



## 日本コンピュータ化学会 2018 年春季年会プログラム

4 月 13 日 決定版

### ■会期

2018 年 6 月 7 日(木)～8 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

### ■主催

日本コンピュータ化学会(SCCJ)

### ■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、CBI 学会

### ■研究展示

RX01	金属錯体の結晶ポテンシャルの開発と多形転移現象のメカニズム解析 ○後藤仁志、中山尚史、小畑繁昭(豊橋技科大, コンプレックス株)
RX02	インシリコ創薬システム、Docking Study with HyperChem (DSHC)と Homology Modeling Professional for HyperChem (HMHC)による創薬基盤技術の高度化 ○辻一徳(分子機能研究所)

1 日目 6 月 7 日 (木)

### ■09:30 受付開始

■10:00 – 11:00 口頭発表 20 分 3 件

座長 1 : 渡邊寿雄 (東工大)

1001	ラジカル共重合性の理論的研究 ○西久保 棕、林 慶浩、川内 進(東工大)
1002	FMO プログラム ABINIT-MP の OakForest-PACS 上での多層並列化と性能評価 ○渡邊啓正(HPC システムズ株式会社)、佐藤伸哉(NEC ソリューションイノベータ株式会社)、坂倉耕太(日本電気株式会社)、齊藤天菜(立教大学)、望月祐志(立教大学、東京大学生産技術研究所)
1003	フェルラ酸のフリーラジカル消去能に関する理論的研究 ○寺前裕之、玄美燕、高山淳、岡崎真理、坂本武史(城西大理、城西大薬)

■11:00 – 12:00 口頭発表 20 分 3 件



座長 2 : 澤口直哉 (室工大)



1004	ソフトクリスタルの結晶力場の構築:フェニル(フェニルイソシアニド)金(I)の場合 ○中山尚史 <sup>1</sup> 、小畑繁昭 <sup>1</sup> 、堀芳和 <sup>2</sup> 、後藤仁志 <sup>2</sup> 、関朋宏 <sup>3</sup> 、伊藤肇 <sup>3</sup> (1 コンプレックス(株)、2 豊橋技科大、3 北大院工)
1005	ファンデルワールス式による固・液・気相平衡 ○片岡洋右(法大生命)
1006	分子動力学法を用いた高温・高圧水環境における鉄材料の塑性変形メカニズムの検討 ○陳茜、許競翔、大谷優介、尾澤伸樹、久保百司(東北大金研)

■12:10 – 12:40 展示会プレビュー 各社 5 分

座長 3 : 田島澄恵 (株式会社ヒューリンクス)

■12:40 - 14:00 昼企業展示

CX01	<a href="#">株式会社クロスアビリティ</a>	
CX02	<a href="#">コンプレックス株式会社</a>	

CX03	<a href="#">東京工業大学 学術国際情報センター</a>	
CX04	<a href="#">九州大学情報基盤研究開発センター</a>	

■12:40 – 14:00 昼休み

■14:00 – 15:30 ポスター発表(19件)

1P01	定積条件下でのリンデマンの融解則と融解エントロピー ○片岡洋右(法大生命)
1P02	DNA-ウラニル系の FMO 計算に基づく相互作用解析 津島悟(東工大先導原研、独 HZDR)、○阿部鷹也(立教大理)、奥脇弘次(立教大理)、望月祐志(立教大理、東大生産研)、古明地勇人(産総研)、福澤薫(星薬科大、東大生産研)、中野達也(国立衛研)、沖山佳生(国立衛研)、三好永作(九大)
1P03	大学初年度向け化学教育のための Scratch プログラムの開発 中川知樹(立教大理)、土居英男(立教大理)、○満野仁美(立教大理)、望月祐志(立教大理、東大生産研)
1P04	Keras を使った転移学習の応用事例 ○伊藤雅仁(立教大理)、伊藤隆登(立教大理)、齊藤天菜(立教大理)、土居英男(立教大理)、望月祐志(立教大理、東大生産研)
1P05	物性測定と粗視化シミュレーションによる脂質二重膜の構造解明 ○新庄永治 <sup>1</sup> 、奥脇弘次 <sup>2</sup> 、土居英男 <sup>2</sup> 、望月祐志 <sup>2</sup> 、古石誉之 <sup>1</sup> 、福澤薫 <sup>1</sup> 、米持悦生 <sup>1</sup> (1 星薬科大、2 立教大学)
1P06	GW 近似を超えた電子系の自由エネルギー ○中村 賢(高度情報研究機構)
1P07	ソフトクリスタルの多形転移解析法の探求 ○堀芳和 <sup>1</sup> 、榎本大義 <sup>1</sup> 、小畑繁昭 <sup>2</sup> 、中山尚史 <sup>2</sup> 、後藤仁志 <sup>1</sup> 、関朋宏 <sup>3</sup> 、伊藤肇 <sup>3</sup> (1:豊橋技科大、2:コンプレックス、3:北大院工)
1P08	グラフ理論と分子力場法による Na クラスター全異性体の安定性の解析 ○関根理香、室野あゆみ、岡倉雅弥、小林陽介、仲上祐斗(静大理)
1P09	対称性の高い固有ベクトルを得る新規固有値固有ベクトル計算のアルゴリズム 長岡伸一、寺前裕之、小久保達信、○長嶋雲兵(愛媛大、城西大、RIST、FOCUS)

1P10	基底量子モンテカルロ法の行列解法による水素原子の電子状態計算 ○八木徹(江戸川大)、長嶋雲兵(FOCUS)
1P11	分子動力学シミュレーションを用いたナトリウムホウ酸塩ガラスにおけるホウ酸異常現象の考察 ○山本優也、澤口直哉、佐々木眞(室蘭工業大学大学院)
1P12	分子軌道法による2層グラフェン間への水素吸蔵特性の研究 ○菅谷大智;斎藤秀俊;内田希(長岡技科大)
1P13	計算機化学を用いたムライト結晶の構造異常の研究 ○鈴木泰地、長島啓、中嶋義晴、内田希(長岡技科大)
1P14	天然ゴムの生合成過程 ○慶野達也、秋山和輝、河原成元、内田希(長岡技科大)
1P15	鑄造におけるニューラルネットワークの活用 ○小林文晃、秋山和輝、菅野利猛、内田希(長岡技科大)
1P16	白金触媒による二酸化炭素還元 of 計算機化学を用いた研究 ○木下遥貴、桜田誠志郎、内田希(長岡技科大)
1P17	完全数値基底を用いる分子軌道法の構築(1) ○中川 克己 (MO BASICS Research)
1P18	Si-H 結合活性化によるジシロキサン生成反応に関する量子化学的研究 ○八日市屋朋子、鷹野景子(お茶大)
1P19	MOPAC2016 による分子間相互作用、触媒反応等のシミュレーション解析と評価 ○染川賢一、上田岳彦(鹿児島大大学院理工)

### ■15:30 - 16:30 口頭発表 20分 3件

座長 4 : 北幸海 (横浜市大)

1007	[Co(dmsO)6](BPh4)2 錯体の結晶相転移と配座解析 ○崎山博史、三橋了爾、御厨正博、脇克志(山形大理、関学大理工)
1008	FMO 計算-粗視化シミュレーション連携手法の開発と応用 ○奥脇 弘次(立教大理)、土居 英男(産総研)、望月 祐志(立教大理、東大生研)、小沢 拓(JSOL)、泰岡 顕治(慶大理工)、福澤 薫(星薬科大、東大生研)
1009	PdRu 合金の安定性に関する理論的研究 ○難波 優輔、古山 通久(九州大稲盛セ)

■16:30 – 17:10 口頭発表 20分 2件

座長 5 : 野村泰志 (信州大)

1010	GAP システムを用いるベンゼン異性体の数え上げの簡略化 ○藤田眞作(湘南数化研)
1011	Isospectral graph を生み出す dormant の発見 (III) ○細矢治夫(お茶大・名誉)

■17:30 懇親会 大学生協にて

2 日目 6 月 8 日(金)

■09:30 受付開始

■10:00 – 11:20 口頭発表 20分 4件

座長 6 : 福澤薫 (星薬科大)

2001	光受容タンパク質の機構解明に向けた分割統治型時間依存密度汎関数強束縛法の開発 ○河本奈々(早大先進理工)、吉川武司(早大先進理工)、小野純一(早大理工総研)、中井浩巳(早大先進理工、早大理工総研、京大 ESICB)
2002	分子動力学法を活用したダイヤモンドライクカーボン膜のグラファイト化が水潤滑における低摩擦特性に与えるメカニズムの解明 ○張静、王楊、許競翔、大谷優介、尾澤伸樹、久保百司(東北大 金研)
2003	化学的特性を考慮した粗視化分子動力学シミュレータの開発とボトルブラシ型ポリマーの摩擦への応用 ○上原周一、劉仲民、許競翔、大谷優介、尾澤伸樹、久保百司(東北大金研)
2004	表面反応の領域選択性の反応性指標としての振電相互作用密度 ○大田 航 <sup>[1]</sup> 小島 弥朗 <sup>[1]</sup> 佐藤 徹 <sup>[2,3]</sup> ([1]京都大学大学院工学研究科, [2]京都大学福井謙一記念研究センター,[3] 京大 ESICB)

■11:20 – 11:50 総会(30分)

司会: 後藤仁志

■11:50 – 12:30 表彰 10 分および受賞講演 30 分

座長 7 : 長嶋雲兵 (FOCUS)

2A01	学会賞	量子多成分系分子理論の開発と応用 ○立川仁典 (横浜市大 生命ナノ・データサイエンス)
------	-----	--

■12:30 – 14:00 昼休み

■14:00 – 15:30 ポスター(18 件)

2P01	FMO 法によるエストロゲン受容体のリガンド結合特異性解析 ○関祐哉、加藤司、古石誉之、福澤薫、米持悦生(星薬科大)
2P02	ポテンシャルエネルギー曲面の交差構造に関する理論的研究 ○稲森真由 (早大先進理工)、五十幡康弘 (早大理工総研)、王祺 (早大理工総研)、中井浩巳 (早大先進理工、早大理工総研、京大 ESICB)
2P03	分子モデル表示による書籍紹介の試み ○本間善夫(ecosci.jp)
2P04	ルテニウムビニリデン錯体の結晶二色性に関する量子化学的研究 ○濱野藍、坂尻浩祐、出口和樹、桑原拓也、石井洋一、鷹野景子(お茶大、中央大)
2P05	放射性 Cs の再拡散: 浪江町の山火事 ○青山智夫、小原裕二、神部順子(江戸川大)
2P06	(Na <sub>2</sub> O、CaO)・2SiO <sub>2</sub> 融体/ガラス系の分子動力学計算 ○河村雄行 (東工大)
2P07	akermanite-gehlenite 固溶体の分子動力学法に適用する原子間相互作用の検討 ○武田都、澤口直哉、佐々木真(室蘭工業大学 大学院)
2P08	深層学習による QSAR に用いる分子データセットの解析 ○加藤凱生、濱田信次、後藤仁志(豊技大)
2P09	メタダイナミクスに基づく重み付きヒストグラム解析法の開発とシクロファン異性化反応への応用 ○小野 純一 <sup>1</sup> 、西村 好史 <sup>2</sup> 、黄 毅聰 <sup>1</sup> 、鹿又 宣弘 <sup>1</sup> 、中井 浩巳 <sup>1-3</sup> (早大先進理工 1、早大理工総研 2、京大 ESICB 3)
2P10	化学教育への Mathematica の活用事例 ○山田祐理(東電大理工)
2P11	分子動力学シミュレーションを用いた単層カーボンナノチューブ内包多環芳香族炭化水素分子の局所構造の評価

	○永井涼、片岡 洋右、緒方 啓典 (法政大学)
2P12	双安定性ロタキサンのスイッチングシミュレーション ○林慶浩、大木竜勝、檜脇悠輔、川内進(東工大)
2P13	○ニトリルオキシドの異性化機構の理論的解明 石山 裕輝、林 慶浩、川内 進 (東工大 川内研)
2P14	イルソグラジン-マレイン酸結晶構造の予測 坂田千夏、○藤田瑛里子、梅田大貴、郡司美穂子、古石誉之、福澤薫、米持悦生(星薬科大)
2P15	MD 計算を用いたシクロデキストリンと難溶性薬物との包接挙動の解明 ○藤崎彩花、郡司美穂子、古石誉之、福澤薫、米持悦生(星薬科大)
2P16	アルカリハライド熔融塩の分子動力学計算のための原子パラメータの決定 ○関口裕真(東大)魚住浩一(電中研)、河村雄行(東工大)、寺井隆幸(東大)
2P17	シクロフェニレン骨格の置換基の電子伝達機構について ○藤山亮治、原田夢月(高知大理)
2P18	逆非平衡分子動力学法を用いた液晶分子 5CB の熱伝導率計算 ○檜脇悠輔、大木竜勝、林慶浩、川内進(東工大物質理工)

### ■ 15:30 – 16:00 吉田賞受賞講演

座長 8 : 後藤仁志 (豊橋技科大)

2A02	吉田賞 (論文賞)	計算としての化学反応によるゲルのロコモーション ○吉田彩乃、櫻沢繁(公立はこだて未来大学)
------	--------------	--

### ■ 16:00 – 17:00 口頭発表 20分 3件

座長 9 : 小野純一 (早稲田大)

2005	CD44 におけるヒアルロン酸結合機構の解明 ○リントウルオト正美(京府大)、堀岡洋太(京府大)、本郷紗記(京府大)、リントウルオトユハミカエル(京大)
2006	高精度非調和振動状態解析に向けた backflow 相関因子の開発 ○石井桐子 <sup>[1]</sup> 、立川仁典 <sup>[1,2]</sup> 、北幸海 <sup>[1]</sup> ([1]横浜市大院生命ナノ、[2]横浜市大 DS センター)
2007	アセトアルデヒド分子への陽電子束縛に対する H/D 同位体効果の理論的解析 ○土肥海人 <sup>[1]</sup> 、立川仁典 <sup>[1,2]</sup> 、北幸海 <sup>[1]</sup>

([1]横浜市大院生命ナノ、[2]横浜市大 DS センター)

■17:00 終了