

発表時間 口頭(発表 15 分, 討論 5 分)
ポスター(60 分)

第 1 日(6 月 5 日)

- 09 時 40 分から -

- 1O01 Ion water cluster の分子間相互作用エネルギーの収束に対する BSSE の影響
(岡山大歯)正村眞佐雄
- 1O02 / 相互作用の大きさと方向依存性
(産総研計算科学) 都築誠二・本田一匡・内丸忠文・三上益弘・田辺和俊
- 1O03 メチルラジカル誘導体の内部回転におけるハードネスの変化
(産総研) 内丸忠文・A.K.Chandra・川原俊一・都築誠二・三上益弘
- 1O04 F₂ によるアルカンの選択的フッ素化に関する理論的研究
(産総研・エモリー大) 深谷治彦・諸熊奎治
- 1O05 ギ酸(HCOOH)分子の分子内水素原子移動および HCOOH-HF と HCOOH-H₂O の分子間水素原子移動の反応障壁エネルギーの計算
(富山医薬大医)広上俊一
- 1O06 触媒反応シミュレーター "LUMMOXTM" について
(住友化学筑波研) 本木隆夫・志賀昭信
- 1O07 遷移状態検索システムの構築(2)
(山口大工)堀 憲次

-13 時 00 分から-

- 1P01 密度汎関数法によるファンデアワールス相互作用の解析
(豊橋技科大工) 栗田典之・関野秀男
- 1P02 芳香族分子の分子間相互作用を計算するためのモデルケミストリー
(産総研計算科学) 都築誠二・本田一匡・内丸忠文・三上益弘・田辺和俊
- 1P03 分子軌道法を用いる HF₂⁻の水素結合能評価:基底関数と電子相関の影響
(産総研) 川原俊一・多比良和誠・内丸忠文
- 1P04 Spherical Charge Analysis による SN₂ 反応の解析
(お茶大理) 松川祐子・能登香・鷹野景子
- 1P05 冷却高速炉の蒸気発生器内におけるナトリウム-水反応の理論的研究
(富士総研・日本電気・核燃料サイクル開発機構) 福澤 薫・松原 聖・高田俊和・高田 孝・岡野 靖・山口 彰
- 1P06 エーテル系フッ素化合物の大気寿命の推算
(産総研) 杉江正昭・内丸忠文・徳橋和明
- 1P07 OH ラジカルによる含ハロゲンアルデヒドの水素引き抜き反応:非経験的分子軌

道法による解析

(産総研) 内丸忠文・A.K.Chandra・杉江正昭・関屋 章

- 1P08 ビニルアレン類の付加環化
(防衛大) 内田久美子・才津和範・権藤恭彦
- 1P09 アレン類からの四員環形成を伴う付加環化
(防衛大) 才津和範・権藤恭彦
- 1P10 塩化ベンゼン生成反応の密度汎関数法による研究
(筑波大化) 王 遵堯・渡辺寿雄・菊池 修
- 1P11 半経験的分子軌道法によるエステル交換反応の解析
(法政大工)片岡洋右 近藤淳史
- 1P12 非経験的分子軌道計算による酢酸セルロースの(脱)アセチル化反応の位置依存性の検討:隣接モノマの影響
(ダイセル化学総研) 奥山直人・柴田 徹
- 1P13 フィリップス触媒活性点モデルによるエチレン重合の DFT 計算
(熊本大工) 物井尚志・榊 茂好
- 1P14 オキセテン中間体の開環反応で生成するオレフィンの立体選択性発現機構の解明
(茨城大理・徳島大医薬資源研セ) 森 聖治・新藤 充・佐藤祐介・穴戸宏造
- 1P15 Implementation of FMF Techniques for Improved Transition State Searches on Molecular Orbital Potential Energy Surfaces
(豊橋技科大) A.T.W.Saito・後藤仁志
- 1P16 酸化チタンのバンドギャップ変化に及ぼす各種金属イオンの同形置換の影響-DFT による検討
(信州大工) 西川智洋・中島 剛
- 1P17 大きなクラスターモデルによるゼオライト格子中 Ti 原子の電子状態計算
(宇部興産高分子研) 後口 隆・八尾 滋
- 1P18 シリコンクラスターの分極率
(日本原研・スウェーデン王立工学研) 望月祐志・H.Agren
- 1P19 CpCo(dmit)の構造と吸収スペクトルに関する密度汎関数法計算
(埼玉大工・上智大工)時田澄男 古後義也・梶谷正次・志村重輔
- 1P20 GIAO 法による C-13 化学シフト(テンソル)の有効性
(京大院理)今城文雄
- 1P21 Ab initio 法によるホウ素同位体換算分配係数の予測 2-環状ホウ酸エステル系
(産総研海洋資源環境) 苑田晃成・渡邊秀和・榎田洋二・大井健太・廣津孝弘
- 1P22 カルボニル基を有する N-ニトロソ化合物の分解反応に関する理論的研究
(ベストシステムズ・産総研・筑波大化) 中山尚史・長嶋雲兵・菊地 修
- 1P23 ニューラルネットワーク入力パラメータの感度解析と偏微分係数解析を用いた赤

外線吸収強度に敏感な分子結合パラメータの抽出-フロン類の赤外吸収強度
(日本女子大家政・ベストシステムズ・大東文化大学外国語・産総研計算科学・産
総研先端情報計算セ・宮崎大工)福田朋子・神部順子・松本高利・田辺和俊 長嶋
雲兵・青山智夫

- 1P24 計算化学によるリチウムイオン 2 次電池の炭素材料設計
(産総研) 松本高利・田辺和俊・長嶋雲兵
- 1P25 計算化学による振動スペクトルの予測-ハロゲン化炭化水素分子の赤外スペクトル
の計算(産総研)松本高利 田辺和俊
- 1P26 溶媒効果を取り入れた密度汎関数(DFT-GB)計算法の Diels-Alder 反応系への応用
(筑波大化) 徳良誠健・守橋健二・菊池修
- 1P27 イミダゾールカルベンのエチレン付加に関する量子化学計算(お茶大人文) 能登
香・角越美紀・鷹野景子

-14 時 00 分から-

2001 年度 JCPE 優秀プログラム賞発表及び受賞講演

-14 時 40 分から-

- 1O08 A Density Functional Theory Studies on Lanthanide Diatomic Compounds
(東北大院工・広島国際学院大工) 羅 一・万 小紅・高見誠一・久保百司・宮本 明・
今村 詮
- 1O09 Study on the electronic structure and spectroscopic property of the IB group diatomic
molecules by using DFT theory
(東北大院工) W. Xiaojing・Z. Hui・W. Xiaohong・高見誠一・久保百司・宮本 明
- 1O10 ニトロソペンタアンミンクロム錯体(Cr(IX)NO(NH₃)₅)²⁺の電子状態と電子スペクトル
についての DFT 計算
(岡山理大理)柴原隆志・浅野真裕・若松 寛 西本吉助
- 1O11 ジアミノシリレン 2 量子体の ab initio 分子軌道計算による UV 吸収波長の予測
(理研フォトダイナミクス研) 高橋まさえ・坂本健吉・吉良満夫・ T.Muller ・
Y.Apeloig
- 1O12 密度汎関数法による Wavenumber-linear Scaling(WLS)法を用いた振動スペクトルの
解析 生体系への応用の可能性
(広島大院理) 吉田 弘・岡村潤子・武田久美・松浦博厚
- 1O13 半経験的分子軌道法による銅フタロシアニンの構造最適化計算
(計算化学工房・セイコーエプソン) 鈴木 哲・上原正光・小松晴信・篠原祐治
- 1O14 MOZYME+DFT 法を用いたタンパク質のアミノ酸側鎖の新規 pKa 計算法

(東工大院生命理工) 大野一樹・井上義夫・櫻井 実

第2日(6月6日)

-09時40分から-

- 2O01 軌道相互作用の新理論
(個人)青野茂行
- 2O02 ヘリウム型2電子イオンにおける電子間相互作用の空間相関
(豊田中研)兵頭志明
- 2O03 Wiener index の物理化学的意味の解析
(お茶大理・Molecular Systems,USA) 細矢治夫・高 穎多
- 2O04 化学教育における多面体CAIの開発
(お茶大院人文) 丸山有紀子・細矢治夫
- 2O05 分子軌道法と分子動力学法による水溶液中トリプトファンの蛍光減衰関数の解析
(三重県立看護大・三重大医・レーザー技総研) 田中文夫・高田孝弘・又賀 昇
- 2O06 ソーダライトケージ内におけるエチレングリコールの選択的配座に関する分子動力学学的検討
(群馬大工)佐藤満雄
- 2O07 分子動力学法によるヘキサデカン/水界面, およびヘキサデカノール/水界面
(兵庫教育大)福田光完

-13時00分から-

- 2P01 球面座標での原子のシュウィンガー・ダイソン法
(政策研究大院大・産業医大) 松浦弘幸・中野正博
- 2P02 いくつかの密度行列繰り込み群アルゴリズムにおける最適解への収束性の検討
(電通大電通) 佐野達司・船田信介・鈴木 冲
- 2P03 高次元アルゴリズムによる分子構造の最適化
(ATR 環適通研) 寺前裕之・大田原一成・新上和正
- 2P04 アセン系分子における振電相互作用と超伝導性に関する理論的研究
(基礎化研) 加藤 貴・山邊時雄
- 2P05 有限要素法による水素原子の電子状態計算
(豊田中研) 山川俊輔・兵頭志明
- 2P06 Ab initio 法によるベンゼン-置換ベンゼンの分子間相互作用の計算
(青山学院大理工・創価大工・産総研) 遠藤 忠・西尾泰彦・佐藤大史・伊藤真人・都築誠二
- 2P07 ボランカチオンの構造に関する計算化学的検討

- (高知大理) 藤山亮治・川井貴友・清岡俊一
- 2P08 1,3-ジオキサンのそのケイ素アナログの構造特性に関する計算化学的検討
(産総研物質プロセス)古澤清孝
- 2P09 シラ・ゲルマフラーレンの理論計算
(筑波大化) 加部義夫・関口 章
- 2P10 イミダゾールカルベンの安定性に関する ab initio 分子軌道計算
(お茶大院人文) 角越美紀・能登 香・鷹野景子
- 2P11 マレイミド環を有する新規メロシアニン色素の合成とその UV/VIS スペクトルに関する分子軌道計算
(長崎工技セ・長崎大機器分析セ) 重光保博・富永義則
- 2P12 ポルフィリン集積系のスペクトル予測
(東理大理) 村瀬正典・萩原冬樹・山村剛士
- 2P13 Co および Cu イオンのグアニン分子への配位に関する理論的研究
(三重大工) 吉岡泰規・宇佐見 護・齋藤 烈・山口 兆
- 2P14 Cytochrome P-450 による一酸素原子添加機構-基質酸化過程における新しい最終活性種
(千葉大院薬) 畑 晶之・平野秀典・西田理恵・星野忠次・津田 穰
- 2P15 バクテリオロドプシンにおける活性中心の pKa 制御に関する量子化学的研究
(東工大生命理工) 中島佐和子・大野一樹・神谷成敏・井上義夫・櫻井 実
- 2P16 ONIOM 法を用いた ターン構造の再現
(新化協・三井化学・大阪ガス・旭硝子・花王) 蒲池宏典・角本輝充・入澤 潤・山下 修
- 2P17 モンテカルロシミュレーションによる均質核生成の自由エネルギー
(法政大工) 山田祐理・片岡洋右
- 2P18 アルゴンクラスターの相転移における分子シミュレーション
(法政大院工)片岡洋右 上田洋輔
- 2P19 両親媒性分子の自己組織形成シミュレーション
(豊田中研) 山本 智・兵頭志明
- 2P20 高速化量子分子動力学法によるリチウム二次電池用正極活物質の検討
(東北大院工・広島国際学院大工) 鈴木 研・鄭 昌鎬・高見誠一・久保百司・宮本 明・今村詮
- 2P21 マルチスケールシミュレーションソフト FEMDY の開発-分子動力学法と有限要素法を組み合わせた解析手法の検討
(セイコーエプソン・日本 SGI ・ FDK ・ 宇部興産・東レ・住友電工・住友金属・松下電子部品・富士ゼロックス・菱化システム・日本ゼオン・鉄道総研)上原正光・篠原祐治・田村祐介・美和俊之 叶木朝則・川上智数・古庄 勝・岡田信宏・前

- 嶋宏行・矢野敏行・千葉貢治・寺石和夫・岩淵研吾
- 2P22 分子動力学法によるイエロープロテイン基底状態及び M 中間体の動的構造の比較
(東工大院生命理工) 塩沢真理子・神谷成敏・肥後順一・井上義夫・櫻井 実
- 2P23 Photoactive Yellow Protein の BL 及び L 中間体に対する分子動力学計算
(東工大院生命理工) 新井昭平・塩沢真理子・大野一樹・今 元泰・神谷成敏・肥後順一・井上義夫・櫻井 実
- 2P24 Neural Network を用いた含フッ素エーテルを含む 2 成分系の気液平衡推算
(地球環境産業技術研究機構・旭硝子・日大生産工・産総研) 浦田新吾・高田 章・村田潤二・日秋俊彦・関屋 章
- 2P25 ニューラルネットワークによる高分子の密度の識別
(産総研・富山県工技セ・オプト技研) 田辺和俊・松本高利・佐伯和光・天野敏男
- 2P26 ニューラルネットワークによる化学物質の毒性の予測
(産総研) 松本高利・田辺和俊

-14 時 00 分から-

特別講演

高機能材料設計プラットフォームプロジェクト

(名大工)土井正男

-14 時 40 分から-

- 2O08 様々な系への応用を目指した高速化量子分子動力学プログラムの精密化
(東北大院工・広島国際学院大工) 高見誠一・鈴木 研・久保百司・宮本 明・今村 詮
- 2O09 膜透過シミュレーション用解析プログラムの開発
(東北大院工) 小林泰則・高見誠一・久保百司・宮本 明
- 2O10 Tight-binding 量子分子動力学法の高速化理論の開発とその応用
(東北大院工・広島国際学院大工) 久保百司・黒川 仁・鈴木 研・高見誠一・宮本 明・今村 詮
- 2O11 液晶相転移温度の分子動力学計算
(ナノシミュレーション)桑島 聖
- 2O12 タンパク質-阻害剤の分子会合シミュレーション
(大正製薬・東京薬科大・金沢大理) 宮川博夫・恒川直樹・山岸明彦・樋渡保秋・北村一泰
- 2O13 疎水性分子の会合自由エネルギー計算

- (大正製薬・金沢大理) 恒川直樹・宮川博夫・北村一泰・樋渡保秋
- 2014 内分泌攪乱化学物質-エストロゲンレセプター系とシクロデキストリン-ゲスト系
における分子認識の類似性
- (東工大資源研・Univ.Zurich,Switzerland) 鈴木孝弘・伊藤鉄平・石田 愈・S.Shapiro
- 2015 Hopfield ニューラルネットワークを用いた pharmacophore 及び active conformation
推定手法
- (豊橋技科大) 荒川正幹・船津公人