

石田干城(助教)(2004年11月1日着任)

A-1) 専門領域：理論化学，計算化学

A-2) 研究課題：

- a) 溶液内光励起反応過程およびエネルギー移動過程に関する理論的研究
- b) 分子動力学法によるイオン液体の動的挙動に関する理論的研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) これまでに提案，改良・発展をさせてきた時間依存形式による溶質分子の電子状態の時間依存変化を記述する方法を色素分子の光励起電子移動反応プロセスなどの研究に応用し，光励起後の励起状態におけるフェムト秒オーダーでの超高速電子移動反応プロセスや溶媒和過程の解析を可能にしてきた。これらの提案された方法論をさらに，光励起によって引き起こされる生体分子や遷移金属錯体内でのエネルギー移動の問題へと適用するためにさらなる方法論の拡張を行い，現在計算段階へと取り組んでいるところである。また，並行して進めていた光以外でもエネルギー移動過程を制御するような系の一つであるイオン液体の研究において，分子間相互作用の効果が顕著に表れるために上記のエネルギー移動に関する研究手法が一部有効であることを見出した。これらに関連して，イオン間相互作用下でのイオン液体中でのエネルギー移動・散逸のシミュレーションによる研究へと展開しているところである。
- b) イオン液体が示す特有の挙動の一つである室温付近でのガラス性挙動に関連した動的不均一性などの研究を長時間シミュレーションの結果をもとにした解析により進めてきているところである。特にイオン液体中でのダイナミックスの詳細についてさらに研究を進め，極性溶媒中での光励起後の生体分子中における分子間のエネルギー緩和過程の研究に関連した解析手法を一部応用し，イオン液体中でのイオン間相互作用とエネルギー移動・緩和を研究した。特に室温においてイオン液体は通常液体では過冷却状態において出現する動的不均一性を示したが，これらに関する陽イオンと陰イオンの寄与は同様なものではなく，イオンの大きさやイオン価数といったイオン種の特徴が陽・陰イオン間相互作用エネルギーの緩和過程の違いに顕著に表れることが分かった。また中間散乱関数の解析より，動的不均一性は空間的な構造不均一性と強く相関することが示唆された。

B-1) 学術論文

T. ISHIDA and H. SHIROTA, "Dicationic versus Monocationic Ionic Liquids: Distinctive Ionic Dynamics and Dynamical Heterogeneity," *J. Phys. Chem. B* **117**, 1136–1150 (2013).

B-3) 総説，著書

T. ISHIDA, "The Dynamical Properties on Ionic Liquids: Insights from Molecular Dynamics Study," in *Ionic Liquids—New Aspects for the Future*, J. Kadokawa, Ed., InTech; Rijeka, Croatia, pp. 3–29 (2013).

B-10) 競争的資金

科研費特定領域研究(公募研究)「溶液内光励起反応プロセスと溶媒効果」石田干城(2007年).

科研費特定領域研究(公募研究)「溶液内光励起反応プロセスと溶媒和ダイナミクス」石田干城(2008年-2009年).

科研費特定領域研究(公募研究)「分子動力学法によるイオン液体の理論的研究」石田干城(2008年-2009年).

科研費基盤研究(C),「分子内及び分子間エネルギー移動を起源とする光機能発現の理論的解明」石田干城(2011年-2013年).

C) 研究活動の課題と展望

本年度は溶液内での光励起後の分子内エネルギー移動過程の解析方法の拡張と、その一部に関連してイオン液体中でのイオン間エネルギー相関やダイナミクスを分子動力学法により解析する研究活動を計画し、行った。溶液内励起状態での分子内電子移動反応の研究では解析方法を光による制御以外のエネルギー移動が起こる系などへの適用を行い、多くの知見と進展を得ることができた。今後は生体分子や遷移金属錯体分子のような比較的大きな分子を対象とした研究にも取り組んでいきたい。またイオン液体の動的不均一性の研究に関しては、イオン分子のダイナミクスを詳細に解析する方法も発展させることができ、イオン液体の本質的な理解に向けて理論研究をさらに推し進めることが可能となった。今後、イオン液体に関して、統一した視点から物性などを理解できることを目指して研究を進めていきたい。