

第29回分子シミュレーション討論会 講演プログラム

(2015年11月4日最終更新)

主催 : 分子シミュレーション研究会
協賛 : 日本化学会, 生物物理学会, 日本薬学会, 日本コンピュータ化学会,
分子科学会, 日本物理学会, 応用物理学会, 高分子学会, 溶液化学研究会
協賛企業 : 株式会社 HPC テック, 株式会社クロスアビリティ, 株式会社 JSOL,
リアルコンピューティング株式会社, 株式会社菱化システム
会期 : 2015年11月30日(月)~2015年12月2日(水)
会場 : 朱鷺メッセ(新潟コンベンションセンター)
〒950-0078 新潟市中央区万代島6番1号
新潟駅万代口より 徒歩20分, バス15分, タクシー5分
HP : <http://mol-sim.sakura.ne.jp/sympo/msssj29/>

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)

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)

P=ポスター発表

S, P=15分講演+ポスター発表

講演者記号 : ○印=発表者

1日目 11月30日(月)

8:30-9:30 開場, 受付

9:30-9:35 開会の辞 会長 岡崎 進(名大)

— 午前の部 —

9:35-10:30 口頭発表(生体分子 I)

座長: 齋藤大明(金沢大)

101L リガンド-タンパク質複合体の分散力相互作用の検討: Hatree-Fock 理論に対する分散力補正 (徳島大院薬) ○吉田 達貞, 林 敬久, 倉橋 昌大, 馬 島彬, 笹原 克則, 中馬 寛

102S 分子動力学法及び密度汎関数法を用いた CYP2D6 におけるチオリダジンの代謝機構の解明: 結晶結合ポーズと代謝物の関係について

(徳島大学大学院・医歯薬学研究部 創薬理論化学分野¹, 大塚製薬株式会社 徳島研究所 薬物動態研究部²) ○笹原 克則^{1,2}, 馬島 彬¹, 吉田 達貞¹, 中馬 寛¹

103S 新規尺度によるたんぱく質構造変化パスの構築方法 (近大先端研) ○米澤康滋

— 休憩 10:30-10:40 —

10:40-11:35 口頭発表(生体分子 II)

座長: 杉田有治(理研)

104S Trp-cage ミニプロテインにおける熱変性のエネルギー相関分析

(阪大基礎工) ○加茂文貴, 石塚良介, 松林伸幸
105S ポリオウィルス-CD155 レセプター結合初期過程の分子動力学法による研究

(名大院工¹, 名大院工・計算科学センター², 阪大蛋白研³) ○遠藤裕太¹, 水谷圭佑¹, 小嶋秀和¹, 藤本和士¹, 山田篤志¹, 安藤嘉倫¹, 吉井範行², 篠田渉¹, 中川敦史³, 岡崎進¹

106L 粗視化分子モデリング: 膜タンパクへの拡張 (名大院工) 川本周平, ○篠田渉

— 休憩 11:35-11:50 —

11:50-12:50 ポスター発表 101P-165P (奇数)

(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 101P-165P (偶数)
(講演タイトルはプログラムの末尾に記載)

— 休憩 14:50-15:00 —

15:00-15:45 口頭発表 (生体分子 III)
座長: 吉井範行 (名大)

- 107S 分子動力学法により調べた A β アミロイド線維の揺らぎと構造
(分子研¹, 総研大²) ○奥村久士^{1,2}, 伊藤暁^{1,2}
- 108S クーロンレプリカ置換法による A β フラグメントのオリゴマー形成経路に関する研究
(分子研¹, 総研大²) ○伊藤暁^{1,2}, 奥村久士^{1,2}
- 109S 拡張アンサンブル法の混合脂質二重膜系への応用
(理研) ○森貴治, 杉田有治

— 休憩 15:45-15:55 —

15:55-17:10 口頭発表 (ソフトマター I)
座長: 秋山 良 (九大)

- 110L 泳動するモデル微生物の集団運動
(京大工) 大山倫弘, John J. Molina, ○山本量一
- 111S 分子モデルと Sogami モデルによる荷電コロイド分散系の構造 (v2)
(法大生命) ○片岡洋右
- 112S 高分子電解質ブラシ系の粗視化シミュレーション
(豊田中央研究所) ○金城友之, 吉田広顕, 鷺津仁志
- 113S 粗視化モデルに基づいたゴム材料の MD シミュレーション
(産総研) ○戸田昌利, 森田裕史

— 休憩 17:10-17:20 —

17:20-18:35 口頭発表 (計算手法・高速化)
座長: 奥村久士 (分子研)

- 114S 高速多重極展開法における圧力テンソル
(名大院工・計算セ¹, 名大院工²) ○吉井範行¹, 安藤嘉倫^{1,2}, 岡崎 進²
- 115S 短距離古典 MD における加速化手法の系統的構築: 近接リスト-セル分割ハイブリッド法とその最適リスト半径・セルサイズ
(新潟大院自然) ○淡路大輔, 金鋼

- 116S 一次相転移現象に適したレプリカ交換法の変種の開発
(慶応大院工) ○土居英男, 泰岡顕治
- 117S Adaptive QM/MM 法の赤外分光計算への応用
(東大先端研¹, 東工大バイオ²) ○渡邊宙志¹, 阪野美紗², 櫻井実²
- 118S 半経験的分子軌道法を利用した有機分子におけるイオン吸着サイトの全探索
(原子力機構シ計セ¹, 分子研²) ○太田幸宏¹, Sergi Ruiz-Barragan^{1,2}, 町田昌彦¹, 志賀基之¹

2日目 12月1日 (火)

— 午前の部 —

9:00-10:15 口頭発表 (ソフトマター II)
座長: 金城友之 (豊田中研)

- 201S 粗視化モデルを用いたポリエチレンにおけるラメラ構造の破壊シミュレーション
(東北大金研¹, JST さきがけ²) ○樋口祐次^{1,2}, 久保百司¹
- 202S 高分子の衝撃破壊 II: ポリエチレン破断の全原子シミュレーション
(名大院工¹, 京大福井謙一記念研究センター²) ○藤本和士¹, 服部智成¹, 中垣雅之², 榎 茂好², 篠田 渉¹, 岡崎 進¹
- 203S 分子動力学法を基盤としたフォトン・アップコンバージョン液晶の微視的構造の解明
(北里大理¹, 九大院工², 九大分子システムセ³, JST さきがけ⁴) ○渡辺豪¹, 堀内達哉¹, 間瀬一馬², 楊井伸浩^{2,3,4}, 君塚信夫^{2,3}
- 204S 有機半導体薄膜のインクジェット印刷形成の MD 計算による検討
(産総研¹, 東大²) ○米谷慎¹, 峯廻洋美¹, 山田寿一¹, 長谷川達生^{1,2}
- 205S 散逸粒子動力学法を用いたオニオン状ベシクルの自己集合
(近大理工) ○荒井規允

— 休憩 10:15-10:25 —

10:25-11:40 口頭発表 (溶液 I)
座長: 古石貴裕 (福井大)

- 206S poly(N-isopropylacrylamide) の圧力誘起 coil-to-globule 転移の分子機構
(岡大自然) ○望月建爾, 墨智成, 甲賀研一郎
- 207S 液相からの気泡核生成の大規模分子動力学計算と古典的核生成理論の改良
(北大低温研¹, チューリッヒ大学²) ○田中今日子¹, 田中秀和¹, Diemand Juerg², Angelil Raymond²

208S 分子動力学シミュレーションによる空気/水界面の二次元和周波スペクトル計算
(富山大理工¹, 東北大院理²) ○石山達也¹, 森田明弘²

209S Microscopic Structure of Organic Electrolyte Interface by Molecular Dynamics and Sum Frequency Generation Spectroscopy

(Department of Chemistry, Tohoku Univ.¹, Catalysis Research Center, Hokkaido Univ.², ESICB, Kyoto Univ.³) ○ Wang Lin^{1,3}, Peng Qiling², Ye Shen^{2,3}, Morita Akihiro^{1,3}

210S 界面構造の座標化による油水界面のイオン輸送の解析、及び、拡張系の方法を用いた電位差一定のアンサンブルの実現

(東北大院理¹, 京大 ESICB²) ○吉川信明¹, Wang Lingjian¹, 森田明弘^{1,2}

— 休憩 11:40-11:55 —

11:55-12:55 ポスター発表 **201P-265P** (奇数)

(講演タイトルはプログラムの末尾に記載)

— 昼食 12:55-13:55 —

— 午後の部 —

13:55-14:55 ポスター発表 **201P-265P** (偶数)

(講演タイトルはプログラムの末尾に記載)

— 休憩 14:55-15:05 —

15:05-16:00 口頭発表 (溶液 II)

座長：石山達也 (富山大)

211L 電荷分布の異方性が水素結合、ハロゲン結合の方向依存性に与える影響

(産総研機能化学) ○都築誠二, 内丸忠文

212S MD/DFT 自己無撞着計算法によるイオン液体の有効電荷の解析

(阪大基礎工¹, 京大 ESICB²) ○石塚良介^{1,2}, 松林伸幸^{1,2}

213S 溶液中会合イオンの解離カイネティクスの多様性：溶媒反応座標を用いた自由エネルギー地形解析

(原子力機構) ○米谷佳晃

— 休憩 16:00-16:10 —

16:10-17:00 招待講演 I

座長：金 鋼 (新潟大)

214IL 単純分子ガラス実験で迫るガラス転移の謎
(東大物性研) 山室 修

— 休憩 17:00-17:10 —

17:10-17:45 学術賞受賞講演

215AL

17:45-18:25 研究会総会

— 休憩 18:25-18:35 —

18:35-20:35 懇親会

会場：朱鷺メッセ 2F 中会議室

3 日目 12 月 2 日 (水)

— 午前の部 —

9:00-10:10 口頭発表 (量子系)

座長：志賀基之 (原研)

301L 分子性固体としての固体水素の動的解析と固-液相転移の実現

(京大院理¹, JST さきがけ²) ○金賢得^{1,2}

302S パラ水素クラスターの量子構造ゆらぎに関する変分経路積分法を用いた研究

(金沢大理工) ○三浦伸一

303S 高次近似の密度行列を用いた変分経路積分分子動力学法の分子系への応用

(金沢大・院自然) ○上林勇貴, 三浦伸一

304S 三重項-三重項消滅光アップコンバージョンの反応機構の理論的研究

(筑波大計セ¹, 産総研無機機能², 阪大院基礎工³, 筑波大院数物⁴) ○佐藤竜馬¹, 鎌田賢司², 岸 亮平³, 中野雅由³, 重田育照^{1,4}

— 休憩 10:10-10:20 —

10:20-11:30 口頭発表 (第一原理)

座長：三浦伸一 (金沢大)

305S グラフェン上のペンタセン - 第一原理分子動力学計算

(岩手大工) ○西館数芽, 吉本則之, 長谷川正之

306S Optical Properties of Polymers from Long-Range Corrected DFT Calculations

(Mitsui Chemicals, Inc.) Shintaro Maekawa,
○ Krzysztof Moorthi

307L Si/O 超格子の新構造とその物性
(産総研¹, IMEC², KU Leuven Univ.³, Antwerp Univ.⁴) ○西尾憲吾¹, Anh Khoa Augustin Lu^{2,3},
Geoffrey Pourtois^{2,4}

308S A Theoretical Study of Green Organic Reaction in Water
(JAEA¹, IMS²) ○Motoyuki Shiga¹, Sergi Ruiz-Barragan^{1,2}

— 休憩 11:30-11:45 —

11:45-12:35 招待講演 II

座長：森下徹也（産総研）

309IL 構造不規則系の大規模第一原理分子動力学シミュレーション
(熊本大院自然) 下條冬樹

— 昼食 12:35-13:35 —

— 午後の部 —

13:35-14:40 口頭発表（ガラス）

座長：山本量一（京大）

310L 構造ガラスのダイナミクスの次元依存性：動的不均一性における短時間振動と長時間協調再配置の区別
(東大物性研¹, 名大理², 新潟大自然³) ○芝隼人¹, 川崎猛史², 金鋼³

311L ランダムピン系における理想ガラス転移
(名古屋大物理¹, モンペリエ第二大², 京大福井セ³) 尾澤岬^{1,2}, Walter Kob², ○池田昌司³, 宮崎州正¹

312S エポキシ樹脂の反応粗視化分子動力学解析：壁面近傍の界面相におけるガラス転移温度計算
(株)日立製作所¹, ダルムシュタット工科大学²) ○杉井 泰介¹, Michael Langeloth², Michael C. Böhm², Florian Müller-Plathe²

— 休憩 14:40-14:50 —

14:50-15:45 口頭発表（過冷却・輸送挙動 I）

座長：池田昌司（京大）

313L 過冷却液体の流体輸送解析

(東大生産研) ○古川亮

314S プレピーク構造を持つ液体の輸送物性

(名大院工) ○山口毅

315S 1 分子軌道の揺らぎの解析による拡散性の動的な変化の検出

(慶大理¹, 金沢大理², 鳴教大教育³) ○秋元琢磨¹, 畝山多加志², 宮口智成³

— 休憩 15:45-15:55 —

15:55-16:55 口頭発表（過冷却・輸送挙動 II）

座長：秋元琢磨（慶大）

316S 分散系におけるシアシックニングのメカニズム：慣性および粒子間摩擦の影響

(名大理¹, 京大福井センター², モンペリエ大学³)

○川崎猛史¹, 池田昌司², Ludovic Berthier³

317S 磁性微粒子の薄膜形成条件に関するブラウン動力学シミュレーション

(和高専機¹, 三重大工², 九工大工³) ○早坂良¹, 岸谷一輝², 栗山洸³

318S 分子動力学法による固体酸化物形燃料電池の燃料極におけるニッケル粒子のシンタリング及び劣化の検討

(東北大金研) ○許競翔, 樋口祐次, 尾澤伸樹, 久保百司

319S ナノ粒子の Stokes-Einstein の関係：分子スケールからの拡張

(新潟大院自然¹, 新潟大理²) ○石井良樹¹, 大鳥範和²

16:55-17:00 閉会の辞

大鳥範和（新潟大）

ポスター発表

(下線は 15 分口頭発表と同じ)

1 日目

101P QM/MM (ONIOM) 法を用いたシステインプロテアーゼによる馬尿酸フェニルエステル加水分解反応の理論的考察

(徳島大院薬) ○倉橋昌大, 馬島彬, 吉田達貞, 中馬寛

102P 拡張アンサンブル分子動力学シミュレーションによるアイソザイム選択的ヒストン脱アセチル化酵素阻害剤の選択性の解明

(名大院理¹, 京府医大院医², JST-CREST³, 名大院理構造生物研⁴, 名大院工計算科学研⁵, 名大情報基盤セ⁶) ○塚本修一郎^{1,3}, 榮慶丈¹, 伊藤幸裕^{2,3}, 鈴木孝禎^{2,3}, 岡本祐幸^{1,3,4,5,6}

103P 水溶媒中の Hras-GTP/GDP 複合体における GTP/GDP 周辺の水分子の動き

(東京薬科大生命科学¹, 金沢大²) ○宮川毅¹, 森河良太¹, 高須昌子¹, 杉森公一², 川口一朋², 齋藤大明², 長尾秀実²

104P モデル細胞内混雑環境中の Ras/GAP 複合体における GTP 加水分解反応の QM/MM 計算

(理研 AICS¹, 京大院理², 理研³) ○神谷基司¹, 公文啓瑛², Po-Hung Wang³, 林重彦², 杉田有治³

- 105P** 熱ショックに伴う一本鎖 RNA の二次構造変化 : 分子動力学シミュレーションによる研究
(分子研¹, 総研大²) ○森義治¹, 奥村久士^{1,2}
- 106P** 分子科学計算を用いた自由エネルギー変化の線形則に基づくトリプシンの触媒反応メカニズムの詳細解析
(徳島大院薬) ○馬島彬, 倉橋昌大, 西村兆二郎, 吉田達貞, 中馬寛
- 107P** 分子動力学計算を用いた蛋白質 RNA 複合体立体構造予測
(お茶の水大・人間文化¹, 遺伝研², 東大・新領域³, 早稲田・理工⁴, 産総研・創薬基盤⁵) 由良 敬^{1,2}, 岩切 淳一³, 浜田 道昭⁴, 浅井 潔^{3,5}, ○亀田 倫史⁵
- 108P** アンサンブル分子ドッキングによる基質-タンパク質の結合構造予測: Estrogen Receptor への応用
(金沢大理工) ○齋藤大明, 川口一朋, 長尾秀実
- 109P** Parallel Cascade Selection MD と Markov State Model を用いたタンパク質構造変化の自由エネルギー計算
(東大総合文化, CMSI¹, 筑波大学計算科学研究センター², 東大分生研³) ○西原 泰孝¹, 原田 隆平², 北尾 彰朗³
- 110P** Trp-cage ミニプロテインにおける熱変性のエネルギー相関分析
(阪大基礎工) ○加茂文貴, 石塚良介, 松林伸幸
- 111P** メタダイナミクスによるリガンド結合構造探索とアルケミカル自由エネルギー計算
(富士通研究所) ○谷田義明, 松浦東
- 112P** 3D-RISM 理論を用いた水溶液中におけるアラニンジペプチドの自由エネルギーランドスケープ
(金沢大院自然) ○山口智, 岩崎宏, 三浦伸一
- 113P** 分子動力学法を用いた生体膜の水透過における自由エネルギー解析
(名大院工¹, 名大院工・計算科学センター²) ○山崎隼也¹, 伊藤太一¹, 安藤嘉倫², 篠田渉¹, 岡崎進¹
- 114P** 脂質二重層膜のダイナミクスと膜弾性に関する理論的研究
(金沢大院自然) ○堀口翔吾, 中川聖, 木下翔吾, 齋藤大明, 川口一朋, 長尾秀実
- 115P** 脂質二重膜近傍での GLP-1 の分子動力学シミュレーション
(東薬大生命) ○森 咲季子, 山田 寛尚, 野口 瑤, 宮川 毅, 森河 良太, 渡部 琢也, 高須 昌子
- 116P** 脂質膜間距離による膜の物性変化
(名大院工¹, 名大院工 計算科学センター²) ○井上未知子¹, 安藤嘉倫², 篠田渉¹, 岡崎進¹
- 117P** 粗視化分子動力学シミュレーションを用いた GM3/DPPC 膜の解析
(慶應大理工) ○井上堅斗, 山本詠士, 高岩大輔, 泰岡顕治, 三上益弘
- 118P** 散逸粒子動力学法による脂質二重膜内のフリック・フロップと脂質及び水との関係性の解明
(近大理工) ○和田直之, 荒井規允
- 119P** 多層ラメラ脂質二重膜間に働く相互作用と安定性に関する理論的研究
(金沢大理) ○田中勇真, 木下翔吾, 中川聖, 川口一朋, 齋藤大明, 長尾秀実
- 120P** 電位依存性プロトンチャネル VSOP における亜鉛イオンの影響
(広島市大・院・情報¹, JST-CREST², 東北大・院・医³, 近大・先端研⁴, 東北大・院・情報⁵, 東北大・メガバンク⁶, 東北大・加齢研⁷) ○近藤寛子^{1,2}, 城田松之^{3,5,6}, 米澤康滋^{2,4}, 鷹野優^{1,2}, 木下賢吾^{2,5,6,7}
- 121P** 表面を含む高分子結晶膜の気体拡散シミュレーション
(福井大院工) ○清水洗佑, 玉井良則
- 122P** 粗視化分子モデルを用いたキラル液晶相の分子シミュレーション
(慶大理工) ○野澤 拓磨, Paul Brumby, 泰岡 顕治
- 123P** 関節の潤滑機構を調べるための粗視化分子動力学モデルの開発
(京都大学) ○佐野晃二郎, 松本充弘
- 124P** アミロイド線維凝集に関する分子動力学法を用いた静電相互作用研究
(名大院理¹, 名大院理構造生物学研究センター², 名大院工計算科学連携教育研究センター³, 名大情報基盤センター⁴) ○合田拓矢¹, 岡本祐幸^{1,2,3,4}
- 125P** アミロイド線維形成物質の圧力依存性に関する分子動力学シミュレーション
(名大院理¹, 分子研², 総研大³, 名大院理構セ⁴, 名大院工計セ⁵, 名大情セ⁶) ○西川直宏^{1,2}, 森義治², 岡本祐幸^{1,4,5,6}, 奥村久士^{2,3}
- 126P** 散逸粒子動力学法を用いたナノチューブ内における疎水バンドを持つトリブロック Janus 粒子の自己集合
(近大理工) ○山西大, 荒井規允
- 127P** 流動中の高分子の変形履歴の可視化
(東北大理) ○村島隆浩
- 128P** アミロイドモデルペプチドを用いた凝集過程に注目した分子シミュレーション
(名大院理¹, 分子研²) ○榮 慶丈¹, 西川 直宏^{1,2}, 岡本 祐幸¹
- 129P** 散逸粒子動力学法を用いた分子内力の検討による分子モーターモデルの歩行モデル改良
(近大理工) ○北條雅一, 荒井規允
- 130P** 散逸粒子動力学法を用いた Janus ナノ粒子水溶液の管内流れと自己集合に関する研究
(近大理工) ○小林祐生, 荒井規允
- 131P** 高分子の衝撃破壊 I: ポリエチレンの切断ポテンシャルモデルの開発
(名大工院¹, 京都大学福井謙一記念研究センター²) ○服部智成¹, 藤本和士¹, 中垣雅之², 榎茂好², 篠田渉¹, 岡崎進¹
- 132P** 相変化材料のシミュレーション: 新規潜熱蓄熱材

- の理論設計に向けて
(産総研・ナノ材料¹, 未利用熱エネルギー革新的活用技術研究組合²) ○稲垣泰一^{1,2}, 石田豊和^{1,2}
- 133P** 第一原理分子動力学計算による 2-aminoethanol 水溶液中での CO₂ の反応解析
(関電技研¹, 電中研材料研², Comenius University and Slovak Academy of Sciences³) ○窪田善之¹, 大沼敏治², Tomáš Bučko³
- 134P** エネルギー表示法による水・オクタノール分配係数の推算
(東レ¹, 阪大院理², 阪大院基礎工³) ○北畑雅弘¹, 川上智教¹, 茂本勇¹, 満田祐樹², 松林伸幸³
- 135P** せん断流れ下におけるテレケリックポリマー水溶液の散逸粒子動力学シミュレーション
(近大理工) ○西村真都, 荒井規允
- 136P** 散逸粒子動力学シミュレーションによるテレケリックスターポリマー水溶液の構造解析
(近大理工) ○西田直人, 荒井規允
- 137P** 全原子モデルによる 1-プロパノール水溶液の構造とゆらぎ
(新潟大院自然¹, 新潟大理²) ○小川雅也¹, 石井良樹¹, 丸山健二¹, 大鳥範和²
- 138P** 分子動力学シミュレーションによる水-アルコール混合系の動的構造の研究
(広島大学大学院総合科学研究科) ○立花優侑, 宗尻修治
- 139P** 水/アルコール 2 成分系における表面張力温度依存性の解明
(東理大理工¹, 東理大 RIST²) ○坂口裕宜¹, 金子敏宏^{1,2}, 上野一郎^{1,2}
- 140P** 溶液による二酸化炭素の吸収
(長岡高専) ○松永茂樹
- 141P** 分子動力学シミュレーションと溶液理論によるイオン液体へのガス吸収の自由エネルギー解析
(阪大基礎工) ○山本椋一, 石塚良介, 松林伸幸
- 142P** アモルファス氷における分子拡散
(明大院理工¹, 明大理工²) ○青木 雅矢¹, 深澤 倫子²
- 143P** アモルファス氷表面の構造およびダイナミクス
(明大院理工) ○熊谷悠, 深澤倫子
- 144P** ヨウ化銀表面における氷の不均一核生成に関する分子動力学シミュレーション
(慶大理工) ○高岩大輔, 今井尚子, 徐東郁, 泰岡顕治
- 145P** 2つの長さスケールをもつ球対称・単成分ポテンシャルの水的異常性
(新潟大院自然) ○樋口沙希, 淡路大輔, 金鋼
- 146P** 単糖水和殻中の水分子振動スペクトル解析
(慶應大理¹, 慶應大医²) ○友部勝文¹, 飯島崇², 山本詠士¹, 安井正人², 泰岡顕治¹
- 147P** 形状による水の凝縮特性の分子動力学法を用いた解析
(慶大理工) ○徐東郁, 泰岡顕治
- 148P** 固体表面への水滴の衝突及び跳ね返りの分子動力学シミュレーション
(福井大工¹, 慶大理工², Univ. Nebraska³) ○古石貴裕¹, 泰岡顕治², X. C. Zeng³
- 149P** 対向する自己駆動粒子系におけるレーン形成とその出現過程の解明
(新潟大院自然) ○池田光佑, 金鋼
- 150P** LAMMPS を用いたマイクロ流路内の単純流体の流れ
(兵庫県大シ) ○加島悠, 安田修悟
- 151P** 過冷却領域における単純液体の輸送係数と Stokes-Einstein の関係
(新潟大院自然¹, 新潟大理²) ○宮本祥平¹, 石井良樹¹, 大鳥範和²
- 152P** 冷媒混合による潤滑油の粘度変化予測に向けた分子動力学計算
(日立製作所) ○松本茂紀, 加賀爪明子, 守谷浩志
- 153P** パーシステントホモロジーによるアモルファス構造の記述
(東北大学 AIMR) ○中村壮伸
- 154P** 分子動力学シミュレーションを用いたメタンハイドレートの相平衡状態の予測
(慶大理工¹, Colorado School of Mines²) ○湯原大輔¹, Paul Brumby¹, David T. Wu², Amadeu K. Sum², 泰岡顕治¹
- 155P** 密度汎関数法を用いた水素ハイドレート, 窒素ハイドレートの振動解析
(慶大理工¹, 工学院大工², Colorado School of Mines³) ○山田基¹, 平塚将起², Wu, David T.³, Sum, Amadeu K.³, 泰岡顕治¹
- 156P** ナノ多孔質体に閉じ込められた分子の融点変化の研究
(東理大理工) ○金子敏宏
- 157P** アンモニアを含むクラスレート水和物のゲスト-ホスト間相互作用
(工学院大工¹, 慶應大理工²) ○平塚将起¹, 大村亮², 泰岡顕治²
- 158P** 汎用 MD ソフトウェア MODYLAS の異方的な MPI プロセス分割および基本セル分割への拡張
(名大院工 計算科学セ¹, 名大院工²) ○安藤嘉倫¹, 吉井範行¹, 岡崎進²
- 159P** Zero-multipole 法による長時間分子動力学シミュレーション
(東大新領域) ○桜庭俊
- 160P** Parallelization of molecular dynamics on hybrid CPU/GPUs for large scale simulation
(理化学研究所¹, NVIDIA²) ○Jaewoon Jung¹, 成瀬彰², 小林千草¹, 杉田有治¹
- 161P** マルチカノニカルアンサンブルを生成するハイブリットモンテカルロ法の開発
(金沢大院自然) ○田川従道, 三浦伸一
- 162P** GPU を用いた分子動力学シミュレーションの開発

(広島大学総合科学部¹, 広島大学大学院総合科学研究科²) ○佐久間翔太¹, 宗尻修治²

- 163P** Cesàro summation を利用した Green-Kubo 式による粘度算出
(株)クロスアビリティ¹, 阪大基礎工²) ○竹内宗孝¹, 坂牧隆司¹, 松林伸幸²
- 164P** テトラグライムを用いる Li-Glyme 錯体系溶媒和イオン液体中のリチウムイオン局所構造
(新潟大院自然¹, 熊本高専², 産総研³, 山口大⁴, 電中研⁵, 横浜国大工⁶, 山形大理⁷) ○齊藤蒼思¹, 松上優², 都築誠二³, 渡辺日香里¹, 上野和英⁴, 関志朗⁵, 獨古薫⁶, 渡邊正義⁶, 亀田恭男⁷, 梅林泰宏¹
- 165P** HFE 希釈系 [Li(G4)][TFSA] 溶媒和イオン液体の液体構造
(新潟大院自然¹, 山口大², 産総研³, 電中研⁴, 横浜国大工⁵, 山形大理⁶) ○齊藤蒼思¹, 上野和英², 土井寛之¹, 渡辺日香里¹, 都築誠二³, 関志朗⁴, 獨古薫⁵, 渡邊正義⁵, 亀田恭男⁶, 梅林泰宏¹

2 日目

- 201P** 血液凝固因子 Xa とリガンドとの結合活性に関する結合サイトの水の解析
(富士通研) ○佐藤博之, 松浦東
- 202P** 青色光受容体の UV 損傷 DNA 認識機構
(名大院 理¹, 筑波大計セ²) ○木村公耶¹, 佐藤竜馬², 倭剛久¹
- 203P** 抗腫瘍活性ペプチド RA-VII の分子動力学シミュレーションを用いた構造解析
(東薬大・生命¹, 東薬大・薬²) ○野口瑤¹, 山田寛尚¹, 森咲季子¹, 宮川毅¹, 森河良太¹, 横島智², 一柳幸生², 竹谷孝一², 高須昌子¹
- 204P** アンブレラサンプリングを用いた四量体型サルコシン酸化酵素における生成物の選択的移動経路の検証
(北里大理) ○中嶋大祐, 渡辺豪, 鈴木春男, 米田茂隆
- 205P** 多層フラグメント分子軌道法を利用した効率的なタンパク-リガンド間相互作用の計算
(理研 QBiC) ○大塚教雄, 沖本憲明, 泰地真弘人
- 206P** 核酸分子の主鎖二面角力場パラメータ開発
(東京大学先端科学技術研究センター¹, 富士通株式会社²) ○三井崇志^{1,2}, 藤谷秀章¹
- 207P** 電解質水溶液中において同じ符号を持つ 2 つの大きな帯電粒子間に働く力の分子動力学法による研究—ウイルス-レセプター間相互作用の理解に向け
(名大院工¹, 名大工²) ○小嶋秀和¹, Nurul Najwa², 遠藤祐太¹, 藤本和士¹, 篠田渉¹, 岡崎進¹
- 208P** 分子シミュレーションによるタンパク質-リガンド相互作用に関する研究
(理研 QBiC) ○平野秀典, 沖本憲明, 大塚教雄, 泰地真弘人
- 209P** 分子科学計算を用いた HIV-1 protease とアロフェニルノルスタチン骨格を持つ化合物との複合体の精密相互作用解析
(徳島大院薬) ○林敬久, 福田修平, 岡尚生, 吉田達貞, 中馬寛
- 210P** ヒストン脱アセチル化酵素 (HDAC) —ベンズアミド系阻害剤複合体形成に関する結合自由エネルギー変化の非経験的分子軌道法に基づく相関解析
(徳島大院薬) ○濱野綾那, 谷山萌, 吉田達貞, 中馬寛
- 211P** タンパク質の残基間相互作用に関する理論的研究
(金沢大理工) ○川口一朋, 齋藤大明, 長尾秀実
- 212P** 分子動力学法を用いた自己集合活性化薬による B 型肝炎ウイルス外殻蛋白質の構造変化の解析
(北里大理) ○佐藤俊輔, 渡辺豪, 米田茂隆
- 213P** アクアポリンの水分子透過に関する分子シミュレーション
(慶大院理工¹, 慶大医², 慶大理工³) ○山本詠士¹, 秋元琢磨¹, 安井正人², 泰岡顕治³
- 214P** タンパク質ビーズモデルの構造最適化
(北大院理) ○竹内浩
- 215P** 分子シミュレーションによるアクアポリン-0 構造変化の研究
(名大院理¹, 名大院理構造生物学研究センター², 名大院工計算科学連携教育研究センター³, 名大情報基盤センター⁴) ○松原大貴¹, 岡本祐幸^{1,2,3,4}
- 216P** 逆状態分布関数に基づく効率的タンパク質構造サンプリング手法の開発
(筑波大学 数理物質系¹, 広島市立大学 大学院情報科学研究科², 筑波大学 計算科学研究センター³, JST-CREST⁴) ○原田隆平^{1,3}, 鷹野優^{2,4}, 重田育照^{1,3,4}
- 217P** 白内障関連タンパク質 γ S- α クリスタリンとその変異体の分子動力学シミュレーションによる構造比較
(東京薬科大生命) ○小澤愛, 山田寛尚, 森咲季子, 野口瑤, 宮川毅, 森河良太, 高須昌子
- 218P** Prediction of Protein-ligand Binding Affinities Using Molecular Mechanics and Quantum Mechanics Calculations
(理研) ○沖本憲明, 大塚教雄, 平野秀典, 泰地真弘人
- 219P** ヘムタンパク質にみられるヘムの分子構造—電子構造—機能相関
(広市大院情報¹, 大阪大学蛋白研²) ○鷹野優^{1,2}, 今田康博¹
- 220P** 散逸粒子動力学シミュレーションによる二成分系液晶の構造の解析
(近大理工) ○西山雄一郎, 荒井規允
- 221P** ナノスリット内に閉じ込められた円盤状両親媒性液晶分子の分子シミュレーション

- (近大理工) ○吉岡峰明, 荒井規允
- 222P** 分子動力学法を用いた基板上の Tetra-PEG ゲル形成シミュレーション
(東薬大生命¹, 東京大工²) ○和出沙弥香¹, 糸賀響¹, 高須昌子¹, 森河良太¹, 宮川毅¹, 酒井崇匡², 鄭雄一²
- 223P** 陽電子寿命法の高度化を目指した分子動力学法の援用: 非晶高分子自由体積の評価
(産総研) ○高橋和義, 三浦俊明, 萩原英昭, 伊藤賢志, 下位幸弘
- 224P** 散逸粒子動力学法を用いた細胞膜モデル内における両親媒性分子の自己集合に関する研究~閉じ込め効果による自己集合の違い~
(近大理工) ○吉本裕貴, 荒井規允
- 225P** 酸素吸着鉄ポルフィリン錯体の密度汎関数法に基づく酸素解離過程の研究
(金沢大自然¹, 金沢大理工²) ○北川直裕¹, 小幡正雄¹, 小田竜樹²
- 226P** 固液界面における高分子電解質の構造
(兵庫県大シミュ¹, 京大 ESICB²) ○鷺津仁志^{1,2}
- 227P** 分子動力学計算による陰イオン/非イオン界面活性剤混合ミセルの可溶性機構の研究
(名大院工) ○武田康助, 藤本和土, 吉井範行, 岡崎進
- 228P** 多体散逸粒子動力学法による固体表面上における高分子液滴のサイズ依存性に関する研究
(近大理工) ○角谷直輝, 荒井規允
- 229P** 散逸粒子動力学法を用いた固体高分子形燃料電池における高分子の形状と自己集合膜の関係
(近大理工) ○藪田明優, 荒井規允
- 230P** 陽イオン性、陰イオン性、非イオン性ミセルへの疎水性分子の可溶化の自由エネルギー解析
(阪大院基礎工) ○伊達淳, 石塚良介, 松林伸幸
- 231P** 枯渇相互作用を考慮したコロイド粒子内封ベシクルのモンテカルロシミュレーション
(東薬大生命¹, 日女大理², 慈恵医大³) ○糸賀響¹, 森河良太¹, 宮川毅¹, 山田寛尚¹, 夏目ゆうの², 植田毅³, 高須昌子¹
- 232P** 表面力測定装置によるフォースカーブから円柱側面上の溶媒密度分布への変換理論
(京大工¹, 京大院工²) ○橋本康汰¹, 天野健一², 西直哉², 作花哲夫²
- 233P** 熔融アルカリハロゲン化物の輸送係数の定式化
(新潟大院自然¹, 新潟大理², パリ第6大³) ○笠井智¹, 石井良樹¹, 大鳥範和², Mathieu Salanne³
- 234P** 熔融アルカリ土類ハロゲン化物の相互作用モデリング
(新潟大院自然¹, 新潟大理²) ○喜古佐太郎¹, 笠井智¹, 石井良樹¹, 大鳥範和²
- 235P** MD 計算による擬2次元流体の相変化シミュレーション
(京都大工) ○粟生貴志, 松本充弘
- 236P** 分子動力学 (MD) シミュレーションによる生体膜/水界面の振動スペクトルと水素結合構造
(富山大理工¹, 東北大院理²) ○寺田大地¹, 石山達也¹, 森田明弘²
- 237P** 溶媒和イオン液体のイオン性の解析
(名大院工¹, 産総研², 山口大院医³, 横国大院工⁴) ○畑中佑太¹, 篠田渉¹, 岡崎進¹, 都築誠二², 上野和英³, 渡邊正義⁴
- 238P** 界面構造の座標化による油水界面のイオン輸送の解析、及び、拡張系の方法を用いた電位差一定のアンサンブルの実現
(東北大院理¹, 京大 ESICB²) ○吉川信明¹, Wang Lingjian¹, 森田明弘^{1,2}
- 239P** 分子動力学法による均一気泡核生成におけるシステムサイズ依存性の解析
(慶大院理工¹, 慶大理工²) ○中村 光希¹, 徐 東郁², 泰岡 顕治²
- 240P** 溶液中会合イオンの解離カイネティクスの特長性: 溶媒反応座標を用いた自由エネルギー地形解析
(原子力機構) ○米谷佳晃
- 241P** 液相からの気泡核生成の大規模分子動力学計算と古典的核生成理論の改良
(北大低温研¹, チューリッヒ大学²) ○田中今日子¹, 田中秀和¹, Diemand Juerg², Angelil Raymond²
- 242P** ナノ粒子の Stokes-Einstein の関係: 分子スケールからの拡張
(新潟大院自然¹, 新潟大理²) ○石井良樹¹, 大鳥範和²
- 243P** せん断流れ下での高分子液体の熱伝導
(兵庫県立大学大学院シミュ) ○常田真平, 安田修悟
- 244P** 分子動力学法と粗視化分子動力学法を用いた高分子流体の粘弾性評価
(慶大理工¹, 産総研², 名大³) ○西村龍斗¹, 高橋和義², 泰岡顕治¹, 増淵雄一³
- 245P** プレピーク構造を持つ液体の輸送物性
(名大院工) ○山口毅
- 246P** 液体の理論のマイクロレオロジーへの応用
(九大院理) ○井上雅郎, 吉森明
- 247P** 水-グラフェン界面近傍における疎水性粒子の溶解度と局所構造
(岡大院自然) ○稲岡健太, 望月建爾, 墨智成, 甲賀研一郎
- 248P** 電子-フォノン結合を伴うグラフェンのランジュバン動力学シミュレーション
(公財) レーザー総研 ○竹内靖
- 249P** グラフェン上のペンタセン - 第一原理分子動力学計算
(岩手大工) ○西館数芽, 吉本則之, 長谷川正之
- 250P** ナノメートルスケールにおける固体基板間の流体に対する表面性状の違いによる影響
(東理大理工¹, 東理大 RIST²) ○長沼誉里香¹, 金

子敏宏², 上野一郎²

- 251P** 固体中のエネルギー輸送のマイクロスケールモデリング
(京大院工) ○向井峻介, 妹尾悟史, 松本充弘
- 252P** 結晶における電子運動量密度の第一原理計算
(金沢大院自) ○杉田到, 斎藤峯雄
- 253P** SiC の酸化シミュレーションのための超離散ダイナミックボンドオーダー・ポテンシャルの開発
(早大理工) ○橋本修一郎, 渡邊孝信
- 254P** GaN 中のミュオニウムにおける超微細構造定数の計算
(金沢大院自¹, 金沢大理工²) ○見波将¹, 斎藤峯雄²
- 255P** 拡張エネルギー表示法による結合自由エネルギー計算方法の開発
(東レ¹, 阪大基礎工²) ○増田友秀¹, 谷村隆次¹, 松林伸幸²
- 256P** 混合 MC/MD 反応法を用いた対向反応に関する理論的研究: 反応速度定数と衝突頻度因子の役割
(名大院情報科学¹, 京大 ESICB², CREST-JST³)
○鈴木雄一¹, 長岡正隆^{1,2,3}
- 257P** 高次近似の密度行列を用いた変分経路積分分子動力学法の分子系への応用
(金沢大・院自然) ○上林勇貴, 三浦伸一
- 258P** 液体の積分方程式理論とストリング法を結合した最小自由エネルギー経路決定法の開発
(金沢大理工) ○水谷優斗, 三浦伸一
- 259P** Adaptive QM/MM 法の赤外分光計算への応用
(東大先端研¹, 東工大バイオ²) ○渡邊宙志¹, 阪野美紗², 櫻井実²
- 260P** 高速多重極展開法における圧力テンソル
(名大院工・計算セ¹, 名大院工²) ○吉井範行¹, 安藤嘉倫^{1,2}, 岡崎 進²
- 261P** 短距離古典 MD における加速化手法の系統的構築: 近接リストセル分割ハイブリッド法とその最適リスト半径・セルサイズ
(新潟大院自然) ○淡路大輔, 金鋼
- 262P** 一次相転移現象に適したレプリカ交換法の変種の開発
(慶応大院工) ○土居英男, 泰岡顕治
- 263P** 擬プロトン性イオン液体イミダゾール-酢酸等量混合物の液体構造とダイナミクス
(新潟大院自然¹, 佐賀大院工², 山形大理³) ○渡辺日香里¹, 梅木辰也², 土井寛之¹, 齊藤蒼思¹, 高椋利幸², 亀田恭男³, 梅林泰宏¹
- 264P** 強結合条件下のマクロアニオン実効 1 成分系のシミュレーション
(九大理) 澤山拓斗, ○秋山良
- 265P** ウラニルイオンの溶媒和構造: 希薄系から濃厚 LiCl 水溶液まで
(新潟大院自然¹, 新潟大理², 京大原子炉³, 原子力研究開発機構⁴) 石井良樹¹, ○佐藤夏美¹, 永田優