

山口大学先端計測技術研究会×山口大学研究推進体「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（2026年8月31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*	○孫松宇・堀川裕加・浦上直人	山口大院創成科学(理)	β-シクロデキストリンとL,D-フェニルアラニンによる包接化合物の構造解析	アミノ酸であるフェニルアラニン(Phe)はL体、D体の光学異性体が存在する。ともに β -CDと包接化合物を形成するが、L体の方が包接化合物を形成しやすい。この理由を解明するために、全原子動力学シミュレーションを行った。シミュレーションでもL体の方が包接化合物を形成する割合が高く、また、3種類の特徴的な包接化合物が存在することが分かった。これらの包接化合物の構造とL体、D体の違いを明らかにする予定である。
2*	○中八児壮太[1,2]・Anusha Pradhan[3]・坂内伸光[4]・大浦正樹[2]・原田慈久[4]・山田裕貴[3]・堀川裕加[5]	山口大理[1]・理研RSC[2]・阪大産研[3]・東大物性研[4]・山口大院創成科学(理)[5]	高濃度フッ化物ハイドレートメルトにおける水のマイクロ構造と電子状態の解明 ― ラマンおよびO 1s X線分光によるアプローチ ―	FSB用超高濃度系電解液は3.49Vの広い電位窓を持つが水分解抑制機構は不明である。本研究では放射光軟X線を用いた O1s、F1s 励起による分光測定により電解液中における水とフッ素イオンの電子状態を直接観測した。今後は実験データの解析とMDに基づく量子化学計算を通じ、水分子のエネルギー準位の変化を定量的に評価し、分解抑制機構の解明を試みる。
3*	○林田望睦[1]・三小田瑞月[2]・堀川裕加[2]	山口大理[1]・山口大院創成科学(理)[2]	MDシミュレーションによるグライムーリチウム塩混合溶液中の[Li(G3)]⁺錯体の構造研究	リチウムイオン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、[Li(Gly)][TfSA]、[Li(Gly)][NO3]に関して液体中のGly錯体の電子状態を軟X線分光法により観測してきた。その結果、アニオンの違いによる錯体の電子状態の違いが観測されており、それぞれのGly錯体構造の違いを探る研究を行なった。MDシミュレーションを用いて[Li(Gly)] ⁺ 錯体の形成率の違い、Li周りのGly構造の違いの解析を行ったので報告する。
4*	○北島実咲[1]・岡村海斗[2]・徳島高[3,5]・吉田啓晃[4,5]・高橋修[5]・堀川裕加[1,6]	山口大院創成科学(理)[1]・山口大理[2]・Lund University[3]・広大院先進理工[4]・広大放射光[5]・理研RSC[6]	HiSOR BL6における液体の軟X線分光測定セットアップの開発	現在、日本で液体試料の軟X線分光測定を行うことができる施設は少なく、軟X線分光スペクトルに関するデータバンクも未整備であることから、基礎研究が重要となっている。本研究では、HiSOR BL6を液体試料の基礎研究専用ラインとして整備することを目的に、液体試料測定用装置の立ち上げとスペクトル補正手法の提案を行っている。液体試料の安定測定の実現を目指すとともに、様々な測定データを用いて補正手法の妥当性を検証している。
5*	○岡村海斗[1]・北島実咲[2]・徳島高[3,5]・吉田啓晃[4,5]・高橋修[5]・堀川裕加[2,5]	山口大理[1]・山口大院創成科学(理)[2]・Lund University[3]・広大院先進理工[4]・広大放射光[5]	液体試料の軟X線分光を可能にする安定型セルの開発	軟X線分光法は、軽元素の電子状態解析に優れた分析手法である。近年、溶液セルの開発により液体試料に対しても軟X線分光法が適用可能になってきた。しかし、液体試料が定期的に測定できるビームライン、ビームタイムが限られているため、広島大学HiSORのような汎用施設においても、安定して使える封入セルの開発が必要と考えている。本発表では現在の設計コンセプトと、このセルを用いたテスト測定の結果について報告する。
6*	○小谷七海[1]・鈴木敦子[2]	山口大理[1]・山口大院創成科学(理)[2]	温度可変NMRによるNd/Dy選択的結晶化を支配する溶液状態の検討	NdおよびDyは化学的性質が極めて類似しているため、高選択的な分離が困難である。本研究では、三脚型シッフ塩基配位子を用いたNd/Dy錯体の選択的結晶化に着目し、温度可変NMRおよびDOSY NMRを用いて溶液中の錯形成挙動や会合状態の温度依存性を解析する。得られた拡散係数および化学種の変化から、選択的結晶化を支配する分離機構を分子レベルで解明し、高効率かつ低環境負荷な希土類分離技術の設計指針を得ることを目的とする。
7*	○湯野裕紀[1]・鈴木敦子[2]	山口大理[1]・山口大院創成科学(理)[2]	温度制御による三脚型シッフ塩基配位子を用いたNd/Dy分離の高効率化	NdとDyは化学的性質が極めて類似しているため相互分離が困難であり、希土類資源のリサイクルにおける重要な課題となっている。本研究では、三脚型シッフ塩基配位子を用いたNd/Dy分離において、温度条件が錯形成および分離挙動に及ぼす影響を検討する。これにより温度制御による分離の高効率化と最適条件の確立を目指す。
8*	○柳井晶穂・網島亮・鈴木敦子	山口大院創成科学(理)	水存在下におけるin situシッフ塩基形成を利用したNd/Dyの選択的結晶化分離	ネオジム磁石は、Fe、Bおよび希土類元素Nd、Dyを含み、これら金属元素の回収源として注目されている。本研究では、配位子の事前合成を必要としないin situシッフ塩基形成法に加え、従来のIPAを用いた結晶化プロセスを水系へ展開することで、簡便で安全性の高いNd/Dy選択的結晶化分離法の構築を目指した。塩基量および水分率を最適化した結果、DMSO/水 混合溶媒系において従来のDMSO/IPA系と同等の分離性能を達成した。
9*	○鬼塚征治・立原真紀・小谷七海・網島亮・鈴木敦子	山口大院創成科学(理)	π-πスタッキング構造を有するTb_xEu_{1-x}錯体混晶における励起波長依存的な発光過程の変化	私たちは、固体状態で π - π スタッキング構造を形成するLn錯体を用いて、 π - π スタッキングがLn ³⁺ イオンへのエネルギー移動および発光特性に及ぼす影響を調査した。Gd錯体では複数のT状態が確認され、TbおよびEu錯体では、それぞれ異なるT状態群を介した異なるエネルギー移動過程が進行することが示唆された。さらに、Tb _x Eu _{1-x} 錯体混晶を用いることで、励起波長に依存したLn発光制御を実証した。
10	○末武稜太・谷誠治・川俣純	山口大院創成科学(理)	記録型感温材料における粘土鉱物の種類がもたらす効果	記録型感温材料は、到達温度を記録できる材料として、温度履歴の可視化への応用が期待されている。本研究では、粘土鉱物-TMPD/ハイブリッドからなる記録型感温材料に着目し、粘土鉱物種の違いが発色・退色挙動および繰り返し性に及ぼす影響を評価した。さらに、酸処理による粘土鉱物の改質が材料特性に与える効果についても検討した。

山口大学先端計測技術研究会×山口大学研究推進体「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（2026年8月31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	○田辺裕大[1]・安達健太[2]	山口大理[1]・山口大院創成科学(理)[2]	バイオフィウリング抑制を指向したアルキルアミン自己組織化表面の形成メカニズム	エチレンプロピレン共重合体（EPR）に長鎖アルキルアミンを添加した複合シートでは、空気中でアルキルアミンと二酸化炭素が反応してカルバメートを形成し、その自己組織化によって表面に微細な凹凸構造が形成される。一方、水中では二酸化炭素の存在状態や供給条件が異なるため、同様の表面構造形成が生じるかは明らかでない。そこで本研究では、水中におけるEPR/アルキルアミン複合シートの表面構造形成過程を明らかにし、水中での表面構造制御を通じたバイオフィウリング抑制材料への展開を目指す。
12	○永田悠人[1]・安達健太[2]	山口大理[1]・山口大院創成科学(理)[2]	酸化モリブデンフォトクロミズムにおけるスモールポーロンー溶媒環境の視点からー	無機酸化物半導体である酸化モリブデン（MoO3）は、バンドギャップ以上の光エネルギーを照射することで励起電子と正孔を生成し、励起電子がMo(VI)サイトに局在化することでMo(V)を形成する。この電子局在化に伴う格子歪みによりスモールポーロンが形成され、可視光吸収が増加するためフォトクロミズムを発現する。既存研究では、アルコール添加によって正孔が捕獲され、電子ー正孔再結合が抑制されることでポーロン生成量が増加し、着色が促進されることが報告されている。一方、アルコールの種類や溶媒環境の違いが、MoO3表面に形成される電子状態やポーロンの局所環境に及ぼす影響については理解されていない。本研究では、異なるアルコール中にMoO3ナノ粒子を分散させ、光照射に伴う吸収スペクトルの変化を比較する。吸収強度に加えて吸収帯の位置や形状にも着目し、溶媒環境の違いがMoO3のフォトクロミズムおよびポーロンに関連する電子状態に及ぼす影響を検討する。
13*	○宮崎万由子・安達健太	山口大院創成科学(理)	カチオン性界面活性剤はナノバブルをどう変える？ー吸着被覆率に基づく散乱体動態解析ー	ナノバブルは、液中に存在する直径1マイクロメートル未満の微細気泡であり、特異な界面特性や高い安定性を示す。気液界面への界面活性剤の吸着は、ナノバブルの安定性や動的挙動に影響すると考えられる。本研究では、カチオン性界面活性剤の吸着がナノバブルの物理化学的特性に及ぼす影響を解明するため、吸着被覆率に着目した散乱体動態解析を行った。界面化学理論に基づく吸着モデルと光散乱等の計測データを統合することで、界面活性剤濃度に応じた被覆率の変化とナノバブルの動的挙動の定量化に成功した。本手法は、理論と計測を融合させた新たな解析系として、微細気泡系の物理化学的特性の解明への貢献が期待される。
14*	○藤原潤哉・大石優希・綱島亮	山口大院創成科学(理)	Cl/Br/I混合DABCOH ⁺ 固溶体における組成-結晶構造相関	1,4-ジアザビシクロ[2.2.2]オクタン（dabco）は二価の有機塩基であり、その共役酸における分子間水素結合鎖やイオン対構造などの構造様式、およびプロトンダイナミクスは対アニオン X ⁻ に強く支配される。本研究では、Xを Cl, Br, I とする疑二元系固溶体（dabcoH） ₂ (Cl/Br)Iの作製に成功し、組成比に応じた結晶構造を評価した。さらに、各二成分系固溶体との結晶構造および水素結合ネットワークの違いを比較したため、その結果を報告する。
15*	○生田秀治・大石優希・綱島亮	山口大院創成科学(理)	分子性イオン結晶dabcoH・I ₃ の機械的変形	塑性変形を示す有機結晶の機序は、分子間のπ-π相互作用により分子カラムを形成し、隣接するカラム同士がハロゲン結合などの弱い相互作用によりスリップ面を形成することで発現する。一方、我々は、1,4-ジアザビシクロ[2.2.2]オクタン(dabco)のモノプロトン化体のヨウ化物塩（dabcoH・I3）が、機械的力に対して変形を示すことを確認した。本発表では、変形機構の理解を目的に、結晶変形に伴う水素結合強度の変化について報告する。
16*	○田中大翔・綱島亮	山口大院創成科学(理)	尿酸ナトリウム水和物の構造解析	痛風は、尿酸代謝異常によって発症する疾患であり、関節内に尿酸アントリウムー水和物（monosodium urate monohydrate; MSU・H2O）結晶が沈着することを機序とする。痛風の治療にはMSU・H2Oの溶解性が重要な物理的性質として知られており、これまでに結晶構造や形成についての理解が進められてきた。本研究では、MSU・H2O結晶が生理温度および高水活量条件のもと、どの結晶相として存在し得るかを明らかにするため、温度依存の単結晶エックス線構造解析を行ったので報告する。
17	○藤本航平・綱島亮	山口大院創成科学(理)	Lindqvist型ポリオキシニオベートアニオンを挿入したLDH複合体の電気物性調査	ポリオキシニオベート（PONb）はNbを骨格とするポリオキシメタレート（POM）の一種で、他のPOM種と異なり高電荷や塩基性を示すことで知られている。また、POMは層状複水酸化物（LDH）の複合体が形成可能で、多数の複合体が報告されている。しかし、PONbを層間に導入したLDH複合体の研究例、特に電気物性に関する報告は少ない。そこで本研究では、PONbがLDH系の物性に与える影響の調査を目的に、PONbアニオン[Nb ₆ O ₁₉] ⁸⁻ のLDH複合体を作製し、電気伝導特性を評価した。

【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