

第34回溶液化学シンポジウム

口頭発表プログラム

(講演:15分 質疑応答:4分 演者交代:1分)

第1日 11月15日(火)

口頭発表1 (10:00~11:00) 座長:松林伸幸

- O01 分子動力学法による溶質の水相からSDSミセル核中への移行に伴う自由エネルギープロフィール
○藤本 和士・吉井 範行・岡崎 進(名大院工)
- O02 非イオン性界面活性剤C12E8ミセルの構造と水和:MD/3D-RISM法からのアプローチ
○宮田 竜彦*・生田 靖弘**・平田 文男*** (愛媛大理*・豊田中研**・分子研***)
- O03 アルキルトリメチルアンモニウムミセル上でのヘキサデシルピリジニウムイオンによるピレンスルホン酸の蛍光消光反応
○竹崎 誠・山形 総一・富永敏弘(岡山理大 工)

口頭発表2 (11:10~12:30) 座長:榮 慶丈

- O04 シニョリンの温度変性ダイナミクス:MD-3DRISMによる解析
○丸山豊*・平田文男** (分子研*・総研大**)
- O05 β -ラクトグロブリンの会合状態に対するアルコールの添加効果
○吉田亨次・山口敏男(福岡大理)
- O06 cytochrome cに対する尿素効果の自由エネルギー解析
○狩野 康人・松林 伸幸(京大化研)
- O07 制限酵素EcoRVとDNAの複合体中での金属イオン分布の3D-RISMによる計算
○安庭 潤治*・丸山 豊**・吉田紀生**・入佐正幸*・平田文男**・皿井明倫* (九工大情報工*・分子研**)

特別講演1 (13:30~14:20) 座長:山口 毅

- PL1 溶液化学と非平衡物理
吉森 明 (九大)

口頭発表3 (14:30~15:50) 座長:伊吹和泰

- O08 疎水効果と4°Cの水の関係
○甲賀 研一郎(岡山大理)
- O09 低磁場パルスNMRで見るナノ間隙水のダイナミクスとその空間サイズ効果
○塚原 剛彦(東工大・原子炉)
- O10 有機—無機ハイブリッドメソ多孔性物質中に閉じ込められた水のダイナミクスと構造
○麻生 真以*・伊藤 華苗*・杉野 公昭*・吉田 亨次*・山田 武**,* **・山室 修**,* **・山口 敏男*(福岡大理*・東大物性研**・CREST***)
- O11 水の誘電摩擦
○佐藤高彰*・深澤敏子**・山口毅***・Richard Buchner****(信州大*・お茶の水大**・名古屋大***・レゲンスブルグ大)

特別講演2 (16:00~16:50) 座長:富永圭介

- PL2 新しい非線形分光法で観る液体界面の分子たち
田原 太平 (理研)

第2日 11月16日(水)

□頭発表4 (10:20~11:20) 座長：吉田亨次

- O12 **カルボン酸含有薬物のヒト血清アルブミン結合**
亀井美緒, 勝野次乃, 竹内玲奈, 黄壁達人, 小川数馬, ○小谷 明 (金沢大院薬)
- O13 **青色光センサータンパク質TePixDの反応と分子拡散ダイナミクス**
黒井邦巧*, 田中啓介*, 岡島公司**, 池内昌彦***, 徳富哲**, ○寺嶋正秀* (京都大学*・大阪府大**・東京大学***)
- O14 **圧力誘起ヘリックス形成の機構:SペプチドおよびCペプチド類似体を用いた検証**
○加藤 稔*,**・奥居伸也*・今村比呂志** (立命館大院理工*・立命館大薬**)

□頭発表5 (11:30~12:10) 座長：宮田竜彦

- O15 **分子動力学計算による実在の原形質膜における脂質分子wobble運動の解析**
○安藤嘉倫, 岡崎進 (名古屋大学)
- O16 **NMR-NOE測定とMDによる脂質膜中の小分子の相互作用とダイナミクス解析**
○新谷恵・松尾勇志・櫻庭俊・松林伸幸 (京大化研)

□頭発表6 (13:10~14:30) 座長：甲賀研一郎

- O17 **疎水性水和と水分子の拡散ダイナミクス**
○中田 克・丸山 健二*・山室 修・古府 麻衣子・菊地 龍弥** (東大物性研・新潟大理*・原子力機構J-PARCセ**)
- O18 **ATR-IR二重差分法によるアルカリ金属イオンの水和数解析**
○亀田恭男・天羽優子・臼杵毅 (山形大理)
- O19 **水素結合系の低振動数モードの振動分極率と電子の挙動**
○鳥居 肇 (静岡大教育)
- O20 **プロピオンアルデヒド会合体中に形成される水素結合 CH...O のテラヘルツ時間領域分光法による検出**
水野 和子*・菊地 巧也*・村上 公祐介*・永岡 一*・山本 晃司**・福井 一俊*・谷正彦** (福井大院工*・福井大遠赤外領域セ**)

受賞講演1 (14:40~15:30) 座長：亀田恭男

- AW1 **その場測定法による環境溶媒の機能解明とその応用**
金久保 光央 (産総研)

□頭発表7 (15:40~16:40) 座長：梅林泰宏

- O21 **完全液体と完全固体の熱力学**
○片岡洋右・山田祐理 (法政大学生命科学)
- O22 **熱測定による低濃度LiCl水溶液ガラスの相分離の観察**
○鈴木芳治, 三島修 (物材機構)
- O23 **HFIP-水混合溶液のアミド分子に対する溶媒和と相分離**
○高椋利幸*・和田 浩*・川床智恵美*・下村拓也*・神崎 亮**・竹内宗孝*** (佐賀大院工学系*・鹿児島大院理**・富士通***)

受賞講演2 (16:50~17:40) 座長：入佐正幸

- AW2 **液体の積分方程式を用いた溶液内化学過程に関する研究**
吉田 紀生 (分子研)

第3日 11月17日(木)

□頭発表8 (9:30~10:30) 座長：木村佳文

- O24 **イオン液体を構成するカチオン、アニオンと二酸化炭素の相互作用: ab initio 分子軌道法による解析**
○都築誠二・篠田渉・藤井健太¹・竹内宗孝²・牧野貴至³・金久保光央³・亀田恭男⁴・松林伸幸⁵・梅林泰宏⁶ (産総研ナノシステム・東大物性研¹・富士通²・産総研コンパクト化学システム³・山形大理⁴・京大化研⁵・九州大院理⁶)
- O25 **酢酸イオン系イオン液体のCO₂吸収によるCO₂-酢酸イオン新化学種生成**
○梅林泰宏*・亀田恭男**・浜野洋志*・吉井未生*・牧野貴至***・金久保光央*** (九大院理*・山形大理**・産総研***)
- O26 **イオン液体を溶媒とするpoly(benzyl methacrylate)溶液の相転移現象とそのマイクロ溶媒和**
○藤井健太*、上木岳士**、渡邊正義**、柴山充弘* (東大物性研*、横浜国大**)

□頭発表9 (10:40~11:40) 座長：長岡正隆

- O27 **イオン液体中におけるフラボノール誘導体のプロトン移動反応: 自由エネルギー面に基づく理論的研究**
早木 清吾・城戸 健太郎・佐藤 啓文 (京大院工)
- O28 **溶液中における10-Hydroxybenzo[h]quinolineの励起状態分子内プロトン移動と振動コヒーレンスに関する理論的研究**
○東 雅大**、芥藤 真司*** (分子研*・学振PD**・総研大***)
- O29 **量子古典混合系近似に基づいた分子動力学シミュレーションによる無極性溶媒中とプロトン性極性溶媒中におけるマロンアルデヒドの分子内プロトン移動反応の解析**
○小嶋秀和・山田篤志・岡崎 進 (名大院工)

□頭発表10 (12:40~13:40) 座長：佐藤啓文

- O30 **溶液中での単一気泡の安定性と準周期運動**
○鈴木 炎・I-Yin Sandy Lee・紫藤亮二 (富山大理)
- O31 **水溶液中におけるPoly(2-isopropyl-2-oxazoline)の感熱応答および結晶化挙動**
○勝本之晶*・土井豆亜希*・Rodolphe Obeid**・Francoise Winnik** (広島大院理*・モントリオール大**)
- O32 **アルコール-水混合溶液中の分子間相互作用と共沸の関係**
○脇坂 昭弘*・浦永 誠**・関本 泰介**・高橋 衛**・松浦 一雄*** (産総研*・日本アルコール産業**・ナノミストテクノロジーズ***)

□頭発表11 (13:50~15:10) 座長：高椋利幸

- O33 **環状フッ素置換炭化水素と含酸素有機液体との発熱膨張混合**
○小川英生・南朴木孝至・田中理歩・杉浦拓也 (東京電機大学理工学部)
- O34 **クマリン153の電子状態とその溶媒依存性: RISM-SCF理論による計算と定常吸収・蛍光スペクトルとの対応**
○西山 桂*・渡部康弘*・吉田紀生**・平田文男** (島根大教育*・分子研**・総研)
- O35 **交換反発エネルギーのための等方的サイト-サイトポテンシャルの量子化学的手法に基づく構築**
○横川 大輔・池上 貴久 (阪大蛋白研)
- O36 **希硝酸の酸化力の高揚現象を利用した貴金属の溶解**
北條正司*・氏家由貴**・坪田昇平* (高知大理*・高知大院理**)