

第 35 回 情報化学討論会

会 期：2012年10月4日（木）・5日（金）

会 場：広島大学 学士会館2階 レセプションホール（東広島キャンパス）

懇親会：学士会館1階 レストラン ラ・ボエーム

2012年10月4日（木）セッション終了後（19:10 - 20:40）

s講演: 60分（講演 + 討論）

a講演: 25分

b講演: 15分

10月4日（木）（1日目）

座長：高島 哲彦（化学情報学）

13 : 30 **1A1a** 化学空間上の目的領域内に新規構造を効率的に発生させる構造ジェネレータの開発，○三島 和晃，金子 弘昌，船津 公人（東京大学 大学院工学系研究科）

13 : 55 **1A2b** 上下限パス頻度に基づいた環構造を一つ持つ化合物の列挙法，○鈴木 政喜，永持 仁，阿久津 達也（京都大学 大学院情報学研究科）

14 : 10 **1A3b** ステレオイソグラム法によるプリズマン誘導体の立体異性，○藤田 眞作（湘南情報数理化学研究所）

14 : 25 - 14 : 35 休憩（10 分）

座長：高橋 崇宏（ケモメトリックス）

14 : 35 **1B1a** 頑健かつ高精度なモデルの構築を目指した新規近赤外スペクトル解析手法の提案，○菅間 幸司，金子 弘昌，船津 公人（東京大学 大学院工学系研究科）

15 : 00 **1B2a** 時間差分に基づくソフトセンサー手法に関する考察および時間差分間隔の検討，○金子 弘昌，船津 公人（東京大学 大学院工学系研究科）

15 : 25 - 15 : 35 休憩（10 分）

座長：堀 憲次 (計算化学)

15 : 35 **1C1a** ガラス状態における配置エントロピーの再解釈, ○高田 章 (旭硝子 中央研究所)

16 : 00 **1C2b MD** シミュレーションによるクラマース反転の微視的機構解明, ○重光 保博^{1,2}, 大賀 恭³ (¹長崎県工業技術センター, ²長崎大学 大学院工学研究科, ³大分大学 工学部)

16 : 15 **1C3b** 1-methyl-3-propylimidazolium chloride における分子間相互作用の Potts モデル, ○早瀬 修一, 伊藤 敏幸 (鳥取大学 大学院工学研究科)

16 : 30 – 16 : 40 休憩 (10 分)

座長：長谷川 清 (計算化学)

16 : 40 **1D1a** 立体配座解析に基づく α -D-ガラクトースの $\text{NMR-}^2J_{\text{CH}}$ 予測式の開発, ○松原 正陽, 後藤 仁志 (豊橋技術科学大学 大学院工学研究科)

17 : 05 **1D2b** 気相中および水溶液中におけるヘキソピラノースアノマーの安定性についての理論化学的研究, ○出射 早希子^{1,2}, 相田 美砂子^{1,2} (¹広島大学 大学院理学研究科, ²広島大学 QuLiS)

17 : 20 **1D3b** 情報化学的手法を用いた変異原性予測, ○荒川 正幹¹, 船津 公人² (¹宇部工業高等専門学校, ²東京大学 大学院工学系研究科)

17 : 35 – 17 : 45 休憩 (10 分)

座長：船津 公人

17 : 45 **1E1s** 企業で活躍できる研究開発人材の養成, ○坂田 恒昭 (塩野義製薬株式会社 Global Development Office イノベーションデザイン部門)

18 : 45 **1E2b** 情報化学討論会誕生の前後, ○細矢 治夫 (お茶の水女子大学 名誉教授)

19 : 00 – 19 : 10 準備 (10 分)

19 : 10 – 20 : 40 懇親会 (学士会館1階 レストラン ラ・ボエーム)

10月5日(金)(2日目)

座長：荒川 正幹

9:30-10:30 poster short-presentation

10:30-12:00 ポスターセッション

- P01** ビットの使用状況の分析に基づくフィンガープリントの比較研究,
○稲次 豊広¹, 中山 伸一² (¹筑波大学 大学院図書館情報メディア研究
科, ²筑波大学 図書館情報メディア系)
- P02** 計算精度保持型量子化学計算, ○小原 繁 (北海道教育大学 教育学部 釧
路校)
- P03** アセンおよびフェニレン類の芳香族性と反応性, ○市原 陵多¹, 酒井 章
吾² (¹岐阜大学 工学研究科, ²岐阜大学 工学部)
- P04** 置換基効果に基づいた Diels-Alder 反応機構のバイラジカル性, ○水谷 篤
俊¹, 酒井 章吾² (¹岐阜大学 大学院工学研究科, ²岐阜大学 工学部)
- P05** 蛋白質芳香性疎水ポケットにおけるリガンド分子内水素結合形成に関す
る計算化学的研究, ○小関 準, 合田 浩明, 広野 修一 (北里大学 薬学部)
- P06** 分子動力学を用いた Cyclooxygenase-Pyrazines Complex の構造及び水素結
合ネットワーク解析, ○吉野 龍ノ介¹, 栗原 照夫¹, 若林 英嗣¹, 太田 明
廣² (¹城西大学 大学院理学研究科, ²東京薬科大学 薬学部)
- P07** 離散変数による固有値解析, ○水上 善博 (滋賀大学 教育学部)
- P08** アダマンタン誘導体と水分子における水和の解析, ○土居 英男, 相田 美
砂子 (広島大学 大学院理学研究科)
- P09** γ -PGA の構造および物性に関する計算化学的研究, ○三枝 俊亮¹, 相
田 美砂子¹, 阿部 幸浩² (¹広島大学 大学院理学研究科, ²東洋紡績株式
会社)
- P10** コレスキー分解を用いたグリッドフリー密度汎関数計算法の研究, ○樋口

恒¹, 平野 敏行², 佐藤 文俊² (¹東京大学 大学院工学系研究科, ²東京大学 生産技術研究所)

P11 ヒ素化合物の拡散係数の pH 依存性についての理論化学的研究, ○田中 雅人, 坂光 美香, 高橋 嘉夫 (広島大学 大学院理学研究科)

P12 緩和な条件下で起こる MOM 基の脱保護反応の密度汎関数法計算, ○高橋 亮介¹, 川下 理日人^{1,2}, 前川 智弘¹, 高木 達也^{1,2}, 藤岡 弘道¹ (¹大阪大学 大学院薬学研究科, ²大阪大学 微生物病研究所)

P13 アセチルアセトン法によるルチジン誘導体の生成反応に関する理論的研究, ○寺前 裕之¹, 丸尾 容子² (¹城西大学 理学部, ²NTT環境エネルギー研究所)

P14 プロトン化水クラスターの安定構造の網羅的探索, 赤瀬 大^{1,2}, ○相田 美砂子^{1,2}, 寺前 裕之³ (¹広島大学 大学院理学研究科, ²広島大学 QuLiS, ³城西大学 理学部)

P15 核内受容体リガンド機能を有する天然物化合物についての計算化学からの検討, ○杉本 廣之¹, 吉田 智喜¹, 相田 美砂子^{1,2} (¹広島大学 QuLiS, ²広島大学 大学院理学研究科)

P16 REX+JGG を用いた CVD プロセスの反応機構自動解析システムの開発, ○高橋 崇宏, 河合 晃平, 中井 寛之, 金原 宏樹, 江間 義則 (静岡大学 工学部)

P17 実数値遺伝的アルゴリズムを用いた CVD 装置における成膜速度分布の計算方法(2), ○高橋 崇宏, 長谷部 恭弘, 稲垣 妙香, 成合 真吾, 江間 義則 (静岡大学 工学部)

P18 分子力学法における不斉性・平面性拘束について, ○神谷 健秀, 安藤 翔 (北里大学 理学部)

P19 分子表面解析による統計的粗視化四体ポテンシャルの開発, ○石飛 秀斗¹, 中川 卓也¹, 孫 林玉¹, 増田 尚之¹, 後藤 仁志¹, 相田 拓洋², 西垣 功一², (¹豊橋技術科学大学 大学院工学研究科, ²埼玉大学 大学院理工学研究科)

P20 浸透圧調整物質の特異な水素結合形成能に関する理論化学的研究, ○渡部雄大^{1,3}, 相田 美砂子^{2,3} (1 広島大学 理学部, 2 広島大学 大学院理学研究科, 3 広島大学 QuLiS)

12 : 00 – 12 : 15 総会 JCAC 賞授賞式

12 : 15 – 13 : 30 昼食 (75 分)

座長 : 重光 保博 (計算化学)

13 : 30 **2B1a** 分子の二重内殻正孔状態の理論的研究, ○高橋 修¹, 上田 潔² (¹ 広島大学 大学院理学研究科, ² 東北大学 多元物質科学研究所)

13 : 55 **2B2b** 量子化学計算データベースの構築 II, ○堀 憲次 (山口大学理工学研究科)

14 : 10 **2B3b** 硝酸アンモニウム二量体におけるプロトントランスファーの第一原理電子論, ○竹内 淨, Richard Clark, 武田 京三郎 (早稲田大学 先進理工学研究科)

14 : 25 – 14 : 35 休憩 (10 分)

座長 : 高田 章 (ケモメトリックス)

14 : 35 **2C1a** 分子の電荷情報に基づく統計的共沸予測モデルの開発, ○金 泰亨, 金子 弘昌, 船津 公人 (東京大学 大学院工学系研究科)

15 : 00 **2C2a** 効率的な材料設計のためのデータ特性を踏まえた戦略的パラメータ探索手法の開発, ○岸尾 拓弥, 金子 弘昌, 船津 公人 (東京大学 大学院工学系研究科)

15 : 25 – 15 : 35 休憩 (10 分)

座長 : 奥野 恭史

15 : 35 **2D1s** 「京」を利用したインシリコ創薬基盤を目指して, ○木戸 善之 (理化学研究所 HPCI 計算生命科学推進プログラム)

16 : 35 – 16 : 45 ポスター賞授賞式