



日本コンピュータ化学会 2012 年春季年会プログラム

4月1日 公開 決定版

■主催

日本コンピュータ化学会(SCCJ)

■共催・協賛

化学工学会, 高分子学会, 触媒学会, 日本化学会, 日本薬学会, 分子科学会, 分子シミュレーション研究会

■会期

2012年5月17日(木)~18日(金)

■会場

東京工業大学大学院社会理工学研究科棟 大岡山西9号館2階

1日目 5月17日(木)

■09:00 受付開始

■09:30 - 10:30 口頭発表 20分3件

座長1: 渡邊寿雄(東工大)

1001	電子の電気双極子モーメント(EDM)探査のための相対論的分子理論の開発 ○阿部穰里, Geetha Gopakumar, B. P. Das, 波田雅彦, D. Mukherjee(首都大, 首都大, Indian Institute of Astrophysics, 首都大, Raman Centre for Atomic, Molecular and Optical Sciences)
1002	局所ユニタリー変換に基づく大規模分子系のための2成分相対論法の開発 ○清野淳司(早大先進理工)、中井浩巳(早大先進理工、早大理工研、JST-CREST)
1003	完全固体・液体の状態方程式 v2 ○片岡洋右、山田祐理(法政大, 生命)

■ 10:30 – 11:30 口頭発表 20分 3件

座長2: 小林正人(早大高等研)

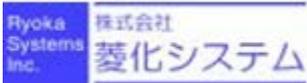
1004	第一原理分子動力学法と粗視化分子動力学法によるポリエチレンの劣化機構の解明 ○樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司(東北大院工)
1005	Si エピタキシャル成長における速度論的基礎研究 ○牛島治宣、猪原一浩、国吉ニルソン、不破章雄(早稲田大)
1006	量子分子動力学法による GaN の Cl ラジカルエッチングプロセスの解析 ○柳谷一行、樋口祐次、尾澤伸樹、島崎智実、久保百司(東北大院工)

■ 11:30 – 12:30 展示会プレビュー 各社 5分

研究展示 座長3: 寺前裕之(城西大)

1D01	MolWorks 新機能 ~ニューラルネットワーク法による物性推算式構築機能~ ○田島澄恵 1、井上靖雄 1、西克也 2(1)ヒューリンクス、2)ビヨンド・コンピューティング)
1D02	原子軌道のガラス内彫刻 –混成軌道の表示: その3– 時田 那珂子、○時田 澄男(埼玉大名誉)、細矢 治夫(お茶大名誉)
1D03	水溶液中の糖のコンホメーション解析 ~NMR 結合定数の経験式の開発と ab initio 計算と分子動力学計算による予測~ ○松原正陽、及川雅人、後藤仁志(豊橋技科大、横浜市大)

■ 企業展示

CX01	株式会社菱化システム	
CX02	ShareTask アライアンス	
CX03	国立大学法人 東京工業大学	
CX04	株式会社 JCC ギミック	
CX05	日本アイ・ビー・エム株式会社	【IBM Starter Kit for Cloud】

■ 12:30 – 14:00 昼休み

■ 14:00 – 15:30 ポスター(20 件)

1P01	「理系のための Excel 活用プログラミング」を執筆して ○吉村 忠与志、佐々 和弘(福井高専)
1P02	金属ナノ粒子の水素化状態と物性に関する理論解析 ○石元孝佳、安高美奈子、Mahesh Bhatt、古山通久(九大、JST-CREST)
1P03	固体酸化物形燃料電池燃料極のマルチスケール・マルチフィジックスシミュレーション ○古山通久、中尾和英、劉世学、小倉鉄平、石元孝佳、松村晶、原祥太郎、多田朋史、梅野宜崇、鹿園直毅(九大、東大、JST-CREST)
1P04	Winmostar 上で DFT 計算と PIO 計算の組合せによる固体表面触媒反応経路推定 ○志賀昭信(ルモックス技研)
1P05	フッ素系アイオノマー側鎖モデル化合物の基準振動解析 ○山口真、大平昭博(技術研究組合 FC-Cubic、産総研)
1P06	初学者のための Gromacs による MD 計算支援ソフト GISP の開発 森一樹 1, 樺島智大 2, 源聡 2, ○玉城哲平 1, 上田一義 1(1 横浜国大院工、2 CTC)
1P07	無限次 Douglas-Kroll 法による構造最適化手法の開発 ○中嶋裕也(早大先進理工)、清野淳司(早大先進理工)、中井浩巳(早大先進理工、早大理工研、JST-CREST)
1P08	DMF 中の金属イオンの溶媒和構造 ○崎山博史、山口亮、阿部啓太(山形大理、和洋学園)
1P09	量子化学計算を用いた有機電子材料の電荷移動特性の解析 ○高田雄太 a、小林正人 a,b、中井浩巳 a,c,d(a 早大先進理工、b 分子研、c 早大理工研、dJST-CREST)
1P10	DC-SAG-CI 法～大規模励起状態理論の構築～ ○吉川武司、小林正人、中井浩巳(早大先進理工、分子研、早大理工研、JST-CREST)
1P11	有機電解質溶媒の分解挙動に関する理論的研究 ○大越昌樹、菊池那明、中井浩巳(早大先進理工、早大理工研、JST-CREST)
1P12	スピン依存 2 成分相対論法に対応した電子相関理論の開発 ○中野匡彦、清野淳司(早大先進理工)、中井浩巳(早大先進理工、早大理工研、JST-CREST)
1P13	イミド化合物の DFT 遠赤外振動計算に基づくポリイミド薄膜のコンホメーション解析 ○岡田朋大、安藤慎治(東工大院理工)
1P14	中止
1P15	Toll 様受容体の構造を学ぶ Web 教材 ○本間善夫(新潟県立大)
1P16	ルチジン誘導体生成の反応機構に関する理論的研究 ○石川諒、寺前裕之(城西大理)、丸尾容子(NTT 環境エネルギー研)
1P17	DFT Study of Adsorption properties of Reaction Intermediates under Electric Potential in Solid

	Oxide Fuel Cell ○Shixue Liu, Teppei Ogura, Takayoshi Ishimoto, Michihisa Koyama (Kyushu Univ., JST-CREST.)
1P18	分子動力学法を用いたシリケートメルトのナノ構造と物性の研究 ○則竹史哉、河村雄行(岡山大環境)
1P19	小直径のCNTにおける π 電子分布の解析 —Liイオンとの相互作用— ○森川大、島田将吏、小須田翔平、成田進、野村泰志(信大)
1P20	エタノールアミン・ジエタノールアミンの構造に関する理論的研究 ○寺前裕之、丸尾容子(城西大理、NTT 環境エネルギー研)

■ 15:30 – 16:30 口頭発表 20分 3件

座長4: 八木 徹(江戸川大学)

1007	甘味タンパク質の全電子量子化学計算 ○矢城陽一朗、直島好伸(岡山理大自然科学研、岡山理大院)
1008	反応性指標としての振電相互作用密度: C60の環化付加反応への応用 ○佐藤徹、岩原直也、春田直毅、田中一義(京大院工)
1009	原子構造計算におけるセルフ・コンシステント計算法の改良 ○石川英明

■ 16:30 – 17:30 口頭発表 20分 3件

座長 5: 本間善夫(新潟県立大)

1010	15年目を迎えた化学教育ジャーナルー今後の課題と展望 澤田和弘、山田洋一、○伊藤真人(大阪教育大、宇都宮大教育、創価大工)
1011	八面体錯体のステレオイソグラム ○藤田眞作(湘南情報数理化学研)
1012	化学は数学の発展にいかに関与できるか ○細矢治夫(お茶大名誉)

■ 18:00 懇親会

蔵前会館3F「手島精一記念会議室」にて

<http://www.somuka.titech.ac.jp/ttf/access/index.html>

2 日 目 5 月 18 日 (金)

■ 09:00 受付開始

■ 09:30 - 10:30 口頭発表 20 分 3 件

座長 6 : 小畑繁昭 (産総研)

2001	塩基溶媒中金触媒表面でのエタノール酸化反応メカニズム 天野祐樹、劉世学、石元孝佳、○古山通久(九大)
2002	バルクヘテロ型有機半導体における暗導電率の理論的解析 ○成島和男、本田真彬、久保直也(宇部高専)
2003	電位を考慮した電気化学反応に関する理論的解析 ○石元孝佳、劉世学、古山通久(九大稲盛セ)

■ 10:30 - 11:00 総会(30 分)

司会: 会長 細矢治夫

■ 11:00 - 11:40 表彰 10 分および受賞講演 30 分

座長 7 : 細矢治夫 (お茶大名譽)

2A01	功労賞	千田範夫(株式会社テンキューブ研究所) 分子設計支援システム(Winmostar)開発秘話
------	-----	--

■ 11:40 - 13:30 昼休み

■ 13:30 - 15:00 ポスター(19 件)

2P01	分子動力学シミュレーション結果解析用可視化ソフトウェアの開発 ○大石駿介、大川政志(沼津高専)
2P02	鉛原子を含む芳香族性化合物に関する量子化学的研究 ○河村俊秋、阿部穰里、斎藤雅一、波田雅彦(首都大院理工、首都大院理工、埼玉大院理工、 首都大院理工)
2P03	SiO ₂ 組成ゼオライトの分子動力学シミュレーション ○大川政志、堤涼、大石駿介(沼津高専)
2P04	エイズの HIV-1 プロテアーゼ阻害薬の効果に関する大規模生体分子量子化学計算 ○矢城陽一朗、直島好伸(岡山理大自然科学研、岡山理大院)
2P05	多分木アルゴリズムを用いた標的タンパク質ペプチド結合部位の探索 ○中川卓也、増田尚之、石飛秀斗、後藤仁志

2P06	Na ₂ O-MgO-BO _{1.5} 系ガラスの分子動力学シミュレーション ○宮本 大輔、澤口 直哉、河内 邦夫、佐々木 眞(室工大院)、河村 雄行(岡山大院)
2P07	分子動力学法を用いたアルミナ焼結挙動の解析 ○楠橋陽教、内田希(長岡技大)
2P08	ガラス表面の応力腐食の研究 3 高木宏哲、○内田希(長岡技大)
2P09	四環縮合ベンゼン系の置換基効果解析 ○藤山亮治、岡本郁也(高知大理)
2P10	粘土鉱物の高圧下での水和挙動 ○佐藤毅、河村雄行(東工大理工、岡山大環境)
2P11	Na ₂ O-B ₂ O ₃ 系結晶を用いた分子動力学シミュレーションの原子間相互作用の評価 ○佐々木 英之、澤口 直哉、河内 邦夫、佐々木 眞(室工大院)、河村 雄行(岡山大院)
2P12	分子動力学法による Li ₂ O-BO _{1.5} -SiO ₂ 系ガラス中の Li イオン挙動解析 ○大川 裕也、澤口 直哉、河内 邦夫、佐々木 眞(室工大院)、河村 雄行(岡山大院)
2P13	擬ポテンシャル法による有機分子の内殻ケミカルシフトの計算と Au-Layer 付加の効果 ○里園浩(浜松ホトニクス中央研究所)
2P14	滑り運動するアクチン繊維の破断と屈曲伝播の関係 ○櫻沢繁、藤田雄人、國田樹(はこだて未来大システム情報科学)
2P15	Na ₂ O-BO _{1.5} -SiO ₂ 系ガラスのシミュレーションに適用する原子間相互作用の検討 ○佐々木 崇博、澤口 直哉、河内 邦夫、佐々木 眞(室工大院)、河村 雄行(岡山大院)
2P16	NMR スペクトルの Scaling Factor ○渡辺 昭敬(神戸高専)
2P17	AR 技術を用いた分子可視化システムの開発 ○蔵内伸悟、須藤大樹、後藤仁志(豊橋技科大)
2P18	化学修飾による有機結晶構造の変化とその予測 ○小畑繁昭、下位幸弘、園田与理子、後藤仁志(産総研、豊橋技科大)
2P19	Temperature dependence of the hydrogen adsorption sites on Zeolite-Templated carbon K. Suzuki ¹ , M. Tachikawa ² , H. Ogawa ¹ , S. Ittisanronnachai ³ , H. Nishihara ³ , T. Kyotani ³ , ○U. Nagashima ¹ (¹ National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, ² Yokohama-city University, ³ Tohoku University)

■ 15:00 – 15:30 受賞講演 30 分

座長8:長嶋雲兵(産総研)

2A02	吉田賞(論文賞)	金子 弘昌 「非線型変数領域選択手法の開発およびソフトセンサーへの応用」
------	----------	---

■ 15:30 – 16:50 奨学賞受賞講演 20 分4件

座長9:内田希(長岡技科大)

2A03	「第一原理分子動力学法による PEFC 電解質の劣化プロセスシミュレーション」 ○小林顕, 樋口祐次, 尾澤伸樹, 島崎智実, 久保百司(東北大院工)
2A04	Na ₂ O-B _{0.5} -Y ₂ O ₃ 系ガラスの分子動力学法による構造解析 ○伊東祥隆, 澤口直哉, 河内邦夫, 佐々木眞(室工大院), 河村雄行(岡山大院)
2A05	「分子軌道計算によるダイヤモンド/ニッケルめっき過程の研究4」 ○伊藤耕悦, 松原浩, 内田希(長岡技科大)
2A06	「分子動力学法を用いたニッケル多孔体シンタリング特性解析」 ○中尾和英, 石元孝佳, 古山通久(九大院工, 九大稲盛ゼ, JST)