

液体界面を見る分子科学の進歩

(東北大学大学院理学研究科化学専攻) 森田 明弘

E-mail: morita@tohoku.ac.jp

液体界面は我々の身近に多くみられ、気液界面では蒸発・凝縮はもとより気泡や大気中のエアロゾル、液液（水-油）界面の例として抽出や相間移動触媒、固液界面として多くの電気化学反応など、それに関わる現象は枚挙にいとまがありません。そのため界面化学や電気化学など多くの関連分野の研究で取り上げられてきました。しかし溶液界面の分子科学としての精密な理解は、溶液バルク内や固体表面の化学と比べても際立って遅れていました。その最大の理由は、溶液界面の分子だけを（バルク中と区別して）鋭敏に捉える実験方法がほとんどなかったからといえます。そのため分子シミュレーションによって、界面の分子の動きを「見てきたように」詳しく解明することがとりわけ求められます。

溶液界面を捉える数少ない有力な実験方法として、非線形光学効果を利用した和周波発生分光法があります。これは界面の分子を選択的に捉えて振動分光を行うユニークな方法で、最近多く行われるようになりました。我々はこの分光法をシミュレーションによって解明する理論を世界で初めて提案し、溶液界面の分子科学をリードする貢献を示してきました。分子シミュレーションと和周波分光という、理論計算と実験の代表的な有力手法を融合することで、溶液界面の解明に新たな光を当てられるようになり、実験との共同研究も盛んに行われています。それらによって新たに解明された知見に基づいて、液体界面での物質輸送や化学反応についても分子レベルの詳細に迫る研究がなされるようになってきました。

本講演では、理論計算と実験の両方の発展に基づいた近年の液体界面の研究を発表者の研究成果を中心にお話ししたいと思います。

【参考文献】

1. 森田 明弘、“液体界面の計算分子科学”, *Mol. Sci.* **2014**, *8*, A0070 (9 pages).
2. T. Ishiyama, T. Imamura, and A. Morita, “Theoretical Studies of Structures and Vibrational Sum Frequency Generation Spectra at Aqueous Interfaces”, *Chem. Rev.* **2014**, *114*, 8447-8470.
3. T. Ishiyama and A. Morita, “Computational Analysis of Vibrational Sum Frequency Generation Spectroscopy”, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **2017**, *68*, 予定.