



## 森田 明弘 (助教授)

1988年東京大学理学部化学科卒、1990年同大学院理学系研究科修士課程修了、1992年京都大学大学院理学研究科博士後期課程中退、博士(理学) 京都大学理学部助手を経て2004年1月より現職  
 TEL: 0564-55-7461 FAX: 0564-55-7025  
 電子メール: amorita@ims.ac.jp

本研究グループでは、電子状態理論や分子動力学シミュレーションなどの計算手段を用いて、不均質化学現象の解明を目指しています。ここでいう「不均質」とは、気相と液相など複数の相にまたがった化学現象を指し、いろいろな界面現象や大気化学など身近に多くの例をみることができます。たとえば近年の大気環境化学のなかで極めてホットな問題であるエアロゾル化学は、不均質現象がまともに関与する問題でもあります。しかしこれらの現象を分子レベルで理解することは非常に難しく、理論化学にとってもチャレンジングな対象といえます。界面に対する理解が進むにつれて、従来主としてよく規定された固体表面を研究してきた表面科学との接点も、今後ますます大きくなっていくと考えられます。

不均質現象については詳細な分子レベルの情報が乏しいため、研究には二つの問題意識が必要となります。 どうしたら分子レベルの知見を引き出すことができるのか、 従来の比較的粗いモデルや現象論的な理解がどこまで成り立つのか。そこで上のそれぞれの問題意識に即して、研究の内容を以下に紹介します。

界面構造に対する和周波発生スペクトルの理論  
 可視光と赤外光を界面に照射

して和周波光を検出する非線形分光法は、界面構造を研究する新しい方法として非常に注目を集めています。この方法は界面の情報を選択的に得られるにもかかわらず、他の多くの方法と異なり真空条件を必要としないため、気液界面や液液界面など従来ほとんど分子レベルの検出手段が難しかった研究対象への広がりが期待されています。我々は、電子状態理論と分子動力学シミュレーションを用いて、実験的な和周波スペクトルを非経験的に計算し解析する方法を、世界に先駆けて提出しました。今後実験と理論の緊密な連携のもとに、界面構造の理解と応用を目指していきます。

### 界面物質移動の理論

不均質な場のもとでの化学反応速度や核形成・成長などによって、界面での物質移動が基礎的な重要性をもっています。しかし実際に観測される物質移動は、バルク中の拡散や溶解度など多くの要因を含んだ複雑なもので、従来の経験的なモデルにはしばしば甚だしい曖昧さが残されています。物質移動に伴う界面現象とバルク現象を正しく分離することは実験では困難なため、我々は理論計算からアプローチしてきました。それをふまえて、実際の物質移動を分子レベルの界面現象と結びつけて理解することを目指します。

### 参考文献

- 1) A. Morita and J. T. Hynes, "A Theoretical Analysis of the Sum Frequency Generation Spectrum of the Water Surface II. Time-Dependent Approach," *J. Phys. Chem. B* **106**, 673–685 (2002).
- 2) A. Morita, M. Sugiyama and S. Koda, "Gas-Phase Flow and Diffusion Analysis of the Droplet Train/Flow Reactor Technique for the Mass Accommodation Processes," *J. Phys. Chem. A* **107**, 1749–1759 (2003).

