

日本化学会情報化学部会主催 第二回若手の会  
[スポンサー: オープンアイ・ジャパン株式会社]

日時: 2014年11月29日(土) (当日 17:30 から懇親会)

会場: 日本化学会化学会館

〒101-8307

東京都千代田区神田駿河台 1-5

Tel: 03-3292-6161

Fax: 03-3292-6318

アクセス: <http://www.chemistry.or.jp/access/index.html>

昨年、情報化学分野の若手研究者の方々の活性化および研究者間の交流の促進のため若手の会が発足しました。前回の若手の会において様々な研究内容について盛んに議論し、日本化学会の支部大会において単独のセッションを開催しながら、活動のフィールドを広げています。(前回の若手の会の様子については [https://www.jstage.jst.go.jp/article/cicsj/32/1/32\\_33/pdf](https://www.jstage.jst.go.jp/article/cicsj/32/1/32_33/pdf) をご覧ください。) また今後、例えばある研究室への短期留学、会社や研究所への見学会、様々な学会での若手向けセッションなどの企画の立ち上げも視野に入れています。皆様からもぜひアイデアをいただけますと幸いです。学生や企業の若手研究者も大歓迎です。今回のスケジュールの中にもショートプレゼンテーションがあります。ここでの発表の検討もよろしくお願ひします。

スケジュール:

・ 11月29日(土)

10:00 – 10:10 開会の挨拶

金子 弘昌 氏 (東京大学)

10:10 – 10:50 類似構造をもつ Pd, Pt クラスターが見せる水素吸蔵特性の違い ;

水素吸蔵特性を支配する電子構造

松田 彩 氏 (お茶の水女子大学)

[概要]

低環境負荷エネルギーとして注目される水素の輸送媒体として水素吸蔵材料の開発が求められている。水素吸蔵材料開発では、水素を吸蔵させる無機材料の空間の制御が重要とされ、無機材料の物性データベースに基づき様々な合金材料が開発される。一方、近年、水素吸蔵材料の開発手段として無機材料のナノ粒子化による表面積拡張の試みが定着しつつあり、様々な新奇水素吸蔵材料が開発されている。その中でも中心的な存在として知られる Pd, Pt ナノ粒子は、従来の無機材料の設計法からの予測とは大きく異なる性質を示すことで知られ、酷似した構造パラメーターを持つにも関わらず水素吸蔵能は大きく

異なる。この結果は、Pd, Pt クラスターの電子状態が相異なることを示唆するものである。本研究では、DFT 計算を用いて Pd, Pt クラスターと水素の相互作用解析をおこない、Pd, Pt クラスター間での水素吸蔵特性の違いを比較解析した。

10:50 – 11:10 分子動力学シミュレーションの基礎と創薬分野での応用研究

荒木 望嗣 氏 (理化学研究所)

[概要]

複雑な自然現象を計算機上で再現する事を目的としたコンピュータ計算科学の進歩は目覚ましいものがあり、中でも分子動力学 (MD) やモンテカルロ法 (MC) を利用した分子シミュレーションは地球科学、材料科学、生命科学等の様々な分野で応用されている。本発表では、多分子系の時間変化を追跡できる MD シミュレーションに焦点を当て、その基礎原理と MD によって比較的容易に抽出できる物理量を概観した後に、現状達成できていない事と抱えている問題点について紹介する。次いで創薬分野での応用研究例として、薬剤候補となる有機化合物と標的タンパク質との結合自由エネルギー ( $\Delta G$ ) を大規模 MD シミュレーション (MP-CAFEE) を使用して精密計算する取り組みについて紹介する。

11:10 – 12:10 TiO<sub>2</sub> 基板へのアミノ酸の吸着自由エネルギーにイオンが及ぼす効果

黒木 菜保子 氏 (お茶の水女子大学)

[概要]

TiO<sub>2</sub> 基板は、メディカルインプラントへの応用上、重要な材料である。インプラントへのタンパク質の初期の吸着状態は、その後のインプラントの生体適合性に大きな影響を与えるため、理論、実験双方から研究が行われてきた。しかし、その吸着挙動には未解明な部分も多い。TiO<sub>2</sub> 基板の生体適合性を解明するには、タンパク質の最小構成要素であるアミノ酸の吸着様式の解明が重要である。そこで本研究では、TiO<sub>2</sub> 基板に対するアミノ酸一分子の水溶液中での吸着様式を、分子動力学計算を用いて調査した。当日は、自由エネルギー計算の結果をふまえて、イオンの影響について紹介する。

12:10 – 13:10 ランチョンセミナー

オープンアイ・ジャパン株式会社よりお弁当をご用意させていただきます。

13:10 – 14:10 多様な特徴量に基づく目的変数予測のための統計的機械学習

志賀 元紀 (岐阜大学)

[概要]

統計的機械学習は、高次元の数値データのみならず文字配列やグラフ構造などの多様なデータを扱えるため、ゲノムや創薬におけるデータ解析への応用が期待される。本講演では、特徴量 (化合物グラフ・記述子など) から目的変数 (毒性値など) を予測する手法 (回帰分析・条件付き確率推定) を中心に概

説する。特に、外的な補助情報を用いて特徴量を効率的に選択するスパース構造学習、また、目的変数の予測分布を用いて候補化合物を効率的に探索するための手法を紹介する。

14:10 – 14:20 休憩

14:20 – 17:00 ショートプレゼンテーション&ディスカッション (休憩含む)

[概要]

各人 7 分でショートプレゼンテーションを行う。しっかりとした成果が出ている発表でなくても構わない(むしろ歓迎)。全プレゼンが終わった後に、それらの内容に関してディスカッションを行う。ショートプレゼンの時間 7 分は人数の増減により若干前後する可能性あり。人数が大きく超過する場合はショートプレゼンやディスカッションを複数に分けて並行する。学生を始め多くの若手研究者のプレゼンを歓迎する。

17:00 – 17:10 今後の若手の会について

17:10 – 17:30 移動

17:30 – 19:30 懇親会 (時間は変更になる場合があります。その場合は再度連絡します。)

場所: 東京周辺 (詳細については追って連絡します。)

参加費: 無料 (オープンアイ・ジャパン株式会社よりお弁当をご用意させていただきます)

参加者がくつろいで交流や議論を楽しむことを目指しています。

当日はラフな服装で参加してください (ノーネクタイをお願いします)。

参加登録: 参加およびショートプレゼンを希望する方は、2014年11月7日(金)までに以下のメールアドレスまで参加登録をお願いします。その際に下記の情報を明記してください。

- ・氏名
- ・所属
- ・メールアドレス
- ・電話番号
- ・ショートプレゼンの希望の有無
- ・懇親会参加の有無

(ショートプレゼンを希望する場合)

- ・タイトルおよび概要(150字くらい)

\*当日はディスカッションがスムーズに進むよう、簡単なポスター または パワーポイントのスライドを印刷したものをご準備いただけると嬉しいです。

申込みは締切を過ぎても柔軟に対応します。遠慮せず連絡いただければ幸いです。

問合せ・参加申込み連絡先:

東京大学大学院工学系研究科化学システム工学専攻 金子弘昌

E-mail: [hkaneko@chemsys.t.u-tokyo.ac.jp](mailto:hkaneko@chemsys.t.u-tokyo.ac.jp)

Tel: 03-5841-8837