

受付 番号	発表タイトル 所属・発表者・共著者
P-1	手で解く量子化学Ⅱ～DFT 計算を手で解く～ (早稲田大学先進理工学部) ○中井浩巳
P-2	Analysis of Lithium-Ion Transport in Solid Polymer Electrolyte of Layered Cellulose and Its Derivatives with Quantum Molecular Dynamics Simulation (Department of Chemistry and Biochemistry, School of Advanced Science and Engineering, Waseda University ¹ , Waseda Research Institute for Science and Engineering, Waseda University ² , Global Center for Science and Engineering, Waseda University ³) ○Kensuke Ishida ¹ , Hiromi Nakai ^{1,2} , Aditya Wibawa Sakti ^{1,3}
P-3	拡張型 Wulff の定理を用いた担持金属クラスターモデルの作成 (早稲田大学先進理工学部 1, 早稲田大学大学院先進理工学部 2, 早稲田大学理工学術院総合研究所 3) ○大西未優 1, 大野彰太 2, 中井浩巳 1,3
P-4	Ab initio 分割統治計算の周期系への拡張とアモルファス材料への適用 (北海道大学大学院総合化学 1, 北海道大学 WPI ICRReDD 2, 北海道大学大学院理学研究院 3) ○小川 紘, 西田叡倫 1, 赤間知子 2, 小林正人 2,3, 武次徹也 2,3
P-5	複数のスペクトル情報と量子化学計算を利用した機械学習による部分構造予測 (早稲田大学大学院先進理工学研究科 1, 早稲田大学理工学術院総合研究所 2) ○熊谷拓海 1, 中嶋裕也 2, 清野淳司 1,2
P-6	高成功率・高精度・高効率の両端固定型遷移状態探索 (分子科学研究所) ○甲田信一, 齊藤真司
P-7	量子コンピューターを用いた実空間量子ダイナミクスシミュレーション (東京大学大学院理学系研究科化学専攻 1, アト秒レーザー科学研究機構 2) ○通岡知輝 1, Erik Lötstedt ¹ , 山内薫 1,2
P-8	Natural Reaction Orbital (NRO)法の Beckmann 転位への適用による経路分岐挙動の解明 (北海道大学理学部 1, 北海道大学 WPI ICRReDD 2, 北海道大学大学院理学研究院 3, 北海道大学大学院総合化学院 4) ○中西達大 1, 小野ゆり子 2, 堤 拓朗 2, 海老澤修一 4, 佐田和己 3, 武次徹也 2,3
P-9	量子化学計算と機械学習を用いた高い円偏光発光特性を有する有機分子の探索 (早稲田大学先進理工学部 1, 早稲田大学理工学術院総合研究所 2, 大阪大学産業科学研究所 3, Suez Canal Univ. ⁴) ○藤原正也 1, 藤波美起登 2, Mohamed S. H. Salem 3,4, 滝澤 忍 3, 中井浩巳 1,2
P-10	Ir 及び Rh 触媒を用いた 8-methylquinoline の C-H 活性化における選択性の理論的研究 (早稲田大学先進理工学部 1, 早稲田大学大学院先進理工学部 2, 早稲田大学理工学術院総合研究所 3) ○星野秀杜 1, 高島千波 2, 堀尾優斗 2, 柴田高範 1, 中井浩巳 1,3
P-11	分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学シミュレーションを用いたイオン水溶液系における動的物性の検証 (早稲田大学先進理工学部, 早稲田大学理工学術院総合研究所) ○森 直輝, 小野純一, 中井浩巳