

日本コンピュータ化学会 2003 秋季年会プログラム

主催 日本コンピュータ化学会
共催 日本化学会
会期 10月25日(土)午後, 26日(日)全日
会場 広島大学東広島キャンパス

第1日 10月25日(土)

年会開会の辞 細矢治夫 (13:00~13:10)

<座長> 吉田 弘

特別講演 生命科学と情報科学の融合：一塩基多型 (SNP) データベース
の開発とその解析
石野洋子 (理化学研究所播磨研究所) (13:10~13:40)

一般講演 4分間概要説明 (13:50~15:50)
デモンストレーション (16:00~17:30)

<座長> 林 治尚

- 101 FVMO法を用いた仮想的数値シミュレーション
(日本医大, *東工大院, **日本SGI, ***WCSC, ****高千穂大) 香川 浩,
○川内 進*, 田村祐介**, 森 和英***, 鈴木一成****
- 102 FVMO法による分子構造・電子状態の同時最適化手法の開発
(産業安全研, *日本医大, **横浜市大院, ***WCSC, ****高千穂大) 大塚輝人,
○香川 浩*, 立川仁典**, 森 和英***, 鈴木一成****
- 103 量子化学計算における数式処理の利用
(WCSC, *東工大院, **日本医大) 森 和英, 後藤真史, ○中野 隆*,
大江親臣, 香川 浩**
- 104 RPA法による励起状態の分子動力学計算
(WCSC, *横浜市大院, **高千穂大, ***三菱化学) 後藤真史, 立川仁典*,
○森 和英, 笹金光徳**, 鈴木一成**, 中村振一郎***
- 105 Block Householder法の実験
(都立短大経営情報) ○村上 弘

- 106 LCI システムの開発ー#1 積分変換と閉殻用求解モジュール
(アドバンスソフト, *産総研グリッド研究センター) ○望月祐志, 長嶋雲兵*
- 107 平面型ボロンクラスターの量子化学的研究
(明薬大) ○溝口則幸
- 108 コンシールド-ノン-ケクレアンについての一考察
(*信州大繊維, **上越教育大自然系) ○野口大樹*, 成田 進*, 野村泰志*, 森川鐵朗**
- 109 CoCN の分子定数の超精密計算
(*産総研グリッド研究センター, **筑波大数理) ○福井 玲***, 長嶋雲兵***, 平野恒夫*
- 110 非経験的分子軌道法計算による non-chlorinated dibenzo-para-dioxin の酸化分解過程の解明
(早大理工) ○荒木 崇, 竹内 匠, 不破章雄
- 111 完全変分型分子軌道法の混成軌道への適用について II
(立教大理, *横浜市大院総合理学) ○池田宣之, 石元孝佳, 立川仁典*, 常盤広明
- 112 C-H...O 型水素結合における幾何学的同位体効果の理論的研究(2)
(立教大理, *産総研グリッド研究センター) ○宇田川太郎, 石元孝佳, 常盤広明, 長嶋雲兵*
- 113 Fenton 反応の密度汎関数法による研究
(岡山大薬) 哈 図, ○増田和文, 玉懸敬悦
- 114 第一原理計算による希土類イオンの濃度消光に関する研究
(FDK 株式会社) ○岡 健太郎
- <座長> 本間善夫
- 115 基準振動解析における ONIOM 法の計算精度の検証
(広島大院理) ○柳井雄樹, 石丸雄一, 吉田 弘, 松浦博厚
- 116 PCM 法を用いた水溶性有機分子の水溶液中におけるコンホメーション安定性に関する研究
(広島大院理) ○鈴木陽二, 松永武志, 吉田 弘, 松浦博厚
- 117 小規模クラスタシステムによる分子シミュレーション
(姫路工大工) ○林 治尚, 山名一成, 中野英彦
- 118 分子動力学法による氷中の分子拡散
(科技団さきがけ研究 21) ○深澤倫子
- 119 MD 法によるピレン修飾核酸の動的解析
(姫路工大工, *広島県立大経営) ○佐々和洋, 戸根健輔, 宇野 健*, 林 治尚, 山名一成, 中野英彦

- 120 エチレングリコールのポテンシャルモデルによる溶液構造の差異
(姫路工大) ○内藤研二, 佐々和洋, 林 治尚, 山名一成, 中野英彦
- 121 フタル酸エステルの回転障壁と運動性
(兵庫教育大, *名工大, **福井大) ○福田光完, 高尾 好, 岡本 茂*,
玉井良則**
- 122 Cs イオンのグラミシジン A イオンチャネル透過の MD シミュレーション
(大分大工, *大分大教育) ○ 小野澤 晃, 中島俊男*
- 123 分子動力学計算による CYP2D6 と基質の相互作用の研究 — Bufuralol エナンチ
オマー代謝選択性のシミュレーション —
(岡山大薬) 増田和文, ○大西利佳, 成松鎮雄, 玉懸敬悦
- 124 結晶構造情報を用いた結晶電子密度の計算
(埼玉大工) ○藤井秀彦, 野口文雄, 小林秀彦
- 125 分子計算支援システム Winmostar の開発 (2)
(出光興産中研) ○千田範夫
- 126 3D 分子モデル作成ソフト Facio の開発
(九大院理) ○末永正彦
- 127 Windows 版 PEACH (3) : 最新バージョンの移植
(群馬大工) ○中田吉郎
- 128 中低分子のための分子体積・表面積計算プログラムについて
(函館高専) ○長尾輝夫

懇親会 国民年金健康保養センターひがし広島 (18:00~20:00)

第2日 10月26日(日)

ミニシンポジウム「バイオ・ナノ・計算機シミュレーション」 (9:00~13:00)
(日本化学会西日本大会との合同セッション)

<座長> 相田美砂子 (9:00~10:00)

- 201 量子化学計算による生物無機化学へのアプローチ
(九大先導研) ○吉澤一成
- 202 シトクロム c 酸化酵素の酸素還元反応による水分子生成機構について
(三重大工) ○吉岡泰規
- 203 CYP3A4 における基質酸化部位特異性について
(千葉大院薬, *千葉大医) ○畑 晶之, 田中良和, 京田直子, 刑部泰輔, 幸 瞳,
石井伊都子, 北田光一*, 星野忠次, 根矢三郎

- 204 酵素の構造と機能についての理論的研究 (第一報) :D-アミノ酸酸化酵素の活性部位の構造と基質との相互作用
(大阪府大総科, *岡山理大) 麻田俊雄, ○西本吉助*

<座長> 杉本 学 (10:00~10:45)

- 205 転写因子の QSAR 解析とシミュレーション
(九州工大情報工) ○皿井明倫
- 206 GRID テクノロジーを用いた創薬プラットフォームの構築
(徳島大薬) ○中馬 寛
- 207 半経験的分子軌道計算プログラム MOS-F の PC クラスタ向け並列化
(富士通研) ○稲田由江, 小野寺 聡, 安里 彰, 松浦 東

<座長> 鳥居 肇 (10:45~11:30)

- 208 超高速コンピュータ網形成プロジェクト (NAREGI) とナノサイエンスシミュレーション
(九大情基セ) ○青柳 睦
- 209 メソスケールでの不均一構造形成シミュレーションと不均一構造中の局所構造の電子状態計算
(豊田中研) ○兵頭志明, 山本 智, 山川俊輔
- 210 金属触媒上で進行する 2, 3 の触媒反応の機構の密度汎関数法による研究
—プロピレンオキシド合成反応と燃料電池関連反応—
(倉敷芸科大) ○小林久芳

<座長> 吉澤一成 (11:30~12:15)

- 211 密度汎関数法の振動分光学への応用
(広島大院理) ○吉田 弘, 松浦博厚
- 212 機能性金属錯体の光応答とプロトン応答に関する電子状態シミュレーション解析
(熊本大院自然科学) ○杉本 学
- 213 量子化学計算から導かれる分子間静電相互作用の新たな描像と計算機シミュレーションにおける意味
(静岡大教育) ○鳥居 肇

<座長> 青柳 睦 (12:15~13:00)

- 214 芳香族化合物の濃硫酸中およびニトロベンゼン中のニトロ化の反応機構について
—9,8-および8,9-ピリジノベンゾアントロンのニトロ化—
(明星大理工) ○上田豊甫, 澤田忠信, 青木淳治

- 215 溶媒中の反応に関する *ab initio* MO を用いた分子動力学
(大阪産大) ○酒井章吾, 森田正二
- 216 計算化学と情報化学を融合した合成経路設計
(山口大工, *第一製薬) ○堀 憲次, *岡野克彦, 越水謙三, 山本豪紀

<座長> 細矢治夫

- 記念講演 量子化学からの生命科学へのとりくみ
相田美砂子 (広島大院理/広島大 QuLiS) (14:00~14:30)
- 一般講演 4 分間概要説明 (14:30~16:10)
デモンストレーション (16:20~17:50)

<座長> 中田吉郎

- 301 水溶液の濃度計算と調製方法のインターネットによる自動サービス
(埼玉大教育) 芦田 実, ○五十嵐真由美, 務台ひろみ, 吉田俊久
- 302 デジタル電位-pH 図
(芝浦工大) ○今井啓裕, 佐藤敏彦
- 303 画像投影によるスプレー塗装作業の改善
(芝浦工大) ○井上輝仁, 佐藤敏彦
- 304 PDB データの Ligand 結合部位のデータ集作成
(県立新潟女短大) ○本間善夫
- 305 FLASH アニメーションの有機化学 Web 教材への導入
(創価大工) ○細川雄二, 山本直樹, 伊藤真人
- 306 携帯電話向け 3D 分子表示プログラム J-molda の開発
(姫路工大工) ○戸根健輔, 林 治尚, 山名一成, 中野英彦
- 307 携帯電話向けの化学教育システムの開発と試用
(福井工専) ○吉村忠与志, 中山裕介, 上嶋晃智
- 308 一軸方向を縮小した 3 次元分子模型の切削加工について
(函館高専) ○長尾輝夫
- 309 化学構造式辞書の作成と教育への利用
(福岡歯科大) ○阿部興紀
- 310 XyM Notation により結合表を作成するアルゴリズムの研究
(京都工繊大院物質工) ○伊藤 圭, 藤田眞作
- 311 Hyper XyMTeX-PostScript および PDF に対応した構造式出力システム
(京都工繊大院物質工) ○内山克彦, 藤田眞作

<座長> 伊藤真人

- 312 XyMTeXによる化学構造式表記を支援するための構造式エディタの試作
(姫路工大工) ○中野英彦, 林 治尚
- 313 神経回路網シミュレーションと構造活性相関: 測定データが全て揃わない場合
(宮崎大工) 青山智夫
- 314 主成分分析法とニューラルネットワークを用いた河川の上流・中流・下流を示す
水質パラメータの抽出(第2報) - 東京多摩川の水質データ(1997~2001)を用
いて -
(大東文化大, *産総研グリッド研究センター, **宮崎大工) ○神部順子,
長嶋雲兵*, 青山智夫***
- 315 ポリ塩素化ダイオキシン類の分子構造指標と GCRT との相関に関する研究
(静岡県立大) ○牧野正和
- 316 三次元分子構造-NMR データベースと ¹³C-NMR 高精度予測システム CAST/CNMR
の開発
(国立情報学研究所, *理研) ○佐藤寛子, 越野広雪*, 鶴澤 洵*, 中田 忠*
- 317 ブロブパターンニングによる STM 画像の高速解析
(名大院工) ○磯部直希, 沢邊恭一, 正島宏祐
- 318 *n*次元の混成原子軌道に関する研究
(埼玉大工, *お茶大理) ○木戸冬子, 細矢治夫*, 時田澄男
- 319 水素原子軌道の可視化プログラムの開発
(埼玉大工) ○平熊 真, 藤井秀彦, 野口文雄, 小林秀彦, 木戸冬子, 時田澄男
- 320 Java 3D グラフィックスによる無機結晶構造可視化の試み
(埼玉大工) ○野口文雄, 藤井秀彦, 小林秀彦
- 321 OpenGL を用いた分子シミュレーション教育用ソフトウェアの開発
(福井大工) ○玉井良則
- 322 Web ブラウザを用いた分子シミュレーション支援システムの開発
(広島県立大経営, *姫路工大工) ○宇野 健, 佐々和洋*, 林 治尚*,
中野英彦*
- 323 AVS を用いた相互作用領域の可視化:DNA-アミノ酸側鎖間相互作用
(広島大院理・広島大 QuLiS, *九工大情報工) ○吉田智喜, 相田美砂子,
皿井明倫*