

ポスター発表

ポスター発表一覧

ID	氏名	所属
	発表タイトル	
サブ課題A		
A-01	土持 崇嗣	神戸大学
	Bridging single-reference and multi-reference regimes for electron correlation with spin-extended coupled electron pair approximation	
A-02	XU ENHUA	Kobe University
	Assessment of truncation schemes from the active space coupled cluster expansion through sextuple excitation levels	
A-03	上島 基之	神戸大学
	射影Hartree-Fock法の二次収束法開発とマンガングラスタへの適用	
A-04	米原 文博	理化学研究所 計算科学研究機構
	太陽光エネルギー変換を担う励起電子の非断熱量子動力学を扱う為の理論手法開発	
A-05	植村 渉	理化学研究所計算科学研究機構
	反対称ジェミナル積を用いた配置間相互作用法による高精度第一原理計算	
A-06	澤田 啓介	理化学研究所
	Coarray Fortranを用いた時間依存密度汎関数法の並列計算	
A-07	三嶋 謙二	東京大学
	非フラウン型アクセプターに関する量子化学計算	
サブ課題B		
B-01	飯塚 将太	物質・材料研究機構
	CPMDへのDFT-D3実装と有機電解液シミュレーションに向けたvdW相互作用のベンチマーク	
B-02	稲垣 泰一	名古屋大学
	混合MC/MD反応法による二次電池被膜形成過程の理論的解析	
B-03	吉井 範行	名古屋大学
	高速多重極展開法 (FMM) の拡張	
B-04	安藤 嘉倫	名古屋大学 工学研究科
	高分子材料の大規模分子動力学計算に向けたMODYLASの機能拡張	

ポスター発表

ポスター発表一覧

ID	氏名	所属
	発表タイトル	
サブ課題C		
C-01	矢ヶ崎 琢磨	岡山大学
	クラスレートハイドレートの生成機構	
C-02	小野 ゆり子	北海道大学
	「京」を用いた反応経路探索の超並列化に向けた試み	
C-03	西村 好史	早稲田大学
	Acceleration of divide-and-conquer DFTB calculation for huge periodic systems	
C-04	Chien-Pin Chou	Research Institute for Science and Engineering, Waseda University
	Automatized Density-Functional Tight-Binding Parameterization for Transition Metals	
自主発表		
X-01	柳田 祥三	大阪大学 名誉教授
	DFT verification of perovskite solar cells as lead iodide quantum dot solar cells	
X-02	吉澤 香奈子	高度情報科学技術研究機構 RIST
	GUI支援ツールC-Toolsによる第一原理シミュレーションの適用	