

日本コンピュータ化学会

2021 年秋季年会 プログラム

第 1 日目 11 月 2 日 (火) 8:50 開場

9:00 – 10:00 口頭発表 1 (各 15 分: 発表 12 分, 討論 3 分)

座長: 原嶋庸介 (筑波大)

[講演番号: 1O01]

固体高分子型燃料電池における炭素担体の細孔構造が触媒層の電極反応活性に与える影響の分子動力学法による解析

○中村哲也¹, 大槻陸¹, 上原周一¹, 大谷優介¹, 尾澤伸樹^{1,2}, 久保百司^{1,2}

(¹ 東北大金属研, ² 東北大未来科学技術研)

[講演番号: 1O02]

固体高分子形燃料電池アノードにおける酸化物担体が Pt ナノ粒子触媒上での H₂O₂ 生成抑制に与える影響の第一原理計算による解析

○吉田賢統¹, 大谷優介¹, 尾澤伸樹^{1,2}, 久保百司^{1,2}

(¹ 東北大金属研, ² 東北大未来科学技術研)

[講演番号: 1O03]

固体高分子形燃料電池における炭素担体の分散状態がアイオノマー被覆挙動に及ぼす影響の分子動力学シミュレーション

○大槻陸¹, 中村哲也¹, 上原周一¹, 大谷優介¹, 尾澤伸樹^{1,2}, 久保百司^{1,2}

(¹ 東北大金属研, ² 東北大未来科学技術研)

[講演番号: 1O04]

反応力場分子動力学法を用いた固体高分子形燃料電池カソードにおける Pt ナノ粒子の電極反応機構の評価

○小野寺建人¹, 大谷優介¹, 尾澤伸樹^{1,2}, 久保百司^{1,2}
(¹ 東北大学金属研, ² 東北大学未来科学技術研)

10:00 – 10:10 休憩 (10分)

10:10 – 11:10 口頭発表2 (各15分: 発表12分, 討論3分)

座長: 堀優太 (筑波大)

[講演番号: 1005]

水との化学反応がSiC/CNT複合材料の力学特性に与える影響の分子動力学シミュレーション解析

○蘇怡心¹, 大谷優介¹, 尾澤伸樹^{1,2}, 久保百司^{1,2}
(¹ 東北大学金属研, ² 東北大学未来科学技術研)

[講演番号: 1006]

大規模反応分子動力学シミュレーションによる固体酸化物形燃料電池のNi/YSZ多孔質材料において水蒸気環境が誘起する破壊プロセスの検討

○清水界斗¹, 王楊², 大谷優介¹, 尾澤伸樹^{1,3}, 久保百司^{1,3}
(¹ 東北大学金属研, ² 東北大院工, ³ 東北大学未来科学技術研)

[講演番号: 1007]

Pt-Ru合金触媒における二酸化炭素還元分子軌道法を用いた研究

○澤村健介, 内田希
(長岡技科大)

[講演番号: 1008]

天然ゴムの生合成過程初期における親水性・親油性の検討

○池原瑞生, 内田希
(長岡技科大)

11:10 – 11:20 休憩 (10分)

11:20-12:10 **特別講演 1** (発表 45 分, 討論 5 分)

座長: 重田育照 (筑波大)

[講演番号: 1S01]

様々な分子シミュレーションを駆使した創薬支援研究

○広川貴次 (筑波大・医学医療系)

12:10 – 13:15 **昼食休憩**

13:15 – 14:00 **ポスターフラッシュトーク**

[講演番号: 1P01 ~ 1P18、2P03、2P04] (計 20 件、各 2 分)

14:00 – 14:10 **休憩** (10 分)

14:10 – 15:10 **ポスター発表** (60 分)

15:10 – 15:20 **休憩** (10 分)

15:20 – 16:20 **口頭発表 3** (各 15 分: 発表 12 分, 討論 3 分)

座長: 兼松佑典 (広島大)

[講演番号 : 1O09]

経路積分分子動力学法を用いた Fujikurin A-D 中の分子内水素結合構造に関する理論的解析

○田中輝¹, 桑畑和明², 立川仁典², 宇田川太郎³

(¹ 岐阜大院自然科技, ² 横浜市立大院生命ナノ, ³ 岐阜大工)

[講演番号 : 1O10]

シュウ酸イオンの構造および溶媒性に対する量子効果

○桑畑和明, 立川仁典

(横浜市立大)

[講演番号 : 1011]

第一原理計算によるカテキン類の酸化還元電位の理論予測

○段練¹, 鷹野優¹, 重田育照²

(¹広島市立大, ²筑波大計セ)

[講演番号 : 1012]

分子軌道法を用いた水酸基付き多層グラフェン間への水素吸蔵特性の解析

○佐々木天伸, 内田希

(長岡技科大)

16:20 – 16:30 休憩 (10分)

16:30 – 17:30 口頭発表 4 (各 15分: 発表 12分, 討論 3分)

座長: 松井亨 (筑波大)

[講演番号 : 1013]

動的分極率による励起状態計算へ向けた量子アルゴリズム qUCC-LR 開発

○高梨倫哉¹, 吉川武司^{2,3}, 中井浩巳^{1,3,4}

(¹早大先進理工, ²東邦大薬, ³早大理工総研, ⁴京大 ESICB)

[講演番号 : 1014]

単量子ビット回転軸自由選択法による量子回路最適化

○渡邊宙志^{1,2}, Raymond Rudy^{1,3}, 大西裕也^{1,4}, 上西慧理子^{1,2}, 菅原道彦¹

(¹慶應義塾大学, ²JST さきがけ, ³日本 IBM, ⁴JSR 株式会社)

[講演番号 : 1015]

電子励起による鏡像異性体間エネルギー差の増大-相対論的 EOM-CC 法
による評価-

○黒田直也, 於保匠, 砂賀彩光, 瀬波大土
(京都大学)

[講演番号 : 1016]

Dilatant Properties of Low Molecular-Weight Polyelectrolytes

○P. A. Bonnaud^{1,2}, H. Ushiyama¹, S. Tejima¹, and J.-H. Fujita²
(¹RIST, ²筑波大学)

懇親会 (オンライン開催) 18:00

第2日目 11月3日(水) 9:20 開場

9:30 – 11:00 口頭発表5 (各 15分: 発表 12分, 討論 3分)

座長: 安藤耕司 (東京女子大)

[講演番号: 2001]

定圧分子動力学法によるレナード・ジョーンズポテンシャル系の3重点

○片岡洋右

(法政大)

[講演番号: 2002]

回転異性体: フェニルイソシアネイト誘導体のTDDFT/augccp-VTZ計算

長沼優人¹, 石橋太祐¹, ○奥山克彦²

(¹日本大学大学院工学研究科, ²日本大学工学部)

[講演番号: 2003]

NTz系非フラレン型アクセプター分子の電荷分離過程

○池山すみれ¹, 太田希¹, 立花れい菜², 山下晃一³, 村岡梓¹

(¹日本女子大院, ²日本女子大, ³京都大・ESICB)

[講演番号: 2004]

ケギン型ポリオキソタングステート ($[XW_{12}O_{40}]^{n-8}$) の形成反応の研究

○阿久根昌彦¹, 枝和男¹, 大塚利行¹, 中嶋隆人²

(¹神戸大学, ²理研 R-CCS)

[講演番号: 2005]

粗視化座標系における分子間力の表現行列を利用した分子結晶のフォノンバンド計算の定式化

○北條博彦^{1,2}, 王越¹

(¹東大生研, ²東大環安セ)

[講演番号: 2006]

イオン液体のシェアニングと流動活性化エネルギーの関係

○山田達矢^{1,2}, 手島正吾¹, 藤田淳一²
(¹RIST, ²筑波大学)

11:00 – 11:10 **休憩** (10分)

11:10-12:00 **招待講演 2** (発表 45分, 討論 5分)

座長: 重田育照 (筑波大)

[講演番号:2S01]

マテリアルズ・インフォマティクスによる新材料設計

○藤井幹也 (奈良先端大)

12:00 – 13:15 **昼食休憩**

13:15 – 14:00 **ポスターフラッシュトーク**

[講演番号: 2P01、2P05 ~ 2P18] (計 16件、各 2分)

14:00 – 14:10 **休憩** (10分)

14:10 – 15:10 **ポスター発表** (60分)

15:10 – 15:20 **休憩** (10分)

15:20 – 16:20 **口頭発表 6** (各 15分: 発表 12分, 討論 3分)

座長: 鷹野優 (広島市立大)

[講演番号 : 2007]

金属表面への分子吸着に対する H/D 同位体効果の理論解析に向けた
CPLB 法の開発と応用

○坂上弘輝¹, 石元孝佳², 立川仁典¹

(¹横浜市立大学大学院データサイエンス研究科, ²広島大学大学院先進
理工系科学研究科)

[講演番号 : 2008]

van der Waals クラスタにおける陽電子束縛の理論的研究

○古島弥来, 吉田大輔, 北幸海, 島崎智実, 立川仁典

(横浜市立大学大学院)

[講演番号 : 2009]

気相 2 成分水素結合クラスタの陽電子親和性の理論予見

○吉田大輔, 北幸海, 島崎智実, 立川仁典

(横浜市立大)

[講演番号 : 2010]

LiH 分子の高次高調波発生スペクトル : 原子価結合局在電子波束による
電子ダイナミクスのポテンシャルエネルギー一面

○安藤耕司

(東京女子大学)

16:20 – 16:30 休憩 (10 分)

16:30 – 18:00 口頭発表 7 (各 15 分: 発表 12 分, 討論 3 分)

座長: 近藤寛子 (北見工大)

[講演番号 : 2011]

FMO プログラム ABINIT-MP の整備状況 2021

○望月祐志^{1,2}, 中野達也³, 佐藤伸哉⁴, 坂倉耕太⁵, 渡邊啓正⁶, 奥脇弘
次¹, 大島聡史⁷, 片桐孝洋⁷

(¹立教大・理, ²東大・生産研, ³国立衛生研, ⁴NEC ソリューションイノベータ (株), ⁵計算科学振興財団, ⁶HPC システムズ (株), ⁷名大・情報基盤センター)

[講演番号 : 2012]

ドッキング、分子動力学計算を用いた Protein Arginin Deiminase 4 選択的阻害剤の結合の様式

○吉岡耕作¹, 吉野龍之介², 重田育照¹

(¹筑波大・計セ, ²筑波大・医学医療系)

[講演番号 : 2013]

分子動力学計算を用いた膜透過過程における計算条件の検討

○高岡健太, 重田育照

(筑波大・計セ)

[講演番号 : 2014]

ポトロマイシンの膜透過性に関する計算科学研究

○高橋輝行, K. Hengphasatporn, 原田隆平, 重田育照

(筑波大・計セ)

[講演番号 : 2015]

アミノ酸間相互作用ポテンシャルの類似度と分子構造の類似度の相関の解析

○寺島千絵子, 谷田義明, 佐藤博之

(富士通)

[講演番号 : 2016]

機械学習による分子の側鎖構造変化に伴う活性変化予測とその解釈

○田村峻佑¹, Swarit Jasial^{1,2}, 宮尾知幸^{1,2}

(¹奈良先端大先端科学技術研究科, ²奈良先端大 DSC)

18:00 閉場

ポスター発表 (1日目)

[講演番号：1P01]

導電性高分子を構成するモノマーとフラーレン C₆₀ 分子間における電子物性の解明

○原岡壮馬¹, 中村潤之介¹, 成島和男²

(¹ 宇部工業高等専門学校専攻科生産システム工学専攻, ² 宇部工業高等専門学校電気工学科)

[講演番号：1P02]

2 光子励起によるジェット冷却分子の蛍光励起スペクトルと分散蛍光スペクトル

○長沼優人¹, 関雄大¹, 奥山克彦²

(¹ 日本大学大学院工学研究科, ² 日本大学工学部)

[講演番号：1P03]

データ解析に基づいたクロマトグラフィー分析の予測 —TLC 分析に関する検討—

○中村祐士, 渡部瑞綺, 藤原優太, 太田哲男, 大江洋平

(同志社大学)

[講演番号：1P04]

対角に二つのメトキシ基が置換したナフタレン誘導体の cis-trans 回転異性体の分光学的研究

○関雄大¹, 長沼優人¹, 奥山克彦²

(¹ 日本大学大学院工学研究科, ² 日本大学工学部)

[講演番号：1P05]

Theoretical Investigations of Palladium-Catalyzed Cross-Coupling of Alkenyl Carboxylates

○岡本優悟, 森聖治

(茨城大学大学院理工学研究科)

[講演番号：1P06]

全原子分子動力学シミュレーションによるマクロサイクル触媒のシャトリングの検討

○酒井達矢¹, 河田悠太¹, 古屋秀峰¹, 川内進², 高田十志和³
(¹東京工業大学物質理工学院, ²東京工業大学物質・情報卓越教育院, ³広島大学大学院先進理工)

[講演番号 : 1P07]

光学異性体間の識別を目指した機械学習による分子構造からの匂いの予測

○萩原大智, 近藤寛子, 新井博文
(北見工業大学)

[講演番号 : 1P08]

ヘム蛋白質における構造機能相関の解明に向けたヘム結合部位のタンパク質環境とヘムの歪みの相関解析

○近藤寛子¹, 飯塚博幸², 舛本現³, 兼松佑典⁴, 鷹野優⁵
(¹北見工大・工, ²北大院・情報, ³理研・情シス, ⁴広大院・先進理工, ⁵広市大院・情報)

[講演番号 : 1P09]

ABCI 法: アニーリング計算と機械学習を併用した電子相関計算

○能條小夜子¹, 小林正人^{2,3}, 武次徹也^{2,3}
(¹北海道大学大学院総合化学院, ²北海道大学大学院理学研究院, ³北海道大学 WPI-ICReDD)

[講演番号 : 1P10]

Analysis of molecular environment in photochromic crystals using ONIOM method

○XU, Mingge¹, HOUJOU, Hirohiko^{1,2}
(¹Inst. Ind. Sci., Univ. of Tokyo, ²Env. Sci. Ctr. Univ. of Tokyo)

[講演番号 : 1P11]

ポランオリゴマーとポリマーの第一原理電子論

○李未帆, 松澤隼, 吉家風悟, 武田京三郎
(早稲田大学理工学術院)

[講演番号 : 1P12]

三脚巴状分子の凝集誘起発光メカニズムについての理論的研究

○柳南帆, 山本典史
(千葉工大)

[講演番号: 1P13]

MSDC—MD を用いたシグナル伝達タンパク質カルモジュリンの自由エネルギー解析

○下山紘充, 重田育照
(筑波大 CCS)

[講演番号: 1P14]

三態の水に現れる水素原子核の量子効果

○兼松佑典, 下畑侑也, 石元孝佳
(広島大学)

[講演番号: 1P15]

Mn 三核錯体(YMn_3O_4)の競合する磁氣的相互作用経路に関する hybrid DFT 法および CASCI-DMRG 法による解析

○川上貴資^{1,2}, 土川真理恵¹, 鈴木雄太¹, 宮川晃一³, 山中秀介¹, 奥村光隆¹, 中嶋隆人², 山口兆^{2,3}
(¹ 阪大院理, ² 理研 R-CCS, ³ 阪大産研)

[講演番号: 1P16]

スクロース及び人工甘味料の甘味度とオクタノール/水分配係数の相関の理論的研究

○荒木貴絵, 安藤耕司
(東京女子大学)

[講演番号: 1P17]

機械学習による鉛フリーペロブスカイト型太陽電池の探索

○大森鈴音¹, 畑中ひなこ², 金子正徳³, 山下晃一³, 村岡梓¹
(¹ 日女大院・理, ² 日女大・理, ³ 京大・ESICB)

[講演番号: 1P18]

分割統治型密度汎関数強束縛メタダイナミクスによる SARS-CoV-2 メインプロテアーゼの切断反応機構の解明

○小清水 初花¹, 小野 純一^{2,3}, 福西 快文⁴, 中井 浩巳^{1,2,3}

(¹ 早大先進理工, ² 京大 ESICB, ³ 早大理工総研, ⁴ 産総研生命工学)

[講演番号 : 2P03]

カゴメ格子クラスタの電子構造

○甲斐壮真, 小岩勇貴, 武田京三郎

(早稲田大学理工学術院)

[講演番号 : 2P04]

準結晶ペンローズタイルクラスタにおける周辺構造修飾と中心局在

○金崎翼, 石井楽志, 武田京三郎

(早稲田大学 理工学術院)

ポスター発表 (2日目)

[講演番号 : 2P01]

インドールアミン-2,3-ジオキシゲナーゼによる一重項酸素生成機構の解明

○齋藤徹, 鷹野優
(広島市立大)

[講演番号 : 2P02]

結晶成長によるアミノ酸キラル増幅に関する理論的研究

○渡辺七都稀¹, 庄司光男², 堀優太², 重田育照²
(¹筑波大院, ²筑波大計セ)

[講演番号 : 2P05]

A theoretical study on electron transfer pathway in Cytochrome c - Cytochrome c Oxidase Electron Transfer Complex

○Kowit Hengphasatporn¹, 佐藤航², 石森浩一郎^{2,3}, 重田育照¹
(¹筑波大学・計算科学研究センター, ²北海道大学・大学院総合化学院, ³北海道大学・大学院理学研究院)

[講演番号 : 2P06]

光学系 II における酸素発生中心の S1 状態での中間体構造の電子状態の DFT と CC 法による解析

○宮川晃一¹, 川上貴資^{2,3}, 庄司光男¹, 磯部寛⁴, 山口兆^{2,5}, 重田育照¹
(¹筑波大, ²理研 R-CCS, ³阪大, ⁴岡山大, ⁵阪大産研)

[講演番号 : 2P07]

線形型フェルスター理論を用いた、フィコシアノピリンの電子励起エネルギー移動に関する理論的研究

○三嶋謙二¹, 梅名泰史², Mauro Boero³, 重田育照¹, 庄司光男¹
(¹筑波大学, ²名古屋大学, ³University of Strasbourg)

[講演番号 : 2P08]

分子動力学法を用いた蛍光タンパク質の発光機構の計算化学的研究

○坂井俊夫, 鷹野優
(広島大院・情報)

[講演番号：2P09]

画像解析とパターン認識に基づく紙基板型蛍光センサアレイの開発

○遠 尤 思¹, Pratiksha Gawas², Xiaojun Lyu¹, 佐々木 由比¹,
Venkatramaiah Nutalapati², 南豪¹

(¹ 東京大学, ²SRM 大学)

[講演番号：2P10]

PySCF 等を用いた電子ダイナミクス計算の実装

○中島航太, 岡崎功

(弘前大学院理工)

[講演番号：2P11]

GLAS 法による分子構造及び化学反応経路の探索

○庄司光男^{1,2}, 三嶋謙二¹, 宮川晃一¹, 堀優太¹, 重田育照¹

(¹ 筑波大計七, ²JST-PRESTO)

[講演番号：2P12]

DNA メチル基転移酵素阻害剤のアイソフォーム選択性の解明

○工藤玄己¹, 重田育照¹, 原田隆平¹, 広川貴次², 吉野龍之介²

(¹ 筑波大計七, ² 筑波大・医学医療系)

[講演番号：2P13]

Ⅲ族元素を主鎖骨格とする水素化高分子類の第一原理計算

○吉家風悟, 李未帆, 松澤隼, 武田京三郎

(早稲田大学理工学術院)

[講演番号：2P14]

経路積分分子動力学法を用いた水素化アルカリ金属- π 結合の理論的解析

○石田舜悟¹, 高木牧人², 桑畑和明², 立川仁典¹

(¹ 横浜市大院 DS, ² 横浜市大院生命ナノ)

[講演番号：2P15]

第一原理計算を用いた[PdCl₄]²⁻の Cl 光解離過程における溶媒効果

○安齋愛子¹, 黒崎譲², 佐伯盛久², 村岡梓¹

(¹ 日本女子大学大学院, ² 量子科学技術研究開発機構)

[講演番号：2P16]

分子動力学計算による植物型フェレドキシンの挙動の解明

○仲吉朝希¹, 大西裕介², 田中秀明³, 鷹野優¹

(¹広島市大院情報, ²和歌山県医大薬, ³阪大蛋白研)

[講演番号：2P17]

分子動力学計算による抗体に結合する RNA アプタマーの立体構造解析

○山崎凌司, 山岸賢司

(日本大学大学院)

[講演番号: 2P18]

革新的材料開発のための計算化学の高速化検討 ～Hybrid DFT の性能分析～

○大田 栄二¹, 本田 巧¹, 白幡 晃一¹, 石川 敦之²

(¹富士通株式会社, ²国立研究開発法人物質・材料研究機構)