

## 日本コンピュータ化学会2007秋季年会 プログラム

2007年10月6日(土)~10月7日(日) イーグレ姫路(〒670-0012 姫路市本町68番290)

主催：日本コンピュータ化学会(SCCJ, <http://www.sccj.net/>)

共催：日本化学会／協賛：財団法人近畿化学協会／後援：姫路市教育委員会

1日目 10月6日(土)

13:20	受付開始
13:50-14:00	開会の辞
14:00-14:50	特別講演 座長・中野英彦(兵庫県立大) 『ユビキタス環境の創生と教育実践プロジェクト -現代GPの採択プログラム-』 矢野米雄(徳島大学大学院ソシオテクノサイエンス研究部長)
14:50-15:00	休憩
15:00-16:00	ポスター・研究展示概要説明 座長・宇野 健(県立広島大)
16:00-17:30	ポスター発表・研究展示 [ポスター] 1P01 [講演取消] 1P02 分子ビューア Jmol を利用した DVD-ROM 版分子事典 ○本間善夫、星 鉄矢、川端 潤(県立新潟女子短期大学、ビーグル、北海道大学) 1P03 品質管理の座学講義に Excel 演習を課した実践教育の教育的効果 ○吉村忠与志(福井高専・物質) 1P04 分子モデリングと計算化学のための可視化ツール Facio の開発 ○末永正彦(九州大・理) 1P05 多変量解析を用いた首都圏の大気汚染物質 (SPM と NO <sub>x</sub> ) の解析 ○神部順子、中山榮子、青山智夫、長嶋雲兵(江戸川大、昭和女子大、宮崎大、産総研) 1P06 MC_MO-full-CI 法による水素分子のエネルギー計算 ○石元孝佳、立川仁典、稲富雄一、梅田宏明、渡邊寿雄、長嶋雲兵(産総研、JST-CREST、横浜市大、九大) 1P07 高次元アルゴリズムにおける混合性パラメーターの検討 ○寺前裕之、石原康行、上夏井勝、五色裕紀(城西大理)、石元孝佳、長嶋雲兵(産総研) 1P08 グアニン二量体の励起状態に関する理論的研究 ○高橋研志、三枝洋之、立川仁典(横市大院・理) 1P09 ビニリデン高分子のコンホメーションと回転障壁 ○福田光完(兵教大院) 1P10 起電力法およびカロリメトリー法による熱力学諸量の測定と相平衡計算プログラムの作成による合金状態図の決定 - Ni-B-X(X=Mo,W)3成分系および Mg-Zn 2成分系状態図の熱力学計算 - ○森下政夫(兵庫県立大院工)、山本宏明(兵庫県立大院工)、松本恭知(兵庫県立大院生) 1P11 低誘電率絶縁材料の材料設計 ○神谷和明(京大院工)、佐藤徹(京大福井セ、京大院工)、田中一義(京大院工、JST-CREST) 1P12 有機分子-金属電極接合の軌道解析 ○板倉広朗(京大院工)、笹野博之(京大院工)、田中一義(京大院工、JST-CREST)

	<p>1P13 ピレン修飾核酸における塩基とピレンの相関 ○佐々和洋、宇野 健、林 治尚、中野英彦 (兵庫県立大、県立広島大)</p> <p>[研究展示]</p> <p>EX01 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 ○長嶋雲兵、櫻井鉄也、立川仁典、石元孝佳、梅田宏明、渡邊寿雄 (JST CREST、産総研、筑波大シス情、横浜市大)</p> <p>EX02 原子軌道確率密度のガラス内部への高精細彫刻 ○時田澄男 (埼玉大名誉)、時田那珂子 (放送大)</p>
18:00-	[懇親会] 総社会館

2日目 10月7日(日)

08:30	受付開始
09:00-10:20	<p>口頭発表 座長・太刀川達也 (埼玉大)</p> <p>2001 CoH、MnH分子の高精度計算による電子状態の研究 ○友成六美、平野恒夫、長嶋雲兵 (NEC、CREST、産総研)</p> <p>2002 高精度 ab initio 計算に基づく計算分子分光学: FeCN ○平野恒夫、奥田 玲、長嶋雲兵 (産総研計算科学)、Per Jensen(Wuppertal 大)</p> <p>2003 メルトポリイソプレン表面におけるガス収着の熱力学 ○福田光完 (兵教大院)</p> <p>2004 オリゴチオフェンならびにオリゴインの単分子電気伝導における非弾性散乱 ○志津功将 (京大院工)、佐藤徹 (京大福井セ、京大院工)、田中一義 (京大院工、JST-CREST)</p>
10:20-10:30	休憩
10:30-11:50	<p>口頭発表 座長・村上 弘 (首都大学東京)</p> <p>2005 動的 <math>E \otimes e</math> Jahn-Teller 問題の強結合極限における解析解 ○佐藤 徹 (京大、ルーヴアンカトリック大)、Liviu F. Chibotaru (ルーヴアンカトリック大)、Arnout Ceulemans (ルーヴアンカトリック大)</p> <p>2006 A Tool for Molecular Similarity Network ○黄 春飛 (関西学院大、吉林大学)、Zsolt Lepp (関西学院大)、岡田 孝 (関西学院大)</p> <p>2007 やせた六角動物のケクレ構造はいも虫グラフの <math>Z</math> で数える ○細矢治夫、Ivan Gutman (お茶大、クラグエバツ大)</p> <p>2008 モノ置換アルカンの数え上げにおける不斉炭素および擬不斉炭素の個数 ○藤田眞作 (湘南情数化研)</p>
11:50-13:10	昼休み
13:10-14:00	<p>特別講演 座長・中野英彦 (兵庫県立大)</p> <p>『闘わないがん治療：粒子線治療』 菱川良夫 (兵庫県立粒子線医療センター院長)</p>
14:00-14:50	<p>特別講演 座長・林 治尚 (兵庫県立大)</p> <p>『放射光軟X線分析と計算機化学』 村松康司 (兵庫県立大院工)</p>
14:50-15:00	休憩

15:00-16:00	ポスター概要説明 座長・佐々和洋(兵庫県立大)
16:00-17:30	ポスター発表・研究展示
	[ポスター]
	2P01 ニ核コバルト(II)錯体のための完全自動磁化率解析プログラムの開発 ○崎山博史(山形大・理)
	2P02 分子計算支援システム Winmostarの開発(8) ○千田範夫(テンキューブ研究所)
	2P03 タンパク質量子化学計算支援統合環境 ProteinEditorの開発 ○吉廣 保(東大、生研)、西村康幸(東大、生研)、佐藤文俊(東大、生研・情基)
	2P04 Web上での分子グラフィックスシーンの共有システムの開発 ○宇野 健、佐々和洋、林 治尚、中野英彦(県立広島大、兵庫県立大)
	2P05 多成分分子軌道法によるメチル基回転に伴うH/D同位体効果に関する研究 ○石原康行、寺前裕之(城西大・理)、石元孝佳、長嶋雲兵(産総研)
	2P06 FMO法による上皮細胞増殖因子受容体(EGFR)の相互作用解析 ○渡邊寿雄、石元孝佳、田村裕、稲富雄一、梅田宏明、長嶋雲兵(産総研計算科学、JST-CREST、千葉大院・医、九州大情基セ)
	2P07 大規模Fock行列生成プログラムの開発 ○梅田宏明、稲富雄一、渡邊寿雄、石元孝佳、長嶋雲兵(JST、産総研、九大)
	2P08 大規模な一般固有値問題のフィルタ対角化法による解法について ○村上 弘(首都大学東京)
	2P09 アリール基を有するフェナジン色素の分子軌道法計算 ○太刀川達也、時田澄男、西本吉助(埼玉大院理工、放送大、大阪市大)
	2P10 酸化バナジウムにおける光触媒作用の発現機構と振電相互作用 ○岩原直也(京大)、徳永健(京大院工)、佐藤徹(京大福井セ、京大院工)、田中庸裕(京大院工)、田中一義(京大院工、CREST-JST)
	2P11 結晶構造を用いる分子間相互作用の評価とテトラセン固体色予測への適用 ○北村千寿、小原拓也、阿部靖、川月喜弘、米田昭夫(兵庫県立大・工)
	2P12 グラファイトとダイヤモンドの電子状態に及ぼす欠陥の影響； 軟X線スペクトルの微細構造解析 ○天野泰至、下村健太、上田聡、村松康司(兵庫県立大・工)
	2P13 分子シミュレーションとネットワーク環境 ○林 治尚、佐々和洋、中野英彦(兵庫県立大)
	2P14 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(3) ○中野英彦(兵庫県立大院工)