

第25回分子シミュレーション討論会 講演プログラム

(2011/12/5 版)

講演番号1桁目 : 発表日

講演番号2,3桁目 : 通し番号(口頭発表,ポスターそれぞれに通し番号あり)

講演番号記号 : L=25分講演(発表20分+討論5分) IL=招待講演(発表45分+討論5分)

: S=15分講演(発表12分+討論3分) AL=受賞講演(発表30分)

: P=ポスター発表

講演者記号 : 印=発表者

1日目 12月5日(月)

— 昼食 13:00-14:00 —

— 午後の部 —

9:15-9:45 開場,受付

9:45-9:55 開会の辞

会長 河村雄行(岡山大環境)

14:00-15:00 ポスター発表1 後半

101P-163P

(講演タイトルはプログラムの末尾に記載)

— 午前の部 —

— 休憩 15:00-15:05 —

9:55-10:55 口頭発表A

座長:松本充弘(京大工)

15:05-15:50 口頭発表B

座長:松林伸幸(京大化研)

101S 高分子溶融体中のミクロスコピックな状態の履歴

(京大工, JST-CREST) 村島隆浩, 谷口貴志

106S クーロンレプリカ交換法による水中のアニンジペプチドのシミュレーション

(分子研, 総研大) 伊藤暁, 奥村久士

102S Monte Carlo simulations of short chain branched polyolefins: structure and entanglements (242P)

(¹Mitsui Chemicals, Inc., ²Mitsui Chemicals Analysis and Consulting Services, ³CSIC Madrid, ⁴National Technical University of Athens) ¹K. Moorthi, ²K. Kamio, ³J. Ramos, ⁴D. N. Theodorou

107S 脂質2重膜表面でのプロトンの振る舞い(221P)

(東大先端研¹, シカゴ大化学²) 山下雄史¹, G. A. Voth²

103S ガラス状態の非平衡性とエントロピーに関する考察

(旭硝子中研) 高田章

108S 糖脂質分子膜の水素結合様式の解析

(産総研, JST-CREST) 高岩大輔, 篠田渉

104S リチウムジシリケート融体およびガラスにおけるフレームワーク構造の分子動力学

(東工大総合理工) 巾崎潤子

— 休憩 15:50-16:05 —

16:05-17:00 口頭発表C

座長:吉井範行(名大工)

— 休憩 10:55-11:10 —

11:10-12:00 招待講演1

座長:増淵雄一(京大化研)

105IL 高分子溶液の乾燥

(東大工) 土井正男

109L 圧力分布解析によるベシクルの物性評価:分子論から弾性論への橋渡し

(産総研, JST-CREST) 中村壮伸, 篠田渉

110S 脂質混合膜における形態変化

(理研¹, 計算科学機構²) 小串典子¹, 小林俊秀¹, 杉田有治^{1,2}

12:00-13:00 ポスター発表1 前半

101P-163P

(講演タイトルはプログラムの末尾に記載)

111S 脂質2重膜における粘弾性とトラップ時間のベキ則

(慶大理工¹, 理研², 慶大医³) 秋元琢磨¹, 山本詠士¹, 泰岡顕治¹, 平野秀典², 安井正人³

2日目 12月6日(火)

— 昼食 12:35-13:35 —

— 午前の部 —

9:00-10:10 口頭発表 D

座長：志賀基之（原子力機構）

- 201S 第一原理拡張アンサンブルシミュレーションによる分子内プロトン移動反応の研究
(名大理¹, 名大工²) 森義治¹, 岡本祐幸^{1,2}
- 202L 水分解酸素発生を可能とする Photosystem II における電子移動・プロトン移動
(京大生命科学系キャリアパス, JST さきがけ) 石北央, 斉藤圭亮
- 203S 光合成蛋白質中におけるクロロフィル二量体上の正電荷分布の起源 (141P)
(京大生命科学系キャリアパス, JST さきがけ) 斉藤圭亮, 石北央
- 204S 第一原理分子動力学法による Li-N-H 水素貯蔵系に対する TiCl₃ の触媒作用の研究
(広大総合科¹, 熊本大自然², 広大先進セ³, 広大先端研⁴) 山根阿樹¹, 下條冬樹², 星野公三¹, 市川貴之^{3,4}, 小島由継^{3,4}

— 休憩 10:10-10:25 —

10:25-11:35 口頭発表 E

座長：三浦伸一（金沢大理工）

- 205L 第一原理分子動力学法による光捕集性 dendritic リマーのエネルギー伝達機構
(熊大自然¹, 熊大衝撃セ²) 大村訓史¹, 赤井一郎², 下條冬樹¹
- 206S 分子動力学シミュレーションによる 共役系高分子 PPV の励起エネルギー移動ダイナミクスの研究
(名大工¹, テキサス大²) 山田篤志¹, P. J. Rossky²
- 207S 高密度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高次秩序変数
(名工大工¹, Lawrence Livermore Nat'l Lab.²) 磯部雅晴¹, B. J. Alder²
- 208S 剛体球模型を用いた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における多結晶化の回避
(徳島大ソシオテクノサイエンス研) 森篤史, 鈴木良尚, 松尾繁樹

11:35-12:35 ポスター発表 2 前半

201P-262P

(講演タイトルはプログラムの末尾に記載)

— 午後の部 —

13:35-14:35 ポスター発表 2 後半

201P-262P

(講演タイトルはプログラムの末尾に記載)

— 休憩 14:35-14:40 —

14:40-15:25 口頭発表 F

座長：森下徹也（産総研）

- 209S 古典的分子動力学法を用いたシリコンナノワイヤ中の熱輸送およびフォノン解析 (133P)
(京大工) 三枝琢己, 鷹尾祥典, 江利口浩二, 斧高一
- 210S 原子空孔を含むグラファイトの機械的特性に関する分子動力学シミュレーション
(愛媛大工) 伊藤明彦, 岡本伸吾
- 211S 液体中の縦波と横波の mixing
(広大総合科学) 宗尻修治, 星野公三

— 休憩 15:25-15:40 —

15:40-16:15 学術賞受賞講演

座長：泰岡顕治（慶大理工）

- 212AL 生体膜の粗視化シミュレーション
(東大物性研) 野口博司

— 休憩 16:15-16:30 —

16:30-17:20 招待講演 2

座長：河村雄行（岡山大環境）

- 213IL ニューガラス開発への分子動力学の応用
(東工大応用セラミックス研) 伊藤節郎

17:20-18:00 研究会総会

司会：岡崎進（名大工）

議長は当日選出

18:30-20:30 懇親会

食堂棟 2階 季の味ガーデン

— 午前の部 —

9:00-10:25 口頭発表 G

座長：光武垂代理（慶大理工）

- 301L 高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト Modylas の開発
（名大工¹，金沢大計算²，分子研³，理研 AICS⁴，富士通⁵） 安藤嘉倫¹，吉井範行¹，藤本和士¹，山田篤志¹，岡崎進¹，川口一朋²，長尾秀実²，岩橋健輔³，水谷文保³，南一生⁴，市川真一⁵
- 302S 変分経路積分分子動力学法の分子系への適用について
（金沢大理工） 三浦伸一
- 303S マルチパーリック・マルチサーマル分子動力学シミュレーションによるシニョリンの温度・圧力変性
（分子研，総研大） 奥村久士
- 304S 拡張アンサンブル法によるタンパク質とリガンドの結合構造予測 (244P)
（武田薬品探索研¹，名大理²） 小久保裕功¹，田中稔祐¹，岡本祐幸²
- 305S 分子数適応階層型 QM/MM-MD 法による水和構造の理論的研究
（名大情報科学¹，JST-CREST²） 竹中規雄^{1,2}，北村勇吉¹，小谷野哲之^{1,2}，長岡正隆^{1,2}

— 休憩 10:25-10:40 —

10:40-11:45 口頭発表 H

座長：磯部雅晴（名工大工）

- 306L 分子動力学計算によるサブミクロン微粒子相互作用の解明
（北大低温研） 田中秀和
- 307S タンパク質分子の主鎖二面角についてアミノ酸ごとに最適化した力場パラメータ
（名大理¹，名大工²） 榮慶丈¹，岡本祐幸^{1,2}
- 308L 完全固体と完全流体の相平衡
（法政大生命） 片岡洋右，山田祐理

— 休憩 11:45-12:00 —

12:00-12:50 招待講演 3

座長：秋元琢磨（慶大理工）

- 309IL 細胞膜のメゾドメインを 1 分子追跡で調べる
（京大 iCeMS / 再生医科学研） 楠見明弘

— 午後の部 —

13:40-14:50 口頭発表 I

座長：奥村久士（分子研）

- 310L 平均力ダイナミクスによる新しい自由エネルギー計算手法
（産総研¹，分子研²，総研大³） 森下徹也¹，伊藤暁^{2,3}，三上益弘¹
- 311S エネルギー分布関数を用いた自由エネルギーの厳密計算 (234P)
（分子研¹，京大化研²） 桜庭俊¹，松林伸幸²
- 312S 溶媒和自由エネルギー計算を用いたアミノ酸アナログおよび cytochrome c への尿素効果に関する研究 (209P)
（京大化研） 狩野康人，松林伸幸
- 313S 分子動力学法による，メタン・水分子の水相から SDS ミセル核中への移行の自由エネルギープロフィール（名大工） 藤本和士，吉井範行，岡崎進

— 休憩 14:50-15:05 —

15:05-15:50 口頭発表 J

座長：甲賀研一郎（岡山大自然）

- 314S 球状錯体 M_6L_8 の自己組織化シミュレーション
（産総研¹，東大²） 米谷慎¹，山口智彦²，藤田誠²
- 315S 分子サイズの溶質に対する水の誘電的な性質（九大理） 久保田陽二，秋山良
- 316S 生体分子表面における水分子の滞在時間を決める要素について (247P)
（原子力機構） 米谷佳晃，河野秀俊

— 休憩 15:50-16:05 —

16:05-17:00 口頭発表 K

座長：篠田渉（産総研）

- 317L 振動和周波スペクトルからみえる水表面の水素結合構造
（東北大理¹，理研²） 石山達也¹，李徳冠¹，二本柳聡史²，山口祥一²，田原太平²，森田明弘¹

- 318S** Structure and dynamics of water confined between water-monolayers
(岡大自然科学) L. Hakim, M. Matsumoto, H. Tanaka
- 319S** 凹凸面における水滴の接触角ヒステリシスの導出
(福井大工¹, 慶大理工², Univ. Nebraska³, 理研⁴) 古石貴裕¹, 泰岡顕治², X. C. Zeng³, 藤川茂紀⁴

17:00-17:05 閉会の辞

委員長 河村雄行 (岡山大環境)

ポスター発表 1 (1日目)

- 101P** 超好熱菌由来タンパク質を用いたタンパク質結合のシミュレーション
(東京薬科大生命) 福田真己, 小松勇, 森河良太, 宮川毅, 高須昌子, 赤沼哲史, 山岸明彦
- 102P** 量子古典混合系近似に基づく分子動力学シミュレーションを用いた無極性溶媒中とプロトン性極性溶媒中におけるマロンアルデヒドの分子内プロトン移動の反応機構
(名大工) 小嶋秀和, 山田篤志, 岡崎進
- 103P** 積分方程式理論から求められる三体分布関数の MC による評価
(九大理) 久保田陽二, 秋山良
- 104P** 古典分子動力学シミュレーションによる Li-ion 二次電池の有機混合溶媒電解液解析
(ソニー) 中本光則, 永井さえ, 森川淳子, 武志一正
- 105P** ベンゼン・クラスター (C_6H_6)_n (n = 2 - 30) における成長過程のシミュレーション
(北大理) 竹内浩
- 106P** リボソームの安定性解析
(産総研) 篠田渉, 中村壮伸
- 107P** 光合成膜タンパク質 PSII の Mn_4O_5Ca クラスターに熱ゆらぎを取り込んだ理論的研究
(東工大生命理工¹, 理研², 東京薬科大³) 打田和香¹, 木村嘉朗¹, 畠山允¹, 若林政光², 中田浩弥¹, 緒方浩二², 横島智^{2,3}, 中村振一郎^{1,2}
- 108P** ハイブリッド汎関数を用いたルチル型 $TiO_2(110)$ 表面における酸素欠陥由来の磁性状態の解析
(慶大理工¹, Uppsala University²) 澁谷泰蔵¹, S. Mirbt², B. Sanyal², 泰岡顕治¹
- 109P** Computational analysis of G9a-inhibitor interactions
(理研) 沖本憲明, 平野秀典, 大塚教雄, 森本元太郎, 藤田茂雄, 泰地真弘人
- 110P** クラスター展開法によるジメチル [6] ヘリセンの円二色スペクトルの解析
(阪大工) 仲井義人, 森直, 楊成, 福原学, 井上佳久
- 111P** キャンセル
- 112P** NICS 値によるグラフェンフラグメントの芳香族性に関する理論的研究
(京大工) 津村佳弘, 笛野博之, 田中一義
- 113P** 正常及びがん化細胞膜への薬剤低分子の膜透過自由エネルギープロファイル
(名大工) 伊藤太一, 安藤嘉倫, 岡崎進
- 114P** FN-III ドメイン間ループ構造の MD シミュレーションを用いた解析
(東大先端研 LSBM) 篠田恵子, 藤谷秀章
- 115P** アミロイド タンパク質と単糖間の特異的結合特性の解析: 古典分子力学及びフラグメント分子軌道計算
(豊橋技科大情報¹, 村田製作所², 九大工³) 野村和哉¹, 岡本晃澄¹, 矢野篤志¹, 檜貝信一², 近藤孝志², 神波誠治², 三浦佳子³, 栗田典之¹
- 116P** 2 種類の陽イオンを含む溶融塩混合系の構造と動的性質
(長岡高専) 松永茂樹
- 117P** Self-consistent treatment for fully relativistic effects in the small bismuth clusters
(¹Kanazawa University, ²Bandung Institute of Technology) E. Aprilia^{1,2}, H. Katou¹, J. Gotou¹, S. Haraguchi¹, Suprijadi², T. Oda¹
- 118P** Ca_3CoMnO_6 における三角格子の交換相互作用と電気分極の第一原理計算
(金沢大自然¹, 金沢大理工²) 西田美穂¹, 石井史之², 斎藤峯雄²
- 119P** 拡張アンサンブル分子動力学による低分子系の固液相転移現象の研究
(慶大理工¹, ネブラスカ大化学²) 金子敏宏¹, 泰岡顕治¹, 光武亜代理¹, X. C. Zeng²
- 120P** Rashba effect on $Tl/Si(111)1 \times 1$ surface
(金沢大自然¹, 金沢大理工²) L. Li¹, H. Kato¹, A. Araki¹, J. Goto¹, T. Oda²

- 121P Hras-GTP 結合系ならびに Hras-GDP 結合系の分子動力学シミュレーション
(東京薬科大生命科学¹, 金城大医療健康², 金沢大理工³) 宮川毅¹, 森河良太¹, 高須昌子¹, 杉森公一², 川口一朋³, 齋藤大明³, 長尾秀実³
- 122P MD-LBM 連成計算による微小気泡の解析
(京大工) 稲岡篤志, 松本充弘, 並河遼
- 123P 光化学系 II・四核 Mn クラスターの酸化数配置に関する理論的研究
(東工大¹, 理研², 東京薬科大³) 畠山允¹, 緒方浩二², 横島智^{1,3}, 中村振一郎^{1,2}
- 124P 二次元人工原子のポリヤッド内エネルギー準位構造
(日大理工¹, 日大文理², 日大量科研³) 佐甲徳栄¹, 石田浩², 藤川和男³
- 125P 分子間ポテンシャルの検討
(日本 SGI) 林宗市, 福本淳司
- 126P アミノ酸アナログに対する尿素およびそのアルキル化物の共溶媒効果の自由エネルギー解析
(京大化研) 涂楷旻, 狩野康人, 桜庭俊, 松林伸幸
- 127P 荷電コロイド粒子まわりのイオン分布
(京大工) 池田一郎, 松本充弘
- 128P 不凝縮ガスを含んだ液体酸素中における気泡核生成の分子動力学解析
(信州大工) 田中博之, 津田伸一, 平田哲夫
- 129P トリスピリジン鉄(II) 錯体のポテンシャルモデルの開発: 水溶液中における低・高スピン状態の分子動力学シミュレーション
(名大情報科学) 井内哲
- 130P 第一原理引張試験によるシリカガラスの破壊解明及び水分子が与える影響
(名工大) 水越智彦, 中村貴英, 田村友幸, 尾形修司
- 131P コロイドゲルにおけるエイジング現象
(岐阜大工) 寺尾貴道
- 132P 二次構造を拘束した proteinA のフォールディングシミュレーション
(名大理) 森正統, 岡本祐幸
- 133P 古典的分子動力学法を用いたシリコンナノワイヤ中の熱輸送およびフォノン解析 (209S)
(京大工) 三枝琢己, 鷹尾祥典, 江利口浩二, 斧高一
- 134P 高分子粗視化モデルのポテンシャル検討
(トヨタ自動車) 諸星圭, 小西正晃
- 135P 珪酸塩ガラスのアルカリ自己拡散に関する分子動力学計算: 共存するアルカリ土類イオンの影響
(日本板硝子¹, 岡山大環境²) 白木康一¹, 河村雄行²
- 136P LIPS 法: 均一系および不均一系の長距離相互作用計算に対応した一般化 IPS 法の開発
(慶大理工¹, 電通大情報²) 高橋和義¹, 成見哲², 泰岡顕治¹
- 137P グラフェン・ナノチューブ上の固有欠陥における第一原理計算
(金沢大自然) 西田和永, 林建波, 斎藤峯雄
- 138P 膜透過ペプチドの脂質二重膜内における自由エネルギー
(産総研¹, 東京薬科大², 金沢大学³, 京大化研⁴) 川本周平¹, 高須昌子², 宮川毅², 森河良太², 小田竜樹³, 齋藤大明³, 二木史朗⁴, 長尾秀実³
- 139P 水和粘土鉱物の粘性の MD 計算
(岡山大環境) 河村雄行
- 140P ハイブリッド量子-古典法を用いた SiO₂ 破壊過程の解明
(名工大) 島田貴章, 中村貴英, 田村友幸, 尾形修司
- 141P 光合成蛋白質中におけるクロロフィル二量体上の正電荷分布の起源 (203S)
(京大生命科学系キャリアパス, JST さきがけ) 斉藤圭亮, 石北央
- 142P ペリクレーズ (MgO) 中に含まれる空孔の分子動力学シミュレーション
(京大理) 植田康浩, 三宅亮
- 143P Condensation on cubic seeds by molecular dynamics
(慶大理工) D. Suh, K. Yasuoka
- 144P 量子統計に従ったプロトン移動反応の経路探索
(原子力機構) 志賀基之
- 145P タンパク質構造変化における最小自由エネルギー経路の解析
(理研¹, 日医大物理², 東大農学生命³, 横浜市大生命ナノ⁴) 松永康佑¹, 藤崎弘士^{1,2}, 寺田透^{1,3}, 木寺詔紀^{1,4}
- 146P タンパク質分子内の残基間エネルギー伝導度の解析
(名大理) 波多野達朗, 石倉孝一, 倭剛久
- 147P ボルツマン方程式に基づくエネルギー輸送解析
(京大工) 今西保奈美, 進藤拓人, 正尾裕輔, 松本充弘
- 148P キャンセル
- 149P Pd 合金水素化物の電子状態計算
(富山大総合情報セ¹, 富山大水素研²) 布村紀男¹, 原 正憲², 赤丸悟士²

- 150P 双頭型両親媒性高分子溶液の相構造の散逸粒子力学シミュレーション
(横国大工¹, 名大², 京都工繊大工芸³, 核融合研⁴) 白崎良演¹, フウジュン・ジャン², 藤原進³, 中村浩章⁴
- 151P fcc プラスチック相の水の微視的性質
(岡山大院自然) 中田秀平, 田中秀樹, 松本正和
- 152P First-principles calculations of hydrogen dimers in graphene and carbon nanotubes
(¹Kanazawa University, ²Bandung Institute of Technology, ³University of Tokyo) M. S. Alam¹, F. Muttaqien^{1,2}, A. Setiadi^{1,2} and M. Saito^{1,3}
- 153P コレステロールを含んだ脂質二重膜の水分子透過性
(金沢大理工¹, 産総研², JST-CREST³) 齋藤大明^{1,3}, 篠田涉^{2,3}
- 154P 第一原理 QM/MM 法における効率的な長距離静電相互作用計算のための仮想点電荷エワルド法
(名大情報科学¹, 阪府大理², JST-CREST³) 山田健太^{1,3}, 麻田俊雄^{2,3}, 古賀伸明^{1,3}, 長岡正隆^{1,3}
- 155P ミオシンの大規模構造変化と力発生機構: レプリカ交換アンブレラサンプリング法を用いた自由エネルギー計算からの示唆
(早大先進理工) 大貫隼, 佐藤昂人, 高野光則
- 156P 動的構造因子に基づく単純液体の熱拡散率評価
(新潟大理¹, 新潟大自然², パリ第6大³, オックスフォード大⁴) 石井良樹¹, 佐藤圭介², 根岸裕太², 大鳥範和¹, M. Salanne³, P. A. Madden⁴
- 157P 自由エネルギー計算による機能性分離膜の物質透過性の研究
(東レ¹, 京大化研²) 川上智教¹, 北畑雅弘¹, 茂本勇¹, 松林伸幸²
- 158P レプリカ交換分子力学シミュレーションによる水中 N 型糖鎖の構造多様性とその調節機構の研究
(理研) 二島涉, 宮下尚之, 山口芳樹, 杉田有治, 李秀栄
- 159P 単一アミノ酸ポテンシャル力場を用いた低分子ペプチドの構造探索
(東海大理) 出立兼一, 下里卓, 峯崎俊哉, 岩岡道夫
- 160P 氷の熱力学的安定性
(岡山大自然) 中村竜也, 松本正和, 田中秀樹
- 161P 外圧の増加が脂質二重膜内のキセノン分子へ与える影響
(慶大理工¹, 理研², 慶大医³) 山本詠士¹, 秋元琢磨¹, 平野秀典², 泰岡顕治¹, 安井正人³
- 162P アルコールハイドレートの第一原理分子力学シミュレーション
(慶大理工) 平塚将起, 大村亮, 泰岡顕治
- 163P ミトコンドリアへの輸送蛋白質に付加されたプレ配列認識モデルの分子力学計算による検証
(中央大理¹, 理研², 九大生医研³) 小室靖明¹, 森貴治², 宮下尚之², 宗行英朗¹, 齋藤貴士³, 神田大輔³, 杉田有治²

ポスター発表 2 (2日目)

- 201P 分子内相互作用を有するキラル有機化合物の理論円二色スペクトルに関する研究
(阪大工) 森直, 楊成, 井上佳久
- 202P 平均力を用いた二次元モデル化シミュレーションによる POPC 二重層膜中でのコレステロール側方配置の研究
(名大工¹, JASRI²) 大野公子¹, 安藤嘉倫¹, 岡崎進¹, 八田一郎²
- 203P 分子力学法を用いたヒストンタンパク質の構造解析
(東京薬科大生命) 藤森亮, 小松勇, 宮川毅, 森河良太, 高須昌子
- 204P レプリカ交換法による主鎖のたわみを利用した膜たんぱく質の立体構造予測 (名大理¹, 名大工²) 浦野諒¹, 岡本祐幸^{1,2}
- 205P プロトン化した水クラスターの構造とゆらぎ
(金沢大自然) 住田由加里, 三浦伸一
- 206P ナノチャンネルに閉じ込められた界面活性剤水溶液の散逸粒子力学シミュレーション
(電通大情報理工¹, 慶大理工², University of Nebraska-Lincoln³) 荒井規允¹, 泰岡顕治², X. C. Zeng³
- 207P ナノ繊維構築の素材となるタンパク質の構造と安定性の分子力学シミュレーション
(東京薬科大生命科¹, 金沢大自然²) 小松勇¹, 川本周平², 宮川毅¹, 森河良太¹, 高須昌子¹, 赤沼哲史¹, 山岸明彦¹
- 208P 多変数シミュレーティッド・テンパリング法の開発
(慶大理工) 光武亜代理
- 209P 溶媒和自由エネルギー計算を用いたアミノ酸アナログおよび cytochrome c への尿素効果に関する研究 (312S)
(京大化研) 狩野康人, 松林伸幸

- 210P ナノ液柱に関する分子動力的研究
(阪大工) 村上太一, 矢野猛
- 211P プラスチック氷の構造と水素結合ネットワーク
(岡山大自然) 樋本和夫, 松本正和, 田中秀樹
- 212P Direct Coexistence 法を用いた固液または気液平衡の分子シミュレーション
(慶大理工¹, Colorado School of Mines², 電通大³) 坂牧隆司^{1,2}, アマデウス², 成見哲³, 大村亮¹, 泰岡顕治¹
- 213P ラミニン 鎖 LG4 モジュールにおけるループ領域ペプチドの分子動力学シミュレーションによる構造解析
(東京薬科大薬¹, 東京薬科大生命²) 山田寛尚¹, 小松勇², 宮川毅², 森河良太², 片桐文彦¹, 保住健太郎¹, 吉川大和¹, 野水基義¹, 高須昌子²
- 214P 実在の細胞膜を模倣した混合脂質二重層膜内での脂質分子 wobble の解析
(名大工) 安藤嘉倫, 岡崎進
- 215P アミロイド タンパク質とトリアジン誘導体間の特異的結合特性の解析: 古典分子力学及びフラグメント分子軌道計算
(豊橋技科大情報知能工¹, 村田製作所², 九州大工³) 岡本晃澄¹, 野村和哉¹, 矢野篤志¹, 檜貝信一², 近藤孝志², 神波誠治², 三浦佳子³, 栗田典之³
- 216P 二酸化炭素ハイドレートの熱力学的安定性
(岡山大自然) 松尾真人, 松本正和, 田中秀樹
- 217P 芳香族ポリアミド膜のナノ構造に関する分子論的考察
(名大情報¹, JST-CREST²) 鈴木雄一¹, 小谷野哲之^{1,2}, 長岡正隆^{1,2}
- 218P タンパク質-化合物 Docking 情報データベース PHABLE
(理研) 平野秀典, 沖本憲明, 森本元太郎, 泰地真弘人
- 219P CO₂ 化学吸収液の分子動力学計算による解析
(京大化研¹, 関西電力²) 古川博敏^{1,2}, 窪田善之^{1,2}, 狩野康人¹, 桜庭俊¹, 松林伸幸¹
- 220P 2 - アミノエタノール水溶液中でのカーバメート生成反応の分子動力的解析
(京大化研¹, 関西電力²) 窪田善之^{1,2}, 桜庭俊¹, 狩野康人¹, 古川博敏^{1,2}, 松林伸幸¹
- 221P 脂質 2 重膜表面でのプロトンの振る舞い (107S)
(東大先端研¹, シカゴ大化学²) 山下雄史¹, G. A. Voth²
- 222P F1 モータータンパク質の水和自由エネルギー解析
(京大化研) 浴本亨, 松林伸幸
- 223P カーボンナノチューブ中のアルゴンの拡散係数
(岡山大自然) 秋吉宏樹, 甲賀研一郎
- 224P 分子動力学法によるアルゴンの蒸気圧
(法政大生命) 山田祐理, 片岡洋右
- 225P 複数ヘリックスを持つタンパク質のフォールディングシミュレーション~ ヘリックス形成順序の比較とその決定因子の探求~
(名大理¹, 名大工²) 阪口剛志¹, 岡本祐幸^{1,2}
- 226P 平面波擬ポテンシャル第一原理計算コードの高速化と磁気接合系への応用
(金沢大自然¹, 東北大 CSIS²) 後藤純平¹, 原口辰也¹, 辻川雅人², 小田竜樹¹
- 227P 氷タンパク質表面上の薄膜水の挙動
(慶大理工) 村上大介, 泰岡顕治
- 228P 準一次元液体の連続固液相転移
(岡山大自然) 阿部紀遥, 甲賀研一郎
- 229P MD 計算によるイオン交換ガラスの構造と変形
(旭硝子¹, 東工大²) 谷口健英¹, 深澤寧司¹, 伊藤節郎²
- 230P 疎水相互作用によるカーボンナノチューブ内でのナノバブル生成
(福井大) 山田恭平, 古石貴裕
- 231P 酸水素混合系に対する非経験的熱物性推算手法を用いた状態方程式の精度検証
(信州大工¹, 東大工²) 鎌倉克訓¹, 津田伸一¹, 平田哲夫¹, 越光男²
- 232P 核沸騰初期過程に関する MD シミュレーション
(京大工) 山本貴大, 松本充弘
- 233P キャンセル
- 234P エネルギー分布関数を用いた自由エネルギーの厳密計算 (311S)
(分子研¹, 京大化研²) 桜庭俊¹, 松林伸幸²
- 235P 希薄気体シミュレーションを応用した新たな熱伝導計算手法の開発
(京大工) 正尾裕輔, 松本充弘
- 236P First-principles calculation of healing of adatom-vacancy pair on carbon nanotubes.
(¹Kanazawa University, ²University of Tokyo) J. Lin¹, K. Nishida¹, M. Saito^{1,2}
- 237P 微小液滴の蒸発に関するハイブリッドシミュレーション
(京大工¹, J-POWER²) 弥永健太¹, 松本充弘¹, 田浦剛²
- 238P 金属プロテアーゼサーモライシンの機能抑制剤の提案: 古典分子力場及びフラグメント分子軌道計算

- (豊橋技科大工¹, University of Tromsø²)
平川達也¹, 藤田聖也¹, M. T. H. Khan²,
I. Sylte², 栗田典之¹
- 239P** 溶液中グリシンの自由エネルギー地形解析 -
構造最適化と振動数解析 -
(名大情報科学¹, JST-CREST²) 北村勇
吉¹, 竹中規雄^{1,2}, 小谷野哲之^{1,2}, 長岡正
隆^{1,2}
- 240P** Molecular dynamics simulations of proteins
under crowded environments
(理研¹, ミシガン州立大²) R. Harada¹, Y.
Sugita¹, M. Feig²
- 241P** 高圧下におけるシリケートメルトの分子動力
学シミュレーション
(東工大理工¹, 岡山大環境学²) 則竹史哉¹,
河村雄行²
- 242P** Monte Carlo simulations of short chain
branched polyolefins: structure and entan-
glements (102S)
(¹Mitsui Chemicals, Inc., ²Mitsui Chem-
icals Analysis and Consulting Ser-
vices, ³CSIC Madrid, ⁴National Technical
University of Athens) K. Moorthi¹, K.
Kamio², J. Ramos³, D. N. Theodorou⁴
- 243P** 熱力学的積分法を用いた Hsp90 と基質分子
の結合自由エネルギープロフィール
(金沢大理工) 川口一朋, A. Purqon, 齋藤
大明, 長尾秀実
- 244P** 拡張アンサンブル法によるタンパク質とリガ
ンドの結合構造予測 (304S)
(武田薬品探索研¹, 名大理²) 小久保裕
功¹, 田中稔祐¹, 岡本祐幸²
- 245P** Lennard-Jones 液体の結晶核生成過程にお
ける不純物分子特性の影響の解明
(慶大理工) 高井北斗, 泰岡顕治
- 246P** 温度勾配によるナノバブル駆動のMDシミュ
レーション
(京大工) 山崎隆太, 松本充弘
- 247P** 生体分子表面における水分子の滞在時間を決
める要素について (316S)
(原子力機構) 米谷佳晃, 河野秀俊
- 248P** 計算機支援による低分子ペプチドの設計
(東大新領域¹, 理研², 産総合研³, シカゴ大⁴)
山岸純也^{1,2}, 沖本憲明², 末永敦³, 岡田眞
理子², 今本公⁴, 泰地真弘人²
- 249P** 2次元モデルガラスにおける波の発生と観測
(愛知工大基礎¹, 九大理², 金沢大³) 村中
正¹, 松井淳², 樋渡保秋³
- 250P** 青色光受容体蛋白質のDNA光補修反応メカ
ニズムの理論的研究
(名大理) 佐藤竜馬, 倭剛久
- 251P** Bennett Acceptance Ratio 法によるプロテ
インキナーゼとその阻害剤の結合自由エネル
ギー計算
(大正製薬¹, 理研², 大阪薬科大³) 田村勇之
進¹, 岩本邦彦¹, 坂井正彦¹, 植木智一¹, 宮
川博夫¹, 姫野龍太郎², 野田茂穂², 北村一
泰³
- 252P** MD 及び FMO 計算による転写制御タンパク
質と DNA 間の特異的相互作用の解析
(豊橋技科大) 大山達也, 野村和哉, 栗田
典之
- 253P** 自由エネルギー勾配法によるアンモニアイ
オン化過程の反応経路探索: ab initio QM/MM-
MD シミュレーションにおける境界表現の重
要性
(名大情報科学¹, JST-CREST²) 小谷野哲
之^{1,2}, 竹中規雄^{1,2}, 北村勇吉¹, 長岡正隆^{1,2}
- 254P** ダウンフォールディング法による核融合材料
用のポテンシャルモデル作成
(核融合研¹, 鳥取大工², 名大工³) 伊藤篤
史¹, 吉本芳英², 高山有道¹, 斎藤誠紀³, 中
村浩章^{1,3}
- 255P** 動的モンテカルロ法による血小板 - 血管壁相
互作用の解析
(理研¹, 東大工²) 塩崎聖治¹, 伊井仁志²,
杉山和靖², 高木周²
- 256P** 水素ハイドレートの構造とゆらぎに関する研
究
(金沢大自然) 東真史, 三浦伸一
- 257P** 閉じ込め液体中の拡散ダイナミクス
(東北大工¹, 東北大 WPI-AIMR², 東北大
IMRAM³, JST-CREST⁴) 松原裕樹^{1,4}, ピ
キエリファビオ^{1,4}, 栗原和枝^{2,3,4}
- 258P** リングポリマー分子動力学法の定式化
(東京都市大知識工) 堀越篤史
- 259P** 孤立 dendrimer の緩和
(慶大理工) 岩岡伸之, 高野宏
- 260P** マルチカノニカル分子動力学シミュレーシ
ョンの粒子数依存性
(信大理) 志水久
- 261P** 棒状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
- 262P** 拡張アンサンブル分子動力学法を用いた
Lennard-Jones 流体の固液相転移温度の推定
(慶大理工) 増永充宏, 金子敏宏, 光武亜代
理, 泰岡顕治