

# 第32回分子シミュレーション討論会 講演プログラム

(平成30年10月16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 : 株式会社クロスアビリティ、株式会社 JSOL、株式会社 HPC ソリューションズ、  
みずほ情報総研株式会社、株式会社 HPC テック、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 : 2018年11月28日(水) - 2018年11月30日(金)  
会場 : 産業技術総合研究所(つくば中央キャンパス内共用講堂 1F)  
〒305-0046 茨城県つくば市東1丁目1-1  
つくばエクスプレス つくば駅より 関東鉄道バス(荒川沖行き4番乗場)「並木2丁目」  
バス停下車、徒歩約10分(「産総研つくば東事業所」ではありませんのでご注意ください)  
HP : <http://sympo.mol-sim.jp/mssj32/>

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

講演者記号 : ○印=発表者

## 1日目 11月28日(水)

9:15-9:55 開場, 受付

9:55-10:00 開会の辞 会長 田中秀樹(岡山大)

— 午前の部 —

10:00-11:25 口頭発表 A

座長: 齊藤真司(分子研)

101S TIP4P/2005, SPC/E, TIP5P の高圧氷の相図(岡大基礎研) ○矢ヶ崎琢磨, 松本正和, 田中秀樹

102S ガス分子含有アモルファス氷の構造とダイナミクス(明大院理工) ○直島康人, 深澤倫子

103S 分子動力学法による気・液平衡密度(法政大生命) ○片岡洋右

104S Red Moon 法による PMMA バルク相ラジカル重合シミュレーション: 高分子ミクロ物性の定量的予測の実現に向けて(滋賀大 DS センター<sup>1</sup>, 理研 AIP<sup>2</sup>, 名大院情報<sup>3</sup>, JST CREST<sup>4</sup>, 京大 ESICB<sup>5</sup>) ○高柳昌芳<sup>1,2,4</sup>, Zizhen Rao<sup>3</sup>, Shanghua Xing<sup>3,4</sup>, 長岡正

隆<sup>3,4,5</sup>

105L マルチハイブリッドシミュレーションによるプラズマ誘起繊維状ナノ構造形成現象の解明(核融合研<sup>1</sup>, 名大院工<sup>2</sup>) ○伊藤篤史<sup>1</sup>, 高山有道<sup>1</sup>, 中村浩章<sup>1,2</sup>

11:30-12:30 ポスター発表 101P-175P(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-175P(偶数)  
(講演タイトルはプログラムの末尾に記載)

— 休憩 14:30-14:40 —

14:40-15:30 招待講演 I

座長: 森下徹也(産総研)

106IL アモルファス物質の構造抽出手法の開発(早大理工) ○平田秋彦

— 休憩 15:30-15:40 —

15:40-16:45 口頭発表 B

座長：金鋼（阪大院基礎工）

- 107L ガラスにおける局在化振動モードの空間構造とその起源（東大院総合文化）○水野英如，島田真成，池田昌司
- 108S (130P) 主成分解析を用いた固体結晶の相転移に重要な分子振動の解析（京セラ株式会社）○増子貴子
- 109L ジャミング転移点近傍における粒子軌道の可逆性に関する非平衡相転移（名大・理<sup>1</sup>，東大・理<sup>2</sup>）○川崎猛史<sup>1</sup>，永澤謙太郎<sup>2</sup>，宮崎州正<sup>1</sup>

— 休憩 16:45-16:55 —

16:55-17:55 口頭発表 C

座長：米澤康滋（近畿大）

- 110S モデル蛋白質のフォールディング転移と比熱（金沢大院自然<sup>1</sup>，金沢大理工<sup>2</sup>）向田夏規<sup>1</sup>，○三浦伸一<sup>2</sup>
- 111S ハミルトニアンレプリカ置換分子動力学シミュレーションによる A $\beta$  40 と A $\beta$  42 の二量体形成（分子研<sup>1</sup>，ExCELLS<sup>2</sup>，総研大<sup>3</sup>）○伊藤暁<sup>1,2,3</sup>，奥村久士<sup>1,2,3</sup>
- 112S (226P) FDPS を通してアクセラレータを利用した分子動力学シミュレーションコードの開発（理研 R-CCS<sup>1</sup>，慶應大<sup>2</sup>，神戸大<sup>3</sup>）○野村昂太郎<sup>1</sup>，野澤拓磨<sup>2</sup>，岩澤全規<sup>1</sup>，行方大輔<sup>1</sup>，似鳥啓吾<sup>1</sup>，阿由葉翔<sup>2</sup>，泰岡顕治<sup>2</sup>，牧野淳一郎<sup>1,3</sup>
- 113S 大規模分子動力学計算高速化のための新規 MPI 通信方法の開発（分子研<sup>1</sup>，玉川大工<sup>2</sup>，名大院工<sup>3</sup>）○安藤嘉倫<sup>1</sup>，坂下達哉<sup>2</sup>，吉井範行<sup>3</sup>，岡崎進<sup>3</sup>

2 日目 11 月 29 日（木）

9:00-9:30 開場，受付

— 午前の部 —

9:30-10:30 口頭発表 D

座長：松本充弘（京都大）

- 201S カルマン渦キャビテーションの分子動力学シミュレーション（東大物性研）○浅野優太，渡辺宙志，野口博司
- 202S (258P) 粗視化分子動力学計算による高分子溶融体の伸長流動（東北大理）○村島隆浩

203S (237P) 溶媒効果を取り入れた結晶界面への分子吸着の解析

（阪大院基礎工）○山本直樹，松林伸幸

204S 拡散理論と遷移状態理論を考慮した水溶液中の反応速度（関西電力技研<sup>1</sup>，Comenius Univ. Bratislava<sup>2</sup>，Slovak Acad. Sci.<sup>3</sup>）○窪田善之<sup>1</sup>，Tomáš Bučko<sup>2,3</sup>

— 休憩 10:30-10:40 —

10:40-11:25 口頭発表 E

座長：安藤嘉倫（分子研）

205S (210P) アクリレートポリマー/水界面における分子構造と振動和周波スペクトルの分子動力学シミュレーション（富山大院工<sup>1</sup>，東北大院理，京大・ESICB<sup>2</sup>）○岸中翔<sup>1</sup>，森田明弘<sup>2</sup>，石山達也<sup>1</sup>

206S Detecting degree of structural order of Langmuir monolayers through molecular simulation analysis of sum frequency generation spectroscopy（東北大理<sup>1</sup>，京大 ES-ICB<sup>2</sup>）○王琳<sup>1,2</sup>，森田明弘<sup>1,2</sup>

207S アルカンとパーフルオロアルカンの分子間相互作用：低い相溶性の原因について（産総研機能材料<sup>1</sup>，産総研機能化学<sup>2</sup>，三菱マテリアル電子化成<sup>3</sup>）○都築誠二<sup>1</sup>，内丸忠文<sup>2</sup>，小野泰蔵<sup>3</sup>

— 昼食 12:30-13:30 —

11:30-12:30 ポスター発表 201P-274P(奇数)  
（講演タイトルはプログラムの末尾に記載）

— 午後の部 —

13:30-14:30 ポスター発表 201P-274P(偶数)  
（講演タイトルはプログラムの末尾に記載）

14:40-15:10 口頭発表 F

座長：伊藤篤史（核融合研）

208S 分子レベルで見た、燃焼反応中の発光機構（産総研<sup>1</sup>，日大医学部<sup>2</sup>）○宮本良之<sup>1</sup>，小松徳太郎<sup>2</sup>

209S Maxwell + TDDFT + MD マルチスケールシミュレーションの開発および瞬間誘導ラマン分光におけるコヒーレントフォノンとシグナルの計算への適用（筑波大・計セ）○山田篤志，矢花一浩

15:10-16:00 招待講演 II

座長：岡本祐幸（名大）

210IL The bionano interface: Insights from molecular simulation, theory and experiment (Imperial College London) ○Nick Quirke

— 休憩 16:00-16:10 —

16:10-16:45 受賞講演

座長：石山達也（富山大）

16:45-17:25 研究会総会

18:30-20:30 懇親会

3日目 11月30日（金）

9:00-9:30 開場，受付

— 午前の部 —

9:30-10:30 口頭発表 G

座長：米谷慎（産総研）

301S コレステリック液晶中に現れるスメクチック構造の研究（慶應大理工）○野澤拓磨，Paul E. Brumy，泰岡顕治

302S 粗視化分子動力学計算を用いた側鎖型液晶エラストマーの力学特性解析（先端素材高速開発技術研究組合<sup>1</sup>，パナソニック<sup>2</sup>，産総研 CD-FMat<sup>3</sup>，九大院理<sup>4</sup>）○田頭健司<sup>1,2</sup>，高橋和義<sup>3</sup>，土居英男<sup>3</sup>，福田順一<sup>4</sup>，青柳岳司<sup>3</sup>

303S 非晶高分子の衝撃破壊に関する分子論的研究 I: 延性と脆性（名大院工）○藤本和士，湯之也，Rajdeep Payal，篠田渉，岡崎進

304S 非晶高分子の衝撃破壊に関する分子論的研究 II: 分子論的解釈（名大工）○湯之也，藤本和士，篠田渉，岡崎進

— 休憩 10:30-10:40 —

10:40-11:25 口頭発表 H

座長：古石貴裕（福井大）

305S 粗視化シミュレーションによるメルト中でのシクロデキストリン包接錯体形成メカニズムの解明（東レ 先端材料研究所<sup>1</sup>，東レ 化成品研究所<sup>2</sup>）○山本海<sup>1</sup>，山下浩平<sup>2</sup>，茂本勇<sup>1</sup>，小林定之<sup>2</sup>

306S Poly(vinylidene fluoride) (PVDF) 結晶および非晶表面における濡れ性の分子論的研究（ADMAT<sup>1</sup>，名大院工<sup>2</sup>，東レ<sup>3</sup>）○北畑雅弘<sup>1,2,3</sup>，Tsedem Taddese<sup>2</sup>，岡崎進<sup>2</sup>

307S アクティブマターとしてのアゾ分子（産総研）○米谷慎，則包恭央

11:35-12:20 口頭発表 I

座長：齋藤大明（理研 BDR）

308S 脂質アシル基の違いが PH ドメインの生体膜への結合性に与える影響（慶應大理工<sup>1</sup>，東京医科歯科大<sup>2</sup>）○山本詠士<sup>1</sup>，佐々木純子<sup>2</sup>，佐々木雄彦<sup>2</sup>

309S 極性を持つ粗視化水モデルの開発と生体分子系における応用（名大院工）○宮崎裕介，岡崎進，篠田渉

310S クライオ電顕フィッティング計算における全原子モデルと粗視化モデルの比較（理研）○森貴治，杉田有治

— 昼食 12:20-13:30 —

— 午後の部 —

13:30-14:45 口頭発表 J

座長：光武亜代理（明治大）

311S DNA 光回復酵素における FAD 光還元反応の電荷移動シミュレーション（JST さきがけ<sup>1</sup>，筑波大計算セ<sup>2</sup>，理研 BDR<sup>3</sup>）○鬼頭（西岡）宏任<sup>1,2</sup>，原田隆平<sup>2</sup>，佐藤竜馬<sup>3</sup>，重田育照<sup>2</sup>

312S バクテリオロドプシンの 1 段階目のプロトン移動過程に対する DC-DFTB-MD シミュレーション（早大理工総研<sup>1</sup>，早大先進理工<sup>2</sup>，京大 ESICB<sup>3</sup>）○小野純一<sup>1</sup>，今井みの莉<sup>2</sup>，西村好史<sup>1</sup>，中井浩巳<sup>1,2,3</sup>

313S 蛋白質-リガンド解離過程の溶媒座標自由エネルギー地形解析（量研機構）○米谷佳晃

314S B 型肝炎ウイルス (HBV) に対する薬剤分子の肝細胞内における吸収量のための自由エネルギー計算（名大工）○浦野諒，吉井範行，篠田渉，岡崎進

315S 分子動力学シミュレーションを用いた長鎖高分子化学ポテンシャルの効率的な計算手法の開発（阪大院基礎工）○山田一雄，松林伸幸

— 休憩 14:45-14:55 —

14:55-16:10 口頭発表 K

座長：米谷佳晃（量研機構）

316S 周期境界条件下における静電相互作用の surface term（名大院工<sup>1</sup>，分子研<sup>2</sup>）○吉井範行<sup>1</sup>，安藤嘉倫<sup>2</sup>，岡崎進<sup>1,2</sup>

- 317S** Optimal temperature evaluation in MD with a large time step (理研) ○Jung-Jaewoon, 小林千草, 杉田有治
- 318S** ポテンシャル極小から最適脱出経路をたどる非経験的方法 (東京大理) ○明石遼介, Yuri S. Nagornov
- 319S** メタダイナミクス計算による高温水中多価アルコール脱水反応経路の探索 (東京大学新領域創成科学研究科<sup>1</sup>, 日本原子力研究開発機構<sup>2</sup>) ○CHANG YONG LIK<sup>1</sup>, 佐々木岳彦<sup>1</sup>, 志賀基之<sup>2</sup>
- 320S** 自由エネルギー面上における停留点の探索法 (原子力機構) ○志賀基之

16:10-16:15 閉会の辞 森下徹也 (産総研)

## ポスター発表

### 1 日目

- 101P** 負圧領域の氷の相図 (岡山大院・自然科学<sup>1</sup>, 岡山大基礎研<sup>2</sup>) ○松井貴宏<sup>1</sup>, 平田雅典<sup>1</sup>, 矢ヶ崎琢磨<sup>2</sup>, 松本正和<sup>2</sup>, 田中秀樹<sup>2</sup>
- 102P** 溶媒中ナノ粒子の流体力学挙動と溶媒和構造: 物理化学と流体力学の融合による横断的解析 (阪大院基礎工) ○水田圭亮, 石井良樹, 金鋼, 松林伸幸
- 103P** 温度勾配のかかった系における水分子ダイナミクスの解明 (慶應大理工) ○加藤優佑, 佐藤洋平, 山本詠士
- 104P** 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<sup>1</sup>, 岡山大基礎研<sup>2</sup>) ○山崎大<sup>1</sup>, 矢ヶ崎琢磨<sup>2</sup>, 松本正和<sup>2</sup>, 田中秀樹<sup>2</sup>
- 105P** メゾスケールの過渡的凝集体を形成する3成分溶媒における疎水溶質の溶解性と拡散性 (阪大基礎工) ○原健太, 石井良樹, 松林伸幸
- 106P** 相互作用凹凸面の水滴に対する濡れ性 - メニーコアプロセッサを用いた分子動力学シミュレーション - (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>
- 107P** アルカン分子構造が液滴均一核生成に与える影響 (慶大理工<sup>1</sup>, 東大工<sup>2</sup>, 理研 R-CCS<sup>3</sup>) ○阿由葉翔<sup>1</sup>, 野澤拓磨<sup>1</sup>, 徐東郁<sup>2</sup>, 野村昂太郎<sup>3</sup>, 泰岡顕治<sup>1</sup>
- 108P** 分子動力学法を用いた HMGB1 における C 末端領域の役割 (慶大理工) ○荻野健太, Wresti L. Anggayasti, 山本詠士, 泰岡顕治
- 109P** 氷 I<sub>h</sub> 内におけるホルムアルデヒドの拡散機構 (岡山大自然科学<sup>1</sup>, 岡山大異分野基礎研<sup>2</sup>) ○平田雅典<sup>1</sup>, 矢ヶ崎琢磨<sup>2</sup>, 松本正和<sup>2</sup>, 田中秀樹<sup>2</sup>
- 110P** 二原子分子に対する Stokes-Einstein-Debye の関係の定式化 (新潟大院自然<sup>1</sup>, 大院基礎工<sup>2</sup>, 新潟大理<sup>3</sup>) ○近藤優多<sup>1</sup>, 石井良樹<sup>2</sup>, 大鳥範和<sup>3</sup>
- 111P** 全原子分子動力学法による PVDF/良溶媒・貧溶媒間の親和性に対する重合度の影響に関する研究 (名大院工) ○渡邊大登, Tseden-Taddese, 北畑雅弘, 岡崎進
- 112P** 溶融アルカリハロゲン化物の自己拡散係数と粘性率の定式化 (新潟大院自然<sup>1</sup>, 大院基礎工<sup>2</sup>, 新潟大理<sup>3</sup>) ○齊藤蒼思<sup>1</sup>, 眞谷健汰<sup>1</sup>, 石井良樹<sup>2</sup>, 大鳥範和<sup>3</sup>
- 113P** 液液界面における電子移動反応機構の多次元自由エネルギー計算 (東北大院・理<sup>1</sup>, 京都大・ESICB<sup>2</sup>) ○平野智倫<sup>1</sup>, 森田明弘<sup>1,2</sup>
- 114P** Blöchl 電荷解析と Force Fitting 法を用いたイオン液体の非分極力場の開発 (阪大院基礎工) ○石井良樹, 石塚良介, 松林伸幸
- 115P** Implementation and Improvement of a regular FMM in MD Simulation Software Modylas (名大工<sup>1</sup>, 分子研<sup>2</sup>) ○ZHU ZHE<sup>1</sup>, 安藤嘉倫<sup>2</sup>, 吉井範行<sup>1</sup>, 岡崎進<sup>1</sup>
- 116P** 316S 参照
- 117P** Ab initio 経路積分分子動力学法を用いた NH<sub>4</sub><sup>+</sup> - H<sub>2</sub>O の解析 (横市大・生命ナノ) ○桑畑和明, 立川仁典
- 118P** 分子動力学計算および緩和モード解析を援用した非弾性中性子散乱データ解釈法の開発 (慶大理工<sup>1</sup>, 明大理工<sup>2</sup>) ○唐澤直之<sup>1</sup>, 光武重代理<sup>2</sup>, 高野宏<sup>1</sup>
- 119P** 周期系における Gentlest Ascent Dynamics 法による遷移状態探索 (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>
- 120P** サイズ誘導型構造最適化法の開発とそのクラスター・タンパク質への応用 (北大院理) ○竹内浩
- 121P** Seeking the High Energy Saddle Points for Argon Cluster by Stochastic Non-empirical Approach (University of Tokyo, Department of Physics) ○Yuri S. Nagornov, Akashi Ryosuke
- 122P** Heterogeneous な net-charge 系の分子動力学シミュレーション (産業技術総合研究所) ○高橋和義
- 123P** 動径分布関数・エネルギー分布関数をもとにした進化戦略による力場パラメータ決定手法 (理研・MIH) ○千葉峻太郎, 池口満徳, 奥野恭史
- 124P** 汎関数積分法に基づく電子相関理論の開発 (高度情報研究機構) ○中村賢
- 125P** 分子シミュレーションにおける密度分布を用いた物性の評価方法に対する検討 (慶大・

- 理工学研究科) ○井上貫太郎, 泰岡顕治
- 126P** データフロープログラミングの拡張による分子シミュレーション解析ツールの開発(慶大理工) ○プアカイ, 泰岡顕治
- 127P** レプリカ部分置換法の開発とシニョリンへの応用(総研大<sup>1</sup>, 分子研<sup>2</sup>, ExCELLS<sup>3</sup>) ○山内仁喬<sup>1,2,3</sup>, 奥村久士<sup>1,2,3</sup>
- 128P** バクテリオロドプシンの長距離プロトン移動過程に対するDC-DFTB-MDシミュレーション(早大先進理工<sup>1</sup>, 早大理工総研<sup>2</sup>, 京大ESICB<sup>3</sup>) ○岡田千果<sup>1</sup>, 小野純一<sup>2</sup>, 西村好史<sup>2</sup>, 中井浩巳<sup>1,2,3</sup>
- 129P** 第一原理分子動力学法による2次元GaNの安定構造の探索(産総研CD-FMat<sup>1</sup>, 産総研MathAM-OIL<sup>2</sup>) ○屋山巴<sup>1</sup>, Anh Khoa Augustin Lu<sup>2</sup>, 森下徹也<sup>1,2</sup>, 中西毅<sup>1,2</sup>
- 130P** 108S 参照
- 131P** アルコール単分子膜/水溶液界面での酸解離に関する分子動力学シミュレーション(富山大院工<sup>1</sup>, 茨城大工<sup>2</sup>, 東北大院理<sup>3</sup>, 京大・ESICB<sup>4</sup>) ○吉田俊将<sup>1</sup>, 城塚達也<sup>2</sup>, 森田明弘<sup>3,4</sup>, 石山達也<sup>1</sup>
- 132P** 親水性ナノチャンネル内における水の液膜の負圧安定性メカニズムの解明(名大院工<sup>1</sup>, 分子研理論・計算<sup>2</sup>) ○伊藤有毅<sup>1</sup>, 安藤嘉倫<sup>2</sup>, 岡崎進<sup>1</sup>
- 133P** 分子シミュレーションによる溶媒抽出錯体の構造モデリング(住友金属鉱山) ○西原泰孝, 吉尾里司
- 134P** 塩化リチウムを添加した水酸化マグネシウムの脱水反応シミュレーション(産総研CD-FMat<sup>1</sup>, TherMat<sup>2</sup>) ○下堂靖代<sup>1,2</sup>, 土田英二<sup>1,2</sup>, 石田豊和<sup>1,2</sup>
- 135P** 水素ハイドレート内の水素分子における分子動力学シミュレーション(金沢大院自然<sup>1</sup>, 金沢大理工<sup>2</sup>) ○原田明日華<sup>1</sup>, Yudha Arman<sup>1</sup>, 三浦伸一<sup>2</sup>
- 136P** 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(IV)(金沢工大 電気電子) ○長濱宏昂, 齋藤公希, 千田祐也, 前島拓斗, 林啓治
- 137P** 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(V)(金沢工大 電気電子) ○千田祐也, 齋藤公希, 木下裕也, 林啓治
- 138P** QM/MM法によるビリルビンオキシダーゼの三核銅中心における構造変化に関する理論的研究(東北大学院理<sup>1</sup>, 筑波大院数理<sup>2</sup>, 筑波大CCS<sup>3</sup>, 兵庫県立大院生命<sup>4</sup>, 金沢大院自然科学<sup>5</sup>) ○常盤恭樹<sup>1,2</sup>, 庄司光男<sup>3</sup>, 柴田直樹<sup>4</sup>, 樋口芳樹<sup>4</sup>, 片岡邦重<sup>5</sup>, 重田育照<sup>3</sup>, 美齊津文典<sup>1</sup>
- 139P** 高分子/水界面の構造とアミノ酸吸着自由エネルギーの側鎖依存性(阪大院基礎工) ○八十島亘宏, 松林伸幸
- 140P** 粉体の圧力分布に注目したブラジルナツツ現象のダイナミクスの解析(名古屋大工) ○仲井文明
- 141P** Density-Functional Tight-Binding Metadynamics Study of Carbonaceous Species Diffusion on (100)- $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Surface (ES-ICB, Kyoto University<sup>1</sup>, WISE, Waseda University<sup>2</sup>, Waseda University<sup>3</sup>) ○SAKTI Aditya Wibawa<sup>1</sup>, CHOU Chien-Pin<sup>2</sup>, NISHIMURA Yoshifumi<sup>2</sup>, NAKAI Hiromi<sup>1,2,3</sup>
- 142P** Inter-molecular interaction studies of Li-Battery electrolyte components using variational based energy decomposition analysis (Nagoya University<sup>1</sup>, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology<sup>2</sup>, Yokohama National University<sup>3</sup>) ○Oleg Starovoytov<sup>1</sup>, Seiji Tsuzuki<sup>2</sup>, Kaoru Dokko<sup>3</sup>, Masayoshi Watanabe<sup>3</sup>, Wataru Shinoda<sup>1</sup>
- 143P** MD simulation on sub-cooled boiling of liquid argon film on platinum nano-structured surface (京都大工) ○李奥, 松本充弘
- 144P** 機械学習と粗視化分子シミュレーションによる機能性自己集合材料の物性予測(近大院理工<sup>1</sup>, 近大理工<sup>2</sup>, トヨタ自動車<sup>3</sup>) ○井口拓弥<sup>1</sup>, 李娜<sup>3</sup>, 諸星圭<sup>3</sup>, 荒井規允<sup>2</sup>
- 145P** 粗視化モデルにおけるエポキシ樹脂の分子構造と物性値の関係(日鉄ケミカル&マテリアル<sup>1</sup>, 東大・先端研<sup>2</sup>) ○庄司直幸<sup>1,2</sup>, 山下雄史<sup>2</sup>
- 146P** 全原子分子動力学計算によるPMMAの圧縮破壊における分子機構の解明(名大工<sup>1</sup>, 名大院工<sup>2</sup>) ○石川博章<sup>1</sup>, 藤本和士<sup>2</sup>, Zhiye Tang<sup>2</sup>, 篠田渉<sup>2</sup>, 岡崎進<sup>2</sup>
- 147P** 散逸粒子動力学シミュレーションによるロッド・コイルスターポリマーの自己集合構造とその物性の研究(近大理工) ○井上晃秀, 荒木雄介, 荒井規允
- 148P** ウレア基を有するポリフェニルアセチレンのキラルセンシング機構の分子動力学シミュレーション(旭川高専物質化学工学科<sup>1</sup>, 北大工学部<sup>2</sup>, 長春理工大学<sup>3</sup>, 北大工学研究院<sup>4</sup>) ○吉富翔太郎<sup>2</sup>, 堺井亮介<sup>1</sup>, 覚知豊次<sup>3</sup>, 佐藤信一郎<sup>4</sup>
- 149P** 散逸粒子動力学シミュレーションによるテトラポッド型ナノ粒子の自己集合構造(名大院理<sup>1</sup>, 近大理工<sup>2</sup>) ○荒木雄介<sup>1</sup>, 小林祐生<sup>1</sup>, 荒井規允<sup>2</sup>
- 150P** 粗視化分子動力学法に基づくフィラー含有樹脂材料の濡れ挙動解析(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
- 151P** 分子動力学計算によるポリスチレンの衝撃破壊における分子論 (名大院工) ○伊藤直紀, 藤本和土, 湯之也, 篠田渉, 岡崎進
- 152P** 散逸粒子動力学法を用いた界面活性剤エマルションの形状変化の研究 (近大理工<sup>1</sup>, 近大院理工<sup>2</sup>) ○上田秋伍<sup>1</sup>, 吉本裕貴<sup>2</sup>, 荒井規允<sup>1</sup>
- 153P** ナノチューブ内におけるパッチ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 (近畿大理工<sup>1</sup>, 理研 AICS<sup>2</sup>, 理工学総研<sup>3</sup>) ○川崎慎太郎<sup>1</sup>, 野村昂太郎<sup>2</sup>, 小林祐生<sup>1</sup>, 荒井規允<sup>1,3</sup>
- 154P** 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
- 155P** 分子間 van der Waals 力の制御による液晶分子の高速自己組織化シミュレーション (東工大物質理工) ○佐々木遼馬, 大木竜勝, 檜脇悠輔, 椎野良介, 林慶浩, 川内進
- 156P** 散逸粒子動力学法によるテレケリックポリマー系の解析 (近大理工) ○松崎隼人, 荒井規允
- 157P** ナノチューブ内におけるコレステリック液晶の配向に関する分子シミュレーション (近畿大理工<sup>1</sup>, 慶應義塾大理工<sup>2</sup>) ○辻之上弘晃<sup>1</sup>, 野澤拓磨<sup>2</sup>, 荒井規允<sup>1</sup>
- 158P** 高分子結晶膜の表面が気体分子の分離に及ぼす影響 (福井大院工) ○清水洗佑, 玉井良則
- 159P** 散逸粒子動力学法を用いた ABC スターポリマーのナノチューブ内における自己集合構造 (近畿大理工) ○藤瀬純也, 荒井規允
- 160P** カーボンナノチューブ内におけるメタン分子の相挙動に関する分子動力学シミュレーション (近大理工) ○林部聖哉, 荒井規允
- 161P** PEG 修飾脂質が膜物性に与える影響: 粗視化分子シミュレーション (名大院工) ○小野貴憲, 田中裕貴, 岡崎進, 篠田渉
- 162P** DNA-小分子複合体の構造安定性 (筑波大院数物<sup>1</sup>, 阪大産研<sup>2</sup>, 筑波大計セ<sup>3</sup>) ○山崎笙太郎<sup>1</sup>, 宮川晃一<sup>2</sup>, 木間塚政人<sup>1</sup>, 庄司光男<sup>3</sup>, 原田隆平<sup>3</sup>, 重田育照<sup>3</sup>, 堂野主税<sup>2</sup>, 中谷和彦<sup>2</sup>
- 163P** 混合脂質膜における脂質分子の膜透過・離脱に関する自由エネルギー曲線 (理研 BDR<sup>1</sup>, 産総研 CD-FMat<sup>2</sup>, 北陸先端大マテリアル<sup>3</sup>, 金沢大学理工<sup>4</sup>) ○齋藤大明<sup>1</sup>, 森下徹也<sup>2</sup>, 水上卓<sup>3</sup>, 川口一朋<sup>4</sup>, 長尾秀実<sup>4</sup>
- 164P** 分子動力学シミュレーションによる  $\beta$  シート凝集の自由エネルギー解析 (阪大院基礎工<sup>1</sup>, AIST<sup>2</sup>) ○増谷佳一<sup>1</sup>, 山守優<sup>2</sup>, 金鋼<sup>1</sup>, 松林伸幸<sup>1</sup>
- 165P** 分子動力学シミュレーションを用いたアミロイド  $\beta$  凝集に関する構造および自由エネルギー解析 (阪大院基礎工) ○新田孝志, 増谷佳一, 松林伸幸
- 166P** Amphotericin B チャネルの構造安定性と疎水性ミスマッチによるチャネル間相互作用解析 (名古屋大工<sup>1</sup>, 阪大大理<sup>2</sup>) ○舟橋康佑<sup>1</sup>, Sangjae Seo<sup>1</sup>, 岡崎進<sup>1</sup>, 梅川雄一<sup>2</sup>, 村田道雄<sup>2</sup>, 篠田渉<sup>1</sup>
- 167P**  $\alpha$  ヘリックス構造における相互作用エネルギーの理論解析 (北見工大工<sup>1</sup>, 阪大蛋白研<sup>2</sup>, 広市大院情報<sup>3</sup>) ○近藤寛子<sup>1</sup>, 草鹿あゆみ<sup>2</sup>, 中村春木<sup>2</sup>, 鷹野優<sup>3</sup>
- 168P** 筋疾患関連タンパク質 FHL1 における分子動力学シミュレーションと構造安定性の解析 (東薬大生命<sup>1</sup>, 統数研<sup>2</sup>, 東京医大<sup>3</sup>) ○竹内裕紀<sup>1</sup>, 岡嶋大樹<sup>1</sup>, 糸賀響<sup>1</sup>, 山田寛尚<sup>1,2</sup>, 宮川毅<sup>1</sup>, 森河良太<sup>1</sup>, 高須昌子<sup>1</sup>, 林由起子<sup>3</sup>
- 169P** 310S 参照
- 170P** 分子動力学法を用いた pregenome RNA を内包した B 型肝炎ウイルスの物性解明 (名大院工<sup>1</sup>, 名市大院医<sup>2</sup>, 名大院医<sup>3</sup>, 阪大蛋白研<sup>4</sup>) ○山口陽平<sup>1</sup>, 今井甫<sup>1</sup>, 藤本和土<sup>1</sup>, 浦野諒<sup>1</sup>, 篠田渉<sup>1</sup>, 尾曲克己<sup>2</sup>, 田中靖人<sup>2</sup>, 石川哲也<sup>3</sup>, 中川敦史<sup>4</sup>, 岡崎進<sup>1</sup>
- 171P** 分子動力学法による脂肪酸結合タンパク質の構造安定性 (信州大院理<sup>1</sup>, 分子研<sup>2</sup>, 生命創成探究センター<sup>3</sup>, 総研大<sup>4</sup>) ○宮澤和久<sup>1,2</sup>, 伊藤暁<sup>2,3,4</sup>, 奥村久士<sup>2,3,4</sup>
- 172P** pK<sub>a</sub> 位置依存性を考慮したイオン性薬物膜透過の多次元自由エネルギー解析 (名大院工) ○田村美術, 岡崎進, 篠田渉
- 173P** 313S 参照
- 174P** 粗視化シミュレーションを用いた cyclin D3 による CDK4 の活性化機構の解明 (金沢大理工) ○川口一朋, 長尾秀実
- 175P** 多次元レプリカ交換法による気液相転移における自由エネルギー曲面の解析 (名大院理<sup>1</sup>, 名大院工計算科学研<sup>2</sup>, 名大情報基盤セ<sup>3</sup>) ○松原大貴<sup>1</sup>, 岡本祐幸<sup>1,2,3</sup>

## 2 日目

- 201P** 液体 n-アルカンに溶存するアルゴン原子の拡散挙動 (新潟大学院自然<sup>1</sup>, 阪大院基礎工<sup>2</sup>) ○村上智央<sup>1</sup>, 石井良樹<sup>2</sup>, 大鳥範和<sup>1</sup>
- 202P** TIP5P の負電荷の適切な位置 (熊本大院生命) ○佐藤恭介
- 203P** Study on Phase Diagram of Ice using Monatomic Water Model (Okayama University, Graduate School of Natural Science and Technology) ○Huda Mahfuzh, Masakazu Matsumoto, Hideki Tanaka

- 204P** 不均一系の物質輸送の理解に向けて、位置に依存する自己拡散係数の再検討（名大工<sup>1</sup>, 名大院工<sup>2</sup>）○弦巻周平<sup>1</sup>, 浦野諒<sup>2</sup>, 藤本和士<sup>2</sup>, 篠田渉<sup>2</sup>, 岡崎進<sup>2</sup>
- 205P** 欠陥形成に伴うアモルファス氷の構造変化（明大院理工）○吉村光史, 深澤倫子
- 206P** 液体 Ar の過冷却状態における自己拡散係数（新潟大院自然<sup>1</sup>, 阪大院基礎工<sup>2</sup>, 新潟大理<sup>3</sup>）○眞谷健汰<sup>1</sup>, 宮本祥平<sup>1</sup>, 石井良樹<sup>2</sup>, 齊藤蒼思<sup>1</sup>, 大鳥範和<sup>3</sup>
- 207P** 分子動力学シミュレーションと溶液理論による水とポリテトラフルオロエチレン (PTFE) の分子間相互作用の解析（阪大院基礎工）○木原健輔, 松林伸幸
- 208P** 高級アルコールのメソスケールダイナミクス：分子シミュレーションと中性子準弾性散乱実験の比較（名大院工<sup>1</sup>, NIST<sup>2</sup>）○山口毅<sup>1</sup>, Antonio Faraone<sup>2</sup>, 長尾道弘<sup>2</sup>
- 209P** CO<sub>2</sub> ハイドレート内の自己拡散係数推定の MD シミュレーションと CO<sub>2</sub> ハイドレート溶解量の可視化計測（筑波大院<sup>1</sup>, 千葉工大<sup>2</sup>）○藤川凜太郎<sup>1</sup>, 山本典史<sup>2</sup>, 金子暁子<sup>1</sup>, 阿部豊<sup>1</sup>
- 210P** 205S 参照
- 211P** 動的不均一性から探る過冷却水に内在する協調的運動（阪大院・基礎工<sup>1</sup>, 名大・理<sup>2</sup>）○菊辻卓真<sup>1</sup>, 川崎猛史<sup>2</sup>, 金鋼<sup>1</sup>, 松林伸幸<sup>1</sup>
- 212P** MD 法を用いた純水および電解質水溶液におけるナノバブルの特性解析（京大院工）○村田克己, 松本充弘
- 213P** レプリカ交換一般化ハイブリットモンテカルロ法の開発とアラニンジペプチドへの適用（金沢大院自然<sup>1</sup>, 金沢大理工<sup>2</sup>）○堀智也<sup>1</sup>, 三浦伸一<sup>2</sup>
- 214P** DC-DFTB-MD プログラムの開発と公開（早大理工総研<sup>1</sup>, 早大先進理工<sup>2</sup>, 京大 ESICB<sup>3</sup>）○西村好史<sup>1</sup>, 吉川武司<sup>2</sup>, 中井浩巳<sup>1,2,3</sup>
- 215P** ゼロエネルギー差条件を満たす配置選択法に基づいた定 pH 法の理論的研究：グルタミン酸水溶液系への適用（名大情報<sup>1</sup>, JST-CREST<sup>2</sup>, 京大 ESICB<sup>3</sup>）○北村勇吉<sup>1</sup>, 長岡正隆<sup>1,2,3</sup>
- 216P** 分子シミュレーションとデータマイニングの協働の試み（金沢工大工）○林亮子
- 217P** FMO と DPD を連携したマルチスケールシミュレーション手法 (FMO-DPD) の開発と先導的応用（立教大理<sup>1</sup>, 東大生研<sup>2</sup>, JSOL<sup>3</sup>, 慶大理工<sup>4</sup>, 星薬大薬<sup>5</sup>, 産総研 CD-FMat<sup>6</sup>）○奥脇弘次<sup>1</sup>, 土居英男<sup>6</sup>, 望月祐志<sup>1,2</sup>, 小沢拓<sup>3</sup>, 泰岡顕治<sup>4</sup>, 福澤薫<sup>2,5</sup>
- 218P** 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トモンテカルロ法の開発と粗視化モデルタンパク質への適用（金沢大院自然<sup>1</sup>, 金沢大理工<sup>2</sup>）○向田夏規<sup>1</sup>, 三浦伸一<sup>2</sup>
- 219P** 315S 参照
- 220P** 時系列データ解析による自由エネルギー計算の正当化（産総研 CD-FMat<sup>1</sup>, MathAM-OIL<sup>2</sup>, JST-さきがけ<sup>3</sup>）○中村壮伸<sup>1,2,3</sup>
- 221P** 活性酸素・抗酸化物質系のシミュレーションに向けて、新たな半経験的量子力学手法の開発（阪大院理）○北川甲コリン, 川上貴資, 山中秀介, 奥村光隆
- 222P** 機械学習による分子動力学シミュレーションの時間発展新手法の提案とその高速化の評価（慶大理工）○遠藤克浩, 湯原大輔, 友部勝文, 泰岡顕治
- 223P** 機械学習による分子動力学シミュレーションの時間発展新手法を用いた各種物理量予測（慶大院理工<sup>1</sup>, JSOL<sup>2</sup>）○湯原大輔<sup>1</sup>, 遠藤克浩<sup>1</sup>, 泰岡顕治<sup>1</sup>, 掛本喜嗣<sup>2</sup>, 新田浩也<sup>2</sup>, 大島広介<sup>2</sup>, 小沢拓<sup>2</sup>
- 224P** 暗号的ハッシュ関数による擬似乱数の散逸粒子動力学法に与える影響（慶應大理工）○岡田清志郎, 泰岡顕治
- 225P** Density-Functional Tight-Binding Parameterization: Accumulated Wisdom and New Directions（早大理工総研<sup>1</sup>, 早大先進理工<sup>2</sup>, 京大 ESICB<sup>3</sup>）○周建斌<sup>1</sup>, 中井浩巳<sup>1,2,3</sup>
- 226P** 112S 参照
- 227P** 時間平均された平均二乗変位の揺らぎ解析による多孔質体内部の拡散挙動解明（東京大工）○金子敏宏
- 228P** Tree 法を用いた固体表面上での水滴の大規模分子動力学シミュレーション（福井大院工）○嶋津雅和, 古石貴裕
- 229P** GaN/SiON 系の第一原理電子状態計算（産総研）○西尾憲吾, 屋山巴, 宮崎剛英, 田岡紀之, 清水三聡
- 230P** Uncovering new structures of bilayer GaN and their properties（産総研 MathAM-OIL<sup>1</sup>, 産総研 CD-FMat<sup>2</sup>）○Anh Khoa Augustin Lu<sup>1</sup>, 屋山巴<sup>2</sup>, 森下徹也<sup>1,2</sup>, 中西毅<sup>1,2</sup>
- 231P** 変分経路積分分子動力学法を用いたヘリウムナノ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<sup>1</sup>, 金沢大・理工<sup>2</sup>）○谷口雄佑<sup>1</sup>, 三浦伸一<sup>2</sup>
- 232P** 分極可能な電極表面モデルが与えるイオン液体分子の界面カイネティクスへの影響（名大院・情報<sup>1</sup>, 京大 ESICB<sup>2</sup>, CREST-JST<sup>3</sup>）○稲垣泰一<sup>1</sup>, 長岡正隆<sup>1,2,3</sup>
- 233P** 階層構造を有するセルロースナノファイバーの機械的性質に関する分子動力学解析（関西大院<sup>1</sup>, 関西大<sup>2</sup>）○高田健太郎<sup>1</sup>, 齋藤賢一<sup>2</sup>, 宅間正則<sup>2</sup>, 高橋可昌<sup>2</sup>, 佐藤知広<sup>2</sup>

- 234P** 局所圧力計算によるナノスケールでのラプラス圧に関する研究(東京大学大学院新領域創成科学研究科<sup>1</sup>, 産業技術総合研究所 CO2 地中貯留研究グループ<sup>2</sup>) ○志賀正茂<sup>1,2</sup>, 愛知正温<sup>1</sup>, 本田博巳<sup>1</sup>, 徂徠正夫<sup>2</sup>
- 235P** 分子動力学計算による酸化チタン表面と水分子の結合特性解析(お茶大院人間文化創成科学) ○竹内なほ, 鷹野景子
- 236P** DSMC 法による固体内のエネルギー輸送解析(京大院工) ○楯本賢志, 秋月聖也, 松本充弘
- 237P** 203S 参照
- 238P** 高分子電解質膜の水素透過性の分子動力学法による研究(名大院工<sup>1</sup>, 旭硝子<sup>2</sup>) ○竹内琴乃<sup>1</sup>, An-Tsung Kuo<sup>2</sup>, 浦田新吾<sup>2</sup>, 岡崎進<sup>1</sup>, 篠田渉<sup>1</sup>
- 239P** リチウムイオン電池の電解液分子の微視的挙動と Li<sup>+</sup> の拡散に関する分子動力学解析(関西大院<sup>1</sup>, 関西大<sup>2</sup>) ○高井義博<sup>1</sup>, 齋藤賢一<sup>2</sup>, 宅間正則<sup>2</sup>, 高橋可昌<sup>2</sup>, 佐藤知広<sup>2</sup>
- 240P** 誘電アロステリーによるシトクロム P450 還元酵素の酸化還元状態と構造状態のカップリング(早大・物理応物) ○飯島美来, 佐藤昂人, 大貫隼, 高野光則
- 241P** ハイドロキシアパタイトにおける水酸基の配向性の温度変化(明大院理工) ○鈴木悠平, 本田みちよ, 渡邊友亮, 相澤守, 深澤倫子
- 242P** 分子動力学法による壁面を考慮したナノスケール流れ解析(工学院大工) ○奥脇雄太郎, 平塚将起, 伊藤慎一郎
- 243P** 定電位分子動力学法を用いた Li イオン電池における固体電解液相間(SEI)膜の構造安定性の解析(名大院情報<sup>1</sup>, JST-CREST<sup>2</sup>, 京大 ESICB<sup>3</sup>) ○松田圭太郎<sup>1</sup>, 稲垣泰一<sup>1</sup>, 長岡正隆<sup>1,2,3</sup>
- 244P** 301S 参照
- 245P** 粗視化分子動力学シミュレーションを用いた高分子溶融体のガラス転移温度の解析(阪大院基礎工) ○友重直也, 金鋼, 松林伸幸
- 246P** 動的螺旋分子オルトフェニレン誘導体分子のフォールディングの分子動力学計算(日女大理<sup>1</sup>, 千葉工大<sup>2</sup>) ○佐藤那音<sup>1</sup>, 山本典史<sup>2</sup>, 村岡梓<sup>1</sup>
- 247P** 高分子ブラシ系のナノトライボロジーのモデリング(京大院工) ○梶並信彦, 松本充弘
- 248P** 分子動力学シミュレーションを用いた高分子における吸水能のエネルギー解析(阪大基工) ○半田和也, 山田一雄, 小嶋秀和, 松林伸幸
- 249P** 粒子表面に異なる領域(パッチ)を持つ異方性ナノ粒子の自己集合に関する分子シミュレーション(近大院理工<sup>1</sup>, 理研 R-CCS<sup>2</sup>, 近大理工<sup>3</sup>, 理工学総研<sup>4</sup>) ○小林祐生<sup>1</sup>, 野村昂太郎<sup>2</sup>, 荒井規允<sup>3,4</sup>
- 250P** 定量性を考慮した散逸粒子動力学法による高分子の相分離シミュレーション(福井大工) ○野田聖, 古石貴裕
- 251P** コロイド結晶における一般化秩序パラメータの解析(岐阜大自然科学技術<sup>1</sup>, 岐阜大工<sup>2</sup>) ○水野涼<sup>1</sup>, 奥村賢太郎<sup>1</sup>, 寺尾貴道<sup>2</sup>
- 252P** 散逸粒子動力学法を用いた分子モーターモデルの歩行モデル改良についての研究(近大理工) ○西台圭佑, 荒井規允
- 253P** ポリフェニレンサルファイドの分子シミュレーションモデル構築(福井大院工) ○出倉敬史, 玉井良則
- 254P** 全原子分子動力学法を用いたポリロタキサン分子ダイナミクス観測(東大院新領域<sup>1</sup>, 名大院工<sup>2</sup>) ○保田侑亮<sup>1</sup>, 藤本和士<sup>2</sup>, 日高悠太<sup>1</sup>, 眞弓皓一<sup>1</sup>, 横山英明<sup>1</sup>, 岡崎進<sup>2</sup>, 伊藤耕三<sup>1</sup>
- 255P** 302S 参照
- 256P** 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分子の自己集合構造と粘性挙動(近大理工) ○小副川讓二, 小林祐生, 荒井規允
- 257P** 機械学習を用いた粗視化シミュレーションにおける液晶分子の構造解析(産総研<sup>1</sup>, 先端材料高速開発技術研究組合<sup>2</sup>, 九大院理<sup>3</sup>) ○土居英男<sup>1</sup>, 田頭健司<sup>2</sup>, 高橋和義<sup>1</sup>, 福田順一<sup>3</sup>, 青柳岳司<sup>1</sup>
- 258P** 202S 参照
- 259P** 粗視化分子動力学シミュレーションを用いた架橋ゴムの破壊解析(東洋ゴム工業) ○狩野康人
- 260P** Hras-GTP/GDP 複合体における各所の水素結合と各所の構造の動的関連性の分子動力学法による研究(東京薬大生命科学<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>, 杉森公一<sup>2</sup>, 川口一朋<sup>3</sup>, 長尾秀実<sup>3</sup>
- 261P** コミッター解析を用いたジペプチドの構造異性化を記述する反応座標の選択に関する考察(阪大院基礎工) ○森勇介, 金鋼, 松林伸幸
- 262P** ATP 加水分解に伴うミオシンの誘電アロステリー(早大・物理応物) ○内田幸瑛, 佐藤昂人, 大貫隼, 高野光則
- 263P** 緩和モード解析による 56 残基のタンパク質のフォールディングプロセス(明大理工<sup>1</sup>, 慶大理工<sup>2</sup>) ○光武亜代理<sup>1</sup>, 高野宏<sup>2</sup>
- 264P** 脂質二重層膜中のコレステロール二分子間側方相互作用にリン脂質および水が果たす役割の解明(名大院工<sup>1</sup>, 分子研<sup>2</sup>) ○松岡漢斗<sup>1</sup>, 安藤嘉倫<sup>2</sup>, 岡崎進<sup>1</sup>



- 265P** タンパク質のダイナミックアロステリー(近大先端研) ○米澤康滋
- 266P** 308S 参照
- 267P** 分子動力学シミュレーションで解き明かす味覚受容体の動態構造(筑波大生物学類<sup>1</sup>, 筑波大計セ<sup>2</sup>) ○會田勇斗<sup>1</sup>, 原田隆平<sup>2</sup>, 重田育照<sup>2</sup>
- 268P** 銅含有アミン酸化酵素におけるセミキノンラジカル生成機構についての理論的解明(筑波大 CCS<sup>1</sup>, 大阪医大生化<sup>2</sup>, 阪大産研<sup>3</sup>) ○庄司光男<sup>1</sup>, 村川武志<sup>2</sup>, 重田育照<sup>1</sup>, 岡島俊英<sup>3</sup>
- 269P** 自由エネルギー反応経路探索法を利用したアラニンヘキサペプチドの自由エネルギー反応経路ネットワーク計算(大阪大理) ○満田祐樹, 山中秀介, 川上貴資, 奥村光隆
- 270P** 分子動力学シミュレーションを用いたアクアポリンにおける水透過性の解明(慶應大理工<sup>1</sup>, 慶應大医<sup>2</sup>) ○塚田拓大<sup>1</sup>, 佐藤洋平<sup>1</sup>, 菱田公一<sup>1</sup>, 安井正人<sup>2</sup>, 山本詠士<sup>1</sup>
- 271P** 312S 参照
- 272P** 311S 参照
- 274P** 電荷を付加したカーボンナノチューブ内部の水の構造解析(慶大理) ○小野祐為, 山本詠士, 泰岡顕治



高須昌子	168P, 260P	長岡正隆	104S, 215P, 232P, 243P	前島拓斗	136P	矢ヶ崎琢磨	101S°, 101P, 104P, 109P
高田健太郎	233P°	長尾秀実	163P, 174P, 260P	牧野淳一郎	112S(226P)	安井正人	270P
鷹野景子	235P	永澤謙太郎	109L	増子貴子	108S(130P)°	泰岡顕治	112S(226P), 106P, 107P, 108P, 125P, 126P, 217P, 222P, 223P, 224P, 274P, 301S(244P)
高野宏	118P, 263P	長濱宏昂	136P°	増谷佳一	164P°, 165P		
高野光則	240P, 262P	行方大輔	112S(226P)	松井貴宏	101P°		
鷹野優	167P	西尾憲吾	229P°	松岡漢斗	264P°		
高橋和義	122P°, 257P, 302S(255P)	西台圭佑	252P°	松崎隼人	156P°		
高橋可昌	233P, 239P	西原泰孝	133P°	松田圭太郎	243P°		
高柳昌芳	104S°	西村好史	128P, 141P, 214P°, 312S(271P)	松林伸幸	102P, 105P, 114P, 139P, 164P, 165P, 203S(237P), 207P, 211P, 245P, 248P, 261P, 315S(219P)	保田侑亮	254P°
高山有道	105L	似鳥啓吾	112S(226P)			八十島亘宏	139P°
田頭健司	257P, 302S(255P)°	新田孝志	165P°			矢花一浩	209S
宅間正則	233P, 239P	新田浩也	223P			山内仁喬	127P°
竹内琴乃	238P°	野口博司	201S	松原大貴	175P°	山口毅	208P°
竹内なほ	235P°	野澤拓磨	107P, 157P, 112S(226P), 301S(244P)°	松本茂紀	150P	山口陽平	170P°
竹内裕紀	168P°			松本正和	101S, 101P, 104P, 109P, 203P	山崎大	104P°
竹内浩	120P°	野田聖	250P°			山崎笙太郎	162P°
立川仁典	117P	野村昂太郎	112S(226P)° 107P, 153P, 249P,	松本充弘	143P, 154P, 212P, 236P, 247P	山下浩平	305S
田中秀樹	101S, 101P, 104P, 109P, 203P	則包恭央	307S	眞弓皓一	254P	山下雄史	145P
田中裕貴	161P	【は】		三浦伸一	110S°, 135P, 213P, 218P, 231P	山田篤志	209S°
田中靖人	170P	林啓治	136P, 137P			山田一雄	248P, 315S(219P)°
谷口雄佑	231P°	林慶浩	155P	美齊津文典	138P	山田寛尚	168P
玉井良則	158P, 253P	林部聖哉	160P°	水上卓	163P	山中秀介	269P, 221P
田村美侑	172P°	林由起子	168P	水田圭亮	102P°	山本海	305S°
湯之也	151P, 303S, 304S°	林亮子	216P°	水野英如	107L°	山本詠士	103P, 108P, 270P, 274P, 308S(266P)°
千葉峻太郎	123P°	原健太	105P°	水野涼	251P°	山本直樹	203S(237P)°
塚田拓大	270P°	原田明日華	135P°	光武亜代理	118P, 263P°	山本典史	246P, 209P
辻之上弘晃	157P°	原田隆平	162P, 267P, 311S(272P)	満田祐樹	269P°	山守優	164P
土田英二	134P	半田和也	248P°	宮川毅	168P, 260P°	屋山巴	129P°, 230P
都築誠二	142P, 207S°	樋口芳樹	138P	宮川晃一	162P	湯原大輔	222P, 223P°
弦巻周平	204P°	菱田公一	270P	宮崎州正	109L	横山英明	254P
寺尾貴道	251P	日高悠太	254P	宮崎裕介	309S°	吉井範行	115P, 113S, 314S, 316S(116P)°
寺崎健	150P	平田秋彦	106IL°	宮澤和久	171P°		
出倉敬史	253P°	平田雅典	101P, 109P°	宮本祥平	206P	吉尾里司	133P
土居英男	217P, 257P°, 302S(255P)	平塚将起	242P	宮本良之	208S°	吉川武司	214P
堂野主税	162P	平野智倫	113P°	向田夏規	110S, 218P°	吉田俊将	131P°
常盤恭樹	138P°	檜脇悠輔	155P	村岡梓	246P	吉富翔太郎	148P°
獨古薫	142P	深澤倫子	102S, 205P, 241P	村上智央	201P°	吉村光史	205P°
友重直也	245P°	福澤薫	217P	村川武志	268P	吉本裕貴	152P
友部勝文	222P	福田順一	257P, 302S(255P)	村島隆浩	202S(258P)°	米澤康滋	265P°
【な】		藤川凜太郎	209P°	村田克己	212P°	米谷佳晃	313S(173P)°
直島康人	102S°	藤瀬純也	159P°	村田道雄	166P	米谷慎	307S°
中井浩巳	128P, 141P, 214P, 225P, 312S(271P)	藤本和士	146P, 151P, 170P, 204P, 254P, 303S°, 304S	望月祐志	217P	【ら】	
仲井文明	140P°	舟橋康佑	166P°	森河良太	168P, 260P	李奥	143P°
中川敦史	170P	プアカイ	126P°	森下徹也	129P, 163P, 230P	李娜	144P
中谷和彦	162P	堀智也	213P°	森田明弘	113P, 131P, 206S, 205S(210P), 310S(169P)°	【わ】	
中西毅	129P, 230P	本田博巳	234P			渡邊友亮	241P
中村賢	124P°	本田みちよ	241P	森貴治	150P	渡邊宙志	201S
中村壮伸	220P°	【ま】		守谷浩志	261P°	渡邊大登	111P°
中村春木	167P			森勇介	144P	渡邊正義	142P
中村浩章	105L			諸星圭		玉琳	206S°
長尾道弘	208P			【や】			

(記号°は発表者となっている講演に記されています。)