

研究室名

16-3-12 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) 水系ナトリウムイオン電池電解液の構造解析、(b) 深共晶溶媒の構造とタンパク質の溶媒和との関連、(c) 高分子電解質膜中の水の状態や運動、(d) 高温高压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、(f) 規則的メソ細孔中に閉じ込められた水や有機溶媒・電解質水溶液の構造とダイナミクス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) 水系ナトリウムイオン電池は、現在主流のリチウムイオン電池の代替として期待される二次電池である。水系電解液は安全性が高いが、高電圧が得られないという欠点がある。ナトリウム塩の水溶液に多価アルコールを添加した系の構造とダイナミクスを明らかにし、電位窓との関連を議論した。

(b) 深共晶溶媒は低揮発性や生分解性の性質を持つことから従来のイオン液体に代わる溶媒として注目されている。深共晶溶媒中におけるタンパク質の構造を調べ、深共晶溶媒の液体構造からタンパク質の溶媒和構造を議論した。

(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索するために、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) 亜臨界流体は均一金属酸化物ナノ粒子の生成や超臨界クロマトグラフィーの分離機構・難分解性塩素化合物の完全分解などで重要な役割を果たしている。亜臨界領域における硝酸カルシウム水溶液の X 線散乱と逆モンテカルロ計算法により、イオンの水和・会合と溶媒水の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。超音波浮揚法により空気中に浮揚させた 1 mm サイズの硫酸マグネシウム水溶液の単一液のラマン散乱および SPring-8 でのシンクロトロン X 線散乱実験により、液滴中のイオンの水和・会合・水の構造を明らかにした。さらに、in situ X 線測定により液滴から結晶生成過程の相変化の観察に成功した。

(f) 規則的メソポーラス炭素の細孔中に閉じ込めた水の X 線散乱と中性子準弾性散乱を測定

して、室温から過冷却状態までの水の構造と併進拡散の温度変化を明らかにした。 キーワード：深共晶溶媒、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、高温高压、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（名誉教授、研究員、中国科学院青海塩湖研究所・教授）・理学博士
2024 年度の大学院生および卒論生の人数と研究テーマ 大学院生：M2（3 名） アニオン交換膜の分子モデリング 生体分子のコンフォメーション変化の速度論 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 M1（2 名） 過塩素酸ナトリウム－水－エチレングリコール混合系の中性子準弾性散乱 深共晶溶媒と水の混合系の分子動力学シミュレーション 4 年次生：5 名 深共晶溶媒およびナトリウムイオン電池電解液の液体構造解析 溶液中に分散させたナノ粒子のゼータ電位と会合状態 ナトリウム電池電解液の蒸気圧測定、他
教員の担当科目 吉田亨次：（学部）情報化学、情報活用基礎、化学数学 A、化学数学 B、物理化学 C、物理化学 D、物理化学実験、化学研究 A、化学実験、化学特別研究、卒業論文（大学院）構造物理化学特論 III、構造物理化学講究、構造物理化学特別実験 永井哲郎：（学部）化学実験、基礎化学演習、化学基礎演習、物理化学実験、化学研究 B
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、分子科学会 永井哲郎：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） Toshio Yamaguchi*, Kousei Li, Yuki Matsumoto, Nami Fukuyama, Koji Yoshida, Visualization of the 3D Structure of Subcritical Aqueous Ca(NO₃)₂ Solutions at 25~350 °C and 40 MPa by Raman and X-Ray Scattering Combined with Empirical Potential Structure Refinement Modeling, <i>Liquids</i> 5(1), 1-1 (2024) ; doi: 10.3390/liquids5010001 Hongyan Liu, Zhuanfang Jing, Yongquan Zhou, Tomoyuki Nagatoshi, Kanae Ito, Koji Yoshida, Takeshi

- Yamada, **Toshio Yamaguchi***, X-ray diffraction and quasielastic neutron scattering studies of the structure and dynamic properties of water confined in ordered microporous carbon pores, *Journal of Molecular Liquids* 415, 126316-126316 (2024) ; doi: 10.1016/j.molliq.2024.126316
- Tetsuro Nagai***, **Koji Yoshida**, Deterministic Path Search Algorithm on Free-Energy Landscape Using Random Grids, *Journal of the Physical Society of Japan* 93(8) 084805 (2024) ; doi: 10.7566/jpsj.93.084805
- T. Yamaguchi***, Historical development of a study of the structure and dynamics of liquids and solutions, *Journal of Molecular Liquids* 395, 123919 (2024); doi: doi.org/10.1016/j.molliq.2023.123919
- K. Chai, **T. Yamaguchi**, T. Zuo, J. Tseng, K. Ikeda, Y. Zhou*, Structure, Microheterogeneity, and Transport Properties of Ethanol Decoded by X-ray/Neutron Scattering and MD simulation, *Journal of Physical Chemistry B* 128, 7445 (2024); doi: 10.1021/acs.jpcb.4c02826
- Toshio Yamaguchi***, Shun-ichiro Matsuo, **Koji Yoshida**, Tsutomu Kurisaki, Shoji Ishizaka, Koji Ohara, Structure of Single Aqueous MgSO₄ Droplets Ultrasonically Levitated in the Air: Supersaturation and Crystallization, *Journal of Solution Chemistry* 53, 610–625 (2024); doi: 10.1007/s10953-023-01309-9
- Shinya Hosokawa, **Koji Yoshida**, Improved data analysis for molecular dynamics in liquid CCl₄, *Journal of Molecular Liquids* 395, 123828-123828 (2024); doi: 10.1016/j.molliq.2023.123828
- Koji Yoshida***, **Tetsuro Nagai**, Koji Ohara, Yuto Shirase, Kenji Miyatake, Junji Inukai, In-situ observation of an anion exchange membrane at various humidity by X-ray scattering, *Journal of Molecular Liquids* 391, 123197-123197 (2023); doi: 10.1016/j.molliq.2023.123197
- Shinya Hosokawa, **Koji Yoshida**, A possible origin of the very fast sound in terahertz region in liquid benzene, *Journal of Molecular Liquids* 390, 123063-123063 (2023); :doi: 10.1016/j.molliq.2023.123063
- Koji Yoshida***, Jun Abe, Yoshihiro Matsumoto, Kenji Mishima, In Situ Observation of the Decomposition Process of Woodchips in Subcritical- and Supercritical Water by Neutron Imaging, *Journal of Solution Chemistry* 53(5), 1-9 (2023); doi:10.1007/s10953-023-01287-y
- 川井田拓弥, 永井哲郎, 吉田亨次, アニオン交換膜における水の輸送機構解明にむけた分子動力学シミュレーション, 福岡大学理学集報 53, 15-21 (2023).
- Ayuko Kitajou, Tatsuya Mitsuyasu, **Tetsuro Nagai**, **Koji Yoshida**, and Wataru Kobayashi, NaClO₄ ethylene glycol–water binary solution as an electrolyte for aqueous sodium ion batteries, *Electrochemistry* 91, 117002 (2023); doi: 10.5796/electrochemistry.23-00086
- G. Wang, Y. Zhou, **T. Yamaguchi**, K. Yoshida, K. Ikeda, K. Chai, Z. Liu, Z. Wu, Atomic insights into the heterogeneity and the interface interactions of nanoconfined aqueous electrolyte solution, *Journal of Molecular Liquids* 388, 122746 (2023).
- K. Chai, Y. Zhou, X. Lu, **T. Yamaguchi**, K. Ohara, H. Liu, F. Zhu, Structure of choline chloride-carboxylic acid deep eutectic solvents by wide-angle X-ray scattering and DFT calculations, *Physical Chemistry Chemical Physics* 25, 10481-10494 (2023).

- T. Yamaguchi**, N. Fukuyama, K. Yoshida, Y. Katayama, S. Machida, T. Hattori, An X-ray and Neutron Scattering Study of Aqueous MgCl_2 Solution in the Gigapascal Pressure Range, *Liquids* 3, 288-302 (2023).
- Z. Jing, Y. Zhou, **T. Yamaguchi**, K. Yoshida, K. Ikeda, K. Ohara, G. Wang, Hydration of Alkali Metal and Halide Ions from Static and Dynamic Viewpoints, *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 14, 6270-6277 (2023).
- Z. Jing, Y. Zhou, **T. Yamaguchi**, K. Ohara, J. Pan, G. Wang, F. Zhu, H. Liu, Alkali Metal Ion Recognition by 18-Crown-6 in Aqueous Solutions: Evidence from Local Structures, *The Journal of Physical Chemistry B*, 127, 4858-4869 (2023).
- T. Yamaguchi**, N. Hata, S. Matsuo, **K. Yoshida**, T. Kurisaki, S. Ishizaka, K. Ohara, In situ Raman and X-ray scattering of a single supersaturated aqueous $\text{Mg}(\text{NO}_3)_2$ droplet ultrasonically levitated, *Analytical Sciences*, 39, 977-987 (2023).
- 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 ZrO_2 /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 Xa 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 $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ 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 SrAl_2O_4 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 NaBD_4 Solution by Neutron and X-ray Diffraction, *J. Phys. Chem. Lett.* 11(5), 1622-1628 (2020); doi: 10.1021/acs.jpcclett.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.jpcclett.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
- T. Nagai**, Nobuaki Kikkawa, Ryosuke Jinnouchi, Masayuki Kimura, and Susumu Okazaki, "Machine learning model to predict free-energy landscape and position-dependent diffusion constant to extend the scale of dynamic Monte Carlo simulations," *Journal of Chemical Theory and Computation* 21, 2598–2611 (2025).
- Yoshimichi Andoh, Shin-ichi Ichikawa, Tatsuya Sakashita, Kazushi Fujimoto, Noriyuki Yoshii, **T.**

- Nagai**, Zhiye Tang, and Susumu Okazaki, “An exa-scale high-performance molecular dynamics simulation program: MODYLAS,” *The Journal of Chemical Physics* **158**, 194803 (12 pages) (2023).
- 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).
- 永井哲郎, 吉川信明, 陣内亮典, 木村将之, 岡崎進, 「最近の研究から『大規模分子動力学計算と新規動的モンテカルロ法による大規模不均一系の物質輸送に対する研究』, アンサンブル **26**, 281–288 (2024)
- 永井哲郎, “不均一な溶媒である高分子電解質膜におけるガス拡散の機構解明,” *Journal of the Japan Association of Solution Chemistry* (溶液化学会誌) **4**, 7–9 (2023).
- 川井田拓弥, 永井哲郎, 吉田亨次, “アニオン交換膜における水の輸送機構解明にむけた分子動力学シミュレーション”, 福岡大学理学集報 **53**, 15-21 (2023).
- 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 A* 96, 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).

最近 5 年間の学術著書

- T. Yamaguchi**, I. Persson, (Eds), Metal Ions and Complexes in Solution, Royal Society of Chemistry, 2023.
- 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)
- T. Yamaguchi**, Structure and dynamics of solutions studied by X-ray and neutron scattering, Encyclopedia of Analytical Chemistry, pp. 1-26 (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)

最近 5 年間の学術国際会議での発表

- K. Yoshida**, T. Kawaida, T. Nagai, Y. Shirase, J. Inukai, Hydration structure of adsorption water in anion exchange membrane investigated by MD simulation and in-situ X-ray scattering, 12th Liquid

Matter Conference 2024, Mainz (Germany), September 2024.

K. Yoshida, S. Hosokawa, Analysis of inelastic X-ray scattering spectra of molecular liquids by generalized Langevin formalism, 12th Liquid Matter Conference 2024, Mainz (Germany), September 2024.

(Invited) K. Chai, T. Yamaguchi, J-PARC Liquids and Amorphous Materials Users Meeting, March 9, 2024, Tsukuba (Japan).

(Invited) T. Yamaguchi, Speciation and structure of single aqueous droplet ultrasonically levitated, in the air; supersaturation and crystallization, Beijin Institute of Technology, April 16, 2024, Beijin (China)

(Plenary) T. Yamaguchi, Thermal behavior, structure, and dynamics of water and electrolyte solutions in confinement, The 21st National Symposium on Chemical Thermodynamics and Thermal Analysis, April 19-21, 2024, Tianjin (China)

(Invited) T. Yamaguchi, X-ray and neutron scattering studies of solution structure, PDF Workshop, July 7-8, 2024, Xining (China)

T. Yamaguchi, Z. Jing, H. Liu, Y. Zhou, T. Hattori, T. Yamada, Violation of the structure making/breaking concept of alkali metal chloride solutions in the gigapascal pressure range, European Molecular Liquids Group/Japanese Liquids Group Meeting, September 8-13, 2024, Trieste (Italy)

(Invited) K. Yoshida, Liquid-Liquid phase transition of water and dynamics transition of proteins, The 9th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems, Chiba, August 2023.

(Invited) T. Yamaguchi, W. Zhang, Y. Zhou, K. Yoshida, S. Machida, T. Hattori, Neutron scattering of aqueous electrolyte solutions in the gigapascal pressure range at J-PARC MLF, The 4th Asia-Oceania Conference on Neutron Scattering, December 2-8, 2023, Dongguan (China).

Z. Jing, **T. Yamaguchi**, H. Liu, Y. Zhou, T. Hattori, T. Yamada, H. Tamatsukuri, M. Matsuura, Translational diffusion of water in alkali metal chloride solutions under pressure by quasielastic neutron scattering, The 4th Asia-Oceania Conference on Neutron Scattering, December 2-8, 2023, Dongguan (China).

K. Chai, **T. Yamaguchi**, T. Zuo, Y. Zhou, Structure of ethaline deep eutectic solvent by X-ray and neutron scattering with isotopic substitution, The 4th Asia-Oceania Conference on Neutron Scattering, December 2-8, 2023, Dongguan (China).

T. Yamaguchi, W. Zhang, Y. Zhou, N. Fukuyama, K. Yoshida, Y. Katayama, S. Machida, T. Hattori, Verification of the structure making/breaking concept of ion solvation from structure of aqueous MCl (M=Li, Na, K, Rb, and Cs) solutions in the gigapascal pressure range, The 38th International Conference on Solution Chemistry, July 9-14 (2023) Belgrade.

T. Yamaguchi, J. Kinoshita, S. Matsuo, K. Yoshida, K. Ohara, Structure of a single acetic acid droplet ultrasonically levitated in the air by in situ Raman and X-ray scattering, The 38th International Conference on Solution Chemistry, July 9-14 (2023) Belgrade.

(Invited) T. Yamaguchi, Effect of temperature and pressure on ion solvation and association,

International Conference on Green and High-value Utilization of Salt Lake Resources, September 6-9 (2023), Remote.

(Invited) T. Yamaguchi, Raman and X-ray scattering of supersaturated electrolyte droplet ultrasonically levitated in the air, The 2nd Global Summit on Advances in Earth Science and Climate Change, September 15-16 (2023), Remote.

(Invited) T. Yamaguchi, Calorimetry and X-ray scattering study of acetonitrile-water binary mixtures confined in mesoporous silica MCM-41, The 12th China-Japan Joint Symposium on Calorimetry and Thermal Analysis, September 22-23 (2023), Tai'an.

Z. Jing, **T. Yamaguchi**, H. Liu, Y. Zhou, T. Hattori, T. Yamada, H. Tamatsukuri, M. Matsuura, Dynamic properties of water in aqueous alkali metal chloride solutions in the gigapascal pressure range by quasielastic neutron scattering, The 45th Symposium on Solution Chemistry in Japan, October 18-20, 2023, Yamagata.

(Invited) T. Yamaguchi, W. Zhang, Y. Zhou, N. Fukuyama, K. Yoshida, Y. Katayama, S. Machida, T. Hattori, Verification of the structure making/breaking concept of ion solvation from structure of aqueous MCl (M=Li, Na, K, Rb, and Cs) solutions in the gigapascal pressure range, The 64th High Pressure Conference of Japan, November 1-3, 2023, Kashiwa.

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.

T. Nagai, Nobuaki Kikkawa, Ryosuke Jinnouchi, Masayuki Kimura, and Susumu Okazaki, "Dynamic Monte Carlo method enhanced by machine learning model to understand mass transport in heterogeneous medium," EMLG-JMLG Annual Meeting 2024, Trieste Italy, September 8-13, 2024.

T. Nagai and Susumu Okazaki, "Atomistic understanding of mass transport in heterogeneous systems via molecular simulation approaches," International Joint Symposium Fukuoka University & University of Ulsan, Fukuoka, Japan, August 27-28, 2024.

T. Nagai and Susumu Okazaki, "Gas diffusion in polymer electrolyte membranes studied using large-scale molecular dynamics and novel Monte Carlo methods," 2024 International Conference of Membrane and Chitosan Materials in Taiwan (2024 ICMCMT), Taipei, Taiwan, July 4-5, 2024 (**Invited Speaker**).

T. Nagai and Susumu Okazaki, "Mechanism of gas transport in polyelectrolyte membranes investigated using novel simulation methods", 台湾高分子学会年次大会 (日台ジョイントセッション), Tainan, Taiwan, January 24-25, 2024 (**Invited Speaker**).

T. Nagai and Susumu Okazaki, "New methodology combining large-scale molecular dynamics and dynamic Monte Carlo simulations to study gas transport in heterogeneous media", The 6th International Conference on Molecular simulation, Taipei, Taiwan, October 6-9, 2023 (**Invited**

Speaker).

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. 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).

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

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

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

吉田 亨次：理学研究科高度化推進事業タイプ I 研究科特別経費 (研究科分)「ナノ粒子の会合機構に対する液体構造の影響に関する研究」 500 万円 2023 年

永井哲郎：若手・女性研究基盤構築支援事業「マルチスケールシミュレーション技術の構築と

制限空間における水の輸送機構解明」2024 年度～2025 年度
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： KEK 物質構造科学研究所 中性子共同利用実験審査委員会委員 2023 年 4 月－現在 The Journal of Molecular Liquids (Elsevier), Guest Editor 2023 年 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 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： 日本物理学会計算物理領域運営委員（2025 年度） 溶液化学研究会会誌編集員（2024 年度～） 日本物理学会領域 12 運営委員（2023 年度） 第 44 回溶液化学シンポジウム実行委員（2022 年度） 度科学技術・学術政策研究（NISTEP）専門調査員（2018 年度～） 山口敏男： International Conference on Solution Chemistry, International Steering Committee, Chairman 2018 年 8 月～現在 The Journal of Molecular Liquids (Elsevier) Editor-in-Chief 2013 年 1 月～2024 年 12 月 Liquids (MDPI), Editorial board member 2024 年 12 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)

永井哲郎：

2023 年度台日ジョイントセッション派遣若手研究者, Tainan, Taiwan, January 24–25, 2024.

第 18 回（2024 年）日本物理学会若手奨励賞

2023 年度溶液化学研究会奨励賞 2023 年 8 月 25 日.

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

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.