

令和 3 年 6 月 10 日現在

機関番号：11301

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2017～2020

課題番号：17K05825

研究課題名(和文) 水素結合ネットワークのテラヘルツ光による振動励起と低温光反応ダイナミクス

研究課題名(英文) THz-driven low-temperature photoreaction dynamics of hydrogen-bonded networks

研究代表者

高橋 まさえ (Takahashi, Masae)

東北大学・農学研究科・准教授

研究者番号：80183854

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,800,000円

研究成果の概要(和文)：本研究は温度依存テラヘルツ分光スペクトルに観測される水素結合ネットワークの形成開裂を指標に、テラヘルツ光励起による低温光反応ダイナミクスの追跡と応用開拓を目指すものである。5種類の水溶性ビタミンの微結晶試料、生体適合性を示す非晶質試料DMAPS、水和塩イオンを捕獲したビタミンの単結晶試料について、テラヘルツ分光スペクトル測定、放射光を利用した赤外顕微分光スペクトル測定、第一原理計算を行った。作成した単結晶試料の構造は低温X線構造解析で決定した。特に、非調和性の算定方法、温度効果の誘電率による置き換え、単結晶中の溶液状態水和塩イオンの挙動などは、低温光反応ダイナミクスの追跡に有益な情報を与える。

研究成果の学術的意義や社会的意義

生体内で営まれている室温の熱エネルギーを利用した物理化学過程は、いくつかの熱振動が同時に起こることで進む。特に、水素結合ネットワークの果たす役割は見逃せない。様々な水素結合ネットワークを有する物質についての厳密な理論解析をベースにした一連の本研究成果は、テラヘルツ波による生体物質の機能発現制御という、テラヘルツ波の利点を生かした新しい応用の道の開拓につながる。また、最近26%近い効率を記録した太陽電池材料ペロブスカイトにおいて、高効率の鍵となる機構はテラヘルツ光のアップコンバージョンであり、厳密な理論解析に基づく本研究成果は新たな持続可能エネルギー材料の設計にも寄与すると期待できる。

研究成果の概要(英文)：The purpose of this study is to elucidate the low-temperature photoreactive dynamics by terahertz waves and to develop their applications, using the formation and cleavage of hydrogen-bonded networks observed in the temperature-dependent terahertz spectral spectrum as an index. Terahertz and synchrotron infrared spectrum measurements and first-principles calculation were performed on microcrystal samples of five water-soluble vitamins, amorphous sample DMAPS showing biocompatibility, and single crystal samples of vitamins that capture hydrated salt ions. The structure of the harvested single crystal sample was determined by low-temperature X-ray crystallographic analysis. In particular, the anharmonicity evaluation, the replacement of the temperature effect by the permittivity, and the capture of liquid-like hydrated salt ions into a single crystal, which were developed in this study, provide useful information to pursue terahertz-driven low-temperature photoreactive dynamics.

研究分野：計算材料学

キーワード：生物物理化学 テラヘルツ分光法 第一原理計算

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

室温域で容易に形成解裂する弱い水素結合、ファンデルワールス結合、疎水結合などの弱い結合の振る舞いは、生体関連分子の形態変化や機能発現の鍵を握る。これらの結合の伸縮振動はテラヘルツ領域に現れる。たとえば、根本的治療法がまだ存在しないアルツハイマー病では、アミロイド β 蛋白が水素結合の組み換えでコンフォメーション変化し安定な β シート構造になり、毒性が増強して神経細胞死を引き起こす。テラヘルツ光照射により、水素結合ネットワークを制御し、 β シート構造から通常の構造へ平衡を移すことができれば治療へ繋がる。

非破壊非侵襲計測手段を提供するテラヘルツ技術は、近年、大変魅力的な研究領域になりつつある。その応用は、半導体、断層写真イメージング、ラベルフリー遺伝子解析、細胞レベルイメージング、生物センサー、テラヘルツ通信など多岐にわたる。テラヘルツ領域 ($3 \sim 300 \text{ cm}^{-1}$ または $0.1 \sim 10 \text{ THz}$) の振動吸収スペクトルは、分子の熱力学的特徴やナノスケール構造の研究に重要な役割を果たし、その振動モードは、物理的および化学的プロセスにとって本質的なものである。テラヘルツ領域の振動スペクトルの解明が格段に進み、医学・薬学・農学への応用を視野に入れ、テラヘルツ電磁波の積極的利用による物理化学過程制御の段階となった。

理論計算によるスペクトルのピーク同定が著しく信頼性がおけるものとなり、その振動モードから観測されたピーク位置のエネルギーでどのような振動が励起されるかが明らかになってきた。これらを踏まえ、特に応募者等が発見した温度依存テラヘルツ分光スペクトルに観測される水素結合ネットワークの形成開裂を指標とし、特定の波長のテラヘルツ波を使って、特定の熱振動を励起し、室温域での物理化学過程のダイナミクスを追跡することで、人体に安全なテラヘルツ波の利点を活かした医学・薬学・農学へのテラヘルツ電磁波の応用開拓へと繋がると確信し、本申請を行うに至った。

2. 研究の目的

本研究は、応募者等が発見した温度依存テラヘルツ分光スペクトルに観測される水素結合ネットワークの形成開裂を指標に、テラヘルツ波を励起光とした低温光反応ダイナミクスを追跡し、人体に安全なテラヘルツ波の利点を活かした応用の道を開拓するものである。テラヘルツ波は“新しい光”として注目されており、応募者等の研究により、生体物質の安定構造や機能発現に重要な役割をしている水素結合ネットワークと結びつけるルートが見いだされた。応募者等にノウハウの蓄積されたこの機会を逸することなく、テラヘルツ波による生体物質の機能発現制御の基礎を確立する。前述のように、本研究は、応募者等の厳密な理論解析をベースに特定のテラヘルツ波を励起光とした光反応ダイナミクスを低温で追跡し、人体に安全な電磁波であるテラヘルツ波の医学・薬学・農学への応用の道を切り拓くものであり、(1) 波長可変テラヘルツ照射光反応測定装置の構築、(2) テラヘルツ振動モードの物理化学過程での役割同定、(3) 波長可変テラヘルツ照射低温光反応測定の溶液系への応用展開、(4) 溶液系の第一原理分子動力学計算、の4項目を戦略的に遂行する。

3. 研究の方法

テラヘルツスペクトル測定は Bomem DA-8 および 栃木ニコン RT-20,000 を用いて行った。遠赤外顕微分光スペクトルは SPring-8 の BL43IR IR ビームラインを用いて行った。結晶試料は蒸気拡散法により作製した。ピーク同定のための第一原理計算は Gaussian および CASTEP を使い、東北大学金属材料研究所のスーパーコンピュータを使って行った。

4. 研究成果

初年度は、「波長可変テラヘルツ照射低温光反応測定装置の構築」と「テラヘルツ振動モードの物理化学過程での役割の同定」を行った。テラヘルツ分光は水素結合などの弱い非共有結合性結合の検出に有効であり、これらの結合はタンパク質の高次構造や機能などにおいて生体内で重要な働きをしている。水溶性ビタミンはその可溶性のために、様々な種類の分子間水素結合ネットワークを形成し、分子間水素結合を調べる良い材料である。初年度は、ニコチン酸、ニコチンアミド、アスコルビン酸、ピリドキシン塩酸塩、ピオチンの5種類の水溶性ビタミンについてテラヘルツスペクトルを測定し(図1) 分子間水素結合の伸縮振動の定量的物性やポテンシャルエネルギー曲面の非調和性をもとにした解離定数の決定を行った。測定と計算の結果から、分子間水素結合伸縮振動の波数範囲、温度依存のピークシフト、半値全幅、モル吸光係数などの特性を明らかにした。この結果は、弱い水素結合検出の指標としての利用が期待できる。非調和性は、ニコチンアミドとピオチンのいくつかのモードで得られた。ピオチンでは、基準振動モードに同定されないポテンシャルの非調和性によるホットバンドが観測された。非調和性を示すピオチンのピークについて、モースポテンシャルを仮定して結合定数、解離エネルギー、非調和定数を求めた。モースポテンシャルのパラメータについて、変位ベクトルの大きさの異なる2点の値より導いた三次方程式の実数解から求める方法を開発した。得られた結合定数と解離エネルギーはファンデルワールス力や弱い水素結合の範囲にあり、このエネルギー領域の振動への弱い

非共有結合性相互作用の寄与が明らかとなった。

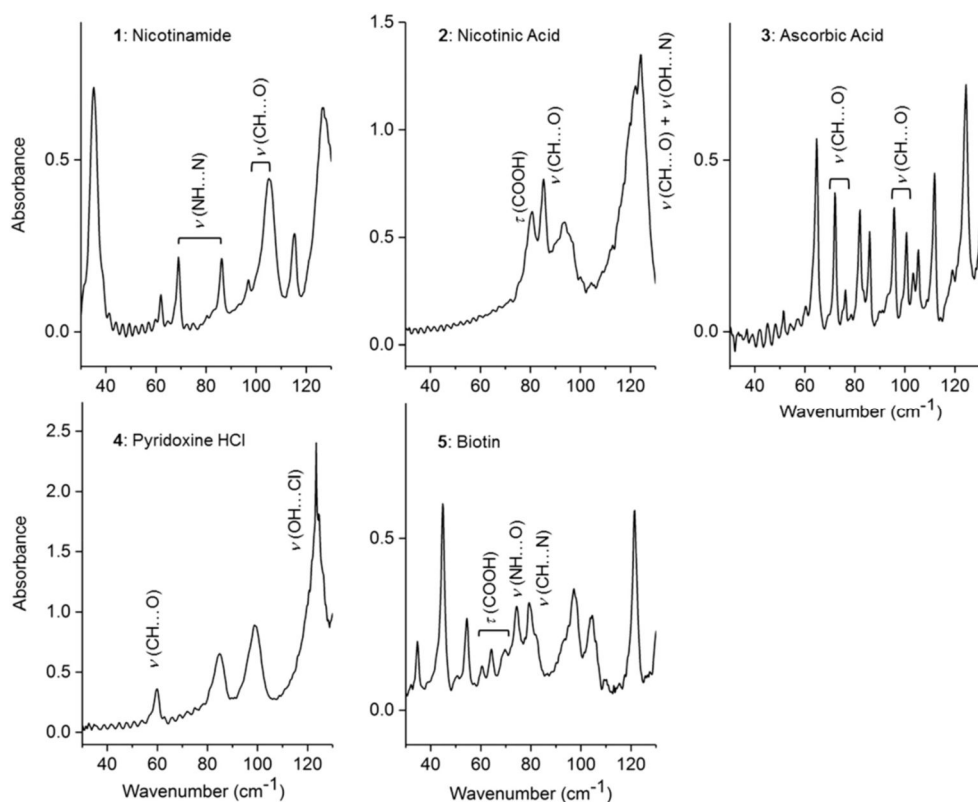


図1 . 5種類のビタミンの77 Kのテラヘルツスペクトル

次年度は、平成30年度以降の計画「波長可変テラヘルツ照射低温光反応測定の実用展開」と「溶液系の第一原理分子動力学計算」に着手した。「波長可変テラヘルツ照射低温光反応測定の実用展開」では水溶液中の水によるテラヘルツ光の吸収が最大の問題点になる。そこで、結晶より溶液状態に近い非晶質試料についての研究を行った。非晶質のテラヘルツ領域スペクトルはシグナルが弱く、また、非晶質特有の単調に増加する大きなバックグラウンドなどのため、測定は困難を極めた。装置を改良し光の強度を上げ、また、充填剤を使わない等の工夫を施した。さらに、用いた生体適合性試料は吸湿性が高く、試料のセッティングにも細心の注意を払った。

材料として、生体適合性を示す非晶質試料 DMAPS について低温における振動吸収の挙動を調べた。測定は $150\text{--}700\text{cm}^{-1}$ の FIR 領域について SPring-8 の BL43IR ビームラインを用い、 $20\text{--}100\text{cm}^{-1}$ の THz 領域について THS-TDS を用いて行った。用いた試料は生体物質によくみられる両性電解質であり、塩と反応するため、充填剤を必要としない SPring-8 の赤外顕微分光装置を用いた。低分子の場合、非晶質はテラヘルツ領域にピークを持たないが、タンパク質など高分子になるとピークが観測されることが知られている。今回は、理論解析が可能な範囲の高分子であり、また、ポリマーにおいて観測される部分的な結晶化と区別できるようなモノマー試料を用い、低温の振動挙動を調べた。FIR 領域、THz 領域ともに $100\text{--}150\text{K}$ 付近で興味深いスペクトル変化が観測されました(図2)。この結果について、Gaussian を用いて第一原理計算によるスペクトル解析を行った。非晶質のため X 線構造解析データがなく、考えられるすべてのコンフォメーションについて検討した。その結果、温度の違いは、温度による誘電率の変化で説明でき、低温において弱い水素結合の形成が形成し、熱運動型から水素結合型に変化した明らかになった(図3)。また、THz 領域では FIR 領域に比べ、水素結合の形成がより顕著に表れることもわかった。

「溶液系の第一原理分子動力学計算」では、温度による影響を調べることができるが、スペクトル解析とどのように結びつけるかが問題となる。非晶質試料について温度の影響を誘電率の変化で置き換えて計算を行い、スペクトル変化に対応する解析ができることを明らかにした。水が水素結合ネットワークを形成し低温で氷になり誘電率が下がるように、今回測定した物質も、低温で水素結合ネットワークの形成により流動性が下がり、誘電率が下がったことは容易に予想できる。

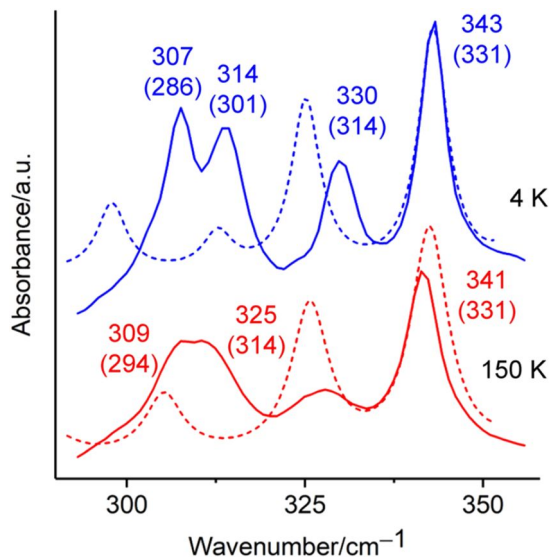


図 2 . DMAPS の遠赤外スペクトル。実線は測定結果、点線は計算結果。

Thermal-motion form at room temperature

Hydrogen-bonded form at low temperature

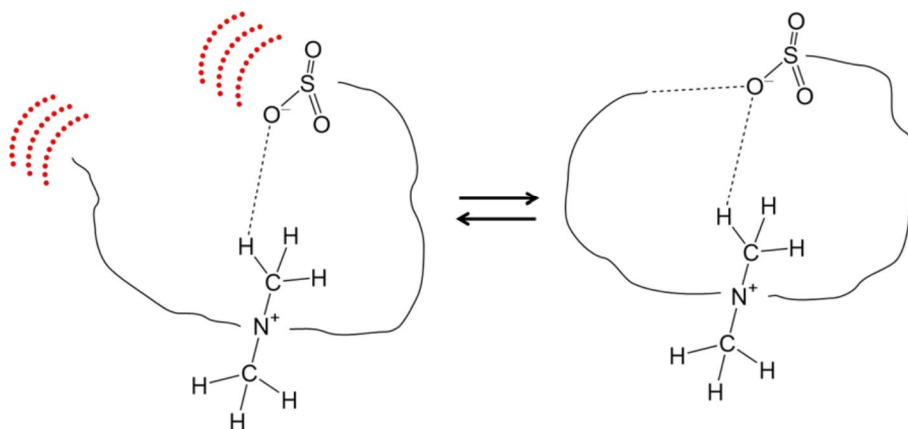


図 3 . DMAPS の室温における熱運動型（左）と低温における水素結合型（右）

最終年度は、積極的に結晶中に水を捕獲し、その温度依存の振動吸収特性を調べた（図 4）。今回は水和塩イオンとして取り込むことで、生物中で重要な役割を担うイオンと水の有機化合物との界面での挙動を明らかにした。「波長可変テラヘルツ照射低温光反応測定の実用展開」では、水和塩イオンを結晶中に積極的に取り込み、溶液系のモデルを構築し、その振動特性を調べた。溶液中に溶けたイオンの水和構造については分子動力学計算による構造予測が最も有力である。しかし、実際の構造についての実験的知見はまだなかった。「溶液系の第一原理分子動力学計算」として、分子動力学計算で予測される構造を、有機結晶中に水和塩イオンを捕獲して結晶化し、実験的に調べた。X線構造解析の結果、水和塩イオンは、有機物と水との界面においても、分子動力学計算の予測の通り 6 配位構造であることが分かった。また、水の酸素と有機物の OH 基の酸素との距離は、分子動力学計算で予測されている純粋中の水クラスターの酸素間距離に等しく、通常の水素結合の酸素間距離より伸びていた。結晶中に捕獲された水分子は、溶液中の水分子と類似の水素結合ネットワークを形成し、イオンへの水和で、有機物との相互作用は弱まっていることがわかった。さらに、この水和イオンを捕獲した有機結晶は、ピーク位置や線幅、ピーク分裂などの温度依存性について、通常の振動分光で現れる特性とは明らかに異なるいくつかの異常性を示すことがわかった（図 5）。異常性を示したピークの振動モードは、相対論効果を取り込んだ第一原理計算から、水素結合の変化に関係するモードであることが明らかになった。研究期間を 1 年延長し、これらの内容を論文にまとめ発表した。

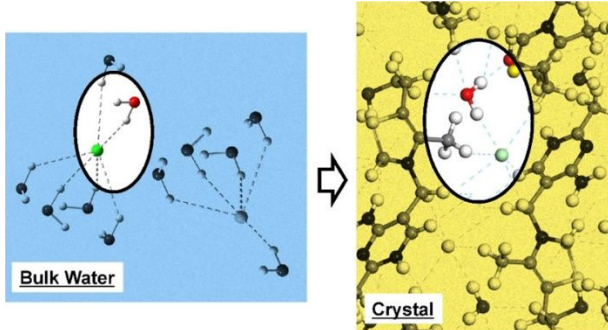


図4. バルク水およびチアミン結晶中の水和塩イオン。緑は塩素、赤は酸素、灰色は炭素、白は水素。点線は水素結合。

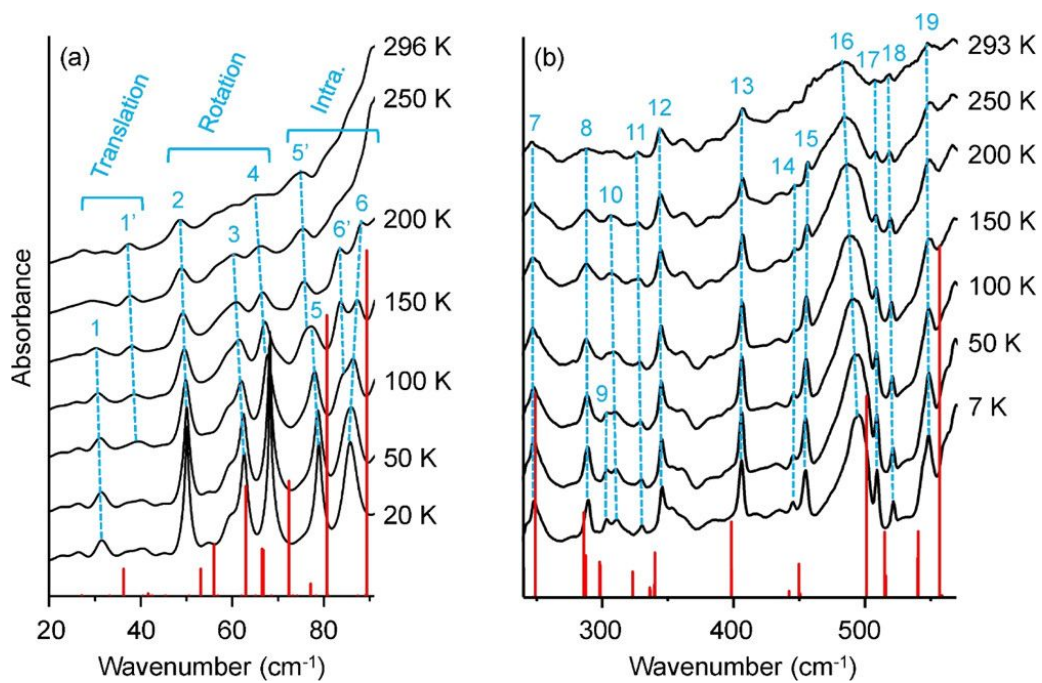


図5. 温度依存(a)テラヘルツおよび(b)遠赤外スペクトル。赤のバーは計算結果。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計12件（うち査読付論文 10件 / うち国際共著 4件 / うちオープンアクセス 5件）

1. 著者名 Takahashi Masae	4. 巻 6
2. 論文標題 Flat Zigzag Silicene Nanoribbon with Be Bridge	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 12099 ~ 12104
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.1c00794	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Takahashi Masae, Kowada Mitsuru, Matsui Hiroshi, Kwon Eunsang, Ikemoto Yuka	4. 巻 125
2. 論文標題 Temperature-Dependent Low-Frequency Vibrations of Thiamine Crystal Containing Hydrated Ions	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 1837 ~ 1844
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.0c09756	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Takahashi Masae	4. 巻 -
2. 論文標題 Environmental effects on the nature of hydrogen bonding detected by synchrotron FTIR microspectroscopy	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 SPRING-8 / SACLAR Research Frontiers 2019	6. 最初と最後の頁 60
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Takahashi Masae, Matsui Hiroshi, Ikemoto Yuka, Suzuki Makoto, Morimoto Nobuyuki	4. 巻 9
2. 論文標題 Assessment of the VDW interaction converting DMAPS from the thermal-motion form to the hydrogen-bonded form	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 13104
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-019-49352-1	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Matsui Hiroshi, Sasaki Tomotaka, Tadokoro Makoto	4. 巻 123
2. 論文標題 Proton Conduction Inhibited by Xe Hydrates in the Water Nanotube of the Molecular Porous Crystal $\{[RuIII(H_2O)_3](TMA)_2 \cdot nH_2O\}_n$	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 20413 ~ 20419
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b05779	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Itakura Tomoya, Matsui Hiroshi, Tada Tomofumi, Kitagawa Susumu, Demessence Aude, Horike Satoshi	4. 巻 11
2. 論文標題 The role of lattice vibration in the terahertz region for proton conduction in 2D metal-organic frameworks	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemical Science	6. 最初と最後の頁 1538 ~ 1541
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c9sc05757a	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 H. Matsui, K. Shimatani, Y. Ikemoto, T. Sasaki, Y. Matsuo	4. 巻 152
2. 論文標題 Phonon-assisted proton tunneling in the hydrogen-bonded dimeric selenates of $Cs_3H(SeO_4)_2$	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 J. Chem. Phys.	6. 最初と最後の頁 154502
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5145108	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Takahashi Masae, Okamura Nobuyuki, Ding Xiaomeng, Shirakawa Hitoshi, Minamide Hiroaki	4. 巻 20
2. 論文標題 Intermolecular hydrogen bond stretching vibrations observed in terahertz spectra of crystalline vitamins	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 CrystEngComm	6. 最初と最後の頁 1960 ~ 1969
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c8ce00095f	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Masae Takahashi	4. 巻 7
2. 論文標題 Theoretical design of flat building blocks for flat silicene with density functional theory calculations	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Material Science & Engineering	6. 最初と最後の頁 27
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.4172/2169-0022-C1-091	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Matsui Hiroshi, Tomida Atsushi, Akagi Tatsuya, Ikemoto Yuka, Tadokoro Makoto	4. 巻 7
2. 論文標題 水素結合型混合原子価レニウム錯体における遠赤外吸収スペクトル	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 SPRING-8/SACLA 利用研究成果集	6. 最初と最後の頁 33 ~ 36
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.18957/rr.7.1.33	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Takahashi Masae	4. 巻 7
2. 論文標題 Flat building blocks for flat silicene	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Sci. Rep.	6. 最初と最後の頁 10855
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-017-11360-4	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Takahashi Masae, Okamura Nubuyuki, Fan Xinyi, Shirakawa Hitoshi, Minamide Hiroaki	4. 巻 121
2. 論文標題 Temperature Dependence in the Terahertz Spectrum of Nicotinamide: Anharmonicity and Hydrogen-Bonded Network	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 J. Phys. Chem. A	6. 最初と最後の頁 2558 ~ 2564
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.6b11049	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計31件（うち招待講演 9件 / うち国際学会 10件）

1. 発表者名 小和田光瑠, 陳思燮, 菅野翔, 高橋まさえ
2. 発表標題 水和イオン含有チアミン結晶の低振動吸収スペクトルの第一原理計算
3. 学会等名 第23回理論化学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 高橋まさえ
2. 発表標題 有機分子・水素結合系のテラヘルツ分光測定と第一原理計算
3. 学会等名 日本学術振興会 テラヘルツ波科学技術と産業開拓第182委員会の研究会（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Masae Takahashi
2. 発表標題 Flat building blocks for flat silicene and the extension to 2D sheet
3. 学会等名 10th International Conference on Materials for Advanced Technologies（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masae Takahashi
2. 発表標題 Assessment of the VDW interaction converting DMAPS from the thermal-motion form to the hydrogen-bonded form
3. 学会等名 The 10th International Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masae Takahashi
2. 発表標題 Theoretical design of flat silicene molecules towards flat 2D silicene sheets
3. 学会等名 The 5th International Conference on Molecular Simulation (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masae Takahashi
2. 発表標題 Assessment of the VDW interaction converting biocompatible molecules from the thermal-motion form to the hydrogen-bonded form
3. 学会等名 The 5th International Conference on Molecular Simulation (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 松井広志、島谷和紀、池本夕佳、松尾康光
2. 発表標題 Cs ₃ H(SeO ₄) ₂ の異常なフォノンとプロトンの相関
3. 学会等名 日本固体イオニクス学会第22回超イオン導電体物性研究会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 松井広志、佐々木智崇、佐久間惇、田所誠
2. 発表標題 Xeを内包した水ナノチューブのプロトン伝導
3. 学会等名 日本物理学会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 松井広志、高野紗季
2. 発表標題 テラヘルツ分光を用いたプロトン移動の研究
3. 学会等名 第1回連携ワークショップ「テラヘルツ光研究の新展開と産業応用への展望」
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 松井広志
2. 発表標題 水ナノチューブにおけるXe水和物生成とプロトン伝導の抑制効果
3. 学会等名 ウォーターフロンティアサイエンス&テクノロジー研究センター研究成果報告会（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Masae Takahashi
2. 発表標題 Anharmonicity and Hydrogen-Bonded Network Observed by Terahertz Spectroscopy
3. 学会等名 Energy Materials and Nanotechnology (EMN) Meeting on Terahertz (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Masae Takahashi
2. 発表標題 Theoretical design of flat building blocks for flat silicene with density functional theory calculations
3. 学会等名 15th Annual Congress on Materials Research and Technology (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hiroshi Matsui
2. 発表標題 Proton Tunneling Detected in Cesium Silicate Compound LDS-1
3. 学会等名 43rd International Conference on Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 高橋まさえ
2. 発表標題 フラットなシリセン実現に向けたフラットな構成単位の理論設計
3. 学会等名 日本物理学会第73回年次大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 高橋まさえ
2. 発表標題 テラヘルツ分光スペクトルに観測される分子間振動とその非調和性の第一原理計算による研究
3. 学会等名 第21回理論化学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 佐々木智崇、田所誠、松井広志
2. 発表標題 キセノン吸蔵したナノ細孔中水分子ケージのプロトン伝導
3. 学会等名 日本固体イオニクス学会第21回超イオン導電体物性研究会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 島谷和紀、池本夕佳、松尾康光、松井広志
2. 発表標題 Cs ₃ H(SeO ₄) ₂ における局在したプロトンの振動状態
3. 学会等名 日本固体イオニクス学会第21回超イオン導電体物性研究会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 松井広志、佐々木智崇、佐久間惇、田所誠
2. 発表標題 Xe水合物により抑制された水ナノチューブのプロトン伝導
3. 学会等名 第44回固体イオニクス討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 高橋まさえ、岡村暢之、丁小萌
2. 発表標題 結晶性ビタミンのテラヘルツスペクトルに観測される分子間水素結合伸縮振動
3. 学会等名 日本物理学会2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 高橋まさえ、菊池星
2. 発表標題 Assessment of the VDW interaction converting a zwitterionic sulfobetaine monomer from the thermal-motion form to the hydrogen-bonded form
3. 学会等名 日本化学会第99春季年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 MasaeTakahashi
2. 発表標題 Flat Building Blocks for Flat Silicene
3. 学会等名 APS March meeting (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 松井広志
2. 発表標題 コーゲン膜の赤外スペクトルと水和状態
3. 学会等名 第2回有機・バイオイオニクス研究会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Masae Takahashi
2. 発表標題 Flat Building Blocks for Flat Silicene
3. 学会等名 The 12th General Meeting of Asian Consortium on Computational Materials Science - Virtual Organization (ACCMS-V012) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Hiroshi Matsui, and Makoto Tadokoro
2. 発表標題 Proton conduction via the water network in hydrophilic nanochannels
3. 学会等名 21st International Conference on Solid State Ionics (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 高橋まさえ
2. 発表標題 温度依存テラヘルツスペクトルで検出される分子間水素結合ネットワークと非調和性
3. 学会等名 シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア2017」(招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 高橋まさえ、菊池星、肖雅馨、三膳真也、須藤駿、松井広志、森本展行、鈴木誠
2. 発表標題 DMAPSのTHz振動吸収スペクトルの温度依存性と誘電率の影響
3. 学会等名 日本物理学会2017年秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 丁小萌、Fan Xinyi、岡村暢之、高橋まさえ
2. 発表標題 水溶性ビタミンのテラヘルツ振動の特性
3. 学会等名 シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア2017」
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 丁小萌、Fan Xinyi、岡村暢之、高橋まさえ
2. 発表標題 水溶性ビタミンの温度依存テラヘルツスペクトルの第一原理計算
3. 学会等名 第11回分子科学討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 佐々木智崇、田所誠、松井広志
2. 発表標題 ナノ細孔中水分子ケージにおけるプロトン伝導I
3. 学会等名 日本物理学会2017年秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 西山伊吹、松尾康光、松井広志
2. 発表標題 赤外分光法によるI型コラーゲンの水和状態の研究
3. 学会等名 日本物理学会2017年秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 佐々木智崇、田所誠、松井広志
2. 発表標題 ナノ細孔中水分子ケージにおけるプロトン伝導率の水和量依存性
3. 学会等名 第43回固体イオニクス討論会
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	松井 広志 (Matsui Hiroshi) (30275292)	東北大学・理学研究科・准教授 (11301)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関			
インド	SASTRA UNIVERSITY			