

## 第 40 回溶液化学シンポジウム

### 口頭発表プログラム

発表会場： イーグレひめじ（あいめっせホール）

（一般講演：15 分 質疑応答：4 分 演者交代：1 分）

10 月 18 日(水)

開会あいさつ (10:25~10:30)

口頭発表 1 (10:30~11:50) 座長：山口 毅 (名古屋大)

O01 新しい溶媒和自由エネルギー表式による蛋白質の安定性の研究

○丸山豊<sup>1</sup>, 光武亜代理<sup>2</sup> (理研 AICS<sup>1</sup>, 慶應大理工<sup>2</sup>)

O02 時間分解拡散法から観るタンパク質と DNA の結合ダイナミクス

高門 輝<sup>1</sup>, 中曽根 祐介<sup>1</sup>, ○寺嶋 正秀<sup>1</sup> (京大院理<sup>1</sup>)

O03 MM-3D-RISM 法を用いた Pim-1 kinase 阻害剤系の結合自由エネルギー予測  
長谷川毅<sup>1</sup>, ○杉田昌岳<sup>1</sup>, 菊地武司<sup>1</sup>, 平田文男<sup>2</sup> (立命館大生命<sup>1</sup>, 豊田理研<sup>2</sup>)

O04 液相フォトニック結晶の相平衡

○鈴木 炎, 大西将之, 金島光年, 城殿丈弘 (富山大理)

昼食 (11:50~13:00)

口頭発表 2 (13:00~14:00) 座長：梅木 辰也 (佐賀大)

O05 イオン液体硝酸エチルアンモニウム中における pH 想定

○神崎 亮, 児玉谷 仁, 富安 卓滋 (鹿児島大院理工)

O06 擬プロトン性イオン液体のナノスケール相分離構造とイオン伝導機構

○渡辺日香里<sup>1</sup>, 荒井奈々<sup>1</sup>, 野崎永莉香<sup>1</sup>, 亀田恭男<sup>2</sup>, 梅林泰宏<sup>1</sup> (新潟大院自然<sup>1</sup>  
山形大理<sup>2</sup>)

O07 アルキル鎖長の異なるイミダゾリウム系イオン液体中におけるニトロアニリン類の  
光励起ダイナミクス

○木村佳文, 茨木伸哉, 平野隆成, 杉田 陽祐, 八坂能郎, 上野正勝 (同志社大理工)

休憩 (14:00~14:10)

**【40周年企画「溶液化学研究とシンポジウムの過去・現在・未来」】**

口頭発表3 (14:10~15:50) 座長：岡村 恵美子 (姫路獨協大)

O08 溶液化学シンポジウムの黎明期

富永 敏弘 (岡山理大工)

O09 最近の溶液化学シンポジウムと溶液化学研究

山口 敏男 (福岡大理)

O10 溶液化学シンポジウムと溶液化学研究のこれから

松林 伸幸 (阪大基礎工)

休憩 (15:50~16:00)

**受賞講演 奨励賞** (16:00~17:00) 座長：鳥居 肇 (静岡大)

AW1 分子動力学計算を用いた溶液内両親媒性分子の分子論的研究

藤本 和士 (名大院工)

AW2 イオン液体のガス吸収特性の解明とガス吸収分離技術への応用

牧野 貴至 (産総研 化学プロセス)

休憩 (17:00~17:10)

**ポスター発表** (奇数番号) (17:10~18:30)

10月19日(木)

ポスター発表 (偶数番号) (9:15~10:35)

休憩 (10:35~10:45)

口頭発表4 (10:45~12:05) 座長: 神崎 亮 (鹿児島大)

O11 両性溶媒中におけるアルカリ土類金属イオンとカルボン酸イオン間の錯形成反応

○北條正司<sup>1</sup>, 安部祥太郎<sup>1</sup>, 陳 小卉<sup>2</sup> (高知大理<sup>1</sup>, 常州工程<sup>2</sup>)

O12 flocculation-SERS法による水和金属イオンの検出

桑名竜之介, ○二又政之 (埼玉大院理工)

O13 水溶性有機溶媒-水混合溶液中における1,3-ブタンジオールの溶媒和構造と分子内水素結合

○高椋利幸<sup>1</sup>, 日隈康仁<sup>1</sup>, 松上 優<sup>2</sup>, 藤 貴弘<sup>1</sup>, 梅木辰也<sup>1</sup> (佐賀大院工学系<sup>1</sup>, 熊本高専<sup>2</sup>)

O14 遠紫外分光法と量子化学計算による水溶液中水和プロトンの第一電子遷移の解釈

○後藤剛喜, Krzysztof Bec, 尾崎幸洋 (関西学院大院理工)

昼食 (12:05~13:15)

口頭発表5 (13:15~14:15) 座長: 吉田 健 (徳島大)

O15 脂質組成の非対称性を考慮したモデル脂質二重膜の分子動力学計算

○安藤嘉倫<sup>1</sup>, 早川志保<sup>2</sup>, 岡崎進<sup>1,2</sup> (名大院計算科学セ<sup>1</sup>, 名大院応物化<sup>2</sup>)

O16 両親媒性交互マルチブロックコポリマーの水中におけるミセル化と水溶液の相分離挙動

○勝本之晶<sup>1</sup>, 堀内輔<sup>2</sup>, 力山和晃<sup>2</sup>, 真田雄介<sup>1</sup> (福岡大理<sup>1</sup>, 広島大院理<sup>2</sup>)

O17 ミセル、ヘキサゴナル、膜における界面活性剤分子の集団運動についての分子動力学計算による研究

○吉井範行<sup>1,2</sup>, 岡崎進<sup>2,1</sup> (名大院工計算セ<sup>1</sup>, 名大院工<sup>2</sup>)

口頭発表6 (14:15~14:55) 座長: 貞包 浩一朗 (同志社大)

O18 ナノ粒子を分散させた液体のX線非弾性散乱測定

○吉田 亨次<sup>1</sup>, 山口敏男<sup>1</sup>, 蒲沢 和也<sup>2</sup>, 福嶋 喜章<sup>2</sup>, 内山 裕士<sup>3</sup>, 筒井 智嗣<sup>3</sup>, 矢野一久<sup>4</sup> (福岡大理<sup>1</sup>, CROSS<sup>2</sup>, JASRI<sup>3</sup>, 豊田中研<sup>4</sup>)

O19 J-PARC NOVA分光器を用いた中性子回折実験による水の部分構造関数の導出

○亀田恭男<sup>1</sup>, 天羽優子<sup>1</sup>, 白杵毅<sup>1</sup>, 大友季哉<sup>2</sup> (山形大理<sup>1</sup>, 高エ機構<sup>2</sup>)

休憩 (14:55-15:10)

**特別講演 1** (15:10~16:00) 座長：梅林 泰宏 (新潟大)

PL1 溶媒和イオン液体の特徴と次世代電池への適用可能性

獨古 薫 (横浜国大院工)

**特別講演 2** (16:00~16:50) 座長：寺嶋 正秀 (京都大)

PL2 連続滴定溶液散乱測定による蛋白質分子複合系の多成分平衡状態の解析

上久保 裕生 (奈良先端大院 物質創成科学)

総会 (17:00~17:50)

懇親会 (18:30~20:30)

10月20日(金)

口頭発表7 (9:20~10:20) 座長：吉井 範行 (名古屋大)

O20 ファンデルワールス式による三相平衡図

○片岡洋右 (法政大生命)

O21 OZ理論による溶媒和自由エネルギーの精度：LJ溶媒へのLJ等核二原子分子の溶媒和について

○宮田竜彦, 矢吹直哉 (愛媛大理)

O22 第一原理有効フラグメントポテンシャル-分子動力学計算によるハロベンゼンの水和構造に関する理論的研究

○黒木菜保子<sup>1</sup>, 森寛敏<sup>2,3</sup> (お茶大院人間文化創成科学<sup>1</sup>, お茶大基幹研究院<sup>2</sup>, JST さきがけ<sup>3</sup>)

口頭発表8 (10:20~11:20) 座長：勝本 之晶 (福岡大)

O23 ポリビニルピロリドン水溶液における中間水ダイナミクス

○中田克<sup>1</sup>, 石田宏之<sup>1</sup>, 古島圭智<sup>1</sup>, 河出直哉<sup>1</sup>, 中野隆行<sup>1</sup>, 児玉尚士<sup>1</sup>, 田中賢<sup>2</sup> (東レリサーチセ<sup>1</sup>, 九大先導物質化学研<sup>2</sup>)

O24 永久双極子のない分子溶液系の過減衰緩和過程

○城田秀明 (千葉大院理)

O25 水素結合系のテラヘルツスペクトル強度生成メカニズムの理論的解析

○鳥居肇 (静岡大教育)

休憩 (11:20~11:35)

口頭発表9 (11:35~12:55) 座長：原野 雄一 (姫路獨協大)

O26 過冷却水における Stokes-Einstein 則の破れと回復：様々な時間スケールの分類による特徴付け

○金鋼<sup>1</sup>, 川崎猛史<sup>2</sup> (阪大基礎工<sup>1</sup>, 名大理<sup>2</sup>)

O27 誘電分極が分子間相互作用に与える影響

○都築誠二<sup>1</sup>, 内丸忠文<sup>2</sup> (産総研機能材料<sup>1</sup>, 産総研機能化学<sup>2</sup>)

O28 アルカノールアミン水溶液中での二酸化炭素の反応の第一原理分子動力学計算

○窪田善之<sup>1</sup>, Tomáš Bučko<sup>2,3</sup> (関電技研<sup>1</sup>, Comenius Univ. Bratislava<sup>2</sup>, Slovak Acad. Sci.<sup>3</sup>)

O29 ゲル化剤の疎溶媒性相互作用の解明に基づく透明な分子オルガノゲルの創成

○西山 桂<sup>1</sup>・江原 守<sup>2</sup>・木下 勝<sup>2</sup>・嘉治寿彦<sup>3</sup>・勝本之晶<sup>4</sup> (名城大理工<sup>1</sup>・島根大教育<sup>2</sup>・東京農工大院工<sup>3</sup>・福岡大理<sup>4</sup>)

閉会あいさつ (12:55~13:00)