



日本コンピュータ化学会 2015 年春季年会プログラム

3 月 18 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

2015 年 5 月 28 日(木)～29 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 28 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	分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学(DC-DFTB-MD)法の最近の展開 ○西村好史、海賢丈彰、中井浩巳(分子研・早大理工研、早大先進理工、早大先進理工・早大理工研・JST-CREST・京大 ESICB)
1002	積分で表わされる関数の高精度数値計算法 —量子力学の数値解析から数学・数値解析へのフィードバック— ○石川英明

1003	数値基底を用いた磁気遮蔽テンソルの計算と NMR 化学シフトの評価 ○中川克己(MO BASICS Research)
------	--

■10:30 - 11:50 口頭発表 20分 4件

座長2: 石元孝佳(九大)

1004	量子化学計算による気体分子の溶解度: 調和溶媒和モデルによる検討 ○石川 敦之(早大 理工研)、鎌田 将宏(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)
1005	炭化水素系の汎用状態方程式 ○片岡洋右(法大生命) 山田祐理(東電大理工)
1006	複数結合ポーズ系の標準自由エネルギー計算 ○谷田義明、松浦東(富士通研)
1007	3Dプリンタ用分子モデルの製作と、触って見る分子モデル教育の実践 ○吉村忠与志、吉村三智頼(福井高専名誉教授、敦賀気比高校)

■11:50-12:15 展示会プレビュー 各社 5分

座長3: 田島澄恵(株式会社ヒューリンクス)

企業展示

CX01	株式会社クロスアビリティ	
CX02	株式会社菱化システム	
CX03	株式会社 TS テクノロジー	
CX04	コンフレックス株式会社	

CX05	東京工業大学 学術情報センター	
------	-----------------	--

■12:15-13:30 昼休み

■13:30 - 15:00 ポスター発表(20件)

1P01	コレスキー分解型 MP2,MP3 計算の Xeon Phi での性能評価 山崎大、齊藤天菜、○望月祐志(立教大)、梅田宏明、重田育照(筑波大)
1P02	カルコゲンを含む多重結合分子のモデル計算 川田修太郎、中野克洋、○望月祐志(立教大)
1P03	不斉有機触媒によるエナンチオ区別[2+2]光付加反応の MOPAC-PM6 法でのシミュレーション ○染川賢一(鹿児島大名誉)
1P04	キラルな二核亜鉛錯体によるペプチド加水分解反応の立体選択性 ○崎山博史(山形大理)
1P05	公開データを利用するオレフィン重合触媒の構造活性相関(QSAR) ○志賀昭信(ルモックス技研)
1P06	ホルムアミジナートイオンとシクロオクタジエンが配位したロジウム(I)二核錯体の構造と電子状態 井手雄紀、池上崇久、井上諒子、吉岡大輔、御厨正博、片岡祐介、○半田 真(島根大院総合理工、関学大理工)
1P07	天然ゴムの配座探索と構造解析 ○秋山和輝、河原成元、内田希(長岡技科大)
1P08	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 ○向剛志、北川貴大、内田希、白仁田沙代子、梅田実(長岡技科大)
1P09	ベンズアニリド誘導体及びフェニルアセトアミド誘導体における安定構造の理論的研究 ○須田岬(城西大院理)、島野洋祐(城西大院薬)、高山淳(城西大院薬)、坂本武史(城西大院薬)、寺前裕之(城西大院理)
1P10	陽電子消滅に関する理論的研究: γ 線スペクトル半値幅の系統的解析 ○岩撫徹(早大先進理工)、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)
1P11	分割統治型自己無撞着場計算における収束性の改善 野中佑太郎 ¹ 、○吉川武司 ¹ 、中井浩巳 ¹⁻⁴ (早大先進理工 ¹ 、早大理工研 ² 、JST-CREST ³ 、京大 ESICB ⁴)

1P12	ジグザグ型 CNT の電子構造のチューブ長依存性とチューブ径依存性 ○森川大、野村泰志、溝口則幸(信州大、明薬大)
1P13	TD DFT 法による分子内プロトン移動反応の理論的研究(3) ○新井健文(城西大院理)、長岡伸一(愛媛大理)、長嶋雲兵(産総研)、寺前裕之(城西大院理)
1P14	分子軌道法プログラムでの利用に向けた ACP 通信ライブラリによる集団通信の実装 ○本田宏明、森江善之、南里豪志、稲富雄一、高見利也(九大情基セ)
1P15	OpenFMO における 4 中心クーロン相互作用項計算の GPGPU 化の試み ○梅田宏明、塙敏博、庄司光男、朴泰祐、重田育照(筑波大、東大)
1P16	二電子 Fock 行列の原始基底計算アルゴリズムの提案 ○今村憲亮、本田宏明、稲富雄一、南里豪志(九大シス情、九大情基セ、JST-CREST)
1P17	生体分子シミュレーションの拡張現実型提示 ○森下裕介、北原格、大田友一(筑波大)
1P18	NiPt ナノ粒子における Pt 拡散特性の分子動力的解析 ○長尾歩(滋賀県立大院工)、石元孝佳、古山通久(九大稲盛セ、JST-CREST)、宮村弘、ジョン・クヤ、バラチャンドラン・ジャヤデワン(滋賀県立大工)
1P19	分子動力学法を用いた 2Na-Ca 置換に伴う Na ₂ O-CaO-SiO ₂ 系ガラスの構造解析 ○岩田 一徳、澤口 直哉、佐々木 眞(室工大院) 大川 政志(沼津高専)
1P20	YbFe ₄ Sb ₁₂ の格子振動・熱伝導解析 ○澤口直哉、中村法仁、佐々木眞(室工大院)
1P21	EXCEL による分子動力学 ○片岡洋右(法大生命)、山田祐理(東電大理工)

■15:00-16:00 口頭発表 20分3件

座長4:林 治尚(兵庫県立大)

1O08	シアン化水素における陽電子親和力の H/D 同位体効果の理論的解明 ○浦川海尋、北幸海、立川仁典(横市大院・生命ナノ)
1O09	金属ナノ粒子の物性発現機構に関する理論解析 ○石元孝佳、稲富雄一、本田宏明、古山通久(九大稲盛セ、九大シス情、九大情基セ、JST-CREST)
1O10	C60 多段階環化付加反応に対する振電相互作用密度解析 ○春田直毅、佐藤徹、田中一義(京大院工、京大触媒電池)

■16:00-17:40 口頭発表 20分5件

座長5:川内進(東工大院理工)

1011	オゾン酸化したポリイソプレンの応力下における切断・結合反応 ○樋口祐次 1,2、尾澤伸樹 1、佐藤弘一 3、久保百司 4 (1 東北大院工、2JST さきがけ、3 ブリヂストーン中研、4 東北大金研)
1012	Koopmans の定理と時間反転対称性を同時に考慮した相対論的開殻 Hartree-Fock 法 ○中村亮太 1、中野匡彦 1、清野淳司 1、中井浩巳 1-4 (1 早大先進理工、2 早大理工研、3JST-CREST、4 京大 ESICB)
1013	シクロパラフェニレンにおける擬 Jahn-Teller 効果と構造制御 ○佐藤徹、亀岡優一郎、田中一義(京大院工)
1014	経路積分分子動力学法を用いたミュオニウム化アセトンの解析 ○大場優生、河津励、立川仁典 (横浜市大院・生命ナノ)
1015	血液凝固因子 Xa とリガンドとの相互作用解析 ○佐藤博之、松浦東(富士通研)

■18:00 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29日(金)

■09:00 受付開始

■09:30 - 10:30 口頭発表 20分3件

座長6:佐々和洋(福井高専)

2001	スケーリングによるダイナミクスと構造・熱力学量・分子間力の関係 -液晶相を中心に- ○佐藤克彦(大阪産業大)
2002	分子動力学法及び量子力学の理解のための Excel を用いた教材開発 ○成島和男、岩武 澄、川上侑作(宇部高専)
2003	大域的ポテンシャル表面の量子化学自動探索に基づく埋蔵分子の発掘 ○大野公一、佐藤寛子、岩本武明(量子化学探索研、東北大院理、国立情報研)

■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: 善甫康成(法政大)

2A01	学会賞	量子化学に基づくマルチフィジックス・マルチスケールシミュレータの開発とシステム・材料設計への応用 ○久保百司(東北大金研)
------	-----	--

■13:30-15:00 ポスター(20件)

2P01	分子動力学法による単層カーボンナノチューブに内包されたアルカリハライドの構造と物性評価 ○横倉 瑛太、片岡 洋右、緒方 啓典(法大生命, 法大マイクロ・ナノテクセンター)
2P02	分子動力学シミュレーションによるカーボンナノチューブに内包されたカルコゲ ンの構造および物性評価 ○佐藤豊、片岡洋右、緒方啓典(法大生命, 法大マイクロ・ナノセンター)
2P03	InfiniBand ループ接続を用いた並列計算システム ○北山清章、猪俣健輔(シミュラティオ)、二川潤(インテグシステム)、善甫康成(法大情報)
2P04	Mathematica による分子動力学 ○山田祐理(東電大理工)、片岡洋右(法大生命)
2P05	分子軌道法を用いたチタニア共析めつき機構の研究 島崎峻州、○宮井菜月、内田 希(長岡技科大)
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(長岡技科大)
2P07	最大エントロピー法におけるラグの選択法に関する考察 ○遠越光輝、狩野覚、善甫康成(法大情報)
2P08	金属表面での分子種の吸着挙動の比較 ○猪俣 健輔(シミュラティオ)、善甫 康成(法大情報)
2P09	実空間実時間の TDDFT における様々な交換相関汎関数による効果 ○田中志歩、遠越光輝、善甫康成(法大情報)
2P10	放射性 plume 軌跡のためのシミュレータ開発 ○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)

2P11	固体酸化物形燃料電池の界面におけるカチオンの拡散経路の理論解析 ○林敬堂(九大院工、JST-CREST)、石元考佳、古山道久(九大稲盛セ、JST-CREST)
2P12	二核イリジウム有機金属錯体の構造と電子状態 ○片岡祐介、川本達也、半田 真(島大院総合理工、神奈川大院理)
2P13	「埋蔵分子」発掘プロジェクト:量子化学に基づくグローバル反応マップデータからの発見 ○佐藤寛子(国立情報研)、小田朋宏((株)SRA)、中小路久美代(京大学際融合)、宇野毅明(国立情報研)、岩田覚(東大情報理工)、大野公一(東北大院理、量子化学探索研)
2P14	振電相互作用密度解析によるルブレンの再配列エネルギー制御 ○須田翔大(京大院工)、佐藤徹(京大院工、京大 ESICB)、田中一義(京大院工)
2P15	3級芳香族アミンにおける蛍光性発現と振電相互作用 ○松本潮、佐藤徹、田中一義(京大院工、京大触媒電池)
2P16	-
2P17	カーボンナノチューブの芯へセレン、テルルらせんを入れた系の電子状態計算 ○夏目雄平(千葉大)
2P18	ケクレン骨格での置換基効果解析 ○藤山亮治(高知大理)
2P19	リガンドドッキングのための高速動力学法の開発 ○佐伯敬志、小畑繁昭、後藤仁志(豊橋技科大院、豊橋技科大次世代シム)
2P20	Web ページ「Jmol トピックス」による分子関連ニュースの発信 ○本間善夫(ecosci.jp)

■15:00-15:30 受賞講演 30分

座長 8: 後藤仁志(豊橋技科大)

2A02	吉田賞(論文賞)	大規模・高精度相対論的量子化学計算手法の開発:元素戦略の理論基盤確立を目指して ○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)
------	----------	--

■15:30-17:10 口頭発表 20分 5件

座長 9: 八木徹(江戸川大)

2O04	液体状態における酢酸、ギ酸メチルの分子間相互作用依存性 ○西田尚大(広島大院・理)、金井清二(広島大・理)、徳島高、堀川裕加(理研/SPring-8)、高橋修(広島大・ISSD)
------	--

2005	xNa ₂ O-(1-x)SiO ₂ ガラス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)
2006	量子分子動力学シミュレーションによる Li 空気電池の負極材料と電解液の反応の解析 ○渡辺敬太、樋口祐次、尾澤伸樹(東北大院工)、久保百司(東北大金研)
2007	高強度ゲルの破壊プロセスにおける粗視化分子動力学シミュレーション ○斎藤圭祐(東北大金研)、樋口祐次、尾澤伸樹(東北大院工)、久保百司(東北大金研)
2008	分子動力学シミュレーションによるイオン液体中におけるフラーレンの結晶成長に関する研究 ○IB Hendra P.、樋口祐次、尾澤伸樹(東北大院工)、久保百司(東北大金研)