

## 第 36 回 溶液化学シンポジウム プレシンポジウム

日時：2013 年 10 月 8 日（火）

会場：北海道大学学術交流会館

13:00~13:05 開会の挨拶

座長：下赤 卓史（京大化研）

13:05~13:45

PS01 オレイン酸・アゾベンゼン誘導体混合自己集合体の酸解離挙動が協同した巨視的な光誘起ダイナミクス

○景山 義之・池上 智則・梶 優太・宮崎 篤・武田 定（北大院理・北大院総化・北大理）

13:45~14:25

PS02 溶液およびマイクロ液滴を利用した発光性ナノカーボンの合成

○比江嶋 祐介・新田 晃平・金久保 光央・脇坂 昭弘（金沢大・産総研）

14:25~15:05

PS03 蛋白質水溶液を扱える高感度赤外分光装置の開発：酵素反応の生理条件下での測定を目指して

久保 稔（理研播磨）

15:05~15:20 休憩

座長：山口 毅（名大院工）

15:20~16:00

PS04 個々の軌道の振舞いとその集団分布の振舞いの関係～一軌道レベルでのスペクトル解析法とそれによる溶質分子と水の協同運動の抽出～

○寺本 央<sup>1</sup>・戸田 幹人<sup>2</sup>・小松崎 民樹<sup>1</sup>（<sup>1</sup>北大電子研・<sup>2</sup>奈良女大理）

16:00~16:40

PS05 凝集系における分子の励起状態に関する理論的研究

長谷川 淳也（北大触媒センター）

16:40~17:20

PS06 蛋白質の立体構造形成をめぐるエネルギー論

丸山 豊・肥後 順一・○原野 雄一（阪大蛋白研）

17:20~17:25 閉会の挨拶

# 第 36 回溶液化学シンポジウム

## 口頭発表プログラム

(講演：15分 質疑応答：4分 演者交代：1分)

口頭発表：北海道大学学術交流会館第一会議室

ポスター発表：北海道大学学術交流会館一階ホール

第1日 10月9日(水)

10:00~11:00 座長：鳥居 肇(静岡大教育)

O01 イミダゾール-酢酸当量混合液体のイオン伝導性

○土井 寛之<sup>1</sup>・齊藤 蒼思<sup>1</sup>・宮崎 琢也<sup>2</sup>・亀田 恭男<sup>3</sup>・梅林 泰宏<sup>1</sup>(<sup>1</sup>新潟大院自然・<sup>2</sup>山形大理工・<sup>3</sup>山形大理)

O02 全原子 MD による中高濃度イオン水溶液系における電気伝導度の研究

○涂 楷旻・松林 伸幸(京大化研)

O03 核磁気緩和による diphenylfulvene の分子内プロトン移動速度における溶媒効果

○益田 祐一・杉山 翠(お茶大理)

11:00~11:10 休憩・PC 接続

11:10~12:10 座長：原野 雄一(阪大蛋白研)

O04 酵素活性に及ぼす塩効果-HRP 中へムのカルボキシル基とカルシウムイオン間の化学的相互作用

○北條 正司・小林 佑海・石部 あゆみ(高知大理)

O05 拡散を伴う光誘起電子移動反応の解析と固有パラメーターの算出：ポルフィリン-キノノン系

○富永 敏弘<sup>1</sup>・Andrew Scully<sup>2</sup>・大高 泰靖<sup>1,3</sup>・竹崎 誠<sup>1</sup>(<sup>1</sup>岡山理大工・<sup>2</sup>CSIRO・<sup>3</sup>千葉科大薬)

O06 液体表面で見られるタンパク質の塩析現象(4)

○矢野 陽子<sup>1</sup>・新田 清文<sup>2</sup>・宇留賀 朋哉<sup>2</sup>(<sup>1</sup>近畿大理工・<sup>1</sup>JASRI/SPring-8)

12:10~13:20 昼休み

13:20~14:40 座長：益田 祐一(お茶大理)

O07 単一気泡とレーザーパルスの相互作用

○鈴木 炎・武田 益宗・稲 慶樹・前北 浩希(富山大理)

O08 極性・非極性混合溶媒におけるマイクロ波加熱の特徴

○鷲見 卓也・堀越 智(上智大理工)

O09 RISM-SCF-SEDD 法を用いた蛍光プローブ内での電子移動過程に関する理論的解明

○臼井 孝介<sup>1</sup>・横川 大輔<sup>1,2</sup>・イレ ステファン<sup>1,2</sup>(<sup>1</sup>名大院理・<sup>2</sup>名大トランスフォーメティブ生命分子研)

O10 エレクトロスプレーマイクロリアクターを利用した発光性ナノカーボンの合成と反応制御

○比江嶋 祐介<sup>1</sup>・新田 晃平<sup>1</sup>・金久保 光央<sup>2</sup>・脇坂 昭弘<sup>3</sup> ( <sup>1</sup>金沢大・<sup>2</sup>産総研東北・<sup>3</sup>産総研つくば)

14:40~14:50 休憩・PC 接続

#### 奨励賞受賞講演

14:50~15:20 座長：佐藤 啓文 (京大院工)

AW1 イオン液体中で特有な溶媒和の構造化学と新規ソフトマター材料開発への展開研究  
藤井 健太 (東京大学 物性研究所)

15:20~15:30 休憩・PC 接続

15:30~16:50 座長：松林 伸幸 (京大化研)

O11 水の遠赤外スペクトルの計算における温度依存性とポテンシャル関数依存性  
○鳥居 肇 (静岡大教育)

O12 水やメタノールの溶媒和が *N*-methylacetamide のアミドバンドに与える影響～  
QM/MM-MD 法によるアプローチ

○勝本 之晶<sup>1</sup>・Bojana Ginovska-Pangovska<sup>2</sup>・相田 美砂子<sup>1</sup>・Michel Dupuis<sup>2</sup> ( <sup>1</sup>広島大院理・<sup>2</sup>PNNL)

O13 アイソタクティシティの高い poly(*N*-isopropylacrylamide)の有機溶媒中での相挙動  
と微量水の赤外分光法および NMR による相関解析

○下赤 卓史<sup>1</sup>・力山 和晃<sup>2</sup>・勝本 之晶<sup>2</sup>・若井 千尋<sup>1</sup>・長谷川 健<sup>1</sup> ( <sup>1</sup>京大化研・<sup>2</sup>広島大院理)

O14 ジメチルスルホキシドの疎水性水和において観測される水の変角振動バンドの高波  
数シフト: CH $\cdots$ OH<sub>2</sub>の関与と高波数シフトの原因

○水野 和子<sup>1</sup>・玉井 良則<sup>2</sup>・炭竈 享司<sup>3</sup> ( <sup>1</sup>福井大男女共参セ・<sup>2</sup>福井大院工・<sup>3</sup>福井大医)

16:50~18:10 ポスター発表 (奇数番号)

### 第2日 10月10日 (木)

9:00~10:20 ポスター発表 (偶数番号)

#### 学術賞受賞講演

10:20~11:10 座長：山口 敏男 (福岡大理)

AW2 液体に特有なクラスター構造形成機構に関する研究  
脇坂 昭弘 (独立行政法人 産業技術総合研究所)

11:10~11:20 休憩・PC 接続

## 「平田記念シンポジウム」

11:20~11:25 記念シンポジウム開会の辞 岡崎 進 (名大院工)

### 招待講演

11:25~12:05 座長：木村 佳文 (同志社大理工)

IL01 時間分解拡散係数法で見るタンパク質反応ダイナミクス：フォトリポソム  
武田 公利<sup>1</sup>・中曾根 佑介<sup>1</sup>・直原 一徳<sup>2</sup>・徳富 哲<sup>2</sup>・寺嶋 正秀<sup>1</sup> (京大院理・<sup>2</sup>大阪府大)

12:05~13:10 昼休み

13:10~14:10 座長：梅林 泰宏 (新潟大院自然)

S01 イオン液体の構造緩和と輸送物性  
○山口 毅・中原 栄一郎・米澤 拓也・香田 忍 (名大院工)

S02 キャビテーションによるアミロイドの破壊を模した非平衡分子動力学シミュレーション  
○奥村 久士・伊藤 暁 (分子研・総研大)

S03 中性子回折による二酸化炭素吸収アミン水溶液の構造解析  
○亀田 恭男<sup>1</sup>・出口 博史<sup>2</sup>・古川 博敏<sup>2</sup>・窪田 善之<sup>2</sup>・八木 靖幸<sup>2</sup>・今井 義博<sup>2</sup>・山崎 紀子<sup>3</sup>・亘 紀子<sup>3</sup>・平田 琢也<sup>3</sup>・松林 伸幸<sup>4</sup> (<sup>1</sup>山形大理・<sup>2</sup>関西電力・<sup>3</sup>三菱重工・<sup>4</sup>京大化研)

14:10~14:20 休憩・PC 接続

### 招待講演

14:20~15:00 座長：石原 浩二 (早稲田大先進理工)

IL02 溶液理論によるソフト分子集合系の自由エネルギー解析  
松林 伸幸 (京大化研)

15:00~15:10 休憩・PC 接続

15:10~16:10 座長：木村 隆良 (近畿大理工)

S04 3D-RISM による KcsA チャンネル中のカチオン結合モード解析  
Saree Phongphanphanee<sup>1</sup>・吉田 紀生<sup>2</sup>・老木 成稔<sup>3</sup>・平田 文男<sup>4</sup> (<sup>1</sup>カセサート大・<sup>2</sup>九州大・<sup>3</sup>福井大・<sup>4</sup>立命館大)

S05 芳香族と界面活性剤が有機溶媒中で自己組織化したオルガノゲルの構造と物性  
○西山 桂<sup>1</sup>・渡邊 圭一<sup>1</sup>・佐藤 高彰<sup>2</sup>・勝本 之晶<sup>3</sup>・嘉治 寿彦<sup>4</sup>・平本 昌宏<sup>4</sup> (<sup>1</sup>島根大教育・<sup>2</sup>信州大繊維・<sup>3</sup>広大院理・<sup>4</sup>分子研)

S06 <sup>7</sup>Li, <sup>23</sup>Na NMR で解明する塩化アルカリアセトニトリル-水混合溶液の相分離  
○高椋 利幸<sup>1</sup>・原楨 宏樹<sup>1</sup>・下村 拓也<sup>2</sup>・梅木 辰也<sup>1</sup> (<sup>1</sup>佐賀大院工・<sup>2</sup>日大工)

16:10~16:20 休憩・PC 接続

## 招待講演

16:20~17:00 座長：岡崎 進（名大院工）

IL03 液体中の化学、化学における液体論

平田 文男（立命館大生命科学）

17:00~17:05 記念シンポジウム閉会の辞 寺嶋 正秀（京大理）

17:10~17:50 溶液化学研究会総会

18:00~20:00 懇親会（北海道大学百年記念会館）

## 第3日 10月11日（金）

9:00~10:00 座長：横川 大輔（名大トランスフォーマティブ生命分子研）

O15 塩化マグネシウム水溶液と塩化カルシウム水溶液の熱力学的性質について（3）

澁江 靖弘（兵庫教育大）

O16 1-ブチル-3-メチルイミダゾリウムイオン液体中における  $\text{Cu}^{2+}$ -クロロ錯生成定数

○神崎 亮・岸下 真理子・児玉谷 仁・富安 卓滋（鹿児島大院理工）

O17 分子動力学シミュレーションを用いた SDS ミセルの会合過程における会合体-会合体間自由エネルギープロファイル計算

○河田 真治<sup>1</sup>・藤本 和士<sup>2</sup>・吉井 範行<sup>3</sup>・岡崎 進<sup>1</sup>（<sup>1</sup>名大院工・<sup>2</sup>立命館大薬・<sup>3</sup>名大院工計算セ）

10:00~10:10 休憩・PC 接続

10:10~11:10 座長：吉田 享次（福岡大理）

O18 カチオンと溶媒の相互作用における軌道間相互作用の寄与

○都築 誠二・内丸 忠文（産総研ナノシステム）

O19 ジドデシルジメチルアンモニウムハロゲン化物の会合体形成における対イオンの効果

○竹崎 誠・富永 敏弘（岡山理大工）

O20 多角入射減衰全反射遠紫外分光法によるアルミナ表面吸着水とバルク水の第一電子遷移の検討

○後藤 剛喜<sup>1</sup>・池羽田 晶文<sup>2</sup>・森澤 勇介<sup>3</sup>・尾崎 幸洋<sup>1</sup>（<sup>1</sup>関学大理工・<sup>2</sup>農研機構食総研・<sup>3</sup>近畿大理工）

11:10~11:20 休憩・PC 接続

11:20~12:40 座長：勝本 之晶（広島大）

O21 イオン液体中における多分岐高分子ゲル化反応の反応速度論

○橋本 慧・西 健吾・藤井 健太・柴山 充弘（東大物性研）

O22 COSMO 法によるイオン液体を含む溶液の電離度の推定と色素増感太陽電池への応用

○玉木 浩一・川田 健太郎（メルク株式会社）

- O23 イオン液体の静的・輸送的物性、及び二成分混合時の特性把握  
○関 志朗<sup>1</sup>・芹澤 信幸<sup>1</sup>・小野 新平<sup>1</sup>・竹井 勝仁<sup>1</sup>・都築 誠二<sup>2</sup>・早水 紀久子<sup>2</sup>・  
土井 寛之<sup>3</sup>・梅林 泰宏<sup>3</sup> (1電力中研・2産総研・3新潟大院自然)
- O24 イオン液体中での溶媒和の不均一性の励起状態プロトン移動反応に及ぼす効果  
須田 佳代<sup>1</sup>・早木 清吾<sup>1</sup>・佐藤 啓文<sup>2</sup>・寺嶋 正秀<sup>2</sup>・○木村 佳文<sup>3</sup> (1京大院理・2  
京大院工・3同志社大理工)

## 第 36 回溶液化学シンポジウム

### ポスター発表プログラム

奇数番号：10月9日（水）16:50~18:10

偶数番号：10月10日（木）9:00~10:20

☆印：ポスター賞選考対象

- P01☆ アセトニトリル-水混合溶媒中での 1,3-Butanediol の分子内水素結合形成によるコンフォメーション変化  
○日隈 康仁・梅木 辰也・高椋 利幸（佐賀大院工）
- P02☆ 近赤外分光法を用いたイオンによる水の水素結合ネットワークの変化の追跡  
○内田 考哉<sup>1</sup>・吉村 季織<sup>2</sup>・高柳 正夫<sup>2</sup>（<sup>1</sup>東京農工大農・<sup>2</sup>東京農工大学院連合農学研）
- P03☆ 混合アミノ酸イオン液体と水の相挙動に及ぼす脱水和の効果  
○税田 祥平<sup>1,2</sup>・大野 弘幸<sup>1,2</sup>（<sup>1</sup>東京農工大・<sup>2</sup>機能イオン液体研究拠点）
- P04☆ イオン液体-分子性液体混合溶液中における遷移金属イオンの溶媒和構造  
○保家 宇宙<sup>1</sup>・山田 泰教<sup>1</sup>・下村 拓也<sup>2</sup>・梅木 辰也<sup>1</sup>・高椋 利幸<sup>1</sup>（<sup>1</sup>佐賀大院工・<sup>2</sup>日大工）
- P05☆ 核磁気緩和法によるシッフ塩基におけるプロトン移動に対する溶媒効果  
○松村 有希・益田 祐一（お茶大院理）
- P06 硝酸ランタノイド(III)-中性ジアミド配位子錯体中における硝酸イオンの配位状態の解析  
○奥村 森<sup>1</sup>・川崎 武志<sup>2</sup>・塚原 剛彦<sup>2</sup>・池田 泰久<sup>2</sup>（<sup>1</sup>東工大院理工・<sup>2</sup>東工大原子炉研）
- P07☆ X線回折による水溶液中における ATP および ADP 分子内コンフォメーションの解析  
○宮崎 琢也<sup>1</sup>・亀田 恭男<sup>2</sup>・梅林 泰宏<sup>3</sup>・土井 寛之<sup>3</sup>・天羽 優子<sup>2</sup>・臼杵 毅<sup>2</sup>（<sup>1</sup>山形大理工・<sup>2</sup>山形大理・<sup>3</sup>新潟大院自然）
- P08☆ 水溶液中における 1,4-dioxane のコンフォメーション:ラマン分光法と分子動力学計算を用いた研究  
○和田 竜一<sup>1</sup>・藤本 和士<sup>2</sup>・加藤 稔<sup>1,2</sup>（立命館大院理工・<sup>2</sup>立命館大薬）
- P09☆ 様々な溶媒中におけるキラルフェンコンの相互作用について  
○富樫 平・神山 匡・藤澤 雅夫・木村 隆良（近畿大理工）
- P10☆ リエントラントな同符号巨大分子間実効引力の発生機構  
○藤原 慎吾・吉森 明・秋山 良（九大院理）
- P11☆ ナフトール類またはフェノール類が自己組織化したオルガノゲルの構造と発光材料への展開  
○勝部 翔太郎<sup>1</sup>・勝本 之晶<sup>2</sup>・嘉治 寿彦<sup>3</sup>・平本 昌宏<sup>3</sup>・西山 桂<sup>4</sup>（<sup>1</sup>島根大院教育・<sup>2</sup>広大院理・<sup>3</sup>分子研・<sup>4</sup>島根大教育）

- P12☆ 発光希土類ナノ構造体の生成過程：水相での界面活性剤鑄型法と水熱法との比較  
○秋田 幸彦<sup>1</sup>・富田 恒之<sup>2</sup>・西山 桂<sup>3</sup> (1島根大院教育・2東海大理・3島根大教育)
- P13☆ 長鎖有機化合物混合物の固液相転移  
○嶋村 恵里<sup>1</sup>・木村 二三夫<sup>2</sup>・小川 英生<sup>1</sup> (1東電大院理工・2東電大理工)
- P14 Benzoxaborole と D-ソルビトールの反応に関する速度論的研究  
○田中 康揮<sup>1</sup>・田口 隆士<sup>1</sup>・岡本 拓也<sup>1</sup>・田中 亜純<sup>1</sup>・菅谷 知明<sup>1</sup>・岩月 聡史<sup>2</sup>・稲毛 正彦<sup>3</sup>・高木 秀夫<sup>4</sup>・小谷 明<sup>5</sup>・石原 浩二<sup>1</sup> (1早大先進理工・2甲南大理工・3愛教大・4名大物国センター・5金沢大薬)
- P15 フェニルボロン酸誘導体の単糖類に対する反応性に関する速度論的研究  
○岡本 拓也<sup>1</sup>・田中 亜純<sup>1</sup>・菅谷 知明<sup>1</sup>・岩月 聡史<sup>2</sup>・稲毛 正彦<sup>3</sup>・高木 秀夫<sup>4</sup>・小谷 明<sup>5</sup>・石原 浩二<sup>1</sup> (1早大先進理工・2甲南大理工・3愛教大・4名大物国センター・5金沢大薬)
- P16 液体ベンゼンの集団ダイナミクス  
○吉田 亨次<sup>1</sup>・福山 菜美<sup>1</sup>・山口 敏男<sup>1</sup>・細川 伸也<sup>2</sup>・内山 裕士<sup>3</sup>・筒井 智嗣<sup>4</sup>・A.Q.R. バロン<sup>3,4</sup> (1福岡大理・2熊本大院自然・3JASRI/Spring-8・4理研)
- P17☆ リモネン+アルコールの 2 成分系における熱力学的性質  
○小菅 友理・神山 匡・藤澤 雅夫・木村 隆良 (近畿大理工)
- P18☆ FAMSO+アルコール系における熱力学的研究  
○高橋 雅<sup>1</sup>・山口 淳<sup>1</sup>・神山 匡<sup>1</sup>・藤澤 雅夫<sup>1</sup>・脇坂 昭弘<sup>2</sup>・木村 隆良<sup>1</sup> (1近畿大理工・2産総研)
- P19 エチレングリコールエーテル中のハイドロフルオロエーテルの部分モル体積と部分モル断熱圧縮に及ぼす分子極性の効果  
○稲垣 和也<sup>1</sup>・南朴木 孝至<sup>2</sup>・小川 英生<sup>2</sup> (1東電大院理工・2東電大理工)
- P20☆ 動的構造因子に基づく単純液体の熱物性評価  
○石井 良樹<sup>1</sup>・末政 直人<sup>1</sup>・佐藤 圭介<sup>1</sup>・大鳥 範和<sup>2</sup>・M. Salanne<sup>3</sup>・P. A. Madden<sup>4</sup>  
(1新潟大院自然・2新潟大理・3パリ第 6 大学・4オックスフォード大学)
- P21☆ 塩素置換メタン+エーテル系の二成分溶液の熱力学量に及ぼす分子極性の考察  
○高橋 勇気<sup>1</sup>・木村 二三夫<sup>2</sup>・小川 英生<sup>1</sup> (1東電大院理工・2東電大理工)
- P22☆ 親水性-疎水性界面をもつメソ細孔物質中に閉じ込めた水の低温挙動  
○浦部 俊雄<sup>1</sup>・福島 由利佳<sup>1</sup>・伊藤 華苗<sup>1</sup>・吉田 亨次<sup>1</sup>・稲垣 伸二<sup>2</sup>・Fouquet Peter<sup>2</sup>・Bellissent-Funel Marie-Claire<sup>4</sup>・山口 敏男<sup>1</sup> (1福岡大理・2豊田中研・3ラウエ・ランジュバン研究所・4レオン・ブリュアン研究所)
- P23 疎水性イオン液体中における 18-クラウン-6 の錯形成に及ぼす水の影響  
○梅木 辰也<sup>1</sup>・高椋 利幸<sup>1</sup>・神崎 亮<sup>2</sup>・高木 雅弥<sup>3</sup>・川井 英司<sup>3</sup>・松本 知也<sup>3</sup>・船造 俊孝<sup>3</sup> (1佐賀大院工・2鹿児島大院理工・3中央大理工)
- P24☆ プロトン性イオン液体中で発現する新規逆ミセル溶液の構造解析  
○草野 巧巳・藤井 健太・橋本 慧・柴山 充弘 (東大物性研)



- P25☆ 安息香酸に親水基を導入したアニオンを有するイオン液体の親水性の抑制  
○安藤 天志<sup>1,2</sup>・河野 雄樹<sup>1,2</sup>・大野 弘幸<sup>1,2</sup> (1東京農工大院工・2機能イオン液体研究拠点)
- P26☆ ヘキシルエチレンジアミンプロトン性イオン液体と銅(II)塩との相互作用：対イオン効果  
○竹村 忍<sup>1</sup>・飯田 雅康<sup>1</sup>・原田 雅史<sup>2</sup> (1奈良女大院人間文化・2奈良女大生活環境)
- P27☆ アニオン・カチオンの異なるイオン液体におけるワルデン積と緩和時間の関係  
○中原 栄一郎・山口 毅・香田 忍 (名大院工)
- P28 高圧 CO<sub>2</sub> 雰囲気下におけるイオン液体の比熱測定  
○牧野 貴至<sup>1</sup>・金久保 光央<sup>1</sup>・増田 善雄<sup>1</sup>・向山 洋<sup>2</sup> (1産総研・2パナソニック)
- P29☆ イミダゾリウム系イオン液体-グライム混合溶液の二酸化炭素吸収特性  
○下村 拓也<sup>1</sup>・遠藤 康裕<sup>2</sup>・児玉 大輔<sup>1</sup>・牧野 貴至<sup>3</sup>・金久保 光央<sup>1</sup> (1日大工・2日大院工・3産総研)
- P30 ホスホニウム系イオン液体の二酸化炭素吸収とそのメカニズム  
○八坂 能郎・上野 正勝・木村 佳文 (同志社大理工)
- P31☆ イオン液体による二酸化炭素吸収とアニオン依存性の理論的研究  
○石塚 良介<sup>1</sup>・梅林 泰宏<sup>2</sup>・松林 伸幸<sup>3</sup> (1京大院工・元素戦略・2新潟大院自然・3京大化研)
- P32 二成分混合溶液の超音波霧化に及ぼす塩効果  
○金久保 光央・牧野 貴至・小原 ひとみ・脇坂 昭弘 (産総研)
- P33☆ 積分方程式理論を用いた液晶の配向性に関する研究  
○本田 龍之介<sup>1</sup>・佐藤 啓文<sup>1,2</sup> (1京大院工・2京大触媒・電池元素戦略)
- P34☆ 希土類錯体をオルガノゲル中に分散させたレーザー媒質の検討  
○渡部 康弘<sup>1</sup>・川井 秀記<sup>2</sup>・鎌田 賢司<sup>3</sup>・西山 桂<sup>4</sup> (1島根大院教育・2静大院工・3産総研関西セ・4島根大教育)
- P35☆ グルコースのアノマー平衡へのアルカリ金属塩化物の影響Ⅲ  
～グルコースの無限希釈値でのアノマー比率からの検討～  
○竹内 友哉・前林 正弘・大場 正春 (名城大農)
- P36☆ 水溶液中におけるアミノ酸の構造揺らぎに関する理論的研究  
○松村 祥宏<sup>1</sup>・佐藤 啓文<sup>1,2</sup> (1京大院工・2京大触媒・電池元素戦略)
- P37☆ リン脂質二重膜中でのタンパク質のフリップフロップ運動経路の解析  
○水口 朋子<sup>1,2</sup>・松林 伸幸<sup>1</sup> (1京大化研・2分子研)
- P38 非イオン性界面活性剤 C<sub>12</sub>E<sub>10</sub> の添加による DMPC 脂質二重層膜の物性変化  
村岡 駿・○安藤 嘉倫・岡崎 進 (名大院工)

- P39 3D-RISM 理論による水溶液中の微小蛋白質に関する研究  
刑部 進之助<sup>1</sup>・○三浦 伸一<sup>2</sup> (1金沢大院自然・2金沢大理工)
- P40 分子シミュレーションを用いた高圧力下における水中のペプチド分子の構造解析  
○森 義治<sup>1</sup>・奥村 久士<sup>1,2</sup> (1分子研・2総研大)
- P41☆ Quantum Chemical Study of Glucose Conversion to 5-Hydroxymethylfurfural using RISM-SCF-SEDD  
Arifin, Daisuke Yokogawa, Stephan Irle (WPI-Institute of Transformative Bio-Molecules & Department of Chemistry, Nagoya University)
- P42 FMO/3D-RISM の開発  
○吉田 紀生<sup>1</sup>・中野 晴之<sup>1</sup>・平田 文男<sup>2</sup> (1九大院理・2立命館大)
- P43 線形応答近似と新規静電場フィッティング法を組み合わせた新規手法の開発  
○横川 大輔 (名大 ITbM)
- P44 MD/3D-RISM 法による希薄な水溶液中での非イオン性界面活性剤ミセルの解析  
○宮田 竜彦<sup>1</sup>・生田 靖弘<sup>2</sup>・平田 文男<sup>3</sup> (1愛媛大院理工・2豊田中研・3立命館大生命科学)
- P45 低温における 2,2,2-Trifluoroethanol-水および Ethanol-水混合溶液の NMR スペクトル  
○松上 優<sup>1</sup>・山本 遼平<sup>2</sup>・熊井 隆<sup>2</sup>・梅木 辰也<sup>2</sup>・高椋 利幸<sup>2</sup> (1熊本高専・2佐賀大院工)
- P46 室温から超臨界状態に至るベンゼンの低振動数ラマン散乱  
○天羽 優子・阿部 太郎・亀田 恭男・臼杵 毅 (山形大理)
- P47  $\beta$ -hairpin モデルペプチドの構造安定性に対する圧力効果：赤外分光法および分子動力学研究  
○藤本 和士<sup>1</sup>・辻井 政統<sup>2</sup>・土屋 慶太<sup>2</sup>・加藤 稔<sup>1</sup> (1立命館大薬・2立命館大生命科学)
- P48 分子動力学法による超臨界水中の赤外スペクトル線形に対する回転運動の影響の解析  
○吉田 健<sup>1</sup>・平山 雅貴<sup>1</sup>・松林 伸幸<sup>2</sup>・魚崎 泰弘<sup>1</sup>・中原 勝<sup>2</sup> (1徳島大院 STS 研・2京大化研)
- P49☆ 高温高圧下の重水中における HDO の OH 伸縮振動に対する添加塩効果  
○井尻 翔太・伊吹 和泰・上野 正勝・八坂 能郎・木村 佳文 (同志社大院理工)
- P50☆ 浸透圧効果を利用した Cyt c-CcO 電子伝達複合体の相互作用解析  
○佐藤 航<sup>1</sup>・今井 瑞依<sup>1</sup>・内田 毅<sup>1,2</sup>・伊藤-新澤 恭子<sup>3</sup>・吉川 信也<sup>3</sup>・石森 浩一郎<sup>1,2</sup> (1北大院総化・2北大院理・3兵庫県立大院生命理)
- P51☆ SSSV 方程式の三次元化および電解質溶液への適用  
○笠原 健人<sup>1</sup>・佐藤 啓文<sup>1,2</sup> (1京大院工・2京大触媒 電池元素戦略)
- P52 粘弾性液体中の小分子の回転緩和  
○山口 毅・香田 忍 (名大院工)