

第36回分子シミュレーション討論会 講演プログラム

(2022年10月11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, 日本コンピュータ化学会, 溶液化学研究会, 日本薬学会, 日本生物物理学会,
化学工学会, 高分子学会, 分子科学会, 日本物理学会, 応用物理学会
協賛企業 : 株式会社 JSOL, 株式会社クロスアビリティ, リアルコンピューティング株式会社,
株式会社メトロ, ビジュアルテクノロジー株式会社,
一般財団法人高度情報科学技術研究機構
会期 : 2022年12月5日(月)~2022年12月7日(水)
会場 : 東京工業大学 大岡山西9号館デジタル多目的ホール等
HP : <https://sympo.mol-sim.jp/mssj36/>

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 12月5日(月)

13:30-14:00 開場, 受付

14:00-14:05 開会の辞 会長 泰岡顕治(慶応大)

— 午後の部 —

14:05-15:45 口頭発表 A

座長: 村島隆浩(東北大理)

101L 大規模系における温度グリーン関数の高速
計算法

(株式会社メトロ) ○対比地剛, 中村賢

102L 発表取消

103L 新規動的モンテカルロ法の多粒子系への展
開—溶解拡散モデルの検証

(東大院新領域) ○岡崎進

104L 重み付きアンサンブル法の応用と最適化に
ついて

(日医大¹, AMED², 大阪公大³) ○藤崎弘
士^{1,2}, 森次圭³

16:00-17:30 口頭発表 B

座長: 藤崎弘士(日医大)

105S 二酸化炭素-水界面張力の温度依存性: 分子
動力学シミュレーションによる検討

(産総研地質¹, 産総研 CDFMat²) ○志賀
正茂¹, 森下徹也², 徂徠正夫¹

106S 表面修飾無機固体/高分子界面のナノス
ケール構造と親和性に関する分子動力学解
析

(東北大院工¹, 東北大 NICHe², 東北大流
体研³) ○斎藤高雅¹, 久保正樹¹, 塚田隆夫²,
庄司衛太¹, 菊川豪太³, Donatas Surblys³

107S 二軸伸長流動下における多環状鎖のトポロ
ジカル転移

(東北大理) ○村島隆浩

108S 分子動力学シミュレーションによる超長鎖
脂肪酸の構造解析

(金沢大理工¹, 国立国際医療研究センター脂
質生命科学研究所², 東大医³, 東大物性研⁴)
○川口一朋¹, 長尾秀実¹, 進藤英雄^{2,3}, 野口
博司⁴

- 109S プロトン化自由エネルギーの第一原理計算とエポキシ系接着剤の水分弱化学予測 (名工大) ○尾形修司, 浦長瀬正幸
- 110S 第一原理計算を用いた力学的変形によるエポキシ樹脂破壊の pH 依存性の評価 (名工大工) ○浦長瀬正幸, 尾形修司

2 日目 12月6日(火)

8:30-9:00 開場, 受付

— 午前の部 —

9:00-10:55 口頭発表 C

座長: 水野英如 (東大院総合文化)

- 201L エンベロープ型ウイルス粒子の粗視化シミュレーション: B 型肝炎ウイルスのビリオン構造とエンベロープ膜 (岡大 RIIS) ○浦野諒, 篠田渉
- 202S 抗菌ペプチドがもつ膜選択性の分子論的研究 (名大院工¹, 岡山大基礎研²) ○川端一正¹, 宮崎裕介², 山田哲平², 篠田渉²
- 203S 量子分子動力学法による SARS-CoV-2 メインプロテアーゼ阻害薬の反応機構の解明 (早大理工総研¹, 早大先進理工², 産総研生命工学³) ○小野純一¹, 小清水初花², 福西快文³, 中井浩巳^{1,2}
- 204S 酵素反応における反応ダイナミクスと反応座標の解明 (九大先導研¹, 九大総理工²) ○森俊文^{1,2}
- 205S Replica permutation with solute tempering 法を用いたポリフェノールの A β 凝集阻害過程の探索 (総研大¹, 分子研², ExCELLS³) ○福原大輝^{1,2}, 伊藤暁^{1,2,3}, 奥村久士^{1,2,3}
- 206S 分子動力学シミュレーションと実験による A β 40 と A β 42 の凝集に関する研究 (分子研¹, ExCELLS², 総研大³, 名市大薬⁴) ○伊藤暁^{1,2,3}, 矢木真穂^{1,2,3,4}, 加藤晃一^{1,2,3,4}, 奥村久士^{1,2,3}
- 207S 反応経路ネットワーク解析を利用した Fentanyl とその類似体の膜透過シミュレーション (大阪公大理¹, 府大 RIMED²) ○満田祐樹^{1,2}, 麻田俊雄^{1,2}

11:10-12:20 口頭発表 D

座長: 森俊文 (九大先導研)

- 208L ガラスが有する構造秩序の機械学習 (豊田中研¹, 名大理²) ○大山倫弘¹, 小山志穂里¹, 川崎猛史²
- 209S 単分散ソフトコア粒子からなるガラスの結晶化動力学 (東大総合文化) ○高羽悠樹, 池田昌司
- 210S ガラスの限界安定性: ガラスの脆さを物理学で理解してみよう (東大院総合文化) ○水野英如
- 211S グラフニューラルネットワークによる静的構造からのガラス動力学の深層学習予測 (東大情基セ¹, 東大情報理工²) ○芝隼人¹, 華井雅俊¹, 鈴木豊太郎^{1,2}, 下川辺隆史¹

— 昼食 12:20-13:50 —

— 午後の部 —

13:50-14:40 招待講演 I

座長: 古田忠臣 (東工大生命理工)

- 212IL X 線自由電子レーザーによる分子レベルイメージングの実現に向けて (JASRI) 城地保昌

14:55-15:45 招待講演 II

座長: 古田忠臣 (東工大生命理工)

- 213IL 分子モーターの動きをみる、動きをつくる (分子研) 飯野亮太

16:00-16:35 受賞講演

座長: 松本充弘 (京大工)

214AL 2022 年受賞講演

16:35-17:15 学会総会

3日目 12月7日(水)

8:30-9:00 開場, 受付

— 午前の部 —

9:00-10:45 口頭発表 E

座長: 米谷佳晃 (量研関西)

- 301S 不均一性のある完全非対称単純排他過程における非自己平均性について
(東理大理工¹, 慶大理工²) ○堺一世¹, 秋元琢磨¹, 齊藤圭司²
- 302S 擬原子基底線形結合法とベリー位相法に基づく一様電場下での第一原理計算手法の開発
(金沢大 NanoMaRi) ○山口直也, 石井史之
- 303S 確率熱力学と情報熱力学を利用した微小サイズ溶液の混合自由エネルギー決定法と古典多体系のギブスパラドックス
(茨城大理) ○吉田旭, 中川尚子
- 304S 静電相互作用の計算コストを抑えた自由エネルギー摂動法の開発
(理研・BDR¹, 理研・R-CCS², 理研・CPR³) ○尾嶋拓¹, 杉田有治^{1,2,3}
- 305S 定圧分子動力学法による水の3重点
(法政大生命) ○片岡洋右
- 306S アクティブマターと相分離: 大規模粒子シミュレーションの活用
(慶大理工¹, 理研 BDR², 理研 iTHEMS³) ○中野裕義¹, 足立景介^{2,3}
- 307S 分子動力学シミュレーションで探るモノマー間相互作用: JKR 理論の拡張
(東大理¹, 国立天文台 CfCA², 東北大理³) ○吉田雄城¹, 小久保英一郎², 田中秀和³

11:00-12:15 口頭発表 F

座長: 古石貴裕 (福井大工)

- 308S 表面処理を施した酸化ナノ界面における液体粘性挙動に関する分子動力学シミュレーション
(岡山大院自然) ○森隼平, 三澤賢明, 鶴田健二
- 309S 長距離静電相互作用の計算法: 液体水と格子スピン系の比較
(量研関西) ○米谷佳晃

310S Spatial-Decomposition Analysis of Electrical Conductivity in Ternary System of Ionic Liquids

(Department of Chemistry, Brawijaya University¹, 大阪大学大学院基礎工学研究科²)
○Lukman Hakim¹, 松林伸幸²

311S 分子動力学とスケーリング則を併用したエンジンオイル動粘度予測

(トヨタ自動車株式会社) ○神田英慈, 植松裕太, 関藤武士, 前川諒介

312S Achievements in Lubrication assisted by additives: from a molecular simulation perspective

(Graduate School of Information Science, University of Hyogo) ○Kosar Khajeh

— 昼食 12:15-13:45 —

— 午後の部 —

13:45-15:15 口頭発表 G

座長: 松林伸幸 (阪大院基礎工)

- 313S Implementation of Residue Level Coarse-Grained Models in GENESIS for Large-Scale Molecular Dynamics Simulations
(RIKEN-CCS¹, RIKEN-CPR², Kyoto Univ³, RIKEN-BDR⁴) ○Cheng Tan¹, Jaewoon Jung^{1,2}, Chigusa Kobayashi¹, Diego Ugarte La Torre¹, Shoji Takada³, Yuji Sugita^{1,2,4}
- 314S VR-MD: スマホ VR で実施する分子動力学計算
(豊田中研¹, 東京大学²) ○吉川信明¹, 松田健郎¹, 梶田晴司¹, 佐藤宗太², 谷川智洋²
- 315S 機械学習力場を用いた自由エネルギー解析: アルミナ CVD の初期反応解析
(Kyungpook National University) ○中田浩弥, Cheol Ho Choi
- 316S tree 法を用いた大規模系水滴の固体表面への衝突シミュレーション
(福井大工¹, 神戸大理²) ○古石貴裕¹, 野村昂太郎²
- 317S 原子の特徴量に注目した、化学における人と機械の学習の違いについての理論的考察
(東大院総文) ○中田倅暉, 横川大輔
- 318S 機械学習型ポテンシャルの SiC への適用に関する研究: 分子動力学による転位の再現
(関西大院¹, 関西大², 産総研³) ○森口詢也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

15:15-15:20 閉会の辞

ポスター発表

- 1001P** Adaptively biased molecular dynamics (ABMD) 法の GENESIS プログラムパッケージへの導入によるマルチスケールシミュレーションにおける自由エネルギー計算
(理研・杉田研) ○伊東真吾
- 1002P** 分子動力学法による窒素修飾カーボン界面のアイオノマの構造解析
(豊田中研) ○南沙央理, 吉川信明, 吉宗航, 米山弘亮
- 1003P** Enhanced sampling における構造妥当性の評価は外部バイアスを適切に制御する
(筑波大理工情報生命¹, 筑波大計セ²) ○保田拓範¹, 森田陸離², 重田育照², 原田隆平²
- 1004P** 共重合体高分子の結晶化の分子吸収性への影響についての自由エネルギー解析
(阪大院基工) ○小嶋秀和, 松林伸幸
- 1005P** 量子計算による Si 半導体界面系の物性と輸送特性評価
(京大工) ○大野海, 外山幸二郎, 李海麗, 高原芳弥, 松本充弘
- 1006P** 分子回転子付き三脚分子薄膜の熱伝導
(産総研) ○唐澤直之, 森下徹也, 土田英二, 中村恒夫
- 1007P** RISM 型積分方程式を用いた水+アルコール混合液体の相平衡と混合熱力学量の研究
(名大院工¹, 熊本大院薬², 名大院情報³) ○山口毅¹, 鄭誠虎², 吉田紀生³
- 1008P** 深層学習による液体構造からの運動性予測
(阪大院基工) ○矢野健太郎, 後藤頌太, 金鋼, 松林伸幸
- 1009P** 膜の区画化が分子の拡散性に与える影響
(慶大理工¹, 東理大理工²) ○坂本健¹, 秋元琢磨², 山本詠士¹
- 1010P** FlhAc の高速原子間顕微鏡画像の解析
(東工大生命理工¹, 中央大理工², 金沢大理工³, 大阪大理⁴, 大阪大生命機能⁵) ○大沢陸輝¹, 寺原直矢², 古寺哲幸³, 今田勝巳⁴, 南野徹⁵, 北尾彰朗¹
- 1011P** 局所秩序変数によるクラスター統計とパーコレーション転移の観察
(産総研) ○高橋和義
- 1012P** 全原子モデルによるセルロースナノファイバーのせん断挙動と強度解析
(関西大院¹, 関西大²) ○三宅伸¹, 齋藤賢一², 宅間正則², 高橋可昌², 佐藤知広²
- 1013P** OCTA を用いたバイオ系シミュレーションのモデリング技術構築
(株)JSOL) ○新田浩也, 小沢拓
- 1014P** ナノ厚さにおける球状潤滑油分子の層構造とせん断粘度の関係
(慶大理工) ○小林祐生, 荒井規允, 泰岡顕治
- 1015P** イオン-中性粒子間ポテンシャルの開発とスパッタリングへの適用
(総研大核¹, NIFS²) ○戸田悠斗¹, 高山有道^{1,2}, 伊藤篤史^{1,2}
- 1016P** 生体適合性ポリマー近傍での水分子の動的挙動
(東レリサーチセンター) ○仲啓志, 中田克, 辻淳一
- 1017P** ポリマー/水界面に吸着するペプチドのエネルギー論的研究
(豊田高専情報工¹, 阪大院基礎工²) ○八十島巨宏¹, 松林伸幸²
- 1018P** 天然変性タンパク質の構造の違いが非膜性構造体内部における分子の拡散性に与える影響
(慶大理工) ○渡辺風雅, 山本詠士
- 1019P** アルコール水溶液表面における分子構造の解明
(富山大院理工) ○廣瀬真由, 石山達也
- 1020P** 高分子表面のからみあい構造に関する分子シミュレーション研究
(富山大院理工) ○京田奈津実, 石山達也
- 1021P** 高分子官能基に影響を受けた水分子ダイナミクスに関する分類方法の提案
(阪大院基礎工) ○四方志, 菊辻卓真, 八十島巨宏, 金鋼, 松林伸幸
- 1022P** 両親媒性分子の凝集体形成駆動力の分子シミュレーション解析
(岡山大自然¹, 岡山大基礎研²) ○平良碧生¹, 墨智成², 甲賀研一郎²
- 1023P** 分子動力学法を用いたシクロデキストリンの薬物分子包接現象の研究
(慶大院理工¹, 慶大理工²) ○酒井星河¹, 平野秀典², 小林祐生², 荒井規允²
- 1024P** 高分子材料自動探索技術による背反特性を両立した新材料の開発
(昭和電工マテリアルズ (株)¹, 昭和電工 (株)²) ○山崎大¹, 石黒良知¹, 星野稔¹, 花岡恭平¹, 谷本昭敏¹, 佐藤来¹, 大和亮介¹, 宮貴紀¹, 宮坂昌宏¹, 南拓也²

- 1025P** How different glycopeptide affects the binding of glycoprotein B to paired immunoglobulin-like type 2 receptor (東工大生命理工) ○Ting-Yi Chu, Duy Tran, Akio Kitao
- 1026P** 電解質水溶液中の核沸騰現象のミクロスケール解析 (京都大・工) ○黄勇勝, 松本充弘
- 1027P** 線形応答理論を応用した効率的な分子動力学シミュレーションに基づく自由エネルギー解析 (東工大生命) ○生澤真司, 北尾彰朗
- 1028P** 一様せん断流におけるひも状ミセルの配向：高分子鎖との比較 (阪大基礎工) ○小井手祐介, 後藤晋
- 1029P** 散逸粒子動力学法を使った界面活性剤の粗視化分子シミュレーション (慶大理工) ○松元泰治
- 1030P** 半導体シリコン表面への酸化チタン成膜過程の量子計算 (京大・工) ○外山幸二郎, 李海麗, 松本充弘
- 1031P** 多体散逸粒子動力学シミュレーションによる界面活性剤分子を用いたアクティブマター制御 (慶大院理工¹, 慶大理工²) ○佐々木謙¹, 上野和輝¹, 小島知也¹, 伴野太祐², 荒井規允²
- 1032P** 小分子の膜透過現象を記述する動力学理論の開発 (阪大院基礎工) ○松原優弥, 昌山廉, 笠原健人, 松林伸幸
- 1033P** 分子シミュレーションと機械学習を組み合わせた臨界充填パラメータによる両親媒性分子の自己組織化形態予測 (慶大理工¹, 慶大院理工²) ○石渡悠幹¹, 横山貴洗², 伴野太祐¹, 荒井規允¹
- 1034P** 電荷配列に依存する IDP の相分離に関する MD シミュレーション (青学大理) ○小山哲
- 1035P** 水と自由エネルギーを高速に計算する深層学習モデルの開発 (東北大院工) ○福島悠朔, 吉留崇
- 1036P** 荷電コロイド分散系のレオロジーに対するスケーリング (大分大理工) ○岩下拓哉
- 1037P** Boltzmann 輸送方程式に基づく固体内エネルギー輸送の解析 (京都大工) ○高原芳弥, 松本充弘
- 1038P** GCMC法による各種分子の親水性評価の試み (京大工) ○佐藤萌香, 岸本文太, 松本充弘
- 1039P** 高汎化な機械学習モデルを用いた粗視化力場による長鎖分子の構造予測 (慶大理工) ○齊藤優, 遠藤克浩, 泰岡顕治, 山本詠士
- 1040P** Free-energy analysis of the effects of ATP and urea on the peptide aggregation through all-atom molecular dynamics simulation (阪大院基礎工) ○Do Tuan Minh, 松林伸幸
- 1041P** 加速分子動力学計算とネットワーク解析ツールを用いた反応経路解析 (豊田中研) ○平井宏俊, 陣内亮典
- 1042P** SARS-CoV-2 のスパイクタンパク質と CR3022 抗体の理論的研究 (金大数物) ○竹田尋, 鞍橋彩早, 川口一朋, 長尾秀実
- 1043P** 脂質供給によるベシクル変形と分裂 (山口大院・創成科学¹, 東北大院・理²) ○浦上直人¹, 佐久間由香², 今井正幸²
- 1044P** せん断流れ場における高分子流体の熱伝導係数の異方性についての分子動力学研究 (兵県大・ダイセル¹, 兵県大²) ○小田浩太郎¹, 安田修悟²
- 1045P** 高分子中に不均一分布した水分子に対する OH 伸縮振動モードの空間分割解析 (兵庫県大院情報¹, 静岡大工², JASRI³) ○石井良樹¹, 鳥居肇², 池本夕佳³, 鷺津仁志¹
- 1046P** chain-increment 法を用いた二成分高分子溶融系の相溶/非相溶性判定のための自由エネルギー計算 (阪大院基礎工) ○山田一雄, 松林伸幸
- 1047P** Newtonian Event-Chain モンテカルロ法の平衡緩和 - 高密度 2 次元剛体球系で生じるホッピング鎖の拡散特性 - (名工大院工) ○麦田大悟, 磯部雅晴
- 1048P** オレキシン 2 受容体の活性化における動的性質と中間状態の計算論的洞察 (明治大・院・理工) ○横井駿, 光武亜代理
- 1049P** ミクロゲル粒子系に関する分子動力学シミュレーション (岐阜大自然科学技術¹, 岐阜大工²) ○小川凌央¹, 寺尾貴道²
- 1050P** 電場を用いた高 Tg 高分子の複素誘電率予測 (東レ) ○北畑雅弘, 茂本勇

- 1051P** 光活性イエロータンパク質の光異性化過程に対する量子的分子動力学シミュレーション
(早大先進理工¹, 早大理工総研², 東邦大薬³)
○石田賢亮¹, 西村好史², 吉川武司³, 中井浩巳^{1,2}
- 1052P** ヤヌスナノ粒子を用いた生体分子センサの理論設計のための粗視化分子シミュレーション
(慶大院理工¹, 慶大理工²) 佐藤碧海¹, ○江刺家恵子², 山本詠士², 斎木敏治², 荒井規允²
- 1053P** ガン関連タンパク質 MDM2 のリガンド結合能に対する共溶媒添加効果
(阪大基礎工) ○古宮直樹, 笠原健人, 松林伸幸
- 1054P** 相転移点の上下における液晶高分子の全原子 MD 解析
(阪大院基礎工) ○坂本充優, 小嶋秀和, 矢ヶ崎琢磨, 松林伸幸
- 1055P** 水分子の構造を基にした共溶媒分子添加によるインスリン解離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
- 1056P** セルロースのポテンシャルパラメータ開発を目指した分子シミュレーション研究
(富山大院理工) ○中村友香, 石山達也
- 1057P** 粗視化分子シミュレーションによるクレンジング剤の自己組織化形態とその機能性の関係
(慶大院理工¹, 株)FANCL², 慶大理工³) ○横山貴洸¹, 三澤秀樹², 中武良一², 荒井規允³
- 1058P** 1-プロパノール水溶液における疎水性相互作用によるクラスター形成とその特異性
(岡山大院自然¹, 岡山大基礎研²) ○内藤秀文¹, 墨智成², 甲賀研一郎²
- 1059P** 外部電場下における多層空孔グラフェン内の水の構造
(慶應大理工) ○小野祐為, 泰岡顕治
- 1060P** 強誘電体 BaTiO₃ における 90° ドメイン壁移動の分子動力学シミュレーション
(名工大工¹, FAU Erlangen-Nurnberg²) ○吾妻真光¹, 尾形修司¹, 小林亮¹, 浦長瀬正幸¹, 都築貴寛¹, 下井聖也¹, Frank Wendler², Dilshod Durdiev²
- 1061P** エネルギー座標上の新規拡散方程式理論を用いた溶媒和構造緩和過程の記述
(阪大院基礎工) ○沖田和也, 笠原健人, 松林伸幸
- 1062P** How partial agonist ligands induce the conformational changes of Adenosine A2a receptor
(東京工業大学・生命理工学院) ○Tran Duy, Akio Kitao
- 1063P** PAN 分子の化学反応に関する分子動力学シミュレーション
(京大工) ○岸本文太
- 1064P** Boltzmann 統計下の液体 ⁴He の CMD シミュレーションによる量子ポリアモルフィズムと動的物性の解明
(奈良女子大院・人総) 辻本桃子, ○衣川健一
- 1065P** 記号回帰による「都合の良い」ポテンシャル関数の探索
(量研機構・量子生命) ○桜庭俊
- 1066P** 分子動力学と機械学習を組み合わせた低せん断速度における炭化水素および球状の潤滑剤におけるシェアニングの解析
(慶大理工¹, 仙台高専²) ○安田一希¹, 小林祐生¹, 遠藤克浩¹, 早川吉弘², 藤原和彦², 矢島邦昭², 荒井規允¹, 泰岡顕治¹
- 1067P** 温度勾配下におけるダンベル状分子の濃度分布の解析
(名大院工) ○大石達真, 石田崇人, 土肥侑也, 畝山多加志, 増淵雄一
- 1068P** 熱関連材料データベース (PropertiesDB Web) を活用した化学蓄熱材の探索
(産総研¹, 未利用熱技術組合², クロスアビリティ³) ○石田豊和^{1,2}, 須田幸子², 石村和也³
- 1069P** 分子動力学法を用いた有機系単分子膜に関する挙動解析
(兵庫県大院情報) ○小林健洋, 石井良樹, 岡本隆一, 鷲津仁志
- 1070P** 機械学習を用いた固体電解質中のリチウムイオンの運動の予測
(慶大理工¹, トヨタ自動車²) ○川田稜¹, 遠藤克浩¹, 山崎久嗣², 泰岡顕治¹
- 1071P** 環境依存の構造変化を取り込んだ粗視化タンパク質モデルの開発と脂質膜吸着現象への応用
(岡山大院自然¹, 岡山大基礎研²) ○山田哲平¹, 篠田涉²
- 1072P** 分子動力学計算による CLCF における F⁻イオン輸送機構の解析
(東北大工¹, IFS², FRIS³) ○仲村陽宏^{1,2}, 徳増崇^{1,2}, 馬淵拓哉^{2,3}

- 1073P** グラフニューラルネットワークを用いた水、氷、クラスレートハイドレートの新規構造分類手法
(慶大理工) ○石合智貴
- 1074P** DCDFTBMD と分子シミュレーションプログラムの接続：大規模量子的経路積分分子動力学計算への展開
(早大理工総研¹, 早大先進理工²) ○西村好史¹, 中井浩巳^{1,2}
- 1075P** 膜タンパク質 AQP4 を介した浸透圧格差による水分子透過のシミュレーション
(慶大理工) ○栗林直信, 平野秀典, 山本詠士, 泰岡顕治
- 1076P** 分子動力学シミュレーションによる ChR2 の陽イオン透過機構の解析
(慶大理工¹, KQCC²) ○菖蒲健太¹, 平野秀典¹, 渡邊宙志², 泰岡顕治¹
- 1077P** タンパク質-リガンド結合過程に対する混雑環境効果の理論的解析
(大阪大学院基礎工) ○笠原健人, 昌山廉, 沖田和也, 松林伸幸
- 1078P** ポリマー添加による分子量に応じたコロイド分散系の安定性
(岡山大院自然¹, 兵庫県大情報², 岡山大基礎研³, 長浜バイオ大⁴, 富山県大医工⁵) ○大坂佳弘¹, 岡本隆一², 墨智成³, 甲賀研一郎³, 今村比呂志⁴, 白井剛⁴, 磯貝泰弘⁵
- 1079P** DFT-MD シミュレーションによる不凍効果を示す分子のプロトン化起因メカニズム
(名工大工) ○生田凌也, 尾形修司, 浦長瀬正幸, 柴田哲男, 住井裕司
- 1080P** Deep Neural Network を用いた形からアミノ酸配列提案するプログラムの並列学習器モデルの考察
(近畿大院生物理工) ○岩野和哉, 清岡亮太, 宮下尚之
- 1081P** ペプチドの電子状態と分子進化系統樹
(日大理工) ○山中雅則
- 1082P** 水分解反応触媒における電子スピン共鳴シグナルの起源
(東大院工) ○西尾俊哉
- 1083P** Molecular Dynamics investigation of binding affinities between amino acid and taste receptor
(東工大生命理工) ○Hao Nguyen, Duy Tran, Akio Kitao
- 1084P** 分子動力学シミュレーションへの応用に向けた水の OH 伸縮の水素結合形成による波数シフトを記述するモデルの理論解析
(静岡大工) ○北村勇吉, 鳥居肇
- 1085P** The Effect of Tricaprylin-Water Interface on the Conformational Dynamics of *Candida antarctica* Lipase B
(東京工業大学生命理工学院生命理工学系¹, Department of Chemistry, Faculty of Science and Computer, University of Pertamina²) ○Tegar Wijaya^{1,2}, 北尾彰朗¹
- 1086P** 2成分コロイド分散系における相分離過程のブラウン動力学法による研究
(香川高専) ○岡田響, 木村祐人
- 1087P** タンパク質-共有結合薬間相互作用の計算科学的研究
(理研・BDR¹, 慶応大²) ○沖本憲明¹, 平野秀典², 藤田茂雄¹, 泰地真弘人¹
- 1088P** 分子動力学計算とネットワークグラフを用いた DNA 分解酵素における変異の影響の解析
(長崎大医歯薬) ○大滝大樹
- 1089P** SARS-CoV-2 メインプロテアーゼの新規共有結合阻害剤の開発に向けたハイブリッド型 in silico 創薬
(早大先進理工¹, 早大理工総研², 産総研生命工学³) ○小清水初花¹, 小野純一², 福西快文³, 中井浩巳^{1,2}
- 1090P** 分子動力学法を用いた界面活性剤の界面揺らぎの解析
(慶大理工) ○菊地駿太, 渡辺宙志
- 1091P** 深層学習を用いたタンパク質ドメインの予測研究
(東北大・院工¹, 横浜市大・生命医科学²) ○佐藤連太¹, 浴本亨², 吉留崇¹
- 1092P** 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相挙動～分子形状の影響～
(慶大院理工¹, 慶大理工²) ○山田一威¹, 荒井規允²
- 1093P** マイクロスケール発電のための摩擦帯電材料の理論的検討
(京大・工) ○山崎滉太, 岸本文太, 松本充弘
- 1094P** 生体分子粗視化モデルとアンブレラサンプリングシミュレーションを用いたタンパク質・RNA 複合体における自由エネルギー計算
(神戸大院・シス情) ○森義治, 田中成典

- 11095P** 量子化学計算と分子動力学計算を使ったエポキシ樹脂の架橋ネットワーク構造生成過程における反応シミュレーションの開発 (東北大院理¹, 東北大流体研²) 岸本直樹¹, ○席穎梶¹, 福澤宏宣¹, 菊川豪太²
- 11096P** 分子動力学法によるカーボンナノチューブ内の水分子の構造が熱伝導特性に与える影響 (慶大理工) ○今村駿, 小林祐生, 山本詠士
- 11097P** 海藻由来の紫外線防御物質マイコスポリン様アミノ酸における脱励起過程の非断熱分子シミュレーション (山口理科大薬) ○畠山允
- 11098P** 量子計算による MoS₂ 単層薄膜の物性評価 (京大工) ○渡部友貴, 外山幸二郎, 松本充弘
- 11099P** 疎水性相互作用と溶解度に対する 2 つの塩添加効果の関係について (岡山大院自然研¹, 兵庫県大院情報研², 岡山大基礎研³) ○甲藤寛¹, 岡本隆一², 墨智成³, 甲賀研一郎³
- 11100P** Acceleration of gREST simulations of large biological systems on massively parallel computers (RIKEN R-CCS¹, RIKEN CPR², RIKEN BDR³) ○Jaewoon Jung^{1,2}, 小林千草¹, 杉田有治^{1,2,3}
- 11101P** フォルステライトの間隙に存在する水の構造とダイナミクス (明治大理工) ○小林優大, 深澤倫子
- 11102P** タンパク質及びその他量体の共溶媒添加に伴う安定性変化のエネルギー解析 (阪大基礎工) ○濱田裕加, 笠原健人, 松林伸幸
- 11103P** ポリマーに対する小分子の溶解の MD 解析 (阪大院基礎工) ○向江謙心, 小嶋秀和, 松林伸幸
- 11104P** タンパク質へのフォトクロミックリガンドの結合に関する自由エネルギー解析 (阪大院基礎工¹, 東北大多元研²) ○昌山廉¹, 笠原健人¹, 小和田俊行², 松井敏高², 水上進², 松林伸幸¹
- 11105P** γ 切断酵素と APP の結合過程におけるコレステロールの役割 (近大生物理工) ○南知香, 松倉里紗, 宮下尚之
- 11106P** スルホラン系濃厚電解液における Li イオン伝導における溶媒効果 (名大院工¹, 横国大先端科学², 横国大院工³, 岡山大基礎研⁴) ○池田周平¹, 都築誠二², 上野和英³, 渡邊正義², 篠田涉⁴
- 11107P** 分子動力学計算による脂質ナノ粒子を用いた核酸エンドソーム脱出機構の解明 (名大院工¹, 岡山大基礎研²) ○柴田果奈¹, Akhil Pratap Singh¹, 宮崎裕介², 篠田涉²
- 11108P** 環状高分子溶融体の拡散における動的不均一性 (阪大院基礎工) ○後藤頌太, 金鋼, 松林伸幸
- 11109P** Li イオン電池における SEI 膜の力学的特性に対する電極電位依存性 (名大院情報¹, 名大価値創造研究センター²) ○近藤宙暉¹, 川瀬智元¹, Sakaki Nisrine¹, 田中佑一¹, 長岡正隆^{1,2}
- 11110P** ダンベル高分子のトポロジカルな拘束と遅いダイナミクス (青学大理工) ○齊藤雅也, 齋藤拓也, 坂上貴洋
- 11111P** 分子動力学シミュレーションを用いた 2 成分ハイドロゲルの全原子解析 (阪大院基礎工) ○向井陵, 山田一雄, 松林伸幸
- 11112P** マグネシウム単結晶のナノ伸線における塑性変形と欠陥生成の MD 解析 (関西大院¹, 関西大²) ○壬生慎一郎¹, 齋藤賢一², 宅間正則², 高橋可昌², 佐藤知広²
- 11113P** ハイドレートの MD-FEM による均質化構造解析 (慶大理工¹, 東北大理²) ○寺島悠登¹, Paul Brumby¹, 村島隆浩², 村松真由¹
- 11114P** アスピリン結晶界面における吸着安定性のエネルギー論的解析 (阪大院基礎工) ○松村徹平, 笠原健人, 松林伸幸
- 11115P** 全原子分子動力学シミュレーションによる液体の自己拡散係数・粘性係数の予測性の評価 (マルホ¹, 東大新領域², 福岡大理³, 岡大異分野⁴) ○馬場廣海^{1,2}, 永井哲郎^{2,3}, 浦野諒⁴, 岡崎進²
- 11116P** GPU 版配置選択定 pH (CS-CpH) 法の開発とその応用 (名大院情¹, 静岡大工², 名大価値創造研究センター³) ○稲垣風花¹, 北村勇吉², 四谷悠¹, 長岡正隆^{1,3}