

## プログラム

### 研究展示

**EX01** タンパク質構造とダイナミックスの可視化

○庄司光男、山口兆（阪大理）

**EX02** グリッド技術を用いた大規模分子シミュレーションプログラムの開発

○長嶋雲兵、櫻井鉄也、石元孝佳、梅田宏明、渡辺寿雄（JST CREST, 産総研、筑波大シ  
ス情）

### 研究発表

**5月24日（木曜日）**

09:00 受付開始

**09:30-12:10 口頭発表 8件**

**座長1: 古山通久（東北大工） 4件**

**1001** Tight-binding 量子分子動力学法の超高速化と化学反応ダイナミクスへの応用

○遠藤 明, 鄭 善鎬, 大沼宏彰, 小野寺 拓, 坪井秀行, 古山通久, 畠山 望, 高羽洋  
充, 久保百司, Carlos Del Carpio, 宮本 明（東北大工）

**1002** The p-Type Conduction Mechanism in Zinc-Doped Indium Oxide: a Tight-Binding  
Quantum Chemical Molecular Dynamics Study

○呂 晨, Agalya Govindasamy, 扇谷 恵, 坪井秀行, 古山通久, 畠山 望, 遠藤 明,  
高羽洋充, 久保百司, Carlos Del Carpio, 宮本 明（東北大工）

**1003** 反応ダイナミクス系時間発展加速化分子動力学法の開発

○高羽洋充, 三浦隆治, 坪井秀行, 古山通久, 畠山 望, 遠藤 明, 久保百司, Carlos Del  
Carpio, 宮本 明（東北大工）

**1004** 計算化学に基づくマルチスケール有限要素シミュレータの開発

○畠山 望, 森田祐輔, 小野寺 拓, 大串巧太郎, 坪井秀行, 古山通久, 遠藤 明, 高羽  
洋充, 久保百司, Carlos Del Carpio, 宮本 明（東北大工）

**座長2: 高羽洋充（東北大工） 3件**

**1005** 三次元多孔質シミュレータに基づく多孔性材料のマルチスケールシミュレーション

○古山通久, 扇谷 恵, 服部達哉, 石本良太, 坪井秀行, 畠山 望, 遠藤 明, 高羽洋充,  
久保百司, Carlos Del Carpio, 宮本 明（東北大工）

**1006** 高速化量子分子動力学法に基づく熱電特性推算手法の開発

○坪井秀行, 古山通久, 畠山 望, 遠藤 明, 高羽洋充, 久保百司, Calos A. Del  
Carpio, 宮本 明（東北大工）

**1007** Computational Chemistry Approach to Investigate the Electrical Properties of Carbon Black

○Chutia Arunabhiram, Zhigang Zhu、坪井秀行、古山通久、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、久保百司、Carlos Del Carpio、宮本 明（東北大工）

**1008** 物質中の原子・分子の動きをイメージ把握するための Web 教材 —分子動力学シミュレーションを利用して—

○赤松 直<sup>1</sup>、川上 紳一<sup>2</sup>、田 偉<sup>1</sup>、南場 功充<sup>1</sup>、澤口 直哉<sup>3</sup>、河村 雄行<sup>4</sup>  
（高知大教育<sup>1</sup>、岐阜大教育<sup>2</sup>、室工大工<sup>3</sup>、東工大理工<sup>4</sup>）

12 : 10 - 13 : 30 昼休み

**13 : 30 - 15 : 30 ポスター発表**

**1P01** 「Excel による品質管理」を発行して

○吉村忠与志(福井高専物工)

**1P02** 糖鎖合成設計支援システムのための構造入力ツールの開発

○西村拓朗、山田一作、水野真盛、白井孝（野口研究所）、船津公人（東大工）

**1P03** 二核高スピニコバルト(II)錯体の磁性に及ぼすローカルな歪み軸の傾きの影響

○崎山博史（山形大理）

**1P04** ネマティックー等方相転移点近傍における分子回転運動とその描像

○佐藤克彦（大産大教養）

**1P05** Ab Initio MO Studies of the Weak Interaction in Cu-Histamine-Tyrosine Complex as a Model of Pseudoazurin M16Y Mutant

○ Nagashima U, Watanabe T(AIST & JST-CREST), Kohzuma T, Uchida Y(Ibaraki Univ.), Osamu Y(Kansai Univ.)

**1P06** Development of a new computational method for calculation of viscosity of complex liquids

○Mart Ugur, 瀬戸川 浩, 坪井秀行、古山通久、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、久保百司、Carlos Del Carpio、宮本 明（東北大工）

**1P07** ハイブリッド量子／古典分子動力学法による金属酸化物粒子の剪断場化学反応ダイナミクス

○小野寺 拓、森田祐輔、坪井秀行、古山通久、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、久保百司、Carlos Del Carpio(東北大工)、Minfray Clotilde、Martin Jean-Michel (Ecole Centrale de Lyon)、宮本 明(東北大工)

**1P08** アルミナ - カーボン系レンガにおけるアルミナと炭素の結合性の理論的研究

○本泉 光、片岡洋右（法政大工）

**1P09** 計算化学手法を用いた MoS<sub>2</sub>潤滑被膜の超低フリクション発現機構の解析

○森田 祐輔、小野寺 拓、坪井秀行、古山通久、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、久保百司、Carlos Del Carpio(東北大工)、西野典明、鈴木 厚(トヨタ自動車)、宮本 明(東北大工)

**1P10** A Molecular Dynamics Approach to study the behavior of Cytochromes.

○Shah Md. Abdur Rauf、Mohamed Ismael、坪井秀行、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、久保百司、Carlos Del Carpio、宮本 明(東北大工)

**1P11** モンテカルロ法による長鎖状分子の折り畳み

○山田祐理、片岡洋右(法政大工)

**1P12** Theoretical Study on the Electrical Conductivity and Electrocatalyst Reaction Properties of Polymer Electrolyte Fuel Cell Electrode

○鍾 慧峰、服部達哉、坪井秀行、古山通久、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、久保百司、Carlos Del Carpio.A、宮本 明(東北大工)

**1P13** Tight-Binding Quantum Chemistry Molecular Dynamics Study on the Semiconductor Temperature Sensor Materials

○Zhu Zhigang、Chutia Arunabhiram、坪井秀行、古山通久、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、久保百司、Carlos Del Carpio、宮本 明(東北大工)

**1P14** NO<sub>3</sub>ラジカルに対する含フッ素エーテル類の反応速度予測:計算化学的手法による試み

○内丸忠文、陳亮、徳橋和明、関屋 章(産総研)、岡本秀一(旭硝子)

**1P15** Tight-Binding 量子分子動力学法を用いた CeO<sub>2</sub>担持触媒に関する研究

○鄭 善鎬、石本良太、坪井秀行、古山通久、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、久保百司、Carlos Del Carpio、宮本 明(東北大工)

**1P16** Theoretical study on mechanism of mesoporous TiO<sub>2</sub> synthesis by multi-scale computational methods

○Qiang Pei、坪井秀行、古山通久、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、久保百司、Carlos Del Carpio(東北大工)、佐野智、越川尚清、田中哲夫、小林智之、足立聡(JAXA)、宮本 明(東北大工)

**1P17** 密度汎関数法によるグルコースの環配座変換

○栗原庸次、上田一義(横国大工)

**1P18** 分子動力学法による Ca<sub>2</sub>Fe<sub>2</sub>O<sub>5</sub>の酸化物イオン伝導性の検討

○川井トオル、澤口直哉、佐々木 眞(室工大工)

**1P19** 縮環シクラジン類の電子スペクトルに対する軌道振電相互作用解析

○重光保博、加藤 貴、山邊時雄(長崎工科大工)

**1P20** Tight-Binding 量子分子動力学法に基づく色素増感型太陽電池 TiO<sub>2</sub>電極のマルチスケールシミュレーション

○扇谷 恵、呂 晨、Agalya Govindasamy、坪井秀行、古山通久、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、久保百司、Carlos Del Carpio、宮本 明（東北大）

1P21 生体分子シミュレーションにおける長距離相互作用の計算法について

○ 米谷佳晃（原研）

**15:30-16:10 表彰（10分）・受賞講演（30分）**

座長：細矢治夫 功労賞受賞講演 時田澄男

「学会誌この15年の歩み」

**16:10-17:30 口頭発表 4件**

座長3： 荒川正幹（東大工） 4件

1009 対称性により類別したアルカンの数え上げ

○藤田眞作（京工織大大）

1010 トポロジカルインデックスの数学的展開

○細矢治夫（お茶大（名誉））

1011 量子化学の幾何学的表現

○ 青野茂行（金沢大（名誉））

1012 プラズマディスプレイ設計のための量子分子動力学法に基づくマルチスケールシミュレータの開発と応用

○久保百司、菊地宏美、坪井秀行、古山通久、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、Carlos A. Del Carpio、梶山博司、篠田 博、宮本 明（東北大工、広大先端）

**18:00 懇親会（東工大生協にて）**

**5月25日**

09:00 受付開始

**09:30-10:50 口頭発表 4件**

座長4： 久保百司（東北大工） 4件

2001 Molecular dynamics simulation for hydroxylation of camphor by Cytochrome P450

○Abdul Rajjak Shaikh<sup>1</sup>、坪井秀行<sup>1</sup>、古山通久<sup>1</sup>、畠山 望<sup>1</sup>、遠藤 明<sup>1</sup>、高羽洋充<sup>1</sup>、久保百司<sup>1, 2</sup>、Carlos Del Carpio<sup>1</sup>、Ewa Broclawik<sup>3</sup>、宮本 明<sup>1</sup>（東北大工<sup>1</sup>、JST- PRESTO<sup>2</sup>、Pol. Acad. Sci., Poland<sup>3</sup>）

2002 Quantum chemical molecular dynamic simulation of NO adsorption on supported Pt catalyst

○Shital Das、鄭 善鎬、石本良太、坪井秀行、古山通久、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、久保百司、Carlos Del Carpio、宮本 明（東北大工）

**2003** Robotic Path Planning and Dynamics of Protein-Ligand Interactions

○Carlos A. Del Carpio M.、坪井秀行、古山通久、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、久保百司、宮本 明（東北大工）

**2004** 秩序氷の安定性の分子数依存性

○片岡洋右、山田祐理（法政大工）

**10:50-11:30 総会**

会長：細矢治夫

**11:30-12:00 特別講演**

座長：中井浩巳（早大理工） 講演 平野恒夫

「Computational Molecular Spectroscopy: 新領域の開拓を目指して」

**12:00-13:30 昼休み**

**13:30-15:30 ポスター発表**

**2P01** 核座標の変化に伴う分子軌道変化のリアルタイム可視化表示 ー等値面ー

○中 貴俊, 山本茂義, 秦野やす世, 遠藤守, 山田雅之, 宮崎慎也（中京大教養・情報理工）

**2P02** 三次元空気極モデルを用いた固体高分子形燃料電池過電圧特性シミュレータの開発と応用

○服部達哉、笠原浩太、佐々木賢治、鐘 慧峰、坪井秀行、古山通久、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、久保百司、Carlos Del Carpio、宮本 明（東北大工）

**2P03** 統合化計算化学手法による希土類蛍光体の構造と電子状態との関連性の解明

○大沼宏彰（東北大工）、丹野裕明（広島大先端）、坪井秀行、古山通久、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、久保百司、Carlos Del Carpio（東北大工）、梶山博司、篠田 博（広島大先端）、宮本 明（東北大工）

**2P04** Theoretical Modeling of the Removal of Carbon dioxide by Absorption in Aqueous Alkanolamines Solutions

○Mohamed Ismael、源谷夏奈、岩渕 翼、坪井秀行、古山通久、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、久保百司、Carlos Del Carpio（東北大工）、清水信吉（RITE）、宮本 明（東北大工）

**2P05** 歪みシリコンの構造及び表面反応性に関するガウス基底周期境界条件計算による検討

○石崎将士、阪田薫穂、中井浩巳、本間敬之（早大理工）

**2P06** Windows の下で動作する切断機能を持つ分子構造表示プログラムの開発

家馬陽介、○佐々和洋、林治尚、中野英彦（兵庫県立大工）

**2P07** 結合分極を考慮した NQEq パラメータの新規決定手法

○中山尚史、後藤仁志（豊橋技科大）

**2P08** 酸化セリウム(001)面における有害物吸着の第一原理計算

○園田敬広、白木康一、高橋康史、菱沼晶光、河村雄行<sup>1</sup> (NSG、東工大<sup>1</sup>)

**2P09** 単分子ワイヤーの電気伝導における非弾性散乱

○志津功将、佐藤徹、田中一義(京大工、JST-CREST、京大福井セ)

**2P10** 化学式入力エディタの開発(その2) - 正誤判断・チュータ機能の実装 -

○及川義道、奥田富蔵、高野二郎(東海大理・教育研)

**2P11** セル分割によるマルチスケール分子動力学計算プログラムの開発とマルチプロセスによる高速化

○三浦隆治、坪井秀行、古山通久、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、久保百司、Del Carpio Carlos A.、宮本 明(東北大工)

**2P12** ab initio 分子軌道法によるホスト-ゲスト相互作用の解析: コール酸アミドによるアルコールの光学分割

○都築誠二、本田一匡、三上益弘、油家一晃、渡部 毅、久木一郎、藤内 謙光、宮田幹二(産総研、阪大工)

**2P13** ホスフェニウム錯体とシリレン錯体の構造に関する量子化学的研究

○土田敦子(お茶大)、中沢 浩(阪市大理)、鷹野景子(お茶大)

**2P14** モデル錯体と密度汎関数法を用いたアルカリ金属-黒鉛層間化合物の解析

○大島正人、岡部裕介、武田 馨、松本里香(東京工芸大)

**2P15** シクロデキストリンの一級アルコール部の配座に関する計算化学的研究

○藤山亮治(高知大理)

**2P16** 水素結合の異方性を考慮した分子間ポテンシャルの構築

○川上俊介、小畑繁昭、後藤仁志(豊橋技科大)

**2P17** 2,2'-ビピリジンを含むテトラアザマクロサイクル及びそのリチウム錯体の構造と電子遷移に関する量子化学的研究

○朱 振霞、鷹野景子、古濱彩子、小川昭二郎(お茶大)

**2P18**  $I_h-C_{60}$  および  $D_{5h}-C_{70}$  フラーレンと  $Li(+)$  の相互作用についての研究

○成田 進、武田 亮、野村泰志、森川鐵朗(信州大工、上越教育大)

**2P19** フラグメントMO法によるEpidermal Growth Factor (EGF) 受容体の解析

○渡邊寿雄、石元孝佳、田村裕、稲富雄一、梅田宏明、長嶋雲兵(産総研、JST-CREST、九大、千葉大)

**2P20** 多成分分子軌道法による  $H_2$  分子のエネルギー計算

○石元孝佳、立川仁典、稲富雄一、梅田宏明、渡邊寿雄、長嶋雲兵(産総研、JST-CREST、横浜市大、九大)

**15:30-16:00 受賞講演(30分)**

座長: 長嶋雲兵 吉田賞受賞講演: 荒川正幹(東大工)

**「分子設計のための統合システム ToMoCo の開発」**

**16:00-17:00 口頭発表 3件**

**座長：長嶋雲兵（産総研）**

**2005 二階線型常微分方程式の固有値問題の高精度数値解法と量子力学への応用**

○石川英明（Selete）

**2006 対称定値一般固有値問題のフィルタ部分空間法による固有対の近似解法**

○村上 弘（首都大）

**2007 フィルタ対角化における櫻井・杉浦法と村上法の関連について**

○池上 努（産総研）

**17:00 閉会**