

content="IE=5.0000" http-equiv="X-UA-Compatible">

日本コンピュータ化学会
Society of Computer Chemistry, Japan<http://www.SCCJ.net/>

日本コンピュータ化学会2013年秋季年会プログラム

8月23日 公開 確定版

■主催

日本コンピュータ化学会(SCCJ)

■共催・協賛

日本化学会, 触媒学会, 化学工学会, 九州大学カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所,
触媒学会コンピュータの利用研究会

■会期

2013年10月18日(金)～19日(土)

■会場

九州大学 伊都キャンパス 稲盛財団記念館 1F 稲盛ホール

1日目 10月18日(金)

■09:30 受付開始

■10:00 - 10:10 開会の挨拶: 古山通久 実行委員長(九州大)

■10:10 - 11:10 口頭発表20分3件

座長: 樋口祐次(東北大)

- 1001 水素系の量子化学 - 量子多成分系分子理論の開発 -
○立川仁典(横浜市大)
- 1002 Excited state reactivity index theory application on organic molecules
○Abhijit Chatterjee(アクセルリス)
- 1003 核の運動を含んだオージェ電子分光スペクトルの理論計算
○高橋修, 高木沙弥, 国武尚登, 山崎勝義(広島大)

■11:10 - 12:00 特別講演① 50分

座長: 古山通久(九州大)

- 1A01 産業革新のための実践的コンピュータ化学: 未来に向けての発展方向
○宮本 明(東北大)

■12:00 - 13:00 昼休み

■13:00 - 13:50 特別講演② 50分

座長: 石元孝佳(九州大)

- 1A02 固体欠陥ダイナミクスとSOFC電極構造変化の予測に向けたナノ・メゾスケール解析
○原 祥太郎(東京大)

■13:50 - 14:50 口頭発表20分3件

座長: 佐藤 徹(京都大)

- 1004 第一原理計算と粗視化シミュレーションによるフィラーの入った高分子の劣化と耐久性
○樋口祐次, 尾澤伸樹, 久保百司(東北大)
- 1005 膜分離活性汚泥法における膜差圧急上昇予測モデルの開発
○金子弘昌, 船津公人(東京大)
- 1006 量子化学計算による新規セシウムイオン吸着剤Cs_{1-x}NaxMn(CN)₃の開発
○大西拓(三重大)

■14:50 – 15:00 休憩

■15:00 – 16:20 口頭発表20分4件

座長:金子弘昌(東京大)

- 1O07 タンパク質-ペプチド結合部位の高速評価技術の開発
○中川卓也、増田尚之、石飛秀斗、後藤仁志(豊橋技科大)
- 1O08 化学分野における初級シミュレーション技術者教育カリキュラムの開発と調査
○吉村 忠与志、佐々和洋(福井高専)
- 1O09 軌道, 巡回, および二重剰余類のスフェリシティ
○藤田眞作(湘南情数化研)
- 1O10 複環共役炭化水素の電子状態予測法と芳香族性
○酒井章吾(岐阜大)

■16:20 – 16:40 展示会プレビュー 各社3分以内

座長:八木 徹(江戸川大)

CX01 [株式会社菱化システム](#)CX02 [コンフレックス株式会社](#)CX03 [九州大学 情報基盤研究開発センター](#)CX04 [ShareTaskアライアンス](#)CX05 [日本SGI株式会社](#)

■16:40 - 18:10 ポスター発表(31件)

- 1P01 単層カーボンナノチューブとポリビニルアルコールの吸着機構の検討
○小林俊樹、野村泰志、渡邊旭平、後藤康夫(信州大)
- 1P02 分子動力学計算によるチオフェンオリゴマー内包単層カーボンナノチューブ内の分子配向
○田畑裕夢、井上和美、片岡洋右、緒方啓典(法政大)
- 1P03 化学ポテンシャルと振電相互作用
○佐藤徹、春田直毅、田中一義(京都大)
- 1P04 C62異性体からのC2脱離の活性化エネルギー
○長島大、佐藤徹、田中一義(京都大)
- 1P05 トリアゾールおよびその誘導体の熱分解に対する分子軌道解析
○田籠しずか、正本博士、重松幹二、コウハク ワサナ(福岡大)
- 1P06 メタノールアミンの構造に関する理論計算
○寺前裕之、丸尾容子(城西大、東北工大)
- 1P07 実空間実時間でのTDDFT法による有機物の光学特性の解析
○加藤舞、遠越光輝、善甫康成(法政大)
- 1P08 分子軌道の節面数計数によるキャラクタリゼーション
○武田直也、秦野やす世、山本茂義(中京大)
- 1P09 粒子法による電子状態計算の高精度化
○杉本宗一郎、善甫康成(法政大)
- 1P10 銅二核錯体によるメタン活性化に関する理論的研究
○塩田淑仁、吉澤一成(九州大)
- 1P11 最大エントロピー法による発光吸収スペクトルの解析の応用
○遠越光輝、加藤舞、狩野覚、善甫康成(法政大)
- 1P12 ヘキサアンミン遷移金属錯体の電子スペクトルの解析
○田中翔悟、田村克浩(静工研)
- 1P13 LaCoO3のスピン状態に関する理論解析
○伊藤諭美、石元孝佳、古山通久(九州大、CREST)
- 1P14 固体酸化物形燃料電池の破壊特性に関する分子動力学及び第一原理シミュレーション
○齋藤慎一朗、坂之井遼太、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司(東北大)
- 1P15 First-principles Study of Adsorption Properties on Ni/YSZ surface
○Shixue Liu, Takayoshi Ishimoto, Michihisa Koyama(九州大、CREST)

- 1P16 分子動力学法を用いたシンタリングが誘起するNi/YSZアノードの劣化解析
○許 競翔、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司(東北大)
- 1P17 Niの表面エネルギー・表面拡散への吸着種の影響
○中尾和英、石元孝佳、古山通久(九州大、CREST)
- 1P18 複数面方位を考慮したNi触媒反応シミュレーション解析
○西林大樹、小倉鉄平、月川久義、田島正喜(九州大)
- Diffusion Pathways of Hydrogen for Solid Oxide Fuel Cells Anode Using Reactive Molecular Dynamics Simulation
1P19 ○Leton Chandra Saha, Kazuhide Nakao, Takayoshi Ishimoto, Michihisa Koyama(九州大、CREST)
- 1P20 密度汎関数を用いたエタン及びプロパンの分解反応経路の検討
○濱田峻輔、小倉鉄平、田島正喜、月川久義(九州大)
- 1P21 Theoretical Study of the Catalytic Properties of BaTiO₃ as Anode for Solid Oxide Fuel Cells
○David S. Rivera, Takayoshi Ishimoto, Michihisa Koyama(九州大、CREST)
- 1P22 エタン水蒸気改質のNi触媒反応シミュレーション解析
○宇根裕一、小倉鉄平、田島正喜、月川久義(九州大)
- 1P23 カーボンナノチューブのπ電子構造とClar's Theory
○森川大、野村泰志(信州大)
- 1P24 SDBS収録化合物の構造式にもとづく索引の実現
○渡邊宏(産総研)
- 1P25 乗鞍岳における大気汚染の観測
八木徹、○神部順子(江戸川大)、長嶋雲兵、青山智夫(産総研)
- 1P26 GoogleAppEngineを用いた分子グラフィックスシステムの開発
○宇野 健、佐々和洋、林 治尚、中野英彦(県立広島大、福井高専、兵庫県立大)
- 1P27 自己組織化マップを用いた樹脂特性可視化技術の開発
○稲葉彩乃、田村克浩、渥美博安(静工研)
- 1P28 ヘモグロビンの構造とトピックスを学ぶWeb教材
○本間善夫(新潟県立大)
- 1P29 ニューラルネットワーク解析を用いた製鐵用耐火物の損耗因子解析
○高野滉一、内田 希(長岡技科大)
- 1P30 電力制約下での性能最適化に向けたSCF計算の電力特性解析
○稲富雄一、吉田匡兵、津秦伴紀、井上弘士(九州大)
- 1P31 メニーコアプロセッサSIMD演算向けの データ並列2電子フォック行列計算 III
○本田宏明、稲富雄一、真木 淳(九州大、九州先端研)

■18:10 懇親会

稲盛財団記念館1Fロビーにて

2日目 10月19日(土)

■09:00 受付開始

■09:30 - 12:30 サイエンスセミナー(一般公開)詳細は[こちら](#)

■13:30 - 14:20 特別講演③ 50分

座長:長嶋雲兵(産総研)

- 2A01 電子励起分子の分光光学と量子化学計算
○奥山克彦(日本大)

■14:20 - 15:20 口頭発表20分3件

座長:大西拓(三重大)

- 2O01 Linear, Quasi-linear or Bent: M-OH (M = Cs, Fe, Zn)の場合
○平野恒夫(お茶大、産総研)、長嶋雲兵(産総研)
- 2O02 光合成初期過程への超分子化学からのアプローチ シアノバクテリアにおけるPSII反応中心の励起遷移の考察
○鈴木 哲、梅崎雅人、沢井裕佑、小野 慎、錦織広昌(信州大)
- 2O03 不飽和共役系の中をπ電子はどう動くのか—有機電子論の再構築
○細矢治夫(お茶大名誉)

■15:20 - 15:30 休憩

■15:30 – 16:30 口頭発表20分3件

座長:小畑繁昭(豊橋技科大)

- 2004 シュレーディンガー方程式の新しい解法
○松木伯元(富山化学)
- 2005 アントラセンを基本骨格とした発光分子の理論設計: 遷移双極子モーメント密度と振電相互作用密度の応用
○上島基之、佐藤徹、田中一義、梶 弘典(京都大)
- 2006 NTPアンサンブル分子動力学法によるレナードジョーンズ系の3相平衡
○片岡洋右、山田祐理(法政大)

■16:30 - 18:00 ポスター発表(31件)

- 2P01 講演中止
- 2P02 OpenFMOにおけるFock行列計算のGPGPUによる高速化への取り組み
○梅田宏明、塙 敏博、庄司光男、朴 泰祐(筑波大)
- 2P03 二分子複合体結晶構造予測法とハイブリッド並列高速結晶計算技術の開発
○佐藤充晃、上林 紺、小幡快之助、小畑繁昭、後藤仁志(豊橋技科大)
- 2P04 傾斜改質能を持つペーパー触媒内における温度・濃度分布計算解析
○小倉鉄平、白鳥祐介、月川久義、田島正喜(九州大)
- 2P05 ルチジン誘導体の反応機構に関する理論的研究(4)
○石川 諒、寺前裕之(城西大)、丸尾容子(東北工大)
- 2P06 ホール輸送材料における振電相互作用と多体効果
○三村貴信、佐藤 徹、田中一義、梶 弘典(京都大)
- 2P07 非経験的分子軌道法による硝酸アンモニウム多量体のエネルギー安定化に関する研究
○竹内 淨(高千穂大、早大)、武田京三郎(早大)
- 2P08 生物運動にみられる自然計算としての化学反応と物理反応の共役
○吉田彩乃、櫻沢 繁(はこだて未来大)
- 2P09 [6]Cycloparaphenyleneの構造と擬ヤーン・テラー効果
○亀岡優一郎、佐藤 徹、香山貴彦、田中一義、加藤立久(京都大)
- 2P10 南関東の放射性物質の環境動態
○八木 徹、神部順子、中山榮子、長嶋雲兵、青山智夫(江戸川大)
- 2P11 CYP2B6によるbupropion及びefavirenzの代謝機構
○増田和文、真弓 慶、加藤久登、齋藤啓太、片岡洋行、成松鎮雄(就実大、岡山大)
- 2P12 リチウムイオン二次電池の界面現象解析
○内野宏章、石元孝佳、古山通久(九州大)
- 2P13 量子分子動力学法を用いたリチウムイオン電池正極/電解液界面における化学反応の解析
○中村耕輔、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司(東北大)
- 2P14 リチウム空気電池における反応生成物の析出過程の第一原理分子動力学法計算
○山本 航、高羽洋充(工学院大)
- 2P15 Pd系合金における水素吸蔵特性および電子構造に関する理論検討
○屋山 巴、石元孝佳、古山通久(九州大、CREST)
- 2P16 第一原理計算に基づくアルカリ形燃料電池におけるエチレングリコールの酸化反応解析
○千枝繁樹、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司(東北大)
- 2P17 グルコース酸化反応活性における担体効果の理論解析
○濱武由美、石元孝佳、数野裕樹、岸田尚之、古山通久(九州大、オリンパス)
- 2P18 白金触媒上における二酸化炭素還元分子軌道法を用いた研究
○北川貴大、内田 希、白仁田沙代子、梅田 実(長岡技科大)
- 2P19 水還元活性を示すコバルト錯体の酸化還元電位に関する理論的研究
○山田健太、青野信治、榊 茂好(京都大)
- 2P20 Ru(0)触媒によるメタクリル酸メチルのアルケンへの付加反応のDFT計算
○中村沙季、川内 進(東工大)
- 2P21 金クラスターAu₆の構造異性体の安定性と芳香族性
○春田直毅、佐藤 徹、田中一義(京都大)
- 2P22 量子分子動力学シミュレーションを用いたCF_xラジカルによるSiO₂エッチングメカニズムの解明
○伊藤 寿、桑原卓哉、樋口祐次、尾澤伸樹、寒川誠二、久保百司(東北大)
- 2P23 量子化学計算によるカリウムチャネルのフィルター部位におけるカリウムイオン伝導メカニズムの理論解析
○大西 拓(三重大)、山口 兆、鷹野 優(大阪大)

- 2P24 Pd/HKUST-1複合材料の界面相互作用と水素吸蔵に関する理論解析
○堤 竜輝、屋山 巴、石元孝佳、古山通久(九州大、CREST)
- 量子分子動力学法を用いたGaN基板のエッチングにおけるClラジカルとの反応機構の検討
- 2P25
○柳谷一行、伊藤 寿、桑原卓哉、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司(東北大)
- 酸素欠陥に関するムライトの構造
- 2P26
○長島 啓(長岡技科大)
- 有限長アームチエアナノチューブのNBMOの組み立てとHOMO-LUMOギャップ振動
- 2P27
○溝口則幸(明治薬大)
- 量子分子動力学法による薄膜Si太陽電池のCVD成長シミュレーション
- 2P28
○桑原卓哉、伊藤 寿、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司(東北大)
- 分子動力学法を用いた単層カーボンナノチューブへの環境汚染気体分子の吸着特性
- 2P29
○関根亮典、井上和美、片岡洋右、緒方啓典(法政大)
- 縮合多環炭化水素骨格の電子伝達に関する窒素原子の効果
- 2P30
○藤山亮治・小野 希(高知大)
- Pd金属のH/D/T吸蔵特性に関する理論解析
- 2P31
○石元孝佳、屋山 巴、古山通久(九州大、CREST)

閉じる