

第 33 回分子シミュレーション討論会 講演プログラム

(令和元年 10 月 23 日 最終更新)

主催 : 分子シミュレーション学会
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、株式会社モルシス、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 HPC テック、シミュレーティング株式会社、
株式会社富士通九州システムズ、一般財団法人高度情報科学技術研究機構、
伊藤忠テクノソリューションズ株式会社、アプライド株式会社
会期 : 2019 年 12 月 9 日 (月) ~ 2019 年 12 月 11 日 (水)
会場 : 名古屋市公会堂 4 F ホール
〒 466-0064 名古屋市昭和区鶴舞一丁目 1 番 3 号
地下鉄鶴舞線「鶴舞駅」下車 4 番出口徒歩 2 分、JR 中央線「鶴舞駅」下車徒歩 2 分
HP : <http://sympo.mol-sim.jp/mssj33/>

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

講演者記号記号 : ○印=発表者

1 日目 12 月 9 日 (月)	104S 水溶液の液-液相転移 (岡大基礎研) ○矢ヶ崎琢磨, 松本正和, 田中秀樹
9:15-9:55 開場, 受付	105S 分子動力学法による液化過程と spinodal 線 (法政大生命) ○片岡洋右
9:55-10:00 開会の辞 会長 田中秀樹 (岡山大)	
— 午前の部 —	— 休憩 11:25-11:30 —
10:00-11:25 口頭発表 A 座長 : 山口 毅 (名大)	11:30-12:30 ポスター発表 101P-178P (奇数) (講演タイトルはプログラムの末尾に記載)
101S 不均一系での物質輸送を評価の際に利用する位置に依存した拡散係数の新規評価方法 (名大・工) ○永井哲郎, 弦巻周平, 浦野諒, 藤本和士, 篠田渉, 岡崎進	— 昼食 12:30-13:30 —
102S 水の誘電緩和スペクトルの微視的起源の探索 (大分大 ¹ , 福工大 ²) ○岩下拓哉 ¹ , 中西真大 ²	— 午後の部 —
103L 単純液体とガラスの普遍的な短距離秩序と物質に依存するガラス形成能 (産総研) ○西尾憲吾, Lu Anh Khoa Augustin, 宮崎剛英	13:30-14:30 ポスター発表 101P-178P (偶数) (講演タイトルはプログラムの末尾に記載)
	— 休憩 14:30-14:35 —
	14:35-15:25 招待講演 I 座長 : 岡崎 進 (名大)

106IL 神戸大学先端膜工学研究センターにおける
膜工学研究最前線
(神戸大院工) ○松山秀人

冬樹⁴, Aiichiro Nakano⁵, Rajiv K. Kalia⁵,
Priya Vashishta⁵

— 休憩 15:25-15:35 —

15:35-16:45 口頭発表 B

座長：荒井規允（慶応大）

- 107S (247P) 分子動力学計算による界面活性剤含水ラメラの構造決定および分子挙動に関する研究（花王¹, 名大院工・応物化², 名大院工・計算セ³）○武田康助¹, 安藤嘉倫^{2,3}, 篠田渉², 岡崎進^{2,3}
- 108S Poly(vinylidene fluoride) (PVDF) 表面における良溶媒および良/貧混合溶媒による濡れ性の分子論的研究 (ADMAT¹, 名大院工², 東レ³) ○北畑雅弘^{1,2,3}, Tseden Taddese², 岡崎進²
- 109S 粗視化分子力場 pSPICA を用いたペプチドによる膜細孔形成過程の解析 (名大院工) ○宮崎裕介, 岡崎進, 篠田渉
- 110L 2つの拡張アンサンブル法を組合せた生体分子の自由エネルギー計算法の開発 (理研 BDR¹, 理研 R-CCS², 理研 CPR³) ○尾嶋拓¹, 李秀榮¹, 杉田有治^{1,2,3}

— 休憩 16:45-16:55 —

16:55-17:55 口頭発表 C

座長：藤崎弘士（日医大）

- 111S (161P) 変更した熱力学経路による効率的なリガンド-レセプター間の結合自由エネルギー計算法 (RIST¹, テンプル大², ペース大³) ○榮慶丈¹, Bin W. Zhang², Ronald M. Levy², Nanjie Deng³
- 112S タンパク質-リガンドドッキングに基づく小胞体グルコシダーゼ II 阻害剤候補化合物の選出 (日大院生資料) ○飯泉寛
- 113S 自己学習ハイブリッドモンテカルロ法：機械学習による第一原理分子シミュレーションの高速化 (原子力機構シ計セ¹, 理研 AIP², RIST³) ○永井佑紀^{1,2}, 奥村雅彦¹, 小林恵太³, 志賀基之¹
- 114S 第一原理計算に基づいた機械学習によるアルカリ金属の融点の決定 (熊大院自然¹, 九産大理工², 神戸大院シス情³, 熊大院先端⁴, 南カリフォルニア大⁵) ○福島省吾¹, 牛島榮作¹, 三澤賢明², 島村孝平³, 高良明英¹, 下條

2日目 12月10日 (火)

9:00-9:20 開場, 受付

— 午前部 —

9:20-10:20 口頭発表 D

座長：光武亜代理（明大）

- 201S (259P) 新規ペプチド薬の HSP90 との結合機構・機能阻害メカニズム (近大・生物理工¹, 電通大・情報理工²) ○松倉里紗¹, 望月和人², 宮下尚之^{1,2}, 瀧真清², 渡辺信一²
- 202S 重み付きアンサンブル法による生体分子の構造変化ダイナミクスの計算 (日医大¹, 横浜市大², 埼玉大³) ○藤崎弘士¹, 森次圭², 松永康佑³
- 203S (177P) B 型肝炎ウイルス (HBV) への逆転写阻害薬剤分子の自由エネルギー計算によるカプシド内部への吸収・透過機構の解明 (名大院工¹, 名大院工計算センター²) ○浦野諒¹, 藤本和士¹, 安藤嘉倫², 吉井範行², 篠田渉¹, 岡崎進¹
- 204S (252P) 複雑な分子系の自由エネルギーを特徴づける反応座標の探索：コミッターと最尤推定法の融合 (阪大院基礎工¹, 分子研²) ○森勇介¹, 岡崎圭一², 森俊文², 金鋼¹, 松林伸幸¹

— 休憩 10:20-10:30 —

10:30-11:45 口頭発表 E

座長：芝 隼人（東北大）

- 205S (212P) 過渡的な結合を用いたからみあった高分子の粗視化分子シミュレーションモデル (名大工) ○畝山多加志, 増淵雄一
- 206S エポキシ樹脂の硬化反応シミュレーション (九大院工¹, ダッソーシステムズ²) ○山本智¹, 桑原理一², 田中敬二¹
- 207S 高分子修飾基板表面-液体間の接着性評価のための自由エネルギー計算手法の構築 (名工大工) ○浦長瀬正幸, 尾形修司
- 208S 高分子溶融体の中間散乱関数のオンザフライ計算 (東北大理) ○村島隆浩

209S (141P) 分子動力学計算による炭素複合材の引張りシミュレーション (CTC¹,MGC²,東京理科大³) ○森一樹¹, 矢部誠¹, 松本信彦², 小柳潤³

— 休憩 11:45-11:50 —

11:50-12:50 ポスター発表 201P-277P(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 201P-277P(偶数)
(講演タイトルはプログラムの末尾に記載)

— 休憩 14:50-14:55 —

14:55-15:50 口頭発表 F

座長：志賀基之（原子力機構）

210L 非晶高分子の衝撃破壊に関する分子論的研究 (名大院工) ○藤本和土, 湯之也, 岡崎進

211S パーステントホモロジーを用いた(自由)エネルギー地形の表現 (産総研) ○中村壮伸

212S Molecular Simulations of Ionic-Liquid-based Electrical Double Layer Capacitors (東北大金研) ○Bonnaud Patrick, 芝隼人

— 休憩 15:50-16:00 —

16:00-16:50 招待講演 II

座長：吉井範行（名大）

213IL 第一原理酸化還元反応シミュレーション (物材機構) ○館山佳尚

— 休憩 16:50-17:00 —

17:00-17:35 受賞講演

座長：北尾彰朗（東工大）

214AL タンパク質の機能発現に重要なレイイベントを抽出するサンプリング手法の開発(筑波大計セ) ○原田隆平

17:35-18:15 学会総会

18:25-20:25 懇親会

3日目 12月11日(水)

9:00-9:20 開場, 受付

— 午前部の部 —

9:20-10:20 口頭発表 G

座長：磯部雅晴（名工大）

301S ガラスにおける音波伝搬:非調和性と弾性不均一性 (東大院総合文化¹, Univ. of Roma², Univ. of Grenoble³) ○水野英如¹, Giancarlo Ruocco², Stefano Mossa³

302S (211P) ダイマー粒子系の低周波数局在振動 (東大総合文化) ○白石薫平, 水野英如, 池田昌司

303S 2次元ガラス形成液体の粘弾性特性と緩和過程 (東北大金研¹, 名大理², 阪大基礎工³) ○芝隼人¹, 川崎猛史², 金鋼³

304S (113P) 理想気体中の粒子の短時間ダイナミクス(名大院工) ○仲井文明, 畝山多加志, 増渕雄一

— 休憩 10:20-10:30 —

10:30-11:40 口頭発表 H

座長：金鋼（阪大）

305S 障害物による歩行者流れの促進 (豊田中研) ○小山志穂里, 井上大輔, 岡田明久, 吉田広頭

306S カルマン渦に対するキャビテーションの影響 (東大物性研¹, 慶大理工²) ○浅野優太¹, 渡辺宙志², 野口博司¹

307S (115P) 分子動力学プログラムを用いた弾性体の有限要素解析計算法 (株式会社クロスアビリティ) ○日野理

308L Travelling without Dwelling : ポアンカレ加速ダイナミクス (産総研¹, 核融合研²) ○森下徹也¹, 伊藤篤史²

— 休憩 11:40-11:50 —

11:50-12:50 口頭発表 I

座長：金城友之（豊田中研）

309S せん断場下におけるトラクションフルードの特性シミュレーションおよび分子構造分布解析 (高度情報科学技術研究機構¹, 出光興産², 兵庫県立大³) ○富山栄治^{1,3}, 岩崎猛², 鷲津仁志³

- 310S** MD/DFT/MC 連携による有機半導体材料結晶多形移動度の比較検討 (産総研) ○米谷慎
- 311S** CRK 分極モデルを用いた Maxwell + MD マルチスケールシミュレーションの開発 (筑波大計セ) ○山田篤志
- 312S** 電子温度依存型力場を用いたレーザーアブレーション分子動力学シミュレーション (名工大院工) ○小林亮

— 昼食 12:50-13:50 —

— 午後の部 —

13:50-14:50 口頭発表 J

座長：伊藤篤史 (核融合研)

- 313S** 多環芳香族分子のヘリンボーン構造の安定性 (産総研機能材料¹, 東大物工²) ○都築誠二¹, 下位幸弘¹, 荒井俊人², 長谷川達生²
- 314S** シリコン系セラミックスの摩擦界面で自己形成する潤滑膜の分子動力学シミュレーション解析 (東北大・金研¹, 東北大院・工²) ○大谷優介¹, 許競翔¹, 高橋直己¹, 赤上研太², 足立幸志², 久保百司¹
- 315S** 水溶液中での二酸化鉛表面上の硫酸イオンの吸着 (関西電力技研) ○窪田善之, 橋上聖, 田中篤嗣, 吉田洋之
- 316S (129P)** 溶媒効果を取り入れた固液界面における物理吸着の解析：速度論と平衡論 (阪大院基礎工) ○山本直樹, 松林伸幸

— 休憩 14:50-15:00 —

15:00-16:15 口頭発表 K

座長：畝山多加志 (名大)

- 317L** 摩耗、発熱、塑性を考慮したせん断摩擦に関する SPH シミュレーション (東京都市大¹, 兵庫県大²) ○杉村奈都子^{1,2}, Le Van Sang², 三原雄司¹, 鷲津仁志²
- 318L** solute adaptive QM/MM 分子動力学法によるプロトン移動 (慶應大量子¹, JST さきがけ²) ○渡邊宙志^{1,2}
- 319L** Channel-flow clogging of colloidal suspensions (中科院大温州研) ○瀬戸亮平

— 休憩 16:15-16:25 —

16:25-17:10 口頭発表 L

座長：永井哲郎 (名大)

- 320S (233P)** 樹脂-金属接合界面の分子動力学シミュレーション (豊田中研) ○金城友之, 米山弘亮, 梅本和彦
- 321S (173P)** The billion-atom simulation in biology with GENESIS on Intel Xeon Phi (KNL) (RIKEN CPR¹, RIKEN R-CCS², RIKEN BDR³) ○Jung Jaewoon^{1,2}, 小林千草², 杉田有治^{1,2,3}
- 322S (176P)** 次期スパコン「富岳」での大規模・長時間分子動力学計算実現のためのソフトウェア MODYLAS の性能向上 (名大院工 計算セ¹, 玉川大工 情通工², 名大院工 応物化³) ○安藤嘉倫¹, 坂下達哉², 張家超³, 朱喆³, 浦野諒³, 藤本和士³, 吉井範行^{1,3}, 岡崎進^{1,3}

17:10-17:15 閉会の辞

ポスター発表

1 日目

- 101P** Force-Fitting 法で構築したイオン液体の非分極力場とその輸送物性 (阪大院基礎工¹, 京大 ESICB²) ○石井良樹¹, HAKIM Lukman^{1,2}, 松林伸幸^{1,2}
- 102P** 水溶液中の疎水性溶質の溶解度に対するイオンサイズ効果 (岡山大院自然¹, 岡山大基礎研²) ○甲藤寛之¹, 岡本隆一², 墨智成², 甲賀研一郎²
- 103P** 氷表面での分子動力学シミュレーションによるイオン分布の解明 (富山大院工) ○北中一也, 石山達也
- 104P** 氷 Ih 内における大気微量物質の拡散機構 (岡山大院・自然科学¹, 岡山大・基礎研²) ○平田雅典¹, 矢ヶ琢磨², 松本正和², 田中秀樹²
- 105P** MD/MC ハイブリッド法による溶媒抽出錯体の形成過程 (住友金属鉱山) ○西原泰孝
- 106P** 氷 Ih 中の空孔欠陥の拡散機構 (岡山大院自然科学¹, 岡山大基礎研²) ○矢野正樹¹, 矢ヶ崎琢磨², 松本正和², 田中秀樹²
- 107P** ガウス型統計集合とレプリカ交換法を結合した新規シミュレーション手法の開発と一次相転移への適用 (金沢大院自然¹, 金沢大理工²) ○鈴木大介¹, 三浦伸一²
- 108P** MD 法を用いた電解質水溶液表面におけるナノバブルの安定性解析 (京都大工) ○村田克己, 松本充弘

- 109P** NH₄F をドーブした氷 Ih の安定性評価 (岡山大院・自然科学¹, 岡山大・基礎研²) ○田口新平¹, 矢ヶ崎琢磨², 松本正和², 田中秀樹²
- 110P** Molecular simulation of boiling process in ultrathin film
(京都大工) ○李奥, 松本充弘
- 111P** ガラス形成液体の振動状態密度とそのフラジリティ依存性 (阪大院基礎工¹, 東大院総合文化²) ○大門翔太¹, 水野英如², 金鋼¹, 松林伸幸¹
- 112P** 2成分剛体円板系における最近接粒子の判定法とその特徴 (名工大院工) ○児山弘昌, 磯部雅晴
- 113P** 304S 参照
- 114P** ハロゲン結合に関わる静電的異方性と分極効果を表す相互作用パラメーターの電子密度解析に基づく導出 (静岡大工) ○齋藤健人, 鳥居肇
- 115P** 307S 参照
- 116P** フッ素化グラフェンナノフレークによる水素貯蔵機構の理論説明 (北大院工) 井山哲二, ○川畑弘, 田地川浩人
- 117P** 金属錯体の分子歪みによる磁性の変化 (香大院工¹, 関学大理工², 岡山理大³) ○大熊健允¹, 中野百恵¹, 常田旦¹, 堤勇旗¹, 藤川佳樹¹, 石井知彦¹, 坂根弦太³, 小笠原一禎²
- 118P** 第一原理分子動力学シミュレーションによる CH₃NH₃PbI₃ のはじき出しエネルギーの評価 (早大理工¹, 宇宙研²) ○鈴木雄大^{1,2}, 小林大輔², 宮澤優², 山本知之¹, 廣瀬和之^{1,2}
- 119P** 平面ポアズイユ流における単純流体の温度分布についての分子動力学解析 (兵県大院シミュ) ○藤原祐, 安田修悟
- 120P** ベシクルにおける孔の遷移過程についての流体力学的解析 (兵県大院シミュ) ○久光和輝, 安田修悟
- 121P** 過渡結合を導入した多体散逸粒子動力学法による粘弾性流体の計算 (名大院工) ○広井紀彦, 畝山多加志, 増渕雄一
- 122P** DFTB Study of Hydrogenated Amorphous Silicon (京都大工) ○李海麗, 松本充弘
- 123P** せん断流れ下における Janus 粒子水溶液の自己集合と粘性挙動 (慶大院理工¹, 慶大理工², Johannes Gutenberg University Mainz³) ○小林祐生¹, 荒井規允², Arash Nikoubashman³
- 124P** DFTB Study of Semiconductor Nanorods (京都大工) ○羅啓峯, 松本充弘
- 125P** 講演取り消し
- 126P** Transport properties of ionic liquids for Na⁺ secondary battery from MD simulations with a self-consistent partial charge determination (Elements Strategy Initiative for Catalysts and Batteries, Kyoto University, Kyoto, Japan. ¹, Graduate School of Engineering Science, Osaka University, Osaka, Japan.², Department of Chemistry, Brawijaya University, Malang, Indonesia.³) ○Lukman Hakim^{1,2,3}, Yoshiki Ishii², Nobuyuki Matubayasi^{1,2}
- 127P** 潤滑油の分解過程における水素発生抑制機構に関する理論的研究 (名大院情報¹, NTN², 名大価値創造研究センター³, 京大 ESICB⁴, CREST-JST⁵) ○伊藤元博^{1,2}, 鈴木雄一¹, 張賀東¹, 長岡正隆^{1,3,4,5}
- 128P** 工業廃水からの金属資源回収用電極の開発を志向した金属イオンの炭素電極への選択的吸着の特性調査 (関学大院・理工¹, 産総研・無機機能²) ○川合悠介¹, 清原健司^{1,2}
- 129P** 316S 参照
- 130P** 温度勾配下における極性分子ダイナミクスの電場による制御 (慶應院理工) ○加藤優佑, 佐藤洋平, 山本詠士
- 131P** アルミナと鉄の摩擦界面における低摩擦発現メカニズムの分子動力学シミュレーション解析 (東北大金研¹, 東北大院工²) ○佐藤雄基¹, 王楊², 宮崎成正¹, 大谷優介¹, 尾澤伸樹¹, 久保百司¹
- 132P** CO₂/塩水/鋳物界面系の濡れ性に対する表面電荷の影響 (産総研 CO₂ 地中貯留グループ¹, 東大新領域²) ○志賀正茂^{1,2}, 徂徠正夫¹, 愛知正温², 本田博巳²
- 133P** Uncovering new stable structures of H-passivated bilayer GaN (産総研 MathAM-OIL¹, 工学院大学 先進工学部 応用物理学科², 産総研 CD-FMat³) ○Lu Anh Khoa Augustin¹, 屋山巴², 森下徹也^{1,3}, 中西毅^{1,3}
- 134P** 親水性壁に挟まれた負圧下にある水液膜内の分子構造およびダイナミクスに関する研究 (名大院工¹, 名大院工計算セ²) ○伊藤有毅¹, 安藤嘉倫², 岡崎進^{1,2}
- 135P** tSPICA: Introducing Temperature- and Pressure- Dependence for the SPICA Coarse-Grained Force Field (Nagoya University) ○Mark Griffiths, Wataru Shinoda
- 136P** グラフェン表面の原子修飾によるナノサイズ経路の電子状態 (成蹊大理工) ○坂本昇

- 一, 富谷光良
- 137P** 有機高分子エアロゲル形成過程のマルチスケールシミュレーション解析 (日立製作所) ○松本茂紀, 植田敦子
- 138P** 散逸粒子動力学法を用いたナノチューブ内におけるコレステリック液晶の自己集合構造 (慶大理工) ○辻之上弘晃, 野澤拓磨, 荒井規允
- 139P** 疎水ポリマーおよび親水ポリマーにおける吸水性の微視的集合様態への依存性 (阪大院基礎工) ○阪口敦哉, 山田一雄, 松林伸幸
- 140P** パーシシステムホモロジと大規模シミュレーションを組み合わせたポリマーの高次構造の推定 (兵庫県大シミュ¹, 京大 ES-ICB²) ○清水陽平¹, 鷲津仁志^{1,2}
- 141P** 209S 参照
- 142P** 非晶高分子圧縮破壊に関する分子論的研究 (名大院工) ○石川博章, 藤本和土, 湯之也, 岡崎進
- 143P** 大規模 MD を用いた伸線材料における塑性変形メカニズムの理解 (関西大院¹, 関西大²) ○吉田紘基¹, 齋藤賢一², 宅間正則², 高橋可昌², 佐藤知広²
- 144P** 高分子ブラシ系のナノトライポロジー (京大機) ○梶並信彦, 松本充弘
- 145P** 高分子の粗視化シミュレーションから得られた構造の全原子化 (福井大工) ○竹多泰之, 古石貴裕
- 146P** 水/エタノール混合溶媒中におけるメチレン鎖連結モノカルボニルポルフィリンの熱力学的安定構造と揺らぎ挙動についての分子動力学シミュレーション (北大院総化¹, 北大院工²) ○川村将也¹, 佐藤信一郎²
- 147P** マルチカノニカル一般化ハイブリットモンテカルロ法を用いた水和生体分子の自由エネルギー地形サンプリング (金沢大院自然¹, 金沢大理工²) ○堀智也¹, 三浦伸一²
- 148P** 分子動力学シミュレーションを用いたオリゴエチレンオキシド側鎖を有する poly (glycidyl ether) の温度応答性の検討 (北大院総化¹, 北大院工²) ○寺田絵里加¹, 佐藤信一郎²
- 149P** 水溶液における両親媒性テトラポッド型ナノ粒子の自己組織化の制御 - 散逸動力学シミュレーション - (慶應大理) ○荒木雄介, 小林祐生, 荒井規允
- 150P** アミノ酸のエネルギー準位統計 (日大理工) ○山中雅則
- 151P** タンパク質の天然構造と熱変性構造の相対安定性に対する塩効果の MD 解析 (阪大院基礎工) ○新田孝志, 松林伸幸
- 152P** 細胞質中の代謝物によって改変される蛋白質間相互作用の全原子分子動力学シミュレーション (前橋工大生情¹, 理研・杉田研², 理研・R-CCS³, ミシガン州立大⁴) ○優乙石¹, 杉田有治^{2,3}, Feig Michael⁴
- 153P** 一般化ハイブリットモンテカルロ法の高効率化と生体分子への適用 (金沢大理工) ○鈴木大輔, 三浦伸一
- 154P** メゾ不均一性を有する新規可溶化システムの MD 解析 (阪大院基礎工¹, ヨーク大学², レーゲンスブルク大学³) ○原健太¹, 石井良樹¹, SHIMIZU Seishi², HORINEK Dominik³, 松林伸幸¹
- 155P** 散逸粒子動力学法を用いた管内流れにおける界面活性剤分子の自己集合構造と粘性挙動 (慶大理工) ○五明寛貴, 小林祐生, 荒井規允
- 156P** ベンクル分裂におけるフリップフロップの影響 (山口大院創成科学¹, 東北大院理学²) ○浦上直人¹, 佐久間由香², 今井正幸²
- 157P** 分子動力学シミュレーションによる AmphotericinB チャネルの構造安定性の解析 (名大院工¹, 阪大院理²) ○舟橋康佑¹, Sang-jae Seo¹, 岡崎進¹, 梅川雄一², 村田道雄², 篠田渉¹
- 158P** 機械学習を用いた液晶エラストマー物性を特徴付ける設計変数の予測 (産総研¹, ADMAT², 九州大理³) 土居英男¹, ○高橋和義¹, 田頭健司², 保岡悠², 福田順一³, 青柳岳司¹
- 159P** 膜タンパク質による膜形状の構造変化に関する理論的研究 (金沢大院自然¹, 金沢大理工²) ○前田倫也¹, 片岡樹紀¹, 齋藤玲那¹, Dian Fitrasari¹, 川口一朋², 長尾秀実²
- 160P** 小ペプチドのスタック構造形成に対する共溶媒効果の相互作用解析 (阪大院基礎工) ○諏訪原一輝, 松林伸幸
- 161P** 111S 参照
- 162P** MD simulation による tankyrase2 のポケット構造変化の調査 (理研・BDR) ○平野秀典, 沖本憲明, 藤田茂雄, 泰地真弘人
- 163P** PaCS-MD を用いた新規リガンド結合経路探索手法の開発と応用 (筑波大生物¹, 筑波大計セ²) ○會田勇斗¹, 重田育照², 原田隆平²
- 164P** Molecular view of lipid-based nanoparticles as drug delivery system revealed by coarse grained simulation (名古屋大工)

- Akhil Pratap Singh, Hiroki Tanaka, Yusuke Miyazaki, Wataru Shinoda
- 165P** アルツハイマー病初期分子機構に関係するβ切断酵素の膜貫通部位の構造予測とラフトとの相互作用 (近大生物理工) ○柳野賀緒梨, 古江祐也, 宮下尚之
- 166P** 定量的粗視化力場 SPICA の DNA/RNA モデルへの拡張 (名大院工) ○田中裕貴, 宮崎裕介, Akhil Pratap Singh, 岡崎進, 篠田渉
- 167P** バクテリオロドプシンのプロトン貯蔵・放出過程に関する DC-DFTB-MD シミュレーション (早大院先進理工¹, 早大理工総研², 京大 ESICB³) ○竹村俊晃¹, 小野純一², 西村好史², 中井浩巳^{1,2,3}
- 168P** Coarse-Grained MD Study of Entecavir Drug Insertion into Hepatitis B Virus (HBV) Capsid (名古屋大工) ○Mayank Dixit, Huihui Liu, Yusuke Miyazaki, Ryo Urano, Susumu Okazaki, Wataru Shinoda
- 169P** PVPA-xIm 複合体中の局所構造と分子ダイナミクス (筑波大計算科学セ¹, 金沢大院自然², 金沢大ナノマリ³) ○堀優太¹, 末武鋭也², 井田朋智², 水野元博³, 重田育照¹
- 170P** Deep Learning を用いたタンパク質欠損部位モデリングの試み (近大生物理工) ○高見拓磨, 古江祐也, 山口知洋, 宮下尚之
- 171P** CRISPR Cas3 の DNA との相互作用機構 (近大生物理工) ○山口知洋, 宮下尚之
- 172P** Hras-GTP/GDP 系における構造の緩和と水素結合の緩和の関係の分子動力学シミュレーションによる研究 (東京薬大生命科学¹, 金沢大国際基幹教育院², 金沢大理工³) ○宮川毅¹, 森河良太¹, 高須昌子¹, 杉森公一², 川口一朋³, 長尾秀実³
- 173P** 321S 参照
- 174P** 多体間ポテンシャルが Soret 係数に与える影響の検討 (東大工) ○金子敏宏
- 175P** 散逸粒子動力学法に用いる新規乱数生成手法の提案と検証 (慶大理工) ○岡田清志郎, Paul Edward Brumby, 泰岡顕治
- 176P** 322S 参照
- 177P** 203S 参照
- 178P** First-Principles Prediction of Wavelength Dependent Product Quantum Yields (California State University Long Beach) ○Enrico Tapavicza
- 201P** 拡張アンサンブル法を用いた、後天的遺伝発現抑制酵素のアイソザイム性に関する研究 (名大院理) ○石川敦貴, 岡本祐幸
- 202P** 反応力場モデルが示す水の結晶-プラスチック相転移 (岡山大院・自然科学¹, 岡山大基礎研², メック株式会社³) ○足立優司^{1,3}, 甲賀研一郎²
- 203P** 水中において多数の分子が関与し引き起こされる水素結合破断の評価手法 (阪大院基礎工) ○菊辻卓真, 金鋼, 松林伸幸
- 204P** 静電ポテンシャルフィッティングにもとづく水モデルの設計 (熊大院生命) ○佐藤恭介
- 205P** 水素ハイドレート内の水素分子の拡散ダイナミクス (金沢大院自然¹, Tanjungpura 大理², 金沢大理工³) ○原田明日華¹, Yudha Arman², 三浦伸一³
- 206P** 着霜過程の分子動力学シミュレーション (京大工) ○永島健太郎, 松本充弘
- 207P** ポリフェニレンサルファイドの力場構築及び溶液物性解析 (福井大院工) ○出倉敬史, 玉井良則
- 208P** 第一原理分子動力学法における van der Waals 相互作用の補正がメタンハイドレートの振動スペクトルとゲスト-ホスト間相互作用に及ぼす影響 (工学院大) ○平塚将起, 伊藤慎一郎
- 209P** DFTB 法による水/水蒸気の物性評価 (京都大) ○奥岳人, 松本充弘
- 210P** 過冷却状態における単純液体の輸送係数に対する引力と斥力の効果 (新潟大院自然¹, 阪大院基礎工², 新潟大理³) ○真谷健汰¹, 内山輝¹, 石井良樹², 大鳥範和³
- 211P** 302S 参照
- 212P** 205S 参照
- 213P** 高分子ガラスのボゾンピーク: 粗視化分子動力学シミュレーションによる起源解明 (阪大院基礎工¹, 東大総合文化²) ○友重直也¹, 水野英如², 金鋼¹, 松林伸幸¹
- 214P** 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 (阪大理化) ○北川甲コリン, 川上貴資, 山中秀介, 奥村光隆
- 215P** 水溶液中のホタルオキシルシフェリンの基底状態および励起状態の第一原理 MD (静岡大・工¹, 群馬大・理工², 原子力機構³, 東大・物性研⁴) ○野口良史¹, 樋山みやび², 志賀基之³, 秋山英文⁴, 杉野修⁴

- 216P** 粗視化分子動力学法に基づくフィラー含有樹脂材料の毛細管現象解析(日立研開)○伊藤寿, 松本茂紀, 鈴木智久, 杉井泰介, 寺崎健, 守谷浩志
- 217P** DFT-MD シミュレーションによる新規正極材料としてのキノン内包 SWCNT の解析(名工大工)○都築貴寛, 尾形修司, 浦長瀬正幸
- 218P** バイオマス分解酵素の反応機構(産総研, 機能材料コンピューショナル¹, ORNL, CMB²)○石田豊和^{1,2}, Jerry M. Parks², Jeremy C. Smith²
- 219P** 水環境下での金属鉄表面および酸化鉄表面のトライボ化学反応の反応分子動力学シミュレーション(日本精工¹, 東北大金研²)○土子政貴^{1,2}, 王楊², 宮崎成正², 大谷優介², 尾澤伸樹², 久保百司²
- 220P** 非球形微粒子系に関するモンテカルロ・シミュレーション(岐阜大自然科学技術¹, 岐阜大工²)○甲斐真也¹, 杉浦拓実¹, 赤塚陽介¹, 寺尾貴道²
- 221P** Mg-MOF-74 による二酸化炭素固定化反応の DFTB-MD/MetaD シミュレーション(早大先進理工¹, 早大理工総研², 京大 ES-ICB³)○土屋佑太¹, 周建斌², Aditya Wibawa Sakti^{2,3}, 中井浩巳^{1,2,3}
- 222P** メタダイナミクス法による高温高圧水中ソルビトール脱水反応機構の解明(東大院・新領域¹, 原子力機構²)○近藤友美^{1,2}, Chang Yong Lik¹, 佐々木岳彦¹, 志賀基之²
- 223P** 量子化学計算によるポリフルオロアレーン類に対する電気化学的カルボキシル化の位置選択メカニズムの検討(北大院総化¹, 北大院工²)○上ヶ島一輝¹, 赤石智久¹, 仙北久典^{1,2}, 佐藤信一郎^{1,2}
- 224P** 伸線パーライトの塑性変形における結晶構造変化および原子ひずみの分子動力学解析(関西大院理¹, 関西大²)○尾田幸介¹, 齋藤賢一², 宅間正則², 高橋可昌², 佐藤知広²
- 225P** 炭化ケイ素の摩擦界面における潤滑膜の自己形成・修復機構の分子動力学法シミュレーション(東北大金研¹, 東北大工²)○川浦正之¹, 王楊^{1,2}, 宮崎成正¹, 大谷優介¹, 尾澤樹¹, 久保百司¹
- 226P** ストルバイト表面における解糖系に関わる低分子有機物のダイナミクス(慶大理工¹, 理研²)○加藤修三¹, 戎崎俊一², 泰岡顕治¹
- 227P** Tree 法を用いた水滴の固体表面上への衝突シミュレーション(福井大院工)○嶋津雅和, 古石貴裕
- 228P** 環状および直鎖ポリエチレンオキシドのフラレンへの吸着状態の分子動力学シミュレーション(北大院総合化学¹, 北大工学院²)○吉富翔太郎¹, Wang Yubo¹, 山本拓矢², 佐藤信一郎²
- 229P** 粘着付与剤と粘着剤のバルクおよび基材界面における親和性の全原子解析(積水化学工業¹, 阪大院基礎工²)○洲上唯一¹, 廣瀬由貴¹, 矢原和幸¹, 松林伸幸²
- 230P** 分子動力学法および TDA を用いた LIB 電解液におけるイオン拡散に関する考察(関西大院¹, 関西大²)○寺井雄亮¹, 齋藤賢一², 宅間正則², 高橋可昌², 佐藤知広²
- 231P** 高エネルギー散乱のための二原子間ユニバーサルポテンシャルモデル(核融合研)○伊藤篤史
- 232P** 3C-および 4H-SiC の結晶欠陥挙動に関する分子動力学シミュレーション(関西大学[院]¹, 関西大学², 産総研³)○今村祐亮¹, 齋藤賢一², 西村憲治³, 佐藤知広², 宅間正則², 高橋可昌²
- 233P** 320S 参照
- 234P** 油水面電子移動の多次元自由エネルギー計算による反応機構解析(東北大院理¹, 京大 ESICB²)○平野智倫¹, 森田明弘^{1,2}
- 235P** タングステン自己照射過程の分子動力学シミュレーション(核融合研¹, 名大院工²)○高山有道¹, 伊藤篤史¹, 中村浩章^{1,2}
- 236P** 粗視化分子動力学法を用いた柔軟鎖液晶エラストマーの力学特性解析(ADMAT¹, パナソニック(株)², 産総研³)○保岡悠^{1,2}, 田頭健司^{1,2}, 高橋和義³, 土居英男³, 青柳岳司³
- 237P** 溶媒の量子化学効果を非経験的に取り込んだ Adaptive QM/MM 手法の開発と金属イオン水溶液への応用(東大情理¹, 京大福井セ², 東大院農³, 慶應量子⁴)○山田真行¹, 西本佳央², 清水謙多郎^{1,3}, 渡邊宙志⁴
- 238P** 分子動力学シミュレーションによるキラリカラムナー液晶のらせん構造解明(北里大院理¹, 名大院工², 北里大理³)○吉田晋太郎¹, 萬代拓由¹, 吉田純³, 原光生², 渡辺豪³, 米田茂隆³
- 239P** 高分子結晶膜の表面修飾による CO₂ 透過特性の変化(福井大院工)○清水洗佑, 玉井良則
- 240P** ポリマーのセグメント化によるコポリマー膜の吸水の自由エネルギー解析(阪大院基礎工)○小嶋秀和, 半田和也, 山

- 田一雄, 松林伸幸
- 241P** 非晶高分子の衝撃破壊に関する分子論的研究: ミクロの視点における降伏現象の解明 (名大院工) ○湯之也, 藤本和士, 岡崎進
- 242P** 全原子 MD を用いた高分子ブレンド相溶性評価 (阪大院基礎工) ○山田一雄, 松林伸幸
- 243P** 両親媒性トリブロックコポリマーを用いたダブルネットワークハイドロゲルの散逸粒子動力学シミュレーション (慶大理工) ○山本健太, 荒井規允
- 244P** 環動高分子材料の粗視化モデリング手法の開発と破壊プロセスの解明 (東北大金研¹, 東北大工²) ○上原周一¹, 王楊^{1,2}, 宮崎成正¹, 大谷優介¹, 尾澤伸樹¹, 久保百司¹
- 245P** MD シミュレーションによる PVA ハイドロゲルの分子レベル解析 (阪大院基礎工) ○大隅理佐, 山田一雄, 松林伸幸
- 246P** 講演取り消し
- 247P** 107S 参照
- 248P** FMO-DPD を連携した脂質二重膜、コレステロールのマルチスケールシミュレーション (立教大理¹, 星葉大², 産総研 CD-FMat³, 東大生研⁴) ○奥脇弘次¹, 新庄永治², 西田瑠花², 土居英男³, 望月祐志^{1,4}, 福澤薫^{2,4}, 米持悦生²
- 249P** 散逸粒子動力学法を用いた単一ヤヌス粒子の拡散について (慶大 理工) ○澤眞詩, 荒井規允, 山本詠士, 泰岡顕治
- 250P** SASA モデル見直しのための水和自由エネルギー計算 (早大・物理応物) ○淀川良, 黒石晃平, パーキン暖, 高野光則
- 251P** ナノ粒子分散高分子コンポジットの急速沈殿におけるナノ粒子凝集のダイナミクス (名大院工) ○草田慧, 畝山多加志, 増淵雄一
- 252P** 204S 参照
- 253P** タンパク質構造安定性のエネルギー論 (岡山大基礎研) ○墨智成, 甲賀研一郎
- 254P** Effects of Packing Density and Chain Length on the Surface Hydrophobicity of Thin-Films Composed of Perfluoroalkyl Acrylate Chains: A Molecular Dynamics Study (名古屋大工¹, AGC Inc.²) ○Hari Yadav¹, An-Tsung Kuo², Shingo Urata², Wataru Shinoda¹
- 255P** Patchy 粒子系に関する構造形成 (岐阜大自然科学技術¹, 岐阜大工²) ○赤塚陽介¹, 杉浦拓実¹, 甲斐真也¹, 寺尾貴道²
- 256P** 動径分布関数・エネルギー分布関数をもとにした粗視化力場パラメータ決定手法の改良 (理研・MIH¹, 京大院・医², 横浜市大・生命医³) ○千葉峻太郎¹, 奥野恭史^{1,2}, 本間光貴¹, 池口満徳^{1,3}
- 257P** 多剤排出トランスポーター AcrABZ-TolC の分子動力学シミュレーション: 膜-膜タンパク質間相互作用の評価 (東大先端研) ○篠田恵子
- 258P** 高分子/水界面におけるアミノ酸アナログの吸着能解析 (阪大院基礎工) ○八十島巨宏, 松林伸幸
- 259P** 201S 参照
- 260P** タンパク質の動的分子機能に関する一考察 (近大先端研) ○米澤康滋
- 261P** 溶媒とモーターの分子動力学シミュレーション: システムサイズ依存性とモーターサイズ依存性 (工学院大教育推進¹, 工学院大先進工², 九大院理³) ○徳永健¹, 佐相剛史², 秋山良³
- 262P** 力学的安定性の高いモデル構造を生成するための Deep Learning を用いたホモロジーモデリング (近大院生物理工) ○古江祐也, 松倉里紗, 宮下尚之
- 263P** FEP/REST 法によるタンパク質変異体の自由エネルギー計算 (量研機構) ○桜庭俊
- 264P** プラストシアニンと P700 における電子伝達機構に関する理論的研究 (金沢大院自然¹, 金沢大理工²) ○片岡樹紀¹, 前田倫也¹, 齋藤玲那¹, Muhammad Saleh Arwansyah¹, 川口一朋², 長尾秀実²
- 265P** 緩和モード解析を用いたフォールディングシミュレーションデータの解析 (明治大理工¹, 慶應大理工²) ○光武亜代理¹, 高野宏²
- 266P** リガンド結合に伴うタンパク質結合ポケット変化の分子動力学的研究 (理研) ○沖本憲明, 平野秀典, 泰地真弘人
- 267P** 蛋白質環境における電子励起移動の量子ダイナミクス (量研・関西¹, 量研・東海²) ○米谷佳晃¹, 安達基泰², 黒崎謙²
- 268P** 分子動力学シミュレーションによるヘモグロビン A とヘモグロビン S の立体構造比較解析 (鳥取大医) ○藤原伸一, 網崎孝志
- 269P** 自由エネルギー反応経路探索法によるアラニンペプチドのフォールディング探索 (筑波大・計セ) ○満田祐樹, 重田育照
- 270P** 分子動力学計算によるトロンビン/DNA アプタマー三量体における Through-bond effects の解析 (シユレーディングー(株)) ○井

上鑑孝

- 271P** 全原子分子動力学法によりファージウィルスの熱伝導特性評価(東工大物質理工)○椎野良介, 佐々木遼馬, 林慶浩, 川内進
- 272P** GLAS アルゴリズムによる酵素反応機構の新規解明(筑波大 CCS)○庄司光男, 三嶋謙二, 堀優太, 重田育照
- 273P** 講演取り消し
- 274P** ジクロロメタンの分子モデル改良とその分子動力学シミュレーションにおけるパフォーマンス(東北大院・理¹, 京都大学 ES-ICB²)○小泉愛¹, 伊藤孟¹, 平野智倫¹, 森田明弘^{1,2}
- 275P** 異なる分子パラメータを持つ複数分子系のシミュレーションプロトコルの構築(三井情報¹, 横浜市大・生命医², 理研・MIH³)○佐藤美和¹, 佐藤昂人¹, 鈴木南美², 浴本亨², 山根努², 池口満徳^{2,3}
- 276P** クラウドを活用したオートスケールリングによる分子シミュレーション環境の最適化(三井情報)○佐藤昂人, 佐藤美和, 平山裕之, 高橋順子, 牧口大旭
- 277P** Lipid droplet biogenesis is a liquid phase separation spatially regulated by seipin and membrane curvature (University of Fribourg)○Valeria Zoni, Pablo Campomanes, Rasha Khaddaj, Abdou Rachid Thiam, Roger Schneiter, Stefano Vanni