

2024 年春季年会プログラム

- 会期

2024 年 6 月 6 日 (木) ~ 7 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 6 日 (木)

■ 9:10 受付開始 (Zoom 開始)

■ 9:40 - 10:40 口頭発表 1 (20 分 3 件)

座長：清野 淳司(早稲田大)

1001	類似の立体配座をとる分子骨格生成手法の開発 ○松永 幹太(奈良先端大), 宮尾 知幸(奈良先端大 DSC)
1003	分子シミュレーションを用いたポリスチレン解重合メカニズムの解明 ○三枝 俊亮(旭化成)
1004	水の密度異常に関する二状態仮説の定量的考察 ○則竹 史哉(山梨大院)

■ 10:40 - 10:50 休憩

■ 10:50 - 11:20 受賞講演 (30分)

座長：山下 晃一(横浜市大)

1A01	学会賞	有機薄膜太陽電池界面における電荷移動型エキシトンの解離と動的過程 ○村岡 梓(日本女子大学 理学部 数物情報科学科)
------	-----	---

■ 11:20 - 12:00 展示会プレビュー (各社 10分 4社)

座長：五十幡 康弘(豊橋技科大)

展示会プレビュー企業

CX01	テガラ株式会社	 研究開発を加速するお手伝い
CX02	株式会社日立製作所	
CX03	コンフレックス株式会社	
CX04	東京工業大学 学術国際情報センター	
CX05	ビジュアルテクノロジー株式会社	
CX07	株式会社エイゾス	

その他展示企業

CX06	株式会社モルシス	
------	----------	--

■ 12:00 - 13:00 昼休み

■ 13:00 - 14:50 ポスター発表 1

1P01	<p>量子モンテカルロ法を用いたフッ素分子二価アニオンと陽電子の複合体に関する理論的解析 ○沼田 健太郎(横浜市大・生命ナノ), 吉田 大輔(理化学研究所・仁科加速器科学研究センター), 立川 仁典(横浜市大・生命ナノ), 北 幸海(横浜市大・生命ナノ)</p>
1P02	<p>水素結合型誘導電体の相転移における H/D 同位体効果の理論的解析 ○石井 裕(横浜市立大学大学院 生命ナノシステム科学研究科), 桑畑 和明(横浜市立大学大学院 生命ナノシステム科学研究科), 島崎 智美(横浜市立大学大学院 生命ナノシステム科学研究科), 立川 仁典(横浜市立大学大学院 生命ナノシステム科学研究科)</p>
1P03	<p>経路積分分子動力学法による分子内水素結合を介した六員環構造に対する原子核量子効果の解析 ○西川 琴美(岐阜大), 田中 輝(岐阜大), 桑畑 和明(横浜市大), 立川 仁典(横浜市大), 宇田川 太郎(岐阜大)</p>
1P04	<p>炭素クラスター負イオン C₆⁻と C₆H⁻の振電構造に関する理論的研究 ○高見 哲理(京大福井セ、京大院工), 春田 直毅(京大福井セ、京大院工), 加藤 立久(京大福井セ), 佐藤 徹(京大福井セ、京大院工)</p>
1P05	<p>Ni 触媒を用いた不斉プロパルギル位置換反応の反応機構解明 ○末廣 七望(東邦大薬), 吉川 武司(東邦大薬), 坂田 健(東邦大薬)</p>
1P06	<p>ルテニウム錯体を用いた触媒的アンモニア酸化反応に関する量子化学的研究: エクアトリアル・アキシャル位配位子に対する検討 ○金澤 菜穂美(東邦大薬), 矢野 資(東邦大薬), 吉川 武司(東邦大薬), 坂田 健(東邦大薬), 西林 仁昭(東大院工)</p>
1P07	<p>リン酸触媒によるエステル化反応の量子化学的検討 ○前川原 大貴(東邦大学, MI-6 株式会社), 吉川 武司(東邦大学), 坂田 健(東邦大学)</p>
1P08	<p>有限温度法における電子エネルギーの原子分割 ○金子 ちひろ(東邦大薬), 吉川 武司(東邦大薬), 坂田 健(東邦大薬)</p>

1P09	DFT と MD による環境汚染物質の溶解性推算 ○藤澤 雅夫(近畿大生物理工), 大波多 友規(福岡大薬), 堤 広之(福岡大薬), 池田浩人(福岡大薬)
1P10	分極率を用いた分割統治型非局所励起状態計算における励起配置解析手法 ○西村龍星(早大院先進理工), 吉川武司(東邦大薬), 坂田健(東邦大薬), 中井浩巳(早大院先進理工, 早大理工総研)
1P11	一、二、三次元結晶の固有値分布 ○関根理香(静大理), 齊藤慧(静大理)
1P12	非フラーレン型有機薄膜太陽電池材料新規 NTz 系アクセプター分子の電子状態計算 ○蘭 暖佳(日女大院・理), 陣内 青萌(大阪大・産業科学研), 家 裕隆(大阪大・産業科学研), 村岡 梓(日女大院・理)
1P13	第一原理計算を用いた SnGe ダブルペロブスカイト型太陽電池の欠陥に関する理論的研究 ○大竹 真愛(日女大院), 大森 鈴音(日女大院), 金子 正徳(横浜市大院), Giacomo Giorgi(The Univ. of Perugia), 山下 晃一(横浜市大院), 村岡 梓(日女大院)
1P14	分子のひずみに着目した有機 K4 格子の設計 ○吉田 瑠(分子研、総研大), 杉山 晴紀(CROSS), 瀬川 泰知(分子研、総研大)
1P15	すべて縮環した三次元 π 共役フタロシアニン COF の設計と合成研究 ○渡邊 幸佑(分子研、総研大), 杉山 晴紀(CROSS), 瀬川 泰知(分子研、総研大)

■ 14:50 - 15:00 休憩

■ 15:00 - 16:40 口頭発表 2 (20 分 5 件)

座長：久間 馨(信州大)

1005	自己集合性ナノキューブにおけるメチル基の数が安定性及び内包速度に及ぼす影響の解析 ○村田 萌(横浜市大院生命ナノ), 小林 理(横浜市大院生命ナノ), 平岡 秀一(東大院総合文化), 島崎 智実(横浜市大院生命ナノ), 立川 仁典(横浜市大院生命ナノ)
1006	第 Xa 因子阻害薬の MM-MD/FMO 連携による相互作用解析 ○芳根 僚平(立教大理), 平野 秀典(慶應大理工), 土居 英男(立教大理), 北原 駿(立教大理), 秋澤 和輝(立教大理), 奥脇 弘次(立教大理, JSOL), 山本 詠士(慶應大理工), 泰岡 顕治(慶應大理工), 望月 祐志(立教大理, 東大生研)
1007	MD/FMO 連携による PPAR- γ に結合するチアゾリジン系リガンドの相互作用解析 ○新井 大貴(立教大理), 北原 駿(立教大理), 土居 英男(立教大理), 奥脇 弘次(立教大理, JSOL), 平野 秀典(慶應大理工), 山本 詠士(慶應大理工), 泰岡 顕治(慶應大理工), 海東 和麻(名大情報), 山西 芳裕(名大情報), 望月 祐志(立教大理, 東大生研)
1008	機械学習を用いた化合物の生物活性予測システムの開発：抗がん活性への適用 ○金子 武史(早大先進理工), 中嶋 裕也(早大理工総研), 町田 光史(早大先進理工), 神平 梨絵(早大先進理工), 中尾 洋一(早大先進理工・早大理工総研), 清野 淳司(早大先進理工・早大理工総研)
1009	高い円偏光発光特性を有する oxaza[7]dehydrohelicene 誘導体の機械学習を用いた探索(2)：S1 安定構造の計算と学習に基づく探索 ○藤波 美起登(早大), 藤原 正也(早大), Mohamed S. H. Salem(阪大, Suez Canal Univ.), 滝澤 忍(阪大), 中井 浩巳(早大)

■ 16:40 - 16:50 休憩

■ 16:50 - 18:10 口頭発表 3 (20分 4件)

座長：福島 省吾(東北大)

1010	ギブズ回転と誤差逆伝播法を用いた SCF 収束法の開発 ○大島 玲生(早大院先進理工), 中井 浩巳(早大院先進理工、早大理工総研)
1011	高压氷相転移に対する量子効果の影響 ○桑畑 和明(横浜市大), 立川 仁典(横浜市大)
1012	BZ 反応を利用した物理レザバー計算による時系列予測および音声認識 ○都城 宏治(はこだて未来大大学院), 香取 勇一(はこだて未来大), 田中 吉太郎(はこだて未来大), 高木 清二(はこだて未来大), 櫻沢 繁(はこだて未来大)
1013	ナノリアクター分子動力学法の熱力学に関する理論的考察 ○中井 浩巳(早大先進理工、早大理工総研), 西村 好史(早大理工総研)

■ 18:10 - 懇親会

2日目 6月7日 (金)

■ 8:50 受付開始 (Zoom 開始)

■ 9:20 - 10:40 口頭発表 4 (20分 4件)

座長：則竹 史哉(山梨大)

2001	Machine Learning Modeling of Protein Adsorption Amount on Well-Defined Polymer Interfaces ○SU SHIWEI(東大), 増田 造(東大), 高井 まどか(東大)
2002	実時間 TDDFT の時系列データに関する特異スペクトル解析 ○谷 直樹(法政大), 善甫 康成(法政大)
2003	キサントンにおける速い内部転換と系間交差の競合 ○在間 嵩朗(京大福井セ、京大院工), 大田 航(京大福井セ、京大院工), 加藤 立久(京大福井セ), 佐藤 徹(京大福井セ、京大院工)
2004	分子軌道エネルギーを説明変数とした機械学習による薬効予測 ○寺前 裕之(城西大理), 三浦 優太(城西大理), 色摩 光一(城西大薬), 玄 美燕(城西大薬), 高山 淳(城西大薬), 岡崎 真理(城西大薬), 坂本 武史(城西大薬)

■ 10:40 - 10:50 休憩

■ 10:50 - 11:20 受賞講演 (30分)

座長：川内 進(株式会社 Quemix)

2A01	吉田賞 (論文賞)	多元素材料の熱力学的安定配置探索のための Wang-Landau アルゴリズムの実装とナノ合金への応用 ○難波 優輔(信州大学先鋭材料研究所)、古山通久
------	--------------	---

■ 11:20 - 11:50 総会・表彰 (30分)

座長：後藤 仁志(豊橋技術科学大学)

■ 11:50 - 13:00 昼休み

■ 13:00 - 14:30 ポスター発表 2

2P01	<p>説明変数に分子軌道エネルギーのみを用いた機械学習によるエントロピーの予測 ○結城 敬史(城西大院理), 寺前 裕之(城西大院理)</p>
2P02	<p>バイオオイルと重質油の混合接触分解を対象とした機械学習による生成物組成予測モデルの未知原料への拡張 ○児玉 侑平(信州大), 嶋田 五百里(信州大)</p>
2P03	<p>機械学習と量子化学計算を利用した混合物スペクトル分解手法の開発 ○関屋 鯨達(早大院先進理工), 熊谷 拓海(早大院先進理工), 廣田 信広(東レリサーチセンター), 清野 淳司(早大院先進理工・早大理工総研)</p>
2P04	<p>発がん性 RAS に対するコバレントドラッグの開発に向けたハイブリッド型 <i>in silico</i> 創薬研究 ○橋本 拓也(早大先進理工), 小野 純一(早大理工総研), 小清水 初花(早大先進理工), 中井 浩巳(早大先進理工, 早大理工総研)</p>
2P05	<p>分子動力学計算による味覚受容体タンパク質のリガンドポケット内水分子クラスターに関する解析 ○荒木 貴絵(東京女子大学), 安藤 耕司(東京女子大学)</p>
2P06	<p>水溶性高分子の親水性のエネルギー的解析 ○園部 美史(住友化学株式会社)</p>
2P07	<p>遷移パスサンプリング法を用いたベンジリデンアニリン誘導体の反応機構解析 ○重光 保博(長崎工技センター), 大賀 恭(大分大)</p>
2P08	<p>SnGe 系ペロブスカイトの表面欠陥に対するパッシベーションに関する理論的研究 ○紀 慧美(横浜市大院・生命ナノ), 内藤 拓海(横浜市大院・生命ナノ), 高木 牧人(横浜市大院・生命ナノ), 立川 仁典(横浜市大院・生命ナノ), 山下 晃一(横浜市大院・生命ナノ), 島崎智実(横浜市大院・生命ナノ)</p>

2P09	<p>分子動力学法を用いた Na₂O-K₂O-SiO₂ 系ガラスにおける混合アルカリ効果の再現 ○吉本 直樹(室工大院), 澤口 直哉(室工大院・希土セ)</p>
2P10	<p>Chirgwin-Coulson weight 法を用いた配置解析法の金属錯体への適用 ○矢野 資(東邦大薬), 吉川 武司(東邦大薬), 塩田 弥浩(東邦大薬), 鶴嶋 友実(東邦大薬), 坂田 健(東邦大薬)</p>
2P11	<p>Quantum Mechanical-based Molecular Simulation on Furfuryl Alcohol Synthesis using Bis(phenoxyimine) Cobalt (II) Catalyst Abel Diyaaldin Faeyza Natawardaja(早大先進理工), 中井 浩巳(早大先進理工、理工総研), Aditya Wibawa Sakti(早大先進理工)</p>
2P12	<p>Wulff の定理および Winterbottom による拡張と第一原理計算を組み合わせた金属および担持金属クラスターの形状予測とサイズ効果 ○大西 未優(早大先進理工), 大野 彰太(早大先進理工), 中田 彩子(NIMS), 中井 浩巳(早大先進理工、早大理工総研)</p>
2P13	<p>Pd および AgRh 合金ナノクラスター中の水素拡散の分子動力学シミュレーション ○木村愛花(東京女子大学大学院), 安藤耕司(東京女子大学大学院)</p>
2P14	<p>Li 媒介アンモニア合成の N≡N 結合切断過程とアンモニア生成における理論的研究 ○岡村 千奈美(日女大院・理), 村岡 梓(日女大院・理), 山下 晃一(横浜市大院・生命ナノ)</p>
2P15	<p>ポリオキソメタレート触媒による二酸化炭素固定化に関する理論的研究 ○杉村 潤輝(京大福井セ、京大院工), 春田 直毅(京大福井セ、京大院工), 佐藤 徹(京大福井セ、京大院工)</p>
2P16	<p>因果発見技術による火山型プロットの網羅的探索を用いた高性能触媒の探索 ○藤田 慶(富士通研), 樋口 博之(富士通研), 栗林 壮太郎(富士通研), 石川 敦之(東工大)</p>

2P17	<p>微視的反應速度論に基づく計算流体力学的手法：メタンの酸化的カップリングに関する研究 ○石川 敦之(東工大)</p>
------	--

■ 14:30 - 14:40 休憩

■ 14:40 - 16:00 口頭発表 5 (20分 4件)

座長：嶋田 五百里(信州大)

2005	<p>機械学習ポテンシャルを用いた分子動力学計算による炭酸電離反応解析 ○北川 功((株)日立製作所 研究開発グループ)</p>
2006	<p>ニューラルネットワーク分子動力学シミュレーションを用いた鉄界面と酸化鉄界面における MoDTC 摩擦低減剤添加によるトライボ化学反応の解析 ○細野 賢人(東北大金研), 工藤 龍太郎(東北大金研), 福島 省吾(東北大金研), 蘇 怡心(東北大 NiChe), 大谷 優介(東北大金研), 尾澤 伸樹(東北大 NiChe), 久保 百司(東北大金研)</p>
2007	<p>機械学習ポテンシャル分子動力学法による水環境下 CrMnFeCoNi 合金の引張シミュレーション ○中島 快(東北大金研), 工藤 龍太郎(東北大金研), 福島 省吾(東北大金研), 蘇 怡心(東北大 NiChe), 大谷 優介(東北大金研), 尾澤 伸樹(東北大 NiChe), 久保 百司(東北大金研)</p>
2008	<p>汎用ニューラルネットワークポテンシャルを用いた CeO₂ 表面における電場下プロトン伝導の分子動力学 ○久間 馨(信州大学), ヴァラデスウェルタ ヘルルド(信州大学), 古山 通久(信州大学)</p>

■ 16:00 - 16:10 休憩

■ 16:10 - 17:30 口頭発表 6 (20分 4件)

座長：桑畑 和明(横浜市大)

2009	<p>固体高分子形燃料電池のカソード触媒層における炭素担体の凝集形態がプロトン伝導ネットワークに与える影響の反応分子動力学シミュレーションによる解析</p> <p>○森 海斗(東北大金研), 中村 哲也(東北大金研), 福島 省吾(東北大金研), 蘇 怡心(東北大NICHe), 大谷 優介(東北大金研), 尾澤 伸樹(東北大NICHe), 久保 百司(東北大金研)</p>
2010	<p>反応分子動力学法による BCC/FCC 型 Dual-Phase 多結晶ハイエントロピー合金の応力腐食割れミュレーション</p> <p>○趙 コウヨ(東北大金研), 蘇 怡心(東北大NICHe), 福島 省吾(東北大金研), 大谷 優介(東北大金研), 尾澤 伸樹(東北大NICHe), 久保 百司(東北大金研)</p>
2011	<p>反応分子動力学シミュレーションによる MoSiBTiC 合金の SiO₂/TiO₂ 複合皮膜における摩耗プロセスの解析</p> <p>○渡部 恵秋(東北大金研), 横井 瑞穂(東北大金研), 川浦 正之(東北大金研), 福島 省吾(東北大金研), 蘇 怡心(東北大NICHe), 大谷 優介(東北大金研), 尾澤 伸樹(東北大NICHe), 久保 百司(東北大金研)</p>
2012	<p>機械学習分子動力学法に基づいたハイエントロピー合金における応力腐食割れに対する Al 添加の影響</p> <p>福島 省吾(東北大金研), 中島 快(東北大金研), 工藤 龍太郎(東北大金研), 大谷 優介(東北大金研), 尾澤 伸樹(NICHe, 東北大金研), 久保 百司(東北大金研, NICHe)</p>

■ 17:30 - 18:00 受賞講演 (30分)

座長：後藤 仁志(豊橋技術科学大学)

2A02	功労賞	<p>計算化学に魅せられて</p> <p>○川内 進(株式会社 Quemix)</p>
------	-----	---

■ 18:00 終了