

令和 2 年 6 月 25 日現在

機関番号：13201

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2016～2019

課題番号：16H04095

研究課題名(和文)水界面の分子構造とダイナミクスの解明および生体膜界面研究への展開

研究課題名(英文) Study of molecular structure and dynamics at water interfaces, and its application to study of biomembrane

研究代表者

石山 達也 (Ishiyama, Tatsuya)

富山大学・学術研究部工学系・准教授

研究者番号：10421364

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 12,900,000円

研究成果の概要(和文)：水や氷表面、界面における分子構造や水素結合ネットワークは、物理学、化学、生物学などの広い分野と関連して、多くの分野で広く研究がなされてきた。振動和周波発生(SFG)分光法は、分子単層レベルの感度で詳細な界面構造の議論を可能にする実験手法として広く用いられるようになった。分子動力学シミュレーションによるSFGスペクトル計算は、観測されるスペクトルを解釈する上で大変強力な手法である。本研究では、i)温度100Kから270Kの広い温度範囲の氷表面の詳細な分子構造、そしてii)代表的な生体膜/水界面の分子構造を分子動力学シミュレーションによるSFGスペクトルの直接計算により解明した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

氷表面の分子構造の解明は、大気科学分野の研究と深いつながりがある。例えば、オゾンホール形成に関わる大気反応過程は、大気中のエアロゾル粒子表面で生じる不均質反応過程であることが分かってきたが、その詳細についてはまだ分かっていないことが多い。それは、エアロゾル表面の分子構造が良く分かっていない事も原因のひとつである。成層圏温度は水の融点以下の温度であるため、氷表面の分子構造の詳細を解明することが環境問題に関わる大気反応過程の理解への鍵となる。さらに、生体膜界面の分子構造の解明は、私達の体内で起こる化学反応過程を理解する上で重要となる。本研究成果は、これらの問題の基礎的知見を与えるものである。

研究成果の概要(英文)：The molecular structure and hydrogen bonding (H-bonding) network at the water and the ice surfaces and interfaces attract broad interest in many fields of science because of its physical, chemical, and biological relevance. Vibrational sum frequency generation (VSFG) spectroscopy has become a very powerful probe to enable discussion of the detailed interfacial structures involved in monolayer sensitivity. The molecular dynamics (MD) computer simulation technique combined with direct calculation of VSFG spectra is now a powerful tool for the interpretation of the measured spectra. In this study, we mainly elucidate i) the detailed structure of ice surface in a wide range of temperature from 100 K to 270 K, and ii) the molecular structure at two representative zwitterionic biomembrane/water interfaces such as phosphatidylcholine/water and phosphatidylethanolamine/water by MD simulation combined with VSFG calculation.

研究分野：界面分子科学

キーワード：水界面 水素結合 分子動力学シミュレーション 和周波発生分光法 脂質膜

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

氷表面は、地球大気中における極域成層圏雲で生じる化学反応場として、あるいは宇宙空間における氷星間塵の表面反応場として重要であると考えられている。氷最表面の分子構造を実験的にプローブする実験手法のひとつに、界面のような反転対称性の破れに伴い生じる二次の非線形感受率 $\chi^{(2)}$ を観測する和周波発生(Sum Frequency Generation, SFG)分光法がある。この分光法では、例えば氷表面に対しては水素結合していない Free OH 伸縮振動のスペクトルが、水素結合した OH 伸縮振動のスペクトルと区別されて 3700 cm^{-1} 付近に観測されることから、最表面の分子構造に敏感な実験手法といえる。氷表面に対して、2001年に Shen らのグループにより室温から 170 K 程度の温度までの Free OH 振動の $|\chi^{(2)}|^2$ 観測が行われ、融点の 273 K から 200 K へ温度が低下するに従い、Free OH 振動の $|\chi^{(2)}|^2$ の値が上昇し Free OH は徐々に表面垂直方向を向くことが示された[1]。つまり、この実験では、温度 200 K 程度まで氷表面に擬似液体層が形成されていることを SFG 観測により示した点で画期的な報告であったが、200 K 以下の温度領域では $|\chi^{(2)}|^2$ に変化がみられなかったことから氷表面構造は 200 K 以下の温度では完全に凍結しているものと議論されていた。

また、氷表面のような基礎的な界面分子構造の問題に加えて、近年、生体膜(脂質膜)界面研究の進展も報告された。私たち生命の体内に存在する細胞の一番外側にある半透性の細胞膜は、細胞の外部環境と細胞質を隔てる壁として存在し、イオンや生体分子を選択的に輸送する役割を果たしている。細胞膜の主な成分として、双性イオンリン脂質であるホスファチジルコリン(PC)とホスファチジルエタノールアミン(PE)が挙げられる。これらの基本構造は親水性頭部基と 2 本の疎水性尾部基に分けられるが、PC と PE の違いは親水性頭部基がコリンであるかエタノールアミンであるかの違いだけである。細胞膜は生体中において二重層膜を形成し細胞膜の内側と外側では PC と PE の存在比が異なっていることが知られており、細胞膜の役割や膜の性質を理解する上でそれらの膜近傍の水分子の構造を理解することは膜透過現象を理解する上で重要である。これら生体膜界面の SFG 実験が近年報告されていたが、スペクトルの解釈に関する理論解析は立ち遅れていた。

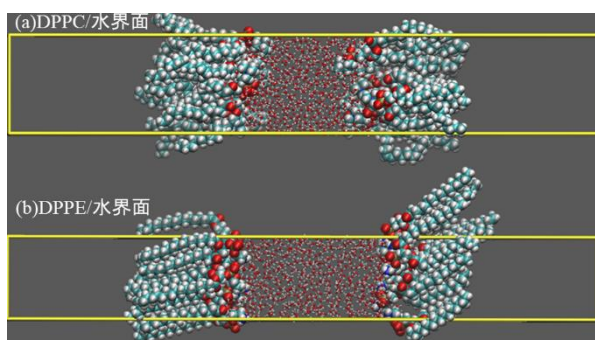


図 1. 脂質膜界面の分子動力学シミュレーションのスナップショット

2. 研究の目的

上記の背景から、本研究ではヘテロダイン検出振動 SFG 分光実験と分子動力学シミュレーションの共同研究により、Shen らのグループでは観測されなかった 170 K から 100 K までの温度領域での Free OH 振動応答を観測し、シミュレーションにより物理化学的メカニズムを解明することを目的とした。また、脂質膜/水界面における分子構造を分子動力学シミュレーションにより解明することを目的とした。本研究では、特にヘテロダイン検出振動和周波発生(HD-VSFG)スペクトルの理論計算を通して界面分子構造を議論した。

3. 研究の方法

氷表面の分子動力学シミュレーションは以下の設定で行った。4480 個の H_2O 分子からなる proton disorder 氷 Ih をシミュレーションセル中央に配置し、スラブ状の氷薄膜を形成し basal 面を表

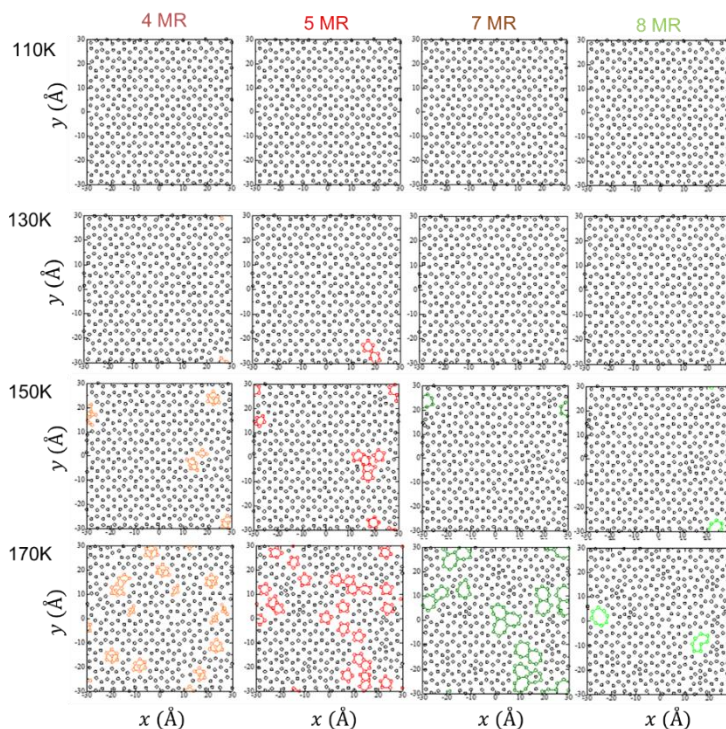


図 2. 氷最表面層(Basal 面)における酸素位置のプロット. それぞれの温度に対して 4 員環, 5 員環, 7 員環, 8 員環構造を色付けして表示した。

面として計算を行った。用いた水モデルとして 融点温度が 272.2 K である TIP4P/Ice モデルを用いた[2]。温度は 270 K から 50 K の範囲とし、10ns の平衡化後、各温度での氷最表面層の構造を計算した。

一方、脂質膜界面の分子動力学シミュレーションは以下の設定で行った。分子モデルとして、水に対して TIP3P モデル、リン脂質分子に対して CHARMM36 モデルを用いた。初期構造は Packmol ソフトウェアにより中央に水の液膜を配置し、両側に界面が生成されるようにした。界面では脂質膜分子の頭部(親水)基が水側に向くように配置し、単層膜界面を形成した(図 1)。分子数は、水を 600、脂質分子を 20 とした。20ns の平衡化後、スペクトル計算プログラム Calnos を用いて HD-VSFG スペクトルを計算した。

4. 研究成果

まず、氷表面構造の研究に関する成果を説明する。共同研究グループの実験により、200 K から 120 K の温度範囲で $\chi^{(2)}$ は温度減少と共に強度が増加し、この温度領域で氷表面構造は完全に凍結していないことを示唆する実験結果が

得られた。さらに 120 K 以下の温度で Free OH の応答がほぼ一定となる結果を得た。この実験に対する分子動力学(Molecular Dynamics, MD)シミュレーションを行うことにより、200 K から 120 K の温度範囲で生じる氷表面構造の詳細について以下の点が明らかになった。図 2 に、110 K から 170 K までの温度における氷最表面層(Basal 面)での酸素位置の瞬間的な配置を示す。理想的には、氷 Ih の basal 面の酸素は 6 員環(Membered-Ring, MR)構造を示すが、図 2 では温度上昇とともに、6 員環以外のトポロジー欠陥を生成する様子がわかる。110 K の温度ではトポロジー欠陥は見られないが、130 K になると 5 員環構造が見つかり、150 K、170 K の温度では 4 員環、7 員環、8 員環構造が徐々に増加してくることがわかる。これら環構造を定量的に見積もるために、各酸素から水素結合している酸素を辿ったとき、最も短い経路で最初の酸素にもどる際に通過した酸素数をカウントすることにより環構造を判定し、その分布を求めた。図 3 に結果を示す。120 K 以下の温度では、表面はほぼ 6 員環構造のみであるが、120 K から 200 K の温度範囲でトポロジー欠陥が増加する様子がわかる。

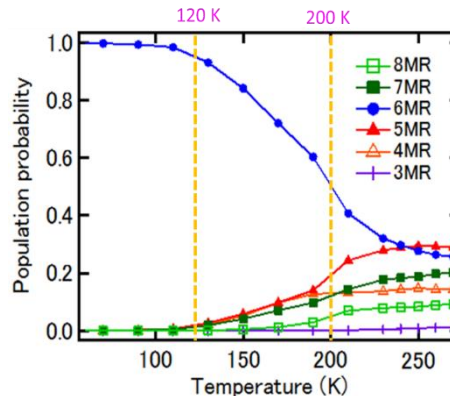


図 3. 各温度に対する氷最表面層 (Basal 面)における環構造の割合。

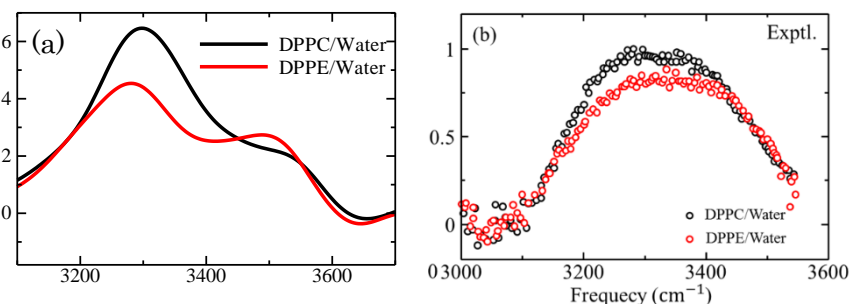


図 4. MD シミュレーション(a)と実験[3](b)による DPPC/水界面、DPPE/水界面の $\text{Im}\chi^{(2)}$ スペクトル

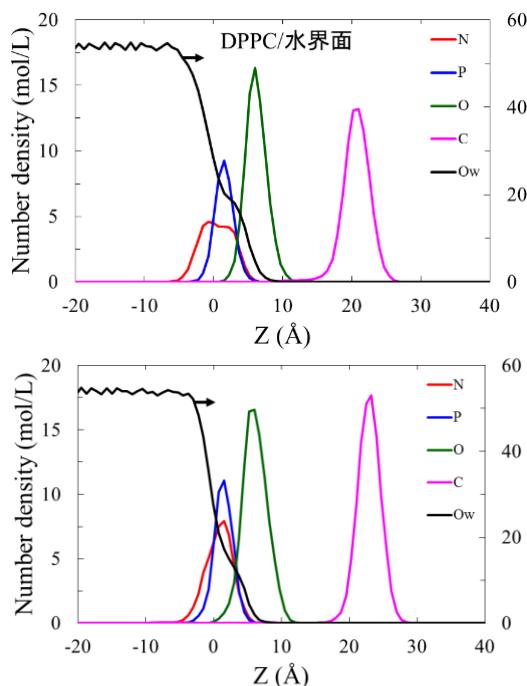


図 5. 界面における各サイト(原子)の密度分布。Ow は水の酸素、N はコリン基の窒素、P はリン酸基のリン、O はカルボニル基の酸素、C は側鎖末端メチルの炭素を表す。

次に、脂質膜界面の研究成果について述べる。図 1 に、DPPC/水界面、DPPE/水界面のスナップショットを示す。DPPC 膜分子の側鎖は比較的ランダムに配向しているが、一方で DPPE 膜分子の側鎖はパッキングし整列していることがわかる。これは、DPPC 膜ではコリン基が窒素まわりにメチル基を 3 つ有している構造のため立体障害が大きく密にパッキングしにくい、DPPE 膜ではアミノ基が比較的密にパッキングできることによると考えられる。実際、Area per lipid の値で比較すると、 $54.2 \text{ \AA}^2/\text{lipid}$ (DPPC)と $44.4 \text{ \AA}^2/\text{lipid}$ (DPPE)となり、DPPE がパッ

キングした構造をとることがわかる。次に、MD シミュレーションにより計算されたそれぞれの膜界面における水の HD-VSFG スペクトルを図 4(a)に示す。実験結果の図 4(b)と比べると、PE 膜で $\text{Im}\chi^{(2)}$ が弱くなる傾向が、実験と計算両方で見られることがわかる。この原因は、DPPE のパッキング効果によって説明できる。図 5 に、界面における代表的サイト(原子)の密度分布を示す。両者で主に異なるのは窒素の分布(赤線)であり、DPPE 膜ではマイナス電荷をもつリン酸基とプラス電荷をもつアミノ基の相互作用が比較的強くなるため、両者の分布が重なることがわかる。DPPC 膜ではリン酸基とコリン基による電気二重層に挟まれた水が図 4 の $\text{Im}\chi^{(2)}$ スペクトルを生成させることが我々の研究よりわかっているが、DPPE 膜ではリン酸基とアミノ基の相互作用により二重層の厚みが減少し、水の配向が弱くなることにより $\text{Im}\chi^{(2)}$ の正バンドが低下することがわかった。

【参考文献】

- [1] X. Wei, P. B. Miranda, C. Zhang and Y. R. Shen, Phys. Rev. B 66, 085401 (2002).
- [2] J. L. Abascal, E. Sanz, R. Garcia Fernandez and C. Vega, J. Chem. Phys. 122 (23), 234511 (2005).
- [3] X. Chen et al., J. Am. Chem. Soc, 132, 11336-11342 (2010)

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計17件（うち査読付論文 9件 / うち国際共著 1件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Sho Kishinaka, Akihiro Morita, and Tatsuya 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 44707
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/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 Toshiki Sugimoto, Yuji Otsuki, Tatsuya Ishiyama, Akihiro Morita, Kazuya Watanabe, and Yoshiyasu 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) https://doi.org/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 Kiyosuke Isoda, Tatsuya Ishiyama, Yuichiro Mutoh, and Daisuke 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 and 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 -
1. 著者名 Yasoshima Nobuhiro, Fukuoka Mizuki, Kitano Hiromi, Kagaya Shigehiro, Ishiyama Tatsuya, Gemmei-Ide Makoto	4. 巻 121
2. 論文標題 Diffusion-Controlled Recrystallization of Water Sorbed into Poly(meth)acrylates Revealed by Variable-Temperature Mid-Infrared Spectroscopy and Molecular Dynamics Simulation	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 5133 ~ 5141
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.7b01824	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 Wang Lin, Ishiyama Tatsuya, Morita Akihiro	4. 巻 121
2. 論文標題 Theoretical Investigation of C ₂ H Vibrational Spectroscopy. 1. Modeling of Methyl and Methylene Groups of Ethanol with Different Conformers	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 6687 ~ 6700
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.7b05320	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 Wang Lin, Ishiyama Tatsuya, Morita Akihiro	4. 巻 121
2. 論文標題 Theoretical Investigation of C ₂ H Vibrational Spectroscopy. 2. Unified Assignment Method of IR, Raman, and Sum Frequency Generation Spectra of Ethanol	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 6701 ~ 6712
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.7b05378	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 Y. Otsuki, T. Sugimoto, T. Ishiyama, A. Morita, K. Watanabe, and Y. Matsumoto	4. 巻 96
2. 論文標題 Unveiling Subsurface Hydrogen-Bond Structure of Hexagonal Water Ice	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Physical Reveiw B	6. 最初と最後の頁 115405(14pages)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.96.115405	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, T. Ishiyama, S. Nihonyanagi, A. Morita, and T. Tahara	4. 巻 20
2. 論文標題 Structure at the Air/Water Interface in the Presence of Phenol: A Study by Heterodyne-Detected Vibrational Sum Frequency Generation and Molecular Dynamics Simulation	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 3002-3009
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C7CP05150F	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 Ishiyama Tatsuya, Shirai Shinnosuke, Okumura Tomoaki, Morita Akihiro	4. 巻 148
2. 論文標題 Molecular dynamics study of structure and vibrational spectra at lipid/aqueous KCl, NaCl, and CaCl ₂ solution interfaces zwitterionic	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) https://doi.org/10.1063/1.5006543	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, L. Xin, T. Ishiyama, Q. Peng, S. Ye, and 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 1-12
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 K. Inoue, T. Ishiyama, S. Nihonyanagi, S. Yamaguchi, A. Morita, and T. Tahara	4. 巻 7
2. 論文標題 Efficient Spectral Diffusion at the Air/Water Interface Revealed by Femtosecond Time-Resolved Heterodyne-Detected Vibrational Sum Frequency Generation Spectroscopy	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 1811-1815
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcllett.6b00701	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. Kundu, S. Tanaka, T. Ishiyama, M. Ahmed, K. Inoue, S. Nihonyanagi, H. Sawai, S. Yamaguchi, A. Morita, and T. Tahara	4. 巻 7
2. 論文標題 Bend Vibration of Surface Water Investigated by Heterodyne-Detected Sum Frequency Generation and Theoretical Study: Dominant Role of Quadrupole	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 2597-2601
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcllett.6b00657	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. A. Sanchez , T. Kling , T. Ishiyama , M.-J. van Zadel , P. J Bisson , M. Mezger , M. N. Jochum , J. D. Cyran , W. J. Smit , H. J Bakker , M. J. Shultz , A. Morita , D. Donadio , Y. Nagata , M. Bonn and E. H. G. Backus	4. 巻 114
2. 論文標題 Experimental and Theoretical Evidence for Bilayer-by-Bilayer Surface Melting of Crystalline Ice	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America	6. 最初と最後の頁 227-232
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) www.pnas.org/lookup/suppl/doi:10.1073/pnas.1612893114/-/DCSupplemental	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 K. Saito, Q. Peng, L. Qiao, L. Wang, T. Joutsuka, T. Ishiyama, S. Ye, and A. Morita	4. 巻 19
2. 論文標題 Theoretical and Experimental Examination on SFG Polarization Analysis at Acetonitrile-Water Solution Surfaces	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 8941-8961
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C6CP08856B	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 and A. Morita	4. 巻 68
2. 論文標題 Computational Analysis of Vibrational Sum Frequency Generation Spectroscopy	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 The Annual Review of Physical Chemistry	6. 最初と最後の頁 1-22
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1146/annurev-physchem-052516-044806	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 Tatsuya Ishiyama and Akihiro 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 J. Phys. Chem. Lett.	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) https://doi.org/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 杉本敏樹, 石山達	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 -

〔学会発表〕 計48件 (うち招待講演 6件 / うち国際学会 10件)

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 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, 森田 明弘, 石山 達也
2. 発表標題 分子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 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 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 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 石山 達也
2. 発表標題 氷表面の分子構造は柔らかいか？
3. 学会等名 新学術領域「柔らかな分子系」第6回全体合宿会議
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 二本柳 聡史, 石山 達也
2. 発表標題 水界面の振動スペクトル応答：実験，理論サイドからの検討
3. 学会等名 新学術領域「柔らかな分子系」第6回全体合宿会議
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Tatsuya Ishiyama
2. 発表標題 Molecular dynamics simulation study of structure and vibrational spectroscopy at ice surface
3. 学会等名 Molecular Science of Ice (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 石山 達也, 森田 明弘
2. 発表標題 氷表面における環構造の温度依存性
3. 学会等名 第31回 分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 石山 達也, 大槻 友志, 杉本 敏樹, 森田 明弘, 渡邊 一也, 松本 吉泰
2. 発表標題 氷表面の分子動力学シミュレーション: フリーOH振動の 和周波発生スペクトル強度と表面環構造との関係について
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 Tatsuya Ishiyama
2. 発表標題 Molecular Dynamics Study of Structures and Vibrational Spectra at Aqueous Solution/Zwitterionic Lipid Interfaces
3. 学会等名 The 98th CSJ Annual Meeting, Asian International Symposium (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 八十島亘宏、加賀谷重浩、北野博巳、源明誠、石山達也
2. 発表標題 固体高分子中の中間水に関する分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 第63回高分子研究発表会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 八十島亘宏、源明誠、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固体高分子-水相互作用によって形成される水構造の解明
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 八十島亘宏、加賀谷重浩、源明誠、石山達也
2. 発表標題 固体高分子中の水構造と振動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66回高分子学会北陸支部研究発表会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 八十島亘宏、石山達也
2. 発表標題 固体高分子中で形成される水構造と振動スペクトルの解析
3. 学会等名 第31回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 岸中翔, 八十島亘宏, 森田明弘, 石山達也
2. 発表標題 アクリレート系高分子と水界面の分子動力学シミュレーション
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 岸中翔, 八十島亘宏, 森田明弘, 石山達也
2. 発表標題 アクリレートポリマー/水界面における水の水素結合構造
3. 学会等名 第31回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 吉田 俊将, 森田 明弘, 石山達也
2. 発表標題 アルコール膜/水溶液界面におけるイオン分布の解明
3. 学会等名 第31回分子シミュレーション研究会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 吉田 俊将, 森田 明弘, 石山達也
2. 発表標題 アルコール単分子膜/水溶液界面でのイオン分布
3. 学会等名 第31回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 寺田 大地、石山 達也、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双性イオンリン脂質膜近傍における水の水素結合構造と振動分光解析
3. 学会等名 第65回高分子学会年次大会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 福岡 瑞希、八十島 亘宏、加賀谷 重浩、北野 博巳、石山 達也、源明 誠
2. 発表標題 赤外分光法および分子動力学法を用いたポリアクリレート中の水の再結晶化挙動に関する研究
3. 学会等名 第65回高分子学会年次大会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 八十島 亘宏、福岡 瑞希、加賀谷 重浩、北野 博巳、源明 誠、石山 達也
2. 発表標題 固体高分子中の水の拡散挙動に関する分子動力学研究
3. 学会等名 第65回高分子学会年次大会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 石山 達也、森田 明弘
2. 発表標題 空気/水界面における二次元和周波スペクトルの分子動力学計算
3. 学会等名 第19回 理論化学討論会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 石山 達也
2. 発表標題 コンピューターシミュレーションで探る水界面の分子構造
3. 学会等名 イブニング技術交流サロン
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Tatsuya Ishiyama
2. 発表標題 Molecular structure and vibrational spectroscopic response of water at interfaces: A molecular dynamics study
3. 学会等名 第7回SFG研究会(国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Nobuhiro YASOSHIMA, Makoto GEMMEI-IDE, and Tatsuya ISHIYAMA
2. 発表標題 Molecular Dynamics Study on Diffusion Behavior of Water in Solid Polymer
3. 学会等名 第7回SFG研究会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 寺田 大地, 石山 達也, 森田 明弘
2. 発表標題 異なる双性イオン膜/水界面における水の水素結合構造比較
3. 学会等名 第10回分子科学討論会2016
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 杉本 敏樹, 大槻 友志, 石山 達也, 森田 明弘, 渡邊 一也, 松本 吉泰
2. 発表標題 和周波発生振動分光による結晶氷表面の水素結合構造の解明
3. 学会等名 第10回分子科学討論会2016
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 岩橋 崇, 石山 達也, 森田 明弘, Kim Doseok, 大内 幸雄
2. 発表標題 赤外-可視和周波発生振動分光法と分子動力学計算を用いたイオン液体/アルコール界面構造の研究
3. 学会等名 第10回分子科学討論会2016
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 八十島 亘宏、源明 誠、石山 達也
2. 発表標題 固体高分子中の水の再結晶化に関する分子動力学研究
3. 学会等名 第10回分子科学討論会2016
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 齋藤 健吾, 王 琳, 城塚 達也, 石山 達也, 彭 奇齡, 叶 深, 森田 明弘
2. 発表標題 水/アセトニトリル溶液の界面配向構造解析に関する理論的および実験的研究
3. 学会等名 第10回分子科学討論会2016
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 八十島 亘宏、源明 誠、石山 達也
2. 発表標題 固体高分子中の水の再結晶化現象に関する分子動力学研究
3. 学会等名 平成28年高分子学会北陸支部研究発表会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 八十島 亘宏、源明 誠、石山 達也
2. 発表標題 固体高分子中の水の再結晶化メカニズムに関する分子シミュレーション
3. 学会等名 平成28年度日本化学会北陸地区講演会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 寺田 大地、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双性イオン膜に接する水の水素結合構造比較
3. 学会等名 平成28年度日本化学会北陸地区講演会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 八十島 亘宏、源明 誠、石山 達也
2. 発表標題 固体高分子中における水の再結晶化メカニズムの解明
3. 学会等名 第30回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 石山達也
2. 発表標題 液体表面の分子シミュレーション手法の開発と展開
3. 学会等名 第30回分子シミュレーション討論会 (招待講演)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Tatsuya Ishiyama
2. 発表標題 Molecular dynamics simulation of time-resolved vibrational spectroscopy at air/water interface
3. 学会等名 The 4th International Conference on Molecular Simulation (ICMS-2016) (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Nobuhiro Yasoshima, Tatsuya Ishiyama
2. 発表標題 Molecular dynamics study onrecrystallization of water in solid polymer
3. 学会等名 The 4th International Conference on Molecular Simulation (ICMS-2016) (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Terada Daichi, Tatsuya Ishiyama
2. 発表標題 Hydrogen bonding structures ofwater near lipid andsurfactant monolayerinterfaces revealed bymolecular dynamics simulation
3. 学会等名 The 4th International Conference on Molecular Simulation (ICMS-2016) (国際学会)
4. 発表年 2016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, San Diego (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 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 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/Catanionic 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 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 分子構造と振動と周波スペクトルの 分子動力学シミュレーション (4/
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

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

富山大学理工学研究部 計算物理化学研究室 http://www3.u-toyama.ac.jp/comp/

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