

## 第 16 回分子シミュレーション夏の学校 ポスター発表

日時：2012 年 8 月 6 日 場所：慶應義塾大学蓼科山荘 105 教室

P1: 秋元 琢磨 (慶應義塾大学)

生体膜における拡散の異常性

P2: 安藤 嘉倫 (名古屋大学)

「京」コンピュータ上での汎用 MD ソフト MODYLAS の開発

P3: 石井 良樹 (新潟大学)

Thermal conductivity of simple liquids

P4: 植木 史子 (慶應義塾大学)

医療用マイクロバブルの膜分子構造

P5: 岡 右里恵 (早稲田大学)

超球座標に基づく新たなモード解析のアプローチ：原子集合体への応用

P6: 澁谷 泰蔵 (慶應義塾大学)

酸素欠陥由来の TiO<sub>2</sub>(110)表面の電子状態

P7: 関 洋 (慶應義塾大学)

第一原理分子軌道計算を用いた半導体素子中の絶縁膜の耐性評価

P8: 張 リンシン (慶應義塾大学)

密度汎関数理論による SiO<sub>2</sub> と TiO<sub>2</sub> の表面の光学特性計算

P9: 野村 昂太郎 (慶應義塾大学)

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

P10: 平塚 将起 (慶應義塾大学)

第一原理分子動力学シミュレーションを用いたクラスレート水和物内部のゲスト分子の振動計算

P11: 増永 充宏 (慶應義塾大学)

拡張アンサンブル法を用いた固液相転移温度の推定

P12: 松原 裕樹 (東北大学)

MD シミュレーションによる閉じ込め液体の研究

P13: 美馬 俊喜 (東京大学)

ナノ細孔内の水の気液相転移に関する分子動力学シミュレーション

P14: 大和 伸好 (慶應義塾大学)

Connection of atomistic and coarse-grained molecular simulation of polymer melts based on the rouse parameters

P15: 山本 詠士 (慶應義塾大学)

Diffusive Nature of Xenon Anesthetic Changes Properties of a Lipid Bilayer: Molecular Dynamics Simulations