

# 第 33 回分子シミュレーション討論会 講演プログラム

(令和元年 11 月 19 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、日本生物物理学会、日本薬学会、日本コンピュータ化学会、  
分子科学会、日本物理学会、応用物理学会、高分子学会、溶液化学研究会、化学工学会  
協賛企業 : 株式会社クロスアビリティ、株式会社モルシス、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 HPC テック、シュレーディンガー株式会社、  
株式会社富士通九州システムズ、一般財団法人高度情報科学技術研究機構、  
伊藤忠テクノソリューションズ株式会社、アプライド株式会社  
会期 : 2019 年 12 月 9 日 (月) ~ 2019 年 12 月 11 日 (水)  
会場 : 名古屋市公会堂 4 F ホール  
〒466-0064 名古屋市昭和区鶴舞一丁目1番3号  
地下鉄鶴舞線「鶴舞駅」下車 4 番出口徒歩 2 分、JR 中央線「鶴舞駅」下車徒歩 2 分  
HP : <http://sympo.mol-sim.jp/mssj33/>

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

講演者記号記号 : ○印=発表者

<b>1 日目 12 月 9 日 (月)</b>	<b>104S</b> 水溶液の液-液相転移 (岡大基礎研) ○矢ヶ崎琢磨, 松本正和, 田中秀樹
<b>9:15-9:55</b> 開場, 受付	<b>105S</b> 分子動力学法による液化過程と spinodal 線 (法政大生命) ○片岡洋右
<b>9:55-10:00</b> 開会の辞 会長 田中秀樹 (岡山大)	
— 午前の部 —	— 休憩 11:25-11:30 —
<b>10:00-11:25</b> 口頭発表 A 座長: 山口 毅 (名大)	<b>11:30-12:30</b> ポスター発表 101P-178P (奇数) (講演タイトルはプログラムの末尾に記載)
<b>101S</b> 不均一系での物質輸送を評価の際に利用する位置に依存した拡散係数の新規評価方法 (名大・工) ○永井哲郎, 弦巻周平, 浦野諒, 藤本和士, 篠田渉, 岡崎進	— 昼食 12:30-13:30 —
<b>102S</b> 水の誘電緩和スペクトルの微視的起源の探索 (大分大 <sup>1</sup> , 福工大 <sup>2</sup> ) ○岩下拓哉 <sup>1</sup> , 中西真大 <sup>2</sup>	— 午後の部 —
<b>103L</b> 単純液体とガラスの普遍的な短距離秩序と物質に依存するガラス形成能 (産総研) ○西尾憲吾, Lu Anh Khoa Augustin, 宮崎剛英	<b>13:30-14:30</b> ポスター発表 101P-178P (偶数) (講演タイトルはプログラムの末尾に記載)
	— 休憩 14:30-14:35 —
	<b>14:35-15:30</b> 口頭発表 F 座長: 志賀基之 (原子力機構)

- 210L** 非晶高分子の衝撃破壊に関する分子論的研究 (名大院工) ○藤本和士, 湯之也, 岡崎進
- 211S** パーシステントホモロジーを用いた (自由) エネルギー地形の表現 (産総研) ○中村壮伸
- 212S** Molecular Simulations of Ionic-Liquid-based Electrical Double Layer Capacitors (東北大金研) ○Bonnaud Patrick, 芝隼人

— 休憩 15:30-15:40 —

**15:40-16:50 口頭発表 B**

座長: 荒井規允 (慶応大)

- 107S (247P)** 分子動力学計算による界面活性剤含水ラメラの構造決定および分子挙動に関する研究 (花王<sup>1</sup>, 名大院工・応物化<sup>2</sup>, 名大院工・計算セ<sup>3</sup>) ○武田康助<sup>1</sup>, 安藤嘉倫<sup>2,3</sup>, 篠田渉<sup>2</sup>, 岡崎進<sup>2,3</sup>
- 108S** Poly(vinylidene fluoride) (PVDF) 表面における良溶媒および良/貧混合溶媒による濡れ性の分子論的研究 (ADMAT<sup>1</sup>, 名大院工<sup>2</sup>, 東レ<sup>3</sup>) ○北畑雅弘<sup>1,2,3</sup>, Tseden Taddese<sup>2</sup>, 岡崎進<sup>2</sup>
- 109S** 粗視化分子力場 pSPICA を用いたペプチドによる膜細孔形成過程の解析 (名大院工) ○宮崎裕介, 岡崎進, 篠田渉
- 110L** 2つの拡張アンサンブル法を組合せた生体分子の自由エネルギー計算法の開発 (理研 BDR<sup>1</sup>, 理研 R-CCS<sup>2</sup>, 理研 CPR<sup>3</sup>) ○尾嶋拓<sup>1</sup>, 李秀榮<sup>1</sup>, 杉田有治<sup>1,2,3</sup>

— 休憩 16:50-17:00 —

**17:00-18:00 口頭発表 C**

座長: 藤崎弘士 (日医大)

- 111S (161P)** 変更した熱力学経路による効率的なりガンド-レセプター間の結合自由エネルギー計算法 (RIST<sup>1</sup>, テンプル大<sup>2</sup>, ペース大<sup>3</sup>) ○榮慶丈<sup>1</sup>, Bin W. Zhang<sup>2</sup>, Ronald M. Levy<sup>2</sup>, Nanjie Deng<sup>3</sup>
- 112S** タンパク質-リガンドドッキングに基づく小胞体グルコシダーゼ II 阻害剤候補化合物の選出 (日大院生資科) ○飯泉寛
- 113S** 自己学習ハイブリッドモンテカルロ法: 機械学習による第一原理分子シミュレーションの高速化 (原子力機構シ計セ<sup>1</sup>, 理研 AIP<sup>2</sup>, RIST<sup>3</sup>) ○永井佑紀<sup>1,2</sup>, 奥村雅彦<sup>1</sup>, 小林恵太<sup>3</sup>, 志賀基之<sup>1</sup>

- 114S** 第一原理計算に基づいた機械学習によるアルカリ金属の融点の決定 (熊大院自然<sup>1</sup>, 九産大理工<sup>2</sup>, 神戸大院シス情<sup>3</sup>, 熊大院先端<sup>4</sup>, 南カリフォルニア大<sup>5</sup>) ○福島省吾<sup>1</sup>, 牛島栄作<sup>1</sup>, 三澤賢明<sup>2</sup>, 島村孝平<sup>3</sup>, 高良明英<sup>1</sup>, 下條冬樹<sup>4</sup>, Aiichiro Nakano<sup>5</sup>, Rajiv K. Kalia<sup>5</sup>, Priya Vashishta<sup>5</sup>

**2 日目 12月10日 (火)**

**9:00-9:20 開場, 受付**

— 午前部 —

**9:20-10:20 口頭発表 D**

座長: 光武亜代理 (明大)

- 201S (259P)** 新規ペプチド薬の HSP90 との結合機構・機能阻害メカニズム (近大・生物理工<sup>1</sup>, 電通大・情報理工<sup>2</sup>) ○松倉里紗<sup>1</sup>, 望月和人<sup>2</sup>, 宮下尚之<sup>1,2</sup>, 瀧真清<sup>2</sup>, 渡辺信一<sup>2</sup>
- 202S** 重み付きアンサンブル法による生体分子の構造変化ダイナミクスの計算 (日医大<sup>1</sup>, 横浜市大<sup>2</sup>, 埼玉大<sup>3</sup>) ○藤崎弘士<sup>1</sup>, 森次圭<sup>2</sup>, 松永康佑<sup>3</sup>
- 203S (177P)** B 型肝炎ウイルス (HBV) への逆転写阻害薬剤分子の自由エネルギー計算によるカプシド内部への吸収・透過機構の解明 (名大院工<sup>1</sup>, 名大院工計算センター<sup>2</sup>) ○浦野諒<sup>1</sup>, 藤本和士<sup>1</sup>, 安藤嘉倫<sup>2</sup>, 吉井範行<sup>2</sup>, 篠田渉<sup>1</sup>, 岡崎進<sup>1</sup>
- 204S (252P)** 複雑な分子系の自由エネルギーを特徴づける反応座標の探索: コミッターと最尤推定法の融合 (阪大院基礎工<sup>1</sup>, 分子研<sup>2</sup>) ○森勇介<sup>1</sup>, 岡崎圭一<sup>2</sup>, 森俊文<sup>2</sup>, 金鋼<sup>1</sup>, 松林伸幸<sup>1</sup>

— 休憩 10:20-10:30 —

**10:30-11:45 口頭発表 E**

座長: 芝隼人 (東北大)

- 205S (212P)** 過渡的な結合を用いたからみあった高分子の粗視化分子シミュレーションモデル (名大工) ○畝山多加志, 増淵雄一
- 206S** エポキシ樹脂の硬化反応シミュレーション (九大院工<sup>1</sup>, ダッソーシステムズ<sup>2</sup>) ○山本智<sup>1</sup>, 桑原理一<sup>2</sup>, 田中敬二<sup>1</sup>

- 207S 高分子修飾基板表面-液体間の接着性評価のための自由エネルギー計算手法の構築 (名工大) ○浦長瀬正幸, 尾形修司
- 208S 高分子溶融体の中間散乱関数のオンザフライ計算 (東大理) ○村島隆浩
- 209S (141P) 分子動力学計算による炭素複合材の引張りシミュレーション (CTC<sup>1</sup>, MGC<sup>2</sup>, 東京理科大<sup>3</sup>) ○森一樹<sup>1</sup>, 矢部誠<sup>1</sup>, 松本信彦<sup>2</sup>, 小柳潤<sup>3</sup>

— 休憩 11:45-11:50 —

- 11:50-12:50 ポスター発表 201P-277P(奇数)  
(講演タイトルはプログラムの末尾に記載)

— 昼食 12:50-13:50 —

— 午後の部 —

- 13:50-14:50 ポスター発表 201P-277P(偶数)  
(講演タイトルはプログラムの末尾に記載)

— 休憩 14:50-14:55 —

- 14:55-15:45 招待講演 I

座長: 岡崎 進 (名大)

- 106IL 神戸大学先端膜工学研究センターにおける膜工学研究最前線 (神戸大学先端膜工学研究センター) ○松山秀人

— 休憩 15:45-16:00 —

- 16:00-16:50 招待講演 II

座長: 吉井範行 (名大)

- 213IL 第一原理酸化還元反応シミュレーション (物材機構) ○館山佳尚

— 休憩 16:50-17:00 —

- 17:00-17:35 受賞講演

座長: 北尾彰朗 (東工大)

- 214AL タンパク質の機能発現に重要なレイイベントを抽出するサンプリング手法の開発(筑波大計セ) ○原田隆平

- 17:35-18:15 学会総会

- 18:25-20:25 懇親会

3日目 12月11日(水)

- 9:00-9:20 開場, 受付

— 午前の部 —

- 9:20-10:20 口頭発表 G

座長: 磯部雅晴 (名工大)

- 301S ガラスにおける音波伝搬: 非調和性と弾性不均一性 (東大院総合文化<sup>1</sup>, Univ. of Roma<sup>2</sup>, Univ. of Grenoble<sup>3</sup>) ○水野英如<sup>1</sup>, Giancarlo Ruocco<sup>2</sup>, Stefano Mossa<sup>3</sup>

- 302S (211P) ダイマー粒子系の低周波数局在振動 (東大総合文化) ○白石薫平, 水野英如, 池田昌司

- 303S 2次元ガラス形成液体の粘弾性特性と緩和過程 (東北大金研<sup>1</sup>, 名大理<sup>2</sup>, 阪大基礎工<sup>3</sup>) ○芝隼人<sup>1</sup>, 川崎猛史<sup>2</sup>, 金鋼<sup>3</sup>

- 304S (113P) 理想気体中の粒子の短時間ダイナミクス (名大院工) ○仲井文明, 畝山多加志, 増渕雄一

— 休憩 10:20-10:30 —

- 10:30-11:40 口頭発表 H

座長: 金鋼 (阪大)

- 305S 障害物による歩行者流れの促進 (豊田中研) ○小山志穂里, 井上大輔, 岡田明久, 吉田広頭

- 306S カルマン渦に対するキャビテーションの影響 (東大物性研<sup>1</sup>, 慶大理工<sup>2</sup>) ○浅野優太<sup>1</sup>, 渡辺宙志<sup>2</sup>, 野口博司<sup>1</sup>

- 307S (115P) 分子動力学プログラムを用いた弾性体の有限要素解析計算法 (株式会社クロスアビリティ) ○日野理

- 308L Travelling without Dwelling: ポアンカレ加速ダイナミクス (産総研<sup>1</sup>, 核融合研<sup>2</sup>) ○森下徹也<sup>1</sup>, 伊藤篤史<sup>2</sup>

— 休憩 11:40-11:50 —

- 11:50-12:50 口頭発表 I

座長: 金城友之 (豊田中研)

- 309S せん断場下におけるトラクションフルードの特性シミュレーションおよび分子構造分布解析 (高度情報科学技術研究機構<sup>1</sup>, 出光興産<sup>2</sup>, 兵庫県立大<sup>3</sup>) ○富山栄治<sup>1,3</sup>, 岩崎猛<sup>2</sup>, 鷲津仁志<sup>3</sup>

- 310S** MD/DFT/MC 連携による有機半導体材料結晶多形移動度の比較検討 (産総研) ○米谷慎
- 311S** CRK 分極モデルを用いた Maxwell + MD マルチスケールシミュレーションの開発 (筑波大計セ) ○山田篤志
- 312S** 電子温度依存型力場を用いたレーザーアブレーション分子動力学シミュレーション (名工大院工) ○小林亮

— 昼食 12:50-13:50 —

— 午後の部 —

**13:50-14:50** 口頭発表 J

座長：伊藤篤史 (核融合研)

- 313S** 多環芳香族分子のヘリンボーン構造の安定性 (産総研機能材料<sup>1</sup>, 東大物工<sup>2</sup>) ○都築誠二<sup>1</sup>, 下位幸弘<sup>1</sup>, 荒井俊人<sup>2</sup>, 長谷川達生<sup>2</sup>
- 314S** シリコン系セラミックスの摩擦界面で自己形成する潤滑膜の分子動力学シミュレーション解析 (東北大・金研<sup>1</sup>, 東北大院・工<sup>2</sup>) ○大谷優介<sup>1</sup>, 許競翔<sup>1</sup>, 高橋直己<sup>1</sup>, 赤上研太<sup>2</sup>, 足立幸志<sup>2</sup>, 久保百司<sup>1</sup>
- 315S** 水溶液中での二酸化鉛表面上の硫酸イオンの吸着 (関西電力技研) ○窪田善之, 橋上聖, 田中篤嗣, 吉田洋之
- 316S (129P)** 溶媒効果を取り入れた固液界面における物理吸着の解析：速度論と平衡論 (阪大院基礎工) ○山本直樹, 松林伸幸

— 休憩 14:50-15:00 —

**15:00-16:15** 口頭発表 K

座長：畝山多加志 (名大)

- 317L** 摩耗、発熱、塑性を考慮したせん断摩擦に関する SPH シミュレーション (東京都市大<sup>1</sup>, 兵庫県大<sup>2</sup>) ○杉村奈都子<sup>1,2</sup>, Le Van Sang<sup>2</sup>, 三原雄司<sup>1</sup>, 鷲津仁志<sup>2</sup>
- 318L** solute adaptive QM/MM 分子動力学法によるプロトン移動 (慶應大量子<sup>1</sup>, JST さきがけ<sup>2</sup>) ○渡邊宙志<sup>1,2</sup>
- 319L** Channel-flow clogging of colloidal suspensions (中科院大温州研) ○瀬戸亮平

— 休憩 16:15-16:25 —

**16:25-17:10** 口頭発表 L

座長：永井哲郎 (名大)

- 320S (233P)** 樹脂-金属接合界面の分子動力学シミュレーション (豊田中研) ○金城友之, 米山弘亮, 梅本和彦
- 321S (173P)** The billion-atom simulation in biology with GENESIS on Intel Xeon Phi (KNL) (RIKEN CPR<sup>1</sup>, RIKEN R-CCS<sup>2</sup>, RIKEN BDR<sup>3</sup>) ○Jung Jaewoon<sup>1,2</sup>, 小林千草<sup>2</sup>, 杉田有治<sup>1,2,3</sup>
- 322S (176P)** 次期スパコン「富岳」での大規模・長時間分子動力学計算実現のためのソフトウェア MODYLAS の性能向上 (名大院工 計算セ<sup>1</sup>, 玉川大工 情通工<sup>2</sup>, 名大院工 応物化<sup>3</sup>) ○安藤嘉倫<sup>1</sup>, 坂下達哉<sup>2</sup>, 張家超<sup>3</sup>, 朱喆<sup>3</sup>, 浦野諒<sup>3</sup>, 藤本和士<sup>3</sup>, 吉井範行<sup>1,3</sup>, 岡崎進<sup>1,3</sup>

**17:10-17:15** 閉会の辞

ポスター発表

1 日目

- 101P** Force-Fitting 法で構築したイオン液体の非分極力場とその輸送物性 (阪大院基礎工<sup>1</sup>, 京大 ESICB<sup>2</sup>) ○石井良樹<sup>1</sup>, HAKIM Lukman<sup>1,2</sup>, 松林伸幸<sup>1,2</sup>
- 102P** 水溶液中の疎水性溶質の溶解度に対するイオンサイズ効果 (岡山大院自然<sup>1</sup>, 岡山大基礎研<sup>2</sup>) ○甲藤寛之<sup>1</sup>, 岡本隆一<sup>2</sup>, 墨智成<sup>2</sup>, 甲賀研一郎<sup>2</sup>
- 103P** 氷表面での分子動力学シミュレーションによるイオン分布の解明 (富山大院工) ○北中一也, 石山達也
- 104P** 氷 Ih 内における大気微量物質の拡散機構 (岡山大院・自然科学<sup>1</sup>, 岡山大・基礎研<sup>2</sup>) ○平田雅典<sup>1</sup>, 矢ヶ琢磨<sup>2</sup>, 松本正和<sup>2</sup>, 田中秀樹<sup>2</sup>
- 105P** MD/MC ハイブリッド法による溶媒抽出錯体の形成過程 (住友金属鉱山) ○西原泰孝
- 106P** 氷 Ih 中の空孔欠陥の拡散機構 (岡山大院自然科学<sup>1</sup>, 岡山大基礎研<sup>2</sup>) ○矢野正樹<sup>1</sup>, 矢ヶ崎琢磨<sup>2</sup>, 松本正和<sup>2</sup>, 田中秀樹<sup>2</sup>
- 107P** 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手法の開発と一次相転移への適用 (金沢大院自然<sup>1</sup>, 金沢大理工<sup>2</sup>) ○鈴木大介<sup>1</sup>, 三浦伸一<sup>2</sup>
- 108P** MD 法を用いた電解質水溶液表面におけるナノバブルの安定性解析 (京都大工) ○村田克己, 松本充弘

- 1109P** NH<sub>4</sub>F をドーブした氷 Ih の安定性評価 (岡山大院・自然科学<sup>1</sup>, 岡山大・基礎研<sup>2</sup>) ○田口新平<sup>1</sup>, 矢ヶ崎琢磨<sup>2</sup>, 松本正和<sup>2</sup>, 田中秀樹<sup>2</sup>
- 1110P** Molecular simulation of boiling process in ultrathin film  
(京都大工) ○李奥, 松本充弘
- 1111P** ガラス形成液体の振動状態密度とそのフラジリティ依存性 (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>
- 1112P** 2成分剛体円板系における最近接粒子の判定法とその特徴 (名工大院工) ○児山弘昌, 磯部雅晴
- 1113P** 304S 参照
- 1114P** ハロゲン結合に関わる静電的異方性と分極効果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
- 1115P** 307S 参照
- 1116P** フッ素化グラフェンナノフレークによる水素貯蔵機構の理論説明 (北大院工) 井山哲二, ○川畑弘, 田地川浩人
- 1117P** 金属錯体の分子歪みによる磁性の変化 (香大院工<sup>1</sup>, 関学大理工<sup>2</sup>, 岡山理大<sup>3</sup>) ○大熊健允<sup>1</sup>, 中野百恵<sup>1</sup>, 常田旦<sup>1</sup>, 堤勇旗<sup>1</sup>, 藤川佳樹<sup>1</sup>, 石井知彦<sup>1</sup>, 坂根弦太<sup>3</sup>, 小笠原一禎<sup>2</sup>
- 1118P** 第一原理分子動力学シミュレーションによる CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub> のはじき出しエネルギーの評価 (早大理工<sup>1</sup>, 宇宙研<sup>2</sup>) ○鈴木雄大<sup>1,2</sup>, 小林大輔<sup>2</sup>, 宮澤優<sup>2</sup>, 山本知之<sup>1</sup>, 廣瀬和之<sup>1,2</sup>
- 1119P** 平面ポアズイユ流における単純流体の温度分布についての分子動力学解析 (兵県大院シミュ) ○藤原祐, 安田修悟
- 120P** ベシクルにおける孔の遷移過程についての流体力学的解析 (兵県大院シミュ) ○久光和輝, 安田修悟
- 121P** 過渡結合を導入した多体散逸粒子動力学法による粘弾性流体の計算 (名大院工) ○広井紀彦, 畝山多加志, 増渕雄一
- 122P** DFTB Study of Hydrogenated Amorphous Silicon (京都大工) ○李海麗, 松本充弘
- 123P** せん断流れ下における Janus 粒子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 University Mainz<sup>3</sup>) ○小林祐生<sup>1</sup>, 荒井規允<sup>2</sup>, Arash Nikoubashman<sup>3</sup>
- 124P** DFTB Study of Semiconductor Nanorods (京都大工) ○羅啓崙, 松本充弘
- 126P** Transport properties of ionic liquids for Na<sup>+</sup> secondary battery from MD simulations with a self-consistent partial charge determination (Elements Strategy Initiative for Catalysts and Batteries, 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>) ○Lukman Hakim<sup>1,2,3</sup>, Yoshiki Ishii<sup>2</sup>, Nobuyuki Matubayasi<sup>1,2</sup>
- 127P** 潤滑油の分解過程における水素発生抑制機構に関する理論的研究 (名大院情報<sup>1</sup>, NTN<sup>2</sup>, 名大価値創造研究センター<sup>3</sup>, 京大ESICB<sup>4</sup>, CREST-JST<sup>5</sup>) ○伊藤元博<sup>1,2</sup>, 鈴木雄一<sup>1</sup>, 張賀東<sup>1</sup>, 長岡正隆<sup>1,3,4,5</sup>
- 128P** 工業廃水からの金属資源回収用電極の開発を志向した金属イオンの炭素電極への選択的吸着の特性調査 (関学大院・理工<sup>1</sup>, 産総研・無機機能<sup>2</sup>) ○川合悠介<sup>1</sup>, 清原健司<sup>1,2</sup>
- 129P** 316S 参照
- 130P** 温度勾配下における極性分子ダイナミクスの電場による制御 (慶應院理工) ○加藤優佑, 佐藤洋平, 山本詠士
- 131P** アルミナと鉄の摩擦界面における低摩擦発現メカニズムの分子動力学シミュレーション解析 (東北大金研<sup>1</sup>, 東北大院工<sup>2</sup>) ○佐藤雄基<sup>1</sup>, 王楊<sup>2</sup>, 宮崎成正<sup>1</sup>, 大谷優介<sup>1</sup>, 尾澤伸樹<sup>1</sup>, 久保百司<sup>1</sup>
- 132P** CO<sub>2</sub>/塩水/鈹物界面系の濡れ性に対する表面電荷の影響 (産総研 CO<sub>2</sub> 地中貯留グループ<sup>1</sup>, 東大新領域<sup>2</sup>) ○志賀正茂<sup>1,2</sup>, 徂徠正夫<sup>1</sup>, 愛知正温<sup>2</sup>, 本田博巳<sup>2</sup>
- 133P** Uncovering new stable structures of H-passivated bilayer GaN (産総研 MathAM-OIL<sup>1</sup>, 工学院大学 先進工学部 応用物理学科<sup>2</sup>, 産総研 CD-FMat<sup>3</sup>) ○Lu Anh Khoa Augustin<sup>1</sup>, 屋山巴<sup>2</sup>, 森下徹也<sup>1,3</sup>, 中西毅<sup>1,3</sup>
- 134P** 親水性壁に挟まれた負圧下にある水液膜内の分子構造およびダイナミクスに関する研究 (名大院工<sup>1</sup>, 名大院工計算セ<sup>2</sup>) ○伊藤有毅<sup>1</sup>, 安藤嘉倫<sup>2</sup>, 岡崎進<sup>1,2</sup>
- 135P** tSPICA: Introducing Temperature- and Pressure- Dependence for the SPICA Coarse-Grained Force Field (Nagoya University) ○Mark Griffiths, Wataru Shinoda
- 136P** グラフェン表面の原子修飾によるナノサイズ経路の電子状態 (成蹊大理工) ○坂本昇一, 富谷光良

- 137P 有機高分子エアロゲル形成過程のマルチスケールシミュレーション解析(日立製作所) ○松本茂紀, 植田敦子
- 138P 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自己集合構造(慶大理工) ○辻之上弘晃, 野澤拓磨, 荒井規允
- 139P 疎水ポリマーおよび親水ポリマーにおける吸水性の微視的集合様態への依存性(阪大院基礎工) ○阪口敦哉, 山田一雄, 松林伸幸
- 140P パーシシステントホモロジと大規模シミュレーションを組み合わせたポリマーの高次構造の推定(兵庫県大シミュ<sup>1</sup>, 京大 ES-ICB<sup>2</sup>) ○清水陽平<sup>1</sup>, 鷺津仁志<sup>1,2</sup>
- 141P 209S 参照
- 142P 非晶高分子圧縮破壊に関する分子論的研究(名大院工) ○石川博章, 藤本和土, 湯之也, 岡崎進
- 143P 大規模 MD を用いた伸線材料における塑性変形メカニズムの理解(関西大院<sup>1</sup>, 関西大<sup>2</sup>) ○吉田紘基<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>
- 144P 高分子ブラシ系のナノトライボロジー(京大機) ○梶並信彦, 松本充弘
- 145P 高分子の粗視化シミュレーションから得られた構造の全原子化(福井大工) ○竹多泰之, 古石貴裕
- 146P 水/エタノール混合溶媒中におけるメチレン鎖連結モノカルボニルポルフィリンの熱力学的安定構造と揺らぎ挙動についての分子動力学シミュレーション(北大院総化<sup>1</sup>, 北大院工<sup>2</sup>) ○川村将也<sup>1</sup>, 佐藤信一郎<sup>2</sup>
- 147P マルチカノニカル一般化ハイブリットモンテカルロ法を用いた水和生体分子の自由エネルギー地形サンプリング(金沢大院自然<sup>1</sup>, 金沢大理工<sup>2</sup>) ○堀智也<sup>1</sup>, 三浦伸一<sup>2</sup>
- 148P 分子動力学シミュレーションを用いたオリゴエチレンオキッド側鎖を有する poly(glycidyl ether) の温度応答性の検討(北大院総化<sup>1</sup>, 北大院工<sup>2</sup>) ○寺田絵里加<sup>1</sup>, 佐藤信一郎<sup>2</sup>
- 149P 水溶液における両親媒性テトラポッド型ナノ粒子の自己組織化の制御-散逸動力学シミュレーション-(慶應大理) ○荒木雄介, 小林祐生, 荒井規允
- 150P アミノ酸のエネルギー準位統計(日大理工) ○山中雅則
- 151P タンパク質の天然構造と熱変性構造の相対安定性に対する塩効果の MD 解析(阪大院基礎工) ○新田孝志, 松林伸幸
- 152P 細胞質中の代謝物によって改変される蛋白質間相互作用の全原子分子動力学シミュレーション(前橋工大生情<sup>1</sup>, 理研・杉田研<sup>2</sup>, 理研・R-CCS<sup>3</sup>, ミシガン州立大<sup>4</sup>) ○優乙石<sup>1</sup>, 杉田有治<sup>2,3</sup>, Feig Michael<sup>4</sup>
- 153P 一般化ハイブリットモンテカルロ法の高効率化と生体分子への適用(金沢大理工) ○鈴木大輔, 三浦伸一
- 154P メゾ不均一性を有する新規可溶化システムの MD 解析(阪大院基礎工<sup>1</sup>, ヨーク大学<sup>2</sup>, レーゲンスブルク大学<sup>3</sup>) ○原健太<sup>1</sup>, 石井良樹<sup>1</sup>, SHIMIZU Seishi<sup>2</sup>, HORINEK Dominik<sup>3</sup>, 松林伸幸<sup>1</sup>
- 155P 散逸粒子動力学法を用いた管内流れにおける界面活性剤分子の自己集合構造と粘性挙動(慶大理工) ○五明寛貴, 小林祐生, 荒井規允
- 156P ベンケル分裂におけるフリップフロップの影響(山口大院創成科学<sup>1</sup>, 東北大院理学<sup>2</sup>) ○浦上直人<sup>1</sup>, 佐久間由香<sup>2</sup>, 今井正幸<sup>2</sup>
- 157P 分子動力学シミュレーションによる AmphotericinB チャンネルの構造安定性の解析(名大院工<sup>1</sup>, 阪大院理<sup>2</sup>) ○舟橋康佑<sup>1</sup>, Sang-jae Seo<sup>1</sup>, 岡崎進<sup>1</sup>, 梅川雄一<sup>2</sup>, 村田道雄<sup>2</sup>, 篠田渉<sup>1</sup>
- 158P 機械学習を用いた液晶エラストマー物性を特徴付ける設計変数の予測(産総研<sup>1</sup>, ADMAT<sup>2</sup>, 九州大理<sup>3</sup>) 土居英男<sup>1</sup>, ○高橋和義<sup>1</sup>, 田頭健司<sup>2</sup>, 保岡悠<sup>2</sup>, 福田順一<sup>3</sup>, 青柳岳司<sup>1</sup>
- 159P 膜タンパク質による膜形状の構造変化に関する理論的研究(金沢大院自然<sup>1</sup>, 金沢大理工<sup>2</sup>) ○前田倫也<sup>1</sup>, 片岡樹紀<sup>1</sup>, 齋藤玲那<sup>1</sup>, Dian Fitrasari<sup>1</sup>, 川口一朋<sup>2</sup>, 長尾秀実<sup>2</sup>
- 160P 小ペプチドのスタック構造形成に対する共溶媒効果の相互作用解析(阪大院基礎工) ○諏訪原一輝, 松林伸幸
- 161P 111S 参照
- 162P MD simulation による tankyrase2 のポケット構造変化の調査(理研・BDR) ○平野秀典, 沖本憲明, 藤田茂雄, 泰地真弘人
- 163P PaCS-MD を用いた新規リガンド結合経路探索手法の開発と応用(筑波大生物<sup>1</sup>, 筑波大計セ<sup>2</sup>) ○會田勇斗<sup>1</sup>, 重田育照<sup>2</sup>, 原田隆平<sup>2</sup>
- 164P Molecular view of lipid-based nanoparticles as drug delivery system revealed by coarse grained simulation (名古屋大工)

- Akhil Pratap Singh, Hiroki Tanaka, Yusuke Miyazaki, Wataru Shinoda
- 165P** アルツハイマー病初期分子機構に関係するβ切断酵素の膜貫通部位の構造予測とラフトとの相互作用 (近大生物理工) ○柳野賀緒梨, 古江祐也, 宮下尚之
- 166P** 定量的粗視化力場 SPICA の DNA/RNA モデルへの拡張 (名大院工) ○田中裕貴, 宮崎裕介, Akhil Pratap Singh, 岡崎進, 篠田渉
- 167P** バクテリオロドプシンのプロトン貯蔵・放出過程に関する DC-DFTB-MD シミュレーション (早大院先進理工<sup>1</sup>, 早大理工総研<sup>2</sup>, 京大 ESICB<sup>3</sup>) ○竹村俊晃<sup>1</sup>, 小野純一<sup>2</sup>, 西村好史<sup>2</sup>, 中井浩巳<sup>1,2,3</sup>
- 168P** Coarse-Grained MD Study of Entecavir Drug Insertion into Hepatitis B Virus (HBV) Capsid (名古屋大工) ○Mayank Dixit, Huihui Liu, Yusuke Miyazaki, Ryo Urano, Susumu Okazaki, Wataru Shinoda
- 169P** PVPA-xIm 複合体中の局所構造と分子ダイナミクス (筑波大計算科学セ<sup>1</sup>, 金沢大院自然<sup>2</sup>, 金沢大ナノマリ<sup>3</sup>) ○堀優太<sup>1</sup>, 末武鋭也<sup>2</sup>, 井田朋智<sup>2</sup>, 水野元博<sup>3</sup>, 重田育照<sup>1</sup>
- 170P** Deep Learning を用いたタンパク質欠損部位モデリングの試み (近大生物理工) ○高見拓磨, 古江祐也, 山口知洋, 宮下尚之
- 171P** CRISPR Cas3 の DNA との相互作用機構 (近大生物理工) ○山口知洋, 宮下尚之
- 172P** Hras-GTP/GDP 系における構造の緩和と水素結合の緩和の関係の分子動力学シミュレーションによる研究 (東京薬大生命科学<sup>1</sup>, 金沢大国際基幹教育院<sup>2</sup>, 金沢大理工<sup>3</sup>) ○宮川毅<sup>1</sup>, 森河良太<sup>1</sup>, 高須昌子<sup>1</sup>, 杉森公一<sup>2</sup>, 川口一朋<sup>3</sup>, 長尾秀実<sup>3</sup>
- 173P** 321S 参照
- 174P** 多体間ポテンシャルが Soret 係数に与える影響の検討 (東大工) ○金子敏宏
- 175P** 散逸粒子動力学法に用いる新規乱数生成手法の提案と検証 (慶大理工) ○岡田清志郎, Paul Edward Brumby, 泰岡顕治
- 176P** 322S 参照
- 177P** 203S 参照
- 202P** 反応力場モデルが示す水の結晶-プラスチック相転移 (岡山大院・自然科学<sup>1</sup>, 岡山大基礎研<sup>2</sup>, メック株式会社<sup>3</sup>) ○足立優司<sup>1,3</sup>, 甲賀研一郎<sup>2</sup>
- 203P** 水中において多数の分子が関与し引き起こされる水素結合破断の評価手法 (阪大院基礎工) ○菊辻卓真, 金鋼, 松林伸幸
- 204P** 静電ポテンシャルフィッティングにもとづく水モデルの設計 (熊大院生命) ○佐藤恭介
- 205P** 水素ハイドレート内の水素分子の拡散ダイナミクス (金沢大院自然<sup>1</sup>, Tanjungpura 大理<sup>2</sup>, 金沢大理工<sup>3</sup>) ○原田明日華<sup>1</sup>, Yudha Arman<sup>2</sup>, 三浦伸一<sup>3</sup>
- 206P** 着霜過程の分子動力学シミュレーション (京大工) ○永島健太郎, 松本充弘
- 207P** ポリフェニレンサルファイドの力場構築及び溶液物性解析 (福井大院工) ○出倉敬史, 玉井良則
- 208P** 第一原理分子動力学法における van der Waals 相互作用の補正がメタンハイドレートの振動スペクトルとゲスト-ホスト間相互作用に及ぼす影響 (工学院大) ○平塚将起, 伊藤慎一郎
- 209P** DFTB 法による水/水蒸気の物性評価 (京都大) ○奥岳人, 松本充弘
- 210P** 過冷却状態における単純液体の輸送係数に対する引力と斥力の効果 (新潟大院自然<sup>1</sup>, 阪大院基礎工<sup>2</sup>, 新潟大理<sup>3</sup>) ○眞谷健汰<sup>1</sup>, 内山輝<sup>1</sup>, 石井良樹<sup>2</sup>, 大鳥範和<sup>3</sup>
- 211P** 302S 参照
- 212P** 205S 参照
- 213P** 高分子ガラスのボゾンピーク: 粗視化分子動力学シミュレーションによる起源解明 (阪大院基礎工<sup>1</sup>, 東大総合文化<sup>2</sup>) ○友重直也<sup>1</sup>, 水野英如<sup>2</sup>, 金鋼<sup>1</sup>, 松林伸幸<sup>1</sup>
- 214P** 活性酸素・抗酸化物質系のシミュレーションに向けて、新たな半経験的量子力学手法の開発 (阪大理化) ○北川甲コリン, 川上貴資, 山中秀介, 奥村光隆
- 215P** 水溶液中のホタルオキシルシフェリンの基底状態および励起状態の第一原理 MD (静岡大・工<sup>1</sup>, 群馬大・理工<sup>2</sup>, 原子力機構<sup>3</sup>, 東大・物性研<sup>4</sup>) ○野口良史<sup>1</sup>, 樋山みやび<sup>2</sup>, 志賀基之<sup>3</sup>, 秋山英文<sup>4</sup>, 杉野修<sup>4</sup>
- 216P** 粗視化分子動力学法に基づくフィラー含有樹脂材料の毛細管現象解析 (日立研開) ○伊藤寿, 松本茂紀, 鈴木智久, 杉井泰介, 寺崎健, 守谷浩志

## 2 日目

- 201P** 拡張アンサンブル法を用いた、後天的遺伝発現抑制酵素のアイソザイム性に関する研究 (名大院理) ○石川敦貴, 岡本祐幸

- 217P DFT-MD シミュレーションによる新規正極材料としてのキノン内包 SWCNT の解析 (名工大工) ○都築貴寛, 尾形修司, 浦長瀬正幸
- 218P バイオマス分解酵素の反応機構 (産総研, 機能材料コンピューショナル<sup>1</sup>, ORNL, CMB<sup>2</sup>) ○石田豊和<sup>1,2</sup>, Jerry M. Parks<sup>2</sup>, Jeremy C. Smith<sup>2</sup>
- 219P 水環境下での金属鉄表面および酸化鉄表面のトライボ化学反応の反応分子動力学シミュレーション (日本精工<sup>1</sup>, 東北大金研<sup>2</sup>) ○土子政貴<sup>1,2</sup>, 王楊<sup>2</sup>, 宮崎成正<sup>2</sup>, 大谷優介<sup>2</sup>, 尾澤伸樹<sup>2</sup>, 久保百司<sup>2</sup>
- 220P 非球形微粒子系に関するモンテカルロ・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>) ○甲斐真也<sup>1</sup>, 杉浦拓実<sup>1</sup>, 赤塚陽介<sup>1</sup>, 寺尾貴道<sup>2</sup>
- 221P Mg-MOF-74 による二酸化炭素固定化反応の DFTB-MD/MetaD シミュレーション (早大先進理工<sup>1</sup>, 早大理工総研<sup>2</sup>, 京大 ES-ICB<sup>3</sup>) ○土屋佑太<sup>1</sup>, 周建斌<sup>2</sup>, Aditya Wibawa Sakti<sup>2,3</sup>, 中井浩巳<sup>1,2,3</sup>
- 222P メタダイナミクス法による高温高圧水中ソルビト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>
- 223P 量子化学計算によるポリフルオロアレーン類に対する電気化学的カルボキシル化の位置選択メカニズムの検討 (北大院総化<sup>1</sup>, 北大院工<sup>2</sup>) ○上ヶ島一輝<sup>1</sup>, 赤石智久<sup>1</sup>, 仙北久典<sup>1,2</sup>, 佐藤信一郎<sup>1,2</sup>
- 224P 伸線パーライトの塑性変形における結晶構造変化および原子ひずみの分子動力学解析 (関西大院理<sup>1</sup>, 関西大<sup>2</sup>) ○尾田幸介<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>
- 225P 炭化ケイ素の摩擦界面における潤滑膜の自己形成・修復機構の分子動力学法シミュレーション (東北大金研<sup>1</sup>, 東北大工<sup>2</sup>) ○川浦正之<sup>1</sup>, 王楊<sup>1,2</sup>, 宮崎成正<sup>1</sup>, 大谷優介<sup>1</sup>, 尾澤樹<sup>1</sup>, 久保百司<sup>1</sup>
- 226P ストルバイト表面における解糖系に関わる低分子有機物のダイナミクス (慶大理工<sup>1</sup>, 理研<sup>2</sup>) ○加藤修三<sup>1</sup>, 戎崎俊一<sup>2</sup>, 泰岡顕治<sup>1</sup>
- 227P Tree 法を用いた水滴の固体表面上への衝突シミュレーション (福井大院工) ○嶋津雅和, 古石貴裕
- 228P 環状および直鎖ポリエチレンオキシドのフラレンへの吸着状態の分子動力学シミュレーション (北大院総合化学<sup>1</sup>, 北大工学院<sup>2</sup>) ○吉富翔太郎<sup>1</sup>, Wang Yubo<sup>1</sup>, 山本拓矢<sup>2</sup>, 佐藤信一郎<sup>2</sup>
- 229P 粘着付与剤と粘着剤のバルクおよび基材界面における親和性の全原子解析 (積水化学工業<sup>1</sup>, 阪大院基礎工<sup>2</sup>) ○洲上唯一<sup>1</sup>, 廣瀬由貴<sup>1</sup>, 矢原和幸<sup>1</sup>, 松林伸幸<sup>2</sup>
- 230P 分子動力学法および TDA を用いた LIB 電解液におけるイオン拡散に関する考察 (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>
- 231P 高エネルギー散乱のための二原子間ユニバーサルポテンシャルモデル (核融合研) ○伊藤篤史
- 232P 3C-および 4H-SiC の結晶欠陥挙動に関する分子動力学シミュレーション (関西大学[院]<sup>1</sup>, 関西大学<sup>2</sup>, 産総研<sup>3</sup>) ○今村祐亮<sup>1</sup>, 齋藤賢一<sup>2</sup>, 西村憲治<sup>3</sup>, 佐藤知広<sup>2</sup>, 宅間正則<sup>2</sup>, 高橋可昌<sup>2</sup>
- 233P 320S 参照
- 234P 油水界面電子移動の多次元自由エネルギー計算による反応機構解析 (東北大院理<sup>1</sup>, 京大 ESICB<sup>2</sup>) ○平野智倫<sup>1</sup>, 森田明弘<sup>1,2</sup>
- 235P タングステン自己照射過程の分子動力学シミュレーション (核融合研<sup>1</sup>, 名大院工<sup>2</sup>) ○高山有道<sup>1</sup>, 伊藤篤史<sup>1</sup>, 中村浩章<sup>1,2</sup>
- 236P 粗視化分子動力学法を用いた柔軟鎖液晶エラストマーの力学特性解析 (ADMAT<sup>1</sup>, パナソニック(株)<sup>2</sup>, 産総研<sup>3</sup>) ○保岡悠<sup>1,2</sup>, 田頭健司<sup>1,2</sup>, 高橋和義<sup>3</sup>, 土居英男<sup>3</sup>, 青柳岳司<sup>3</sup>
- 237P 溶媒の量子化学効果を非経験的に取り込んだ Adaptive QM/MM 手法の開発と金属イオン水溶液への応用 (東大情理<sup>1</sup>, 京大福井セ<sup>2</sup>, 東大院農<sup>3</sup>, 慶應量子<sup>4</sup>) ○山田真行<sup>1</sup>, 西本佳央<sup>2</sup>, 清水謙多郎<sup>1,3</sup>, 渡邊宙志<sup>4</sup>
- 238P 分子動力学シミュレーションによるキラルカラムナー液晶のらせん構造解明 (北里大院理<sup>1</sup>, 名大院工<sup>2</sup>, 北里大理<sup>3</sup>) ○吉田晋太郎<sup>1</sup>, 萬代拓由<sup>1</sup>, 吉田純<sup>3</sup>, 原光生<sup>2</sup>, 渡辺豪<sup>3</sup>, 米田茂隆<sup>3</sup>
- 239P 高分子結晶膜の表面修飾による CO<sub>2</sub> 透過特性の変化 (福井大院工) ○清水洗佑, 玉井良則
- 240P ポリマーのセグメント化によるコポリマー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
- 241P 非晶高分子の衝撃破壊に関する分子論的研究: ミクロの視点における降伏現象の解明 (名大院工) ○湯之也, 藤本和士, 岡崎進

- 242P** 全原子 MD を用いた高分子ブレンド相溶性評価 (阪大院基礎工) ○山田一雄, 松林伸幸
- 243P** 両親媒性トリブロックコポリマーを用いたダブルネットワークハイドロゲルの散逸粒子動力学シミュレーション (慶大理工) ○山本健太, 荒井規允
- 244P** 環動高分子材料の粗視化モデリング手法の開発と破壊プロセスの解明 (東北大金研<sup>1</sup>, 東北大工<sup>2</sup>) ○上原周一<sup>1</sup>, 王楊<sup>1,2</sup>, 宮崎成正<sup>1</sup>, 大谷優介<sup>1</sup>, 尾澤伸樹<sup>1</sup>, 久保百司<sup>1</sup>
- 245P** MD シミュレーションによる PVA ハイドロゲルの分子レベル解析 (阪大院基礎工) ○大隅理佐, 山田一雄, 松林伸幸
- 247P** 107S 参照
- 248P** FMO-DPD を連携した脂質二重膜、コレステロール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>, 産総研 CD-FMat<sup>3</sup>, 東大生研<sup>4</sup>) ○奥脇弘次<sup>1</sup>, 新庄永治<sup>2</sup>, 西田溜花<sup>2</sup>, 土居英男<sup>3</sup>, 望月祐志<sup>1,4</sup>, 福澤薫<sup>2,4</sup>, 米持悦生<sup>2</sup>
- 249P** 散逸粒子動力学法を用いた単一ヤヌス粒子の拡散について (慶大理工) ○澤眞詩, 荒井規允, 山本詠士, 泰岡顕治
- 250P** SASA モデル見直しのための水和自由エネルギー計算 (早大・物理応物) ○淀川良, 黒石晃平, パーキン暖, 高野光則
- 251P** ナノ粒子分散高分子コンポジットの急速沈殿におけるナノ粒子凝集のダイナミクス (名大院工) ○草田慧, 畝山多加志, 増淵雄一
- 252P** 204S 参照
- 253P** タンパク質構造安定性のエネルギー論 (岡山基礎研) ○墨智成, 甲賀研一郎
- 254P** Effects of Packing Density and Chain Length on the Surface Hydrophobicity of Thin-Films Composed of Perfluoroalkyl Acrylate Chains: A Molecular Dynamics Study (名古屋大工<sup>1</sup>, AGC Inc.<sup>2</sup>) ○Hari Yadav<sup>1</sup>, An-Tsung Kuo<sup>2</sup>, Shingo Urata<sup>2</sup>, Wataru Shinoda<sup>1</sup>
- 255P** Patchy 粒子系に関する構造形成 (岐阜大自然科学技術<sup>1</sup>, 岐阜大工<sup>2</sup>) ○赤塚陽介<sup>1</sup>, 杉浦拓実<sup>1</sup>, 甲斐真也<sup>1</sup>, 寺尾貴道<sup>2</sup>
- 256P** 動径分布関数・エネルギー分布関数をもとにした粗視化力場パラメータ決定手法の改良 (理研・MIH<sup>1</sup>, 京大院・医<sup>2</sup>, 横浜市大・生命医<sup>3</sup>) ○千葉峻太郎<sup>1</sup>, 奥野恭史<sup>1,2</sup>, 本間光貴<sup>1</sup>, 池口満徳<sup>1,3</sup>
- 257P** 多剤排出トランスポーター AcrABZ-TolC の分子動力学シミュレーション: 膜-膜タンパク質間相互作用の評価 (東大先端研) ○篠田恵子
- 258P** 高分子/水界面におけるアミノ酸アナログの吸着能解析 (阪大院基礎工) ○八十島巨宏, 松林伸幸
- 259P** 201S 参照
- 260P** タンパク質の動的分子機能に関する一考察 (近大先端研) ○米澤康滋
- 261P** 溶媒和モーターの分子動力学シミュレーション: システムサイズ依存性とモーターサイズ依存性 (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>
- 262P** 力学的安定性の高いモデル構造を生成するための Deep Learning を用いたホモロジーモデリング (近大院生物理工) ○古江祐也, 松倉里紗, 宮下尚之
- 263P** FEP/REST 法によるタンパク質変異体の自由エネルギー計算 (量研機構) ○桜庭俊
- 264P** プラストシアニンと P700 における電子伝達機構に関する理論的研究 (金沢大院自然<sup>1</sup>, 金沢大理工<sup>2</sup>) ○片岡樹紀<sup>1</sup>, 前田倫也<sup>1</sup>, 齋藤玲那<sup>1</sup>, Muhammad Saleh Arwansyah<sup>1</sup>, 川口一朋<sup>2</sup>, 長尾秀実<sup>2</sup>
- 265P** 緩和モード解析を用いたフォールディングシミュレーションデータの解析 (明治大理工<sup>1</sup>, 慶應大理工<sup>2</sup>) ○光武亜代理<sup>1</sup>, 高野宏<sup>2</sup>
- 266P** リガンド結合に伴うタンパク質結合ポケット変化の分子動力学的研究 (理研) ○沖本憲明, 平野秀典, 泰地真弘人
- 267P** 蛋白質環境における電子励起移動の量子ダイナミクス (量研・関西<sup>1</sup>, 量研・東海<sup>2</sup>) ○米谷佳晃<sup>1</sup>, 安達基泰<sup>2</sup>, 黒崎讓<sup>2</sup>
- 268P** 分子動力学シミュレーションによるヘモグロビン A とヘモグロビン S の立体構造比較解析 (鳥取大医) ○藤原伸一, 網崎孝志
- 269P** 自由エネルギー反応経路探索法によるアラニンペプチドのフォールディング探索 (筑波大・計セ) ○満田祐樹, 重田育照
- 270P** 分子動力学計算によるトロンビン/DNA アプタマー三量体における Through-bond effects の解析 (シユレーディング (株)) ○井上鑑孝
- 271P** 全原子分子動力学法によりファージウイルスの熱伝導特性評価 (東工大物質理工) ○椎野良介, 佐々木遼馬, 林慶浩, 川内進

- 272P** GLAS アルゴリズムによる酵素反応機構の新規解明 (筑波大 CCS) ○庄司光男, 三嶋謙二, 堀優太, 重田育照
- 274P** ジクロロメタンの分子モデル改良とその分子動力学シミュレーションにおけるパフォーマンス (東北大院・理<sup>1</sup>, 京都大学 ES-ICB<sup>2</sup>) ○小泉愛<sup>1</sup>, 伊藤孟<sup>1</sup>, 平野智倫<sup>1</sup>, 森田明弘<sup>1,2</sup>
- 275P** 異なる分子パラメータを持つ複数分子系のシミュレーションプロトコルの構築 (三井情報<sup>1</sup>, 横浜市大・生命医<sup>2</sup>, 理研・MIH<sup>3</sup>) ○佐藤美和<sup>1</sup>, 佐藤昂人<sup>1</sup>, 鈴木南美<sup>2</sup>, 浴本亨<sup>2</sup>, 山根努<sup>2</sup>, 池口満徳<sup>2,3</sup>
- 276P** クラウドを活用したオートスケールリングによる分子シミュレーション環境の最適化 (三井情報) ○佐藤昂人, 佐藤美和, 平山裕之, 高橋順子, 牧口大旭
- 277P** Lipid droplet biogenesis is a liquid phase separation spatially regulated by seipin and membrane curvature (University of Fribourg) ○Valeria Zoni, Pablo Campomanes, Rasha Khaddaj, Abdou Rachid Thiam, Roger Schneiter, Stefano Vanni

## 講演者索引

[ALPHABET]	277P	伊藤寿	216P°	尾澤伸樹	131P, 219P, 244P
Abdou Rachid Thiam	Ronald M. Levy	伊藤元博	127P°	尾嶋拓	110L°
277P	111S(161P)	伊藤有毅	134P°	尾田幸介	224P°
Aditya Wibawa Sakti	Sangjae Seo	井上大輔	305S	小野純一	167P
221P	157P	井上鑑孝	270P°	[か]	
Aiichiro Nakano	SHIMIZU Seishi	今井正幸	156P	甲斐真也	220P°, 255P
114S	154P	今村祐亮	232P°	梶並信彦	144P°
Akhil Pratap Singh	Shingo Urata	井山哲二	116P	片岡樹紀	264P°, 159P
164P°, 166P	254P	岩崎猛	309S	片岡洋右	105S°
An-Tsung Kuo	Stefano Mossa	岩下拓哉	102S°	甲藤寛之	102P°
254P	301S	植田敦子	137P	加藤修三	226P°
Arash Nikoubashman	Stefano Vanni	上原周一	244P°	加藤優佑	130P°
123P	277P	牛島栄作	114S	金子敏宏	174P°
Bin W. Zhang	Tseden Taddese	内山輝	210P	上ヶ島一輝	223P°
111S(161P)	108S	畝山多加志	121P, 205S(212P)°, 251P, 304S(113P)	川合悠介	128P°
Bonnaud Patrick	Valeria Zoni	梅川雄一	157P	川内進	271P
212S°	277P°	梅本和彦	320S(233P)	川浦正之	225P°
Chang Yong Lik	Wang Yubo	浦上直人	156P°	川上貴資	214P
222P	228P	浦長瀬正幸	217P, 207S°	川口一朋	264P, 172P, 159P
Dian Fitrasari	Yudha Arman	浦野諒	101S, 168P, 203S(177P)°, 322S(176P)	川崎猛史	303S
159P	205P	浴本亨	275P	川畑弘	116P°
Dixit Mayank	[あ]	戎崎俊一	226P	川村将也	146P°
168P°	會田勇斗	大熊健允	117P°	菊辻卓真	203P°
Feig Michael	愛知正温	大隅理佐	245P°	北川甲コリン	214P°
152P	132P	大谷優介	131P, 219P, 225P, 244P, 314S°	北中一也	103P°
Giancarlo Ruocco	青柳岳司	大鳥範和	210P	北畑雅弘	108S°
301S	236P, 158P	岡崎圭一	204S(252P)	清原健司	128P
HAKIM Lukman	赤石智久	岡崎進	101S, 107S(247P), 108S, 109S, 134P, 142P, 157P, 166P, 168P, 210L, 241P, 203S(177P), 322S(176P)	金鋼	111P, 203P, 204S(252P), 213P, 303S
101P	223P			金城友之	320S(233P)°
Hari Yadav	赤上研太			草田慧	251P°
254P°	314S			窪田善之	315S°
HORINEK Dominik	赤塚陽介			久保百司	131P, 219P, 225P, 244P, 314S
154P	220P, 255P°			黒石晃平	250P
Huihui Liu	秋山英文			黒崎讓	267P
168P	215P			桑原理一	206S
Jeremy C. Smith	秋山良			古石貴裕	145P, 227P
218P	261P			小泉愛	274P°
Jerry M. Parks	浅野優太			甲賀研一郎	202P, 102P, 253P
218P	306S°			高良明英	114S
Jung Jaewoon	足立幸志			小嶋秀和	240P°
321S(173P)°	314S			小林恵太	113S
Le Van Sang	安達基泰			小林大輔	118P
317L	267P			小林千草	321S(173P)
Lu Anh Khoa Augustin	安達基泰			小林祐生	123P°, 149P, 155P
103L, 133P°	202P°			小林亮	312S°
Lukman Hakim	網崎孝志			五明寛貴	155P°
126P°	268P			小柳潤	209S(141P)
Mark Griffiths	網崎孝志				
135P°	268P				
Muhammad Saleh Arwansyah	荒井俊人				
264P	313S				
Nanjie Deng	荒井規允				
111S(161P)	123P, 138P, 149P, 155P, 243P, 249P				
Pablo Campomanes	荒木雄介				
277P	149P°				
Paul Edward Brumby	安藤嘉倫				
175P	107S(247P), 134P, 203S(177P), 322S(176P)°				
Priya Vashishta	飯泉寛				
114S	112S°				
Rajiv K. Kalia	池口満徳				
114S	256P, 275P				
Rasha Khaddaj	池田昌司				
277P	302S(211P)				
Roger Schneider	池田昌司				
	101P°, 126P, 154P, 210P°				
	石井良樹				
	117P				
	石井知彦				
	201P°				
	石川敦貴				
	142P°				
	石川博章				
	218P°				
	石田豊和				
	103P				
	石山達也				
	112P				
	磯部雅晴				
	169P				
	井田朋智				
	274P				
	伊藤孟				
	231P°, 235P, 308L				
	伊藤篤史				
	208P				
	伊藤慎一郎				

小山志穂里	305S°	杉浦拓実	220P, 255P	堤勇旗	117P	平塚将起	208P°
児山弘昌	112P°	杉田有治	110L, 152P, 321S(173P)	都築誠二	313S°	平野智倫	234P°, 274P
近藤友美	222P°			都築貴寛	217P°	平野秀典	162P°, 266P
【さ】		杉野修	215P	常田旦	117P	平山裕之	276P
齋藤賢一	143P, 224P, 230P, 232P	杉村奈都子	317L°	弦巻周平	101S	広井紀彦	121P°
齋藤健人	114P°	杉森公一	172P	寺井雄亮	230P°	廣瀬和之	118P
齋藤玲那	264P, 159P	鈴木大介	107P°	寺尾貴道	220P, 255P	廣瀬由貴	229P
榮慶丈	111S(161P)°	鈴木大輔	153P°	寺崎健	216P	福澤薫	248P
阪口敦哉	139P°	鈴木智久	216P	寺田絵里加	148P°	福島省吾	114S°
坂下達哉	322S(176P)	鈴木南美	275P	出倉敬史	207P°	福田順一	158P
坂根茲太	117P	鈴木雄一	127P	土居英男	158P, 236P, 248P	藤川佳樹	117P
坂本昇一	136P°	鈴木雄大	118P°	湯之也	142P, 241P°	藤崎弘士	202S°
佐久間由香	156P	墨智成	102P, 253P°	徳永健	261P°	藤田茂雄	162P
桜庭俊	263P°	諏訪原一輝	160P°	富山栄治	309S°	藤本和士	101S, 241P, 203S(177P), 210L°, 142P, 322S(176P)
佐々木岳彦	222P	朱喆	322S(176P)	富谷光良	136P		
佐々木遼馬	271P	瀬戸亮平	319L°	友重直也	213P°		
佐相剛史	261P	仙北久典	223P	鳥居肇	114P	藤原祐	119P°
佐藤恭介	204P°	徂徠正夫	132P	【な】		藤原伸一	268P°
佐藤信一郎	146P, 148P, 223P, 228P	【た】		中井浩巳	167P, 221P	舟橋康佑	157P°
		泰地真弘人	162P, 266P	仲井文明	304S(113P)°	古江祐也	165P, 170P, 262P°
佐藤昂人	275P, 276P°	高須昌子	172P	中西毅	133P		
佐藤知広	143P, 224P, 230P, 232P	高野宏	265P	中西真大	102S	堀智也	147P°
佐藤美和	275P°, 276P	高野光則	250P	中野百恵	117P	堀優太	169P°, 272P
佐藤雄基	131P°	高橋和義	236P, 158P°	中村壮伸	211S°	本田博巳	132P
佐藤洋平	130P	高橋直己	314S	中村浩章	235P	本間光貴	256P
澤真詩	249P°	高橋可昌	143P, 224P, 230P, 232P	永井哲郎	101S°	【ま】	
椎野良介	271P°	高橋順子	276P	永井佑紀	113S°	前田倫也	264P, 159P°
志賀正茂	132P°	高見拓磨	170P°	長岡正隆	127P	牧口大旭	276P
志賀基之	113S, 215P, 222P	高山有道	235P°	長尾秀実	264P, 172P, 159P	増渕雄一	121P, 205S(212P), 251P, 304S(113P)
重田育照	163P, 169P, 269P, 272P	田頭健司	158P, 236P	永島健太郎	206P°		
篠田恵子	257P°	瀧真清	201S(259P)	西尾憲吾	103L°	松倉里紗	201S(259P)°, 262P
篠田涉	101S, 107S(247P), 109S, 135P, 157P, 164P, 166P, 168P, 203S(177P), 254P	宅間正則	143P, 224P, 230P, 232P	西田瑠花	248P	松永康佑	202S
芝隼人	212S, 303S°	田口新平	109P°	西村憲治	105P°	松林伸幸	101P, 111P, 126P, 139P, 151P, 154P, 160P, 203P, 204S(252P), 213P, 229P, 240P, 242P, 245P, 258P, 316S(129P)
嶋津雅和	227P°	武田康助	107S(247P)°	西村好史	232P		
島村孝平	114S	竹多泰之	145P°	西本佳央	167P		
清水謙多郎	237P	竹村俊晃	167P°	新田孝志	237P		
清水洗佑	239P°	田地川浩人	116P	野口博司	151P°		
清水陽平	140P°	館山佳尚	213IL°	野口良史	306S		
下位幸弘	313S	田中裕貴	164P, 166P°	野澤拓磨	215P°		
下條冬樹	114S	田中篤嗣	315S	【は】	138P		
庄司光男	272P°	田中敬二	206S	橋上聖	315S	松本茂紀	137P°, 216P
白石薫平	302S(211P)°	田中秀樹	104S	長谷川達生	313S	松本信彦	209S(141P)
新庄永治	248P	田中秀樹	104P, 109P	林慶浩	271P	松本正和	104P, 104S, 106P, 109P
眞谷健汰	210P°	田中秀樹	106P	原健太	154P°	松本充弘	108P, 110P, 122P, 124P, 144P, 206P, 209P
許競翔	314S	玉井良則	207P, 239P	原田明日華	205P°		
末武鋭也	169P	湯之也	210L	原田隆平	163P, 214AL°	松山秀人	106IL°
洲上唯一	229P°	大門翔太	111P°	原光生	238P	萬代拓由	238P
杉井泰介	216P	千葉峻太郎	256P°	半田和也	240P	三浦伸一	147P, 205P, 107P, 153P
		張賀東	127P	パーキン暖	250P	三澤賢明	114S
		周建斌	221P	久光和輝	120P°	三嶋謙二	272P
		張家超	322S(176P)	日野理	307S(115P)°		
		辻之上弘晃	138P°	樋山みやび	215P		
		土子政貴	219P°	平田雅典	104P°		
		土屋佑太	221P°				

水野英如	111P, 213P, 301S°, 302S(211P)	森河良太	172P	山田真行	237P°	米田茂隆	238P
		森下徹也	133P, 308L°	山中秀介	214P	米持悦生	248P
水野元博	169P	森田明弘	234P, 274P	山中雅則	150P°	米谷慎	310S°
光武重代理	265P°	森次圭	202S	山根努	275P	米山弘亮	320S(233P)
満田祐樹	269P°	森俊文	204S(252P)	山本拓矢	228P	【ら】	
三原雄司	317L	守谷浩志	216P	山本詠士	130P, 249P	羅啓峯	124P°
宮川毅	172P°	森勇介	204S(252P)°	山本健太	243P°	李奧	110P°
宮崎成正	225P	【や】		山本智	206S°	李海麗	122P°
宮崎剛英	103L	矢ヶ崎琢磨	104P, 104S°, 106P, 109P	山本知之	118P	李秀栄	110L
宮崎成正	219P, 244P, 131P	泰岡顕治	175P, 226P, 249P	山本直樹	316S(129P)°	【わ】	
宮崎裕介	109S°, 164P, 166P, 168P	保岡悠	158P, 236P°	屋山巴	133P	鷺津仁志	140P, 309S, 317L
		安田修悟	119P, 120P	優乙石	152P°	渡辺豪	238P
宮澤優	118P	八十島亘宏	258P°	吉井範行	203S(177P), 322S(176P)	渡辺信一	201S(259P)
宮下尚之	165P, 170P, 171P, 201S(259P), 262P	柳野賀緒梨	165P°	吉田紘基	143P°	渡辺宙志	306S
		矢野正樹	106P°	吉田晋太郎	238P°	渡邊宙志	237P, 318L°
村島隆浩	208S°	矢原和幸	229P	吉田純	238P	王楊	131P, 219P, 225P, 244P
村田克己	108P°	矢部誠	209S(141P)	吉田広顕	305S		
村田道雄	157P	山口知洋	171P°, 170P	吉田洋之	315S		
望月和人	201S(259P)	山田篤志	311S°	吉富翔太郎	228P°		
望月祐志	248P	山田一雄	139P, 240P, 242P°, 245P	淀川良	250P°		
森一樹	209S(141P)°			米澤康滋	260P°		
				米谷佳晃	267P°		

(記号 ° は発表者となっ  
ている講演に記されてい  
ます。)