

# 第34回分子シミュレーション討論会 講演プログラム

(2020年11月28日 最終更新)

主催 : 分子シミュレーション学会  
会期 : 2020年12月15日(火)  
開催方式 : オンライン  
HP : <https://sympo.mol-sim.jp/mssj34/>

講演番号1桁目 : セッション番号  
講演番号2,3桁目 : 通し番号  
講演番号記号 : P=ポスター発表  
講演者記号記号 : ○印=発表者

**12月15日(火)**

— 午前の部 —

## 10:00-12:00 セッション1

- 101P** 分子動力学シミュレーションを用いたアクアポリンとアクアグリセロポリンにおける水分子透過現象の比較  
(慶大院理工<sup>1</sup>, 慶大医<sup>2</sup>, 慶大理工<sup>3</sup>) ○田島慶太<sup>1</sup>, 安井正人<sup>2</sup>, 佐藤洋平<sup>3</sup>, 山本詠士<sup>3</sup>
- 102P** 空間分割表式によるタンパク質近傍の水和エネルギー論  
(阪大院基礎工) ○山本博輝, 松林伸幸
- 103P** 格子ボルツマン・ブラウン動力学連成シミュレーション法を用いたエンジンオイル中のVIIの挙動解析  
(兵庫県立大) ○澤井源太郎, 川手大樹, 白井颯馬, Deboprasad Talukdar, 鷺津仁志
- 104P** 環状高分子メルトの振動状態およびダイナミクスの粗視化分子動力学シミュレーションによる解析  
(阪大院基礎工<sup>1</sup>, 東大院総合文化<sup>2</sup>) ○後藤頌太<sup>1</sup>, 水野英如<sup>2</sup>, 金鋼<sup>1</sup>, 松林伸幸<sup>1</sup>
- 105P** 水和シニョリン分子のエネルギー地形とフォールディング転移  
(金沢大院自然<sup>1</sup>, 金沢大理工<sup>2</sup>) ○鈴木大輔<sup>1</sup>, 三浦伸一<sup>2</sup>
- 106P** ペプチドのスタック構造形成に対する塩効果の全原子相互作用解析  
(阪大院基礎工) ○諏訪原一輝, 笠原健人, 松林伸幸

- 107P** 分子動力学計算による p53-C 末端部位のDNA結合機構の解明  
(東工大生命) ○平悠太, Tran Duy, 北尾彰朗
- 108P** PaCS-MD/MSMを用いたタンパク質-タンパク質複合体の結合親和性評価  
(東京工業大学大学院生命理工学院) ○宮澤佳希, Tran Phuoc Duy, 竹村和浩, 北尾彰朗
- 109P** マルチウォーカーの再配置に基づく効率的なタンパク質構造サンプリング法の開発  
(筑波大生命環境<sup>1</sup>, 筑波大計セ<sup>2</sup>) ○保田拓範<sup>1</sup>, 森田陸離<sup>2</sup>, 重田育照<sup>2</sup>, 原田隆平<sup>2</sup>
- 110P** 分子動力学法に基づくタンパク質振動スペクトルシミュレーションに向けた静電相互作用モデルの改良  
(静岡大工) ○三宅雅輝, 鳥居肇
- 111P** 添加剤存在下での尿素結晶成長のMD解析  
(大阪大学 大学院基礎工学研究科) ○田中泉利, 松林伸幸
- 112P** フッ化水素の静電的異方性と水素結合に関わる静電分極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
- 113P** エネルギー表示の一般化 Langevin 方程式の定式化と溶媒和ダイナミクスへの応用  
(阪大院基礎工<sup>1</sup>, 京大ESICB<sup>2</sup>) ○沖田和也<sup>1</sup>, 笠原健人<sup>1</sup>, 松林伸幸<sup>1,2</sup>
- 114P** 粗視化シミュレーションから得られた高分子の粗視化構造の全原子化  
(福井大院工) ○竹多泰之, 古石貴裕

- 115P** せん断流れ下におけるヤヌスコロイド-ポリマー混合水溶液の自己集合と粘性挙動 (慶大院理工<sup>1</sup>, 慶大理工<sup>2</sup>, Johannes Gutenberg Univ. Mainz<sup>3</sup>) ○小林祐生<sup>1</sup>, 荒井規允<sup>2</sup>, Arash Nikoubashman<sup>3</sup>
- 116P** PVA ハイドロゲルの MD シミュレーションを用いた分子レベル解析 (阪大院基礎工) ○大隅理佐, 山田一雄, 松林伸幸
- 117P** ベイスンホッピング法を用いた水和生体分子のエネルギー地形探索 (金沢大院自然) ○吉森匠, 三浦伸一
- 118P** 人工知能と分子シミュレーションの連携による逐次学習型材料設計 (豊田中研) ○吉川信明, 梶田晴司, 武市憲典
- 119P** 分子動力学シミュレーションを用いた高分子グラフトナノ粒子の結晶多形の解析 (慶大理工) ○石山将成, 浅井誠, 泰岡顕治
- 120P** カーボンナノチューブに閉じ込めた水分子の振動解析 (慶大理工<sup>1</sup>, 工学院大工<sup>2</sup>, 富山大工<sup>3</sup>) ○三浦俊次<sup>1</sup>, 平塚将起<sup>2</sup>, 山本詠士<sup>1</sup>, 石山達也<sup>3</sup>, 泰岡顕治<sup>1</sup>
- 121P** 2次元剛体球系 Alder 転移近傍における平衡緩和-パルス膨張に対する非平衡応答— (名工大院工) ○麦田大悟, 磯部雅晴
- 122P** 多価の相互作用を持ったタンパク質による相分離解析のためのメソスケール分子動力学モデルの開発 (京大理) ○村田隆, 高田彰二
- 123P** 大規模分子シミュレーションによる生体膜融合メカニズムの解明 (慶大理工<sup>1</sup>, オックスフォード大生物化学<sup>2</sup>) ○岡田清志郎<sup>1</sup>, 泰岡顕治<sup>1</sup>, 山本詠士<sup>1</sup>, Mark Sansom<sup>2</sup>
- 124P** 分子動力学法による Si 結晶成長速度の面方位依存性の解析 (東レリサーチセンター) ○澤田啓介, 垂水喜明, 清水夕美子
- 125P** ld-PaCS-MD : PaCS-MD に基づくタンパク質-リガンド結合経路探索 (筑波大院生物<sup>1</sup>, 筑波大計セ<sup>2</sup>) ○會田勇斗<sup>1,2</sup>, 重田育照<sup>2</sup>, 原田隆平<sup>2</sup>
- 126P** FMO-DPD 連携による脂質ナノ粒子、ペプチドのマルチスケールシミュレーション (立教大理<sup>1</sup>, 星薬大<sup>2</sup>, 東大生研<sup>3</sup>, 東北大工<sup>4</sup>, 千葉大院薬<sup>5</sup>) ○奥脇弘次<sup>1</sup>, 西田瑠花<sup>2</sup>, 氏家かれん<sup>2</sup>, 土屋裕大朗<sup>1</sup>, 望月祐志<sup>1,3</sup>, 福澤薫<sup>2,3,4</sup>, 米持悦生<sup>2</sup>, 田中浩揮<sup>5</sup>, 秋田英万<sup>5</sup>
- 127P** Maxwell+ MD マルチスケールシミュレーションを用いた DCMBI 結晶の瞬間誘導ラマン散乱誘起テラヘルツ波発生過程 (筑波大計セ) ○山田篤志
- 128P** 機械学習を用いたオーダーパラメータの自動探索 (産総研) ○高橋和義
- 129P** Lysozyme - (GlcNac)<sub>3</sub> 結合における尿素添加効果の自由エネルギー解析 (阪大院基礎工) ○肥喜里志門, 松林伸幸
- 130P** 多粒子座標の不変性及び同変性を考慮した深層学習モデルの提案 (慶大理工) ○山田悠斗, 遠藤克浩, 泰岡顕治
- 131P** 分子動力学シミュレーションおよび位相的データ解析を用いたイオン液体における微視的構造の特徴化 (関西大院<sup>1</sup>, 関西大<sup>2</sup>) ○寺井雄亮<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>
- 132P** QM/MM 法による銅含有アミン酸化酵素のプロトン化状態についての理論解析 (筑波大 CCS<sup>1</sup>, JST-PRESTO<sup>2</sup>, 大阪医科大<sup>3</sup>, 阪大産研<sup>4</sup>) ○庄司光男<sup>1,2</sup>, 村川武志<sup>3</sup>, 重田育照<sup>1</sup>, 林秀行<sup>3</sup>, 岡島俊英<sup>4</sup>
- 133P** 電荷付加カーボンナノチューブを用いたエタノール水溶液の分離 (慶大理工) ○小野祐為, 山本詠士, 泰岡顕治
- 134P** 粗視化分子動力学法を用いた環状鎖・線状鎖混合系のレオロジー解析 (東北大理) ○村島隆浩
- 135P** 自己組織化イオン液晶の全原子分子モデリング: 1D および 3D ナノチャネルの分子輸送機能解析 (兵庫県大院シミュ<sup>1</sup>, 阪大院基礎工<sup>2</sup>, 北里大理<sup>3</sup>, 東大院工<sup>4</sup>) ○石井良樹<sup>1</sup>, 松林伸幸<sup>2</sup>, 渡辺豪<sup>3</sup>, 加藤隆史<sup>4</sup>, 鷺津仁志<sup>1</sup>
- 136P** セグメントの集合としてみる共重合体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

- 137P** 環状ペプチド分子の安定構造探索  
(富士通研究所) ○谷田義明, 寺島千絵子,  
佐藤博之
- 138P** 水アルコール混合溶媒中の連結ポルフィリン2量体の熱揺らぎについての分子動力学シミュレーション  
(北大院工<sup>1</sup>, 北大総合化学院<sup>2</sup>) ○佐藤信一郎<sup>1,2</sup>, 川村将也<sup>2</sup>
- 139P** 取り下げ
- 140P** 粒子間相互作用計算カーネルジェネレータPIKGの開発  
(神戸大<sup>1</sup>, 理研 R-CCS<sup>2</sup>, 松江高専<sup>3</sup>) ○野村昴太郎<sup>1</sup>, 岩澤全規<sup>3</sup>, 行方大輔<sup>2</sup>, 牧野淳一郎<sup>1,2</sup>

— 午後の部 (前半) —

13:00-15:00 セッション 2

- 201P** 伸線材の微細強化に及ぼす Cr の影響に関する分子動力学解析  
(関西大院<sup>1</sup>, 関西大<sup>2</sup>) ○李響<sup>1</sup>, 齋藤賢一<sup>2</sup>, 高橋可昌<sup>2</sup>, 宅間正則<sup>2</sup>, 佐藤知広<sup>2</sup>
- 202P**  $\alpha$ 切断酵素と  $\beta$ 切断酵素の膜貫通部位の構造予測とそのダイナミクス  
(近大生物理工) ○柳野賀緒梨, 宮下尚之
- 203P** PaCS-MD によるアクトミオシンの結合解離予測  
(東工大生命理工<sup>1</sup>, 大阪大生命機能<sup>2</sup>) ○尾川拓巳<sup>1</sup>, Tran Duy<sup>1</sup>, 藤井高志<sup>2</sup>, 難波啓一<sup>2</sup>, 北尾彰朗<sup>1</sup>
- 204P** 薬剤分子の B 型肝炎ウイルスへの透過機構の探索  
(名大院工<sup>1</sup>, 東大創域<sup>2</sup>) ○弦巻周平<sup>1</sup>, 浦野諒<sup>1</sup>, 藤本和士<sup>1</sup>, 篠田渉<sup>1</sup>, 岡崎進<sup>2</sup>
- 205P** 着霜過程のミクロスケール解析  
(京大工) ○永島健太郎, 松本充弘
- 206P** 疎水性相互作用の温度依存性 - 溶質の性質による影響 -  
(岡山大院自然科学<sup>1</sup>, 岡山大基礎研<sup>2</sup>) ○内藤秀文<sup>1</sup>, 岡本隆一<sup>2</sup>, 墨智成<sup>2</sup>, 甲賀研一郎<sup>2</sup>
- 207P** 分子シミュレーションを用いた HSP90 機能阻害薬の作用機構の解明  
(近大院・生物理工<sup>1</sup>, 電通大・情報理工<sup>2</sup>) ○松倉里紗<sup>1</sup>, 宮下尚之<sup>1,2</sup>, 瀧真清<sup>2</sup>
- 208P** 機械学習ポテンシャルエネルギー曲面を用いた変分経路積分分子動力学法の開発と応用  
(金沢大院自然<sup>1</sup>, UBC<sup>2</sup>) ○杉澤宏樹<sup>1</sup>, 井田朋智<sup>1</sup>, 三浦伸一<sup>1</sup>, Roman V. Krems<sup>2</sup>
- 209P** 第 XI 因子と血小板膜糖蛋白 GPIb  $\alpha$  および von Willebrand 因子複合体の動的結合構造予測  
(東海大医) ○中山正光, 後藤信一, 後藤信哉
- 210P** 任意の次元における理想気体中の粒子の 1 回の衝突による速度変化  
(名古屋大工) ○仲井文明, 畝山多加志, 土肥侑也, 増渕雄一
- 211P** MD-GAN を使用した固体電解質内のリチウムイオンの拡散係数予測  
(慶大理工<sup>1</sup>, トヨタ自動車<sup>2</sup>) ○山田悠斗<sup>1</sup>, 遠藤克浩<sup>1</sup>, 山崎久嗣<sup>2</sup>, 泰岡頭治<sup>1</sup>
- 212P** 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の開発と高効率化  
(金沢大院自然) ○鈴木大介, 三浦伸一
- 213P** ナノチューブ内におけるテザーナノ粒子の自己組織化  
(慶大院理工<sup>1</sup>, 慶大理工<sup>2</sup>) ○佐藤碧海<sup>1</sup>, 小林祐生<sup>1</sup>, 荒井規允<sup>2</sup>
- 214P** 反応拡散系とカップリングした膜変形シミュレーションによる時空間パターンの解析  
(東大物性研) ○爲本尚樹, 野口博司
- 215P** 5CB 液晶のネマチック相転移における秩序化の分子動力学解析  
(阪大院基礎工<sup>1</sup>, 兵県大院シミュ<sup>2</sup>) ○竹本健吾<sup>1</sup>, 石井良樹<sup>2</sup>, 金鋼<sup>1</sup>, 松林伸幸<sup>1</sup>
- 216P** 超音波下における膜付きマイクロバブルの非線形挙動 - 多体散逸粒子動力学シミュレーション -  
(慶大院理工<sup>1</sup>, 産総研<sup>2</sup>, 慶大理工<sup>3</sup>) ○荒木雄介<sup>1</sup>, 高橋和義<sup>2</sup>, 荒井規允<sup>3</sup>
- 217P** 18 残基チオエーテル結合環状ペプチド p6,p7 のシミュレーションデータの解析  
(明治大院理) ○野口大輝, 光武亜代理
- 218P** プロトン伝導体  $\text{Cs}_2(\text{HSO}_4)(\text{H}_2\text{PO}_4)$  のガラス転移における構造と電子状態の変化 - 分子動力学法による研究 -  
(長岡高専) ○松永茂樹
- 219P** 分子シミュレーションによる分光分析: フーリエ・ラプラス変換に拡張した離散ウィナー・ヒンチン定理とオンザフライアルゴリズムによる方法  
(豊田高専一般<sup>1</sup>, 立命館大理工<sup>2</sup>, 山口大理工<sup>3</sup>, ChemE, MIT<sup>4</sup>) ○小山暁<sup>1</sup>, 深尾浩次<sup>2</sup>, 山本隆<sup>3</sup>, Gregory C. Rutledge<sup>4</sup>
- 220P** 蝶ネクタイ型ナノグラフェンの構造と電子状態  
(成蹊大理工) ○飯田怜央, 富谷光良, 坂本昇一
- 221P** Structural Order of Water Molecules around the Polyrotaxane of PEG with  $\alpha$ -Cyclodextrin onto Gold surface by MD Simulation  
(Univ. Hyogo<sup>1</sup>, Univ. Tokyo<sup>2</sup>) ○Le Nhu Minh Tue<sup>1</sup>, Le Van Sang<sup>1</sup>, Yoshiki Ishii<sup>1</sup>, Kosuke Yamazoe<sup>2</sup>, Yoshihisa Harada<sup>2</sup>, Hitoshi Washizu<sup>1</sup>
- 222P** 反応分子動力学を用いた層状グラフェン移着片への雰囲気分子効果の解析  
(兵庫県大シミュ) ○松岡諒, 石井良樹, 鷲津仁志

- 223P** Structure and Electronic Properties of  $\alpha$ -Si: H Investigated with Quantum Simulation  
(京都大工) ○李海麗, 松本充弘
- 224P** 氷 Ih における格子欠陥の生成自由エネルギー  
(岡山大院自然科学<sup>1</sup>, 岡山大基礎研<sup>2</sup>, 阪大院基礎工<sup>3</sup>) ○矢野正樹<sup>1</sup>, 矢ヶ崎琢磨<sup>3</sup>, 松本正和<sup>2</sup>, 田中秀樹<sup>2</sup>
- 225P** 難燃性濃厚電解液における Na イオン拡散の理論的解析  
(早大先進理工<sup>1</sup>, 京大 ESICB<sup>2</sup>, 早大理工総研<sup>3</sup>) ○土屋佑太<sup>1</sup>, 小野純一<sup>2,3</sup>, 中井浩巳<sup>1,2,3</sup>
- 226P** 電子状態計算に基づく分子動力学計算のエネルギー保存検証と拘束条件を用いた効率化  
(筑波大・計セ) ○西澤宏晃, 重田育照
- 227P** 2成分剛体円板ガラス系における Hopping 鎖運動と準空隙分布の相関  
(名工大院工) ○柿原唯人, 児山弘昌, 磯部雅晴
- 228P** 溶媒和モーターを用いた大きく重い粒子の分子動力学シミュレーション  
(工学院大教育推進<sup>1</sup>, 工学院大先進工<sup>2</sup>, 九大院理<sup>3</sup>) ○徳永健<sup>1</sup>, 佐相剛史<sup>2</sup>, 秋山良<sup>3</sup>
- 229P** レプリカ交換モンテカルロ法を用いたモデル液晶分子における相転移の解析  
(慶大理工) ○小和口昌愛, Paul Brumby, 泰岡顕治
- 230P** Electronic Properties of Semiconductor Nanorods  
(京都大工) ○羅啓峯, 松本充弘
- 231P** セルロースナノファイバーのせん断変形挙動における異方性: 分子動力学解析  
(関西大院<sup>1</sup>, 関西大<sup>2</sup>) ○和泉幸宏<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>
- 232P** モーフィングを利用してタンパク質の構造遷移を効率よく評価する  
(筑波大計セ) ○森田陸離, 重田育照, 原田隆平
- 233P** 高分子溶液の潤滑現象  
(京都大工) ○須崎正裕, 松本充弘
- 234P** レプリカ交換分子動力学法を用いた準二次元多層氷の相図  
(慶大理工<sup>1</sup>, 神戸大理<sup>2</sup>) ○平川和明<sup>1</sup>, 野村昴太郎<sup>2</sup>, 泰岡顕治<sup>1</sup>
- 235P** 拡散理論を用いたタンパク質-リガンド結合の動力学解析  
(阪大院基礎工<sup>1</sup>, 京大 ESICB<sup>2</sup>) ○笠原健人<sup>1</sup>, 松林伸幸<sup>1,2</sup>
- 236P** 不均一系における位置に依存した拡散係数の新規手法の提案  
(東大新領域<sup>1</sup>, 名大工<sup>2</sup>) ○永井哲郎<sup>1</sup>, 弦巻周平<sup>2</sup>, 浦野諒<sup>2</sup>, 藤本和士<sup>2</sup>, 篠田渉<sup>2</sup>, 岡崎進<sup>1</sup>
- 237P**  $\text{NH}_4\text{F}$  をドーピングした Ice I<sub>h</sub> 及び Ice II の安定性評価  
(岡山大院・自然科学<sup>1</sup>, 阪大院・基礎工<sup>2</sup>, 岡山大・基礎研<sup>3</sup>) ○田口新平<sup>1</sup>, 矢ヶ崎琢磨<sup>2</sup>, 松本正和<sup>3</sup>, 田中秀樹<sup>3</sup>
- 238P** オートファゴソーム形成に関与する膜タンパク質 Atg9 の膜中配向予測  
(理研 CPR<sup>1</sup>, 微化研<sup>2</sup>, 理研 BDR<sup>3</sup>, 理研 R-CCS<sup>4</sup>) ○森貴治<sup>1</sup>, 的場一晃<sup>2</sup>, 野田展生<sup>2</sup>, 杉田有治<sup>1,3,4</sup>
- 239P** 四分岐星型高分子ゲルにおける過剰排除体積によるゲル化促進機構の解明  
(慶大理工) ○谷口鷹, 浅井誠, 泰岡顕治
- 240P** 氷 Ih に取り込まれた不純物分子の拡散と相互作用  
(岡山大院・自然科学<sup>1</sup>, 阪大院・基礎工<sup>2</sup>, 岡山大院・基礎研<sup>3</sup>) ○平田雅典<sup>1</sup>, 矢ヶ崎琢磨<sup>2</sup>, 松本正和<sup>3</sup>, 田中秀樹<sup>3</sup>

— 午後の部 (後半) —

15:00-17:00 セッション 3

- 301P** 散逸粒子動力学法を用いた Bio-inspired 材料表面における超撥水/親水の遷移機構解明  
(慶大院理工<sup>1</sup>, 慶大理工<sup>2</sup>) ○辻之上弘晃<sup>1</sup>, 荒井規允<sup>2</sup>
- 302P** 固体表面付近におけるイオン液体の陽イオン及び陰イオンを変えたときの構造変化  
(福井大工) ○原田滉平, 古石貴裕
- 303P** 温度勾配による極性-無極性分子混合溶液の相構造変化  
(慶大院理工<sup>1</sup>, 慶大理工<sup>2</sup>) ○加藤優佑<sup>1</sup>, 佐藤洋平<sup>2</sup>, 山本詠士<sup>2</sup>
- 304P** MAO-B のリガンド結合部位の動力学と PET 薬剤の結合自由エネルギー計算  
(近大生物理工<sup>1</sup>, 東北大医系<sup>2</sup>, 東北大 CYRIC<sup>3</sup>) ○大多和克紀<sup>1</sup>, 松倉里紗<sup>1</sup>, 宮下尚之<sup>1</sup>, 原田龍一<sup>2</sup>, 木村裕一<sup>1</sup>, 古本祥三<sup>3</sup>
- 305P** 定量的粗視化力場 SPICA の DNA モデルへの拡張: 脂質ナノ粒子の構造予測  
(名大院工) ○田中裕貴, 宮崎裕介, Akhil Pratap Singh, 篠田涉
- 306P** 一様せん断流における界面活性剤の棒状ミセルの動力学とレオロジーへの影響  
(阪大) ○小井手祐介, 後藤晋
- 307P** NMR 解析を用いたシニョリンとその変異体の立体構造の決定  
(明治大学大学院) ○小六隼平
- 308P** Inverse square flow による効率的なモンテカル分子ロシミュレーション方法の提案  
(慶應理工) ○遠藤克浩, 湯原大輔, 泰岡顕治
- 309P** 気液界面における半フッ化炭素のヘミミセル形成  
(名大院工) ○原田昌吾, Hari O. S. Yadav, 篠田涉
- 310P** 改良メタダイナミクス法の考案と高温水中多価アルコール脱水反応機構の解明  
(東大院・新領域<sup>1</sup>, 原子力機構<sup>2</sup>) ○近藤友美<sup>1,2</sup>, Chang Yong Lik<sup>1</sup>, 佐々木岳彦<sup>1</sup>, 志賀基之<sup>2</sup>
- 311P** 分割統治型励起状態計算に基づく凝縮系非断熱分子動力学シミュレーション手法の開発と応用  
(早大院先進理工<sup>1</sup>, 早大先進理工<sup>2</sup>, 東邦大薬<sup>3</sup>, 早大理工総研<sup>4</sup>, 京大 ESICB<sup>5</sup>) ○浦谷浩輝<sup>1</sup>, 森岡俊貴<sup>2</sup>, 吉川武司<sup>3</sup>, 中井浩巳<sup>1,4,5</sup>
- 312P** ガラス形成液体のフラジリティとボゾンピークによるスケーリング性の検討  
(阪大院基礎工<sup>1</sup>, 東大院総合文化<sup>2</sup>) ○大門翔太<sup>1</sup>, 水野英如<sup>2</sup>, 金鋼<sup>1</sup>, 松林伸幸<sup>1</sup>
- 313P** 疎水および親水ポリマーの微視的集合様態が吸水性に及ぼす影響の解析  
(阪大院基礎工) ○阪口敦哉, 山田一雄, 松林伸幸
- 314P** 分子動力学シミュレーションによる、オレキシン 2 受容体の動的性質の研究  
(明治大学) ○横井駿, 光武亜代理
- 315P** 圧延による高分子鎖配向制御を施した PMMA の強度向上に関する分子論  
(名大院工<sup>1</sup>, 東大創域<sup>2</sup>) ○石川博章<sup>1</sup>, 藤本和士<sup>1</sup>, 湯之也<sup>2</sup>, 岡崎進<sup>2</sup>
- 316P** 水/氷界面における非対称性水素結合構造  
(富山大院理工) ○北中一也, 石山達也
- 317P** 鋳物表面上の水分子吸着膜の構造と安定性解析  
(産業技術総合研究所地圏資源環境研究部門<sup>1</sup>, 東京大学大学院新領域創成科学研究科環境システム学専攻<sup>2</sup>) ○志賀正茂<sup>1,2</sup>, 愛知正温<sup>2</sup>, 徂徠正夫<sup>1</sup>
- 318P** 機能性有機分子の自己組織化薄膜構造の安定性評価  
(慶大理工) ○松井一真, 渡辺宙志, 清水智子
- 319P** 過冷却水中での水素結合破断に伴う多体構造変化: マルコフプロセスで記述する遷移ネットワーク  
(阪大院基礎工) ○菊辻卓真, 金鋼, 松林伸幸
- 320P** 分子動力学によるアルゴンの 3 重点  
(法大生命) ○片岡洋右
- 321P** ベシクルの脂質膜増大に伴う DPD を用いた形状変化解析  
(東葉大生命) ○三橋弘美, 糸賀響, 野口瑤, 森河良太, 高須昌子
- 322P** New parallel computing algorithm of molecular dynamics for extremely huge scale biological systems  
(RIKEN R-CCS<sup>1</sup>, RIKEN CPR<sup>2</sup>, RIKEN BDR<sup>3</sup>, Michigan State University<sup>4</sup>) ○Jae-woon Jung<sup>1,2</sup>, 小林千草<sup>1</sup>, 笠原健人<sup>3</sup>, Cheng Tan<sup>1</sup>, Michael Feig<sup>4</sup>, 杉田有治<sup>1,2,3</sup>
- 323P** 高分子/水界面に対するアミノ酸側鎖及び主鎖の吸着自由エネルギー解析  
(阪大院基礎工) ○八十島巨宏, 松林伸幸

- 324P** Transport Properties of Ionic Liquid and Sodium Salt Mixtures for Sodium-Ion Battery Electrolytes from Molecular Dynamics Simulation with a Self-Consistent Atomic Charge Determination  
(ESICB, Kyoto University, Kyoto, Japan<sup>1</sup>, Graduate School of Engineering Science, Osaka University, Osaka, Japan<sup>2</sup>, Department of Chemistry, Brawijaya University, Malang, Indonesia<sup>3</sup>, Graduate School of Simulation Studies, University of Hyogo, Kobe, Japan<sup>4</sup>) ○ Lukman Hakim<sup>1,2,3</sup>, Yoshiki Ishii<sup>1,4</sup>, Nobuyuki Matubayasi<sup>1,2</sup>
- 325P** 直鎖および環状オリゴチオフェン単分子の導電性シミュレーション  
(北大総化<sup>1</sup>, 北大院工<sup>2</sup>) ○ 蘇学銘<sup>1</sup>, 佐藤信一郎<sup>1,2</sup>
- 326P** 水処理用多孔膜製造過程の最適化に向けたポリフッ化ビニリデン-有機溶媒-水3成分系の混合自由エネルギー計算  
(東大新領域<sup>1</sup>, 東レ<sup>2</sup>) ○ 金子敏宏<sup>1</sup>, 北畑雅弘<sup>2</sup>, 岡崎進<sup>1</sup>
- 327P** 自由エネルギー反応経路探索法を利用したジペプチドの膜透過速度計算  
(筑波大・計セ) ○ 満田祐樹, 重田育照
- 328P** OpenMP SIMD ディレクティブ挿入による第一原理計算プログラム CONQUEST の高速化  
(NIMS 材料数値ステ) ○ 安藤嘉倫
- 329P** 界面超分子系における和周波発生分光スペクトルの第一原理シミュレーション  
(阪大院基礎工<sup>1</sup>, 東大院総合文化<sup>2</sup>, 筑波大院・数理物質<sup>3</sup>, 物材機構 WPI-MANA<sup>4</sup>) ○ 大戸達彦<sup>1</sup>, 奥野将成<sup>2,3</sup>, 山田周平<sup>3</sup>, 埴田博一<sup>1</sup>, 中西和嘉<sup>4</sup>, 有賀克彦<sup>4</sup>, 石橋孝章<sup>3</sup>
- 330P** セルロースの両親媒性の評価  
(京大工) ○ 伊藤憲哉, 松本充弘
- 331P** 水の動的揺らぎで始まる蛋白質-リガンド解離の分子メカニズム  
(量研関西) ○ 米谷佳晃
- 332P** PaCS-MD と異常検知を援用したレアイベントサンプリング法の開発  
(筑波大計セ) ○ 原田隆平, 山口孝太, 重田育照
- 333P** chain-increment 法を用いたポリマーブレンド相溶性の全原子計算  
(阪大院基礎工) ○ 山田一雄, 松林
- 334P** Toward Understanding Triboelectric Processes  
(京都大工) ○ LIYUXIN, 松本充弘
- 335P** 分子動力学シミュレーションで示す筋疾患関連タンパク質 FHL1 のダイナミクス  
(東薬大生命<sup>1</sup>, 東薬大薬<sup>2</sup>, 統数研<sup>3</sup>, 東京医科大<sup>4</sup>) ○ 川井俊祐<sup>1</sup>, 山田寛尚<sup>2,3</sup>, 野口瑠<sup>1</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>4</sup>
- 336P** 分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学・メタダイナミクス計算の階層的並列化  
(早大理工総研<sup>1</sup>, 早大先進理工<sup>2</sup>, 京大 ES-ICB<sup>3</sup>) ○ 西村好史<sup>1</sup>, 中井浩巳<sup>1,2,3</sup>
- 337P** 超臨界水によるセルロース加水分解の分子シミュレーション  
(京都大工) ○ 奥岳人, 松本充弘
- 338P** Grimme の分散力補正 DFT 法で計算したヘテロ原子を含む分子の分子間相互作用エネルギーの計算精度  
(産総研機能材料) ○ 都築誠二, 内丸忠文
- 339P** 分割統治型密度汎関数強束縛メタダイナミクス計算の効率化とバクテリオロドプシンのプロトン輸送への応用  
(京大 ESICB<sup>1</sup>, 早大理工総研<sup>2</sup>, 早大先進理工<sup>3</sup>) ○ 小野純一<sup>1,2</sup>, 竹村俊晃<sup>3</sup>, 西村好史<sup>2</sup>, 中井浩巳<sup>1,2,3</sup>
- 340P** 水素結合相互作用の球面射影法に基づく液体水の粗視化ポテンシャル  
(名古屋文理大 情報メディア学科) ○ 本多一彦

## 講演者索引

### 【あ】

- |            |                                     |            |                           |            |   |                  |                            |
|------------|-------------------------------------|------------|---------------------------|------------|---|------------------|----------------------------|
| 會田勇斗       | 125P°                               | 梶田晴司       | 118P                      | 重田育照       | 109P, 125P,<br>132P, 226P,<br>232P, 327P,<br>332P | 寺島千絵子            | 137P                       |
| 愛知正温       | 317P                                | 片岡洋右       | 320P°                     |            |   | 土肥侑也             | 210P                       |
| 秋田英万       | 126P                                | 加藤隆史       | 135P                      |            |   | 徳永健              | 228P°                      |
| 秋山良        | 228P                                | 加藤優佑       | 303P°                     | 篠田涉        | 204P, 236P,<br>305P, 309P                         | 富谷光良             | 220P                       |
| 浅井誠        | 119P, 239P                          | 金子敏宏       | 326P°                     |            |   | 鳥居肇              | 110P, 112P                 |
| 荒井規允       | 115P, 213P,<br>216P, 301P           | 川井俊祐       | 335P°                     | 清水智子       | 318P  | <b>【な】</b>       |                            |
|            |                                     | 川手大樹       | 103P                      | 清水夕美子      | 124P  | 内藤秀文             | 206P°                      |
| 荒木雄介       | 216P°                               | 川村将也       | 138P                      | 庄司光男       | 132P°   | 中井浩巳             | 225P, 311P,<br>336P, 339P  |
| 有賀克彦       | 329P                                | 菊辻卓真       | 319P°                     | 杉澤宏樹       | 208P°   |                  |                            |
| 安藤嘉倫       | 328P°                               | 北尾彰朗       | 107P, 108P,<br>203P       | 杉田有治       | 238P, 322P  | 仲井文明             | 210P°                      |
| 飯田怜央       | 220P°                               |            |                           | 須崎正裕       | 233P°   | 中西和嘉             | 329P                       |
| 石井良樹       | 135P°, 215P,<br>221P, 222P,<br>324P | 北中一也       | 316P°                     | 鈴木大介       | 212P°   | 中山正光             | 209P°                      |
|            |                                     | 北畑雅弘       | 326P                      | 鈴木大輔       | 105P°   | 永井哲郎             | 236P°                      |
| 石川博章       | 315P°                               | 吉川信明       | 118P°                     | 墨智成        | 206P  | 永島健太郎            | 205P°                      |
| 石橋孝章       | 329P                                | 木村裕一       | 304P                      | 諏訪原一輝      | 106P°   | 行方大輔             | 140P                       |
| 石山達也       | 120P, 316P                          | 金鋼         | 104P, 215P,<br>312P, 319P | 蘇学銘        | 325P°   | 難波啓一             | 203P                       |
| 石山将成       | 119P°                               | 古石貴裕       | 114P, 302P                | 徂徠正夫       | 317P  | 西澤宏晃             | 226P°                      |
| 和泉幸宏       | 231P°                               | 小井手祐介      | 306P°                     | <b>【た】</b> |   | 西田瑠花             | 126P                       |
| 磯部雅晴       | 121P, 227P                          | 甲賀研一郎      | 206P                      | 平悠太        | 107P°   | 西村好史             | 336P°, 339P                |
| 井田朋智       | 208P                                | 小嶋秀和       | 136P°                     | 高須昌子       | 321P, 335P  | 野口大輝             | 217P°                      |
| 伊藤憲哉       | 330P°                               | 後藤頌太       | 104P°                     | 高田彰二       | 122P  | 野口博司             | 214P                       |
| 糸賀響        | 321P                                | 後藤信一       | 209P                      | 高橋和義       | 128P°, 216P                                       | 野口瑤              | 321P, 335P                 |
| 岩澤全規       | 140P                                | 後藤信哉       | 209P                      | 高橋可昌       | 131P, 201P,<br>231P                               | 野田展生             | 238P                       |
| 氏家かれん      | 126P                                | 後藤晋        | 306P                      | 瀧真清        | 207P  | 野村昴太郎            | 140P°, 234P                |
| 白井颯馬       | 103P                                | 小林千草       | 322P                      | 宅間正則       | 131P, 201P,<br>231P                               | <b>【は】</b>       |                            |
| 内丸忠文       | 338P                                | 小林祐生       | 115P°, 213P               | 田口新平       | 237P°   | 林由起子             | 335P                       |
| 畝山多加志      | 210P                                | 小山暁        | 219P°                     | 竹多泰之       | 114P°   | 原田滉平             | 302P°                      |
| 浦谷浩輝       | 311P°                               | 児山弘昌       | 227P                      | 武市憲典       | 118P  | 原田昌吾             | 309P°                      |
| 浦野諒        | 204P, 236P                          | 小六隼平       | 307P°                     | 竹村和浩       | 108P  | Yoshihisa Harada | 221P                       |
| 遠藤克浩       | 308P°, 130P,<br>211P                | 小和口昌愛      | 229P°                     | 竹村俊晃       | 339P  | 原田龍一             | 304P                       |
|            |                                     | 近藤友美       | 310P°                     | 竹本健吾       | 215P°   | 原田隆平             | 109P, 125P,<br>232P, 332P° |
| 大隅理佐       | 116P°                               | <b>【さ】</b> |                           | 田島慶太       | 101P°   | 半田和也             | 136P                       |
| 大多和克紀      | 304P°                               | 齋藤賢一       | 131P, 231P                | 冨田博一       | 329P  | 肥喜里志門            | 129P°                      |
| 大戸達彦       | 329P°                               | 齋藤賢一       | 201P                      | 田中泉利       | 111P°   | 林秀行              | 132P                       |
| 岡崎進        | 204P, 236P,<br>315P, 326P           | 齋藤健人       | 112P°                     | 田中秀樹       | 224P, 237P,<br>240P                               | 平川和明             | 234P°                      |
|            |                                     | 阪口敦哉       | 313P°                     | 田中浩揮       | 126P  | 平田雅典             | 240P°                      |
| 岡島俊英       | 132P                                | 坂本昇一       | 220P                      | 田中裕貴       | 305P°   | 平塚将起             | 120P                       |
| 岡田清志郎      | 123P°                               | 佐々木岳彦      | 310P                      | 谷口鷹        | 239P°   | 深尾浩次             | 219P                       |
| 岡本隆一       | 206P                                | 佐相剛史       | 228P                      | 谷田義明       | 137P°   | 福澤薫              | 126P                       |
| 尾川拓巳       | 203P°                               | 佐藤信一郎      | 138P°, 325P               | 爲本尚樹       | 214P°   | 藤井高志             | 203P                       |
| 沖田和也       | 113P°                               | 佐藤碧海       | 213P°                     | 垂水喜明       | 124P  | 藤本和士             | 204P, 236P,<br>315P        |
| 奥岳人        | 337P°                               | 佐藤知広       | 131P, 201P,<br>231P       | 大門翔太       | 312P°   | 古本祥三             | 304P                       |
| 奥野将成       | 329P                                | 佐藤博之       | 137P                      | 辻之上弘晃      | 301P°   | 本多一彦             | 340P°                      |
| 奥脇弘次       | 126P°                               | 佐藤洋平       | 101P, 303P                | 土屋佑太       | 225P°   | <b>【ま】</b>       |                            |
| 小野純一       | 225P, 339P°                         | 澤井源太郎      | 103P°                     | 土屋裕大朗      | 126P  | 牧野淳一郎            | 140P                       |
| 小野祐為       | 133P°                               | 澤田啓介       | 124P°                     | 都築誠二       | 338P°   | 増渕雄一             | 210P                       |
| <b>【か】</b> |                                     | 志賀正茂       | 317P°                     | 弦巻周平       | 236P  | 松井一真             | 318P°                      |
| 柿原唯人       | 227P°                               | 志賀基之       | 310P                      | 弦巻周平       | 204P°   | 松岡諒              | 222P°                      |
| 笠原健人       | 106P, 113P,<br>235P°, 322P          |            |                           | 寺井雄亮       | 131P°   |                  |                            |



松倉里紗	207P°, 304P	村川武志	132P	山田寛尚	335P	305P
松永茂樹	218P°	村島隆浩	134P°	山本詠士	101P, 120P, 123P, 133P, 303P	Arash Nikoubashman 115P
松林伸幸	102P, 104P, 106P, 111P, 113P, 116P, 129P, 135P, 136P, 215P, 235P, 312P, 313P, 319P, 323P, 324P, 333P	村田隆	122P°	山本隆	219P	Cheng Tan 322P
		望月祐志	126P	山本博輝	102P°	Chang Yong Lik 310P
		森岡俊貴	311P	湯原大輔	308P	Deboprasad Talukdar 103P
		森河良太	321P, 335P	横井駿	314P°	Gregory C. Rutledge 219P
		森貴治	238P°	吉川武司	311P	Hari O. S. Yadav 309P
		森田陸離	109P, 232P°	吉森匠	117P°	Jaewoon Jung 322P°
		【や】		米谷佳晃	331P°	Mark Sansom 123P
松本正和	224P, 237P, 240P	矢ヶ崎琢磨	224P, 237P, 240P	米持悦生	126P	Michael Feig 322P
松本充弘	205P, 223P, 230P, 233P, 330P, 334P, 337P	安井正人	101P	【ら】		Paul Brumby 229P
		泰岡顕治	119P, 120P, 123P, 130P, 133P, 211P, 229P, 234P, 239P, 308P	羅啓崙	230P°	Roman V. Krems 208P
的場一晃	338P			李海麗	223P°	Tran Duy 107P, 203P
三浦伸一	105P, 117P, 208P, 212P	保田拓範	109P°	李響	201P°	Tran Phuoc Duy 108P
三浦俊次	120P°	八十島亘宏	323P°	LIYUXIN	334P°	湯之也 315P
水野英如	104P, 312P	柳野賀緒梨	202P°	Lukman Hakim	324P°	
光武亜代理	217P, 314P	矢野正樹	224P°	Le Nhu MinhTue	221P°	
満田祐樹	327P°	山口孝太	332P	Le Van Sang	221P	
三橋弘美	321P°	山崎 久嗣	211P	【わ】		
宮川毅	335P	Kosuke Yamazoe	221P	鷲津仁志	103P, 135P, 221P, 222P	
三宅雅輝	110P°			渡辺豪	135P	
宮崎裕介	305P	山田悠斗	130P°, 211P°	渡辺宙志	318P	
宮澤佳希	108P°	山田篤志	127P°	【その他】		
宮下尚之	202P, 207P, 304P	山田一雄	116P, 136P, 313P, 333P°	Akhil Pratap Singh		(記号 ° は発表者となっ ている講演に記されてい ます。)
麦田大悟	121P°	山田周平	329P			