:40）

- | | | |
|-------|------|---|
| 座長 | | 甲田 信一（分子研） |
| 12:40 | 1L05 | ○高塚 和夫（京大福井センター）
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？ |

- 13:00 1L06 ○山田 篤志 (防衛大)
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
- 13:20 1L07 ○大谷 優介 (東北大金研), 久保 百司 (東北大金研)
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
- 13:40 1L08 ○Mineo, Hirobumi (Van Lang U.)
Unidirectional pi-electron rotations for the helical-photo-dressed states in aromatic ring molecules

休憩 (14:00-14:10)

- 座長 松本 健太郎 (名大院情)
- 14:10 1L09 ○砂賀 彩光 (ELTE)
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
- 14:30 1L10 ○吉田 悠一郎 (阪大QIQB), 室越 拓真 (阪大QIQB), 中川 理夢 (TOPPANホールディングス), 森 千紘 (TOPPANホールディングス), 片山 雄太 (TOPPANホールディングス), 黒田 直也 (阪大QIQB), 古川 茂樹 (TOPPANホールディングス), 田上 英恵 (TOPPANホールディングス), 水上 渉 (阪大QIQB)
Seniority-zero spaceに基づくQSCI法の改良とQSCI-AFQMC法への応用
- 14:50 1L11 ○曲 立豪 (北大院理), 堤 拓朗 (北大院理), 小野 ゆり子 (北大院理), 武次 徹也 (北大院理, 北大WPI-ICReDD)
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
- 15:10 1L12 ○宮本 孟 (阪大QIQB), 黄海 仲星 (阪大QIQB), Spaventa, Giovanni (Institute of Theoretical Physics & IQST, Ulm University), Lautenbacher, Lea (Institute of Theoretical Physics & IQST, Ulm University), Huelga, Susana, F (Institute of Theoretical Physics & IQST, Ulm University), Plenio, Martin, B (Institute of Theoretical Physics & IQST, Ulm University), 水上 渉 (阪大QIQB)
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

休憩 (15:30-15:40)

国際交流セッション1 (International Session 1)

- Chairperson Junya Hasegawa (Hokkaido University)
- 15:40 IL01 ○Kuo, Jer-Lai (IAMS, AS)
Ab Initio Algorithms to Link Potential Energy Surfaces with Experimental Vibrational Spectra
- 16:00 1L13 ○Thomsen, Bo (JAEA - CCSE) , Shiga, Motoyuki (JAEA - CCSE)
Enabling Large Scale Path Integral Simulations of Water using GPUs
- 16:20 1L14 ○Glover, William, James (NYU Shanghai, NYU)
Water Catalyzes the Decay of a Ground-State Twisted Intermediate During the Electronic Relaxation of Uracil
- 16:40 1L15 ○Tiwari, Ashwani, Kumar (Hokkaido University, IISER Kolkata)
Dynamics of Water Dissociation on Metal Surfaces

休憩 Break (17:00-17:10)

国際交流セッション2 (International Session 2)

- Chairperson Tetsuya Taketsugu (Hokkaido University)
- 17:10 IL02 ○Tsai, Hui-Hsu, Gavin (NCU)
Accelerating Photovoltaic Discovery: Navigating Uncharted Molecular Space via Generalizable Graph Deep Learning
- 17:30 IL03 ○Lin, Kun-Han (NTHU, Taiwan) , Lin, Li-You (NTHU, Taiwan)
Understanding Gas Sensing through Multiscale Simulations of Impurity-Modulated Charge Transport
- 17:50 1L16 ○Tsai, Min-Yeh, (Victor) (CCU)
Diffusion with a Twist: Multiscale Simulations Reveal Interfacial Energy Landscapes Governing Amyloid- β Dynamics

5月19日 (火)

- 座長 池田 龍志 (東大院工)
- 9:00 2L01 ○日沼 洋陽 (産総研)
原子拡散係数の統計分布による拡散挙動の検出
- 9:20 2L02 ○水流 翔太 (理研R-CCS), Kedžuch, Stanislav (理研R-CCS), Noga, Jozef (Comenius University), 中嶋 隆人 (理研R-CCS)
S₁/S₀円錐交差を記述する単参照結合クラスター理論
- 9:40 2L03 ○Nguyen, Thanh Phuc (Kyoto University)
Variational Ground State of Strongly Coupled Systems
- 10:00 2L04 ○甲田 信一 (分子研, 総研大), 斉藤 真司 (分子研, 総研大)
一般的かつスケーラブルな原子マッピング

休憩 (10:20-10:30)

10:30-11:50 **ポスター発表 セッション1 (P101-P139)**

休憩 (11:50-12:50)

産学特別セッション

- 座長 白井 聡一 (豊田中研), 増子 貴子 (京セラ株), 東 雅大 (名大院情)
- 12:50 IL04 招待講演
○鷲津 仁志 (兵庫県大院情報, 計算科学研究所)
企業・大学の経験に基づく研究ベースト型研究室の創生
- 13:10 IL05 招待講演
○松下 雄一郎 (Quemix)
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
- 13:30 IL06 招待講演
○本田 康 (HPCシステムズ)
理論化学・計算化学の産業界への普及の取り組み(仮)

13:50 IL07 招待講演
○河東田 道夫 (RIST)
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

休憩 (14:10-14:30)

座長 平野 智倫 (東北大院理)
14:30 2L05 ○池田 龍志 (東大院工), 中山 哲 (東大院工)
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

14:50 2L06 ○黒田 直也 (阪大QIQB), 石原 健次 (阪大QIQB, 阪大院理), 塩田 知弥 (阪大QIQB), 水上 渉 (阪大QIQB)
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

15:10 2L07 ○高木 牧人 (横浜市大院生命ナノ), 河原 虎太郎 (横浜市大院生命ナノ), 新城 涼太 (横浜市大院生命ナノ), 立川 仁典 (横浜市大院生命ナノ), 山下 晃一 (横浜市大院生命ナノ), 島崎 智実 (横浜市大院生命ナノ)
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

15:30 2L08 ○松本 健太郎 (名大院情報)
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

休憩 (15:50-15:55)

奨励賞受賞講演

座長 篠田 渉 (岡山大基礎研)
15:55 IL08 ○住谷 陽輔 (山口大院創成)
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

16:25 IL09 ○堤 拓朗 (北大院理)
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

休憩 (16:55-17:00)

理論化学会総会 (17:00-18:00)

移動 (18:00-18:10)

懇親会 (18:10-20:10)

5月20日 (水)

- 座長 松岡 和 (北大ICReDD)
- 9:00 3L01 鈴木 皓陽 (東北大院理), ○平野 智倫 (東北大院理), 森田 明弘 (東北大院理)
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
- 9:20 3L02 ○桑畑 和明 (東京科学大学, 横浜市立大学), 立川 仁典 (横浜市立大学)
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
- 9:40 3L03 ○三浦 伸一 (金沢大数物)
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
- 10:00 3L04 ○笠原 健人 (阪大院基礎工), 岡部 涼 (阪大院基礎工), Chia-en, Chang (カリフォルニア大リバーサイド校), 森 俊文 (京大院工), 松林 伸幸 (阪大院基礎工)
状態間遷移の積分方程式理論

休憩 (10:20-10:30)

10:30-11:50 **ポスター発表 セッション2 (P201-P239)**

休憩 (11:50-13:00)

13:00-14:20 **ポスター発表 セッション3 (P301-P339)**

休憩 (14:20-14:30)

座長		桑畑 和明 (科学大)
14:30	3L05	○松岡 和 (北大ICReDD, JST-ERATO), 大城 泰平 (北大ICReDD, JST-ERATO), 田中 耕作三世 (北大ICReDD, JST-ERATO), 山田 蓮 (北大院総化), Staub, Ruben (北大ICReDD), Varnek, Alexandre (北大ICReDD, ストラスブール大), 美多 剛 (北大ICReDD, JST-ERATO), 原淵 祐 (北大ICReDD, JST-ERATO), 岩田 覚 (北大ICReDD, JST-ERATO, 東大情報理工), 前田 理 (北大ICReDD, JST-ERATO, 北大院理) バ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
14:50	3L06	○永島 佑貴 (東大院薬, JST創発) 分子振動を利用した有機光反応：理論提案と実験的検証
15:10	3L07	○田中 佑一 (名大院情報, 名大価値創造教育研究センター), 松本 健太郎 (名大院情報), 長岡 正隆 (名大未来社会創造機構) 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
15:30	3L08	○永井 哲郎 (岡山大基礎研), 川井田 拓弥 (福岡大院理), 吉田 亨次 (福岡大理化) 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

閉会挨拶 (15:50-16:00)

5月19日 (火)

ポスター発表セッション1 (10:30-11:50)

- P101 ○MOKHTAR, BENJAMIN JIHAN, OSSAMA (SIT)
Quantum Jacobi: Hybrid Quantum-Classical Givens Rotations for Reduced Measurement Cost
- P102 ○内山 諒一 (早大院先進理工), 中嶋 裕也 (早大理工総研, ENEOSホールディングス株式会社), 田中 悠太 (ENEOSホールディングス株式会社), 清野 淳司 (早大院先進理工, 早大理工総研)
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 西川 琴美 (岐阜大・工), 田中 輝 (岐阜大・工), 桑畑 和明 (科学大・物質情報), 立川 仁典 (横市大院・生命ナノ), ○宇田川 太郎 (岐阜大・工)
負の熱膨張特性をもつ $\text{H}_3\text{Co}(\text{CN})_6$ 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 (阪大院基礎工), 岡部 涼 (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)
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 (NCCU)
Free Energy Analysis of Dansylglycine Dissociation from Human Serum Albumin
- P106 ○高山 光男 (横浜市大), 関本 奏子 (横浜市大)
大気圧低温プラズマ成分 (H_2O , $\text{H}\cdot$, e^-) からの $[\text{H}_2\cdots\text{H}_2\text{O}]-(\text{H}_2\text{O})_n$ の生成
- P107 ○Sara, Suzuki (京大院工), Mazzeo, Patrizia (Pisa Univ.), Cupellini, Lorenzo (Pisa Univ.), Sato, Hirofumi (京大院工, 京大福井センター), Mennucci, Benedetta (京大院工)
Solvent effect on the excited-state dynamics of an A-D-A quadrupolar molecule

- P108 ○金ヶ崎 晴也（東北大院・理），平野 智倫（東北大院・理），森田 明弘（東北大院・理）
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（デロイト トーマツ），荒川 晶彦（中外製薬），大澤 泰生（中外製薬），寺部 雅能（デロイト トーマツ），杉崎 研司（デロイト トーマツ, CQuERE, TCG CREST）
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（大阪大），多田 幸平（大阪大），廣田 陸哉（大阪大），北野 幸親（大阪大），岸 亮平（大阪大），北河 康隆（大阪大）
トリオキソトリアンギュレン誘導体-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（豊田中研），宮本 開任（豊田中研）
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（北大院総化），堤 拓朗（北大院理），武次 徹也（北大院理, 北大WPI-ICReDD）
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 (Kyushu University) , Takamatsu, Akihiko (Kyushu University) , Tada, Tomofumi (Kyushu University)
Atomistic kinetic Monte Carlo analysis for the interplay between Oxygen Reduction Reaction and proton conduction at Pt-Perovskite Interfaces
- P114 ○西野康生 西野 康生（阪大院基礎工），北野幸親 北野 幸親（阪大院基礎工），多田幸平 多田 幸平（阪大院基礎工, 阪大QIQB），岸亮平 岸 亮平（阪大院基礎工, 阪大ICS-OTRI, 阪大QIQB），北河康隆 北河 康隆（阪大院基礎工, 阪大ICS-OTRI, 阪大QIQB, 阪大OTRI-SPIN）
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（東大院工），池田 龍志（東大院工），中山 哲（東大院工）
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（岡山大院自然），松本 正和（岡山大基礎研）
分極表面からの氷Ih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（芝浦工大院理工），阿部 将大（芝浦工大院理工），堀 顕子（芝浦工大工），土持 崇嗣（芝浦工大工）
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（横浜市大院生命ナノ），金子 正徳（横浜市大院生命ナノ）
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（北大院総合化学），小野 ゆり子（北大院理, 量子化学探索研究所），林 裕樹（名大物質科学国際研究センター），武次 徹也（北大院理, 北大WPI-ICReDD）
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（阪大院基礎工），松田 琢真（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）
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（東北大院・理），平野 智倫（東北大院・理），森田 明弘（東北大院・理）
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（早大先進理工），中井 浩巳（早大先進理工, 早大理工総研）
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（早大院先進理工），吉川 武司（東邦大薬, 早大理工総研），坂田 健（東邦大薬），中井 浩巳（早大院先進理工, 早大理工総研）
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（慶大院理工），稲垣 泰一（慶大院理工），東 雅大（名大院情報），畑中 美穂（慶大院理工, 分子研）
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（北大院総化），中西 達大（北大院総化），神原 龍冬（北大院総化），小野 ゆり子（北大院理, 量子化学探索研究所），武次 徹也（北大院理, 北大WPI-ICReDD）
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（近大理工），伊藤 杏美（近大理工），松本 紡季（近大理工），高橋 直大（近大理工），田中 仙君（近大理工），大久保 貴志（近大理工），鬼頭 宏任（近大理工）
新規Cubane型CuI錯体の発光機構の理論解析

- P127 ○高橋 朋之 (京大院工), 杉山 佳奈美 (京大院工, 国立情報研), 佐藤 啓文 (京大院工, 京大福井セ)
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 (北大院総化), 美多 剛 (北大WPI-ICReDD), 武次 徹也 (北大WPI-ICReDD, 北大院理), 常田 貴夫 (北大WPI-ICReDD, 神戸大院シス情)
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 (慶大院理工), 稲垣 泰一 (慶大院理工), 畑中 美穂 (慶大院理工, 分子研)
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 (東大院総文)
アセトニトリル溶液中でのキノリニ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 (山口大院創成), 住谷 陽輔 (山口大院創成)
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 (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)
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 (北大院総化), 武次 徹也 (北大院理), 岩佐 豪 (北大院理)
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 (阪大院基礎工), 松本 優太 (阪大院基礎工), 岡田 健治 (阪大院基礎工), 岸 亮平 (阪大院基礎工, 阪大QIQB, 阪大ICS-OTRI), 多田 幸平 (阪大院基礎工, 阪大QIQB), 北河 康隆 (阪大院基礎工, 阪大QIQB, 阪大ICS-OTRI, 阪大OTRI-Spin)
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 (北大院総化), 鶴田 雅也 (北大院総化), 武次 徹也 (北大院理, 北大WPI-ICReDD), 常田 貴夫 (北大WPI-ICReDD, 神戸大院シス情)
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 (日本製鉄先端研), 北河 康隆 (阪大院基礎工), 関 和明 (日本製鉄先端研), 白石 康浩 (阪大院基礎工), 平井 隆之 (阪大院基礎工)
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（東理大理），中根 大輔（東理大理），秋津 貴城（東理大理）
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（立教大理），新井 大貴（立教大理），芳根 僚平（立教大理），平塚 慧大（立教大理），土居 英男（立教大理），平野 秀典（慶應大理工），山本 詠士（慶應大理工），泰岡 顕治（慶應大理工），田中 成典（神戸大分子フォト研），望月 祐志（立教大理, 東大生産研）
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（東北大院理），菅野 学（東北大院理），美齊津 文典（東北大院理），河野 裕彦（東北大院理）
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

5月20日 (水)

ポスター発表セッション2 (10:30-11:50)

- P201 ○大澤 弘和 (静岡大学 創造科学技術大学院, 株式会社アイセロ), 鳥居 肇 (静岡大学 創造科学技術大学院, 静岡大学 工学部)
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 (京大院理), 倉重 佑輝 (京大院理, JST CREST, JST FOREST)
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 (広市大院・情), 齋藤 徹 (広市大院・情)
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 (北大院総合化学院), 飯田 健二 (北大触媒研), 長谷川 淳也 (北大触媒研)
外部電場下での酸素欠陥を有するCeO₂表面上における水素移動に関する理論的研究
- P205 ○和田 望 (芝浦工大理工), 福士 英里香 (芝浦工大理工), 大西 康生 (芝浦工大理工), 大口 裕之 (芝浦工大理工)
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 (東大院工), 池田 龍志 (東大院工), 中山 哲 (東大院工)
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 (中央大理工), 森 寛敏 (中央大理工)
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 (阪大院基礎工), Hansen, Stefan, Hervø (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)
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 (広大院先進理工), Rivera Rocabado, David, Samuel (広大院先進理工, 大阪公立大院理), Kanematsu, Yusuke (広大院先進理工), Ishimoto, Takayoshi (広大院先進理工)
Field-Dependent Redox Thermodynamics of MoO_mH_n Surface Species on Cu(111) and Ni(111) Surfaces under Hydrogen Evolution Conditions

- P210 ○小山 周介 (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)
ペプチドのランダム凝集の全原子MD解析
- P211 ○多田 幸平 (大阪大), 尾崎 弘幸 (産総研), 北野 幸親 (大阪大), 北河 康隆 (大阪大), 清林 哲 (産総研)
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 (分子研, 総研大), Krug, Simon, León (ベルリン工科大), 江原 正博 (分子研, 総研大), von Lilienfeld, O. Anatole (ベルリン工科大, トロント大, ベクター研)
化学空間における応答物性の反対称性則
- P213 ○高 海斗 (阪大院基礎工), 小磯 太陽 (阪大院基礎工), 多田 幸平 (阪大院基礎工, 阪大 ICS-OTRI), 岸 亮平 (阪大院基礎工, 阪大 ICS-OTRI, 阪大 QIQB, 阪大 RCSEC), 北河 康隆 (阪大院基礎工, 阪大 ICS-OTRI, 阪大 QIQB, 阪大 RCSEC, 阪大 OTRI-Spin)
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 (北大ICReDD), 神原 龍冬 (北大院総化), 周 之毅 (北大院工), 関川 太郎 (北大院工), 武次 徹也 (北大ICReDD, 北大院理)
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 (芝浦工大院理工), 毛利 文哉 (東京科学大理学院), 土持 崇嗣 (芝浦工大工)
非Aufbau配置に基づくTDDFTによる縮退系の記述
- P216 ○盛田 歩花 (岡山大院環境生命自然), Zhang, Daniel, Tianhou (岡山大基礎研), 篠田 渉 (岡山大基礎研)
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 (岡山大院自然), 松本 正和 (岡山基礎研)
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 (九大理), 鈴木聡 (九大理), 中野晴之 (九大理)
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 (山口大院創成), 國分 嵩亮 (千葉工大院工), 山川 一仁 (千葉工大院工), 原口 亮介 (千葉工大院工), 住谷 陽輔 (山口大院創成)
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 (京大院工, 京大福井セ), 藤原 絵美子 (京大福井セ), 春田 直毅 (京大院工, 京大福井セ), 大場 優生 (ENEOSホールディングス株式会社), 佐藤 徹 (京大院工, 京大福井セ)
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 -エストラ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 (阪大院基礎工), 松田 琢真 (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)
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 (阪大院基礎工), 田中 学 (都立大院都市環境), 矢ヶ崎 琢磨 (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)
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 (芝浦工大院理工)
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 (芝浦工大院理工), 土持 崇嗣 (芝浦工大工)
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 (阪大院基礎工), 岸 亮平 (阪大院基礎工, 阪大ICS-OTRI, 阪大QIQB), 岡田 健治 (阪大院基礎工), 多田 幸平 (阪大院基礎工, 阪大ICS-OTRI), 北河 康隆 (阪大院基礎工, 阪大ICS-OTRI, 阪大QIQB, 阪大OTRI-Spin)
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 (阪大理), 徳永 信 (九大理), 奥村 光隆 (阪大理)
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 (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)
Au/ γ -Al₂O₃触媒によるCO酸化反応に関する理論的研究
- P228 ○船田 宙軌 (近大院総理工), 鬼頭 宏任 (近大院総理工), Ravi, Kumar (近大院総理工), 柳澤 啓史 (静大電子工学研)
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 (芝浦工大院理工), 土持 崇嗣 (芝浦工大工), 樋口 和哉 (芝浦工大工), 汲田 開斗 (芝浦工大工)
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（北大院総化），小川 絃（北大院総化），赤間 知子（北大WPI-ICReDD），武次 徹也（北大WPI-ICReDD, 北大院理），小林 正人（北大WPI-ICReDD, 北大院理）
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（筑波大院数物），中原 未来（筑波大理工），八木 清（筑波大院数物）
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（阪大院基礎工），多田 幸平（阪大院基礎工），岸 亮平（阪大院基礎工, 阪大 QIQB, 阪大RCSEC, 阪大ICS-OTRI），北河 康隆（阪大院基礎工, 阪大QIQB, 阪大RCSEC, 阪大ICS-OTRI, 阪大OTRI-Spin）
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（横浜市大・生命ナノ），高木 牧人, 立川 典仁
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（阪大院基礎工），矢ヶ崎 琢磨（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（京大院工），浦谷 浩輝（京大院工），清水 俊介（東北大多元研），吉井 丈晴（東北大多元研），佐藤 啓文（京大院工, 京大福井セ）
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 —高温条件におけるNドープグラフェンからのN₂生成機構について
- P236 ○Nasu, Ryota（阪大院基礎工）
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 茉依（阪大院基礎工），多田 幸平（阪大院基礎工, 阪大ICS-OTRI），岸 亮平（阪大院基礎工, 阪大ICS-OTRI, 阪大QIQB, 阪大RCSEC），北河康隆（阪大院基礎工, 阪大ICS-OTRI, 阪大QIQB, 阪大RCSEC, 阪大OTRI-Spin）
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（山口大院創成），住谷 陽輔（山口大院創成）
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（早大院先進理工），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）
擬似ペア行列による2体キュムラントの行列表現

ポスター発表セッション3(13:00-14:20)

- P301 ○米谷 佳晃 (量研関西)
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 (阪大院基礎工), Hansen, Stefan, Hervø (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 (東北大院理), 菅野 学 (東北大院理), 美齊津 文典 (東北大院理), 河野 裕彦 (東北大院理)
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 (阪大院基礎工), 高 海斗 (阪大院基礎工), 多田 幸平 (阪大院基礎工, 阪大ICS-OTRI), 岸 亮平 (阪大院基礎工, 阪大ICS-OTRI, 阪大QIQB, 阪大RCSEC), 北河 康隆 (阪大院基礎工, 阪大ICS-OTRI, 阪大QIQB, 阪大RCSEC, 阪大OTRI-Spin)
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 (阪大院基礎工), 多田 幸平 (阪大院基礎工, 阪大ICS-OTRI), 岸 亮平 (阪大院基礎工, 阪大ICS-OTRI, 阪大QIQB, 阪大RCSEC), 北河 康隆 (阪大院基礎工, 阪大ICS-OTRI, 阪大QIQB, 阪大RCSEC, 阪大OTRI-Spin)
開殻分子ジフルオレノチオフェ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 (明治大学)
光合成で酵素ルビスコが毎秒大気中から固定するCO₂分子の個数の第一原理計算による再現
- P307 ○田中 玲央 (北大院・総合化学), 飯田 健二 (触媒研), 長谷川 淳也 (触媒研)
通電状態のNi/ZrO₂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 (東大工), 佐藤 健 (東大工)
Enhanced Neural Quantum State for Many Body Simulation
- P309 ○大谷 優太郎 (都立大), 中谷 佳萌 (都立大), 中谷 直輝 (都立大)
DOCI多参照摂動法のDMRG法による解法

- P310 ○大東 優太 (阪大院基礎工), 岡部 涼 (阪大院基礎工), 笠原 健人 (阪大院基礎工), 矢ヶ崎 琢磨 (阪大院基礎工), 松林 伸幸 (阪大院基礎工)
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 (北里大未来工), 井上 翔太 (北里大未来工), 中西 祐輔 (出光興産), 吉田 幸生 (出光興産), 渡辺 豪 (北里大未来工)
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 (北大院総化), 武次 徹也 (北大院理), 日隈 聡士 (産総研), 岩佐 豪 (北大院理)
N₂O/Ir₂Oの吸着状態及びIRスペクトルの理論研究
- P313 ○岸 亮平 (阪大院基礎工, 阪大QIQB, 阪大ICS-OTRI), 西野 康生 (阪大院基礎工), 岡田 健治 (阪大院基礎工), 藏田 蓮弥 (阪大院基礎工), 多田 幸平 (阪大院基礎工, 阪大ICS-OTRI), 北河 康隆 (阪大院基礎工, 阪大QIQB, 阪大ICS-OTRI, 阪大OTRI-Spin)
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 (横市大院生命ナノ), 吉田 大輔 (東北大院理), 立川 仁典 (横市大院生命ナノ), 島崎 智実 (横市大院生命ナノ)
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 ○Namba, Tomotaro (JAEA), Matsueda, Makoto (JAEA), Yanagisawa, Kayo (JAEA)
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 ○Yukihiro, Okuno (Fujifilm Corporation)
Accuracy and Potential of Hardware-Efficient Ansätze for Molecular Ground and Excited State Electronic Structure Calculations
- P317 ○Yagi, Takumi (Grad. Sch. Eng., Kyoto Univ., FIFC, Kyoto Univ.), Ota, Wataru (Grad. Sch. Eng., Kyoto Univ., FIFC, Kyoto Univ.), Haruta, Naoki (Grad. Sch. Eng., Kyoto Univ., FIFC, Kyoto Univ.), Sato, Tohru (Grad. Sch. Eng., Kyoto Univ., FIFC, Kyoto Univ.)
Raman scattering theory based on the Longuet-Higgins representation
- P318 ○笠谷 颯生 (北大院総化), 西田 叡倫 (北大院総化), 武次 徹也 (北大院理, 北大WPI-ICRReD), 小林 正人 (北大院理, 北大WPI-ICRReD)
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 ○下宮 輝斗（阪大院基礎工），矢ヶ崎 琢磨（阪大院基礎工），松林 伸幸（阪大院基礎工）
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（大阪大），多田 幸平（大阪大），廣田 陸哉（大阪大），岸 亮平（大阪大），北河 康隆（大阪大）
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（京都大学大学院工学研究科），浦谷 浩輝（京都大学大学院工学研究科），佐藤 啓文（京都大学大学院工学研究科）
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 (CCU, Dept. Chem. & Biochem.)
Comparative Molecular Dynamics Study of Thiazole Orange Binding with G-quadruplex: Impact of K⁺ and Na⁺ Ion Environments on Probe Dynamics
- P323 ○Sakamoto, Yusuke（東大院工）
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（早大院先進理工），藤波 美起登（早大理工総研），中井 浩巳（早大院先進理工，早大理工総研）
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（早大院先進理工），中田 彩子（MANA, NIMS），中井 浩巳（早大院先進理工，早大理工総研）
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（北大院総化），小川 絃（北大院総化），赤間 知子（北大WPI-ICReDD），武次 徹也（北大WPI-ICReDD, 北大院理），小林 正人（北大WPI-ICReDD, 北大院理）
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（北大院総化），西畑 駿（北大院総化），吉川 武司（東邦大薬），赤間 知子（北大WPI-ICReDD），武次 徹也（北大WPI-ICReDD, 北大院理），小林 正人（北大WPI-ICReDD, 北大院理）
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（長崎工技セ），大賀 恭（大分大理工）
吸込頂付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（北海道大院総合化学, 北海道大触媒研）, 宮崎 玲（北海道大触媒研）, 大野 祥平（大阪大院薬学研究科）, 植原 啓太（大阪大院薬学研究科）, 佐古 真（大阪大院薬学研究科）, 有澤 光弘（大阪大院薬学研究科）, Himo, Fahmi（Stockholm大有機化学分野）, 長谷川 淳也（北海道大触媒研）
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（京大院工）, 浦谷 浩輝（京大院工）, 河野 英也（理研開拓研）, 八木 亜樹子（名大院理）, 伊丹 健一郎（理研開拓研）, 佐藤 啓文（京大院工, 京大福井センター）
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（山口大院創成）, 住谷 陽輔（山口大院創成）
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（岡山大院環境生命自然）, 川口 祥正（京大化研）, 二木 史朗（京大院薬）, 篠田 渉（岡山大院環境生命自然, 岡山大基礎研）
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（阪大院基礎工）, 岡田 健治（阪大院基礎工）, 岸 亮平（阪大院基礎工, 阪大QIQB, 阪大ICS-OTRI）, 多田 幸平（阪大院基礎工, 阪大ICS-OTRI）, 北河 康隆（阪大院基礎工, 阪大QIQB, 阪大ICS-OTRI, 阪大OTRI-Spin）
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（九大総理工）, 辻 雄太（九大総理工）
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（Dept. Mol. Eng., Kyoto Univ., FIFC, Kyoto Univ.）, Haruta, Naoki（Dept. Mol. Eng., Kyoto Univ., FIFC, Kyoto Univ.）, Sato, Tohru（Dept. Mol. Eng., Kyoto Univ., FIFC, Kyoto Univ.）
Origin of Efficient Near-Infrared Emission of Triphenylamine-Benzothiadiazole Derivative
- P336 ○橘川 武知（阪大院理）, 山中 秀介（阪大院理）, 川上 貴資（阪大院理）, 奥村 光隆（阪大院理）
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 佑太朗（東大院工）, 池田 龍志（東大院工）, 中山 哲（東大院工）
Meta-GGA汎関数に基づくNaCl水溶液の伝導率予測

P338 ○植田 英豊 (阪大院基礎工), 吉川 航平 (阪大院基礎工), 岡部 涼 (阪大院基礎工), 加地 涼真 (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)
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

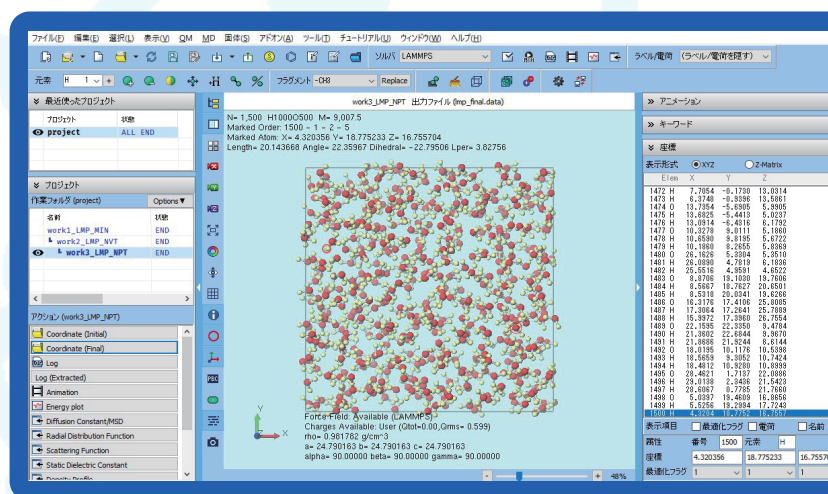
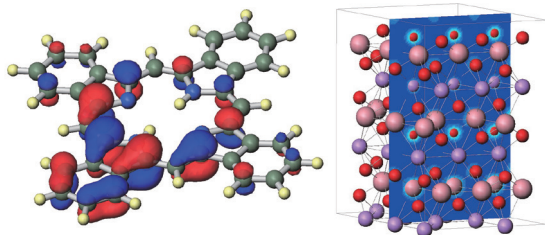
P339 ○高敏 (北大・WPI-ICReDD)
Computational Exploration and Design of Catalytic Reactions

winmostar

Winmostar は、MO、DFT、MD などのシミュレーション環境を提供する統合 GUI ソフトウェアです。
20 年以上の歴史を持ち、現在もお進化を続けています。

主な機能

- 1 様々な原子・分子構造の作成
分子、錯体、液体、アモルファス、
ポリマー、結晶、表面、界面など
- 2 シンプルかつ柔軟な計算条件の設定
GAMESS、Gaussian、LAMMPS、
Gromacs、Quantum ESPRESSO などに対応
- 3 様々な計算リソースのシームレスな切り替え
- 4 膨大なファイル・プロセスの自動管理
- 5 シミュレーションデータの変換
- 6 計算結果の解析・可視化、各種物性算出
45 種類以上の物性に対応



特徴

- ▶ 主要なシミュレーション手法を Winmostar だけで網羅
- ▶ 基礎原理の学習から受託計算まで充実したサポートで初心者でも安心
- ▶ 長年の開発・サポート実績を活用し高いコストパフォーマンス
- ▶ 実用的な入力ファイルを生成するのでソルバの学習に有用

導入実績 (2022年10月4日現在)

- ・メーカー 160 社、研究機関 26 機関、教育機関 105 機関で導入
- ・93 本の学術論文と 13 社の特許で引用
- ・74 の大学で授業・実習に利用、公的機関の講習会で採用



弊社リサーチフェローが執筆した
『LAMMPS による分子動力学シミュレーション』
が出版されました。

LAMMPS の実践的な利用方法に特化した解説書となります。
化学工業日報 8,800 円 (税込)

料金プラン (税別)

特定ユーザー ライセンス	民間企業 官公庁	¥ 360,000 ~
	教育機関	¥ 120,000 ~
サイト ライセンス		¥ 1,440,000 ~

全機能を 1 ヶ月間利用可能な無料トライアルと、
機能を限定した学生版および無償版を
Web から無料でダウンロードできます。

各ライセンスの詳細、ダウンロード、注文見積もりも Web にてご確認ください

winmostar

GET STARTED



株式会社クロスアビリティ

東京都文京区本郷4-1-5 石渡ビル3階

<https://x-ability.co.jp/>

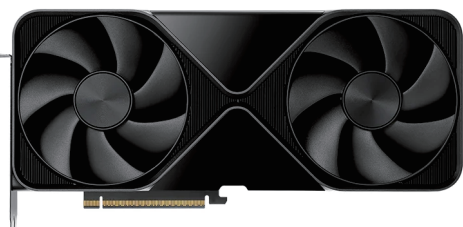
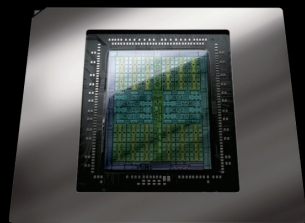
ULTIMATE AI & HPC

ENGINE FOR PROFESSIONAL AI WORKFLOWS

NVIDIA RTX PRO 6000 Blackwell Series

次世代アーキテクチャ Blackwell 採用 GPU

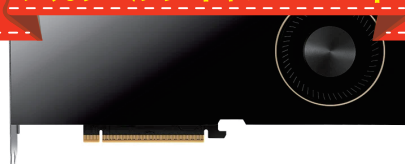
NVIDIA RTX PRO 6000 Blackwell シリーズは AI、HPC、シミュレーションやグラフィックスを扱うヘビーユーザー向けの高性能プラットフォームです。大容量メモリをはじめ、設計や科学技術計算等のプロジェクトを高速かつ正確に行う機能が搭載されており、エンタープライズグレードの信頼性で最適化されています。



NVIDIA RTX PRO 6000 Blackwell Workstation Edition

ソフトウェア開発者をはじめデータサイエンティスト、デザイナーやエンジニアといったヘビーユーザーに生産性やパフォーマンス、処理速度を提供します。

アカデミックキャンペーン中



NVIDIA RTX PRO 6000 Blackwell Max-Q Workstation Edition

AI およびニューラルレンダリング機能を提供し、1GPUから 4GPUへとシームレスにスケールアップし計算能力を倍増させます。



NVIDIA RTX PRO 6000 Blackwell Server Edition

GDDR7 96GBメモリを搭載し、エージェント AIやフィジカル AI、科学計算からレンダリング、3Dグラフィックス等幅広いユースケースに対応します

SPECIFICATION COMPARISON

Product Name	RTX PRO 6000 Workstation	RTX PRO 6000 Max-Q Workstation	RTX PRO 6000 Server	RTX 6000 Ada
Architecture	NVIDIA Blackwell	NVIDIA Blackwell	NVIDIA Blackwell	NVIDIA Ada Lovelace
CUDA Cores	24,064	24,064	24,064	18,176
Tensor Cores	752	752	752	568
AI TOPS	4,000 AI TOPS	3,511 AI TOPS	3,700 AI TOPS	-
FP32	125 TFLOPS	110 TFLOPS	120 TFLOPS	91.1 TFLOPS
GPU memory	96 GB GDDR7 + ECC	96 GB GDDR7 + ECC	96 GB GDDR7 + ECC	48GB GDDR6 + ECC
Memory interface	512-bit	512-bit	512-bit	384-bit
Memory bandwidth	1,792 GB/s	1,792 GB/s	1,597 GB/s	960 GB/s
Multi-Instance GPU	Supported	Supported	Supported	-
Max Power Consumption	600W	300W	Up to 600W (Configurable)	300W



株式会社HPCテック

本社：〒103-0006 東京都中央区日本橋富沢町 7-13
TEL:03-5643-2681 FAX:03-5643-2682
大阪営業所：〒532-0011 大阪市淀川区西中島4丁目5-1
TEL 06-6195-6464 FAX 06-6195-6468



info@hpctech.co.jp

あなたの計算が 世界の化学を加速する

計算化学はあらゆる化学の課題を解決する可能性を持っています。
しかし化学全体を見渡すと、計算を本格的に使っている研究はまだわずか2割程度。
あなたの経験と知見は、化学の未来を変える力になります。
私たちと一緒に、もっと多くの分野に計算化学を届けませんか。



インターン募集

対象

- 一般的な化学・物理分野での大学学部卒の資格を持つこと
- 量子化学計算・機械学習等、何らかの計算化学を用いた研究に携わった経験があること望ましい

就業体験地

京都または東京 ※遠隔地の方もご相談に応じます

会社概要

会社名：HPC システムズ株式会社
所在地：〒108-0022 東京都港区海岸 3-9-15 LOOP-X 8 階
株 式：東京証券取引所 グロース市場上場
資本金：2億3,151万円
社員数：136名

募集人数

募集枠には限りがあり、応募状況によってはお断りさせていただきます場合がございます。

お問い合わせ先

〒108-0022 東京都港区海岸 3-9-15 LOOP-X 8 階
HPC システムズ株式会社
採用担当 米澤／青木

T E L : 03-5446-5530

メール : hpcs_hr@hpc.co.jp

A Century of Scholarly Achievements

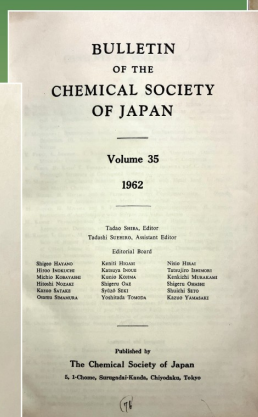
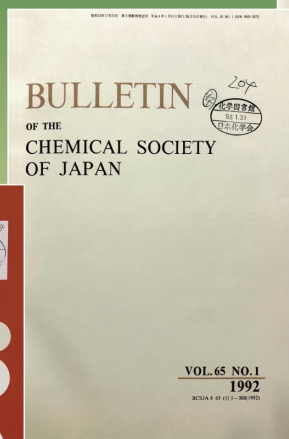
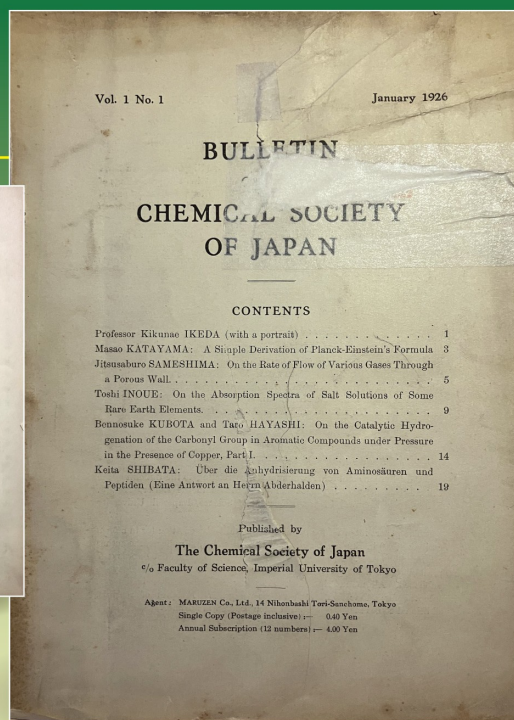
A photo of Dr. Kikunae Ikeda in the first issue of BCSJ.



Photo: KOJI OKUMURA (Forward Stroke)

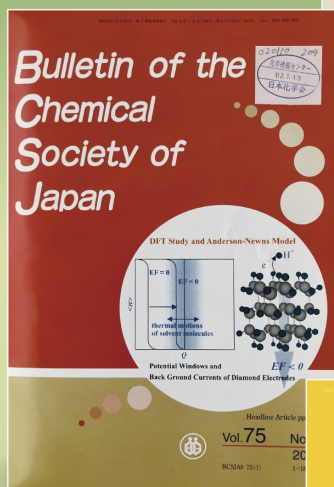
The Bulletin of the Chemical Society of Japan (BCSJ) was founded in 1926 as a pioneering chemistry journal publishing in both English and German. Since then, BCSJ has been publishing significant work spanning various fields of chemistry, except for the years 1945 and 1946. The 100th volume will appear in 2027.

First Issue
1926



vol.35/1962

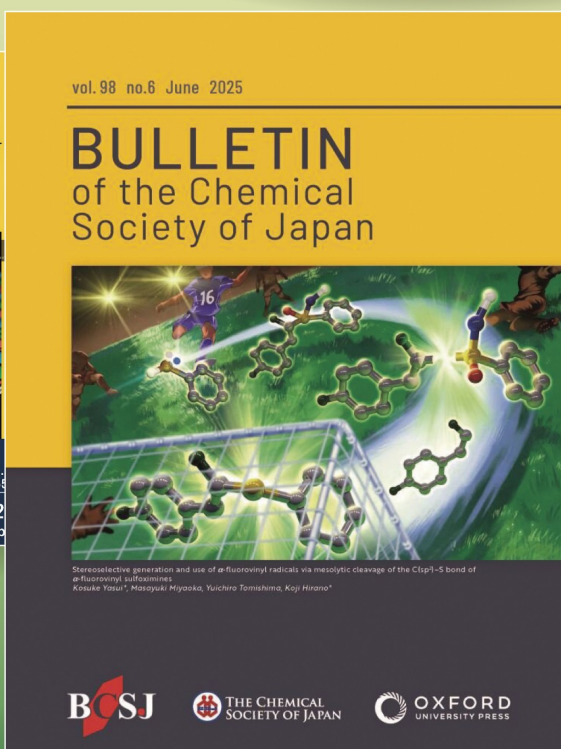
vol.65/no.1/1992



vol.75/no.1/2002



vol.95/no.3/2022



vol.98/no.6/2025

Volume 100 in
2027!



GPU & CPU ALL WATER COOLING SERVER RC GPU Server SAYUKI

RC水冷オリジナルユニットの進化系、GPU水冷モデルで参戦！
消費電力500W Over製品対応の高効率、冷却性能を実現！
性能ダウンの分岐点をクリアすることでパフォーマンスを引き出します。



GPU冷却ウォーターポンプユニット

GeForce系GPU専用のウォーターポンプユニットを1GPUごとに搭載可能です。
性能ダウンの分岐点と言われている80°Cを常時下回ることにより、可能な限り最大ブースト状態をキープします。



CPU冷却ウォーターポンプユニット

水冷静音サーバー RC CalmVシリーズ同様の水冷CPU冷却ウォーターポンプユニットを搭載。
TDP500Wを余裕で冷却する水冷冷却システムです。



常時70°Cラインを目指して

12時間のフル稼働テストでは、ほとんどの稼働時間を70°C以下で運用が可能でした。
空冷(弊社機)と比較した結果でも、高クロック維持を証明しております。

RC GPU Server SAYUKI Specification	
Case	EIA規格6Uラックマウントケース (スライドレール付属) / キャスター装着タワーケース運用可能
CPU	AMD EPYC™ / Intel Xeon® Scalable Processors 最大2基※TDP500W対応
Cooling	CPU&GPU: 水冷式 ウォータージャケット付属 Memory: 最大静圧: 16.7Pa / 音圧レベル: 23dB以下の専用冷却FAN
Memory	EPYC: MAX 24DIMM-SLOT / Xeon: MAX 16DIMM-SLOT
Storage	3.5inch HDD or 2.5inch SSD 最大4基 / 3.5inch ホットスワップベイ搭載
Network	2x 10G Base-T
Power Supply	100V/200V非冗長電源 (100V時:2400W 200V時: 4000W)
OS	Linux(各種ディストリビューション対応) / Windows 他
GPU	GeForce RTX4090 水冷エディション最大4基 ※RTX50シリーズ対応準備中
Support	1年 / 3年ハードウェアサポート (GPUはメーカーに準拠)

※RC GPU Server SAYUKIは水冷静音サーバー RC CalmVシリーズ同様の冷却方式を採用しておりますのでメンテナンスフリーになります。



リアルコンピューティング株式会社

〒135-0041 東京都江東区冬木9-13 tel: 03-5621-7211 fax: 03-5621-7212
URL: <http://www.realcomputing.jp/> Mail: info@realcomputing.jp