

# 日本コンピュータ化学会 2008 秋季年会プログラム

1日目 9月27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・赤松直(高知大教育)

『Web教材集「理科ねっとわーく」における「化学」のデジタル』

亀井威則(JST理数学習支援部)

14:50-15:00 休憩

15:00-15:50 ポスター・研究展示 概要説明

15:50-17:20 ポスター発表・研究展示

1P01 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(4)

○中野 英彦(兵庫県立大・名誉)

1P02 分子計算支援システム Winmostar の開発(9)

○千田範夫(テンキューブ研究所)

1P03 有機性・無機性値とともに見る LIGPLOT 公開データを利用した分子モデル集

○本間善夫(県立新潟女子短期大学)

1P04 Flash を用いた分子グラフィックス表示システムの開発

○宇野健、佐々和洋、林治尚(県立広島大、福井高専、兵庫県立大)

1P05 電子演習システムの開発—XMLによる問題定義の検討と実装—

○及川義道、井畑旬喜、奥田富蔵、高野二郎(東海大理、東海大教育研)

1P06 1桁データの一括入力法とその応用としてのマークシート代替

○菅田節朗(慶大薬)

1P07 並列分散処理向きハウスホルダ変換の実験

○村上 弘(首都大学)

1P08 欠測データ集合を扱う神経回路網法 CQSAR を用いた環境指標データの補完と分布図

○神部順子、長嶋雲兵、青山智夫(江戸川大、産総研、宮崎大工)

1P09 CONFLEX/MMFF94 の水素結合ポテンシャル関数の改良

○高田康仁、小畑繁昭(豊橋技科大院)、大田一男(コンフレックス株)、中山尚史、後藤仁志(豊橋技科大院、コンフレックス株)

1P10 ホタル由来ルシフェラーゼの不斉判別に関する計算化学的解析

○佐々和洋、加藤 太一郎、宇野 健、林 治尚、中野 英彦(福井高専、兵庫県立大、県立広島大)

- 1P11 分子動力学法を用いたアルミナセラミックスの焼結挙動の研究  
○岡田智宏、内田 希(長岡技科大)
- 1P12 分子動力学計算による $\alpha$ -ヘアピン構造の動的挙動の解析  
川口拓也、○岡 勝仁(大阪府立大総合教育)
- 1P13 円二色性スペクトル解析ソフトウェアの開発  
○松川有香、崎山博史(山形大理)
- 1P14 二核ニッケル(II)錯体の分子軌道計算と諸性質  
○崎山博史、大嶋正人、鈴木哲、西田雄三(山形大理、東京工芸大学、計算化学工房)
- 1P15 運動性タンパク質の顕微鏡画像解析  
○國田美穂子、櫻沢繁(公立はこだて未来大システム情報科学、JSPS)
- 1P16 [高校生ポスター発表]  
かいわれ大根と希少糖の関係  
濱口拓真、細川雄慎、永森功成、松浦洋史、森澤翔(高知県立高知小津高等学校)
- EX01 [研究展示]  
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、八木徹、渡邊寿雄 (JST CREST、  
産総研、筑波大シス情、九州先端研)
- EX02 [研究展示]  
原子軌道のガラス内彫刻 –混成軌道の表示–  
時田 那珂子、○時田 澄男(埼玉大名誉)
- 18:00- (あるいは 18:30-) 懇親会 オリентホテル高知

## 2日目 9月28日(日)

08:30 受付開始

09:00-10:20 口頭発表 座長・細矢治夫(お茶大)

2001 鉍物表面の濡れの分子動力学計算

○河村 雄行(東工大地惑)

2002 QRコードによる物理化学実験支援システムの開発と教育的効果

○吉村忠与志(福井高専物質工学科)

2003 分子内部の分岐度を考慮したモノ置換アルカン異性体の数え上げ

○藤田眞作(湘南情報数理化学研究所)

2004 酸化チタン系透明導電体の第一原理計算

神坂英幸、末永貴洋、○山下晃一(東大院工)

10:20-10:30 休憩

10:30-11:10 特別講演 座長・藤山亮治(高知大理)

『環状化合物がとることができる立体構造の配置空間(1)』

配置空間の数理モデルである多様体のトポロジー』

小松和志(高知大理学部)

11:10-11:50 特別講演 座長・藤山亮治(高知大理)

『環状化合物がとることができる立体構造の配置空間(2)』

エリスロマイシンへの応用とX線結晶構造』

後藤了(国際医療福祉大薬学部)

11:50-13:00 昼休み

13:00-14:00 口頭発表 座長・稲富雄一(九州先端研)

2005 振電相互作用密度とその応用

○佐藤徹(京大福井セ、京大院工)、徳永健(京大院工)、志津功将(京大院工)、田中一義(京大院工)

2006 行列の $n$ 乗根を解析的に求めるアルゴリズムの発見

○細矢治夫(お茶大)

2007 化学的観点から見た質量式

○鳴海英之(元北大大学院理学研究科・地環科学研究科)

14:00-14:10 休憩

14:10-15:00 ポスター概要説明

15:00-16:30 ポスター発表・研究展示

- 2P01 テルピリジン誘導体の蛍光特性に関する計算化学解析  
○重光保博、北条博彦・務台俊樹・荒木孝二(長崎工技セ、東大生産研)
- 2P02 多成分分子軌道法の開発と同位体効果の解析  
○石元孝佳、立川仁典、梅田宏明、渡邊寿雄、長嶋雲兵(産総研、JST-CREST、横浜市大)
- 2P03 分子内プロトン移動反応に関する理論的研究 (2)  
○寺前裕之、藤田若菜(城西大理)、長岡伸一(愛媛大理)、長嶋雲兵(産総研)
- 2P04 グリッド技術を用いた大規模 Fock 行列計算プログラムの開発  
○梅田宏明、稲富雄一、渡邊寿雄、八木徹、石元孝佳、長嶋雲兵(JST、産総研、九州先端研)
- 2P05 GAMESS 版フラグメント MO 法計算のための GUI の開発  
○末永正彦(九大理院)
- 2P06 フラグメント MO 法及び FMO-MO 法による DNA の電子状態計算  
○渡邊寿雄、稲富雄一、梅田宏明、長嶋雲兵(JST CREST、産総研、九州先端研)
- 2P07 水和クラスターモデル計算による分子間相互作用の自由エネルギー解析：核酸塩基対  
○谷誠治(山口大院・理工)
- 2P08 金属フタロシアニン誘導体の自己集合膜の構造について  
○勝又春次(いわき明星大)
- 2P09 密度汎関数法による  $\alpha$ -シクロデキストリンおよびその包接体の構造解析  
○磯崎陽子、大嶋正人(東京工芸大)
- 2P10 多成分分子軌道法によるアセトンのメチル基回転に伴う H/D 同位体効果の解析  
○石原康行、寺前裕之(城西大理)、石元孝佳(産総研)、長嶋雲兵(産総研)
- 2P11 カーボンナノチューブ内部における電場と磁場の遮蔽効果  
○三宅伸尚(首都大学東京)、波田雅彦(首都大学東京、JST-CREST)
- 2P12 環状  $\pi$  電子化合物のプロトン NMR 化学シフトに関する解析  
○波田雅彦(首都大・理工)
- 2P13 共鳴理論を用いた不対電子密度の計算  
○辻井秀和、成田進(信州大学繊維学部)
- 2P14  $\beta$ -アリアルアルキル トシレートのスルボリシス反応における電荷の非局在化  
○梅津智・飯干友美・勝大史・政岡由佳・吉田真奈・藤山亮治(高知大理)
- 2P15 カルボランの電荷の非局在化量に関する研究  
○勝大史・藤山亮治(高知大理)

(16:40 に朝倉高知大学前から高知龍馬空港行きバスが出ます.)