

## 第34回溶液化学シンポジウム ポスター発表プログラム

奇数番号 (15日(火) 16:50~18:10)

偶数番号 (16日(水) 9:00~10:20)

☆印：ポスター賞選考対象

- P01 分子動力学法を用いたプロトン化した水クラスターの構造ゆらぎに関する研究  
○住田 由加里・三浦 伸一 (金沢大院・自然)
- P02  $^1\text{H}$ -NMRの測定時間スケールでみる水の液体構造  
○春木 健作・長谷部 亨 (福島大理工)
- P03 (講演中止)
- P04 H/D同位体置換法中性子回折による酢酸イオンのメチル基周囲の水の構造解析  
☆茂泉広太・亀田恭男・天羽優子・臼杵毅 (山形大理工)
- P05 グルコースの水酸基における局所的水とそのダイナミクス 一核磁気共鳴法による研究  
☆中西ゆい・益田祐一 (お茶大院・理)
- P06 テトラアルキルアンモニウムイオンを溶質とした水溶液のテラヘルツスペクトル  
☆井口 遥\*・石原 茜衣\*・富永 圭介\*,\*\* (神戸大院・理\*・神戸大・分子フォト\*\*)
- P07 中性子回折によるLiPF<sub>6</sub>のDMC溶液内におけるLi<sup>+</sup>の溶媒和構造  
☆宮崎琢也\*・亀田恭男\*\*・梅林泰宏\*\*\*・浜野洋志\*\*\*・藤井健太\*\*\*\*・天羽優子\*\*・臼杵毅\*\* (山形大理工\*・山形大理\*\*・九大院理\*\*\*・東大物性研)
- P08 時間分解蛍光分光法による水溶液中の溶媒和ダイナミクスの研究: 重水素効果、温度変化、プローブ分子依存性  
☆高務 真美\*・仮屋 明奈\*・秋本 誠志\*,\*\*・富永 圭介\*,\*\* (神戸大院・理\*・神戸大・分子フォト\*\*)
- P09 環状および鎖状アミドのアルコールへの溶媒和挙動  
☆松井 尚之・木村 二三夫・小川 英生 (東京電機大学 理工学部)
- P10 種々のアルコール-水混合溶液中におけるL-ロイシンの溶媒和構造  
☆波戸本 洋平・戸根川 順子・梅木 辰也・高椋 利幸 (佐賀大院工学系)
- P11 ラマン散乱法による、40 MPa, 25~350°CにおけるNaNO<sub>3</sub>、Mg(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>、Ca(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>水溶液の構造  
☆李 孝成・藤村 恒児・吉田 享次・山口 敏男 (福岡大理)
- P12 分子動力学計算によるアルカノールアミン水溶液の解析  
○古川博敏\*,\*\*・窪田善之\*,\*\*・狩野康人\*・桜庭俊\*・松林 伸幸\* (京都大学化学研究所\*・関西電力\*\*)
- P13 N,N-ジメチルホルムアミド-重水混合系における分子の回転運動に対する温度および圧力効果  
☆岡田 真紀\*・伊吹一泰\*\*・上野正勝\*\*\* (同志社大学理工)
- P14 水溶液中におけるデキストラン及び蛍光デキストランの微細構造  
☆服部実\*・小松晃之\*\*・酒井宏水\*\*\*・佐藤高彰\* (信州大\*・中央大\*\*・早稲田大\*\*\*)
- P15 逆モンテカルロ法を用いた溶融Cs-Au混合系に対する短・中距離構造解析  
☆佐藤慧、丸山健二 (新潟大院自然研\*・新潟大理\*\*)
- P16 量子化学計算とラマン分光法による1,2-プロパンジアミンの溶媒和構造  
☆寺島 幸生\*, 武田 清\*\*, 本田亮\*\*, (兵庫教育大学連合大学院自然系教育連合講座\*, 鳴門教育大学大学院自然系コース(理科)\*\*)
- P17 核磁気緩和による溶液中での1,5-diphenyl-1,3,5-pentanetrioneにおける多重プロトン移動の研究  
☆仲野 朋子・益田 祐一 (お茶大院・理)
- P18 イオン液体/水混合系における6-ヒドロキシキノリンのプロトン移動ダイナミクス  
☆小林 慧・寺嶋 正秀・木村 佳文 (京大院理)
- P19 自由エネルギー勾配法によるアンモニアイオン化過程の反応経路探索: QM/MM-MD 計算における境界表現の重要性  
☆小谷野 哲之\*,\*\*・竹中 規雄\*,\*\*・北村 勇吉\*・長岡 正隆\*\*, (名大院・情報科学\*・JST-CREST\*\*)
- P20 エネルギー表示法による2-アミノエタノール(MEA)水溶液中でのCO<sub>2</sub>の反応性の解析

○窪田善之\*,\*\*, 櫻庭俊\*, 狩野康人\*, 古川博敏\*,\*\*, 松林伸幸\* (京大化研\*, 関西電力\*\*)

P21 **Diethyl ether と ethyl isopropyl ether のコンフォメーション平衡におよぼす溶媒・圧力効果**

☆和田竜一\*, 加瀬澤邦浩\*, 加藤稔\*,\*\* (立命館大院理工\*, 立命館大薬\*\*)

P22 **アルカノールアミン水溶液の二酸化炭素吸収におけるアルコール鎖長の影響**

○山田秀尚\*, Chowdhury, Firoz A.\*, 松崎洋市\*\*, 後藤和也\*, 東井隆行\*, 風間伸吾\* (地球環境産業技術研究機構\*, 新日鐵先端技術研究所\*\*)

P23 **DBU-アルコール溶液のCO<sub>2</sub>吸収と放散挙動**

○梅木 辰也\*,\*\*, 金久保 光央\*, 牧野 貴至\*, 鈴木 明\*, 高椋 利幸\*\* (産総研\*, 佐賀大

P24 **In situ NMRを用いたグルコース水熱反応の機構および速度論的解析**

☆木村 浩・中原 勝・松林 伸幸 (京大化研)

P25 **熱水中におけるセロビオースのグリコシド結合の分解の溶液NMRによる速度論解析**

☆野間 時郎・吉田 健・魚崎 泰弘 (徳島大工)

P26 **3-トリフルオロメチルフェニルボロン酸のD-フルクトースに対する反応性に関する速度論的研究**

○田中亜純\*, 岩月聡史\*\*, 稲毛正彦\*\*\*, 高木秀夫\*\*\*\*, 石原浩二\* (早大先進理工\*, 甲南大理工\*\*, 愛教大教育\*\*\*, 名大物国センター\*\*\*\*)

P27 **イオン液体のCO<sub>2</sub>吸収特性に及ぼすカチオン種の影響**

○牧野 貴至・金久保 光央・梅木 辰也・鈴木 明 (産総研)

P28 **イオン液体[bmim][BF<sub>4</sub>]のコンフォメーション平衡に及ぼす温度・圧力効果**

☆幡野 尚宏\*, 竹清 貴浩\*, 阿部 洋\*\*, 吉村 幸浩\* (防衛大応用化学\*, 防衛大機能材料

P29 **X線非弾性散乱実験によるイオン液体の集団的ダイナミクス**

☆浜野 洋志\*, 藤井 健太\*\*, 関 志朗\*\*\*, 渡邊 正義\*\*\*\*, 吉田 亨次\*\*\*\*\*, 山口 敏男\*\*\*\*\*, 山口 毅\*\*\*\*\*, 梅林 泰宏\* (九州大理\*, 東大物性研\*\*, 電中研\*\*\*, 横浜国大工\*\*\*\*, 福大理\*\*\*\*\*, 名古屋大工\*\*\*\*\*)

P30 **ジエチレントリアミンを極性基に持つプロトン性イオン液体と遷移金属イオンとの相互作用**

○竹村 忍・森本敦美・飯田雅康 (奈良女子大大学院人間文化研究科)

P31 **FSA型イオン液体のDFT法を用いた力場構築及びMD法への適用**

☆畑克典\*, 鴨陽一\*\*, 松宮正彦\*\*, 綱島克彦\*\*\*, 小玉春\*\*\*\* (横浜国大\*, 横浜国大院・環境\*\*, 和歌山高専\*\*\*, 日本化学工業(株)\*\*\*\*)

P32 **イオン液体中の最近接イオン間相互作用とナノスケール相分離構造**

☆吉井 未生\*, 藤井 健太\*\*, 亀田 泰男\*\*\*, 金久保 光央\*\*\*\*, 梅林 泰宏\* (九大院理\*, 東大物性研\*\*, 山形大理\*\*\*, 産総研\*\*\*\*)

P33 **メソポーラスシリカ中に閉じ込めたイオン液体のX線構造解析**

☆杉野 公昭\*, 伊藤 華苗\*, 麻生 真以\*, 吉田 亨次\*, 高椋 利幸\*\*, 来田 康司\*\*\*, 田中 俊輔\*\*\*, 三宅義和\*\*\*, 山口 敏男\* (福岡大理\*, 佐賀大理工\*\*, 関西大工\*\*\*)

P34 **粘性緩和法によるイオン液体-リチウム塩混合系の粘度に関する研究**

☆三河 健一\*, 山口 毅\*, 香田 忍\*, 関 志朗\*\*, 藤井 健太\*\*\*, 梅林 泰宏\*\*\*\* (名大院工\*, 電力中研\*\*, 東大物性研\*\*\*, 九大院理\*\*\*\*)

P35 **ベンゼン誘導体中におけるイオン液体のクラスター形成に対するベンゼン置換基の効果**

☆下村 拓也・井之上 紗緒梨・梅木 辰也・高椋 利幸 (佐賀大院工学系)

P36 **ピリジルボロン酸誘導体とヒノキチオールとの錯形成反応の速度論的研究**

○岩月 聡史\*, 大原 秀隆\*, 金光 優希\*, 渡邊 永祐\*\*, 檀上 博史\*, 石原 浩二\*\* (甲南大院自然\*, 早大先進理工\*\*)

P37 **水溶液中におけるトリスピリジン鉄(II)錯体の低・高スピン状態に対する分子動力学シミュレーション**

○井内 哲 (名大院情報科学)

P38 **ラマン分光法及びDFT計算による遷移金属FSA錯体のスペクトル解析**

☆鴨 陽一\*, 畑 克典\*\*, 松宮 正彦\*, 綱島 克彦\*\*\*, 小玉 春\*\*\*\* (横浜国大院環境\*, 横浜国大\*\*, 和歌山高専\*\*\*, 日本化学工業(株)\*\*\*\*)

P39 **極性溶媒中での光学活性リモネンのエンタルピー識別**

木村隆良・☆小菅友理・神山匡・藤澤雅夫 (近畿大学理工学部)

P40 **脂肪族ニトリル水溶液系の部分モルエンタルピー**

木村隆良・☆鈴木辰則・神山匡・藤澤雅夫 (近畿大)

P41 **二成分混合系の臨界点近傍における熱力学量の異常 Ⅲ. 過剰エンタルピーの異常の分子論的解釈**

☆塚本 浩貴・前林 正弘・大場 正春 (名城大農)

P42 **コロイド溶液の揺らぎと音波物性**

- ☆辰巳 怜・山本量一（京大工）
- P43 **ジグライム+リチウム塩溶液の輸送現象とCO<sub>2</sub>吸収特性**  
金久保 光央\*・遠藤 康弘\*\*・児玉 大輔\*\*・Thomas Sonnleitner\*\*\*・Richard Buchner\*\*\*・牧野 貴至\*・梅木 辰也\*・鈴木 明\*（産総研\*・日大工\*\*・レーゲンスブルク
- P44 **塩化カリウム-糖-水の3成分溶液の粘性**  
☆秦龍一・安藤寛子・梶原一人（東京工科大学）
- P45 **環状フッ素置換炭化水素を含む二成分溶液の分子極性に関する研究**  
○佐藤 祐貴\*・小川 英生\*\*・稲垣 和也\*\*・高橋 勇気\*\*（東電大院理工\*・東電大理
- P46 **水中における疎水性および両親媒性分子・イオンの拡散係数：フェニルアルコールと関連溶質の比較**  
西原崇・竹崎誠・富永敏弘（岡山理大工）
- P47 **二酸化炭素-メタノール混合流体における溶質トレーサー拡散係数の分子動力学計算**  
○由井和子・鳥海秀・船造俊孝（中央大理工）
- P48 **水溶液中でのグルコースのアノマー異性体の部分モル体積と部分モル断熱圧縮**  
☆蒲生 浩之・重田 康有・前林 正弘・大場 正春（名城大農）
- P49 **WCAポテンシャルによる単純液体の熱伝導評価**  
☆石井良樹\*・佐藤圭介\*\*・根岸裕太\*\*・大鳥範和\*・M. Salanne\*\*\*・Paul A. Madden\*\*\*\*（新潟大理\*・新潟大院自然\*\*・パリ第6大\*\*\*・オックスフォード大\*\*\*\*）
- P50 **Coumarin153の電子状態の溶媒依存性(1)RISM-SCF理論による解析**  
○吉田 紀生\*・西山 桂\*\*・平田 文男\*\*（分子研\*・島根大教育\*\*）
- P51 **水分子の価電子遷移に対するカチオンの影響に関する遠紫外分光分析**  
○後藤剛喜\*・池羽田晶文\*・森澤勇介\*\*・尾崎幸洋\*\*（農研機構食総研\*・関学大理工
- P52 **遠紫外域に現れるハロゲンCTTSバンドのATR分光観察**  
○池羽田晶文\*・後藤剛喜\*・森澤勇介\*\*・東昇\*\*\*・尾崎幸洋\*\*（農研機構食総研\*・関西学院大学\*\*・クラボウ\*\*\*）
- P53 **(講演中止)**
- P54 **<sup>7</sup>Li, <sup>23</sup>Na NMR法で観測した塩化アルカリ塩誘起によるアセトニトリル-水混合溶液の相分離**  
☆原楨 宏樹・下村 拓也・高椋 利幸（佐賀大院工学系）
- P55 **ポリビニルアルコールゲルの弾性挙動に対する水・DMSOの組成の影響**  
○松岡 辰郎・古田 亮一（名古屋大学）
- P56 **水中におけるpolyNIPAmゲル微粒子の静的構造に関する新解釈**  
☆宮下拓也・○古俣結城・鈴木大介・佐藤高彰（信州大学）
- P57 **緩和測定法によるポリマーゲル電解液の電気伝導度及び粘性に関する研究**  
☆松井 亮・山口 毅・香田 忍（名古屋大学大学院工学研究科）
- P58 **ドデシル硫酸ナトリウム-ペンタデカフルオロオクタノール混合界面活性剤のミセル形成熱 ～水の部分モルエンタルピーの影響～**  
☆宿波 祐美\*・都築 佳孝\*・前林 正弘\*・大場 正春\*・原田 茂治\*\*・佐原 秀子\*\*（名城大農\*・静岡県立大短\*\*）
- P59 **ドデシル硫酸ナトリウム-ペンタデカフルオロオクタノール混合界面活性剤水溶液のミセル組成II ～異なる温度におけるミセル組成～**  
☆都築 佳孝\*・宿波 祐美\*・前林 正弘\*・大場 正春\*・原田 茂治\*\*・佐原 秀子\*\*（名城大農\*・静岡県立大短\*\*）
- P60 **脂質膜中に取り込まれたナフタレン誘導体の溶液<sup>1</sup>H-NMR測定**  
☆松尾 勇志・新谷 恵・松林 伸幸（京都大学化学研究所）
- P61 **脂質二重層膜におけるコレステロールの側方向二体間の自由エネルギープロフィール**  
○大野公子\*・安藤嘉倫\*・岡崎進\*・八田 一郎\*\*（名大院工\*・JASRI\*\*）
- P62 **混合界面活性剤溶液中におけるタンパク質の構造変化**  
○森山 佳子・竹田 邦雄（岡山理大工）
- P63 **ヘキサフルオロイソプロパノール-水二成分溶液中の10残基ペプチド1FSD-10のMDシミュレーション**  
☆井村晋也, 武藤加奈味, 甲斐 恭, 吉田亨次, 山口敏男（福岡大理）
- P64 **実験で得られた蛋白質天然構造モデルのキャラクタリゼーション**  
☆三嶋浩和\*・安田賢司\*・吉留崇\*・池口満徳\*・木下正弘\*（京大エネルギー理工\*・横浜市立大\*\*）
- P65 **拡張 scaled particle theory を用いたアルコールと小さな球状蛋白質の部分モル体積計算**  
☆辻 裕人・入佐 正幸（九工大・情報工・生命）

- P66 **あらわに水分子を取り入れた系における最適化したタンパク質系力場の比較**  
☆榮 慶丈\*・岡本 祐幸\*\*,\*\* (名大院理\*・名大構造生物研\*\*・名大計算科学研\*\*\*)
- P67 **球状タンパク質の二次構造に及ぼすイミダゾリウム系イオン液体の添加効果**  
○竹清 貴浩\*・山崎 久美子\*・二瓶 あずさ\*・小俣 智也\*・幡野 尚宏\*・阿部 洋\*\*・吉村 幸浩\* (防衛大応用化学\*・防衛大機能材料\*\*)
- P68 **三成分溶液(水+タンパク質+シクロデキストリン)の溶液粘性**  
☆小早川将哉・神山匡・立石貴大・竹内大輔・木村隆良 (近畿大学理工学部)
- P69 **液体表面で見られるタンパク質の塩析現象(2) アニオン依存性**  
○矢野陽子\*・宇留賀朋哉\*\*・谷田肇\*\*・寺田靖子\*\* (近畿大学\*・JASRI/SPRING-8\*\*)
- P70 **アンサンブル分子動力学計算による溶液中グロビンタンパク質緩和過程の理論的研究**  
☆高柳 昌芳\*・\*\*・平尾 昌吾\*・長岡 正隆\*\* (名古屋大学大学院情報科学研究科\*・JST-CREST\*\*)
- P71 **タンパク質圧力変性の溶媒効果に関する拡張アンサンブルシミュレーションによる研究**  
☆森 義治\*・岡本 祐幸\*\* (名大院理\*・名大院理, 名大構造生物研, 名大計連センター)
- P72 **圧縮率と熱膨張率による生体高分子の揺らぎ検出**  
☆猪股孝史・神山匡・辻貴士・金岡恵理・石井亮太・木村隆良 (近畿大学理工学部)
- P73 **溶質分子の自由エネルギー地形平坦化—Ab initio QM/MM-MD自由エネルギー計算によるグリシン配座異性体の安定性—**  
☆北村勇吉\*・竹中規雄\*, \*\*・小谷野哲之\*, \*\*・長岡正隆\*, \*\* (名大・情報科学\*・JST-CREST\*\*)
- P74 **アミノ酸アナログに対する尿素およびそのアルキル化物の共溶媒効果の自由エネルギー解析**  
☆涂楷旻・狩野康人・櫻庭俊・松林伸幸 (京大化研)
- P75 (講演中止)
- P76 **3次元RISM理論に基づくドラッグデザインへ向けた解析手法の開発と応用**  
○清田 泰臣\*・吉田 紀生\*, \*\*・平田 文男\*, \*\* (分子研\*・総研大\*\*)
- P77 **分子動力学法を用いた水素ハイドレートの研究**  
○東 真史・三浦 伸一 (金沢大学院自然)
- P78 **医薬品の溶解度と各種物性値との相関関係**  
○藤澤雅夫\*・堤 浩崇\*・金岡奈々絵\*・池田 浩人\*\*・安藝 初美\*\*・木村 隆良\*\*\* (近畿大生物理工\*・福岡大薬\*\*・近畿大理工\*\*\*)
- P79 **エレクトロスプレーマイクロリアクターによる金ナノ粒子のサイズ制御**  
○脇坂 昭弘\*・兵藤 豊\*・土屋 雅大\*\*・小野 泰蔵\*・小原 ひとみ\* (産総研\*・防大\*\*)
- P80 **水中のカーボンナノチューブが受ける抗力の流体力学による計算**  
☆村上 寛徳\*・岡田 健\*\*・入佐 正幸\*・石島 秋彦\*\* (九工大情報工\*, 東北大多元研\*\*)