

1日目 10月18日(土)

■9:30 - 受付開始

■10:30 - 12:10 口頭発表 I (各20分)

座長 山岸賢司(日大)

1001	内殻二重正孔状態に対する理論的研究 ○高橋 修, 上田 潔 (広大, 東北大)
1002	金属ナノ粒子の構造と電子状態に関する理論解析 ○石元 孝佳, Mohammad Shahjahan, 古山 通久 (九大稲盛セ, JST-CREST)
1003	パラジウム触媒を用いたノルボルネンのシアノエステル化反応におけるexo選択性の理論的解明 ○石塚 拓也, 奥田 靖浩, Robert K Szilagyi, 西原 康師, 森 聖治 (茨大理, 岡大院自然, Montana State Univ.)
1004	RNA-seqに対するNGSデータ解析プログラムの開発 ○見越 大樹, 深野 義人, 宮澤 由妃, 山岸 賢司 (日大工)
1005	3Dプリンタによる分子の可視、可触化がもたらすもの ○川上 勝 (山大工)

■12:10 - 12:30 企業展示プレビュー (各3-5分)

座長 田島澄恵(江戸大)

CX01	株式会社クロスアビリティ	
CX02	九州大学 情報基盤研究開発センター	
CX03	HPCシステムズ株式会社	
CX04	東京工業大学学術国際情報センター	
CX05	コンフレックス株式会社	
CX06	株式会社タロウ	

■12:30 - 13:30 昼休み

■13:30 - 14:20 特別講演 I (50分)

座長 加藤隆二(日大)

1A01	ab initio 分子軌道法を用いた分子間相互作用の精密解析 都築 誠二 (産業技術総合研究所ナノシステム研究部門)
------	--

■14:30 - 15:50 口頭発表 II (各20分)

座長 野村泰志(信州大)

1006	最大エントロピー法による発光吸収スペクトルの解析におけるデータ利用法 ○遠越 光輝, 狩野 覚, 善甫 康成 (法政大)
1007	構造異性体と立体異性体についての誤解 ○藤田 眞作 (湘南情報数理化学研)
1008	境界条件を伴う3次元イジングモデルの厳密解 ○鳴海 英之, 細矢 治夫 (元北大院, お茶大)
1009	鎖状炭化水素の状態方程式の基本構造 ○片岡 洋右, 山田 祐理 (法政大生命, 東電大理工)

■ 15:50 - 16:10 ポスター発表プレゼンテーション I (各1分)

座長 山田祐理(東電大)

■ 16:10 - 17:40 ポスター発表 I (90分)

1P01	ペプチドナノリングとナノチューブの第一原理電子論 ○武田 京三郎 (早大理工)
1P02	StarDrop/Nova機能によるhA2AARアンタゴニスト構造展開 ○田島 澄恵, 井上 靖雄 (江戸大, 株ヒューリンクス)
1P03	蛍光性ポリマーのユニット数による蛍光消光への影響1 ○樋岡 慎一郎, 野村 泰志 (信州大繊維)
1P04	鉄化合物の構造予測と発ガン性 阿部 啓太, ○崎山 博史, 西田 雄三 (和洋国府台女子高, 山大理, 金医大)
1P05	計算機化学を用いたムライトの構造異常の研究 ○長島 啓, 内田 希 (長岡技大院)
1P06	エタノールアミンの水和構造に関する理論的研究 ○寺前 裕之, 丸尾 容子 (城西大理, 東北工大)
1P07	塩化物イオンを軸位に持つ酢酸架橋ランタン型ルテニウム(II,III)二核錯体の電子状態 平岡 勇哉, 池上 崇久, 広 光一郎, 吉岡 大輔, 御厨正博, 片岡 祐介, ○半田 真 (島大院総合理工, 関学大理工)
1P08	スマートフォン向けの分子グラフィックス表示アプリの開発(仮) ○宇野 健, 佐々 和洋, 林 治尚, 中野 英彦 (県立広大経営情報)
1P09	液体酢酸の酸素K端に対する選択的軟X線発光の理論研究 ○西田 尚大, 徳島 高, 堀川 裕加, 高橋 修 (広大院理, 理研/SPring-8, 広大ISSD)
1P10	ホルムアミジナート架橋ロジウム(II)二核錯体の電子状態と軸位における溶媒分子の配位挙動 ○片岡 祐介, 高橋 一希, 池上 崇久, 川本 達也, 半田 真 (島大院総合理工, 神大院理)
1P11	FMO法を用いた核内受容体-リガンド間の相互作用解析 -1アミノ酸変異がもたらす分子間相互作用への影響- ○吉田 尚恵, 春木 満, 山岸 賢司 (日大工)
1P12	並列FMOプログラムOpenFMOの電力性能最適化 ○稲富 雄一, 深沢 圭一郎, 井上 弘士, 青柳 睦 (九大)
1P13	Pd@HKUST-1複合材料の水素吸蔵機構に関する理論解析 堤 竜輝, ○石元 孝佳, 古山 通久 (九大稲盛セ, JST-CREST)
1P14	分子軌道法に向けた RDMA に基づく通信ミドルウェアの開発 ○本田 宏明, 稲富 雄一, 森江 善之, 南里 豪志, 高見 利也 (九大, JST-CREST)
1P15	結晶構造の探索と予測 小畑 繁昭, ○後藤 仁志 (豊技大)
1P16	NGSデータ解析環境の導入と新規遺伝子候補の探索 ○宮澤 由妃, 深野 義人, 見越 大樹, 井上 寿男, 丸岡秀一郎, 黒田 和道, 権 寧博, 橋本 修, 山岸 賢司 (日大工, 日大医)
1P17	アームチェア型CNTの電子構造のチューブ長依存性 ~主としてトポロジカルな観点から~ ○森川 大, 野村 泰志, 溝口 則幸 (信州大, 明薬大)
1P18	粒子法を用いた実空間における電子状態計算 ○善甫 康成, 杉本 宗一郎 (法政大情報)
1P19	危険ドラッグを知るためのJmolページ公開 ○本間 善夫 (新潟県大)
1P20	非晶質リン酸カルシウムのSr吸着特性 ○河西 貴仁, 内野智裕 (日大工)

■移動 (各自)

■ 19:00 - 21:00 懇親会 (郡山ビューホテルアネックス)

2日目 10月19日(日)

■9:30 - 受付開始

■10:00 - 12:30 一般公開イベント「科学発信!! Fukushima」

講演	分子模型モル・タロウ誕生秘話【講演】
	ヘモグロビンの構造は?【分子模型組立体験】 高松 尚久(株式会社タロウ 代表取締役)

ブース 展示	立体の化学、折り紙で学ぶ分子の構造
	見えないタンパク質の拡張現実(AR)
	原子軌道のガラス彫刻
	極小物質から生命のナゾにせまる
	空と海の色のお宝にせまろう!
	3Dプリンタ実演
	鑑定士に挑戦!! 本物の水晶はどれ?

■12:30 - 13:30 昼休み

■13:30 - 14:20 特別講演 II (50分)

座長 後藤仁志(豊技大)

2A01	計算としての化学反応 櫻沢 繁(公立はこだて未来大学システム情報科学部)
------	---

■14:30 - 15:30 口頭発表 III (各20分)

座長 石元孝佳(九大)

2001	ハロゲン結合の引力の原因と方向性 ○都築 誠二, 内丸 忠文(産総研ナノシステム)
2002	陽電子化合物に対する第一原理計算へのモデルポテンシャルの実装 ○武田 湧, 北 幸海, 立川 仁典(横浜市大院生命ナノ)
2003	プルシアンブルー類似体のセシウムマンガシアノ化合物に対する化学結合解析 ○大西 拓(三重大院工)

■ 15:40 - 16:00 ポスター発表プレゼンテーション II (各1分)

座長 北幸海(横市大)

■ 16:00 - 17:30 ポスター発表 II (90分)

2P01	メチルピリジンイミン類のハロゲン化水素塩およびその異性体の構造に関する理論的考察 ○岩崎 直也, 鈴木 隆之 (東電大工)
2P02	SOFC三相界面に対する構造モデリングと反応機構解析 ○石元 孝佳, 劉 世学, Leton C. Saha, 劉 淑生, 古山 通久 (九大稲盛セ, JST-CREST)
2P03	分子動力学シミュレーションによる単層カーボンナノチューブに内包された硫黄の構造評価 ○佐藤 豊, 片岡 洋右, 緒方 啓典 (法政大生命, 法政大マイクロ・ナノテク研究セ)
2P04	分子動力学シミュレーションによる単層カーボンナノチューブに内包されたハロゲン化物の構造とイオン伝導性の評価 ○横倉 瑛太, 片岡 洋右, 緒方 啓典 (法政大生命, 法政大マイクロ・ナノテクノロジー研究セ)
2P05	定圧分子動力学シミュレーションによるレナード-ジョーンズ系の相平衡 ○山田 祐理, 片岡 洋右 (東電大理工, 法政大生命)
2P06	分子軌道法を用いたシリカフェームを含む耐火物の反応の研究 ○高野 滉一, 内田 希 (長岡技大)
2P07	分子軌道法を用いたチタニア共析めっき機構の研究 ○島崎 峻州, 堀切 直樹, 内田 希, 松原 浩 (長岡技大)
2P08	2-アザスピロ[4.5]デカン構造における安定構造の理論的研究 ○須田 岬, 島野 洋祐, 高山 淳, 坂本 武史, 寺前 裕之 (城西大院理, 城西大薬)
2P09	TD DFT法による分子内プロトン移動反応の理論的研究(2) ○新井 健文, 寺前 裕之, 長岡 伸一, 長嶋 雲兵 (城西大院理, 愛媛大理, 産総研)
2P10	Rh(I)-BINAP触媒によるアリルアミンの1,3-不斉水素転移反応に関する理論的研究 ○吉村 誠慶, 前田 理, 澤村 正也, 武次 徹也, 諸熊 奎治, 森 聖治 (茨大理, 北大院理, 京大福井謙一記念研究セ)
2P11	ハロゲン原子導入によるタンパク質の構造安定化メカニズムの解明 ○鷹嘴 潤平, 小橋 創介, 石川 岳志, 坂本 健作, 山岸 賢司 (日大工, 長崎大, 理研)
2P12	GPGPUクラスタ上でのFMO計算の性能評価 ○梅田 宏明, 塙 敏博, 庄司 光男, 朴 泰祐, 重田 育照 (筑波大, 東大)
2P13	winmostar cloudのための対称操作モジュールの開発 ○長代 新治, 千田 範夫, 北條 博彦 (株クロスアビリティ)
2P14	硫黄鎖を中心に挿入したカーボンナノチューブの電子状態計算 ○夏目 雄平 (千葉大普遍教育セ)
2P15	H3+, H3, H3-の結合様式と構造 Amih Sagan, 田島澄恵, 中山尚史, ○長嶋雲兵, 寺前裕之, 長岡伸一 (産総研, 江戸大, コンプレックス株, 城西大, 愛媛大)
2P16	次世代シーケンサーを用いたRNA-seq解析手法の確立と呼吸器疾患早期診断システムへの展開II ○深野 義人, 宮澤 由妃, 見越 大樹, 井上 寿男, 丸岡秀一郎, 黒田 和道, 権 寧博, 橋本 修, 山岸 賢司 (日大工, 日大医)
2P17	乗鞍岳における大気汚染の観測(その2) ○八木 徹, 神部 順子, 長嶋 雲兵, 青山 智夫 (江戸大, 産総研)
2P18	水分子による高分子電解質膜の脱プロトン反応過程の解析 ○酒井 博則, 徳増 崇 (東北大流体研)
2P19	直鎖状オリゴマーと光子間相互作用の計算機実験による検討 ○岩武 澄, 成島 和男 (宇部高専)
2P20	ポリフェニルエチニレン化合物の基準振動解析 板倉 誉樹, ○沼田 靖, 奥山克彦 (日大工)