

第4回公開シンポジウム ポスターセッション(12月11日 17:00~18:30) 1階 エントランスホール

No.	発表者	所属	ポスタータイトル
A01	上島 基之	神戸大学	酸素発生系酸化マンガンキューベンの構造ならびにスピン状態解析
A02	XU ENHUA	神戸大学	Partially linearized external models to active-space coupled-cluster through connected hexuples excitations
A03	嶺澤 範行	理化学研究所 計算科学研究機構	太陽電池設計に向けたTD-DFT(B)法による非断熱分子動力学シミュレーション
A04	米原 文博	理化学研究所 計算科学研究機構	分子集合系光化学過程における多様な励起電子動力学の解釈と制御に向けた量子動力学法の提案
A05	植村 渉	理化学研究所 計算科学研究機構	密度行列を用いた多体波動関数理論による高精度量子化学計算
A06	Rahul Maitra	理化学研究所 計算科学研究機構	Beyond the Gold-Standard in Quantum Chemistry: An Efficient Single-reference Coupled Cluster Theory& with Multi-reference Correlation Effects& for Molecular Energetics and Spectra
A07	三嶋 謙二	東京大学	非フラレーン型電子アクセプターに関する量子化学計算
A08	金子 正徳	東京大学	ペロブスカイト型酸窒化物光触媒における安定なアニオン配置の探索
B01	Yan Lei	東京大学 物性研究所	Hydrogen adsorption on Pt(111) from random phase approximation
B02	CHOUDHARY Ash	物質・材料研究機構	Car-Parrinello Molecular Dynamics (CPMD) Study on Electrolytes based on Grignard Reagents for Magnesium-Ion Battery
B03	稲垣 泰一	名古屋大学	定電位下でのSEI膜形成シミュレーションに向けた計算手法
B04	吉井 範行	名古屋大学	高速多重極展開法(FMM)の拡張
B05	坂下 達哉	名古屋大学	Solid harmonicsを用いた高速多重極展開法のMODYLASへの効率的な実装
B06	Chunwei Yang	名古屋大学	Implementation of MS-EVB method for proton transfer simulation into MODYLAS
C01	小野 ゆり子	北海道大学	超並列電子状態計算ソフトウェアとGRRMの連結による大規模系反応経路探索に向けた試み
C02	吉川 武司	早稲田大学	分割統治型理論に基づく大規模励起状態ダイナミクス手法の開発: DC-TDDFTB-MD法
C03	周 建斌	早稲田大学	Density-Functional Tight-Binding Parameterization for Metal-Organic Frameworks
C04	矢ヶ崎 琢磨	岡山大学	仮想的に超低密度の氷多形体