

山口大学研究推進体「先端的計測・分析基盤技術の創出」×物質構造解析研究会 ジョイントセミナー・ポスターセッションプログラム (2019年9月5日(木)山口大学)

ポスター番号	発表者	所属	題目	概要
P01	○岡島敏浩(1)・賈軍軍(2)・重里有三(3)	九州シンクロトロン光研究センター(1)・早大国際理工学センター(2)・青学大理工(3)	応性スパッタリングで成膜したNb、N添加TiO ₂ 膜の局所構造	応性スパッタリングで成膜したNb、N添加TiO ₂ 膜の局所構造をXAFS及び第一原理計算で調べた。TiO ₂ 膜中に添加されたNb原子は4個のTi原子を5個で置換していることを明らかにした。また、以前に報告したSn原子の場合と異なり、Nb原子はお互いに独立してTi原子を置換していることを明らかにした。
P02	○津川直矢	株式会社東ソー分析センター	加熱SEMを用いた各種材料の動的観察	温度を制御した状態での分析、いわゆるIn-situ分析に関する要望に答えるため、弊社では加熱機能を搭載した走査型電子顕微鏡(加熱SEM)を導入し、技術検討を進めている。加熱SEMでは、昇温・冷却過程における材料の動的な構造変化をリアルタイムで観察することが出来る。本発表では、加熱SEMを用いた各種材料の分析事例について紹介する。
P03	○大久保晃太(1)・鶴村達也(1,2)・藤井健太(1)	山口大院創成科学(1)・ティカ株式会社(2)	超濃厚硫酸水液中で形成するTi ⁴⁺ 多核錯体の局所構造解析	硫酸チタニルを溶解させた超濃厚硫酸水溶液に対して、高エネルギーX線全散乱実験およびラマン分光測定を行った。定量的な構造解析の結果から、Ti4+周りの平均配位数が硫酸濃度に強く依存すること、濃厚硫酸水溶液中では長距離多核錯体(Ti-O-Ti-)を形成していることが分かった。
P04	○韓智海・藤井健太	山口大院創成科学	超濃厚電解液中における均一網目高分子ゲルの架橋反応メカニズムとリチウムイオンキャパシタへの応用	電解液を高分子ネットワークで擬固体化したゲル電解質は比較的高いイオン伝導特性や安全性を有する機能性ソフトマテリアルとして注目されている。本研究では、高濃度リチウム塩と有機溶媒からなる超濃厚電解液を反応場として選択し、均一網目を形成する四分岐高分子(TetraPEG)ゲルの架橋反応を反応速度論的に調べ、得られたゲルの基礎物性およびリチウムイオンキャパシタの負極・正極における電気化学特性を評価した。
P05	○上山裕史・柴田雅之・藤井健太	山口大院創成科学	放射光X線全散乱実験を基盤とする高分子鎖のナノスケール構造解析	イオン液体電解液とPEGを複合化したイオンゲル電解質は、Li塩の添加に伴いその基礎物性が大きく変化する。本研究では、(1)振動分光法によるLiイオン-PEG鎖間相互作用の定量解析(2)放射光X線全散乱および全原子MDシミュレーションによるPEG鎖の溶存構造解析を行い、高分子鎖のナノスケール構造とゲル物性の相関関係について議論した。
P06	○上原香織・藤井健太	山口大院創成科学	フッ素系低配位溶媒を用いたLiイオン電池用電解液の構造および電気化学特性	ドナー数の低い2,2,2-トリフルオロエチルアセテート(TFEAc)を主溶媒とした希薄系電解液に対してRaman分光測定による構造解析、サイクリックボルタンメトリー(CV)および充放電試験による電気化学特性評価を行なった。Li塩+TFEAcの2成分系では、グラファイトによるLiイオンの挿入脱離反応が観測されたものの、良好なサイクル特性を示さなかった。この電解液にカーボネート系添加剤を加えたところ、サイクル特性が劇的に改善された。
P07	○石川明日実・藤井健太	山口大院創成科学	優れた延伸性を有する均一網目ゲル電解質の架橋反応メカニズムと材料特性	高分子ゲルの基礎特性、特に機械的強度はゲルの網目構造や架橋点密度(反応率)に強く依存している。我々は、網目構造とゲル物性の相関関係に着目しており、高分子濃度や反応率を制御することでゲルの力学特性をコントロールしてきた。本研究では、高分子網目のサイズに着目し、力学特性制御に関する系統的研究を進め、得られたゲル電解質の電気化学特性を評価した。
P08	○村田輝(2)・十川みちる(1)・藤井健太(1)	山口大院創成科学(1)・山口大工(2)	Liイオン電池用超濃厚電解液中で特有なイオン秩序構造形成：溶媒分子のサイズ依存性と電極反応特性	アセトニトリル(AN)及びフッ素化リチウム酸エステル(TFEP)を溶媒とする超濃厚電解液の溶液構造を放射光X線全散乱実験及びMDシミュレーションにより調べた。LiTFSA/AN系ではLiイオンは多角錯体をベースとした特殊構造を形成しているのに対し、LiTFSA/TFEP系では単核錯体が主成分であることが分かった。この溶液構造の違いが電極反応特性に直接影響することをCV測定により確認した。
P09	○高野沙織(2)・十川みちる(1)・藤井健太(1)	山口大院創成科学(1)・山口大工(2)	嵩高い不燃性溶媒を用いた超濃厚電解液中における多分岐高分子のゲル化反応メカニズム:Liイオン電池用ゲル電解質への応用展開	我々の研究グループでは、嵩高い不燃性溶媒の一つであるTFEPを用いた超濃厚電解液に着目し、その電気化学的、溶液化学的特性を報告している。本研究ではこの電解液を四分岐ポリエチレングリコールを用いてゲル化させ、そのゲル化過程を反応速度論的に調べた。また得られたゲルの網目均一性や力学特性を評価した。

山口大学研究推進体「先端的計測・分析基盤技術の創出」×物質構造解析研究会 ジョイントセミナー・ポスターセッションプログラム (2019年9月5日(木)山口大学)

ポスター番号	発表者	所属	題目	概要
P10	○石田晃基(1)・藤井寛之(2) ・阿部憲孝(3)・堀学(1)	山口大院創成科学(1)・ 山口大学総合科学実験 センター(2)・山口大名 誉教授(3)	ベンズイミダゾール縮環1-アザアズレン誘導体の効率的合成 と生物活性評価	1-アザアズレンは、5員7員双環化合物であり分子分極が大きいなどの特性により、特異的な反応性を示す化合物である。また、ベンズイミダゾール骨格を有する化合物には、殺菌作用、薬理活性など様々な活性を示すものが多い。したがって、1-アザアズレンにベンズイミダゾール骨格を縮環させることにより、新たな物性や機能性の発現が期待される。本研究では、銅触媒を用いた分子内環化により、最大収率93%で目的化合物を合成した。
P11	○宮崎雄一郎・綱島亮	山口大創成科学	混合原子価POMの巨視的電気的性質の調査	混合原子価化合物は誘電応答を示す化合物として注目されている。その中でもポリオキシメタレートは、酸素を配位子としたMoイオンを含む分子性酸化物で還元され、Mo(V)と(VI)の混合原子価状態をとる。電子は有限骨格内で非局在化している。我々はこれまで、混合原子価ポリ酸の分極構造に由来する誘電物性に着目してきた。今回、混合原子価なポリ酸について、より電気分極を稼ぐため異方性の{P4Mo30}型に着目し、還元体の単離と構造を評価した。
P12	○渡優・藤林将・綱島亮	山口大院創成科学	バスケット型ポリオキシメタレートの熱分子変形に対するカチオン依存性	多核金属錯体であるポリオキシメタレート(POM)は有機分子とハイブリッドすることによりそれぞれの成分とも異なる特異な物性や機能を示すことが明らかになっている。我々の研究室では、有機無機ハイブリッドPOMの新たな物質群として、有機ホスホン酸を用いることで混合原子価な18核バスケット型POMの有機部位が誘導可能であることを報告してきた。今回、有機部位や用いる対カチオンが結晶構造や相転移機構に与える影響を調査した。
P13	○森田菫乃・綱島亮	山口大院創成科学	プロトン化されたヘキサメチレンテトラミンからなるペロブスカイト型化合物の強誘電特性	プロトン化したヘキサメチレンテトラミン(hmta)、臭化物イオン、アンモニウムイオンからなるイオン性分子結晶(1)を新たに単離した。単結晶X線構造解析から、構造をAサイトにプロトン化されたhmta、Bサイトにアンモニウムイオン、Oサイトに臭化物イオンが配置したABO ₃ 型のペロブスカイト型構造と同定した。自発分極を持った構造であり、強誘電的性質をP-Eヒステリシス測定や焦電流の温度依存性評価から明らかにしたので報告する。
P14	○三小田瑞月(2)・大浦正樹 (3)・堀川祐加(1)	山口大院創成科学(1)・ 山口大理(2)・理研 RSC(3)	軟X線発光を用いた溶媒和イオン液体の電子状態研究	軟X線発光分光を用いてリチウム二次電池の新規電解液として注目されている溶媒和イオン液体であるリチウム-グライム錯体系水溶液中のグライムの電子状態を観測した。Li塩とグライムの混合比を変えると溶液中のグライムの発光スペクトル形状に変化が見られた。発表ではこの形状変化の帰属について考察する。
P15	○植野一輝(1)・大浦正樹(2)・ 堀川祐加(1)	山口大院創成科学(1)・ 理研RSC(2)	軟X線発光分光とラマン分光による逆ミセル中の水の水素結合状態観測	近年、ナノサイズの微小空間中に閉じ込められた水がバルク水と異なる物性を持っているということが明らかになってきた。そこで、本研究では逆ミセル中の微小空間に閉じ込められた水の水素結合状態について軟X線発光分光とラマン分光を用いて調べた。発表では、ミセルのサイズを変化させた際の水の水素結合状態の変化について2つの実験手法による観測結果とともに報告する。
P16	○矢野航季(1)・野崎浩二(1)・ 中川知之(2)	山口大院創成科学(1)・ 宇部興産(2)	ノナメチレンオキサミド/2-メチル-1,8オクタメチレンオキサミドコポリマーの結晶構造解析	異種のモノマーを重合したコポリマーがどのような構造形成を示し、ホモポリマーとはどのような点で分子の振る舞いが異なるかは非常に興味を持たれる。本研究ではノナメチレンオキサミドモノマー(n体)と2-メチル-1,8-オクタメチレンオキサミドモノマー(体)の共重合体PX9(n/i)の結晶構造を明らかにする。PX9(n/i)には2つの結晶相PX9(100/0)型結晶とPX9(0/100)型結晶、非晶領域が出現し、1つの結晶相内に2つのモノマーが取り込まれていることがわかった。
P17	○本條晴也(1)・伊藤美紀(2)・ 野崎浩二(1)・國米達也(3)	山口大院創成科学(1)・ 山口大理(2)・日本精蠟 (3)	n-アルカン/櫛型高分子混合系の構造形成	著作らは直鎖型と櫛型という分子の幾何学的特徴に注目し、n-アルカンとポリオレフィン櫛型高分子の混合系がどのような構造を形成するのか、n-アルカンの鎖長と櫛型高分子の側鎖長の鎖長差の関係について研究を行っている。その結果、櫛型高分子の側鎖とn-アルカンは固溶体を形成し、高次構造はn-アルカンの添加量に応じて変化し、固溶体の形成はn-アルカンの鎖長と櫛型高分子の側鎖長の鎖長差が関係していることが分かった。
P18	○森隆太郎・安達健太	山口大院創成科学	酸化タングステン(VI)未修飾単層ナノシートの超音波合成	昨今、注目される半導体単層ナノシートは表面の非修飾が望まれる。酸化タングステン(WO ₃)ナノシートも報告されているが、表面からの分離が困難な添加剤を必須とする。よって本研究は超音波照射を用いた表面非修飾WO ₃ 単層ナノシート合成を指向した。

山口大学研究推進体「先端的計測・分析基盤技術の創出」×物質構造解析研究会 ジョイントセミナー・ポスターセッションプログラム (2019年9月5日(木)山口大学)

ポスター番号	発表者	所属	題目	概要
P19	○有馬悠輔(1)・安藤綾香(2)・ 山野水静(2)・安達健太(1)	山口大院創成科学(1)・ 山口大理(2)	分子拡散と晶析から自己組織化構造を紐解く：ポリオレフィン／長鎖アルキル組成物	植物表面構造はナノ及びマイクロオーダーの微細構造によって魅力的な機能を発現する。直鎖アルキルアミンとエチレン・プロピレン共重合体を用いて人工的な植物表面構造の作成と表面構造発現のメカニズム解明を行った。