

第 38 回溶液化学シンポジウム

口頭発表プログラム

発表会場： かるぽーと 大ホール

(一般 講演：15分 質疑応答：4分 演者交代：1分)

10月21日(水)

口頭発表1 (10:00~11:00) 座長：松林 伸幸 (阪大基礎工、京大 ESICB)

- O01 LJ系の動径分布関数における立ち上がり領域の重要性：OZ理論から求まる熱力学量の補正へ向けて
○宮田竜彦，江波戸佑来 (愛媛大院理工)
- O02 核量子効果を取り入れた凝縮系水素の量子分子動力学法開発と液体水素における分子内・分子間ダイナミクスの物理化学的考察
○金賢得^{1,2} (京大院理¹, JST さきがけ²)
- O03 一酸化炭素の回転ダイナミクスに対する溶媒効果—イオン液体はどのくらいアルカン的か？
○八坂能郎，木村佳文 (同志社理工)

口頭発表2 (11:10~12:10) 座長：宮田 竜彦 (愛媛大院理工)

- O04 分子動力学シミュレーションによる荷電コロイド分散系の構造(v2)
○片岡洋右 (法政大生命)
- O05 液体における水の回転由来のテラヘルツ強度と水素結合構造の関係の解析
○鳥居 肇 (静岡大教育)
- O06 MD/DFT 自己無撞着計算法に基づくイオン液体の有効電荷の決定と構造・物性の解析
○石塚良介^{1,2}，松林伸幸^{1,2} (阪大基礎工¹，京大 ESICB²)

口頭発表3 (13:20~14:40) 座長：鳥居 肇 (静岡大教育)

- O07 凍結水溶液で起こる種々の現象
○岡田哲男 (東工大院理工)
- O08 アニオン溶解による水の近赤外吸収スペクトルの変化
内田考哉¹，勝さやか²，吉村季織³，○高柳正夫³ (東農工大院農¹，東農工大農²，東農工大院連農³)
- O09 二次元赤外分光法および分子動力学シミュレーションによる水溶液中における非イオン性振動プローブ分子の振動数揺らぎに関する研究
○奥田 真紀¹，東 雅大²，太田 薫³，斉藤 真司⁴，富永 圭介^{1,3} (神戸大院理¹，琉球大理海洋自然科学²，神戸大分子フォトサイエンス研究センター³，分子研⁴)

- O10 中性子回折実験と MD シミュレーションによるイミダゾール - 酢酸等量混合液体の液体構造とダイナミクス
○渡辺日香里¹, 梅木辰也², 土井寛之¹, 齊藤蒼思¹, 高椋利幸², 亀田恭男³, 梅林泰宏¹ (新潟大院自然¹, 佐賀大院工², 山形大理³)

受賞講演・奨励賞 (14:50~15:20) 座長: 藤原 照文 (広島大院理)
環境低負荷型技術の高度化を指向した溶液中の分子間相互作用に関する研究
梅木辰也 (佐賀大院工)

口頭発表 4 (15:30~16:50) 座長: 梅林 泰宏 (新潟大院自然)

- O11 電子状態変化を考慮できる交換反発ポテンシャルの作成
○横川大輔¹ (WPI-ITbM¹)
- O12 均一沈殿法・ソルボサーマル法による発光希土類ナノ粒子 (粒径 < 100 nm) の粒径制御
秋田幸彦¹, 青木啓泰¹, 原田 聖¹, 富田恒之², 笹井 亮³, 上野 誠⁴, 大谷修司¹, ○西山 桂¹ (島根大教育¹, 東海大理², 島根大院総合理工³, 島根大生物資源⁴)
- O13 ポリスチレンコロイド結晶のフォトニック効果
○鈴木 炎・赤松七音・中田日花里・真野洸樹 (富山大理)
- O14 光学活性 2,2'-ジヒドロキシ-1,1'-ビナフチル溶液の混合エンタルピー
○木村隆良 (近畿大理工総研)

ポスター発表 (奇数番号) (17:00~18:20)

10月22日(木)

ポスター発表(偶数番号)(9:00~10:20)

招待講演 座長:竹崎 誠 (岡山理科大工)

招待講演1(10:20~10:50)

IL01 光ピンセットを用いた単一エアロゾル液滴の化学

○石坂昌司(広島大院理)

招待講演2(10:50~11:20)

IL02 アモルファス氷の微視的構造とカイラリティ

○松本正和, 矢ヶ崎琢磨, 田中秀樹(岡大院自然)

特別講演1(11:30~12:10) 座長:寺嶋 正秀(京大理)

S01 非線形赤外分光と広帯域分光による水溶液の動的挙動

○富永圭介(神戸大分子フォト)

口頭発表5(13:20~14:40) 座長:吉田 紀生(九大理)

O15 タンパク質の反応を誘起する揺らぎ:フォトリピン

黒井 邦巧¹, 中曽根祐介¹, 徳富 哲², ○寺嶋 正秀¹(京都大学¹, 大阪府大²)

O16 ポリペプチドの集団ダイナミクスにおける水和効果

吉田亨次¹, 山口敏男¹, 細川伸也², Alfred Q. R. Baron³(福岡大理¹, 熊本大院自然², 理研³)

O17 分子動力学計算による小児マヒウイルス感染初期過程の分子論的研究—ウイルスカプシド・レセプター間の相互作用

遠藤裕太¹, 水谷圭介¹, 小嶋秀和¹, 藤本和士¹, 山田篤志¹, 安藤嘉倫¹, 吉井範行¹, 篠田 渉¹, 中川敦史², ○岡崎 進¹(名大院工¹, 阪大蛋白研²)

O18 QM/MM-MD法を用いたハロゲン化カルシウムの水和構造と水分子に及ぼす影響についての理論化学的研究

○菅原貴弘^{1,2}, 相田美砂子^{1,2}(広島大院理¹, QuLiS²)

特別講演2(14:50~15:30) 座長:山口 敏男(福岡大理)

S02 湿式法による金クラスターの精密合成

○佃 達哉(東大院理)

口頭発表6(15:40~17:00) 座長:岡崎 進(名大院工)

O19 エレクトロスプレー反応場(フェムトリアクター)による化学反応制御

○脇坂昭弘¹, 土屋雅大², 小原ひとみ¹, 寺本慶之¹, 金賢夏¹, 井戸洋平¹, 富永健一¹, 金久保光央¹(産総研¹, 防大応化²)

- O20 特異なイオン会合と水の構造的変化
○北條正司 (高知大理)
- O21 ${}^6\text{Li}/{}^7\text{Li}$ 同位体置換法中性子回折による THF 溶液中における Li^+ の溶媒和構造
○亀田恭男¹, 天羽優子¹, 臼杵毅¹ (山形大理¹)
- O22 イミダゾリウム系イオン液体とベンゼンの混合に対する陰イオンの効果
○高椋利幸¹, 糸山ゆう¹, 梅木辰也¹, 柿沼翔平², 城田秀明² (佐賀大院工学系¹, 千葉大院融合科学²)

溶液化学研究会総会 (17 : 30~18 : 10)

懇親会 (18 : 30~20 : 30)

10月23日(金)

口頭発表7(9:00~10:20) 座長: 亀田 恭男(山形大理)

- O23 リチウム溶媒和イオン液体の安定性にイオン間相互作用が与える影響
○都築誠二¹, 篠田渉², 上野和英³, 万代俊彦⁴, 梅林泰宏⁵, 関志朗⁶, 獨古薫⁷,
渡邊正義⁷(産総研¹, 名古屋大², 山口大³, Chalmers大⁴, 新潟大⁵, 電力中研
6, 横浜国大⁷)
- O24 グライム系電解液中におけるMgイオンの溶媒和構造
○藤井健太, 木村俊貴, 吉本信子, 森田昌行(山口大院理工)
- O25 リチウム二次電池用電解質における溶媒/電解質塩・組成変化時の物性変化の詳細
調査
○関志朗¹, 芹澤信幸¹, 竹井勝仁¹, 梅林泰宏², 都築誠二³, 渡邊正義⁴(電
力中央研究所¹, 新潟大学², 産業技術総合研究所³, 横浜国立大学⁴)
- O26 ポリメタクリル酸メチル粒子の周りにおけるポリスチレン粒子の数密度分布の予
測
○天野健一, 橋本康次, 西直哉, 作花哲夫(京大院工)

口頭発表8(10:30~11:30) 座長: 吉田 健(徳島大工)

- O27 アルキルCHと水とのC-H...O形成のときNMRのケミカルシフトは $C^{\delta-}-H^{\delta+}$ へ
の分極を示す
○水野和子¹, 谷正彦²(福井大院工¹, 福井大遠赤セ²)
- O28 リアルタイムNMR測定によるL- α -およびD- β -アスパラギン酸異性体含有ペプチド
の分解速度の解析
○安岐健三, 岡村恵美子(姫路獨協大薬)
- O29 単糖類の各水酸基における水素結合形成のキャラクタリゼーション 水酸基のプ
ロトンNMRの適用
○益田祐一, 高杉成美(お茶大理)