

[1] 第 26 回分子シミュレーション討論会 講演プログラム

主催：分子シミュレーション研究会

協賛：日本物理学会，日本化学会，応用物理学会，日本生物物理学会，日本薬学会，高分子学会，
日本コンピューター化学会

後援：九州大学

会期：平成 24 年 11 月 26 日（月）－28 日（水）

会場：西新プラザ

（住所：福岡市早良区西新 2－1 6－2 3）

HP：http://yasuoka.mech.keio.ac.jp/mssj26/

(2012/10/10 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 26 日（月）**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）

－ 午前の部 －**9:55-10:50 口頭発表 A****（量子系・経路積分）****101L** 半導体量子ドットにおける光励起ダイナミクス
（京大院理¹、University of Rochester²）○金賢得¹、Oleg V. Prezhdo²**102S** α -Fe 中での水素同位体の量子的拡散ダイナミクス
（埼玉大院理工¹、阪大院基礎工²、JAEA³）○吉川武宏¹、高柳敏幸¹、君塚肇²、志賀基之³**103S** 半古典的インスタントン法によるトンネル経路解析
（分子科学研究所¹、金沢大学理工²）○河津励^{1,2}、三浦伸一²**－ 休憩 10:50-11:05 －****11:05-11:50 口頭発表 B****（量子系・経路積分）****104S** 水素分子の量子効果が熱物性に与える影響解析
（東北大工¹、信州大工²、九工大工³、青学大理工⁴、東大工⁵、東北大流体研⁶）○永島浩樹¹、津田伸一²、坪井伸幸³、林光一⁴、越光男⁵、徳増崇⁶**105S** 溶液中における分子内プロトン移動反応の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：実験および反応速度理論との対応と反応機構

（名大院工）○小嶋秀和、山田篤志、岡崎 進

106S 第一原理変分経路積分分子動力学法の開発
（金沢大理工¹、分子研²、金沢大院自然³）○三浦伸一¹、河津励^{2,3}**11:50-12:50 ポスター発表 1 前半****101P-155P**

（講演タイトルはプログラムの末尾に記載）

－ 昼食 12:50-13:50 －**－ 午後の部 －****13:50-14:50 ポスター発表 1 後半****101P-155P**

（講演タイトルはプログラムの末尾に記載）

15:00-15:50 招待講演 A

- 107IL** 分子モーター F1-ATPase によるエネルギー変換特性
(中央大理工) 宗行英朗

15:50-16:20 口頭発表 C

(高分子・ガラス・クラスター)

- 108S** 球状錯体 $M_{12}L_{24}$ 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¹, 佐藤宗太², 藤田 誠²
- 109S** 高分子末端変性によるフィラー充填ゴムの粘弾性変化に関する分子動力学を用いた解析
(東洋ゴム工業株式会社) ○日野理

— 休憩 16:20-16:35 —

16:35-18:00 口頭発表 D

(高分子・ガラス・クラスター)

- 110L** ガラスのフラジリティと動的不均一性に関する考察
(分子研¹) ○金鋼¹, 齊藤真司¹
- 111S** ガラス状態の配置エントロピーの分子論的解釈
(旭硝子(株)) ○高田 章
- 112S** Shape Effect Study on Heterogeneous Nucleation by Molecular Dynamics
(慶應工大) ○徐東郁, 泰岡 顕治
- 113S** ナノ細孔中の分子の固液平衡条件を決定するための新規手法の開発
(慶大理工¹, ネブラスカ大化学²) ○金子 敏宏¹, Jaecil BAI², 泰岡 顕治¹, 光武 亜代理¹, Xiao Cheng ZENG² (249P)
- 114S** 分子クラスターにおけるポテンシャルエネルギー曲面上のダイナミクス
(慶大理工¹, ネブラスカ大化学²) ○秋元琢磨¹, 金子敏宏¹, 泰岡 顕治¹, X. C. Zeng² (250P)

2日目 11月27日(火)

— 午前の部 —

9:30-10:30 口頭発表 E

(モデル系・計算手法)

- 201S** Hybrid (MPI+OPENMP) parallelization of Molecular Dynamics with cell-pair Verlet list
(RIKEN AICS¹, RIKEN QBiC²) ○ Jaewoon Jung¹, Takaharu Mori², Yuji Sugita^{1,2}
- 202S** 遺伝的アルゴリズムを用いたタンパク質の安定構造探索
(名大院理¹, 分子研², 名大構造生物研³, 名大計算科学研⁴) ○榮慶丈^{1,2}, 岡本祐幸^{1,3,4}

- 203S** 化学反応分子動力学シミュレーションの高速化
(東大先端研) ○山下雄史
- 204S** 水中の Abeta フラグメントに対するクーロンレプリカ交換分子動力学シミュレーション
(分子研, 総研大) ○伊藤暁, 奥村久士

— 休憩 10:30-10:45 —

10:45-11:45 口頭発表 F

(モデル系・計算手法)

- 205S** α ヘリックス構造と β ストランド構造を取りやすくするレプリカ交換分子動力学シミュレーション法
(分子研¹, 総研大²) ○奥村久士^{1,2}, 伊藤暁^{1,2}
- 206S** Basin-Hopping 法と Rigid Body 法を組み合わせた生体分子のリガンド結合自由エネルギー計算法の開発と Aldose Reductase への応用
(総研大物理¹, ケンブリッジ大学化学²) ○望月建爾¹, David Wales² (251P)
- 207S** 地殻中の超臨界水の物性を予測するための H₂O モデルの開発
(東工大理工¹, 東北大理², 岡山大環境³, 佐賀大⁴) ○佐久間博¹, 市来雅啓², 河村雄行³, 藤田清士⁴ (252P)
- 208S** 分極モデルとエネルギー表示の理論による溶媒和自由エネルギー計算の方法論の開発
(東北大院理) ○鈴岡大樹, 高橋英明*, 石山達也, 森田明弘 (254P)

11:45-12:45 ポスター発表 2 前半

201P-255P

(講演タイトルはプログラムの末尾に記載)

— 昼食 12:45-14:00 —

— 午後の部 —

14:00-15:00 ポスター発表 2 後半

201P-255P

(講演タイトルはプログラムの末尾に記載)

15:10-16:00 招待講演 B

- 209IL** 流体粒子ダイナミクス法によるコロイド分散系の研究
(京大院理) 荒木武昭

— 休憩 16:00-16:15 —

16:15-16:50 学術賞受賞講演

210AL

— 休憩 16:50-17:05 —

17:05-17:45 研究会総会**18:00-19:30 懇親会**

会場：西新プラザ

3日目 11月28日(水)

— 午前の部 —

9:30-10:25 口頭発表 G

(生体分子・自由エネルギー)

301L LAMMPS を用いた凝縮核生成過程の大規模分子動力学計算(北海道大学低温科学研究所¹, 独立行政法人海洋開発機構², University of Zurich³) ○田中今日子¹, 田中秀和¹, 河野明男², Jurg Diemand³, Raymond Angelil³**302S** DNA-タンパク質複合体の解離過程の自由エネルギープロファイル計算

(原子力機構) ○米谷佳晃, 河野秀俊 (152P)

303S TMAO 添加による蛋白質溶媒和自由エネルギー変化の微視的解明: 3次元カークウッド-バフ積分法によるマッピング解析(青山学院化学・生命¹, 名大院情報科学²) ○優乙石¹, 中田恭子¹, 長岡正隆² (153P)

— 休憩 10:25-10:40 —

10:40-11:20 口頭発表 H

(生体分子・自由エネルギー)

304L レプリカ交換分子動力学計算による糖鎖-タンパク質相互作用の解析

(理化学研究所 基幹研究所) ○李秀榮, 杉田有治

305S 拡張アンサンブル分子動力学シミュレーションによるヘリックス構造に対する圧力効果の研究(分子研¹, 総研大²) ○森義治¹, 奥村久士^{1,2}

— 休憩 11:20-11:35 —

11:35-12:25 招待講演 C**306IL** 単細胞生物に学ぶ最適なネットワーク

(九大マスコアインダストリ研究所) 手老篤史

— 昼食 12:25-13:40 —

— 午後の部 —

13:40-14:50 口頭発表 I

(生体膜・ミセル)

307L 曲げ応力による膜の曲げ弾性係数の解析手法 (産業技術総合研究所) ○川本周平, 篠田渉**308S** CHARMM36 力場を用いた実在の原形質膜の分子動力学計算(名大工¹) ○安藤嘉倫¹, 岡崎進¹**309S** 膜貫通タンパク質の膜内配置に関する自由エネルギー解析(京大化研¹, 分子研²) ○水口朋子^{1,2}, 松林伸幸¹ (255P)**310S** 極性分子(メチルアミン、オクチルアミン、メタノール、オクタノール)の水相から SDS ミセルへの移行の自由エネルギー変化(名大院工¹, 名大院工・計算セ²) ○藤本和士¹, 吉井範行^{1,2}, 岡崎 進¹

— 休憩 14:50-15:05 —

15:05-15:50 口頭発表 J

(モデル系・計算手法)

311S 完全固体・液体の熱力学 v4

(法政大生命科学) ○片岡 洋右 (151P)

312S 電荷中性条件のみを利用した静電ポテンシャルの開発と評価

(近大先端研) ○米澤 康滋

313S ダウンフォールディング法による炭素系ポテンシャルの開発(核融合研¹, 鳥取大院工², 名大院工³) ○伊藤篤史¹, 吉本芳英², 高山有道¹, 中村浩章^{1,3} (253P)

— 休憩 15:50-16:05 —

16:05-17:00 口頭発表 K

(溶液)

314S けい酸塩鉱物結晶表面・表面間における水・水溶液の構造と物性

(岡山大環境科学) ○河村雄行 (154P)

315S 振動スペクトルからみえる水/疎水性液体界面の構造

(東北大院理¹) ○石山達也¹, 佐藤祐史¹, 森田明弘¹ (155P)

- 316L** イオン近傍の水の速い誘電緩和と遅い配向緩和 (九大理¹, 京大化研², 東北大工³) ○久保田陽二¹, 吉森明¹, 松林伸幸², 鈴木誠³, 秋山良¹

17:00-17:05 閉会の辞

ポスター発表 1 (1日目)

- 101P** 多環芳香族炭化水素クラスターの構造およびその分子集合パターンの研究 (北大院理) ○竹内浩
- 102P** 分子動力学法による高圧下のカルシウムの融解曲線 (広大総合科¹, 広大院総合科²) ○BOLD TUVSHINTUGS¹, 宗尻修治², 星野公三²
- 103P** 熱硬化性樹脂の架橋構造と熱伝導性 (三菱電機 先端総研) ○鶴崎晋也, 信時英治
- 104P** 電場の氷結晶成長への影響に関する分子動力学解析 (京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科¹, 京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科²) ○黒島考平¹, 萩原良道²
- 105P** 高温高圧下での MgO 結晶中の点欠陥による拡散機構 (岡山大学地球研¹, 岡山大学環境理工²) ○辻野典秀¹, 河村雄行²
- 106P** ネットワーク構造ガラス形成液体における剛性パーコレーション; 分子動力学シミュレーションとペブルゲーム解析 (国立天文台¹) ○竹内靖¹
- 107P** Forsterite/MgSiO₃ ガラス・メルト界面の分子動力学シミュレーション (岡山大環境生命¹) ○則竹史哉¹, 河村雄行¹
- 108P** 超イオン導電ガラスの分子動力学シミュレーション (東北学院大工) 淡野照義
- 109P** 高分子結晶膜を用いた CO₂ の分離 (福井大院工) ○朝日駿介, 玉井良則
- 110P** 高分子メルトの非平衡レオロジー: 3次元シア流に対する力学応答 (京大工) ○大山倫弘, 水野英如, 山本量一
- 111P** 緩和モード解析を用いた高分子メルトの線形粘弾性の評価 (慶大理工, 防衛大応物¹) ○岩岡伸之, 萩田克美¹, 高野宏
- 112P** LJG ポテンシャル系におけるガラスの MD シミュレーション (九大理¹, 九大理²) ○松本幸介¹, 松井淳²
- 113P** ガラスの変形や緩和に関する MD 計算 (旭硝子中研¹, 東工大応セラ研²) ○谷口健英¹, 深澤寧司¹, 伊藤節郎^{1, 2}
- 114P** 拡張アンサンブル分子動力学法による単純液体の固液相転移温度の推定 (慶大院理工¹, 慶大理工²) ○増永充宏¹, 金子敏宏¹, 光武亜代理², 泰岡顕治²
- 115P** 散逸粒子動力学法による制限された領域におけるジブロック共重合体の自己組織化の研究 (福井大院工) 高橋浩司
- 116P** 分子動力学および量子化学計算によるガラス中に存在するシラノール基の振動スペクトル評価 (旭硝子中央研究所) ○田中厚¹, 入澤潤², 谷口健英³, 深澤寧司⁴
- 117P** 粗視化分子シミュレーションによる高分子電解質ブラシの構造 (豊田中研¹, 京大触媒電池²) ○鷲津仁志^{1, 2}, 金城友之¹, 吉田広顕¹
- 118P** Rouse パラメータを用いた原子レベル分子動力学法と粗視化分子動力学法の接続 (慶應大院¹, 慶應大機械², 京大化³) ○大和伸好¹, 泰岡顕治², 増淵雄一³
- 119P** 分子動力学シミュレーションによる溶解度パラメータ推算 (東レ¹) ○北畑雅弘¹, 川上智教¹, 茂本勇¹
- 120P** MPI を用いた並列古典 MD プログラムの GPGPU 上での性能評価 (リンクセル法) (金沢工業大学 情報学部¹, 金沢工業大学 工学部²) 桜井 翔¹, 亀山 侑弥², 林 亮子³
- 121P** MPI を用いた並列古典 MD プログラムの GPGPU 上での性能評価 (DirectN² 法) (金沢工業大学 情報学部 情報工学科¹, 金沢工業大学 工学部 情報工学科²) ○亀山 侑弥¹, 桜井 翔¹, 林 亮子²
- 122P** レプリカ交換インターフェース (REIN) (理研 QBIC¹, 理研 CSR², 理研 AICS³, 理研 ASI⁴) ○宮下尚之^{1, 2, 3}, 李秀榮⁴, 杉田有治^{1, 2, 3, 4}
- 123P** GPU を用いたレプリカ交換分子動力学シミュレーションの高速化 (慶大院理工¹, 慶大理工², 慶大理工³, 電通大情報⁴, 慶大理工⁵) ○野村昂太郎¹, 老川稔², 川井敦³, 成見哲⁴, 泰岡顕治⁵
- 124P** MUSTERMD : Temperature Accelerated MD と Replica 交換法を用いた Multi Scale サンプリング手法の開発 (東大院新領域¹, 東大分生研²) ○山守優¹, 北尾彰朗^{1, 2}
- 125P** 分極振動子による極性溶媒の粗視化粒子モデル ((株) 豊田中央研究所) ○金城友之, 吉田広顕, 鷲津仁志
- 126P** closure effect を考慮した部分モル体積の計算 (九大理¹) ○川畑雄一¹, 秋山良¹
- 127P** Cs⁺ イオン-タンパク質系の古典分子動力学計算

- (日本原子力研究開発機構¹)○桜庭俊¹, 河野秀俊¹
- 128P** 分子シミュレーションにおけるデータ同化手法の開発
(理研 AICS¹, 理研 QBiC², 理研 ASI³)○松永康佑¹, 森貴治², 杉田有治^{1,2,3}
- 129P** 大きな粒子の拡散における摂動理論
(九大院理¹)○中村有花¹, 吉森明¹, 秋山良¹
- 130P** Efficient exchange algorithm for the replica exchange method
(理研 生命システム研究センター(QBiC)¹, 東大新領域²)○近藤寛子^{1,2}, 泰地真弘人^{1,2}
- 131P** 流体膜に対する圧力分布解析をもとにした関係式
(東北大学原子分子材料高等研究機構(WPI-AIMR)¹, 産業技術総合研究所(AIST)²)○中村壮伸¹, 篠田渉²
- 132P** 膜融合過程の自由エネルギー解析
(産業技術総合研究所)川本周平, 篠田渉
- 133P** 二成分系気液界面の分子動力学
(阪大工¹, 阪大工², 阪大工³)○山口恭平¹, 稲葉匡司², 矢野猛³
- 134P** 脂質二重膜周りの水分子の異常拡散
(慶大院理工¹, 理研², 慶大医³, 慶大理工⁴)○山本詠土¹, 秋元琢磨¹, 平野秀典², 安井正人³, 泰岡顕治⁴
- 135P** 微小気泡ダイナミクスへの界面活性剤の影響: MD-LBM 連成計算
(京大工¹, 京大工²)○稲岡篤志¹, 松本充弘²
- 136P** アルカノールアミン水溶液の CO₂ 反応速度推算法の分子動力学シミュレーションによる検討
(京大化研¹, 関西電力²)○古川博敏², 窪田善之², 松林伸幸¹
- 137P** 影響汎関数理論を用いた銅基板表面上に吸着されたセシウム原子のフォノンモードの振動緩和の研究
(名大院工¹, 東大院工², 京大院理³)○山内隆義¹, 山田篤志¹, 岡崎進¹, 大戸達彦², 山下晃一², 渡邊一也³, 松本吉泰³
- 138P** Hsp90 との結合・解離における ADP の解析
(金沢大理工)○川口一朋, 齋藤大明, 長尾秀実
- 139P** クラスタ展開法による置換ヘリセンの円二色スペクトルの解析
(阪大院工)○仲井義人, ○森直, 井上佳久
- 140P** H-ras-GTP 結合系の GTP 周辺ならびに H-ras-GDP 結合系の GDP 周辺における水分子の解析
(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
- 141P** 計算化学に支援された大腸菌機械受容チャネル MscL の開口挙動の解析
(名大・医¹, 名大院・医・細胞生物物理², 名大・革新ナノバイオデバイスセンター³)○山本泰康¹, 澤田康之², 曾我部正博^{1,2,3}
- 142P** 量子化学計算を用いたクラスレート水和物のゲスト分子占有率計算
(慶大理工¹, NRC²)○高橋和義¹, Saman Alavi², 大村亮¹
- 143P** 積分方程式理論を用いた生理条件下における同符号電荷間引力の制御の研究
(九大理¹)○藤原慎吾¹, 秋山良¹
- 144P** 磁性原子を内包した量子ドットの光励起スペクトル
(日大理工¹, 日大文理²)○佐甲徳栄¹, 石田浩²
- 145P** F1 モータータンパク質βサブユニットの全原子水和自由エネルギー解析
(京大化研)○浴本亨, 松林伸幸
- 146P** 筋小胞体カルシウムポンプの ATP/ADP 結合状態の分子動力学計算
(中央大・理工物理¹, 理研 ASI², 理研 AICS³, 理研 QBiC⁴)○小室靖明^{1,2}, 小林千草², 宗行英朗¹, 杉田有治^{2,3,4}
- 147P** MUBA MC 法による Lennard-Jones 流体の圧力誘起相転移と結晶構造の研究
(中京大国際教養)六車千鶴
- 148P** 第一原理計算による斜方輝石中の OH 振動スペクトルの再現
(東工大地惑¹, 岡山大地球研², 岡山大環境³)○櫻井萌¹, 佐久間博¹, 辻野典秀², 高橋栄一¹, 河村雄行³
- 149P** 分子間プロトン移動反応の量子的経路
(原子力機構)○志賀基之
- 150P** レプリカ交換分子動力学計算による糖鎖力場の検証
(中央大・理工物理¹, 理研 ASI², 理研 AICS³, 理研 QBiC⁴)○渡部茂久¹, 李秀榮², 二島渉², 宗行英朗¹, 杉田有治^{2,3,4}
- 151P** 完全固体・液体の熱力学 v4
(法政大生命科学)片岡洋石(311S)
- 152P** DNA-タンパク質複合体の解離過程の自由エネルギープロファイル計算
(原子力機構)米谷佳晃, 河野秀俊(302S)
- 153P** TMAO 添加による蛋白質溶媒和自由エネルギー変化の微視的解明: 3次元カークウッド-バフ積分法によるマッピング解析
(青山学院化学・生命¹, 名大院情報科学²)○優乙石¹, 中田恭子¹, 長岡正隆²(303S)
- 154P** けい酸塩鉱物結晶表面・表面間における水・水溶液の構造と物性
(岡山大環境科学)河村雄行(314S)
- 155P** 振動スペクトルからみえる水/疎水性液体界面の構造
(東北大院理¹)○石山達也¹, 佐藤祐史¹, 森田明弘¹(315S)

- 201P** ラミニン α 鎖由来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
(東京薬科大学¹, 東京薬科大生命²) ○山田 寛尚¹, 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
- 202P** FMO-MD 法の最近の進歩
(産総研バイオメディカル¹, 立教大理², お茶大理³, TS テクノロジー⁴, 東大生産研⁵) ○古明地 勇人¹, 加藤雄司, 佐藤真, 望月祐志, 山高博², 平山奈津実, 松田彩, 森寛敏³, 藤原崇幸⁴, 沖山佳生⁵
- 203P** 脂質二重層膜におけるグラミシジン A の構造と圧力特性
(金沢大学理工) ○齋藤大明, 川口一朋, 長尾秀実
- 204P** 細胞環境における蛋白質の構造安定性
(理研・AICS¹, 理研・QBiC², 理研・ASI³, ミシガン州立大⁴) ○原田隆平¹, 杉田有治^{1,2,3}, Michael Feig⁴
- 205P** 分子動力学法による散逸粒子動力学相互作用モデルの構築: Lennard-Jones 流体に関する検討
(東大工¹, 東北大流体研²) ○吉本勇太¹, 美馬俊喜¹, 福島啓悟², 柞淵郁也¹, 徳増崇², 高木周¹, 松本洋一郎¹
- 206P** 溶媒和モーターのエネルギー論
(工学院大教養¹, 九大院理²) ○徳永 健¹, 秋山 良²
- 207P** タンキラーゼー阻害剤複合体の結合自由エネルギー計算
(理化学研究所) 沖本憲明¹, 平野秀典¹, 藤田茂雄¹, 泰地真弘人¹
- 208P** シミュレーションによる 4-helix bundle をモデルにしたタンパク質の分子間相互作用面のデザイン
(東薬大生命, 筑波大数理物質¹) ○福田真己, 小松勇¹, 森河良太, 宮川毅, 高須昌子, 赤沼哲史, 山岸明彦
- 209P** 分子シミュレーションを用いた G9a の阻害剤開発に関する研究
(理研¹) ○平野秀典¹, 沖本憲明¹, 藤田茂雄¹, 森本元太郎¹, 泰地真弘人¹
- 210P** 細菌機械受容チャネル MscL の活性化における水-タンパク質間の協調過程の解析
(名大院・医・細胞生物物理¹, 名大・革新ナノデバイスセンター²) ○澤田康之¹, 曾我部正博^{1,2}
- 211P** 青色光受容体蛋白質の DNA 修復における電子トンネル移動経路と構造変化
(名大院理¹, 京大院理²) ○佐藤竜馬¹, 西岡宏任², 倭剛久¹
- 212P** Pd-TM(Fe,Co,Ni) 合金水素化物の磁性と電子構造計算
(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
- 213P** テロメアとテロメア関連タンパク質の親和性についての分子動力学シミュレーション
(東京大学工学系研究科原子力国際専攻¹, 東京大学工学系研究科原子力専攻², 東京薬科大学生命科学研究所³, コロラド州立大学⁴) ○冠城雅晃¹, 福田真己³, 宮川毅³, 森川良太³, 高須昌子³, 加藤宝光⁴, 上坂充²
- 214P** 経路積分分子動力学法を用いた水素ハイドレートの理論的研究
(金沢大院自然¹) ○東 真史¹, 三浦 伸一¹
- 215P** 芳香族炭化水素受容体とその共役因子間の特異的結合構造の解析: 古典分子動力学及びフラグメント MO 計算
(豊橋技術科学大学¹, RIKEN AICS², 東芝研究開発センター³) ○宮城慧¹, 村田享士郎¹, 伊藤聡², 石原-菅野 美津子³, 栗田典之¹
- 216P** リボヌクレアーゼ HI のリン酸ジエステル加水分解反応機構に関する計算化学的研究
(阪大蛋白研¹) ○鷹野優¹, 喜多真琴¹, 中村春木¹
- 217P** 相同タンパク質の構造ゆらぎの緩和
(慶大理工¹) ○小泉祐太¹, 光武亜代理¹, 高野宏¹
- 218P** 分子動力学シミュレーションを用いたポリオウイルスレセプター CD155 の水中における構造の解析
(名古屋大院工¹, 名古屋大院工・計算セ², 大阪大蛋白研³) ○水谷圭佑¹, 藤本和土¹, 安藤嘉倫¹, 山田篤志¹, 吉井範行², 中川敦史³, 岡崎進¹
- 219P** 微小液滴の蒸発に伴う冷却と凝固
(京都大工¹) 立見純一¹, ○松本充弘¹
- 220P** 剛体水モデルにおける水/氷共存状態の分子動力学シミュレーション
(慶大理工¹, Colorad School of Mines², 電通大情報理工³) ○高岩大輔¹, 坂牧隆司¹, Amadeu K. Sum², 成見哲³, 泰岡顕治¹
- 221P** H₂CNH₂⁺ の内部転換に伴う電子ダイナミクスに関する理論的研究
(東大院工) ○国定友隆, 牛山浩, 山下晃一
- 222P** アミロイド線維形成のレプリカ交換分子動力学シミュレーション
(名古屋大学大学院理学研究科¹, Laboratoire de Biochimie Theorique, Institut de Biologie Physico-Chimique²) ○西川直宏¹, Phuong Nguyen², Philippe Derreumaux², 岡本祐幸¹
- 223P** QM/MM-ER 法による ATP モデル分子の加水分解反応の自由エネルギー解析
(東北大学大学院理学研究科) 高橋英明, 三木雄詩, 近江 惇, 森田明弘
- 224P** 単純液体の熱伝導率: 温度および充填率依存性
(新潟大院自然¹, 新潟大理², バリ第 6 大³, オックスフォード大⁴) 石井良樹¹, 大野卓哉¹, 佐藤

- 圭介¹, 大鳥範和², M. Salanne³, P. A. Madden⁴
- 225P** 蛋白質系への緩和モード解析の適用
(慶應大理工物理) 長井俊樹, ○光武重代理, 高野宏
- 226P** 溶媒の効果を含めた溶質のダイナミクス: シャペロニンへの蛋白質の挿入過程
(九大院理¹, 神戸大理², 京大工³) ○原諒平¹, 天野健一², 木下正弘³, 吉森明¹
- 227P** 分子動力学シミュレーションを用いた抗精神病薬-GPCR複合体の薬理作用メカニズムの解明
(名大院工¹, 大日本住友製薬株式会社²) ○藤井秀幸¹, 藤本和士¹, 山田篤志¹, 岡崎進¹, 市川治², 岡崎一彦², 山崎一人²
- 228P** umbrella sampling 法を用いたタンパク質中のリガンド移動メカニズムの解明
(名大院理¹, 慶應大物理²) 都築峰幸¹, 光武重代理², 倭剛久¹
- 229P** 粗視化モデル MD による RNA 立体構造予測
(産総研・CBRC) 亀田倫史
- 230P** ミオシン分子のレバーアームスイングと大域静電相互作用ネットワークの相関
(早大先進理工¹) ○大貫隼¹, 佐藤昂人¹, 梅澤公二¹, 高野光則¹
- 231P** SBDD を用いた CRK SH2 ドメインに対するタンパク質間相互作用阻害ペプチドの設計
(東京大新領域¹, 理研分子設計², 理研 NMR パイプ³, 産総研分子機能⁴, 理研細胞システム⁵, シカゴ大ベンメイ癌研⁶) 山岸純也^{1,2}, 沖本憲明², 葛西卓磨³, 末永敦⁴, 岡田真理子⁵, 今本公⁶, 泰地真弘人^{1,2}
- 232P** 散逸粒子動力学シミュレーションによるナノチューブ内におけるトリブロック Janus 粒子の自己集合構造
(電通大院情報理工¹, 慶應大理工², University of Nebraska-Lincoln³) ○荒井規允¹, 泰岡顕治², Xiao Cheng Zeng³
- 233P** 荷電コロイド粒子まわりのイオン分布とコロイド粒子間の有効相互作用
(京大院工¹) ○池田一郎¹, 松本充弘¹
- 234P** 球状ミセル表面で界面活性剤分子の親水基がなす構造と動力学に関する分子動力学計算による研究
(名大工¹, 名大院工・計算セ², 名大院工³) 瀬高悠太¹, ○吉井範行², 二村佑樹³, 藤本和士³, 岡崎進^{1,3}
- 235P** 両親媒性分子による球状ミセル生成の分子動力学シミュレーション
(名古屋大学大学院工学研究科¹, 名古屋大学大学院工学研究科計算センター²) ○河田真治¹, 小森美佳¹, 藤本和士¹, 吉井範行², 岡崎進¹
- 236P** イオン輸送における界面揺らぎの影響の解析
(東北大院理¹) ○吉川信明¹, 森田明弘¹
- 237P** ピペラジンのカーバメート生成反応の標準自由エネルギー計算
(京大化研¹, 関西電力²) ○窪田善之^{1,2}, 古川博敏^{1,2}, 松林伸幸¹
- 238P** 液体中の縦波と横波の mixing 機構
(広島大学大学院総合科学研究科) 宗尻修治, 星野公三
- 239P** 水和粘土鉱物の水の挙動の分子動力学計算
(東工大理工¹, 岡山大環境²) ○佐藤毅¹, 河村雄行²
- 240P** 凹凸面に衝突したときの水滴の内部圧力の導出
(福井大工¹, 慶應大理工², Univ. Nebraska³, 九州大学 I2CNER⁴) ○古石貴裕¹, 泰岡顕治², X. C. Zeng³, 藤川茂紀⁴
- 241P** ナノ細孔内の水の気液相境界に関する分子動力学シミュレーション
(東大工¹, 東北大流体研²) ○美馬俊喜¹, 杵淵郁也¹, 吉本勇太¹, 福島啓悟², 徳増崇², 高木周¹, 松本洋一郎¹
- 242P** モンテカルロ直接シミュレーションによる固体高分子形燃料電池マイクロポーラス層内の気体輸送解析
(東大工¹, FC-Cubic², 東北大流体研³) 杵淵郁也¹, 大山淳平², 横山浩司², 久保則夫², 徳増崇³, 松本洋一郎¹
- 243P** バナジウム水素化物中の格子欠陥に関する計算科学的研究
(産総研) 小川 浩
- 244P** ナノスリットに閉じ込められた液晶の分子動力学シミュレーション
(東北大工学部¹, 東北大 WPI and 東北大多元研², JST-CREST³) ○松原裕樹^{1,3}, Pichierri Fabio^{1,3}, 栗原和枝^{2,3}
- 245P** LD-BTE 計算によるフォノン物性および熱伝導のシミュレーション
(京大工院¹, CMU²) ○正尾裕輔¹, Ankit Jain², Jason Larkin², Alan McGaughey²
- 246P** 酸化セリウムにおける酸素・セリウムイオンフレンケル対の挙動
(純真学園大学保健医療¹, 九州大学大学院工², CEA Saclay³) ○椎山謙一¹, 高木聖也², 安田和弘², 松村晶², Alain Chartier³, Constantin Meis³
- 247P** ボルツマン方程式に基づく固体中のエネルギー輸送解析
(京大工) 今西保奈美, 倉田博文, 正尾裕輔, 松本充弘
- 248P** 分子動力学法を用いた二次元液晶のミクロスコピックな拡散挙動解析
(北里大理¹, 早大先進理工²) ○渡辺豪¹, 多辺由佳²
- 249P** ナノ細孔中の分子の固液平衡条件を決定するための新規手法の開発
(慶大理工¹, ネブラスカ大化学²) ○金子 敏宏

- ¹, Jaecil BAI², 泰岡 顕治¹, 光武 亜代理¹, Xiao Cheng ZENG² (113S)
- 250P** 分子クラスターにおけるポテンシャルエネルギー曲面上のダイナミクス
(慶大理工¹, ネブラスカ大化学²) 秋元琢磨¹, 金子敏宏¹, 泰岡顕治¹, X. C. Zeng² (114S)
- 251P** Basin-Hopping 法と Rigid Body 法を組み合わせた生体分子のリガンド結合自由エネルギー計算法の開発と Aldose Reductase への応用
(総研大物理¹, ケンブリッジ大学化学²) ○望月建爾¹, David Wales² (206S)
- 252P** 地殻中の超臨界水の物性を予測するための H₂O モデルの開発
(東工大理工¹, 東北大理², 岡山大環境³, 佐賀大⁴) ○佐久間博¹, 市來雅啓², 河村雄行³, 藤田清士⁴ (207S)
- 253P** ダウンフォールディング法による炭素系ポテンシャルの開発
(核融合研¹, 鳥取大院工², 名大院工³) ○伊藤篤史¹, 吉本芳英², 高山有道¹, 中村浩章^{1,3} (313S)
- 254P** 分極モデルとエネルギー表示の理論による溶媒和自由エネルギー計算の方法論の開発
(東北大院理) ○鈴岡大樹, 高橋英明*, 石山達也, 森田明弘 (208S)
- 255P** 膜貫通タンパク質の膜内配置に関する自由エネルギー解析
(京大化研¹, 分子研²) ○水口朋子^{1,2}, 松林伸幸¹ (309S)