

日本コンピュータ化学会 2023 年春季年会 プログラム

5 月 20 日 決定版

- 会期

2023 年 6 月 1 日 (木) ~ 2 日 (金)

- 会場

東京工業大学 大岡山 9 号館 2 階

- 主催

日本コンピュータ化学会 (SCCJ)

- 協賛 (予定)

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学会、CBI 学会、理論化学会

1 日目 6 月 1 日 (木)

■ 9:20 受付開始 (Zoom 開始)

■ 9:50 - 10:50 口頭発表 1 (20 分 3 件)

座長: 澤口 直哉 (室蘭工業大)

1001	珪酸塩液体中に於けるネットワーク構成元素の拡散機構について ○則竹史哉 (山梨大学大学院)
1002	混合有機溶媒中における有機修飾ナノ粒子の分散メカニズムの解明に向けた有機修飾ナノ粒子/溶媒/有機修飾ナノ粒子界面構造の粗視化分子動力学シミュレーション解析 ○城島浩太 (東北大)、浅野優太 (東北大)、大谷優介 (東北大)、尾澤伸樹 (東北大)、久保百司 (東北大)
1003	気相と液相の中間密度から出発した定温定圧分子動力学によるアルゴンの沸点 ○片岡洋右 (法大生命)

■ 10:50 - 11:00 休憩

■ 11:00 - 11:30 展示会プレビュー (各社5分 4社)

座長：五十幡 康弘 (豊橋技科大)

CX01	コンフレックス株式会社	
CX02	テガラ株式会社	
CX03	株式会社クロスアビリティ	
CX04	東京工業大学 学術国際情報センター	
CX06	ビジュアルテクノロジー株式会社	
CX07	株式会社日立製作所	

その他展示企業

CX05	株式会社モルシス	
------	----------	--

■ 11:30 - 13:30 昼休み

■ 13:30 - 15:00 ポスター発表1

1P01	天然ゴムの生合成過程における動的挙動の研究 ○田村洋介、池原瑞生、内田 希（長岡技科大）
1P02	計算機化学を用いた水素吸蔵による多層グラフェン層への影響解析 ○根本晃佑、佐々木天伸、内田 希（長岡技科大）
1P03	汎用原子レベルシミュレータ Matlantis を用いた Ir 錯体[2+2]環化付加反応の検証 ○大川 優子（東邦大薬）、進 千晴（東邦大薬）、吉川 武司（東邦大薬）、坂田 健（東邦大薬）、中嶋 裕也（ENEOS 株式会社）
1P04	テトラヒドロフラン溶媒とグリニャール反応剤を用いるニトリルへの塩化亜鉛触媒のアルキル付加反応の量子化学的検討 ○梅澤 美帆（東邦大学）、椿 紗穂里（東邦大学）、吉川 武司（東邦大学）、坂田 健（東邦大学）、桑野 葵咲（神戸薬科大学）、飛鳥居里穂（神戸薬科大学）、永吉 絢子（神戸薬科大学）、星原 遥花（神戸薬科大学）、平田 翼（神戸薬科大学）、波多野 学（神戸薬科大学）
1P05	ジチオフェンピリジン骨格化合物の蛍光特性に関する量子化学的検討 ○井上 篤哉（東邦大薬）、吉川 武司（東邦大薬）、坂田 健（東邦大薬）、澤野 卓大（青学大理工）、青山 海人（青学大理工）、武内 亮（青学大理工）
1P06	吸着種を考慮したナノ合金の安定配置探索手法の開発と応用 ○難波優輔、古山通久（信大）
1P07	拡張型ポリオキソタンゲストートの生成経路についての研究 ○窪田樹（神大院理）、中嶋隆人（理研）、枝和男（神大院理）、大塚利行（神大院理）
1P08	ホウケイ酸塩ガラスの分子動力学計算に適用する組成に応じた原子間相互作用の検討 ○岩浪尚輝（室工大院）、澤口直哉（室工大院）
1P09	Na ₂ O-B ₂ O ₃ 系ガラスの分子動力学計算に適用する静電相互作用の考察 ○水野凱斗（室工大大学院）、澤口直哉（室工大大学院）
1P10	分子軌道エネルギーを用いた機械学習によるエントロピーの予測 ○結城敬史、寺前裕之（城西大院理）

1P11	Investigation on Halogen Bonds in Molecular Crystals of Diphenyl Disulfide Derivatives by DFT Calculations ○Hao Wu ¹ , Hitomi Tabuchi ¹ , Qi Zhou ¹ , IsaoYoshikawa ¹ , Hirohiko Houjou ^{1,2} , Tsuyoshi Minami ¹ , (1 Institute of Industrial Science The University of Tokyo, 2 EnvironmentalScience Center The University of Tokyo)
1P12	タンパク質-リガンド複合体におけるリガンドの配座に関する研究 ○立花尚登（豊橋技科大院工）、五十幡康弘（豊橋技科大院工、豊橋技科大 IMC）、後藤仁志（豊橋技科大院工、豊橋技科大 IMC）
1P13	分子動力学伸長計算によるポリペプチド α ヘリックス一本鎖の特性解析 ○古屋秀峰（東工大物質）、伊藤隼哉（東工大物質）
1P14	拡張アンサンブル法によるアルギニンのポリグルタミンタンパク質に対する凝集阻害効果の理論的解析 ○谷本勝一、奥村久士（生命創成探究センター、分子研、総研大、計算科学研究センター）

■ 15:00 - 15:10 休憩

■ 15:10 - 16:30 口頭発表2 (20分 4件)

座長：奥脇 弘次（立教大）

1004	化学系特許中の表及びテキストからの材料知識データ抽出 ○我妻正太郎（日立製作所）、竹内理（日立製作所）
1005	シンボリック回帰の化学の諸問題への適用：外挿性の検証と反応速度論への応用 ○磯田拓哉（早大院先進理工）、高橋栞（早大院先進理工）、中野匡彦（早大理工総研、三菱ケミカルグループ）、中嶋裕也（早大理工総研）、清野淳司（早大院先進理工、早大理工総研）
1006	分子軌道エネルギーを用いた機械学習による logP の予測 ○寺前裕之（城西大・理）
1007	電子状態インフォマティクスによる天然物創薬：新規 α -glucosidase 阻害剤の探索 ○立石優輔（熊本大院自然科学）、中村登志（熊本大院自然科学）、大川和史（熊本大院自然科学）、杉本学（熊本大院自然科学、熊本大院先端科学、沼津高専グリーンアンモニア研）

■ 16:30 - 16:40 休憩

■ 16:40 - 17:40 口頭発表 3 (20分 3件)

座長：杉本 学 (熊本大)

1008	中心力場問題で非同次項を持つ2階線形常微分方程式の固有値問題の数値解法 ○石川 英明
1009	スピン反転凍結軌道解析を用いた円錐交差構造の支配因子に関する理論的研究 ○五十幡康弘 (豊橋技科大 IMC、豊橋技科大工)、吉川武司 (東邦大薬)、中井浩巳 (早大先進理工、早大理工総研)、小川賢太郎 (東邦大薬)、坂田健 (東邦大薬)
1010	多重共鳴熱活性型遅延蛍光における逆項間交差メカニズムの理論的解明 ○志津 功将、梶弘典 (京大化研)

■ 18:10 - 懇親会

2 日目 6 月 2 日 (金)

■ 9:20 受付開始 (Zoom 開始)

■ 9:50 - 10:50 口頭発表 4 (20 分 3 件)

座長：古屋 秀峰 (東工大)

2001	タンパク質に関する FMO-DPD シミュレーション用パラメータ算定と試行 ○太刀野雄介 (立教大理)、土居英男 (立教大理)、奥脇弘次 (立教大理)、平野秀典 (慶應大理工)、望月祐志 (立教大理、東大生研)
2002	機械学習を用いた FMO-DPD シミュレーション用パラメータ算定の効率化 ○松岡壯太 (立教大理)、土居英男 (立教大理)、奥脇弘次 (立教大理)、畑田峻 (立教大理)、南聡次朗 (立教大理)、栖原涼輔 (立教大理)、望月祐志 (立教大理、東大生研)
2003	ペプチドタンパク質ドッキングのための評価スコア法の開発 ○山本 妙 (豊橋技科大院工)、五十幡 康弘 (豊橋技科大院工、豊橋技科大 IMC)、後藤 仁志 (豊橋技科大院工、豊橋技科大 IMC)

■ 10:50 - 11:00 休憩

■ 11:00 - 11:30 総会・表彰 (30 分)

座長：後藤 仁志 (豊橋技科大)

■ 11:30 - 12:00 受賞講演 (30 分)

座長：後藤 仁志 (豊橋技科大)

2A01	吉田賞 (論文賞)	「特許公開公報文章からの化学物質名の抽出」 ○田中 るみ子、中山 伸一
------	--------------	--

■ 12:00 - 13:30 昼休み

■ 13:30 - 15:00 ポスター発表 2

2P01	高分子物性自動計算プログラム RadonPy を用いた熱伝導率の延伸配向特性評価 ○光武拓馬 (東工大)、石井聡子 (東工大)、古屋秀峰 (東工大)
2P02	分子軌道法を用いた [3] デンドラレン誘導体のアニオン重合の研究 ○大島直、原口和也、内田 希 (長岡技科大)

2P03	分子軌道法による桂皮酸エステル誘導体の時シリル化反応機構の解明 ○鈴木海都、岡崎太矩、内田 希（長岡技科大）
2P04	グラフ理論による金属クラスターの安定性の解析 ○関根理香、池ヶ谷春輝、大弥省吾、中村瑞希（静岡大理化）
2P05	Na ₃ YSi ₃ O ₉ , NaYSi ₂ O ₆ における Na イオン拡散の解析 ○葛西海斗（室工大院）、澤口直哉（室工大院）
2P06	水/Na ₂ O-SiO ₂ 系ガラス界面の設計手法と浸入した水分子周辺の構造解析 ○佐藤耀平（室工大大学院）、奥田昂平（室工大大学院）、澤口直哉（室工大大学院）
2P07	ケイ酸塩系低熱膨張結晶の分子動力学シミュレーション ○大垣 毅弥（室工大院）、澤口 直哉（室工大院、希土類材料研究センター）
2P08	液滴の分子動力学シミュレーション ○島菜々美（広大院先進理工）、高橋修（広大院先進理工）
2P09	DSSC に最適な有機色素探索のための機械学習アプローチ ○水野祐介、野村泰志（信州大学繊維学部）
2P10	量子化学計算と各種スペクトル情報を用いた化合物の自動同定手法の開発 ○熊谷拓海（早大院先進理工）、中嶋裕也（早大理工総研、ENEOS 株式会社）、清野淳司（早大院先進理工、早大理工総研）
2P11	量子多体系ダイナミクスシミュレータの構築 ○戸畑海研（宇都宮大院）、石田邦夫（宇都宮大）
2P12	MD+FM0 計算による β-シクロデキストリンとキラル医薬品の包接挙動の解明 ○奈良 友里衣（星薬科大学 薬学部）、古石 誉之（星薬科大学 薬学部）、奥脇 弘次（星薬科大学 薬学部）、遠藤 朋宏（東京薬科大学 薬学部）、福澤 薫（星薬科大学 薬学部、大阪大学大学院 薬学研究科）、米持 悦生（星薬科大学 薬学部）

2P13	光活性イエロータンパク質の光反応サイクルにおける trans-cis 光異性化過程の量子的分子動力学シミュレーション解析 ○石田賢亮（早大先進理工）、西村好史（早大理工総研）、中井浩巳（早大先進理工、早大理工総研）
2P14	分子動力学計算による味覚受容体タンパク質とリガンドの相互作用の解析 ○荒木貴絵、安藤耕司

■ 15:00 - 15:10 休憩

■ 15:10 - 16:10 口頭発表 5 (20分 3件)

座長：内田 希（長岡技科大）

2004	第一原理計算による微視的反応速度論と不均一触媒系への応用 ○石川 敦之（東工大）
2005	結晶構造で決まる表面終端安定性の記述子 ○日沼洋陽（産総研）、安村駿作（北大）、鳥屋尾隆（北大）、蒲池高志（福工大）、清水研一（北大）
2007	固体高分子形燃料電池アノードにおける H ₂ O ₂ 生成抑制が可能な Pt 合金ナノ粒子/酸化物構造の第一原理計算による検討 ○加納 諒也（東北大学金属材料研究所）、浅野優太（東北大学金属材料研究所）、大谷 優介（東北大学金属材料研究所）、尾澤 伸樹（東北大学未来科学技術共同研究センター、東北大学金属材料研究所）、久保百司（東北大学金属材料研究所、東北大学未来科学技術共同研究センター）

■ 16:10 - 16:20 休憩

■ 16:20 - 17:00 口頭発表 6 (20分 2件)

座長：則竹 史哉（山梨大学大学院）

2008	天然ゴム（RSS）と臭気成分の溶解度パラメータおよび分子動力学シミュレーション ○阿知良浩人（兵工技セ）
2009	ポリマーラジカルの Q-e 値の初めての算出 ○川内 進（東工大、Quemix）

■ 18:00 終了