

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 6 年 6 月 14 日現在

機関番号：15301

研究種目：基盤研究(B)（一般）

研究期間：2020～2023

課題番号：20H02696

研究課題名（和文）ミセル形成駆動力の解明に基づく界面活性剤凝集挙動の理論モデリング

研究課題名（英文）Theoretical Modeling of Surfactant Aggregation Behavior

研究代表者

甲賀 研一郎 (Koga, Kenichiro)

岡山大学・異分野基礎科学研究所・教授

研究者番号：10315020

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 12,300,000円

研究成果の概要（和文）：両親媒性溶質を含む水溶液におけるミセル形成駆動力の実体を正確に理解し、定量化するために、階層的アプローチに基づき、次のような成果を上げた。第一に、両親媒性分子の溶媒和自由エネルギーの効率的計算方法を開発した。第二に、アルコール水溶液の濃度ゆらぎおよびそれに対する塩添加効果に関する研究を推進し、標準的2成分系と対比して、水+プロパノール系においては、ナノメートルオーダーの濃度不均一性が存在し、構造ゆらぎの時間スケールも数十ナノ秒の長さであることがわかった。第三に、疎水性相互作用の強さを与える浸透第2ビリアル係数が疎水性溶質分子の直径の6乗に比例するという結果を得た。

研究成果の学術的意義や社会的意義

ミセル形成の理論モデルは今のところ、具体的な界面活性剤の挙動を予測することはできない。本研究により生み出された成果（両親媒性分子の溶媒和自由エネルギーの効率的計算方法、アルコール水溶液のミクロ相分離構造の解析結果、そして疎水性相互作用の疎水性分子サイズ依存性の法則等）は、特定の分子のミセル化挙動を予測することができる理論モデルを構築に繋がる成果である。このような理論モデルが完成すれば、特定の条件でミセル化挙動を示す両親媒性分子を選択する指針が導かれ、さらには新しいタイプのミセル形成分子（DNAやペプチド等の生体分子からフラレン等のナノ粒子までを含むもの）の開発が促進される。

研究成果の概要（英文）：In order to understand and quantify the driving forces for micellization of surfactant molecules in aqueous solutions, we undertook a theoretical investigation based on a hierarchical approach. First, we developed an efficient method for calculating the solvation free energy of amphiphilic molecules. Second, we studied concentration fluctuations in aqueous solutions of alcohols and the effect of salt on the fluctuations and found that there is nanoscale heterogeneity in an aqueous solution of propanol and the time scale of the structural fluctuations is a few tens of nanoseconds. Third, in an effort to understand the size dependence of the hydrophobic interaction, we found that the osmotic second virial coefficient of a hydrophobic solute is proportional to the 6th power of the solute diameter.

研究分野：理論物理化学

キーワード：疎水効果 疎水性相互作用 塩析効果 自由エネルギー計算法 ミセル

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

親水基と疎水基からなる両親媒性分子の凝集体であるミセルは、その乳化能・可溶性のため、洗剤・食品・化粧品など日用品への利用から、薬物輸送システム、メソ細孔材料などの先端科学技術にも広く応用される自己集合体である。新しいタイプの両親媒性分子として、DNA やペプチド等の生体分子を親水基とするものから、フラーレン等のナノ粒子を疎水基とするものまでが開発され、新規ミセルの潜在的利用法を探索する研究が強力に進められている。このような応用研究の急速な発展にも関わらず、ミセル形成駆動力の実態解明はなされておらず、ミセル化の理論モデルはアприオリに駆動力の諸因子を仮定した現象論的なものに限られており、与えられた分子のミセル化挙動を予想できる理論モデルは存在しない。

ミセルの安定化は、両親媒性分子の凝集体成長促進力と拮抗力のバランスにより実現する。ここでは、促進力と拮抗力を総合したものをミセル形成駆動力と呼ぶ。現在のミセル形成駆動力の理解は、「疎水基の凝集力（疎水効果）が促進力であり、親水基同士の静電反発が拮抗力の役割を担う」というものが主流である[C. Tanford, *The Hydrophobic Effect* (Wiley, 1980)]. それを反映し、界面活性剤を特徴づける指数として親水性-疎水性のバランスを表す HLB 値が広く普及しているが、この値からミセル化挙動（臨界ミセル濃度・平均ミセルサイズ・形状等）を予測することはできない。後で述べるように現在の理論モデルはミセル化挙動の一般的描像は与えるが、具体的な界面活性剤の挙動を予測することはできないし、ミセル化の温度応答性・溶媒組成依存性は全く予測できない。したがって、目的に合致した界面活性剤を選択・開発するためには試行実験を繰り返すしかない。

このような現状において、ミセル形成駆動力の実体を解明することが最重要課題に位置づけられる。両親媒性分子の凝集数 n の関数としてのミセル形成駆動力ポテンシャル=凝集体形成自由エネルギー $W(n)$ は、凝集数 n の分布関数

$$f(n) \propto \exp\left(-\frac{W(n)}{kT}\right)$$

より評価できる情報である。しかし、実験では、溶液中の凝集数分布 $f(n)$ を測定することは困難であり、したがって凝集体形成自由エネルギー $W(n)$ を知ることはできない。一方、ミセル化の理論モデルは、 $W(n)$ 、 $f(n)$ 、平均ミセルサイズ $\langle n \rangle$ 、臨界ミセル濃度 CMC 等を与える。しかし、凝集体成長促進力と拮抗力をもたらす複数の因子とそれらの凝集数依存性をアприオリに設定しているため、現在の理論モデルは、ある両親媒性分子が与えられたときに、ミセル化能・CMC・平均ミセルサイズ $\langle n \rangle$ を予測することはできず、それらの温度応答性・溶媒組成依存性についても答えない。

上に述べた状況を鑑み、研究代表者はミセル化挙動の予測可能な理論モデルを構築するにあたって、ミセル形成駆動力-凝集体成長促進力および拮抗力-の実体を正確に理解し、定量化し、その知見を適切にモデルに組み込む階層的アプローチを取ることの重要性を認識するに至った。

2. 研究の目的

本研究の最終目標であるミセル化挙動の予測可能な理論モデルを構築するために、ロードマップに沿って以下に述べる 5 つの研究目的を設定した。

第一は、両親媒性分子の溶媒和自由エネルギー μ^* の効率的計算方法の確立とその温度および圧力依存性の解明である。複雑な分子の溶媒和自由エネルギーは BAR 法等の熱力学積分法に基礎をおく手法により得られるが、計算コストが大きい。また、温度や圧力などの熱力学条件の変化に対して溶媒和自由エネルギーがどのように変化するかを知ることは、ミセル化挙動の理解に不可欠な情報である。

第二の目的は、両親媒性分子を含む水溶液の構造を解明することである。疎水基が大きいアルコールはミセル形成能を有するが、疎水基の小さいアルコールでは、ある濃度領域で微視的に不均一な水溶液構造が現れること（マイクロ相分離がおこること）が示唆されている。このようなマイクロ相分離が起こる系とミセルが形成される系を対比して、ミセル形成駆動力の起源を明らかにする。

第三は、ミセル形成能をもつ両親媒性分子を含む水溶液の構造を解析することである。この解析により、理論モデル構築の鍵となる凝集数分布 $f(n)$ を得る。

第四の目的は、疎水性相互作用の定量化と疎水基サイズ依存性の解明である。ミセル形成の駆動力の大きな部分は疎水性相互作用にはかならない。しかし、疎水性相互作用の強さが疎水基サイズとともにどのように変化するかは明らかにされていない。

第五は、疎水性相互作用に対するイオン添加効果の解明である。ミセル形成は電解質によって大きな影響を受けるが、その主要な駆動力である疎水性相互作用に対する効果は未解明である。

3. 研究の方法

両親媒性分子の溶媒和自由エネルギー μ^* の効率的計算方法の開発においては、溶媒和過程を物理的に意味のある複数の段階に分割し、それぞれに対して数値誤差の少ない計算方法を決定し、それらを組み合わせることによって計算コストが低く、かつ精密な値が得られる最適な手法を得る。その後、 μ^* の温度依存性および圧力依存性を計算し、溶媒和過程の各段階の寄与を明らかにする。

両親媒性分子を含む水溶液の構造を解明する課題については、プロパノール水溶液の分子動力学シミュレーションを複数の組成について実行し、マイクロ相分離構造が現れる組成を同定する。そのうえで、構造解析を行い、マイクロ相分離構造を特徴づける因子を同定する。さらに、マイクロ相分離が起こる前後の組成で、構造以外の物理量の変化を探索する。

ミセル形成能をもつ両親媒性分子を含む水溶液の構造を解析するにあたっては、界面活性剤分子ヘキサンジオール水溶液の全原子分子シミュレーションを実行し、様々な濃度に対して、凝集数分布 $f(n)$ を計算する。

疎水性溶質を含む水溶液については、メタンからフラーレンサイズまでの疎水性球形分子の平均力ポテンシャル $w(r)$ 、浸透第2ビリアル係数 B の計算を行う。

疎水性相互作用に対するイオン添加効果については、分子動力学シミュレーションにより、疎水性溶質のセチェノフ係数を陽イオンおよび陰イオンの直径の関数として求める。さらに、疎水性溶質の浸透第2ビリアル係数を水および塩水溶液において計算する。

4. 研究成果

研究の目的にあげたそれぞれの項目に対して次のような成果が得られた。

両親媒性分子の溶媒和自由エネルギー μ^* の効率的計算方法の開発においては、溶媒和過程を物理的に意味のある複数の段階に分割し、それぞれに対して数値誤差の少ない計算方法を決定し、それらを組み合わせることによって計算コストが低く、かつ精密な値が得られる最適な手法を得た。具体的には、両親媒性分子の溶媒和自由エネルギー μ^* を以下のように分割した。

$$\mu^* = \mu_{\text{cav}}^* + \mu_{\text{attr}}^* + \mu_{\text{el}}^*$$

μ_{cav}^* 、 μ_{attr}^* 、 μ_{el}^* はそれぞれ溶媒に空孔を形成するための自由エネルギー、空孔に弱い引力相互作用が付加される自由エネルギー、静電相互作用が付加される自由エネルギーである。様々な計算手法を比較した結果、空孔形成自由エネルギー μ_{cav}^* はBAR法を用いて計算し、 μ_{attr}^* は摂動法の公式により求め、 μ_{el}^* は摂動結合法により評価する手法が計算コストと計算精度との総合指標に対して優れた方法であることがわかった。図1は μ^* の温度依存性および圧力依存性をいくつかの手法で計算した結果である。高コストのBAR法に比して、摂動結合法の結果はそれと大きな違いがないことがわかる。より複雑な構造を持つ両親媒性分子の溶媒和自由エネルギーもこの方法により、正確かつ低コストで計算できることが予想される。この成果は学術論文 Taira et al., Phys. Chem. Chem. Phys. 25, 31107 (2023) として発表した。

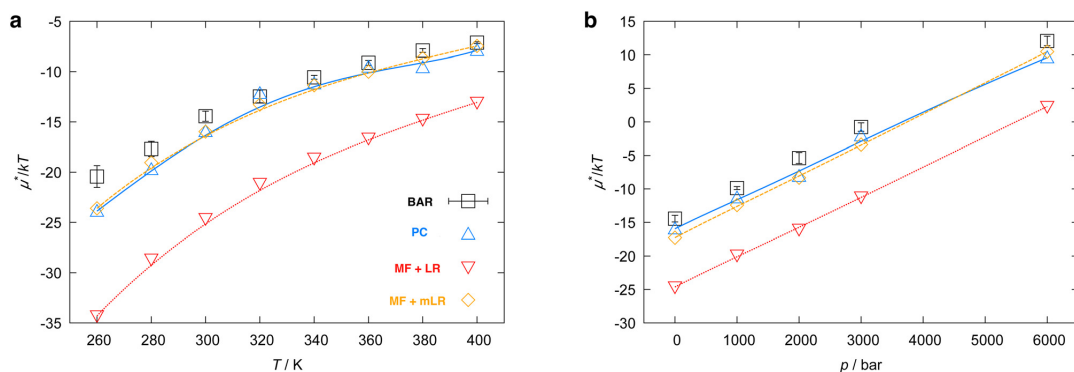


図1 水溶液中のヘキサンジオールの溶媒和自由エネルギー μ^* の(a)温度依存性および(b)圧力依存性。高コストのBAR法の結果と今回開発した摂動結合法の結果に大きな違いはない。

アルコール水溶液の濃度ゆらぎおよびそれに対する塩添加効果について、それらの発現機構を明らかにする研究を推進し、以下のような知見を得た。まず、パーコレーション解析を行い、標準的2成分系（類似な分子種2成分からなる混合系）と対比して、水+プロパノール系においては、ナノメートルオーダーの濃度不均一性が存在し、構造ゆらぎの時間スケールも数十ナノ秒の長さであることがわかった。塩を添加するとより速やかにマイクロ相分離が進行することがわ

かった。本成果については2024年度に査読付き論文として発表する予定である。

ミセル形成能をもつ両親媒性分子を含む水溶液の構造を解析する目的で、1,2-ヘキサジオール+水の2成分系の分子動力学シミュレーションを行った。1,2-ヘキサジオールの分子数は1600に固定し、水分子数を64000, 80000, 96000, 120000とした5つの組成で計算を行った。界面活性剤分子の仕込みの質量モル濃度はそれぞれ1.39, 1.11, 0.93, 0.74 mol/kgである。温度は300 K, 圧力は1 barに固定し、200–300 nsのシミュレーションを行った。図2は1,2-ヘキサジオールのミセルサイズ分布のグラフである。縦軸はミセル濃度 C_n , 横軸は凝集数 n である。低濃度においては, C_n は凝集数 n とともに単調に減少する。この仕込み濃度は臨界ミセル濃度に達していないことを意味する。しかし, 仕込み濃度が1.11 mol/kg以上になるとミセル濃度 C_n に極小と極大が観測される。これは, 仕込み濃度が臨界ミセル濃度を超過していることを意味する。この研究課題については, 理論モデリングとの比較を行い, 本年度中に学術論文に投稿する予定である。

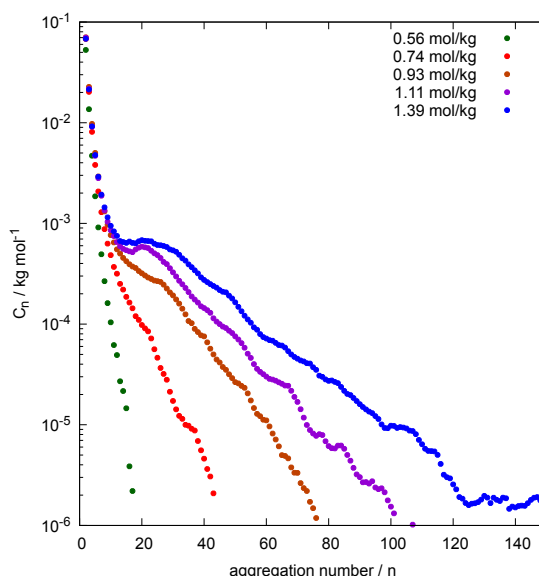


図2 ミセル形成系の凝集数分布

疎水性相互作用は溶液の物理化学における重要な研究課題の一つである。なかでも, 溶質分子のサイズの増大とともに疎水性相互作用がいかに変化するか, という問題は未解明であった。我々は疎水性相互作用を平均力ポテンシャル $w(r)$ および浸透第2ビリアル係数 B により評価し, メタンから C_{60} までの分子サイズ領域で, それらの溶質分子サイズ依存性を決定した。以下の図3に示したように, 溶質サイズの増大とともに, 溶質分子間動径分布関数の第1ピークは増大し, $w(r)$ の第1極小値 (溶質分子同士が接する距離における値) は減少する。

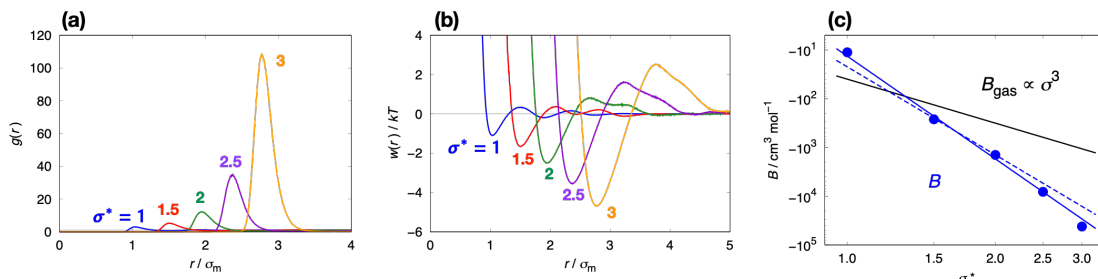


図3 疎水性相互作用の溶質分子サイズ依存性. (a) 溶質分子間動径分布関数, (b) 溶質分子間平均力ポテンシャル, (c) 溶質分子の浸透第2ビリアル係数.

さらに, 溶質分子直径の増大とともに, $w(r)$ の第1極大 (ポテンシャル障壁) が増大することが明らかになった。 $w(r)$ から導かれる浸透第2ビリアル係数 B は溶質分子直径に対して極めて強い依存性を示すことがわかった。すなわち,

$$B = A \sigma^\alpha$$

というべき乗則に従うことが明らかになった。べき指数は $\alpha \approx 6$ or 7 である。注意すべき点は, 気体の第2ビリアル係数の分子サイズ依存性は分子直径の3乗に比例するという点だ。したがって, 水溶液中での有効相互作用の強さを与える浸透第2ビリアル係数が分子直径の6乗に比例するという結果は, 質的に異なるものである。そしてその原因はすべて溶媒誘起力の溶質分子サイズ依存性にある。本研究成果は Naito et al., *J. Chem. Phys.* **156**, 221104 (2022) および Naito et al., *Faraday Discussions*, 249, 440–452 (2024) に発表した。

界面活性剤分子のミセル形成能に対するイオン特異的効果を調べるために, まず, 本研究では疎水性溶質の溶解度に対するイオン特異的効果および溶質分子間有効相互作用に対するイオン特異的効果に関して理論モデリングおよび分子シミュレーションにより, 次のような成果を得た。

溶解度に対するイオン特異的効果はセチェノフ係数 K_s によって測られる。水溶液の電解質 (塩)

濃度を c , 溶質の溶解度 (オストワルド吸収係数) を λ , 純水に対する溶解度を λ_0 とすると, 次式が成立する.

$$\frac{\lambda}{\lambda_0} = \exp(-K_s c)$$

K_s が正であれば塩析, 負であれば塩溶である. 通常, イオン半径が大きいイオン種ほど塩析効果が強いが, Li^+ と Na^+ については逆転現象が起こることが知られている. 我々はメタンを溶質として含む電解質水溶液の分子シミュレーションの結果を解析し, この逆転現象の微視的原因を解明した. 具体的には, 第一に, セチェノフ係数 K_s の大きさは電解質水溶液の充填率 η と関連しており, 充填率はイオンの水和構造によって決まることを指摘した.

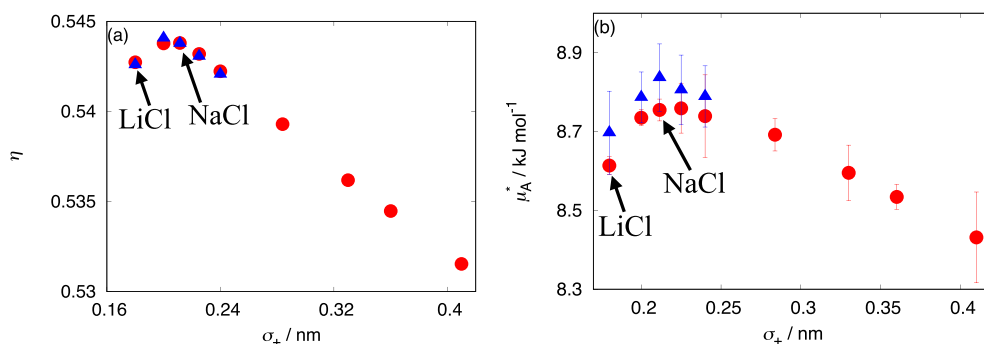


図4 陽イオンの直径に対する電解質水溶液の充填率 η (左) およびメタンの溶媒和自由エネルギー μ^* (右) の変化. 陰イオンは Cl^- に固定している.

図4に示したように, 陽イオンサイズに対する充填率 η の変化と溶媒和自由エネルギー μ^* の変化 (セチェノフ係数の変化) は一致している. 第二に, なぜ電解質水溶液の充填率 η の変化が陽イオンサイズに対して非単調な変化を示すのかについて調べた. その結果, まず, 「 Li^+ のような小さい陽イオンの場合, 陰イオンと対を形成するため非単調な挙動が起こる」という従来の仮説が誤りであることがわかった. 次に, 陽イオン周りの第1水和殻の充填率は陽イオン直径の減少とともに単調に増大するが, 第2および第3水和殻の充填率はバルク水溶液の充填率 η と同じように非単調に変化することがわかった. この成果は学術論文 Katsuto et al., *J. Phys. Chem. B* **125**, 6296-6305 (2021) として発表した.

セチェノフ係数 K_s については多様なイオン種と溶質分子種の組み合わせに対する実験データが整備されている一方, 凝集力 (溶質分子間有効相互作用) に対するイオン特異的効果を測る標準的指標は存在していなかった. そこで, 我々は浸透第2ビリアル係数 B の塩濃度依存性がそれに相当する物理量になることを指摘し, SEA (Salt-Enhanced Association) 係数 C_1 を次のように定義した.

$$C_1 = - \left(\frac{\partial B}{\partial c} \right)_{T,p} \quad (c \rightarrow 0)$$

そうして, 溶液の統計力学に基づき, SEA 係数とセチェノフ係数との間に次の関係式が成立することを示した.

$$C_1 = C_1^{(1)} + \frac{K_s^2}{2(a+b)} \quad (\text{電解質が } X_a Y_b \text{ 型の場合})$$

右辺第2項にセチェノフ係数の2乗が現れることに注目してほしい. すなわち, 第2項は K_s の符号によらず, 塩析・塩溶のいずれの電解質でも SEA 係数を大きくする方向に働く. 我々は溶媒を誘電体として扱う密度汎関数理論モデルを用いて, 上の関係式の妥当性を確認した. 以上の研究成果は学術論文 Okamoto et al., *J. Phys. Chem. B* **125**, 12820-12831 (2021) に発表した. 今後の課題としては, 実験及び分子シミュレーションにより, 上記関係式の妥当性を検証することがあげられる. 以上の研究成果は独創性の高いものであり, 国際学会などで高く評価された.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計10件（うち査読付論文 10件 / うち国際共著 2件 / うちオープンアクセス 10件）

1. 著者名 Naito Hidefumi, Okamoto Ryuichi, Sumi Tomonari, Koga Kenichiro	4. 巻 156
2. 論文標題 Osmotic second virial coefficients for hydrophobic interactions as a function of solute size	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 221104 ~ 221104
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0097547	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Indekeu Joseph O., Koga Kenichiro	4. 巻 129
2. 論文標題 Wetting and Nonwetting near a Tricritical Point	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 224501
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevLett.129.224501	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する
1. 著者名 Katsuto Hiroyuki, Okamoto Ryuichi, Sumi Tomonari, Koga Kenichiro	4. 巻 125
2. 論文標題 Ion Size Dependences of the Salting-Out Effect: Reversed Order of Sodium and Lithium Ions	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 6296 ~ 6305
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.1c03388	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Okamoto Ryuichi, Koga Kenichiro	4. 巻 125
2. 論文標題 Theory of Gas Solubility and Hydrophobic Interaction in Aqueous Electrolyte Solutions	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 12820 ~ 12831
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.1c08050	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Okamoto Ryuichi, Koga Kenichiro, Onuki Akira	4. 巻 153
2. 論文標題 Theory of electrolytes including steric, attractive, and hydration interactions	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 074503 ~ 074503
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0015446	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Adachi Yuji, Koga Kenichiro	4. 巻 153
2. 論文標題 Structure and phase behavior of high-density ice from molecular-dynamics simulations with the ReaxFF potential	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 114501 ~ 114501
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0016565	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Naito Hidefumi, Sumi Tomonari, Koga Kenichiro	4. 巻 249
2. 論文標題 How do water-mediated interactions and osmotic second virial coefficients vary with particle size?	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Faraday Discussions	6. 最初と最後の頁 440 ~ 452
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D3FD00104K	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Mochizuki Kenji, Adachi Yuji, Koga Kenichiro	4. 巻 18
2. 論文標題 Close-Packed Ices in Nanopores	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 ACS Nano	6. 最初と最後の頁 347 ~ 354
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsnano.3c07084	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Taira Aoi, Okamoto Ryuichi, Sumi Tomonari, Koga Kenichiro	4. 巻 25
2. 論文標題 Solvation free energies of alcohols in water: temperature and pressure dependences	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 31107 ~ 31117
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D3CP03799A	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Nakata Noa, Okamoto Ryuichi, Sumi Tomonari, Koga Kenichiro, Morita Takeshi, Imamura Hiroshi	4. 巻 32
2. 論文標題 Molecular mechanism of the common and opposing cosolvent effects of fluorinated alcohol and urea on a coiled coil protein	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Protein Science	6. 最初と最後の頁 e4763
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/pro.4763	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

〔学会発表〕 計9件 (うち招待講演 6件 / うち国際学会 7件)

1. 発表者名 Kenichiro Koga
2. 発表標題 Solute-size dependences of hydrophobic interactions in water and other effective interactions in liquids
3. 学会等名 EMLG-JMLG 2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Kenichiro Koga
2. 発表標題 How to Make Attraction Stronger in Liquids
3. 学会等名 A workshop in celebration of Joseph Indekeu (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Kenichiro Koga
2. 発表標題 How do water-mediated interactions and osmotic second virial coefficients vary with particle size?
3. 学会等名 Faraday Discussions: Water at Interfaces (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 甲賀研一郎
2. 発表標題 浸透第2ビリアル係数の理論的研究：イオン特異的效果および溶質サイズ依存性
3. 学会等名 分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Kenichiro Koga
2. 発表標題 Osmotic second virial coefficients for hydrophobic interactions: Ion-specific effects and solute-size dependences
3. 学会等名 TSRC Workshop, Hydrophobicity: From Theory, to Simulation, to Experiment (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Kenichiro Koga
2. 発表標題 Two Aspects of the Osmotic Second Virial Coefficient
3. 学会等名 EMLG conference 2022 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Kenichiro Koga
2. 発表標題 Ion-size dependences of the salting-out effect
3. 学会等名 IUPAC CCCE (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Kenichiro Koga
2. 発表標題 Ion-Specific Effects on Hydrophobicity: Salting-out effect and Salt-Enhanced Association
3. 学会等名 Physical Chemistry Seminar, Purdue University (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 甲賀研一郎
2. 発表標題 細孔内準一次元物質のポリモルフィズム: 最密充填vs.水素結合
3. 学会等名 日本物理学会2020年秋季大会 (招待講演)
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 公益社団法人 日本化学会, 甲賀研一郎 (分担)	4. 発行年 2021年
2. 出版社 丸善出版	5. 総ページ数 1534
3. 書名 化学便覧 基礎編 改訂6版	

〔産業財産権〕

〔その他〕

理論物理化学研究室
http://phys.chem.okayama-u.ac.jp/

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計3件

国際研究集会 The 16th Mini-Symposium on Liquids	開催年 2023年～2023年
国際研究集会 The 15th Mini-Symposium on Liquids	開催年 2022年～2022年
国際研究集会 The 14th Mini-Symposium on Liquids	開催年 2021年～2021年

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関		
ベルギー	KULeuven		