

# 第42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：東北大学片平さくらホール 1 階

奇数番号：10月30日（水）17:00～18:30

偶数番号：10月31日（木）9:00～10:30

☆印：ポスター賞選考対象

- P01 ☆ 相分離を起こす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イオン間相互作用  
○末木光, 下村拓也 (室蘭工大院工)
- P02 ☆ 1-メチル-3-オクチルイミダゾリウムテトラフルオロボレート-分子液体混合系の低振動数スペクトル：メタノール, アセトニトリル, ジメチルスホキシドの比較  
○安藤雅俊<sup>1</sup>, 田代篤也<sup>2</sup>, 高椋利幸<sup>3</sup>, 城田秀明<sup>1</sup> (千葉大院理<sup>1</sup>, 佐賀大院工学系<sup>2</sup>, 佐賀大理工<sup>3</sup>)
- P03 ☆ イミダゾリウム系イオン液体+アセトニトリル溶液中におけるカチオン-アニオン間相互作用  
○三橋遼, 下村拓也 (室蘭工大院工)
- P04 ☆ ラマン分光法による 1-butyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethanesulfonyl)imide 中におけるアルコールの局所構造に関する研究  
○服部修事<sup>1</sup>, 森天啓<sup>1</sup>, 金子和義<sup>2</sup>, 上田隼<sup>3</sup>, 竹清貴浩<sup>1</sup>, 益田祐一<sup>4</sup>, 清水昭夫<sup>2</sup>, 吉村幸浩<sup>1</sup> (防衛大学校応用化学科<sup>1</sup>, 創価大学大学院工学研究科<sup>2</sup>, 創価大学工学部<sup>3</sup>, お茶の水女子大理学部化学科<sup>4</sup>)
- P05 ☆ テトラプロピルアンモニウムブロマイド-HFIP-水混合溶液中のエマルジョン形成  
○松崎慎ノ介<sup>1</sup>, 山本実咲<sup>2</sup>, 河野雅大<sup>3</sup>, 貞包浩一郎<sup>4</sup>, 岩瀬裕希<sup>5</sup>, 高椋利幸<sup>2</sup> (佐賀大院先進<sup>1</sup>, 佐賀大理工<sup>2</sup>, 佐賀大院工学系<sup>3</sup>, 同志社大生命医<sup>4</sup>, 総合科学研究機構<sup>5</sup>)
- P06 ☆ イミダゾリウム系イオン液体とシクロエーテルの混合状態と相分離  
○河野雅大<sup>1</sup>, 貞包浩一郎<sup>2</sup>, 松上優<sup>3</sup>, 岩瀬裕希<sup>4</sup>, 高椋利幸<sup>5</sup> (佐賀大院工学系<sup>1</sup>, 同志社大生命医<sup>2</sup>, 熊本高専<sup>3</sup>, 総合科学研究機構<sup>4</sup>, 佐賀大理工<sup>5</sup>)
- P07 ☆ イオン液体を用いた $\alpha$ -synuclein アミロイド形成の制御  
○山田菜月, 天羽拓, 竹清貴浩, 吉村幸浩 (防衛大応用化学)
- P08 ☆ イミダゾリウム系イオン液体 C<sub>8</sub>mimBF<sub>4</sub>と種々のアミド分子との微視的相互作用  
○田代篤也<sup>1</sup>, 安藤雅俊<sup>2</sup>, 貞包浩一郎<sup>3</sup>, 岩瀬裕希<sup>4</sup>, 城田秀明<sup>2</sup>, 高椋利幸<sup>5</sup> (佐賀大院工学系<sup>1</sup>, 千葉大院理<sup>2</sup>, 同志社大生命医<sup>3</sup>, 総合科学研究機構<sup>4</sup>, 佐賀大理工<sup>5</sup>)
- P09 ☆ イミダゾリウム系イオン液体 C<sub>2</sub>mimTfSA 中における Ni(II)イオンと環状分子, シクロエーテル, およびピリジンとの錯形成平衡  
○池田剛大<sup>1</sup>, 川頭祐太郎<sup>1</sup>, 貞包浩一郎<sup>2</sup>, 岩瀬裕希<sup>3</sup>, 小堤和彦<sup>4</sup>, 高椋利幸<sup>5</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>, 佐賀大理工<sup>5</sup>)
- P10 ☆ イオン液体 C<sub>12</sub>mimTfSAと Benzene および Chloroformとの混合溶液中における色素 Coumarin 153 の溶媒和構造の観測  
○西山大貴<sup>1</sup>, 高椋利幸<sup>2</sup> (佐賀大院先進<sup>1</sup>, 佐賀大理工<sup>2</sup>)

- P11 ☆ アニオンの違いによるイミダゾリウム系イオン液体中に閉じ込められた水の局所構造変化  
○森天啓<sup>1</sup>, 服部修事<sup>1</sup>, 金子和義<sup>2</sup>, 上田隼<sup>3</sup>, 竹清貴浩<sup>1</sup>, 益田祐一<sup>4</sup>, 清水昭夫<sup>2</sup>, 吉村幸浩<sup>1</sup> (防衛大学校応用化学科<sup>1</sup>, 創価大学大学院工学研究科<sup>2</sup>, 創価大学工学部<sup>3</sup>, お茶の水女子大理学部化学科<sup>4</sup>)
- P12 ☆ イオン液体静電噴霧による二酸化炭素分離吸収に与える環境温度依存性  
○原望<sup>1</sup>, 高奈秀匡<sup>2</sup>, 牧野貴至<sup>3</sup>, 金久保光央<sup>3</sup> (東北大学工学研究科<sup>1</sup>, 東北大学流体研究所<sup>2</sup>, 産業技術総合研究所<sup>3</sup>)
- P13 ☆ 二酸化炭素分離吸収のための多孔質体エミッター型イオン液体静電噴霧の基礎特性  
○川原田鎮一<sup>1</sup>, 高奈秀匡<sup>2</sup> (東北大学大学院工学研究科<sup>1</sup>, 東北大学流体科学研究所<sup>2</sup>)
- P14 ☆ イオン液体+イオン液体混合物の相分離挙動におよぼすカチオン構造の効果  
○村山大雅, 下村拓也 (室蘭工大院工)
- P15 ☆ エチレンカーボネートを用いた溶媒和イオン液体の NMR 測定  
○益田弥都<sup>1</sup>, 草野竜征<sup>2</sup>, 高椋利幸<sup>2</sup>, 梅木辰也<sup>2</sup> (佐賀大院先進<sup>1</sup>, 佐賀大理工<sup>2</sup>)
- P16 ☆ 6-ヒドロキシキノリンのプロトン移動からみたプロトン性イオン液体のプロトン供与能と受容能  
○松村千尋<sup>1</sup>, 藤井香里<sup>1</sup>, 七原悠夏<sup>2</sup>, 遠藤太佳嗣<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>)
- P17 ☆ イオン液体の特異な極性構造を用いた電子励起状態における反応制御  
○宮林花道<sup>1</sup>, 藤井香里<sup>1</sup>, 渡邊拓未<sup>2</sup>, 俣野善博<sup>2</sup>, 遠藤太佳嗣<sup>3</sup>, 木村佳文<sup>1,3</sup> (同志社大院理工<sup>1</sup>, 新潟大院自然<sup>2</sup>, 同志社大理工<sup>3</sup>)
- P18 イオン液体触媒の相分離挙動が脱水縮合反応の反応効率に及ぼす効果  
河野雄樹, 牧野貴至, ○金久保光央 (産総研)
- P19 イオン液体水溶液中の Amyloid  $\beta_{1-11}$  ペプチドの凝集選択性  
○竹清貴浩, 山田菜月, 天羽拓, 吉村幸浩 (防衛大応用化学)
- P20 中性子小角散乱によるイオン液体水溶液中の $\beta$ -ラクトグロブリンの会合状態の観測  
○吉田亨次<sup>1</sup>, 禪院智寛<sup>1</sup>, 山口敏男<sup>1</sup>, 廣井孝介<sup>2</sup>, 高田慎一<sup>2</sup> (福岡大理<sup>1</sup>, J-PARC センター<sup>2</sup>)
- P21 一酸化炭素の回転緩和によるイオン液体の不均一性の評価  
隅田大樹<sup>1</sup>, 遠藤太佳嗣<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>)
- P22 プロトン性イオン液体の CO<sub>2</sub>/CH<sub>4</sub> ガス吸収選択性  
○児玉大輔<sup>1</sup>, 渡邊正輝<sup>2</sup>, 牧野貴至<sup>3</sup>, 金久保光央<sup>3</sup> (日大工<sup>1</sup>, 日大院工<sup>2</sup>, 産総研<sup>3</sup>)
- P23 ☆ ジカルボン酸を用いた共融系液体の形成に及ぼすアルギニン化学種効果  
○河村建, 高椋利幸, 梅木辰也 (佐賀大院工)
- P24 ☆ オペランド顕微 Raman 測定による正極不溶型リチウム-硫黄電池の充放電反応に関する研究  
○荒井奈々<sup>1</sup>, 渡辺日香里<sup>1</sup>, 弓削眞子<sup>2</sup>, 都築誠二<sup>3</sup>, 上野和英<sup>4</sup>, 渡邊正義<sup>4</sup>, 獨古薫<sup>4</sup>, 梅林泰宏<sup>1</sup> (新潟大院自然<sup>1</sup>, 新潟大理<sup>2</sup>, 産総研<sup>3</sup>, 横浜国大院工<sup>4</sup>)
- P25 ☆ Raman スペクトル相補的最小自乗解析による LiBF<sub>4</sub> スルホラン溶媒和溶融塩中の Li<sup>+</sup> 溶存構造  
○弓削眞子<sup>1</sup>, 荒井奈々<sup>2</sup>, 渡辺日香里<sup>2</sup>, 都築誠二<sup>3</sup>, 上野和英<sup>4</sup>, 渡邊正義<sup>4</sup>, 獨古薫<sup>4</sup>, 亀田恭男<sup>5</sup>, 梅林泰宏<sup>2</sup> (新潟大学理<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>, 山形大理<sup>5</sup>)
- P26 ☆ リチウム-グリセリン系プロトン性溶媒和イオン液体の異常なリチウムイオン伝導  
○渡辺日香里<sup>1</sup>, 荒井奈々<sup>1</sup>, 上野和英<sup>2</sup>, 獨古薫<sup>2</sup>, 渡邊正義<sup>2</sup>, 梅林泰宏<sup>1</sup> (新潟大院自然<sup>1</sup>, 横国大院工<sup>2</sup>)

- P27 MD シミュレーションによる CO<sub>2</sub> 周囲におけるアミン水溶液の液体構造の解析  
○岡田真紀<sup>1</sup>, 保科貴亮<sup>2</sup>, 山田秀尚<sup>3</sup>, 辻智也<sup>4</sup>, 日秋俊彦<sup>2</sup> (日大理工<sup>1</sup>, 日大生産工<sup>2</sup>, RITE<sup>3</sup>, マレーシア工科大<sup>4</sup>)
- P28 ギ酸ナトリウム水溶液の水和構造やダイナミクスに及ぼす炭酸水素ナトリウムの影響  
石井香里, 高椋利幸, ○梅木辰也 (佐賀大理工)
- P29 相分離型 CO<sub>2</sub> 吸収液の高圧相挙動  
新妻依利子<sup>1</sup>, Andrzej-Alexander Litwinowicz<sup>1</sup>, 渡邊正輝<sup>1</sup>, 牧野貴至<sup>1</sup>, 河野雄樹<sup>1</sup>, 町田洋<sup>2</sup>, 則永行庸<sup>2</sup>, ○金久保光央<sup>1</sup> (産総研<sup>1</sup>, 名大院工<sup>2</sup>)
- P30 ポリオール水溶液ガラスの溶媒状態の安定性と溶質の OH 基との関係  
○鈴木芳治 (物材機構)
- P31 1 ~ 4 GPa 圧力下の塩化カリウム水溶液中におけるイオンの水和・会合・溶媒の構造  
曾我良枝<sup>1</sup>, 吉田亨次<sup>1</sup>, ○山口敏男<sup>1</sup>, 服部高典<sup>2</sup> (福岡大理<sup>1</sup>, JAEA-JPARC Center<sup>2</sup>)
- P32 高温 NMR と MD シミュレーションによる超臨界条件下の水—有機溶媒混合系の並進拡散に対する水素結合の影響の解析  
○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>)
- P33 ラマン分光と軟 X 線分光による逆ミセル中の水の状態観測  
○植野一輝<sup>1,2</sup>, 大浦正樹<sup>2</sup>, 堀川裕加<sup>1,2</sup> (山口大院・理<sup>1</sup>, 理研 RSC<sup>2</sup>)
- P34 ☆ 下部臨界点をもつ混合溶媒の濃度ゆらぎに起因する J 会合体の協同性解離過程の解明  
○原田美緒, ハッ橋知幸, 迫田憲治 (阪市大院理)
- P35 ☆ NMR から見たテトラアルキルアンモニウム塩の水溶液中での包接化合物の生成とダイナミクス  
○黒田美優, 益田祐一 (お茶大院理)
- P36 ☆ 核磁気共鳴法から見た有機溶媒中の水の水素結合ネットワーク形成とそのダイナミクス  
○平尾結生, 岩田真理子, 益田祐一 (お茶大院理)
- P37 ☆ 塩化リチウム水溶液の低振動ラマン散乱  
○大村拓也<sup>1</sup>, 天羽優子<sup>2</sup>, 亀田恭男<sup>2</sup>, 臼杵毅<sup>2</sup> (山形大院理工<sup>1</sup> 山形大理<sup>2</sup>)
- P38 ☆ <sup>6</sup>Li/<sup>7</sup>Li 同位体置換法中性子回折による濃厚 LiTfSA-アセトニトリル溶液中における Li<sup>+</sup>の溶媒和構造の解析  
○佐治葵<sup>1</sup>, 亀田恭男<sup>1</sup>, 天羽優子<sup>1</sup>, 臼杵毅<sup>1</sup>, 梅林泰宏<sup>2</sup>, 池田一貴<sup>3</sup>, 大友季哉<sup>3</sup> (山形大理<sup>1</sup>, 新潟大理<sup>2</sup>, 高工研<sup>3</sup>)
- P39 1 次光学過程と 2 次光学過程の相補性の破れ：1,3-プロパンジオールの温度依存性  
○天羽優子<sup>1</sup>, 藤井有平<sup>1</sup>, 梅林泰宏<sup>2</sup>, 亀田恭男<sup>1</sup>, 臼杵毅<sup>1</sup> (山形大学理<sup>1</sup>, 新潟大学理<sup>2</sup>)
- P40 環状フッ素置換炭化水素+アルコール, ケトン系の等圧気液平衡による G<sup>E</sup>  
○谷本知樹<sup>1</sup>, 小川英生<sup>2</sup>, 木村二三夫<sup>2</sup> (東電大院理工研<sup>1</sup>, 東電大理工<sup>2</sup>)
- P41 フェムト秒ラマン誘起カー効果分光でみる水溶液中のヨウ素イオンの状態  
○城田秀明<sup>1</sup>, 川本裕之<sup>2</sup>, 浅倉聡<sup>2,3,4</sup> (千葉大院理<sup>1</sup>, 伊勢化学工業株式会社<sup>2</sup>, 千葉ヨウ素資源イノベーションセンター<sup>3</sup>, 山形大院理工<sup>4</sup>)
- P42 ☆ メチルセルロース水溶液のゲル化の背景にある LCST 型相分離と結晶化  
○中町敦生<sup>1</sup>, 柳瀬慶一<sup>2</sup>, 佐藤高彰<sup>1</sup> (信州大院織<sup>1</sup>, 名古屋大院工<sup>2</sup>)
- P43 ☆ イオン性球状ミセル水溶液とマルチラメラベシクル分散液中での対イオン揺らぎ  
○小倉大祈<sup>1</sup>, 小倉卓<sup>2</sup>, Richard Buchner<sup>3</sup>, 佐藤高彰<sup>1</sup> (信大繊維<sup>1</sup>, (株)コスモステクニカルセンター<sup>2</sup>, レーゲンスブルグ大理論化学物理<sup>3</sup>)

- P44 ☆ リン脂質/非イオン性界面活性剤複合系が形成するバイセルの静的構造及び溶液中の対イオンダイナミクス  
○平林未希, 佐藤高彰, (信州大繊維)
- P45 ☆ アミノ酸およびジペプチド水溶液中へのフッ化アルコール添加にともなう溶媒和構造の変化  
○藤貴弘<sup>1</sup>, 水崎弘章<sup>2</sup>, 村井麻美<sup>2</sup>, 松上優<sup>3</sup>, 高椋利幸<sup>2</sup> (佐賀大院工学系<sup>1</sup>, 佐賀大理工<sup>2</sup>, 熊本高専<sup>3</sup>)
- P46 ☆ 枯渇相互作用によるバクテリオロドプシン結晶化の検討  
○須田慶樹<sup>1</sup>, 末松安由美<sup>2</sup>, 秋山良<sup>1</sup> (九州大学理学府<sup>1</sup>, 九産大<sup>2</sup>)
- P47 ☆ アミノ酸混合による水の近赤外吸収スペクトルの変化  
○伊藤勝利<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>, 東農工大連農<sup>2</sup>)
- P48 ☆ ラマン顕微鏡を用いた細胞周期に伴う細胞内生体分子の密度変化の観測  
○柴田大輝<sup>1</sup>, 梶本真司<sup>1,2</sup>, 中林孝和<sup>1,2</sup> (東北大薬<sup>1</sup>, 東北大院薬<sup>2</sup>)
- P49 ☆ CpHMD/3DRISM 法によるタンパク質中アミノ酸 pK<sub>a</sub> の理論的予測手法の開発  
○藤木 涼<sup>1</sup>, 伊藤 暁<sup>2</sup>, 奥村 久士<sup>2</sup>, 吉田 紀生<sup>1</sup>, 中野 晴之<sup>1</sup> (九州大学<sup>1</sup>, 分子科学研究所<sup>2</sup>)
- P50 ☆ 鎖状分子の貴ガス溶液におけるストークス・アインシュタインの関係  
○村上智央<sup>1</sup>, 石井良樹<sup>2</sup>, 大鳥範和<sup>3</sup> (新潟大院自然<sup>1</sup>, 大阪大院基礎工<sup>2</sup>, 新潟大理<sup>3</sup>)
- P51 ☆ 過冷却 LJ 液体の輸送係数に対する引力と斥力の効果  
○眞谷健汰<sup>1</sup>, 内山輝<sup>1</sup>, 石井良樹<sup>2</sup>, 大鳥範和<sup>3</sup> (新潟大院自然<sup>1</sup>, 阪大院基礎工<sup>2</sup>, 新潟大理<sup>3</sup>)
- P52 ☆ MD 計算による直線型分子に対する Stokes-Einstein-Debye の関係の定式化  
○近藤優多<sup>1</sup>, 大鳥範和<sup>2</sup>, 石井良樹<sup>3</sup> (新潟大院自然<sup>1</sup>, 新潟大理<sup>2</sup>, 阪大院基礎工<sup>3</sup>)
- P53 ☆ MD シミュレーションを用いた PVA ハイドロゲルの分子レベル解析  
○大隅理佐, 山田一雄, 松林伸幸 (阪大院基礎工<sup>1</sup>)
- P54 ☆ 溶媒効果を取り入れた固液界面における物理吸着の分子動力学シミュレーション解析 : 速度論と平衡論  
○山本直樹, 松林伸幸 (阪大院基礎工)
- P55 ☆ 小ペプチドのスタック構造形成に対する共溶媒効果の相互作用解析  
○諏訪原一輝, 松林信幸 (大阪大基礎工)
- P56 ☆ MD 計算による液体ベンゼンの輸送的性質と Stokes-Einstein の関係  
○信田民生<sup>1</sup>, 大鳥範和<sup>2</sup>, 石井良樹<sup>3</sup> (新潟大院自然<sup>1</sup>, 新潟大理<sup>2</sup>, 阪大院基礎工<sup>3</sup>)
- P57 ☆ 溶媒の量子効果を非経験的に取り込んだ金属イオンの溶媒和ダイナミクス  
○山田真行<sup>1</sup>, 西本佳央<sup>2</sup>, 清水謙多郎<sup>1,3</sup>, 渡邊宙志<sup>4</sup> (東大情理<sup>1</sup>, 京大福井セ<sup>2</sup>, 東大院農<sup>3</sup>, 慶應大理工<sup>4</sup>)
- P58 ミセルが多数分散する溶液中における溶質分子の拡散  
○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>)
- P59 ☆ 液体の積分方程式理論における溶媒和自由エネルギー表式に対する分子配向の影響  
○谷本勝一<sup>1</sup>, 吉田紀生<sup>1</sup>, 山口毅<sup>2</sup>, 天能精一郎<sup>3</sup>, 中野晴之<sup>1</sup> (九大院理<sup>1</sup>, 名大院工<sup>2</sup>, 神大システム情報<sup>3</sup>)
- P60 RISM 理論における二原子分子流体の熱力学量の精度に関する研究  
○宮田竜彦, 坂本萌, 佐々木康 (愛媛大学理学部)

- P61 ☆ 多孔性ポリマーへの選択的吸蔵における van der Waals 描像  
○大久保堅三郎<sup>1</sup>, 大島章生<sup>1</sup>, 千葉文野<sup>2</sup>, 秋山良<sup>1</sup> (九州大理<sup>1</sup>, 慶応大理工<sup>2</sup>)
- P62 ☆ 積分方程式理論を用いた 2 原子分子の溶媒和自由エネルギーの計算精度  
○LEUNG JACKIE, 木内竜大, 宮田竜彦 (愛媛大理)
- P63 ☆ A QM/MM Metadynamics study of the DNA Hydrolysis by EcoRV Subsequent to Scissile-Phosphate Twist  
○大西到<sup>1</sup>, 吉田紀生<sup>2</sup>, 平田文男<sup>3</sup>, 入佐正幸<sup>1</sup> (九工大院情報工<sup>1</sup>, 九大院理<sup>2</sup>, 豊田理研・分子研<sup>3</sup>)
- P64 ☆ 接触距離に非加算性を示す粒子の液中での基板近傍における数密度分布：積分方程式による理論計算  
○古川暁之<sup>1</sup>, 天野健一<sup>2</sup>, 橋本康汰<sup>1</sup>, 西直哉<sup>1</sup>, 作花哲夫<sup>1</sup> (京大院工<sup>1</sup>, 名城大院農<sup>2</sup>)
- P65 溶媒分極を考慮した 3D-RISM 理論における誘電率と屈折率  
○山口毅<sup>1</sup>, 吉田紀生<sup>2</sup> (名大院工<sup>1</sup>, 九大院理<sup>2</sup>)
- P66 3D-RISM 理論を応用した解析的な構造揺らぎの予測法の開発  
○杉田昌岳<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>)
- P67 電子移動反応への応用を目指した Solvent-polarizable 3D-RISM の開発  
○吉田紀生<sup>1</sup>, 山口毅<sup>2</sup> (九大院理<sup>1</sup>, 名大院工<sup>2</sup>)
- P68 アクトミオシンの力発生機構 – 水和測定と高電場下の水和自由エネルギーから –  
○鈴木 誠<sup>1</sup>, 最上譲二<sup>2</sup>, 松林伸幸<sup>3</sup> (東北大多元研<sup>1</sup>, 東北大工<sup>2</sup>, 大阪大基礎工<sup>3</sup>)