

## 第 28 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 : 日本化学会, 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  
 会期 : 平成 26 年 11 月 12 日 (水) ~ 14 日 (金)  
 会場 : 仙台市民会館  
 〒980-0823 宮城県仙台市青葉区桜ヶ丘公園 4-1  
 地下鉄・当台公園駅下車「公園 2」出口から, 徒歩約 10 分  
 HP : <http://www.yasuoka.mech.keio.ac.jp/mssj28/>

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) I L=招待講演 (発表 45 分+討論 5 分)  
 S=15 分講演 (発表 12 分+討論 3 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 11 月 12 日 (水)

9:15-9:45 開場, 受付

9:45-9:55 開会の辞

森田明弘 (東北大)

—午前の部—

9:55-10:40 口頭発表 A

座長 秋山良 (九大)

(液体論)

101S 剛体球参照系を用いた密度汎関数理論に基づく新しい溶媒和自由エネルギー表式 (慶應大理工<sup>1</sup>, 岡山大自然<sup>2</sup>) ○丸山豊<sup>1</sup>, 光武亜代理<sup>1</sup>, 墨智成<sup>2</sup>,

102S 剛体球参照系を用いた新たな密度汎関数理論の定式化: 単純液体への適用 (岡山大自然<sup>1</sup>, 慶應大理工<sup>2</sup>) ○墨智成<sup>1</sup>, 丸山豊<sup>2</sup>

103S 液中原子間力顕微鏡で計測されるフォースマップを溶媒和構造へ変換する理論の研究 (京大院工) ○天野健一, 西直哉, 作花哲夫

—休憩 10:40-10:50—

10:50-11:50 口頭発表 B

座長 金鋼 (新潟大)

(非平衡・粗視化)

104S 超音波キャビテーションによるアミロイド線維の破壊過程を調べた非平衡分

子動力学シミュレーション (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>

105S 二次電池電解液添加剤の粗視化分子シミュレーション (筑波大院化<sup>1</sup>, 豊田中研<sup>2</sup>, 京大触媒電池<sup>3</sup>) 相川小春<sup>1</sup>, 金城友之<sup>2,3</sup>, 吉田広顕<sup>2,3</sup>, ○鷲津仁志<sup>2,3</sup>

106S 粗視化モデルによる電解質溶液のシミュレーション (豊田中研, 京大 ESICB) ○金城友之, 吉田広顕, 鷲津仁志

107S 分子動力学によるナノチャンネル内水溶液の流れのシミュレーション (豊田中研<sup>1</sup>, 京大 ESICB<sup>2</sup>, ドイツ DLR<sup>3</sup>, グルノーブル第 1 大<sup>4</sup>) ○吉田広顕<sup>1,2</sup>, 水野英如<sup>3</sup>, 金城友之<sup>1,2</sup>, 鷲津仁志<sup>1,2</sup>, Jean-Louis Barrat<sup>4</sup>

—休憩 11:50-12:00—

12:00-13:00 ポスター発表 1 (奇数番号)

101P-152P (講演タイトルはプログラムの末尾に記載)

—昼食 13:00-14:00—

—午後の部—

14:00-15:00 ポスター発表 1 (偶数番号)

101P-152P (講演タイトルはプログラムの末尾に記載)

—休憩 15:00-15:10—

15:10-16:00 招待講演 1

座長 高橋英明 (東北大)

- 108IL 天然光合成 PSII が行う不思議な酸素発生  
のメカニズム (理化学研究所 中村特別研究室) 中村振一郎 先生

16:00-16:30 口頭発表 C

座長 米谷慎 (産総研)

(高分子・ガラス・クラスター)

- 109S ナノ多孔質体に閉じ込められた分子の融点変化メカニズムの研究 (東理大理工) 金子敏宏  
110S 氷 VII の結晶化経路に現れる, 準安定氷の発見 (岡大院自然) ○望月建爾, 樋本和夫, 松本正和

—休憩 16:30-16:45—

16:45-17:40 口頭発表 D

座長 墨智成 (岡山大)

(高分子・ガラス・クラスター)

- 111L 過冷却水における Stokes-Einstein 則の破れに関する考察 (モンペリエ第2大<sup>1</sup>, 新潟大理<sup>2</sup>, 京大理<sup>3</sup>) 川崎猛史<sup>1</sup>, ○金鋼<sup>2</sup>, 小貫明<sup>3</sup>  
112S 配位高分子ネットワークの自己組織化シミュレーション (産総研<sup>1</sup>, 東大工<sup>2</sup>) ○米谷慎<sup>1</sup>, 青柳将<sup>1</sup>, 藤田誠<sup>2</sup>  
113S 分子スケールにおける単純液体の Stokes-Einstein の関係 (新潟大院自然<sup>1</sup>, 新潟大理<sup>2</sup>) ○石井良樹<sup>1</sup>, 大鳥範和<sup>2</sup>

17:40-18:40 「ポスト京」の意見交換会

2日目 11月13日(木)

9:15-9:30 開場, 受付

—午前の部—

9:30-10:40 口頭発表 E

座長 森下徹也 (産総研)

(高分子・ガラス・クラスター)

- 201L アモルファス金属酸化物にある普遍的な中距離秩序 (産総研) ○西尾憲吾, 宮崎剛英, 中村恒夫  
202S 制限領域内でのジブロック共重合体の

相分離制御の散逸粒子動力学法を用いた定量的再現 (福井大院工) ○高橋浩司, 古石貴裕

203S Polarization switching in ferroelectric polymer nanocrystal (Hokkaido Univ. of Education) Nobuyuki Takahashi

204S 親水性分子を含むクラスレート水和物におけるゲスト-ホスト間水素結合 (慶大理工<sup>1</sup>, Colorado School of Mines<sup>2</sup>, Univ. of Ottawa<sup>3</sup>) ○平塚将起<sup>1</sup>, 大村亮<sup>1</sup>, Amadeu K. Sum<sup>2</sup>, Saman Alavi<sup>3</sup>, 泰岡頭治<sup>1</sup>

—休憩 10:40-10:55—

10:55-11:50 口頭発表 F

座長 古石貴裕 (福井大)

(材料)

- 205L 陽電子消滅法と分子動力学法を用いた PAN 系炭素繊維の分子モデリングと引張強度 (東レ<sup>1</sup>, 愛大院工<sup>2</sup>) ○伊藤明彦<sup>1</sup>, 岡本伸吾<sup>2</sup>  
206S PAN 系炭素繊維の圧縮破壊の発生メカニズムと圧縮強度に関する分子動力学解析 (愛大院工<sup>1</sup>, 東レ<sup>2</sup>) ○岡本伸吾<sup>1</sup>, 伊藤明彦<sup>2</sup>  
207S LogMFD 法によるシリセンの Al 基板上での構造転移シミュレーション (産総研<sup>1</sup>, RMIT 大<sup>2</sup>) ○森下徹也<sup>1</sup>, M. Spencer<sup>2</sup>, 川本周平<sup>1</sup>, I. Snook<sup>2</sup>

—休憩 11:50-12:00—

12:00-13:00 ポスター発表 2 (奇数番号)

201P-251P (講演タイトルはプログラムの末尾に記載)

—昼食 13:00-14:00—

—午後の部—

14:00-15:00 ポスター発表 2 (偶数番号)

201P-251P (講演タイトルはプログラムの末尾に記載)

—休憩 15:00-15:10—

15:10-16:00 招待講演 2

座長 中村壮伸 (東北大)

208IL エクサスケールコンピュータとその上での分子シミュレーション (理化学研究

所 計算科学研究機構) 牧野淳一郎先生

—休憩 16:00-16:10—

16:10-16:45 学術賞講演

座長 三上益弘 (慶應大)  
大鳥範和 (新潟大)

209AL 生体分子系, 液体系における分子動力学シミュレーション手法の開発と応用 (分子研, 総研大) 奥村久士

16:45-17:30 研究会総会

18:00-20:00 懇親会

B1 階展示コーナー (ポスター会場)

**3 日目 11 月 14 日 (金)**

9:15-9:30 開場, 受付

—午前部の部—

9:30-10:30 口頭発表 G

座長 吉井範行 (名大)  
(生体分子・自由エネルギー)

301S DNA 高次構造の凝縮転移: 粗視化モデルによる研究 (同志社大生命医) ○剣持貴弘, 渡邊俊, 吉川研一

302S クーロンレプリカ置換分子動力学シミュレーションによる Aβ(29-42) の二量体形成 (分子研<sup>1</sup>, 総研大<sup>2</sup>) ○伊藤暁<sup>1,2</sup>, 奥村久士<sup>1,2</sup>

303S マルチカノニカル分子動力学法による RNA ポリメラーゼ II-C 末端領域の構造空間探索 (近大先端研) 米澤康滋

304S (202P) アルケミカル変換法によるテオフィリン-RNA の結合自由エネルギー計算 (富士通研) ○谷田義明, 松浦東

—休憩 10:30-10:40—

10:40-11:35 口頭発表 H

座長 三浦伸一 (金沢大)  
(量子系・QM/MM)

305L 凝縮水素系における核量子性を取り入れた量子分子動力学法 (京大院理, JST さきがけ) 金賢得

306S 交換対称性理論に基づく QM/MM 分子動力学法と水溶液への適用 (原子力機構) 志賀基之

307S (248P) Size-Consistent Multi-partitioning QM/MM method (東工大<sup>1</sup>, Karlsruhe Institute of Tech.<sup>2</sup>) ○渡辺宙志<sup>1</sup>, Tomas Kuabar<sup>2</sup>, Elstner Marcus<sup>2</sup>

—休憩 11:35-11:45—

11:45-12:40 口頭発表 I

座長 鷲津仁志 (豊田中研)  
(溶液)

308L 全原子 MD による中高濃度塩水溶液及びイオン液体の電気伝導度の研究 (京大理<sup>1</sup>, 阪大基礎工<sup>2</sup>) ○Kai-min Tu<sup>1</sup>, 石塚良介<sup>2</sup>, 松林伸幸<sup>2</sup>

309S (116P) 固体酸化物形燃料電池作動中における Ni 粒子のシンタリング挙動に関する研究 (東北大院工) ○許競翔, 樋口祐次, 尾澤伸樹, 久保百司

310S (141P) 混合溶媒中における歯車状両親媒性分子の動的特性に関する理論的研究 (横浜市大院生命ナノ<sup>1</sup>, 東大院総合文化<sup>2</sup>, 産総研<sup>3</sup>) ○増子貴子<sup>1</sup>, 平岡秀一<sup>2</sup>, 長嶋雲兵<sup>3</sup>, 立川仁典<sup>1</sup>

—昼食 12:40-13:40—

—午後部の部—

13:40-14:50 口頭発表 J

座長 奥村久士 (分子研)  
(膜・ミセル)

311L 球状ミセルの構造とダイナミクスについての球面調和関数解析 (名大院工計セ<sup>1</sup>, 名大院工<sup>2</sup>, 上海交通大<sup>3</sup>) ○吉井範行<sup>1</sup>, 二村祐樹<sup>2</sup>, 王琳<sup>3</sup>, 瀬高悠太<sup>2</sup>, 藤本和士<sup>2</sup>, 岡崎進<sup>2</sup>

312S SDS ミセルにおけるメタンの結合数の分布に関する分子動力学シミュレーションによる研究 (名大院工<sup>1</sup>, 名大院工 計セ<sup>2</sup>) ○高林宏彰<sup>1</sup>, 藤本和士<sup>1</sup>, 吉井範行<sup>2</sup>, 岡崎進<sup>1</sup>

313S (250P) 膜タンパクの粗視化モデル (Temple Univ.<sup>1</sup>, P&G<sup>2</sup>, 名大院工<sup>3</sup>) ○川本周平<sup>1,3</sup>, Giacomo Fiorin<sup>1</sup>, Chris MacDermaid<sup>1</sup>, Russell Devane<sup>2</sup>, 篠田渉<sup>3</sup>, Michael L. Klein<sup>1</sup>

314S (242P) マウス正常肝臓細胞および癌化細胞膜の分子動力学シミュレーション (名大工) ○安藤嘉倫, 青木則之, 岡崎進

—休憩 14:50-15:00—

15:00-15:45 口頭発表 K

座長 樋口祐次 (東北大)

(モデル・計算手法)

- 315S 定圧分子動力学シミュレーションによる  
レナード-ジョーンズ系の3相平衡 (法政  
大生命<sup>1</sup>, 東電大理工<sup>2</sup>) ○片岡洋右<sup>1</sup>,  
山田祐理<sup>2</sup>
- 316S 決定論的レプリカ交換法とその生体分子  
(125P) のフォールディングシミュレーションへ  
の適用例 (名大院理<sup>1</sup>, 名大院工<sup>2</sup>, 名大  
情報基盤<sup>3</sup>) ○浦野諒<sup>1</sup>, 岡本祐幸<sup>1,2,3</sup>
- 317S バルク液体の自己拡散係数に対する計算  
(232P) 系形状の影響 (東北大学<sup>1</sup>, 東北大工<sup>2</sup>,  
東北大院<sup>3</sup>) 菊川豪太<sup>1</sup>, 鈴木城<sup>2</sup>, 成毛陽  
一<sup>3</sup>, 小原拓<sup>1</sup>

—休憩 15:45-15:55—

15:55-16:40 口頭発表 L

座長 森田明弘 (東北大)

(非平衡系)

- 318S 非平衡 MD 法による高温高压メタノール  
水溶液粘度に与えるメタノール分子の親  
水基の影響の検討 (東北大院工) ○堀川喬  
平, 小野巧, 大田昌樹, 佐藤善之, 猪股宏
- 319S 粗視化分子動力学法と第一原理分子動力  
学法によるポリエチレンのメカノケミカ  
ル反応 (東北大院工<sup>1</sup>, JST さきがけ<sup>2</sup>) ○  
樋口祐次<sup>1,2</sup>, 尾澤伸樹<sup>1</sup>, 久保百司<sup>1</sup>
- 320S 分子の構造の違いが分子熱輸送特性に与  
える影響 (東北大<sup>1</sup>, トヨタ自動車<sup>2</sup>)  
○松原裕樹<sup>1</sup>, 菊川豪太<sup>1</sup>, 別所毅<sup>2</sup>, 山下  
征士<sup>2</sup>, 小原拓<sup>1</sup>

16:40-16:45 閉会の辞

森田明弘 (東北大)

ポスター発表

ポスター発表 1 (1日目)

- 101P 分子動力学シミュレーションによる分  
離膜の分離性予測 (東レ<sup>1</sup>, 阪大院基礎  
工<sup>2</sup>) ○北畑雅弘<sup>1</sup>, 川上智教<sup>1</sup>, 茂本勇<sup>1</sup>,  
松林伸幸<sup>2</sup>
- 102P 液体噴流と液膜の相互作用 (京大工) 広  
橋謙介, ○松本充弘
- 103P 酢酸の水表面での酸解離平衡の計算 (東  
北大院理<sup>1</sup>, 京大 ESICB<sup>2</sup>) ○神戸宏之<sup>1</sup>,  
高橋英明<sup>1</sup>, 森田明弘<sup>1,2</sup>
- 104P 3D-RISM/MD ハイブリッドシミュレ  
ーション法によるシニョリン分子の構造

ゆらぎの解析 (金沢大院自) ○刑部進之  
助, 三浦伸一

- 105P 二次元自由エネルギー曲面を用いた液  
液界面におけるイオン輸送の解析 (東  
北大院理<sup>1</sup>, 京大 ESICB<sup>2</sup>) ○吉川信明<sup>1</sup>,  
王聆鑑<sup>1</sup>, 森田明弘<sup>1,2</sup>
- 106P つり合い条件または詳細つり合い条件  
を課した焼き戻し法のサンプリング効  
率に関する研究 (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>
- 107P レーザーアブレーションのランジュバ  
ン動力学シミュレーション (レーザー  
総研<sup>1</sup>, 阪大レーザー研<sup>2</sup>) ○竹内靖<sup>1</sup>,  
砂原淳<sup>1</sup>, 西原功修<sup>2</sup>
- 108P 光触媒材料としてのタンタル系酸窒化  
物の構造と電子状態に関する理論的研  
究 (東大院工) 山下晃一, Giacomo  
Giorgi, ○久保綾子
- 109P 異符号荷電粒子間相互作用のイオン濃  
度依存性 (早大先進理工) ○吉田一貴,  
大貫隼, 高野光則
- 110P 量子マスター方程式における定常解の  
摂動的解法 (阪大理) 弓削達郎
- 111P ナトリウムイオン電池における固体電解  
液相間(SEI)膜形成に対するフルオロエ  
チレンカーボネートの添加剤効果 (名大  
院情報科学<sup>1</sup>, 京大 ESICB<sup>2</sup>, CREST-JST<sup>3</sup>)  
○酒井裕史<sup>1</sup>, 竹中規雄<sup>1,2</sup>,  
鈴木雄一<sup>1</sup>, Uppala Purushotham<sup>1,3</sup>,  
長岡正隆<sup>1,2,3</sup>
- 112P 生体分子 MD の間違い探し (原子力研)  
○桜庭俊, 河野秀俊
- 113P Understanding propylene carbonate  
(PC) interface structure and  
vibrational spectroscopy using  
molecule dynamics simulation  
(Tohoku Univ.<sup>1</sup>, ESICB, Kyoto Univ.<sup>2</sup>)  
○Lin Wang<sup>1,2</sup>, Akihiro Morita<sup>1,2</sup>
- 114P 表面力測定装置で計測されるフォース  
カーブを溶媒和構造へ変換する理論の  
研究 (京大工<sup>1</sup>, 京大院工<sup>2</sup>) ○田中英  
祐<sup>1</sup>, 天野健一<sup>2</sup>, 西直哉<sup>2</sup>, 作花哲夫<sup>2</sup>
- 115P 野生型  $\gamma$ S-クリスタリンと変異体  
 $\gamma$ S-G18V の分子動力学シミュレ  
ーションによる構造比較 (東京薬科大生命) ○  
小澤愛, 山田寛尚, 森咲季子, 野口瑠,  
宮川毅, 森河良太, 高須昌子
- 116P 309S と同じ
- 117P 濃度およびイオン種変化によるイオン  
対形成過程の比較: 全原子分子動力学シ  
ミュレーション (慶應大) ○友部勝文,  
山本詠士, Kojic Dusan, 安井正人, 泰  
岡顕治
- 118P Catalytic Effect of Trace Water on Ion  
Transport through Liquid-Liquid

- Interface—Water Finger Formation and Hydration (Tohoku Univ.<sup>1</sup>, ESICB, Kyoto Univ.<sup>2</sup>) ○Lingjian Wang<sup>1</sup>, Nobuaki Kikkawa<sup>1</sup>, Akihiro Morita<sup>1,2</sup>
- 119P** 粗視化 MD 計算によるリポソームの熱的安定性の解析 (豊橋技大<sup>1</sup>, NAS of Ukraine<sup>2</sup>) ○玉井秀明<sup>1</sup>, 奥津尚子<sup>1</sup>, 徳山雄生<sup>1</sup>, 前田泰志<sup>1</sup>, Sergiy Shulga<sup>2</sup>, Victor I. Danilov<sup>2</sup>, 栗田典之<sup>1</sup>
- 120P** SPH 法を用いた粘着材剥離過程のシミュレーション (東北大理) ○関根忍, 川勝年洋
- 121P** QM/MM-ER 法と摂動論の結合による π 電子の揺らぎの自由エネルギー解析 (東北大院理<sup>1</sup>, 京大 ESICB<sup>2</sup>) ○鈴岡大樹<sup>1</sup>, 高橋英明<sup>1</sup>, 森田明弘<sup>1,2</sup>
- 122P** 量子分子動力学シミュレーションを用いた SF<sub>x</sub> ラジカルによる SiC エッチングメカニズムの解明 (東北大院工) ○伊藤 寿, 桑原卓哉, 樋口祐次, 尾澤伸樹, 久保百司
- 123P** 血流凝固因子 Xa とリガンドとの FMO 相互作用に対する結合サイトの水の影響調査 (富士通研) ○佐藤博之, 松浦東
- 124P** 交換ホール関数に基づく QM/MM 法における交換反発ポテンシャルの計算 (東北大院理<sup>1</sup>, 京大 ESICB<sup>2</sup>) ○海野悟<sup>1</sup>, 高橋英明<sup>1</sup>, 森田明弘<sup>1,2</sup>
- 125P** 316S と同じ
- 126P** 電解質中にポリオウイユスカプシドが作る電場の全原子シミュレーションによる解析 (名大院工<sup>1</sup>, 名大院工計セ<sup>2</sup>, 立命館大薬<sup>3</sup>, 阪大蛋白研<sup>4</sup>, 微化研<sup>5</sup>) ○小嶋秀和<sup>1</sup>, 遠藤裕太<sup>1</sup>, 藤本和士<sup>3</sup>, 安藤嘉倫<sup>1</sup>, 吉井範行<sup>2</sup>, 山田篤志<sup>1</sup>, 中川敦史<sup>4</sup>, 野本明男<sup>5</sup>, 篠田渉<sup>1</sup>, 岡崎進<sup>1</sup>
- 127P** 脂質二重膜上でのヌクレオチド二量体の構造とダイナミクスに関する研究 (慶應大理工<sup>1</sup>, 理研<sup>2</sup>) 高岩大輔<sup>1</sup>, 泰岡顕治<sup>1</sup>, 戒崎俊一<sup>2</sup>
- 128P** 自由エネルギー計算で探る DNA 配列探索中の蛋白質の分子動態 (原子力機構) 米谷佳晃
- 129P** ラミニン由来細胞接着ペプチドと α2β1 インテグリン I ドメインの結合シミュレーション (東薬大生命<sup>1</sup>, 東薬大薬<sup>2</sup>) ○山田寛尚<sup>1</sup>, 宮川毅<sup>1</sup>, 森河良太<sup>1</sup>, 片桐文彦<sup>2</sup>, 保住建太郎<sup>2</sup>, 吉川大和<sup>2</sup>, 野水基義<sup>2</sup>, 高須昌子<sup>1</sup>
- 130P** タンパク質レアイベント抽出のための効率的構造サンプリング手法 (筑波大計セ<sup>1</sup>, 理研 AICS<sup>2</sup>, 阪大蛋白研<sup>3</sup>, JST-CREST<sup>4</sup>) ○原田隆平<sup>1,2,4</sup>, 鷹野優<sup>3,4</sup>, 重田育照<sup>1,4</sup>
- 131P** 多成分系クラスターの最適構造探索 (北大院理) 竹内浩
- 132P** Generalized Born モデルの検討: 有効 Born 半径を決めるパラメータと分子会合への影響 (早大先進理工) ○水原志暢, 梅澤公二, 大貫隼, パーキン暖, 高野光則
- 133P** スフィンゴミエリン/コレステロール/DOPC 3 成分膜の Lo,Ld 相の分子動力学計算 (名大院工<sup>1</sup>, 名大院工計セ<sup>2</sup>) ○柴山総一郎<sup>1</sup>, 篠田渉<sup>1</sup>, 安藤嘉倫<sup>2</sup>, 岡崎進<sup>1</sup>
- 134P** 分子動力学シミュレーションを用いたメタンハイドレートの核生成の解析 (慶大理工<sup>1</sup>, Colorado School of Mines<sup>2</sup>) ○湯原大輔<sup>1</sup>, Donguk Suh<sup>1</sup>, Brian C. Barnes<sup>2</sup>, David T. Wu<sup>2</sup>, Amadeu K. Sum<sup>2</sup>, 泰岡顕治<sup>1</sup>
- 135P** Pleckstrin-homology (PH) ドメインと細胞膜との相互作用 (慶大院理工<sup>1</sup>, オックスフォード大<sup>2</sup>, 慶大理工<sup>3</sup>) ○山本詠士<sup>1</sup>, Antreas C. Kalli<sup>2</sup>, 秋元琢磨<sup>1</sup>, Mark S. P. Sansom<sup>2</sup>, 泰岡顕治<sup>3</sup>
- 136P** TiO<sub>2</sub> (110) における酸素欠陥周辺にある Ti<sup>3+</sup> 状態の STM による直接観察: 第一原理的アプローチ (慶大理工<sup>1</sup>, Uppsala Univ.<sup>2</sup>) ○澁谷泰蔵<sup>1</sup>, 泰岡顕治<sup>1</sup>, Susanne Mirbt<sup>2</sup>, Biplab Sanyal<sup>2</sup>
- 137P** 水溶液中の Hras-GTP 複合体の溶媒水との水素結合の解析 (東京薬科大生命<sup>1</sup>, 金沢大教育開発<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>
- 138P** 分子シミュレーションを用いたドラッグデザインに関する研究 (理研 QBiC) 平野秀典, 沖本憲明, 藤田茂雄, 泰地真弘人
- 139P** 熔融アルカリハロゲン化物の分極イオンモデルの構築 (新潟大院自然<sup>1</sup>, 新潟大理<sup>2</sup>, パリ第 6 大<sup>3</sup>, オックスフォード大<sup>4</sup>) ○笠井智<sup>1</sup>, 石井良樹<sup>1</sup>, 大鳥範和<sup>2</sup>, Mathieu Salanne<sup>3</sup>, Paul A. Madden<sup>4</sup>
- 140P** スフィンゴ脂質膜の構造とダイナミクス-コレステロール含有による変化- (名大工<sup>1</sup>, 名大院工<sup>2</sup>) ○永山日菜<sup>1</sup>, 安藤嘉倫<sup>2</sup>, 篠田渉<sup>2</sup>, 岡崎進<sup>2</sup>
- 141P** 310S と同じ
- 142P** 109S と同じ
- 143P** Fe-ゼオライト系触媒を用いた NO 直接分解反応の理論的研究 (東大工<sup>1</sup>, 京大 ESICB<sup>2</sup>) ○水上範貴<sup>1</sup>, 牛山浩<sup>1,2</sup>, 山下晃一<sup>1,2</sup>
- 144P** Prediction of Protein-ligand Binding Affinities Using Molecular

Simulations (II) (理研<sup>1</sup>,産総研<sup>2</sup>) ○沖本憲明<sup>1</sup>, 末永敦<sup>2</sup>, 平野秀典<sup>1</sup>, 泰地真弘人<sup>1</sup>

- 145P** a-SiC:H の化学気相成長プロセスに関する Density - Functional Tight - Binding 分子動力学シミュレーション (東北大院工) ○桑原卓哉, 伊藤寿, 樋口祐次, 尾澤伸樹, 久保百司
- 146P** ヘマグルチニン/糖脂質分子を含む脂質膜系の祖視化モデルによるモデリング (慶大理工) ○井上堅斗, 高岩大輔, 泰岡顕治, 三上益弘
- 147P** ナノ細孔内に存在する水の飽和蒸気圧の細孔径およびぬれ性依存性に関する分子動力学シミュレーション (東大工<sup>1</sup>, 農工大工<sup>2</sup>, 東北大流体研<sup>3</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>3</sup>, 高木周<sup>1</sup>, 松本洋一郎<sup>1</sup>
- 148P** 液晶相に接した界面活性剤単層膜の物性 (東北大理) ○奥島駿, 川勝年洋
- 149P** 気液界面の熱・物質輸送を支配する Boltzmann 方程式に対する境界条件の分子動力学研究 (富山大理工) 石山達也
- 150P** 水溶液中の粒子間に働く力の粒子サイズ依存性 (金沢大理工) ○川ロー朋, 齋藤大明, 長尾秀実
- 151P** 非一様な帯電系のための高精度な分子動力学計算手法の開発 (慶大理工) 高橋和義
- 152P** 種の形状による凝縮の特性の分子動力学法を用いた解析 (慶大理工<sup>1</sup>, Univ. of Nebraska-Lincoln, Dept. of Chem.<sup>2</sup>) ○徐東郁<sup>1</sup>, 泰岡顕治<sup>1</sup>, Xiao Cheng Zeng<sup>2</sup>

## ポスター発表 2 (2 日目)

- 201P** ミスマッチ塩基対挿入下における [Ru(bpy)<sub>2</sub>dppz]<sup>2+</sup> の構造と水溶媒分布の解析 (お茶大院人間文化創成科学) ○大塚美穂, 鷹野景子
- 202P** 304S と同じ
- 203P** 温度範囲や圧力範囲を指定できるマルチカノニカル法の変種の開発 (慶大理工) ○土居英男, 泰岡顕治
- 204P** 振動差スペクトルの理論と効率的な計算方法 (東北大院理<sup>1</sup>, 京大触媒電池<sup>2</sup>) ○城塚達也<sup>1</sup>, 坂口俊<sup>1</sup>, 森田明弘<sup>1,2</sup>
- 205P** 固体中のエネルギー輸送のミクロスケールモデリング (京大) ○妹尾悟史, 松本充弘
- 206P** 化学反応とカップルしたゲルの動力学-連続体力学によるモデリング- (東北大院理) ○高畑正一, 川勝年洋
- 207P** 糖アルコールにおける融解潜熱の分子

種依存性 (産総研<sup>1</sup>, 未利用熱エネルギー革新的活用技術研究組合<sup>2</sup>) ○稲垣泰一<sup>1,2</sup>, 石田豊和<sup>1,2</sup>

- 208P** 円管内の球状粒子の沈降 (山形大工) 牧野真人
- 209P** 古典分子動力学計算による溶媒和イオン液体の解析 (名大院工<sup>1</sup>, 産総研<sup>2</sup>, 横国大院工<sup>3</sup>) ○畑中佑太<sup>1</sup>, 篠田渉<sup>1</sup>, 岡崎進<sup>1</sup>, 都築誠二<sup>2</sup>, 上野和英<sup>3</sup>, 渡邊正義<sup>3</sup>
- 210P** 203S と同じ
- 211P** アミロイド線維を形成する物質の濃度依存性に関する分子動力学シミュレーション (名大院理<sup>1</sup>, 分子研<sup>2</sup>, 名大院理構セ<sup>3</sup>, 名大院工計セ<sup>4</sup>, 名大情セ<sup>5</sup>) ○西川直宏<sup>1,2</sup>, 榮慶丈<sup>1</sup>, 岡本祐幸<sup>1,3,4,5</sup>
- 212P** 酸素分子の非部位特異的アロステリック効果によるヒトヘモグロビン四次構造平衡変化 (名大院情<sup>1</sup>, CREST-JST<sup>2</sup>) ○高柳昌芳<sup>1,2</sup>, 栗崎以久男<sup>1</sup>, 長岡正隆<sup>1,2</sup>
- 213P** 超並列 QM/MM-ER 法を用いた ATP 加水分解反応の自由エネルギー解析 (東北大院理<sup>1</sup>, 京大 ESICB<sup>2</sup>) ○三木雄詩<sup>1</sup>, 高橋英明<sup>1</sup>, 森田明弘<sup>1,2</sup>
- 214P** 強結合法パラメータ自動算出プログラムの開発とその算出事例 (株式会社ヒューリンクス<sup>1</sup>, 東大大総セ<sup>2</sup>, 東京工大コンピュータサイエンス<sup>3</sup>) ○鈴木隆史<sup>1</sup>, 藤原毅夫<sup>2</sup>, 山元進<sup>3</sup>, 西野信也<sup>1,2</sup>, 大谷泰昭<sup>1</sup>
- 215P** 芳香族ポリアミド膜合成のアトミスティックシミュレーション: 界面重合反応過程における単量体混合比率の膜構造への影響 (名大院情<sup>1</sup>, 京大 ESICB<sup>2</sup>, CREST-JST<sup>3</sup>) ○鈴木雄一<sup>1</sup>, 小谷野哲之<sup>1</sup>, 長岡正隆<sup>1,2,3</sup>
- 216P** 分子動力学法とマルチスケール接続を利用した高分子の粘弾性予測法の開発 (慶大理工<sup>1</sup>, 京大化研<sup>2</sup>) ○西村龍斗<sup>1</sup>, 高橋和義<sup>1</sup>, 泰岡顕治<sup>1</sup>, 増淵雄一<sup>2</sup>
- 217P** 水表面の構造と変角振動スペクトルの分子動力学研究 (東北大院理<sup>1</sup>, 富山大院理工<sup>2</sup>, 京大 ESICB<sup>3</sup>) ○田中翔悟<sup>1</sup>, 石山達也<sup>2</sup>, 森田明弘<sup>1,3</sup>
- 218P** ポリオウィルス-CD155 レセプター間の相互作用の分子動力学法による研究 (名大院工<sup>1</sup>, 名大院工計セ<sup>2</sup>, 阪大蛋白研<sup>3</sup>, 微化研<sup>4</sup>) ○遠藤裕太<sup>1</sup>, 水谷圭佑<sup>1</sup>, 小嶋秀和<sup>1</sup>, 藤本和士<sup>1</sup>, 山田篤志<sup>1</sup>, 安藤嘉倫<sup>1</sup>, 吉井龍行<sup>2</sup>, 篠田渉<sup>1</sup>, 中川敦史<sup>3</sup>, 野本明男<sup>4</sup>, 岡崎進<sup>1</sup>
- 219P** ホウ酸ガラスの相互作用モデルの構築: 熔融相から結晶相まで (新潟大院自然<sup>1</sup>, 新潟大理<sup>2</sup>, 日本板硝子<sup>3</sup>, パリ第 6 大<sup>4</sup>, オックスフォード大<sup>5</sup>) ○石井良樹<sup>1</sup>, 笠

- 原康平<sup>1</sup>,大鳥範和<sup>2</sup>,白木康一<sup>3</sup>, Mathieu Salanne<sup>4</sup>, Paul A. Madden<sup>5</sup>
- 220P** 正三角形型モノマーによるゲル形成過程のシミュレーション (東京薬科大生命<sup>1</sup>, 東大工<sup>2</sup>) ○杉山拓<sup>1</sup>, 和出沙弥香<sup>1</sup>, 宮川毅<sup>1</sup>, 森河良太<sup>1</sup>, 高須昌子<sup>1</sup>, 酒井崇匡<sup>2</sup>, 鄭雄一<sup>2</sup>
- 221P** 生体分子におけるレプリカ置換分子動力学法の詳細釣り合い条件の有無に対する検証 (分子研<sup>1</sup>, 総研大<sup>2</sup>) ○西澤宏晃<sup>1</sup>, 奥村久士<sup>1,2</sup>
- 222P** ベシクルの形状変化メカニズムの解析 (山口大院理工<sup>1</sup>, 東北大院理<sup>2</sup>) ○浦上直人<sup>1</sup>, 大藤義之<sup>1</sup>, 山本隆<sup>1</sup>, 今井正幸<sup>2</sup>
- 223P** 和周波分光解析プログラム Calnos の開発と水/メタノール混合溶液の界面解析への応用 (東北大院理<sup>1</sup>, 京大 ESICB<sup>2</sup>, 富山大院理工<sup>3</sup>) ○石原崇志<sup>1</sup>, 石山達也<sup>3</sup>, 森田明弘<sup>1,2</sup>
- 224P** 応力印加による高分子結晶の構造転移とキャビティの変化 (福井大院工) 玉井良則
- 225P** 冷凍空調機向け潤滑油の動粘度解析 (日立製作所) 松本茂紀
- 226P** 液体中の横波と動的構造因子 (広島大) 宗尻修治
- 227P** イオン液体によるガス吸収のエネルギー解析 (阪大基礎工<sup>1</sup>, 京大 ESICB<sup>2</sup>, 京大理<sup>3</sup>, 新潟大理<sup>4</sup>) ○石塚良介<sup>1,2</sup>, 松林伸幸<sup>1,2</sup>, Tu Kai-min<sup>3</sup>, 梅林泰宏<sup>4</sup>
- 228P** 平面で閉じ込められた系における表面での拡散係数を厳密に見積もる方法 (慶大理工) 秋元琢磨
- 229P** 第一原理分子動力学計算を利用した分子振動励起による水素生成反応促進メカニズムの解析 (東北大院工) ○横山直樹, 樋口祐次, 尾澤伸樹, 湯上浩雄, 久保百司
- 230P** CO<sub>2</sub>分離回収材の反応 (8) 分子シミュレーション解析 (RITE<sup>1</sup>, TST<sup>2</sup>) ○山田秀尚<sup>1</sup>, 藤原崇幸<sup>2</sup>, 後藤和也<sup>1</sup>, 余語克則<sup>1</sup>
- 231P** 緩和モード解析によるシニョリンの動的解析性質 (慶應大理工) ○光武亜代理, 高野宏
- 232P** 317S と同じ
- 233P** 現実系変数のみを用いた能勢-ポアンカレ熱浴のシンプレクティック数値積分法 (核融合研) 伊藤篤史
- 234P** フレキシブルレセプターモデルを用いた分子ドッキング (金沢大理工) ○齋藤大明, 川口一朋, 長尾秀実
- 235P** 水溶液中トリチウム水分子の選択励起分離法 (慶大院) 吉本啓太
- 236P** 分子動力学による溶液の分子内・分子間振動の2次元ラマン分光, THz-Raman 分光スペクトルの直接計算 (京大院理<sup>1</sup>) ○趙珠延<sup>1</sup>, 谷村吉隆<sup>1</sup>
- 237P** イオン液体に水を添加した系の構造と動的性質 (福井大工) 古石貴裕
- 238P** 多価カチオンの媒介による実効引力相互作用とタンパク質表面の引力パッチの pH 依存性 (九州大理化学) 澤山拓斗, ○秋山良
- 239P** 高次近似のプロパゲータを用いた変分経路積分分子動力学法による水分子の研究 (金沢大院自) ○上林勇貴, 三浦伸一
- 240P** 反応分子動力学 (ReaxFF) によるガラス表面の濡れ性評価 (旭硝子) ○田中厚, 島田千恵子, 深澤寧司
- 241P** 二つの励起方法による二原子分子の非平衡分子動力学シミュレーションを用いた振動エネルギー緩和と蒸発の関係の解明 (慶大理工<sup>1</sup>, 日本ガイシ<sup>2</sup>) ○野本悠介<sup>1</sup>, 平塚将起<sup>1</sup>, 高岩大輔<sup>1</sup>, 藤田雄樹<sup>2</sup>, 近藤良夫<sup>2</sup>, 泰岡顕治<sup>1</sup>
- 242P** 314S と同じ
- 243P** 粗視化分子動力学法による高分子のガラス転移温度の解析 (トヨタ自動車) 諸星圭
- 244P** マニフォールドを用いたデータ解析法 (東北大工<sup>1</sup>, 慶応大理工<sup>2</sup>, 横浜市大生命医科学<sup>3</sup>) ○吉留崇<sup>1</sup>, 笠口友隆<sup>2</sup>, 中迫雅由<sup>2</sup>, 池口満徳<sup>3</sup>
- 245P** ランダム行列理論と主成分分析による蛋白質分子動力学の時系列解析 (日大理工) 山中雅則
- 246P** MgO 担持 Ru 触媒への気体分子吸着に関する第一原理分子動力学計算 (熊大院<sup>1</sup>, 分子研<sup>2</sup>, JST-CREST<sup>3</sup>) 杉本学<sup>1,2,3</sup>
- 247P** Isotropic Periodic Sum 法を用いた液晶相転移の分子動力学シミュレーション (慶大理工<sup>1</sup>, 電通大情報<sup>2</sup>) ○野澤拓磨<sup>1</sup>, 高橋和義<sup>1</sup>, 成見哲<sup>2</sup>, 泰岡顕治<sup>1</sup>
- 248P** 307S と同じ
- 249P** ペンタセンおよびパーフルオロペンタセンと, グラフェンとの相互作用 (岩手大工) ○鈴木佳之, 吉本則之, 長谷川正之, 西館数芽
- 250P** 313S と同じ
- 251P** 散逸粒子動力学法を用いた Janus 粒子水溶液のシミュレーション (近大理工<sup>1</sup>, 慶大理工<sup>2</sup>, Univ. 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>

