



日本コンピュータ化学会 2013 年春季年会プログラム

3 月 22 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, CBI 学会

■会期

2013 年 5 月 30 日(木)~31 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 30 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	Si-Si 結合が示す新規反応機構の理論的提案 ○林慶浩、大津駿、棗田貴文、川内進(東工大院理工)
1002	Relationship between the Shannon Ionic Radius and Interatomic Charge Composition Distribution via the SIWB Method in a Density Functional Theory Scheme ○福島公親(TNES)
1003	ポリベンゾイミダゾールとリン酸の相互作用の DFT 計算 ○白田 圭、川内 進(東工大院理工)

■10:30 - 11:30 口頭発表 20分 3件

座長2: 石元孝佳(九大)

1004	Hartree-Fock-Bogoliubov 法による分子の電子状態計算とエネルギー勾配法 ○小林正人(早大高等研)
1005	新規な数値積分法による分子の構造最適化の精度向上 ○中川克己(MO BASICS Research)
1006	原子構造計算の平均場近似における高精度数値計算法 ○石川英明

■11:30-12:30 口頭発表 20分 3件

座長3: 野村泰志(信州大繊維)

1007	適応型非線型回帰分析手法の開発およびソフトセンサーへの応用 ○金子弘昌、船津公人(東大院工)
1008	化学空間の可視化を利用した化学構造ジェネレータの開発 ○三島和晃、金子弘昌、船津公人(東大院工)
1009	N分木アルゴリズムを用いた標的タンパク質のペプチド結合部位探索 ○中川卓也、増田尚之、石飛秀斗、後藤仁志(豊橋技科大)

■12:30-14:00 昼休み

■14:00-14:30 展示会プレビュー 各社 5分

座長4: 田島澄恵(株式会社ヒューリンクス)

CX01	コンフレックス株式会社	
CX02	株式会社菱化システム	
CX03	株式会社 日立製作所	
CX04	ShareTask アライアンス	
CX05	株式会社アルゴグラフィックス	

CX06	東京工業大学 学術国際情報センター	
------	-------------------	--

■14:30 – 16:00 ポスター発表(20 件)

1P01	ab initio 計算と PIO 計算のコンビネーションによる固体触媒反応経路の実践的探索法 ○志賀昭信(ルモックス技研)
1P02	過シュウ酸エステル化学発光における CIEEL 機構の検討 ○西脇高雄、野村泰志、本吉谷二郎(信州大・繊維)
1P03	理論計算を用いたシクロアルキン類の[2+2]環化付加反応機構の解明 ○栗田貴文、林慶浩、大津駿、川内進(東工大院理工)
1P04	バナナ型液晶分子のコンフォメーション解析 ○服部将也、白田圭、山田和彦、川内進(東工大院理工)
1P05	分子動力学法を用いたシタリング現象解析 ○中尾和英、濱武由美、河野晴彦、石元孝佳、古山通久(九大院工、九大稲盛セ、JST-CREST)
1P06	ニューラルネットワーク解析を用いた製鉄用耐火物の損耗因子解析 ○高野滉一、内田 希(長岡技科大)
1P07	耐障害性を考慮した並列 FMO プログラムの実装 ○稲富雄一、梅田宏明、辻美和子、村井均、南一生、横川三津夫、佐藤三久、青柳睦(九大、筑波大、理研)
1P08	分子動力学計算を用いたアルミナ焼結過程の研究 ○長島啓、楠橋陽教、内田希(長岡技科大)
1P09	SOFC 燃料極の Ni 上における CH ₄ , C ₂ H ₆ 混合気体に関する表面反応数値解析 ○藤原徹也、河野晴彦、石元孝佳、古山通久(九大稲盛セ・JST-CREST)
1P10	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 II ○本田宏明、稲富雄一、真木淳(九大情基セ、九大シス情、九州先端研)
1P11	分子軌道計算による Ni めっき膜中へのナノダイヤモンド共析機構の解明 伊藤耕悦、松原浩、○内田希(長岡技科大)
1P12	斜方輝石の IR スペクトルの第一原理計算: 元素置換による変化の考察 ○櫻井萌 1・佐久間博 1・辻野典秀 2・高橋栄一 1・河村雄行 3(1:東工大地惑,2:岡山大 ISEI,3 岡山大環境科学)
1P13	選択的ビニログス向山アルドール反応に関する量子化学的検討 ○菊池那明、迎田裕貴、加藤卓也、細川誠二郎、中井浩巳(早大理工研、早大先進理工、JST-CREST、京大 ESICB)
1P14	CUDA/OpenACC を用いた GPU による分割統治法的高速化 ○吉川武司、中井浩巳(早大先進理工、早大理工研、JST-CREST、京大 ESICB)

1P15	Gタンパク質共役受容体(GPCR)の構造を学ぶ Web 教材 ○本間善夫(新潟県立大)
1P16	動的分極率計算に基づく励起状態計算法: 汎用アルゴリズムの開発 ○野中佑太郎、吉川武司(早大先進理工)、中井浩巳(早大先進理工、早大理工研、JST-CREST、京大 ESICB)
1P17	スピン依存 2 成分相対論法に基づく分割統治型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、京大 ESICB)
1P18	Li+を用いた PAHs の π 電子分布解析手法について ~主として Clar's Theory との比較~ ○森川大、野村泰志(信州大繊維)
1P19	Strange Behavior of DK Relativistic Correction on the CoH ab initio Calculation 平野恒夫、友成六実、○長嶋雲兵(お茶大名誉、NEC、産総研)
1P20	Auto-Modeller: 高精度物性推算式の自動構築機能 ○田島澄恵、井上靖雄(株式会社ヒューリンクス)、Matthew Segall(Optibrium,Ltd.)

■16:00-17:20 口頭発表 20分4件

座長5: 川内進(東工大院理工)

1010	相補誤差関数の最良近似: Hastings の近似式の再検討 ○河野明男(海洋研究開発機構)
1011	有機化学力の増強へ向けた「有機分子の分子軌道計算と活用」を著わして ○染川賢一(鹿児島大名誉)
1012	限定減縮巡回指標(RSCI)法による数え上げとフィボナッチ数 ○藤田眞作(湘南情数化研)
1013	Wiener number と Hosoya polynomial ○細矢治夫(お茶大 名誉)

■18:00 懇親会

東工大生協にて

2日目 5月31日(金)

■09:00 受付開始

■09:30 – 10:30 口頭発表 20分 3件

座長6:金子弘昌(東大院工)

2001	エチレングリコールを用いた固体アルカリ形燃料電池における酸化触媒の反応特性に関する第一原理計算 ○千枝繁樹、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司(東北大院工)
2002	アルカリ形燃料電池電解質中での OH-ダイナミクスと溶媒効果 ○石元孝佳、古山通久(九大稲盛セ)
2003	リチウムイオン電池の劣化プロセスに関する量子分子動力学シミュレーション ○中村耕輔、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司(東北大院工)

■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:河村雄行(岡山大学)

2A01	学会賞	○片岡洋右、山田 祐理(法政大) 完全固体・液体の状態方程式 v5
------	-----	--------------------------------------

■11:40-12:20 表彰 10分および受賞講演 30分

座長8:澤口 直哉(室工大院)

2A02	吉田賞(論文賞)	○森 一樹, 樺島 智大, 源 聡, 玉城 哲平, 上田 一義(横国大院、伊藤忠テクノ) Gromacs のための計算支援ソフト GISP の開発
------	----------	--

■12:20-14:00 昼休み

■14:00-15:30 ポスター(19件)

2P01	スクッテルダイト化合物 $Ce_xCo_4As_{12}$ の格子振動シミュレーション ○福士 明宏、澤口 直哉、関根 ちひろ、佐々木 眞(室工大院)
2P02	オープンソースによる化学反応情報共有システムの構築 ○湯浦慶子、来住伸子(津田塾大)
2P03	原子・分子軌道の節面の解析的計数法 ○武田直也、秦野やす世、山本 茂義(中京大 情報科学、中京大 国際教養)
2P04	グラフ理論による 1 価の金属クラスター構造の安定性の解釈

	○前田研司、仲上祐斗、小島一起、関根理香(静岡大理)
2P05	有機半導体におけるキャリア発生機構の検討 ○本田真彬(宇部高専生産システム)、成島和男(宇部高専電気)
2P06	Ru および Pd/Ru 表面における CO 酸化活性に関する理論解析 ○安高美奈子、石元孝佳、古山通久(九州大、JST)
2P07	置換基効果を用いた縮合多環炭化水素骨格の電子伝達機構の解析 ○藤山亮治・秋山剛(高知大理)
2P08	メ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、NTT 環境エネルギー研)
2P09	SOFC 三相界面の実構造観察に基づく反応ダイナミクス 石元孝佳、劉世学、Leton C. Saha、劉淑生、古山通久(九大稲盛セ・JST-CREST)
2P10	ブラゼインとその変異体の電子状態計算による甘味タンパク質の機能解析 ○矢城陽一郎、直島好伸(岡山理大自然科学研、岡山理大院)
2P11	OpenFMO における Fock 行列計算ルーチンの GPGPU 化について ○梅田宏明、埴敏博、庄司光男、朴泰祐(筑波大学)
2P12	分子軌道法による Si-O-Si 架橋の電子状態: 珪酸塩の特異な挙動と分子動力学法への応用 ○則竹史哉、河村雄行(岡山大学)
2P13	ルチジン誘導体生成の反応機構に関する理論的研究(3) ○石川諒、寺前裕之(城西大院・理)、丸尾容子 (NTT 環境エネルギー研)
2P14	YbxFe4Sb12(x = 0.7~ 1.0)の振動解析 ○中村 法仁、澤口 直哉、佐々木 眞(室工大院)
2P15	A2O-BO1.5-SiO2 系ガラス(A = Li, Na, K)の分子動力学シミュレーション ○上原 友哉,澤口 直哉,佐々木 眞(室工大院)
2P16	分子動力学法による 3 価の陽イオンを含む Na2O-BO1.5 系ガラスの構造解析 ○伊東 祥隆、澤口 直哉、佐々木 眞(室工大院)
2P17	一般縮約基底関数に対応した電子反発積分手法の開発: GC-ACE-RR 法 ○速水雅生(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、京大 ESICB)
2P18	液体アルコールの X 線発光分光に対する理論計算 ○高橋 修、Lars Pettersson(広大院理、ストックホルム大)
2P19	ハイブリッド並列結晶計算法による酢酸結晶構造予測 ○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)

■15:30-16:30 口頭発表 20分 3件

座長 9: 小林正人(早大高等研)

2004	粒子法による電子状態計算
------	--------------

	○杉本宗一郎、善甫康成(法政大)
2005	最大エントロピー法を用いた発光吸収スペクトルの解析 ○遠越光輝、加藤舞、狩野覚、善甫康成(法政大)
2006	バイジカル性色素の量子化学計算による分子設計 ○日吉淳也、林慶浩、川内進(東工大院理工)

■16:30-17:10 口頭発表 20分 2件

座長 10: 佐々和洋(福井高専)

2007	分子動力学法によるハロゲン化物を添加したLiイオン伝導ガラス中のLiイオン挙動解析 ○大川 裕也、澤口 直哉、佐々木 眞(室工大院)
2008	量子分子動力学法に基づく炭化ケイ素膜の水潤滑シミュレーション ○小林康彦、佐藤誠一、白珊丹、樋口祐次、尾澤伸樹、足立幸志、久保百司(東北大院工)