

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、(b) 生体における水の役割、(c) 高分子電解質膜中の水の状態や運動、(d) ギガパスカル圧力下における電解質水溶液中のイオン溶媒和・会合・溶媒水の構造、(e) 超音波浮揚法による空気中に浮揚させた単一液滴の構造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、タンパク質周囲のマイ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。

(c) プロトン交換膜に代わりアニオン交換膜を用いた固体高分子形燃料電池が近年注目されている。この方式ではより安価な金属触媒膜を使用できるなど利点がある。アニオン交換膜中でのイオンの伝導経路を探るために、アニオン交換膜中の水の水素結合状態や運動を放射光 X 線や中性子準弾性散乱で明らかにした。

(d) ギガパスカル圧力は地球の上部マントル層に相当し、高压下での水や電解質水溶液の構造はマグマの成長や火山噴火、また地層のずれによる地震の生成メカニズムを調べる上で需要である。SPring-8 や J-PARC MLF での高压 X 線・中性子散乱により、ギガパスカル圧力下における種々の金属塩化物水溶液のイオン溶媒和・会合・水構造を明らかにした。

(e) 空気中のエアロゾル液滴は雲形成核であり、地球の異常気象に深く関わっている。超音波浮揚法とラマン散乱および SPring-8 でのシンクロトロン X 線散乱実験により、硝酸マグネシウムや硫酸マグネシウム水溶液液滴の構造を決定した。

キーワード：ナノ流体、イオン液体、高分子電解質膜、液体構造、ダイナミクス、タンパク質、X線散乱、中性子散乱、分子動力学シミュレーション、高温高圧、イオン溶媒和、イオン会合、超音波浮揚、ラマン散乱、液滴
研究室の構成員
吉田 亨次（准教授）・博士（工学） 永井 哲郎（助教）・博士（理学） 山口 敏男（研究員、中国科学院青海塩湖研究所・教授）・理学博士
2022 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：5 名 アニオン交換膜の分子モデリング イオン交換樹脂内の水のダイナミクス測定 過塩素酸ナトリウム・水・エチレングリコール混合系の分子動力学シミュレーション
教員の担当科目
吉田 亨次：（学部）情報化学、情報活用基礎、物理化学 B、化学数学 A、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 永井 哲郎：（学部）化学実験、基礎化学演習、化学基礎演習、物質機能化学実験、ナノ材料評価実験
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 永井 哲郎：日本生物物理学会、日本物理学会、溶液化学研究会、分子シミュレーション学会、理論化学会、高分子学会
最近 5 年間の学術論文
（すべて査読有） T. Yamaguchi, K. Yoshida, S. Machida, T. Hattori, Neutron scattering on an aqueous sodium chloride solution in the gigapascal pressure range, J. Mol. Liquids 365, 120181 (2022) doi:10.1016/j.molliq.2022.1201 Koji Yoshida, Yusuke Sanada, Toshio Yamaguchi, Masato Matsuura, Hiromu Tamatsukuri, Hiroshi Uchiyama, The translational, rotational, and phonon dynamics of water in ZrO₂ /water nanofluid, J. Mol. Liquids, 366 120218-120218 (2022); doi:10.1016/j.molliq.2022.120218 Tsuyoshi Yamaguchi, Koji Yoshida, Shinya Hosokawa, Daisuke Ishikawa, Alfred Q. R. Baron, Effects of molecular shape and flexibility on fast sound of organic liquids, J. Chem. Phys. 157, 154504 (2022); doi:10.1063/5.0107387 Toshio Yamaguchi, Sota Higa, Koji Yoshida, Kazushi Sumitani, Tsutomu Kurisaki, Structure of Aqueous Scandium(III) Nitrate Solution by Large-Angle X-ray Scattering Combined with Empirical

Potential Refinement Modeling, X-ray Absorption Fine Structure, and Discrete Variational X α Calculations, Bull. Chem. Soc. Japan 95(4) 673-679 (2022); doi:10.1246/bcsj.20220007

K. Yoshida, S. Nishimoto, **T. Yamaguchi**, Structural analysis of hydrazinium trifluoroacetate aqueous solution by X-ray diffraction and empirical potential structure refinement modeling in the temperature range of 25 to -125 °C, J. Mol. Liquids 353, 118802 (2022); doi: /10.1016/j.molliq.2022.118802

Jun Shirai, **Koji Yoshida**, Hiroki Koreeda, Takehiko Kitamori, **Toshio Yamaguchi**, Kazuma Mawatari, Water structure in 100 nm nanochannels revealed by nano X-ray diffractometry and Raman spectroscopy, J. Mol. Liquids 350, 118567-118567 (2022); doi: 10.1016/j.molliq.2022.118567

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, J. Mol. Liquids 348 118080-118080 (2022); doi: 10.1016/j.molliq.2021.118080

吉田 亨次, 山口 敏男, 多孔性シリカおよび高分子ゲルに閉じ込められた水の熱的性質・構造・ダイナミクス, 熱測定 49, 95-101 (2022); doi: 10.11311/jscta.49.3_95

Y. Wang, F. Zhu, **T. Yamaguchi**, **K. Yoshida**, G. Wang, R. Liu, L. Song, Y. Zhou, H. Liu, Structure of phase change energy storage material Ca(NO₃)₂ · 4H₂O solution, J. Mol. Liquids 356, 119010 (2022); doi: 10.1016/j.molliq.2022.119010

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, Anal. Sci. 38(2) (2022); 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, J. Mol. 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, J. Mol. 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, Chem. Phys. Lett. 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, Phys. Chem. Chem. Phys. 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 NaBD₄ Solution by Neutron and X-ray Diffraction, J. Phys. Chem. Lett. 11(5), 1622-

1628 (2020); doi: 10.1021/acs.jpcllett.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.jpcllett.0c03147

F. Zhu, **T. Yamaguchi**, **K. Yoshida**, W. Zhang, H. Liu, Yn 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.cpllett.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, *Chem. Phys. Lett.* 680, 1-5 (2019); doi: 10.1016/j.cpllett.2017.05.005

T. Yamaguchi, M. Nishino, **K. Yoshida**, M. Takumi, K. Nagata, T. Yamaguchi, Ion Hydration and Association in an Aqueous Calcium Chloride Solution 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, *J. Mol. 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 $NaBH_4$ solutions by x-ray scattering and empirical potential structure refinement, *J. Mol. 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, *J. Mol. 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

Tsuyoshi Yamaguchi, M. Saito, K. Yoshida, **Toshio 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.jpcclett.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.jpccb.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.cpl.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

Hiromi Baba, Ryo Urano, **T. Nagai**, and S. Okazaki, “Self-diffusion coefficients of chemically diverse pure liquids by all-atom molecular dynamics simulations,” *Journal of Computational Chemistry* **43** 1892–1900 (2022).

Han Asi, Bhaskar Dasgupta, **T. Nagai**, Osamu Miyashita, and Florence Tama, “A hybrid approach to study large conformational transitions of biomolecules from single particle XFEL diffraction data,” *Frontiers in Molecular Biosciences* **9**, 913860 (15 pages)(2022). <10.3389/fmolb.2022.913860>

T. Nagai and Susumu Okazaki, “Global diffusion of hydrogen molecules in the heterogeneous structure of polymer electrolytes for fuel cells: Dynamic Monte Carlo combined with molecular dynamics calculations,” *The Journal of Chemical Physics* **157**, 054502 (10 pages)(2022).

T. Nagai, Akira Yoshimori and Susumu Okazaki, “Dynamic Monte Carlo calculation generating particle trajectories that satisfy the diffusion equation for heterogeneous systems with a position-dependent diffusion coefficient and free energy,” *The Journal of Chemical Physics* **156**, 154506 (14 pages) (2022).

T. Nagai, Kazushi Fujimoto and Susumu Okazaki, “Three-dimensional free-energy landscape of hydrogen and oxygen molecules in polymer electrolyte membranes: Insight into diffusion paths,” *The Journal of Chemical Physics* **156**, 044507 (14 pages)(2022).

Kazushi Fujimoto, **T. Nagai (co-first author)**, Tsuyoshi Yamaguchi, “Momentum removal to obtain the position-dependent diffusion constant in constrained molecular dynamics simulation,” *Journal of Computational Chemistry* **42**, 2136–2144 (2021).

T. Nagai, Shuhei Tsurumaki, Ryo Urano, Kazushi Fujimoto, Wataru Shinoda, and Susumu Okazaki,

“Position-dependent diffusion constant of molecules in the heterogeneous systems as evaluated by the local mean squared displacement,” *Journal of Chemical Theory and Computation* **16**, 7239–7254 (2020).

Asanga Bandara, Afra Panahi, George A. Pantelopulous, **T. Nagai**, and John E. Straub, “Exploring the impact of proteins on the line tension of a phase-separating ternary lipid mixture,” *The Journal of Chemical Physics* **150**, 204702 (15 pages) (2019).

T. Nagai, F. Tama, and O. Miyashita, “Cryo-cooling effect on DHFR crystal studied by replica-exchange molecular dynamics simulations,” *Biophysical Journal* **116**, 395–405 (2019).

Ashutosh Srivastava, **T. Nagai**, Arpita Srivastava, Osamu Miyashita, and Florence Tama, “Role of computational methods in going beyond X-ray crystallography to explore protein structure and dynamics,” *International Journal of Molecular Sciences* **19**, E3401 (23 pages) (2018) (review article).

T. Nagai, Yuki Mochizuki, Yasumasa Joti, Florence Tama, and Osamu Miyashita, “Gaussian mixture model for coarse-grained modeling from XFEL,” *Optics Express* **26**, 26734 (16 pages) (2018).

George A. Pantelopulous, **T. Nagai**, Asanga Bandara, Afra Panahi, and John E. Straub, “Critical size dependence of domain formation observed in coarse-grained simulations of bilayers composed of ternary lipid mixtures,” *The Journal of Chemical Physics* **147**, 095101 (9 pages) (2017).

T. Nagai, “General formalism of mass scaling approach for replica-exchange molecular dynamics and its application,” *Journal of the Physical Society of Japan* **86**, 014003 (9 pages) (2017).

永井哲郎, 岡崎進, “不均一系にける物質輸送に関する分子論的研究の展開” アンサンブル **24**, 160–166 (2022) (査読あり).

永井哲郎, “優秀講演賞 受賞寄稿「位置に依存した拡散係数の新規評価手法の開発：大規模不均一系における物質輸送解明にむけて」” フロンティア **4**, 20–23 (2022) (査読あり).

Y. Kato, **K. Yoshida**, Y. Ohba, I. Fujimoto, Y. Imahara, S. Nakchi, K. Nakashima, K. Shoji, **T. Yamaguchi**, Different properties of two types of red fluorescent proteins in octocoral *Scleronephythya* spp. as Akane families, *Luminescence*, **37**, 2074-2082 (2022).

Z. Jing, Y. Zhou, W. Zhang, **T. Yamaguchi**, **K. Yoshida**, G. Wang, I. Han, Structure of 18-crown-6/Cs⁺ complexes in aqueous solution by wide angle X-ray scattering and density functional theory, *The Journal of Molecular Liquids*, **360**, 120218 (2022).

山口敏男、種々の環境下における水の構造、化学と教育、**70**, 344-347 (2022).

G. Wang, Y. Zhou, **T. Yamaguchi**, H. Liu, F. Zhu, Z. Wu, Structure of aqueous CaCl₂ solutions by X-ray scattering and density functional theory, *Russian Journal of Physical Chemistry*, **A96**, S68-S76 (2022).

H. Liu, Y. Zhou, D. An, G. Wang, F. Zhu, **T. Yamaguchi**, Structure of aqueous KNO₃ solutions by wide-angle X-ray scattering and density functional theory, *The Journal of Physical Chemistry B*, **126**, 5866-5875 (2022).

T. Yamaguchi, N. Fukuyama, **K. Yoshida**, Y. Katayama, Ion solvation and water structure in an aqueous sodium chloride solution in the gigapascal pressure range, *The Journal of Physical Chemistry Letters*, **12**, 250-256 (2021).

- R. Sakamoto, M. Yamashita, K. Nakamoto, Y. Zhou, N. Yoshimoto, K. Fujii, **T. Yamaguchi**, A. Kitajou, S. Okada, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 22, 26452-26458 (2020).
- 山口敏男、高圧下の水の構造、福岡大学理学集報、50(2), 78-91 (2020).
- Y. Zhou, **T. Yamaguchi**, K. Ikeda, C. Fang, **K. Yoshida**, W. Zhang, F. Zhu, H. Liu, G. Wang, Structure of liquid water studied by neutron and X-ray scattering: temperature effects, *Chemical Report* 83, 434-441 (2020).
- 坂本遼、中本康介、喜多條鮎子、村上大樹、平井晴香、田中賢、周永全、山口敏男、岡田重人、高電圧水系電池の確立を目指した濃厚水系電解液、*電気化学*、87, 220-226 (2019).
- K. Ito, A. Faraone, M. Tyagi, **T. Yamaguchi**, S.H. Chen, Nanoscale dynamics of water confined in ordered mesoporous carbon, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 21, 8517-8528 (2019).
- Y. Zhou, Y. Soga, **T. Yamaguchi**, Y. Fang, C. Fang, Structure of aqueous RbCl and CsCl solutions using X-ray scattering and empirical potential structure refinement modeling, *Wuli Huaxue Xuebao/Acta Physico-Chimica Sinica* 34, 483-491 (2018).
- Y. Zhou, **K. Yoshida**, **T. Yamaguchi**, H. Liu, C. Fang, Y. Fang, $B(OH)_4^-$ hydration and association in sodium metaborate solutions by X-ray diffraction and empirical potential structure refinement, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 19, 27878-27887 (2017).
- T. Takekiyo, **K. Yoshida**, Y. Funahashi, S. Nagata, H. Abe, **T. Yamaguchi**, Y. Yoshimura, Helix-forming ability of proteins in alkylammonium nitrate, *The Journal of Molecular Liquids* 243, 584-590 (2017).

最近 5 年間の学術著書

- 吉田 亨次, X線・中性子分光, I章 12-8, 高圧力の科学・技術事典, 入船 徹男 他(編), 朝倉書店 (2022)
- 吉田 亨次, 高圧下における水および電解質溶液の構造, VI章 1-3, 高圧力の科学・技術事典, 入船 徹男 他(編), 朝倉書店 (2022)
- 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)
- T. Yamaguchi, Structure and dynamics of solutions studied by X-ray and neutron scattering, *Encyclopedia of Analytical Chemistry*, pp. 1-26 (2022)

最近 5 年間の学術国際会議での発表

- K. Yoshida, In-situ Observation of the Decomposing Process of Organic Compounds in High-temperature Water by Neutron Imaging, Annual meeting of solution chemistry, Yamaguchi Symposium, Kagoshima, 28 October 2022.
- 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, December 10-14, 2019. (Invited)
- K. Yoshida, T. Yamaguchi, Inelastic X-ray scattering measurements of copper/ethylene glycol and alumina/water nanofluids, The 36th International Conference on Solution Chemistry, Xining, August 4-9, 2019.
- T. Yamaguchi, K. Ito, K. Yoshida, M.C. 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.
- T. Nagai and Susumu Okazaki, "Gas transportation in inhomogeneous systems studied using large-scale molecular dynamics simulation and dynamic Monte Carlo method", the 37th International Conference on Solution Chemistry, online, July 25–29, 2022.
- T. Nagai, Shuhei Tsurumaki, Ryo Urano, Kazushi Fujimoto, Wataru Shinoda, and Susumu Okazaki, "Transportation of molecules under inhomogeneous environments of large systems: Position-dependent diffusion constant and free energy," 2021 International chemical congress of pacific basin societies, Online, December 16–21, 2021.
- Yoshimichi Andoh, Noriyuki Yoshii, Tatsuya Sakashita, Kazushi Fujimoto, T. Nagai, Susumu Okazaki, "Development of a highly parallelized general purpose molecular dynamics simulation program MODYLAS and its implementation on FUGAKU," 2021 International chemical congress of pacific basin societies, Online, December 16–21, 2021.
- T. Nagai, Shuhei Tsurumaki, Ryo Urano, Kazushi Fujimoto, Wataru Shinoda, and Susumu Okazaki, "Novel method to evaluate position-dependent diffusion constant of small molecules in heterogeneous system," the 36th International Conference on Solution Chemistry, Xining, China, August 4–8, 2019.
- T. Nagai, "Toward hybrid modeling of XFEL single particle experiment by Gaussian mixture model," Workshop "Trends in Computational Molecular Biophysics," Kanazawa, Japan, November 3–4, 2018.
- T. Yamaguchi, X-ray and neutron scattering of water and electrolyte solutions in the gigapascal pressure range, The Xth International Meeting of the Spanish Society of Neutron Techniques, June 15, 2022, Almeria (Spain) (Invited)

T. Yamaguchi, S. Matsuo, S. Nakasato, N. Hata, K. Yoshida, S. Ishizaka, K. Ohara, Structure and properties of a single aqueous electrolyte droplet in the air, The 37th International Conference of Solution Chemistry, July 25-28 (2022), Remote.

T. Yamaguchi, S. Matsuo, S. Nakasato, N. Hata, K. Yoshida, S. Ishizaka, K. Ohara, Structure and properties of a single aqueous electrolyte droplet in the air by Raman spectroscopy and X-ray diffraction, PACIFICHEM 2021, Remote, December 15-21 (2021).

T. Yamaguchi, N. Fukuyama, K. Yoshida, Y. Katayama, T. Hattori, PACIFICHEM 2021, Remote, December 15-21 (2021) (Invited).

T. Yamaguchi, Structure of water and aqueous electrolyte solutions in the GPa range, EMLG/JMLG2019 Meeting, September 9 (2019), (Invited)

T. Yamaguchi, Ion hydration and association in aqueous electrolyte solutions in the GPa range, The 36th International Conference on Solution Chemistry, August 9 (2019), Xinghai (Invited).

T. Yamaguchi, T. Urabe, K. Yoshida, S. Kittaka, F. Zhuranyi, M.-C. Bellissent-Funel, Thermal behavior, structure, and dynamic properties of 1,4-dioxane-water binary solutions confined in mesoporous silica MCM-41, Joint Conference of EMLG/JMLG Meeting 2018 and 41st Symposium of Solution Chemistry of Japan, November 6 (2018), Nagoya.

T. Yamaguchi, Structure of Water and Aqueous Solutions in the Ambient to GPa Pressure Range, 15th Eurasia Conference on Chemical Sciences, September 7 (2018) (Invited)

T. Yamaguchi, K. Ito, K. Yoshida, M.-C. 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), August 9 (2017), Fukuoka

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

吉田 亨次：日本学術振興会・科研費・基盤研究 C「深共晶溶媒の構造と物性および生体関連分野への応用」(22K12673) (代表) 3,300 千円 (直接経費) 2022 年 4 月～2025 年 3 月 (予定)

山口 敏男：日本学術振興会・科学研究費助成事業 基盤研究(C)「空気中に浮揚させた液滴の in situ 構造解析法の開発とエアロゾル反応への展開」(19K05551) (代表) 3,300 千円 (直接経費) 2019 年 4 月～2023 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：
日本高圧力学会 評議員 2022 年 9 月 - 現在

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
 中性子産業利用推進協議会 液体・非晶質研究会 主査 2019 年 10 月－現在
 国際会議 Conference on Solution Chemistry, Xining, China (Chairman: Chunhui Fang) ,
 International Academic Committee 2020 年
 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
 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
 日本分析化学会九州支部幹事 2011 年 3 月－現在

永井哲郎：

第 44 回溶液化学シンポジウム実行委員、2022 年度
 第 33 回分子シミュレーション討論会実行委員、2019 年度
 度科学技術・学術政策研究（NISTEP）専門調査員

山口敏男：

日本分析化学会、副会長・理事、2018 年 3 月-2020 年 2 月
 International Conference on Solution Chemistry, International Steering Committee, Chairman (2018)
 8 月～現在
 The Journal of Molecular Liquids (Elsevier) Editor-in-Chief
 Liquids (MDPI), Editorial board member

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)
 永井哲郎：

優秀講演賞・第23回理論化学討論会，オンライン，2021年5月13日-15日において

The 5th International Conference on Molecular Simulation, Best Poster Award, Jeju, Korea, November 3-6, 2019.

The Journal of Chemical Physics top reviewer 2017 (2018年7月)

The Journal of Chemical Physics **149**, 010201 (2018) ;

<https://doi.org/10.1063/1.5043197>

山口敏男：青海省科学技術奨励3等賞 (2022) 9月

T. Yamaguchi, N. Fukuyama, K. Yoshida, Y. Katayama, Hot Article Award Analytical Sciences, February 15, 2022.