

日本コンピュータ化学会 2009秋季年会

2009年11月12日(木)~13日(金)

東北大学青葉山キャンパス 青葉記念会館

プログラム

10月22日作成

研究発表1日目 : 11月12日(木)

12:30	受付開始
13:30-14:20	特別講演 座長・後藤仁志(豊橋技科大) 浅井美博(産業技術総合研究所計算科学研究部門) 「非平衡量子伝導シミュレーションとその基礎理論研究の現状」
14:20-16:00	ポスター・研究展示・企業展示 概要説明 座長・高羽洋充(東北大) *ポスター・研究展示概要説明2分 企業展示概要説明4分(交代時間込み)
16:00-17:40	ポスター発表・研究展示

ポスター発表

1P01	ルチジン誘導体の電子状態に関する研究 寺前裕之、丸尾容子、中村二郎(城西大理、NTT環境エネルギー研)
1P02	分子軌道法を用いたガラスの応力腐食の研究 高木宏哲、内田希(長岡技科大)
1P03	L-イソアスパラギン酸またはD-アスパラギン酸を含むペプチド基質とPIMTとのドッキングシミュレーション 野地郁彦、小林佳奈、小田彰史、高橋央宜(東北薬大、阪大蛋白研)
1P04	錯化剤と金属イオンとの親和性 -無電解メッキプロセスの研究- 高野健児、内田希、松原浩(長岡技科大)
1P05	酵素リパーゼの鏡像体選択性の予測に関する生体分子化学計算 謝敷宗利、森義裕、今川敦、矢城陽一郎、木村崇知、亀澤誠、直島好伸(岡山理大総合情報、甲南化工)
1P06	MEAの劣化機構に関する理論的解析 石元孝佳、南雲亮、小倉鉄平、徳増崇、古山通久(九大稲盛セ、東北大流体研)

1P07	燃料電池電極における硫黄被毒に関する量子化学的解析 小倉鉄平、石元孝佳、南雲 亮、古山通久 (九大稲盛セ)
1P08	アミノ酸残基の変異によるタンパク質立体構造の変化に対する分子動力学シミュレーションの有用性の検討 小林佳奈、小田彰史、高橋央宜 (東北薬大、阪大蛋白研)
1P09	化学反応系の離散的記述と連続的記述を繋ぐ 春名太一 (神戸大・理)
1P10	密度汎関数法を用いた三核ルテニウム錯体によるエチレンの炭素-水素活性化反応の解析 大嶋正人、鈴木郁美、島 亘 (東京工芸大工)
1P11	GUHF 波動関数を参照する EOM-CC 法の開発 松岡登行、清野淳司、染野秀介、波田雅彦 (首都大学東京)
1P12	物質中の原子・分子の動きをイメージ把握するための教材の改良・整備 分子動力学シミュレーションを利用して 赤松 直、川上紳一、澤口直哉、河村雄行 (高知大教育、岐阜大教育、室工大工、東工大院理工)
1P13	タンパク質中におけるスクシンイミド生成における水分子の関与 松谷佳大、小林佳奈、小田彰史、高橋央宜 (東北薬大、阪大蛋白研)
1P14	イオン結晶中での BH_4^- イオンの回転トンネル運動 尾崎芳昭 (名工大)
1P15	クラスターイオン誘起による大気エアロゾル生成メカニズムの計算化学的研究 河野明男、河村洋史、草野完也 (海洋研究開発機構)
1P16	メチルピリジンイミン類の幾何異性化反応における置換基効果および溶媒効果に関する理論的考察 岩崎直也、丹羽雅昭 (東京電機大工)
1P17	Winmostar 上での触媒反応の “ 相互作用軌道対 (PIO) 解析 ” 志賀昭信 (ルモックス技研)
1P18	テルピリジンのヒートモード蛍光スイッチングの理論的考察 重光保博、務台俊樹、北条博彦、荒木孝二 (長崎工技セ、東大生研)
1P19	量子化学計算に基づく自動ポテンシャルフィッティング機能を実装した分子動力学計算プログラムの開発と応用 三浦隆治、鈴木 愛、坪井秀行、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、久保百司、宮本 明(東北大)

1P20	<p>QCMD study to investigate the Influence of the surface hydrogen vacancy for the dissociative adsorption of hydrogen on Pd (111) surface</p> <p>Farouq Ahmed、Md. Khorshed Alam、鈴木 愛、坪井秀行、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、久保百司、宮本 明 (東北大)</p>
1P21	<p>蛍光体のための発光効率算出シミュレータの開発と Eu²⁺付活蛍光体への応用</p> <p>大沼宏彰、山下 格、芹澤和実、鈴木 愛、坪井秀行、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、久保百司、宮本 明 (東北大)</p>
1P22	<p>Using ultra accelerated QCMD method to study drug-protein interaction</p> <p>Kamlesh Kumar Sahu、鈴木 愛、坪井秀行、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、久保百司、宮本 明 (東北大)</p>
1P23	<p>計算化学による C₆₀ フラーレンの境界潤滑メカニズムの解析</p> <p>小野寺拓、鈴木 愛、坪井秀行、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、久保百司、宮本 明 (東北大)</p>
1P24	<p>Theoretical Investigations on the Oxidation Mechanism of the 4H-SiC(0001) Surface and its Interface with SiO₂</p> <p>Yacapin John Paul、鈴木 愛、古山通久、坪井秀行、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、久保百司、宮本 明 (東北大、九大)</p>
1P25	<p>大規模量子化学計算を用いた高分子青色発光材料の劣化要因に関する研究</p> <p>山下 格、芹澤和実、大沼宏彰、鈴木 愛、坪井秀行、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、久保百司、宮本 明 (東北大)</p>
1P26	<p>計算化学手法による PEFC のカソード触媒層劣化現象の解析</p> <p>金 桐賢、金 寶英、鈴木 愛、坪井秀行、遠藤 明、畠山 望、高羽洋充、久保百司、宮本 明 (東北大)</p>

研究展示 (2日間)

RX01	<p>原子軌道のガラス内彫刻 - 軌道の組み合わせ表示その 2 -</p> <p>時田澄男、時田那珂子 (埼玉大名誉)</p>
RX02	<p>運動計測装置と接続可能な神経活動解析システムの開発</p> <p>井上洋太、浅間 一、大武美保子 (東京大学)</p>

企業展示 (2日間)

CX01	株式会社菱化システム
CX02	テンキューブ研究所
CX03	東京工業大学
CX04	コンフレックス株式会社
CX05	株式会社ルネッサンス・エネルギー・リサーチ
CX06	富士通株式会社

企業広告

PR01	アクセルリス株式会社 / ダイキン工業株式会社
PR02	ペガサスソフトウェア株式会社

18:00-20:00	懇親会 (青葉記念会館 3階 四季彩)
-------------	---------------------

研究発表2日目 : 11月13日(金)

8:30	受付開始
9:00-11:40	口頭発表 A

口頭発表 A

9:00-10:20	座長・石元孝佳(九大)
2001	ab-initio 分子動力学法のためのガウス基底・フーリエ変換(GFT)法の開発 島崎智実、久保百司(東北大院工)
2002	計算化学による PCB の Pd 金属触媒を用いた無害化処理の反応機構解析 大竹邦信、伊藤鉦一(東電技開研)
2003	分子軌道解析支援 3D 描画システム - 希ガスのマトリックスへの適用事例 - 中 貴俊、秦野やす世、宮崎慎也、山本茂義、野呂武司、館脇 洋(中京大情報理工、中京大国際教養、北大院理、名市大院システム自然科学)
2004	配位化合物の d 電子スピン配置記述への UHF 近似分子軌道理論からのアプローチ 常磁性鉄錯体 鈴木 哲、崎山博史、大嶋正人(計算化学工房、山形大理、東京工芸大工)
10:20-11:40	座長・島崎智実(東北大)
2005	実験融合マルチスケール計算化学に基づく Li イオン電池の理論評価手法の開発 高羽洋充、鈴木 愛、坪井秀行、畠山 望、遠藤 明、久保百司、宮本 明(東北大)
2006	粉末安息香酸二量体の温度依存テラヘルツ帯振動スペクトルの解釈 高橋まさえ、川添良幸、石川陽一、伊藤弘昌(東北大金研、理研仙台)
2007	ZORA-TDDFT 法による燐光物性の予測: 零磁場分裂と輻射速度定数 森 健人、池田博隆、千葉貢治(菱化システム)
2008	統計化学による任意の有機溶媒・溶質についての溶解度予測 右田啓哉、倉田浩二郎、花村 遼、荒川正幹、船津公人(東大院工)

11:40-12:30	特別講演 座長・長嶋雲兵(産総研) 森田明弘(東北大学大学院理学研究科) 「分子シミュレーションで解明する液体界面と非線形分光」
12:30-13:30	昼休み
13:30-14:20	特別講演 座長・久保百司(東北大) 大武美保子(東京大学人工物工学研究センター) 「ヒト神経系シミュレーションと認知活動支援サービスへの展開」

14:20-15:00	口頭発表 B
-------------	--------

口頭発表 B

14:20-15:00	口頭発表 B 座長・寺前裕之(城西大)
2009	トポロジカルインデックスと整数論. II 細矢治夫 (お茶大名誉)
2010	XyMTeX4.04 公開とオンライン投稿 藤田眞作 (湘南情数化研)

15:00-16:20	ポスター 概要説明 座長・古山通久(九大) *ポスター概要説明 2分(交代時間込み)
16:20-18:00	ポスター発表・研究展示

ポスター発表

2P01	自動車排ガスの触媒に関するマルチスケールシミュレーション計算化学手法の開発 鄭 善鎬、鈴木 愛、坪井秀行、遠藤 明、畠山 望、高羽洋充、久保百司、宮本 明 (東北大)
2P02	量子分子動力学プログラムの新規解析モジュールの開発 遠藤 明、小野寺拓、鈴木 愛、坪井秀行、畠山 望、高羽洋充、久保百司、宮本 明 (東北大)
2P03	Ultra accelerated quantum chemical molecular dynamics study of surface reduction process of CeO ₂ (111) and CeO ₂ (110) by H ₂ Md. Khorshed Alam、Farouq Ahmed、鈴木 愛、坪井秀行、遠藤 明、畠山 望、高羽洋充、久保百司、宮本 明 (東北大)
2P04	表面トラップ効果を考慮した PDP 用電極保護膜の二次電子放出係数評価方法開発 芹澤和実、大沼宏彰、菊地宏美、末貞和真、北垣昌規、山下 格、鈴木 愛、坪井秀行、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、久保百司、梶山博司、宮本 明 (東北大、広大)
2P05	Study the interaction of p53 with viral oncoprotein LTag, a UA-QCMD approach Shah Rauf、鈴木 愛、坪井秀行、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、久保百司、宮本 明 (東北大)
2P06	自動化超高速化量子 MD 法による Si 表面酸化反応シミュレーション 坪井秀行、稲葉賢二、鈴木 愛、遠藤 明、畠山 望、高羽洋充、久保百司、宮本 明 (東北大)

2P07	Accelerated tight-binding calculation study on the deprotonation of the monofucosyllacto-N-hexaose I (MFLNH I) Xiaolei Wang, Kazumi Serizawa, Ai Suzuki, Hideyuki Tsuboi, Nozomu Hatakeyama, Akira Endou, Hiromitsu Takaba, Momoji Kubo, Akira Miyamoto (Tohoku University)
2P08	色素増感型太陽電池の電極構造最適化を指向したマルチスケールシミュレーション 小野寺真里、扇谷 恵、鈴木 愛、坪井秀行、畠山 望、遠藤 明、高羽洋充、久保百司、宮本 明 (東北大)
2P09	有機概念図の計算シート改変と簡便利用法 本間善夫、相馬 稔 (新潟県立大、県立新潟女子短大)
2P10	「Excel で化学工学の解法がわかる本」を執筆して 吉村忠与志 (福井高専)
2P11	ニューラルネットワーク解析を用いた製鉄用耐火物の寿命解析 小林 淳、内田 希、齋藤吉俊、松井泰次郎 (長岡技大、新日鐵)
2P12	スパイラルアルゴリズムからフラレン 3 次元座標を得る方法 成田 進、辻井秀和、野村泰志 (信州大学)
2P13	ホルモース反応の反応速度モデルの構築 鹿又喬平、井上博愛、伊藤真人 (創価大工)
2P14	分子動力学計算を用いたアルミナセラミックスの焼結挙動の研究 菅野理雲、岡田智宏、内田 希 (長岡技科大)
2P15	共鳴理論を用いた不対電子密度の計算(2) 辻井秀和、成田 進、野村泰志 (信州大学繊維学部)
2P16	分子化学計算のための簡便な連成計算プラットフォームの開発 渡邊啓正、森 義裕、英 憲悦、直島好伸 (岡山理大総合情報、HPC システムズ)
2P17	晴天のデジタル画像解析 神部順子、長嶋雲兵、高妻孝光、中山栄子、青山智夫 (江戸川大学情報文化学科、産業技術総合研究所計算科学部門、茨城大学大学院理工学研究科、昭和女子大学生活科学部生活環境学科、宮崎大学工学部電子工学科)
2P18	コンピュータシミュレーションを用いた固体酸化物形燃料電池(SOFC)における機械特性 松山健男、中村美穂、島崎智実、久保百司 (東北大院工)
2P19	微小な摂動を受けた対称行列の固有対の求解法について 村上 弘 (首都大学)
2P20	Web カメラを用いた色測定ツールの開発 (2)

	及川義道、高野二郎 (東海大理)
2P21	Flash を用いた分子グラフィックス表示システムの開発 (2) 宇野 健、佐々和洋、林 治尚 (県立広島大、福井高専、兵庫県立大)
2P22	Basis Quantum Monte Carlo 法を用いた調和振動子内 Fermion の計算 八木 徹、長嶋雲兵 (江戸川大、産総研)
2P23	ペリレンビスイミド誘導体の構造最適化と電子構造 田中申明、錦織広昌、藤井恒男 (信州大工)
2P24	セリン残基のエノール化における側鎖 C - O 結合超共役の重要性 高橋央宜、小林佳奈、小田彰史 (東北薬大、阪大蛋白研)
2P25	電子スペクトルの精密解析による錯体構造の予測 正八面体型ニッケル(II)錯体の幾何異性体 崎山博史、Md. Kudrat-E-Zahan (山形大学)
2P26	量子化学計算による主鎖共役性ペプチドの理論的設計 岡 勝仁 (大阪府大総合教育)
2P27	第一原理バンド計算による強誘電性ポリフッ化ビニリデン I 型結晶の構造と電子状態 伊藤 哲、古川猛夫、矢島博文 (東京理科大)
2P28	局所的基準振動解析に基づくノイラミニダーゼーリガンド複合体の自由エネルギー解析 後藤仁志 (豊橋技科大院工)

