

## アジア連携分子研研究会 開催要領・プログラム

### 溶液・ソフトマターの新局面：実験及び理論研究手法の開拓と新規物性探索への展開

Recent development of experimental and theoretical methodology on liquids and soft matters: Basic properties and applications to novel devices

開催日 平成 24 年 6 月 1 日(金)~6 月 2 日(土)  
会場 分子科学研究所 研究棟 201 号室 (分子研明大寺地区・愛知県岡崎市)

提案代表者 西山 桂 (島根大教育)  
提案者 吉田紀生 (九大院理)  
所内対応教員 奥村久士 (分子研)

### 開催趣旨

溶液論・液体論について、20 世紀後半には X 線や中性子散乱による構造解析、時間分解レーザー分光といった実験手法が進展した。さらに関連する量子力学・統計力学の顕著な発展が見られ、溶液の構造やダイナミクスに関する詳細な知見が蓄積されつつある。一方、ここ数年の傾向に着目すると、従来の単純な溶液に対して適用された研究手法が、ゲルや高分子といったソフトマター、さらには生体内反応へと展開されている様子が特に目立ってきている。

そこで本研究会では、溶液・ソフトマターに関して、まず「①何を調べるか (研究対象)」と「②何で調べるか (研究手法)」を整理することで、研究対象と研究手法とのマッチングを行う。そのうえで、「③何に使えるか (研究展開)」を俯瞰することで、溶液・ソフトマターの新規反応場としての活用や、新しいデバイス構築を指向した展開をも視野に入れる。

また本研究会では、この分野で顕著な成果を有している、近隣アジアの研究者との連携をも探る。これを機会に、溶液・ソフトマター研究に求められている学術的・社会的な要請を、グローバルな視座から考える嚆矢としたい。

# アジア連携分子研研究会 口頭発表プログラム

2012年6月1日(金)			
講演 番号	開始 時刻	講演者氏名	題目
	13:00	西山 桂	趣旨説明
<b>セッション(1) 計算科学のいま：方法論の開発から応用へ</b>			
座長 墨 智成			
<b>S1</b>	13:10	宮田竜彦 (愛媛大院理工)	MD/3D-RISM 法を用いた自由エネルギー計算
<b>S2</b>	13:35	横川大輔 (名大院理)	量子化学的手法に基づく分子間ポテンシャルの構築
<b>S3</b>	14:00	奥村久士 (分子研)	マルチパーリック・マルチサーマル分子動力学シミュレーションによるタンパク質の温度・圧力変性
	14:25	<b>ポスター発表(1)</b> うち冒頭5分は口頭プレビュー	
<b>セッション(2) 溶液の構造・反応場としての利用</b>			
座長 高椋利幸			
<b>S4</b>	14:50	富田恒之 (東海大理)	機能性セラミックス合成のための溶液プロセス
<b>S5</b>	15:15	佐藤高彰 (信州大繊維)	小角散乱法を用いた蛋白質溶液への多面的アプローチ —蛋白質間相互作用から立体構造予測まで—
座長 加藤 稔			
<b>S6</b>	15:40	吉田亨次 (福岡大理)	細孔水の構造とダイナミクス
<b>S7</b>	16:05	高椋利幸 (佐賀大院工)	分子性液体の特性に依存したイオン液体の会合体形成
	16:30	<b>ポスター発表(2)</b>	
<b>セッション(3) レーザーを使って観る・作る</b>			
座長 佐藤高彰			
<b>S8</b>	17:00	塚田真也 (島根大教育)	不規則性を有する強誘電体の相転移 ～光散乱による観測～
<b>S9</b>	17:25	城田秀明 (千葉大院融合科学)	フェムト秒ラマン誘起カー効果分光法でみるテラヘルツ領域の分子運動
座長 西山 桂			
<b>SL10</b>	17:50	三浦篤志 (台湾・交通大)	光圧が誘起する分子集合・結晶化の時空間分解分光とイメージング
	18:30	記念撮影	

2012年6月2日(土)

セッション(4) 溶液・ソフトマターの基礎物性と機能発現

座長 勝本之晶

- S11** 9:30 西山 桂 溶液中における小さな有機分子の自己組織化を利用した発光デバイス合成プロセス  
(島根大教育)
- S12** 9:55 山口 毅 ポリマー系電解液のワルデン則：緩和スペクトルからのアプローチ  
(名大院工)
- S13** 10:20 原田 聖 キラル希土類錯体の円偏光発光特性評価と新規偏光発光材料への応用  
(島根大教育)
- 休憩 10:45-11:05

セッション(5) 高分子から生体系まで

座長 吉田亨次

- S14** 11:05 勝本之晶 アクリルアミド系高分子の微細構造と巨視的溶液物性の相関  
(広島大院理)
- S15** 11:30 加藤 稔 タンパク質の構造物性－モデルペプチドの高圧研究からのアプローチ  
(立命館大薬)
- 昼食 11:55-13:30

セッション(6) 生体系のこれから

座長 吉田紀生

- S16** 13:30 原野雄一 生体分子の水和熱力学量計算に向けた形態計測法的アプローチ  
(阪大蛋白研)
- S17** 13:55 墨 智成 バクテリアIV型線毛モーターの粘着脱離動力学  
(豊橋技科大院工)

座長 原野雄一

- S18** 14:20 伊藤 暁 クーロンレプリカ交換法の A $\beta$  (29-42)への応用  
(分子研)
- S19** 14:45 吉田紀生 3D-RISM による KcsA チャンネル中のカチオン結合モード解析  
(九大院理)
- 15:10 吉田紀生・ 会議総括 -溶液・ソフトマター研究の将来展望-  
西山 桂  
15:30 終了

注 **S** と **SL** は、それぞれ招待講演、特別招待講演を示す。  
プログラムには招待講演者氏名のみを掲載した。

## ポスター発表プログラム

---

<b>P1</b>	宮下拓也 <sup>a</sup> ・蓮岡和幸 <sup>a</sup> ・鈴木 大介 <sup>a</sup> ・佐藤高彰 <sup>b</sup> (信州大院工 <sup>a</sup> ・信州大繊維 <sup>b</sup> )	水中における Poly-NIPAm ゲル微粒子と Poly-NIPAm のコイル-グロビュール転移に伴う臨 界挙動
<b>P2</b>	古俣結城 <sup>a</sup> ・佐藤高彰 <sup>b</sup> (信州大院工 <sup>a</sup> ・信州大繊維 <sup>b</sup> )	温度変化に誘発される水溶液中の ABA 型トリブロ ックコポリマーの自己組織化と水和の役割
<b>P3</b>	服部実 <sup>a</sup> ・小松晃之 <sup>a</sup> ・酒井宏 水 <sup>a</sup> ・佐藤高彰 <sup>b</sup> (信州大院工 <sup>a</sup> ・信州大繊維 <sup>b</sup> )	高分解能小角 X 線散乱法による水溶性高分子の溶 液中における階層的ミクロ構造
<b>P4</b>	渡邊圭一 <sup>a</sup> ・佐藤高彰 <sup>b</sup> ・勝本 之晶 <sup>c</sup> ・嘉治寿彦 <sup>d</sup> ・平本昌宏 <sup>d</sup> ・西山 桂 <sup>e</sup> ( <sup>a</sup> 島根大院教育・ <sup>b</sup> 信州大繊維・ <sup>c</sup> 広 島大院理・ <sup>d</sup> 分子研・ <sup>e</sup> 島根大教育)	フェノール類と AOT が自己組織化によりスタック した有機ナノゲルの階層構造
<b>P5</b>	渡部康弘 <sup>a</sup> ・渡邊圭一 <sup>a</sup> ・原田 聖 <sup>b</sup> ・西山 桂 <sup>b</sup> ( <sup>a</sup> 島根大院教育・ <sup>b</sup> 島根大教育)	希土類-有機ハイブリッド発光体のソフトマテリア ル中における発光カラーチューニング

---