

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 5 月 26 日現在

機関番号：11301

研究種目：基盤研究(A)

研究期間：2009～2013

課題番号：21245002

研究課題名(和文) 界面和周波分光の理論計算手法の開発と応用

研究課題名(英文) Theory and computational method of interfacial sum frequency generation spectroscopy

研究代表者

森田 明弘 (Morita, Akihiro)

東北大学・理学(系)研究科(研究院)・教授

研究者番号：70252418

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 21,500,000円、(間接経費) 6,450,000円

研究成果の概要(和文)：本研究代表者が世界に先駆けて提案した界面和周波発生分光の理論計算手法をさらに発展させて、最も精密で信頼性の高い理論解析手法の確立と実用化を進めた。和周波分光の理論を深化させて和周波発生過程の全貌を明らかにするとともに、分子モデリングやシミュレーション手法の開発をすすめて、水溶液表面や有機分子液体表面の和周波分光と構造解析を精密に明らかにした。

研究成果の概要(英文)：We have proposed the theory and computational methods of vibrational sum frequency generation spectroscopy. We further advanced the theory including quadrupole and local field effects, and applied the sophisticated theory and computation to various liquid interfaces, such as water, electrolyte aqueous solutions, and organic liquid surfaces. The detailed structure of interfaces have been revealed with the help of SFG theory and molecular dynamics simulation.

研究分野：化学

科研費の分科・細目：基礎科学・物理化学

キーワード：和周波発生分光 分子動力学シミュレーション 分子モデリング 電解質水溶液 界面

## 1. 研究開始当初の背景

1987年に初めてカリフォルニア大学のShenらによって可視赤外の界面和周波分光実験が報告されて以降、近年では界面構造解析に関する多くの研究者が利用可能な手法となってきた。しかしながら、現在和周波分光の進歩にとって直面する最大のボトルネックは、実験技術よりもむしろ、分子レベルでの信頼できる理論や解析手法の不足にあると考えられる。これまでの解析手法の進展としては、1990年代に和周波スペクトルと界面分子配向を関係づける理論的枠組みが提案され、現在でも広く採用されているが、しかしその中で、分子の超分極率の振動依存性、配向の分布や乱れ、界面局所電場の効果など、理論を構成する重要な要素が明らかでないために多分に理想化された仮定を含まざるをえない問題点があり、これは現実の実験条件に適用する上では避けられない障害となっていた。また実験スペクトルの解釈は、ほとんどの場合経験的なバンドフィッティングに基づいて行われているが、そのフィッティング自身の曖昧さや物理的根拠の乏しさのために、スペクトルの解釈にはしばしば混乱があり、界面構造解析手法としての信頼性を妨げる大きな要因となっていることは、当該分野の研究者にとって広く認識されている。

そこで申請者は、界面和周波分光を解析する新しい理論的方法論として、分子の電子状態に基づく分子モデリングと分子動力学シミュレーションによって、和周波スペクトルを分子モデルから直接非経験的に計算して解析する手法を、世界で初めて提案して実用化し、当該分野で大きな注目を集めた。分子シミュレーションで得られる界面構造と和周波スペクトルを直接比較することを可能とし、従来の経験的な解釈に付きまとっていた曖昧さを払拭する方法論として期待されている。この理論計算手法は、界面構造解析手法としての和周波分光の有用性を切り開く研究として、国際的な注目も高まっていた。

## 2. 研究の目的

界面和周波発生分光は、2次の非線形光学過程を利用して界面特有の振動スペクトルを敏感に捉えることのできる実験手法である。この手法は、界面分子一層がそれ以下での吸着量の感度を持ち、表面の分子種や局所的な環境、分子配向などについて豊富な情報を提供する。とりわけ界面選択性が反転対称性の破れに由来するため、原理的に真空条件を必要とせず、その特長を生かして液体や高分子表面、液液・固液界面のような埋もれた界面など、従来の表面科学にとって分子レベルの研究が比較的未開拓な界面への適用が特に注目されている。本研究は、申請者が世界に先駆けて提案した界面和周波分光の理論を深化させて和周波発生現象の全貌に対する精緻な理解を確立するとともに、分子

モデリングと分子シミュレーションに基づく非経験的な計算手法を開発し、和周波分光実験のもつ詳細な界面情報を精度良く引き出すことのできる実用的な理論と解析手法を確立することを目的としている。

## 3. 研究の方法

界面和周波分光の理論計算手法として、これまで申請者はエネルギー表示に基づく理論と時間依存表示の理論の2つを提唱し、それぞれ世界に先駆けて計算手法を実現してきた。両者は原理的にはほぼ等価であるが、前者の理論は比較的少ない計算コストで実験スペクトルを定性的に解釈するのに向いており、後者の理論は大規模計算によって精密で定量的な計算を実現するうえで有効である。本研究においては、後者の理論開発に重点をおき、国際的にも最も精密で信頼性の高い理論解析手法の確立と実用化を進めた。そのためには和周波分光計算を可能とする分子モデリングと大規模並列サンプリングによる分子動力学(MD)シミュレーションプログラムが必要であり、申請者のグループですでに開発が進展していた。

それらの方法論とプログラムを完成させ、有機薄膜や水溶液界面への広い応用研究を展開した。具体的な成果は、以下に述べるとおりである。

## 4. 研究成果

### (1) 界面和周波分光のための汎用分子モデリング開発

界面和周波分光の分子シミュレーションにおいては、分子振動かつ電子分極を取り入れた分子力場に加えて、界面全系の双極子ベクトルや分極率テンソルの揺らぎを精度良く計算することが不可欠である。それらの要請を統一的かつ系によらず汎用的に満足できる手法として、申請者が以前に開発したcharge response kernel (CRK)理論を界面和周波分光計算に応用する。この理論はab initio分子軌道法に基づいて電子分極の揺らぎを汎用的に表現でき、かつ用いる電子状態理論の精度に応じて計算精度を向上させることができる。我々は以前にCRKを密度汎関数法に基づいて実装し直し、分子の分極ゆらぎを与える上で実用的で十分に精度をもった分子モデルとなることを示した。本研究では、CRK理論の利点を生かして、電子分極ゆらぎに対する分子振動やコンフォメーション変化の依存性を実際に計算してモデルに取り込み、界面和周波分光の計算に対する汎用モデルとして完成させた。この分子モデルは、以下に述べるように有機薄膜や液液界面など今後の幅広い理論解析の展開において使用された。

### (2) アルキル鎖分子の和周波分光の解析

アルキル分子鎖のメチル基、メチレン基のC-H伸縮領域の和周波分光は、自己組織化膜

や Langmuir 膜など有機薄膜の構造解析において、今までに多く研究例が報告されてきた重要なターゲットである。和周波スペクトルは、界面アルキル鎖の配向角やその分布、gauche 配置の混入による乱れなど、有機薄膜の構造変化を敏感に反映することが知られており、信頼できる理論計算に基づく解析手法は実用的な意味も非常に大きい。有機薄膜中のアルキル鎖の構造解析手法の開発は、本研究の期間を通しての重要なテーマの一つであり、メチル基を含むメタノール界面を対象にして和周波分光実験の定量的な精密解析を行った。使用するメタノールの分子モデルでは、上の CRK 理論に基づいて分子間力や分極揺らぎを表現し、またメチル基の C-H 振動を MD において表現する分子内振動の力場として、フェルミ共鳴の効果も古典力学のなかで実効的にモデル化した分子モデルを開発した。

### (3) 硫酸エアロゾル界面の構造解析

申請者がこれまでに進めてきた電解質水溶液界面の構造解析の発展を生かして、硫酸水溶液界面の構造解析を行う。この系は大気化学で広く現れる硫酸エアロゾル上の不均質反応を解明する鍵として重要であるのみならず、水溶液の界面構造解析として非常にチャレンジングな対象である。イオンの完全解離を前提としてよい他の電解質塩とは異なり、硫酸における 2 段階の酸解離平衡は系の熱力学的条件に敏感に依存することが知られている。界面の局所的な環境における硫酸の解離平衡は、バルク中のそれとどの程度異なるのか明らかでなく、その解離平衡が界面構造と強く couple していることが考えられる。以前から硫酸水溶液界面の和周波スペクトルが O-H 伸縮領域で測定されていたが、近年産総研の宮前らの共同研究によって S-O 伸縮が測定され、実験的に新たな知見が加わった。これらの実験結果を我々の理論計算手法によって説明しうる条件を求め、硫酸エアロゾル界面での酸解離平衡と界面構造の関係を明らかにした。

### (4) 電解質水溶液の界面局所構造

電解質水溶液界面の局所構造は、本研究室によって和周波分光の詳細な解析を通じて研究されてきており、国際的にも評価が高い。界面でのイオン分布は、イオン種によって非常に多様であり、これまで本研究室では NaCl, NaI などの一価塩、HCl, HI などの強酸、H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> のようなイオン解離平衡との coupling のある系などについて、多様な界面構造と和周波スペクトルの関係が研究されてきた。その多様性をさらに明らかにするため、SO<sub>4</sub><sup>2-</sup> のような二価アニオンを含む塩 (Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> など) や、OH<sup>-</sup> のふるまいを検討した。たとえば Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> の水溶液では、アニオン・カチオンともに表面から遠ざかって埋もれた構造をとり、明確な電気二重層を形成しな

いことがシミュレーションで示されるにもかかわらず、水の強い配向を示唆すると考えられる和周波スペクトルの強度増大が著しく、その理由を解明した。また OH<sup>-</sup> を含む塩基性水溶液の SFG スペクトルの解析により、OH<sup>-</sup> は表面に現れない証拠となっていることを示した。

### (5) 液液界面への展開

液液界面の分子レベルでの構造解析は、和周波分光のユニークな特長が特に発揮できる大きな研究分野である。申請者によって開発されてきた和周波分光の理論計算手法は、液液界面の系にそのまま適用することが可能であり、そこで本研究期間では典型的な液液界面を例にとって和周波分光解析への応用を行った。そこでまず、水/四塩化炭素界面や水/ジクロロエタン界面をモデル系として詳細な分子シミュレーションの解析を行い、水の O-H 伸縮領域のスペクトルへの振動と液液界面構造の関係を明らかにした。SFG スペクトルの大きな違いは、水の配向構造の違いでなく、水と有機溶媒の局所的な相互作用の違いによることを明らかにした。

### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 34 件)

1. "Theory and Efficient Computation of Differential Vibrational Spectra", S. Sakaguchi, T. Ishiyama, A. Morita, *J. Chem. Phys.*, **140**, 144109 (13 pages) (2014). 査読有 DOI: 10.1021/cr4004133.
2. "Theoretical Studies of Structures and Vibrational Sum Frequency Generation Spectra at Aqueous Interfaces", T. Ishiyama, T. Imamura, A. Morita, *Chem. Rev.* in press (2014). 査読有 DOI: 10.1063/1.4870523
3. "Molecular Dynamics Study of Water Transfer at Supercooled Sulfuric Acid Solution Surface Covered with Butanol", S. Sakaguchi, A. Morita, *J. Phys. Chem. A*, **117**, 4602-4610 (2013). 査読有 DOI: 10.1021/jp310305a
4. "Computational Analysis of the Quadrupole Contribution in the Second-Harmonic Generation Spectroscopy for the Water/Vapor Interface", K. Shiratori, S. Yamaguchi, T. Tahara, A. Morita, *J. Chem. Phys.*, **138**, 064704 (8 pages) (2013). 査読有 DOI: 10.1063/1.4802916
5. "Origin of Vibrational Spectroscopic Response at Ice Surface", T. Ishiyama, H. Takahashi, A. Morita, *J. Phys. Chem. Lett.*, **3**, 3001-3006 (2012). 査読

- 有 DOI: 10.1021/jz3012723
6. "Theory of Quadrupole Contributions from Interface and Bulk in Second-Order Optical Processes", K. Shiratori, A. Morita, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **85**, 1061-1076 (2012). 査読有 DOI: 10.1246/bcsj.20120167
  7. "Interfacial Structures and Vibrational Spectra at Liquid/Liquid Boundaries: Molecular Dynamics Study of Water/Carbon Tetrachloride and Water/1,2-Dichloroethane Interfaces", T. Ishiyama, Y. Sato, A. Morita, *J. Phys. Chem. C*, **116**, 21439-21446 (2012). 査読有 DOI: 10.1021/jp3073365
  8. "Molecular Dynamics Simulations of Surface-Specific Bonding of the Hydrogen Network of Water: A Solution to the Low Sum-Frequency Spectra", T. Ishiyama, H. Takahashi, A. Morita, *Phys. Rev. B*, **86**, 035408 (10 pages) (2012). 査読有 DOI: 10.1103/PhysRevB.86.035408
  9. "Mechanisms of Sum Frequency Generation from Liquid Benzene: Symmetry Breaking at Interface and Bulk Contribution", T. Kawaguchi, K. Shiratori, Y. Henmi, T. Ishiyama, A. Morita, *J. Phys. Chem. C*, **116**, 13169-13182 (2012). 査読有 DOI: 10.1021/jp302684q
  10. "Surface Structures of NaF and Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> Aqueous Solutions: Specific Effects of Hard Ions on Surface Vibrational Spectra", T. Imamura, Y. Mizukoshi, T. Ishiyama, A. Morita, *J. Phys. Chem. C*, **116**, 11082-11090 (2012). 査読有 DOI: 10.1021/jp3019777
  11. "Vibrational Spectrum at Water Surface: A Hybrid Quantum Mechanics/Molecular Dynamics Approach", T. Ishiyama, H. Takahashi, A. Morita, *J. Phys.: Condens. Matter*, **24**, 124107 (7 pages) (2012). 査読有 DOI: 10.1088/0953-8984/24/12/124107
  12. "Nonlinear Vibrational Spectroscopic Studies on the Ionic Liquid([C<sub>n</sub>mim]TFSA (n=4,8))/Water Interfaces", T. Iwahashi, Y. Sakai, D. Kim, T. Ishiyama, A. Morita, Y. Ouchi, *Faraday Discuss.*, **154**, 289-301 (2012). 査読有 DOI: 10.1039/c1fd00061f
  13. "Surface Structure of Sulfuric Acid Solution Relevant to Sulfate Aerosol: Molecular Dynamics Simulation Combined with Sum Frequency Generation Measurement", T. Ishiyama, A. Morita, T. Miyamae, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **13**, 20965-20973 (2011). 査読有 DOI: 10.1039/c1cp21920k
  14. "Unified Molecular View of Air/Water Interface Based on Experimental and Theoretical  $\chi^{(2)}$  Spectra of Isotopically Diluted Water Surface", S. Nihonyanagi, T. Ishiyama, T. Lee, S. Yamaguchi, M. Bonn, A. Morita, T. Tahara, *J. Am. Chem. Soc.*, **133**, 16875-16880 (2011). 査読有 DOI: 10.1021/ja2053754
  15. "Molecular Dynamics Simulation of Sum Frequency Generation Spectra of Aqueous Sulfuric Acid Solution", T. Ishiyama, A. Morita, *J. Phys. Chem. C*, **115**, 13704-13716 (2011). 査読有 DOI: 10.1021/jp200269k
  16. "Molecular Theory on Dielectric Constant at Interfaces: A Molecular Dynamics Study of the Water/Vapor Interface", K. Shiratori, A. Morita, *J. Chem. Phys.*, **134**, 234705 (10 pages) (2011). 査読有 DOI: 10.1063/1.3598484
  17. "Electric Quadrupole Contribution to the Nonresonant Background of Sum Frequency Generation at Air/Liquid Interfaces", S. Yamaguchi, K. Shiratori, A. Morita, T. Tahara, *J. Chem. Phys.*, **134**, 184705 (7 pages) (2011). 査読有 DOI: 10.1063/1.3586811
  18. "Molecular Dynamics Simulation of Liquid Methanol. II. Unified Assignment of Infrared, Raman, and Sum Frequency Generation Vibrational Spectra in Methyl C-H Stretching Region", T. Ishiyama, V. V. Sokolov, A. Morita, *J. Chem. Phys.*, **134**, 024510 (11 pages) (2011). 査読有 DOI: 10.1063/1.3514146
  19. "Molecular Dynamics Simulation of Liquid Methanol. I. Molecular Modeling including C-H Vibration and Fermi Resonance", T. Ishiyama, V. V. Sokolov, A. Morita, *J. Chem. Phys.*, **134**, 024509 (18 pages) (2011). 査読有 DOI: 10.1063/1.3514139
  20. "'Half Hydration' at the Air/Water Interface Revealed by HD-ESFG Spectroscopy, Polarization SHG, and MD Simulation", H. Watanabe, S. Yamaguchi, S. Sen, A. Morita, T. Tahara, *J. Chem. Phys.*, **132**, 144701 (9 pages) (2010). 査読有 DOI: 10.1063/1.3372620
  21. "Analysis of Anisotropic Local Field in Sum Frequency Generation Spectroscopy with the Charge

- Response Kernel Water Model", T. Ishiyama, A. Morita, J. Chem. Phys., **131**, 244714 (17 pages) (2009). 査読有 DOI: 10.1063/1.3279126
22. "Vibrational Spectroscopic Response of Intermolecular Orientational Correlation at the Water Surface", T. Ishiyama, A. Morita, J. Phys. Chem. C, **113**, 16299-16302 (2009). 査読有 DOI: 10.1021/jp9060957
  23. "水の界面でイオンの織りなす構造 --- 大気化学からホフマイスター系列まで" 森田 明弘, 化学, 64 (12月号), 68-69 (2009). 査読無
- [学会発表](計 154 件)
1. 森田 明弘, 溶液界面の計算分子科学と分光学, CMSI/TCCI 研究会「分子集合系における先端分析と大規模計算 ~ 高度水利用に資するスマート分離技術の基盤構築を目指して ~」, ウィズビジネスセンター, 東京, 2014. 3. 20.
  2. A. Morita, Molecular Science for Liquid Interfaces, 5th JCS International Symposium on Theoretical Chemistry, Todai-ji Temple Comprehensive Cultural Center, Nara, Japan, Dec. 3, 2013.
  3. A. Morita, Molecular Simulation for Liquid Interfaces, 3rd International Conference on Molecular Simulation, Kobe International Conference Center, Kobe, Japan, Nov. 18, 2013.
  4. A. Morita, Theory and Simulation of Aqueous Interfaces and their Spectroscopy, 246th ACS National Meeting, Symposium on "Theory and Experiment on Water and Hydration," Indianapolis, Indiana Convention Center, Indianapolis, IN, Sep. 9, 2013.
  5. A. Morita, Theory and Computational Analysis of Sum Frequency Generation Spectroscopy of Liquid Interfaces, CECAM Workshop "Liquid/Solid Interfaces: Structure and Dynamics from Spectroscopy and Simulations," CECAM-HQ-EPFL, Lausanne, Switzerland, June 24, 2013.
  6. 森田 明弘, 分子シミュレーションによる溶液界面化学の新展開, 分子研シンポジウム 2013, 分子科学研究所, 岡崎, 2013. 5. 31.
  7. 森田 明弘, 柔らかな界面の構造と機能の理論解析, シンポジウム「複雑系のための分子科学 複雑さと柔らかさ」, 日本化学会第 93 春季年会, フォレストハウス, 草津, 2013. 3. 22.
  8. 森田 明弘, 界面和周波分光の理論と解析手法の新展開, 日本表面科学会学術講演会「電極表面科学の深化と進化を目指す計測と理論の新展開」, 東北大学片平キャンパスさくらホール, 仙台, 2012. 11. 22.
  9. 森田 明弘, 界面和周波発生分光の理論の開発と液体界面への応用, 平成 24 年度化学系学協会東北大会, 秋田大学手形キャンパス, 秋田, 2012. 9. 15.
  10. A. Morita, Computational analysis of sum frequency generation spectroscopy, University of Akron, Akron, OH, USA, Aug. 24, 2012.
  11. A. Morita, Mechanisms of Sum Frequency Generation from Liquid Benzene: Symmetry Breaking at Interface and Bulk Contribution, ACS National Meeting, Symposium on "Recent Advances in Studies of Molecular Processes at Liquid Interfaces", Phidaldephia Conbention Center, Phidaldephia, PA, USA, Aug. 20, 2012.
  12. A. Morita, Computational analysis of SFG spectroscopy and application to liquid interfaces, Pacific Northwest National Laboratory, Richland, WA, USA, Jun. 22, 2012.
  13. A. Morita, Analysis of SFG Spectra of Organic Liquid Surfaces, Telluride Science Research Conference on Nonlinear Optics at Interfaces, Telluride Intermediate School, Telluride, CO, USA, Jun. 20, 2012.
  14. A. Morita, Unified view of  $\chi^{(2)}$  of liquid water studied by MD and SFG spectroscopy, ACS National Meeting, Symposium on "Atmospheric and Geochemical Interfaces", San Diego, Convention Center, San Diego, CA, USA, Mar. 25, 2012.
  15. 森田 明弘, 界面非線形分光の実験と計算化学による溶液界面研究の進展, 第 25 期 C A M M フォーラム 本例会, 参道「アイビーホール」, 東京, 2012. 2. 3.
  16. 森田 明弘, 界面分光の理論と実験—協力体制が拓く界面化学、分子研研究会「実験と理論による高次分子システムの機能発現の分子論的理解」, 分子科学研究所, 岡崎, 2011. 11. 1.
  17. 森田 明弘, 液体界面での計算分子科学の新展開, 多元研ミニシンポジウム「第一原理計算化学の最前線」, 東北大学片平キャンパス, 仙台, 2011. 9. 30.
  18. A. Morita, Theory and Computation of Surface Nonlinear Spectroscopy and Structure of Water Surface, 14th Korea-Japan Joint Symposium on Frontiers of Molecular Science "New Visions for Spectroscopy and Computation: Temporal and Spatial

- Adventures of Molecular Sciences", Haeundae Grand\_Hotel Busan, Korea, Jul. 6, 2011.
19. A. Morita, Theory and Computation of Sum Frequency Generation Spectroscopy, Telluride Science Research Conference on Chemistry and Dynamics in Complex Environments, Telluride Intermediate School, Telluride, CO, USA, June 30, 2011.
  20. A. Morita, T. Ishiyama and K. Shiratori, Computer Simulation of Surface Nonlinear Spectroscopy, International Conference on Computational Science 2011, "Large Scale Computational Molecular Science", Nanyang Executive Centre, Singapore, Jun. 2, 2011.
  21. A. Morita, Theory of sum frequency generation spectroscopy and application to liquid surfaces, CECAM Workshop on Vibrational Spectroscopy of Complex Systems, Ecole Normale Supérieure - Chemistry Department, Paris, France, May 25, 2011.
  22. 森田 明弘、界面分光の理論と実験—協力体制が拓く界面化学、第 91 回日本化学会春季年会「先端ウオッチング：高次実在分子システムのための分子科学：実験と理論による機能発現の分子論的理解」、神奈川大学横浜キャンパス、横浜、2011. 3. 27.
  23. A. Morita and T. Ishiyama, Computational analysis of nonlinear spectroscopy at water surface, Pacificchem 2010, Symposium "Molecular Dynamics in Complex Environments: Theory and Experiments", Sheraton Waikiki, Honolulu, Hawaii, USA, Dec. 18, 2010.
  24. A. Morita, Theoretical Analysis on the Phase of Nonlinear Susceptibility at Water Surface, Telluride Science Research Conference on Nonlinear Optics at Interfaces, Telluride Science Research Center, Telluride, CO, USA, Jun. 21, 2010.
  25. 森田 明弘、界面非線形分光の分子シミュレーション計算手法の開発、スーパーコンピューターワークショップ 2010、岡崎、2010. 1. 13-14.
  26. A. Morita, Development of Theory on Surface Nonlinear Spectroscopy and Application to Liquid Interfaces, International Symposium on Molecular Theory for Real Systems, 京都大学福井謙一記念研究センター Kyoto, Japan, Jan. 7, 2010.
  27. A. Morita, Theoretical Phase Analysis of Nonlinear Susceptibility for Water Surface, Mini-Workshop on Liquid Surfaces, Korea Sogang University, Seoul, Korea, Dec. 3, 2009.
  28. 森田 明弘、実験と理論の連携による溶液界面の分子科学、第 32 回溶液化学シンポジウム、朱鷺メッセ、新潟、2009. 11.18.
  29. 森田 明弘、分子シミュレーションで解明する液体界面と非線形分光、日本コンピュータ化学会 2009 秋季大会、東北大学青葉山キャンパス 青葉記念会館、仙台、2009. 11. 13.
  30. A. Morita, Structure of aqueous interfaces studied by MD analysis of SFG spectroscopy, Telluride Science Research Conference on Chemistry and Dynamics in Complex Environments, Telluride Science Research Center, Telluride, CO, USA, Jun. 23, 2009.
  31. A. Morita, Computational Analysis of Sum Frequency Generation Spectroscopy and Aqueous Surfaces, 13th International Conference on Surface and Colloid Science, Columbia University, New York, NY, USA. Jun. 16, 2009.
- 〔図書〕(計 2 件)
1. 森田 明弘 他、化学同人、「巨大分子系の計算化学」CSJ カレントレビュー・シリーズ第 8 巻第 14 章、「液体界面の分子の状態」2012、140-146 ページ
  2. 森田 明弘 他、東京化学同人、大学院講義物理化学(第 2 版)第 巻第 6 章、「溶液反応の速度論」、2011、146-177 ページ
- 〔その他〕  
ホームページ  
<http://comp.chem.tohoku.ac.jp/>
6. 研究組織
- (1) 研究代表者  
森田 明弘(MORITA, Akihiro)  
東北大学・大学院理学研究科・教授  
研究者番号：70252418
  - (2) 連携研究者  
石山 達也 (ISHIYAMA, Tatsuya)  
東北大学・大学院理学研究科・助教  
研究者番号：10421364
  - (3) 連携研究者  
白鳥 和矢 (SHIRATORI, Kazuya)  
東北大学・大学院理学研究科・COE フェロ  
—  
研究者番号：10507908