

第31回分子シミュレーション討論会 講演プログラム

(平成29年10月24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、株式会社ダイセル、
株式会社モルシス、ビジュアルテクノロジー株式会社、リアルコンピューティング株式会社
会期 : 2017年11月29日(水)～2017年12月1日(金)
会場 : 金沢商工会議所
〒920-8639 金沢市尾山町9番13号
金沢駅兼六園口(東口)よりバス(3、8～10番乗場)にて約10分(南町バス停より徒歩2分)
HP : <http://sympo.mol-sim.jp/mssj31/>

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)

: SL=特別講演(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

講演者記号記号 : ○印=発表者

1日目 11月29日(水)

9:00-10:00 開場, 受付

10:00-10:05 開会の辞 会長 田中秀樹(岡山大)

— 午前の部 —

10:05-11:20 口頭発表 A

座長: 古石貴裕(福井大)

101S ファンデルワールス式による水の相図
(法政大生命) ○片岡洋右

102S 水-メタノール混合系の音速～波数及び
温度依存性～

(広大院総) ○山崎真史, 佐久間翔太, 宗
尻修治

103S Atomistic simulation on the mechani-
cal deformation of hydrated perfluorosul-
fonic acid polymer membranes
(旭硝子先端研¹, 名大工²) ○郭安聰^{1,2}, 田
中厚¹, 入澤潤¹, 篠田渉², 岡崎進²

104S 分子動力学法による界面活性剤水和結晶
(177P) の融解挙動に関する研究

(名大院工 応用物質化学専攻¹, 名大院工
計算科学セ², 花王株³) ○武田康助^{1,3}, 田

淵友季子³, 安藤嘉倫², 篠田渉¹, 岡崎進^{1,2}

105S 水中におけるイオンペア解離カイネティ
クスの多様性とその起源

(量研機構) ○米谷佳晃

11:30-12:30 ポスター発表 101P-181P (奇数)
(講演タイトルはプログラムの末尾に記載)

— 昼食 12:30-13:30 —

— 午後の部 —

13:30-14:30 ポスター発表 101P-181P (偶数)
(講演タイトルはプログラムの末尾に記載)

14:40-15:30 招待講演 I

座長：畝山多加志（金沢大）

- 106IL** 柔らかい相互作用を持つ液体のガラス転移
（名大理）○宮崎州正

— 休憩 15:30-15:40 —

15:40-16:40 口頭発表 B

座長：金鋼（阪大）

- 107S** ガラスの連続体極限におけるフォノンの輸送特性
（東大院総合文化）○水野英如, 池田昌司
- 108S** 混合溶媒中のコロイド分散系のレオロジー
（京大理¹, ENS-Paris²）○荒木武昭¹, Armand Barbot^{1,2}
- 109S** コロイド分散系の伸長流レオロジー
（OIST）○瀬戸亮平, Giulio G. Giusteri
- 110S** アモルファス金属の雪崩的な塑性伝播特性に対する熱的構造緩和の影響
（金沢大理工¹, 物質・材料研究機構², 阪大基礎工³）○新山友暁¹, 譯田真人², 下川智嗣¹, 尾方成信³

— 休憩 16:40-16:50 —

16:50-17:35 口頭発表 C

座長：奥村久士（分子研）

- 111S** 過冷却水はなぜドロドロになるのか？：Stokes-Einstein 則の破れのメカニズム
（名大理¹, 阪大基礎工²）○川崎猛史¹, 金鋼²
- 112S (121P)** スリット型細孔に閉じ込められた水および単純液体の相転移現象
（東京理科大理工）○金子敏宏
- 113S** 速度論的阻害剤による包接水和物の結晶成長遅延化と不凍タンパク質との比較
（岡大基礎研）○矢ヶ崎琢磨, 松本正和, 田中秀樹

— 休憩 17:35-17:45 —

17:45-18:45 口頭発表 D

座長：篠田渉（名大）

- 114S (225P)** ベイズ推定による on-the-fly MD トラジェクトリ解析方法の開発
（近畿大先端研¹, 近畿大生命情報工²）○米澤康滋¹, 宮下尚之²
- 115S** 計量に依存しない自由エネルギー地形の構成方法
（産総研）○中村壮伸
- 116S** PIN1 酵素における異性化反応への重み付きアンサンブル法の適用
（日医大・物¹, 横浜市大², 近畿大³, 広島大⁴）○藤崎弘士¹, 森次圭², 米澤康滋³, 楯真一⁴
- 117S** 非平衡パスアンサンブルに基づく対数平均力ダイナミクス
（産総研 CD-FMat¹, 近畿大², 核融合研³）○森下徹也¹, 米澤康滋², 伊藤篤史³

2日目 11月30日 (木)

— 午前の部 —

9:00-10:00 口頭発表 E

座長：吉井範行（名大）

- 201S** 水溶液中の二酸化炭素とアミンの反応の自由エネルギー解析
（関西電力技研¹, Comenius Univ.², Slovak Acad. Sci.³）○窪田善之¹, Tomáš Bučko^{2,3}
- 202S (138P)** 共溶質存在下における DNA 水和水の熱力学的性質の解析
（理研 AICS¹, 甲南大 FIBER², 神戸大院情報³, 名大院理⁴, 名大 ITbM⁵, 甲南大 FIRST⁶）○中野美紀¹, 建石寿枝², 田中成典³, Florence Tama^{1,4,5}, 宮下治¹, 杉本直己^{2,6}
- 203S** Ornstein-Zernike 理論に基づく溶媒和自由エネルギー高精度化の試み
（愛媛大理）○宮田竜彦, 矢吹直哉
- 204S** 疎水性相互作用の温度, 圧力, 塩濃度依存性
（岡山大基礎研）○甲賀研一郎

— 休憩 10:00-10:10 —

10:10-11:25 口頭発表 F

座長：桜庭俊（東大）

- 205S シニョリンの定温定圧2次元レプリカ置換法による物性解析
(147P) (総研大構造¹, 分子研²) ○山内仁喬^{1,2}, 奥村久士^{1,2}
- 206S 分子動力学シミュレーションを用いた β シート凝集体の自由エネルギー解析
(240P) (阪大院基礎工) ○増谷佳一, 金鋼, 松林伸幸
- 207S 脂質膜におけるメリチンペプチドによる協奏的細孔形成機構の自由エネルギー解析
(名大院工) ○宮崎裕介, 篠田渉, 岡崎進
- 208S 誘電アロステリーによる分子モーターの力発生機構
(136P) (早大・物理応物) ○佐藤昂人, 大貫隼, 高野光則
- 209S DC-DFTB-MD 法によるバクテリオロドプシンのプロトン移動反応機構に関する理論的研究
(早大先進理工¹, 早大理工研², JST-CREST³, 京大 ESICB⁴) ○小野純一¹, 今井みの莉¹, 西村好史², 中井浩巳^{1,2,3,4}

11:30-12:30 ポスター発表 201P-282P (奇数)
(講演タイトルはプログラムの末尾に記載)

— 昼食 12:30-13:30 —

— 午後の部 —

13:30-14:30 ポスター発表 201P-282P (偶数)
(講演タイトルはプログラムの末尾に記載)

14:40-15:30 招待講演 II

座長：三浦伸一（金沢大）

- 210IL 高速 AFM による生体分子の形状と動きの同時観察
(金沢大理工) ○古寺哲幸

— 休憩 15:30-15:40 —

15:40-16:30 特別企画 特別講演

座長：田中秀樹（岡山大）

- 211SL 祝 分子シミュレーション研究会20周年「研究会の目標について」
(研究会顧問, 金沢大) ○樋渡保秋

— 休憩 16:30-16:40 —

16:40-17:15 学術賞受賞講演

座長：森下徹也（産総研）

- 212AL 分子動力学計算による自己組織化分子集合体の物性に関する研究および高並列対応汎用分子動力学計算ソフトウェア MODY-LAS の開発
(名大院工) ○安藤嘉倫

17:15-17:55 研究会総会

18:30-20:30 懇親会

会場：KKR ホテル金沢

3日目 12月1日(金)

— 午前部の部 —

9:00-10:00 口頭発表 G

座長：炭竈享司（福井大）

- 301S Goldman-Hodgkin-Katz 方程式から得られる静止膜電位の分子動力学シミュレーション
(金沢大理工) ○川口一朋, 長尾秀実
- 302S 分子シミュレーションを用いたシトクロム P450(CYP) に対する薬物代謝部位予測
(226P) (理研・QBiC) ○齋藤大明, 大塚教雄, 沖本憲明, 泰地真弘人
- 303S クライオ電子顕微鏡像フィッティングシミュレーションの新規並列計算法の開発
(137P) (理研・杉田理論分子科学¹, 理研 iTHES², 理研 AICS³, 名大院理⁴, 理研 QBiC⁵) ○森貴治^{1,2}, Marta Kulik¹, 宮下治³, Florence Tama^{3,4}, 杉田有治^{1,2,3,5}
- 304S 第一原理経路積分分子動力学法を用いた水における原子核量子効果の研究
(みずほ情報総研¹, 原子力機構²) ○加藤幸一郎¹, 町田昌彦², 志賀基之²

— 休憩 10:00-10:15 —

10:15-11:15 口頭発表 H

座長：志賀基之（原子力機構）

- 305S** アモルファス氷表面におけるイオン拡散
（明大院理工）○原典史, 青木雅矢, 深澤倫子
- 306S (122P)** 固体高分子中で形成される水構造と振動スペクトルの解析
（富山大院理工）○八十島亘宏, 石山達也
- 307S** 固液界面におけるイオン移動と振動差スペクトルの分子動力学シミュレーション
（東北大院理¹, 京大 ESICB²）○城塚達也¹, 高瀬航輝¹, 森田明弘^{1,2}
- 308S** Unified assignment method of alkyl C-H vibrational spectra: molecular dynamics study of ethanol
（東北大院・理¹, 京大・ESICB², 富山大院・理工³）○王琳^{1,2}, 石山達也³, 森田明弘^{1,2}

— 休憩 11:15-11:30 —

11:30-12:30 口頭発表 I

座長：石山達也（富山大）

- 309S** Solid harmonics を用いた高速多重極展開法の計算量削減 — 高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト MODYLAS の開発状況
（名大院工¹, 名大院工 計算セ²）○坂下達哉¹, 安藤嘉倫², 吉井範行^{1,2}, 岡崎進^{1,2}
- 310S (207P)** 異方性のある系に対する周期境界条件付き高速多重極展開法
（名大院工・計算セ¹, 名大院工²）○吉井範行^{1,2}, 安藤嘉倫¹, 坂下達哉², 岡崎進^{1,2}
- 311S (202P)** 全原子分子動力学計算での熱浴および圧力浴更新時間の削減
（名大院工 計算セ¹, 名大院工 応物化²）○安藤嘉倫¹, 吉井範行^{1,2}, 岡崎進^{1,2}
- 312S** 連続体解析と分子シミュレーション練成のためのアルゴリズム
（旭硝子 先端研¹, UC Berkeley²）○浦田新吾¹, Shaofan Li²

— 昼食 12:30-13:30 —

— 午後の部 —

13:30-14:45 口頭発表 J

座長：玉井良則（福井大）

- 313S** 動的モンテカルロ法のイベント順序を維持した並列化手法の開発
（東芝メモリ¹, 核融合研², 総研大³）○加藤周一¹, 伊藤篤史^{2,3}
- 314S** 分子動力学計算を用いたガラス状高分子衝撃破壊の分子論的研究
（名大院工）○藤本和士, 服部智成, 篠田渉, 岡崎進
- 315S** 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おける応力伝播
（東大物性研）○樋口祐次
- 316S (181P)** 主鎖の剛直性に依存する高分子電解質凝集体の構造解析
（豊田中研）○美馬俊喜, 金城友之, 山川俊輔, 旭良司
- 317S** PVDF と溶媒の親和性に関する分子論的研究：PVDF 表面と溶媒との接触角計算
（先端素材高速開発技術研究組合¹, 名大院工², 東レ³）○北畑雅弘^{1,2,3}, Tseden Taddese², 岡崎進²

— 休憩 14:45-15:00 —

15:00-16:15 口頭発表 K

座長：樋口祐次（東大）

- 318S (165P)** 全原子型分子動力学シミュレーションによるナノ空孔への樹脂の充填挙動の解析
（デンソー¹, 阪大基礎工²）○森穂高^{1,2}, 松林伸幸²
- 319S** 銀ナノ粒子形成過程のシミュレーション
（産総研¹, 東大²）○米谷慎¹, 杉澤進也¹, 長谷川達生^{1,2}
- 320S (277P)** 特異な熱電現象の解明を指向した分子動力学計算による熱物性の評価
（奈良先端大物質¹, 分子研²）○小島広孝¹, 阿部竜¹, 井上智史¹, 中村雅一^{1,2}
- 321S (275P)** Effect of Stacking Interactions on Polarizability of Organic Molecules
（R & D Center, Mitsui Chemicals）○Krzysztof Moorthi, Shintaro Maekawa

322S 分子動力学法を用いた Hras-GTP/GDP 複合体中の GTP/GDP の構造と GTP/GDP と溶媒水分子との水素結合との関連性の研究
(東京薬科大生命科学¹, 金沢大国際基幹教育院², 金沢大理工³) ○宮川毅¹, 森川良太¹, 高須昌子¹, 杉森公一², 川口一朋³, 長尾秀実³

16:15-16:20 閉会の辞 三浦伸一 (金沢大)

ポスター発表

1 日目

101P 高分子物性定量予測のための異なるスケールの分子シミュレーション手法の接続
(近畿大理工¹, 産総研²) ○三輪谷良太¹, 高橋和義², 荒井規允¹

102P Kinetic energy definition in velocity Verlet integration for accurate pressure evaluation
(理研¹, 理研 AICS²) ○Jung Jaewoon^{1,2}, 小林千草², 杉田有治^{1,2}

103P 高精度分子動力学シミュレーションのための分子間相互作用モデルの検討
(新日鉄住金化学¹, 東大先端研²) ○佐々木皓平^{1,2}, 山下雄史²

104P Blöchl 電荷解析による分極力場構築法の検討
(阪大院基礎工) ○石井良樹, 石塚良介, 松林伸幸

105P 分子シミュレーションへのデータマイニング技術応用
(金工大工) ○林亮子

106P GPU を用いた動的構造因子計算プログラムの開発
(広島大院総) ○佐久間翔太, 山崎真史, 宗尻修治

107P 散逸粒子動力学 (DPD) シミュレーションのためのプログラム開発と性能評価
(立教大理¹, 東京大生産研²) ○土居英男¹, 斎藤天菜¹, 奥脇弘次¹, 内藤貴充¹, 望月祐志^{1,2}

108P 不規則原子配列を記述するための多胞体の命名法 2
(産総研) ○西尾憲吾, 宮崎剛英

109P マルチカノニカル法における最適な状態密度決定法
(名大理) ○林卓弥, 岡本祐幸

110P 負圧領域の水の新しい構造
(岡山大院・自然科学¹, 岡山大基礎研²) ○松井貴宏¹, 平田雅典¹, 矢ヶ崎琢磨², 田中秀樹², 松本正和²

111P 溶媒和イオン液体系の分極モデル開発
(名大院工¹, 産総研², 横国大³) ○平川真志¹, 篠田渉¹, 岡崎進¹, 都築誠二², 渡邊正義³

112P 分子動力学シミュレーションによる固液界面における分子吸着の自由エネルギー解析
(阪大院基礎工) ○中久木一平, 石塚良介, 松林伸幸

113P 変分経路積分分子動力学法を用いたプロトン化水クラスターの量子構造ゆらぎに関する研究
(金沢大院・自然) ○杉澤宏樹, 井田朋智, 三浦伸一

114P 水/エタノール混合溶媒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についての分子動力学シミュレーション
(北大工¹, 北大院工²) ○川村将也¹, 佐藤信一郎²

115P レプリカ交換分子動力学シミュレーションによるナノスリット内の水/水相平衡及び相転移の解析
(慶大理工) ○山光隆一, 野村昴太郎, 泰岡顕治

116P 分子動力学法による電解質水溶液中の一樣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, 藤本和士, 篠田渉, 岡崎進

117P アルカリ土類金属酸化物の水和過程における吸着物質間の相互作用解析
(TherMAT¹, 産総研 CD-FMat², トヨタ自動車³) ○下堂靖代^{1,2}, 土田英二^{1,2}, 大橋良央^{1,3}, 石切山守^{1,3}, 石田豊和^{1,2}

- 118P** Fermi-Jagla モデルにおける水型液体の液液相転移の熱力学的および動力学的異常の解明
(新潟大院理¹, 阪大院基礎工²) ○加藤大貴¹, 樋口沙紀¹, 淡路大輔¹, 金鋼²
- 119P** 二酸化炭素ハイドレートの分解過程における分子動力学シミュレーション
(慶應大理工) ○長谷川智大
- 120P** 変分経路積分分子動力学法を用いたヘリウム液滴中の水素分子クラスターの基底状態に関する研究
(金沢大院自然) ○谷口雄佑, 三浦伸一
- 121P** 112S 参照
- 122P** 306S 参照
- 123P** 過冷却水中の水素結合が形成するネットワーク構造と破断プロセスの関係
(阪大院基礎工) ○菊辻卓真, 金鋼, 松林伸幸
- 124P** アクリレートポリマー/水界面における水の水素結合構造
(富山大院理工¹, 東北大院理², 京大 ES-ICB³) ○岸中翔¹, 八十島亘宏¹, 森田明弘^{2,3}, 石山達也¹
- 125P** 脂質二重層膜中のコレステロール 2 分子間側方相互作用への溶媒効果の解明
(名大院工¹, 名大院工 計算科学セ²) ○松岡漢斗¹, 安藤嘉倫², 岡崎進^{1,2}
- 126P** 共溶媒によるタンパク質構造安定性への自由エネルギー解析
(阪大院基礎工) ○山守優, 松林伸幸
- 127P** 分子力場および量子化学計算を用いた tankyrase2-リガンドの結合親和性予測
(理研 QBiC) ○平野秀典, 大塚教雄, 沖本憲明, 泰地真弘人
- 128P** タンパク質平衡揺らぎとリガンド結合の関係に対するエネルギー相関解析
(阪大院基礎工) ○伊庭輝, 山守優, 松林伸幸
- 129P** 発表取消
- 130P** QM/MM 法に基づく CYP1A2 によるカフェインの代謝選択性の検討
(徳島大学院・薬) ○西村兆二郎, 岡尚生, 谷山萌, 吉田達貞
- 131P** レプリカ交換傘サンプル法によるモルテングロビュール状態タンパク質の構造探索
(名大・院理・物理¹, 東大・院理・物理², Dept. Chem., Univ. Cambridge³) ○清水政宏¹, 梶川通仁¹, 桑島邦博², Christopher M. Dobson³, 岡本祐幸¹
- 132P** Theoretical Study on Contribution of Long-Range Interaction to Electronic Structure of Type I Copper Center in Multicopper Oxidase
(Div. of Math. and Phys. Sci., Grad. Sch. of Nat. Sci. and Tech., Kanazawa University¹, Div. of High. Educ. Res. and Dev., Inst. of Lib. Arts and Sci., Kanazawa University², Div. of Mat. Sci., Grad. Sch. of Nat. Sci. and Tech., Kanazawa University³) ○ Isman Kurniawan¹, Koichi Kodama¹, Makoto Wada¹, Satoshi Nakagawa¹, Kimikazu Sugimori², Kazutomo Kawaguchi¹, Takeshi Sakurai³, Hidemi Nagao¹
- 133P** 分子動力学法を用いた B 型肝炎抗ウイルス剤のカプシド透過機構の研究
(名大院工) ○深井基裕, 浦野諒, 藤本和士, 篠田渉, 岡崎進
- 134P** 計算創薬研究における薬物結合ポケットの柔軟性に関する研究
(理研 QBiC) ○沖本憲明, 平野秀典, 藤田茂雄, 泰地真弘人
- 135P** 生体膜上における膜結合タンパク質間の相互作用とタンパク質の拡散現象の解明
(慶大院理工¹, リーズ大², オックスフォード大³) ○山本詠士¹, Antreas C. Kalli², Mark S. P. Sansom³
- 136P** 208S 参照
- 137P** 303S 参照
- 138P** 202S 参照
- 139P** 発表取消
- 140P** 細胞膜の外単層膜と内単層膜間での膜物性の違いに関する研究
(名大院工¹, 名大院工・計算セ²) ○早川志保¹, 安藤嘉倫², 岡崎進^{1,2}

- 141P** 一般化ハイブリットモンテカルロ法を用いたマルチカノニカルアンサンブルの新規生成手法の開発
(金沢大院自然) ○向田夏規, 三浦伸一
- 142P** K^+ チャネルを通る電流の Michaelis-Menten 様の飽和の分子論的説明
(福井大医) ○炭竈享司, 老木成稔
- 143P** 遺伝子編集タンパク質の改良に向けた分子シミュレーションを用いたプロトコルの開発
(近大生物理工¹, 近大先端研²) ○高橋良太¹, 古江祐也¹, 梅田拓樹¹, 上野敦大¹, 米澤康滋², 宮下尚之¹
- 144P** 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 その2
(慶大理工¹, 慶大院理工²) ○九十九慶之¹, 山本詠士², 井上堅斗², 泰岡顕治¹, 三上益弘²
- 145P** シトクロム P450 還元酵素の誘電応答が制御する大規模構造変化と電子伝達
(早大・物理応物) ○飯島美来, 佐藤昂人, 森竹亮太, 高野光則
- 146P** 薬剤の有無によるリボスイッチの構造変化
(近大生物理工) ○大西庸嵩, 古江祐也, 白木琢磨, 米澤康滋, 宮下尚之
- 147P** 205S 参照
- 148P** 生体関連分子の AOT 逆ミセル内への導入の自由エネルギー解析
(阪大院基礎工) ○長尾昌洋, 石塚良介, 松林伸幸
- 149P** The Free Energy Profile for Dissociation of Ligand from Zn^{2+} Ion of CA I Activesite
(Division of Mathematical and Physical Sciences, Graduate School of Natural Science and Technology, Kanazawa University) ○Saleh Arwansyah Muhammad, Kurniawan Isman, Kazutomo Kawaguchi, Hidemi Nagao
- 150P** 分子動力学シミュレーションによる超分子上の GM1 糖鎖とアミロイド β の相互作用の研究
(名大院理¹, 分子研², 総研大³) ○多知裕平^{1,2}, 岡本祐幸¹, 奥村久士^{2,3}
- 151P** 機械学習を用いた散逸粒子動力学シミュレーションによる高性能界面活性剤分子の予測
(近大院理工¹, トヨタ自動車株式会社², 近大理工³) ○井口拓弥¹, 李娜², 諸星圭², 荒井規允³
- 152P** アルキルイミダゾリウムイオン液体における内部階層構造と遅い緩和についての分子動力学計算
(東北大金研) 彭海龍, ○芝隼人
- 153P** 分子シミュレーションによる高分子溶融体の伸長粘度解析
(東北大理) ○村島隆浩
- 154P** 閉じた空間内における界面活性剤水溶液の自己集合プロセスおよび自己集合構造の散逸粒子動力学法シミュレーション 温度および閉じ込めサイズの影響
(近大理工) ○吉本裕貴, 荒井規允
- 155P** 高電場におけるコロイドの非線型電気泳動
(九大・工) ○名嘉山祥也, 伊藤恵, 梶原稔尚
- 156P** 定量性を考慮した高分子の散逸粒子動力学シミュレーション
(福井大工) ○野田聖, 古石貴裕
- 157P** Dissipative Particle Dynamics Study on Self-Assembly of Tripod Shape Nanocrystal
(近大理工) ○ Bin Sazali Muhammad Adli, 小林祐生, 荒井規允
- 158P** 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
(近畿大学院総合理工) ○西脇拳四郎, 荒井規允
- 159P** 散逸粒子動力学法を用いたナノチューブ内におけるトリブロックおよびテトラブロックヤヌス粒子の自己集合構造の解明
(近大理工) ○竹口琢郎, 荒井規允
- 160P** 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
(近畿大院理工¹, 近畿大理工²) ○荒木雄介¹, 荒井規允²
- 161P** フォルステライトのガラス転移
(明大院理工) ○西澤隼哉, 深澤倫子

- 162P** 大規模分子動力学法を用いた低過飽和度条件における液滴均一核生成の自由エネルギー解析
(慶大理工¹, AICS²) ○阿由葉翔¹, 野村昂太郎², 徐東郁¹, 泰岡顕治¹
- 163P** ナフタルイミド化合物-ハロゲン系の光誘起過程に関する理論的研究
(理研 QBiC¹, 理研 AIP², 鳥取大院工³, 筑波大院化⁴) ○大塚教雄¹, 隅田真人², 井澤浩則³, 守橋健二⁴
- 164P** LIB 電解液中のリチウムイオンの微視的挙動に関する分子動力学解析—リチウム塩 LiPF₆ の解離度の評価—
(関西大院¹, 関西大²) ○高井義博¹, 齋藤賢一², 宅間正則², 高橋可昌², 佐藤知広²
- 165P** 318S 参照
- 166P** ワインラクトンの立体選択的生成機構の理論研究
(筑波大院数理物質¹, 筑波大計算セ²) ○喜屋武茜¹, 栢沼愛², 庄司光男^{1,2}, 重田育照^{1,2}
- 167P** MD シミュレーションによる半導体の表面物性解析
(京大院工) ○張鳴鏞, 松本充弘
- 168P** イミダゾールと酸性高分子中の水素結合構造と運動性
(九大先端研) ○堀優太, 塩田淑仁, 吉澤一成
- 169P** 二次元 Bi のトポロジカル相図の第一原理計算
(金沢大自然¹, 京都大 ESICB², 金沢大数物³) ○澤端日華瑠¹, 山口直也¹, 小鷹浩毅², 石井史之³
- 170P** 発表取消
- 171P** Electronic structures of 2-dimensional group-V materials : First-principles calculation.
(金沢大学自然科学研究科¹, 金沢大学数物科学系²) ○ ANUGRAH PUTRI NAMARI NUNING¹, 斎藤峯雄²
- 172P** 分岐構造を持つポリマー系における吸水能の自由エネルギー解析
(阪大院基礎工) ○半田和也, 松林伸幸
- 173P** ReaxFF を使った摩擦面の化学反応解析
(兵庫県大シミュレーション) ○秋山博俊, 鷺津仁志
- 174P** 炭素クラスターによる鉄鋼材料の強化メカニズム
(金沢大自然¹, 金沢大理工², 新日鐵住金³) ○安井紀一朗¹, 下川智嗣², 新山友暁², 澤田英明³
- 175P** データ科学と大規模電子状態計算による有機高分子探索
(鳥取大¹, 東大²) ○大平健太郎¹, 星健夫¹, 福島孝治²
- 176P** 大規模第一原理計算による酸化物/貴金属界面の構造決定
(金沢大自然¹, 金沢大数物²) ○山口直也¹, 石井史之²
- 177P** 104S 参照
- 178P** 溶媒効果を考慮した有機系添加剤の初期吸着過程の解析
(兵庫県大シミュレーション) ○小西正和, 鷺津仁志
- 179P** Bi 化合物/貴金属界面の第一原理電子状態計算
(金沢大自然¹, 金沢大数物²) ○杉田恵¹, 山口直也¹, 石井史之²
- 180P** 電荷を導入した液晶エラストマーモデルの相転移挙動解析
(先端素材高速開発技術研究組合¹, パナソニック², 産総研 CD-FMat³) ○田頭健司^{1,2}, 高橋和義³, 青柳岳司³
- 181P** 316S 参照
- 2 日目**
- 201P** 電子相関を考慮した有限電子温度 LCAO 法の開発
(高度情報研究機構) ○中村賢
- 202P** 311S 参照
- 203P** 局所分子動力学を用いた動的モンテカルロ法の経路自動探索
(核融合研¹, 総研大², 東芝メモリ(株)³) ○伊藤篤史^{1,2}, 加藤周一³
- 204P** 分子系に対する Gentlest Ascending Dynamics 法を利用した遷移状態探索
(RIST 神戸センター¹, 原子力機構²) ○太田幸宏¹, 志賀基之²

- 205P** 単一 GPU を用いる MD プログラムの開発
(理研 AICS¹, 理研², 理研 QBiC³) ○神谷基司¹, 杉田有治^{1,2,3}
- 206P** FDPS を用いた水の分子動力学シミュレーション
(理研 AICS¹, 慶應大², 神戸大³) ○野村昂太郎¹, 岩澤全規¹, 行方大輔¹, 野澤拓磨², 泰岡顕治², 牧野淳一郎^{1,3}
- 207P** 310S 参照
- 208P** 分子動力学シミュレーションによる応力計算を用いた界面の解析
(阪大院基礎工) ○木原健輔, 松林伸幸
- 209P** ナノスケール空間における流体の拡散係数評価
(琉大工¹, 琉大院²) ○西上正浩², 鈴木正己¹, 天久和正¹, 永島浩樹¹
- 210P** 高圧下での TIP4P/2005 モデルによる新型氷の発見
(岡山大院自然科学¹, 岡山大異分野基礎研²) ○平田雅典¹, 矢ヶ崎琢磨², 松本正和², 田中秀樹²
- 211P** カーボンナノチューブの周囲にできる新しい氷
(岡山大院自然科学¹, 岡山大異分野基礎研²) ○山崎大¹, 矢ヶ崎琢磨², 松本正和², 田中秀樹²
- 212P** 側鎖にオリゴエチレンオキシドを有する温度応答性ポリイソシアネート水溶液の MD 計算
(北大院総化¹, 北大院総化², 北大院工³) ○喜多駿弥¹, 水谷駿介², 佐藤信一郎³
- 213P** 経路積分 CMD 計算による超臨界流体ヘリウム 4 の Widom 線と物性の解明
(奈良女子大院・人間文化・化学) 竹元亜由美, ○衣川健一
- 214P** Molecular Dynamics Study of Filled Ice Ic and II
(金沢大院自然) ○Yudha Arman, 池沢将人, 三浦伸一
- 215P** 氷表面における環構造の温度依存性
(富山大院・理工¹, 東北大院・理², 京大 ESICB³) ○石山達也¹, 森田明弘^{2,3}
- 216P** 低温における氷 Ih 内の水素分子の量子ゆらぎに関する理論的研究
(金沢大院自然¹, 原子力機構²) ○池沢将人¹, Yudha Arman¹, 志賀基之², 三浦伸一¹
- 217P** 分子動力学シミュレーションによる分子イオンの電気移動度の計算
(金沢大自然研) ○玉館知也, 東秀憲, 汲田幹夫, 瀬戸章文, 大谷吉生
- 218P** アルコール単分子膜/水溶液界面でのイオン分布
(富山大院・理工¹, 東北大院・理, 京大・ESICB²) ○吉田俊将¹, 石山達也¹, 森田明弘²
- 219P** 3D-RISM 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
- 220P** DC-DFTB-MD simulations of excess proton diffusion in ordered/disordered water configurations
(早大理工研¹, 早大先進理工², JST-CREST³, 京大 ESICB⁴) ○西村好史¹, Sakti Aditya Wibawa², 周建斌¹, 中井浩巳^{1,2,3,4}
- 221P** 第一原理計算を用いたメタンハイドレートの相平衡条件の推定
(工学院大大学院¹, 工学院大²) ○中根億士¹, 伊藤慎一郎², 平塚将起²
- 222P** アルコール水溶液における表面張力温度依存性の解明
(東理大理工) ○土屋翼, 坂口裕宜, 金子敏宏, 上野一郎
- 223P** WCA ポテンシャルを用いた LJ 流体の輸送係数の評価
(新潟大院自然¹, 大阪大基礎工², 新潟大理³) ○内山輝¹, 石井良樹², 大鳥範和³
- 224P** MD シミュレーションとエネルギー表示溶液理論によるインスリン 2 量化的自由エネルギー解析
(阪大院基礎工) ○大矢晃久, 山守優, 松林伸幸
- 225P** 114S 参照
- 226P** 302S 参照
- 227P** 電位依存性カリウムチャンネル変異体の電位依存的な構造変化の解析
(広市大・情報¹, 東北大・情報², 東北大・メガバンク³, 東北大・加齢研⁴) ○近藤寛子¹, 鷹野優¹, 木下賢吾^{2,3,4}

- 228P** 分割統治型励起状態密度汎関数強束縛法を用いた光活性イエロータンパク質に関する理論的研究
(早大先進理工¹, 早大理工研², JST-CREST³, 京大 ESICB⁴) ○河本奈々¹, 吉川武司¹, 小野純一¹, 中井浩巳^{1,2,3,4}
- 229P** 分子力学のサンプリング間隔依存分散共分散行列による蛋白質-リガンド相互作用の解析
(日大理工) ○山中雅則
- 230P** 修飾核酸の力場パラメータ決定
(東大新領域) ○桜庭俊
- 231P** タンパク質 - フラグメント間の結合ポーズの効率の探索
(富士通研究所) ○佐藤博之, 谷田義明, 松浦東
- 232P** 四量体型サルコシン酸化酵素の生成物の移動経路探索 - 順過程・逆過程における自由エネルギー計算 -
(北里大院理¹, 北里大理²) ○斎藤崇己¹, 中嶋大祐², 渡辺豪², 米田茂隆²
- 233P** 気液界面でのアミロイド β (16-22) フラグメントの凝集シミュレーション
(分子研¹, 総研大²) ○奥村久士^{1,2}, 伊藤暁^{1,2}
- 234P** 親水性/疎水性界面での A β 単量体に対する分子力学シミュレーション
(分子研¹, 総研大²) ○伊藤暁^{1,2}, 奥村久士^{1,2}
- 235P** 野生型および変異型 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, 西村兆二郎, 吉田達貞
- 236P** 蛋白質の天然構造と熱変性構造の安定性に関する相互作用成分解析
(阪大院基礎工) ○徳永好彦, 山守優, 石塚良介, 松林伸幸
- 237P** 発表取消
- 238P** Prediction of membrane protein structures by replica-exchange umbrella sampling simulations: Case of two helices
(名大理) ○松原大貴
- 239P** 生体模倣高分子系でのエキシトン波束ダイナミクス
(鳥取大¹, 分子研², 立教大³, 東大生産研⁴) ○安部友樹也¹, 星健夫¹, 藤田貴敏², 望月祐志^{3,4}
- 240P** 206S 参照
- 241P** pg-RNA を内包した B 型肝炎ウイルスの全原子分子力学シミュレーション
(名大院工¹, 名市大院医², 名大院医³, 阪大蛋白研⁴) ○山口陽平¹, 今井甫¹, 藤本和士¹, 浦野諒¹, 尾曲克己², 田中靖人², 石川哲也³, 中川敦史⁴, 篠田渉¹, 岡崎進¹
- 242P** 分子科学計算を用いたグリコーゲンシクターゼキナーゼ-3 β と 7-アザインドール誘導体との複合体の精密相互作用解析
(徳島大院・薬) ○谷山萌, 岡尚生, 西村兆二郎, 吉田達貞
- 243P** I 型不凍タンパク質の水氷界面での安定度に関する MD シミュレーション
(名工大工¹, 名造大²) ○石田雅祥¹, 尾形修司¹, 鍛島康裕², 浦長瀬正幸¹, 田村友幸¹, 小林亮¹
- 244P** 分子力学シミュレーションによるヒストン脱メチル化酵素阻害剤が持つアイソザイム選択性の研究
(名大院理¹, 京都府医大院医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) ○塚本修一朗^{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}
- 245P** ゲルの引張りによる構造変化のシミュレーション
(東京薬科大生命) ○多ヶ谷翔吾, 和出沙弥香, 糸賀響, 宮川毅, 森河良太, 高須昌子
- 246P** 脂質膜の薬物透過における脂質組成の影響
(名大院工) ○田村美侑, 篠田渉, 岡崎進
- 247P** Langevin 力学を用いたチラコイドルーメン内腔のプラストシアニンの拡散現象に関する理論的研究
(金沢大院自然) ○和田慎, 高木晶平, 中川聖, 川口一朋, 長尾秀実
- 248P** QM/MM 分子力学法を用いた金属イオン存在下でのアミロイド β 凝集に対する理論的研究
(分子研¹, 総研大²) ○西澤宏晃¹, 奥村久士^{1,2}

- 249P** 結晶と非晶質から成る材料の力学特性と変形挙動
(金沢大自然¹, 金沢大理工²) ○原一輝¹, 下川智嗣², 新山友暁²
- 250P** 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
- 251P** 散逸粒子動力学法を用いたナノチューブ内における界面活性剤水溶液の管内流れのシミュレーション
(近大理工) ○本松崇裕, 荒井規允
- 252P** 散逸粒子動力学法によるテレケリックスターポリマーの自己集合構造
(近畿大理工) ○小野憲司, 荒井規允
- 253P** 様々なパッチを有するナノ粒子の自己集合構造に関する分子シミュレーション
(近畿大院総合理工¹, 理研², 近畿大理工³) ○小林祐生¹, 野村昂太郎², 荒井規允³
- 254P** 固体表面における水滴の衝突及び跳ね返り条件
(福井大工¹, 慶應大理工², Univ. Nebraska³) ○古石貴裕¹, 泰岡顕治², Xiao C. Zeng³
- 255P** 散逸粒子動力学シミュレーションによる気泡生成現象を利用した分子モーターモデルの歩行モデル改良
(近畿大院総合理工¹, 近畿大理工²) ○北條雅一¹, 荒井規允²
- 256P** 温度勾配が誘発する粒子流
(東理大理工) ○田中来輝, 秋元琢磨
- 257P** 液晶分子 BABH-n のキュービック相発現に関する分子シミュレーション
(京大院工) ○管東遼, 松本充弘
- 258P** ポリプロピレンの力学的破壊に関する分子シミュレーション
(福井大院工) ○山田忠明, 玉井良則
- 259P** 高分子ダイナミクスの普遍性を応用した分子シミュレーションの階層間接続
(産総研¹, 慶應大・理工², 名大院・工³) ○高橋和義¹, 西村龍斗², 大和伸好², 泰岡顕治², 増淵雄一³
- 260P** 散逸粒子動力学シミュレーションを用いたナノチューブ内における楕円型 Janus ナノ粒子の自己集合
(近畿大理工) ○西本淳, 荒井規允
- 261P** 分子デイジーチェーン構造の形成メカニズム
(山口大院創成科学) ○下柘晴菜, 浦上直人
- 262P** キレート抽出剤や酸性抽出剤を用いた溶媒抽出の分子シミュレーション
(住友金属鉱山) ○西原泰孝, 吉尾里司, 榎孝一郎
- 263P** 銀イオン錯体内における金属-金属結合の密度汎関数理論による解析
(筑波大院数理) ○添田皓輝, 松井亨, 守橋健二
- 264P** 実験計画法を用いた粗視化分子動力学シミュレーションによる樹脂材料の濡れ性解析
(日立製作所) ○伊藤寿, 松本茂紀, 鈴木智久, 杉井泰介, 寺崎健, 守谷浩志
- 265P** ボルツマンの輸送方程式を用いた熱輸送の解析
(京都大工) ○秋月聖也, 松本充弘, 向井峻介
- 266P** 側鎖の長さの違いによる高分子電解質膜の形態と機械的特性への影響の分子動力学シミュレーション
(名大院工¹, 旭硝子²) ○竹内琴乃¹, An-Tsung Kuo^{1,2}, 田中厚², 入澤潤², 篠田渉¹, 岡崎進¹
- 267P** 分子置換に伴うハイドロキシアパタイトの構造変化
(明大院理工) ○鈴木悠平, 並木亮太, 本田みちよ, 渡邊友亮, 相澤守, 深澤倫子
- 268P** 熱硬化性エポキシ樹脂の破壊挙動解析に向けた粗視化モデルの開発
(新日鉄住金化学¹, 東大先端研²) ○庄司直幸^{1,2}, 山下雄史²
- 269P** 結晶材料における不連続な亀裂進展ダイナミクス
(金沢大理工) ○藤元大志, 新山友暁, 下川智嗣
- 270P** 分岐高分子ブラシを付与した微粒子系に関するモンテカルロ・シミュレーション
(岐阜大工¹, 岐阜大自然科学技術²) ○寺尾貴道¹, 水野涼², 奥村賢太郎², 小栗潤也²
- 271P** 全原子古典分子動力学シミュレーションによるカルバゾール dendrimer 分子集合構造の解析
(理研 AICS¹, 東洋大理工², 首都大院理工³) ○河東田道夫¹, 田代基慶², 今村穰³

- 272P** 粗視化分子動力学法によるメソゲン含有エポキシ樹脂の配向性評価
(日立¹, 日立化成²) ○杉井泰介¹, 伊藤寿¹, 松本茂紀¹, 田中慎吾¹, 守谷浩志¹, 丸山直樹², 田中直敬², 竹澤由高²
- 273P** カルボン酸塩・ナフタルイミド化合物錯体の光誘起過程の理論的解析
(筑波大院数理¹, 理研 QBiC², 鳥取大院工³) ○大高秀仁¹, 大塚教雄², 隅田真人¹, 井澤浩則³, 松井亨¹, 守橋健二¹
- 274P** 分子シミュレーションを用いたナノスケールフラレン分散液の示す流体力学的挙動の分子論的議論
(阪大院基礎工) ○水田圭亮, 石井良樹, 金鋼, 松林伸幸
- 275P** 321S 参照
- 276P** DSMC 法による固体内の電子輸送解析
(京都大工) ○鋤本賢志, 秋月聖也, 松本充弘
- 277P** 320S 参照
- 278P** メタダイナミクスによる複合体構造予測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
- 279P** リチウム-グラフェン系による水素貯蔵メカニズムの理論解明
(北大院工) 田地川浩人, 井山哲二, ○福澄孝博
- 280P** セルローズナノファイバーのねじり変形に関する分子動力学解析
—水素結合の評価と形状記憶機能の検討—
(関西大院¹, 関西大²) ○高田健太郎¹, 齋藤賢一², 宅間正則², 高橋可昌², 佐藤知広²
- 281P** ホイスラー合金における熱電効果の第一原理計算
(金沢大自然¹, 金沢大数物²) ○見波将¹, 石井史之², 水田耀ピエール¹, 齋藤峯雄²
- 282P** QM/MMに基づくRed Moon法におけるポテンシャルエネルギー評価
(名大院情報¹, 京大 ESICB², CREST-JST³) ○藤江拓哉¹, 竹中規雄^{1,2}, 鈴木雄一¹, 長岡正隆^{1,2,3}