



日本コンピュータ化学会 2016 年春季年会プログラム

4 月 11 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 2016 年 6 月 2 日(木)~3 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 6 月 2 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	Grid inhomogeneous solvation theory を用いた血液凝固因子 Xa の水和サイト解析 ○佐藤博之、松浦東(富士通研)
1002	分子動力学法に基づく ZnO 結晶成長プロセスにおける 基板の極性が与える影響の解明 ○川岸俊介、許競翔、大谷優介、西松毅、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司(東北大金研)
1003	Sogami ポテンシャルによる荷電コロイド分散系の相図 ○片岡洋右(法大生命)

■10:30 - 11:30 口頭発表 20 分 3 件

座長 2: 渡邊寿雄(東工大)

1004	化学・生命科学系の理学教育における 3D プリンタの活用事例 ○望月祐志 ¹ 、中村昇太 ² 、山中正浩 ¹ 、山田康之 ¹ 、工藤光子 ¹ 、常盤広明 ¹ 、川上勝 ³ 、 北本俊二 ¹ (立教大 ¹ 、スタジオミダス ² 、山形大 ³)
------	--

1005	XyMTeX/LaTeXによる学際的書籍「Mathematical Stereochemistry」の出版 ○藤田眞作(湘南情報化研)
1006	世代の起源…Heisenberg 方程式から Schrodinger 方程式へ ○鳴海英之(元北大院)

■11:30-12:00 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	コンフレックス株式会社	
CX03	株式会社菱化システム	
CX04	九州大学情報基盤研究開発センター	
CX05	東京工業大学 学術国際情報センター	

■12:00-13:00 昼休み

■13:00 - 15:00 ポスター発表(16件)

1P01	並列化分子軌道法プログラム SMASH の Xeon Phi による加速性能評価 ○齊藤天菜 ¹ 、望月祐志 ¹ 、石村和也 ² (立教大 ¹ 、分子研 ²)
1P02	珪酸塩融液の分子動力学シミュレーションにおけるアーティファクトの研究 ○則竹史哉(東工大、理研)
1P03	ゼオライト細孔に対するアルカン吸着の机上モデル実験 ○志賀昭信(ルモックス技研)
1P04	三次元イジングモデルの分配関数の候補として提出された積分表示式の数値計算 ○村上弘(首都大学東京)
1P05	分子動力学法によるアルゴン液体と固体のエントロピー ○片岡洋右(法大生命)

1P06	<p>ペプチド類のフラグメント分子軌道計算</p> <p>○川田修太郎(立教大理)、坂口正貴(立教大理)、米倉伊吹(立教大理)、奥脇弘次(立教大理)、望月祐志(東大生研、立教大理)、福澤薫(東大生研、日大松戸歯)</p>
1P07	<p>[Mg(DMF)6]2+の構造に及ぼすクリスタルパッキングの効果</p> <p>○崎山博史¹、伊藤美咲¹、三橋了爾²、御厨正博²(山形大理¹、関西学院大理工²)</p>
1P08	<p>Armchair α-graphyne nanotube の HOMO-LUMO gap のチューブ長依存性</p> <p>○森川大¹、野村泰志¹、溝口則幸²(信州大¹、明葉大²)</p>
1P09	<p>Web ページ「CRISPR 関連生体分子データ」の公開</p> <p>○本間善夫(ecosci.jp)</p>
1P10	<p>安定化ジルコニア粒界近傍におけるイオン伝導の再検討</p> <p>○澤口直哉、岩満信、佐々木眞(室工大)</p>
1P11	<p>アルカリケイ酸塩ガラスへ適用する原子間相互作用の考察</p> <p>○山本優也、澤口直哉、佐々木眞(室工大院)</p>
1P12	<p>量子化学計算情報を記述子とした機械学習に基づく反応予測手法の開発</p> <p>○藤波美起登(早大先進理工)、清野淳司(早大理工研)、中井浩巳(早大先進理工、早大理工研、JST-CREST、京大 ESICB)</p>
1P13	<p>第一原理計算による水分解用光触媒カソード材料 La5Ti2CuS5O7 の解析</p> <p>○阪田薫穂¹、久富隆史¹、後藤陽介¹、Blanka Magyari-Köpe²、Peter Deák³、山田太郎¹、堂免一成¹(東京大¹、Stanford Univ.²、Universität Bremen³)</p>
1P14	<p>分子動力学法を用いた YbCo4Sb12 の熱振動解析</p> <p>○橋本怜奈、澤口直哉、佐々木眞、関根ちひろ(室工大院)</p>
1P15	<p>イソシアナートのウレタン化反応過程におけるエネルギー、立体変化および置換基効果の PM6 法シミュレーション</p> <p>○染川賢一*、満塩勝、上田岳彦(鹿児島大学大学院理工学研究科、*名誉教授)</p>
1P16	<p>交差共役系での置換基効果</p> <p>○藤山亮治、日高りさ子(高知大理)</p>

■15:00-16:00 口頭発表 20分 3件

座長4: 立川仁典(横浜市大)

1007	古典ポテンシャル系のメタダイナミクスによる準安定構造探索 ○谷田義明、松浦東(富士通研)
1008	局所ユニタリー変換を用いた効率的な2成分相対論法のGAMESSへの実装 ○中嶋裕也(早大先進理工)、清野淳司(早大理工研)、中井浩巳(早大先進理工、早大理工研、JST-CREST、京大ESIGB)
1009	電子EDM探査のための有効電場解析: XH分子とXF分子の比較 ○砂賀彩光 ¹ 、阿部穰里 ¹ 、Bhanu Pratap Das ² 、波田雅彦 ¹ (首都大院理工 ¹ 、東工大院理工 ²)

■16:00-17:00 口頭発表 20分 3件

座長5: 立川仁典(横浜市大)

1010	(発表中止)
1011	固体高分子形燃料電池におけるアノード触媒の不純物耐性に関する第一原理計算 ○加地剛史、大谷優介、西松毅、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司(東北大金研)
1012	2-アザスピロ環化化合物の安定構造の理論的研究 ○寺前裕之 ¹ 、須田岬 ¹ 、林浩輔 ² 、高山淳 ² 、坂本武史 ² (城西大理 ¹ 、城西大薬 ²)

■17:30 懇親会 大学生協にて

2日目 6月3日(金)

■09:30 受付開始

■10:00 - 10:40 口頭発表 20分 2件

座長6: 佐々和洋(福井高専)

2O01	分子シミュレーションによるラドンの挙動予測 ○河村雄行(岡山大)、石森有(原子力機構)
2O02	スピン禁制励起を用いた色素増感太陽電池材料の理論的設計 ○菅野翔平、今村穰、波田雅彦(首都大)

■10:40 - 11:10 総会(30分)

司会: 会長 細矢治夫

■11:10 - 11:50 表彰 10分および受賞講演 30分

座長7: 長嶋雲兵(FOCUS)

2A01	学会賞	古典分子動力学法による無機物質の理解支援とその発展性 ○澤口直哉(室工大)
------	-----	--

■11:50-13:30 昼休み

■13:30-15:30 ポスター(14件)

2P01	局所応答分散力(LRD)法に基づく非経験的分極型力場の開発 ○若山和史(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)
2P02	放射性物質の沈着過程 ○青山智夫(筑波大)、神部順子、八木徹(江戸川大)、長嶋雲兵(FOCUS)
2P03	軟 X 線分光法による炭酸水溶液の電子状態と構造 西田尚大(広島大院理)、堀川裕加(山口大院理工)、徳島高(理研)、○高橋修(広島大 ISSD)
2P04	スマートフォンを用いた晴天のデジタル画像解析 ○神部順子、八木徹(江戸川大)、長嶋雲兵(FOCUS)、青山智夫(筑波大)
2P05	(発表中止)
2P06	水クラスター表面の静電場による H+CO 反応への寄与 ○桑畑和明、小野頌太、大野かおる(横国大)

2P07	アルコキシド架橋二核銅(II)錯体の磁性と分光学的性質についての理論的解釈 ○半田真 ¹ 、石水勇次 ¹ 、三上沙紀 ¹ 、御厨正博 ² 、三橋了爾 ¹ 、片岡祐介 ¹ (島根大院総合理工 ¹ 、関学大理工 ²)
2P08	ロジウム二核錯体による水の光還元反応メカニズムの理論的研究 ○片岡祐介 ¹ 、矢野なつみ ¹ 、植田光 ¹ 、半田真 ¹ 、川本達也 ² (島根大 ¹ 、神奈川大 ²)
2P09	ホモ/ヘテロダイマー系分子間振動の粗視化による分子間/分子内剛性の定量化 ○磯貝 実、北條博彦(東大)
2P10	DFT・MD 法による単層カーボンナノチューブに内包されたヨウ化セシウムの局所構造と物性評価 ○横倉瑛太 ¹ 、片岡洋右 ¹ 、緒方啓典 ^{1,2} (法政大生命科学部 ¹ 、法政大学マイクロ・ナノテクノロジー研究センター ²)
2P11	分子動力学シミュレーションおよび第一原理計算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評価 ○佐藤豊 ¹ 、横倉瑛太 ¹ 、片岡洋右 ¹ 、緒方啓典 ^{1,2} (法政大生命科学部 ¹ 、法政大学マイクロ・ナノテクノロジー研究センター ²)
2P12	界面不均一水素結合構造に関する理論解析 ○石元孝佳、古山通久(九大稲盛セ)
2P13	浸漬熱測定と分子軌道計算を用いたナノダイヤモンドの表面評価 宮井菜月、松原浩、○内田希(長岡技科大物材専攻)
2P14	白金触媒による二酸化炭素還元 of 計算機化学を用いた研究 向剛志、○桜田誠志朗、梅田実、内田希(長岡技科大物材専攻)

■15:30-16:30 受賞講演 30分 2件

座長 8: 後藤仁志(豊橋技科大)

2A02	吉田賞(論文賞)	The Nature of Si-O-Si Bonding via Molecular Orbital Calculations ○則竹史哉(東工大、理研)、河村雄行(岡山大)
2A03	吉田賞(論文賞)	Mathematica による分子動力学 ○山田祐理(東電大、法政大)、片岡洋右(法大生命)