

# 7th Symposium on Electronic Structure Theory

## 第7回 電子状態理論シンポジウム

2021年

11月6日(土) 12:40 開場

会場 ▶ Zoom によるオンライン開催

主催 ▶ 理工学術院総合研究所プロジェクト研究

『計算化学の社会実装』

### プログラム

13:00 - 13:10

中井先生ご挨拶

13:10 - 13:30

講演 001 「量子コンピュータを用いた動的分極率による励起状態計算アルゴリズム」  
高梨 倫哉 (M2)

13:30 - 13:50

講演 002 「COVID-19 治療薬開発に向けた DC-DFTB-MD によるメインプロテアーゼの  
酵素反応機構の解明」

小清水 初花 (B4)

13:50 - 14:10

講演 003 「物体検出手法の実装と化学実験データに対する数値検証」  
佐々木 良輔 (B4)

14:10 - 14:30

休憩

14:30 - 15:30

ポスターセッション

P01 「電荷の分割に基づく酸化的付加反応における金属種および配位子依存性の  
理論的解釈」

佐藤 稔也 (M2)

P02 「色素増感太陽電池に適した新規有機色素の探索とその物性値の評価」

清水 伊織 (M2)

P03 「有限温度法に基づく単参照型静的相関手法の拡張」

田嶋 一輝 (M2)

P04 「遷移金属置換  $\text{CeO}_2$  による CO 酸化反応の理論的解析」

土屋 佑太 (M2)

P05 「機械学習を用いた非制限 MP2 相関エネルギーの予測」

藤澤 遼 (M2)

P06 「2 電子演算子の固有関数による RI 近似の検証」

大島 玲生 (B4)

P07 「TD-DFTB 法に基づく系間交差ダイナミクスシミュレーションに向けた  
スピン軌道相互作用項の実装」

大野 彰太 (B4)

15:30

閉会