

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（2024年8月26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*	○小嶋太智・宮戸祐治	龍谷大学先端理工学部	原子間力顕微鏡による液体流路中微粒子観察に向けた流路構造の設計	フローサイトメトリとは、液体流路に微粒子を1つずつ、1列に整列させた状態で流してレーザー光を当て、反射した光を測定することにより、微粒子の内部情報を統計的に得る手法である。本研究では、原子間力顕微鏡においてもフローサイトメトリと類似の方式で液体流路に流れる微粒子を観察できるようなコンセプトの設計を行った。
2*	○五嶋将理・沖村俊之介・野崎浩二	山口大院創成科学(理)	ポリ α -オレフィン/n-アルカン混合系の構造形成	ポトルブラシ型高分子であるアタクチックポリ α -オレフィンと直鎖型分子であるn-アルカン分子の混合系の高次構造形成をX線回折と示差走査熱量測定により調べた。この混合系は特徴的な高次構造を形成することが推測されている。ポリ α -オレフィン側鎖の平均鎖長および鎖長分布が固溶体形成や高次構造形成に及ぼす影響について考察する。
3*	○沖村俊之介・高部巧・浦上直人・野崎浩二	山口大院創成科学(理)	アイソタクチックポリプロピレン(iPP)の分子配列秩序が乱れた α 相結晶の結晶構造	著者らは、現在までにiPPには3/1らせん構造分子の右巻きと左巻きの配列秩序の乱れた α 1'相が存在することを示す実験結果を示した。本研究では推測される α 1'相における分子配列の安定性をコンピュータ・シミュレーションで評価する。さらに、コンピュータ・シミュレーションで得られた分子配列から計算されるX線散乱強度と実測の散乱強度を比較し、 α 1'相の分子配列について議論する。
4*	○和多陸斗・松本大輝・鈴木敦子・網島亮	山口大院創成科学(理)	[V18]ポリオキシメタレートからなるフレームワーク構造体におけるアモルファス-結晶変態と水吸着	当研究室では、[V18]型ポリオキシメタレートと遷移金属イオンからなるフレームワーク構造体 $H_x[M(OH)_2]_4[3V18O42(AO_4)] \cdot n(H_2O)_6$ (c-M)が、室温付近でゲスト水分子の脱離に伴う結晶からアモルファス(a-M)への相変態を示し、その過程の潜熱は900 kJ/molであることを明らかにした。先行研究から、a-Mを浸水させたところ、アモルファスから結晶への相変態が完全な可逆過程ではないことが示唆された。今回、水蒸気を用いた水吸着過程に着目し、その詳細を調査したので報告する。
5*	○長谷川奈樹・上尾雅大・鈴木敦子・網島亮	山口大院創成科学(理)	高濃度の溶液環境が希土類錯体の生成と結晶化に及ぼす影響	ネオジム磁石の金属成分を相互分離する方法の中で、結晶化は簡素で高選択的な分離法として期待できる。我々は、磁石に含まれるDyとNdを結晶化により相互分離することに取り組み、Dy ³⁺ /Nd ³⁺ 混合溶液からDy ³⁺ 錯体を選択的に結晶化させる方法を報告した。さらに分離が起こる要因を調査した。その結果、結晶化過程において希薄溶液では両イオンとも錯体生成が進むが、結晶化を行った高濃度溶液ではNd ³⁺ 錯体の生成が遅く進まないことが分かった。
6*	○山本千尋[1]・鈴木敦子[1]・窪田裕大[2]・網島亮[1]	山口大院創成科学(理)[1]・岐阜大工[2]	近赤外発光性Yb錯体を持つ混晶におけるLMCT状態を経由するエネルギー移動ダイナミクスの解明	我々は近赤外発光性のYb錯体と金属中心発光を示さないLu錯体から成る混晶において、Lu錯体の配位子励起を介したYb発光の増強を報告した。この研究で、近赤外発光寿命を測定し、Lu錯体の比が大きい混晶で発光減衰の前に発光強度の増大を確認した。本研究では、増大成分の起源を調べるため、混晶の可視発光特性を評価した。可視発光寿命測定の結果、増大成分がLMCT状態に由来し、LMCT状態を介する機構の実験的知見を得た。
7*	○立原真紀・鈴木敦子・網島亮	山口大院創成科学(理)	複数の三重項状態を経由したアンテナ効果を示すTb錯体とEu錯体の混晶における励起波長選択的な発光スペクトル変化	当研究室では π スタック型二量体構造を持つ単核Ln錯体 (Ln = Tb, Tm; Ln = Eu, Er; Ln = Gd, Dy) を合成した。また複数の励起三重項状態が存在しTbとEuの効果的な励起波長が異なることを明らかにした。今回TbとEuの混合結晶 TbxEu _{1-x} を合成し励起波長 (λ_{ex}) を変えて発光スペクトルを測定した。Tb _{0.4} Eu _{0.6} の発光スペクトルでは $\lambda_{ex} = 350$ nmにおいてTb発光が観察された。一方 $\lambda_{ex} > 410$ nmにおいてEu発光が観察された。以上の結果より励起波長選択的に発光スペクトルを変化できた。
8*	○大坪由季乃・大石優希・鈴木敦子・網島亮	山口大院創成科学(理)	1,3,5-トリアザ-7-ホスファダマンタン (pta) を用いた分子性イオン結晶ptaH ₂ X (X=Cl, Br, I) の結晶構造と相転移挙動	強誘電体は非揮発性メモリーなどに応用される一方、多くが有害な金属を含むため、低環境負荷な分子性強誘電体が注目されている。本研究ではptaを用いたイオン結晶ptaH ₂ X (X=Cl, Br, I) を作製し、ptaの強誘電体としての可能性を探した。ptaH-Iでは400Kにおいて強誘電-常誘電相転移が示唆され、今回、第2次高調波発生と温度可変相X線構造解析を用いて高温相の構造解析を行ったので報告する。
9*	○松田 裕海[1]・朝井廉太郎[1]・鈴木敦子[1]・芥川智行[2]・網島亮[1]	山口大院創成科学(理)[1]・東北大多元研[2]	ペロブスカイト型分子結晶ptaH ₂ (NH ₄)X ₃ (X = Br ⁻ , I ⁻ , BF ₄ ⁻) の構造と物性	金属を含まないペロブスカイト型分子結晶A(NH ₄)X ₃ は、Aサイトが球状の有機カチオンからなるペロブスカイト構造をとり、強誘電性、発光、X線吸収などを示す新しい分子化合物として注目されている。当研究室では、新しいAサイトカチオンを探索し、hmtaで強誘電性を確認した。本研究では、hmtaのN原子の一つをP原子に置換したptaをAサイトカチオンとして用い、構造、誘電特性、発光特性を調査した。
10*	○河村悠汰[1]・藤林将[2]・鈴木敦子[1]・西原禎文[3]・網島亮[1]	山口大院創成科学(理)[1]・宇部高専[2]・広島大学院先進理工[3]	Preysslerr型ポリオキシメタレートを挿入したLDHs複合体の作製と構造	Preysslerr型ポリオキシメタレート (M@P5W30) は、単一の金属イオンMを内包する籠型形状のタングステン酸化物である。Mは熱力学的に同等な2つの位置を占め、外部電場により強誘電性のような分極ヒステリシスを示す。M@P5W30の分極方向を制御することにより、高分極な構造体の実現を目指し、M@P5W30-LDH複合材料をいくつかの異なる手法で調製し、その構造を評価した。

山口大学研究推進体「先端的計測・分析基盤技術の創出」×「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 (2024年8月26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*	○山下実紗・澤山沙希・藤井健太	山口大院創成科学(工)	環状サルファイトを主溶媒としたLiイオン電池用電解液の電極反応速度論：Li塩濃度依存性	極めて高濃度のLi塩を溶解した超濃厚電解液は、一般的な希薄電解液に比べて速度論的に優れた電極反応特性を示すことで注目されている。当研究グループでは、Ethylene sulfite (ES) を溶媒とする超濃厚LiFSA電解液に対して溶液構造解析を進めており、Li塩濃度の増加に伴い、溶媒和構造が連続的に変化することを報告している。そこで本研究では、グラフナイト負極反応をモデル系として、LiFSA/ES電解液の超濃厚化が電極反応速度に及ぼす影響を調べた。
12*	○木村功佳[1]・澤山沙希[2]・藤井健太[2]	山口大工[1]・山口大院創成科学(工)[2]	金属イオン錯形成によりゲル化する超濃厚Li塩含有イオンゲルの力学特性および電気化学的特性	イオン液体 (IL) と高分子ネットワークを複合化した高分子ゲル電解質は、ILの優れた電気化学特性と高分子の持つ自立性、柔軟性を兼ね備えたソフトマテリアルである。本研究では4分岐ポリエチレングリコール (TetraPEG) にタービリン配位子を末端修飾しTetraPEG-tpylポリマーを合成し、末端配位子と遷移金属イオンの錯形成反応をゲル化の駆動力とする均一網目イオンゲルを開発し、ゲルの力学特性と電気化学的特性を評価した。
13*	○林幹大[1]・澤山沙希[2]・藤井健太[2]	山口大工[1]・山口大院創成科学(工)[2]	ギ酸を溶媒とした高濃度セルロース溶液の分子レベル溶液構造解析	セルロースは一般的な分水性溶媒には難溶性であり、溶解するには過酷な実験条件を必須とする。一方で近年、セルロースが複雑化したリグニンが、ギ酸やピルビン酸等の分水性溶媒に温かな条件下で溶解することが報告されているものの、その溶解機構は解明されていない。そこで本研究では、振動分光実験および全原子MDシミュレーションを組み合わせた精密構造解析により、セルロース/ギ酸溶液およびそのモデル溶液系の溶液構造を分子レベルで調べた。
14*	○関駿介[1]・澤山沙希[2]・藤井健太[2]	山口大工[1]・山口大院創成科学(工)[2]	カーボネート型Liイオン電池用電解液中におけるLiイオン溶媒和構造の定量解析	Liイオン電池の商用電解液として使用されているカーボネート混合溶媒 (エチレンカーボネート+ジメチルカーボネート) 中におけるLiイオンの溶媒和構造を決定した。RamanスペクトルのLi塩濃度依存性を定量的に解析することで、エチレンカーボネートおよびジメチルカーボネートの個別溶媒和数を決定し、それぞれ単一溶媒系との相違点・類似点を議論した。さらに、種々のLiイオン溶媒和錯体に対してDFT計算を行い、理論的検証を行った。
15*	○下村優涼[1]・安達健太[2]	山口大理[1]・山口大院創成科学(理)[2]	ポリサッカロイド誘導体の膨潤・溶解挙動 ■二次元相関分光法を用いた分子内/分子間水素結合の定性的評価■	セルロースやアミロースに代表されるポリサッカロイド化合物の研究は、持続可能なバイオマス資源の利用拡大の観点から不可欠である。ポリサッカロイドの二次構造および三次構造の構築において、水素結合は非常に重要な役割を果たしている。しかし、これら化合物の溶媒膨潤・溶解過程における水素結合のふるまいは未だ明確になっていない。本研究では、アミロースに対する種々溶媒の膨潤・溶解過程を二次元相関分光法を用いて定性的に評価する。
16*	○和田詩穂梨[1]・安達健太[2]	山口大理[1]・山口大院創成科学(理)[2]	クルクミノイドオキシ金属錯体のシランクロスリンク反応触媒能評価 ★ルイス塩基性の視点から★	シラングラフトポリオレフィンに代表されるポリアルコキシシランは、水存在下、シランクロスリンク反応 (加水分解反応・脱水縮合反応) による高次ネットワークを構築するため、耐熱性・耐溶媒性などの物理特性を大幅に向上させる反応型樹脂として知られている。この樹脂のシランクロスリンク反応の制御には、触媒が重要な働きを担っている。我々は水分子が容易に補足される金属オキシ基の性質に着目し、ルイス塩基性の視点からの新規触媒開発を行っている。その研究の一端を紹介する。
17*	○宮崎万由子[1]・安達健太[2]	山口大理[1]・山口大院創成科学(理)[2]	ウルトラファインバブル数密度・サイズ定量法の確立 ■色素助起子結合理論からのアプローチ■	ウルトラファインバブル (ナノバブル) は、直径1000nm以下の極小な気泡と定義される。現行の計測技術では、ナノバブルのサイズ分布や濃度 (数密度) を正確に把握するのが難しく、新たな原理に基づく簡便な測定方法の確立が求められている。我々は、気/液界面に吸着した有機色素による色素助起子結合理論を用いた新しいナノバブル数密度・サイズ定量法の確立を目指している。
18*	○新山和志・鈴木康孝・川俣純	山口大院創成科学(理)	表面プラズモン共鳴を利用したナノシートの光操作	金属を蒸着した基板に集光したレーザー光を照射し、プラズモン共鳴場を作ると従来よりも低いレーザーパワーで基板上のコロイドの分散質には強い力が働くと考えられている。そこで今回、金を蒸着した入射面をもつサンプルセルを作成し、そこにナノシートコロイドを封入し、プラズモン共鳴が生じる条件下でのナノシートの光マニピュレーション挙動を調べた。
19*	○原田佳奈・鈴木康孝・川俣純・中尾脩二	山口大院創成科学(理)	光マニピュレーションを利用した単一層の還元型酸化グラフェン(RGO)の電気伝導率の測定	グラフェンは電子材料として注目されており、グラフェンと似た性質をもつ還元型酸化グラフェン(RGO)の研究が盛んに行われている。グラフェンの導電性はその層数により変化するという知見が報告されているが、それらは全て膜状での評価に留まっている。そこで、光マニピュレーションという技術を用いて、水中に分散させた大量のグラフェンの中から狙った1枚だけを取り出し、グラフェン一枚単位の電気伝導率の測定を目指す。
20*	○鈴木理文・鈴木康孝・川俣純	山口大院創成科学(理)	アゾベンゼン骨格を有する新規発光性結晶の開発	4-[(1E)-2-(4-Hydroxyphenyl)diazenyl]phenyl 1-pyrenecarboxylateの単結晶は、結晶化誘起発光を示すことが知られており、光応答性材料の開発への応用が期待できる。ピレンとアントラセンはどちらも平面分子であり、性質が似ているため、この物質のピレン部位をアントラセンに変換した物質の発光挙動を調査し、比較したいと考えた。今回の合成に用いたアントラセンカルボン酸は3種類で、それぞれ合成検討を行った。

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（2024年8月26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
21*	○平川太智[1]・城裕喜[2]・堀川裕加[2]	山口大理[1]・山口大院創成科学(理)[2]	ラマン分光法によるカルボン酸/ピリジン混合液体の液体構造観測	弱酸、弱塩基の組み合わせである酢酸とピリジンの混合液体の電気伝導率は、等モル混合時ではなく、ピリジンモル分率17%で極大を示す。先行研究からこの混合系ではピリジンと酢酸2量体の会合体になることでイオン生成が起こり、このイオンの増加が電気伝導率上昇に寄与していることが示された。そこで、ピリジンと他のカルボン酸の混合液体についても酸の濃い領域で同様のイオン生成を行っているのかラマン分光法から確認した。
22	○城裕喜[1][2]・高橋修[3][2]・大浦正樹[2]・堀川裕加[1][2]	山口大院創成科学(理)[1]・理研RSC[2]・広島大院先進理工[3]	軟X線吸収分光法を用いたアセトニトリル溶媒中での18-crown-6の電子状態観測	クラウンエーテルは特定のイオンを捕獲する性質を持つ。軟X線分光法の元素選択性を利用して、18-crown-6、アセトニトリル、金属塩の混合物中の18-crown-6の電子状態を観測し、混合イオンによる18-crown-6の電子状態変化を調べた。その結果軟X線吸収スペクトルにおける1stピークが混合した金属イオンの価数に依存してシフトしている様子が観測されたので、分子軌道計算結果と合わせて報告する。
23	○金田悠介・山崎鈴子	山口大院創成科学(理)	可視光応答型バナジウム修飾酸化チタン電極の作製とその性能評価	当研究室では、可視光応答型白金イオンドープ酸化チタンの合成途中に得られるゾルを用いて電極を作製し、可視光照射下で光電流が生じることを報告した。本研究では白金イオンの代替として、バナジウムイオンをドープあるいは表面担持した酸化チタン電極を作製した。その結果、担持電極の方が高い光電流値を示すことを見出したので、電極表面のバナジウムイオンの原子価状態等を明らかにし、光電流増加の要因を考察した。
24	○竹本希・山崎鈴子	山口大院創成科学(理)	酸化チタンナノロッドを用いたアセトアルデヒドガスの光触媒分解	グリコール酸を構造指向剤として用いた水熱合成法によって、ルチル型の酸化チタンナノロッド(NR)を合成した。気相中のアセトアルデヒド分解において、NRは市販品の酸化チタンナノ粒子よりも優れた光触媒活性を示すことを見出した。そこで本研究では、NR上での反応機構を解明するために、アセトアルデヒドの分解反応速度の照射光強度や反応ガス組成への依存性について、速度論的研究を実施した。
25	○河野誠[1]・藤田美菜[2]	カワノラボ[1]・アイニウム[2]	磁場を用いた粒子の分析	粒子を溶媒に分散させた状態で電場をかけることで、電気泳動現象が観察されることは一般的に知られている。一方、磁場を印加しても同様に粒子は泳動される。この現象を磁気泳動や磁気浮遊などと呼んでおり、磁化率に起因した挙動が得られる。そのため、カーボンなど反磁性の強い物質は、ネオジム磁石でも浮遊する。こうした泳動現象を使って、粒子の特性評価に応用した。

【注】 ポスター番号右肩に * 記号があるものはポスター賞審査対象