

ポスターセッション 17:00-18:30

番号	ポスタータイトル／ポスター発表者
P01	実空間密度汎関数法 (東大院工)○岩田潤一
P02	実空間密度汎関数法プログラムHP-RSDFTの開発と固体系への適用 (東大院工)○古家真之介, 内田和之, 岩田潤一, 押山淳
P03	実空間密度汎関数法に基づいたCar-Parrinello分子動力学法の開発 (阪大基礎工)重田育照(東大院工)○小泉健一、古家真之介、岩田潤一、押山淳、(IPCSM) Mauro Boero
P04	第一原理材料シミュレータQMASの開発と応用 (産総研ナノシステム)○石橋章司、三宅隆 (産総研ユビキタス)田中真悟、香山正憲 (北陸先端大融合院)寺倉清之
P05	連続変位クラスター変分法(CDCVM)及び変位型相変態計算への応用 (東北大)○陳迎、(北大)清兼直哉、毛利哲夫、 Continuous Displacement Cluster Variation Method (CDCVM) and its application to displacive phase transition (Tohoku University) ○Ying Chen , (Hokkaido University) Naoya Kiyokane, Tetsuo Mohri
P06	量子伝導計算 (筑波大院数物)○小林伸彦、石井宏幸、(NEC)広瀬賢二
P07	ハバードモデルのグリーン関数に関する量子モンテカルロプログラムの開発と応用 (山形大理)○富田憲一、(物構研)那須奎一郎
P08	非弾性中性子散乱による電荷励起の可能性 (KEK物構研)○岩野薫、那須奎一郎
P09	ARTED (Ab-initio Real-Time Electron Dynamics simulator)の開発と応用 (筑波大計科セ)○矢花一浩、(筑波大数物科)篠原康
P10	時間依存密度汎関数理論による平面波基底電子・格子時間発展計算コードの開発と応用 (産業技術総合研究所)○宮本良之
P11	大規模密度汎関数法コード: OpenMX の開発と応用 北陸先端大融合院, 尾崎泰助, 豊田雅之
P12	全電子混合基底法プログラムTOMBOの開発と水素貯蔵材設計への応用 (東北大金研)○佐原亮二、志田和人、水関博志、川添良幸 (デルフト工科大)Marcel Sluiter (横浜国立大学)大野かおる
P13	付加機能ソフトM2TDの開発と応用 (鳥取大学)○吉本 芳英
P14	Dynamical DMRGの開発と応用 (京大基研)○曾田繁利、遠山貴巳、(仙台高専)松枝宏明
P15	電子格子系 時間発展計算 プログラム (分子研)○米満賢治
P16	実空間Keldyshグリーン関数数値計算ソフトウェアの開発と応用 (秋田大院工資)小野田勝、(東大院工)○永長直人
P17	変分モンテカルロ法の開発と応用 (東大院理)○小形正男、林 勇太
P18	Ferromagnetism in Diluted Magnetic Semiconductors: Quantum Monte Carlo method with Density Functional Theory (ASRC, JAEA) ○Bo Gu, (Toho Univ.) Jun' ichiro Ohe, (ASRC, JAEA) Sadamichi Maekawa
P19	不規則系量子コンダクタンスと磁気抵抗効果 (名大院工)○井上順一郎、(筑波物質)本多周太、(関大システム理工)伊藤博介
P20	スピン蓄積の解析プログラムの開発と応用 (日立中研)市村雅彦、菅野量子

ポスターセッション 17:00-18:30

番号	ポスタータイトル／ポスター発表者
P21	大規模並列量子モンテカルロ法 ALPS/looper (東大物性研)藤堂眞治
P22	散逸環境での量子ダイナミクスシミュレーションの開発と応用 (東大理物理)宮下精二°, (東大物性研)藤堂眞治
P23	格子変形を伴う双安定状態間相転移シミュレーションの開発と応用 (東大理物理)宮下精二°, 中田太郎,(東大物性研)藤堂眞治
P24	SCR-KKRの開発と応用 (阪大院理)○小倉昌子、赤井久純、永田徹哉、(奈良県立医大)平井國友
P25	クラスタ動的平均場理論を用いた計算プログラムMcDMFTの開発と応用 (阪大理)大橋 琢磨
P26	DSQSS(Discrete Space Quantum System Solver)の概要 (兵庫県立大)○鈴木 隆史、(NEC)坂倉 耕太、(東大物性研)川島 直輝
P27	1次元スピン模型によるリラクサーの数値的研究 (東大物性研)○富田裕介
P28	FMO-LCMO法:フラグメント分子軌道(FMO)法に基づいた全系電子状態計算手法 (理研)○小堀知輝、(東京大学)常行真司
P29	高並列汎用分子動力学シミュレーションソフトMODYLAS の開発 (名古屋大)安藤嘉倫, 吉井範行, 藤本和士, 山田篤志, 岡崎進 (金沢大)川口一朋, 長尾秀実 (分子研)岩橋建輔, 水谷文保(理研AICS)南一生(富士通)市川眞一
P30	Nano-Ignitionの紹介 (分子研)○岩橋建輔、水谷文保、(名大院工)山田篤志、岡崎進
P31	フラグメント分子起動(FMO)法の開発と高速量子化学計算ソフトへの組み込み (神戸大, 産総研)○北浦和夫 (産総研)ドミトリ フェロドフ (神戸大, 産総研)永田武史
P32	付加機能ソフト:REM(レプリカ交換法) (名大院理1, 名大構造生物研2, 名大計算科学研3)○榮慶丈1, 岡本祐幸1,2,3
P33	3次元HNC-OZ理論計算プログラムE-FORCEで計算された 剛体球系3体相関関数とMCによるその評価 (九大理)久保田陽二、○秋山良
P34	PIMDの開発と応用 (金沢大理工)○三浦伸一、石井史之
P35	Trajanの開発と応用 (理研・基幹研)小林千草、(分子研・理論・計算)○齊藤真司
P36	高精度自由エネルギー計算プログラム:CPOL 1齋藤大明, 2篠田涉, 2三上益弘 1.金沢大学理工研究域数物科学系, 2.産業技術総合研究所 ナノシステム研究部門
P37	RISM/3D-RISMの概要と分子認識解析への応用 (分子研)○吉田紀生、丸山豊、平田文男 (筑波大)多田野寛人、高橋大介、佐藤三久
P38	3D-RISMプログラムの超並列対応とMD/3D-RISMへの応用 (分子研)○丸山豊、(分子研、総研大)吉田紀生、平田文男
P39	ACCURATE PREDICTION OF EXPLICIT SOLVENT ATOM DISTRIBUTION IN HIV-1 PROTEASE AND F-ATP SYNTHASE BY STATISTICAL-MECHANICAL THEORY OF LIQUIDS Daniel J. Sindhikara ¹ , Norio Yoshida ¹ , Fumio Hirata ¹ ¹ Department of Theoretical and Computational Molecular Science, Institute for Molecular Science, Okazaki

ポスターセッション 17:00-18:30

番号	ポスタータイトル／ポスター発表者
P40	Ion binding sites and the selectivity of KcsA potassium channel
	Saree Phongphanphanee ¹ , Norio Yoshida ^{1,2} , Shigetoshi Oiki ³ , Fumio Hirata ^{1,2} ¹ Department of Theoretical and Computational Molecular Science, Institute for Molecular Science ² Department of Functional Molecular Science, The Graduate University for Advanced Studies ³ Faculty of Medical Sciences, University of Fukui
P41	3D-RISM-SCF
	(分子研)○吉田紀生、平田文男
P42	高速・高並列RI-MP2プログラムの開発とFMOプログラムへの組み込み
	(理研AICS)○河東田道夫(京大院薬)北浦和夫(分子研)永瀬茂
P43	Divide-and-Conquer (DC)プログラムによるリニアスケール量子化学計算
	(a早大先進理工、b分子研、c早大理工研、dJST-CREST) ○小林正人 ^{a,b} 、赤間知子 ^a 、當眞嗣貴 ^a 、吉川武司 ^a 、五十幡康弘 ^a 、中井浩巳 ^{a,c,d}
P44	Etrans プログラムの開発と応用
	(慶大院理工)○山本拓磨、森田将人、菅原道彦、藪下聡
P45	大規模並列計算に向けた実時間・実空間電子ダイナミクス法(PIQUANDY)の開発
	(分子研)○信定克幸、野田真史
P46	多参照電子状態計算法の開発と応用
	(分子研)○柳井毅、倉重佑輝
P47	第一原理量子化学プログラムqの開発
	武田亮 ¹ 、山中秀介 ¹ 、北河康隆 ¹ 、川上貴資 ¹ 、山口 兆 ² 、奥村光隆 ¹ ¹ . 大阪大学理学研究科化学専攻 ² . 豊田理研
P48	ermodを用いた凝縮系の自由エネルギー計算
	(京大化研)○松林 伸幸
P49	界面非線形分光の解析計算ソフトCalnosの開発
	(東北大院理)○森田明弘、石山達也
P50	半古典分子動力学プログラム(SCMD)の開発と応用
	(上智大学理工)○南部伸孝、村上龍大、小林 理、(京都大学)石田俊正、 (新潟大学自然)徳江郁雄、 (九州大学理学研究院)関谷 博、(九州大学薬学研究院)中園 学
P51	SO-SC-CIの開発とイオン化スペクトルへの応用
	(分子研、計算科学研究センター)○福田良一、江原正博
P52	マルチウェーブレットを用いたEhrenfest Dynamicsソフトウェアの開発と応用
	(豊橋技術大学)○濱田信次、関野秀男
P53	超並列FMOプログラムOpenFMO
	(1)九州大学、2)九州先端研)○1)稲富雄一、2)眞木淳、1)2)高見利也、1)小林泰三、1)2)青柳睦
P54	密結合環境の紹介
	(分子科学研究所)○水谷文保
P55	GAMESS による大規模FMO 計算に向けたOpenMP/MPI ハイブリッド並列化
	(筑波大)○梅田宏明、佐藤三久