

第37回分子シミュレーション討論会 講演プログラム

(2023年11月20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, 溶液化学研究会, 化学工学会, 日本コンピュータ化学会, 日本物理学会
応用物理学会, 分子科学会, 高分子学会, 日本薬学会, 日本生物物理学会
協賛企業 : 株式会社クロスアビリティ, 株式会社 JSOL, リアルコンピューティング株式会社, 株式会社メトロ,
株式会社 HPC テック, 株式会社エルザ ジャパン, GDEP ソリューションズ株式会社
会期 : 2023年12月4日(月)~2023年12月6日(水)
会場 : 福井県県民ホール (AOSSA 8階) 福井駅東口 徒歩1分
HP : <https://sympo.mol-sim.jp/mssj37/>

講演番号1桁目 : 発表日

講演番号2,3桁目: 通し番号

講演記号 : 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4日(月)

9:00-9:55 開場, 受付

9:55-10:00 開会の辞 会長 泰岡顕治(慶應大)

— 午前の部 —

10:00-11:10 口頭発表 A

座長: 三浦伸一(金沢大)

101S アンブレラ積分法を利用した多次元アンブレラサンプリングのパラメーター自動最適化手法の開発
(大阪公大理¹, 大阪公大 RIMED²) ○満田祐樹^{1,2}, 麻田俊雄^{1,2}

102S 分子シミュレーションにおける自由エネルギー計算手法の再重プロセスの高次内挿による改良
(東大理¹, 東大物性研², 九大情基セ³) ○富山翔平^{1,2}, 樋口祐次³, 野口博司²

103L 重み付きアンサンブル法で得られたパスアンサンブルから集団座標を抜き出す
(日医大¹, 大阪公立大²) ○藤崎弘士¹, 森次圭²

104S Spectral Map: Embedding Slow Kinetics in Collective Variables
(Nicolaus Copernicus University) ○Rydzewski Jakub

— 休憩 11:10-11:20 —

11:20-12:20 ポスター発表 101P-180P (奇数)
(講演タイトルはプログラムの末尾に記載)

— 昼食 12:20-13:20 —

13:20-14:20 ポスター発表 101P-180P (偶数)
(講演タイトルはプログラムの末尾に記載)

— 休憩 14:20-14:30 —

— 午前の部 —

14:30-15:55 口頭発表 B

座長: 志賀基之(原子力機構)

105S 双極子スピンアイスの長距離相互作用と相転移
(105P) (量研関西) ○米谷佳晃

- 106S 定エネルギー法分子動力学によるアルゴンの3重点
(法政大生命) ○片岡洋右
- 107L 浸透第2ビリアル係数の理論的研究: イオン特異的効果および溶質サイズ依存性
(岡山大基礎研¹, 兵庫県大²) 甲藤寛之¹, 内藤秀文¹, 岡本隆一², 墨智成¹, ○甲賀研一郎¹
- 108S 分子動力学シミュレーションによる気泡性液体中の音波伝播の解析
(東北大金研) ○浅野優太, 久保百司
- 109S 水の回転拡散に対する第二水和圏の重要性
(九大情セ¹, 東理大理²) ○樋口祐次¹, 菱田真史²

— 休憩 15:55-16:10 —

16:10-17:35 口頭発表 C

座長: 山口毅 (名古屋大)

- 110S 光電場+古典電子分子動力学法を用いた液相に対する非共鳴表面増強ラマン分光のシミュレーション
(防衛大・応化) ○山田篤志
- 111S Self-learning path integral Monte Carlo methods for accurate modelling of water
(Center for Computational Science and e-Systems, JAEA) ○Bo Thomsen, 志賀基之
- 112L 経路積分理論に基づく半古典動力学
(原子力機構) ○志賀基之
- 113S メタン分子をドーブしたパラ水素クラスターの構造と超流動性の発現機構
(金沢大数物) ○三浦伸一
- 114S (251P) Solvent Effects on Polarizability in Condensed Phases
(R&D Center, Mitsui Chemicals, Inc.)
○Moorthi Krzysztof

2日目 12月5日(火)

9:00-10:45 口頭発表 D

座長: 齋藤大明 (北陸大)

- 201S 秩序相/非秩序相に相分離した細胞膜において拡散するタンパク質のメゾスケール計算
(慶應大理工) ○山本詠士

- 202S (222P) 粗視化力場 SPICA におけるタンパク質モデルの改良

(岡山大院自然¹, 岡山大基礎研², 名古屋大院工³, フリブール大⁴) ○山田哲平¹, 宮崎裕介², 原田昌吾³, Ashutosh Kumar⁴, Stefano Vanni⁴, 篠田涉²

- 203S 生体膜表面に流れを発生させる非平衡分子動力学シミュレーション手法

(総研大¹, 分子研², ExCELLS³) ○大多和克紀^{1,2}, 伊藤暁^{1,2,3}, 奥村久士^{1,2,3}

- 204S 電子状態評価に基づくアミロイドβタンパク質の構造変化に関する理論研究

(兵県大院理¹, 阪大院工², 筑波大計算セ³)
○大石泰弘¹, 中島吉太郎², 荻博次², 萩原聡³, 大谷実³, 草部浩一¹

- 205S 分子シミュレーションと低温電子顕微鏡実験を用いた4次元イメージング法の構築

(東北大院工) ○吉留崇

- 206S SARS-CoV-2 マトリックス膜タンパク質の密度と脂質成分変化による脂質二重層膜構造の変化

(岡大 RIIS) ○浦野諒, 篠田涉

- 207S ヘモグロビンの構造安定性と構造間遷移に対する pH 依存性

(名大・院情¹, 静岡大・工², 名大価値創造研究センター³) ○四谷悠¹, 北村勇吉², 長岡正隆^{1,3}

— 休憩 10:45-11:00 —

- 11:00-12:00 ポスター発表 201P-280P (奇数)
(講演タイトルはプログラムの末尾に記載)

— 昼食 12:00-13:00 —

- 13:00-14:00 ポスター発表 201P-280P (偶数)
(講演タイトルはプログラムの末尾に記載)

— 休憩 14:00-14:10 —

14:10-15:00 招待講演 I

座長: 玉井良則 (福井大)

- 208IL 確率的手法を用いた量子化学計算は普及するか?: 量子コンピューティングの化学への応用を目指して

(大阪大量子情報・量子生命研究センター)
○水上涉

— 休憩 15:00-15:10 —

15:10-16:00 招待講演 II

座長：古石貴裕（福井大）

- 209IL 次世代計算基盤に係る調査研究における理
研チームの検討状況
（理研 計算科学研究センター）○近藤正章

— 休憩 16:00-16:10 —

16:10-16:45 受賞講演

座長：篠田渉（岡山大）

- 210AL 分子シミュレーションと機械学習の協働
によるソフトマター物性の解明と予測
（産総研 CD-FMat）○高橋和義

16:45-17:25 学会総会

18:00-20:00 懇親会

3日目 12月6日（水）

9:00-10:00 口頭発表 E

座長：金鋼（大阪大）

- 301S Towards the microscopic mechanism of the
embrittlement in swollen polylactic acid:
from the molecular dynamics simulation
（The University of Tokyo¹, Institute for
Molecular Science², Yamagata University³）
○ZHANG Zhiyu¹, TANG Zhiye²,
KOBAYASHI Yutaka³, ITO Hiroshi³,
OKAZAKI Susumu¹

- 302S 環状鎖/線状鎖混合系の分子動力学シミュ
レーション
（東北大理）○村島隆浩

- 303S 分子動力学計算を用いた高分子材料の誘電
損失予測
（AGC 株式会社）○舟橋康佑, 郭安聰

- 304S 乾燥過程における高分子電解質の凝集構造
変化の散逸粒子動力学シミュレーション
（豊田中研）○金城友之, 吉川信明, 長谷川
直樹, 陣内亮典

— 休憩 10:00-10:15 —

10:15-11:40 口頭発表 F

座長：鷲津仁志（兵庫県大）

- 305S 細孔内酸素拡散の網羅解析と非理想拡散を
（250P）考慮した局所拡散解析理論
（豊田中研¹, 福岡大理², 東大院創域³, トヨ
タ自⁴）○吉川信明¹, 永井哲郎², 岡崎進³, 木
村将之⁴

- 306L 不均一場における粒子の運動を記述する動
的モンテカルロ法の多粒子系への展開
（東大院新領域）○岡崎進

- 307S 高濃度電解液におけるイオン輸送支配因子
の分子論的考察
（岡山大基礎研¹, 横浜国大院理工², 横浜国
大 IAS³）○重信圭佑¹, 都築誠二², Frederik
Philippi², 須藤拓², 宇賀田洋介^{2,3}, 獨古薫^{2,3},
渡邊正義³, 上野和英^{2,3}, 篠田渉¹

- 308S 大規模不均一系における物質輸送解明に向
けた自由エネルギーと拡散係数の機械学習
モデルの作成
（福岡大理¹, 豊田中研², トヨタ自動車³, 東
大新領域⁴）○永井哲郎¹, 吉川信明², 陣内
亮典², 木村将之³, 岡崎進⁴

- 309S 燃料電池触媒層における Test Particle In-
sertion Method を用いた酸素の局所拡散解
析
（トヨタ自動車¹, 分子科学研究所², 福岡大
学³, 東京大学⁴, 関西大学⁵）○岡村優希¹, 湯
之也², 永井哲郎³, 木村将之¹, 岡崎進⁴, 藤本
和士⁵

— 昼食 11:40-13:00 —

13:00-14:00 口頭発表 G

座長：山田篤志（防衛大）

- 310S 第一原理 MD と古典 MD における CO₂-水
界面の比較・検証：カーボンニュートラル
への分子動力学シミュレーション①
（産総研 CD-FMat¹, 産総研地質²）○森下
徹也¹, 志賀正茂²

- 311S CO₂-水-粘土鉱物界面系の接触角と水膜の
自由エネルギーからの解釈：カーボンニュ
ートラルへの分子動力学シミュレーション②
（産総研地質¹, 産総研 CDFMat², 東大新領
域³）○志賀正茂¹, 森下徹也², 愛知正温³, 西
山直毅¹, 徂徠正夫¹

- 312S CNT 間の凝着と滑りの力学的計測実験の
（280P）シミュレーション
（高度情報¹, 筑波大学院理工情報生命², 筑
波大数理物質³）○山田達矢^{1,3}, 東谷圭祐²,
鄭サムエル³, 手島正吾¹, 藤田淳一³

- 313S 結合が切れることを許しポテンシャルだけ
で描かれる分子のおもちゃモデル
（産総研 CD-FMat）○中村壮伸

— 休憩 14:00-14:15 —

14:15-15:35 口頭発表 H

座長：石山達也（富山大）

- 314L** 非平衡流体が示す異常揺らぎ：大規模分子動力学シミュレーションを用いた解析
（東大物性研）○中野裕義
- 315S (270P)** ランダム力で駆動された粉体の振動特性
（豊田中研¹, 東大総合文化²）○小山志穂里¹, 大山倫弘¹, 水野英如², 池田昌司²
- 316S** 自由エネルギー障壁を利用したオンザフライ動的モンテカルロ法の開発
（核融合研¹, 総研大²）○伊藤篤史^{1,2}, 高山有道^{1,2}
- 317L** せん断下ガラスが示す降伏臨界性について
（豊田中研¹, 名大理², 阪大基礎工³, 東大総合文化⁴）○大山倫弘¹, 川崎猛史², 金鋼³, 水野英如⁴

15:35-15:40 閉会の辞

ポスター発表

【1日目】

- 101P** 分子会合キネティクスを効率的に解析する方法論の開発
（阪大院基礎工）○丸山優星, 松原優弥, 昌山廉, 笠原健人, 松林伸幸
- 102P** k-means 法を用いた MD-FEM 手法の計算高速化
（慶應義塾大理工機械¹, 慶應義塾大院理工開放環境², 慶應義塾大院理工開放環境³）○小林茉莉奈¹, 寺島悠登², 村松真由³
- 103P** Vorotis: 多面体コードとポロノイ分割法を組み合わせて不規則な原子配列を解析するソフトウェア
（産総研）○西尾憲吾
- 104P** 単純液体における非畳込み型モード結合理論の数値解とシミュレーションとの比較
（香川高専機械）○木村祐人
- 105P** 105S 参照
- 106P** トラクションフルードのマテリアルズインフォマティクス解析における MD シミュレーションデータの活用
（兵庫県立大情報¹, RIST²）○深谷剛¹, 清水陽平¹, 富山栄治^{1,2}, 鷲津仁志¹
- 107P** バイアス交換 ABMD 法を用いたアミロイドβ前駆体タンパク質における 2 量体化プロセスの解明
（理研・杉田研）○伊東真吾, 杉田有治
- 108P** コレステロールが影響を与える脂質膜近傍の水素結合ダイナミクスの解析
（阪大院基礎工）○四方志, 笠原健人, 金鋼, 松林伸幸
- 109P** 主成分分析の逆変換によって未知のタンパク質構造を生成する
（筑波大・計セ）森田陸離, 重田育照, 原田隆平
- 110P** 一塩基分解能の二重らせん DNA モデルを用いたヒストンコアへの巻きつき
（九州大シス情¹, 九大情セ²）○萩原拓海¹, 小野謙二², 樋口祐次²
- 111P** Theoretical Study of Dynamics and Infra-Red Spectra of Myosins
（Graduate School of Science and Engineering, Kanazawa University）○Lilih Siti Solihat, Kazutomo Kawaguchi, Hidemi Nagao
- 112P** 分子動力学シミュレーションによるアミロイドβペプチドの気水界面における安定性評価
（富山大院理工）○齋藤大河, 石山達也
- 113P** 大規模 MD シミュレーションを用いた非膜性構造体内部での天然変性タンパク質挙動の解析
（慶大理工¹, 東理大理工²）○渡辺風雅¹, 秋元琢磨², 山本詠士¹
- 114P** タンパク質-リガンド結合様式予測の精度向上法の提案：複数の結合予測法のハイブリッドアプローチ
（東北大院工）○木村啓太, 吉留崇
- 115P** 全原子分子動力学シミュレーションを用いた人工ポリペプチド高分子の溶解性評価
（京都大福井謙一記念研究センター¹, 阪大院基礎工²）○山田一雄^{1,2}, 松林伸幸²
- 116P** 分子動力学シミュレーションを用いた ChR2 のアミノ酸置換による構造変化の解析
（慶大理工）○菖蒲健太, 平野秀典, 泰岡顕治
- 117P** ペプチド結合主鎖二面角変化の自由エネルギー曲面を特徴付ける反応座標の深層学習による探索
（阪大院基礎工¹, 分子研², 九大先導研³）○岡田一志¹, 菊辻卓真¹, 岡崎圭一², 森俊文³, 金鋼¹, 松林伸幸¹

- 118P** ベシクル成長・分裂メカニズム
(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
- 119P** ポリグルタミンタンパク質の凝集阻害機構のレプリカ置換分子動力学シミュレーション
(生命創成探究センター¹, 分子研², 総研大³) 谷本勝一¹, ○奥村久士^{1,2,3}
- 120P** 蛍光色素で標識した脱塩基損傷 DNA の分子動力学研究
(京工織大院工芸¹, 京工織大材料化学², 量研関西³, 量研量子生命⁴, 核融合研⁵, 名大院工⁶) ○増本晃太郎^{1,4}, 藤原進², 水口朋子², 米谷佳晃³, 鹿園直哉⁴, 赤松憲⁴, 中村浩章^{5,6}
- 121P** カルシウムイオンポンプの E1P-E2P ステップの構造変化解析
(理研・R-CCS¹, 東北大・IMRAM², 理研・CPR³, 理研・BDR⁴) ○小林千草¹, 稲葉謙次², 杉田有治^{1,3,4}
- 122P** 分子動力学シミュレーションによる、アデノシン A₂A 受容体のダイナミクスの研究
(明治大理工) ○有澤明浩, 光武垂代理
- 123P** Deep Neural Network と AlphaFold2 及び MD シミュレーションを用いたタンパク質の部分配列デザインプロトコルの開発
(近畿大院生物理工¹, 近畿大生物理工²) ○岩野和哉¹, 中条貴裕¹, 塩田優真¹, 宮下尚之^{1,2}
- 124P** アミノ酸変異によるタンパク質複合体の結合自由エネルギー変化
(金沢大理工) ○川口一朋, 長尾秀実
- 125P** 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
- 126P** 取り消し
- 127P** DNN と MD シミュレーションを組み合わせたモーフィング手法のフォールディングなどへの応用
(近大院生物理工生体システム¹, 近大生物理工生命情報²) ○下河内翔太¹, 清岡亮太¹, 宮下尚之^{1,2}
- 128P** 蛍光色素分子で標識したギャップ損傷 DNA の配向因子解析
(京工織大院工芸¹, 京工織大材料化学², 量研関西³, 量研量子生命⁴, 核融合研⁵, 名大院工⁶) ○橋拓実ティモシー^{1,3}, 藤原進², 水口朋子², 米谷佳晃³, 鹿園直哉⁴, 赤松憲⁴, 中村浩章^{5,6}
- 129P** Docking and Molecular Dynamics Studies of Antimicrobial Compounds Against FmtA of Staphylococcus aureus.
(Graduate School of Natural Science and Technology, Kanazawa University) ○Citra Hasanah, Hidemi Nagao, Kazutomo Kawaguchi
- 130P** 高分子表面の末端基に依存した水滴に対する濡れ状態の変化
(福井大工) ○中村瑛岐, 古石貴裕
- 131P** 含水アモルファスセルロースの初期構造作成方法の提案と水素結合構造の解明
(富山大院理工) ○中村友香, 石山達也
- 132P** Li イオン電池の固体電解液相間膜におけるイオン伝導度計算法の開発: 3D-RISM 法と Q 学習の組合せ理論
(名大院情報¹, 名大情報², 名大価値創造研究センター³) ○白澤悠貴¹, 加茂俊介², 川瀬智元¹, 田中佑一¹, 吉田紀生¹, 長岡正隆^{1,3}
- 133P** ポリマー/テザーナノ粒子コンポジット材料の強化メカニズムの解明
(慶應大理) ○佐々木謙, 山口晃寛, 荒井規允
- 134P** 分子動力学計算と機械学習を用いたフィルター充填加硫高分子モデルの特性に関する理論的解析
(広島大院先進理工) ○吉田昂平, 兼松佑典, 石元孝佳
- 135P** 分子触媒効果を入れた Cat-GRRM/MC/MD 計算法による架橋ネットワーク高分子の生成と力学特性の研究
(東北大院理¹, 東北大流体研²) ○岸本直樹¹, Xi Yingxiao¹, Bai Yukun¹, 菊川豪太²
- 136P** マニフォールドラーニングを用いた多孔質体中のガス拡散の解析
(東北大院工¹, 東北大 SRIS²) ○荒井翔太¹, 高山裕貴², 吉留崇¹
- 137P** 取り消し
- 138P** 分子シミュレーションを用いたポリマー解重合メカニズムの解明
(旭化成(株)) ○三枝俊亮
- 139P** 水中のポリマー衝突と電子移動の量子計算
(京都大・工) ○黄昱霖, 黄勇勝, 松本充弘
- 140P** ナノスリット内における ABC トリブロックスターポリマーの自己組織化パターンと機械的特性
(慶大理工¹, 慶大院理工²) ○大里直也¹, 横山貴洸², 荒井規允¹

- 141P** ネマチック-等方相転移の拡張アンサンブルによる高効率サンプリングと自由エネルギー解析
(阪大院基礎工¹, 北里大未来工², 兵庫県情報³) ○荻田隼輔¹, 石井良樹², 鷲津仁志³, 金鋼¹, 松林伸幸¹
- 142P** 体外式膜型人工肺の中空糸膜細孔モデルにおけるPP膜とPMP膜の水分子浸透機構の比較
(近畿大・院生物理工¹, 近畿大・生物理工²) ○中条貴裕¹, 福田誠^{1,2}, 宮下尚之^{1,2}
- 143P** コア-シェル構造を有するTPS複合材料の強靱化メカニズムに関する研究
(日立製作所¹, 日立ハイテック², 慶應大³) ○山口晃寛^{1,3}, 荒井聡², 荒井規允³
- 144P** 全原子型分子動力学計算によるアクリル系粘着剤とテルペン系粘着付与剤における親和性評価
(積水化学工業¹, 阪大院基礎工²) ○洲上唯一¹, 松林伸幸²
- 145P** 粗視化分子動力学法を用いた硬質材料の有無による結晶性高分子の摩擦挙動の差異
(兵庫県立大学¹, 九州大学²) ○伊藤和輝¹, 樋口祐次², 端山昌樹¹, 鷲津仁志¹
- 146P** 全原子分子動力学シミュレーションに基づく逆浸透膜の高性能化
(東レ株式会社) ○山本直樹, 志村晴季, 小川貴史, 峯岸進一
- 147P** 分子動力学法を用いた、シンジオタクチックポリスチレン ϵ 型結晶膜による水中からの微量有機物の除去性能確認
(福井院大工) ○矢島浩司, 玉井良則
- 148P** 水分によるプロトン状態が及ぼすアルミナとエポキシ樹脂との接着力のシミュレーション
(名工大¹, 神戸製鋼所², 千葉大³) ○中村優希¹, 浦長瀬正幸¹, 尾形修司¹, 山本慎太郎², 高橋佑輔², 宮前孝行³
- 149P** 体系的な全原子分子動力学シミュレーション解析によるポリオキシエチレン系界面活性剤の会合過程の解明
(マルホ株式会社¹, 福岡大理², 東大院新領域³) ○岩崎航太郎¹, 馬場廣海¹, 永井哲郎², 岡崎進³
- 150P** 分子動力学計算による炭素繊維-樹脂界面における拡散挙動の理論的解析
(広島大院先進理工) ○井手本一慧, 石元孝佳, 兼松佑典
- 151P** 三体相互作用に基づく液体アルゴンの動的構造因子の包括的理解
(新潟大理¹, 北里大未来工²) ○小林寛武¹, 青木美穂¹, 石井良樹², 大島範和¹
- 152P** ジアリアルエテン誘導体への光照射による溶解度変化
(熊本大工¹, 熊本大院先端機構²) ○中村優斗¹, 沈君偉², 深港豪¹, 中村振一郎²
- 153P** 散逸粒子動力学法を用いた高内相比O/W型エマルションの乳化安定性に関する研究
(慶大院理工¹, 京工繊大機械², Kirin HLD.³, 慶大理工⁴) ○鈴木虎次郎¹, 小林祐生^{2,4}, 山崎貴史³, 辻俊一³, 荒井規允⁴
- 154P** 気液界面水の秤動運動に関する和周波発生分光スペクトルの分子シミュレーション
(慶大院理工) ○近藤真岬, 稲垣泰一, 畑中美穂
- 155P** アルコール水溶液表面における分子構造の解明: 力場依存性の検討
(富山大院理工) ○廣瀬真由, 石山達也
- 156P** 分子サイズ変化を伴う新規熱力学的積分法の提案: 混合自由エネルギーおよび溶媒和自由エネルギー計算の高精度化に向けて
(東レ¹, 防衛大応化², 東大新領域³) ○北畑雅弘^{*1}, 山田篤志^{*2}, 金子敏宏^{*3}, 岡崎進³
(*共同筆頭著者, These authors contributed equally to this work)
- 157P** 分子動力学計算によるCLC^FにおけるF⁻イオン選択機構の解析
(東北大院工¹, IFS², FRIS³) ○仲村陽宏^{1,2}, 徳増崇², 馬淵拓哉^{2,3}
- 158P** 制約された空間におけるコア-シェル粒子系の構造形成
(岐阜大工) ○寺尾貴道
- 159P** 溶媒種によって反転する溶媒誘起相互作用の溶質サイズ依存性
(岡山大院自然¹, 兵庫県大院情報研², 岡山大基礎研³) ○内藤秀文¹, 岡本隆一², 墨智成³, 甲賀研一郎³
- 160P** せん断流れ下における両親媒性立方体粒子の凝集構造と粘性挙動
(京工繊大) ○池田高浩, 山川勝史, 小林祐生
- 161P** 時間依存密度汎関数理論に基づく高エネルギー水素イオンの中性化過程解析
(総研大核¹, NIFS²) ○戸田悠斗¹, 高山有道^{1,2}, 伊藤篤史^{1,2}

- 162P** ポリマー RISM 理論によるポリペプチド水溶液の相挙動の研究
(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
- 163P** 二成分溶液のクラスター形成密度と浸透ビリアル係数の関係について
(岡大自然¹, 岡大基礎研²)○松原稜¹, 甲賀研一郎², 墨智成²
- 164P** 液晶エラストマーの粗視化分子動力学シミュレーションおよび機械学習による引張特性の予測
(産総研 CD-FMat)○高橋和義
- 165P** 異方性および有限サイズの影響による界面水系の分子間振動と緩和ダイナミクス: 低波数ラマン分光シミュレーション
(慶大院理工¹, 分子研², 総研大³)○稲垣泰一¹, 畑中美穂¹, 斎藤真司^{2,3}
- 166P** 平衡状態及びせん断流れ下における両親媒性キュービックコロイドの自己集合
(慶大理工¹, 京都工繊大², JGU Mainz³)○横山貴洗¹, 小林祐生², 荒井規允¹, Arash Nikoubashman³
- 167P** ゼオライトにおける金属サブナノ粒子の動態予測に向けた量子分子動力学計算の適用
(早大理工総研¹, 名大院工², 早大先進理工³)○西村好史¹, 織田晃², 中井浩巳^{1,3}
- 168P** 固液界面における添加剤吸着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
- 169P** 密度汎関数理論計算によるタングステンに吸着した原子の拡散挙動の評価
(核融合研¹, 総研大²)○高山有道^{1,2}, 伊藤篤史^{1,2}
- 170P** ハイドレートの FEM-MD マルチスケールシミュレーションによるマクロ変形解析
(慶應大・理工¹, 東北大・理², Eindhoven University of Technology・Mechanical Engineering³)○寺島悠登¹, Paul Edward Brumby¹, 村島隆浩², Varvara Kouznetsova³, 村松眞由¹
- 171P** AgI のパーシステントホモロジー解析
(琉大理¹, 琉大院理工²)○田原周太¹, 叶雄希²
- 172P** 2成分剛体円板ガラス系における深層過冷却状態での局所構造とホッピング予測
(名工大院工¹, ハルビン工大深セン², 香港理工大³)○華井凌平¹, Cho-Tung Yip², Chi-Hang Lam³, 磯部雅晴¹
- 173P** 界面系の格子振動解析
(京大工)○大野海, 松本充弘
- 174P** 多分散自己駆動粒子系におけるアクティブガラスと非平衡相転移
(名工大院工)○稲葉和香, 岩瀬晃司, 磯部雅晴
- 175P** 第一原理 Ehrenfest Dynamics 法による摩擦帯電現象のシミュレーション
(京大・工)○山崎滉太, 松本充弘
- 176P** アモルファス炭素膜に対する潤滑剤分子の吸着自由エネルギー評価
(兵庫県立大情報¹, 日本グリース², 東北大工³)○鳥本航史朗¹, 秋山博俊^{1,2}, 岡本隆一¹, 村島基之³, 鷲津仁志¹
- 177P** 第一原理分子動力学法によるグラフェンの水素分子透過現象のシミュレーション
(京都大工)○石松大志, 松本充弘, 山崎滉太
- 178P** RbAg₄I₅ の第一原理分子動力学シミュレーション
(琉大院理工¹, 琉大理²)○叶雄希¹, 田原周太²
- 179P** Li / LiF 界面における電荷可変型ポテンシャルの開発
(名工大工)○山田健人
- 180P** 分子動力学シミュレーションを用いた有機結晶の構造安定性評価
(北里大院理¹, 理研 CEMS², 香港中文大理工³, 北里大未来工⁴, 神奈川県産総研⁵)○佐藤俊輔¹, Barun Dhara², 宮島大吾^{2,3}, 渡辺豪^{1,4,5}

【2日目】

- 201P** Statistical thermodynamics の分子シミュレーション系への応用
(京都大工)○高屋智考, 清水一誠, 松本充弘
- 202P** 記号回帰による軽量な相互作用関数の探索
(量科研)○桜庭俊
- 203P** 機械学習を用いた分子シミュレーションにおける自己組織化構造の定量的分類
(慶應大機械)○須藤健生, 石渡悠幹, 泰岡顕治, 荒井規允
- 204P** 分子シミュレーションと機械学習による両親媒性分子の自己組織化予測および分子構造依存性解析
(慶大院理工¹, 慶大理工²)○石渡悠幹¹, 横山貴洗¹, 伴野太祐², 荒井規允²

- 205P** 一次相転移の効率的なサンプリング手法の開発
(金沢大理工) ○大門駿介, 三浦伸一
- 206P** 1次元 Gray-Scott モデルにおける振動パターンの Smoluchowski 拡散方程式によるモデル化
(金沢大大学院理¹, 金沢大理²) ○今吉竜汰¹, 狩俣龍之介², 長尾秀実¹, 川口一朋¹
- 207P** 分子シミュレーションを用いた claudin-5 タンパク質の構造的性質の解析
(慶大理工) ○石岡遼大, 平野秀典, 小和口昌愛, 荒井規允, 浅井誠, 泰岡顕治
- 208P** マルチカノニカルハイブリッドモンテカルロ法を用いたシニョリンのフォールディング転移に関する研究
(金沢大自) ○山田悠友, 鈴木大輔, 三浦伸一
- 209P** 配置選択定 pH(CS-CpH) 法による酸性残基を含むペプチドの立体配座が持つ pH 依存性の解明
(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}
- 210P** レプリカ置換溶質焼き戻し法のサンプリング効率における問題点と改善方法
(分子研¹, ExCELLS², 総研大³, 京大理⁴) 福原大輝^{1,3}, 山内仁喬⁴, ○伊藤暁^{1,2,3}, 奥村久士^{1,2,3}
- 211P** Drug Discovery Targeting p53 Protein in Breast Cancer: A Promising Approach for Therapeutic Advancements
(Graduate School of Natural Science and Technology¹, Graduate School of Natural Science and Technology², Graduate School of Natural Science and Technology³) ○Rifqa Fikriya Rahasri¹, Hidemi Nagao², Kawaguchi Kazutomo³
- 212P** がん遺伝子産物 RAS のアロステリック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) ○橋本拓也¹, 小野純一², 小清水初花¹, 中井浩巳^{1,2}
- 213P** Assessing Eleutherine palmifolia Compounds as Anti-Diabetic Agents: A Molecular Dynamics Approach
(Graduate School of Natural Science and Technology¹, Graduate School of Natural Science and Technology², Graduate School of Natural Science and Technology³) ○Haliza Hasnia Putri¹, Hidemi Nagao², Kawaguchi Kazutomo³
- 214P** 深層学習モデルのハイパーパラメータチューニングによる溶液内反応の反応座標探索
(九大総理工¹, 九大先導研², 分子研³, 阪大基礎工⁴) ○佐藤拓海¹, 川島恭平², 岡崎圭一³, 金鋼⁴, 松林伸幸⁴, 森俊文^{1,2}
- 215P** 大規模分子シミュレーションを用いたオレキシン2受容体における活性化メカニズムの計算論的洞察
(明治大・理工¹, スタンフォード大・医²) ○横井駿^{1,2}, 光武亜代理¹
- 216P** 分子膜透過ダイナミクスの理論的解析
(阪大院基礎工) ○松原優弥, 昌山廉, 笠原健人, 松林伸幸
- 217P** 味覚受容体1型的全原子分子動力学シミュレーション
(埼玉大院理工) ○岡田一真, 松永康佑
- 218P** 粗視化分子動力学シミュレーションによる脂質ナノ粒子の解析
(岡山大基礎研) ○宮崎裕介, 篠田渉
- 219P** ヘビ毒の PLA₂ による脂質吸着に関する分子動力学シミュレーション
(金大院数物) ○川島龍大
- 220P** 1分子 FRET 計測と分子動力学シミュレーションを統合した Protein G のフォールディング経路解析
(埼玉大院理工) ○小田奏一郎, 松永康佑
- 221P** IRE1 共有結合性インヒビターがタンパク質の構造変化に与える影響についての分子動力学的研究
(慶應大・理工¹, 理研²) ○平野秀典¹, 沖本憲明², 藤田茂雄², 泰岡顕治¹, 泰地真弘人²
- 222P** 202S 参照
- 223P** 取り消し
- 224P** 加水分解酵素の機能制御を目指した共溶媒添加効果の全原子 MD による解析
(阪大院基礎工¹, 産業技術総合研究所²) ○大坂龍司¹, 石田豊和², 笠原健人¹, 松林伸幸¹

- 225P** ペプチドのアモルファス凝集に対する共溶媒効果の全原子 MD による解析
(阪大基礎工) ○田川雄大, 笠原健人, 松林伸幸
- 226P** スパイダーシルクの機械的性質に関する分子動力学シミュレーション
(関西大システム理工¹, 関西大院²) ○齋藤賢一¹, 渡部大真²
- 227P** 人工 DNA チャンネル内のイオン輸送特性に及ぼす細孔径と疎水性修飾の影響に関する分子論的解析
(東北大工¹, 東北大流体研², 九工大情報工³, 東北大 FRIS⁴) ○高橋潤^{1,2}, 川又生吹¹, 佐藤佑介³, 仲村陽宏^{1,2}, 徳増崇², 馬淵拓哉^{2,4}
- 228P** 分子動力学法を用いた有機系単分子膜の配向秩序度の解析
(兵庫県立大情報) ○小林健洋, 岡本隆一, 鷲津仁志
- 229P** シランカップリング剤が及ぼすアルミナとエポキシ樹脂との接着に関するシミュレーション
(名工大院工) ○森川智哉, 尾形修司, 浦長瀬正幸
- 230P** メソスケールモデルによる絡み合い線状高分子・星型高分子のレオロジーと誘電緩和の予測
(京大化研¹, University of Michigan²) ○佐藤健¹, Yanan Gong², Ronald G. Larson²
- 231P** 分子シミュレーションを用いた膜内の水の挙動解析
(アイシン材技部) ○米沢吹雪
- 232P** シンジオタクチックポリスチレン (s-PS) 結晶中のキャビティに包接されたゲスト分子の分子動力学 (MD) 法によるダイナミクスの解析
(福大院工¹, 福井大工²) ○長谷川剛夫¹, 玉井良則²
- 233P** 電荷テレレリックポリマーの物性予測
(慶應理工) ○波佐祐輝, 荒井規允, 佐藤碧海
- 234P** 全原子動力学法による高分子微粒子同士の相互貫入過程評価
(名古屋大工¹, 関西大化学生命工²) ○吉田昌太郎¹, 大槻主税¹, 藤本和士²
- 235P** kMC 法と分子動力学法の組み合わせによる PAN 分子の耐炭化工程における反応シミュレーションの開発
(京都大学工学研究科¹, 三菱ケミカル株式会社²) ○岸本文太¹, 松本充弘¹, 速水弘樹², 小谷知之²
- 236P** ポリエチレンおよびポリエチレングリコールの乾燥ポリマーブラシ構造に関する分子動力学シミュレーション研究
(富山大院理工) ○山本菜々香, 石山達也
- 237P** 楕円体分子集団の相転移についての分子動力学研究
(兵庫県立大学大学院情報科学研究科¹, 株式会社ダイセル²) ○古橋理一郎¹, 安田修悟¹, 小田浩太郎²
- 238P** PET - 溶媒間の接着仕事への官能基付加の影響
(東レリサーチセンター) ○仲啓志, 長谷川菜, 高橋久美子
- 239P** 小分子のポリマー中への溶解の MD 解析
(阪大院基礎工) ○向江謙心, 小嶋秀和, 矢ヶ崎琢磨, 松林伸幸
- 240P** 天然変性タンパク質 TDP-43 のマルチドメイン構造が RNA と形成する非膜性構造体の物性に与える影響
(慶大理工) ○松下由依, 山本詠士
- 241P** 水溶性ポリマーのコンフォメーション変化と凝集挙動の関係
(岡山大院環境生命自然科学¹, 岡山大基礎研²) ○小松寿式千¹, 墨智成², 甲賀研一郎²
- 242P** Effect of coarse-graining level on structure and thermophysical properties of crosslinked polymer in DPD simulation
(東北大院¹, 東北大²) ○ LIKAIWEN^{1,2}, 菊川豪太²
- 243P** 散逸粒子動力学法を用いた水/油界面におけるグラフトナノ粒子の吸着挙動の解析
(京工織大機械) ○稲田知穂, 山川勝史, 北川石英, 小林祐生
- 244P** 分子動力学計算による結晶性セルロース集合体の生体分子吸着特性の解析
(北里大院理¹, 東工大物質理工², 北里大未来工³, KISTEC⁴) ○石橋広一郎¹, 石井佐和¹, 露木弘美¹, 芹澤武², 渡辺豪^{1,3,4}
- 245P** ポリスチレン S-I 型結晶膜中の気体透過における分子間の競合
(福井大院工¹, 福井大工²) ○細木原薫乃¹, 玉井良則²
- 246P** PAN 系炭素繊維の反応過程の量子解析
(京都大工¹, 三菱ケミカル株式会社²) ○角田瑞生¹, 松本充弘¹, 岸本文太¹, 速水弘樹², 小谷知之²

- 247P** 粗視化分子動力学を用いた架橋エラストマーの力学物性解析
(積水化学¹, 九大²) ○石倉有梨¹, 樋口祐次²
- 248P** 環状高分子におけるトポロジカルガラスの動的不均一性
(阪大院基礎工) ○後藤頌太, 金鋼, 松林伸幸
- 249P** ジブロックコポリマーのマイクロ相分離構造を区別する局所秩序変数の探索
(工学院大, 産総研 CD-FMat¹, 工学院大², 産総研 CD-FMat³) ○高野芙巳生¹, 平塚将起², 高橋和義³
- 250P** 305S 参照
- 251P** 114S 参照
- 252P** グランドカノニカルモンテカルロ法における挿入削除バイアス法の一般化とキャピティバイアス法の修正への応用
(東大院工) ○池田龍志, 菅野智也, 中山哲
- 253P** アクティブサスペンションの異常レオロジー
(東大工) ○早野陽紀
- 254P** 散逸粒子動力学法を用いた界面活性剤ミセルにおける結合時間の統計則の解明
(阪大基礎工) ○小井手祐介
- 255P** 全原子分子動力学法を用いた有機溶媒中におけるリチウム石けん分子の初期凝集挙動の解析
(兵庫県立大情報) ○西村泰風, 岡本隆一, 鷲津仁志
- 256P** ニューラルネットワークポテンシャルを用いた分子動力学シミュレーションによる有機金属系潤滑油添加剤の固体表面反応ダイナミクス
(兵庫県立大情報¹, PFCC², ENEOS³) ○堀尾巴人¹, 名見耶彰洋², 小野寺拓³, 鷲津仁志¹
- 257P** 水の誘電緩和スペクトルの時空間構造
(大分大理工¹, 福工大²) ○岩下拓哉¹, 中西真大²
- 258P** 水モデルパラメータの多様性
(熊本大院生命) ○佐藤恭介
- 259P** 分子動力学計算と機械学習による機能性分子液体材料の特異な粘性挙動の解明
(NIMS 技共部門¹, NIMS MANA², NIMS マ基研セ³) ○安藤嘉倫¹, 名倉和彦², 中西尚志², 袖山慶太郎³
- 260P** ナノスケール水ポンプのチャンネル構造を変えたときの水分子の流れの変化
(福井大工) ○久野真果, 古石貴裕
- 261P** ヘリウム液滴内の OCS 分子の回転ダイナミクス
(金沢大自) ○久司昂希, 三浦伸一
- 262P** 界面自由エネルギーのエネルギー表示法による評価法の開発
(阪大院基工) ○小嶋秀和, 松林伸幸
- 263P** 分散媒の硬化の進行に伴う枯渇相互作用の変化
(都立大物理¹, 大日本塗料²) ○古田祐二郎^{1,2}, 栗田玲¹
- 264P** ナノスケール水ポンプ内で生じる流れと水分子の挙動の関係
(福井大学院工) ○上坂康太, 古石貴裕
- 265P** 会合平衡に対する共溶媒効果の自由エネルギー解析
(阪大基礎工) ○濱田裕加, 古宮直樹, 笠原健人, 松林伸幸
- 266P** Deep neural networks reveal spatial correlation between structure and dynamics in supercooled liquids
(東大総文¹, 豊田中研², 名大理³) ○Liu Min¹, Oyama Norihiro², Kawasaki Takeshi³, Mizuno Hideyuki¹
- 267P** ガラス動力学の深層学習における準安定構造の使用の影響
(兵庫県大院情報¹, 東大情基セ²) ○芝隼人¹, 下川辺隆史²
- 268P** 取り消し
- 269P** ボルン有効電荷を再現する Graph NN 型ポテンシャルの開発
(名工大工) ○出口元貴, 小林亮, 尾形修司, 浦長瀬正幸, 都築貴寛, 吾妻真光
- 270P** 315S 参照
- 271P** 反応分子動力学を用いたアモルファス炭素膜-ZrO₂ 間における化学反応解析
(兵庫県立大情報) ○田中雄大, 岡本隆一, 鷲津仁志
- 272P** クラスレートハイドレートの核生成系におけるグラフニューラルネットワークを用いた構造解析
(慶大理工¹, CSM²) ○石合智貴¹, 遠藤克浩¹, Amadeu K. Sum², 泰岡顕治¹
- 273P** フォノン+電子の輸送解析
(京都大工) ○佐藤萌香, 松本充弘
- 274P** 分子動力学法を用いたナノ構造 bio-inspired 材料表面と自由エネルギー障壁の関係
(慶大理工) ○孟凡, 荒井規允

- 275P** 自己治癒セラミックスにおける酸化生成物の接合性評価
(工学院大工) ○宮尾溪吾
- 276P** 深層学習によるガラス形成液体の温度変化に伴う特徴的な構造変化の解明
(阪大院基礎工) ○矢野健太郎, 後藤頌太, 金鋼, 松林伸幸
- 277P** GEMC/MD 法を用いたメタンハイドレート三相平衡曲線の導出
(慶應大・理工¹, 慶應大・理工², CSM³, 慶應大・理工⁴) ○岸本寛隆¹, Paul E. Brumby², Amadeu K. Sum³, 泰岡顕治⁴
- 278P** ペロブスカイト CsPbX₃ (X=Cl, Br, I) 表面の第一原理計算
(金沢大院自然¹, 金沢大 NanoMaRi²) ○三浦昌平¹, 山口直也², 石井史之²
- 279P** 二酸化炭素を含有した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
- 280P** 312S 参照