

化学ソフトウェア学会 2000年会プログラム

主催 化学ソフトウェア学会
 共催 日本化学会, 日本化学会情報化学部会,
 日本分析化学会, 日本化学プログラム
 交換機構, CBI学会
 会期 11月3日(金)13時~4日(土)17時

会場 つくばカピオ(つくば市竹園1-10-1, 電話0298-51-2886)
 東京駅八重洲南口より高速バス65分, つくばセンター下車徒歩分



第1日 11月3日(金)

<実行委員長挨拶> 田辺和俊(物質研) (13:00 ~ 13:10)

<司会> 長嶋雲兵

記念講演 計算化学の将来像 - 化学反応のオンラインシミュレーションに向けて

(NEC)高田俊和 (13:10 ~ 14:00)

<座長> 伊藤真人

一般発表 5分間概要説明 (14:00 ~ 15:20)

デモンストレーション (15:30 ~ 16:30)

101 インターネットによる化学計算演習の教材開発

(福井高専) 馬上免高德・蘆田 昇・吉村忠与志

102 反応シミュレータ'LUMMOX™'について

(住友化学筑波研) 本木隆夫・志賀昭信

103 Chemisorption of aromatic nitrogen heterocyclics over clay surface-a density functional theory(DFT)

study(東北工研) A.Chatterjee・ T.Iwasaki・ T.Ebina

104 計算化学学習のためのWebページ作成

(県立新潟女短大・新潟大工) 本間善夫・橋 美和子

105 インターネット教育システムにおける学生の学習状況把握機能の構築

(一橋大) 鎌田祐生紀・田中宏明・矢野敬幸

106 化学物質の毒性予測

(物質研)田辺和俊・ 松本高利

107 鋼材の溶接部の3次元熱履歴予測システム

(金材研・富士通) 藤田充苗・宮本一代・衣川純一・春日井孝昌・岡田明

108 高速化量子分子動力学プログラムの開発とその材料設計への応用

(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

109 古典/第一原理ハイブリッド分子動力学プログラムの開発

(東北大院工) 高見誠一・宮原資哉・谷島健二・久保百司・宮本明

110 膜透過シミュレーションプログラムの開発と無機膜透過プロセスへの応用

(東北大院工) 小林泰則・高見誠一・久保百司・宮本明

111 しゅう動シミュレーションプログラムによる固体表面上での潤滑現象の解明

(東北大院工) 亀井大輔・安藤美奈子・周 慧・田村宏之・高見誠一・久保百司・宮本明

112 電池材料におけるイオン拡散の解明を目的とした新規プログラムの開発

(東北大院工) 鄭 昌鎬・森戸英明・小林泰則・鈴木 研・高見誠一・久保百司・宮本 明

113 ベンゾジキサンテン類縁体の立体構造と電子スペクトル

(埼玉大工・日本曹達) 渡部智博・古後義也・蛭田公広・柳田光広・太刀川達也・時田澄
男

114 region kを利用したPPP分子軌道法計算

(埼玉大工・基礎化研) 太刀川達也・蛭田公広・時田澄男・西本吉助

115 茶カテキン類の電子状態

(静岡工技セ・物質研・融合研) 田村克浩・松本高利 長嶋雲兵

116 理論計算による赤外スペクトルの予測

(物質研) 田辺和俊・松本高利

懇親会 ホテルスワ

(17:30 ~ 19:30)

第2日 11月4日(土)

<座長> 本間善夫

一般発表 5分間概要説明 (9:30 ~ 10:50)

デモンストレーション (11:00 ~ 12:00)

201 C60クラスターのケクレ構造の数とPauling-bond-orderについて

(信州大繊維・上越教育大自然 成田 進・森川鐵朗・渋谷泰一

202 表計算ソフトによる薬物速度論のシミュレーション

(共立薬大) 菅田節朗

203 Java™を使用した化学研究支援ソフトウェアMolWorks™

(ベストシステムズ・お茶大院・融合研 後藤成志・アンディスタビングス・田島澄恵・
長嶋雲兵

204 C1触媒反応データベース - 工業触媒反応のデータベース化 -

(物質研) 佐々木 基・濱田秀昭・伊藤建彦

205 化学ソフトウェア学会論文誌の電子出版 - 新たな展開 -

(姫路工大工) 中野英彦・山名一成・林 治尚

206 スペクトルデータベースシステムSDBS

(物質研) 田辺和俊

207 MCBDF法による電解質溶液のシミュレーション

(武蔵工大工) 吉田真史

208 ボロノイ多面体を用いた分子の体積と表面積について

(函館高専) 長尾輝夫

209 2成分系の相互溶解度曲線のモデル計算へのExcelの利用

(沼津高専) 浜渦允紘

210 固溶体結晶のXRDシミュレーション

(埼玉大工) 内堀可奈子・梅下友則・野口文雄・小林秀彦

211 結晶構造電子図鑑の作成

(埼玉大工) 野宮秋美・岡本洋和・野口文雄・小林秀彦

212 硫化物蛍光体の発光スペクトルと結晶構造の相関性

(埼玉大工・三井金属総研) 奥 清高・岡本洋和・八島 勇・野口文雄・小林秀彦

213 有機化合物命名法TSの構築(2) - 課題化合物の生成法 -

(図情大) 中山伸一・小松幸子・吉田政幸

214 原研における並列化分子軌道計算の展開

(原研計算セ) 望月祐志

215 第一原理分子軌道計算DVX 専用計算機の開発

(アプリアリマイクロシステムズ・融合研・東大・佐々木 徹 長嶋雲兵・塚田 捷

216 リチウムイオン2次電池の材料設計

(物質研) 松本高利・長嶋雲兵・田辺和俊

総会 (13:00 ~ 13:30)

<座長> 矢野敬幸

一般発表 5分間概要説明 (13:30 ~ 14:45)

デモンストレーション (15:00 ~ 16:00)

- 301 グラフ画像から数値を読み取るツールGraphSqueezeの改良—編集画像の保存と傾いた画像への対応(創価大工) 平島大志郎・守谷 崇・伊藤真人
- 302 POV-Rayを用いたレイトレーシング法による高品質三次元分子グラフィックス(広島大院理) 吉田 弘
- 303 OpenGLを利用した分子表示プログラムの開発³⁾(群馬大工・生命研) 中田吉郎・滝沢俊治・上林正巳
- 304 示性式に近い線形表記による化学構造入力プログラムの開発(仙台電波高専) 速水健一・今泉 喬・本郷雄史
- 305 インターネットを利用した分子シミュレーションの表示システム(姫路工大工) 林 治尚・山名一成・中野英彦
- 306 振動式攪拌機の動画ホームページ作成演習(芝浦工大・日本テクノ) 江修 寛・今井理裕・佐藤敏彦・大政龍晋
- 307 大学基礎教育における計算化学実習について(武蔵工大工) 吉田真史・にい原絹子・多留康矩
- 308 3次元造形による分子レベルでのミクロ構造の非仮想現実なモデリング(函館高専) 長尾輝夫
- 309 仮想現実感を利用した原子軌道の新しい対話型動画表示(埼玉大工・お茶大理)時田澄男 杉山孝雄・細矢治夫
- 310 OpenGLを用いた原子軌道の可視化(埼玉大工) 矢野雅彦・野口文雄・時田澄男

311 粉末法X線回折データの指数付け

(埼玉大工) 梅下友則・海老原朋介・野口文雄・小林秀彦

312 ブリュアン・ゾーンの可視化

(埼玉大工) 海老原朋介・福地正行・野口文雄・小林秀彦

313 プラスチック廃棄物の判別

(物質研)田辺和俊 松本高利

314 Metropolis Monte Carlo Brownian Dynamics法によるDNA水溶液の対イオン分極のシミュレ

ーション(東京大院総合文化) 鷲津仁志・菊地一雄

315 赤外スペクトルからの化合物同定

(物質研) 田辺和俊・松本高利

参加予約 9月30日(土)締切(必着). 住所, 所属, 氏名, 電話・FAX番号, 所属学会, 懇親会出席の有無を明記して, 下記連絡先に郵便FAXまたはe-mailでお申し込みください

参加登録費 予約:本学会会員 3,000円, 共催学会会員 4,000円, 一般 5,000円, 学生 1,500円,
当日参加登録予約なしの場合:予約参加登録費に1,000円を加算します.

懇親会 11月3日(金)17時30分～19時30分, 会場:ホテルスワ(地図は下記ホームページをご覧ください), 参加費4,000円

ホテル ホテルスワ(懇親会場のホテル, 学会特別料金で宿泊できます. 詳細は下記ホームページをご覧ください)

〒305-0854 茨城県つくば市手代木, TEL 0298-36-4011 / FAX 0298-36-3996

ホームページ : <http://homepage2.nifty.com/hotel-suwa/>

連絡先 〒305-8565 つくば市東1-1 物質工学工業技術研究所 田辺和俊

電話/FAX 0298-61-4432

e-mail ktanabe@home.nimc.go.jp

ホームページ <http://www.aist.go.jp/NIMC/TC/~chemsoft/>

