

令和 6 年 5 月 24 日現在

機関番号：13901

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2019～2023

課題番号：19K03768

研究課題名（和文）高周波ざりインピーダンス法によるマルチスケール構造を持つ液体のレオロジーの研究

研究課題名（英文）Study on rheology of liquids with multiscale structures by means of high-frequency shear impedance spectroscopy

研究代表者

山口 毅 (Yamaguchi, Tsuyoshi)

名古屋大学・工学研究科・助教

研究者番号：80345917

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,000,000円

研究成果の概要（和文）：無電極水晶振動子を用いたQCM-D法により、液体の複素粘性係数を65 MHz - 3 GHzの領域で測定する手法を開発した。等価回路を用いて試料の誘電応答の影響を補正する方法を構築し、既報の電極付振動子を用いた5 - 205 MHzのQCM-D測定と矛盾しない測定結果を得ることが出来た。本手法をイオン液体やリチウム塩濃厚水溶液、高分子溶液、ナノ流体を含む様々な高粘性液体に適用し、超音波スペクトロスコピーや中性子準弾性散乱と比較することで、これらの液体の粘性発現機構や粘性の原因となる構造の長さスケールに関する解析を行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究で開発した手法により、5 MHz - 3 GHzという高周波領域、ほぼ3桁にわたる広帯域の粘弾性緩和測定が可能となり、粘度数十mPa sの液体のレオロジーを解析することが出来るようになった。レオロジー測定は粘性の微視的機構の解明に有力な実験手法であり、本研究成果は液体の粘性に対する新たな実験的研究手法を与えるものとなる。対象となる液体はイオン液体や濃厚電解液、コロイド溶液や高分子溶液など幅広く、これらの液体を工業的に用いる上で粘性が重要な物性となる場面も多いため、粘度を制御する材料設計の基礎となる情報を与える研究としての社会的意義も有する。

研究成果の概要（英文）：An experimental method was developed to measure the frequency-dependent complex shear viscosity in the frequency range from 65 MHz to 3 GHz using an electrodeless quartz transducer. Calibrating the effects of dielectric responses of sample liquids by means of equivalent circuit method, we could obtain the shear relaxation spectrum consistent with those determined by conventional QCM-D method between 5 - 205 MHz. The novel method was then applied to various viscous liquids including room-temperature ionic liquids, water-in-salt electrolyte, polymer solution and nanofluids. Comparing the obtained shear relaxation spectra with the frequency-dependent volume viscosity determined by ultrasonic spectroscopy and the structural relaxation measured by quasi-elastic neutron scattering spectroscopy, we analyzed the origin of the shear viscosity of these liquids and the spatial dimension of the microscopic structure that determines the shear viscosity.

研究分野：化学物理

キーワード：粘弾性 マルチスケール 構造緩和 横波超音波 高粘性液体 レオロジー

1. 研究開始当初の背景

液体の巨視的輸送物性である粘性係数やイオン伝導度が、微視的液体構造・分子間相互作用とどのような関係にあるのかは、液体の統計力学の中心的な問題の一つである。また、これらの輸送物性は実用上も重要な物性であるため、ミクロな分子設計による物性の制御という工学的観点からも、微視的構造と巨視的輸送物性の関係の解明が求められている。

単純液体においては、分子間距離に対応する構造因子の主ピークが粘性を支配する構造であり、主ピークの異方的シフトの緩和によって粘弾性緩和が記述される。この主ピークは高密度液体に共通する構造であるが、実在液体においては、その他にもスケールが異なる特徴的な構造を有するものがあり、どの構造が粘性を支配するかは必ずしも自明ではない。例えば、異方性の大きな分子からなる液体においては、並進配向結合を通じて配向モードが粘弾性緩和に現れることが知られている。高級アルコールや長いアルキル鎖を持つイオン液体は、極性部と無極性部が分かれた中距離ドメイン構造を有し、このドメイン構造のダイナミクスの粘性への寄与の有無は現在議論の対象となっている。しかしながら研究開始当初においては、粘性を異なる長さスケールのダイナミクスの寄与に分割する手法は実験的にも理論的にも限られていた。

長さスケールの異なる液体構造のダイナミクスは時間軸あるいは周波数軸上で分離できる。したがって異なる空間スケールを持つ構造の粘性に対する寄与を実験的に分離するためには幅広い周波数帯での粘弾性測定が必要である。粘度が $10 \text{ mPa s} \sim 1 \text{ Pa s}$ の分子性液体は通常、MHz ~ GHz の周波数帯で粘弾性緩和を示す。研究代表者らはこれまでの研究で、Quartz Crystal Microbalance (QCM)用の水晶振動子を用いたずりインピーダンス法によって、高粘性液体の複素粘性係数を $5 \sim 205 \text{ MHz}$ の周波数帯で測定していたが、同一条件で緩和の全貌を明らかにするためには測定周波数上限が不十分であった。

2015年にOgiらは、無電極水晶振動子(基本周波数 58 MHz)を用いてQCM法の高周波化を行っており、7倍音(400 MHz)での動作を報告している[1]。研究代表者らも同タイプ的水晶振動子を用いて水を試料として予備実験を行い、45倍音(2.9 GHz)までの共振信号を観測することに成功している。そこで本研究において無電極水晶振動子を用いた粘弾性測定手法を開発し、既存のQCM-D法による測定と合わせて $5 \text{ MHz} \sim 3 \text{ GHz}$ という広帯域での粘弾性測定を可能にするとともに、マルチスケール構造を有する高粘性液体に適用して、その粘性の起源を明らかにすることを考えた。

2. 研究の目的

本研究の目的は、スケールが異なる特徴的構造を複数有する液体について、MHz から GHz の周波数帯で複素粘性スペクトルを測定し、X線や中性子準弾性散乱などの別手法で決定した各構造の緩和時間との比較から、それぞれの構造がどの程度粘性に寄与しているのかを明らかにすることである。高級アルコールやイオン液体、超濃厚電解液に見られる中距離構造は、界面活性剤溶液のメソ構造の前駆体と見なせるものであり、これらの中距離構造の粘性への寄与を明らかにすることは、分子性液体の粘性とソフトマターのレオロジーをつなぐという意味でも興味深い。

本研究の手法に関しては、ずりインピーダンス法による高周波粘弾性測定は世界でも数グループが行っているのみであり、MDシミュレーションによる相互相関解析を用いた粘性と構造のカップリングの抽出や時間相関関数を用いた並進配向結合の解析は、研究代表者が独自に開発したものである。

3. 研究の方法

(1) 無電極振動子を用いた広帯域粘弾性測定法の開発

Ogiらの研究[1]でも用いられている基本周波数 64.5 MHz の無電極水晶振動子を用いて、45次までの倍音測定によって 2.9 GHz までの複素粘性係数を測定する手法を開発する。既存の電極付振動子を用いたQCM-D法と組み合わせることによって、 5 MHz から 3 GHz という約3桁にわたる広帯域の粘弾性測定を可能にする。

図1に作成した試料セルの断面模式図を示す[2]。水晶振動子は両面で液体と接触している。セル上部のSMAレセプタクルを信号電極、セル底面を電氣的グラウンドとし、信号極底面間の電氣的特性から振動子の共振特性を測定する。信号極はベクトルネットワークアナライザ(VNA)に接続し、複素反射係数 $S_{11}(\nu)$ から信号極底面間の電氣的特性を決定する。

(2) イオン液体・超濃厚電解液の粘弾性緩和

イオンのみからなる液体であるイオン液体や、少量の溶媒が無機塩に混合した溶液である超

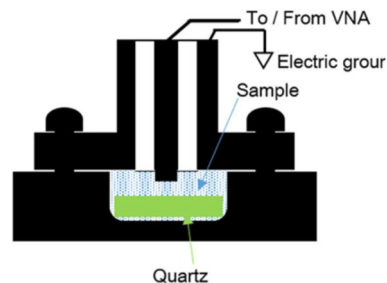


図1 無電極水晶振動子を用いた粘弾性測定装置の模式図(文献[2]より転載)

濃厚電解液は、電気二重層キャパシタやリチウムイオン二次電池などの電気化学デバイス用電解液として注目されている。電解液としての機能にはイオン伝導度が関わっており、イオン伝導度は粘性と深く関係している。したがって、これらの液体の粘性を微視的液体構造や分子間相互作用から理解することは電解液としての実用上も重要である。

長いアルキル鎖を有するイオン液体は、極性部と無極性部が分かれたドメイン構造を有し、X線・中性子散乱で得られる構造因子の低角部にドメイン構造を反映したプレピークを示すことが知られている。また同様のプレピークは、Lithium bis(trifluoromethanesulfonyl)amide (LiTfSA)の濃厚水溶液でも報告されている。研究代表者らはこれまでの研究で、長いアルキル鎖を有するイオン液体の場合には、粘弾性緩和はドメイン構造のダイナミクスよりもむしろ極性ドメイン内のイオン間相関の緩和を反映していることを見出している[3,4]。本研究ではLiTfSA濃厚水溶液について本研究室で開発した手法を用いて粘弾性緩和を測定し、Gonzalezらによって報告されている中性子準弾性散乱[5]との比較によってLiTfSA濃厚電解液の粘性を与えている微視的構造の波数を決定する。さらにGonzalezらによる散乱実験とMDシミュレーションを組み合わせた構造解析[6]とも併せて、粘度を決定する構造の詳細な起源を明らかにする。

(3) X線非弾性散乱とMDシミュレーションによるTHz領域の粘弾性解析

Brillouin散乱による超音波測定は、液体のGHz領域における粘弾性を解析するうえで重要な実験手法である。従来の可視光を用いたBrillouin散乱では測定周波数が数GHz以下に限られていたが、近年の放射光技術の発展によってX線を用いたTHz領域でのBrillouin散乱測定が可能になっている。

Brillouin測定では縦波粘性率の波数・周波数依存性が得られる。縦波粘性率は体積粘性率とずり粘性率の寄与の和で表せるため、ずり粘弾性の情報を得るためには体積粘弾性の寄与を除去する必要がある。また周波数依存性の情報を得るためには、波数依存性と周波数依存性の影響を分離しなければならない。そこで本研究では、液体の粘弾性測定手法としてのX線準弾性散乱法の可能性を検討するために、比較的簡単な構造を持つ液体であるn-hexaneとcyclohexaneについてX線準弾性散乱測定を行うと共に、分子動力学シミュレーションによってずり粘弾性の寄与を分離することを試みる。

4. 研究成果

(1) 無電極振動子を用いた広帯域粘弾性測定法の開発[2]

図1に示す装置を用いることによって、水やアセトニトリルなどの誘電率が高い液体試料では45次(2.9GHz)まで共振信号を測定することが出来た。一方で空気のような低誘電率試料では、振動子に加わる電場が弱くなるために高周波数での測定は不可能であった。そのため実試料の測定では、高誘電率・低粘性のアセトニトリルを参照試料とし、実試料と参照試料の共振特性の差から実試料の複素粘性係数を求めることとした。

VNAを用いた複素反射係数測定では、試料液膜と水晶振動子を合わせた系の電気的特性が測定される。したがって、測定された共振特性は試料の誘電物性の影響を受けて変化する。その影響を除去して水晶振動子の真の共振特性を決定するために、図1の試料セルを図2の等価回路で近似することとした。粘度と誘電率が既知の試料の1次の共振特性から等価回路パラメータを決定することによって、試料の誘電特性の影響を除去することに成功した。

図3にイオン液体の一種である1-methyl-3-octylimidazolium

bis(trifluoromethanesulfonyl)amide

([omim][TFSA])の複素粘性係数の測定結果を示す。青は試料の誘電物性による影響の補正前、赤は補正後であり、緑は従来の電極付振動子を用いたQCM-D法による測定結果である。イオン伝導性を有するイオン液体であっても先述の補正は有効であり、補正によって従来のQCM-D測定と連続的に繋がる粘弾性スペクトルを得ることが出来た。また、既存のQCM-D法による測定と合わせて5MHz - 3GHzの広帯域で緩和スペクトルを測定することによって、従来の測定では不可能であった緩和の全貌の観測が可能となった。

(2) 超濃厚リチウム塩水溶液の粘弾性緩和[7]

市販のリチウムイオン電池の多くは有機溶媒を電解液に用いており、発火などの安全性の問題を抱えている。水は電位窓が狭いためリチウムイオン電池用の電解液に用いられないが、リチウム塩を高濃度にする事でリチウムイオン二次電池が動作するという報告がされており、近年盛んに研究が行われている。塩濃度を増加させることで電気化学的安定性は向上するが、粘

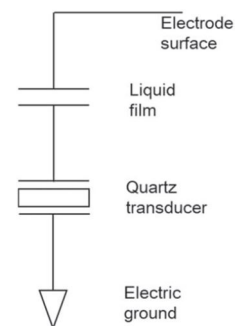


図2 試料セルの共振特性補正用に用いた等価回路(文献[2]より転載)

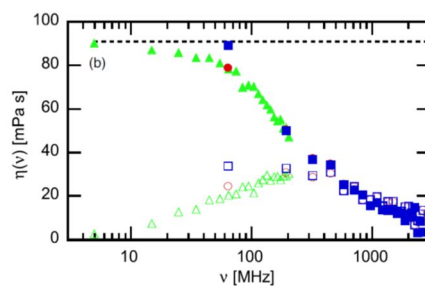


図3 イオン液体[omim][TFSA]の複素粘性係数(文献[2]より転載)

度が増大、イオン伝導度が低下するという問題があり、粘度の微視的機構の解明は高機能な電解液の開発の基礎としても重要である。

本研究では溶解限界に近い 21 mol/kg LiTFSA 水溶液の粘弾性緩和スペクトルを 5 MHz - 2 GHz の周波数領域で測定した。定常粘度 η_0 で規格化した複素粘性係数を図 4 に示す。数百 MHz に緩和周波数を持つ粘弾性緩和が明瞭に観測されている。

重水素化された同一濃度の溶液については Saboungi らによって中性子準弾性散乱が測定されており [5]、その結果を本研究で得られた粘弾性スペクトルと比較することによって、粘性を決定する液体構造の波数の決定を試みた。解析法は研究代表者らがこれまでにイオン液体等に対して行ってきたもの [3] と同一であり、モード結合理論に基づき、各波数の中間散乱関数を二乗してフーリエ変換したスペクトルと粘弾性緩和スペクトルとの比較を行った。その結果を図 4 に示す。粘弾性緩和は 8 - 12 nm^{-1} の構造緩和と対応しており、この波数領域の液体構造が粘性に重要な役割を果たしていることが示唆された。一方、中距離構造を反映したプレピークが見られる 4 nm^{-1} 付近の構造緩和は粘弾性緩和より遥かに遅く、中距離構造のダイナミクスが粘弾性緩和の直接的な原因とはなっていないことが分かった。Gonzalez らの X 線・中性子回折と MD シミュレーションによる解析では、8 - 12 nm^{-1} の構造は TFSA アニオン間の相関に帰属されており [6]、サイズの大きな TFSA アニオンのパッキング構造の緩和が粘性に重要な役割を果たしていることが考えられる。

また、超音波パルス法と Brillouin 散乱法で測定した縦波粘性係数の周波数依存性との比較も併せて行った。縦波粘性係数からずり粘性係数の寄与を差し引いて体積粘性係数を求め、ずり粘性係数と比較したところ、両者の周波数依存性はおおむね一致しており、体積粘性係数とずり粘性係数は同様の微視的ダイナミクスを反映していることが示唆された。

(3) X 線非弾性散乱と MD シミュレーションによる THz 領域の粘弾性解析 [8, 9]

液体 n-hexane, cyclohexane, 1,4-dioxane, ethyleneglycol dimethylether (EGDME) の 4 種の液体について、SPRING-8 BL43XU の高分解 X 線非弾性散乱分光器を用いた測定を行った。流体力学を拡張したモデルを用いて各波数でのエネルギー分散スペクトルを解析し、縦波音速を波数の関数として決定した。その結果を図 5 に示す。

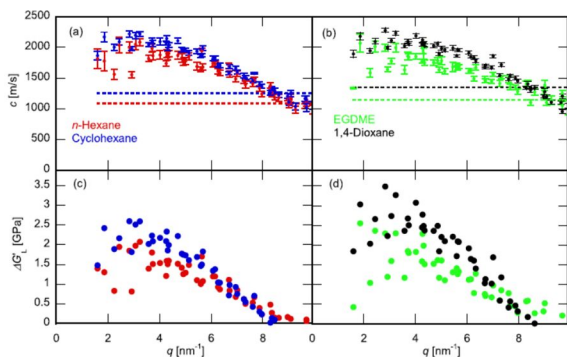


図 5 音速 c と过剩縦波弾性率 ΔG_L の波数依存性 (文献 [9] より転載)

鎖状分子からなる液体と比べて環状分子からなる液体は縦波弾性率の緩和強度が大きいことを表している。

n-hexane と cyclohexane について全原子 MD シミュレーションを行い、久保グリーン公式を用いて縦波弾性率の周波数依存性を計算した。Cyclohexane の方が hexane と比べて縦波弾性率の緩和強度が大きいという、実験と対応する計算結果が得られた。両液体の違いを明らかにするために、縦波弾性率の緩和を体積弾性率とずり弾性率の寄与に分割したところ、体積弾性率の違いの方が大きいものの、ずり弾性率の違いも縦波弾性率の緩和強度の違いに無視できない寄与をしていることが分かった。ずり弾性率の緩和の違いに関しては、剛直な構造を持つ cyclohexane は柔軟な構造を持つ n-hexane と比べて瞬間的なずり変形に対する固さが大きいためであると考えられる。さらに体積弾性率の緩和の寄与を解析したところ、分子内振動エネルギー緩和の寄与の違いが cyclohexane と n-hexane の体積弾性率の緩和強度の違いを支配していることが分かった。Cyclohexane と n-hexane では一分子当たりの原子数で決まる分子内自由度はほぼ等しいため、古典 MD の範囲では両者の振動比熱の違いは大きくないはずである。それにもかかわらず体積弾性率の見かけの緩和強度が両液体で異なる理由は、柔軟な分子構造を持つ n-hexane では鎖が変形するモードのエネルギー緩和が速いため、これらの分子内モードは観測周波数領域での縦波弾性率には寄与しないことが理由であると考えられる。

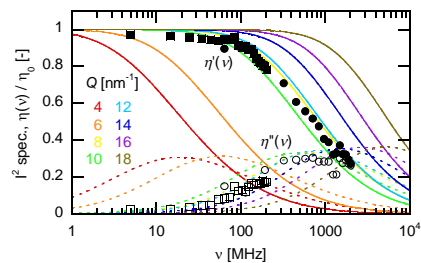


図 4 21 mol/kg LiTFSA 水溶液の粘弾性緩和と構造緩和の比較

2 - 4 nm^{-1} での縦波音速は横線で示した流体力学極限の値より大きく、多くの分子性液体でこれまで報告されている fast sound が本実験でも観測されていることが分かる。音速を縦波弾性率に変換し、流体力学極限との差である过剩縦波弾性率を計算したところ、環状構造を持つ Cyclohexane や 1,4-dioxane は対応する鎖状分子である n-hexane や EGDME と比べて过剩縦波弾性率が大きいことが分かる。研究代表者によるモデル系の MD シミュレーションからは、2 nm^{-1} 以下の波数領域での音速分散に対しては、弾性率の波数依存性の寄与は小さく周波数依存性の影響が支配的であることが示されており [8]、図 5 に示された本実験結果は

5 . 参考文献

- [1] T. Shagawa, H. Torii, F. Kato, H. Ogi and M. Hirao, *Jpn. J. Appl. Phys.* 54, 096601 (2015).
- [2] T. Yamaguchi and T. Matsuoka, *Jpn. J. Appl. Phys.* 61, SG1021(2022).
- [3] T. Yamaguchi, K. Mikawa, S. Koda, K. Fujii, H. Endo, M. Shibayama, H. Hamano and Y. Umebayashi, *J. Chem. Phys.* 137, 104511 (2012).
- [4] T. Yamaguchi, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 20, 17809 (2018).
- [5] M. A. Gonzalez, O. Borodin, M. Kofu, K. Shibata, T. Yamada, O. Yamamuro, K. Xu, D. L. Price, and M.-L. Saboungi, *J. Phys. Chem. Lett.* 11, 7279 (2020).
- [6] M. A. Gonzalez, H. Akiba, O. Borodin, G. J. Guello, L. Hennes, S. Kohara, E. J. Maginn, L. Mangin-Thro, O. Yamamuro, Y. Zhang, D. L. Price and M.-L. Saboungi, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 24, 10727 (2022).
- [7] T. Yamaguchi, A. Dukhin, Y.-J. Ryu, D. Zhang, O. Borodin, M. A. Gonzalez, O. Yamamuro, D. L. Price and M.-L. Saboungi, *J. Phys. Chem. Lett.* 15, 76 (2024).
- [8] T. Yamaguchi, *J. Chem. Phys.* 156, 244505 (2022).
- [9] T. Yamaguchi, K. Yoshida, S. Hosokawa, D. Ishikawa and A. Q. R. Baron, *J. Chem. Phys.* 157, 154504 (2022).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計11件（うち査読付論文 10件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Yamaguchi Tsuyoshi, Dukhin Andrei, Ryu Young-Jay, Zhang Dongzhou, Borodin Oleg, Gonzalez Miguel A., Yamamuro Osamu, Price David L., Saboungi Marie-Louise	4. 巻 15
2. 論文標題 Non-Newtonian Dynamics in Water-in-Salt Electrolytes	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 76 ~ 80
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcllett.3c03145	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Yamaguchi Tsuyoshi	4. 巻 24
2. 論文標題 Volume viscosity and ultrasonic relaxation of ethanol-water mixtures studied by molecular dynamics simulations	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 12311 ~ 12318
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d2cp00856d	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Yamaguchi Tsuyoshi, Matsuoka Tatsuro	4. 巻 61
2. 論文標題 Measurement of complex shear viscosity up to 3 GHz using an electrodeless AT-cut quartz transducer	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 SG1021 ~ SG1021
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/ac4141	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Yamaguchi Tsuyoshi	4. 巻 126
2. 論文標題 Coupling between Translational Diffusion of a Solute and Dynamics of the Heterogeneous Structure: Higher Alcohols and Ionic Liquids	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 3125 ~ 3134
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpccb.2c01053	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yamaguchi Tsuyoshi	4. 巻 156
2. 論文標題 Comparison between longitudinal viscoelastic relaxation and sound dispersion of molecular liquids on the molecular scale	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 244505 ~ 244505
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0098098	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yamaguchi Tsuyoshi, Yoshida Koji, Hosokawa Shinya, Ishikawa Daisuke, Baron Alfred Q. R.	4. 巻 157
2. 論文標題 Effects of molecular shape and flexibility on fast sound of organic liquids	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 154504 ~ 154504
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0107387	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Fujimoto Kazushi, Nagai Tetsuro, Yamaguchi Tsuyoshi	4. 巻 42
2. 論文標題 Momentum removal to obtain the position dependent diffusion constant in constrained molecular dynamics simulation	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Computational Chemistry	6. 最初と最後の頁 2136 ~ 2144
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.26742	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yamaguchi Tsuyoshi	4. 巻 12
2. 論文標題 Decoupling between Solvent Viscosity and Diffusion of a Small Solute Induced by Self-Motion	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 7696 ~ 7700
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcllett.1c02219	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yamaguchi Tsuyoshi	4. 巻 124
2. 論文標題 Coupling between Structural and Dielectric Relaxations of Methanol and Ethanol Studied by Molecular Dynamics Simulation	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 7027 ~ 7036
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.0c05685	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yamaguchi Tsuyoshi、Yoshida Norio	4. 巻 154
2. 論文標題 Solvation dynamics in electronically polarizable solvents: Theoretical treatment using solvent-polarizable three-dimensional reference interaction-site model theory combined with time-dependent density functional theory	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 044504 ~ 044504
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0036289	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yamaguchi Tsuyoshi	4. 巻 542
2. 論文標題 Molecular dynamics simulation study on the isomerization reaction in a solvent with slow structural relaxation	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 111056 ~ 111056
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.chemphys.2020.111056	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計16件 (うち招待講演 2件 / うち国際学会 2件)

1. 発表者名 山口 毅
2. 発表標題 分子性液体のX線領域の音速分散と長波長極限の縦波粘弾性の比較
3. 学会等名 第24回理論化学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 山口 毅, 吉田亨次, 細川伸也, 石川大介, Alfred Q.R. Baron
2. 発表標題 液体ヘキサンとシクロヘキサンの速い音速の解析
3. 学会等名 日本物理学会秋季大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 山口 毅, 吉田亨次, 細川伸也, 石川大介, Alfred Q.R. Baron
2. 発表標題 鎖状及び環状アルカンのX線非弾性散乱の比較
3. 学会等名 第44回溶液化学シンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 山口 毅
2. 発表標題 高級アルコールの不均一構造のダイナミクスと溶質拡散のカップリング
3. 学会等名 第23回理論化学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 山口 毅, 松岡辰郎
2. 発表標題 無電極QCM-D法による液体のGHz領域における粘弾性測定
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 山口 毅, 松岡辰郎
2. 発表標題 無電極水晶振動子を用いた液体のGHz領域に至る粘性測定
3. 学会等名 第42回超音波エレクトロニクスの基礎と応用に関するシンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 山口 毅
2. 発表標題 溶媒の不均一構造のダイナミクスと小さい溶質分子の並進拡散のカップリング
3. 学会等名 第43回溶液化学シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 山口 毅
2. 発表標題 分子動力学シミュレーションによるエタノール水溶液の超音波緩和の研究
3. 学会等名 第35回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Tsuyoshi Yamaguchi
2. 発表標題 Dynamics of Liquids with Multiscale Structure
3. 学会等名 Pacifichem 2021 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 山口 毅
2. 発表標題 高压水の体積粘性率と超音波緩和
3. 学会等名 日本物理学会年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 山口 毅
2. 発表標題 液体アルコールの誘電高周波プロセスと構造緩和のカップリング
3. 学会等名 日本物理学会秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 山口 毅
2. 発表標題 粘弾性溶媒中の溶質拡散の周波数依存性
3. 学会等名 日本物理学会年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Tsuyoshi Yamaguchi
2. 発表標題 Shear thinning and Cox-Merz rule of 1-octanol
3. 学会等名 The 13th MiniSymposium on Liquids
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 山口 毅
2. 発表標題 分子動力学シミュレーションによる高級アルコールのレオロジーの研究
3. 学会等名 日本物理学会秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 山口 毅
2. 発表標題 イオン液体におけるイオン伝導と構造緩和のカップリング
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Tsuyoshi Yamaguchi
2. 発表標題 Relation between mesostructure and viscoelasticity of ionic liquids
3. 学会等名 2nd International Conference on Materials Research and Innovation (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

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
研究 分担者	松岡 辰郎 (Tatsuro Matsuoka) (60252269)	名古屋大学・工学研究科・准教授 (13901)	

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0件

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			
米国	Dispersion Technology	The University of Chicago	US Army Research	
フランス	Sorbonne Universite	Institute Laue Langevin	Universite d'Orleans	