



日本コンピュータ化学会 2017 年春季年会プログラム

4 月 5 日 決定版

- 会期 2017 年 6 月 8 日(木)～9 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
- 主催 日本コンピュータ化学会(SCCJ)
- 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

1 日目 6 月 8 日(木)

■09:30 受付開始

■10:00 - 11:00 口頭発表 20 分 3 件



座長1:立川仁典(横市大)

1001	計算分子分光學:直線分子の変角振動 ○平野恒夫、長嶋雲兵(お茶大理、FOCUS)
1002	分子動力学シミュレーションによるイオン性結晶と金属における融解エントロピーの密度依存性 ○片岡洋右(法大生命)
1003	調和溶媒和モデル(HSM)を用いた凝縮系の自由エネルギー計算 ○中井浩巳(早大理工)

■11:10-11:40 展示会プレビュー 各社 5 分 6 社

座長2:田島澄恵(株式会社ヒューリンクス)

企業展示

CX01	コンフレックス株式会社	
CX02	株式会社クロスアビリティ	

CX03	九州大学情報基盤研究開発センター	
CX04	ビジュアルテクノロジー株式会社	
CX05	東京工業大学 学術国際情報センター	
CX06	株式会社モルシス	

■11:40-13:30 昼休み

■13:30 - 15:00 ポスター発表(17件)

1P01	軌道非依存密度汎関数理論のための運動エネルギー汎関数の開発: 機械学習によるアプローチ ○影山 椋 1、藤波美起登 1、清野 淳司 2,3、五十幡康弘 1、中井浩巳 1-4 (1:早大先進理工、2:早大理工研、3:JST-CREST、4:京大 ESICB)
1P02	Molecular mining by highly accurate molecular property estimation using a Supercomputer aided molecular design with a Deep Learning on a Big Data and an AI technique. 田島澄恵、○長嶋雲兵(ヒューリンクス、FOCUS)
1P03	ポドフィリックアルデヒドの全合成における中間体の反応性の計算化学的考察 ○三原陽子、森川大、野村泰志、西井良典(信州大学繊維学部)
1P04	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 ○桜田誠志朗、梅田実、内田希(長岡技科大)
1P05	ケギン型ポリタングステン酸イオンにおける多電子移動の量子化学的研究: 酸化還元電位と μ 4-O-W の結合原子価 ○高崎亜希、枝和男、大塚利行、中嶋隆人*(神戸大院理、理研 AIGCS*)
1P06	Xeon Phi KNL 環境での MO 計算プログラムの性能評価 ○齊藤天菜 1、望月祐志 12、石村和也 3、渡邊啓正 4、坂倉耕太 5、佐藤伸哉 6 (1 = 立教大, 2 = 東大生産研, 3 = 分子研, 4 = HPC システムズ, 5 = NEC, 6 = NEC ソリューションイノベータ)
1P07	分子動力学法による電気二重層キャパシタの界面特性の解析 ○矢野振一郎、古山通久(九州大学)
1P08	分子軌道法による 2 層グラフェン間への水素吸蔵特性の研究 ○菅谷大智、斎藤秀俊、内田希(長岡技科大)
1P09	ステロイド化合物—CD 包接複合体における分子間相互作用の量子化学的解析 ○小池友理、姚嵐、森幸恵、鷹野景子(お茶大院人間文化創成科学、お茶大理)
1P10	メタダイナミクス+リウエイティングを経由したアルケミカル自由エネルギー計算による複数

	複合体構造と結合活性の高精度予測 ○谷田義明、松浦東(富士通研)
1P11	計算機化学を用いたムライト結晶の構造異常の研究 ○鈴木泰地、長島啓、中嶋義晴、内田希(長岡技科大)
1P12	粗視化モデルから全原子モデルへのペプチド構造推定法の検討 ○鈴木天風、後藤仁志(豊橋技科大)
1P13	MX(AB) ₅ 錯体の異性体数え上げと配座解析 ○崎山博史、脇克志(山形大学理学部)
1P14	外部磁場によって誘起される閉殻重原子分子の電子スピン密度の解析 ○宮本優弥、波田雅彦(首都大院・理工、首都大院・理工)
1P15	ビッグヒストリーを題材にした化学教材 Web ページの作成 ○本間善夫(ecosci.jp)
1P16	複素数列描画の形状制御法 ○青山智夫、八木徹、神部順子(江戸川大学)、長嶋雲兵(FOCUS)
1P17	NMR の核スピン間結合定数の計算 ○中川克己(MO BASICS Research)

■15:10-16:10 口頭発表 20分 3件

座長3:澤口直哉(室工大)

1004	スペクトル解析法による固体有機結晶の新規振動スペクトル計算法の開発 ○末永太河、高橋修(広島大院・理、広島大 ISSD)
1005	エタノール結晶の長周期構造 ○則竹史哉(山梨大)、小松一生(東大)
1006	有機分子の結晶構造予測に関する技術考 ○後藤仁志、小畑繁昭、榎本大義(豊橋技科大)

■16:20-17:20 口頭発表 20分 3件

座長4:善甫 康成(法政大)

1007	異なる電荷を持つ粒子の夫々の3世代の質量和について成り立つ小出の式 ○鳴海英之(北大院)
1008	骨格異性および位置異性を、構造異性の一種とみなしてよいか? ○藤田眞作(湘南情数化研)
1009	Isospectral graph を生み出す dormant graph の発見 ○細矢治夫(お茶大)

■17:50 懇親会 大学生協にて

2日目 6月9日(金)

■09:30 受付開始

■10:00 - 11:00 口頭発表 20分3件

座長5: 清野淳司(早大)

2001	Ir 錯体の電子物性に関する理論的研究 ○辻雄太(九大)、Roald Hoffmann(コーネル大)、Joel Miller(ユタ大)
2002	ベンゼン誘導体への陽電子吸着と対消滅機構に関する理論的解析 ○小野邦彰、北幸海、立川仁典(横浜市大院)
2003	計算科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 燃料極における破壊メカニズムの検討 ○許競翔、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司(東北大金研)

■11:10 - 11:40 総会(30分)

司会: 後藤仁志

■11:40 - 12:10 表彰 10分および受賞講演 30分

座長6: 長嶋雲兵(FOCUS)

2A01	学会賞	振電相互作用の基礎と応用(学会賞受賞講演) ○佐藤徹(京大院工)
------	-----	-------------------------------------

■12:10-13:30 昼休み

■13:30-15:00 ポスター(18件)

2P01	配座変化を伴うリガンドのタンパク質結合過程の分子動力学シミュレーション ○三井崇志(富士通)、杉山肇(富士通)、藤谷秀章(東大)
2P02	分子動力学シミュレーションによる β -LiAlSiO ₄ の熱膨張の解析 ○志摩知輝、澤口直哉、佐々木真(室工大院)
2P03	フェルラ酸の抗酸化作用に関する理論的研究 ○寺前裕之、湯川満(城西大理)、加藤洋介、高山淳、坂本武史(城西大薬)
2P04	YSZ 中の酸化物イオン拡散に及ぼす粒界の影響 森安桃太、○澤口直哉、佐々木真(室工大)
2P05	分子動力学シミュレーションを用いた Na ₂ O-CaO-SiO ₂ 系ガラスの構造解析 ○奥田真之助、澤口直哉、佐々木真(室蘭工大院)
2P06	非交互多環系をユニットとするリング状共役分子の電子構造

	○森川大、野村泰志、溝口則幸(信州大、明薬大)
2P07	Theoretical Investigations on Room-Temperature Phosphorescence of Arylboronic Esters ○Qi Wang(1,3), Yasuhiro Ikabata(1), Junji Seino(1), Hiromi Nakai(1-4), Yoshiaki Shoji(5), and Takatori Fukushima(5) [1 早大理工研, 2 早大先進理工, 3 JST-CREST, 4 京大 ESICB, 5 東工大化生研]
2P08	シクロブタジビフェニレンの構造と置換効果の関係について ○藤山亮治、土居奈央(高知大理学部)
2P09	Na ₂ O-K ₂ O-SiO ₂ 系ガラスにおける混合アルカリ効果の考察 ○山本優也、澤口直哉、佐々木真(室蘭工大院)
2P10	インフォマティクスの交換相関汎関数開発への応用 ○棚嶋拓朗 1、五十幡康弘 1、清野淳司 2、影山椋 1、中井浩巳 1-4(1 早大先進理工、2 早大理工研、3 JST-CREST、4 京大 ESICB)
2P11	4 成分相対論における超微細結合定数の定式化に関する考察 ○砂賀彩光、阿部穰里、波田雅彦(首都大院理工)
2P12	天然ゴムの配座探索と構造解析 ○慶野達也、秋山和輝、河原成元、内田希(長岡技科大)
2P13	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調査 ○村上弘(首都大学)
2P14	密度汎関数強束縛法を用いたメタダイナミクスに基づくシクロファン異性化反応の自由エネルギー地形解析 黄毅聰(早大先進理工)、○西村好史(早大理工研)、小野純一(早大先進理工)、鹿又宣弘(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)
2P15	深層学習を用いた有機化合物の生成熱推算 ○井上雅都、後藤仁志(豊橋技科大工)
2P16	MEL 型ゼオライトの分子動力学シミュレーション ○大川政志、榎本耀太(沼津高専)
2P17	DMPO スピンアダクトの超微細結合定数の DFT 計算 ○山口真

■15:10-16:10 口頭発表 20分3件

座長7: 溝口則幸(明薬大)

2004	QSAR モデルによるアセチルコリンエステラーゼ阻害活性解析 ○海東和麻、田中健一、金子弘昌、船津公人(東大院工)
2005	プローブ分子によるタンパク質の結合サイト探索 ○佐藤博之、松浦東(富士通研)

2006	定量的構造活性相関に適用する深層学習法のパラメータ分析 ○加藤凱生、濱田信次、後藤仁志(豊橋技科大)
------	---

■16:20-17:20 口頭発表 20分3件

座長8: 渡邊寿雄(東工大)

2007	Accurate pKa Evaluation by Metadynamics Simulation at the Density-Functional Tight-Binding Level ○Aditya Wibawa Sakti, Yoshifumi Nishimura, Hiromi Nakai (Waseda Univ.)
2008	リチウム空気電池における陽極生成物分解過程のシミュレーション ○添野壮大(工学院大工)、高羽洋充(工学院大工)
2009	分子動力学法に基づく鉄の粒内破壊メカニズムの解明 ○陳茜、許競翔、大谷優介、樋口祐次、尾澤伸樹、久保百司(東北大金研)

■17:30 終了