

ポスター発表プログラム

奇数番号：10月28日（木） 13：20～14：40

偶数番号：10月29日（金） 9：50～11：10

☆印：ポスター賞選考対象

- P01☆** 水溶液中におけるアルギニンやその塩の CO₂ 化学吸収特性
(佐賀大学) 土井 雅斗、高椋 利幸、梅木 辰也
- P02☆** Lysozyme および β -Lactoglobulin の構造変化に対するフッ化アルコールと脂肪族アルコールの効果
(¹佐賀大院先進、²佐賀大院工学系、³同志社大生命医、⁴総合科学研究機構、⁵佐賀大理工) 佐々木 隆¹、原口 知也²、貞包 浩一朗³、岩瀬 裕希⁴、高椋 利幸⁵
- P03☆** 溶媒のエントロピー効果に着目した環状分子による分子認識現象に関する研究
(九大院理) 松尾 美香、秋山 良
- P04☆** プルシアンブルー類似体のセシウムイオン親和性に関する格子サイズ依存性の理論的検討
(¹九大院理、²NANOTEC、³カセサート大ナノ、⁴東大院工) イデユン¹、Nirun Ruankaew²、Saree Phongphananee³、中山 哲⁴、吉田 紀生¹、中野 晴之¹
- P05☆** 空気中に浮揚させた単一液滴の構造と性質 (2) 硫酸マグネシウム水溶液滴
(¹福岡大理、²広島大院先進理工、³JASRI) ○松尾 俊一郎¹、山口 敏男¹、中里 駿太郎¹、秦 菜月¹、吉田 亨次¹、栗崎 敏¹、石坂 昌司²、尾原 幸治³
- P06☆** Poly(N-isopropylacrylamide-co-N,N-diethylacrylamide)水溶液の相分離挙動に対する隣接基間相互作用の影響
(¹福岡大院理、²福岡大理) 池田 篤史¹、真田 雄介²、勝本 之晶²
- P07☆** 1-Octyl-3-methylimidazolium カチオンを有するイオン液体／イオン結晶混合系の相転移挙動
(¹福岡大院理、²福岡大理) 三浦 千尋¹、渡辺 啓介²、勝本 之晶²
- P08☆** EcoRV による DNA 加水分解におけるプロトン移動の量子化学計算による観察
(¹九工大院情報工、²九大院理、³分子研) 三松 美香¹、大西 到¹、吉田 紀生²、平田 文男³、入佐 正幸¹
- P09☆** DNA 切断直後における EcoRV-DNA 複合体中のカチオン近傍溶媒構造の計算
(¹九工大院情報工、²九大院理、³分子研) 長野 怜也¹、大西 到¹、吉田 紀生²、平田 文男³、入佐 正幸¹
- P10** 超臨界条件下の水一有機溶媒混合系の並進拡散と回転に対する溶媒和殻の構造と寿命の影響
(徳島大院理工) 吉田 健、吉岡 春香
- P11☆** フェムト秒過渡吸収分光法による 9-アリアルカルバゾールの分子内電荷移動ダイナミクス
(¹神戸大院理、²神戸大分子フォト、³国立台湾大凝態科学研究中心) 高本 和也¹、植野 嘉文¹、太田 薫^{1,2}、林 倫年³、秋本 誠志¹、松原 亮介¹、富永 圭介^{1,2}
- P12☆** 広帯域分光測定による温度応答性高分子の水和ダイナミクス
(¹神戸大院理、²神戸大分子フォト、³新居浜高専生物応用化学) 井岡 光¹、藤井 悠生¹、Lou Serafin Lozada¹、橋本 千尋³、太田 薫^{1,2}、富永 圭介^{1,2}

- P13☆** 全原子 MD による添加剤存在下での結晶成長過程の解析
(¹ 阪大院基礎工、² 兵庫県大情) 田中 泉利¹、笠原 健人¹、石井 良樹²、松林 伸幸¹
- P14☆** 分子動力学シミュレーションによる 2 成分ハイドロゲル系の全原子解析
(阪大院基礎工) 向井 陵、山田 一雄、松林 伸幸
- P15☆** 自由エネルギー解析によるガン関連タンパク質 MDM2 のリガンド結合能に対する共溶媒効果の評価
(阪大院基礎工) 古宮 直樹、笠原 健人、松林 伸幸
- P16☆** 再帰確率理論に基づくタンパクーリガンド結合過程の動力学解析
(阪大院基礎工) 昌山 廉、沖田 和也、笠原 健人、松林 伸幸
- P17☆** ミクロンサイズの逆ミセルにおける PNIPAM 水溶液の相分離挙動
(阪市大院理) 住本 明駿、八ッ橋 知幸、迫田 憲治
- P18☆** 時間分解分光測定によるベンゾ[b]ホスホリウム塩の分子会合体形成ダイナミクスの解明
(¹ 同志社大理工、² 新潟大院自然、³ 同志社大院理工) 藤井 香里¹、松本 篤郎¹、工藤 裕太²、村山 仁愛²、俣野 善博²、木村 佳文^{1,3}
- P19☆** アルキル硫酸イオン液体中での光励起プロトン移動反応における新規コンプレックスの形成
(¹ 同志社大理工、² 東工大院物質理工) 木下 絵里加¹、野村 庄之介¹、春名 開友²、藤井 香里¹、遠藤 太佳嗣¹、木村 佳文¹
- P20** 逆ミセルに閉じ込められた水の水素結合状態：軟 X 線発光分光、小角中性子散乱、NMR による検証
(¹ 同志社大学生命、² 山口大学院創成科学、³ 理研 RSC) 貞包 浩一朗¹、堀川 裕加²、大浦 正樹³
- P21☆** 密度差 0 の水-有機溶媒二元系混合物中における単分散液滴の安定機構の解明
(同志社大学生命) 後藤 篤子、荒木田 怜那、貞包 浩一朗
- P22☆** 密度差 0 近傍の水と油の混合：密度変化に伴う混合状態のサブクリティカル分岐
(同志社大学生命) 荒木田 怜那、片山 瑞月、後藤 篤子、貞包 浩一朗
- P23☆** 界面活性剤ミセルの選択的溶媒和が誘起する液液相分離：NMR を活用した相分離メカニズムの解明
(同志社大学生命) 青山 航大、貞包 浩一朗、剣持 貴弘
- P24☆** 3D-RISM 理論による金属-水界面の溶媒和構造と吸着自由エネルギーに関する研究
(¹ 京大院工、² 京大 ESICB、³ 京大 FIFC) 高松 晃彦¹、福田 良一²、東 雅大^{1,2}、佐藤 啓文^{1,2,3}
- P25☆** ベンゼンのニトロ化反応における溶媒和と Wheland 中間体の価電子構造
(¹ 京大院工、² 京大 ESICB、³ 京大 FIFC) 中谷 佳萌¹、東 雅大^{1,2}、佐藤 啓文^{1,2,3}
- P26☆** 新規 QM/MM 法による電極界面の特異な溶媒構造下での酸化還元分子の電子状態計算
(¹ 京大院工、² 京大 ESICB、³ 京大 FIFC) 高橋 健¹、中農 浩史^{1,2}、佐藤 啓文^{1,2,3}
- P27☆** Photoactive Yellow Protein の光サイクル反応とダイナミクスに対する水和イオン液体の効果
(¹ 同志社大理工、² Rice University、³ 同志社大院理工、⁴ 京大院理) ○畠中美雨^{1,4}、梅崎詩菜^{1,2}、小野寺香菜³、水谷浩人³、金穂香⁴、中曽根祐介⁴、寺嶋正秀⁴、木村佳文^{1,3}
- P28☆** ミニタンパク質 Trp-cage の温度・圧力に対する構造安定性に関する FTIR 研究
(立命館大生命) 大池 裕登、今村 比呂志、加藤 稔
- P29☆** タンパク質の構造変化における動的揺らぎの分子論的解析
(分子研) 松村 祥宏、斉藤 真司

- P30☆** アルミン酸ストロンチウム系蓄光化合物の液相合成 -水熱法・界面活性剤鑄型法によるモルフォロジー制御-
(¹名城大理工、²東海大理、³分子研、⁴物材機構、⁵福岡大理) ○世良 基史¹、山本 実佳¹、富田 恒之²、谷原 佑輔³、伊澤 誠一郎³、平本 昌宏³、中西 貴之⁴、吉田 亨次⁵、西山 桂¹
- P31☆** スルホラン系高濃度 Li 塩電解液における Li イオン拡散機構
(¹名大院工、²横浜国大先端科学高等研究院、³横浜国大院工) 池田 周平¹、都築誠二²、上野和英³、渡邊正義²、篠田渉¹
- P32☆** ペプチドのアミド I モードに関わる汎用的な静電相互作用モデルの構築に向けた水素結合会合体などの諸性質の解析
(静大院工) 三宅 雅輝、鳥居 肇
- P33☆** 二原子分子液体の輸送係数の分子形状依存性
(¹新潟大院自然、²兵庫大院情報、³新潟大理) 阿部 俊太¹、石井 良樹²、大鳥 範和³
- P34☆** グライム系アルミニウム電解液中における $Al^{3+}-Cl$ 錯体生成反応に関する分子軌道計算および振動分光測定
(¹新潟大学、²山口大学、³京都大学) 韓 智海¹、永島 結¹、川名 結衣¹、弓削 眞子¹、藤井 健太²、北田 敦³、邑瀬 邦明³、梅林 泰宏¹
- P35☆** スルホラン系超濃厚リチウム塩溶液の双極子再配向ダイナミクスとスペシエーション
(¹新潟大院自然、²新潟大理、³横浜国大 IAS、⁴横浜国大院工、⁵東京理科大理工) 弓削 眞子¹、荒井 奈々¹、佐久間 有紀²、都築 誠二³、渡邊 正義³、上野 和英⁴、獨古 薫⁴、渡辺 日香里⁵、韓 智海²、梅林 泰宏²
- P36☆** 正極不溶型リチウム-硫黄電池の正極活物質のオペランド顕微 Raman 分光と単粒子電気化学測定
(¹新潟大院自然、²物材機構、³工学院大先進工、⁴横浜国大 IAS、⁵横浜国大院工、⁶東京理科大理工) 川名 結衣¹、荒井 奈々¹、西川 慶²、関 志朗³、都築 誠二⁴、上野 和英⁵、獨古 薫⁵、渡邊 正義⁴、渡辺 日香里⁶、韓 智海¹、梅林 泰宏¹
- P37☆** イオン液体 1-butyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate と水の混合液の熱力学的性質
(¹創価大学理工学部、²創価大学大学院理工学研究科、³防衛大学校応用化学科) 金子 和義¹、北脇 恭平²、森 智祥³、吉村 幸浩³、清水 昭夫¹
- P38** 分子動力学シミュレーションに基づいた環状ペプチドの膜透過率の大規模予測
(東工大) 杉田 昌岳、杉山 聡、藤江 拓哉、吉川 寧、柳澤 溪甫、大上 雅史、秋山 泰
- P39☆** 機械学習での利用を目指した大規模溶媒和自由エネルギーデータセットの理論的構築
(東京大学) 中田 倅暉、横川 大輔
- P40** 高分子 P4MP1 フィルムの各種アルカンに対する選択的吸蔵と透過特性
(慶應義塾大学理工) 千葉 文野、多田 健偉、真田 雄介、勝本 之晶、秋山 良
- P41☆** 次世代二次電池電解質に資する新規ホウ酸アニオン系イオン液体の物性と電気化学評価
(¹東京理科大学大学院、²新潟大学大学院) 田端 憂也¹、渡辺 日香里¹、韓 智海²、四反田 功¹、梅林 泰宏²、板垣 昌幸¹
- P42** 自由電子の古典的運動を組み込んだ金属力場モデルの開発：水溶液中ナノ粒子の光吸収とエネルギー緩和
(筑波大・計セ) 山田 篤志