

プログラム

研究展示

EX01 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、立川仁典、石元孝佳、梅田宏明、渡辺寿雄（JST CREST、産総研、筑波大シス情、横浜市大）

EX02 原子軌道のガラス内彫刻 ―軌道の組み合わせ表示―

時田 那珂子、○時田 澄男（放送大、埼玉大名誉）

研究発表

5月22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） 4件

1001 超高速化量子分子動力学シミュレーションに基づくマルチスケール表面トンネル電流シミュレータの開発

○坪井秀行、菊地宏美、芹澤和実、鈴木 愛、Riadh Sahnoun、古山通久、坪井秀行、畠山望、遠藤 明、高羽洋充、Carlos Del Carpio、Ramesh C. Deka、久保百司、宮本 明（東北大）

1002 Investigation on Electrical Properties of Carbon Black by Ultra Accelerated Quantum Chemical Molecular Dynamics

○Arunabhiram Chutia、Zhiqiang Zhu、鈴木 愛、Riadh Sahnoun、古山通久、坪井秀行、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、Carlos Del Carpio、Ramesh C. Deka、久保百司、宮本 明（東北大）

1003 ペロブスカイト型強誘電体 BaTiO₃ の電場応答特性に関する理論的研究

○後瀉敬介、渥美照夫、中井浩巳

1004 ホール輸送材料における振電相互作用と材料設計

○佐藤徹（京大福井セ、京大院工）、志津功将（京大院工）、久我香子（京大化研）、田中一義（京大院工、JST-CREST）、梶弘典（京大化研、京大院工）

座長2：坪井秀行（東北大） 4件

1005 高分散シリカ担持バナジウム酸化物における光触媒活性とリン光スペクトル

○岩原直也（京大院工）、徳永健（京大院工）、佐藤徹（京大福井セ、京大院工）、田中庸裕（京大院工）、田中一義（京大院工、JST-CREST）

1006 Effect of Organic Dye Compounds on Absorption Spectra of Organic Dye/Anatase (001)

System: an Ultra Accelerated Quantum Chemical Molecular Dynamics Study

○呂 晨、扇谷 恵、鈴木 愛、Riadh Sahnoun、古山通久、坪井秀行、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、Carlos Del Carpio、Ramesh C. Deka、久保百司、宮本 明（東北大）

1007 オリゴチオフェンのカチオン状態における構造変形と振電相互作用

○志津功将（京大院工）、佐藤徹（京大福井セ、京大院工）、田中一義（京大院工、JST-CREST）

1008 不規則性多孔質電極マルチスケールシミュレーション手法の開発と応用

○古山通久、金 寶英、扇谷 恵、服部達哉、呂 晨、鈴木 愛、Riadh Sahnoun、坪井秀行、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、Carlos Del Carpio、Ramesh C. Deka、久保百司、宮本 明（東北大）

12:10-13:30 昼休み

13:30-15:30 ポスター発表 22件

1P01 糖鎖合成設計支援システムの開発

○西村拓朗、山田一作、水野真盛、白井孝（野口研究所）、船津公人（東京大学工学系研究科化学システム）

1P02 並列処理を意識した大規模行列のハウスホルダ型直交変換

○村上弘（首都大学東京）

1P03 「Excel で物理化学の解法がわかる本」を執筆して

○吉村忠与志（福井高専）

1P04 大気中のエアロゾル分布の可視化

○青山智夫、神部順子、長嶋雲兵（宮崎大工、江戸川大、産総研）

1P05 超高速化量子分子動力学計算に基づくプラズマディスプレイ用 MgO 保護膜からの二次電子放出能予測方法の開発

○芹澤和実、大沼宏彰、菊地宏美（東北大）、北垣昌規（広島大）、鈴木 愛、Riadh Sahnoun、古山通久、坪井秀行、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、Carlos Del Carpio、Ramesh C. Deka、久保百司（東北大）、梶山博司、篠田 傳（広島大）、宮本 明（東北大）

1P06 水酸基終端ダイヤモンド膜の超低フリクション特性発現機構の理論的解析

○森田祐輔、小野寺 拓、鈴木 愛、Riadh Sahnoun、古山通久、坪井秀行、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、Carlos Del Carpio、Ramesh C. Deka、久保百司、宮本 明（東北大）

1P07 蛍光体キャリア移動パスに対する構造欠陥の影響の解明

○大沼宏彰、鈴木 愛、Riadh Sahnoun、古山通久、坪井秀行、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、Carlos Del Carpio、Ramesh C Deka、久保百司、宮本 明（東北大）

1P08 量子・古典ハイブリッド法を用いた自動車エンジンオイル添加剤のトライボケミカル反応シミュレーション

○小野寺 拓、森田祐輔、鈴木 愛、Riadh Sahnoun、古山通久、坪井秀行、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、Carlos Del Carpio、久保百司、宮本 明（東北大）

1P09 古典分子動力学及び量子分子動力学手法を用いる固体高分子電解質膜内での OH ラジカルの拡散及び反応メカニズムの解析

○金 寶英、服部達哉、Souissi Maaouia、鈴木 愛、Riadh Sahnoun、古山通久、坪井秀行、畠山望、遠藤 明、高羽洋充、Carlos Del Carpio、Ramesh C. Deka、久保百司、宮本 明(東北大)

1P10 ニューラルネット、アニーリング法を利用したタンパク質 NMR データの自動解析

○小林直宏、木川隆則、横山茂之(理研 GSC)

1P11 超高速化量子分子動力学法のダイヤモンドライクカーボン成膜への応用

○敖敦 其木格、鈴木 愛、Riadh Sahnoun、古山通久、坪井秀行、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、Carlos Del Carpio、Ramesh C. Deka、久保百司、宮本 明(東北大)

1P12 7、8員ジシロキサン架橋構造の計算化学的検討

○古沢清孝(産総研)

1P13 データマイニングによるシクロム P450 基質の代謝位置予測手法の開発

○光山倫央、荒川正幹、船津公人(東大院工)

1P14 統合型オンライン事典への Jmol 版分子事典の登録

○本間善夫(県立新潟女子短期大学)、柳沼周一、佐々木亨、森雄哉(ウェブリオ)

1P15 三次元多孔質構造を考慮した色素増感 TiO₂ 電極のマルチスケールシミュレーション

○扇谷 恵、鈴木 愛、Riadh Sahnoun、古山通久、坪井秀行、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、Carlos Del Carpio、Ramesh C. Deka、久保百司、宮本 明(東北大)

1P16 有機合成経路設計システムにおける戦略部位の統合とその応用

○赤坂宏一郎、荒川正幹、船津公人(東大院工)

1P17 分子内プロトン移動反応に関する理論的研究

○寺前裕之、橋詰大志郎(城西大理)、長岡伸一(愛媛大理)、長嶋雲兵(産総研)

1P18 含ハロゲンシクロブタン類の安定性とシクロブタン環のパッカリング挙動について

○内丸忠文、陳亮、水門潤治、徳橋和明、関屋章(産総研)

1P19 超高速化量子分子動力学法を用いた貴金属表面上での CO 酸化反応速度解析

○鄭 善鎬、鈴木 愛、Riadh Sahnoun、古山通久、坪井秀行、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、Carlos Del Carpio、Ramesh C. Deka、久保百司、宮本 明(東北大)

1P20 Study on small-molecule inhibitor of the p53 suppressor HDM2 using ultra accelerated quantum chemical molecular dynamics

○Shah Rauf、鈴木 愛、Riadh Sahnoun、古山通久、坪井秀行、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、Carlos Del Carpio、Ramesh C. Deka、久保百司、宮本 明(東北大)

1P21 Tight-binding Quantum Molecular Dynamics Study on Ethylene Polymerization Reaction Using CpSiH₂NHTiCl₂ Constrained Geometry Catalyst

○Hema Malani、林 繁和、鈴木 愛、Riadh Sahnoun、古山通久、坪井秀行、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、Carlos Del Carpio、Ramesh C. Deka、久保百司、宮本 明(東北大)

1P22 Study of Surface Reaction Mechanisms over CeO₂ (111) using Ultra Accelerated Quantum

Chemical Molecular Dynamics

○Md. Khorshed Alam, Katsuyoshi Nakamura、鈴木 愛、Riadh Sahnoun、古山通久、坪井秀行、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、Carlos Del Carpio、Ramesh C. Deka、久保百司、宮本 明(東北大)

15:30-16:40 表彰(10分)・受賞講演(30分+30分)

座長：細矢治夫

学会賞受賞講演 本間善夫 「インターネットを利用して分子を学んでもらう試み」

論文賞受賞講演 古山通久 「三次元多孔質シミュレータの開発と応用」

特別功労賞 曾々木志穂

16:40-17:40 口頭発表 3件

座長3：石元孝佳(産総研) 3件

1009 化学物質発ガン性データベースの開発及びサポートベクターマシンによる発ガン性予測

○田辺和俊、鈴木孝弘、貝原巳樹雄、小野寺夏生(筑波大院図情メディア、東洋大経、一関工業高専物質化学工)

1010 異性体の数え上げにおける Maple プログラミング

○藤田眞作(湘南情数化研)

1011 ヒュッケル近似と素粒子の質量... 化学と高エネルギー物理の狭間

○鳴海 英之 (元北大大学院地環研)

18:00 懇親会(百年記念館4F角笛にて)

5月23日(金曜日)

09:00 受付開始

09:30-11:10 口頭発表 5件

座長4：小林 正人(早大先進理工) 5件

2001 ABAを用いた新規タンパク質構造予測アルゴリズム

○山守 優、山村剛士(東京理科大理)

2002 超高速化量子分子動力学法の開発と反応ダイナミクスへの応用

○遠藤 明、芹澤和実、大沼宏彰、小野寺 拓、鈴木 愛、古山通久、坪井秀行、畠山 望、高羽洋充、Carlos Del Carpio、Ramesh C. Deka、久保百司、宮本 明(東北大)

2003 超高速化量子分子動力学法に基づく大規模化学反応シミュレーション

○高羽洋充、Hema Malani、石橋世子、鈴木 愛、古山通久、坪井秀行、遠藤 明、畠山 望、Carlos Del Carpio、Ramesh C. Deka、久保百司、宮本 明(東北大)

2004 超高速化量子分子動力学法に基づくマルチレベルトライボシミュレーション

○畠山 望、森田祐輔、小野寺 拓、教敦其木格、鈴木 愛、Riadh Sahnoun、古山通久、坪井秀

行、遠藤 明、高羽洋充、Carlos Del Carpio、Ramesh C. Deka、久保百司、宮本 明(東北大)

2005 アルゴンの定容における蒸発の分子動力学シミュレーション

○片岡洋右、山田祐理(法政工)

11:10-12:00 総会

会長：細矢治夫

12:00-13:30 昼休み

13:30-15:30 ポスター発表 22件

2P01 コール酸アミドによるアルコールの光学分割:密度汎関数法による格子エネルギーの計算と MP2 法との比較

○都築誠二・本田一匡・折田 秀夫・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、大阪大院工)

2P02 シクロオクテン光増感異性化反応におけるエネルギーと立体配置の MO 解析

○橋本浩晃・厚地幹人・下茂徹朗・染川賢一(鹿児島大工)

2P03 カテプシンーリガンド複合体の立体配座解析

○杉山拓、後藤仁志(豊橋技科大)、西垣功一(埼玉大)

2P04 密度汎関数法による一酸化炭素結合型ミオグロビンの全電子計算

○千葉貢治、岡本正宏(九大院シス生)、平野敏行、佐藤文俊(東大生研)

2P05 タンパク質構造とダイナミックスの可視化 その2

○庄司光男、山口兆(阪大院理、阪大極限)

2P06 ソルポリシス反応の溶媒効果解析における溶媒系分散と電荷の非局在化との関係

○藤山亮治(高知大)、藤尾瑞枝(九大先導研)

2P07 グリオキサールのラジカル開始酸化反応ダイナミックス

○瀬戸口修(産総研)

2P08 クラスタリングとマルチプロセスによる高速化分子動力学計算プログラムの開発

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

2P09 Modeling of the removal of carbon dioxide using aqueous alkanolamine solutions using accelerated Quantum Chemical Molecular Dynamics technique

○Mohamed Ismael、鈴木 愛、Riadh Sahnoun、古山通久、坪井秀行、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、Carlos Del Carpio、Ramesh C. Deka、久保百司(東北大)、清水信吉(RITE)、宮本 明(東北大)

2P10 Applying Ultra Accelerated Quantum Chemical Molecular Dynamics techniques for studying the role of NADPH in Dihydrofolate reductase

○Kamlesh kumar sahu、鈴木 愛、Riadh Sahnoun、古山通久、坪井秀行、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、Carlos Del Carpio、Ramesh C. Deka、久保百司、宮本 明(東北大)

- 2P11 分子動力学法を用いた NiO 中のイオン挙動の解析
○内海 男斗、澤口 直哉、佐々木 眞(室蘭工業大)
- 2P12 分子動力学法による Li_{1.33}Ti_{1.66}O₄ 中の Li イオン挙動解析
○朝倉 勇貴、澤口 直哉、佐々木 眞(室蘭工業大)
- 2P13 分子動力学法を用いた Ca₂FeAlO₅ 中の酸化物イオン伝導の解析
○原田 裕介、川井 トオル、澤口 直哉、佐々木 眞(室蘭工業大)
- 2P14 CRK を用いたタンパク質分極力場の開発、溶液中オリゴペプチドの MD 計算への応用
○伊勢川 美穂、加藤重樹(京大院理)
- 2P15 タンパク質全電子計算で得られる静電ポテンシャルの高速な計算手法の開発
○湯川英宜(東大院工)、平野敏行(東大生研)、佐藤文俊(東大生研)
- 2P16 結晶多形と多配座解析支援システムの開発
○菅付俊佑、小畑繁昭、後藤仁志(豊橋技術科学大学)、大田一男(コンフレックス株式会社)
- 2P17 多成分分子軌道法によるメチル基回転に伴う H/D 同位体効果に関する研究
○石原康行、寺前裕之(城西大理)、石元孝佳(産総研)、長嶋雲兵(産総研)
- 2P18 密度汎関数法によるホスフィド架橋ルテニウム二核錯体による炭素-炭素結合開裂反応の解析
○大嶋正人、武田るい(東工芸大工)
- 2P19 非 IPR フラーレン C₉₀ と Li(イオン/原子)との相互作用
○成田 進(信大繊維)、安本晴信(信大繊維)、野村泰志(信大繊維)、森川鐵朗(上越教育大自然系)
- 2P20 分子動力学計算を用いたアルミナ焼結過程の研究
○岡田智宏、内田 希(長岡技術科学大学)
- 2P21 Web カメラを用いた色測定ツールの開発
○及川義道・奥田富蔵・高野二郎(東海大)
- 2P22 櫻井-杉浦法を用いた TDDFT による内殻励起状態の高速計算
○小林正人、土持崇嗣、中田彩子、今村穰、中井浩巳(早大先進理工)

15:30-16:30 口頭発表 3件

座長：梅田宏明(産総研)

2006 効率的な分子の局所安定構造探索法の開発：MSMC 法

伊丹崇裕 ○安倍朋弘 中井浩巳(早大先進理工)

2007 分割統治(DC)電子状態計算プログラムの GAMESS への実装

○赤間 知子、小林 正人、佐倉 大輔、藤井 厚彦、中井 浩巳(早大先進理工)

2008 平面波基底におけるエネルギー密度解析: PW-EDA

○今村穰、高橋明日香、中井浩巳(早大先進理工)

16:30 閉会