

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 5 年 5 月 29 日現在

機関番号：82401

研究種目：基盤研究(S)

研究期間：2018～2022

課題番号：18H05265

研究課題名（和文）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

研究課題名（英文）Exploring Interface Science by Concerted Use of Advanced Spectroscopy and Theory

研究代表者

田原 太平（Tahara, Tahei）

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

研究者番号：60217164

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 148,400,000円

研究成果の概要（和文）：位相制御した界面選択的非線形分光とそのフェムト秒時間分解測定および分子動力学計算によるシミュレーションを協奏的に駆使し、水を中心とする液体界面における先進的界面研究を推進した。空気/水界面のフェムト秒振動緩和機構の全貌を明らかにし、水界面での化学反応の直接観測に初めて成功して界面反応が水中反応と大きく異なることを発見した。さらに、埋もれた界面である酸化物質/水界面の電気二重層の構造を分光学的に明らかにするとともに、電極界面等の現実界面の界面構造を分子レベルで明らかにする道を拓いた。世界の他の研究グループでは実現出来ない研究を実現することで界面科学に新しい可能性を拓き、これを飛躍的に進歩させた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

分光計測による液体界面の研究は溶液中分子に比して遙かに遅れていたが、本研究で同水準の研究が可能になった。特に水界面の反応が水中の反応と大きく異なることを計測と理論の両面から明らかにし、液体界面の反応研究という新分野の可能性を拓いた。さらに界面科学における未踏領域である埋もれた界面の、電気二重層構造を始めとする分子レベルの描像を位相制御した界面選択的非線形分光で得られることを示し、学術研究に新しい可能性を提示した。電池研究の基盤である電極界面に研究を展開して学術と応用を結び、界面現象が大きな役割を果たす環境化学、電気化学、材料化学に新しい知見を与え、持続可能な社会実現のための知的基盤を提供した。

研究成果の概要（英文）：We have advanced liquid interface research, especially water interfaces, by making full use of phase-sensitive interface-selective nonlinear spectroscopy, its femtosecond time-resolved measurements, and molecular dynamics simulations in a concerted manner. We clarified the whole picture of the femtosecond vibrational relaxation at the air/water interface and realized the first direct tracking of a chemical reaction at the water interface, discovering that the interfacial reaction is significantly different from that in bulk water. Furthermore, we have clarified the structure of the electric double layer at the oxide/water interface, a buried interface, and paved the way for clarifying the interfacial structure of real interfaces, such as electrode interfaces, at the molecular level. By realizing research that no other research group in the world has been able to achieve, We have opened up new possibilities in interface science and have made significant advances in this field.

研究分野：物理化学

キーワード：界面 非線形分光 超高速分光 分子動力学計算 分子科学

1. 研究開始当初の背景

界面は触媒化学、環境科学、電気化学、生物科学、光エネルギー変換など広範な科学・技術分野で極めて大きな役割を果たしており、界面の研究はわれわれが持続可能な社会を実現するための知的基盤として本質的に重要である。しかしながら界面現象、特に液体界面の現象の理解は、それに対する計測手段がほとんどないために著しく遅れている。液体界面の研究においては1980年代初頭に開始された二次非線形分光が未だにほとんど唯一と言って良い研究手段である。この分光計測は二次の非線形分極が反転対称性の破れた界面でのみ生じうるという原理によるもので、これに基づいて赤外光と可視光を界面に照射し、界面でのみ発生する和周波強度を測定することによって界面選択的な振動スペクトルを測定するのが振動和周波発生(VSFG)分光である。このVSFG法による界面研究は液体やポリマ-の表面の研究において一定の成功を収めたが、今世紀初頭には技術的に飽和し、液体界面の研究は停滞した感があった。

従来の二次非線形分光では界面で生じる非線形信号光の強度を測定する(ホモダイン検出)。界面分子の情報は二次の非線形感受率 $\chi^{(2)}$ という量で表わされるが、これは信号光の電場に比例する量であって、信号光強度(すなわち電場の二乗)を測定するホモダイン検出では感受率の自乗 $|\chi^{(2)}|^2$ に対応するスペクトルしか得られない。このためホモダイン検出のVSFG分光には異なる信号成分の干渉によるスペクトル歪み、低い感度、分子の絶対配向を示す符号情報の喪失などの深刻な問題があり、これがスペクトル解釈を著しく困難にして界面研究の停滞の原因となっていた。本研究の研究代表者である田原とその共同研究者は、界面で発生させた非線形信号光と参照光を干渉させることで信号光の電場の位相と振幅を決定する、位相制御した界面選択的な非線形分光である「ヘテロダイン検出和周波発生(HD-VSFG)分光」を開発し、界面分子の二次非線形感受率 $\chi^{(2)}$ そのもののスペクトル測定を実現した。これは液体の赤外吸収スペクトルやラマンスペクトルに直接対応する界面の振動スペクトルが測定可能となったことを意味し、これで界面研究が一気に活性化した。さらに我々はこのHD-VSFG分光をもとに界面選択的なフェムト秒時間分解分光を実現することにも成功した。一方、理論においては研究分担者の森田が分子動力学計算と非線形分光スペクトルをつなぐ基礎式を提出し、和周波スペクトルを理論的に計算する道を拓いた。これによって界面選択的な非線形分光計測と分子動力学計算を直接比較して界面現象を研究する枠組みが構築され、それまで分かっていた界面の静的・動的性質とその機構を分子レベルで解明できる状況が整ったところであった。

2. 研究の目的

方法論の開発者であるがゆえに用いることができる“最も”先進的な計測と理論を駆使し、連携して界面研究を推進することである。特に、

- (1) 液体界面の超高速振動ダイナミクスの解明、
- (2) 液体界面構造と界面分子の反応性の解明、
- (3) 埋もれた界面への展開と現実界面の基礎分子過程の解明、

の3つを中心課題とし、「界面の分子はバルクの分子と何が異なるのか、またその違いがどのように界面特有な現象を引き起こしているのか」という根源的な問いに答える革新的な界面研究を実現する。これによって液体界面の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し、界面科学を飛躍的に進歩させると同時に界面現象が大きな役割を果たしている広い範囲の科学・技術の基礎となる分子レベルの知的基盤を提供することを目標とした。

3. 研究の方法

本研究課題は、研究代表者である田原と分担者である二本柳の理化学研究所の実験グループと、研究分担者である東北大学の森田と富山大学の石山の理論グループが連携して推進した。特に液体界面でも最も基本的で重要な水の界面に対する研究を集中的に行った。

具体的には、理研の実験グループでは、田原・二本柳がHD-VSFG分光を用いた実験研究を推進した。まず、液体界面の超高速振動ダイナミクスの解明のために、これまでに我々が開発した定常HD-VSFG分光装置と赤外励起のフェムト秒時間分解HD-VSFG分光装置、さらに狭帯域赤外ポンプ光の波数を変えながら測定することで界面選択的な2次元振動スペクトルが得られる走査型2D HD-VSFG分光装置を駆使して研究を行った。さらに、時間分解能と振動励起周波数分解能を限界まで高めた干渉型2D HD-VSFG分光装置の開発を行った。

液体界面構造と界面反応の反応性の解明のためには、紫外パルス光を界面分子に照射して反応を開始させ、光化学ダイナミクスを界面選択的に時間分解HD-VSFG分光で追跡する紫外励起時間分解HD-VSFG分光を用いた。この方法は我々が開発した極めて新しい分光計測である。

埋もれた界面の研究のためには、まず、埋もれた界面測定に最適化させた新しいHD-VSFG分光装置を、本科研費で導入したフェムト秒Yb:KGW再生増幅器と近赤外領域の量子効率が増強された新型高感度冷却CCDを用いて製作し、それを用いて実験を行った。なお、埋もれた界面のHD-VSFG測定に関しても我々が世界に初めて実現して本研究に用いているものである。

一方、東北大学の森田と富山大学の石山の理論グループは分子動力学計算を主に用いて液体界面の

界面構造およびそのダイナミクスに対するシミュレーションを行った。森田 / 石山が開発した分極モデルを始め、信頼できる力場がある水系については古典的分子動力学計算を主とし、さらに量子化学計算を援用した *ab initio* 分子動力学計算も利用して研究を進めた。

以上の実験グループと理論グループの研究活動を代表者の田原が総括した。理研の実験と東北大 / 富山大の理論のグループは本研究以前から長きに亘って共同研究を行い緊密な協力関係にあり、興味深い新しい実験結果、計算結果が出る度に連絡を取り合って互いの研究進展を把握するとともに、実験データの解釈のために理論計算を要する場合や理論的予想を実験データによって裏付ける必要がある場合など、理論と実験の両面から同時にアプローチする重要な問題を設定して機動的な相補的研究を行える体制を築いた。

4. 研究成果

本研究課題の3つの骨子である 液体界面の超高速振動ダイナミクスの解明、液体界面構造と界面分子の反応性の解明、埋もれた界面への展開と現実界面の基礎分子過程の解明、の各々について以下に代表的な成果について述べる。

(1) 液体界面の超高速振動ダイナミクスの解明

超高速現象の解明は物理化学・化学物理のフロンティアである。中でも最も重要な液体である水の動的挙動の理解は最重要問題の一つである。水素結合の強さは OH 基の伸縮振動数に最も鋭敏に反映され、様々な強さの水素結合が共存する水素結合系液体の OH 伸縮振動バンドは幅広くなる。よって OH 基の振動緩和やその水素結合のダイナミクスは赤外パルスで特定の振動数の OH 伸縮振動を励起し、それに続く振動スペクトルの時間変化を計測することで解明できる。

第一に、最も基本的な水界面である空気 / 水界面で OH 基の振動エネルギーが失われていく機構を赤外励起時間分解 HD-VSFG 分光で OH 伸縮振動の緩和時間 (T_1) を決定することで研究した。まず、空気 / 水界面に特徴的な空気側に突き出た “フリー-OH” の振動緩和を調べた。フリー-OH の緩和過程については従来のホモダイナミクス検出 VSFG 分光の時間分解測定によって、分子内のエネルギー移動によって同一水分子の他の振動に緩和すると結論されていた。その実験的根拠は、水を重水で希釈 (同位体希釈) して生じる HOD においてフリー-OH の T_1 が遅くなることであったが、我々の時間分解 HD-VSFG 測定によってこれは従来法のアーティファクトによるものであり、実際には T_1 に変化がないことがわかった。これによってこれまで信じられていた緩和機構とは異なり、振動励起したフリー-OH が回転によって振動励起を保ったまま水素結合した OH (HB-OH) に変化することがその緩和過程の本質であると結論した (*Nat. Commun.* 2020)。この新しい実験結果に対応する *ab-initio* MD 計算を行い、理論的にも OH 基の回転がその振動緩和に大きく寄与していることが確かめられた (*J. Chem. Phys.* 2021)。この MD 計算では別の緩和過程が存在する可能性も示されたが、これを実験的に検討するため空気 / 重水素界面のフリー-OD の振動緩和に対する時間分解測定を行い、D に変えることで慣性モーメントが大きくなることを反映して T_1 が約2倍になることがわかり、フリー-OH / OD の振動緩和は OH / OD 基の回転によって起こることが確定した (*J. Chem. Phys.* 2022)。

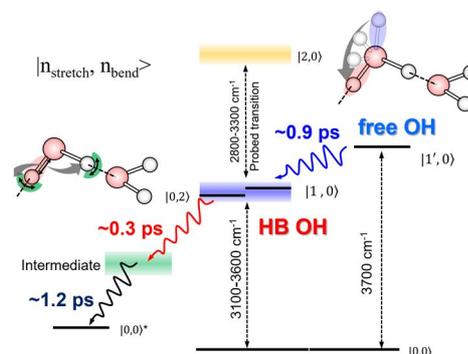


図1. 空気 / 水界面の OH 伸縮振動緩和機構

フリー-OH の振動緩和の研究で空気 / 水界面の OH 伸縮の緩和ダイナミクスの包括的理解の必要性を痛感し、3200 ~ 3700 cm^{-1} の OH 伸縮振動全領域の T_1 を、熱化に由来する信号に妨害されない HB-OH の振動励起状態の信号を観測することで決定した。これで、空気 / 水界面では、振動励起したフリー-OH は約 0.9 ピコ秒で回転して振動励起した HB-OH に変化し、その後の HB-OH と区別がなく、分子内エネルギー緩和によってバルクの水とほぼ同じ 0.3 ピコ秒で振動緩和することがわかった。これにより空気 / 水界面の OH 伸縮振動の振動緩和の全貌が明らかになった (図1; 投稿中 2023)。

空気 / 水界面は中性の疎水性水界面であるが、帯電した疎水性界面の水の物理化学的性質を理解することも極めて重要である。そこで、帯電した疎水性界面の水分子の挙動を明らかにするために正または負の電荷をもった芳香族分子の作る疎水性単分子膜界面の水に対する振動ダイナミクス測定を走査型 2D HD-VSFG を用いて行った。その結果、水が H を界面側に向けて配向している負に帯電した疎水性界面でのみ界面芳香族分子と水素結合をしている遅い振動緩和を示す OH 基を持つ水が存在することを発見した。これは水の配向の違いが界面との相互作用を本質的に変え水の挙動に大きく影響を与えることを示した新しい知見である (*Angew. Chem. Int. Ed.* 2020)

上記の研究で 200 フェムト秒より遅い時間で進行する振動ダイナミクスを明らかにすることが出来たが、さらに短い時間スケールで進む水の水素結合揺らぎの観測のため、ポンプ光にバンド幅の広い極短赤外パルス対を用い、フーリエ変換で二次元振動スペクトルを得る干渉型 2D HD-VSFG 装置を製作した。これによって時間分解能 90 fs、励起振動数分解能 25 cm^{-1} を達成し

た。この装置で 200 fs 内で進行する界面の水素結合の超高速揺らぎを反映した OH 伸縮バンドのスペクトル拡散現象を観測することに成功した (2023 年 6 月開催の国際学会口頭発表に採択)。

(2) 液体界面構造と界面分子の反応性の解明

これまで幾つかの間接的事実から、液体界面の反応は溶液中の反応と異なると考えられていた。しかしながら、液体界面の反応を直接観測 / 追跡に成功した例はなかった。そこで、空気 / 水界面のフェノールに対し、その界面光化学反応を紫外励起時間分解 HD-VSFG によって観測することに挑戦し、成功した。フェノールの光化学反応は水中ですでにフェムト秒時間分解吸収分光によって研究されており、紫外励起によって生成した電子励起 (S_1) 状態が、5 ns の時定数で自動イオン化するとともに解離してプロトンを放出し、結果として溶媒和電子、プロトン、フェノキシラジカルが生成することが知られている。これに対して我々の水界面での実験では、光励起後、測定的时间分解能 (200 フェムト秒) 以内で溶媒和電子、プロトン、フェノキシラジカルが界面に生じ、その後、溶媒和電子とプロトンはより安定になれるバルク水側に各々約 1 ピコ秒、約 80 ピコ秒で移動して界面から消えていく界面特異的な反応ダイナミクスが観測された (図 2)。この研究は液体界面で初めて光化学反応追跡を実現しただけでなく、空気 / 水界面ではフェノール反応が水中に比べ 1 万倍以上加速していることを明らかにした (*Nat. Chem.* 2021)。

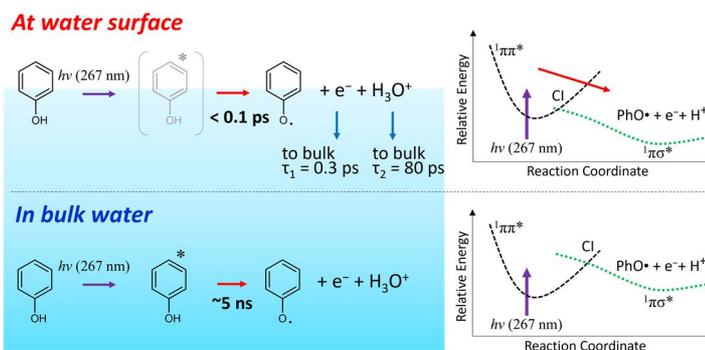


図 2. 水表面と水中のフェノール光化学反応ダイナミクス

この予想外の結果を理論的に検討するため、分子動力学計算と量子化学計算による研究を行った。その結果、この光化学反応の反応障壁を決めている 2 つの電子励起状態の溶媒和に対する安定化が違うため、結果として界面反応では反応障壁が著しく下がり反応が劇的に加速することがわかった (*J. Am. Chem. Soc.* 2022)。これによって、2 つの電子励起状態の交差が反応障壁を決める反応では一般に液体界面と液中で大きく反応ダイナミクスが異なることが示された。

この実験と理論による水界面の光化学反応に関する論文はそれぞれ *Nat. Chem.* と *JACS* のカバーに選ばれた (図 3)。

(3) 埋もれた界面への展開と現実界面の基礎分子過程の解明

密度の高い 2 つの相に挟まれた、固 / 液、液 / 液、固 / 固などの“埋もれた界面”は全く未解明と言ってよい未踏領域である。埋もれた界面も用いる光の波長領域で媒質が透明であれば界面選択的非線形分光で研究することができる。我々は位相基準となる参照界面と試料界面を一つの材料上に作成した複合試料を用いることで、一般的な透明固体と液体の界面に対する HD-VSFG の適用を可能にした。この技術を基に研究を展開した。

第一に、最も基本的な埋もれた界面であり、自然界に広く存在する酸化物 / 水界面の典型であるシリカ (SiO_2) / 水界面の界面構造の研究を行った。シリカ表面には $\text{SiOH} \rightleftharpoons \text{SiO}^- + \text{H}^+$ の酸塩基平衡があり、pH によりシリカ表面の負電荷量が大きく変化する。そこで、シリカ表面が最も負に帯電する pH12 において塩濃度を変化させながら HD-VSFG 測定を行ったところ、界面の水スペクトルがシリカ表面最近傍の Stern 層 (SL) と対イオンがバルク側に拡散している Gouy-Chapman 層 (DL) のスペクトル成分に明確に分離できることがわかった (*J. Phys. Chem. Lett.* 2018)。この結果を受けて、シリカ / 水界面の電気二重層構造をシリカ表面の負電荷量が大きく変化する pH12 ~ pH2 の広い pH 範囲で、塩濃度を系統的に変化させながら HD-VSFG 測定を行い、得られたスペクトルを特異値分解 (SVD) を駆使して解析した。その結果、pH12 ~ pH2 全域においてシリカ界面は負に帯電しており、スペクトルは SL と DL のものに分離できること (Stern モデルの分光学的実証)、SL は 0.01 M という希薄なイオン濃度ですでに完全に形成され、2M という高濃度まで全く変化がないこと、表面電位 (表面電荷) を直接反映する DL スペクトルの強度の pH 変化からシリカ表面の $\text{SiOH} \rightleftharpoons \text{SiO}^- + \text{H}^+$ 平衡は一つだけの pKa (~4.8) を示すことがわかった。さらに SL の水は表面負電荷の多い高 pH 領域と低 pH 領域ではシリカ表面との相互作用の変化を反映して異なる配向を取るが、中性 pH 付近ではランダムに近い配向であることがわかった。これによって最も基本的な酸化物水界面であるシリカ / 水界面の電気二重層構造の分子レベルの明確な描像が得られただけでなく、中性 pH 付近のランダムに近い SL の水構造など、今後理論的 / 実験的に研究しなければならない新しい問題を提示することができた



図 3. *Nat. Chem.* と *JACS* のカバーになった水表面のフェノール光化学反応の実験と理論による研究

(図4; *J. Am. Chem. Soc.* 2023)。この研究に続いて、pHによって正に帯電するアルミナ(Al_2O_3) / 水界面に対して同様のアプローチで研究を行い、その電気二重層構造を明らかにした。これらの研究で酸化物 / 水界面の電気二重層構造という界面科学の本質的な重要問題について明解な回答を与えた。

上記の酸化物 / 水界面の研究と並行し、応用に近い現実的な埋もれた界面の研究にも進み、電極界面の研究に挑戦した。HD-VSFG測定が実現できる電気化学セルを製作するとともに、これに使える新たな信号光の位相校正法を開発した(*Chem. Lett.* 2019)。これらを基に、基本的非水電気化学系の一つである白金電極 / アセトニトリル電解質溶液界面のその場観察を行い、電気化学条件下でのHD-VSFG測定を初めて実現した。これにより従来信じていたのとは逆に、正の電位下で溶媒のアセトニトリル分子が若干正の電荷を帯びているメチル基を電極に向けて配向していることを見出した。これにより正電位の電極界面ではまず負イオンが電極界面に吸着し、その上にアセトニトリルがメチル基を吸着負イオンに向ける形で配向する界面構造を形成するという新しい電極界面の描像が得られた(図5; *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2020)。さらに二次電池として重要なリチウムイオン電池において、濃厚電解質溶液が溶液を安定化させる分子論的機構を明らかにする研究を行った。Li⁺TFSIを電解質として用い、濃厚電解質溶液と希薄電解質溶液に対して白金 / アセトニトリル溶液界面のHD-VSFG測定を行い、濃厚電解質溶液中では電解質の分解堆積物が、また希薄溶液中では溶媒の分解物が界面を覆っていることを見いだした。これによって濃厚電解質溶液中では電解質の分解堆積物が電極を覆って溶媒との直接接触を防止するため、溶媒の分解反応が起らなくなると溶媒が安定化することが強く示唆された(*J. Phys. Chem. C* 2023)。

また、VSFG分光を現実的界面に応用する際に重要な問題となるフレネル係数が界面選択的スペクトルへ与える影響を計測と理論の両面から明らかにした。フレネル係数は界面に関する一般化した光振幅の透過 / 反射係数であって、界面その場での $\chi^{(2)}$ スペクトルと実際に観測される実効的な $\chi^{(2)}$ スペクトルを関係づける基本的な量である。まず、実験によるスペクトル測定と理論計算を併用して、バルクが赤外領域に強い吸収バンドを持ちかつ $\chi^{(2)}$ スペクトルが大きな非共鳴バックグラウンドを示す場合にはフレネル係数によって $\chi^{(2)}$ スペクトルが大きく歪むことを示し、以前報告されたリチウムイオン電池のモデル界面に対するVSFG実験で示されたスペクトル構造は主としてこのスペクトル歪みに由来するものであることを指摘した(*J. Phys. Chem. C* 2019)。理論グループはこの問題をさらに体系的に研究し、フレネル係数がVSFGで得られる界面スペクトル形状を大きく歪ませる一般的な条件を明らかにするとともに、その影響を取り除くために必要な複素屈折率計算プログラムを作成してWeb上に公開した(*J. Phys. Chem. B* 2021, 2報)。

その他にポリマー(PMMA) / 水界面の界面構造をHD-VSFG法で明らかにし(*Phys. Chem. Chem. Phys.* 2020)、また、英国の研究グループとの共同研究で、高効率太陽電池の開発研究で注目を集めているペロブスカイト研究に初めてHD-VSFG分光を応用した(*Mat. Horiz.* 2020)。

これら研究は、最先端の界面選択的非線形分光であるHD-VSFG分光が界面科学の未踏領域である埋もれた界面の研究にも強力であることを示したものであり、埋もれた界面研究の一つの起点となるものである。またその電極界面への応用は、先端的な計測と理論によって学術研究と応用研究をつなぐ研究の今後の展開につながるものである。

(4) その他

以上述べた本研究課題の3つの骨子の研究に加え、VSFG信号発生原理に関する研究においても大きな成果を得た。通常のVSFGにおいては双極子近似のもと、界面における反転対象性の破れによって界面選択的にVSFGが起こると考え、スペクトルの解釈が行われる。しかし、双極子近似が破れ、高次の四重極遷移を含む光学過程によってVSFG信号が生じる可能性があることはVSFG研究の当初から指摘されていた。実験グループは、HD-VSFG測定によって空気 / 水界面で1650 cm^{-1} 領域に現れる水の変角振動バンドの符号が水の配向が逆転しても変化しないことを観測し、これが四重極遷移による信号であることを明快に示した(*J. Phys. Chem. Lett.* 2020)。さらにこの四重極機構でも界面に生じる大きな電場勾配によってVSFG信号が発生するため界面選択的な信号を得られることを指摘した(*J. Chem. Phys.* 2019)。これと独立に理論グループも四重極遷移に基づくVSFG信号発生に対する理論的研究を行い、VSFG信号における四重極遷移の寄与を見積もる方法を提案した(*J. Phys. Chem. Lett.* 2020, *J. Chem. Phys.* 2020, 2022)。これらの研究で実験と理論の両面からVSFGの光学過程の原理に対する基礎的理解を拡張した。

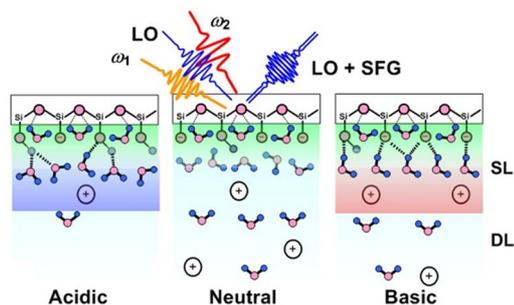


図4 シリカ / 水界面の電気二重層の構造

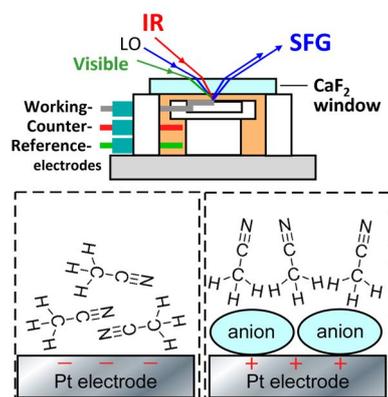


図5 電極界面のHD-VSFG測定

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計69件（うち査読付論文 65件 / うち国際共著 9件 / うちオープンアクセス 5件）

1. 著者名 H. Rozak, S. Nihonyanagi, A. Myalitsin, S. Roy, M. Ahmed, T. Tahara, I. I. Rzeznicka	4. 巻 127
2. 論文標題 Adsorption of SARS-CoV-2 Spike (N501Y) RBD to Human Angiotensin-Converting Enzyme 2 at a Lipid/Water Interface	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 4406 ~ 4414
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.3c00832	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 A. Sayama, S. Nihonyanagi, Y. Ohshima, T. Tahara	4. 巻 -
2. 論文標題 Origin of Solvent Stabilization at Super-concentrated Electrolyte/Electrode Interfaces Revealed by Heterodyne-detected Vibrational Sum Frequency Generation Spectroscopy	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Physical Chemistry C.	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.3c01744	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 F. Wei, S. Urashima, S. Nihonyanagi, T. Tahara	4. 巻 145
2. 論文標題 Elucidation of the pH-Dependent Electric Double Layer Structure at the Silica/Water Interface Using Heterodyne-Detected Vibrational Sum Frequency Generation Spectroscopy	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 8833 ~ 8846
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.2c11344	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 L. Wang, A. Morita, N. M. North, S. M. Baumler, E. W. Springfield, H. C. Allen	4. 巻 127
2. 論文標題 Identification of Ion Pairs in Aqueous NaCl and KCl Solutions in Combination with Raman Spectroscopy, Molecular Dynamics, and Quantum Chemical Calculations	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 1618 ~ 1627
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.2c07923	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 Y. Miura, Y. Yamamoto, S. Karashima, N. Orimo, A. Hara, K. Fukuoka, T. Ishiyama, T. Suzuki	4. 巻 145
2. 論文標題 Formation of Long-Lived Dark States during Electronic Relaxation of Pyrimidine Nucleobases Studied Using Extreme Ultraviolet Time-Resolved Photoelectron Spectroscopy	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 3369 ~ 3381
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.2c09803	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 M. Ahmed, S. Nihonyanagi, T. Tahara	4. 巻 156
2. 論文標題 Ultrafast vibrational dynamics of the free OD at the air/water interface: Negligible isotopic dilution effect but large isotope substitution effect	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 224701 ~ 224701
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0085320	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 T. Ishiyama, T. Tahara, A. Morita	4. 巻 144
2. 論文標題 Why the Photochemical Reaction of Phenol Becomes Ultrafast at the Air/Water Interface: The Effect of Surface Hydration	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 6321 ~ 6325
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.1c13336	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 P. C. Singh, M. Ahmed, S. Nihonyanagi, S. Yamaguchi, T. Tahara	4. 巻 126
2. 論文標題 DNA-Induced Reorganization of Water at Model Membrane Interfaces Investigated by Heterodyne-Detected Vibrational Sum Frequency Generation Spectroscopy	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 840 ~ 846
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.1c08581	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 T. Hirano, N. Yazawa, L. Wang, A. Morita	4. 巻 157
2. 論文標題 Development of efficient computational analysis of difference infrared and Raman spectroscopies	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 124105 ~ 124105
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0108934	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 T. Hirano, A. Morita	4. 巻 156
2. 論文標題 Boundary effects and quadrupole contribution in sum frequency generation spectroscopy	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 154109 ~ 154109
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0076400	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 N. Yasoshima, T. Ishiyama, N. Matubayasi	4. 巻 126
2. 論文標題 Adsorption Energetics of Amino Acid Analogs on Polymer/Water Interfaces Studied by All-Atom Molecular Dynamics Simulation and a Theory of Solutions	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 4389 ~ 4400
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.2c01297	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 A. Morita	4. 巻 97
2. 論文標題 Correction to: Quadrupole Contributions from Interface and Bulk	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Lecture Notes in Chemistry	6. 最初と最後の頁 C1 ~ C2
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/978-981-13-1607-4_12	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 L. Wang, R. Murata, K. Inoue, S. Ye, A. Morita	4. 巻 125
2. 論文標題 Dispersion of Complex Refractive Indices for Intense Vibrational Bands. II. Implication to Sum Frequency Generation Spectroscopy	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 9804 ~ 9810
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.1c06190	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 R. Murata, K. Inoue, L. Wang, S. Ye, A. Morita	4. 巻 125
2. 論文標題 Dispersion of Complex Refractive Indices for Intense Vibrational Bands. I. Quantitative Spectra	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 9794 ~ 9803
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.1c06189	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 Y. Yamamoto, T. Ishiyama, A. Morita, T. Suzuki	4. 巻 125
2. 論文標題 Exploration of Gas-Liquid Interfaces for Liquid Water and Methanol Using Extreme Ultraviolet Laser Photoemission Spectroscopy	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 10514 ~ 10526
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.1c04765	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 A. Ge, R. Nagai, C. Xu, K. Kannari, B. Peng, K. Inoue, A. Morita, S. Ye	4. 巻 126
2. 論文標題 Unraveling the Unstable Nature of Tetraglyme-Based Electrolytes toward Superoxide and the Inhibitory Effect of Lithium Ions by Using In Situ Vibrational Spectroscopies	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 2980 ~ 2989
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.1c10753	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 L. Wang, R. Murata, K. Inoue, S. Ye, A. Morita	4. 巻 126
2. 論文標題 Correction to "Dispersion of Complex Refractive Indices for Intense Vibrational Bands. II. Implication to Sum Frequency Generation Spectroscopy"	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 2143 ~ 2143
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.2c01098	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 R. Murata, K. Inoue, L. Wang, S. Ye, A. Morita	4. 巻 126
2. 論文標題 Correction to "Dispersion of Complex Refractive Indices for Intense Vibrational Bands. I. Quantitative Spectra"	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 2142 ~ 2142
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.2c01314	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 A. Morita, A. Koizumi, T. Hirano	4. 巻 154
2. 論文標題 Recent progress in simulating microscopic ion transport mechanisms at liquid/liquid interfaces	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 080901 ~ 080901
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0039172	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 N. Yasoshima, T. Ishiyama, M. Gemmei-Ide, N. Matubayasi	4. 巻 125
2. 論文標題 Molecular Structure and Vibrational Spectra of Water Molecules Sorbed in Poly(2-methoxyethylacrylate) Revealed by Molecular Dynamics Simulation	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 12095 ~ 12103
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.1c07342	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 T. Ishiyama	4. 巻 155
2. 論文標題 Energy relaxation dynamics of hydrogen-bonded OH vibration conjugated with free OH bond at an air/water interface	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 154703 ~ 154703
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0069618	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 A. Ikenaga, Y. Akiyama, T. Ishiyama, M. Gon, K. Tanaka, Y. Chujo, K. Isoda	4. 巻 13
2. 論文標題 Stimuli-Responsive Self-Assembly of -Conjugated Liquids Triggers Circularly Polarized Luminescence	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ACS Applied Materials & Interfaces	6. 最初と最後の頁 47127 ~ 47133
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsami.1c13119	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 T. Ishiyama	4. 巻 154
2. 論文標題 Ab initio molecular dynamics study on energy relaxation path of hydrogen-bonded OH vibration in bulk water	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 204502 ~ 204502
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0050078	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 松林 伸幸、石山 達也、泰岡 顕治、尾形 修司、藤本 和士	4. 巻 24
2. 論文標題 「富岳」成果創出加速プログラム「環境適合型機能性化学品」	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 分子シミュレーション学会アンサンブル	6. 最初と最後の頁 22 ~ 31
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 R. Kusaka, S. Nihonyanagi, T. Tahara	4. 巻 13
2. 論文標題 The photochemical reaction of phenol becomes ultrafast at the air-water interface	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Nature Chemistry	6. 最初と最後の頁 306 ~ 311
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41557-020-00619-5	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 K. Inoue, M. Ahmed, S. Nihonyanagi, T. Tahara	4. 巻 11
2. 論文標題 Reorientation-induced relaxation of free OH at the air/water interface revealed by ultrafast heterodyne-detected nonlinear spectroscopy	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 5344-1 ~ 7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-020-19143-8	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 M. Ahmed, Y. Nojima, S. Nihonyanagi, S. Yamaguchi, T. Tahara	4. 巻 152
2. 論文標題 Comment on "Phase-sensitive sum frequency vibrational spectroscopic study of air/water interfaces: H ₂ O, D ₂ O, and diluted isotopic mixtures" [J. Chem. Phys. 150, 144701 (2019)]	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 237101-1 ~ 3
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5126062	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 A. Myalitsin, S. Ghosh, S. Urashima, S. Nihonyanagi, S. Yamaguchi, T. Aoki, T. Tahara	4. 巻 22
2. 論文標題 Structure of water and polymer at the buried polymer/water interface unveiled using heterodyne-detected vibrational sum frequency generation	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 16527 ~ 16531
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D0CP02618B	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 M. Ahmed, S. Nihonyanagi, A. Kundu, S. Yamaguchi, T. Tahara	4. 巻 11
2. 論文標題 Resolving the Controversy over Dipole versus Quadrupole Mechanism of Bend Vibration of Water in Vibrational Sum Frequency Generation Spectra	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 9123 ~ 9130
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcllett.0c02644	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 T. Iwahashi, T. Ishiyama, Y. Sakai, A. Morita, D. Kim, Y. Ouchi	4. 巻 23
2. 論文標題 Reply to the 'Comment on "Bi-layering at ionic liquid surfaces: a sum-frequency generation vibrational spectroscopy- and molecular dynamics simulation-based study"' by M. Deutsch, O. M. Magnussen, J. Haddad, D. Pontoni, B. M. Murphy and B. M. Ocko, Phys. Chem. Chem. Phys., 2021, DOI: 10.1039/DOCP04882H	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 5028 ~ 5030
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d1cp00171j	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 W. Mori, L. Wang, Y. Sato, A. Morita	4. 巻 153
2. 論文標題 Development of quadrupole susceptibility automatic calculator in sum frequency generation spectroscopy and application to methyl C-H vibrations	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 174705-1 ~ 14
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0026341	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 T. Ishiyama, S. Takagi, T. Hirano, L. Wang, A. Morita	4. 巻 124
2. 論文標題 Comment on "Toward Unraveling the Puzzle of Sum Frequency Generation Spectra at Interface of Aqueous Methanol Solution: Effects of Concentration-Dependent Hyperpolarizability"	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 25160 ~ 25162
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.0c06234	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 L. Wang, W. Mori, A. Morita, M. Kondoh, M. Okuno, T. Ishibashi	4. 巻 11
2. 論文標題 Quadrupole Contribution of C=O Vibrational Band in Sum Frequency Generation Spectra of Organic Carbonates	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 8527 ~ 8531
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcllett.0c02453	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 K. Inoue, C. Takada, L. Wang, A. Morita, S. Ye	4. 巻 124
2. 論文標題 In Situ Monitoring of the Unsaturated Phospholipid Monolayer Oxidation in Ambient Air by HD-SFG Spectroscopy	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 5246 ~ 5250
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpccb.0c03408	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 T. Iwahashi, T. Ishiyama, Y. Sakai, A. Morita, D. Kim, Y. Ouchi	4. 巻 22
2. 論文標題 Bi-layering at ionic liquid surfaces: a sum-frequency generation vibrational spectroscopy- and molecular dynamics simulation-based study	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 12565 ~ 12576
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D0CP01219J	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 T. H. H. Le, A. Morita, T. Tanaka	4. 巻 5
2. 論文標題 Refractive index of nanoconfined water reveals its anomalous physical properties	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Nanoscale Horizons	6. 最初と最後の頁 1016 ~ 1024
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D0NH00180E	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 T. Hirano, A. Morita	4. 巻 124
2. 論文標題 Electron Transfer Mechanism at the Oil/Water Interface Revealed by Multidimensional Free Energy Calculations	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 3811 ~ 3827
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.0c01467	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 T. Ishiyama	4. 巻 154
2. 論文標題 Energy relaxation path of excited free OH vibration at an air/water interface revealed by nonequilibrium ab initio molecular dynamics simulation	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 104708-1 ~ 15
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0038709	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 T. Ishiyama, K. Kitanaka	4. 巻 124
2. 論文標題 Asymmetric Hydrogen-Bonding Structure at a Water/Ice Interface	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 23287 ~ 23294
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.0c08173	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 T. Ishiyama	4. 巻 152
2. 論文標題 Existence of weakly interacting OH bond at air/water interface	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 134703-1 ~ 10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5144308	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 八十島亘宏, 石山達也, 源明誠	4. 巻 22
2. 論文標題 温度可変中赤外分光法と分子動力学シミュレーションを用いた高分子中の水の再結晶化メカニズムの解析	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 アンサンプル	6. 最初と最後の頁 304-309
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 L. Wang, S. Nihonyanagi, K. Inoue, K. Nishikawa, A. Morita, S. Ye, T. Tahara	4. 巻 123
2. 論文標題 Effect of Frequency-Dependent Fresnel Factor on the Vibrational Sum Frequency Generation Spectra for Liquid/Solid Interfaces	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 15665 ~ 15673
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b04043	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 K. Matsuzaki, S. Nihonyanagi, S. Yamaguchi, T. Nagata, T. Tahara	4. 巻 151
2. 論文標題 Quadrupolar mechanism for vibrational sum frequency generation at air/liquid interfaces: Theory and experiment	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 064701 ~ 064701
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5088192	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 S. Nihonyanagi, A. Sayama, Y. Ohshima, T. Tahara	4. 巻 48
2. 論文標題 In-situ Referencing Method for Heterodyne-detected Vibrational Sum Frequency Generation Measurements at Liquid/Metal Interfaces	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 1387 ~ 1390
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/cl.190606	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 A. Sayama, S. Nihonyanagi, Y. Ohshima, T. Tahara	4. 巻 22
2. 論文標題 In situ observation of the potential-dependent structure of an electrolyte/electrode interface by heterodyne-detected vibrational sum frequency generation	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 2580 ~ 2589
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C9CP06253J	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 W. Sung, C. Muller, S. Hietzschold, R. Lovrincic, N. P. Gallop, A. A. Bakulin, S. Nihonyanagi, T. Tahara	4. 巻 7
2. 論文標題 Preferred orientations of organic cations at lead-halide perovskite interfaces revealed using vibrational sum-frequency spectroscopy	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Materials Horizons	6. 最初と最後の頁 1347 ~ 1357
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C9MH01394F	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 M. Ahmed, K. Inoue, S. Nihonyanagi, T. Tahara	4. 巻 -
2. 論文標題 Hidden isolated OH at the charged hydrophobic interface revealed by two-dimensional heterodyne-detected VSG spectroscopy	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.202002368	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 H. Takahashi, S. Sakuraba, A. Morita	4. 巻 60
2. 論文標題 Large-Scale Parallel Implementation of Hartree-Fock Exchange Energy on Real-Space Grids Using 3D-Parallel Fast Fourier Transform	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Chemical Information and Modeling	6. 最初と最後の頁 1376 ~ 1389
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jcim.9b01063	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 A. Koizumi, H. Tahara, T. Hirano, A. Morita	4. 巻 11
2. 論文標題 Revealing Transient Shuttling Mechanism of Catalytic Ion Transport through Liquid-Liquid Interface	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 1584 ~ 1588
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcllett.9b03742	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 A. Benderskii, A. Morita	4. 巻 151
2. 論文標題 Nonlinear spectroscopy and interfacial structure and dynamics	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 150401 ~ 150401
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5129103	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 T. Ishiyama, A. Morita	4. 巻 10
2. 論文標題 Nuclear Quantum Effect on the (2) Band Shape of Vibrational Sum Frequency Generation Spectra of Normal and Deuterated Water Surfaces	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 5070 ~ 5075
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcllett.9b02069	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 H. Takahashi, D. Suzuoka, S. Sakuraba, A. Morita	4. 巻 123
2. 論文標題 Role of the Photosystem II as an Environment in the Oxidation Free Energy of the Mn Cluster from S1 to S2	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 7081 ~ 7091
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpccb.9b03831	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 H. Takahashi, H. Kambe, A. Morita	4. 巻 150
2. 論文標題 Calculation of solvation free energy utilizing a constrained QM/MM approach combined with a theory of solutions	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 114109 ~ 114109
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5089199	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 杉本敏樹, 石山達也	4. 巻 21
2. 論文標題 和周波発生振動分光計測と分子シミュレーションからみる氷表面の分子構造	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 分子シミュレーション学会アンサンブル	6. 最初と最後の頁 177-184
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 S. Urashima, A. Myalitsin, S. Nihonyanagi, T. Tahara	4. 巻 9
2. 論文標題 The Topmost Water Structure at a Charged Silica/Aqueous Interface Revealed by Heterodyne-Detected Vibrational Sum Frequency Generation Spectroscopy	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 4109 ~ 4114
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcllett.8b01650	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 S. M. Mccullough, W. Sung, S. Nihonyanagi, T. Tahara	4. 巻 149
2. 論文標題 Molecular mechanism of charge inversion revealed by polar orientation of interfacial water molecules: A heterodyne-detected vibrational sum frequency generation study	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 024703 ~ 024703
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5024310	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 K. Inoue, M. Ahmed, S. Nihonyanagi, T. Tahara	4. 巻 150
2. 論文標題 Effect of hydrogen-bond on ultrafast spectral diffusion dynamics of water at charged monolayer interfaces	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 054705 ~ 054705
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5081077	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 T. Sugimoto, Y. Otsuki, T. Ishiyama, A. Morita, K. Watanabe, Y. Matsumoto	4. 巻 99
2. 論文標題 Topologically disordered mesophase at the topmost surface layer of crystalline ice between 120 and 200 K	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 121402
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.99.121402	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 S. Kishinaka, A. Morita, T. Ishiyama	4. 巻 150
2. 論文標題 Molecular structure and vibrational spectra at water/poly(2-methoxyethylacrylate) and water/poly(methyl methacrylate) interfaces: A molecular dynamics simulation study	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 044707 ~ 044707
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5074144	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 Q. Peng, J. Chen, H. Ji, A. Morita, S. Ye	4. 巻 140
2. 論文標題 Origin of the Overpotential for the Oxygen Evolution Reaction on a Well-Defined Graphene Electrode Probed by in Situ Sum Frequency Generation Vibrational Spectroscopy	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 15568 ~ 15571
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.8b08285	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 Thu H. H. Le、A. Morita、K. Mawatari、T. Kitamori、T. Tanaka	4. 巻 5
2. 論文標題 Metamaterials-Enhanced Infrared Spectroscopic Study of Nanoconfined Molecules by Plasmonics-Nanofluidics Hybrid Device	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 ACS Photonics	6. 最初と最後の頁 3179 ~ 3188
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsp Photonics.8b00398	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 T. Joutsuka、A. Morita	4. 巻 122
2. 論文標題 Electrolyte and Temperature Effects on Third-Order Susceptibility in Sum-Frequency Generation Spectroscopy of Aqueous Salt Solutions	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 11407 ~ 11413
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.8b02445	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 S. K. Reddy、R. Thiriaux、B. A. Wellen Rudd、L. Lin、T. Adel、T. Joutsuka、F. M. Geiger、H. C. Allen、A. Morita、F. Paesani	4. 巻 4
2. 論文標題 Bulk Contributions Modulate the Sum-Frequency Generation Spectra of Water on Model Sea-Spray Aerosols	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Chem	6. 最初と最後の頁 1629 ~ 1644
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.chempr.2018.04.007	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 T. Hirano、L. Wang、A. Morita	4. 巻 44
2. 論文標題 Singularity-free constraint on molecular dynamics beyond Lagrange multiplier	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Molecular Simulation	6. 最初と最後の頁 965 ~ 972
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/08927022.2018.1467012	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 L. Wang, L. Xin, T. Ishiyama, Q. Peng, S. Ye, A. Morita	4. 巻 34
2. 論文標題 Microscopic Investigation of Ethylene Carbonate Interface: A Molecular Dynamics and Vibrational Spectroscopic Study	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Acta Phys. Chim. Sin.	6. 最初と最後の頁 1124 ~ 1135
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3866/PKU.WHXB201801291	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 H. Takahashi, H. Kambe, A. Morita	4. 巻 148
2. 論文標題 A simple and effective solution to the constrained QM/MM simulations	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 134119 ~ 134119
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5019874	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 L. J. Wang, N. Kikkawa, A. Morita	4. 巻 122
2. 論文標題 Hydrated Ion Clusters in Hydrophobic Liquid: Equilibrium Distribution, Kinetics, and Implications	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 3562 ~ 3571
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.7b10740	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 T. Ishiyama, S. Shirai, T. Okumura, A. Morita	4. 巻 148
2. 論文標題 Molecular dynamics study of structure and vibrational spectra at zwitterionic lipid/aqueous KCl, NaCl, and CaCl ₂ solution interfaces	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 222801 ~ 222801
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5006543	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 K. Isoda, T. Ishiyama, Y. Mutoh, D. Matsukuma	4. 巻 11
2. 論文標題 Stimuli-Responsive Room-Temperature N-Heteroacene Liquid: In Situ Observation of the Self-Assembling Process and Its Multiple Properties	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 ACS Applied Materials & Interfaces	6. 最初と最後の頁 12053 ~ 12062
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsami.8b21695	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 -

[学会発表] 計189件 (うち招待講演 85件 / うち国際学会 90件)

1. 発表者名 T. Tahara
2. 発表標題 Ultrafast dynamics at the water interfaces revealed by time-resolved phase-sensitive nonlinear spectroscopy
3. 学会等名 Seminar, The Hebrew University of Jerusalem (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 T. Tahara
2. 発表標題 Structure and ultrafast dynamics at the water interface revealed by phase-sensitive nonlinear spectroscopy
3. 学会等名 Guest Seminar, Weizmann Institute of Science (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 T. Tahara
2. 発表標題 Ultrafast chemical dynamics at the water surface revealed by femtosecond time-resolved phase-sensitive nonlinear spectroscopy
3. 学会等名 Symposium "Multiscale Chemistry and Dynamics at Surfaces and Interfaces", Spring 2002 American Chemical Society (ACS) meeting (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 S. Nihonyanagi
2. 発表標題 Studies of buried material interfaces using heterodyne-detected vibrational sum frequency generation spectroscopy
3. 学会等名 2022 RIKEN-NCHU Joint Symposium (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 T. Tahara
2. 発表標題 Ultrafast dynamics at the water interfaces revealed by femtosecond phase-sensitive nonlinear vibrational spectroscopy
3. 学会等名 27th International Conference on Raman Spectroscopy (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 F. Wei, S. Urashima, S. Nihonyanagi, T. Tahara
2. 発表標題 Elucidation of pKa value at silica/water interface using HD-VSFG spectroscopy and model-independent spectral decomposition
3. 学会等名 日本化学会 第102回春季年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 W. Sung, K. Inoue, S. Nihonyanagi, T. Tahara
2. 発表標題 Complete picture of vibrational relaxation of OH stretch at the air/H ₂ O interface: From hydrogen-bonded OH to free OH
3. 学会等名 日本化学会 第102回春季年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 M. Ahmed, S. Nihonyanagi, T. Tahara
2. 発表標題 Ultrafast vibrational dynamics of the free OD at the air/water interface revealed by time-resolved vibrational sum frequency generation spectroscopy
3. 学会等名 日本化学会 第102回春季年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 M. Ahmed, K. Inoue, S. Nihonyanagi, T. Tahara
2. 発表標題 Relaxation of Free OH/OD at the water surface: New insights from heterodyne-detected vibrational sum frequency generation spectroscopy
3. 学会等名 Gordon Research Conference on Water and Aqueous Solutions (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 T. Tahara
2. 発表標題 Ultrafast Dynamics at Aqueous Interface Revealed by Heterodyne-Detected Vibrational Sum-Frequency Generation Spectroscopy
3. 学会等名 Gordon Research Conference on Water and Aqueous Solutions (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 M. Ahmed, S. Nihonyanagi, T. Tahara
2. 発表標題 Ultrafast vibrational relaxation of excited free OD at the air/water interface revealed by femtosecond time-resolved HD-VSFG spectroscopy
3. 学会等名 Ultrafast phenomena 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 T. Tahara
2. 発表標題 Ultrafast chemical dynamics at the water surface revealed by femtosecond time-resolved phase-sensitive nonlinear spectroscopy
3. 学会等名 Symposium "Multiscale Chemistry and Dynamics at Surfaces and Interfaces", Spring 2002 American Chemical Society (ACS) meeting (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 T. Tahara
2. 発表標題 A chemical reaction becomes ultrafast at the water surface
3. 学会等名 The 16th biennial DAE-BRNS Trombay Symposium on Radiation & Photochemistry (TSRP-2022) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 T. Tahara
2. 発表標題 Vibrational relaxation of OH stretch at the air/water interface
3. 学会等名 CMDS2022 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 S. Nihonyanagi
2. 発表標題 Structure and dynamics of water at interfaces
3. 学会等名 Annual Summer School Solvation Science (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 W. Sung、二本柳聡史、田原太平
2. 発表標題 Development of the Sub-100 fs Interferometric 2D heterodyne-detected vibrational sum-frequency spectroscopy for the study of ultrafast water dynamics at the interface
3. 学会等名 第10回RAPシンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 M. Ahmed、二本柳聡史、田原太平
2. 発表標題 Mechanism of vibrational relaxation of free OH/OD at the water surface by TR-HD-VSFG spectroscopy
3. 学会等名 Saitama SFG Colloquium II (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 W. Sung、二本柳聡史、田原太平
2. 発表標題 Ultrafast spectral diffusion of hydrogen-bonded OH stretch at the air/H ₂ O interface investigated by cutting-edge interferometric 2D HD-VSFG spectroscopy
3. 学会等名 第16回分子科学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 二本柳聡史、田原太平
2. 発表標題 その場参照法を用いた電極/電解液界面における水の振動和周波発生分光測定
3. 学会等名 第16回分子科学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 二本柳聡史
2. 発表標題 Fundamentals of Heterodyne-Detected Vibrational Sum-Frequency Generation and Its Extension to Solid/Liquid Interfaces
3. 学会等名 GMSIセミナー
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 A. Morita
2. 発表標題 Development of Computational Analysis of Difference Vibrational Spectroscopy
3. 学会等名 Global Initiatives of Academic Network (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 A. Morita
2. 発表標題 Recent Theoretical Studies of SFG Spectroscopy and Water Surface
3. 学会等名 Telluride Science Research Conference on Nonlinear Optics at Interfaces (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 森田 明弘
2. 発表標題 分子シミュレーションと理論化学
3. 学会等名 第16回分子シミュレーションスクール - 基礎から応用まで - (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 森田 明弘
2. 発表標題 液液界面の構造ゆらぎとその機能の分子科学
3. 学会等名 第35期 C A M M フォーラム (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 石山 達也
2. 発表標題 分子シミュレーションが明かす複雑界面の構造とダイナミクス
3. 学会等名 CSJ化学フェスタ (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 石山 達也
2. 発表標題 生体適合性を有する高分子界面の分子構造研究
3. 学会等名 旭硝子財団 助成研究発表会 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 T. Tahara
2. 発表標題 Ultrafast Vibrational dynamics of water at aqueous interfaces studied by infrared-excited time-resolved HD-VSFG and 2D HD-VSFG spectroscopy
3. 学会等名 Pacifichem 2021, Symposium on "Recent Advances in Coherent Multidimensional Spectroscopy (Physical #391) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 T. Tahara
2. 発表標題 Tracking ultrafast chemical processes at aqueous interfaces by time-resolved heterodyne-detected vibrational sum-frequency generation
3. 学会等名 Pacifichem 2021, Symposium on "Advanced Understanding of Soft Interfaces at the Molecular-Scale (Physical #392) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 T. Tahara
2. 発表標題 Revealing chemical reactions at the water surface by phase-sensitive ultrafast nonlinear spectroscopy
3. 学会等名 XIOPM-RAP Joint Webinar on Photonics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 T. Tahara
2. 発表標題 Revealing ultrafast reaction dynamics at the water surface by femtosecond time-resolved phase-sensitive nonlinear spectroscopy
3. 学会等名 11th Asian Photochemistry Conference (APC 2021) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 W. Sung, K. Inoue, S. Nihonyanagi, T. Tahara
2. 発表標題 Vibrational relaxation of OH stretch at the air/H ₂ O interface: A time-resolved heterodyne-detected VSFG study
3. 学会等名 20th International Conference on Time-Resolved Vibrational Spectroscopy (TRVS2021) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 M. Ahmed, K. Inoue, S. Nihonyanagi, T. Tahara
2. 発表標題 Capturing Hidden Isolated OH at the Charged Hydrophobic Interface by 2D Heterodyne-Detected VSFG Spectroscopy
3. 学会等名 20th International Conference on Time-Resolved Vibrational Spectroscopy (TRVS2021) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 T. Tahara
2. 発表標題 Ultrafast dynamics at the water surface revealed by time-resolved HD-VSFG spectroscopy
3. 学会等名 20th International Conference on Time-Resolved Vibrational Spectroscopy (TRVS2021) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 T. Tahara
2. 発表標題 Vibrational dynamics of interfacial water revealed by 2D HD-VSFG spectroscopy
3. 学会等名 CMDS online webinars (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 M. Ahmed, S. Nihonyanagi, T. Tahara
2. 発表標題 Femtosecond two-dimensional heterodyne-detected VSFG spectroscopy: A novel technique to probe ultrafast dynamics at aqueous interfaces
3. 学会等名 International web-conference "LASER SPECTROSCOPY AND ULTRAFAST SCIENCE (LSUS-2021) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 F. Wei、浦島周平、二本柳聡史、田原太平
2. 発表標題 Elucidation of water structure and pKa at the SiO ₂ /water buried interface using heterodyne detected vibrational sum frequency generation spectroscopy
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 W. Sung、井上賢一、二本柳聡史、田原太平
2. 発表標題 Reliable vibrational relaxation time of OH stretch at the Air/H ₂ O interface determined by time-resolved heterodyne-detected VSFG spectroscopy
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 二本柳聡史、万代俊彦、田原 太平、
2. 発表標題 界面選択的非線形分光法によるモデルMg電池界面のその場観測
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 A. Morita
2. 発表標題 Development and Application of Quadrupole Susceptibility Analyzer in SFG Spectroscopy
3. 学会等名 Pacifichem 2021, Symposium "Advanced Understanding of Soft Interfaces at the Molecular-Scale (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 A. Morita
2. 発表標題 New Perspectives on Chemical Reactions and Transport at Liquid-Liquid Interfaces
3. 学会等名 Pacifichem 2021, Symposium "Exploring Complex and Real Systems using Large-Scale Molecular Dynamics Calculations" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 T. Ishiyama
2. 発表標題 Recent progress in theoretical studies of structures and vibrational spectra at ice surface
3. 学会等名 Pacifichem 2021, Symposium "Advanced Understanding of Soft Interfaces at the Molecular-Scale (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 T. Ishiyama
2. 発表標題 Molecular dynamics study of transport, structure, and spectroscopy at liquid interfaces
3. 学会等名 IAPWS 2020 Helmholtz Award Lecture (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 K. Inoue, C. Takada, L. Wang, A. Morita, and S. Ye
2. 発表標題 Ozone oxidation of the unsaturated phospholipid monolayer in ambient air revealed by HD-SFG spectroscopy
3. 学会等名 Pacifichem 2021, Symposium "Advanced Understanding of Soft Interfaces at the Molecular-Scale (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 L. Wang, and A. Morita
2. 発表標題 Theoretical investigation of sum frequency generation spectroscopy on carbon-based electrode-electrolyte interfaces
3. 学会等名 Pacifichem 2021, Symposium "Advanced Understanding of Soft Interfaces at the Molecular-Scale" (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 T. Hirano, and A. Morita
2. 発表標題 Multidimensional free energy analysis on electron transfer mechanism at the oil/water interface
3. 学会等名 Pacifichem 2021, Symposium "Advanced Understanding of Soft Interfaces at the Molecular-Scale" (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 L. Wang, and A. Morita
2. 発表標題 Microscopic Dielectric Constant and Sum Frequency Generation Spectroscopy of Monolayer Interfaces Evaluated by Molecular Dynamics Simulation
3. 学会等名 MRM2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 小泉 愛、田原 寛文、平野 智倫、森田 明弘
2. 発表標題 液界面のイオン通過での触媒の効果と特異性の分子機構
3. 学会等名 第35回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 山本 遥一、石山 達也、森田 明弘、鈴木 俊法
2. 発表標題 極端紫外レーザー光電子分光による気液界面の電子状態の研究
3. 学会等名 原子衝突学会第46回年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 今泉 伊織、平野 智倫、内藤 暢也、森田 明弘
2. 発表標題 溶液系界面を対象とするグランドカノニカル分子動力学法の開発
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 市川 怜奈、小泉 愛、平野 智倫、森田 明弘
2. 発表標題 有機溶媒界面のイオン輸送反応における微量の水の触媒効果
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 平野 智倫、森田 明弘
2. 発表標題 和周波発生分光における四重極成分の時間依存形式による計算
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 王 琳、村田 凌、井上 賢一、叶 深、森田 明弘
2. 発表標題 Quantitative determination of Fresnel factor dispersion in the analysis of sum-frequency generation spectroscopy
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 細谷 毅、王 琳、森田 明弘
2. 発表標題 電子共鳴を含むSFG計算の開発とキラル系への応用
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 山本 遥一、石山 達也、森田 明弘、鈴木 俊法
2. 発表標題 極端紫外レーザー光電子分光による気液界面の電子状態の研究
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 小泉 愛、岸本 直樹、高橋 英明、森田 明弘
2. 発表標題 油水界面を反応場とする相間移動触媒反応の反応機構解析
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 丸岡 俊政、平野 智倫、矢澤 尚也、森田 明弘
2. 発表標題 疎水性水和殻構造における水の振動スペクトルの理論解析
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 矢澤 尚也、平野 智倫、森田 明弘
2. 発表標題 振動差スペクトル計算の並列実装による効率化と水/電極表面への応用
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 森田 明弘
2. 発表標題 分子シミュレーションと理論化学
3. 学会等名 第15回分子シミュレーションスクール 基礎から応用まで 2021 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 A. Morita, A. Koizumi, and T. Hirano
2. 発表標題 Microscopic Mechanisms of Facilitated Ion Transfer and Electron Transfer Reaction at Liquid-Liquid Interface
3. 学会等名 The 7th Quantum Science Symposium、 ICCMSE 2021 -- Computational Chemistry and Computational Physics (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 平野 智倫、森田 明弘
2. 発表標題 多次元自由エネルギー計算による液液界面における電子移動反応機構の解明
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 京田 奈津実、石山 達也
2. 発表標題 高分子表面のからみあい構造に関する分子シミュレーション研究
3. 学会等名 第35回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 廣瀬 真由、八尾 春奈、石山 達也
2. 発表標題 空気/エタノール水溶液界面の分子構造の解明
3. 学会等名 第35回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 京田 奈津実、石山 達也
2. 発表標題 Polyethyleneの全原子分子動力学シミュレーション：熱物性、からみあい構造の計算
3. 学会等名 第67回高分子研究発表会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 R. Kusaka, S. Nihonyanagi, T. Tahara
2. 発表標題 Probing ultrafast photochemical reaction at water surface by heterodyne-detected vibrational sum frequency generation
3. 学会等名 The 22nd International Conference on Ultrafast Phenomena (UP2020) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 W. Sung, K. Inoue, S. Nihonyanagi, T. Tahara
2. 発表標題 Vibrational relaxation of water at the air/H ₂ O interface revealed by time-resolved heterodyne-detected vibrational sum-frequency generation in the OH stretch hot-band region
3. 学会等名 The 22nd International Conference on Ultrafast Phenomena (UP2020) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 T. Tahara
2. 発表標題 Tracking ultrafast chemical reactions at the aqueous interface with femtosecond time-resolved HD-VSFG spectroscopy
3. 学会等名 7th Asian Spectroscopy Conference (ASC2020) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 T. Tahara
2. 発表標題 Three researches going on at MLS: What we wish to understand about Nature?
3. 学会等名 A National Workshop on Fluorescence and Raman Spectroscopy (FCS2020) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 M. Ahmed
2. 発表標題 Probing the structure and dynamics of molecules at interfaces: heterodyne detected VSFG spectroscopy
3. 学会等名 A National Workshop on Fluorescence and Raman Spectroscopy (FCS2020) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 M. Ahmed, S. Nihonyanagi, T. Tahara
2. 発表標題 Probing ultrafast dynamics of water at aqueous interfaces with femtosecond two-dimensional heterodyne-detected VSFG spectroscopy
3. 学会等名 National Laser Symposium NLS-292 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 A. Morita
2. 発表標題 Development of Qsac Program to Evaluate Whole SFG Susceptibility
3. 学会等名 Telluride Science Research Conference on "Nonlinear Optics at Interfaces" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 細谷 毅、王 琳、森田 明弘
2. 発表標題 電子共鳴によるキラルSFGのバルク・界面成分の理論解析
3. 学会等名 分子科学会オンライン討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 三浦俊次、平塚将起、山本詠士、石山達也、泰岡顕治
2. 発表標題 カーボンナノチューブに閉じ込めた水分子の振動解析
3. 学会等名 第34回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 北中一也、石山達也
2. 発表標題 水/氷界面における非対称性水素結合構造
3. 学会等名 第34回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 石山達也
2. 発表標題 アクリレート系高分子と水の相互作用に関するバルク，および界面の分子動力学シミュレーション研究
3. 学会等名 第69回 高分子討論会（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 A. Sayama, S. Nihonyanagi, Y. Ohshima, T. Tahara
2. 発表標題 Anion species dependence of solvent molecular orientation at an electrode / electrolyte solution interface
3. 学会等名 第35回化学反応討論会（国際学会）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 K. Inoue, M. Ahmed, S. Nihonyanagi, T. Tahara
2. 発表標題 Effect of hydrogen-bond on ultrafast spectral diffusion dynamics of water at charged monolayer interfaces revealed by steady-state and 2D HD-VSFG spectroscopy
3. 学会等名 International workshop on Nonlinear Optics at Interfaces 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 二本柳 聡史
2. 発表標題 新規非線形分光法が解き明かす血液適合性高分子界面の構造
3. 学会等名 理研・イブニングセミナー (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Tahara
2. 発表標題 Vibrational sum-frequency generation with quadrupole mechanism investigated by HD-VSFG spectroscopy
3. 学会等名 International workshop on nonlinear optics at interfaces 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 L. Wang, S. Nihonyanagi, K. Inoue, K. Nishikawa, A. Morita, S. Ye, T. Tahara
2. 発表標題 Effect of frequency-dependent fresnel factor on the lineshape of vibrational sum frequency generation spectroscopy
3. 学会等名 International workshop on Nonlinear Optics at Interfaces 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Tahara
2. 発表標題 Challenges with Interface-selective nonlinear spectroscopy
3. 学会等名 Seminar, Institute for interdisciplinary research, Jiangnan University (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 S. Nihonyanagi
2. 発表標題 Phase-resolved nonlinear spectroscopy at electrode/electrolyte solution interfaces
3. 学会等名 10th International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy (ICAVS 10) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Tahara
2. 発表標題 Ultrafast dynamics at aqueous interface revealed by time-resolved HD-VSFG spectroscopy
3. 学会等名 CECAM workshop on "Dynamics of Water in Complex Environments, Bridging the Gap between Molecular and Mesoscopic Interfaces" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 田原 太平
2. 発表標題 挑戦したい幾つかの問題
3. 学会等名 第6回森野ディスカッション (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Tahara
2. 発表標題 Photochemical reaction at the liquid interface tracked by femtosecond time-resolved HD-VSFG spectroscopy
3. 学会等名 19th Time Resolved Vibrational Spectroscopy Conference (TRVS2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 L. Wang, S. Nihonyanagi, K. Inoue, K. Nishikawa, A. Morita, S. Ye, T. Tahara
2. 発表標題 Effect of frequency-dependent fresnel factor on the lineshape of vibrational sum frequency generation spectroscopy
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 松崎維信、山口祥一、田原太平
2. 発表標題 和周波発生分光法における非共鳴信号の複素位相の見積もり
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 W. Sung, 井上賢一、二本柳聡史、田原太平
2. 発表標題 Evidence of Strong Anharmonic Coupling in Terminal Methyl Group of Self-assembled Monolayer: A Study of Time-domain 2D Heterodyne-detected Vibrational Sum-frequency Generation Spectroscopy
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 佐山篤、二本柳聡史、大島康裕、田原太平
2. 発表標題 濃厚溶液条件下におけるアセトニトリルの還元耐性機構の分子論的解明
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 二本柳聡史、A. Myalitsin、浦島周平、S. Ghosh、山口祥一、柳沢純司、青木隆史、田原太平
2. 発表標題 高分子薄膜/水界面のヘテロサイン検出和周波発生分光計測
3. 学会等名 第68回高分子討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 二本柳聡史、佐山篤、大島康裕、田原太平
2. 発表標題 電極溶液界面のヘテロサイン検出振動和周波発生分光
3. 学会等名 2019年日本表面真空学会学術講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 M.Ahmed, S. Nihonyanagi, T. Tahara
2. 発表標題 Vibrational spectra and ultrafast dynamics of interfacial water studied by steady-state and time-resolved HD-VSFG spectroscopy
3. 学会等名 Indo-Japan workshop on "Frontiers in Molecular Spectroscopy: From Fundamentals to Applications in Chemistry and Biology" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Tahara
2. 発表標題 Ultrafast dynamics at the water surface revealed by femtosecond interface-selective nonlinear spectroscopy
3. 学会等名 Nature Conference on Functional Dynamics -Visualizing Molecules in Action- (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 L. Wang, S. Nihonyanagi, K. Inoue, K. Nishikawa, A. Morita, S. Ye, T. Tahara
2. 発表標題 Microscopic structure of electrode/electrolyte interface probed by molecular simulation and sum frequency generation spectroscopy
3. 学会等名 Workshop on Nonlinear Optics at Interfaces 2019
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Tahara
2. 発表標題 Structure and dynamics at aqueous interface revealed by heterodyne-detected vibrational sum-frequency
3. 学会等名 Department Seminar, Department of Inorganic and Physical Chemistry, Indian Institute of Science (IISc) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 T. Tahara
2. 発表標題 Wonder world seen with ultrashort light
3. 学会等名 Special Colloquium 2020 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 T. Tahara
2. 発表標題 Structure and dynamics at aqueous interface revealed by heterodyne-detected vibrational sum-frequency
3. 学会等名 Department Seminar, Department of Chemistry, Indian Institute of Technology at Bombay (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Tahara
2. 発表標題 Wonder world seen with ultrashort light
3. 学会等名 Mizushima-Raman Public Lecture (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 T. Tahara
2. 発表標題 Wonder world seen with ultrashort light
3. 学会等名 Institute Lecture, Indian Institute of Science Education and Research (IISER) Bhopal, Bhopal, India (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 T. Tahara
2. 発表標題 Structure and dynamics at aqueous interface revealed by heterodyne-detected vibrational sum-frequency
3. 学会等名 Department Seminar, Department of Chemistry, Indian Institute of Science Education and Research (IISER) Bhopal (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 森田 明弘
2. 発表標題 液体界面の構造と機能を解明する計算分子科学
3. 学会等名 スーパーコンピューターワークショップ(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 平野 智倫、森田 明弘
2. 発表標題 油水界面電子移動の多次元自由エネルギー計算による反応機構解析
3. 学会等名 第33回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 小泉 愛、伊藤 孟、平野 智倫、森田 明弘
2. 発表標題 ジクロロメタンの分子モデル改良とその分子動力学シミュレーションにおけるパフォーマンス
3. 学会等名 第33回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 L. Wang, A. Morita
2. 発表標題 Molecular dynamics simulation and sum frequency generation study on the structural order of langmuir monolayers
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 高橋 英明、鈴岡 大樹、森田 明弘
2. 発表標題 大規模QM/MM 法によるPSIIマンガングラスターの酸化自由エネルギー解析
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2019秋季年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 森田 明弘
2. 発表標題 和周波発生分光の理論と溶液界面の構造解明への応用
3. 学会等名 日本化学会青森地区講演会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 A. Morita
2. 発表標題 Theory and computational analysis of vibrational sum frequency generation spectroscopy
3. 学会等名 Changchun Institute of Applied Chemistry (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 A. Morita
2. 発表標題 Theory and computational analysis of vibrational sum frequency generation spectroscopy
3. 学会等名 Jilin Normal University (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 佐々木 伸一、奥野 将成、石山 達也、森田 明弘、石橋 孝章
2. 発表標題 空気 / 陽・陰イオン性混合界面活性剤水溶液界面の水分子のHD-VSFG分光
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 伊藤 孟、小泉 愛、平野 智倫、内藤 暢也、森田 明弘
2. 発表標題 液液界面のイオン輸送における標準速度定数の評価
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 高橋 英明、鈴岡 大樹、森田 明弘
2. 発表標題 QM/MM-ER法によるPSII マンガンクラスターの光酸化の自由エネルギー解析
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 平野 智倫、森田 明弘
2. 発表標題 分子動力学シミュレーションによる油水界面電子移動の反応経路解析
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 小泉 愛、田原 寛文、平野 智倫、岸本 直樹、森田 明弘
2. 発表標題 油水界面における相間移動触媒の微視的研究
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 森 渉、平野 智倫、王 琳、森田 明弘
2. 発表標題 和周波発生分光におけるバルク四重極効果の汎用計算プログラムの開発
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 佐藤 大和、平野 智倫、王 琳、叶 深、森田 明弘
2. 発表標題 ジメチルスルホキシド溶液/グラフェン電極界面における和周波発生分光と理論解析
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 内藤 暢也、森田 明弘
2. 発表標題 溶液界面に適用されるグランドカノニカル分子動力学法の開発
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 森田 明弘
2. 発表標題 分子シミュレーションと理論化学
3. 学会等名 第13回分子シミュレーションスクール -基礎から応用まで- (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 N. Naito, A. Morita
2. 発表標題 Development of grand canonical molecular dynamics method applied to solution interfaces
3. 学会等名 Tohoku University's Chemistry Summer School 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 A. Morita
2. 発表標題 Ion transport mechanisms through liquid-liquid interfaces
3. 学会等名 Gordon Research Conference on Chemistry and Physics of Liquids (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 A. Morita
2. 発表標題 Dynamics and kinetics at liquid-liquid interfaces
3. 学会等名 CPMD Meeting 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 A. Morita
2. 発表標題 Microscopic structure and dynamics at water-oil interfaces
3. 学会等名 CECAM Workshop on "Dynamics of Water in Complex Environments, Bridging the Gap between Molecular and Mesoscopic Interfaces (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 A. Morita
2. 発表標題 Effect of fresnel dispersion in SFG spectroscopy
3. 学会等名 The 2019 International Workshop on Nonlinear Optics at Interfaces (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 A. Morita
2. 発表標題 Molecular dynamics analysis of catalytic effect on ion transport through liquid-liquid interface
3. 学会等名 5th Computational Chemistry Symposium, ICCMSE2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 A. Morita
2. 発表標題 Theory and computational analysis of liquid interfaces and spectroscopy
3. 学会等名 University of Cambridge (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Ishiyama
2. 発表標題 Molecular dynamics study of structure and vibrational spectra of water at lipid and polymer interfaces
3. 学会等名 ACS Fall Meeting (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 S. Nakamura, K. Tomobe, E. Yamamoto, T. Ishiyama, M. Yasui and K. Yasuoka,
2. 発表標題 Vibrational spectra analysis of HOD molecules in alpha-D-glucose solution using molecular dynamics simulations
3. 学会等名 PRTEC2019 (The 2nd Pacific Rim Thermal Engineering Conference) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 石山 達也
2. 発表標題 アクリレートポリマー/水界面における 分子構造と振動和周波スペクトルの 分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 第68回高分子討論会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 奥村 智明, 石山 達也
2. 発表標題 リン脂質膜/水溶液界面における二価カチオンの効果
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 北中一也, 石山達也
2. 発表標題 分子動力学シミュレーションによる氷表面上でのイオン分布に関する研究
3. 学会等名 日本化学会2019年度北陸地区講演会と研究発表会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 北中一也, 石山達也
2. 発表標題 氷表面での分子動力学シミュレーションによるイオン分布の解明
3. 学会等名 第33回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Tahei Tahara
2. 発表標題 Heterodyne-detected vibrational sum-frequency generation spectroscopy at buried aqueous interfaces
3. 学会等名 Telluride Science Research Center (TSRC) Workshop "Nonlinear Optics at Interfaces" 2018 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Tahei Tahara
2. 発表標題 Ultrafast vibrational dynamics at lipid/ water interfaces studied by 2D HD-VSFG spectroscopy
3. 学会等名 The 9th International Conference on Coherent Multidimensional Spectroscopy (CMDS 2018) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Tahei Tahara
2. 発表標題 Ultrafast vibrational dynamics at aqueous interfaces studied by 2D HD-VSFG spectroscopy
3. 学会等名 Telluride Science Research Center (TSRC) Workshop "Advances of Multidimensional Vibrational Spectroscopy in Water, Biology and Materials Science" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Satoshi Nihonyanagi, Ken-ichi Inoue, Tahei Tahara
2. 発表標題 Relaxation of excited free OH at the air/water interface revealed by time-resolved heterodyne-detected vibrational sum frequency generation
3. 学会等名 21th International Conference on Ultrafast Phenomena (UP2018) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Satoshi Nihonyanagi
2. 発表標題 Development of heterodyne-detected vibrational sum frequency generation and elucidation of structure and dynamics of water at interfaces
3. 学会等名 Seminar, Molecular and Cellular Responses to Xenobiotics Lab, Unit of Functional and Adaptive Biology, University of Paris Diderot (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Tahei Tahara
2. 発表標題 Structure and dynamics of liquid interfaces studied by heterodyne-detected vibrational sum-frequency generation
3. 学会等名 Gordon Research Conference 2018 Vibrational Spectroscopy (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 二本柳聡史
2. 発表標題 ヘテロダイン検出振動和周波分光測定による電極/溶液界面の構造解析
3. 学会等名 セミナー、東北大学理学研究科
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Ahmed Mohammed, Ken-ichi Inoue, Satoshi Nihonyanagi, Tahei Tahara
2. 発表標題 Femtosecond hydrogen bond dynamics of water at hydrophobic ion/water interface revealed by 2D HD-VSFG spectroscopy
3. 学会等名 The 26th International Conference on Raman Spectroscopy (ICORS 2018) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Satoshi Nihonyanagi, Anton Myalitsin, Shu-hei Urashima, Shoichi Yamaguchi, Junji Yanagisawa, Takashi Aoki, Tahei Tahara
2. 発表標題 Water structure at hemocompatible polymer/water interfaces revealed by heterodyne-detected vibrational sum frequency generation
3. 学会等名 The 26th International Conference on Raman Spectroscopy (ICORS 2018) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Woongmo Sung, Ken-ichi Inoue, Satoshi Nihonyanagi, Tahei Tahara
2. 発表標題 Construction of an apparatus of interferometric 2D heterodyne-detected vibrational sum-frequency generation spectroscopy for liquid interface study
3. 学会等名 The 26th International Conference on Raman Spectroscopy (ICORS 2018) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 佐山篤、二本柳聡史、大島康裕、田原太平
2. 発表標題 電解質溶液/電極界面へのヘテロダイン検出振動和周波発生分光法の応用
3. 学会等名 第12回分子科学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Woongmo Sung, Ken-ichi Inoue, Satoshi Nihonyanagi, Tahei Tahara
2. 発表標題 Vibrational relaxation time of OH stretch at the air/H ₂ O interface: Reliable determination through the hot-band by time-resolved vibrational sum-frequency generation spectroscopy
3. 学会等名 第12回分子科学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Sanat Ghosh, Satoshi Nihonyanagi, Tahei Tahara
2. 発表標題 Elucidating water structure at the hydrophobic/water interface by heterodyne detected vibrational sum frequency generation (HD-VSFG) spectroscopy
3. 学会等名 第12回分子科学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Ahmed Mohammed, Satoshi Nihonyanagi, Tahei Tahara
2. 発表標題 Vibrational Spectrum of the Water Bend at the Charged Interfaces Probed by Heterodyne-Detected Sum Frequency Generation
3. 学会等名 第12回分子科学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 二本柳聡史、Anton Myalitsin、浦島周平、Sanat Ghosh、山口祥一、柳沢純司、青木隆史、田原太平
2. 発表標題 界面選択的非線形分光による血液適合性高分子/水界面における水の構造研究
3. 学会等名 第67回高分子討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Tahei Tahara
2. 発表標題 Catching ultrafast reactions at the water surface by femtosecond time-resolved HD-VSFG spectroscopy
3. 学会等名 The 8th SFG Symposium (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Satoshi Nihonyanagi
2. 発表標題 HD-VSFG spectroscopic study of buried solid liquid interfaces
3. 学会等名 The 8th SFG Symposium (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Tahe Tahara
2. 発表標題 Structure and dynamics of water at the interface
3. 学会等名 Joint Conference of EMLG/JMLG Meeting 2018 and 41st Symposium on Solution Chemistry of Japan (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Ahmed Mohammed, Ken-ichi Inoue, Satoshi Nihonyanagi, Tahei Tahara
2. 発表標題 Ultrafast hydrogen-bond dynamics of water at hydrophobic ion/water interface: A 2D HD-VSFG spectroscopic study
3. 学会等名 理研シンポジウム 第6回「光量子工学研究」-サブ波長フォトニクス研究と新たな光量子工学の展開-
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Satoshi Nihonyanagi
2. 発表標題 Phase-resolved Interface-selective Spectroscopy of Applied Interfaces
3. 学会等名 2nd International Workshop on Phase Interfaces for Highly Efficient Energy Utilization (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Satoshi Nihonyanagi
2. 発表標題 Structure and Dynamics of Liquid Interfaces Studied By Phase- and Time-Resolved Interface-Selective Nonlinear Spectroscopies
3. 学会等名 Seminar, Department of Chemistry, Temple University (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 二本柳聡史
2. 発表標題 Role of hydrogen bonding in ultrafast spectral diffusion dynamics of water at charged lipid interfaces
3. 学会等名 分子研研究会「Water at interfaces」(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 田原太平
2. 発表標題 フェムト秒レーザーを用いた複雑な分子系の研究
3. 学会等名 PF研究会「高繰り返し極短パルス光源の未来」(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 二本柳聡史、Anton Myalitsin、浦島周平、Sanat Ghosh、山口祥一、柳沢純司、青木隆史、田原太平
2. 発表標題 界面選択的非線形分光による血液適合性高分子/水界面における水の構造研究
3. 学会等名 水関連研究ミニシンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Mohammed Ahmed, Satoshi Nihonyanagi, Tahei Tahara
2. 発表標題 Mechanism of water bending bands at the charged interfaces observed by heterodyne-detected sum frequency generation: Quadrupole contribution
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 Woongmo Sung, Ken-ichi Inoue, Satoshi Nihonyanagi, Tahei Tahara
2. 発表標題 Vibrational relaxation dynamics of OH stretch of water at air/H ₂ O interface investigated by time-resolved heterodyne-detected vibrational sum-frequency generation spectroscopy
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 Tatsuya Ishiyama
2. 発表標題 Structure and Vibrational Spectra at Complex Aqueous Interfaces Revealed by Molecular Dynamics Simulation
3. 学会等名 8th SFG Symposium, 2018 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 森田明弘
2. 発表標題 実験と理論計算による溶液界面の分子科学の進展
3. 学会等名 ワークショップ「複合系の理論化学・計算化学：最近の研究状況と展望」(招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 高橋 英明、神戸 宏之、森田 明弘
2. 発表標題 拡張型QM/MM法の方法論開発とその応用
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 A. Morita
2. 発表標題 Analysis of SFG Spectra of Liquid Interfaces
3. 学会等名 Telluride Science Research Conference on "Nonlinear Optics at Interfaces" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 A. Morita
2. 発表標題 Theoretical Analysis of Structure and Dynamics at Liquid-Liquid Interfaces
3. 学会等名 Telluride Science Research Conference on "Hydrophobicity: From Theory, to Simulation, to Experiment" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 A. Morita
2. 発表標題 Recent Topics on Theoretical Analysis of Sum Frequency Generation Spectroscopy
3. 学会等名 Gordon Research Conference on Vibrational Spectroscopy (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 T. Hirano, L.-J. Wang, H. Tahara, A. Koizumi, A. Morita
2. 発表標題 Theoretical Analysis on Mechanism of Electron Transfer at Oil/Water Interfaces by Multidimensional Free Energy Calculations
3. 学会等名 Tohoku University's Chemistry Summer School 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 森田明弘
2. 発表標題 コンピュータシミュレーションと理論化学
3. 学会等名 第12回分子シミュレーションスクール～基礎から応用まで～ (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Lingjian Wang、吉川 信明、森田 明弘
2. 発表標題 自由エネルギー計算による親水性イオンの界面間輸送プロセスにおける水和効果の究明
3. 学会等名 第12回分子科学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 吉田 俊将、森田 明弘、石山 達也
2. 発表標題 分子動力学シミュレーションによるアルコール単分子膜/水溶液界面での酸解離定数の決定
3. 学会等名 第12回分子科学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 森 涉、近藤 正人、奥野 将成、王 琳、石橋 孝章、森田 明弘
2. 発表標題 和周波発生分光におけるバルク四重極効果の検討
3. 学会等名 第12回分子科学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 高橋 英明、森田 明弘
2. 発表標題 拡張型QM/MM法の方法論開発とその性能評価
3. 学会等名 第12回分子科学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 平野 智倫、Lingjian Wang、田原 寛文、小泉 愛、森田 明弘
2. 発表標題 油水界面における電子移動反応機構の多次元自由エネルギー計算による理論的解析
3. 学会等名 第12回分子科学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 小泉 愛、田原 寛文、平野 智倫、Lingjian Wang、森田 明弘
2. 発表標題 油水界面における塩基触媒反応の理論研究
3. 学会等名 第12回分子科学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 王 琳、森田 明弘
2. 発表標題 Identification of ordered and disordered Langmuir films through computational sum frequency generation spectroscopy
3. 学会等名 第12回分子科学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 岸中 翔、森田 明弘、石山 達也
2. 発表標題 分子動力学シミュレーションによるアクリレートポリマー/水界面の分子構造の解明
3. 学会等名 第12回分子科学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 高橋 英明、劉 斯璋、森田 明弘
2. 発表標題 QM/MM法による水表面における酢酸の酸性度の自由エネルギー解析
3. 学会等名 第12回分子科学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 内藤 暢也、田原 寛文、森田 明弘
2. 発表標題 溶液系の気液界面におけるグランドカノニカル分子動力学法の開発
3. 学会等名 第12回分子科学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 城塚 達也、小幡 恭子、森田 明弘
2. 発表標題 アモルファスシリカ・水界面の分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 第12回分子科学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 田原 寛文、Lingjian Wang、平野 智倫、小泉 愛、森田 明弘
2. 発表標題 液液界面でのイオン輸送におけるイオンペア形成効果の微視的解明
3. 学会等名 第12回分子科学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 森田明弘
2. 発表標題 液体界面の計算分子科学と分光計測
3. 学会等名 第22回分子シミュレーション夏の学校(招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 A. Morita
2. 発表標題 Theory of (3) Effect in Sum Frequency Generation Spectroscopy
3. 学会等名 8th SFG Symposium(招待講演)(国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 T. Joutsuka, K. Obata and A. Morita
2. 発表標題 Molecular Dynamics Simulations of Amorphous Silica/Water Interfaces
3. 学会等名 EMLG/JMLG Meeting 2018(国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 A. Morita
2. 発表標題 Microscopic Structure and Dynamics at Liquid-Liquid Interfaces
3. 学会等名 Melbourne-Tohoku Workshop: combining Materials Science and Chemistry(招待講演)(国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 王 琳、森田 明弘
2. 発表標題 Detecting degree of structural order of Langmuir monolayers through molecular simulation analysis of sum frequency generation spectroscopy
3. 学会等名 第32回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 岸中 翔、森田 明弘、石山 達也
2. 発表標題 アクリレートポリマー/水界面における分子構造と振動と周波スペクトルの分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 第32回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 吉田 俊将、城塚 達也、森田 明弘、石山 達也
2. 発表標題 アルコール単分子膜/水溶液界面での酸解離に関する分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 第32回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 平野 智倫、森田 明弘
2. 発表標題 液液界面における電子移動反応機構の多次元自由エネルギー計算
3. 学会等名 第32回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 森田明弘
2. 発表標題 Mechanism of Ion Transport through Water-Oil Interface
3. 学会等名 分子研研究会 "Water at Interfaces 2018" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 S. Sasaki, M. Okuno, T. Ishiyama, A. Morita, T. Ishibashi
2. 発表標題 Orientations of Water Molecules and Their Alkyl Chain Length Dependence at Air/Cationic Surfactant Solution Interfaces using HD-VSFG Spectroscopy
3. 学会等名 MANA International Symposium 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 佐々木 伸一、奥野 将成、石山 達也、森田 明弘、石橋 孝章
2. 発表標題 HD-VSFG分光法による空気/陽・陰イオン性混合界面活性剤水溶液界面の水分子の配向の研究
3. 学会等名 第4回TIA光・量子計測シンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 T. Joutsuka, A. Morita
2. 発表標題 Heterogeneity at Amorphous Silica/Water Interface: Molecular Dynamics Simulations of Sum Frequency Generation Spectroscopy
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 T. Joutsuka, A. Morita
2. 発表標題 Heterogeneity at Amorphous Silica/Water Interface: Molecular Dynamics Simulations of Sum Frequency Generation Spectroscopy
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 T. Joutsuka, A. Morita
2. 発表標題 Heterogeneity at Amorphous Silica/Water Interface: Molecular Dynamics Simulations of Sum Frequency Generation Spectroscopy
3. 学会等名 日本化学会第99春季年会
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計4件

1. 著者名 石山達也	4. 発行年 2021年
2. 出版社 丸善出版	5. 総ページ数 1534
3. 書名 化学便覧 基礎編 改訂6版 日本化学会編 (分担執筆 17.1.3 分子シミュレーション、pp. 1263-1265)	

1. 著者名 公益社団法人 日本化学会	4. 発行年 2021年
2. 出版社 丸善出版	5. 総ページ数 1534
3. 書名 化学便覧 基礎編 改訂6版	

1. 著者名 K. Inoue, S. Nihonyanagi, T. Tahara	4. 発行年 2019年
2. 出版社 Springer Series in Optical Science book Series	5. 総ページ数 22
3. 書名 Coherent Multidimensional Spectroscopy	

1. 著者名 Akihiro Morita	4. 発行年 2018年
2. 出版社 Springer	5. 総ページ数 264
3. 書名 Theory of Sum Frequency Generation Spectroscopy	

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>理化学研究所 田原分子分光研究室 https://spectroscopy.riken.jp/ Molecular Spectroscopy Laboratory, RIKEN https://spectroscopy.riken.jp/?lang=en 東北大学大学院理学研究化学専攻 計算分子科学研究室 https://comp.chem.tohoku.ac.jp/index.html 富山大学大学院理工学研究部 計算物理化学研究室 http://www3.u-toyama.ac.jp/comp/</p>

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	森田 明弘 (Morita Akihiro) (70252418)	東北大学・理学研究科・教授 (11301)	

6. 研究組織（つづき）

	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	二本柳 聡史 (Nihonyanagi Satoshi) (30443972)	国立研究開発法人理化学研究所・開拓研究本部・専任研究員 (82401)	
研究分担者	石山 達也 (Ishiyama Tatsuya) (10421364)	富山大学・学術研究部工学系・准教授 (13201)	

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			
英国	Imperial College London			
ドイツ	Technical University Braunschweig	InnovationLab GmbH		
米国	カリフォルニア大学サンディエ ゴ校	ノースウェスタン大学	オハイオ州立大学	他1機関
中国	中国科学技術大学			