

森 田 明 弘 (准教授) (2004 年 1 月 1 日 ~ 2007 年 3 月 31 日)^{*}

A-1) 専門領域：計算化学、理論化学

A-2) 研究課題：

- a) 界面和周波発生分光の理論とシミュレーション
- b) 分子軌道法に基づく電子分極の分子モデリング

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 可視 - 赤外の和周波発生分光法は、界面構造をプローブする実験手法として近年広く用いられるようになってきた。とくに液体界面を分子レベルで観測する手法として他に類例がなく有力であり、電気化学、高分子化学、大気化学など多くの関連分野への展開が図られている。本グループでは、分子軌道計算に基づく分子モデリングと分子動力学計算に基づいて和周波発生スペクトルを非経験的に計算し、理論的に解析する手法を開発してきた。本年の成果としては、電解質水溶液および酸水溶液界面の構造解析に関して新たな進展を得た。電解質水溶液界面におけるイオンの分布は、誘電体モデルによる鏡像電荷を超えて、イオン種によって多様であることが近年の分子シミュレーションによって予想されているが、実験的に液体表面を観測する手段が乏しいことが検証を困難にしていた。そこで本研究グループでは、界面和周波分光の実験結果を精密に解析し、 Br^- や I^- のようなアニオンでは確かに界面から露出する状態が実験的に観測されていることを実証し、詳細に報告した。また酸水溶液界面に対しても同様の解析を行い、ヒドロニウムイオン H_3O^+ が界面第 1 層で特異的に存在することの確かな証拠を与えることができた。これらは、和周波分光の有効性を拡大するうえでも重要な成果となった。
- b) 電子分極の効果は、凝縮相中での分子間相互作用を記述する上で非常に重要であるとともに、上記の和周波分光を支配する非線形分極を表現するうえでも必要である。本年は、水溶液系の分極および分極率を時々刻々に計算するための分子モデルを開発し、上記の計算に応用した。さらに和周波分光を記述できる分子モデルの一般化を目指して、charge response kernel (CRK) 理論に基づいて、アルキル分子鎖の分子モデリング手法を開発した。

B-1) 学術論文

- T. ISHIYAMA and A. MORITA**, "Molecular Dynamics Study of Gas-Liquid Aqueous Sodium Halide Interfaces I. Flexible and Polarizable Molecular Modeling and Interfacial Properties," *J. Phys. Chem. C* **111**, 721–737 (2007).
- T. ISHIYAMA and A. MORITA**, "Molecular Dynamics Study of Gas-Liquid Aqueous Sodium Halide Interfaces II. Analysis of Vibrational Sum Frequency Generation Spectra," *J. Phys. Chem. C* **111**, 738–748 (2007).
- T. ISHIYAMA and A. MORITA**, "Molecular Dynamics Analysis of Interfacial Structures and Sum Frequency Generation Spectra of Aqueous Hydrogen Halide Solutions," *J. Phys. Chem. A* **111**, 9277–9285 (2007).

B-4) 招待講演

森田明弘, 「エアロゾル表面の分子論と界面物質移動の理論的検討」第 1 回「エアロゾルの核生成 - CCN - 雲微物理 - 気候システム」ワークショップ, 横浜, 2007 年 2 月.

A. MORITA, "Molecular dynamics study of interfacial sum frequency generation spectroscopy," 12th Korea-Japan Joint Symposium on Frontiers of Molecular Science "Leading-Edge and the Future of Photo-Molecular Science," Jeju (Korea), July 2007.

A. MORITA and T. ISHIYAMA, "Computational Analysis of Interfacial Sum Frequency Generation Spectroscopy," 234th ACS National Meeting, Symposium on "Recent Advances in Studies of Molecular Processes at Interfaces," Boston (U.S.A.), August 2007.

森田明弘, 「分子軌道計算に基づくモデリングとMD計算の組み合わせによる界面和周波発生分光の第一原理的シミュレーション手法の開発」分子研研究会「分子科学における連成シミュレーションの基礎理論と応用」岡崎, 2007年8月.

A. MORITA, "Theoretical Aspects of Interfacial Sum Frequency Generation Spectroscopy," 1st Asian Science Forum, Sendai, September 2007.

森田明弘, 「分子シミュレーションと和周波分光で探る溶液界面の電気二重層構造の多様性」第27回物理化学コロキウム, 山形, 2007年9月.

森田明弘, 「界面和周波分光における実験と理論のインタープレイ」科研費特定研究「実在系の分子理論」A02, A03班合同研究会, 東京, 2007年11月.

A. MORITA, "Local Interface Structure of Electrolyte Solutions Probed by Sum Frequency Generation and Molecular Simulation," 2nd Japan-Czech-Slovakia Joint Symposium for Theoretical/Computational Chemistry, Kyoto (Japan), December 2007.

B-6) 受賞、表彰

森田明弘, 平成18年度分子科学奨励森野基金 (2006).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員

分子構造総合討論会実行委員 (2003).

第19回分子シミュレーション討論会実行委員 (2005).

第22回化学反応討論会実行委員 (2006).

第13回理論化学シンポジウム代表世話人 (2006).

第1回分子科学討論会実行委員 (2007).

学会誌編集委員

分子シミュレーション研究会誌「アンサンブル」編集委員 (2007-).

科学研究費の研究代表者、班長等

奨励研究(A)-若手研究(B) 代表者 (2001-2002).

基盤研究(C) 代表者 (2003-2005).

特定領域研究「実在系の分子理論」(公募)代表者 (2007).

B-10)外部獲得資金

奨励研究(A)- 若手研究(B),「成層圏エアロゾル表面での不均質大気化学の理論的研究」森田明弘(2001年-2002年).

基盤研究(C),「大気中エアロゾル表面構造と物質移動に関する理論的研究」森田明弘(2003年-2005年).

特定領域研究,「実験と理論の連携による界面和周波発生分光の解析」森田明弘(2007年).

山田科学振興財団派遣援助,「大気中エアロゾル表面構造の理論的研究」森田明弘(2001年).

C) 研究活動の課題と展望

本年度初頭に東北大学に転任となり,本年度は引き続き分子研の兼任として研究活動を行った。界面和周波分光の理論計算は世界的にも初めての試みであり,分子研在職中に上記のアイデアを具体化するうえで,分子研のスタッフや設備等には非常にお世話になったことを感謝したい。しかし今度萌芽的段階を超えて,界面現象の解明に大きく貢献できる実用的な理論的方法論とするためには,まだ多くの仕事が残されている。今後,理論自体を深化させるとともに,大規模計算を活用した幅広い応用を図って,研究の領域を広げてゆきたい。また,後進の指導にも新たに力を注いでゆきたいと考えている。

*) 2007 年 4 月 1 日東北大学大学院理学研究科教授,分子科学研究所教授兼任