

# 第38回分子シミュレーション討論会 講演プログラム

(2024年11月8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 エルザ ジャパン, 九州大学情報基盤研究開発センター, 株式会社クロスアビリティ, 株式会社 JSOL, 株式会社 ダイセル, 富士通株式会社, 株式会社 メトロ, 株式会社 モルシス, リアルコンピューティング株式会社  
会期 : 2024年12月2日(月)~2024年12月4日(水)  
会場 : アクリエひめじ(2階 中ホール) JR 姫路駅 徒歩10分  
ポスター発表会場 4階 407会議室  
HP : <https://sympo.mol-sim.jp/mssj38/>

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2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)

103S 重み付きアンサンブル法と変分オートエンコーダを併用した遷移状態サンプリング(日医大<sup>1</sup>, 大阪公立大<sup>2</sup>) ○藤崎弘士<sup>1</sup>, 森次圭<sup>2</sup>

104S 量子アルゴリズムを利用したタンパク質フォールディングモデルのモンテカルロシミュレーション(慶大理工) ○森義治, 山本直樹

— 午前の部 —

— 移動 11:00-11:10 —

10:00-11:00 口頭発表 A

座長: 光武 亜代理(明治大)

101S たんぱく質時空間データの低次元動的特徴量と時間依存性を同時抽出する拡張改良型機械学習手法(116P)  
(近大先端研) ○米澤康滋

102S 分子動力学シミュレーションによるLEDGFの結合におけるヒストンメチル化の影響の解明(134P)  
(信州大<sup>1</sup>, 総研大<sup>2</sup>, 分子研<sup>3</sup>, ExCELLS<sup>4</sup>)  
○鈴木日奈子

11:10-12:10 ポスター発表 102P-195P (奇数)  
(講演タイトルはプログラムの末尾に記載)

— 昼食 12:10-13:10 —

13:10-14:10 ポスター発表 102P-195P (偶数)  
(講演タイトルはプログラムの末尾に記載)

— 移動 14:10-14:25 —

— 午後の部 —

14:25-16:00 口頭発表 B

座長：樋口祐次（九大情セ）

- 105S 通信用高分子材料における誘電特性シミュレーション技術の高精度化  
（村田製作所）○渡邊唯人, 日吉憲祐, 廣瀬左京, 木村雅彦
- 106S 連続体シミュレーションと機械学習の協働によるソフトマテリアルのマルテンサイト変態の解析  
（九大理<sup>1</sup>, 広島大 WPI<sup>2</sup>, 産総研 CD-FMat<sup>3</sup>）  
福田順一<sup>1,2</sup>, ○高橋和義<sup>3</sup>
- 107L 全原子分子動力学シミュレーションによる高分子微粒子圧縮破壊時の応力応答と分子メカニズムの解明  
（立命館大院生命<sup>1</sup>, 関大化生<sup>2</sup>, 立命館大生命<sup>3</sup>, 関大 ORDIST<sup>4</sup>）○高橋一輝<sup>1</sup>, 稗田吉希<sup>2</sup>, 加藤稔<sup>1,3</sup>, 保田侑亮<sup>4</sup>, 藤本和士<sup>2</sup>
- 108S 環状高分子メルトの1本鎖スリップスプリング模型  
（お茶大ソフトマター<sup>1</sup>, 東北大院理<sup>2</sup>）○冨吉良徳<sup>1</sup>, 村島隆浩<sup>2</sup>, 川勝年洋<sup>2</sup>
- 109L 全原子ならびに粗視化シミュレーションによる親水高分子ブラシの防汚性の研究  
（阪大院基礎工）○矢ヶ崎琢磨, 松林伸幸

— 休憩 16:00-16:20 —

16:20-17:30 口頭発表 C

座長：村島隆浩（東北大理）

- 110S (234P) 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>
- 111L 二分子反応理論に基づく膜透過現象の動力学解析  
（阪大院基礎工）○笠原健人, 松原優弥, 岡部涼, 松林伸幸

112S 不均一系における物質輸送の解明のための自由エネルギーと位置に依存した拡散係数を予測する機械学習モデル

（福岡大理<sup>1</sup>, 豊田中央研究所<sup>2</sup>, トヨタ自動車<sup>3</sup>, 横浜市立大ナノシステム科学研究科<sup>4</sup>）  
○永井哲郎<sup>1</sup>, 吉川信明<sup>2</sup>, 陣内亮典<sup>2</sup>, 木村将之<sup>3</sup>, 岡崎進<sup>4</sup>

113S (151P) 長距離静電相互作用のカットオフで生じる水の層状構造：周期境界条件なしの場合  
（量研関西）○米谷佳晃

2日目 12月3日(火)

— 午前の部 —

9:00-9:50 口頭発表 D

座長：芝隼人（兵庫県大情報）

- 201S 剪断弾性変形における金属ガラスの協働性の特定  
（大分大<sup>1</sup>, 豊田工大<sup>2</sup>）○岩下拓哉<sup>1</sup>, 椎原良典<sup>2</sup>
- 202L 過冷却液体の動的不均一性を支配するゼロ温度臨界性  
（豊田中研<sup>1</sup>, 名大理<sup>2</sup>, 阪大基礎工<sup>3</sup>, 東大総合文化<sup>4</sup>）○大山倫弘<sup>1</sup>, 川崎猛史<sup>2</sup>, 金鋼<sup>3</sup>, 水野英如<sup>4</sup>
- 203S (237P) Deep neural networks reveal the structural origin of low-frequency localized modes in amorphous solids  
（東大総文<sup>1</sup>, 豊田中央研<sup>2</sup>）○Liu Min<sup>1</sup>, Oyama Norihiro<sup>2</sup>, Mizuno Hideyuki<sup>1</sup>

— 休憩 9:50-10:00 —

10:00-10:50 口頭発表 E

座長：諸星圭（旭化成）

- 204S COFのプロトン伝導メカニズムの機械学習力場を用いた分子動力学解析  
（豊田中研<sup>1</sup>, 株式会社デンソー<sup>2</sup>）○南沙央理<sup>1</sup>, 金甫根<sup>2</sup>, 高橋一輝<sup>2</sup>, 佐藤敬<sup>2</sup>, 陣内亮典<sup>1</sup>

**205S** 分子動力学による油性剤の吸着構造解析  
(286P) (兵庫県大情報) ○小林健洋, 岡本隆一, 鷺津仁志

**206L** ソフトポーラスクリスタルへの分子吸着過程における動的スケーリング  
(東大総合文化<sup>1</sup>, 鳥取大工<sup>2</sup>) 光元亨汰<sup>1</sup>, ○高江恭平<sup>2</sup>

— 移動 10:50-11:00 —

**11:00-12:00** ポスター発表 201P-295P (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-295P (偶数)  
(講演タイトルはプログラムの末尾に記載)

— 移動 14:00-14:10 —

— 午後の部 —

**14:10-15:00** 招待講演 I  
座長：鷺津仁志 (兵庫県大情報)

**207IL** パーフルオロアルキル化合物の分子自己集合と特異な物性発現  
(京大化研) ○長谷川健

— 休憩 15:00-15:15 —

**15:15-16:05** 招待講演 II  
座長：安田修悟 (兵庫県大情報)

**208IL** Regularized FMM による Energy Drift の解消  
(東京科学大学) ○横田理央

— 休憩 16:05-16:20 —

**16:20-16:55** 受賞講演  
座長：三浦伸一 (金沢大理工)

**209AL** 高分子材料系の大規模全原子分子力学シミュレーションの実践的研究  
(関西大学) ○藤本和士

**16:55-17:40** 学会総会

**18:00-20:00** 懇親会

**3 日目 12月4日(水)**

— 午前部の部 —

**9:00-10:25** 口頭発表 F  
座長：石山達也 (富山大理工)

**301S** 全原子分子力学シミュレーションを用いたポリアミドとアルミニウム合金の直接接合界面に関する研究  
(大阪公立大) ○吉田十義, 桑原卓哉, 兼子佳久

**302S** Molecular Simulations of Amine-Based Organic Additives at a Steel Surface: Effect of the Internal Molecular Structure on Adsorption  
(豊田中央研究所) ○Bonnaud Patrick, 金城友之, 森谷浩司, 佐藤範和, 遠山護

**303S** 溶媒中における溶質間有効相互作用に対する添加物効果  
(兵庫県大院) ○岡本隆一

**304S** (241P) 時間依存密度汎関数理論を用いたタンゲステン表面での水素イオン中性化過程解析  
(総研大核<sup>1</sup>, 核融合研<sup>2</sup>) ○戸田悠斗<sup>1</sup>, 高山有道<sup>1,2</sup>, 伊藤篤史<sup>1,2</sup>

**305L** 原子の高速運動および衝突に重点を置いた時間依存密度汎関数理論コードの開発  
(核融合研<sup>1</sup>, 総研大<sup>2</sup>) ○伊藤篤史<sup>1,2</sup>, 戸田悠斗<sup>2</sup>, 高山有道<sup>1,2</sup>

— 休憩 10:25-10:35 —

10:35-12:00 口頭発表 G

座長：志賀 基之 (JAEA)

- 306S サブミクロン粒子の breathing mode が与える粒子間衝突過程への影響  
(神戸大理<sup>1</sup>, NAOJ<sup>2</sup>, 東北大<sup>3</sup>) ○吉田雄城<sup>1</sup>, 小久保英一郎<sup>2</sup>, 田中秀和<sup>3</sup>
- 307S 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 II  
(金沢大数物) ○三浦伸一
- 308L ゆらぎを取り入れた第一原理計算手法  
(株式会社メトロ) ○対比地剛, 中村賢, 前田悠佑
- 309S 0次元水素結合型誘電体  $K_3H(SO_4)_2$  の相転移温度に関する H/D 同位体効果  
(横浜市大生命ナノ) ○石井裕, 桑畑和明, 島崎智実, 立川仁典
- 310S (261P) 高压水の相転移における量子効果  
(科学大<sup>1</sup>, 横市大<sup>2</sup>) ○桑畑和明<sup>1,2</sup>, 立川仁典<sup>1</sup>

— 昼食 12:00-13:00 —

— 午後の部 —

13:00-14:00 口頭発表 H

座長：森下 徹也 (産総研)

- 311S 大規模系水滴の固体表面への衝突における液膜の広がり挙動  
(福井大工<sup>1</sup>, 慶應大理工<sup>2</sup>, City Univ. Hong Kong<sup>3</sup>) ○古石貴裕<sup>1</sup>, 泰岡顕治<sup>2</sup>, Xiao Cheng Zeng<sup>3</sup>
- 312S 富岳を利用した分子動力学シミュレーションによる超音波キャビテーションの数値解析  
(東北大) ○浅野優太
- 313S Finding the best functional for modelling sub- and supercritical water with SL-PIHMC-MIX  
(Center for Computational Science and e-Systems, JAEA) ○トムセンボー, 志賀基之
- 314S Large-scale Molecular Dynamics Simulations of Multicomponent Biomolecular Condensation Reveals a Regulatory Mechanism by Highly Charged Proteins  
(理研 R-CCS) ○譚丞, 杉田有治

— 休憩 14:00-14:10 —

14:10-15:25 口頭発表 I

座長：

- 315S スリップ長の平衡測定法の開発  
(東大物性研) ○中野裕義
- 316S Accurate MD integration maintaining the equipartition theorem  
(理研) ○JungJaewoon, 杉田有治
- 317S レプリカ交換法の最適化：一次相転移への大規模並列計算のアプローチ  
(慶應大理) ○小和口昌愛, Paul E. Brumby, 泰岡顕治
- 318S Widom の式に基づいた自由エネルギー計算の効率的サンプリング  
(関大化生<sup>1</sup>, 分子研<sup>2</sup>, 福岡大理<sup>3</sup>, 横浜市大院生命ナノ<sup>4</sup>) 藤本和士<sup>1</sup>, 湯之也<sup>2</sup>, 永井哲郎<sup>3</sup>, ○岡崎進<sup>4</sup>
- 319S アンブレラサンプリングにおけるウィンドウ分布の位置と分散を調節する自動最適化手法  
(大阪公大理<sup>1</sup>, 大阪公大 RIMED<sup>2</sup>) ○満田祐樹<sup>1,2</sup>, 麻田俊雄<sup>1,2</sup>

15:25-15:30 閉会の辞

## ポスター発表

### 【1日目】

- 102P** タンパク質分子間結合での van der Waals 引力の累積と SASA モデルでの表面張力係数の符号反転  
(早大先進理工<sup>1</sup>, 早大理工総研<sup>2</sup>) ○衛方千<sup>1</sup>, 神山幸成<sup>1</sup>, 久保大地<sup>1</sup>, パーキン暖<sup>2</sup>, 高野光則<sup>1,2</sup>
- 103P** Patchy 粒子を用いたフォトニック結晶形成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<sup>1</sup>, 岐阜大工<sup>2</sup>) ○中島和哉<sup>1</sup>, 寺尾貴道<sup>2</sup>
- 104P** 荷電デンドリマーの構造形成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<sup>1</sup>, 岐阜大工<sup>2</sup>) ○深谷政太<sup>1</sup>, 寺尾貴道<sup>2</sup>
- 105P** 成分比によって制御される多成分溶媒中のエントロピー駆動型分子認識現象  
(九大基幹<sup>1</sup>, 九大院理<sup>2</sup>) ○松尾美香<sup>1</sup>, 秋山良<sup>2</sup>
- 106P** MD シミュレーションによる乳酸オリゴマー水溶液の特異な温度依存性の調査  
(北大院総合化学<sup>1</sup>, 北大院工<sup>2</sup>) ○生井克幸<sup>1</sup>, 佐藤信一郎<sup>2</sup>, 山本拓矢<sup>2</sup>
- 107P** フラーレン C<sub>60</sub> とオリゴエチレングリコール・オリゴプロピレングリコールの分子間錯体の量子化学計算  
(北大院総合化学<sup>1</sup>, 北大院工<sup>2</sup>) ○有馬颯汰<sup>1</sup>, 山本拓矢<sup>2</sup>, 佐藤信一郎<sup>2</sup>
- 108P** マイクロスイマー懸濁液の異常レオロジー効果に関するシミュレーション研究  
(東大工<sup>1</sup>, 東大生研<sup>2</sup>) ○早野陽紀<sup>1</sup>, 古川亮<sup>2</sup>
- 109P** メソスケールシミュレーションによる不均一場での粒子挙動の解析  
(慶大理工<sup>1</sup>, 名大院工<sup>2</sup>) ○高木悠丞<sup>1</sup>, 畝山多加志<sup>2</sup>, 山本詠士<sup>1</sup>
- 110P** 分子動力学計算による油脂の物性の比較解析  
(関西大院理工<sup>1</sup>, 日清オイリオグループ株式会社, 関西大化生<sup>3</sup>) ○北村勇稀<sup>1</sup>, 目時潤也<sup>2</sup>, 岸健汰<sup>2</sup>, 辻野祥伍<sup>2</sup>, 吉村和馬<sup>2</sup>, 平井浩<sup>2</sup>, 藤本和士<sup>3</sup>
- 111P** ソフトコロイド系における粗視化ポテンシャル解析  
(岐阜大自然科学技術<sup>1</sup>, 岐阜大工<sup>2</sup>) ○西部昇吾<sup>1</sup>, 寺尾貴道<sup>2</sup>
- 112P** 水分子の中距離秩序構造による HDL・LDL の判別  
(岡山大理) ○山田隆史
- 113P** 生体応用される含エーテル基親水性高分子と水素結合する水分子に関する分子動力学解析  
(阪大院基礎工) ○橋本貴欣, 四方志, 金鋼, 松林伸幸
- 114P** 分子動力学シミュレーションを用いた PTP1B のアロステリック阻害メカニズム研究  
(慶大院理工<sup>1</sup>, 慶大理工<sup>2</sup>) ○矢野晃紀<sup>1</sup>, 安田一希<sup>1</sup>, 平野秀典<sup>1</sup>, 泰岡顕治<sup>2</sup>
- 115P** 流動環境下におけるアミロイドベータの凝集機構  
(総研大<sup>1</sup>, 分子研<sup>2</sup>, ExCELLS<sup>3</sup>) ○大多和克紀<sup>1,2</sup>, 伊藤暁<sup>1,2,3</sup>, 奥村久士<sup>1,2,3</sup>
- 116P** 101S 参照
- 117P** 生体子を模倣した構造モデルを用いた細胞環境におけるタンパク質立体構造探索  
(筑波大生物学学位 P<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>
- 118P** 天然変性タンパク質 FUS が形成する非膜性構造体内の溶媒水分子の振動及び拡散ダイナミクスに対する分子論的解釈  
(慶大理工<sup>1</sup>, 富山大工<sup>2</sup>) ○武田陽太郎<sup>1</sup>, 石山達也<sup>2</sup>, 山本詠士<sup>1</sup>
- 119P** TDP-43 タンパク質凝縮体内部の粘弾性特性とアミロイドシードの分子挙動  
(慶大理工) ○松下由依, 安田一希, 山本詠士
- 120P** 分子動力学シミュレーションを用いた APC タンパク質の K516N 変異による Sam68 結合能への影響の解明  
(慶大院理工<sup>1</sup>, 慶大理工<sup>2</sup>) ○小林蓮<sup>1</sup>, 安田一希<sup>1</sup>, 平野秀典<sup>1</sup>, 泰岡顕治<sup>2</sup>
- 121P** バーチャル富岳における分子動力学法ソフトウェアの性能評価  
(理研 R-CCS) ○小林千草, 安藤和人, 山浦剛, 井上晃, 村井均
- 122P** 水中アラニンジペプチドの反応座標に沿った自由エネルギーと拡散係数のフラットボトムポテンシャル法による評価  
(福岡大院理<sup>1</sup>, 福岡大理<sup>2</sup>, RIST<sup>3</sup>) ○秋永千寛<sup>1</sup>, 永井哲郎<sup>2</sup>, 榮慶丈<sup>3</sup>, 吉田亨次<sup>2</sup>
- 123P** G タンパク質共役受容体とアンタゴニストの複合体構造とダイナミクスの解明  
(九大総理工<sup>1</sup>, 神戸大院理<sup>2</sup>, 九大先端研<sup>3</sup>) ○鄒瑞思<sup>1</sup>, 尾林虹兵<sup>2</sup>, 塚本寿夫<sup>2</sup>, 森俊文<sup>1,3</sup>

- 124P** PaCS-MD/MSM を用いた糖輸送体 SGLT の糖選択性の原理に関する研究  
(科学大・生命理工<sup>1</sup>,BAI, NTHU<sup>2</sup>, 広島大・院医・生理<sup>3</sup>) ○河野弘士<sup>1</sup>, 竹村和浩<sup>2</sup>, 藤原祐一郎<sup>3</sup>, 北尾彰朗<sup>1</sup>
- 125P** 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
- 126P** 膜透過過程に対する共溶媒添加効果  
(阪大基礎工<sup>1</sup>, 阪大院基礎工<sup>2</sup>) ○山下湧輝<sup>1</sup>, 岡部涼<sup>2</sup>, 笠原健人<sup>2</sup>, 松林伸幸<sup>2</sup>
- 127P** DNA の幾何学的構造がヌクレオソームに及ぼす影響  
(九州大シス情<sup>1</sup>, 九大情セ<sup>2</sup>) ○萩原拓海<sup>1</sup>, 小野謙二<sup>2</sup>, 樋口祐次<sup>2</sup>
- 128P** 変異型タンパク質複合体の相対結合自由エネルギー計算に関する研究  
(金沢大理工) ○川口一朋, 長尾秀実
- 129P** マルチカノニカル一般化ハイブリッドモンテカルロ法を用いたスーパーシニョリンの熱力学的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>) ○保坂賢<sup>1</sup>, 三浦伸一<sup>2</sup>
- 130P** AQP4 ポア内の水分子のゆらぎに関する解析  
(慶大理工) ○栗林直信, 山本詠士, 平野秀典, 泰岡顕治
- 131P** 共溶媒法による p38  $\alpha$  のアロステリックポケット探索  
(理研 BDR) ○浦長瀬正幸, 沖本憲明, 藤田茂雄, 森本元太郎, 泰地真弘人
- 132P** AI 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 (MOVE-DM) における構造変化経路探索の改良  
(近大生物理工<sup>1</sup>, 近大院生物理工<sup>2</sup>) ○榎山佳広<sup>1</sup>, 下河内翔太<sup>2</sup>, 塩田優真<sup>2</sup>, 宮下尚之<sup>1,2</sup>
- 133P** Theoretical Study of Acquired Resistance Mechanisms of KRAS G12C Secondary Mutants from Covalent Inhibitors  
(金沢大自然研) ○ Karim Riksa, 川口一朋, 長尾秀実
- 134P** 102S 参照
- 135P** MSL10(MscS の植物ホモログ) の活性化メカニズムの解明  
(九大理) ○森山太陽<sup>1</sup>, 渡邊宙志<sup>2</sup>
- 136P** 貴金属添加 Zr<sub>70</sub>Cu<sub>30</sub> 金属ガラスにおける準結晶クラスター形成機構の検討  
(早大基幹材料<sup>1</sup>, JAEA<sup>2</sup>) ○佐藤元紀<sup>1</sup>, 平田秋彦<sup>1</sup>, 奥村雅彦<sup>2</sup>, 山本知之<sup>1</sup>
- 137P** 分子動力学計算によるガラス状高分子 PMMA 破壊への溶媒効果  
(名古屋大工<sup>1</sup>, 関西大化学生命工<sup>2</sup>) ○金谷理瑠<sup>1</sup>, 大槻主税<sup>1</sup>, 藤本和士<sup>2</sup>
- 138P** 合金モデルの液相線  
(産総研) ○西尾憲吾
- 139P** シリコン/アモルファス炭素界面系の格子振動解析  
(京都大工) ○中村圭太郎, 松本充弘, 佐藤萌香
- 140P** オリゴエチレングリコールで表面修飾された金ナノ粒子水溶液の温度応答性についてのシミュレーション  
(北大総化<sup>1</sup>, 北大院工<sup>2</sup>, 北大電子研<sup>3</sup>) ○蘇学銘<sup>1</sup>, 佐藤信一郎<sup>1,2</sup>, 三友秀之<sup>3</sup>
- 141P** 第一原理計算と古典溶液論を用いた黒鉛へのアニオン挿入過程の解析  
(東大院工<sup>1</sup>, 筑波大計算科学セ<sup>2</sup>) ○中村公<sup>1</sup>, 竹中規雄<sup>1</sup>, 萩原聡<sup>2</sup>, 大谷実<sup>2</sup>, 山田淳夫<sup>1</sup>
- 142P** エチレングリコール添加による水系 Na イオン電池の電位窓拡大に関する分子動力学シミュレーション  
(福岡大院理<sup>1</sup>, 福岡大理<sup>2</sup>) ○上廣誠也<sup>1</sup>, 吉田亨次<sup>2</sup>, 永井哲郎<sup>2</sup>
- 143P** 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>
- 144P** 機械学習に基づく拡張 DFT 計算による TENG のマルチスケール解析  
(京都大工) ○黄勇勝, 松本充弘
- 145P** 流体潤滑近似を用いた Synchronized Molecular-Dynamics 法の開発  
(兵庫県大情報<sup>1</sup>, 株式会社ダイセル<sup>2</sup>) ○村垣文斗<sup>1</sup>, 安田修悟<sup>1</sup>, 小田浩太郎<sup>1,2</sup>, 岩山将士<sup>2</sup>, 伊奈智秀<sup>2</sup>
- 146P** 3次元クエット流れにおける液滴マーゼーションの DPD シミュレーション  
(慶大理工) ○山田一威, 荒井規允
- 147P** GPU によるエネルギー表示法プログラム ERmod の高速化  
(阪大院基礎工) ○丸山豊, 松林伸幸
- 148P** 溶液内における会合自由エネルギー計算手法の開発  
(阪大院基礎工) ○沖田和也, 笠原健人, 松林伸幸

- 149P** 分子動力学法と AlphaFold の相互活用が促進するタンパク質の構造状態探索  
(分子研・計算センター) ○大貫隼, 岡崎圭一
- 150P** gREST-ABMD 法による自由エネルギー地形探索  
(RIKEN・R-CCS<sup>1</sup>, RIKEN・CPR<sup>2</sup>, RIKEN・BDR<sup>3</sup>, 兵庫県大<sup>4</sup>) ○伊東真吾<sup>1</sup>, 尾嶋拓<sup>4</sup>, 杉田有治<sup>1,2,3</sup>
- 151P** 113S 参照
- 152P** Stochastic thermodynamics に基づく水・電解質水溶液中の気泡核生成の自由エネルギー評価  
(京都大工) ○廣瀬心哉, 清水一誠, 松本充弘
- 153P** Phate PaCS-MD: graph 理論を用いた並列カスケード選択分子動力学  
(科学大・生命理工) ○向山雅輝, 北尾彰朗
- 154P** タンパク-基質複合体のための QM/MM データセットと機械学習ポテンシャルの開発  
(東大院農<sup>1</sup>, ヒューマノーム研究所<sup>2</sup>) ○大村拓登<sup>1</sup>, 森脇由隆<sup>1</sup>, 寺田透<sup>1</sup>, 瀬々潤<sup>2</sup>
- 155P** 分子動力学シミュレーションを用いたシニョリンの構造解析および IR スペクトル計算  
(兵庫県大理<sup>1</sup>, 兵庫県大院理<sup>2</sup>, 筑波大数理物質<sup>3</sup>) ○深津昌吾<sup>1</sup>, 佐藤航<sup>2</sup>, 八木清<sup>3</sup>, 久保稔<sup>2</sup>, 尾嶋拓<sup>2</sup>
- 156P** スターポリマー自己集合構造の DPD モデルから全原子 MD モデルへのリバースマッピング  
(慶大院理工<sup>1</sup>, 慶大理工<sup>2</sup>) ○大里直也<sup>1</sup>, 山口晃寛<sup>1</sup>, 荒井規允<sup>2</sup>
- 157P** パラ水素クラスターの構造と超流動性発現機構  
(金沢大・理工) ○内田敬斗, 三浦伸一
- 158P** 分子シミュレーションを用いたブタジエン配位重合での立体選択性の解析  
(ENEOS 中研<sup>1</sup>, ENEOS マテリアル研究開発本部<sup>2</sup>, 名大院情報学<sup>3</sup>, 名大未来社会<sup>4</sup>) ○幡宮慎太郎<sup>1</sup>, 小島隆嗣<sup>1</sup>, 石井隆文<sup>1</sup>, 松本昭一<sup>2</sup>, 松本健太郎<sup>3</sup>, 古賀伸明<sup>3</sup>, 長岡正隆<sup>4</sup>
- 159P** *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
- 160P** PAN 系炭素繊維製造工程における化学反応モデリング 2: 脱水素・酸化反応の量子計算  
(京都大工<sup>1</sup>, 三菱ケミカル<sup>2</sup>) ○清水一誠<sup>1</sup>, 角田瑞生<sup>1</sup>, 松本充弘<sup>1</sup>, 速水弘樹<sup>2</sup>, 小谷知之<sup>2</sup>, 湯原大輔<sup>2</sup>, 平岩竜一<sup>2</sup>
- 161P** ポリマー解重合シミュレーション方法の検討  
(旭化成株式会社 基盤技術研究所) ○三枝俊亮
- 162P** ポリマーの接触・摩擦による帯電機構の量子計算  
(京都大工) ○黄昱霖, 松本充弘, 黄勇勝
- 163P** CNT 内部における官能基の塩橋形成がプロトン輸送に及ぼす影響  
(東北大工<sup>1</sup>, 東北大流体研<sup>2</sup>) ○仲村陽宏<sup>1,2</sup>, 馬淵拓哉<sup>2</sup>
- 164P** 溶媒の量子化学効果を取り込んだ分子動力学シミュレーションの精度改善  
(九大理) ○池田拓真, 渡邊宙志
- 165P** 牛の育成カルテデータから肉質を推定する AI の開発  
(近大院生物理工<sup>1</sup>, 近大生物理工<sup>2</sup>) ○塩田優真<sup>1</sup>, 池上春香<sup>2</sup>, 西前太揮<sup>2</sup>, 宮下尚之<sup>1,2</sup>, 松本和也<sup>1,2</sup>
- 166P** マニフォールド学習による多孔質構造のガス拡散の解析と予測  
(東北大院工<sup>1</sup>, 東北大 SRIS<sup>2</sup>) ○荒井翔太<sup>1</sup>, 高山裕貴<sup>2</sup>, 吉留崇<sup>1</sup>
- 167P** MAPbI<sub>3</sub> ペロブスカイト中での有機分子の回転運動評価  
(早稲田大基幹理工<sup>1</sup>, JAEA<sup>2</sup>) ○塚崎壮輔<sup>1</sup>, 奥村雅彦<sup>2</sup>, 山本知之<sup>1</sup>
- 168P** 機械学習分子動力学法を用いた蛍石構造における高温比熱異常の解析  
(JAEA) ○小林恵太, 中村博樹, 奥村雅彦, 板倉充洋, 町田昌彦
- 169P** 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>
- 170P** クラスレートハイドレート同位体の原子核量子効果  
(慶大理工<sup>1</sup>, 原子力研<sup>2</sup>) ○岸本寛隆<sup>1,2</sup>, 泰岡顕治<sup>1</sup>, Bo Thomsen<sup>2</sup>, 志賀基之<sup>2</sup>

- 171P** 熱電変換素子開発のための焼結多孔体中のフォノン輸送・電気伝導解析  
(京大・工<sup>1</sup>, 三菱電機・先端研<sup>2</sup>) ○佐藤萌香<sup>1</sup>, 松本充弘<sup>1</sup>, 高原芳弥<sup>1</sup>, 梶並信彦<sup>2</sup>, 花岡美咲<sup>2</sup>, 岩川学<sup>2</sup>
- 172P** 体外式膜型人工肺 ECMO の中空糸膜中の水と酸素のダイナミクスの単純なモデル膜による検討  
(近大生物理工<sup>1</sup>, 近大院生物理工<sup>2</sup>) ○芝崎亮汰<sup>1</sup>, 中条貴裕<sup>2</sup>, 福田誠<sup>1,2</sup>, 宮下尚之<sup>1,2</sup>
- 173P** 酸化セリウム触媒によるニトリル水和反応機構の自由エネルギー解析  
(東大工<sup>1</sup>, 大阪公立大工<sup>2</sup>) ○遠藤昂晶<sup>1</sup>, 池田龍志<sup>1</sup>, 村岡恒輝<sup>1</sup>, 喜多祐介<sup>2</sup>, 田村正純<sup>2</sup>, 中山哲<sup>1</sup>
- 174P** 不凍分子 p-テルフェニルグアニジンの DFT-MD シミュレーション：部分的プロトン化と変形  
(名工大工) ○家田竜之介, 尾形修司, 柴田哲男
- 175P** 全原子分子動力学手法を用いた高分子摩擦メカニズムの解明  
(旭化成<sup>1</sup>, 兵庫県大情報<sup>2</sup>) ○金城知広<sup>1</sup>, 山本拳<sup>1</sup>, 青柳岳司<sup>1</sup>, 三枝俊亮<sup>1</sup>, 鷲津仁志<sup>2</sup>
- 176P** (Pyridylamido)Hf(IV) 錯体による 1-オクテン重合反応の全原子シミュレーション：実時間スケールでのイオン対活性種の構造変化  
(名大・院情報<sup>1</sup>, JST-CREST<sup>2</sup>, 京大・ES-ICB<sup>3</sup>, 名大・価値創<sup>4</sup>) ○松本健太郎<sup>1</sup>, 三澤奈々<sup>1</sup>, 鈴木雄一<sup>1</sup>, Saha Soumen<sup>1,2,3</sup>, 古賀伸明<sup>1,2,4</sup>, 長岡正隆<sup>1,2,3,4</sup>
- 177P** 架橋反応分子動力学シミュレーションにおける結合組み換え判定パラメータの影響および反応速度論的考察  
(豊田中研) ○金城友之
- 178P** トポロジカルガラスの起源解明：環状高分子に対するパーシステントホモロジー解析  
(阪大院基礎工<sup>1</sup>, 産総研<sup>2</sup>, エディンバラ大学<sup>3</sup>) ○後藤頌太<sup>1</sup>, 中村壮伸<sup>2</sup>, Davide Micheletto<sup>3</sup>, 金鋼<sup>1</sup>, 松林伸幸<sup>1</sup>
- 179P** 粗視化分子動力学シミュレーションによるポリテトラフルオロエチレンのインデンテーション特性の解析  
(RIST<sup>1</sup>, GSI クレオス<sup>2</sup>) ○浅野優太<sup>1</sup>, 柳澤隆<sup>2</sup>, 城野亮太<sup>1</sup>
- 180P** 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, 後藤頌太, 金鋼, 松林伸幸
- 181P** 高分子中の小分子の溶解性および拡散性への結晶化の影響  
(阪大院基礎工) ○小嶋秀和, 向江謙心, 矢ヶ崎琢磨, 松林伸幸
- 182P** 粗視化分子動力学法を活用したポリカーボネート中の二酸化炭素の発泡素過程の解析  
(名大院工) ○原田勇杜, 君塚肇
- 183P** 燃料電池触媒層における大規模分子動力学計算を活用した酸素の局所拡散係数解析  
(トヨタ自動車<sup>1</sup>, 分子研<sup>2</sup>, 福岡大理<sup>3</sup>, 横浜市大<sup>4</sup>, 関西大<sup>5</sup>) ○岡村優希<sup>1,5</sup>, 湯之也<sup>2</sup>, 永井哲郎<sup>3</sup>, 井本裕貴<sup>5</sup>, 木村将之<sup>1</sup>, 岡崎進<sup>4</sup>, 藤本和士<sup>5</sup>
- 184P** 液体の体積粘性率に対する三体相互作用の効果  
(新潟大院自然<sup>1</sup>, 新潟大理<sup>2</sup>, 北里大未来工<sup>3</sup>) ○小林寛武<sup>1</sup>, 青木美穂<sup>2</sup>, 石井良樹<sup>3</sup>, 大鳥範和<sup>2</sup>
- 185P** 摺動下の金属表面におけるリン系・硫黄系極圧添加剤の挙動解析  
(兵庫県大情報) ○今井総, 鷲津仁志
- 186P** 離散要素法を用いた 2 成分からなる摩擦のモデルの検討  
(RIST<sup>1</sup>, GSI クレオス<sup>2</sup>) ○牧野真人<sup>1</sup>, 柳澤隆<sup>2</sup>, 城野亮太<sup>1</sup>
- 187P** 分子動力学シミュレーションによる細孔内部における水雰囲気下の酸素挙動解析  
(パナ・EW 社) ○高畑昌弘, 山名正人
- 188P** 粒子モデルを用いた赤血球の座屈現象の解析  
(慶大理工<sup>1</sup>, 東大物性研<sup>2</sup>) ○山本哲也<sup>1,2</sup>, 渡辺宙志<sup>1</sup>, 野口博司<sup>2</sup>
- 189P** 結晶性高分子の冷却過程における結晶化度の温度・時間依存性  
(工学院大工<sup>1</sup>, 産総研 CD-FMat<sup>2</sup>) ○高野美巳生<sup>1,2</sup>, 平塚将起<sup>1</sup>, 高橋和義<sup>2</sup>
- 190P** 非即時的相互作用によって誘発される走化性細菌の集団運動  
(兵庫県大情報) ○森脇遼太, 安田修悟
- 191P** 分子動力学計算を用いた“お椀型”分子が形成する集合体構造に対する安定性評価と自己集合化過程の再現  
(北里大院理<sup>1</sup>, 理研 CEMS<sup>2</sup>, 香港中文大理工<sup>3</sup>, 北里大未来工<sup>4</sup>, KISTEC<sup>5</sup>) ○佐藤俊輔<sup>1</sup>, Barun Dhara<sup>2</sup>, 宮島大吾<sup>3</sup>, 渡辺豪<sup>1,4,5</sup>
- 192P** 分子動力学シミュレーションを用いたゴム-水界面のプレメルト層の解析  
(慶大理工) ○小島拓海, 安田一希, 佐藤碧海, 荒井規允, 泰岡顕治



- 193P** ポリスチレン S-I 型結晶膜を用いた混合気体の競合下での分子挙動解析  
(福井大院工<sup>1</sup>, 福井大工<sup>2</sup>) ○細木原薫乃<sup>1</sup>, 玉井良則<sup>2</sup>
- 194P** 量子計算による摩擦帯電現象の解析  
(京都大工) ○河野達朗, 山崎滉太, 松本充弘
- 195P** 茶カテキンによる OH ラジカル捕捉機構の分子動力学シミュレーション  
(京工繊大<sup>1</sup>, 量研関西<sup>2</sup>, 核融合研<sup>3</sup>, 名古屋大<sup>4</sup>, 富山高専<sup>5</sup>, 京都大<sup>6</sup>, 静岡大<sup>7</sup>) ○栗山玲温<sup>1,2</sup>, 藤原進<sup>1</sup>, 米谷佳晃<sup>2</sup>, 中村浩章<sup>3,4</sup>, 阿蘇司<sup>5</sup>, 平野祥之<sup>4</sup>, 大塚教雄<sup>6</sup>, 大矢恭久<sup>7</sup>
- 209P** 星型構造を有する温度応答性高分子に関する分子シミュレーション  
(北大総合化学<sup>1</sup>, 北大工<sup>2</sup>, 長春理工大材<sup>3</sup>, 三井化学<sup>4</sup>) ○水谷駿介<sup>1</sup>, 菊池誠也<sup>4</sup>, 山本拓矢<sup>1,2</sup>, 覚知豊次<sup>3</sup>, 佐藤信一郎<sup>1,2</sup>
- 210P** 分子シミュレーションを用いた低濃度水性クレンジング剤の洗浄メカニズムの解明  
(ファンケル<sup>1</sup>, 慶大理工<sup>2</sup>, 日光ケミカルズ<sup>3</sup>) 三澤秀樹<sup>1</sup>, 横山貴洗<sup>2</sup>, 三園武士<sup>3</sup>, 中武良一<sup>1</sup>, ○荒井規允<sup>2</sup>
- 211P** 溶質サイズによって変化する疎水性相互作用の駆動因子  
(岡山大院自然<sup>1</sup>, 岡山大基礎研<sup>2</sup>) ○内藤秀文<sup>1</sup>, 墨智成<sup>2</sup>, 甲賀研一郎<sup>2</sup>

## 【2日目】

- 201P** 散逸粒子動力学法を用いた刺激応答性ポリマー存在下での水/油/界面活性剤系におけるアクティブマター制御  
(慶大理工) ○神庭芳史, 佐々木謙, 渡邊彩乃, 伴野太祐, 荒井規允
- 202P** 分子動力学法によるナノ液滴の構造解析  
(広大院先進理工<sup>1</sup>, 東大物性研<sup>2</sup>) ○島菜々美<sup>1</sup>, 原田慈久<sup>2</sup>, 高橋修<sup>1</sup>
- 203P** イオン液体中における Trp-cage の全原子 MD 解析  
(阪大院基礎工) ○陳元傑, 大坂龍司, 笠原健人, 松林伸幸
- 204P** DMSO-水分子間相互作用の強度評価: 有効フラグメントポテンシャル-分子動力学計算  
(お茶大院人間文化創成科学<sup>1</sup>, お茶大基幹研究院<sup>2</sup>) ○石郷岡知里<sup>1</sup>, 黒木菜保子<sup>2</sup>
- 205P** ポリグリセリン脂肪酸エステルを用いた O/W 型エマルジョンの乳化安定性に関する研究  
(慶大院理工<sup>1</sup>, 慶大理工<sup>2</sup>) ○鈴木虎次郎<sup>1</sup>, 荒井規允<sup>2</sup>
- 206P** 2成分剛体球系の拡散係数における Stokes-Einstein 則の破れ  
(新潟大工) ○金子和彦, 中村有花, 林智彦
- 207P** 水モデルの多極子モーメントの規則性  
(熊本大生命科学) ○佐藤恭介
- 208P** MD シミュレーションとエネルギー表示法を用いたアミン水溶液中の水の溶媒和自由エネルギーおよび水蒸気圧の評価  
(名古屋大工) ○横山裕紀, 安田啓司, 山口毅
- 212P** 電子連続体補正が逆ミセルの構造に与える影響  
(兵庫県大情報) ○西村泰風, 岡本隆一, 鷲津仁志
- 213P** MD シミュレーションによるタンパク質アモルファス凝集に対する共溶媒効果の自由エネルギー解析  
(阪大院基礎工) ○田川雄大, 笠原健人, 松林伸幸
- 214P** 膜グラフト高分子のコンフォメーション転移による拡散係数への影響  
(東北大理<sup>1</sup>, 山口大創成科学<sup>2</sup>) ○高田翔太郎<sup>1</sup>, 村島隆浩<sup>1</sup>, 浦上直人<sup>2</sup>, 川勝年洋<sup>1</sup>, 今井正幸<sup>1</sup>, 佐久間由香<sup>1</sup>
- 215P** 分子動力学シミュレーションを用いた AMP 活性化プロテインキナーゼへの競合的なりガンド結合に関する研究  
(金沢大院自然研) ○村上大河, 川口一朋, 長尾秀実
- 216P** 不均一溶媒系における会合反応の熱力学・動学的解析  
(阪大院基礎工) ○丸山優星, 笠原健人, 松林伸幸
- 217P** PaCS-MD によるアクトミオシンの解離予測  
(科学大・生命理工<sup>1</sup>, 科学大・生命機能<sup>2</sup>) ○林怜矢<sup>1</sup>, 北尾彰朗<sup>1</sup>, 難波啓一<sup>2</sup>
- 218P** 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>
- 219P** 蛍光分子の膜溶解状態に対するアルコール添加効果の自由エネルギー解析  
(阪大院基礎工) ○岡部涼, 松原優弥, 笠原健人, 松林伸幸

- 220P** 脂質二重膜上における膜結合タンパク質 AKT のダイナミクスの解明  
(慶大理工) ○中垣友希, 山本詠士
- 221P** 力場レプリカ交換法と温度レプリカ交換法を結合した生体高分子シミュレーション手法の開発  
(金沢大・院自然<sup>1</sup>, 金沢大・理工<sup>2</sup>) ○為川倫<sup>1</sup>, 三浦伸一<sup>2</sup>
- 222P** 膜モジュレータ分子を用いた核酸の膜透過機構の解明  
(岡山大院環境生命自然<sup>1</sup>, 京大院工<sup>2</sup>, 岡山大基礎研<sup>3</sup>) ○門脇怜央<sup>1</sup>, Wenting Huo<sup>2</sup>, 三木康嗣<sup>2</sup>, 大江浩一<sup>2</sup>, 篠田渉<sup>3</sup>
- 223P** 芳香族環相互作用に注目した変異型アデノシン A2A 受容体とリガンドの結合と解離の分子動力学計算  
(科学大・生命理工<sup>1</sup>, 名大工<sup>2</sup>, 京大医<sup>3</sup>) ○堀立樹<sup>1</sup>, Tran Phuoc Duy<sup>1</sup>, 松岡佑真<sup>2</sup>, 堂浦智裕<sup>2</sup>, 荒谷剛史<sup>3</sup>, 浅田秀基<sup>3</sup>, 岩田想<sup>3</sup>, 清中茂樹<sup>2</sup>, 北尾彰朗<sup>1</sup>
- 224P** 分子シミュレーションを用いた claudin-5 への変異導入によるトランス結合阻害メカニズムの解析  
(慶大院理工<sup>1</sup>, KGRI<sup>2</sup>, 慶大医<sup>3</sup>, 東大先端研<sup>4</sup>, 理研 BDR<sup>5</sup>) ○石岡遼大<sup>1</sup>, 平野秀典<sup>1,3,5</sup>, 小和口昌愛<sup>1</sup>, 荒井規允<sup>1</sup>, 浅井誠<sup>2</sup>, 星野歩子<sup>4</sup>, 泰岡顕治<sup>1</sup>
- 225P** 多剤排出トランスポーター CmABCB1 構造変化の最小自由エネルギーパス計算と薬剤輸送過程の解析  
(大阪公立大理<sup>1</sup>, 横浜市大生命医<sup>2</sup>, 日医大<sup>3</sup>) ○森次圭<sup>1</sup>, 染谷拓<sup>2</sup>, 石田竜二<sup>2</sup>, 藤崎弘士<sup>3</sup>
- 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: 温度依存性と水分子との相互作用の影響  
(関西大大学院<sup>1</sup>, 関西大<sup>2</sup>) ○渡部大真<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>
- 227P** PEG と抗 PEG 抗体の動的立体構造解析による薬物送達システムの発展  
(科学大・生命理工<sup>1</sup>, 九州大工<sup>2</sup>, National Tsing Hua University (NTHU) <sup>3</sup>) ○伊藤悠世<sup>1</sup>, 森健<sup>2</sup>, Yiwei Liu<sup>2</sup>, 竹村和浩<sup>3</sup>, 北尾彰朗<sup>1</sup>
- 228P** 分子動力学法によるヒト血清アルブミンとパーフルオロアルキル化合物の結合シミュレーション  
(京都工繊大工芸<sup>1</sup>, 京都工繊大材料化学<sup>2</sup>, 兵庫県大理<sup>3</sup>) ○辻脇陽希<sup>1</sup>, 水口朋子<sup>2</sup>, 尾嶋拓<sup>3</sup>
- 229P** 分子動力学計算による膜タンパク質-ナノディスク複合体の形態解析  
(東理大院理) ○井上紗良, 森貴治
- 230P** 脂質二重膜を用いたイオン濃度勾配環境下での MD シミュレーション  
(明治大物理) ○田丸萩人, 光武重代理
- 231P** ナトリウムイオンによるアデノシン A<sub>2A</sub> 受容体のリガンド選択性への寄与  
(明治大学理工) ○有澤明浩, 光武重代理
- 232P** 気水界面におけるアミロイドβペプチドの自由エネルギープロファイル  
(富山大院理工<sup>1</sup>, 総研大<sup>2</sup>, 分子研<sup>3</sup>, ExCELLS<sup>4</sup>) ○齋藤大河<sup>1</sup>, 石山達也<sup>1</sup>, 伊藤暁<sup>2,3,4</sup>, 奥村久士<sup>2,3,4</sup>
- 233P** 不均一な脂質膜の水和構造とダイナミクスに対する解析手法の開発  
(阪大院基礎工) ○四方志, 笠原健人, 金銅, 松林伸幸
- 234P** 110S 参照
- 235P** ポリマーナノコンポジットのガラス転移温度に及ぼすナノ粒子表面の相互作用異質性の影響  
(京工繊大・機械) ○上田大晟, 小林祐生, 山川勝史
- 236P** 水溶性高分子ポリビニルアルコールにおける非晶部のモデル構築と相転移の分子論的探求  
(静岡大・院創造, (株)アイセロ<sup>1</sup>, 静岡大・工<sup>2</sup>, 静岡大・院創造, 静岡大・工<sup>3</sup>) ○大澤弘和<sup>1</sup>, 北村勇吉<sup>2</sup>, 鳥居肇<sup>3</sup>
- 237P** 203S 参照
- 238P** 粉体に現れる協調的なダイナミクスの起源  
(豊田中研<sup>1</sup>, 東大総合文化<sup>2</sup>) ○小山志穂里<sup>1</sup>, 大山倫弘<sup>1</sup>, 水野英如<sup>2</sup>, 池田昌司<sup>2</sup>
- 239P** ガラス形成液体の遅いダイナミクスを特徴づける静的特徴量の深層学習による探索  
(阪大院基礎工) ○吉川航平, 矢野健太郎, 後藤頌太, 金銅, 松林伸幸
- 240P** (発表取り下げ)
- 241P** 304S 参照
- 242P** 分子シミュレーションを用いたナノ粒子表面加工による誘電特性の解明  
(慶大理工<sup>1</sup>, IPF<sup>2</sup>) ○佐藤碧海<sup>1</sup>, Arash Nikoubashman<sup>2</sup>, 荒井規允<sup>1</sup>
- 243P** (発表取り下げ)

- 244P** 説明可能な深層学習によるイオン会合・解離過程の遷移状態を特徴づける記述子の探索  
(阪大院基礎工) ○岡田一志, 金鋼, 松林伸幸
- 245P** CMD 計算による量子ヘリウム同位体と古典高分子ばね-ビーズ模型との対応関係の解明  
(奈良女大院・人総) ○黒川萌楓, 衣川健一
- 246P** バルビツール酸誘導体が形成する超分子構造を再現するための楕円体型モデルを使用した粗視化モデル開発  
(大阪公大院理<sup>1</sup>, 大阪公大 RIMED<sup>2</sup>) ○高垣賢太郎<sup>1</sup>, 満田祐樹<sup>1,2</sup>, 麻田俊雄<sup>1,2</sup>
- 247P** マルチプルタウ法を用いた高分子鎖の平均二乗変位解析  
(東北大理) ○村島隆浩
- 248P** アンブレラサンプリング法を用いた超分子メカノフォアの自由エネルギー計算  
(北里大院未来工<sup>1</sup>, 北里大院理<sup>2</sup>, 科学大物質理工<sup>3</sup>, 北里大未来工<sup>4</sup>, KISTEC<sup>5</sup>) ○指方万智<sup>1</sup>, 新田海統<sup>2</sup>, 相良剛光<sup>3</sup>, 石井良樹<sup>4</sup>, 渡辺豪<sup>4,5</sup>
- 249P** Exploring Li-ion Transport in PMMA Polymer Electrolytes with LiFTA and LiTFSA Salts Through Molecular Dynamics Simulations  
(岡山大基礎研<sup>1</sup>, 横浜国大化学生命系<sup>2</sup>, 横浜国大 IAS<sup>3</sup>) ○Thummuru Dhileep Nagi Reddy<sup>1</sup>, 都築誠二<sup>3</sup>, 重信圭祐<sup>1</sup>, 須藤拓<sup>2</sup>, 上野和英<sup>2,3</sup>, 宇賀田洋介<sup>2</sup>, 篠田渉<sup>1</sup>
- 250P** 非相溶高分子ブレンドにおける分子力学シミュレーション  
(京大化研<sup>1</sup>, 金沢大学設計製造<sup>2</sup>) ○山本歩睦<sup>1</sup>, 松宮由実<sup>1</sup>, 佐藤健<sup>2</sup>
- 251P** 膜タンパク質複合体の構造安定性: 粗視化分子力場 SPICA2 による評価  
(岡大院環境生命<sup>1</sup>, 岡大異分野基礎研<sup>2</sup>) ○Tong Jingyun<sup>1</sup>, 篠田渉<sup>2</sup>
- 252P** Variationally Enhanced Sampling 法と反応経路解析を利用した Ibuprofen と Aspirin の生体膜透過性の解析  
(大阪公大院理<sup>1</sup>, 大阪公大 RIMED<sup>2</sup>) ○肥田吉騎<sup>1</sup>, 満田祐樹<sup>1,2</sup>, 麻田俊雄<sup>1,2</sup>
- 253P** 古典分子力学計算による化学反応の再現と不可逆反応による自由エネルギー変化  
(京大理<sup>1</sup>, 茨城大理<sup>2</sup>, 産総研<sup>3</sup>) ○吉田旭<sup>1</sup>, 平野菜奈子<sup>2</sup>, 中村壮伸<sup>3</sup>, 中川尚子<sup>2</sup>
- 254P** 一次相転移の効率的なサンプリングのためのガウス型統計集合を用いた新規レプリカ交換法の開発  
(金沢大院自然<sup>1</sup>, 金沢大理工<sup>2</sup>) ○大門駿介<sup>1</sup>, 三浦伸一<sup>2</sup>
- 255P** 新規有機半導体分子創製を目指した結晶構造予測基盤の開発  
(北里大院理<sup>1</sup>, 東大院新領域<sup>2</sup>, NIMS<sup>3</sup>, JST CREST<sup>4</sup>, 科学大物質理工<sup>5</sup>, 北里大未来工<sup>6</sup>, KISTEC<sup>7</sup>) ○篠崎雄大<sup>1</sup>, 關拓和<sup>1</sup>, 佐藤俊輔<sup>1</sup>, 伊藤良将<sup>1</sup>, 竹谷純一<sup>2,3,4</sup>, 岡本敏宏<sup>4,5</sup>, 渡辺豪<sup>1,4,6,7</sup>
- 256P** 有機ケイ素ポリマーに向けた GAFF 系拡張モデルと計算基盤の構築  
(北里大未来工) ○石井良樹, 渡辺豪
- 257P** 添加剤存在下でのグリシン結晶成長制御の全原子 MD 解析  
(阪大院基礎工) ○松田琢真, 笠原健人, 松林伸幸
- 258P** 定エネルギー法分子力学による二酸化炭素の 3 重点  
(お茶大理<sup>1</sup>, ENAA<sup>2</sup>, 法政大生命<sup>3</sup>) ○青山裕花<sup>1</sup>, 森義仁<sup>1</sup>, 竹内宗孝<sup>1</sup>, 河野巧<sup>2</sup>, 片岡洋右<sup>3</sup>
- 259P** OH ラジカルによる DNA からの水索引抜き反応の量子化学計算  
(京工繊大<sup>1</sup>, 量子研<sup>2</sup>, 富山高専<sup>3</sup>, 名大<sup>4</sup>, 核融合研<sup>5</sup>, 京大<sup>6</sup>, 富山大<sup>7</sup>) ○飯田匠<sup>1,2</sup>, 藤原進<sup>1</sup>, 米谷佳晃<sup>2</sup>, 阿蘇司<sup>3</sup>, 中村浩章<sup>4,5</sup>, 平野祥之<sup>4</sup>, 大塚教雄<sup>6</sup>, 原正憲<sup>7</sup>
- 260P** Adaptive-QM/MM 法を用いたバルク水中の水酸化物イオンのプロトン移動のシミュレーション手法の開発  
(九大理) ○吉村早織, 渡邊宙志
- 261P** 310S 参照
- 262P** 超流動ヘリウム液滴内の OCS 分子の回転定数と溶媒和構造  
(金沢大・院自然<sup>1</sup>, 金沢大・理工<sup>2</sup>) ○久司昂希<sup>1</sup>, 三浦伸一<sup>2</sup>
- 263P** PAN 系炭素繊維製造工程における化学反応モデリング 1: 環化反応の量子計算と反応エネルギー評価  
(京大工<sup>1</sup>, 三菱ケミカル<sup>2</sup>) ○角田瑞生<sup>1</sup>, 松本充弘<sup>1</sup>, 速水弘樹<sup>2</sup>, 小谷知之<sup>2</sup>, 湯原大輔<sup>2</sup>, 平岩竜一<sup>2</sup>
- 264P** 機械学習を用いたタンパク質の時系列動力学解析の検討  
(近大院生物理工<sup>1</sup>, 近大生物理工<sup>2</sup>) ○下河内翔太<sup>1</sup>, 塩田優真<sup>1</sup>, 宮下尚之<sup>1,2</sup>

- 265P** 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
- 266P** 機械学習による拡散ダイナミクスの予測 (慶大理工) ○榊光太, 遠藤克浩, 泰岡顕治
- 267P** 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<sup>1,2,3,5</sup>, 岡本敏宏<sup>4,5</sup>, 渡辺豪<sup>1,5,6,7</sup>
- 268P** 9元高エントロピー合金における機械学習力場の構築と応用 (名大院工) ○原幸佑, 大戸達彦, 君塚肇
- 269P** MDの画像データを用いた液晶性分子集団の相状態判別機械学習モデル (兵庫県大情報<sup>1</sup>, 株式会社ダイセル<sup>2</sup>) ○高橋和志<sup>1</sup>, 安田修悟<sup>1</sup>, 小田浩太郎<sup>2</sup>, 岩山将士<sup>2</sup>, 伊奈智秀<sup>2</sup>
- 270P** 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>
- 271P** 共役ポリマーナノシートの分子動力学シミュレーション (慶大理工) ○佐藤遼一, 荒井規允
- 272P** 強誘電体 BaTiO<sub>3</sub> の分極回転・反転電場の特異な温度依存性に関する分子動力学シミュレーション (名工大工<sup>1</sup>, FAU<sup>2</sup>) ○小川智央<sup>1</sup>, 吾妻真光<sup>1</sup>, 尾形修司<sup>1</sup>, 小林亮<sup>1</sup>, 浦長瀬正幸<sup>1</sup>, 都築貴寛<sup>1</sup>, 野崎拓実<sup>1</sup>, Dilshod Durdiev<sup>2</sup>, Frank Wendler<sup>2</sup>, Michael Zaiser<sup>2</sup>
- 273P** 半結晶性高分子の粘弾性と摩擦発現 (兵庫県大情報<sup>1</sup>, 九大情基セ<sup>2</sup>) ○小川雄大<sup>1</sup>, 樋口祐次<sup>2</sup>, 鷺津仁志<sup>1</sup>
- 274P** 液晶性ナノ自己組織化水処理膜の XES 計算 (広大院先進理工<sup>1</sup>, 北里大未来工<sup>2</sup>, 兵庫県立大情報<sup>3</sup>, 東大物性研<sup>4</sup>) ○高橋修<sup>1</sup>, 石井良樹<sup>2</sup>, 鷺津仁志<sup>3</sup>, 原田慈久<sup>4</sup>
- 275P** アルミニウムの樹脂接着における被着面粗さと水分の影響 (名工大工) ○高須健也, 尾形修司
- 276P** 熱可塑性デンプン/生分解性ポリエステル複合材料における相分離界面の密着性向上に関する研究 (日立製作所<sup>1</sup>, 慶大院理工<sup>2</sup>, 日立ハイテック<sup>3</sup>) ○山口晃寛<sup>1,2</sup>, 荒井聡<sup>3</sup>, 荒井規允<sup>2</sup>
- 277P** 分子動力学計算による高分子電解質のレオロジー解析 (京大化研<sup>1</sup>, 金沢大学設計製造<sup>2</sup>) ○戸崎友博<sup>1</sup>, 松宮由美<sup>1</sup>, 佐藤健<sup>2</sup>
- 278P** エネルギー表示法によるネマチック-等方相転移の熱力学的安定性の評価 (阪大院基礎工<sup>1</sup>, 北里大未来工<sup>2</sup>, 兵庫県大情報<sup>3</sup>) ○荻田隼輔<sup>1</sup>, 石井良樹<sup>2</sup>, 渡辺豪<sup>2</sup>, 鷺津仁志<sup>3</sup>, 金鋼<sup>1</sup>, 松林伸幸<sup>1</sup>
- 279P** 結晶セルロース、アモルファスセルロース/水界面における分子構造の解明 (富山大院理工) ○角田拓海, 石山達也
- 280P** ポリマーブラシ/水界面の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
- 281P** 湿熱処理がエポキシ樹脂の接着特性に与える影響に関する分子動力学解析 (東レリサーチセンター) ○仲啓志, 萬尚樹
- 282P** 溶媒抽出法における金属錯体の界面透過過程 (住友金属鉱山) ○西原泰孝
- 283P** 金属固体の摩擦・摩耗を対象とした SPH シミュレーション (兵庫県大情報<sup>1</sup>, 鹿児島高専機械<sup>2</sup>) ○藤田晃徳<sup>1</sup>, 石原大嵩<sup>2</sup>, 杉村奈都子<sup>2</sup>, 鷺津仁志<sup>1</sup>
- 284P** Janus 表面を導入したナノ流体の熱伝導率 (京工織大院<sup>1</sup>, 京工織大<sup>2</sup>) ○池田高浩<sup>1</sup>, 小林祐生<sup>2</sup>, 山川勝史<sup>2</sup>
- 285P** 多層酸化グラフェンの摩擦挙動に対する雰囲気分子の影響 (兵庫県大情報<sup>1</sup>, 兵庫県大工<sup>2</sup>) ○友清貴之<sup>1</sup>, 木之下博<sup>2</sup>, 鷺津仁志<sup>1</sup>
- 286P** 205S 参照
- 287P** Stochastic thermodynamics の分子シミュレーション系への応用 (京都大学工学研究科) ○高屋智考, 松本充弘
- 288P** 銅(II)系1次元配位高分子の結晶融解における局所構造変化解析 (京大院工<sup>1</sup>, 京大院理<sup>2</sup>, VISTEC<sup>3</sup>, 京大 iCeMS<sup>4</sup>) ○小原勇輝<sup>1</sup>, 西口大智<sup>1</sup>, 堀毛悟史<sup>2,3</sup>, Daniel Packwood<sup>4</sup>

- 289P** 高分子表面の末端基に依存した水滴に対する濡れ性と吸着面における水分子の挙動  
(福井大院工<sup>1</sup>, 福井大工<sup>2</sup>) ○中村瑛岐<sup>1</sup>, 古石貴裕<sup>2</sup>
- 290P** Investigating the Nanostructure Design Mechanism Behind the Hydrophobicity of Biomimetic Surface: Insights from Butterfly and Mosquito Systems  
(慶大理工<sup>1</sup>, 北京化工大数物<sup>2</sup>) ○孟凡<sup>1</sup>, Jialong Liu<sup>2</sup>, 荒井規允<sup>1</sup>
- 291P** ナノスケール水チャンネルで生じる流れのメカニズム  
(福井大工) ○上坂康太, 古石貴裕
- 292P** 水中の PHEMA ブラシに対する中性アミノ酸側鎖類似分子の吸着挙動解析  
(阪大院基礎工) ○一井桜, 矢ヶ崎琢磨, 松林伸幸
- 293P** 有機フッ素化合物系単分子膜における SDA 理論の検証  
(兵庫県大情報<sup>1</sup>, 京大化研<sup>2</sup>) ○花野竜士<sup>1</sup>, 小林健洋<sup>1</sup>, 岡本隆一<sup>1</sup>, 長谷川健<sup>2</sup>, 鷺津仁志<sup>1</sup>
- 294P** 三次元的な狭隘空間内に生じる氷  
(岡大理) ○河野雄太, 松本正和
- 295P** daisy chain 擬ロタキサンの会合メカニズムおよび安定性の解明  
(関西大院理工<sup>1</sup>, 関大 ORDIST<sup>2</sup>, 大阪歯大歯<sup>3</sup>, 関西大化生<sup>4</sup>) ○後藤亨佑<sup>1</sup>, 保田侑亮<sup>2</sup>, 津田進<sup>3</sup>, 西山豊<sup>4</sup>, 藤本和士<sup>4</sup>