

令和 6 年 5 月 29 日現在

機関番号：17102

研究種目：挑戦的研究（萌芽）

研究期間：2021～2023

課題番号：21K18604

研究課題名（和文）真空中の液滴で挑む過冷却液体の未踏領域

研究課題名（英文）Exploring deeply supercooled liquid droplets in a vacuum

研究代表者

寺崎 亨（TERASAKI, Akira）

九州大学・理学研究院・教授

研究者番号：60222147

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 5,000,000円

研究成果の概要（和文）：大気中では到達が困難な過冷却深部の探究を目的に、真空中の液滴を利用した実験と分子動力学法を軸とした理論を基盤として、純水およびポリオール水溶液を対象に研究を推進した。主要な成果として、過冷却深部の均質凍結核生成速度の実測と理論解析、液滴径の精密計測法に基づく蒸発速度の実測、超高速カメラによる液滴振動観察に基づく表面張力や粘度の評価など、種々の物性解明を進めた。さらに、ポリオール混合時の凍結遅延や水和状態の変化などの観察・解析にも取り組んだ。以上のように、真空中の液滴を扱う独自の的方法論で、過冷却深部など極限環境の科学の開拓につながる成果を上げた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

過冷却液体の研究は、極限環境を扱う実験上の困難で停滞していたが、真空中の液滴を自在に発生・操作・制御する独自の実験技術を駆使し、純水および水溶液系の過冷却深部における物性解明を進めた点で、学術的意義が高い。研究協力者の学生が表彰されるなど、全国規模の学会で研究成果が高い評価を得たことも特筆に値する。さらに、成果の波及は物質科学に止まらず、特に水の謎の解明は生命科学にまで波及する点、また博士号取得者の輩出など若手研究者の育成の面でも成果を上げた点で、社会的意義も大きい。

研究成果の概要（英文）：We have explored deeply supercooled liquids of water and its dilute polyol solution by means of experiments based on liquid droplets in a vacuum along with theoretical approaches by molecular-dynamics simulation. Several properties of supercooled water were elucidated, including surface tension, viscosity, evaporation rates, homogeneous ice nucleation rates. Effects of polyol addition to the water were analyzed by focusing on delay in the freezing time as well as change in the hydration state. These achievements are expected to contribute to future development of science of matters in extreme environments.

研究分野：物理化学

キーワード：過冷却液体 液滴 真空 蒸発冷却 相転移

1. 研究開始当初の背景

水の密度が4℃で最大になることなど、液体が示す性質には今なお謎が潜んでおり、その要因の一つは、過冷却深部の未知領域にあると考えられている。過冷却深部に残されたこの未知の空白地帯の地図を描くために、低温領域への新たな実験的なアプローチが喫緊の課題となっていた。特に水では、過冷却水とアモルファス相との間の No man's land と呼ばれる未踏領域に、高密度水-低密度水の共存線とその臨界点の存在が予想されており(第2臨界点仮説)、実験による踏破が強く期待されている。従来の冷却手法では、過冷却深部に到達する以前に凝固に至ってしまうことが問題だったが、本研究は、真空中の液滴を扱う独自の実験手段でその困難を克服することを提案した。すなわち、真空中では、急速な蒸発冷却で液滴温度は瞬時に凝固点を下回り、凍結核生成よりも速く過冷却が進み、極限状態への到達が可能となる。この手法で、新物質相の発見など物質の未踏領域の探索のほか、比熱、熱伝導、蒸気圧、凍結核生成速度など、基本的な熱力学データを含む過冷却液体の諸物性の究明が期待される。これらを理論研究へ還元し、過冷却液体の科学を新たな発展に導くことを狙いとして、本研究を開始した。

2. 研究の目的

以上の背景から、本研究は、過冷却深部に到達する手段として真空中の液滴を研究対象に取り上げ、独自の技術と戦略で実験を低温に推し進め、未踏領域の液体物性を解明することを目的とした。課題の一つは水の第2臨界点仮説の検証であるが、過冷却液体の科学は、上層大気中の雲粒やエアロゾルでの分子の蒸発・凝集過程など、それに止まらない多様な波及性がある。しかしながら、基礎的な物性データさえも十分に整っていない。そこで、表面張力、粘性、蒸発速度、凍結核生成速度など、過冷却液体の物性研究を実験・理論の両面から進めることを主題とした。

3. 研究の方法

(1) 実験手法

① 液滴の発生

図1に実験装置の概略図を示す。ガラス製のキャピラリー(内径30 μm)を圧電素子で圧縮する機構のノズルを真空槽に挿入し、液体をパルス状に吐出した。液体試料容器と真空槽内との圧力差を適切に保つとともに、特に蒸気圧の高い水では、試料液体と液体供給チューブを冷却して低圧下での水の沸騰を抑制する工夫を施し、液滴を持続的かつ安定に発生させた。

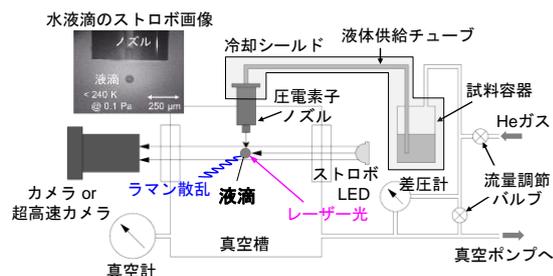


図1. 実験装置の概略と液滴画像

② 液滴の画像観察

液滴の観察では、ノズルと同期したストロボLEDとCMOSカメラ(分解能: 2 μm)で液滴を撮影し、その画像からおおよその大きさを測定した(図1の挿入図)。液滴のサイズは、圧電素子に加える電圧や時間幅を調節して、直径約40 μmを発生した。一方、液滴にレーザー光を照射して直角方向の散乱光を観察すると、凍結前には幾何光学に従って液滴の前方と後方の二点のみから弱い散乱が届くのに対して、凍結後には液滴表面に凹凸が生じ、散乱光の強度が顕著に増加した。そこで、この手法で液滴の凍結を判定し、ノズルから観察位置までの距離を変えながら、液滴発生後、最長11 msまでを追跡した。各観察位置(時刻)で200~300個の液滴を撮像して凍結した液滴の割合を算出し、時間を追ってその割合を描いて「凍結曲線」を得た。さらに、後述の手法で液滴径の精密測定が可能となった結果、数値シミュレーションで見積もる凍結時の温度の精度が向上し、凍結核生成速度の温度依存性の実測を実現した。

③ 液滴径の精密測定

真空中の水液滴は数msの短時間で凍結するため、その間の液体の蒸発量は僅かであり、蒸発速度の測定には液滴径の精密な測定が要求される。そこで、レーザー照射時のラマン散乱光の中で、液滴の外周に共鳴する波長(Whispering-Gallery Mode: WGM)が強く観測されることを利用し、共鳴線の波長を解析して液滴径の精密測定を行った。

④ 超高速カメラによる液滴ダイナミクスの撮像

液滴は、発生直後には楕円体状だが、時間とともに真球状に変化する。また、凍結時には、分裂を起こす場合も知られている。このような液滴のダイナミクスを、毎秒400,000フレーム(2.5 μs毎の撮像)の超高速カメラで追跡した。

(2) 理論解析

実験結果の解釈を補強する理論研究として、凍結核生成過程の分子動力学シミュレーションを行った。先行研究[Sanz et al., J. Am. Chem. Soc. **135**, 15008 (2013)]を参考に、初期核の成長と融解が拮抗する温度をシミュレーションから求め、古典的な核生成理論に基づいて、凍結核生成速

度の温度依存性を算出するなどの解析を行った。さらに、実験とは相補的な視点での解析として、ポリオール混合における親水基と疎水基の寄与の分離など、実験的には困難な解析を分子動力学計算法で行い、液滴急冷実験における添加物効果の解釈に理論基盤を与える研究を行った。

一方で、高密度水-低密度水の存在と関連する現象として、水中の溶質分子の溶媒和状態と拡散係数との相関に着目した研究を行った。常温常圧の水は第2臨界点より高温側に位置するが、巨大分子表面の溶媒和状態は、親水的な表面では高密度水的、疎水的な表面では低密度水的に偏ると予想される。つまり、同じサイズの溶質分子であっても、溶媒和状態に依存して拡散係数に差異が現れると考えた。特に臨界点の延長線近傍ならばその差異は顕著で、溶質分子表面の小さな変化が拡散挙動の大きな変化に繋がるであろう。以上の予想に関して、分子動力学シミュレーションによる検証を試みた。

4. 研究成果

(1) 水液滴の蒸発冷却過程

① ポリオール混合効果

直径 $40\ \mu\text{m}$ の液滴について、凍結曲線の測定結果を図2に示す。青色で示した純水のデータは、 $6.0\ \text{ms}$ 付近から立ち上がり、 $6.5\ \text{ms}$ で半数が凍結した。半数が凍結するまでの時間を凍結時間 (t_f) と呼ぶことにする。赤色はポリオールの一種であるエチレングリコール (EG) をモル分率 0.5% から 2.0% まで添加した場合の結果であり、純水の凍結時間 $6.5\ \text{ms}$ が 2% 混合液では $11.5\ \text{ms}$ まで遅延した。この原因として EG 混合による蒸気圧低下が考えられるが、液滴をイオントラップで捕捉し、大気下で数秒にわたって蒸発の様子を観察した結果、純水と 2% 混合液とで蒸発速度に有意な差はなく、蒸気圧の低下は凍結遅延の主要因ではないと結論した。このことは、むしろ EG 混合で均質凍結温度 (T_H) が低下することを示唆しており、水の水素結合ネットワーク内に混入した EG 分子が凍結核形成を阻害するとの仮説に至った。さらに、EG よりも多くの OH 基を持つグリセロール (GL) やキシリトール (XY) の混合実験を行った結果、同じモル分率では同程度の遅延となり、EG との顕著な差異は見られなかった。つまり、OH 基近傍ばかりでなく、混合した溶質分子周囲の水素結合ネットワークの乱れが凍結を阻害することが確認された。

② 純水液滴の均質凍結核生成速度の実測

凍結曲線を描く実験において、時間を追って撮像したレーザー光の散乱画像に対して、深層学習を取り入れて凍結画像を自動判定し、実験・解析の効率化を図った。さらに、精密測定された液滴の初期直径をもとに、熱力学方程式を解く数値シミュレーションで冷却曲線 (温度の時間変化) を描いた。これらを合わせて、過冷却深部で現れる凍結曲線の立ち上がり部分で、各測定区間ごとに均質凍結核生成速度を算出し、その温度依存性を得た。図3に示すように、これらの測定値は既報値のない温度領域 $232\sim 235\ \text{K}$ のデータを新たに与える成果となった。

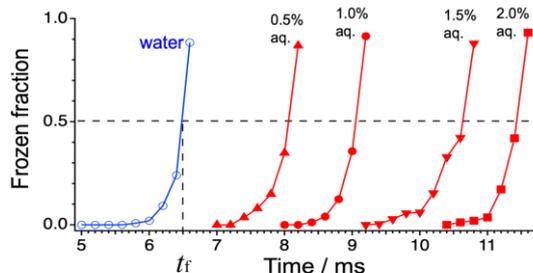


図2. 純水 (青) およびエチレングリコール混合水溶液 (赤) の凍結曲線

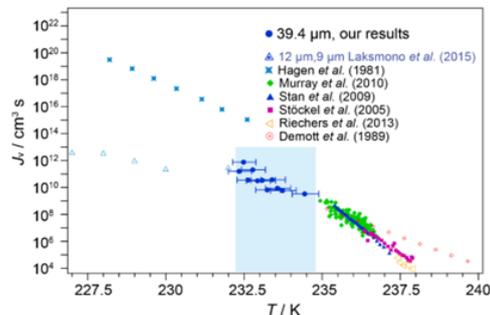


図3. 均質凍結核生成速度の温度依存性。新たに $232\sim 235\ \text{K}$ 領域の測定値を得た。

(2) ラマン散乱の観測による水液滴の解析

① Whispering-gallery mode (WGM) を利用した液滴径の精密測定

水液滴に波長 $532\ \text{nm}$ のナノ秒パルスレーザー光を照射して測定したラマン散乱スペクトルの一例を図4に示す。OH 伸縮振動バンドに6本の共鳴線が観測され、これら共鳴波長を Mie 理論に基づいて解析した。特に、周回モードに加えて動径モードも考慮して解析の高度化を図った結果、液滴径を $10\ \text{nm}$ もの高精度で実測することが可能となった。この精密計測法により、上述の均質凍結核生成速度の温度依存性のほか、次項の蒸発速度の測定を行った。

② 水液滴の蒸発速度の評価

WGM による液滴径精密計測法を、真空中で発生後、凍結するまでの水液滴に適用した。ここではデータを示さないが、初期直径 $40.60\ \mu\text{m}$ の水液滴に対して発生後 $200\ \mu\text{s}$ 毎に $3\ \text{ms}$ まで液滴径を計測した結果、蒸発速度の測定に成功し、およそ $0.22\ \mu\text{m}/\text{ms}$ と見積もつ

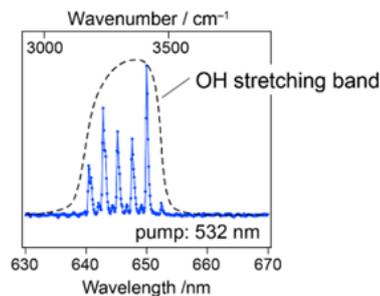


図4. 水液滴から発生したラマン散乱スペクトルに見られる Whispering Gallery Modes

た。このような僅かな蒸発量を定量化できる高精度な計測法であることを実証した。また、得られた蒸発速度は Knudsen の蒸発速度理論と合致した。

(3) 超高速カメラによる水液滴のダイナミクス観察

① 発生直後の四重極変形振動

発生直後の液滴を最先端の超高速カメラで撮像し、時々刻々の液滴の形状変化を捉える実験を行った。液滴画像の一つ一つを数値解析して液滴外形のアスペクト比を算出した結果を図 5 に示す。このように、液滴発生時に誘起される四重極振動を捉え、振動の周期から表面張力を、振幅の減衰時間から粘性をそれぞれ評価した。大気中での測定結果 (赤) に比べ、真空中 (青) では振動の周期は短く、減衰は速くなった。つまり室温よりも過冷却領域で、表面張力と粘度がともに増加する結果を得た。これは、過冷却状態の水の物性の一端を捉えた成果となった。

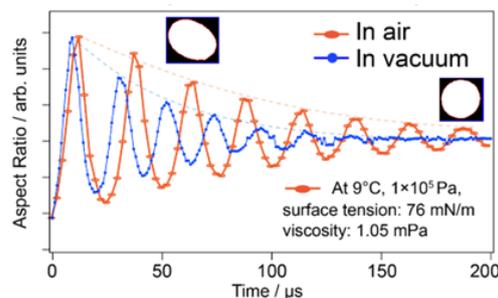


図 5. 超高速カメラで観察した発生直後の水液滴の形状変化 (大気中および真空中)

② 凍結時の分裂現象

一方、液滴の蒸発冷却過程では、時間の経過とともに表面の温度が内部に先行して低下し、表面近傍で凍結核が生じる可能性が高い。従って表面が優先して凍結し、引き続く内部の凍結の際に、体積膨張による圧力増加が液滴の分裂を引き起こす。そこで、凍結核生成後の液滴分裂過程を観察したところ、2 体分裂ばかりでなく、3 体、4 体の分裂も検知された。さらに、直径 40 μm の水液滴が分裂する確率は 85% に上り、分裂を起こす最小サイズは 50 μm と予想されている従来の大気中の研究に照らすと、真空中に特有と考えられる新たな現象を見出した。

(4) 理論解析

① 均質凍結核生成速度の温度依存性の解析

時間とともに凍結が進む様子を描いた「凍結曲線」が実験で得られており、その理論解析を進めた。凍結曲線の数値解析には、まず、液体の蒸気圧、蒸発熱、比熱などの熱力学データをもとに、時間とともに蒸発が進み温度が低下する様子を示す冷却曲線を描き、その後、各温度での均質凍結核生成速度から凍結確率を算出し、凍結曲線を得る [Ando et al., Phys. Chem. Chem. Phys. **20**, 28435 (2018)]. 純水では、既報の物性データをもとに、実験結果 (図 2 の青線) を数値シミュレーションでよく再現できた。一方、凍結の遅延が見られた EG 混合溶液 (同図の赤線) では、上述の 4-(1)-①の研究で均質凍結温度 (T_H) の低下が示唆されたため、純水の均質凍結核生成速度の温度曲線が単純に低温側に移動すると仮定して数値解析を行ったが、凍結曲線が実験データよりも鈍く立ち上がる結果となり、十分な再現が得られなかった。そこで、均質凍結核生成速度の温度依存性の解明が鍵を握るとの認識に至り、分子動力学計算法でその課題に取り組んだ。

純水の凍結核生成過程について、分子動力学シミュレーションの結果の一例を図 6 に示す。およそ 2 万分子の液相の水の中に、初期核となる数百分子程度の氷の結晶を沈め、200 K にて 0.2 ns 間、まずアニーリングを行った。図 6 の例では、アニーリング後に 500 分子弱が固相として残った。その後、温度を 240 K に設定してさらに 30 ns までシミュレーションを進めたところ、核は次第に小さくなった (図中の黒)。一方、237 K では、核は一旦成長し平衡状態に達した (赤)。さらに低温では核が成長し続けたことから、凍結の起点となる臨界核サイズ N_c を、237 K では 550~600 分子と評価した。この臨界核サイズから、古典的な核生成理論に基づいて、その温度における凍結核生成速度を算出した。初期核のサイズを変えてシミュレーションを行うと、異なる温度の N_c 値が得られ、凍結核生成速度の温度依存性を描くことができる。

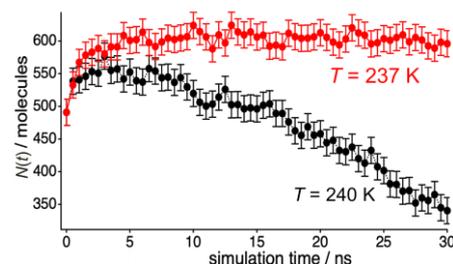


図 6. 臨界核サイズ N_c の温度依存性を評価する分子動力学シミュレーション：純水の結果

これまでに、純水の均質凍結核生成速度を 220~240 K の温度領域で見積もり、およそ既報値を再現する結果を得た。一方、まだ予備的な結果ではあるが、EG 混合時の凍結核生成速度は、純水よりも低温側で立ち上がり、しかも急峻な変化が見られた。この結果は、EG 混合時の凍結曲線の実験結果を定性的には再現する傾向を示しており、今後さらに精査して行く。

② 拡散係数と表面水和状態の解析

一方で、実験とは相補的な視点での理論解析を行った。成果の一つとして、本研究が目指す過冷却領域の水の第 2 臨界点仮説と関連して進めた、水中の巨大分子の分子シミュレーションが挙げられる。常温常圧では相分離しない低密度水と高密度水が顕在化すると考えられる例として、巨大分子表面が疎水的な場合は低密度水が、親水的な場合には高密度水が、それぞれ分子周辺にトラップされやすいと推測し、その結果、高密度水的な水に溶媒和された巨大分子の拡散係数は大きく低下すると予想した。そこで、水に対する巨大分子表面の摩擦抵抗係数を原子ごと

に分解する方法を考案し、分子表面近傍の水和状態と拡散係数との相関の解析を進めた。

巨大分子として $C_{60}(OH)_{28}$ を取り上げ、水に対する摩擦抵抗係数を分子表面のサイトごとの寄与に分割した結果を図 7 に示す。 C_{60} 分子表面の OH 基の数を変えながら同様のシミュレーションをさらに行った結果、親水性による摩擦の顕著な増大が確認された。以上より、OH 基が水中での摩擦を増加させ、拡散を抑制する効果を持つことを見出した。

この成果は、凍結核生成速度に対するポリオール混合効果について考察を深める起点にもなる。つまり、ポリオールの OH 基は、高密度的な水を偏在させる原因にもなると考えられる。この拡散現象の解析を通して、今後、ポリオールに対しても水合状態の研究を進めて行く。

さらに、上述の研究に深く関連する溶液論の研究にも取り組んだ。例えば、拡散係数のシミュレーションには基本セルサイズ効果の除去が基盤となるが、その手法の開発に関して成果を上げ、論文発表した[Iwashita et al., Chem. Phys. Lett. **807**, 140096 (2022)]。

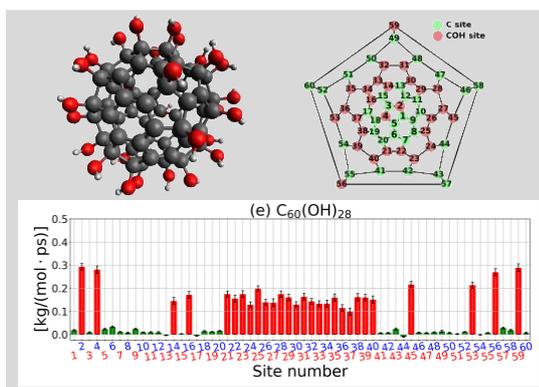


図 7. $C_{60}(OH)_{28}$ の水との摩擦抵抗係数のサイトごとの寄与への分割。OH 基による摩擦の増加を示している。

(5) まとめと展望

以上のように、概ね当初の計画に沿って研究を推進し、過冷却領域の純水およびポリオール水溶液の探究を実験・理論の両面から行った。主要な成果として、純水の液滴について、過冷却深部の均質凍結核生成速度の実測と分子動力学シミュレーションによる導出、Whispering gallery mode を利用した液滴径の精密計測法の開発に基づく蒸発速度の実測、超高速カメラによる液滴振動観察に基づく表面張力、粘度の評価など、種々の物性解明の手段としての有用性を実証した。さらに、ポリオール水溶液の液滴について、凍結遅延の実測、凍結核成長や水合状態の分子動力学シミュレーションを行って、ポリオール混合効果の探究を進めた。特に、凍結の抑制効果が見出され、純水よりもさらに低温領域を探索できる可能性が示された。

これらの成果は高く評価され、一例として、ナノ学会第 20 回大会 (2022 年) にて、「真空中における水液滴の蒸発冷却過程：ラマン散乱共鳴波長による液滴直径測定と凍結過程の画像解析」の題目で発表した研究協力者・飯田岳史が若手優秀ポスター発表賞を受賞した。飯田は、真空中のイオンビームから液滴までの研究に取り組み、2024 年 3 月に「真空中のイオンビーム制御と液滴ダイナミクスの探究：計算機活用による実験支援」の論文名で博士 (理学) の学位を取得した。また、現在、博士課程在籍中の吉岡拓哉、岩下智哉も研究協力者として実績を積み、若手研究者の育成にも成果があった。

真空中の液体を実験対象として取り扱うことを可能にした本研究の方法論が、今後、幅広く展開され、過冷却液体の科学が、新たな物質相の発見などに向けて益々進展することが期待される。将来展望として、真空中の液体科学が多様な観点から極限環境の科学を切り拓く分野として発展することを期待したい。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計4件（うち査読付論文 4件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Mika Matsuo, Yuka Nakamura, Masahiro Kinoshita, and Ryo Akiyama	4. 巻 -
2. 論文標題 Spatial distribution of reduced density of hard spheres near a hard-sphere dimer: Results from three-dimensional Ornstein-Zernike equations coupled with several different closures and from grand canonical Monte Carlo simulation	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Physica A	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.physa.2024.129846	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 Keiju Suda, Ayumi Suematsu, and Ryo Akiyama	4. 巻 630
2. 論文標題 Two-dimensional ordering of bacteriorhodopsins in a lipid bilayer and effects caused by repulsive core between lipid molecules on lateral depletion interaction: A study based on a thermodynamic perturbation theory	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physica A	6. 最初と最後の頁 129260/1-10
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.physa.2023.129260	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 Takeda M., Maruyama K., Akiyama R., Miyata T.	4. 巻 140
2. 論文標題 Integral equation study of effective attraction between like-charged particles mediated by cations: Comparison between IPY2 and HNC closures	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Europhysics Letters	6. 最初と最後の頁 17001/1-7
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1209/0295-5075/ac94f5	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 Iwashita Tomoya, Nagao Masaaki, Yoshimori Akira, Terazima Masahide, Akiyama Ryo	4. 巻 807
2. 論文標題 Usefulness of higher-order system-size correction for macromolecule diffusion coefficients: A molecular dynamics study	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Chemical Physics Letters	6. 最初と最後の頁 140096/1-7
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.cpllett.2022.140096	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17件（うち招待講演 4件 / うち国際学会 6件）

1. 発表者名 吉岡拓哉、荒川 雅、秋山 良、寺寄 亨
2. 発表標題 真空中のポリオール添加水液滴の凍結過程：凍結時間の観測と分子動力学シミュレーションによる解析
3. 学会等名 日本化学会第104春季年会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 飯田岳史、堀尾琢哉、荒川 雅、寺寄 亨
2. 発表標題 真空中の蒸発冷却による水液滴の均質凍結：液滴径変化の光測定と相転移挙動の高速画像観察
3. 学会等名 日本化学会第104春季年会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 秋山 良
2. 発表標題 教科書では学ばない実効力利用の話：エントロピー駆動の“引力”と同符号電荷間の“引力”
3. 学会等名 新潟工学振興会 技術講演会（招待講演）
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 R. Akiyama
2. 発表標題 A theoretical approach for separation device based on the idea of entropic attraction
3. 学会等名 KIAS-FUB International Workshop on Bio-Soft Matter Theory (国際学会)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 T. Iwashita and R. Akiyama
2. 発表標題 Molecular dynamics study of difference of friction coefficients between hydrophilic and hydrophobic surfaces on a macromolecule in water
3. 学会等名 KIAS-FUB International Workshop on Bio-Soft Matter Theory (国際学会)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 R. Akiyama
2. 発表標題 Reentrant behavior in effective interactions between like-charged macroions immersed in an electrolyte solution
3. 学会等名 KIAS-FUB International Workshop on Bio-Soft Matter Theory (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 R. Akiyama
2. 発表標題 Co-cation effect on the reentrant behavior of effective interaction between like-charged particles immersed in an electrolyte solution
3. 学会等名 5th ICMAR12023 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 秋山 良
2. 発表標題 電解質溶液中の同符号電荷間の実効引力
3. 学会等名 令和5年度 物理化学インターカレッジセミナー 兼 日本油化学会界面科学部会九州地区講演会 (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 秋山 良、末松安由美、竹田宙加、宮田竜彦、丸山虎哲
2. 発表標題 電解質溶液中の同符号電荷間相互作用が示すリエントラント挙動とその普遍性
3. 学会等名 第45回溶液化学シンポジウム
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 T. Iwashita and R. Akiyama
2. 発表標題 The Decomposition of Friction Coefficients for Analysis of Solvation Effects on Diffusion Coefficients
3. 学会等名 The 5th conference of Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC2023) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 K. Tokunaga, Y. Nakamura, R. Akiyama, and A. Yoshimori
2. 発表標題 Molecular dynamics study of difference of friction coefficients between hydrophilic and hydrophobic surfaces on a macromolecule in water
3. 学会等名 STATPHYS28 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 飯田岳史、吉岡拓哉、荒川 雅、堀尾琢哉、寺寄 亨
2. 発表標題 真空下の蒸発冷却過程の解明を目指した水滴径の精密測定法
3. 学会等名 ナノ学会第21回大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 飯田岳史、吉岡拓哉、楠本多聞、荒川 雅、堀尾琢哉、寺寄 亨
2. 発表標題 真空下における水液滴の蒸発冷却過程：ラマン散乱共鳴波長による液滴直径測定と凍結過程の画像解析
3. 学会等名 ナノ学会第20回大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 吉岡拓哉、飯田岳史、楠本多聞、荒川 雅、堀尾琢哉、寺寄 亨
2. 発表標題 ポリオール化合物を添加した真空中の水液滴の凍結過程
3. 学会等名 The 15th Mini-Symposium on Liquids
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 飯田岳史、荒川 雅、堀尾琢哉、寺寄 亨
2. 発表標題 真空下における水滴の蒸発冷却過程：Whispering Gallery Modeの波長測定による液滴直径計測
3. 学会等名 第16回分子科学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 吉岡拓哉、飯田岳史、楠本多聞、荒川 雅、堀尾琢哉、寺寄 亨
2. 発表標題 エチレングリコール添加による真空中の水液滴の凍結時間遅延
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 吉岡拓哉、飯田岳史、荒川 雅、堀尾琢哉、寺崎 亨
2. 発表標題 ポリオール添加による真空中の水液滴の凍結遅延
3. 学会等名 日本化学会第102春季年会
4. 発表年 2022年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

九州大学大学院理学研究院化学部門量子化学研究室ホームページ http://www.scc.kyushu-u.ac.jp/quantum/index_j.php
--

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	秋山 良 (Akiyama Ryo) (60363347)	九州大学・理学研究院・准教授 (17102)	
研究分担者	堀尾 琢哉 (Horio Takuya) (40443022)	九州大学・理学研究院・准教授 (17102)	
研究分担者	荒川 雅 (Arakawa Masashi) (10610264)	九州大学・理学研究院・助教 (17102)	

6. 研究組織（つづき）

	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
研究協力者	飯田 岳史 (Handa Takefumi)	九州大学・大学院理学府・博士課程 (17102)	
研究協力者	吉岡 拓哉 (Yoshioka Takuya)	九州大学・大学院理学府・博士課程 (17102)	
研究協力者	岩下 智哉 (Iwashita Tomoya)	九州大学・大学院理学府・博士課程 (17102)	

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