

研究室紹介



高千穂大学人間科学部人間科学科

准教授 竹内 浄 研究室

経歴

早稲田大学先進理工学研究科電気・情報生命専攻博士後期課程満期退学

日産自動車株式会社材料技術部、川崎市環境局公害部、川崎市公害研究所、川崎市環境総合研究所を経て現職

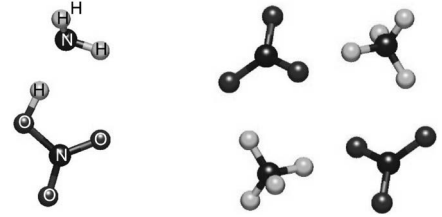
杉並区環境清掃審議会副会長

● 高千穂大学について

高千穂大学は、1914年に開校した高千穂高等商業学校（私学として日本最初の高等商業学校）から戦後に昇格した高千穂商科大学を前身とした少人数教育重視の大学です。所在地は東京都杉並区であり、渋谷、新宿、吉祥寺の概ね中心に位置した利便性の良い場所にあります。

● 研究活動

前職の川崎市環境総合研究所では大気環境及び都市環境の研究を担当しておりました。現在は、計算化学（第一原理計算など）により、物質の性質や物理的現象の分子レベルでの理論的解明、新奇な機能をもつ材料の理論的設計について研究しています。ここでは、気相の硝酸アンモニウムの分子構造に関する研究結果を紹介し [1, 2]。硝酸アンモニウムは、結晶中では $[\text{NH}_4][\text{NO}_3]$ 構造ですが、気相の単量体では $[\text{NH}_3][\text{HNO}_3]$ 構造が最もエネルギー的に安定です（右図参照）。しかし、二量体よりも大きくなると $[\text{NH}_4][\text{NO}_3]$ 構造が安定となります。この水素原子の移動 (proton transfer) は単量体の電気双極子が作る電場の相互作用により起こると考えられました。その理由の一つとして孤立単量体に電場を加えると $[\text{NH}_4][\text{NO}_3]$ 構造が安定となる計算結果が得られています。また、より大きな多量体の計算では、一定の大きさで分子単位当たりの安定性は最大とならないため（マジックナンバーが存在しない）、ある決まった大きさの多量体が始動因となって凝集しているわけではないことが示唆されました。現在は、環状物質によるアミノ酸のキラリティー認識を、分子間相互作用に着目して研究しています [3]。ホスト分子によるゲスト分子の捕捉メカニズムの解明は、クロマトグラフィーなどの分離技術にとって重要と考えています。



硝酸アンモニウムの単量体（左）と二量体（右）の最安定構造

[1] J. Takeuchi & K. Takeda: Japanese Journal of Applied Physics, 52, 076302 (2013).
 [2] J. Takeuchi & K. Takeda: International Journal of Applied Physics and Mathematics, 4, 5 (2014).
 [3] J. Takeuchi & K. Takeda: Japanese Journal of Applied Physics, 55, 03DF09 (2016).

● 教育活動

基礎数学、物質科学、環境科学など通常の講義以外に、数理・物質科学に関するゼミナールを開講しています。私が所属する人間科学部の学生の多くは心理学や社会学などに興味をもつため、私のゼミを希望する学生は少数です。ゼミでは、前述のような計算化学の他に、学生の要望に応じて、イプシロン-デルタ論法などの微分積分学の基礎、マルコフ連鎖であるレスリー行列などの数理モデルの基礎を学んでいます。学生が新たに何かを理解できたときに教育の意義を感じます。

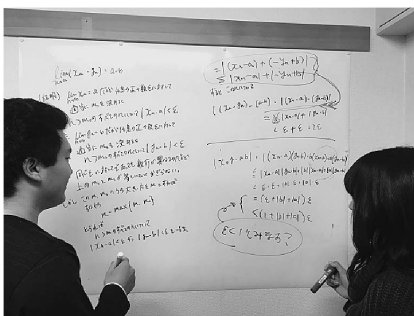


ゼミ学生と筆者(中央)

● 社会貢献

大学は教育研究の他に、これまで以上に知の拠点として地域への貢献を期待されています。2013年には、本学総合研究所の主催により、「スマート社会に向けて」と題したシンポジウムを杉並区役所及び日産自動車の協力を得て開催し、コーディネーターを務めました。2014年からは、杉並区環境清掃審議会の委員を務めております。2015年には、NPO法人すぎなみ環境ネットワーク主催の環境セミナー「杉並のごみ、みどり、エネルギーを考える」にファシリテーターとして参加しました。今後も、行政やNPOなど外部機関との連携により、自分が協力できる社会貢献について幅広く模索していきたいと考えています。

ゼミでは数学を中心とした自然科学の基礎を勉強しています。先生から質問や説明を繰り返し求められ、他の講義よりも頭を使うので疲れますが、楽しいです。現在、IT企業を中心に就活中です。



ゼミ風景



ゼミ発表会に向けた準備



本学主催のシンポジウム