

**山口大学研究推進体「先端的計測・分析基盤技術の創出」×「最先端物質から文化・芸術まで科学する物質構造解析研究」× 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（2023年9月4日(月)山口大学吉田キャンパス）**

ポスター番号	発表者	所属	題目	概要
1	○中司悠哉[1]・赤井光治[2]・岸本堅剛[1]・栗巢普揮[1]・村田卓也[1]・山本節夫[1]	山口大院創成科学[1]・山口大国際総合科学[2]	ハイブリッド汎関数を用いたクラスレート半導体Ba-Ga-Snのバンドギャップの検討	P型のタイプⅧ構造のクラスレートであるBa8Ga16Sn30の熱電特性を評価するために第一原理計算ソフトVASPを用いてバンド構造を計算した。一般的に用いられる密度汎関数法ではバンドギャップが過小評価されてしまった。本研究では、ハイブリッド汎関数であるHSE06を用いて、バンドギャップを検討した。
2	○上田武蔵[1]・松田啓太郎[2]・石井治之[2]	山口大工[1]・山口大院創成科学[2]	オレイン酸ナトリウムを用いたメソポーラスシリカ粒子合成における反応条件の検討	ソフトテンプレート法とは、ソフトマターであるミセルやベシクルを鋳型として材料を合成し、その材料の細孔構造、形態制御を行うことができる。本研究では、人体への刺激性が低いアニオン性界面活性剤オレイン酸ナトリウムを用いたソフトテンプレート法でメソポーラスシリカ粒子を合成した。反応条件の違いによる粒子の形状、また粒子表面の構造の変化を評価した。
3	○山下颯斗[1]・國貞明里[2]・石井治之[2]	山口大工[1]・山口大院創成科学[2]	過酸化水素存在下での金ナノ粒子の酸化触媒能の評価	金ナノ粒子（GNP）は、液相・気相いずれにおいても常温で優れた触媒能を持つ。本研究では、液相における金ナノ粒子の酸化触媒能を評価するために過酸化水素存在下で3,3',5,5'-テトラメチルベンジジン（TMB）の酸化反応試験を行った。TMBの酸化生成物の吸収ピークの時間変化よりGNPの酸化触媒能の評価を行った。
4	○大石優希・鈴木敦子・綱島亮	山口大院創成科学	dabcoH・(Br _x , I _{1-x})の構造・誘電特性	dabcoH・A(A = BF ₄ , ClO ₄ , ReO ₄ , TFSA)は水素結合中のプロトン変位とアニオン反転が機序の強誘電性を示す。今回、アニオンが球形状のdabcoH・X(X = Br, I)について、固溶体を作製し、構造及び誘電特性の調査を行った。dabcoH・(Br _{0.80} , I _{0.20})で強誘電相を示唆する挙動が誘電率の温度依存性や自発極の電場応答性に見られたので、その詳細を報告する。
5	○松本大輝・鈴木敦子・綱島亮	山口大院創成科学	[V ₁₈]型ポリオキソメタレートを含むフレームワーク構造体の結晶水吸脱着に伴う構造変態と熱分析	ポリオキソメタレートを遷移金属イオンM ₂₊ で架橋したフレームワーク構造体H ₆ [M ₃ V ₁₈ O ₄₂ SO ₄]・24H ₂ O (I-M)は、親水性の空隙に結晶水を取り込む。架橋子置換体(M=Mn、Fe、Co、Ni、Cu、Zn、Cd)が結晶水の脱離に伴って、結晶一アモルファスもしくは単結晶一単結晶と可逆に相変態することを明らかにした。脱離した結晶水1分子当たりのΔHが30-45 kJ/mol程度と、見積もられる脱離熱ΔH _{de} -50 kJ/molに相当し、特に1-Ni、Zn、Cdは固一固相変態として比較的大きな熱収支-400 J/gを示した。
6	○森口順平・鈴木敦子・綱島亮	山口大院創成科学	ペロブスカイト分子固溶体(H ₂ dabco, H ₂ hmta) NH ₄ (BF ₄) ₃ の構造と相転移挙動の組成依存性	固体の機械的な粉砕混合により固溶化するメカニカルアロイニング法には、融点や溶解度、比重など溶液・液相における性質が異なる成分の固溶化を可能にする特徴がある。今回、このメカニカルアロイニング法をペロブスカイト型分子結晶の固溶化に適用したところ、溶液相から結晶を析出させる従来の作製法に比べて幅広い組成域での固溶化が可能となり、その構造と相転移挙動の組成依存性を明らかにしたので報告する。
7	○上尾雅大[1]・鈴木敦子[1]・壹岐伸彦[2]・綱島亮[1]	山口大院創成科学[1]・東北大院環境[2]	三脚型シッフ塩基の置換基が与えるネオジム/ジスプロシウム分離への影響	これまでに我々は、三脚型シッフ塩基を配位子とする金属錯体を結晶化させることで、ネオジムとジスプロシウムを高い分離能で相互分離できることを見出している。本講演では、配位子の置換基を変えて分離性能の比較を行い、置換基が及ぼす分離への影響を調査した結果を報告する。
8	○城裕喜[1]・岡崎麻耶子[1]・永田恭平[1]・徳島高[2]・勅使河原誠[3]・達本衛輝[4]・長谷川巧[5]・堀川裕加[1]	山口大院創成科学[1]・Lund Univ.[2]・原研J-PARCセンター[3]・ESS[4]・広島大院先進理工[5]	中性子実験施設 ESS に設置可能なラマン分光器の開発 —液体水素のオルソ/バラ比の高精度測定に向けて—	中性子実験施設では発生した中性子の減速材として液体水素が用いられている。液体水素ではバラ水素とオルソ水素が混在しておりバラ水素の方が減速材として優れているため、バラ水素の存在比の減少を素早く検出する必要がある。そこで中性子実験施設ではオルソ/バラ比の測定にラマン分光法を導入する。実際に水素ラインに照射すると、窓材からの信号が問題となるが、その除去のための光学系の設計と動作確認を行ったので報告する。
9	○瀧口歩[1]・岡崎麻耶子[2]・城裕喜[2]・濱本諭[3]・大浦正樹[3]・堀川裕加[2]	山口大理[1]・山口大院創成科学[2]・理研SRC[3]	軟X線吸収分光による濃厚電解液中のアセトニトリルの電子状態測定	L2吸収線の新しい電解液として注目されている濃厚電解液LiTFSA/ANにおいて、参加安定性が向上する理由として溶媒のアセトニトリルのLUMOレベルが濃厚電解液となることで上昇していることが予想されている。本研究では実際に電子状態測定を行うことで電解液中のアセトニトリルのLUMOレベルの値を調べたので報告する。
10	○濱田真衣・野崎浩二	山口大院創成科学	ポリエチレンフィルムの構造形成評価	インフレーション法によるポリエチレン(PE)フィルムの作製時の構造形成を評価する。今回はフィルム作製後の結晶化度、選択配向性、高次構造をX線回折法、X線極点図法、原子間力顕微鏡法によって評価する方法について報告する。

**山口大学研究推進体「先端的計測・分析基盤技術の創出」×「最先端物質から文化・芸術まで科学する物質構造解析研究」× 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（2023年9月4日(月)山口大学吉田キャンパス）**

ポスター番号	発表者	所属	題目	概要
11	○宗貞遥花・山崎鈴子	山口大院創成科学	水分解反応におけるNa⁺、Ca²⁺ドープSrTiO₃の光触媒活性評価	チタン酸ストロンチウム（STO）は、紫外光照射下で水分解活性を有する光触媒である。我々は、市販品STOへのNa+ドープによって、水分解による酸素発生速度が約2倍に向上する事を見出した。本研究では、チタン化合物を原料に用いて様々な条件で水熱合成したSTOにNa+、Ca2+をドープし、それらの物性と酸素発生速度を調査した。また市販品との比較を行い、金属イオンドープによる活性向上の要因について検討した。
12	○甲斐友都・鈴木康孝・川俣純	山口大院創成科学	粘土鉱物と発光性色素からなるコロイドを用いたランダムレーザー媒質の開発	散乱体として粘土鉱物ナノシートを発行体としてローダミン6G（R6G）を用いたランダムレーザー媒質の開発を行った。R6Gのメタノール溶液に粘土鉱物を加え、混合することで試料を作製した。一般的に発光体は粘土鉱物に吸着すると量子収率が低下するが、粘土鉱物の吸着容量に対し過剰量のR6Gを導入することで誘導放出が発現することが分かった。粘土鉱物がランダムレーザー媒質の散乱体として使用可能であることが示された。
13	○山根沙耶・鈴木康孝・川俣純	山口大院創成科学	多光子励起蛍光顕微鏡を用いた9,10-ジプロモアントラセン結晶の発光挙動の三次元解析	単結晶の9,10-ジプロモアントラセンは、外力によって弾性的に変形することが知られている。この結晶は、曲げることでπ平面の滑りを誘発し、結晶全体の構造変化とマクロな発光特性の変化をもたらす。一方、当研究室では、多光子励起蛍光顕微鏡を用いた分子性結晶の解析に関する研究を進めており、9,10-ジプロモアントラセン結晶のミクロな構造の変化がもたらす発光挙動の解析に多光子顕微鏡が有効であると考え、調査を行った。
14	○大林信明・倉重裕一	東ソー分析センター	固体NMRを用いたLiMn系正極材料の解析	LIB正極材料において、充放電時のLi状態は電池の性能や寿命に大きく影響する。しかし、LiMn系正極材料の固体7Li NMRでは、ピーク分解能の低さやMnの影響で現れるゴーストピーク(スピニングサイドバンド:SSB)により解析が困難であった。そこで、700MHz NMRへSSB除去可能なMATPASS法を導入し、高分解能測定が可能となった。本発表では、本手法を充放電試料に適用した事例を紹介する。
15	○河野誠[1]・藤田美菜[2]・高橋酵太郎[3]	カワノラボ[1]・アイニウム[2]・ダイヤモンドブルーイング[3]	磁気泳動及び近赤外分光法による食品分析	我々はこれまで、磁気泳動法及び近赤外分光法を用いて、様々な食品の分析について検討してきた。磁気泳動法では、主に乳化状態を評価することを目的としてきた。また、近赤外分光法では多変量解析を用いることで、一見違いが分かりづらいサンプル間の違いについても類似性を見出すことができることから、同様に乳化状態などについて評価した結果を報告する。
16	○高橋酵太郎[1]・藤田美菜[2]・河野誠[3]	ダイヤモンドブルーイング[1]・アイニウム[2]・カワノラボ[3]	近赤外分光法を用いた酵母培養液の評価	近赤外分光法は食品分析の領域で広く用いられており、多変量解析によって僅かな違いを評価することができることが知られている。近赤外領域では応答する振動モードが多いため、複数の成分が混在する食品には適した手法である。一方、酵母培養液中には代謝物など様々な成分が生じるため、これらを詳細に解析するには多くの手間を要する。そこで、酵母培養液の評価に近赤外分光法を用い、その変化を評価したので報告する。
17	田中祥平[1,2]・○安達健太[1]	山口大院創成科学[1]・化薬ヌーリオン[2]	ポリアルコキシシラン水-架橋反応における種々リン化合物の触媒能評価	ポリアルコキシシラン樹脂は、水-架橋反応の進行により高次ネットワーク構築し、物理的・化学的特性を飛躍的に向上できる。水-架橋反応は水分子を反応開始剤として進行するため、環境にやさしく、ポリアルコキシシラン樹脂は産業的・経済的に注目を集めている。この樹脂の水-架橋反応の制御には、触媒が重要な働きを担っている。本研究では、種々リン化合物（ホスホリル化合物、及びホスフィン化合物）存在下におけるポリアルコキシシラン樹脂の水-架橋反応を定量的に評価した。