

## 日本コンピュータ化学会 2019 年春季年会プログラム

4 月 09 日 決定版

- 会期 2019 年 6 月 6 日(木)～7 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

## 1 日目 6 月 6 日(木)

## ■09:10 受付開始

## ■9:40 - 11:00 口頭発表 20 分 4 件


座長 1: 渡辺寿雄(東工大)

|      |   |
|------|---|
| 1001 | 相対論的量子化学計算プログラム RAQET の公開<br>○五十幡康弘(早大理工総研)、吉川武司(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) |
| 1002 | 核電子相関を考慮した新規多成分系分子軌道理論 MACCHA 法の開発<br>○兼松佑典、鷹野優(広島市大院情報)、立川仁典(横浜市大院生命ナノ)              |
| 1003 | マシンラーニングによる配座解析の時間短縮<br>○崎山博史(山形大理)   |
| 1004 | 粒子法による量子波束の数値解析<br>○廣野 史明(法政大)、岩沢 美佐子(法政大)、狩野 覚(法政大)、善甫 康成(法政大)                       |

## ■11:10-11:40 展示会プレビュー 各社 5 分 n 社

座長 2: 田島澄恵(株式会社ヒューリンクス)

企業展示

|      |              |  |
|------|--------------|--|
| CX01 | 株式会社クロスアビリティ |  |
|------|--------------|--|

|      |                   |  |
|------|-------------------|--|
| CX02 | コンフレックス株式会社       |  |
| CX03 | アプライド株式会社         |  |
| CX04 | 株式会社モルシス          |  |
| CX05 | 東京工業大学 学術国際情報センター |  |

■11:40-13:30 昼休み

■13:30 - 15:00 ポスター発表(18件)

|      |   |
|------|---|
| 1P01 | Blueqat による量子コンピュータでの量子化学計算の試み<br>○加藤拓己(MDR), 奥脇弘次(立教大理), 山崎清仁(OpenQL プロジェクト), 望月祐志(立教大理, 東大生産研), 湊雄一郎(MDR)               |
| 1P02 | 機械学習によるテキスト処理ツールの開発と応用<br>亙理結香(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)  |
| 1P03 | ペプチド対応のフラグメント分割ツールの開発<br>○吉田杏平(立教大理), 加藤幸一郎(みずほ情報総研), 奥脇弘次(立教大理), 阿部鷹也(立教大理), 望月祐志(立教大理, 東大生産研), 福澤薫(星薬科大, 東大生産研)         |
| 1P04 | Scratch を経由する機械学習教材の開発の試み<br>○満野仁美(立教大理), 奥脇弘次(立教大理), 伊藤雅仁(立教大理), 望月祐志(立教大理, 東大生産研)                                       |
| 1P05 | 転移学習と生成ネットワークの試行事例<br>○伊藤雅仁(立教大), 篠嶋友也(立教大), 奥脇弘次(立教大), 望月祐志(立教大, 東大生産研), 秋永宜伸((株)ヴァイナス), 小杉範仁((株)ヴァイナス)                  |
| 1P06 | 局在化自然摂動軌道を用いた NMR 化学シフトの解析<br>○宮本優弥, 波田雅彦(首都大院理)  |
| 1P07 | 完全数値基底を用いる分子軌道法の構築(2)<br>○中川 克己(MO BASICS Research)   |
| 1P08 | 分子内水素結合 7 員環分子の ESIPT 発光に関する計算化学研究<br>○重光保博(長崎工技セ), 務台俊樹(東大生研)  |
| 1P09 | 3-ヒドロキシ-2-ピリドン等の塩基触媒下, 立体選択的 Diels-Alder(DA)反応機構の分子軌道法シミュレーションによる解析と展開<br>○染川賢一, 上田岳彦, 吉留俊史, 石川岳志, 錦織寿, 岡村浩昭(鹿児島大名誉, 鹿児島) |

|      |   |
|------|---|
|      | 大院理工化生、鹿児島大教育、鹿児島大院理工生化)  |
| 1P10 | 一般固有値問題の固有値が指定区間にあるすべての固有対の近似をフィルタを用いて構成する解法について<br>○村上弘(首都大学東京)  |
| 1P11 | インフォマティクス手法を活用した結合エネルギー密度解析の開発<br>○中村海里(早大先進理工)、清野淳司(早大理工総研、JST さきがけ)、中井浩巳(早大先進理工、早大理工総研、京大 ESICB)                                  |
| 1P12 | カチオン性イリジウム触媒を用いた均一系触媒反応における相対論効果<br>○高島千波(早大先進理工)、五十幡康弘(早大理工総研)、栗田久樹(早大先進理工)、高野秀明(早大先進理工)、柴田高範(早大先進理工)、中井浩巳(早大先進理工、早大理工総研、京大 ESICB) |
| 1P13 | 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(2)<br>○藤山亮治、井上あゆみ(高知大理)   |
| 1P14 | 分子動力学法を用いた高炉水砕スラグの構造解析<br>○武田都、澤口直哉(室蘭工業大学大学院)  |
| 1P15 | 分子動力学法を用いた水/雲母界面における水及びKイオンの挙動解析<br>○星野 圭祐, 澤口 直哉(室蘭工業大学 大学院)   |
| 1P16 | 分子軌道法を用いた多層グラフェン間への水素吸蔵特性の研究<br>○小林丈晃、菅谷大智、斎藤秀俊、内田 希(長岡技科大)   |
| 1P17 | 計算機化学を用いたムライト結晶の異常構造特性の研究<br>鈴木泰地、長嶋 啓、○内田 希(長岡技科大)   |
| 1P18 | ルテニウム錯体における隣接アゴスティック相互作用の理論的解析<br>○大橋佐鳳子、山中聡美、鷹野景子(お茶大院人間文化創成科学)  |
| 1P19 | 配座 DB を用いたグラフ畳み込みニューラルネットワークによる構造物性相関<br>○立花尚登, 井上雅都, 金子晶夫, 加藤凱生, 濱田信次, 後藤仁志  |

■15:10-16:10 口頭発表 20分3件

座長 3: 岩沢 美佐子 (法政大),

|      |  |
|------|--|
| 1O05 | 分子動力学法によるアルゴンの気・液平衡密度<br>○片岡洋右(法大生命)   |
| 1O06 | 分子動力学法による SN2 反応の理論研究—化学反応はいかにして起こるか—<br>○松原世明(神奈川大学理)   |
| 1O07 | 分子動力学法とニューラルネットワーク法を用いた $\text{Li}_7\text{La}_3\text{Zr}_2-x\text{Nb}_x\text{O}_{12}$ 粒界リチウムイオン伝導解析<br>○椎葉寛将(信大工), 是津信行(信大工, 信大先鋭材料研), 古山通久(NIMS, 信大先鋭材料研, 広大院工), 手嶋勝弥(信大先鋭材料研, 信大工) |

■16:20-17:40 口頭発表 20分4件

座長 4: 古山通久 (NIMS)

|      |   |
|------|---|
| 1008 | 触媒担体の格子酸素が関わる NO-CO 反応の理論的解析<br>○藤代天佑、大越昌樹、中井浩巳(早大先進理工、京大 ESICB、早大理工総研)   |
| 1009 | 珪酸塩融体中のソレー効果の支配的要素<br>○則竹史哉(山梨大学大学院)  |
| 1010 | 散逸動力学シミュレーションによるアミロイドβオリゴマーの自己組織化の検討<br>○河合良子(京大医)、千葉峻太郎(理研 MIH)、金田亮(理研 RCH)、奥脇弘次(立教大理)、土居英男(産総研 CD-FMat)、望月祐志(立教大理、東大生研)、奥野恭史(京大医、理研 MIH、理研 RCH) |
| 1011 | アンモニウムイオン水複合体の構造に対する量子効果<br>○桑畑和明、立川仁典(横浜市大生命ナノ)  |

■18:10 懇親会 大学生協にて

2日目 6月7日(金)

■09:30 受付開始

■10:00 - 11:00 口頭発表 20分 3件

座長 5: 則竹史哉(山梨大学大学院)

|      |              |   |
|------|--------------|---|
| 2A01 | 吉田賞<br>(論文賞) | FMO-DPD シミュレーションのための有効相互作用パラメータ算出の自動化フレームワーク<br>○奥脇弘次(立教大理), 土居英男(産総研 CD-FMat), 望月祐志(立教大理、東大生研) |
|------|--------------|---|

|      |  |  |
|------|--|--|
| 2001 | FMO-DPD シミュレーションの応用展開<br>○奥脇弘次*(立教大理), 土屋裕大朗(立教大理), 新庄永治(星薬大薬), 土居英男(産総研 CD-FMat), 望月祐志(立教大理, 東大生研), 福澤薫(星薬大薬, 東大生研), 泰岡顕治(慶大理工)                                     |  |
| 2002 | ABINIT-MP Open シリーズの最新の開発状況について○望月祐志(立教大理, 東大生産研), 秋永宜伸(ヴァイナス), 坂倉耕太(NEC), 渡邊啓正(HPC システムズ), 加藤幸一郎(みずほ情報総研), 渡辺尚貴(みずほ情報総研), 奥脇弘次(立教大理), 中野達也(国立衛研), 福澤薫(星薬科大薬, 東大生産研) |  |

■11:10 - 11:40 総会(30分)

司会: 後藤仁志

■11:40 - 12:15 表彰 5分および受賞講演 30分

座長 6: 古山通久 (NIMS)

|      |     |                               |
|------|-----|-------------------------------|
| 2A02 | 学会賞 | 計算機化学、食い散らかし<br>○内田 希 (長岡技科大) |
|------|-----|-------------------------------|

■12:15-13:30 昼休み

■13:30-15:00 ポスター(18件)

|      |   |  |
|------|---|--|
| 2P01 | FMO 計算を用いた JAK 阻害剤のサブタイプ選択性の評価<br>○半田佑磨、町田大樹、田中成典、古石誉之、福澤薫、米持悦生(星薬大、神戸大院) |  |
| 2P02 | エストロゲン様化合物におけるサブタイプ選択性の解析<br>○関祐哉、加藤司、安崎聡、田中成典、古石誉之、福澤薫、米持悦生(星薬大、神戸大院)    |  |
| 2P03 | COMT 賦活化における基質認識機構の理論的解析<br>○山川和也 1、飯島洋 2、沖山佳生 3、古石誉之 1、福澤薫 1、米持悦生 1      |  |
| 2P04 | 実験と計算によるイルソグラジン-マレイン酸の結晶構造の予測深層学習を用いた有機化合物の生成熱推算                          |  |

|      |  |
|------|--|
|      | ○坂田千夏、岡本有史、梅田大貴、古石誉之、福澤薫、米持悦生(星薬大)   |
| 2P05 | ジソピラミドーフタル酸の複合体結晶の結晶構造予測<br>○岡本有史、古石誉之、福澤薫、米持悦生(星薬科大)  |
| 2P06 | 全原子分子動力学法によるファージウイルスの熱伝導率異方性評価<br>○椎野良介、佐々木遼馬、林慶浩、澤田敏樹、芹澤武、川内進(東工大物質理工)  |
| 2P07 | Pd 触媒を用いたアリルウレタンの分子内ヒドロアミノ化反応機構の理論的解明<br>○河田悠太、林慶浩、高田十志和、川内進(東工大物質理工)  |
| 2P08 | イミダゾール誘導体を触媒とする N-メチルアミド化反応機構の理論的解明<br>○柴田裕介、林慶浩、小竹佑磨、中村浩之、布施新一郎、川内進(東工大)  |
| 2P09 | 分子動力学シミュレーションによる抗 HIV 抗体 PG16 の CDR-H3 の変異における中和能への影響の解析<br>○近藤寛子、桐林遼、田邊直己、黒田大佑、齋藤徹、香田次郎、釘宮章光、中野靖久、津本浩平、鷹野優(北見工大、広島市大、東大)                      |
| 2P10 | 触媒表面反応機構の自動生成アルゴリズムの検討<br>○荒谷壮人、小倉鉄平(関西学院大)  |
| 2P11 | 機械学習を用いた Mizoroki-Heck 反応における均一系 Pd 触媒の配位子設計<br>○新谷佳久(早大先進理工)、藤波美起登(早大先進理工)、松下薫(早大先進理工)、武藤慶(早大先進理工)、山口潤一郎(早大先進理工)、中井浩巳(早大先進理工、早大理工総研、京大 ESICB) |
| 2P12 | 分子動力学シミュレーションによる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一次元積層構造の研究<br>○永井 涼(法政大院理工学研究科)、緒方 敬典(法政大生命科学部)、片岡 洋右(法政大情報メディア教育研究センター)                             |
| 2P13 | 高精度量子化学計算に基づく分子間ポテンシャルに関する考察<br>○濱田信次、宮下真人、都築誠二、下位幸弘、小畑繁昭、中山尚史、後藤仁志(豊橋技科大、ADMAT、産総研、コンプレックス)   |
| 2P14 | MEL 型ゼオライトの分子動力学シミュレーション2<br>○大川政志、杉山弥(沼津高専)   |
| 2P15 | クリストバライトの相転移の分子動力学計算一欠陥・不純物の影響<br>○河村 雄行(東工大)  |
| 2P16 | グラフ理論を用いた金クラスターイオンの安定性の考察<br>○関根理香、古田笑理、岡倉雅弥   |
| 2P17 | 白金触媒による二酸化炭素還元分子軌道法を用いた研究<br>○木下遙貴、桜田誠志朗、梅田 実、内田 希(長岡技科大)  |
| 2P18 | ニューラルネットワークを用いた鋳造物打音検査法の開発<br>○篠原美月*、岩見祐貴**、内田 希* (*長岡技科大、**木村鋳造所)   |

■15:10-16:10 口頭発表 20分 3件

奨学賞エントリー (1)

座長 7: 松原世明(神奈川大学理)

|      |   |
|------|---|
| 2003 | FMO 計算を用いた天然ゴム中タンパク質とイソプレン鎖の末端モデルとの相互作用解析<br>○阿部鷹也(立教大理), 奥脇弘次(立教大理), 福澤薫(星薬科大, 東大生産研), 望月祐志(立教大理, 東大生産研), 佐藤弘一(ブリヂストン) |
| 2004 | FCC 型 FeNiCr 系ハイエントロピー合金の応力腐食割れプロセスの分子動力学シミュレーション<br>○劉暢、陳茜、王楊、宮崎成正、大谷優介、尾澤伸樹、久保百司(東北大 金研)                              |
| 2005 | 特異な反応座標下での QM/MM metadynamics 計算で明らかになった Chitinase A の加水分解機構とその反応中間体<br>○飯野翼、櫻井実、古田忠臣(東工大生命理工)                          |

■16:20-17:20 口頭発表 20分 3件

奨学賞エントリー (2)

座長 8: 河東田 道夫(RIST)

|      |   |
|------|---|
| 2006 | 分子動力学法を用いたフォルステライト—水界面における水分子の解離メカニズムの解析<br>○久保文音、西澤隼哉、深澤倫子(明大院理工)                      |
| 2007 | アルミナ/カーボンナノチューブ複合材料における変形挙動の分子動力学解析<br>○蘇怡心、王楊、宮崎成正、大谷優介、尾澤伸樹、久保百司(東北大)                 |
| 2008 | ペロブスカイト太陽電池材料におけるポーラロン形成の量子的分子動力学シミュレーション<br>○浦谷 浩輝、周 建斌、中井 浩巳(早大院先進理工、早大理工総研、京大 ESICB) |

■17:30 終了