

科学研究費助成事業（基盤研究（S））事後評価

課題番号	18H05265	研究期間	平成30(2018)年度 ～令和4(2022)年度
研究課題名	最も先進的な計測と理論の協奏による革新的界面研究の推進	研究代表者 (所属・職) (令和5年3月現在)	田原 太平 (国立研究開発法人理化学研究所・開拓研究本部・主任研究員)

【令和5(2023)年度 事後評価結果】

評価		評価基準
	A+	期待以上の成果があった
○	A	期待どおりの成果があった
	A-	一部十分ではなかったが、概ね期待どおりの成果があった
	B	十分ではなかったが一応の成果があった
	C	期待された成果が上がらなかった
<p>(研究の概要)</p> <p>本研究は、液体界面における基礎現象から応用に近い複雑現象までの静的・動的分子過程を観測・解析してその機構を明らかにすることを目的としている。位相制御した界面選択的な非線形分光及びフェムト秒時間分解測定による実験、分子動力学を基盤とするシミュレーション解析を通じて、水を中心とする液体界面の研究を推進した。水/空気界面の振動緩和機構の研究、水界面での化学反応の特異性の解明、水中の埋もれた界面での構造等についての成果を得、界面の物理化学の新しい可能性を拓いた。</p>		
<p>(意見等)</p> <p>研究計画に従い、(1)液体界面の超高速振動ダイナミクス、(2)液体界面構造と界面分子の反応性、(3)埋もれた界面への展開と現実界面の基礎分子過程、の研究を展開し、独創的な高水準の研究成果を着実に上げている。また、それらに用いられたヘテロダイナミクス検出和周波発生法の有用性を示した。例えば、(2)において、フェノールの光解離の反応が、バルク水中に比べて水/空気界面で桁違い（1万倍以上）に加速する現象は、意外性も高く、興味深い現象である。その他にも重要な基礎物理化学的知見が得られており、それらが広い系に一般化され得る現象であるかについては、今後の検証が必要である。(3)では実用を意識した電極界面の手法をも開発している。現時点では静的な条件での測定となっているが、さらに、動的な作用下での計測が必要であろう。これらの研究成果を効果的に達成するためには、実験を担う研究者と理論を構築する研究者間で密な共同研究が、更に進展することを期待する。</p>		