

日本コンピュータ化学会 2011 年春季年会プログラム
(併催) 日本コンピュータ化学会 10 周年記念シンポジウム

6 月 5 日 公開第 11 版

■主催

[日本コンピュータ化学会](#)

■共催・協賛

[化学工学会](#), [高分子学会](#), [触媒学会](#), [日本化学会](#), [日本薬学会](#), [分子科学会](#),
[分子シミュレーション研究会](#)

■会期

2011 年 6 月 15 日 (水) ~17 日 (金)

■会場

東京工業大学大学院社会理工学研究科棟 大岡山西 9 号館 2 階

[[交通案内](#) | [大岡山キャンパス](#) | [大岡山東・西・南地区](#)]

■研究展示

RX01	原子軌道のガラス内彫刻 – 混成軌道の表示: その2 – 時田 那珂子, ○時田 澄男 (埼玉大名誉)
------	--

■企業展示

CX01	国立大学法人 東京工業大学 
CX02	コンフレックス 株式会社 
CX03	ShareTask アライアンス
CX04	ビヨンド・コンピューティング 株式会社 
CX05	株式会社 菱化システム 
CX06	株式会社 エルザジャパン 

一日目 6月15日(水)

■受付開始(13:00-)

■口頭発表(13:30-14:10)

◇13:30-14:10 セクション1 (各20分)

座長: 澤口直哉(室蘭工大)

1001	完全固体の状態方程式と固体アルゴンの蒸気圧 ○片岡洋右, 山田祐理(法政大生命)
1002	L-J 流体系の液体-固体相転移に伴うn員環の数の変化 ○六車千鶴(中京大)

■展示会プレビュー(14:10-15:00)

◇14:10-14:50 (各5分) 研究展示, 企業展示

座長: 後藤仁志(豊橋技科大)

■表彰(15:00-15:30)

◇15:00-15:15 日本コンピュータ化学会表彰発表, 授賞式

学会賞	中井浩巳(早稲田大学 理工学術院 教授)
論文賞 (吉田賞)	吉村季織, 茂谷明宏, 高柳正夫(東京農工大). 『Microsoft Excel を用いたケモメトリクス計算(3) - 重回帰による定量法 -』, <i>J. Comput. Chem., Jpn</i> , Vol. 9, No. 2, 109-120 (2010).
功労賞	河村雄行(岡山大学 大学院環境学研究科 教授)

◇15:15-15:30 日本コンピュータ化学会 10周年記念 SCCJ 奨学金授与式

■SCCJ 特別奨学賞講演 (15:30 –16:30)

◇15:30 – 16:30 特別奨学賞受賞講演 (各 15 分)

座長：佐々和洋 (福井高専)

1003	分子軌道法を用いたガラス表面の応力腐食の研究 ○高木宏哲, 内田希(長岡技科大)
1004	分子動力学法による $\text{Na}_2\text{O-B}_2\text{O}_3$ 系ガラス構造の検証 ○佐々木崇博, 山口翔, 澤口直哉, 河内邦夫, 佐々木眞(室工大院), 河村雄行(岡山大院)
1005	酵素リパーゼの鏡像体選択性に関する大規模生体分子化学計算 ○守屋陽輔, 矢城陽一郎, 今川敦, 木村崇知, 亀澤誠, 直島好伸(岡山理大院, 甲南化工)
1006	タンパク質活性部位探索 – ペプチド配列活性評価システムの開発 ○増田尚之, 孫林玉, 相田拓洋, 西垣功一, 後藤仁志(豊橋技科大院, 埼玉大院理工)

■口頭発表 16:30 –17:30 (各 20 分)

座長：村上 弘 (首都大)

1007	Genetic Algorithm-based WaveLength Selection 法を応用したソフトセンサー手法の開発 ○金子弘昌, 船津公人(東大院工)
1008	USCI 法によるキューバン誘導体の数え上げ ○藤田眞作(湘南情数化)
1009	トポロジカルインデックスと整数論. IV. アイゼンシュタイン三角形 ○細矢治夫(お茶大)

■一日目終了 (17:40)

二日目 6月16日(木)

日本コンピュータ化学会 10周年記念シンポジウム

■受付開始 (10:00 -)

■開会の辞 (10:30 - 10:40)

2S01	平野恒夫(日本コンピュータ化学会名誉会長)
------	-----------------------

■コンピュータ化学の夜明け (10:40 - 12:10)

◇10:40 - 11:40 10周年記念講演

座長：本間善夫(新潟県立大学)

2S02	化学ソフトウェア学会と共に 吉村忠与志(福井高専)
------	------------------------------

2S03	学会誌の創刊とその発展 時田澄男(埼玉大名誉)
------	----------------------------

2S04	学会誌のオンライン配信事始 中野英彦(兵庫県立大名誉)
------	--------------------------------

◇11:40 - 12:10 10周年記念招待講演

座長：本間善夫(新潟県立大学)

2S05	化学物質の発ガン性の予測 ○田辺和俊, 鈴木孝弘(ティー・エヌ・ケー, 東洋大)
------	---

■昼休み (12:10 - 13:00)

■日本コンピュータ化学会 2011 春季年会ポスター発表 (13:00 - 14:30)

2P01	ブロック化ヤコビ法による固有値計算の実験 ○村上 弘(首都大学東京)
------	---------------------------------------

2P02	光異性化反応など 2,3 の反応機構の MOPAC-PM6 法による評価 ○染川賢一(鹿児島大名誉), 松山隆真, 下茂徹朗(鹿児島大院理工)
2P03	非 IPR フラーレン C ₇₀ と Li 原子/イオンの相互作用についての研究 ○今野正弥, 成田進, 野村泰志(信大)
2P04	Fully-benzenoid の π 電子分布解析 ○徳山雄一, 成田進, 野村泰志(信大)
2P05	キラル型 CNT における π 電子分布の解析 ○森川大, 成田進, 野村泰志(信大)
2P06	フルーレン二量体の融合過程におけるスペクトル変化 ○藤崎真史, 成田進, 野村泰志(信大)
2P07	同一のサイズの環が縮合した多環式共役系の芳香族性の解釈 ○仲上祐斗, 関根理香(静岡大創造), 相原惇一(静岡大)
2P08	分子動力学法を用いた CO ₂ の液体への溶解現象の解析 ○小寺厚, 平井秀一郎, 植村豪, 津島将司(東工大), 河村雄行(岡山大)
2P09	点欠陥と転位による MgO 結晶の拡散 ○辻野典秀(東工大), 河村雄行(岡山大)
2P10	分子動力学法による CeFe ₄ Sb ₁₂ 系化合物の格子振動解析 ○伊端優祐, 澤口直哉, 関根ちひろ, 河内邦夫, 佐々木真(室工大院)
2P11	分子動力学シミュレーションによる Bi ₂ Te ₃ の格子振動解析 ○古起大, 澤口直哉, 河内邦夫, 佐々木真(室工大院)
2P12	水の均一蒸気-液体核生成過程の分子動力学シミュレーション ○河野明男, 河村洋史(JAMSTEC), 草野完也(名古屋大学)
2P13	カテプシンE活性ペプチドの高速活性予測法の検討 ○蔵内伸悟, 西垣功一, 後藤仁志(豊橋技科大院, 埼玉大)
2P14	入力ファイルの前処理とデータベースを用いた全解探索の分散処理: Charmm を用いた検討 矢部誠, ○玉城哲平, 上田一義, 武田穰, 小泉淳一(横浜国大院工)
2P15	ニューラルネットワーク解析を用いた都市ごみ焼却灰溶融炉耐火物の寿命 予測 ○横山類, 内田希(長岡技科大)

2P16	糖鎖合成統合データベースの開発 ○山田一作, 本庄秀之, 藤田典昭, 鈴木芳典, 鹿内俊秀, 水野真盛, 成松久(野口研, 産総研)
2P17	Distribution of radioisotope dust along NW direction from a source ○Tomoo AOYAMA (Miyazaki Univ.), Eiko NAKAYAMA (Showa Women's Univ.), Junko KAMBE and Toru YAGI (Edogawa University)
2P18	生命の歴史を学ぶ生体分子モデル教材集 ○本間善夫(新潟県立大)
2P19	再構成運動系におけるアクチン繊維のミオシンとの相互作用部位検出 ○櫻沢繁, 國田樹, 坂田花(はこだて未来大)
2P20	タンパク質の立体構造を評価するための統計的粗視化 4 体ポテンシャルの開発 ○石飛秀斗, 孫林玉, 増田尚之, 相田拓洋, 西垣功一, 後藤仁志(豊橋技科大院工, 埼玉大院理工)
2P21	Pharmacophore を考慮した Ligand-Based Virtual Screening ○奥野達矢, 千見寺浄慈(名大院)

■10周年記念特別招待講演 (14:30 – 15:20)

◇14:30 – 15:20 10周年記念特別招待講演

座長：細矢治夫 (お茶の水大学 名誉教授)

2S06	ナノテク時代のコンピュータ化学 大澤映二(ナノ炭素研究所社長)
------	------------------------------------

■コンピュータ化学の広がり (15:20 – 16:10)

◇15:20 – 15:40 10周年記念講演

座長：長嶋雲兵 (産業技術総合研究所)

2S07	CBI学会の活動 中田吉郎(元群馬大学, CBI 学会理事)
------	-----------------------------------

◇15:40 – 16:10 SCCJ 功労賞受賞講演

座長：長嶋雲兵（産業技術総合研究所）

2S08	分子シミュレーションのための原子・分子間相互作用モデル 河村雄行(岡山大学大学院環境学研究科, 分子シミュレーション研究会 会長)
------	---

■コンピュータ化学の未来へ（16:10– 17:10）

◇16:10 – 16:40 SCCJ 吉田（論文）賞受賞講演

座長：吉村忠与志（福井高専）

2S09	Microsoft Excel を用いたケモメトリクス計算(3) -重回帰による定量法- ○吉村季織, 茂谷明宏, 高柳正夫(東京農工大)
------	--

◇16:40 – 17:10 SCCJ 学会賞受賞講演

座長：波田雅彦（首都大学東京）

2S10	理論化学の新展開 中井浩巳(早稲田大学 理工学術院 教授)
------	----------------------------------

◇17:10 – 17:40 10周年記念講演

座長：波田雅彦（首都大学東京）

2S11	量子分子動力学法に基づくマルチフィジックスシミュレータの開発と低炭素 化機械システムへの応用 久保百司(東北大学大学院)
------	--

■閉会の辞（17:40 – 17:50）

2S12	細矢治夫(日本コンピュータ化学会会長)
------	---------------------

■懇親会（18:30 から）

三日目 6月17日(金)

■受付開始(10:00-)

■口頭発表(10:30-11:50)

◇10:30-11:50 セクション3 (各20分)

座長:小林正人(早大先進理工)

3O01	固体酸化物燃料電池燃料極劣化現象の計算化学解析 ○古山通久, 中尾和英, 小倉鉄平, 石元孝佳(九大稲盛セ)
3O02	固体酸化物形燃料電池の破壊特性に関する分子動力学シミュレーション ○坂之井遼太, 許競翔, 尾澤伸樹, 島崎智実, 久保百司(東北大院工)
3O03	量子分子動力学法によるSi薄膜太陽電池の結晶成長シミュレーション ○桑原卓哉, 尾澤伸樹, 島崎智実, 久保百司(東北大院工)
3O04	大規模量子化学計算による甘味タンパク質ブラゼインの機能解析 ○矢城陽一郎, 直島好伸(岡山理大院)

■昼休み(12:00-13:00)

■日本コンピュータ化学会 2011 春季年会ポスター発表(13:00-14:30)

3P01	LiHの分子軌道エネルギー準位図-非経験的ハートリー・フォック法を用いて- Amih Sagan, ○長嶋雲兵, 寺前裕之, 長岡伸一(産総研, 城西大, 愛媛大)
3P02	四核高スピンコバルト(II)化合物の磁化率解析ソフト(1) ○崎山博史(山形大理)
3P03	オキソバナジウム(IV)錯体の電子スペクトル解析(2) ○阿部啓太, 我妻 洸, 矢田 哲也, 崎山 博史(和洋学園, 山形大理)
3P04	内殻イオン化エネルギーの理論計算によるポリプロピレンのXPSスペクトル解析 ○里園浩, 望月崇宏(浜松ホトニクス)

3P05	DIIS 法により高速化した反対称化強直交ジェミナル積 (APSG) 法の実装 ○樽見望都 ^a , 小林正人 ^{a,b} , 中井浩巳 ^{a,c,d} (^a 早大先進理工, ^b 分子研, ^c 早大理工研, ^d JST-CREST)
3P06	ルチジン誘導体生成の反応機構に関する研究 ○寺前裕之 (城西大理), 丸尾容子, 中村二郎 (NTT 環境エネルギー研)
3P07	DC-SAC 法～大規模励起状態理論の構築に向けて～ ○吉川武司, 小林正人, 中井浩巳 (早大先進理工, 分子研, 早大理工研, JST-CREST)
3P08	分割統治 (DC) 法に基づく非経験的分子動力学 (AIMD) シミュレーション ○窪田崇人, 赤間知子, 小林正人, 中井浩巳 (早大先進理工)
3P09	拘束条件付き SCF 法による有機強誘電体の物性に関する研究 ○今村穰, 山形悠也, 中井浩巳 (早大先進理工)
3P10	OpenFMO におけるフラグメント電子状態計算部分の高並列化 ○稲富雄一, 高見利也, 本田宏明, 小林泰三, 青柳睦 (九大), 眞木淳 (九州先端研), 南一生 (理研)
3P11	<発表無し>
3P12	2次元紫外・可視分光法の3次応答への拡張 平塚暁裕, ○赤間知子 (早大先進理工), 矢ヶ崎琢磨, 齊藤真司 (分子研), 中井浩巳 (早大先進理工)
3P13	燃料電池電極反応に関する理論的研究 ○石元孝佳, 刘世学, 小倉鉄平, 古山通久 (九大稲盛セ)
3P14	大規模量子化学計算による甘味タンパク質およびその変異体の機能解析 ○矢城陽一郎, 直島好伸 (岡山理大院)
3P15	エイズタンパク質やヒトタンパク質とエイズ阻害剤との相互作用に関するフラグメント分子軌道計算 ○岩佐彰浩, 矢城陽一郎, 直島好伸 (岡山理大院)
3P16	分子軌道計算によるダイヤモンド/ニッケルめっき過程の研究2 ○伊藤耕悦, 高野健児, 内田 希 (長岡技科大)
3P17	分子動力学法を用いたアルミナ焼結過程の研究2 -粒成長- ○楠橋陽教, 菅野理雲, 内田希 (長岡技科大)

3P18	多環芳香族化合物における置換基効果解析 ○藤山亮治, 辻村侑徳(高知大)
3P19	Si 量子ドットの表面構造を考慮したキャリア増倍効果の計算化学的評価 ○広瀬祥, 南雲亮, 三浦隆治, 鈴木愛, 坪井秀行, 畠山望, 高羽洋充, 宮本明(東北大)
3P20	Doping of ceria surface with Ti and its catalytic activity: a Quantum Chemical Molecular Dynamics Study ○Md. Khorshed Alam, 三浦隆治, 鈴木愛, 坪井秀行, 畠山望, 高羽洋充, 宮本明(東北大)
3P21	生物燃料電池メディエータの性能評価に向けたマルチスケールシミュレーション ○小林大, 南雲亮, 三浦隆治, 鈴木愛, 坪井秀行, 畠山望, 高羽洋充, 宮本明(東北大)
3P22	大規模量子化学計算手法による貴金属/CeO ₂ ベース酸化物間の相互作用評価 ○鄭 善鎬, 南雲亮, 三浦隆治, 鈴木愛, 坪井秀行, 畠山望, 高羽洋充, 宮本明(東北大)

■総会 (14:30 – 15:00)

■口頭発表 (15:00 – 17:40)

◇15:00 – 16:20 セクション4 (各 20 分)

座長：矢城陽一郎 (岡山理大)

3O05	分割統治(DC)量子化学計算プログラムの進捗:非線形光学応答計算を中心に ○小林正人, 當眞嗣貴, 中井浩巳(早大先進理工, 分子研, 早大理工研, JST-CREST)
3O06	SAC-CI 法によるシアノ化合物アニオンラジカルの励起状態 ○中嶋浩之, 志田忠正, 中辻博(量化研, JST-CREST)
3O07	密度汎関数理論における軌道エネルギーの直線性条件を用いた汎関数の構築 ○今村穰, 小林理恵, 中井浩巳(早大先進理工)

3008	情報理論に基づくエネルギー分割手法の開発 ○今村穰, 鈴木潤, 中井浩巳(早大先進理工)
------	---

◇16:20 – 17:40 セクション5 (各 20 分)

座長：崎山博史 (山形大)

3009	計算科学手法による CeO ₂ スラリーの化学機械研磨特性の解析及び代替砥粒設計 ○尾澤伸樹, 石川宗幸, 久保百司(東北大院)
3010	量子分子動力学法によるシリコン酸化膜の高選択性フルオロカーボンラジカルエッチングプロセス ○伊藤寿, 尾澤伸樹, 島崎智実, 久保百司(東北大院工)
3011	リチウムイオン電池正極材の粒子構造を考慮したイオン拡散マルチスケールシミュレーション ○高羽洋充, 南雲亮, 三浦隆治, 鈴木愛, 坪井秀行, 畠山望, 宮本明(東北大)
3012	アミノ酸への陽電子吸着の理論的解析 ○小柳勝彦, 北幸海, 立川仁典(横市大院)

■年会終了 (17:50)