

# 第24回分子シミュレーション討論会 講演プログラム

(2010/10/15 最終更新)

講演番号1桁目 : 発表日

講演番号2,3桁目 : 通し番号

講演番号記号 : L=25分講演(発表20分+討論5分)

: S=15分講演(発表12分+討論3分)

: P=ポスター発表

講演者記号 : ○印=発表者

IL=招待講演(発表45分+討論5分)

AL=受賞講演(発表30分+討論5分)

**1日目 11月24日(水)**

**9:30-9:50 開場, 受付**

**9:50-10:00 開会の辞**

会長 河村雄行(東工大)

— 午前の部 —

**10:00-11:00 口頭発表 A**

(モデル系・計算手法)

座長: 奥村久士(分子研)

**101S** 正方格子パターン上への剛体球のコロイドエ  
ピタキシーのモンテカルロシミュレーション  
(徳島大院ソシオテクノ) ○森篤史

**102S** 粗視化粒子法の開発: 重み関数の最適化と有  
限温度粗視化ダイナミクスについて  
(名工大院創成シミュ) ○中村貴英, 小林  
亮, 尾形修司

**103S** 鎖状多体系のダイナミクス: 末端部の活発な  
運動とゆっくりした緩和  
(名大理<sup>1</sup>, 北大電子研<sup>2</sup>) ○小西哲郎<sup>1</sup>, 柳  
田達雄<sup>2</sup>

**104S** 分子動力学における周期境界方向への熱拡散  
と温度制御  
(核融合研<sup>1</sup>, 名大工<sup>2</sup>) ○伊藤篤史<sup>1</sup>, 米村  
幸朗<sup>2</sup>, 高山有道<sup>1</sup>, 斎藤誠紀<sup>2</sup>, 中村浩章<sup>1,2</sup>

— 休憩 11:00-11:20 —

**11:20-12:30 口頭発表 B**

(固体・結晶)

座長: 三上益弘(産総研)

**105L** フォノン気体をシミュレートする

(京大工) ○松本充弘, 正尾裕輔, 岡野真哉

**106S** Two Species Model の融解

(信大理<sup>1</sup>, 豊田理研<sup>2</sup>) ○志水久<sup>1</sup>, 樋渡保  
秋<sup>2</sup>

**107S** ペンタセン結晶薄膜における揺らぎに起因し  
た多形選択

(産総研<sup>1</sup>, 日立ケンブリッジ研<sup>2</sup>) ○米谷  
慎<sup>1</sup>, 川崎昌弘<sup>2</sup>, 安藤正彦<sup>2</sup>

**108S** 高密剛体球系における遅い緩和の起源: トラ  
ンジェントな結晶化とモラセステール

(名工大院工<sup>1</sup>, Lawrence Livermore Nat'l  
Lab.<sup>2</sup>) ○磯部雅晴<sup>1</sup>, B. J. Alder<sup>2</sup>

— 昼食 12:30-13:40 —

— 午後の部 —

**13:40-15:30 ポスター発表 1**

座長: 古石貴裕(福井大)

**101P-152P**

(講演タイトルはプログラムの末尾に記載)

**15:40-16:50 口頭発表 C**

(核形成・クラスター)

座長: 三浦伸一(金沢大)

**109L** 分子動力学シミュレーションによる均質核生  
成過程の理論モデルの検証

(北大低温研<sup>1</sup>, 東工大理<sup>2</sup>) 田中今日子<sup>1</sup>,  
○田中秀和<sup>1</sup>, 河村雄行<sup>2</sup>, 山本哲生<sup>1</sup>

**110S** 液体アルゴンの凝固と核形成過程の分子動力  
学シミュレーション

(神奈川大理) ○平田善則

**111S** マルチカノニカル分子動力学法による分子ク  
ラスターの転移現象の解明

(慶大理工<sup>1</sup>, ネブラスカ大<sup>2</sup>) ○金子敏宏<sup>1</sup>,  
秋元琢磨<sup>1</sup>, 泰岡顕治<sup>1</sup>, 光武亜代理<sup>1</sup>, X. C.  
Zeng<sup>2</sup>

**112S** The compressibility and phase diagram of  
hydrogen hydrates at high pressure

(Okayama Univ.) ○L. Hakim, K. Koga,  
H. Tanaka

— 休憩 16:50-17:10 —

17:10-18:20 口頭発表 D

(生体分子・自由エネルギー)

座長：長岡正隆 (名古屋大)

- 113L Cytochrome *c* の構造変化に対する水和効果の自由エネルギー解析  
(京大化研) ○狩野康人, 松林伸幸
- 114S 分子動力学計算による水溶液中における *cis*-マロンアルデヒドの2つの二面角の関数としての自由エネルギー曲面—熱力学的積分法とアンブレラサンプリング  
(名大院工) ○小嶋秀和, 山田篤志, 岡崎進
- 115S タンパク質の二次構造形成の傾向に注目した力場の改良  
(名大院理<sup>1</sup>, 名大構造生物研<sup>2</sup>) ○榮慶丈<sup>1</sup>, 岡本祐幸<sup>1,2</sup>
- 116S レプリカ交換法の改良と水中のアラニンジペプチドへの応用  
(分子研) ○伊藤暁, 奥村久士

2日目 11月25日(木)

9:00-9:10 事務連絡

— 午前の部 —

9:10-10:30 口頭発表 E

(量子系・経路積分)

座長：小田竜樹 (金沢大)

- 201L Ab initio 経路積分シミュレーション  
(原子力機構) ○志賀基之
- 202S 変分経路積分分子動力学法の量子振動ゆらぎへの適用について  
(金沢大理工) ○三浦伸一
- 203L Semiquantum molecular dynamics simulation of liquid water  
(京大院理) ○金賢得, 安藤耕司
- 204S ハイブリッド量子古典シミュレーションによるグラファイト層間化合物の動力学的研究：グラファイトの構造変化と Li 拡散  
(豊田中研<sup>1</sup>, 名工大院創成シミュ<sup>2</sup>, 名工大若手研究セ<sup>3</sup>, JST-CREST<sup>4</sup>) ○大庭伸子<sup>1,2,4</sup>, 尾形修司<sup>2,4</sup>, 小林亮<sup>2,4</sup>, 田村友幸<sup>3,4</sup>, 山川俊輔<sup>1</sup>, 兵頭志明<sup>1,4</sup>

— 休憩 10:30-10:50 —

10:50-11:45 口頭発表 F

(振動分光・圧力依存性)

座長：岡崎進 (名古屋大)

- 205L メチル基の分子内振動のモデリングと振動分光のシミュレーション  
(東北大院理<sup>1</sup>, 分子研<sup>2</sup>) 石山達也<sup>1</sup>, V. Sokolov<sup>1,2</sup>, ○森田明弘<sup>1</sup>
- 206S 拡張アンサンブル法を用いた分子シミュレーションによるタンパク質の圧力依存性の研究  
(名大院理) ○森義治, 岡本祐幸
- 207S シミュレーションから熱力学量を正しく求めるのに重要な量：圧力  
(産総研 CBRC) ○亀田倫史

— 昼食 11:45-12:50 —

— 午後の部 —

12:50-14:40 ポスター発表 2

座長：炭竈享司 (福井大)

201P-252P

(講演タイトルはプログラムの末尾に記載)

14:50-15:40 招待講演 1

座長：葛生伸 (福井大)

- 208IL 越境する数学—計算科学の果たす役割—  
(北大電子研) 西浦廉政

15:40-16:30 招待講演 2

座長：玉井良則 (福井大)

- 209IL 高分解能三次元電子顕微鏡による高分子材料のナノスケール構造解析  
(京都工繊大) 陣内浩司

— 休憩 16:30-16:50 —

16:50-17:30 学術賞受賞講演

座長：松本充弘 (京成大)

- 210AL 水素・重水素の量子統計力学を反映した量子論的分子シミュレーション  
(原子力機構) 志賀基之

17:30-18:00 研究会総会

司会：岡崎進 (名古屋大)  
議長は当日選出

18:30-20:30 懇親会

司会：水野和子 (福井大)

ユアーズホテルフクイ 4F「芙蓉の間」  
ミニコンサート ハープ演奏：窪田ひとみ

3日目 11月26日(金)

9:00-9:10 事務連絡

— 午前の部 —

9:10-10:30 口頭発表 G

(ガラス・過冷却液体)

座長：白木康一（日本板硝子）

- 301L** 高温高压下のシリカガラス構造に関する分子動力学シミュレーションの研究  
(旭硝子) ○高田章
- 302S** Ti添加 SiO<sub>2</sub> ガラスの XANES/ELNES の第一原理計算  
(名工大若手研究セ) ○田村友幸
- 303L** イオン液体における動的不均一性とガラス転移  
(東工大総理工<sup>1</sup>, Pisa 大<sup>2</sup>) ○巾崎潤子<sup>1</sup>, K. L. Ngai<sup>2</sup>
- 304S** 過冷却液体における動的不均一性の寿命  
(京大工) ○水野英如, 山本量一

— 休憩 10:30-10:50 —

10:50-12:00 口頭発表 H

(水素貯蔵・エネルギー)

座長：兵頭志明（豊田中研）

- 305L** 鉄における水素の拡散・捕捉現象の量子動力学シミュレーション  
(阪大院基礎工) ○君塚肇, 山田和弘, 森英喜, 尾方成信
- 306S** 水素化に伴う金属ナノ粒子の構造変化に関する分子シミュレーション  
(産総研ナノシステム) ○小川浩, Phung Thi Viet Bac
- 307S** アルカリ金属水素化合物とアンモニアによる水素貯蔵系の研究  
(広大院総合科<sup>1</sup>, 熊本大院自然<sup>2</sup>, 広大先進セ<sup>3</sup>, 広大先端研<sup>4</sup>) ○山根阿樹<sup>1</sup>, 下條冬樹<sup>2</sup>, 星野公三<sup>1</sup>, 市川貴之<sup>3,4</sup>, 小島由継<sup>3,4</sup>
- 308S** グラファイト内リチウム拡散の Kinetic MC シミュレーション  
(名工大院工<sup>1</sup>, JST-CREST<sup>2</sup>, 豊田中研<sup>3</sup>) ○小林亮<sup>1,2</sup>, 大庭伸子<sup>3,1,2</sup>, 尾形修司<sup>1,2</sup>

— 昼食 12:00-13:20 —

— 午後の部 —

13:20-14:20 口頭発表 I

(生体膜・ミセル)

座長：松林伸幸（京都大）

- 309S** 脂質膜とカーボン材料の相互作用：分子動力学シミュレーションによる研究  
(産総研<sup>1</sup>, Texas 大<sup>2</sup>, Temple 大<sup>3</sup>) ○篠田涉<sup>1</sup>, C. Chiu<sup>2</sup>, S. O. Nielsen<sup>2</sup>, R. DeVane<sup>3</sup>, M. L. Klein<sup>3</sup>
- 310S** SDS ミセルの構造と界面張力に関する分子論的研究  
(名大院工<sup>1</sup>, 姫路獨協大薬<sup>2</sup>) ○北畑雅弘<sup>1</sup>, 藤本和士<sup>1</sup>, 吉井範行<sup>2</sup>, 岡崎進<sup>1</sup>
- 311S** リポソーム・ミセルの圧力プロファイルの計算方法  
(産総研<sup>1</sup>, CREST<sup>2</sup>) ○中村壮伸<sup>1,2</sup>, 篠田涉<sup>1,2</sup>
- 312S** 氷表面近傍の水中におけるイオンと不凍化タンパク質の相互作用  
(京工織大工芸) ○萩原良道, 早狩浩平

— 休憩 14:20-14:40 —

14:40-15:40 口頭発表 J

(液体・分子モーター)

座長：甲賀研一郎（岡山大）

- 313S** 液体中における横波の可視化～分子動力学法  
(広大院総合科<sup>1</sup>, 熊本大院自然<sup>2</sup>) ○宗尻修治<sup>1</sup>, 下條冬樹<sup>2</sup>, 星野公三<sup>1</sup>
- 314S** ナノ閉じ込め下における液体の層化  
(東北大, JST-CREST) ○松原裕樹, ピキエリファビオ, 栗原和枝
- 315S** 溶媒和構造の変化を利用した微小なモーター分子のシミュレーション  
(工学院大工<sup>1</sup>, 九州大理<sup>2</sup>) 徳永健<sup>1</sup>, 古海拓哉<sup>2</sup>, ○秋山良<sup>2</sup>
- 316S** 気泡生成を利用した高効率ナノモーターシステムの分子シミュレーション  
(電通大院情報理工<sup>1</sup>, 慶大理工<sup>2</sup>, 福井大工<sup>3</sup>, 理研<sup>4</sup>) ○荒井規允<sup>1</sup>, 泰岡顕治<sup>2</sup>, 古石貴裕<sup>3</sup>, 戎崎俊一<sup>4</sup>

15:40-15:50 閉会の辞

委員長 玉井良則（福井大）

## ポスター発表 1 (1日目)

- 101P** 気体シミュレーションのフォノン解析への応用  
(京大院工) ○正尾裕輔, 松本充弘
- 102P** OpenMP+MPI 並列による MD コードの高速化  
(名工大) ○樋口拓磨, 尾形修司
- 103P** マルチバーリック・マルチサーマル分子動力学シミュレーションによるポリアラニンの温度・圧力依存性  
(分子研計算科学セ) ○奥村久士
- 104P** GPU を用いた散逸粒子動力学の高速化  
(福井大院工) ○高橋浩司, 古石貴裕
- 105P** モデルチャンネルでのイオン透過におけるエネルギーとエントロピーの役割  
(福井大医<sup>1</sup>, 分子研<sup>2</sup>) ○炭竈享司<sup>1</sup>, 齊藤真司<sup>2</sup>, 大峯巖<sup>2</sup>
- 106P** 微小液滴の衝突・乾燥  
(京大工) ○弥永健太, 田浦剛, 松本充弘
- 107P** 第一原理分子動力学計算コードの MPI および OpenMP を用いた高性能計算  
(金沢大) ○後藤純平, 原口辰也, 辻川雅人, 小田竜樹
- 108P** Isotropic Periodic Sum 法と Particle-Particle Particle-Cell 法を組み合わせた長距離相互作用計算手法の開発  
(慶大院理工<sup>1</sup>, 電通大情報工<sup>2</sup>, 慶大理工<sup>3</sup>) ○高橋和義<sup>1</sup>, 成見哲<sup>2</sup>, 泰岡顕治<sup>3</sup>
- 109P** オーダー  $N$  法第一原理計算を用いた DNA 系の全エネルギーと力計算—古典力場計算との比較—  
(理研基幹研<sup>1</sup>, 物材機構<sup>2</sup>, Univ. College London<sup>3</sup>) ○大塚教雄<sup>1</sup>, 宮崎剛<sup>2</sup>, D. R. Bowler<sup>3</sup>, M. J. Gillan<sup>3</sup>
- 110P** High-pressure crystal structure prediction using evolutionary algorithmic simulation  
(Bandung Inst. Tech.<sup>1</sup>, Kanazawa Univ.<sup>2</sup>) ○A. M. Hanna<sup>1,2</sup>, J. Gotou<sup>2</sup>, T. Yoshizaki<sup>2</sup>, M. A. Martoprawiro<sup>1</sup>, T. Oda<sup>2</sup>
- 111P** 分子動力学法による融点近傍の水  $I_h$  表面のシミュレーション  
(新潟大院自然) ○久賀みづき, 小川貴史, 家富洋
- 112P** プラスチック氷の構造と相転移ダイナミクス  
(岡山大院自然) ○樋本和太, 田中秀樹
- 113P** 連続ランダムネットワークモデルを用いた Si(110) 酸化膜界面構造に関するシミュレーション  
(産総研ナノシステム) ○美馬俊喜, 西尾憲吾, 三上益弘
- 114P** 正方格子パターン上への剛体球結晶形成のモンテカルロシミュレーション  
(徳島大工<sup>1</sup>, 徳島大院ソシオテクノ<sup>2</sup>) ○金繁美希<sup>1</sup>, 森篤史<sup>2</sup>
- 115P** Lennard-Jones 流体の気泡核生成現象における分子動力学法と古典核生成理論の比較  
(慶大理工) ○都築孝明, 泰岡顕治
- 116P** 核沸騰初期過程の分子動力学シミュレーション  
(京大工) ○山本貴大, 河辺俊輔, 松本充弘
- 117P** QM/MM-ER 法による水の気液界面におけるプロトンの水和の自由エネルギー解析  
(東北大理<sup>1</sup>, 阪大基礎工<sup>2</sup>) ○高橋英明<sup>1</sup>, 丸山邦宏<sup>2</sup>, 中野雅由<sup>2</sup>, 森田明弘<sup>1</sup>
- 118P** レプリカ交換法を用いたアポミオグロビンのヘリックス形成傾向の比較  
(名大理) ○阪口剛志, 岡本祐幸
- 119P** 光解離 MbCO に生じる clamshell rotation の高分解能解析  
(名大院情報科学<sup>1</sup>, JST-CREST<sup>2</sup>) ○高柳昌芳<sup>1,2</sup>, 長岡正隆<sup>1,2</sup>
- 120P** 分子シミュレーションによるアミロイド線維の凝集機構の解明  
(福井大院工) ○益子勇輝, 玉井良則
- 121P** 熱変性によるユビキチンの自由エネルギー変化  
(金沢大理工) ○齋藤大明
- 122P** 散逸粒子動力学法を用いたアクアポリンの自己集合  
(慶大理工<sup>1</sup>, 電通大<sup>2</sup>, 理研<sup>3</sup>, 慶大医<sup>4</sup>) ○柏木弘毅<sup>1</sup>, 秋元琢磨<sup>1</sup>, 泰岡顕治<sup>1</sup>, 荒井規允<sup>2</sup>, 平野秀典<sup>3</sup>, 安井正人<sup>4</sup>
- 123P** Photoactive yellow protein 構造変化と溶媒和自由エネルギー  
(北陸先端大マテリアル<sup>1</sup>, 金沢大自然<sup>2</sup>) ○水上卓<sup>1</sup>, 齋藤大明<sup>2</sup>, 長尾秀実<sup>2</sup>
- 124P** ミオシン周囲の溶媒のアロステリック応答  
(早大先進) ○佐藤昂人, 大貫隼, 岡崎圭一, 高野光則
- 125P** ペプチドアダプターの高速度活性予測技術の開発  
(豊橋技科大院工<sup>1</sup>, 埼玉大院理工<sup>2</sup>) ○蔵内伸悟<sup>1</sup>, 後藤仁志<sup>1</sup>, 西垣功一<sup>2</sup>
- 126P** ペプチドの  $\alpha$ -ヘリックス形成シミュレーション  
(防衛大応化) ○木本博喜, 中澤千香子, 黒津卓三
- 127P** 欠陥・不純物を含む炭素系物質の量子伝導の第一原理計算  
(金沢大自然<sup>1</sup>, 金沢大理工<sup>2</sup>) ○川崎智代<sup>1</sup>, 石井史之<sup>2</sup>, 澤田啓介<sup>1</sup>, 齋藤峯雄<sup>2</sup>
- 128P** マルチフェロイック酸化物における交換相互

- 作用の第一原理計算  
(金沢大自然<sup>1</sup>, 金沢大理工<sup>2,4</sup>, 金沢大理<sup>3</sup>)  
○西田美穂<sup>1</sup>, 石井史之<sup>2</sup>, 川本鷹雅<sup>3</sup>, 齋藤峯雄<sup>2</sup>
- 129P** シリコンナノシートの電子状態計算  
(RMIT 大<sup>1</sup>, 産総研ナノシステム<sup>2</sup>) ○森下徹也<sup>1,2</sup>, S. Russo<sup>1</sup>, I. Snook<sup>1</sup>, M. Spencer<sup>1</sup>, 西尾憲吾<sup>2</sup>, 三上益弘<sup>2</sup>
- 130P** シリコン中強相関中心: 10 原子空孔  
(金沢大自然<sup>1</sup>, 東大生研<sup>2</sup>, 富士通研<sup>3</sup>, 東邦大理<sup>4</sup>, NIMS<sup>5</sup>) ○居波哲<sup>1</sup>, 齋藤峯雄<sup>1,2</sup>, 石井史之<sup>1</sup>, 山崎隆浩<sup>2,3</sup>, 山本武範<sup>2,4</sup>, 大野隆央<sup>2,5</sup>
- 131P** Bi ナノリボンの電子状態シミュレーション  
(金沢大自然<sup>1</sup>, 物材機構<sup>2</sup>) ○小鷹浩毅<sup>1</sup>, 齋藤峯雄<sup>1</sup>, 石井史之<sup>1</sup>, 長尾忠昭<sup>2</sup>, 柳沼晋<sup>2</sup>
- 132P** 有機化合物の水和クラスターを形成している水分子の振動数計算  
(福井大工) ○諸寄卓之, 水野和子, 玉井良則
- 133P** MD 計算による Na<sub>2</sub>O-SiO<sub>2</sub> ガラスの変形と破壊  
(旭硝子中研<sup>1</sup>, 東工大応セラ研<sup>2</sup>) ○谷口健英<sup>1</sup>, 深澤寧司<sup>1</sup>, 伊藤節郎<sup>1,2</sup>
- 134P** 2成分系アルカリ珪酸塩ガラスの古典 MD 計算による構造再現性  
(日本板硝子<sup>1</sup>, 東工大地球惑星<sup>2</sup>) ○白木康一<sup>1</sup>, 河村雄行<sup>2</sup>
- 135P** シリカガラスの第一原理引張試験  
(名工大院<sup>1</sup>, 名工大若手研究セ<sup>2</sup>) ○櫻井克<sup>1</sup>, 中村貴英<sup>1</sup>, 小林亮<sup>1</sup>, 田村友幸<sup>2</sup>, 尾形修司<sup>1</sup>
- 136P** 金属-水素系の自由エネルギー計算  
(物材機構計算科学セ) ○竹内靖, 小野寺秀博
- 137P** 脂質膜の粗視化分子シミュレーション  
(東大物性研) ○野口博司
- 138P** 膜透過ペプチドの脂質二重膜透過における自由エネルギー障壁  
(金沢大自然<sup>1</sup>, 東京薬科大<sup>2</sup>, 京大化研<sup>3</sup>) ○川本周平<sup>1</sup>, 高須昌子<sup>2</sup>, 宮川毅<sup>2</sup>, 森河良太<sup>2</sup>, 小田竜樹<sup>1</sup>, 二木史朗<sup>3</sup>, 長尾秀実<sup>1</sup>
- 139P** ベシクル上の脂質分子の側方拡散係数  
(姫路獨協大薬) ○吉井範行, 岡村恵美子
- 140P** 電解液中における脂質二重膜の流動性低下と水のダイナミクス変化との関係  
(慶大医<sup>1</sup>, 理研 ASI<sup>2</sup>, 慶大理工<sup>3</sup>) ○香川璃奈<sup>1</sup>, 平野秀典<sup>2</sup>, 泰岡顕治<sup>3</sup>, 安井正人<sup>1</sup>
- 141P** キセノン分子と圧力が脂質二重膜に与える影響に関する分子動力学計算  
(慶大理工<sup>1</sup>, 理研<sup>2</sup>, 慶大医<sup>3</sup>) ○山本詠士<sup>1</sup>, 秋元琢磨<sup>1</sup>, 泰岡顕治<sup>1</sup>, 平野秀典<sup>2</sup>, 安井正人<sup>3</sup>
- 142P** 糖脂質分子膜の分子動力学シミュレーション  
(産総研ナノシステム<sup>1</sup>, JST-CREST<sup>2</sup>) ○高岩大輔<sup>1,2</sup>, 篠田渉<sup>1,2</sup>, 三上益弘<sup>1,2</sup>
- 143P** DPPC 脂質二重層膜における水分子の膜透過自由エネルギーの経路依存性  
(名大院工<sup>1</sup>, 東大院総理工<sup>2</sup>) ○伊藤太一<sup>1</sup>, 相澤恵奏<sup>2</sup>, 川上智教<sup>2</sup>, 安藤嘉倫<sup>1</sup>, 岡崎進<sup>1</sup>
- 144P** 脂質二重膜における脂質の拡散の解析  
(慶大理工<sup>1</sup>, 理研<sup>2</sup>, 慶大医<sup>3</sup>) ○秋元琢磨<sup>1</sup>, 山本詠士<sup>1</sup>, 泰岡顕治<sup>1</sup>, 平野秀典<sup>2</sup>, 安井正人<sup>3</sup>
- 145P** レナード・ジョーンズ流体におけるファン・デル・ワールズ型状態方程式とポテンシャルエネルギーの揺らぎ  
(法政大生命科学) ○片岡洋右, 山田祐理
- 146P** 2-アミノエタノール (MEA) 水溶液の分子動力学解析  
(関西電力<sup>1</sup>, 京大化研<sup>2</sup>) ○窪田善之<sup>1,2</sup>, 狩野康人<sup>2</sup>, 桜庭俊<sup>2</sup>, 古川博敏<sup>1,2</sup>, 松林伸幸<sup>2</sup>
- 147P** 微小気泡のための MD-LBM ハイブリッドシミュレーション  
(京大院工<sup>1</sup>, 京大工<sup>2</sup>) ○並河遼<sup>1</sup>, 池本尚史<sup>1</sup>, 松本充弘<sup>2</sup>
- 148P** 分子シミュレーションを活用した FC 膜・触媒層の解析  
(トヨタ自動車) ○諸星圭, 小西正晃
- 149P** 固体基板上における *n*-アルカン薄膜の作成および構造解析—分子動力学シミュレーション—  
(山口大院理工) ○三根雅生, 浦上直人, 野崎浩二, 山本隆
- 150P** 芳香族アミド膜の重合反応過程に関する理論的研究  
(名大院情報科学<sup>1</sup>, JST-CREST<sup>2</sup>) ○鈴木雄一<sup>1</sup>, 小谷野哲之<sup>1</sup>, 長岡正隆<sup>1,2</sup>
- 151P** Simulated annealing によるケージフレーザー形成シミュレーション  
(金沢大院自然<sup>1</sup>, 豊田理研<sup>2</sup>) ○岩山将士<sup>1</sup>, 齋藤大明<sup>1</sup>, 西川清<sup>1</sup>, 長尾秀実<sup>1</sup>, 樋渡保秋<sup>2</sup>
- 152P** Seed characteristics analysis for heterogeneous nucleation  
(Keio Univ.) ○D. Suh, K. Yasuoka

## ポスター発表 2 (2 日目)

- 201P** H<sub>2</sub>O-NaCl-CO<sub>2</sub> 系超臨界流体の電気伝導率の予測に向けた H<sub>2</sub>O モデルの開発  
(東工大地惑) ○佐久間博, 河村雄行
- 202P** 独立部分空間分析による Biotin Carboxylase の解析  
(京大化研) ○桜庭俊, 松林伸幸
- 203P** 遷移金属錯体の電子励起状態を記述するポテンシャルモデルの開発  
(名大院情報科学) ○井内哲
- 204P** QM/MM/RISM 理論の開発とその応用  
(分子研) ○吉田紀生, 平田文男
- 205P** NEMS 用トライボ材料設計法としての Phonon-Band Engineering 手法の開発  
(金沢工大光電磁場研) ○白石智基, 畑拓海, 田中大介, 林啓治
- 206P** ネマティック液晶のマルチスケール分子動力学シミュレーション  
(慶大理工) ○米川伊織, 泰岡顕治
- 207P** 準一次元 q-orientation モデルにおける相転移  
(岡山大院自然) ○阿部紀遥, 甲賀研一郎
- 208P** マルチスケールシミュレーションで探る生体分子の自由エネルギー地形  
(東大院理<sup>1</sup>, JST/CREST<sup>2</sup>, 東大分生研<sup>3</sup>)  
○原田隆平<sup>1,2</sup>, 北尾彰朗<sup>1,2,3</sup>
- 209P** NEMS 用人工材料設計のためのナノ動摩擦法則の探究 (I)  
(金沢工大光電磁場研<sup>1</sup>) ○豊田一穂, 白山大樹, 田中文也, 田中大介, 林啓治
- 210P** NEMS 用人工材料設計のためのナノ動摩擦法則の探究 (II)  
(金沢工大光電磁場研<sup>1</sup>) ○辻法行, 桑原大輔, 森大河, 田中大介, 林啓治
- 211P** グラファイトの剥離に関する分子動力学法を用いた大規模シミュレーション  
(名工大院) ○中尾太貴, 小林亮, 尾形修司
- 212P** ペリクレーズ (MgO) 中の空孔の電子状態計算  
(京大理) ○三宅亮
- 213P** ガラスでの協同運動領域のシミュレーションサイズ依存性の研究  
(愛知工大基礎<sup>1</sup>, 九大理<sup>2</sup>, 豊田理研<sup>3</sup>) ○村中正<sup>1</sup>, 松井淳<sup>2</sup>, 樋渡保秋<sup>3</sup>
- 214P** プロトン化した水クラスターの分子動力学シミュレーション  
(金沢大院自然) ○住田由加里, 三浦伸一
- 215P** エチレンクラスター (C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>)<sub>n</sub> の構造最適化: n = 2~25 に関する構成原理について  
(北大院理) ○竹内浩
- 216P** 不純物分子が Lennard-Jones 液体の結晶核生成過程に与える影響の解析  
(慶大理工) ○高井北斗, 泰岡顕治
- 217P** 計算機支援による合理的ペプチド設計手法の開発  
(理研<sup>1</sup>, 千葉大薬<sup>2</sup>) ○沖本憲明<sup>1</sup>, 山岸淳也<sup>2</sup>, 末永敦<sup>1</sup>, 星野忠治<sup>2</sup>, 泰地真弘人<sup>1</sup>
- 218P** 氷タンパク質表面上の水分子クラスターの解析  
(慶大理工) ○村上大介, 泰岡顕治
- 219P** Ab initio QM/MM-MD 法による水溶液中グリシン配座異性体の自由エネルギー的安定性  
(名大院情報科学<sup>1</sup>, CREST-JST<sup>2</sup>) ○北村勇吉<sup>1</sup>, 竹中規雄<sup>1</sup>, 長岡正隆<sup>1,2</sup>
- 220P** 分子動力学法によるヒトコンデンシンヒンジドメインの構造解析  
(阪大院薬<sup>1</sup>, 奈女大<sup>2</sup>, 阪大微研<sup>3</sup>, 阪大院工<sup>4</sup>, 大阪薬大<sup>5</sup>) ○元岡大祐<sup>1</sup>, 河原一樹<sup>2</sup>, 細川祐岐<sup>1</sup>, 中村昇太<sup>3</sup>, 内山進<sup>4</sup>, 小林祐次<sup>5</sup>, 福井希一<sup>4</sup>, 大久保忠恭<sup>1</sup>
- 221P** Cytochrome P450 の遷移状態の構造モデリング  
(NEC グリーンイノベーション研) ○島田次郎, 福西広晃, 上條憲一
- 222P** 人工亜鉛フィンガーの DNA 認識能制御に関する理論: 分子動力学法とフラグメント分子軌道法による分子間相互作用解析  
(お茶大アカプロ<sup>1</sup>, 北里大<sup>2</sup>) ○森寛敏<sup>1</sup>, 能登香<sup>2</sup>
- 223P** H-ras-GTP 結合系の分子動力学シミュレーション  
(東京薬大<sup>1</sup>, 金沢大<sup>2</sup>) ○宮川毅<sup>1</sup>, 森河良太<sup>1</sup>, 高須昌子<sup>1</sup>, 長尾秀実<sup>2</sup>
- 224P** アミロイドβ 重合体の構造解析と自由エネルギー評価法の検討  
(豊橋技科大院工) ○岡山武司, 後藤仁志
- 225P** ナノ繊維構築の素材となるタンパク質の構造と安定性  
(東京薬大生命<sup>1</sup>, 金沢大自然<sup>2</sup>) ○小松勇<sup>1</sup>, 川本周平<sup>2</sup>, 宮川毅<sup>1</sup>, 森河良太<sup>1</sup>, 高須昌子<sup>1</sup>, 赤沼哲史<sup>1</sup>, 山岸明彦<sup>1</sup>
- 226P** グルタチオンとグルタチオン転移酵素 T2-2 の結合エネルギーゆらぎ  
(金沢大院自然) ○大前裕莉子, 齋藤大明, 西川清, 長尾秀実
- 227P** 第一原理分子動力学法によるシリコン原子空孔の電子状態解析  
(新潟大院自然<sup>1</sup>, 岡山大院自然<sup>2</sup>, 新潟大物質量子セ<sup>3</sup>) ○小川貴史<sup>1</sup>, 鶴田健二<sup>2</sup>, 家富洋<sup>1</sup>, 根本祐一<sup>1</sup>, 金田寛<sup>3</sup>, 後藤輝孝<sup>1</sup>
- 228P** 有機物強誘電体の第一原理計算  
(金沢大理工) ○石井史之

- 229P** DFT study of H<sub>2</sub>O adsorption on oxygen-covered Fe surfaces.  
(富山大総合情報<sup>1</sup>, 富山大理工<sup>2</sup>) ○布村紀男<sup>1</sup>, 砂田聡<sup>2</sup>
- 230P** 基板上グラフェンナノリボンの磁性  
(金沢大自然<sup>1</sup>, 金沢大理工<sup>2</sup>) ○澤田啓介<sup>1</sup>, 石井史之<sup>2</sup>, 斎藤峯雄<sup>2</sup>
- 231P** Adatom related defects in carbon nanotubes  
(金沢大) ○林建波, 西田和永, 斎藤峯雄
- 232P** [イソプロパノール/水] と [ヘキサフルオロイソプロパノール/水] の水の O-H 伸縮および H-O-H 変角振動バンドのシミュレーション  
(福井大院工) ○河村昂介, 水野和子, 玉井良則
- 233P** 第一原理分子動力学法を用いた構造 I・構造 H クラスレート水和物中メタン分子の振動スペクトル解析  
(慶大理工<sup>1</sup>, Colorado School of Mines<sup>2</sup>) ○平塚将起<sup>1</sup>, 大村亮<sup>1</sup>, A. K. Sum<sup>2</sup>, 泰岡顕治<sup>1</sup>
- 234P** ほう酸塩溶融体とガラスの原子間相互作用モデルと MD 計算  
(東工大地球惑星<sup>1</sup>, 室工大もの創造系<sup>2</sup>, 日本板硝子<sup>3</sup>) ○河村雄行<sup>1</sup>, 澤口直哉<sup>2</sup>, 白木康一<sup>3</sup>
- 235P** インバートガラスの永久高密度化に伴う構造変化  
(福井大院工) ○田中正人, 玉井良則
- 236P** 分子動力学計算による高分子電解質ゲルの物質透過性の研究  
(東レ<sup>1</sup>, 京大化研<sup>2</sup>) ○川上智教<sup>1</sup>, 茂本勇<sup>1</sup>, 松林伸幸<sup>2</sup>
- 237P** 炭素構造体への水素照射シミュレーション  
(名大院工<sup>1</sup>, 核融合研<sup>2</sup>) ○米村幸朗<sup>1</sup>, 斎藤誠紀<sup>1</sup>, 伊藤篤史<sup>2</sup>, 高山有道<sup>2</sup>, 中村浩章<sup>1,2</sup>
- 238P** 高分子鎖による油中水滴型ドロップレットの形状変化  
(山口大院理工<sup>1</sup>, お茶大理<sup>2</sup>) ○黒川敬久<sup>1</sup>, 浦上直人<sup>1</sup>, 今井正幸<sup>2</sup>, 山本隆<sup>1</sup>
- 239P** 細胞膜模倣脂質二重層膜の構造解析—膜透過性についての一考察  
(名大院工) ○安藤嘉倫, 岡崎進
- 240P** 分子動力学法による血小板-血管壁相互作用の解析  
(理研<sup>1</sup>, 東大工<sup>2</sup>) ○塩崎聖治<sup>1</sup>, 高木周<sup>1,2</sup>
- 241P** 脂質二重層膜におけるコレステロールの側方向二体間の自由エネルギープロフィール  
(名大院工<sup>1</sup>, JASRI<sup>2</sup>) ○大野公子<sup>1</sup>, 安藤嘉倫<sup>1</sup>, 岡崎進<sup>1</sup>, 八田一郎<sup>2</sup>
- 242P** 散逸粒子動力学法によるベシクル変形のダイナミクス  
(山口大院理工<sup>1</sup>, お茶大理<sup>2</sup>) ○野口威照<sup>1</sup>, 浦上直人<sup>1</sup>, 今井正幸<sup>2</sup>, 山本隆<sup>1</sup>
- 243P** メタンの SDS ミセルへの可溶化自由エネルギープロフィール計算  
(名大院工<sup>1</sup>, 姫路獨協大薬<sup>2</sup>) ○藤本和士<sup>1</sup>, 吉井範行<sup>2</sup>, 岡崎進<sup>1</sup>
- 244P** 創薬標的タンパク質構造ライブラリ PHABLE  
(理研 ASI) ○平野秀典, 沖本憲明, 泰地真弘人
- 245P** メッシュレス膜模型を例とした曲げ弾性率の測定の検討  
(東大物性研) ○芝隼人, 野口博司
- 246P** 第一原理分子動力学法によるシリカガラス表面のエタノール分子の解析  
(慶大理工) ○佐藤豪洋, 泰岡顕治
- 247P** テトラヒドロフラン溶媒中におけるメチルリチウム会合状態の自由エネルギー的安定性  
(名大院情報科学<sup>1</sup>, CREST-JST<sup>2</sup>) ○杉山孝行<sup>1</sup>, 太田雄介<sup>1</sup>, 長岡正隆<sup>2</sup>
- 248P** イオン強結合状態における荷電コロイド系の分子動力学シミュレーションによる解析  
(京大院工) ○浦長瀬正幸, 山本量一
- 249P** 有機薄膜上への Mg 真空蒸着の理論的解析  
(東工大生命理工<sup>1</sup>, 地球快適化インスティテュート<sup>2</sup>, 三菱化学科学技術研究センター<sup>3</sup>, 大阪教育大教養<sup>4</sup>) ○木村嘉朗<sup>1</sup>, 横島智<sup>2</sup>, 沈君偉<sup>3</sup>, 辻岡強<sup>4</sup>, 中村振一郎<sup>1,2,3</sup>
- 250P** 流れ中のグラフェンの挙動に関する分子動力学シミュレーション  
(名工大院) ○中村太志, 中尾太貴, 小林亮, 尾形修司
- 251P** 高分子流体の履歴の影響  
(京大院工, JST-CREST) ○村島隆浩, 谷口貴志
- 252P** シリカガラス接合界面付近構造の分子動力学～接合界面付近の構造欠陥～  
(福井大情報セ<sup>1</sup>, 福井大工<sup>2</sup>, シミュラテオ<sup>3</sup>, 福井大院工<sup>4</sup>) ○田中光也<sup>1</sup>, 伊藤禎芳<sup>2</sup>, 吉岡誠<sup>3</sup>, 葛生伸<sup>4</sup>

## 講演者索引

<b>【あ】</b>		金 賢得	203L	高橋 浩司	104P	三浦 伸一	202S
秋元 琢磨	144P	木村 嘉朗	249P	高橋 英明	117P	水上 卓	123P
秋山 良	315S	木本 博喜	126P	高柳 昌芳	119P	水野 英如	304S
阿部 紀遥	207P	久賀 みづき	111P	竹内 浩	215P	三根 雅生	149P
荒井 規允	316S	窪田 善之	146P	竹内 靖	136P	美馬 俊喜	113P
安藤 嘉倫	239P	蔵内 伸悟	125P	田中 秀和	109L	宮川 毅	223P
井内 哲	203P	黒川 敬久	238P	田中 正人	235P	三宅 亮	212P
石井 史之	228P	小嶋 秀和	114S	田中 光也	252P	宗尻 修治	313S
礮部 雅晴	108S	小鷹 浩毅	131P	谷口 健英	133P	村上 大介	218P
伊藤 篤史	104S	小西 哲郎	103S	田村 友幸	302S	村島 隆浩	251P
伊藤 暁	116S	小林 亮	308S	辻 法行	210P	村中 正	213P
伊藤 太一	143P	小松 勇	225P	都築 孝明	115P	元岡 大祐	220P
居波 哲	130P			豊田 一穂	209P	森 篤史	101S
岩山 将士	151P	<b>【さ】</b>		<b>【な】</b>		森 寛敏	222P
浦長瀬 正幸	248P	齋藤 大明	121P	中尾 太貴	211P	森 義治	206S
大塚 教雄	109P	榮 慶丈	115S	中村 太志	250P	森下 徹也	129P
大野 公子	241P	阪口 剛志	118P	中村 貴英	102S	森田 明弘	205L
大庭 伸子	204S	佐久間 博	201P	中村 壮伸	311S	諸星 圭	148P
大前 裕莉子	226P	櫻井 克	135P	並河 遼	147P	諸寄 卓之	132P
岡山 武司	224P	桜庭 俊	202P	西田 美穂	128P	<b>【や】</b>	
小川 貴史	227P	佐藤 昂人	124P	布村 紀男	229P	弥永 健太	106P
小川 浩	306S	佐藤 豪洋	246P	野口 威照	242P	山根 阿樹	307S
沖本 憲明	217P	澤田 啓介	230P	野口 博司	137P	山本 詠士	141P
奥村 久士	103P	塩崎 聖治	240P			山本 貴大	116P
		志賀 基之	201L	<b>【は】</b>		吉井 範行	139P
<b>【か】</b>		篠田 涉	309S	萩原 良道	312S	吉田 紀生	204P
香川 璃奈	140P	芝 隼人	245P	巾崎 潤子	303L	米川 伊織	206P
柏木 弘毅	122P	島田 次郎	221P	原田 隆平	208P	米村 幸朗	237P
片岡 洋右	145P	志水 久	106S	樋口 拓磨	102P	米谷 慎	107S
金子 敏宏	111S	白石 智基	205P	樋本 和大	112P		
金繁 美希	114P	白木 康一	134P	平田 善則	110S	<b>【ら】</b>	
亀田 倫史	207S	杉山 孝行	247P	平塚 将起	233P	林 建波	231P
狩野 康人	113L	鈴木 雄一	150P	平野 秀典	244P		
川上 智教	236P	炭竈 享司	105P	藤本 和士	243P	<b>【英字】</b>	
川崎 智代	127P	住田 由加里	214P			L. Hakim	112S
河村 雄行	234P			<b>【ま】</b>		A. M. Hanna	110P
河村 昂介	232P	<b>【た】</b>		正尾 裕輔	101P	D. Suh	152P
川本 周平	138P	高井 北斗	216P	益子 勇輝	120P		
北畑 雅弘	310S	高岩 大輔	142P	松原 裕樹	314S		
北村 勇吉	219P	高田 章	301L	松本 充弘	105L		
君塚 肇	305L	高橋 和義	108P				