

令和 4 年 5 月 24 日現在

機関番号：12501

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2019～2021

課題番号：19K05382

研究課題名(和文) 時間領域低振動数分光による分子間振動をプローブとしたイオン液体の特性の解明

研究課題名(英文) Understanding the nature of ionic liquid through intermolecular vibrations by time-domain vibrational spectroscopy

研究代表者

城田 秀明 (Shirota, Hideaki)

千葉大学・大学院理学研究院・准教授

研究者番号：00292780

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,300,000円

研究成果の概要(和文)：本研究の最大の成果は、フェムト秒ラマン誘起カー効果分光装置を使って、40種類の非芳香族カチオン系イオン液体の低振動数ラマンスペクトルの測定を行い、データ集的な論文を発表できたことである。これにより、2016年に報告した40種の芳香族カチオン系イオン液体の低振動数ラマンスペクトルのデータ集的な論文と併せることで、イオン液体の分子間振動に関して、構成イオンの影響や全般的な理解を世界に先駆けて進めることができた。また、イオン液体の低振動数スペクトルの温度依存性および分子液体とイオン液体の低振動数ラマンスペクトルについて、それぞれ総説として書籍の1章として発表した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究の大きな成果である40種の非芳香族系イオン液体の低振動数ラマンスペクトルの膨大なデータの報告は、世界的に初めてのものである。このような膨大なデータに基づいた俯瞰的な視点により、イオン液体の低振動数スペクトルについての分子レベルに基づいた理解が可能となった。よって、液体・溶液分野、物理化学分野、材料科学分野において重要な財産ともいえるものである。また、本研究期間において、イオン液体の低振動数スペクトルの温度依存性および分子液体とイオン液体の低振動数ラマンスペクトルについて、それぞれ総説として書籍の1章として発表できたことは、広く社会にその研究成果を還元できたと考える。

研究成果の概要(英文)：In this research project period, we successfully reported a collection of the low-frequency Raman spectra of 40 nonaromatic cation-based ionic liquids via femtosecond Raman-induced Kerr effect spectroscopy. In 2016, we reported a collection of the low-frequency Raman spectra of 40 aromatic cation-based ionic liquids supported by the previous research grant. Based on these collections of the low-frequency Raman spectra of ionic liquids, we addressed the overall picture of the intermolecular vibrations in ionic liquids, as well as the key roles of the constituent ion species. In addition, we published two book chapters as reviews of the temperature dependence of the low-frequency spectrum in ionic liquids and the low-frequency Raman spectra of molecular and ionic liquids in this project period.

研究分野：物理化学

キーワード：フェムト秒ラマン誘起カー効果分光 イオン液体 低振動数スペクトル 分子間振動 液体物性 溶液

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

近年、環境や安全性の点からイオン液体が注目されている。イオン液体は常温常圧下ではほぼ不揮発であり、有機物で構成されている場合でも引火しにくい。そのため、環境に優しく安全性が高い溶剤・電池材料として大変期待されている。基礎科学研究的な面においても、溶液中での透過電子顕微鏡測定（真空下）のニーズが最近増しつつあり、イオン液体の注目度が増している。

イオン液体とは室温で液体状態の塩のことであり、1914年にその存在が報告されたもののあまり研究されてこなかった。注目されるきっかけは1992年の大気下で安定なイオン液体の発明である（Wilkes & Zaworotko, *Chem. Commun.* **1992**, 2010）。特に2000年頃から活発に研究されるようになったルネサンス液体であり、応用を指向した研究が先行しているものの、基礎物理化学的な面で十分に理解されたとは言い難い状況である。

イオン液体は一般的に液体として分子間相互作用が強く、(NaClのような)塩よりは弱い。そのため微視的な分子間相互作用・運動は、通常の液体（または塩）とは異なると予想される。しかしながら、イオン液体の液体由来の多体効果や動的な影響を含む分子間相互作用・運動において、通常の分子液体と比べてどう異なるのか、特異性は構成イオンのどのような性質や構造（例えば芳香族と非芳香族の相違）によってもたらされるのか、といった本質的な問いに対して満足できる解はまだ得られていなかった。

液体の分子間振動は、微視的な構造・分子間相互作用が反映されるため、イオン液体の分子間振動を検討することは重要である。しかしながら、本研究課題を申請した当時（2018年10月）において、芳香族カチオン系イオン液体に関しては研究が進んでおり、報告者のグループからもフェムト秒ラマン誘起カー効果分光（fs Raman-induced Kerr effect spectroscopy: fs-RIKES）を使ってデータベース的な研究報告を2016年に行った（*Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2016**, 89, 1106）。一方で、非芳香族系イオン液体に関する報告は十分でなかった。また、イオン液体の低振動数スペクトルについて、ラマンスペクトルとテラヘルツ波吸収スペクトルにおける相違点については十分に理解が進んでいる状況ではなかった。

2. 研究の目的

本研究では、イオン液体の分子間振動測定を通して特徴的な分子間相互作用や運動性を分子レベルで理解する。将来的にその知見が材料設計・改質に活かされることで環境に優しい社会・産業発展に貢献できることを目指している。液体・溶液の分子間振動は多体的な効果を含む分子間相互作用・運動が強く反映されるため、その評価は液体の本質の理解に繋がる。イオン液体の分子間振動を直接実験的に評価し本質に迫る点が本研究の大きな特徴である。

上記の「研究開始当初の背景」で述べたように、芳香族カチオン系イオン液体については、低振動数領域の分子間振動に関する研究は進んできていたが、非芳香族カチオン系イオン液体については立ち遅れていた。そこで、本研究課題では非芳香族系イオン液体の低振動数領域の分子間振動に関して、特に研究を進めることを第一の目的とした。

一方で、液体の分子間振動が現れる低振動数領域の測定において、定常状態のラマン分光（分極応答）ではレイリー散乱の影響また遠赤外線分光（双極子応答）では検出器の感度（熱ノイズ）の問題があった。fs-RIKESやテラヘルツ時間領域分光（terahertz time domain spectroscopy: THz-TDS）は、フェムト秒光パルスを用いた時間領域ラマン散乱分光及びテラヘルツ波吸収分光であり、定常状態分光よりも低振動数側で感度良いスペクトルを得ることができる。報告者はfs-RIKESを自作している。これは現在稼働しているfs-RIKES装置として日本で唯一のものであり、世界的にも米国、英国などで10台程度しかない。最近市販されるようになった狭帯域ノッチフィルターを使った定常状態ラマン分光器では約 10 cm^{-1} 以上の領域の観測ができるが、 10 cm^{-1} 付近に分子間振動バンドのピークを示す液体は多く、分子間振動バンドの正確な評価にはfs-RIKESが適している。研究協力者の富永教授のグループでは、二種類の異なる帯域のTHz-TDS、遠赤外分光、誘電測定装置が設置され、世界的にも例がないほど広帯域（約20 MHz - 20 THz）の誘電スペクトルが得られる。液体・溶液の分子間振動スペクトルの報告数はあまり多くないが、多体的な効果を含む分子間相互作用の影響を含むため計算化学に必要な力場の高精度化に重要な指針となる。実は、イオン液体のみならず単純な分子液体でさえもその分極と双極子応答の両分子間振動スペクトルを実験的に提示することは、計算化学分野だけでなく計算化学を利用する材料化学、薬学等の分野にも恩恵を与えることが期待できる。

加えて、報告者はこれまでに新規イオン液体を開発してきた経験がある。合成技術・知識を活かして市販で入手できないイオン液体も合成できるため、サンプルについて構造の影響を系統的に検討することができ、市販で入手できない分光装置を用いた分子科学的研究に更なる独自性・付加価値を付与した研究を展開できる。本研究課題では、この点についても試みることにした。

3. 研究の方法

本研究を行う上で、以下の項目について研究を進めた。

(i) 分子間振動スペクトルの理解

報告者は本研究課題開始前に 40 種類の芳香族系イオン液体(*Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2016**, 89, 1106) や 40 種類の非プロトン性分子液体の低振動数領域のスペクトルを取得してきた(*Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2009**, 82, 1347)。本研究課題で非芳香族系イオン液体のデータを得て、これまでに測定した芳香族系イオン液体と比較することで、非芳香族系イオン液体のスペクトルの特徴を明確にすることを旨とし、さらに非プロトン性分子液体との比較からイオン液体の普遍的特徴を把握することを旨とした。そのために約 40 種というかなりの数の非芳香族系イオン液体の測定を行った。

(ii) 分子間振動バンドの振動周波数と液体バルク因子の関係

報告者はこれまでに非プロトン性分子液体について分子間振動バンドの平均振動数である一次モーメントと表面張力と密度の商の平方根との間に比例関係があることを見出した。この関係はこれらのミクロとマクロの物理量にスケール的な関係があることを示している。また、芳香族系イオン液体については分子液体や非芳香族系イオン液体よりもバルク物性値に関する感度が低くことを明らかにした(*ChemPhysChem* **2012**, 13, 1638)。しかしながら、非芳香族系イオン液体については 8 点のみで値も偏っており、相関を議論するにはデータ数が不足している。本研究で非芳香族系イオン液体のデータを増やすことにより、イオン液体において分子間振動特性周波数とバルク因子に関する網羅的な知見を獲得することを目指した。

(iii) RIKES と THz-TDS スペクトルの比較

計算化学への貢献を意識した液体の RIKES と THz-TDS のスペクトル自体も重要であるが、サンプルの構成成分の分子構造と光学的選択律を利用することで、より詳細な知見を得ることもできる。イオン液体はカチオンとアニオンを含む二成分系であるため、分子液体よりも複雑である。例えば分極率異方性と双極子の大きさが異なるイオンで構成されるイオン液体について、fs-RIKES と THz-TDS による分極と双極子応答という観測物理量の差異を利用した比較測定を行うことで、試料の構成成分ごとの詳細な知見が得られると期待できる。

この点に挑戦するため、研究協力者の神戸大学富永教授と太田特命准教授に THz-TDS による測定実験の協力を得た。一方で、実験データ(特に分子間振動の fs-RIKES と THz-TDS スペクトルの関係等)が予想と異なり、解釈が非常に困難となった。そこで、分子科学研究所石田助教に相談し、分子動力学シミュレーションによる計算を通じて、スペクトルの詳細な検討を行った。

(iv) イオン液体と分子液体の混合溶液の理解

本研究課題を提案当初は計画になかったが、イオン液体の微視的な構造・分子間相互作用を詳細に考える上で、イオン液体と分子液体の混合溶液にも研究を発展させた。イオン液体は不均一な構造をしているため、混合する分子液体の種類によって特徴ある相互作用することが予想される。そのため、メタノール、アセトニトリル、ジメチルスルホキシド、ポリエチレングリコール、ホルムアミド系液体と混合した 1-メチル-3-オクチルイミダゾリウムテトラフルオロボレートについても研究を進めた。尚、この研究については、佐賀大学高椋教授と共同して研究を進めた。

4. 研究成果

主な研究成果を以下に示す。

(1) 非芳香族系イオン液体の低振動数スペクトルのデータ集

本研究課題の最大の成果である。fs-RIKES で 40 種類の非芳香族カチオン型イオン液体の低振動数スペクトルの測定を行い、スペクトルデータ集としてまとめた(*Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2020**, 93, 1520)。溶液化学分野および物理化学分野における科学的財産になるものと信じている。尚、この発表論文は Selected Paper に選定された。より詳細な理解については次で述べる。

(2) 分子間振動バンドの振動周波数と液体バルク因子の関係と分子液体および芳香族カチオン系イオン液体との違い

上記のスペクトルデータを詳細に検討するため、40 種のイオン液体の液体物性(密度、粘度、表面張力、電導度)の測定を行った。表面張力と密度の商の平方根と低振動数スペクトルの一次モーメントの関係について、分子液体は芳香族分子液体と非芳香族分子液体に区別は見られなかったが、イオン液体については明確な違いが確認された。イオン液体では、芳香族カチオン系イオン液体の方が、非芳香族系イオン液体よりも不均一なミクロ相分離構造を取ることが知られており(Triolo, et al., *J. Chem. Phys.* **2009**, 130, 164521)、その違いが反映されている可能性がある。

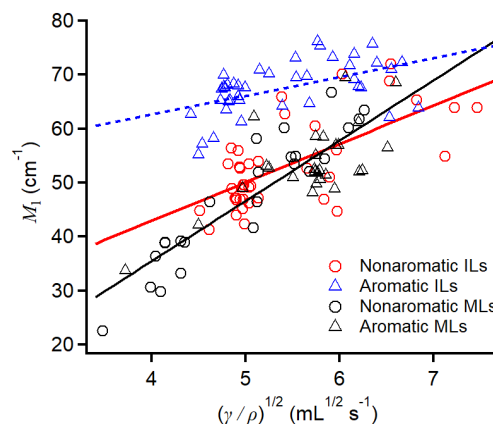
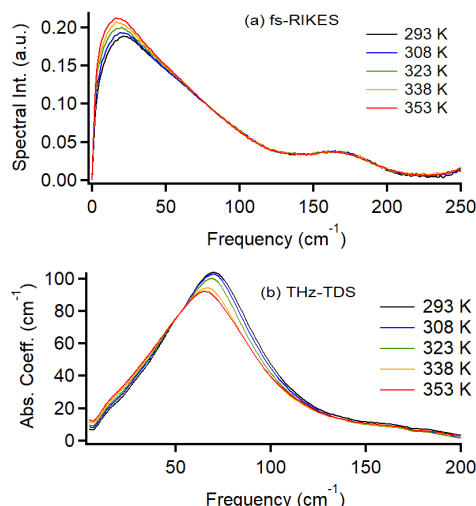


図 1. 分子液体とイオン液体 ILs の一次モーメント M_1 とバルク因子 $(\gamma/d)^{1/2}$ の関係。
Bull. Chem. Soc. Jpn. **2020**, 93, 1520.

(3) イオン液体の低振動数スペクトルにおける偏光解消ラマン (fs-RIKES) とテラヘルツ波吸収 (THz-TDS) の相違

当研究室で新規に合成した硫黄を含むホスホニウム型イオン液体について、fs-RIKES と THz-TDS による低振動数スペクトルの比較を行った。両者のスペクトルの形状は全く異なることが明らかになったが (図 2), なぜそのような違いが現れるのか、何に起因しているのか、ということが実験データからでは理解が困難であった。分子動力学シミュレーションの成分解析の結果から、fs-RIKES と THz-TDS の違いは主にイオンの運動のタイプ (前者は回転的な振動運動, 後者は並進的な振動運動) に起因していると結論した。この研究成果については、現在論文執筆中である。尚、THz-TDS によるスペクトルについては神戸大学富永教授と太田特命准教授に、分子動力学シミュレーションについては分子科学研究所石田助教に協力を得ることができ、本研究を行うことができた。



(4) イオン液体と分子液体の混合溶液

微視的な相分離構造をとるイオン液体について、分子液体とどのように混合するか、ということに焦点を当てて研究を進展させた。イオン液体については、不均一構造が比較的明確な 1-メチル-3-オクチルイミダゾリウムテトラフルオロボレートを選択し、まず、メタノール、アセトニトリル、ジメチルスルホキシドとの混合溶液について検討した。いずれの系についても分子液体のモル分率が 0 から 0.6 の範囲では、あまり分子間振動バンドの一次モーメントが変わらないことが明らかになった (*J. Phys. Chem. B* **2020**, *124*, 7857)。また、イオンの分子内振動と NMR による結果もこの描像と一致した結果が得られた (*J. Phys. Chem. B* **2021**, *125*, 13896)。一方で、より強い相互作用をするホルムアミド、*N*-メチルホルムアミド、*N,N*-ジメチルホルムアミドについて、1-メチル-3-オクチルイミダゾリウムテトラフルオロボレートとの混合溶液について調べると、三つの系において分子間振動スペクトルの一次モーメントの分子液体モル分率依存性が異なることが明らかとなった (現在、論文執筆中)。シンプルな分子液体だけでなく、ポリエチレングリコールとイオン液体の混合溶液についても検討を行い、ポリエチレングリコールの分子量は低振動数スペクトルに大きな影響を与えないことが明らかとなった (*J. Phys. Chem. B* **2021**, *125*, 12006)。尚、この研究項目の多くは佐賀大学高椋教授との共同研究による成果である。現在進行中のイオン液体 - 非極性溶媒の混合系については、アルゼンチン共和国オクアルト大学ファルコン助教との共同研究である。

図 2. トリエチルペンチルホスホニウムビス(フルオロスルホニル)アミドの (a) fs-RIKES と (b) THz-TDS のスペクトル

(5) 複雑凝縮相の低振動数スペクトルの理解

イオン液体の複雑凝縮相として、高分子溶液 (ポリスチレン/四塩化炭素) とリドカイン塩酸塩水溶液について fs-RIKES で低振動数スペクトルの測定を行い、それぞれのユニークな微視的描像を明らかにした。前者については、千葉大学森山准教授 (オリゴマーの合成) と共同して低振動数領域の分子運動は単量体から五量体程度まではスペクトル形状が変化したが、それ以上大きくなってもあまり変化しないことが分かった (*J. Phys. Chem. B* **2020**, *124*, 2006)。また、後者については、リドカイン分子が数分子単位で会合していることを信州大学佐藤教授 (X-線回折および光散乱) と共同してつきとめた (*J. Phys. Chem. B* **2022**, *126*, 1787)。それぞれ、高分子分野と薬学分野において新しい分子レベルの知見であると考えられる。また、水溶液中の芳香族化合物の低振動数スペクトルにおける電荷の影響についても検討を行い、正電荷と負電荷が芳香環の分子間振動に与えるスペクトルシフトが中性のものとは比べて逆に与えることが明らかとなった (*J. Phys. Chem. B* 印刷中)。

(6) イオン液体・液体の低振動数スペクトルのまとめ

本研究課題を含むこれまでの研究成果について、書籍の章としてまとめることができた。一つは "Intermolecular Vibrations in Aprotic Molecular Liquids and Ionic Liquids" in *Molecular Basics of Liquids and Liquid-Based Materials*, (Springer: Singapore) **2021**, 195-229 (Chapter 7), もう一つは "Temperature-Dependent Features in Low-Frequency Spectra of Ionic Liquids" in *Theoretical and Computational Approaches to Predicting Ionic Liquid Properties*, (Elsevier: Amsterdam) **2020**, 159-187 (Chapter 5) である。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計7件（うち査読付論文 7件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Hideaki Shirota, Masatoshi Ando, Shohei Kakinuma, Kotaro Takahashi	4. 巻 93
2. 論文標題 Ultrafast Dynamics in Nonaromatic Cation Based Ionic Liquids: A Femtosecond Raman-Induced Kerr Effect Spectroscopic Study	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Bull. Chem. Soc. Jpn.	6. 最初と最後の頁 1520-1539
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1246/bcsj.20200198	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 Masatoshi Ando, Masahiro Kawano, Atsuya Tashiro, Toshiyuki Takamuku, Hideaki Shirota	4. 巻 124
2. 論文標題 Low-Frequency Spectra of 1-Methyl-3-octylimidazolium Tetrafluoroborate Mixtures with Methanol, Acetonitrile, and Dimethyl Sulfoxide: A Combined Study of Femtosecond Raman-Induced Kerr Effect Spectroscopy and Molecular Dynamics Simulations	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 7857-7871
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1021/acs.jpcc.0c04870	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 Shirota Hideaki, Moriyama Katsuhiko	4. 巻 124
2. 論文標題 Low-Frequency Vibrational Motions of Polystyrene in Carbon Tetrachloride: Comparison with Model Monomer and Dependence on Concentration and Molecular Weight	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 2006-2016
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1021/acs.jpcc.9b10672	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 Masatoshi Ando, Hideaki Shirota	4. 巻 125
2. 論文標題 Low-Frequency Spectra of Methyl-3-octylimidazolium Tetrafluoroborate Mixtures with Poly(ethylene glycol) by Femtosecond Raman-Induced Kerr Effect 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 12006-12019
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1021/acs.jpcc.1c07079	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 Toshiyuki Takamuku, Atsuya Tashiro, Masahiro Kawano, Masatoshi Ando, Akira Ogawa, Koichiro Sadakane, Hiroki Iwase, Hideaki Shirota	4. 巻 125
2. 論文標題 Anion Effects on the Mixing States of Methyl-3-octylimidazolium Tetrafluoroborate and Bis(trifluoromethylsulfonyl)amide with Methanol, Acetonitrile, and Dimethyl Sulfoxide on the Meso- and Microscopic Scales	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 13896-13907
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.1c08001	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 Hideaki Shirota, Keiichi Yanase, Taiki Ogura, Takaaki Sato	4. 巻 126
2. 論文標題 Intermolecular Dynamics and Structure in Aqueous Lidocaine Hydrochloride 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 1787-1798
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.1c10504	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 Masako Shimizu, Hideaki Shirota	4. 巻 126
2. 論文標題 Intermolecular Dynamics of Positively and Negatively Charged Aromatics and Their Isoelectronic Neutral Analogs in Aqueous 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 印刷中
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 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25件(うち招待講演 7件/うち国際学会 7件)

1. 発表者名 彭越、ファルコンダリオルーベン、城田秀明
2. 発表標題 イオン液体とイオン液体 - アルカン混合溶液の粘度とガラス転移温度の比較
3. 学会等名 日本化学会第102春季年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 清水 亜子、城田 秀明
2. 発表標題 水溶液中の芳香族化合物の分子間振動の温度依存性：濃度による効果
3. 学会等名 日本化学会第102春季年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Masatoshi Ando, Yue Peng, Astuya Tashiro, Masahiro Kawano, Toshiyuki Takamuku, Hideaki Shirota
2. 発表標題 Effects of Formamides on Intermolecular Vibrations of 1-Methyl-3-octylimidazolium Tetrafluoroborate
3. 学会等名 日本化学会第102春季年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Masatoshi Ando, Kaoru Ohta, Tateki Ishida, Keisuke Tominaga, Hideaki Shirota
2. 発表標題 Low-Frequency Spectra of Phosphonium-Based Ionic Liquids Having Pentyl, Ethoxyethyl or 2-(Ethylthio)ethyl Group
3. 学会等名 16th Trombay Symposium on Radiation and Photochemistry (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 安藤 雅俊、彭越、田代 篤也、河野 雅大、高椋 利幸、城田 秀明
2. 発表標題 1-メチル-3-オクチルイミダゾリウムテトラフルオロボレート/ホルムアミド系分子液体混合系の低振動数スペクトル
3. 学会等名 第43回溶液化学シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 清水 亜子、城田 秀明
2. 発表標題 フェムト秒光カー効果分光による水溶液中の芳香族分子とイオンの分子間ダイナミクス
3. 学会等名 2021年度日本分光学会年次講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 清水 亜子、城田 秀明
2. 発表標題 水溶液中の芳香族化合物の分子間ダイナミクスに与える電荷の影響
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 安藤 雅俊、城田 秀明
2. 発表標題 1-メチル-3-オクチルイミダゾリウムテトラフルオロボレートの分子間振動におけるポリエチレングリコールの影響
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 Hideaki Shirota, Masatoshi Ando
2. 発表標題 Heavy Atom Substitution Effects on Liquid Properties of Ionic Liquids
3. 学会等名 XXII SINAQO (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 城田秀明、森山克彦
2. 発表標題 四塩化炭素中のポリスチレンの低振動数スペクトル：濃度依存性と分子量依存性
3. 学会等名 東京大学物性研究所短期研究会「ガラスおよび関連する複雑系の最先端研究」（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 安藤雅俊、城田秀明
2. 発表標題 1 メチル 3 オクチルイミダゾリウムテトラフルオロボレート 及びオクチルイミダゾールの分子間振動における ポリエチレングリコール 添加の影響
3. 学会等名 溶液化学研究会若手の会 オンラインシンポジウム
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 清水亜子、城田秀明
2. 発表標題 水溶液中における芳香族化合物の分子間振動：電荷の影響
3. 学会等名 日本化学会第101春季年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 CAO Mengjun、城田秀明
2. 発表標題 ライン - 水混合系の液体物性と低振動数スペクトル
3. 学会等名 日本化学会第101春季年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Hideaki Shirota
2. 発表標題 Intermolecular Vibrations of Room Temperature Ionic Liquids Studied by Femtosecond Raman-Induced Kerr Effect Spectroscopy
3. 学会等名 4th International Conference on Applied Physics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hideaki Shirota
2. 発表標題 Temperature Dependent Features of Low-Frequency Spectra of Ionic Liquids Studied by Femtosecond Raman-Induced Kerr Effect Spectroscopy
3. 学会等名 7th International Congress on Microscopy & Spectroscopy (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hideaki Shirota
2. 発表標題 Characterizations of novel ionic liquids based on phosphonium cations with (alkylthio)alkyl groups
3. 学会等名 EMLG-JMLG (European & Japanese Molecular Liquid Groups) Annual Meeting 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masatoshi Ando, Atsuya Tashiro, Toshiyuki Takamuku, Hideaki Shirota
2. 発表標題 Low-frequency spectra of 1-methyl-3-octylimidazolium tetrafluoroborate mixtures with methanol, acetonitrile, and dimethyl sulfoxide
3. 学会等名 EMLG-JMLG (European & Japanese Molecular Liquid Groups) Annual Meeting 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hideaki Shirota, Katsuhiko Moriyama
2. 発表標題 Ultrafast Dynamics of Polystyrene in CCl ₄ Studied by fs Raman-Induced Kerr Effect Spectroscopy
3. 学会等名 15th Trombay Symposium on Radiation & Photochemistry (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 安藤雅俊, 城田秀明
2. 発表標題 イオン液体の低振動数スペクトルにおける分子液体添加の影響
3. 学会等名 第9回CSJ化学フェスタ2019
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 城田秀明
2. 発表標題 フェムト秒ラマン誘起カー効果分光による液体・溶液の分子間振動に関する研究
3. 学会等名 第42回溶液化学シンポジウム (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 城田秀明, 川本裕之, 浅倉聡
2. 発表標題 フェムト秒ラマン誘起カー効果分光でみる水溶液中のヨウ素イオンの状態
3. 学会等名 第42回溶液化学シンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 安藤雅俊, 田代篤也, 高椋利幸, 城田秀明
2. 発表標題 1-メチル-3-オクチルイミダゾリウムテトラフルオロボレート-分子液体混合系の低振動数スペクトル: メタノール, アセトニトリル, ジメチルスルホキシドの比較
3. 学会等名 第42回溶液化学シンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 田代篤也, 安藤雅俊, 貞包浩一郎, 岩瀬祐希, 城田秀明, 高椋利幸
2. 発表標題 イミダゾリウム系イオン液体C8mimBF4と種々のアミド分子との微視的相互作用
3. 学会等名 第42回溶液化学シンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 城田秀明, 森山克彦
2. 発表標題 ポリスチレン溶液の低振動数スペクトルにおける濃度依存性と分子量依存性
3. 学会等名 日本化学会第100春季年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Masatoshi Ando, Hideaki Shirota
2. 発表標題 Physical Properties of Ionic Liquid-Poly(Ethylene Glycol) Mixtures: Comparing with a Neutral Analog of its Cation
3. 学会等名 日本化学会第100春季年会
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計2件

1. 著者名 Hideaki Shirota, Shohei Kakinuma	4. 発行年 2020年
2. 出版社 Elsevier	5. 総ページ数 29 (159-187)
3. 書名 "Temperature-Dependent Features in Low-Frequency Spectra of Ionic Liquids" (Chapter 5) in Theoretical and Computational Approaches to Predicting Ionic Liquid Properties	

1. 著者名 Hideaki Shirota	4. 発行年 2021年
2. 出版社 Springer	5. 総ページ数 35 (195-229)
3. 書名 "Intermolecular Vibrations in Aprotic Molecular Liquids and Ionic Liquids" (Chapter 7) in Molecular Basics of Liquids and Liquid-Based Materials	

〔産業財産権〕

〔その他〕

千葉大学 城田研究室 https://sites.google.com/view/shirota-lab/home-jpn 千葉大学大学院理学研究院化学研究部門 城田研究室 https://sites.google.com/view/shirota-lab/home-jpn
--

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
研究協力者	富永 圭介 (Tominaga Keisuke)	神戸大学 (14501)	

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
研究協力者	太田 薫 (Ohta Kaoru)	神戸大学 (14501)	
研究協力者	石田 干城 (Ishida Tateki)	分子科学研究所 (63903)	
研究協力者	高椋 利幸 (Takamuku Toshiyuki)	佐賀大学 (17201)	
研究協力者	森山 克彦 (Moriyama Katsuhiko)	千葉大学 (12501)	
研究協力者	佐藤 高彰 (Sato Takaaki)	信州大学 (13601)	
研究協力者	ファルコン ダリオルーベン (Falcone Ruben Dario)	リオカアルト国立大学	

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
---------	---------