

## 第 38 回分子シミュレーション討論会

### 学生優秀発表賞 受賞者(敬称略)

- 125P 手代木 陽介 (東京大学大学院農学生命科学研究科応用生命工学専攻)  
「細胞スケールの生命現象の解明に向けた新規粗視化分子動力学法の開発」  
東大院農  
○手代木陽介,寺田透
- 143P 北川 剛健 (関西大学大学院理工学研究科)  
「分子動力学計算による燃料電池高分子電解質中のプロトン輸送機構メカニズムの解明」  
関西大院理工<sup>1</sup>,関西大化生<sup>2</sup>,福岡大理<sup>3</sup>,分子研<sup>4</sup>,横市大院生命ナノシステム科学<sup>5</sup>,トヨタ自動車(株)<sup>6</sup>  
○北川剛健<sup>1</sup>,井本裕貴<sup>2</sup>,永井哲郎<sup>3</sup>,湯之也<sup>4</sup>,岡崎進<sup>5</sup>,木村将之<sup>6</sup>,藤本和士<sup>2</sup>
- 159P 三津原 晟弘 (名古屋大学工学研究科材料デザイン工学専攻)  
「Ab-initio 経路積分分子動力学法と動的モンテカルロ法の連携による PdCu 合金中の水素拡散挙動の解析」  
名大工  
○三津原晟弘,君塚肇
- 169P 佐藤 克樹 (東京理科大学大学院理学研究科化学専攻)  
「機械学習と分子動力学計算を組み合わせたタンパク質の高速 AFM 画像解析」  
東理大院理<sup>1</sup>,名大院理<sup>2</sup>,奈良先端大<sup>3</sup>  
○佐藤克樹<sup>1</sup>,金岡優依<sup>2</sup>,塚崎智也<sup>3</sup>,内橋貴之<sup>2</sup>,森貴治<sup>1</sup>
- 180P 坂巻 雄飛 (大阪大学大学院基礎工学研究科物質創成専攻化学工学領域)  
「高分子溶融体のシアニングと分子形状を特徴づける秩序変数の解析」  
阪大院基礎工  
○坂巻雄飛<sup>1</sup>,後藤頌太<sup>2</sup>,金鋼<sup>3</sup>,松林伸幸<sup>4</sup>
- 218P 大坂 龍司 (大阪大学基礎工学研究科)  
「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<sup>1</sup>,産総研<sup>2</sup>

○大坂 龍司<sup>1</sup>,石田 豊和<sup>2</sup>,笠原 健人<sup>1</sup>,松林 伸幸<sup>1</sup>

- 234P 山田 哲平 (岡山大学大学院環境生命自然科学研究科)  
「非対称な脂質分布がもたらす細胞膜の物性と不均一性」  
岡山大院環境生命自然<sup>1</sup>,岡山大基礎研<sup>2</sup>

○山田哲平<sup>1</sup>,篠田渉<sup>2</sup>

- 265P 石渡 悠幹 (慶應義塾大学理工学研究科)  
「分子シミュレーションと機械学習を用いた多成分系における自己組織化形態予測」  
慶大理工

○石渡悠幹,横山貴洸,小島知也,伴野太祐,荒井規允

- 267P 關 拓和 (北里大学大学院理学研究科分子科学専攻)  
「機械学習を用いた有機半導体の結晶構造予測」  
北里大院理<sup>1</sup>,東大院新領域<sup>2</sup>,NIMS<sup>3</sup>,科学大物質理工<sup>4</sup>,JST CREST<sup>5</sup>,北里大未来工<sup>6</sup>,KISTEC<sup>7</sup>

○關 拓和<sup>1</sup>,篠崎 雄大<sup>1</sup>,佐藤 俊輔<sup>1</sup>,伊藤 良将<sup>1</sup>,竹谷 純一<sup>2,3,5</sup>,岡本 敏宏<sup>4,5</sup>,渡辺 豪<sup>1,5,6,7</sup>

- 270P 小松 寿式千 (岡山大学大学院環境生命自然科学研究科)  
「Martyite 層間水の相転移に伴う水素結合構造の変化」  
岡山大院環境生命自然科学<sup>1</sup>,岡山大基礎研<sup>2</sup>,静岡大理<sup>3</sup>

○小松寿式千<sup>1</sup>,甲賀研一郎<sup>2</sup>,野村肇宏<sup>3</sup>