研究室名

17-3-12　溶液化学研究室

最近の研究課題とその取り組みの概要

原子レベルで液体を眺めると、液体を構成する分子は自由に運動しており、結晶のように周期的な構造を持たない。しかし、液体中の分子は短距離秩序を形成しており、分子の配置（液体構造）や運動がその液体の性質を決める。 液体は様々な化学的・工業的・生物学的プロセスにおいてその機能性を発揮している。当研究室では、主に X 線・中性子散乱および計算科学的手法を用いて、液体が持つ機能の発現原理を分子レベルで解明することに取り組んでいる。

X 線や中性子の波長は原子間距離に相当し、物質の構造や運動を調べるには最適なプローブである。放射光や中性子ビームを用いて、(a) 機能性液体であるナノ流体の機能発現のメカニズムや (b) 生体における水の役割を分子レベルで明らかにした。それぞれについての具体的な内容を以下に記載する。

(a) ナノ粒子を液体に分散させた系はナノ流体と呼ばれ、新規熱伝導材料として期待されている。熱伝導機構を液体のダイナミクスから議論するために、各種金属ナノ粒子を水や有機溶媒に分散させた系の X 線非弾性散乱測定を行った。一般化 Langevin 方程式を用いた解析により、液体分子のダイナミクスがナノ粒子の影響によりどのように変化するのかを明らかにした。

(b) 筋肉や細胞骨格を形成するアクチンフィラメントの水和水のダイナミクスを測定した。低温においても水和水は凍結せず、ガラス状態となることが示された。そして、室温付近では水の運動性が増加し、タンパク質分子が運動する際の潤滑剤として水が機能することが示された。また、イオン液体と水の混合溶液中におけるタンパク質の会合構造を小角散乱により明らかにした。その結果、タンパク質周囲のミクロ環境がタンパク質の構造安定性や会合に大きな影響を与えることが明らかになった。

キーワード : ナノ流体、イオン液体、液体構造、ダイナミクス、タンパク質、X 線散乱、中性子散乱

研究室の構成員

吉田亨次（准教授）・博士（工学）

2021 年度の大学院生および卒論生の人数と研究テーマ

4 年次生 : 3 名

広角 X 線およびラマン散乱による空気中に浮揚させたカルボン酸水溶液液滴の構造

分子動力学法によるヒドラジニウムトリフルオロ酢酸塩水溶液の構造解析

分子動力学法による酢酸水溶液の構造解析

教員の担当科目

吉田亨次：（学部）情報化学、情報活用基礎、外書講読（物質系）、基礎物理化学実験、構造物理化学実験、化学実験、化学特別研究、卒業論文

教員の所属学会

吉田亨次：日本化学会、日本分析化学会、日本高圧力学会、溶液化学研究会、日本中性子科学会、日本生物物理学会、分子科学会

最近５年間の学術論文

（すべて査読有）

T. Yamaguchi, N. Fukuyama, K. Yoshida, Y. Katayama, Ion Solvation and Association and Water Structure in an Aqueous Cerium(III) Chloride Solution in the Gigapascal Pressure Range, Analytical Sciences 38(2) (2021); doi : 10.2116/analsci.21P297

W.Q. Zhang, T. Yamaguchi, C.H. Fang, K. Yoshida, Y.Q. Zhou, F.Y. Zhu, S. Machida, T. Hattori, W. Li, Structure of an aqueous RbCl solution in the gigapascal pressure range by neutron diffraction combined with empirical potential structure refinement modeling, Journal of Molecular Liquids 348, 118080 (2021); doi : 10.1016/j.molliq.2021.118080

S. Hosokawa, T. Kamiyama, K. Yoshida, T. Yamaguchi, S. Tsutsui, A.Q.R. Baron, Collective dynamics of liquid acetone investigated by inelastic X-ray scattering, Journal of Molecular Liquids 332, 115825 (2021); doi: 10.1016/j.molliq.2021.115825

M. Sera, M. Yamamoto, K. Tomita, Y. Yabara, S. Izawa, M. Hiramoto, T. Nakanishi, K. Yoshida, K. Nishiyama, Morphology control and synthesis of afterglow materials with a SrAl2O4 framework synthesized by Surfactant-Template and hydrothermal methods, Chemical Physics Letters 780, 138916 (2021); doi: 10.1016/j.cplett.2021.138916

K. Yoshida, T. Yamaguchi, D.T. Bowron, J.L. Finney, The structure of aqueous solutions of hexafluoro-iso-propanol studied by neutron diffraction with hydrogen/deuterium isotope substitution and empirical potential structure refinement modeling, Physical Chemistry Chemical Physics 23, 13561-13573 (2021); doi: 10.1039/D1CP00950H

Y. Zhou, T. Yamaguchi, K. Ikeda, K. Yoshida, T. Otomo, C. Fang, W. Zhang, F. Zhu, Dihydrogen Bonds in Aqueous $NaBD_4$ Solution by Neutron and X-ray Diffraction, J. Phys. Chem. Lett. 11(5), 1622-1628 (2020); doi: 10.1021/acs.jpclett.9b03183

T. Yamaguchi, N. Fukuyama, K. Yoshida, Y. Katayama, Ion Solvation and Water Structure in an Aqueous Sodium Chloride Solution in the Gigapascal Pressure Range, Journal of Physical Chemistry Letters 12, 250-256 (2020); doi: 10.1021/acs.jpclett.0c03147

F. Zhu, T. Yamaguchi, K. Yoshida, W. Zhang, H. Liu, Y.n Zhou, C. Fang, Ion hydration and association in aqueous potassium tetrahydroxyborate solutions, Analyst 145, 2245-2255 (2020); doi: 10.1039/c9an01662g

Y. Zhou, T. Yamaguchi, W. Zhang, K. Ikeda, K. Yoshida, F. Zhu, H. Liu, Structure of Aqueous

H_3BO_3 Solutions by DFT and Neutron Scattering, Phys. Chem. Chem. Phys. 22, 17160-17170 (2020); doi:10.1039/D0CP02306

吉田亨次、山口敏男、広いエネルギー範囲で観測される水の構造とダイナミクス，波紋 29, 86-90 (2019); doi : /10.5611/hamon.29.2_86

K. Yoshida, T. Yamaguchi, Generalized Langevin analysis of inelastic X-ray scattering for copper/ethylene glycol nanofluid, Chemical Physics Letters 718, 74-79 (2019); doi: 10.1016/j.cplett.2019.01.024

K. Yoshida, S. Ishida, T. Yamaguchi, Hydrogen bonding and clusters in supercritical methanol–water mixture by neutron diffraction with H/D substitution combined with empirical potential structure refinement modelling, Mol. Phys. 117, 3297-3310 (2019); doi: 10.1080/00268976.2019.1633481

K. Yoshida, N. Fukuyama, T.Yamaguchi, S. Hosokawa, H. Uchiyama. S. Tsutsui, A.Q.R.Baron, Inelastic X-ray scattering on liquid benzene analyzed using a generalized Langevin equation, Chemical Physics Letters 680, 1-5 (2019); doi: 10.1016/j.cplett.2017.05.005

T. Yamaguchi, M. Nishino, K. Yoshida, M. Takumi, K. Nagata, T. Yamaguchi, Ion Hydration and Association in an Aqueous Calcium ChlorideSolution in the GPa Range, Eur. J. Inorg. Chem. 1170-1177 (2019); doi: 10.1002/ejic.201900016

K. Yoshida, H. Uchiyama, T. Yamaguchi, Structure and dynamical properties of hydrated F-actin investigated by X-ray scattering, Journal of Molecular Liquids 291, 111265 (2019); doi: 10.1016/j.molliq.2019.111265

Y. Zhou, T. Yamaguchi, K. Yoshida, C.H. Fang, Y. Fang, F. Zhu, Structure of alkaline aqueous NaBH4 solutions by x-ray scattering and empirical potential structure refinement, Journal of Molecular Liquids 274, 173-182 (2019); doi: /10.1016/j.molliq.2018.10.124

K. Yoshida, T. Zenin, A. Fujiyoshi, Y. Sanada, T. Yamaguchi, K. Murata, S. Takata, K. Hiroic, T. Takekiyo, Y. Yoshimura, The effect of alkyl ammonium ionic liquids on thermal denaturation aggregation of β-lactoglobulin, Journal of Molecular Liquids 293, 111477 (2019); doi: 10.1016/j.molliq.2019.111477

K. Mawatari, H. Koreeda, K. Ohara, S. Kohara, K. Yoshida, T. Yamaguchi, T. Kitamori, Nano X-ray diffractometry device for nanofluidics, Lab Chip 18, 1259-1264 (2018); doi: 10.1039/C8LC00077H

T. Yamaguchi, M. Saito, K. Yoshida, T. Yamaguchi, Y. Yoda, M. Seto, Structural Relaxation and Viscoelasticity of a Higher Alcohol with Mesoscopic Structure, J. Phys. Chem. Lett. 9 (2), 298–301 (2018); doi: 10.1021/acs.jpclett.7b02907

Yongquan Zhou, Koji Yoshida, Toshio Yamaguchi, Hongyan Liu, Chunhui Fang, Yan Fang, Microhydration of BH_4^-: Dihydrogen Bonds, Structure, Stability, and Raman Spectra, J. Phys. Chem. A 121 (47), 9146–9155 (2017); doi: 10.1021/acs.jpca.7b09703

Tsuyoshi Yamaguchi, K. Yoshida, Toshio Yamaguchi, Y. Kameda, K. Ikeda, T. Otomo, Analysis of Prepeak Structure of Concentrated Organic Lithium Electrolyte by Means of Neutron Diffraction with Isotopic Substitution and Molecular Dynamics Simulation, J. Phys. Chem. B 121 (21), 5355–

5362 (2017); doi: 10.1021/acs.jpcb.7b00686

K. Yoshida, N. Fukuyama, T. Yamaguchi, S. Hosokawa, H. Uchiyama, S. Tsutsui, A.Q.R. Baron, Inelastic X-ray scattering on liquid benzene analyzed using a generalized Langevin equation, Chem. Phys. Lett. 680, 1-5 (2017); doi: 10.1016/j.cplett.2017.05.005.

S. Kittaka, K. Yoshida, T. Yamaguchi, M-C Bellissent Funel, P. Fouquet, A neutron spin echo study of low-temperature water confined in the spherical silica pores of SBA-16, Phys. Chem. Chem. Phys. 19, 10502-10510 (2017); doi: 10.1039/C6CP08047B

S. Hosokawa, K. Kimura, M. Yamasaki, Y. Kawamura, K. Yoshida, M. Inui, S. Tsutsui, A. Q R Baron, Y. Kawakita, S. Itoh, Impurity effects in the microscopic elastic properties of polycrystalline Mg-Zn-Y alloys with a synchronized long-period stacking ordered phase, J. Alloys. Compounds 695, 426-432 (2017); doi: 10.1016/j.jallcom.2016.10.26

K. Yoshida, A. Q. R. Baron, H. Uchiyama, S. Tsutsui, T. Yamaguchi, Structure and collective dynamics of hydrated anti-freeze protein type III from 180 K to 298 K by X-ray diffraction and inelastic X-ray scattering, J. Chem. Phys. 144, 134505 (2016); doi: 10.1063/1.4944987

K. Yoshida, A. Tashiro, T. Yamaguchi, Thermal properties and hydration structure of poly-L-lysine, polyglycine, and lysozyme, J. Mol. Liquids 217, 57–61 (2016); doi:10.1016/j.molliq.2015.08.048

最近５年間の学術著書

K. Yoshida, Structure and Dynamics of Liquids Investigated by Quantum Beam: Binary Solution, Solution Under High Pressure, and Confined Solution, in Molecular Basics of Liquids and Liquid-Based Materials, (Ed.) Katsura Nishiyama, Tsuyoshi Yamaguchi, Toshiyuki Takamuku, Norio Yoshida, Springer Singapore (2021)

最近５年間の学術国際会議での発表

K. Yoshida, The effect of alkyl ammonium ionic liquids on aggregation of β-lactoglobulin POLYSOLVAT-13, remote, 9-12 November, 2021.

K. Yoshida, T. Yamaguchi, Structure and dynamic properties of water at extreme conditions – in a nano-space and under high pressures, Materials Research Meeting 2019, Yokohama, Decenber 10-14, 2019. (Invited)

K. Yoshida, T. Yamaguchi, Inelastic X-ray scattering measurements of copper/ethylene glycol and alumina/water nanofluids, The 36the International Conference on Solution Chemistry, Xining, August 4-9, 2019.

Toshio Yamaguchi, Kanae Ito, Koji Yoshida, Marie-Claire Bellissent-Funel, Thermal behavior, structure and dynamics of low-temperature water confined in biopolymer gels, 5th International Symposium & Exhibition on Aqua Science and Water Resources(ISASWR’17), Fukuoka, August 8-11, 2017. (Plenary lecture)

T. Inoue, M. Torigoe, K. Yoshida, T. Yamaguchi, T. Yamada, K. Shibata, Structure and dynamics of

glycine solution confined in MCM-41 C18 using X-ray diffraction and quasi-elastic neutron scattering, 5th International Symposium & Exhibition on Aqua Science and Water Resources(ISASWR'2017), Fukuoka, August 8-11, 2017.

T. Zenin, K. Yoshida, T. Yamaguchi, K. Murata, The aggregation of β-lactoglobulin induced by thermal denaturation in propylammonium nitrate aqueous solutions, 5th International Symposium & Exhibition on Aqua Science and Water Resources(ISASWR'17), Fukuoka, August 8-11, 2017.

K. Yoshida, K. Mawatari, H. Koreeda, T. Kitamori, K. Ohara, S. Kohara, T. Yamaguchi, Structure analysis of water confined in extended nanospace, 5th International Symposium & Exhibition on Aqua Science and Water Resources(ISASWR'17), Fukuoka, August 8-11, 2017.

最近５年間の代表者としての学外資金導入実績

吉田亨次：日本学術振興会・科研費・基盤研究C「液体のダイナミクスから観たイオンナノ流体の機能解明」(19K12632) (代表) 3,400千円 (直接経費) 2019年4月～2022年3月

最近５年間の代表者としての学内資金導入実績

吉田亨次：領域別研究チーム「溶媒によって誘起される両親媒性高分子の機能発現機構の解明」 81 万円 2021 年～2023 年(予定)

吉田亨次：新任特別補助「メソポーラスシリカ内に閉じ込めた溶液の熱的性質の解明」 300 万円 2021 年

最近５年間の学会等学術団体における役職など

吉田亨次：

日本原子力研究開発機構 研究課題諮問委員会委員 2020 年 4 月－現在

一般財団法人総合科学研究機構 開発課題諮問委員会委員 2020 年 4 月－現在

J-PARC MLF 利用者懇談会 液体・非晶質分科会 代表 2019 年 10 月－現在

国際会議 Conference on Solution Chemistry, Xining, China (Chairman: Chunhui Fang) , International Academic Committee 2020 年

一般財団法人総合科学研究機構 利用研究課題審査委員会（NSPRC）分科会委員 2017 年 7 月－2021 年 6 月

J-PARC センター 中性子課題審査部会（PEC）分科会委員 2017 年 7 月－2021 年 6 月

東大物性研附属中性子科学研究施設 中性子散乱実験審査委員会委員 2015 年 4 月－現在

国際会議 JMLG/EMLG Meeting 2018, Nagoya (Chairman: Susumu Okazaki), Executive Committee, 2017 年

日本中性子科学会第 17 回年会 実行委員 2017 年

日本中性子科学会 行事幹事 2015 年 4 月－2017 年 3 月

九州分析化学若手の会世話人 2016 年

日本高圧力学会評議員 2014 年 9 月－2016 年 8 月

日本化学会新領域研究グループ「機能性ソフトマテリアルと分子統計化学」構成員 2013 年 4 月－現在

一般財団法人総合科学研究機構　利用研究課題審査委員会分科会レフェリー　2011 年 8 月－現在

日本分析化学会九州支部幹事　2011 年 3 月－現在

最近 5 年間の一般向け論文と著書、行政報告書など

該当なし

最近 5 年間の一般（非学術）集会での発表論文

該当なし

最近 5 年間の学術団体以外の団体での啓蒙活動や社会貢献活動とその役職など

該当なし

その他特筆事項

吉田亨次：波紋 President Choice 賞を受賞(2020)