

**[1] 第26回分子シミュレーション討論会 講演プログラム**

主催：分子シミュレーション研究会

協賛：日本物理学会，日本化学会，応用物理学会，日本生物物理学会，日本薬学会，高分子学会，  
日本コンピューター化学会

後援：九州大学

会期：平成 24 年 11 月 26 日（月）－28 日（水）

会場：西新プラザ

（住所：福岡市早良区西新 2-1-6-23）

HP：http://yasuoka.mech.keio.ac.jp/mssj26/

(2012/10/10 最終更新)

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）

：P=ポスター発表

講演者記号：○印=発表者

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）

**1 日目 11 月 26 日（月）****9:15-9:45 開場，受付****9:45-9:55 開会の辞**

会長 河村雄行（岡山大）

**— 午前の部 —****9:55-10:50 口頭発表 A****(量子系・経路積分)****101L** 半導体量子ドットにおける光励起ダイナミクス  
(京大院理<sup>1</sup>、University of Rochester<sup>2</sup>) ○金賢得<sup>1</sup>、Oleg V. Prezhdo<sup>2</sup>**102S**  $\alpha$ -Fe 中での水素同位体の量子的拡散ダイナミクス  
(埼玉大院理工<sup>1</sup>、阪大院基礎工<sup>2</sup>、JAEA<sup>3</sup>) ○吉川武宏<sup>1</sup>、高柳敏幸<sup>1</sup>、君塚肇<sup>2</sup>、志賀基之<sup>3</sup>**103S** 半古典的インスタントン法によるトンネル経路解析  
(分子科学研究所<sup>1</sup>、金沢大学理工<sup>2</sup>) ○河津励<sup>1,2</sup>、三浦伸一<sup>2</sup>**— 休憩 10:50-11:05 —****11:05-11:50 口頭発表 B****(量子系・経路積分)****104S** 水素分子の量子効果が熱物性に与える影響解析  
(東北大工<sup>1</sup>、信州大工<sup>2</sup>、九工大工<sup>3</sup>、青学大理工<sup>4</sup>、東大工<sup>5</sup>、東北大流体研<sup>6</sup>) ○永島浩樹<sup>1</sup>、津田伸一<sup>2</sup>、坪井伸幸<sup>3</sup>、林光一<sup>4</sup>、越光男<sup>5</sup>、徳増崇<sup>6</sup>**105S** 溶液中における分子内プロトン移動反応の量子古典混合系近似に基づく分子動力学シミュレーション：実験および反応速度理論との対応と反応機構

(名大院工) ○小嶋秀和、山田篤志、岡崎 進

**106S** 第一原理変分経路積分分子動力学法の開発  
(金沢大理工<sup>1</sup>、分子研<sup>2</sup>、金沢大院自然<sup>3</sup>) ○三浦伸一<sup>1</sup>、河津励<sup>2,3</sup>**11:50-12:50 ポスター発表 1 前半****101P-155P**

(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 1 後半****101P-155P**

(講演タイトルはプログラムの末尾に記載)

**15:00-15:50 招待講演 A**

- 107IL** 分子モーター F1-ATPase によるエネルギー変換特性  
(中央大理工) 宗行英朗

### 15:50-16:20 口頭発表 C

#### (高分子・ガラス・クラスター)

- 108S** 球状錯体  $M_{12}L_{24}$  の自己組織化シミュレーション  
(産総研<sup>1</sup>, 東大<sup>2</sup>) ○米谷 慎<sup>1</sup>, 山口智彦<sup>1</sup>, 佐藤宗太<sup>2</sup>, 藤田 誠<sup>2</sup>
- 109S** 高分子末端変性によるフィラー充填ゴムの粘弾性変化に関する分子動力学を用いた解析  
(東洋ゴム工業株式会社) ○日野理

#### — 休憩 16:20-16:35 —

### 16:35-18:00 口頭発表 D

#### (高分子・ガラス・クラスター)

- 110L** ガラスのフラジリティと動的不均一性に関する考察  
(分子研<sup>1</sup>) ○金鋼<sup>1</sup>, 齊藤真司<sup>1</sup>
- 111S** ガラス状態の配置エントロピーの分子論的解釈  
(旭硝子(株)) ○高田 章
- 112S** Shape Effect Study on Heterogeneous Nucleation by Molecular Dynamics  
(慶應工大) ○徐東郁, 泰岡 顕治
- 113S** ナノ細孔中の分子の固液平衡条件を決定するための新規手法の開発  
(慶大理工<sup>1</sup>, ネブラスカ大化学<sup>2</sup>) ○金子 敏宏<sup>1</sup>, Jaecil BAI<sup>2</sup>, 泰岡 顕治<sup>1</sup>, 光武 亜代理<sup>1</sup>, Xiao Cheng ZENG<sup>2</sup> (249P)
- 114S** 分子クラスターにおけるポテンシャルエネルギー曲面上のダイナミクス  
(慶大理工<sup>1</sup>, ネブラスカ大化学<sup>2</sup>) ○秋元琢磨<sup>1</sup>, 金子敏宏<sup>1</sup>, 泰岡 顕治<sup>1</sup>, X. C. Zeng<sup>2</sup> (250P)

## 2日目 11月27日(火)

#### — 午前の部 —

### 9:30-10:30 口頭発表 E

#### (モデル系・計算手法)

- 201S** Hybrid (MPI+OPENMP) parallelization of Molecular Dynamics with cell-pair Verlet list  
(RIKEN AICS<sup>1</sup>, RIKEN QBiC<sup>2</sup>) ○ Jaewoon Jung<sup>1</sup>, Takaharu Mori<sup>2</sup>, Yuji Sugita<sup>1,2</sup>
- 202S** 遺伝的アルゴリズムを用いたタンパク質の安定構造探索  
(名大院理<sup>1</sup>, 分子研<sup>2</sup>, 名大構造生物研<sup>3</sup>, 名大計算科学研<sup>4</sup>) ○榮慶丈<sup>1,2</sup>, 岡本祐幸<sup>1,3,4</sup>

- 203S** 化学反応分子動力学シミュレーションの高速化  
(東大先端研) ○山下雄史
- 204S** 水中の Abeta フラグメントに対するクーロンレプリカ交換分子動力学シミュレーション  
(分子研, 総研大) ○伊藤暁, 奥村久士

#### — 休憩 10:30-10:45 —

### 10:45-11:45 口頭発表 F

#### (モデル系・計算手法)

- 205S**  $\alpha$ ヘリックス構造と $\beta$ ストランド構造を取りやすくするレプリカ交換分子動力学シミュレーション法  
(分子研<sup>1</sup>, 総研大<sup>2</sup>) ○奥村久士<sup>1,2</sup>, 伊藤暁<sup>1,2</sup>
- 206S** Basin-Hopping 法と Rigid Body 法を組み合わせた生体分子のリガンド結合自由エネルギー計算法の開発と Aldose Reductase への応用  
(総研大物理<sup>1</sup>, ケンブリッジ大学化学<sup>2</sup>) ○望月建爾<sup>1</sup>, David Wales<sup>2</sup> (251P)
- 207S** 地殻中の超臨界水の物性を予測するための H<sub>2</sub>O モデルの開発  
(東工大理工<sup>1</sup>, 東北大理<sup>2</sup>, 岡山大環境<sup>3</sup>, 佐賀大<sup>4</sup>) ○佐久間博<sup>1</sup>, 市来雅啓<sup>2</sup>, 河村雄行<sup>3</sup>, 藤田清士<sup>4</sup> (252P)
- 208S** 分極モデルとエネルギー表示の理論による溶媒和自由エネルギー計算の方法論の開発  
(東北大院理) ○鈴岡大樹, 高橋英明\*, 石山達也, 森田明弘 (254P)

### 11:45-12:45 ポスター発表 2 前半

#### 201P-255P

(講演タイトルはプログラムの末尾に記載)

#### — 昼食 12:45-14:00 —

#### — 午後の部 —

### 14:00-15:00 ポスター発表 2 後半

#### 201P-255P

(講演タイトルはプログラムの末尾に記載)

### 15:10-16:00 招待講演 B

- 209IL** 流体粒子ダイナミクス法によるコロイド分散系の研究  
(京大院理) 荒木武昭

#### — 休憩 16:00-16:15 —

**16:15-16:50 学術賞受賞講演**

210AL

— 休憩 16:50-17:05 —

**17:05-17:45 研究会総会****18:00-19:30 懇親会**

会場：西新プラザ

**3日目 11月28日(水)**

— 午前の部 —

**9:30-10:25 口頭発表 G**

(生体分子・自由エネルギー)

- 301L** LAMMPS を用いた凝縮核生成過程の大規模分子動力学計算  
(北海道大学低温科学研究所<sup>1</sup>, 独立行政法人海洋開発機構<sup>2</sup>, University of Zurich<sup>3</sup>) ○田中今日子<sup>1</sup>, 田中秀和<sup>1</sup>, 河野明男<sup>2</sup>, Jurg Diemand<sup>3</sup>, Raymond Angelil<sup>3</sup>
- 302S** DNA-タンパク質複合体の解離過程の自由エネルギープロファイル計算  
(原子力機構) ○米谷佳晃, 河野秀俊 (152P)
- 303S** TMAO 添加による蛋白質溶媒和自由エネルギー変化の微視的解明: 3次元カークウッド-バフ積分法によるマッピング解析  
(青山学院化学・生命<sup>1</sup>, 名大院情報科学<sup>2</sup>) ○優乙石<sup>1</sup>, 中田恭子<sup>1</sup>, 長岡正隆<sup>2</sup> (153P)

— 休憩 10:25-10:40 —

**10:40-11:20 口頭発表 H**

(生体分子・自由エネルギー)

- 304L** レプリカ交換分子動力学計算による糖鎖-タンパク質相互作用の解析  
(理化学研究所 基幹研究所) ○李秀榮, 杉田有治
- 305S** 拡張アンサンブル分子動力学シミュレーションによるヘリックス構造に対する圧力効果の研究  
(分子研<sup>1</sup>, 総研大<sup>2</sup>) ○森義治<sup>1</sup>, 奥村久士<sup>1,2</sup>

— 休憩 11:20-11:35 —

**11:35-12:25 招待講演 C**

- 306IL** 単細胞生物に学ぶ最適なネットワーク  
(九大マスコアインダストリ研究所) 手老篤史

— 昼食 12:25-13:40 —

— 午後の部 —

**13:40-14:50 口頭発表 I**

(生体膜・ミセル)

- 307L** 曲げ応力による膜の曲げ弾性係数の解析手法  
(産業技術総合研究所) ○川本周平, 篠田渉
- 308S** CHARMM36 力場を用いた実在の原形質膜の分子動力学計算  
(名大工<sup>1</sup>) ○安藤嘉倫<sup>1</sup>, 岡崎進<sup>1</sup>
- 309S** 膜貫通タンパク質の膜内配置に関する自由エネルギー解析  
(京大化研<sup>1</sup>, 分子研<sup>2</sup>) ○水口朋子<sup>1,2</sup>, 松林伸幸<sup>1</sup> (255P)
- 310S** 極性分子(メチルアミン、オクチルアミン、メタノール、オクタノール)の水相から SDS ミセルへの移行の自由エネルギー変化  
(名大院工<sup>1</sup>, 名大院工・計算セ<sup>2</sup>) ○藤本和士<sup>1</sup>, 吉井範行<sup>1,2</sup>, 岡崎進<sup>1</sup>

— 休憩 14:50-15:05 —

**15:05-15:50 口頭発表 J**

(モデル系・計算手法)

- 311S** 完全固体・液体の熱力学 v4  
(法政大生命科学) ○片岡洋右 (151P)
- 312S** 電荷中性条件のみを利用した静電ポテンシャルの開発と評価  
(近大先端研) ○米澤康滋
- 313S** ダウンフォールディング法による炭素系ポテンシャルの開発  
(核融合研<sup>1</sup>, 鳥取大院工<sup>2</sup>, 名大院工<sup>3</sup>) ○伊藤篤史<sup>1</sup>, 吉本芳英<sup>2</sup>, 高山有道<sup>1</sup>, 中村浩章<sup>1,3</sup> (253P)

— 休憩 15:50-16:05 —

**16:05-17:00 口頭発表 K**

(溶液)

- 314S** けい酸塩鉱物結晶表面・表面間における水・水溶液の構造と物性  
(岡山大環境科学) ○河村雄行 (154P)
- 315S** 振動スペクトルからみえる水/疎水性液体界面の構造

(東北大院理<sup>1</sup>) ○石山達也<sup>1</sup>, 佐藤祐史<sup>1</sup>, 森田明弘<sup>1</sup> (155P)

- 316L** イオン近傍の水の速い誘電緩和と遅い配向緩和 (九大理<sup>1</sup>, 京大化研<sup>2</sup>, 東北大工<sup>3</sup>) ○久保田陽二<sup>1</sup>, 吉森明<sup>1</sup>, 松林伸幸<sup>2</sup>, 鈴木誠<sup>3</sup>, 秋山良<sup>1</sup>

## 17:00-17:05 閉会の辞

### ポスター発表 1 (1日目)

- 101P** 多環芳香族炭化水素クラスターの構造およびその分子集合パターンの研究 (北大院理) ○竹内浩
- 102P** 分子動力学法による高圧下のカルシウムの融解曲線 (広大総合科<sup>1</sup>, 広大院総合科<sup>2</sup>) ○BOLD TUVSHINTUGS<sup>1</sup>, 宗尻修治<sup>2</sup>, 星野公三<sup>2</sup>
- 103P** 熱硬化性樹脂の架橋構造と熱伝導性 (三菱電機 先端総研) ○鶴崎晋也, 信時英治
- 104P** 電場の氷結晶成長への影響に関する分子動力学解析 (京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科<sup>1</sup>, 京都工芸繊維大学大学院工芸科学研究科<sup>2</sup>) ○黒島考平<sup>1</sup>, 萩原良道<sup>2</sup>
- 105P** 高温高圧下での MgO 結晶中の点欠陥による拡散機構 (岡山大学地球研<sup>1</sup>, 岡山大学環境理工<sup>2</sup>) ○辻野典秀<sup>1</sup>, 河村雄行<sup>2</sup>
- 106P** ネットワーク構造ガラス形成液体における剛性パーコレーション; 分子動力学シミュレーションとペブルゲーム解析 (国立天文台<sup>1</sup>) ○竹内靖<sup>1</sup>
- 107P** Forsterite/MgSiO<sub>3</sub> ガラス・メルト界面の分子動力学シミュレーション (岡山大環境生命<sup>1</sup>) ○則竹史哉<sup>1</sup>, 河村雄行<sup>1</sup>
- 108P** 超イオン導電ガラスの分子動力学シミュレーション (東北学院大工) 淡野照義
- 109P** 高分子結晶膜を用いた CO<sub>2</sub> の分離 (福井大院工) ○朝日駿介, 玉井良則
- 110P** 高分子メルトの非平衡レオロジー: 3次元シア流に対する力学応答 (京大工) ○大山倫弘, 水野英如, 山本量一
- 111P** 緩和モード解析を用いた高分子メルトの線形粘弾性の評価 (慶大理工, 防衛大応物<sup>1</sup>) ○岩岡伸之, 萩田克美<sup>1</sup>, 高野宏
- 112P** LJG ポテンシャル系におけるガラスの MD シミュレーション (九大理<sup>1</sup>, 九大理<sup>2</sup>) ○松本幸介<sup>1</sup>, 松井淳<sup>2</sup>
- 113P** ガラスの変形や緩和に関する MD 計算 (旭硝子中研<sup>1</sup>, 東工大応セラ研<sup>2</sup>) ○谷口健英<sup>1</sup>, 深澤寧司<sup>1</sup>, 伊藤節郎<sup>1, 2</sup>
- 114P** 拡張アンサンブル分子動力学法による単純液体の固液相転移温度の推定 (慶大院理工<sup>1</sup>, 慶大理工<sup>2</sup>) ○増永充宏<sup>1</sup>, 金子敏宏<sup>1</sup>, 光武亜代理<sup>2</sup>, 泰岡顕治<sup>2</sup>
- 115P** 散逸粒子動力学法による制限された領域におけるジブロック共重合体の自己組織化の研究 (福井大院工) 高橋浩司
- 116P** 分子動力学および量子化学計算によるガラス中に存在するシラノール基の振動スペクトル評価 (旭硝子中央研究所) ○田中厚<sup>1</sup>, 入澤潤<sup>2</sup>, 谷口健英<sup>3</sup>, 深澤寧司<sup>4</sup>
- 117P** 粗視化分子シミュレーションによる高分子電解質ブラシの構造 (豊田中研<sup>1</sup>, 京大触媒電池<sup>2</sup>) ○鷲津仁志<sup>1, 2</sup>, 金城友之<sup>1</sup>, 吉田広顕<sup>1</sup>
- 118P** Rouse パラメータを用いた原子レベル分子動力学法と粗視化分子動力学法の接続 (慶應大院<sup>1</sup>, 慶應大機械<sup>2</sup>, 京大化<sup>3</sup>) ○大和伸好<sup>1</sup>, 泰岡顕治<sup>2</sup>, 増淵雄一<sup>3</sup>
- 119P** 分子動力学シミュレーションによる溶解度パラメータ推算 (東レ<sup>1</sup>) ○北畑雅弘<sup>1</sup>, 川上智教<sup>1</sup>, 茂本勇<sup>1</sup>
- 120P** MPI を用いた並列古典 MD プログラムの GPGPU 上での性能評価 (リンクセル法) (金沢工業大学 情報学部<sup>1</sup>, 金沢工業大学 工学部<sup>2</sup>) 桜井 翔<sup>1</sup>, 亀山 侑弥<sup>2</sup>, 林 亮子<sup>3</sup>
- 121P** MPI を用いた並列古典 MD プログラムの GPGPU 上での性能評価 (DirectN<sup>2</sup> 法) (金沢工業大学 情報学部 情報工学科<sup>1</sup>, 金沢工業大学 工学部 情報工学科<sup>2</sup>) ○亀山 侑弥<sup>1</sup>, 桜井 翔<sup>1</sup>, 林 亮子<sup>2</sup>
- 122P** レプリカ交換インターフェース (REIN) (理研 QBIC<sup>1</sup>, 理研 CSR<sup>2</sup>, 理研 AICS<sup>3</sup>, 理研 ASI<sup>4</sup>) ○宮下尚之<sup>1, 2, 3</sup>, 李秀榮<sup>4</sup>, 杉田有治<sup>1, 2, 3, 4</sup>
- 123P** GPU を用いたレプリカ交換分子動力学シミュレーションの高速化 (慶大院理工<sup>1</sup>, 慶大理工<sup>2</sup>, 慶大理工<sup>3</sup>, 電通大情報<sup>4</sup>, 慶大理工<sup>5</sup>) ○野村昂太郎<sup>1</sup>, 老川稔<sup>2</sup>, 川井敦<sup>3</sup>, 成見哲<sup>4</sup>, 泰岡顕治<sup>5</sup>
- 124P** MUSTERMD : Temperature Accelerated MD と Replica 交換法を用いた Multi Scale サンプリング手法の開発 (東大院新領域<sup>1</sup>, 東大分生研<sup>2</sup>) ○山守優<sup>1</sup>, 北尾彰朗<sup>1, 2</sup>
- 125P** 分極振動子による極性溶媒の粗視化粒子モデル ((株) 豊田中央研究所) ○金城友之, 吉田広顕, 鷲津仁志
- 126P** closure effect を考慮した部分モル体積の計算 (九大理<sup>1</sup>) ○川畑雄一<sup>1</sup>, 秋山良<sup>1</sup>
- 127P** Cs<sup>+</sup> イオン-タンパク質系の古典分子動力学計算

- (日本原子力研究開発機構<sup>1</sup>)○桜庭俊<sup>1</sup>, 河野秀俊<sup>1</sup>
- 128P** 分子シミュレーションにおけるデータ同化手法の開発  
(理研 AICS<sup>1</sup>, 理研 QBiC<sup>2</sup>, 理研 ASI<sup>3</sup>)○松永康佑<sup>1</sup>, 森貴治<sup>2</sup>, 杉田有治<sup>1,2,3</sup>
- 129P** 大きな粒子の拡散における摂動理論  
(九大院理<sup>1</sup>)○中村有花<sup>1</sup>, 吉森明<sup>1</sup>, 秋山良<sup>1</sup>
- 130P** Efficient exchange algorithm for the replica exchange method  
(理研 生命システム研究センター(QBiC)<sup>1</sup>, 東大新領域<sup>2</sup>)○近藤寛子<sup>1,2</sup>, 泰地真弘人<sup>1,2</sup>
- 131P** 流体膜に対する圧力分布解析をもとにした関係式  
(東北大学原子分子材料高等研究機構(WPI-AIMR)<sup>1</sup>, 産業技術総合研究所(AIST)<sup>2</sup>)○中村壮伸<sup>1</sup>, 篠田渉<sup>2</sup>
- 132P** 膜融合過程の自由エネルギー解析  
(産業技術総合研究所)川本周平, 篠田渉
- 133P** 二成分系気液界面の分子動力学  
(阪大工<sup>1</sup>, 阪大工<sup>2</sup>, 阪大工<sup>3</sup>)○山口恭平<sup>1</sup>, 稲葉匡司<sup>2</sup>, 矢野猛<sup>3</sup>
- 134P** 脂質二重膜周りの水分子の異常拡散  
(慶大院理工<sup>1</sup>, 理研<sup>2</sup>, 慶大医<sup>3</sup>, 慶大理工<sup>4</sup>)○山本詠土<sup>1</sup>, 秋元琢磨<sup>1</sup>, 平野秀典<sup>2</sup>, 安井正人<sup>3</sup>, 泰岡顕治<sup>4</sup>
- 135P** 微小気泡ダイナミクスへの界面活性剤の影響: MD-LBM 連成計算  
(京大工<sup>1</sup>, 京大工<sup>2</sup>)○稲岡篤志<sup>1</sup>, 松本充弘<sup>2</sup>
- 136P** アルカノールアミン水溶液の CO<sub>2</sub> 反応速度推算法の分子動力学シミュレーションによる検討  
(京大化研<sup>1</sup>, 関西電力<sup>2</sup>)○古川博敏<sup>2</sup>, 窪田善之<sup>2</sup>, 松林伸幸<sup>1</sup>
- 137P** 影響汎関数理論を用いた銅基板表面上に吸着されたセシウム原子のフォノンモードの振動緩和の研究  
(名大院工<sup>1</sup>, 東大院工<sup>2</sup>, 京大院理<sup>3</sup>)○山内隆義<sup>1</sup>, 山田篤志<sup>1</sup>, 岡崎進<sup>1</sup>, 大戸達彦<sup>2</sup>, 山下晃一<sup>2</sup>, 渡邊一也<sup>3</sup>, 松本吉泰<sup>3</sup>
- 138P** Hsp90 との結合・解離における ADP の解析  
(金沢大理工)○川口一朋, 齋藤大明, 長尾秀実
- 139P** クラスタ展開法による置換ヘリセンの円二色スペクトルの解析  
(阪大院工)○仲井義人, ○森直, 井上佳久
- 140P** H-ras-GTP 結合系の GTP 周辺ならびに H-ras-GDP 結合系の GDP 周辺における水分子の解析  
(東京薬科大生命科学<sup>1</sup>, 金城大医療健康<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>, 齋藤大明<sup>3</sup>, 長尾秀実<sup>3</sup>
- 141P** 計算化学に支援された大腸菌機械受容チャネル MscL の開口挙動の解析  
(名大・医<sup>1</sup>, 名大院・医・細胞生物物理<sup>2</sup>, 名大・革新ナノバイオデバイスセンター<sup>3</sup>)○山本泰康<sup>1</sup>, 澤田康之<sup>2</sup>, 曾我部正博<sup>1,2,3</sup>
- 142P** 量子化学計算を用いたクラスレート水和物のゲスト分子占有率計算  
(慶大理工<sup>1</sup>, NRC<sup>2</sup>)○高橋和義<sup>1</sup>, Saman Alavi<sup>2</sup>, 大村亮<sup>1</sup>
- 143P** 積分方程式理論を用いた生理条件下における同符号電荷間引力の制御の研究  
(九大理<sup>1</sup>)○藤原慎吾<sup>1</sup>, 秋山良<sup>1</sup>
- 144P** 磁性原子を内包した量子ドットの光励起スペクトル  
(日大理工<sup>1</sup>, 日大文理<sup>2</sup>)○佐甲徳栄<sup>1</sup>, 石田浩<sup>2</sup>
- 145P** F1 モータータンパク質βサブユニットの全原子水和自由エネルギー解析  
(京大化研)○浴本亨, 松林伸幸
- 146P** 筋小胞体カルシウムポンプの ATP/ADP 結合状態の分子動力学計算  
(中央大・理工物理<sup>1</sup>, 理研 ASI<sup>2</sup>, 理研 AICS<sup>3</sup>, 理研 QBiC<sup>4</sup>)○小室靖明<sup>1,2</sup>, 小林千草<sup>2</sup>, 宗行英朗<sup>1</sup>, 杉田有治<sup>2,3,4</sup>
- 147P** MUBA MC 法による Lennard-Jones 流体の圧力誘起相転移と結晶構造の研究  
(中京大国際教養)六車千鶴
- 148P** 第一原理計算による斜方輝石中の OH 振動スペクトルの再現  
(東工大地惑<sup>1</sup>, 岡山大地球研<sup>2</sup>, 岡山大環境<sup>3</sup>)○櫻井萌<sup>1</sup>, 佐久間博<sup>1</sup>, 辻野典秀<sup>2</sup>, 高橋栄一<sup>1</sup>, 河村雄行<sup>3</sup>
- 149P** 分子間プロトン移動反応の量子的経路  
(原子力機構)○志賀基之
- 150P** レプリカ交換分子動力学計算による糖鎖力場の検証  
(中央大・理工物理<sup>1</sup>, 理研 ASI<sup>2</sup>, 理研 AICS<sup>3</sup>, 理研 QBiC<sup>4</sup>)○渡部茂久<sup>1</sup>, 李秀榮<sup>2</sup>, 二島渉<sup>2</sup>, 宗行英朗<sup>1</sup>, 杉田有治<sup>2,3,4</sup>
- 151P** 完全固体・液体の熱力学 v4  
(法政大生命科学)片岡洋石(311S)
- 152P** DNA-タンパク質複合体の解離過程の自由エネルギープロファイル計算  
(原子力機構)米谷佳晃, 河野秀俊(302S)
- 153P** TMAO 添加による蛋白質溶媒和自由エネルギー変化の微視的解明: 3次元カークウッド-バフ積分法によるマッピング解析  
(青山学院化学・生命<sup>1</sup>, 名大院情報科学<sup>2</sup>)○優乙石<sup>1</sup>, 中田恭子<sup>1</sup>, 長岡正隆<sup>2</sup>(303S)
- 154P** けい酸塩鉱物結晶表面・表面間における水・水溶液の構造と物性  
(岡山大環境科学)河村雄行(314S)
- 155P** 振動スペクトルからみえる水/疎水性液体界面の構造  
(東北大院理<sup>1</sup>)○石山達也<sup>1</sup>, 佐藤祐史<sup>1</sup>, 森田明弘<sup>1</sup>(315S)

- 201P** ラミニン $\alpha$ 鎖由来ペプチドの分子動力学シミュレーションによる構造解析  
(東京薬科大学<sup>1</sup>, 東京薬科大生命<sup>2</sup>) ○山田 寛尚<sup>1</sup>, 宮川 毅<sup>2</sup>, 森河 良太<sup>2</sup>, 片桐 文彦<sup>1</sup>, 保住 健太郎<sup>1</sup>, 吉川 大和<sup>1</sup>, 野水 基義<sup>1</sup>, 高須 昌子<sup>2</sup>
- 202P** FMO-MD 法の最近の進歩  
(産総研バイオメディカル<sup>1</sup>, 立教大理<sup>2</sup>, お茶大理<sup>3</sup>, TS テクノロジー<sup>4</sup>, 東大生産研<sup>5</sup>) ○古明地 勇人<sup>1</sup>, 加藤雄司, 佐藤真, 望月祐志, 山高博<sup>2</sup>, 平山奈津実, 松田彩, 森寛敏<sup>3</sup>, 藤原崇幸<sup>4</sup>, 冲山佳生<sup>5</sup>
- 203P** 脂質二重層膜におけるグラミシジン A の構造と圧力特性  
(金沢大学理工) ○齋藤大明, 川口一朋, 長尾秀実
- 204P** 細胞環境における蛋白質の構造安定性  
(理研・AICS<sup>1</sup>, 理研・QBiC<sup>2</sup>, 理研・ASI<sup>3</sup>, ミシガン州立大<sup>4</sup>) ○原田隆平<sup>1</sup>, 杉田有治<sup>1,2,3</sup>, Michael Feig<sup>4</sup>
- 205P** 分子動力学法による散逸粒子動力学相互作用モデルの構築: Lennard-Jones 流体に関する検討  
(東大工<sup>1</sup>, 東北大流体研<sup>2</sup>) ○吉本勇太<sup>1</sup>, 美馬俊喜<sup>1</sup>, 福島啓悟<sup>2</sup>, 柞淵郁也<sup>1</sup>, 徳増崇<sup>2</sup>, 高木周<sup>1</sup>, 松本洋一郎<sup>1</sup>
- 206P** 溶媒和モーターのエネルギー論  
(工学院大教養<sup>1</sup>, 九大院理<sup>2</sup>) ○徳永 健<sup>1</sup>, 秋山 良<sup>2</sup>
- 207P** タンキラーゼー阻害剤複合体の結合自由エネルギー計算  
(理化学研究所) 沖本憲明<sup>1</sup>, 平野秀典<sup>1</sup>, 藤田茂雄<sup>1</sup>, 泰地真弘人<sup>1</sup>
- 208P** シミュレーションによる 4-helix bundle をモデルにしたタンパク質の分子間相互作用面のデザイン  
(東薬大生命・筑波大数理物質<sup>1</sup>) ○福田真己, 小松勇<sup>1</sup>, 森河良太, 宮川毅, 高須昌子, 赤沼哲史, 山岸明彦
- 209P** 分子シミュレーションを用いた G9a の阻害剤開発に関する研究  
(理研<sup>1</sup>) ○平野秀典<sup>1</sup>, 沖本憲明<sup>1</sup>, 藤田茂雄<sup>1</sup>, 森本元太郎<sup>1</sup>, 泰地真弘人<sup>1</sup>
- 210P** 細菌機械受容チャネル MscL の活性化における水-タンパク質間の協調過程の解析  
(名大院・医・細胞生物物理<sup>1</sup>, 名大・革新ナノデバイスセンター<sup>2</sup>) ○澤田康之<sup>1</sup>, 曾我部正博<sup>1,2</sup>
- 211P** 青色光受容体蛋白質の DNA 修復における電子トンネル移動経路と構造変化  
(名大院理<sup>1</sup>, 京大院理<sup>2</sup>) ○佐藤竜馬<sup>1</sup>, 西岡宏任<sup>2</sup>, 倭剛久<sup>1</sup>
- 212P** Pd-TM(Fe,Co,Ni) 合金水素化物の磁性と電子構造計算  
(富山大総合情報セ<sup>1</sup>, 富山大水素研<sup>2</sup>) ○布村紀男<sup>1</sup>, 原 正憲<sup>2</sup>, 赤丸悟士<sup>2</sup>
- 213P** テロメアとテロメア関連タンパク質の親和性についての分子動力学シミュレーション  
(東京大学工学系研究科原子力国際専攻<sup>1</sup>, 東京大学工学系研究科原子力専攻<sup>2</sup>, 東京薬科大学生命科学研究所<sup>3</sup>, コロラド州立大学<sup>4</sup>) ○冠城雅晃<sup>1</sup>, 福田真己<sup>3</sup>, 宮川毅<sup>3</sup>, 森川良太<sup>3</sup>, 高須昌子<sup>3</sup>, 加藤宝光<sup>4</sup>, 上坂充<sup>2</sup>
- 214P** 経路積分分子動力学法を用いた水素ハイドレートの理論的研究  
(金沢大院自然<sup>1</sup>) ○東 真史<sup>1</sup>, 三浦 伸一<sup>1</sup>
- 215P** 芳香族炭化水素受容体とその共役因子間の特異的結合構造の解析: 古典分子動力学及びフラグメント MO 計算  
(豊橋技術科学大学<sup>1</sup>, RIKEN AICS<sup>2</sup>, 東芝研究開発センター<sup>3</sup>) ○宮城慧<sup>1</sup>, 村田享士郎<sup>1</sup>, 伊藤聡<sup>2</sup>, 石原-菅野 美津子<sup>3</sup>, 栗田典之<sup>1</sup>
- 216P** リボヌクレアーゼ HI のリン酸ジエステル加水分解反応機構に関する計算化学的研究  
(阪大蛋白研<sup>1</sup>) ○鷹野優<sup>1</sup>, 喜多真琴<sup>1</sup>, 中村春木<sup>1</sup>
- 217P** 相同タンパク質の構造ゆらぎの緩和  
(慶大理工<sup>1</sup>) ○小泉祐太<sup>1</sup>, 光武亜代理<sup>1</sup>, 高野宏<sup>1</sup>
- 218P** 分子動力学シミュレーションを用いたポリオウイルスレセプター CD155 の水中における構造の解析  
(名古屋大院工<sup>1</sup>, 名古屋大院工・計算セ<sup>2</sup>, 大阪大蛋白研<sup>3</sup>) ○水谷圭佑<sup>1</sup>, 藤本和土<sup>1</sup>, 安藤嘉倫<sup>1</sup>, 山田篤志<sup>1</sup>, 吉井範行<sup>2</sup>, 中川敦史<sup>3</sup>, 岡崎進<sup>1</sup>
- 219P** 微小液滴の蒸発に伴う冷却と凝固  
(京都大工<sup>1</sup>) 立見純一<sup>1</sup>, ○松本充弘<sup>1</sup>
- 220P** 剛体水モデルにおける水/氷共存状態の分子動力学シミュレーション  
(慶大理工<sup>1</sup>, Colorad School of Mines<sup>2</sup>, 電通大情報理工<sup>3</sup>) ○高岩大輔<sup>1</sup>, 坂牧隆司<sup>1</sup>, Amadeu K. Sum<sup>2</sup>, 成見哲<sup>3</sup>, 泰岡顕治<sup>1</sup>
- 221P** H<sub>2</sub>CNH<sub>2</sub><sup>+</sup> の内部転換に伴う電子ダイナミクスに関する理論的研究  
(東大院工) ○国定友隆, 牛山浩, 山下晃一
- 222P** アミロイド線維形成のレプリカ交換分子動力学シミュレーション  
(名古屋大学大学院理学研究科<sup>1</sup>, Laboratoire de Biochimie Theorique, Institut de Biologie Physico-Chimique<sup>2</sup>) ○西川直宏<sup>1</sup>, Phuong Nguyen<sup>2</sup>, Philippe Derreumaux<sup>2</sup>, 岡本祐幸<sup>1</sup>
- 223P** QM/MM-ER 法による ATP モデル分子の加水分解反応の自由エネルギー解析  
(東北大学大学院理学研究科) 高橋英明, 三木雄詩, 近江 惇, 森田明弘
- 224P** 単純液体の熱伝導率: 温度および充填率依存性  
(新潟大院自然<sup>1</sup>, 新潟大理<sup>2</sup>, バリ第 6 大<sup>3</sup>, オックスフォード大<sup>4</sup>) 石井良樹<sup>1</sup>, 大野卓哉<sup>1</sup>, 佐藤

- 圭介<sup>1</sup>, 大鳥範和<sup>2</sup>, M. Salanne<sup>3</sup>, P. A. Madden<sup>4</sup>
- 225P** 蛋白質系への緩和モード解析の適用  
(慶應大理工物理) 長井俊樹, ○光武重代理, 高野宏
- 226P** 溶媒の効果を含めた溶質のダイナミクス: シャペロニンへの蛋白質の挿入過程  
(九大院理<sup>1</sup>, 神戸大理<sup>2</sup>, 京大工<sup>3</sup>) ○原諒平<sup>1</sup>, 天野健一<sup>2</sup>, 木下正弘<sup>3</sup>, 吉森明<sup>1</sup>
- 227P** 分子動力学シミュレーションを用いた抗精神病薬-GPCR複合体の薬理作用メカニズムの解明  
(名大院工<sup>1</sup>, 大日本住友製薬株式会社<sup>2</sup>) ○藤井秀幸<sup>1</sup>, 藤本和士<sup>1</sup>, 山田篤志<sup>1</sup>, 岡崎進<sup>1</sup>, 市川治<sup>2</sup>, 岡崎一彦<sup>2</sup>, 山崎一人<sup>2</sup>
- 228P** umbrella sampling 法を用いたタンパク質中のリガンド移動メカニズムの解明  
(名大院理<sup>1</sup>, 慶應大物理<sup>2</sup>) 都築峰幸<sup>1</sup>, 光武重代理<sup>2</sup>, 倭剛久<sup>1</sup>
- 229P** 粗視化モデル MD による RNA 立体構造予測  
(産総研・CBRC) 亀田倫史
- 230P** ミオシン分子のレバーアームスイングと大域静電相互作用ネットワークの相関  
(早大先進理工<sup>1</sup>) ○大貫隼<sup>1</sup>, 佐藤昂人<sup>1</sup>, 梅澤公二<sup>1</sup>, 高野光則<sup>1</sup>
- 231P** SBDD を用いた CRK SH2 ドメインに対するタンパク質間相互作用阻害ペプチドの設計  
(東京大新領域<sup>1</sup>, 理研分子設計<sup>2</sup>, 理研 NMR パイプ<sup>3</sup>, 産総研分子機能<sup>4</sup>, 理研細胞システム<sup>5</sup>, シカゴ大ベンメイ癌研<sup>6</sup>) 山岸純也<sup>1,2</sup>, 沖本憲明<sup>2</sup>, 葛西卓磨<sup>3</sup>, 末永敦<sup>4</sup>, 岡田真理子<sup>5</sup>, 今本公<sup>6</sup>, 泰地真弘人<sup>1,2</sup>
- 232P** 散逸粒子動力学シミュレーションによるナノチューブ内におけるトリブロック Janus 粒子の自己集合構造  
(電通大院情報理工<sup>1</sup>, 慶應大理工<sup>2</sup>, University of Nebraska-Lincoln<sup>3</sup>) ○荒井規允<sup>1</sup>, 泰岡顕治<sup>2</sup>, Xiao Cheng Zeng<sup>3</sup>
- 233P** 荷電コロイド粒子まわりのイオン分布とコロイド粒子間の有効相互作用  
(京大院工<sup>1</sup>) ○池田一郎<sup>1</sup>, 松本充弘<sup>1</sup>
- 234P** 球状ミセル表面で界面活性剤分子の親水基がなす構造と動力学に関する分子動力学計算による研究  
(名大工<sup>1</sup>, 名大院工・計算セ<sup>2</sup>, 名大院工<sup>3</sup>) 瀬高悠太<sup>1</sup>, ○吉井範行<sup>2</sup>, 二村佑樹<sup>3</sup>, 藤本和士<sup>3</sup>, 岡崎進<sup>1,3</sup>
- 235P** 両親媒性分子による球状ミセル生成の分子動力学シミュレーション  
(名古屋大学大学院工学研究科<sup>1</sup>, 名古屋大学大学院工学研究科計算センター<sup>2</sup>) ○河田真治<sup>1</sup>, 小森美佳<sup>1</sup>, 藤本和士<sup>1</sup>, 吉井範行<sup>2</sup>, 岡崎進<sup>1</sup>
- 236P** イオン輸送における界面揺らぎの影響の解析  
(東北大院理<sup>1</sup>) ○吉川信明<sup>1</sup>, 森田明弘<sup>1</sup>
- 237P** ピペラジンのカーバメート生成反応の標準自由エネルギー計算  
(京大化研<sup>1</sup>, 関西電力<sup>2</sup>) ○窪田善之<sup>1,2</sup>, 古川博敏<sup>1,2</sup>, 松林伸幸<sup>1</sup>
- 238P** 液体中の縦波と横波の mixing 機構  
(広島大学大学院総合科学研究科) 宗尻修治, 星野公三
- 239P** 水和粘土鉱物の水の挙動の分子動力学計算  
(東工大理工<sup>1</sup>, 岡山大環境<sup>2</sup>) ○佐藤毅<sup>1</sup>, 河村雄行<sup>2</sup>
- 240P** 凹凸面に衝突したときの水滴の内部圧力の導出  
(福井大工<sup>1</sup>, 慶應大理工<sup>2</sup>, Univ. Nebraska<sup>3</sup>, 九州大学 I2CNER<sup>4</sup>) ○古石貴裕<sup>1</sup>, 泰岡顕治<sup>2</sup>, X. C. Zeng<sup>3</sup>, 藤川茂紀<sup>4</sup>
- 241P** ナノ細孔内の水の気液相境界に関する分子動力学シミュレーション  
(東大工<sup>1</sup>, 東北大流体研<sup>2</sup>) ○美馬俊喜<sup>1</sup>, 杵淵郁也<sup>1</sup>, 吉本勇太<sup>1</sup>, 福島啓悟<sup>2</sup>, 徳増崇<sup>2</sup>, 高木周<sup>1</sup>, 松本洋一郎<sup>1</sup>
- 242P** モンテカルロ直接シミュレーションによる固体高分子形燃料電池マイクロポーラス層内の気体輸送解析  
(東大工<sup>1</sup>, FC-Cubic<sup>2</sup>, 東北大流体研<sup>3</sup>) 杵淵郁也<sup>1</sup>, 大山淳平<sup>2</sup>, 横山浩司<sup>2</sup>, 久保則夫<sup>2</sup>, 徳増崇<sup>3</sup>, 松本洋一郎<sup>1</sup>
- 243P** バナジウム水素化物中の格子欠陥に関する計算科学的研究  
(産総研) 小川 浩
- 244P** ナノスリットに閉じ込められた液晶の分子動力学シミュレーション  
(東北大工学部<sup>1</sup>, 東北大 WPI and 東北大多元研<sup>2</sup>, JST-CREST<sup>3</sup>) ○松原裕樹<sup>1,3</sup>, Pichierri Fabio<sup>1,3</sup>, 栗原和枝<sup>2,3</sup>
- 245P** LD-BTE 計算によるフォノン物性および熱伝導のシミュレーション  
(京大工院<sup>1</sup>, CMU<sup>2</sup>) ○正尾裕輔<sup>1</sup>, Ankit Jain<sup>2</sup>, Jason Larkin<sup>2</sup>, Alan McGaughey<sup>2</sup>
- 246P** 酸化セリウムにおける酸素・セリウムイオンフレンケル対の挙動  
(純真学園大学保健医療<sup>1</sup>, 九州大学大学院工<sup>2</sup>, CEA Saclay<sup>3</sup>) ○椎山謙一<sup>1</sup>, 高木聖也<sup>2</sup>, 安田和弘<sup>2</sup>, 松村晶<sup>2</sup>, Alain Chartier<sup>3</sup>, Constantin Meis<sup>3</sup>
- 247P** ボルツマン方程式に基づく固体中のエネルギー輸送解析  
(京大工) 今西保奈美, 倉田博文, 正尾裕輔, 松本充弘
- 248P** 分子動力学法を用いた二次元液晶のミクロスコピックな拡散挙動解析  
(北里大理<sup>1</sup>, 早大先進理工<sup>2</sup>) ○渡辺豪<sup>1</sup>, 多辺由佳<sup>2</sup>
- 249P** ナノ細孔中の分子の固液平衡条件を決定するための新規手法の開発  
(慶大理工<sup>1</sup>, ネブラスカ大化学<sup>2</sup>) ○金子 敏宏

- <sup>1</sup>, Jaecil BAI<sup>2</sup>, 泰岡 顕治<sup>1</sup>, 光武 亜代理<sup>1</sup>, Xiao Cheng ZENG<sup>2</sup> (113S)
- 250P** 分子クラスターにおけるポテンシャルエネルギー曲面上のダイナミクス  
(慶大理工<sup>1</sup>, ネブラスカ大化学<sup>2</sup>) 秋元琢磨<sup>1</sup>, 金子敏宏<sup>1</sup>, 泰岡顕治<sup>1</sup>, X. C. Zeng<sup>2</sup> (114S)
- 251P** Basin-Hopping 法と Rigid Body 法を組み合わせた生体分子のリガンド結合自由エネルギー計算法の開発と Aldose Reductase への応用  
(総研大物理<sup>1</sup>, ケンブリッジ大学化学<sup>2</sup>) ○望月建爾<sup>1</sup>, David Wales<sup>2</sup> (206S)
- 252P** 地殻中の超臨界水の物性を予測するための H<sub>2</sub>O モデルの開発  
(東工大理工<sup>1</sup>, 東北大理<sup>2</sup>, 岡山大環境<sup>3</sup>, 佐賀大<sup>4</sup>) ○佐久間博<sup>1</sup>, 市來雅啓<sup>2</sup>, 河村雄行<sup>3</sup>, 藤田清士<sup>4</sup> (207S)
- 253P** ダウンフォールディング法による炭素系ポテンシャルの開発  
(核融合研<sup>1</sup>, 鳥取大院工<sup>2</sup>, 名大院工<sup>3</sup>) ○伊藤篤史<sup>1</sup>, 吉本芳英<sup>2</sup>, 高山有道<sup>1</sup>, 中村浩章<sup>1,3</sup> (313S)
- 254P** 分極モデルとエネルギー表示の理論による溶媒和自由エネルギー計算の方法論の開発  
(東北大院理) ○鈴岡大樹, 高橋英明\*, 石山達也, 森田明弘 (208S)
- 255P** 膜貫通タンパク質の膜内配置に関する自由エネルギー解析  
(京大化研<sup>1</sup>, 分子研<sup>2</sup>) ○水口朋子<sup>1,2</sup>, 松林伸幸<sup>1</sup> (309S)