

# 第30回分子シミュレーション討論会 講演プログラム

(2016年10月30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, 日本生物物理学会, 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, 化学工学会  
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, 東京工業大学学術国際情報センター,  
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 : 2016年11月30日(水) ~ 2016年12月2日(金)  
会場 : 大阪大学 基礎工学国際棟 シグマホール (大阪大学豊中キャンパス)  
〒560-8531 大阪府豊中市待兼山町 1-3  
阪急宝塚線石橋駅より徒歩20分, もしくは大阪モノレール柴原駅より徒歩8分  
HP : <http://sympo.mol-sim.jp/mssj30/>

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

講演者記号記号 : ○印=発表者

## 1日目 11月30日(水)

— 休憩 10:50-11:00 —

9:00-10:00 開場, 受付

10:00-10:05 開会の辞 会長 岡崎 進(名大)

11:00-12:00 ポスター発表 101P-158P(奇数)

(講演タイトルはプログラムの末尾に記載)

— 午前の部 —

— 昼食 12:00-13:00 —

10:05-10:50 口頭発表(溶液I)

座長: 光武亜代理(慶大)

— 午後の部 —

**101S** 水溶液中のオキシシフェリン異性体の安定性  
(東大物性研<sup>1</sup>, 原研<sup>2</sup>) ○野口良史<sup>1</sup>, 樋山みやび<sup>1</sup>,  
志賀基之<sup>2</sup>, 杉野修<sup>1</sup>, 秋山英文<sup>1</sup>

**102S** Kirkwood-Buff 積分に基づく溶液の分子構造を  
再現する可分極分子力場の検討—尿素溶液を例  
として  
(東工大 ACLS<sup>1</sup>, 東工大生命理工<sup>2</sup>, ヨーク大化<sup>3</sup>)

○千葉峻太郎<sup>1</sup>, 古田忠臣<sup>2</sup>, 清水青史<sup>3</sup>

**103S** 分子動力学シミュレーションによる温度・圧力  
制御下での振動差スペクトルの効率的な計算手  
法と水への応用  
(東北大院理<sup>1</sup>, 京大 ESICB<sup>2</sup>) ○城塚達也<sup>1</sup>, 森田  
明弘<sup>1,2</sup>

13:00-14:00 ポスター発表 101P-158P(偶数)

(講演タイトルはプログラムの末尾に記載)

14:00-14:45 口頭発表(計算法I)

座長: 松本充弘(京大)

**104S** アンブレラ積分による自動アンブレラサンプリ  
ングアルゴリズム  
(阪大理) ○満田祐樹, 山中秀介, 川上貴資, 奥村  
光隆

**105S** 分子シミュレーションにおける三体ポテンシ  
ヤルを含んだ系の局所応力テンソルの非一意性  
(東大物性研) ○中川恒, 野口博司

- 106S** マルチタイムステップ数値積分法 (RESPA) に基づく分子動力学計算での圧力値算出における問題  
(名大院工 計算セ<sup>1</sup>, 名大院工<sup>2</sup>) ○安藤嘉倫<sup>1</sup>, 吉井範行<sup>1,2</sup>, 山田篤志<sup>2</sup>, 岡崎進<sup>2</sup>

— 休憩 14:45-14:55 —

**14:55-16:05 口頭発表 (材料)**

座長：鷺津仁志 (兵庫県立大)

- 107L** ガラスの振動特性と熱物性：弾性不均一性を基盤とした理論構築  
(東大院総合文化) 水野英如
- 108S** 粗視化分子動力学法によるポリエチレンの破壊プロセスに高分子鎖末端が与える影響  
(東北大金研<sup>1</sup>, JST さきがけ<sup>2</sup>) ○樋口祐次<sup>1,2</sup>, 久保百司<sup>1</sup>
- 109S** 周期振動下高密度分散系の粒子軌道に関する可逆・不可逆不連続転移  
(名大理<sup>1</sup>, モンペリエ大<sup>2</sup>) ○川崎猛史<sup>1</sup>, Ludovic Berthier<sup>2</sup>
- 110S** リチウムイオン電池における Li イオンの動的挙動解明  
(工学院大) ○齋藤周平, 高羽洋充

— 休憩 16:05-16:15 —

**16:15-17:10 口頭発表 (計算手法 II)**

座長：米澤康滋 (近大)

- 111S** リガンド-タンパク質複合体の分散力相互作用の検討: Hartree-Fock 理論に対する分散力補正 (2)  
(徳島大院薬) ○吉田達貞, 岡尚生, 谷山萌, 西村兆二期
- 112S** 量子化学計算による電子雲の 3D プリント出力用コード開発  
(東大物性研<sup>1</sup>, (株) クロスアビリティ<sup>2</sup>) ○山崎淳<sup>1</sup>, 古宇田光<sup>1</sup>, 長代新治<sup>2</sup>, 千田範夫<sup>2</sup>, 古賀良太<sup>2</sup>
- 113L** 分子動力学に向けた多体ポテンシャル関数の自動コード生成を行うメタコンパイラ DAMA の開発  
(核融合研) 伊藤篤史

2日目 12月1日 (木)

— 午前部 —

**9:00-9:55 口頭発表 (ソフトマター I)**

座長：山本量一 (京大)

- 201S** 分子動力学法を用いた脂質膜における細孔形成過程の自由エネルギー解析  
(名大院工) ○宮崎裕介, 篠田渉, 岡崎進
- 202S** 対向する自己駆動粒子系におけるレーン形成とその動的な転移の解明  
(新潟大院自然<sup>1</sup>, 阪大基礎工<sup>2</sup>) ○池田光佑<sup>1</sup>, 金鋼<sup>2</sup>
- 203L** 理想ガラス状態のエネルギー地形とエントロピー  
(モンペリエ大<sup>1</sup>, 東大総合文化<sup>2</sup>, 名大理<sup>3</sup>) 尾澤岬<sup>1</sup>, Walter Kob<sup>1</sup>, ○池田昌司<sup>2</sup>, 宮崎州正<sup>3</sup>

— 休憩 9:55-10:05 —

**10:05-10:50 口頭発表 (生体分子 I)**

座長：奥村久士 (分子研)

- 204S** ウリジンシチジンキナーゼの基質特異性の理論的解明  
(総研大遺伝<sup>1</sup>, 筑波大数物<sup>2</sup>, 筑波大計算セ<sup>3</sup>, 阪大生命機能<sup>4</sup>, 神奈川工科大教育セ<sup>5</sup>, 産総研ナノシス<sup>6</sup>, 阪大理<sup>7</sup>, 大阪市大理<sup>8</sup>) ○田中弥<sup>1,2</sup>, 庄司光男<sup>2,3</sup>, 友池史明<sup>4</sup>, 氏家謙<sup>2</sup>, 花岡恭平<sup>2</sup>, 原田隆平<sup>2</sup>, 栢沼愛<sup>2,3</sup>, 神谷克政<sup>5</sup>, 石田豊和<sup>6</sup>, 増井良治<sup>7,8</sup>, 倉光成紀<sup>7</sup>, 重田育照<sup>2,3</sup>
- 205S** ペプチドの凝集過程についての特に密度依存性に着目した解析  
(名大院理<sup>1</sup>, 名大構造生物センター<sup>2</sup>, 名大計算科学センター<sup>3</sup>, 名大情報基盤センター<sup>4</sup>) ○榮慶丈<sup>1</sup>, 岡本祐幸<sup>1,2,3,4</sup>
- 206S** 緩和モード解析を用いた蛋白質のダイナミクス研究  
(慶大理工<sup>1</sup>, さきがけ<sup>2</sup>) ○光武亜代理<sup>1,2</sup>, 高野宏<sup>1</sup>

— 休憩 10:50-11:00 —

**11:00-12:00 ポスター発表 201P-258P (奇数)**

(講演タイトルはプログラムの末尾に記載)

— 昼食 12:00-13:00 —

— 午後部 —

**13:00-14:00 ポスター発表 201P-258P (偶数)**

(講演タイトルはプログラムの末尾に記載)

**14:00-14:50 招待講演 I**

座長：杉田有治 (理研)

207IL 計算科学・情報科学が拓く創薬の未来  
(京大医) 奥野恭史

— 休憩 14:50-15:00 —

15:00-15:50 招待講演 II

座長：松林伸幸 (阪大)

208IL ナノスケール化学反応系に対する分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学 (DC-DFTB-MD) シミュレーション  
(早大先進理工) 中井浩巳

— 休憩 15:50-16:00 —

16:00-16:35 学術賞受賞講演

座長：斉藤真司 (分子研)

209AL 受賞講演

16:35-17:15 研究会総会

— 移動 17:15-17:30 —

17:30-19:30 懇親会

会場：大阪大学会館 アセンブリーホール

3日目 12月2日 (金)

— 午前の部 —

9:30-10:25 口頭発表 (生体分子 II)

座長：齋藤大明 (理研)

301S Hras-GTP / GDP 複合体の GTP / GDP と溶媒水分子との水素結合状態の分子動力学法による研究

(東京薬科大生命科学<sup>1</sup>, 金沢大国際基幹教育院<sup>2</sup>, 金沢大理工<sup>3</sup>) ○宮川毅<sup>1</sup>, 森河良太<sup>1</sup>, 高須昌子<sup>1</sup>, 杉本公一<sup>2</sup>, 川口一朋<sup>3</sup>, 長尾秀実<sup>3</sup>

302S ポリオウィルス-レセプター間相互作用の分子論的研究

(名大院工<sup>1</sup>, 名大院工計算セ<sup>2</sup>, 阪大蛋白研<sup>3</sup>) ○藤本和士<sup>1</sup>, 水谷圭介<sup>1</sup>, 小嶋秀和<sup>1</sup>, 山田篤志<sup>1</sup>, 安藤嘉倫<sup>1</sup>, 吉井範行<sup>2</sup>, 篠田渉<sup>1</sup>, 中川敦史<sup>3</sup>, 岡崎進<sup>1</sup>

303L 創薬応用へのメタダイナミクスによる構造探索とアルケミカル自由エネルギー計算  
(富士通研) ○谷田義明, 松浦東

— 休憩 10:25-10:35 —

10:35-11:20 口頭発表 (モデリング)

座長：荒井規允 (近大)

304S 大規模分子動力学法による固体酸化物形燃料電池における Ni 多結晶の破壊プロセスの検討  
(東北大金研) ○許競翔, 樋口祐次, 尾澤伸樹, 久保百司

305S 強磁場下における磁性微粒子の高濃度薄膜形成に関するブラウン動力学シミュレーション  
(和高専機械<sup>1</sup>, 明石高専機械<sup>2</sup>) ○早坂良<sup>1</sup>, 大村高弘<sup>1</sup>, 藤原誠之<sup>2</sup>

306S 銅めっきによる溝埋め込みにおける銅 (I) イオンの働き  
(京大情報) ○北原稔也, 金子豊, 船越満明

— 休憩 11:20-11:30 —

11:30-12:30 口頭発表 (量子系)

座長：伊藤篤史 (核融合研)

307S 水素分子クラスターの基底状態と魔法数  
(金沢大理工) ○三浦伸一

308S 酸化セリウム触媒の酸・塩基特性に関する理論的研究  
(北大触媒研<sup>1</sup>, 東大院工<sup>2</sup>) ○中山哲<sup>1</sup>, 田村正純<sup>2</sup>, 清水研一<sup>1</sup>, 長谷川淳也<sup>1</sup>

309S 水素分子凝集系における過冷却状態の達成とその特異な動的性質  
(京大院理<sup>1</sup>, JST さきがけ<sup>2</sup>) 金賢得<sup>1,2</sup>

310S 水素結合を含んだアニオンのヘテロ型複合体における核磁気共鳴化学シフトの溶媒・温度効果  
(RIST 神戸センター<sup>1</sup>, 原子力機構<sup>2</sup>) ○太田幸宏<sup>1</sup>, 志賀基之<sup>2</sup>

— 昼食 12:30-13:30 —

— 午後の部 —

13:30-14:30 口頭発表 (溶液 II)

座長：藤本和士 (名大)

311S 分子動力学法によるアルゴンの融解エントロピー  
(法大生命) 片岡洋右

312S 分子動力学を基盤とした錯体キラルドーパントが有するらせん誘起力の理論的予測  
(北里大理) ○渡辺豪, 吉田純

313S 第一原理分子動力学計算による水溶液中での CO<sub>2</sub> とアミンの反応の自由エネルギー解析  
(関電技研<sup>1</sup>, 電中研材料研<sup>2</sup>, コメニウス大理<sup>3</sup>, ス

ロバキア科学アカデミー無機研<sup>4</sup>) ○窪田善之<sup>1</sup>,  
大沼敏治<sup>2</sup>, Tomáš Bučko<sup>3,4</sup>

- 314S** DA 型高分子半導体溶液薄膜における界面配向  
形成の MD 計算による検討  
(産総研<sup>1</sup>, 東大<sup>2</sup>) ○米谷慎<sup>1</sup>, 松岡悟志<sup>1</sup>, 堤純也<sup>1</sup>,  
長谷川達生<sup>1,2</sup>

### — 休憩 14:30-14:40 —

#### 14:40-15:30 口頭発表 (アモルファス)

座長: 秋元琢磨 (慶大)

- 315L** 不規則原子配列を記述するための多胞体の命名  
法  
(産総研) ○西尾憲吾, 宮崎剛英
- 316L** パーシステントホモロジーを用いたガラスの中  
距離秩序構造の統一的記述  
(東北大 AIMR) 中村壮伸

### — 休憩 15:30-15:40 —

#### 15:40-16:35 口頭発表 (ソフトマター II)

座長: 篠田渉 (名大)

- 317S** 表在性膜タンパク質の脂質膜上での不均一拡散  
(慶大院理工<sup>1</sup>, オックスフォード大理<sup>2</sup>, 慶  
大理工<sup>3</sup>) ○山本詠士<sup>1</sup>, 秋元琢磨<sup>1</sup>, Antreas C.  
Kalli<sup>2</sup>, Mark S. P. Sansom<sup>2</sup>, 泰岡顕治<sup>3</sup>
- 318S** ミセル、ヘキサゴナル、膜構造における界面活  
性剤分子の拡散および集団運動  
(名大院工計算セ<sup>1</sup>, 名大院工<sup>2</sup>) ○吉井範行<sup>1,2</sup>, 岡  
崎進<sup>1,2</sup>
- 319L** 自発的に運動する細胞集団のモデリングとシミュ  
レーション  
(京大工) ○山本量一, Simon Schnyder

#### 16:35-16:40 閉会の辞

松林伸幸 (阪大)

### ポスター発表

(下線は 15 分口頭発表と同じ)

#### 1 日目

- 101P** GPU を用いた近傍リスト作成の高速化-短距離  
相互作用分子動力学  
(広大院総) ○佐久間翔太, 宗尻修治
- 102P** ニッチとシードを組み込んだ進化論的計算による  
クラスターの構造  
(北大院理) 竹内浩

- 103P** 零多重極子和法の実装と PME 法との比較  
(東大新領域<sup>1</sup>, 阪大蛋白研<sup>2</sup>) ○桜庭俊<sup>1</sup>, 福田育  
夫<sup>2</sup>

**104P** 105S 参照

- 105P** B 型肝炎ウイルス-新規抗ウイルス薬 C13 複合  
体の分子動力学シミュレーション  
(北里大院理<sup>1</sup>, 北里大理<sup>2</sup>, 中央大理工<sup>3</sup>, 大阪市  
立大院医学<sup>4</sup>) ○佐藤俊輔<sup>1</sup>, 渡辺豪<sup>2</sup>, 岩館満雄<sup>3</sup>,  
梅山秀明<sup>3</sup>, 早川路代<sup>4</sup>, 村上善基<sup>4</sup>, 米田茂隆<sup>2</sup>

- 106P** 気泡生成現象を利用した分子モーターモデルの  
散逸粒子動力学シミュレーション~ATP サイクル  
中の分子間距離の検討による歩行モデルの改良~  
(近大院理工<sup>1</sup>, 近大理工<sup>2</sup>) ○北條雅一<sup>1</sup>, 荒井規  
允<sup>2</sup>

- 107P** MD シミュレーションによるアミノ酸アナログ  
に対する共溶媒効果の自由エネルギー解析  
(阪大基礎工) ○小林遊磨, 山守優, 石塚良介, 松  
林伸幸

- 108P** 分子動力学シミュレーションと多変量解析によ  
るによる転写因子足場蛋白質の研究  
(近大先端研・JST-CREST) 米澤康滋

- 109P** 生体分子の定温定圧レプリカ置換分子動力学シ  
ミュレーションの開発  
(総研大<sup>1</sup>, 分子研<sup>2</sup>) ○山内仁喬<sup>1,2</sup>, 奥村久士<sup>1,2</sup>

- 110P** 脂質二重膜における PI(4,5)P2 の安定性の解析  
(広市大情報<sup>1</sup>, 近大先端研<sup>2</sup>, 東北大情報<sup>3</sup>, 東北大  
メガバンク<sup>4</sup>, 東北大<sup>5</sup>) ○近藤寛子<sup>1</sup>, 米澤康滋<sup>2</sup>,  
木下賢吾<sup>3,4,5</sup>, 鷹野優<sup>1</sup>

- 111P** 緩和モード解析による蛋白質系の遅い緩和ダイ  
ナミクスの抽出  
(慶大理工<sup>1</sup>, JST さきがけ<sup>2</sup>) ○唐澤直之<sup>1</sup>, 光武  
亜代理<sup>1,2</sup>, 高野宏<sup>1</sup>

- 112P** 生物学的レアイベントを再現する構造サンプリ  
ング手法の開発  
(筑波大計セ) ○原田隆平, 重田育照

- 113P** 分子動力学法による抗 B 型肝炎ウイルス薬の機  
能解明に向けた力場開発  
(名大院工) ○深井基裕, 藤本和士, 篠田渉, 岡  
崎進

- 114P** Molecular Tailoring Approach を用いた  $\alpha$  ヘリッ  
クスに働く水素結合の量子化学的解析  
(阪大蛋白研<sup>1</sup>, 阪大院理<sup>2</sup>, 広市大院情報<sup>3</sup>) ○草  
鹿あゆみ<sup>1,2</sup>, 鷹野優<sup>3</sup>, 中村春木<sup>1</sup>

**115P** 206S 参照

- 116P** FKBP とリガンドとの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) ○岡尚生, 谷山萌, 吉田達貞

- 117P** Prediction of Tankyrase2-ligand Binding Affini-  
ties Using Molecular Mechanics and Quantum Me-

chanics Calculations

(理研) ○沖本憲明, 大塚教雄, 平野秀典, 泰地真弘人

- 118P** POPC の膜電位に関する理論的研究  
(金沢大院自然) ○伊藤誠一朗, 川口一朋, 長尾秀実
- 119P** 分子動力学シミュレーションによるナノ空間におけるエポキシ樹脂の充填挙動の解析  
(デンソー<sup>1</sup>, 阪大基礎工<sup>2</sup>) ○森穂高<sup>1,2</sup>, 松林伸幸<sup>2</sup>, 泉龍介<sup>1</sup>, 今井博和<sup>1</sup>
- 120P** イオン液体におけるイオンペア交換のダイナミクス  
(名大院工<sup>1</sup>, 名大<sup>2</sup>, 産総研<sup>3</sup>, 山口大<sup>4</sup>, 横国大<sup>5</sup>) ○平川真志<sup>1</sup>, 篠田渉<sup>2</sup>, 岡崎進<sup>2</sup>, 都築誠二<sup>3</sup>, 上野和英<sup>4</sup>, 渡邊正義<sup>5</sup>
- 121P** 固体高分子中における水の再結晶化メカニズムの解明  
(富山大院理工) ○八十島亘宏, 源明誠, 石山達也
- 122P** MD/DFT 自己無撞着計算法を用いた水溶液系の力場開発  
(阪大基礎工<sup>1</sup>, 京大 ESICB<sup>2</sup>) ○石塚良介<sup>1,2</sup>, 松林伸幸<sup>1,2</sup>
- 123P** A molecular dynamics study of hydrogen hydrate  
(金沢大院自然) ○Yudha Arman, 三浦伸一
- 124P** 分子動力学法を用いた不均一気泡核生成  
(慶大理工) ○徐東郁, 泰岡顕治
- 125P** 液体アルカンに溶存する球状分子の拡散挙動とその構造寿命  
(新潟大院自然<sup>1</sup>, 新潟大理<sup>2</sup>) ○石井良樹<sup>1</sup>, 大鳥範和<sup>2</sup>
- 126P** 微小液滴の蒸発にともなう冷却と凝固  
(京大院工) ○粟生貴志, 松本充弘
- 127P** 充填水の構造とダイナミクス  
(金沢大院自然) ○池沢将人, 三浦伸一
- 128P** 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<sup>1</sup>, 東理大 RIST<sup>2</sup>) ○坂口裕宜<sup>1</sup>, 金子敏宏<sup>1,2</sup>, 上野一郎<sup>1,2</sup>
- 129P** 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計算法の開発  
(金沢大院自然) ○水谷優斗, 岩崎宏, 三浦伸一
- 130P** 不凍タンパク質の近傍での氷生成: TIP4P/Ice と AMBER ポテンシャルを用いた MD シミュレーション  
(名工大工<sup>1</sup>, 名造大<sup>2</sup>) ○石田雅祥<sup>1</sup>, 尾形修司<sup>1</sup>, 鍛島康裕<sup>2</sup>, 浦長瀬正幸<sup>1</sup>, 田村友幸<sup>1</sup>
- 131P** 修飾シクロデキストリンが形成する包接化合物の構造解析  
(山口大院創成科学) ○下柘晴菜, 浦上直人, 山本隆
- 132P** 第一原理計算を用いた水素ハイドレートの振動解析  
(慶大理工<sup>1</sup>, 工学院大工<sup>2</sup>, Colorado School of Mines<sup>3</sup>) ○山田基<sup>1</sup>, 平塚将起<sup>2</sup>, David T. Wu<sup>3</sup>, Amadeu K. Sum<sup>3</sup>, 泰岡顕治<sup>1</sup>
- 133P** 水-メタノール混合系中の音速~分子動力学シミュレーション~  
(広大院総合) ○立花優侑, 宗尻修治
- 134P** エネルギー表示法とベネット受容比法による水・オクタノール分配係数の推算  
(東レ<sup>1</sup>, 阪大院理<sup>2</sup>, 阪大院基礎工<sup>3</sup>) ○北畑雅弘<sup>1</sup>, 川上智教<sup>1</sup>, 茂本勇<sup>1</sup>, 満田祐樹<sup>2</sup>, 松林伸幸<sup>3</sup>
- 135P** ナノ液滴界面での液晶に媒介される自己集合の散逸粒子動力学シミュレーション  
(近大理工) ○井口拓弥, 荒井規允
- 136P** 水-メタノール液滴に対する凹凸構造のある表面の濡れ性  
(福井大工<sup>1</sup>, 慶應大理工<sup>2</sup>, Univ. Nebraska<sup>3</sup>) ○古石貴裕<sup>1</sup>, 泰岡顕治<sup>2</sup>, X. C. Zeng<sup>3</sup>
- 137P** 粗視化分子動力学シミュレーションによる溶媒がポリマーブラシの摩擦に与える影響  
(東北大<sup>1</sup>, 京大<sup>2</sup>) ○高桑諒<sup>1</sup>, 大谷優介<sup>1</sup>, 西松毅<sup>1</sup>, 樋口祐次<sup>1</sup>, 尾澤伸樹<sup>1</sup>, 辻井敬巨<sup>2</sup>, 久保百司<sup>1</sup>
- 138P** 閉じ込め系における界面活性剤水溶液の自己集合構造と自己集合プロセスの散逸粒子動力学法シミュレーション  
(近大理工) ○吉本裕貴, 荒井規允
- 139P** 分子動力学シミュレーションとエネルギー表示溶液理論によるタンパク質の共溶媒変性効果の自由エネルギー解析  
(阪大基礎工) ○山守優, 松林伸幸
- 140P** Janus 表面を持つナノチューブ内における界面活性剤水溶液の自己集合に関する散逸粒子動力学シミュレーション  
(近大院理工<sup>1</sup>, 近大理工<sup>2</sup>) ○小林祐生<sup>1</sup>, 荒井規允<sup>2</sup>
- 141P** 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
- 142P** 202S 参照
- 143P** 高分子結晶膜の CO<sub>2</sub> 分離性能を単結晶モデルと表面を含むモデルで見る  
(福井大院工) ○清水洗佑, 玉井良則
- 144P** シリカガラスにおける水分子による化学ボンド破壊の温度依存性: ハイブリッド量子古典シミュレーション  
(名工大工) ○佐藤美希, 河野貴久, 尾形修司, 浦長瀬正幸, 田村友幸
- 145P** 分子動力学シミュレーションによる層状グラフェンの低摩擦機構解析  
(兵衛大院) ○前田達也, 鷺津仁志
- 146P** 講演取消
- 147P** MD シミュレーションによる半導体材料の結晶成長解析  
(京大工) ○張鳴鏞, 松本充弘

- 148P** 応力印加による結晶性高分子の破壊機構の解明 (福井大院工) ○山田忠明, 玉井良則
- 149P** 全原子 MD による高分子に吸収された水のエネルギー相関解析 (阪大基礎工) ○石田菜穂, 石塚良介, 松林伸幸
- 150P** 分子動力学法による  $\alpha$ - $\text{Al}_2\text{O}_3$  基板上的 ZnO 結晶成長シミュレーション (東北大金研) ○川岸俊介, 許競翔, 大谷優介, 西松毅, 樋口祐次, 尾澤伸樹, 久保百司
- 151P** 高熱熱流体潤滑における壁面近傍でのレナード・ジョーンズ液体の固体化 (兵庫県大院) 大川凌
- 152P** ボルツマンの輸送方程式を用いた熱輸送の解析 (京大工) 松本充弘, 向井竣輔, ○秋月聖也
- 153P** 第一原理分子動力学法による Si 基板表面-水間の界面自由エネルギーの評価 (名工大<sup>1</sup>, (株) デンソー<sup>2</sup>, (株) 豊田中央研究所<sup>3</sup>) ○浦長瀬正幸<sup>1</sup>, 田中宏一<sup>2</sup>, 森穂高<sup>2</sup>, 田嶋聡美<sup>3</sup>, 尾形修司<sup>1</sup>
- 154P** 密度汎関数理論によるルチル型  $\text{TiO}_2(110)$  表面における格子間チタン由来の余剰電子に関する研究 (慶大理工) ○森田一軌, 澁谷泰蔵, 泰岡顕治
- 155P** フラグメント分子軌道法を活用したタンパク-リガンド系の大規模分子軌道解析 (理研 QBiC<sup>1</sup>, 東大理<sup>2</sup>) ○大塚教雄<sup>1</sup>, 沖本憲明<sup>1</sup>, 泰地真弘人<sup>1</sup>, 常行真司<sup>2</sup>
- 156P** 密度汎関数理論およびドッキング計算に基づく CYP1A2 におけるカフェインの代謝部位選択性の検討 (徳島大院薬) ○西村兆二郎, 吉田達貞
- 157P** 液体水素における非平衡熱伝導状態の実現と分子熱流解析 (京大理<sup>1</sup>, JST さきがけ<sup>2</sup>) ○阿部紀遥<sup>1</sup>, 金賢得<sup>1,2</sup>
- 158P** QM/MM 法を用いたグリコーゲンシンターゼキナーゼ-3 $\beta$  と 7-アザインドール誘導体の結合相相互作用解析 (徳島大院薬) ○谷山萌, 岡尚生, 吉田達貞
- 205P** 蛋白質間相互作用のエネルギー密度積分におけるクーロン場近似の影響と適切な積分範囲 (早大物理) ○水原志暢, パーキン暖, 高野光則
- 206P** 電解質水溶液中の一様に帯電した球殻内に生成される負圧の分子論的解明 (名大院工) ○島航平, 小嶋秀和, 藤本和士, 篠田渉, 岡崎進
- 207P** 強磁場下における磁性微粒子の薄膜形成条件の解析 (和高専機械) ○裕俊浩, 早坂良
- 208P** プローブ分子によるタンパク質の結合ポケット探索 (富士通研) ○佐藤博之, 松浦東
- 209P** 204S 参照
- 210P** 水溶液中のタンパク質間静電相互作用の粗視化モデル (金沢大理工) ○川口一朋, 長尾秀実
- 211P** 分子シミュレーションによるタンパク質の結合ポケット解析と基質の結合構造予測 (理研 QBiC) ○齋藤大明, 沖本憲明, 泰地真弘人
- 212P** 粗視化ゲルモデルを用いた生体関節潤滑機構の研究 (京大院工) ○矢上翔太, 佐野晃二郎, 松本充弘
- 213P** 活性化および非活性化ロドプシンの内部結合水の比較の分子シミュレーション (慶應大<sup>1</sup>, Frank Laboratory of Neutron Physics, Joint Institute for Nuclear Research<sup>2</sup>) ○友部勝文<sup>1</sup>, 山本詠士<sup>1</sup>, Kholmirzo<sup>2</sup>, 泰岡顕治<sup>1</sup>
- 214P** リン脂質二重層膜中でのコレステロール間側方相互作用のリン脂質種依存性 (名大院工<sup>1</sup>, 名大院工 計算科学セ<sup>2</sup>) ○松岡漢斗<sup>1</sup>, 安藤嘉倫<sup>2</sup>, 岡崎進<sup>1,2</sup>
- 215P** ヘマグルチニンと GM3 分子間のリガンド-受容体相互作用の解析 (慶大理工) ○九十九慶之, 山本詠士, 井上堅斗, 泰岡顕治, 三上益弘
- 216P** アミノアシル tRNA 合成酵素での基質結合における自由エネルギー計算と分子構造からの考察 (分子研<sup>1</sup>, 総研大<sup>2</sup>) ○森義治<sup>1</sup>, 奥村久士<sup>1,2</sup>
- 217P** 複数タンパク構造を用いた分子ドッキング手法に関する研究 (理研 QBiC) ○平野秀典, 沖本憲明, 藤田茂雄, 泰地真弘人
- 218P** 分子シミュレーションを用いたメタンハイドレート相平衡条件予測方法 (慶大院<sup>1</sup>, 慶大院理工<sup>2</sup>, CSM<sup>3</sup>, 慶大理工<sup>4</sup>) ○湯原大輔<sup>1</sup>, Paul E. Brumby<sup>2</sup>, David T. Wu<sup>3</sup>, Amadeu K. Sum<sup>3</sup>, 泰岡顕治<sup>4</sup>
- 219P** ナノチューブ内におけるメタン分子の分子動力学シミュレーション (近大理工) ○勝部康平, 荒井規允
- 220P** 分子動力学計算を用いた界面における氷 1h の安

## 2 日目

- 201P** Multiple program/multiple data molecular dynamics method with multiple time step integrator for large biological systems (理研) ○Jaewoon Jung, 杉田有治
- 202P** Green-Kubo 式による粘度算出の計算条件依存性 ((株) クロスアビリティ<sup>1</sup>, 阪大基礎工<sup>2</sup>) ○竹内宗孝<sup>1</sup>, 坂牧隆司<sup>1</sup>, 松林伸幸<sup>2</sup>
- 203P** 112S 参照
- 204P** マルチカノニカルアンサンブルを生成する一般化ハイブリッドモンテカルロ法の開発 (金沢大院自然) ○田川従道, 三浦伸一

- 定性に関する研究  
(慶大理) ○今井尚子, 徐東郁, 高岩大輔, 泰岡  
顕治
- 221P** 分子動力学法を用いたアルカンの均一液滴核生  
成の解析  
(慶大理工) ○阿由葉翔, 徐東郁, 泰岡顕治
- 222P** 水和イオン対解離過程の多次元自由エネルギー  
地形解析  
(量研機構) 米谷佳晃
- 223P** 直鎖アルカン・アルコールの粘弾性緩和：並進  
配向結合と不均一構造の効果  
(名大院工) 山口毅
- 224P** [C<sub>2</sub>mim][BF<sub>4</sub>] イオン液体中で生成する  
Co(II)(OH<sub>2</sub>)<sub>4</sub> 錯体周辺の溶媒和構造とソルバト  
クロミズムに関する理論的研究  
(お茶大院人間文化創成科学<sup>1</sup>, 東工大原研<sup>2</sup>, お  
茶大基幹研究院<sup>3</sup>, JST さきがけ<sup>4</sup>) ○黒木菜保子<sup>1</sup>,  
鷹尾康一朗<sup>2</sup>, 森寛敏<sup>3,4</sup>
- 225P** 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地形の評価  
(金沢大院自然) ○山口智, 岩崎宏, 三浦伸一
- 226P** 110S 参照
- 227P** レプリカ交換分子動力学法を用いたナノスリッ  
ト細孔内の氷/水相平衡シミュレーション  
(慶大理工) ○山光隆一, 野村昂太郎, 泰岡顕治
- 228P** 蒸発に伴うナノ粒子凝集の分子シミュレーショ  
ン  
(日立) ○杉井泰介, 保坂知幸, 吉村一樹, 石井  
英二
- 229P** 102S 参照
- 230P** 水アルコール混合溶液中のポルフィリンモノカ  
ルボン酸自己組織化ダイマーの安定化機構につ  
いての分子動力学シミュレーション  
(北大工<sup>1</sup>, 北大総化<sup>2</sup>) ○佐藤信一郎<sup>1,2</sup>, 佐藤友  
亨<sup>2</sup>, 水谷駿介<sup>2</sup>, 和田拓馬<sup>1</sup>
- 231P** 超臨界 LJ 流体における Stokes-Einstein の関係  
の破綻：気体から液体まで  
(新潟大院自然<sup>1</sup>, 新潟大理<sup>2</sup>) ○宮本祥平<sup>1</sup>, 石井  
良樹<sup>1</sup>, 大鳥範和<sup>2</sup>
- 232P** 疎水表面付近における水の誘電率低下の分子描  
像  
(早大物理) ○佐々木徹, 佐藤昂人, 大貫隼, 高野  
光則
- 233P** 非調和振動ポテンシャルを用いた赤外線領域に  
おける D-グルコース水溶液内水分子の振動解析  
(慶大理工<sup>1</sup>, 富山大工<sup>2</sup>) ○中村真二郎<sup>1</sup>, 友部勝  
文<sup>1</sup>, 山本詠士<sup>1</sup>, 石山達也<sup>2</sup>, 泰岡顕治<sup>1</sup>
- 234P** 水-メタノール混合系におけるメタノールのポ  
テンシャルモデルの開発  
(広大院総) ○山崎真史, 宗尻修治
- 235P** 201S 参照
- 236P** 多体散逸粒子動力学法を用いた親水/疎水のパ  
ターンを有する固体表面上の高分子液滴に関す  
る研究  
(近大理工) ○西脇拳四郎, 荒井規允
- 237P** 磁性微粒子の薄膜形成に及ぼす液体の温度変化  
の影響  
(和高専機械) ○Ariff Hanafi, 早坂良
- 238P** 散逸粒子動力学シミュレーションを用いた分子  
認識機能を持つトリブロックポリマーモデルに  
よる自己集合構造  
(近大理工) ○荒木雄介, 荒井規允
- 239P** 318S 参照
- 240P** 散逸粒子動力学シミュレーションを用いたテレ  
ケリックポリマーによる超分子ネットワークの  
緩和挙動  
(近大理工) ○脇本宏平, 荒井規允
- 241P** パーシステントホモロジーを用いた乱れた系の  
降伏点前後での構造変化の探索  
(東北大 AIMR<sup>1</sup>, JST さきがけ<sup>2</sup>) ○白井達彦<sup>1,2</sup>,  
中村壮伸<sup>1,2</sup>
- 242P** 高分子力学ネットワークの粘弾特性  
(慶大理工) ○名取慧, 高野宏
- 243P** CNT の強度特性  
(成蹊大理工) ○吉田智, 坂本昇一, 富谷光良
- 244P** 全原子分子動力学法による有機系単分子膜形成  
過程の解析  
(兵庫県大(院)<sup>1</sup>, 兵庫県大<sup>2</sup>) ○小西正和<sup>1</sup>, 鷲  
津仁志<sup>2</sup>
- 245P** ナノチャンネル内流れのすべり速度に対する分子  
内自由度による影響  
(東理大理工<sup>1</sup>, 東理大 RIST<sup>2</sup>) ○長沼誉里香<sup>1</sup>, 金  
子敏宏<sup>1,2</sup>, 上野一郎<sup>1,2</sup>
- 246P** カーボンナノチューブに内包された有機分子の  
第一原理ダイナミックス  
(名工大工) ○小柳津翔太, 尾形修司, 都築貴寛,  
浦長瀬正幸, 田村友幸
- 247P** MD シミュレーションを用いたパーフルオロア  
ルキル化合物が形成する Langmuir 膜の構造解析  
(阪大基礎工<sup>1</sup>, 京大化研<sup>2</sup>) ○中田幸司朗<sup>1</sup>, 石塚  
良介<sup>1</sup>, 松林伸幸<sup>1</sup>, 長谷川健<sup>2</sup>
- 248P** NEMS 摺動界面に用いる人工材料設計指針とし  
てのナノ動摩擦法則の探究 (I)  
(金沢工大 EOE 応用研究セ) ○町野太樹, 池田  
聖, 東側大輝, 林啓治
- 249P** NEMS 摺動界面に用いる人工材料設計指針とし  
てのナノ動摩擦法則の探究 (II)  
(金沢工大 EOE 応用研究セ) ○齋藤公希, 町野  
太樹, 林野光輝, 林啓治
- 250P** NEMS 摺動界面に用いる人工材料設計指針とし  
てのナノ動摩擦法則の探究 (III)  
(金沢工大 EOE 応用研究セ) ○小松央征, 齋藤

公希, 中野高嗣, 林啓治

- 251P** REBO 分子動力学法による高水素含有アモルファス炭素膜の摩擦シミュレーション  
(兵庫県大) ○秋山博俊, 鷺津仁志
- 252P** 高分子鎖切断を記述可能な新規ポテンシャルモデルの開発および破断の分子動力学シミュレーション  
(名大院工<sup>1</sup>, 京大福井謙一セ<sup>2</sup>) ○服部智成<sup>1</sup>, 藤本和士<sup>1</sup>, 埜崎寛雄<sup>1</sup>, Rajdeep Singh Payal<sup>1</sup>, 中垣雅之<sup>2</sup>, 榊茂好<sup>2</sup>, 篠田渉<sup>1</sup>, 岡崎進<sup>1</sup>
- 253P** Density functional approach and random matrix theory to proteogenesis  
(日大理工) 山中雅則
- 254P** QM/MM-ER 法による光化学系 II の Mn クラスターにおける一電子酸化反応の自由エネルギー解析  
(東北大院理<sup>1</sup>, 京大 ESICB<sup>2</sup>) ○鈴岡大樹<sup>1</sup>, 高橋英明<sup>1</sup>, 森田明弘<sup>1,2</sup>
- 255P** ポルフィリン環の構造歪みがヘムの電子構造と酸化還元電位に与える影響の計算科学的研究  
(阪大蛋白研<sup>1</sup>, 阪大院理<sup>2</sup>, 広市大院情報<sup>3</sup>) ○今田康博<sup>1,2</sup>, 中村春木<sup>1</sup>, 鷹野優<sup>3</sup>
- 256P** 周期境界条件化での高速な QM/MM 理論の開発  
(分子研<sup>1</sup>, 総研大<sup>2</sup>) ○西澤宏晃<sup>1</sup>, 奥村久士<sup>1,2</sup>
- 257P** 混合 MC/MD 反応法における QM/MM 計算による汎用的エネルギー評価法の開発  
(名大院情報科学<sup>1</sup>, 京大 ESICB<sup>2</sup>, CREST-JST<sup>3</sup>) ○藤江拓哉<sup>1</sup>, 竹中規雄<sup>1,2</sup>, 鈴木雄一<sup>1</sup>, 長岡正隆<sup>1,2,3</sup>
- 258P** 分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学法のシクロファン類の異性化反応への応用  
(早大先進理工<sup>1</sup>, 早大理工研<sup>2</sup>, 京大 ESICB<sup>3</sup>, JST-CREST<sup>4</sup>) ○黄毅聰<sup>1</sup>, 西村好史<sup>2</sup>, 小野純一<sup>1</sup>, 鹿又宣弘<sup>1</sup>, 中井浩巳<sup>1,2,3,4</sup>