

日本コンピュータ化学会2006秋季年会プログラム
 主催：日本コンピュータ化学会
 会期：2006年10月13日(水)～15日(金) 10月15日18:30分
 会場：北海道教育大学道庁校

1日目 10月14日(土)
 12:30 受付開始
 13:30-14:20

開会 総務課長(北海道教育大学)
 特別講演 量子化学計算による分子軌道力学と分光学—星野分子の
 励起ダイナミクスから再励起化合物の理論予測まで—
 武本健治(北海道教育大学理学部理化学部門)

14:20-14:30 休憩
 14:30-16:00 ポスター発表(概要説明)

- <ポスター>
 IP01 Car-Parrinello法加速のための近似ベクトル正規直交化法
 長嶋貴兵, 奥山雅夫(産総研, 筑波大)
 IP02 J-STAGEに登録されている本学会論文誌のアクセス統計の解析(2)
 中野英樹(兵庫教育大学)
 IP03 イソトポロジーな反応経路を用いた触媒開発
 坂井善美, 奥山雅夫, 石若裕子, 小西稔, 小林淳哉(ほこだて未来大, 北大, 産総研)
 IP04 計算化学のための等価置換ソフトウェアの開発
 高木洋, 野村文雄(小林製薬(埼玉大工学部応用化学科))
 IP05 Iga上での分子ラファイックシオンの共有システムの開発(3)
 宇野誠, 佐々木和, 船橋大, 中野英樹(徳山高科大学, 兵庫教育大学)
 IP06 分子軌道計算のDmol3からJmolへの移植
 本間啓(徳山大学理学部)
 IP07 シャボン膜に閉じる非線形シャボン膜に電圧をかける—
 中川 友雄, 山口 博孝, 斎藤 隆雄, 藤井 次郎, 佐藤 弘幸, 嵯 輝一郎(北海道南茅部高等学校理科部)
 IP08 インターネットによる新しい有機化学システムの構築
 堀下登博, 野村文雄(産総研)
 IP09 大気汚染物質(SPA/NOx)に関する分析—2004年三軒茶屋データと
 関東圏汚染データを用いて
 神部順子, 中山英子, 奥山雅夫, 長嶋貴兵(大妻文化大学外国語学部, 産総研)
 IP10 Numerical Analysis of Electromagnetic Field in ESR Gavity
 中村守真, 久大保賢家, 川口英樹, 下山雄平(京福工業大学材料物性)
 IP11 NMRスペクトルのSolving Factor
 渡辺昭雄, 安田圭介(神戸市立高専, 神戸高専)
 IP12 分子活性分子の磁気共鳴による磁気共鳴効果
 本田謙, 渡辺昭雄(新野大学東京)
 IP13 Numerical Analysis of Spin-Tion Site-directed Spin-Labeling :
 Salt Bridge Formation of Prion Protein
 三上博樹, 野田洋子, 斎藤隆雄, 藤原孝, 藤原典典, 下山雄平
 (京福工業大学材料物性, 北海道大学)
 IP14 ESR Simulation Analysis of Site-Induced Conformational Change in
 PTP as Labeled by the Site-Directed Spin Labeling (SDSL) Method.
 Hiroshi KIMURA and Yasuo SHIMIZU(京福工業大学材料物性, 北大)
 IP15 SAC(SAC-CI法による環状および線状カルコゲン化合物のDFTスペクトルの計算
 葉原篤史, 中野英樹, 中野英樹(北海道教育大学理学部理学研究科)
 IP16 ONR-OTのフロンティア軌道構造の解析
 武本 健(北海道教育大学)
 IP17 分子軌道計算による非線形光学材料の設計(7)
 千原誠(産総研)
 IP18 フェニル系-カニキキヤン系色素の分子軌道計算
 太刀川達也, 時田浩介, 蛭田公広, 西本岳典(埼玉大, 日清紡, 大阪市立大)

Yuuki OTOSHINA, Yasuko MATSUUE, Hirotoshi TAMAYAMA, Osamu INANAWA,

16:00 休憩
 16:10-18:10 ポスターセッション

研究展示
 T1 グリッド技術を用いた大規模分子シミュレーションプログラムの開発
 長嶋貴兵, 藤井真也(JST-CREST, 産総研, 筑波大)
 T2 緑色の有機色素—軌道表示機型の進化について
 藤原典典, 藤原孝
 T3 対応可能になる量子化学計算環境表示
 神部順子, 武本健, 野田洋子(埼玉大, 産総研等)

19:00 懇親会

10月15日

8:30 受付開始
 9:00-12:00 口頭発表

- 開会 船津公仁(筑波)
 2001 遷移性分子の二次元位置座標の解析
 田田義樹子, 藤沢繁(ほこだて未来大学システム情報科学研究科)
 2002 Theoretical Evidence of Hyperconjugation for Polystyrene
 Methyl Rotation
 Rishu Sawano, Hiroshi Nakai (Iisoda University)
 2003 ベル方格子の化学的安定性の理論
 藤本浩二(徳山の水女子大学理学部)
- 開会 渡辺昭雄(産総研)
 2004 電子の構造に関する分子軌道計算と空間群制御
 藤田隆彦(山形大学)
 2005 置換アルカンの立体異性体の数え上げ
 野田洋子(京福工業大学)
 2006 量子分子軌道力学による非線形光学材料の設計とDNAの反応シミュレーション
 中野 英樹, 大谷 淳(京福工業大学工学部)

11:00 休憩
 11:10-12:00 特別講演

開会 小栗祐典(北海道教育大学)
 特別講演 「学びと体験をつなげる：科学教育理解のための展示コンテンツ
 デザインの進歩と発展」
 橋 朋子 先生(多摩美術大学情報デザイン学科)

12:00 昼食
 13:00-13:50 特別講演

開会 長嶋貴兵(産総研)
 特別講演 「MolSSI2005(CSP)の35年」
 船矢治夫先生(お茶の水女子大学名誉教授)

13:50 休憩
 14:00-15:25 ポスター発表(概要説明)

- <ポスター>
 2P01 Numerical Analysis of Radiation Induced Radicals in Foods during
 Thermal Treatments
 Hiroshi KIMURA, Hitosaku UKAI and Yuhei SHIMIZU (京福工業大学)
 2P02 「好発菌叢—病原菌叢問題の区画内にある固有種の特定法」
 村上 弘 (筑波大学理学部)
 2P03 表面電荷での分子間相互作用
 藤原典典(北大)
 2P04 フラグメント反応によるEpidermal Growth Factor (EGF) と
 EGF Receptorの相互作用解析
 渡邊秀雄, 石元孝雄, 田村裕, 稲塚謙一, 梅田宏明, 長嶋貴兵
 (産総研, JST-CREST, 九大, 千葉大)
 2P05 FMO-SCF法による大規模分子軌道計算(グリッド環境下でのFMO計算
 橋田昭雄, 藤原典典, 渡邊秀雄, 石元孝雄, 長嶋貴兵
 (JST-CREST, 産総研, 九大)
 2P06 S(1)ローブアーブレーションによる生体物の安定構造の理論的解析
 藤地 英樹, 藤澤 まさ久, 川島 啓孝, 渡辺 昭, DMITRIK Andriy, 柏谷 輝生
 (京大大学院材料科学研究, 京大大学院多元物質科学研究, 東北大学
 理学部科学部理論科学研究センター)
 2P07 反応場に基づいた分子軌道計算
 石元孝雄, 中川に真, 稲塚謙一, 梅田宏明, 渡邊秀雄, 長嶋貴兵
 (産総研, JST-CREST, 筑波大, 九大)
 2P08 医薬の超分子構造を誘発するシグマトロピーに関する理論的研究
 野田洋子(山形大学), 藤原典典(産総研), 中野英樹(京大理工)
 2P09 フロリッパ核とアラニン残基からなるブロックコポリペプチドの
 分子軌道計算による構造解析
 川口拓也, 寺崎光祐, 寺野義明, 田 藤仁(大阪府立大学総合教育研究機構)
 2P10 分子軌道力学を用いた分子軌道計算による構造解析
 川口拓也, 寺野義明, 田 藤仁(大阪府立大学総合教育研究機構)
 2P11 内殻電子の軌道結合による遷移金属錯体の配位場の解析(2)
 上持崇雄, 中田彰子, 今村謙, 中村浩巳(京大理工)
 2P12 分子シミュレーションを用いた遷移金属錯体の配位場の解析(1)
 佐々木和, 寺野義, 林治典, 中野英樹(兵庫教育大学大学院) 上
 2P13 高次元の分子軌道計算による遷移金属錯体の配位場の解析(1)
 藤原典典, 中野英樹, 中野英樹(京大理工)
 2P14 遷移金属錯体の配位場の解析と分配係数の推定
 山下 悠(花王薬品株式会社)
 2P15 計算化学による遷移金属錯体の配位場の解析
 武本 健(京大理工)
 2P16 大気汚染物質(SPA/NOx)に関する分析—その2
 中野英樹, 藤原典典, 藤原孝, 藤原典典(京大理工)
 (産総研, 京大理工)
 2P17 置換アルカンの立体異性体の数え上げ
 野田洋子(京大理工)
 2P18 置換アルカンの立体異性体の数え上げ
 野田洋子(京大理工)

15:25 休憩
 15:35-17:35 ポスターセッション, 研究展示