

## 第40回溶液化学シンポジウム

### ポスター発表プログラム

発表会場： イーグレひめじ 市民ギャラリー 展示室

奇数番号： 10月18日（水） 17:10～18:30

偶数番号： 10月19日（木） 9:15～10:35

☆印： ポスター賞選考対象

- P01 ☆高圧力 NMR 法によるユビキチンの局所変性状態の立体構造解析  
○若本拓朗<sup>1</sup>, 北沢創一郎<sup>2</sup>, 池谷鉄兵<sup>3</sup>, 亀田倫史<sup>4</sup>, Christian Roumestand<sup>5</sup>, Nichola J Baxte<sup>6</sup>, Mike P Williamson<sup>6</sup>, 北原亮<sup>2</sup> (立命館大院生命科学<sup>1</sup>, 立命館大薬<sup>2</sup>, 首都大東京理工<sup>3</sup>, 産総研(AIST)<sup>4</sup>, Centre de Biochimie Structurale, University of Montpellier<sup>5</sup>, Department of Molecular Biology and Biotechnology, University of Sheffield<sup>6</sup>)
- P02 ☆タンパク質に対するイオン液体の選択的溶媒和量の決定  
○中森翔太, 野間真里, 神山匡 (近大院総合理工)
- P03 イオン液体を用いた熱凝集シトクロム c の可溶化  
○竹清貴浩, 宮崎夏鈴, 石川由佳, 吉村幸浩 (防衛大応用化学)
- P04 ☆イオン液体水溶液中におけるタンパク質の構造的揺らぎ  
○澤田真弥, 下谷一貴, 神山匡 (近大理工)
- P05 ☆ $\beta$ -ラクトグロブリンの熱変性による凝集体構造に対するアルキルアンモニウム型イオン液体の影響  
○禪院知寛<sup>1</sup>, 吉田亨次<sup>1</sup>, 山口敏男<sup>1</sup>, 村田邦彦<sup>2</sup> (福岡大理<sup>1</sup>, 福岡大医<sup>2</sup>)
- P06 ☆1-Alkyl-3-methylimidazolium 水溶液中における Lysozyme の熱安定性  
○野間真里, 神山匡 (近畿大院総合理工)
- P07 ☆イオン液体を用いたインスリンアミロイドの可溶化/再生に関する研究  
○石川由佳, 竹清貴浩, 吉村幸浩 (防衛大応用化学)
- P08 リアルタイム in-cell NMR によるオクタアルギニンペプチドの細胞膜透過機構  
武知(原矢)佑樹<sup>1,2</sup>, 安岐健三<sup>1</sup>, 通山由美<sup>1</sup>, 原野雄一<sup>1</sup>, 川上徹<sup>3</sup>, 斎藤博幸<sup>4</sup>, 岡村恵美子<sup>1</sup> (姫路獨協大薬<sup>1</sup>, 国立衛研<sup>2</sup>, 阪大蛋白研<sup>3</sup>, 京都薬大<sup>4</sup>)
- P09 ☆分子動力学シミュレーションによる  $\beta$  シート凝集の構造および自由エネルギー解析  
○増谷佳一, 金鋼, 松林伸幸 (阪大院基礎工)
- P10 ☆尿素およびその誘導体によるタンパク質変性の自由エネルギー解析  
○山守優, 松林伸幸 (大阪大基礎工)
- P11 ☆Lysozyme の高次構造変化に対するフッ化アルコールの効果  
○原口知也<sup>1</sup>, 宝蔵寺侑輔<sup>1</sup>, 櫻井裕之<sup>1</sup>, 貞包浩一郎<sup>2</sup>, 岩瀬裕希<sup>3</sup>, 梅木辰也<sup>1</sup>, 高椋利幸<sup>1</sup> (佐賀大院工学系<sup>1</sup>, 同志社大生命医<sup>2</sup>, 総合科学研究機構<sup>3</sup>)

- P12 有機溶媒水溶液中におけるタンパク質の凝集形成機構  
○中西翔也, 神山匡 (近大理工)
- P13 ☆蛋白質構造の安定性と熱変性に関する相互作用成分解析  
○徳永好彦, 山守優, 石塚良介, 松林伸幸 (阪大院基礎工)
- P14 ☆3D-RISM 計算での溶媒分布と MD から導く EcoRV の DNA 切断反応における水分子と  $Mg^{2+}$  の役割  
○大西到<sup>1</sup>, 砂場俊哉<sup>1</sup>, 本松良太<sup>1</sup>, 安庭潤治<sup>1</sup>, 丸山豊<sup>2</sup>, 吉田紀生<sup>3</sup>, 皿井明倫<sup>1</sup>, 平田文男<sup>4</sup>, 入佐正幸<sup>1</sup> (九工大情報工<sup>1</sup>, 慶応大<sup>3</sup>, 九大理<sup>3</sup>, 豊田理研・分子研<sup>4</sup>)
- P15 水のせん断応力と液体構造のカップリング  
○山口毅 (名大院工)
- P16  $LiBF_4$  を添加したプロピレングリコール溶液におけるガラス転移過程の活性化エネルギーと協同的再配置運動領域の変化  
○寺島幸生, 武田清 (鳴門教育大)
- P17 高温NMRとMDによる超臨界条件下の水—シクロヘキサン混合流体中の自己拡散係数の解析  
○吉田健<sup>1</sup>, 中原勝<sup>2</sup> (徳島大院理工<sup>1</sup>, 京大化研<sup>2</sup>)
- P18 NaOH, KOH 水溶液のラマン散乱の最低振動数モード  
○天羽優子, 渡邊将孝, 亀田恭男, 白杵毅 (山形大理)
- P19 ☆ナノスケールフラーレンが示す流体力学的挙動の分子シミュレーションによる解析  
○水田圭亮, 石井良樹, 金鋼, 松林伸幸 (阪大基礎工)
- P20 ☆過冷却水における水素結合ネットワーク構造と動力学  
○菊辻卓真, 金鋼, 松林伸幸 (阪大基礎工)
- P21 ☆メソ細孔物質 MCM-41 に閉じ込められたグリシン水溶液の構造とダイナミクス  
○井上拓也<sup>1</sup>, 鳥越基克<sup>1</sup>, 吉田亨次<sup>1</sup>, 山田武<sup>2</sup>, 柴田薫<sup>3</sup>, 山口敏男<sup>1</sup>, (福岡大理<sup>1</sup>, CROSS<sup>2</sup>, J-PARC センター<sup>3</sup>)
- P22 溶液中における一分子に対する時間依存分布関数  
○笠原健人<sup>1</sup>, 佐藤啓文<sup>1,2</sup> (京大院工<sup>1</sup>, 京大 ESICB<sup>2</sup>)
- P23 非水溶媒中におけるアミン類化合物の  $CO_2$  吸収に対する溶媒効果  
○金久保光央<sup>1</sup>, 牧野貴至<sup>1</sup>, 梅木辰也<sup>2</sup> (産総研<sup>1</sup>, 佐賀大院工<sup>2</sup>)
- P24 グアニジンを用いた Deep Eutectic Mixtures の  $CO_2$  化学吸収に関する NMR 研究  
○梅木辰也, 林直樹, 江口一輝, 後藤瑛裕, 高椋利幸 (佐賀大院工学系)
- P25 様々なアニオン種を有するホスホニウム系イオン液体中での 7-アザインドールの状態  
○高橋浩太郎<sup>1</sup>, 城田秀明<sup>2</sup> (千葉大院融合<sup>1</sup>, 千葉大院理<sup>2</sup>)
- P26 ☆水溶液中におけるイオン液体とシクロデキストリンの包接作用  
○青木綾香, 神山匡 (近大理工)
- P27 ☆軟 X 線分光による二酸化炭素を吸収する酢酸系イオン液体の電子状態研究  
○戸畑敦貴<sup>1</sup>, 森山諒平<sup>1</sup>, 徳島高<sup>2</sup>, 高橋修<sup>3,2</sup>, 梅林泰宏<sup>4</sup>, 堀川裕加<sup>1,2</sup> (山口大院創成科学<sup>1</sup>, 理研 RSC<sup>2</sup>, 広島大院理<sup>3</sup> 新潟大院自然科学<sup>4</sup>)
- P28 ☆イオン液体  $C_2mimTFSA$ -アルコール溶液中における  $Ni^{2+}$  の錯形成平衡と熱力学  
○小川輝<sup>1</sup>, 川頭祐太郎<sup>1</sup>, 櫻井裕之<sup>1</sup>, 貞包浩一朗<sup>2</sup>, 岩瀬裕希<sup>3</sup>, 梅木辰也<sup>1</sup>, 小堤和

- 彦<sup>4</sup>, 高椋利幸<sup>1</sup> (佐賀大院工学系<sup>1</sup>, 同志社大生命医<sup>2</sup>, 総合科学研究機構<sup>3</sup>, 立命館大生命<sup>4</sup>)
- P29 ☆イオン液体 C<sub>4</sub>mimTFSA とシクロエーテルの混合状態  
○河野雅大, 梅木辰也, 高椋利幸 (佐賀大院工学系)
- P30 ☆溶媒和イオン液体の構造緩和に関する理論的解析  
○平川真志<sup>1</sup>, 篠田渉<sup>1</sup>, 岡崎進<sup>1</sup>, 都築誠二<sup>2</sup>, 上野和英<sup>3</sup>, 渡邊正義<sup>3</sup> (名大院工<sup>1</sup>, 産総研<sup>2</sup>, 横国大工<sup>3</sup>)
- P31 ☆有機電解液とイオン液体の境界線に関する物性研究  
○柳澤茉穂<sup>1</sup>, 高橋圭太郎<sup>1</sup>, 鈴木智仁<sup>1</sup>, 亀田恭男<sup>2</sup>, 梅林泰宏<sup>3</sup>, 関志朗<sup>1</sup> (工学院大工<sup>1</sup>, 山形大理<sup>2</sup>, 新潟大院自然<sup>3</sup>)
- P32 ☆溶媒和イオン液体及びこれを希釈するハイドロフルオロエーテルとの混合時における液体物性  
○高橋圭太郎<sup>1</sup>, 柳澤茉穂<sup>1</sup>, 石野優貴<sup>1</sup>, 梅林泰宏<sup>2</sup>, 都築誠二<sup>3</sup>, 渡邊正義<sup>4</sup>, 高羽洋充<sup>1</sup>, 関志朗<sup>1</sup> (工学院大工<sup>1</sup>, 新潟大院自然<sup>2</sup>, 産総研<sup>3</sup>, 横浜国大院工<sup>4</sup>)
- P33 イミダゾリウム系イオン液体+アルコール溶液の相分離に及ぼすアルコールアルキル鎖長の影響  
○下村拓也, 碓井真大 (室蘭工大院工)
- P34 ☆1-alkyl-3-methylimidazolium iodide + 水系の過剰熱力学量の決定  
○石田将忠, 吉田祥, 木村隆良, 神山匡 (近大院総合理工)
- P35 ☆イミダゾリウム系イオン液体+ホスホニウム系イオン液体混合物の相分離挙動に及ぼすアルキル鎖長とアニオンの影響  
○杉山允一, 下村拓也 (室蘭工大院工)
- P36 ☆高エネルギーX線全散乱および Raman 分光による不定比リチウム-グライム錯体系溶媒和イオン液体の構造に関する研究  
○荒井奈々<sup>1</sup>, 渡辺日香里<sup>2</sup>, 関志朗<sup>3</sup>, 都築誠二<sup>4</sup>, 野崎永莉香<sup>1</sup>, 上野和英<sup>5</sup>, 獨古薫<sup>5</sup>, 渡邊正義<sup>5</sup>, 亀田恭男<sup>6</sup>, 梅林泰宏<sup>2</sup> (新潟大理<sup>1</sup>, 新潟大院自然<sup>2</sup>, 工学院大先進工<sup>3</sup>, 産総研<sup>4</sup>, 横浜国大院工<sup>5</sup>, 山形大理<sup>6</sup>)
- P37 ☆2-フェニルベンゾ[b]ホスホニウム塩における消光反応のダイナミクス  
○川口匠悟<sup>1</sup>, 藤井香里<sup>1</sup>, 小柳誉也<sup>2</sup>, 俣野善博<sup>3</sup>, 木村佳文<sup>1</sup> (同志社大院理工<sup>1</sup>, 新潟大院理<sup>2</sup>, 新潟大理<sup>3</sup>)
- P38 ☆軟X線分光による酢酸/1-メチルイミダゾール混合液体の電子状態観測  
○吉村典子<sup>1</sup>, 徳島高<sup>2</sup>, 堀川裕加<sup>1,2</sup> (山口大学院創成科学<sup>1</sup>, 理研 RSC<sup>2</sup>)
- P39 陰イオン性ミセル表面での PyMA<sup>+</sup>蛍光のメチルピリジニウムによる消光反応  
○竹崎誠, 多和義弘 (岡山理大工)
- P40 ☆分子動力学法によるナノ空孔への接着剤の充填挙動の解析  
○森穂高<sup>1,2</sup>, 松林伸幸<sup>1</sup>, 泉龍介<sup>2</sup> (阪大基礎工<sup>1</sup>, デンソー<sup>2</sup>)
- P41 固液界面における分子吸着の分子動力学シミュレーションによる解析  
○中久木一平, 石塚良介, 松林伸幸 (阪大院基礎工)
- P42 ☆生体関連分子の AOT 逆ミセルへの結合の自由エネルギー解析  
○長尾昌洋, 石塚良介, 松林伸幸 (阪大院基礎工)

- P43 ☆脂質二重層膜中のコレステロール 2 分子間側方相互作用への溶媒効果の解明  
○松岡漢斗<sup>1</sup>, 安藤嘉倫<sup>2</sup>, 岡崎進<sup>1,2</sup> (名大院工<sup>1</sup>, 名大院工 計算科学セ<sup>2</sup>)
- P44 ☆分子動力学法を用いた抗 B 型肝炎薬のウイルスカプシド透過機構解明  
○深井基裕, 藤本和士, 篠田渉, 岡崎進 (名大院工)
- P45 ☆拮抗的な塩は水中でどれだけ界面活性剤に近い振舞いをするか  
○土合恭平, 貞包浩一郎 (同志社大生命医)
- P46 拮抗的な塩を含む有機溶媒水溶液中での結晶形成  
○貞包浩一郎<sup>1</sup>, 加藤僚<sup>1</sup>, 高椋利幸<sup>2</sup> (同志社大生命医<sup>1</sup>, 佐賀大院工学系<sup>2</sup>)
- P47 ☆分子動力学シミュレーションを用いた応力計算による界面付着仕事の解析  
○木原健輔, 松林伸幸 (阪大院基礎工)
- P48 ☆原子間力顕微鏡によって測定されるフォースカーブと粒子間動径分布関数を用いた固液界面における溶媒分子・コロイド粒子の数密度分布の決定法  
○橋本康汰, 天野健一, 西直哉, 作花哲夫 (京大院工)
- P49 ☆全原子 MD を用いたポリマー化学ポテンシャル計算法の開発  
○山田一雄, 松林伸幸 (阪大院基礎工)
- P50 疎水性相互作用の及ぼす圧力効果: メタン会合系の自由エネルギー計算  
藤本和士<sup>1</sup>, 堀田優也<sup>2</sup>, ○加藤 稔<sup>3</sup> (名大院工<sup>1</sup> 立命館大薬<sup>2</sup> 立命館大生命<sup>3</sup>)
- P51 ☆分岐構造を持つポリマー系における吸水能の自由エネルギー解析  
○半田和也, 松林伸幸 (阪大基礎工)
- P52 ☆水酸基を複数持つ有機化合物の混合による水の近赤外吸収スペクトルの変化  
○勝さやか<sup>1</sup>, 吉村季織<sup>2</sup>, 高柳正夫<sup>2</sup> (東農工大院農<sup>1</sup>, 東農工大院連農<sup>2</sup>)
- P53 ☆水溶性有機溶媒-水混合溶液中におけるテトラアルキルアンモニウムイオンの溶媒和構造の観測  
○山本実咲<sup>1</sup>, 松上優<sup>2</sup>, 梅木辰也<sup>1</sup>, 高椋利幸<sup>1</sup> (佐賀大院工学系<sup>1</sup>, 熊本高専<sup>2</sup>)
- P54 ☆リチウムイオンを含むエチレンカーボネート溶液の微視的構造解析  
○前田隼弥<sup>1</sup>, 亀田恭男<sup>1</sup>, 天羽優子<sup>1</sup>, 白杵毅<sup>1</sup>, 池田一貴<sup>2</sup>, 大友季哉<sup>2</sup>, 関志朗<sup>3</sup>, 渡辺日香里<sup>4</sup>, 梅林泰宏<sup>4</sup>(山形大理<sup>1</sup>, KEK 物構研<sup>2</sup>, 工学院大先進工<sup>3</sup>, 新潟大院自然<sup>4</sup>)
- P55 ☆"Water-in-Salt"超濃厚リチウム塩溶液中の Li<sup>+</sup>の局所構造  
○野崎永莉香<sup>1</sup>, 渡辺日花里<sup>2</sup>, 上野和英<sup>3</sup>, 藤井健太<sup>4</sup>, 荒井奈々<sup>1</sup>, 関志郎<sup>5</sup>, 獨古薫<sup>3</sup>, 渡邊正義<sup>3</sup>, 亀田恭男<sup>6</sup>, 梅林泰弘<sup>2</sup>(新潟大理<sup>1</sup>, 新潟大院自然<sup>2</sup>, 横浜国立大院工<sup>3</sup>, 山口大工<sup>4</sup>, 工学院大先進工<sup>5</sup>, 山形大理<sup>6</sup>)
- P56 ☆核磁気共鳴法を用いた有機溶媒中の水のクラスター形成とその構造  
○岩田真理子, 柚木佳菜, 益田祐一 (お茶大院・理)
- P57 ☆超臨界メタノールの 3 次元構造  
○曾我良枝, 比嘉颯太, 吉田享次, 山口敏男 (福岡大理)
- P58 ☆単糖類の水酸基における局所的水和構造とそのダイナミクス -核磁気共鳴法による研究  
○鈴木菜那, 益田祐一 (お茶大院・理)
- P59 ☆D-ソルビトールとの反応におけるオルト(フェニルアミノ)メチルフェニルボロン酸の緩衝剤との相互作用  
○林祥太郎<sup>1</sup>, 菅谷知明<sup>2</sup>, 岩月聡史<sup>3</sup>, 稲毛正彦<sup>4</sup>, 高木秀夫<sup>5</sup>, 石原浩二<sup>1</sup> (早大院先

- 進理工<sup>1</sup>, 千葉工大<sup>2</sup>, 甲南大理工<sup>3</sup>, 愛教大教育<sup>4</sup>, 名大物国センター
- P60 ☆超臨界状態をふくむアルコール中での5,8-ジシアノ-2-ナフトールの励起状態プロトン移動反応  
○藤井香里<sup>1</sup>, 八坂能郎<sup>2</sup>, 上野正勝<sup>2</sup>, 木村佳文<sup>1,2</sup> (同志社大院理工<sup>1</sup>, 同志社大理工<sup>2</sup>)
- P61 ☆パーフルオロヘキサン+アルコール+デカフルオロペンタン三成分系の液-液平衡  
○船山順子<sup>1</sup>, 長田慎平<sup>2</sup>, 小川英生<sup>3</sup>, 木村二三夫<sup>3</sup> (東電大院理工研<sup>1</sup>, 東電大院先端研<sup>2</sup>, 東電大理工<sup>3</sup>)
- P62 ポリオール水溶液ガラスの溶媒状態のポリアモルフィズム  
○鈴木芳治 (物材機構)
- P63 アルコール/水界面で生じるマランゴニ対流  
○矢野陽子, 井上雄介, 新田優斗 (近畿大理工)
- P64 ☆塩化カリウム-糖-水の3成分系の溶液の粘度 —フルクトース, スクロース—  
○榎本志緒里<sup>1</sup>, 阿部周司<sup>2</sup>, 梶原一人<sup>3</sup> (東京工科大学大学院バイオニクス専攻<sup>1</sup>, 東京工科大学大学院バイオニクス専攻<sup>2</sup>, 東京工科大学大学院バイオニクス専攻<sup>3</sup>)
- P65 ☆分子動力学シミュレーションによる水-メタノール混合系の音速  
○山崎真史, 佐久間翔太, 宗尻修治 (広島大院総)
- P66 ☆非プロトン性極性溶媒中の2,2,2-トリフルオロエタノールの挙動  
○武田紗知<sup>1</sup>, 吉村季織<sup>2</sup>, 高柳正夫<sup>2</sup> (東農工大院農<sup>1</sup>, 東農工大院連農<sup>2</sup>)
- P67 ☆両親媒性シアニン色素のキラルJ会合体形成における混合溶媒の組成比依存性  
○大谷拓也, 三宅弘之, 八ッ橋知幸, 迫田憲治 (阪市大院理)
- P68 ☆フッ素置換炭化水素+ベンゼンまたは+シクロヘキサン二成分溶液の298.15 Kにおける熱力学的性質  
○大高友美<sup>1</sup>, 長田慎平<sup>2</sup>, 小川英生<sup>3</sup> (東電大院理工<sup>1</sup>, 東電大院先端研<sup>2</sup>, 東電大院理工<sup>3</sup>)
- P69 ☆高温高压下におけるアセトン + ヘプタン二成分溶液の混合エンタルピー  
○横澤琢麻<sup>1</sup>, 菅原優一<sup>2</sup>, 小川英生<sup>2</sup>, 木村二三夫<sup>2</sup> (東電大院理工<sup>1</sup>, 東電大理工<sup>2</sup>)
- P70 ☆HFE-347pc-f + alkane, alcohol, ether, alkoxyalcohol 二成分系における気-液平衡  
○山口薫<sup>1</sup>, 長田慎平<sup>2</sup>, 小川英生<sup>3</sup>, 木村二三夫<sup>3</sup> (東電大院理工<sup>1</sup>, 東電大院先端科技研<sup>2</sup>, 東電大理工<sup>3</sup>)
- P71 ☆環状フッ素置換炭化水素と分枝アルカンとの相互溶解度に及ぼすアルキル基の寄与  
○長田慎平<sup>1</sup>, 佐藤祐貴<sup>2</sup>, 小川英生<sup>3</sup>, 木村二三夫<sup>3</sup> (東電大院先端研<sup>1</sup>, 東電大院理工<sup>2</sup>, 東電大理工<sup>3</sup>)
- P72 ☆高分子電解質ブラシ中の氷のような水の水素結合構造  
○山添康介<sup>1</sup>, 檜垣勇次<sup>2,3</sup>, 犬塚仁浩<sup>2,3</sup>, 宮脇淳<sup>1,4</sup>, 崔藝濤<sup>4</sup>, 高原淳<sup>2,3</sup>, 原田慈久<sup>1,4</sup> (東大新領域<sup>1</sup>, 九大先導研<sup>2</sup>, 九大院工<sup>3</sup>, 東大物性研<sup>4</sup>)
- P73 ☆軟X線分光によるリチウム-グライム錯体系溶液の電子状態観測  
○松村準也<sup>1</sup>, 徳島高<sup>2</sup>, 高橋修<sup>2,3</sup>, 梅林泰宏<sup>4</sup>, 堀川裕加<sup>1,2</sup> (山口大院創成科学<sup>1</sup>, 理研 SPring-8 センター<sup>2</sup>, 広島大 ISSD<sup>3</sup>, 新潟大院自然科学<sup>4</sup>)

- P74 ☆大気圧 He 雰囲気下での液体試料の軟 X 線吸収分光測定装置の開発  
○中尾嘉宏<sup>1</sup>, 吉田啓晃<sup>2,3</sup>, 徳島高<sup>3</sup>, 堀川裕加<sup>1,3</sup> (山口大院創成科学<sup>1</sup>, 広島大院理<sup>2</sup>, 理研 RSC<sup>3</sup>)
- P75 ☆発光性カーボンナノドットの水熱連続合成における光学特性と構造の関係  
○酒井直希<sup>1</sup>, 比江嶋祐介<sup>2</sup>, 新田晃平<sup>2</sup> (金沢大院自然<sup>1</sup>, 金沢大理工<sup>2</sup>)
- P76 ☆軟 X 線発光分光によるトレハロース溶液中の水の電子状態評価  
○塚田智幸<sup>1</sup>, 澁谷孝<sup>2</sup>, 日野克彦<sup>2</sup>, 三宅章子<sup>2</sup>, 崔芸涛<sup>3</sup>, 赤田圭史<sup>3</sup>, 宮脇淳<sup>1,3</sup>, 原田慈久<sup>1,3</sup> (東大新領域<sup>1</sup>, (株)林原<sup>2</sup>, 東大物性研<sup>3</sup>)
- P77 ☆アリザリン Red S とベンゾオキサボロールの反応機構の再検討  
○北沢泰地<sup>1</sup>, 鈴木陽太<sup>1</sup>, 菅谷知明<sup>2</sup>, 石原浩二<sup>1</sup> (早大院先進理工<sup>1</sup>, 千葉工大工<sup>2</sup>)
- P78 ☆水素結合形成した水の分極効果に関わる電子密度変化の理論的解析  
○伊藤広伸<sup>1</sup>, 鳥居肇<sup>1</sup> (静岡大教育<sup>1</sup>)
- P79 ☆赤外パルス-交流電流変換を可能にする MISIM 光電セルにおける溶媒層の重要性についての理論的研究  
○中瀧翔太<sup>1</sup>, 阿波賀邦夫<sup>1</sup>, 横川大輔<sup>1,2</sup> (名大院理<sup>1</sup>, WPI-ITbM<sup>2</sup>)
- P80 ☆構造ゆらぎに注目したリン架橋スチルベンの無輻射失活に関する理論的研究  
○稲井直人<sup>1</sup>, 深澤愛子<sup>1</sup>, 山口茂弘<sup>1,2</sup>, 横川大輔<sup>1,2</sup> (名大院理<sup>1</sup>, WPI-ITbM<sup>2</sup>)
- P81 ☆Highly accurate quantum chemical method with the reference interaction site model (RISM) for calculating near infrared dyes  
○Ryosuke Shimizu<sup>1</sup>, Takeshi Yanai<sup>2,3</sup>, Yuki Kurashige<sup>4,5</sup>, Daisuke Yokogawa<sup>1,6</sup>  
(Graduate School of Science, Nagoya Univ.<sup>1</sup>, Institute for Molecular Science<sup>2</sup>, The Graduate University for Advanced Studies<sup>3</sup>, Graduate School of Science, Kyoto Univ.<sup>4</sup>, PRESTO<sup>5</sup>, WPI-ITbM, Nagoya Univ.<sup>6</sup>)
- P82 非平衡溶媒和系に対する反応-溶媒和座標カップリング解析  
○重光保博<sup>1,2</sup>, 大賀恭<sup>3</sup> (長崎県工業技術センター<sup>1</sup>, 長崎大学大学院工学研究科<sup>2</sup>, 大分大学理工学部<sup>3</sup>)
- P83 ☆溶液の動的構造因子計算の高速化~分子動力学法~  
○佐久間翔太, 山崎真史, 宗尻修治 (広島大院総)
- P84 ☆単純液体における OZ 理論の近似が動径分布関数の微分に与える影響  
○丹下健太郎, 宮田竜彦 (愛媛大院理工)
- P85 ☆電解質水溶液中の一様に帯電した球殻内に生成される負圧の分子論的解明  
○島航平, 小嶋秀和, 藤本和土, 篠田渉, 岡崎進 (名大院工)
- P86 ☆A Theoretical study of the hydration effect on glucose and trehalose using QM/MM-MD method  
○吉川太基<sup>1,2</sup>, 赤瀬大<sup>1,2</sup>, 相田美砂子<sup>1,2</sup> (広島大院理<sup>1</sup>, 広島大 QuLiS<sup>2</sup>)