



日本コンピュータ化学会 2014 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

2014 年 5 月 29 日(木)~30 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 29 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	多成分密度汎関数理論による核の量子揺らぎを考慮した核磁気遮蔽定数の理論的解析 ○日高愛唯、北幸海、立川仁典 (横浜市大院、生命ナノ)
1002	Comparison of Finite Element Approach and LCAO Analysis with SIWB Method for a Molecule Including an Anion in a Discrete Variational Density Functional Theory ○ Kimichika FUKUSHIMA (TNES)

1003	水分子を付加したアデニン-チミン対の水素結合における原子核の量子効果の及ぼす影響 ○渡邊紗羅、立川仁典(横浜市大院・生命ナノ、立川研)
------	--

■10:30 - 11:30 口頭発表 20分 3件

座長 2: 石元孝佳(九大)

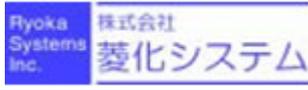
1004	振動励起メタンによる水蒸気改質反応に関する第一原理分子動力学シミュレーション ○横山直樹、樋口祐次、尾澤伸樹、湯上浩雄、久保百司(東北大院工)
1005	振動量子モンテカルロ法による無極性分子の振動励起状態への陽電子吸着に関する理論的解析 ○武田湧、北幸海、立川仁典(横浜市大院 生命ナノ)
1006	MoDTCによるDLCの低摩擦発現に関する量子分子動力学シミュレーション ○村林宏紀、小林康彦、佐藤誠一、白珊丹、樋口祐次、尾澤伸樹、足立幸志、久保百司(東北大院工)

■11:30-11:50 展示会プレビュー 各社 5分

座長 3: 小畑繁昭(豊橋技大)

1D01	原子軌道の球形ガラス内彫刻 時田 那珂子、星 成司、館野 行義(横浜マテリアル株式会社)、功力 芳郎(野老実験クラブ)、中村 恵子(埼玉大)、○時田 澄男(埼玉大名誉)
1D02	「3D モーションコントローラーを用いた拡張分子表示」 ○千々岩睦、鈴木貴洋、小畑繁昭、後藤仁志(豊橋技科大, TUT-ADSIM)

企業展示

CX01	株式会社菱化システム	
CX02	コンフレックス株式会社	
CX03	東京工業大学 学術情報センター	
CX04	株式会社アルゴグラフィックス	

■11:50-14:00 昼休み

■14:00 - 15:00 ポスター発表(21件)

1P01	LiCl-KCl 熔融塩中のヨウ素、臭素の A 型ゼオライトによる吸着挙動の分子動力学計算による検証 ○魚住浩一、河村雄行、杉原圭、小山正史、寺井隆幸(電中研、東大、岡山大)
1P02	3 種のビスチエニルエテンの光異性変換反応におけるエネルギー、立体化学、置換基効果等の MOPAC-PM6 法によるシミュレーション解析 ○染川賢一(鹿児島大名誉)
1P03	群論による正八面体型錯体の配座異性体書き出しと安定構造予測(1) ヘキサキス-メチルアミン錯体の場合 ○崎山博史、脇克志(山形大理)
1P04	ヘキサキス DMF 金属錯体の構造比較 ○阿部啓太、鈴木遼、千葉友香子、山口亮、崎山博史(和洋学園、山形大理)
1P05	ソフトドナーによるアクチノイド元素の選択的分離に関する理論的研究 ○金子政志、宮下直、中島覚(広島大院理、広島大院理、広島大 N-BARD)
1P06	固体触媒反応機構の実践的探索法 ○志賀昭信(ルモックス技研)
1P07	分子動力学シミュレーションに用いるホウケイ酸塩ガラスに適した電荷の検討 ○上原 友哉、澤口 直哉、佐々木 眞(室工大院)
1P08	PGAS モデルに基づく通信ライブラリを用いた OpenFMO プログラムの実装 ○本田宏明 1), 稲富雄一 1), 眞木淳 2) (1.九大, 2.九州先端研)
1P09	Jmol 教材「窒素から見る生命の世界」の公開 ○本間善夫(新潟県立大学)
1P10	分子動力学法による Na ₂ O-SiO ₂ 系メルトの圧密過程の考察 ○則竹史哉、河村雄行(岡山大学)
1P11	放射性 Gas/SPM 反応拡散シミュレータの開発 ○青山智夫、若月泰孝(筑波大アイソトープ環境動態研究センター)
1P12	核・電子軌道(NOMO)理論を用いた電子-陽電子消滅 γ 線スペクトルの理論研究 ○中井浩巳(早大先進理工、早大理工研、JST-CREST、京大 ESICB)、饗庭理沙(早大先進理工)、西澤宏晃(早大理工研、分子研)、五十幡康弘(早大先進理工)、WANG, Feng (Swinburne University of Technology, AUSTRALIA)
1P13	ムライト結晶構造における無秩序構造の秩序についての研究 ○長島啓、内田希(無機材料シミュレーション研究室)
1P14	置換基効果解析による置換基の電子効果の伝達に関する研究 ○藤山亮治、田村真一(高知大理)

1P15	N2-および O2-の基底状態の diffuse 関数依存性 杉山達人(城西大理)、長岡伸一(愛媛大院理)、長嶋雲兵(産総研)、○寺前裕之(城西大院理)
1P16	斜方輝石の含水メカニズム:IR スペクトルによる水素位置決定 ○櫻井萌 1・佐久間博 2・辻野典秀 3・高橋栄一 1・河村雄行 4(1:東工大地惑,2:NIMS,3:岡山大 ISEI,4 岡山大資源環境)
1P17	らせん状・直線状の鎖状高分子をカーボンナノチューブの芯に挿入した系の電子状態計算 ○夏目雄平(千葉大学)
1P18	第一原理計算に基づく Li イオン二次電池の負極表面被膜に対する電解液添加剤 VC の効果 ○後瀉敬介(富士フイルム、NIMS)、袖山慶太郎(京大・NIMS)、奥野幸洋(富士フイルム、NIMS)、館山佳尚(京大、NIMS、JST)
1P19	分子動力学法による Na2O-CaO-SiO2 系ガラス/融体の構造解析 ○岩田 一徳、澤口 直哉、佐々木 眞(室工大院)
1P20	$x\text{Li}_2\text{O}-(1-x)\text{SiO}_2$ 結晶に適用する原子間相互作用の考察 ○山本 優也、澤口 直哉、佐々木 眞(室工大院)
1P21	単層カーボンナノチューブに内包されたチオフェンオリゴマー分子の構造と動的性質 ○緒方啓典、田畑裕夢、関根亮典、井上和美、片岡洋右(法政大)

■15:00-16:00 口頭発表 20分3件

座長 4: 阿部穰里(首都大院理工)

1007	電子-核相関を評価するための相関汎関数の開発 ○宇田川太郎、常田貴夫、立川仁典(岐阜大、山梨大燃研、横浜市大)
1008	3項間漸化式法に基づく実時間発展 TDHF/TDDFT の効率的計算 ○赤間 知子、佐藤 紀穂、南部 伸孝(上智大理工)
1009	量子分子動力学法による LED 用サファイア基板の化学機械研磨シミュレーション ○會澤豪大、河口健太郎、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司(東北大院工)

■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	RS-立体異性体群と四つ組 RS-立体異性体の数え上げ ○藤田眞作(湘南情数化研)
1011	3次元行列の試み ○鳴海英之(元北大院)
1012	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アンケート報告 ○吉村忠与志、佐々和洋、後藤仁志(福井高専・豊橋技科大)

1013	有機電子論の再構築.II. Cross-conjugation. ○ 細矢治夫 (お茶大、名誉)
------	---

■17:50 懇親会

蔵前会館 1F「ロイヤルブルーホール」にて <http://www.somuka.titech.ac.jp/ttf/access/index.html>

2日目 5月30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	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3相平衡図 ○片岡洋右、山田祐理(法政大生命)
2002	粒子法を用いた実空間における電子状態計算 杉本宗一郎、○善甫康成(法政大情報)
2003	Theophylline/Caffeine 分子と RNA アプタマーの結合自由エネルギー計算 ○谷田義明、三井崇志、松浦東(富士通研、富士通、富士通研)

■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: 長嶋雲兵(産総研)

2A01	学会賞	「多様性の計算化学」 ○後藤仁志(豊橋技科大)
------	-----	----------------------------

■11:40-13:30 昼休み

■13:30-15:00 ポスター(20件)

2P01	TD-DFT 法による分子内プロトン移動反応の理論的研究 ○新井健文(城西大院理)寺前裕之(城西大院理)長嶋雲兵(産総研)長岡伸一(愛媛大院理)
2P02	ホウ酸ナトリウム結晶中の 4 配位ホウ素に関する 11B NMR スペクトルの解釈 杉山広忠、橋本尚幸、三好健太、○大川政志(沼津高専)
2P03	白金触媒による二酸化炭素還元分子軌道法による研究 ○向剛志、北川貴大、内田希、梅田実、白仁田沙代子(長岡技大)
2P04	プロトン化水クラスター 8 量体における安定構造の理論的研究 須田岬(城西大院理)、赤瀬大、相田美砂子(広島大院理)、寺前裕之(城西大院理)
2P05	有機合成における酵素リパーゼの鏡像体選択性とその機構に関する大規模生体分子シミュレーション ○矢城陽一朗、木村崇知、亀澤 誠、直島好伸(岡山理大自然科学研、岡山理大院、甲南化)

	工)
2P06	結合エネルギー密度解析による分子間磁氣的相互作用の解析 ○五十幡康弘(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)
2P07	携帯情報端末による生命情報可視化技術の開発 ○鈴木貴洋、後藤仁志(豊橋技科大)
2P08	電力制約下における分子積分プログラムの性能最適化 ○稲富雄一、深沢圭一郎、井上弘士(九大)
2P09	活性酸素種のスキャベンジングに対する新規 Mg マテリアルの水素分子生成機構 ○小林茂樹、品川真理子、高瀬洋一、知久馬敏幸(昭和薬大)、土屋太佑(トッパンフォームズ)、平井重光(ニッコー化成)
2P10	数理化学的計算手法を用いた異性体探索プログラムの開発 ○森川大、野村泰志、松村嘉之(信州大)
2P11	分子軌道法を用いたコロイド TiO ₂ 粒子/Ni めっき膜中への複合化機構の研究 ○島崎峻州、内田 希、堀切直樹、松原浩(長岡技大)
2P12	Lock-in amp 方式を用いた、雑音に埋没した信号の読み取り手法 ○八木徹、神部順子、青山智夫、長嶋雲兵
2P13	分子軌道法を用いた不定形耐火物中でのシリカフェームの挙動の研究 ○高野滉一、内田 希(長岡技大)
2P14	高スピン Fe(IV)ポルフィリン錯体によるオレフィンのエポキシ化反応: CASPT2 の理論研究 ○宇梶かすみ、阿部穰里、波田雅彦(首都大院理工、JST-CREST)
2P15	エチレンジアミン四酢酸(EDTA)錯体を用いた鉛同位体交換反応 ○浅井久瑠美(首都大院理工)、阿部穰里(首都大院理工、JST-CREST)、波田雅彦(首都大院理工、JST-CREST)、藤井靖彦(東工大原子炉)
2P16	分子動力学法および量子化学計算による YbFe ₄ Sb ₁₂ の振動解析 ○中村法仁、澤口直哉、佐々木真(室工大院)
2P17	GPGPU 化した Fock 行列計算ルーチンの OpenFMO への組み込み ○梅田宏明、庄司光男、塙敏博、朴泰祐(筑波大、東大)
2P18	重原子化合物の電子反発積分に適した新たな随伴座標展開-漸化関係式法の開発 ○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)
2P19	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改良 ○遠越光輝、加藤舞、狩野覚、善甫康成(法政大)
2P20	MPO Explorer: Multi-Parameter Scoring 自動生成機能 ○田島澄恵(江戸川大学)、井上靖雄(株式会社ヒューリンクス)

■15:00-15:30 受賞講演 30分

座長 8: 澤口 直哉(室工大院)

2A02	吉田賞(論文賞)	原油増進回収における CO ₂ /油系溶解現象の分子動力学解析 ○植村 豪, 小寺 厚, 津島 将司(東工大), 河村 雄行(岡山大), 平井 秀一郎(東工大)
------	----------	--

■15:30-16:30 口頭発表 20分 3件

座長 9: 八木 徹(江戸川大)

2004	量子化学計算による凝縮系のエンタルピー・エントロピー ○石川 敦之、中井 浩巳(早大先進理工)
2005	イオン核 NO ₃ ⁻ (HNO ₃) ₂ ・水クラスターの安定構造に関する理論的研究 ○植田敦子、北幸海、立川仁典(横浜市大院、生命ナノ)
2006	グラフェン/水界面相互作用に関する理論解析 ○石元孝佳、古山通久(九大稲盛セ)

■16:30-17:30 口頭発表 20分 3件

座長 10: 田島澄恵(江戸川大)

2007	二核亜鉛錯体と二核マグネシウム錯体のアミノペプチダーゼ活性 ○石山晋太郎、金田力、鈴木敬介、山口亮、崎山博史(山形大理)
2008	Gromacs のための計算支援ソフト GISP の開発(2) 玉城 哲平 ¹ , 樺島 智大 ² , 森 一樹 ^{1,3} , 源 聡 ² , 上田 一義 ¹ (1 横浜国大、2 CTC、3 アドバンスソフト)
2009	人工蜂コロニーアルゴリズムを用いたタンパク質-リガンドの結合予測と評価 ○上原彰太、藤本和宏、田中成典(神戸大学)