

研究 成 果 報 告 書

(国立情報学研究所の民間助成研究成果概要データベース・登録原稿)

研究テーマ (和文) AB		下部臨界温度を持つ溶液の局所構造解析とその起源の解明			
研究テーマ (欧文) AZ		Local structural analysis of aqueous solution having lower critical consolute temperature and investigation of its origin			
研究氏 代 表 名 者	カタカナ CC	姓) ナガサカ	名) マサナリ	研究期間 B	2014 ~ 2015 年
	漢字 CB	長坂	将成	報告年度 YR	2015 年
	ローマ字 CZ	Nagasaka	Masanari	研究機関名	自然科学研究機構
研究代表者 CD 所属機関・職名		自然科学研究機構 分子科学研究所・助教			
<p>概要 EA (600 字～800 字程度にまとめてください。)</p> <p>下部臨界温度を持つ溶液は、臨界温度以下では均一に混ざり、臨界温度以上において相分離する、通常とは逆の挙動を示す。本研究では、溶液の局所構造を元素選択的に明らかにできる軟 X 線吸収分光法 (XAS) と、更に空間分解して XAS 測定できる走査型軟 X 線顕微鏡 (STXM) を用いることで、トリエチルアミン水溶液でなぜ下部臨界温度が存在するのか明らかにすることを目的とする。まずは、下部臨界温度以下の均一な溶液において、トリエチルアミン水溶液の C-K, N-K, O-K 吸収端 XAS 測定を異なる温度で行った。実験は UVSOR-III の軟 X 線ビームライン BL3U に、独自に開発した透過法 XAS 測定のための液体セルを接続して行った。C-K, N-K 吸収端 XAS からはトリエチルアミン分子周りの相互作用が分かる。また、O-K 吸収端 XAS からは水分子周りの相互作用が分かる。トリエチルアミン分子の窒素原子と水分子の水素原子が水素結合するが、N-K 吸収端 XAS からその水素結合が異なる温度で変化しないことを明らかにした。一方、C-K, O-K 吸収端 XAS 測定から、低温ではトリエチルアミン分子のエチル基の反発相互作用により、水の水素結合が伸びることが分かった。そして温度が上がるにつれて、エチル基の反発相互作用が弱まり、水の水素結合がバルクの水に近づいていくことが分かった。これにより、臨界温度以上では水とトリエチルアミンが相分離すると考えられる。次に臨界温度以上において相分離した後の、トリエチルアミンと水の液液界面を STXM で観察した。STXM は UVSOR-III の軟 X 線ビームライン BL4U に、STXM 用の液体セルを接続して行った。その結果、相分離した後の水相にトリエチルアミン分子が存在して、トリエチルアミン相にも水分子が存在することが分かった。また、それぞれの相において、水分子の局所構造が変化することを明らかにした。</p>					
キーワード FA	軟 X 線吸収分光	下部臨界温度	液液界面	走査型軟 X 線顕微鏡	

(以下は記入しないでください。)

助成財団コード TA					研究課題番号 AA								
研究機関番号 AC					シート番号								

発表文献（この研究を発表した雑誌・図書について記入してください。）									
雑誌	論文標題 ^{GB}								
	著者名 ^{GA}		雑誌名 ^{GC}						
	ページ ^{GF}	～	発行年 ^{GE}					巻号 ^{GD}	
雑誌	論文標題 ^{GB}								
	著者名 ^{GA}		雑誌名 ^{GC}						
	ページ ^{GF}	～	発行年 ^{GE}					巻号 ^{GD}	
雑誌	論文標題 ^{GB}								
	著者名 ^{GA}		雑誌名 ^{GC}						
	ページ ^{GF}	～	発行年 ^{GE}					巻号 ^{GD}	
図書	著者名 ^{HA}								
	書名 ^{HC}								
	出版者 ^{HB}		発行年 ^{HD}					総ページ ^{HE}	
図書	著者名 ^{HA}								
	書名 ^{HC}								
	出版者 ^{HB}		発行年 ^{HD}					総ページ ^{HE}	

欧文概要^{EZ}

Aqueous solution having lower critical consolute temperature is mixed below critical temperature, and shows phase separation above critical temperature. This behavior is contrary to the normal one. In this study, we have studied the local structures of aqueous triethylamine (TEA) solutions that show lower critical consolute temperature by using soft X-ray absorption spectroscopy (XAS) and scanning transmission X-ray microscope (STXM). XAS is an element specific method to reveal local structures of liquids. Spatial resolved XAS of liquid-liquid interfaces is able to be measured by using STXM. Below lower critical temperature, we have measured XAS of aqueous TEA solution in the C, N, and O K-edges at different temperatures. The XAS experiment is performed by using a liquid flow cell for XAS in transmission mode at soft X-ray beamline BL3U at UVSOR-III Synchrotron. Local structure of TEA molecule is measured by C and N K-edge XAS, and that of water molecule is studied by O K-edge XAS. From the N K-edge XAS, we have found that the hydrogen bond between N atom of TEA and H atom of water is not changed at different temperatures. From the C and O K-edge XAS, on the other hand, we have revealed that the hydrogen bond between water molecules is weakened by the hydrophobic interaction of ethyl group in TEA molecule. The hydrogen bond between water molecules becomes closer to that of bulk water by increasing temperature because of the weak hydrophobic interaction of ethyl group at higher temperatures. As a result, aqueous TEA solution shows phase separation above critical consolute temperature. We have also measured STXM images of liquid-liquid interfaces between TEA and water phases above critical temperatures. STXM of liquid samples are measured by our developed liquid flow cell at soft X-ray beamline BL4U at UVSOR-III Synchrotron. As a result, we have found that TEA molecules exist in the water phase, and water molecules exist in the TEA phase. The local structures of water molecules are changed at the different phases in liquid-liquid interfaces of aqueous TEA solutions.