

第 32 回情報化学討論会

主催 日本化学会 情報化学部会

共催 日本薬学会, 日本農芸化学会, 日本分析化学会, 日本コンピュータ化学会

協賛 教育システム情報学会

会期 平成 21 年 10 月 29 日 (木)・30 日 (金)

会場 常盤工業会会館 (〒755-0039 山口県宇部市東梶返 1-10-8)

参加登録予約申込締切 2008 年 10 月 16 日 (金)

詳細は情報化学討論会 URL (http://cicsj.csj.jp/div_meeting/32th/) をご覧下さい。

2009 年 10 月 29 日 (木)

*印は A 講演 25 分 (発表 20 分、質疑 5 分)、無印は B 講演 15 分 (発表 12 分、質疑 3 分)

一般講演 -(10 時から)- 座長 相田美砂子

01* 回帰モデルの適用範囲と予測誤差の関係に関する研究

(東大院工) ○金子弘昌, 荒川正幹, 船津公人

02 新規ノンパラメトリック回帰手法の応用

(大阪大院薬, 大阪大微生物病研, 長浜バイオ大) ○米倉 聡, 岡本晃典,
川下理日人, 日高伸之介, 山崎広之, 川瀬雅也, 高木達也

03* タンパク質情報を取り入れた QSAR 手法に関する研究

(東大院工) ○光山倫央, 荒川正幹, 船津公人

一般講演 -(11 時 15 分から)- 座長 後藤仁志

04* 逆解析手法を用いた分子設計支援システムの開発

(東大院工) ○宮尾知幸, 荒川正幹, 船津公人

05* ADMET ローカルモデルの構築およびケミスト向け Web GUI の開発

(中外製薬鎌倉研) ○長谷川清, 深海隆明, 大田雅照, 白鳥康彦

総会 -(12 時 05 分から)-

昼食 -(12 時 35 分から)-

特別講演 -(13 時 50 分から)- 座長 船津公人

S1 「量子輸送現象におけるフロンティア軌道理論 (予定)」

(九大院工) 吉澤一成

一般講演 -(15 時から)- 座長 荒川正幹

06* 合成経路設計システム SYNSUP における選択的探索戦略

- (住友化学有合研, Univ. of Toronto, Dept. of Chemistry) ○高畠哲彦,
田中章夫, 河合 隆, Malcolm Bersohn
- 07 生理活性を持つアミド誘導体合成経路の計算化学的検証
(山口大院理工) ○松尾勇二郎, 貞富博喬, 山口 徹, 隅本倫徳, 堀 憲次
- 08* QM/MM-MC 法によるアミノ酸-水相互作用構造
(広島大院理, 広島大 QuLiS) ○宮本秀範, 相田美砂子
- 09 超臨界溶液中反応への QM/MC/FEP 法の適用
(山口大院理工) ○林山祥大, 山口 徹, 隅本倫徳, 堀 憲次
- 一般講演** -(16 時 30 分から)- 座長 高畠 哲彦
- 010* 水クラスターの水素結合パターンと双極子モーメント
(広島大院理, 広島大 QuLiS) ○赤瀬 大, 相田美砂子
- 011 共有結合性 PPAR γ リガンドについての理論化学的研究
(広島大院理, 広島大 QuLiS) ○安藤広司, 吉田智喜, 杉本寛之, 相田美砂子
- 012* P-P 二座配位子を持つ Pd 触媒を用いた Heck 反応の活性種に関する理論的研究
(山口大院理工) ○隅本倫徳, 堀 憲次

懇親会 - (18 時から)-

2009 年 10 月 30 日 (金)

ポスタープレゼンテーション -(9 時 30 分から)- 座長 隅本倫徳

P1-P18 (各 3 分: 会議室 B)

ポスターセッション -(10 時 30 分から)- (会議室 E)

- P01 重心からの距離情報に基づく分子の三次元構造特徴解析
(豊橋技科大) ○中谷光裕, 加藤博明
- P02 サブユニット間の会合領域に注目したタンパク質四次構造の自動分類
(豊橋技科大) ○吉廣伸也, 加藤博明
- P03 有機結晶の無輻射遷移速度解析: テルピリジンのヒートモード蛍光スイッチングの
理論的考察
(長崎工技セ, 東大生研) ○重光保博, 務台俊樹, 北条博彦, 荒木孝二
- P04 分子内共鳴支援水素結合における共役効果と芳香族性 (3) 配置依存性
(京大院理) 今城文雄
- P05 $\text{CH}_3\text{OCH}_3/\text{Ar}$, $\text{CH}_3\text{OCF}_3/\text{Ar}$, $\text{CF}_3\text{OCF}_3/\text{Ar}$ の構造に関する量子化学的研究
(静岡理工科大理工) ○関山秀雄, 伊藤 彰, 高橋知裕, 辻 正高, 濱 毅之
- P06 N-P 二座配位のパラジウム(II)触媒を用いた Heck 反応に関する理論的研究
(山口大院理工) ○倉田雅祥, 隅本倫徳, 堀 憲次

- P07 水和クラスターモデルを用いたオリゴペプチドの構造と安定性に関する分子軌道法による研究
(山口大院理工) 谷 誠治
- P08 ウイルス外殻蛋白質向け分子グラフィックス・ソフト RasMol-v の開発
(北里大院理) ○山田 希, 原ゆき菜, 米田茂隆
- P09 塩化シアヌルを用いたバックマン転位の反応機構に関する理論的研究
(山口大院理工, 宇部興産) ○寺島沙織, 杉本常実, 福田泰久, 隅本倫徳, 堀 憲次
- P10 定量的溶媒効果算出のための解析的分子表面計算法の開発
(豊橋技科大院工) ○大胡真司, 後藤仁志
- P11 絡み行列による非線形化学反応の分類
(近大院総合理工) ○山内直揮, 高橋紘一
- P12 定量的モデルの局所的な予測性を評価するための汎用的な手続きについて
(東大院工) ○右田啓哉, 船津公人
- P13 キチンの光学的性質と分光スペクトルとの関係
(一関高専化学, アーステクニカ) ○貝原巳樹雄, 戸谷一英, 二階堂満, 猪股尚治
- P14 薄膜微細形状評価を用いた CVD プロセスの反応機構自動解析システムに関する研究
(静岡大工) ○高橋崇宏, 江間義則
- P15 化学 I の森
(一関高専化学) ○貝原巳樹雄
- P16 合成可能性を考慮したバーチャルライブラリ構築のためのシステム開発
(東大院工) ○赤坂宏一郎, 荒川正幹, 船津公人
- P17 医薬品副作用データベースからの情報抽出並びに解析手法の検討
(阪大院薬, 阪大遺伝情報実験セ) ○奥井朋子, 井上 藍, 栗花落昇平, 白國優子, 川下理日人, 岡本晃典, 高木達也
- P18 マイクロリアクターを用いたプレリシャエフ反応と量子化学計算結果の比較
(山口大院理工) ○佐藤真太郎, 岩井志帆, 葉石由紀子, 隅本倫徳, 堀 憲次
- ポスター賞発表ならびに閉会挨拶 (12時から)