

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：90 分

奨励賞受賞講演：30 分（討論含）

産学特別セッション・量子コンピュータセッション：招待講演 30 分（討論含）

5 月 16 日（火）【12:50-17:20】

12:50 開会挨拶 立川 仁典（横浜市大）

座長 三浦 伸一（金沢大数物）

13:00 1L01 ○中嶋 裕也（早大理工総研，ENEOS 株式会社），大村 拓登（早大先進理工），
清野 淳司（早大先進理工，早大理工総研）
周辺環境を考慮した化学的性質に基づく原子のクラスタリングと精度検証への
応用

13:20 1L02 ○難波 知太郎，大槻 幸義（東北大院理）
機械学習による分子ダイナミクスの制御機構の予測：
分子 3 次元整列の制御ランドスケープ図

13:40 1L03 ○村上 龍大（埼玉大院理工，上智大理工），伊吹 駿一（埼玉大院理工），
橋本 ゆう（埼玉大院理工），菊間 悠矢（埼玉大院理工），高柳 敏幸（埼玉大院理工）
プロトン化ギ酸の解離分岐反応の動力学と機械学習解析

14:00 1L04 ○田中 綾一（北大院総化），水野 雄太（北大電子研，北大 WPI-ICReDD），堤 拓朗
（北大院理），戸田 幹人（北大電子研），武次 徹也（北大院理，北大 WPI-ICReDD），
小松崎 民樹（北大電子研，北大 WPI-ICReDD）
教師つき次元縮約を用いた化学反応動力学の相空間構造解析

休憩（14:20-14:30）

座長 清野 淳司（早大先進理工）

14:30 1L05 ○八日市屋 朋子，池田 龍志，村岡 恒輝，中山 哲（東大院工）
吸着種間相互作用を取り込んだ kinetic Monte Carlo シミュレーション手法の
開発：ニューラルネットワークポテンシャルの適用

14:50 1L06 李 盛洲（筑波大シス情），宮崎 剛（NIMS），○中田 彩子（NIMS）
大規模 DFT 計算と機械学習の連携による担持金属ナノ粒子触媒の電子状態解析

15:10 1L07 ○トムセン ボー, 志賀 基之 (日本原子力研究開発機構)
Application of Machine Learning Potentials in Path Integral Molecular
Dynamics Simulations

15:30 1L08 三浦 伸一 (金沢大数物)
分子をドーピングしたパラ水素クラスターの構造と超流動性の発現

休憩 (15:50-16:00)

座長 **中田 彩子 (NIMS)**

16:00 1L09 ○峯尾 浩文 (Van Lang 大 STAI), Quang Huy Ho (ホーチミン市教育大物理),
Ngoc Loan Phan (ホーチミン市教育大物理), 藤村 勇一 (東北大院化学)
Generation of dynamic Stark-induced vibronic state using two
non-resonant lasers

16:20 1L10 米谷 佳晃 (量研関西)
長距離静電相互作用の計算法: 液体水と格子スピン系の比較

16:40 1L11 ○平野 智倫, 森田 明弘 (東北大院理)
和周波スペクトル計算にバルクの境界と四重極が与える影響

17:00 1L12 ○渡邊 千鶴 (理研 BDR), 田中 成典 (神大シス情), 沖山 佳生 (神大シス情),
幸 瞳 (理研 BDR), 大山 達也 (甲南大 FIBER), 神坂 紀久子 (理研 BDR),
高谷 大輔 (阪大薬), 福澤 薫 (阪大薬), 本間 光貴 (理研 BDR)
フラグメント分子軌道法を用いた SARS-CoV-2 メインプロテアーゼと阻害剤の結合
メカニズムの考察

5月17日(水)【9:00-18:25】

座長 高橋 聡(東大院総合文化)

9:00 2L01 ○黒田 直也, 瀬波 大土(京大院工)
キラル分子の電子励起状態における電子カイラリティの増大

9:20 2L02 ○高塚 和夫, 新崎 康樹(京大福井セ)
励起状態の化学結合論

9:40 2L03 ○花崎 浩太, 高塚 和夫(京大福井セ)
ラジカル反応における電子ダイナミクスとスピンフラックス

10:00 2L04 ○上島 基之(MOFLEX), 佐藤 徹(京大福井セ)
核配置空間における一電子励起状態の Berry 接続

休憩(10:20-10:30)

座長 上島 基之(MOFLEX)

10:30 2L05 ○Nan He, Naoki Nakatani, Masahiko Hada(都立大院理)
DFT and CASPT2 studies of Fe-catalyzed coupling reaction: Effect of electron correlation

10:50 2L06 ○砂賀 彩光(京大理), ブータ アマール(トロント大学),
高橋 唯基(カリフォルニア工科大学), 高橋 義朗(京大理)
相対論的励起状態計算に基づく核磁気四重極モーメントの探索実験の提案

11:10 2L07 ○井内 哲, 古賀 伸明(名大院情報)
トリスビピリジン鉄(II)錯体の励起緩和ダイナミクスに関する
非断熱分子動力学計算

11:30 2L08 ○吉田 大輔(理研仁科センター), 高橋 開人(IAMS, Academia Sinica)
 $\text{Ni} + \text{CO} \rightarrow \text{NiCO}$ のスピncrossオーバー反応の正しい理解

休憩(11:50-13:00)

産学特別セッション

座長 北 幸海（横浜市大）
13:00 IL01 招待講演
○尾上 允敏, 勝山 智祐（株式会社資生堂 みらい開発研究所）
「化粧品会社における計算科学に対する取り組み」

量子コンピュータセッション

座長 重田育照（筑波大学計算科学研究センター）
13:30 IL02 招待講演
小川 和久（大阪大学）
「大阪大学 QIQB における超伝導量子コンピュータ開発」

14:00 IL03 招待講演
大関 真之（東北大学）
「量子アニーリングとその活用事例の紹介」

休憩（14:30-14:40）

座長 高棕章太（QunaSys）
14:40 IL04 招待講演
竹内 勇貴（NTT コミュニケーション科学基礎研究所）
「計算複雑性理論から見る量子加速の限界と進展」

15:10 IL05 招待講演
平岩 美央里（クオンティニウム株式会社）
「量子コンピューティング技術の発展と産業応用」

15:40 パネルディスカッション（40分）

休憩（16:20-16:30）

座長 井内 哲（名大院情報）
16:30 2L09 ○伊藤 琢磨（北大院総化），原渕 祐（WPI-ICReDD, JST-ERATO），前田 理（北大院理, WPI-ICReDD, JST-ERATO, NIMS）
ポテンシャルエネルギー曲面のトポロジーに基づく [3, 3]-シグマトロピー転位の機構解析：反応性と経路分岐の関係性に関する考察

- 16:50 2L10 ○岩佐 豪（北大院理, JST さきがけ）, 武次 徹也（北大院理）
一般化遷移モーメントを用いた近接場光励起の選択則解析
- 17:10 2L11 ○春田 直毅（京大福井セ, 京大院工）, 堺 稚菜（京大福井セ, 京大院工）, Lori Gonnet
（アルビ国立高等鉱業学校, バーミンガム大）, 佐藤 徹（京大福井セ, 京大院工）,
Michel Baron（アルビ国立高等鉱業学校）
メカノケミカル反応における選択性とその発現機構
- 17:30 2L12 ○神名 航（北大院総化）, 原渕 祐（北大 WPI-ICReDD, JST-ERATO, 北大院理）, 勝山
瞳（北大 WPI-ICReDD, JST-ERATO）, 高野 秀明（北大 WPI-ICReDD, JST-ERATO）, 林
裕樹（北大 WPI-ICReDD, JST-ERATO）, 美多 剛（北大 WPI-ICReDD, JST-ERATO）,
前田 理（北大 WPI-ICReDD, JST-ERATO, 北大院理）
オレフィンの触媒的アミノカルボキシル化：一電子移動過程におけるポテンシャル
交差点の計算を活用した反応開発

休憩（17:50-17:55）

奨励賞受賞講演

- 座長 志賀 基之（日本原子力研究開発機構）
- 17:55 IL06 高 敏（北海道大学・ICReDD）
「系統的な構造計算に基づく不均一系触媒の機構理解と設計指針の構築」

休憩（18:25-18:30）

理論化学会総会（18:30-19:30）

5月18日(木)【9:00-15:50】

座長 中谷 直輝 (都立大院理)

9:00 3L01 ○Jianfei Yang, Yuki Orimo, Kenichi L. Ishikawa, Takeshi Sato (U-Tokyo)
Orbital Optimize method in ADAPT-VQE Algorithm

9:20 3L02 ○加藤 毅 (東大院理), 齊藤 真司 (分子研)
Kohn-Sham ポテンシャルと占有 Kohn-Sham 軌道関数の関係

9:40 3L03 ○中辻 博 (量子化学研究協会)
自由完員関数理論の基礎とその新しい展開

10:00 3L04 ○御代川 克輝, 倉重 佑輝 (京都大学大学院)
スピン双極子相互作用に由来するゼロ磁場分裂テンソルの DMRG-CASSCF 法を用いた計算法の開発と応用

休憩(10:20-10:30)

座長 大谷 優介 (東北大金研)

10:30 3L05 菅野 恵太 (QunaSys), ○甲田 昌也 (QunaSys), 今井 良輔 (QunaSys), 高 翔 (QunaSys), 御手洗 光祐 (大阪大基礎工・QIQB), 水上 渉 (大阪大基礎工・QIQB), 中川 裕也 (QunaSys)
量子選択 CI 法: 量子計算により特定した部分空間における多電子ハミルトニアン
の対角化

10:50 3L06 ○日沼 洋陽 (産総研)
直方体に近い N 倍のスーパーセルの作成手法

11:10 3L07 ○今村 洸輔 (京大院工), 安池 智一 (放送大学),
佐藤啓文 (京大院工・京大福井センター)
自己エネルギーに基づくパラメータフリーな複素吸収ポテンシャルの構成

11:30 3L08 Nguyen Thanh Phuc (Kyoto University)
Chiral-induced Spin Selectivity in Photon-Coupled Achiral Matters

休憩 (11:50-13:00)

座長 岩佐 豪（北大院理）

13:00 3L09 ○吉田 航（阪大院基礎工），重田 育照（筑波大 CSS），松井 啓史（大安研），
宮本 孟（阪大院基礎工），岸 亮平（阪大院基礎工，阪大 RCSEC，阪大 QIQB，
阪大 ICS-OTRI），北河 康隆（阪大院基礎工，阪大 RCSEC，阪大 QIQB，阪大 ICS-OTRI，
阪大 SRN-OTRI）

π 共役分子の有限集積体の電子酸化状態における電荷密度分布に関する理論研究

13:20 3L10 ○大谷 優介，谷合 凌輔，城島 浩太，中村 美穂，久保 百司（東北大金研）
ナノ粒子大量生産プロセスの設計に向けた有機修飾ナノ粒子凝集メカニズムの
粗視化分子動力学シミュレーション解析

13:40 3L11 ○岡崎 進（東京大院新領域）
新規動的モンテカルロ法の多粒子系への拡張

14:00 3L12 ○鳥居 肇（静岡大工），渡邊 華央（静岡大工）
水溶液中の硝酸イオンの対称性破れにおける分子間静電相互作用の役割

休憩（14:20-14:30）

座長 安池 智一（放送大学）

14:30 3L13 ○Dhileep N. Reddy (The University of Tokyo), Shinji Aono (RIST),
Tetsuro Nagai (Fukuoka University), Susumu Okazaki (The University
of Tokyo)

Permeation of CO₂ through polydimethylsiloxane with different cross-linking
ratios studied by the molecular dynamics calculations

14:50 3L14 ○杉崎 研司（慶大理工，慶大量子セ，CQuERE TCG-CREST），V. S. Prasanna (CQuERE
TCG-CREST)，大島 聡史（九大情基研開セ），片桐 孝洋（名大情基セ），
望月 祐志（立教大理，東大生産研），B. K. Sahoo (PRL)，B. P. Das (CQuERE TCG-
CREST，東工大理)

量子位相差推定アルゴリズムを用いた微細構造分裂の直接計算

15:10 3L15 ○Qingyu Zhu, Daisuke Yokogawa
(Graduate School of Arts and Sciences, The University of Tokyo)
Excited State Calculation in Solution: Multireference Perturbation Theory
Coupled with RISM Approach

15:30 3L16 ○高橋 聡（東大院総合文化），佐藤 啓文（京大院工，京大福井センター），
平岡 秀一（東大院総合文化）

拡張 Curtin-Hammett 原理：可逆な素反応からなる反応ネットワークにおける経路
選択の起源の解明