

## 【基盤研究(S)】

### 大区分E



## 研究課題名 最も先進的な計測と理論の協奏による革新的界面研究の推進

理化学研究所・開拓研究本部・主任研究員 **たはら たいへい**  
**田原 太平**

研究課題番号：18H05265 研究者番号：60217164

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

### 【研究の背景・目的】

界面は広範な科学・技術の分野で重要な役割を果たしているにも関わらず、その分子レベルでの理解はあまり進んでいません。本研究では界面研究の実験と理論で独自の的方法論を開発してきた研究者が連携し、界面研究を強力に推進します。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・動的分子過程を明らかにし、それら界面現象の背景にある機構を解明して「界面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」を明らかにします。

### 【研究の方法】

位相制御した界面選択的非線形分光と分子動力学計算を有機的に用いて以下の3つを骨子とした研究を展開します。

#### (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す。中でも水素結合の動的挙動の解明は最も重要な液体である水の性質を理解するために本質的です。バルクの水の水素結合の揺らぎや組み替えなどの超高速ダイナミクスは精力的に研究されてきましたが、界面でのダイナミクスは分かっていません。位相制御した振動和周波発生分光のフェムト秒時間分解測定とそれを発展させた界面選択的二次元分光を用いてこれを解明します。

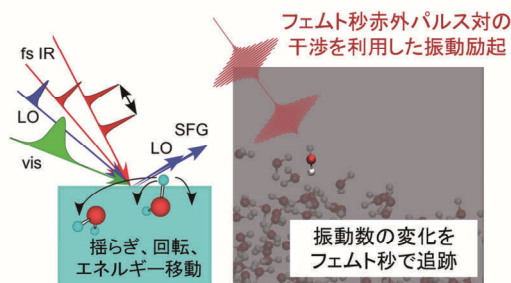


図1 液体界面の超高速振動ダイナミクスの観測

#### (2) 液体界面構造と界面分子の反応性の解明

液体界面での反応は溶液中の反応とは異なると考えられていますが、その実際は分かっていません。そこで、液体界面で溶質は如何に溶媒和され、それがどのように分子の反応性に影響し、結果として界

面反応が溶液反応とどう異なるのかを明らかにします。溶質の存在がどのように液体界面構造を変化させるのかを調べ、界面で進む反応過程を位相制御した界面選択的非線形分光で直接観測します。

#### (3) 埋もれた界面への展開と現実界面の解明

未踏領域である固/液などの“埋もれた界面”の構造を分子レベルで明らかにします。最も基本的な固/液界面であるシリカ/水などの酸化物/水界面を始めとして、実社会で広く利用されている電極界面などの現実界面における基礎過程を解明します。

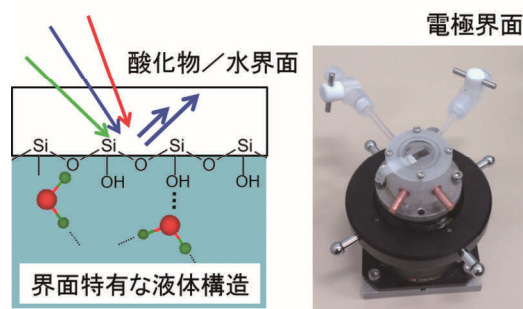


図2 埋もれた界面と現実界面の解明

### 【期待される成果と意義】

本研究で得られる知見は界面科学を飛躍的に進歩させるだけでなく、界面現象が大きな役割を果たす環境化学、電気化学、材料化学など広い範囲の科学・技術にそれらの基礎となる知的基盤を提供します。

### 【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- Nihonyanagi, S.; Yamaguchi, S.; Tahara, T. Ultrafast dynamics at water interfaces studied by vibrational sum-frequency generation. *Chem. Rev.* 2017, *117*, 10665-10693.
- Ishiyama, T.; Imamura, T.; Morita, A. Theoretical studies of structures and vibrational sum frequency generation spectra at aqueous interfaces. *Chem. Rev.* 2014, *114*, 8447-8470.

### 【研究期間と研究経費】

平成30年度-34年度  
148,400千円

### 【ホームページ等】

<https://spectroscopy.riken.jp/tahei@riken.jp>