



森田グループの吉川信明君が分子シミュレーション討論会学生優秀発表賞とポーラログラフィーおよび電気分析化学討論会ポスター賞を受賞

森田 明弘（東北大院理・A01 計画研究代表者）

本領域 A01 班の森田グループの吉川信明君（DC2、学振特別研究員）が、本年度の 11 月に第 28 回分子シミュレーション討論会の学生優秀発表賞、および第 60 回ポーラログラフィーおよび電気分析化学討論会のポスター賞を続けて受賞しました。研究テーマはいずれも、分子シミュレーションによる液体界面のイオン輸送の解析で、ことに後者は最高得票での受賞と伺っています。今回の一連の受賞をお祝いするとともに、この研究内容についてご紹介いたします。

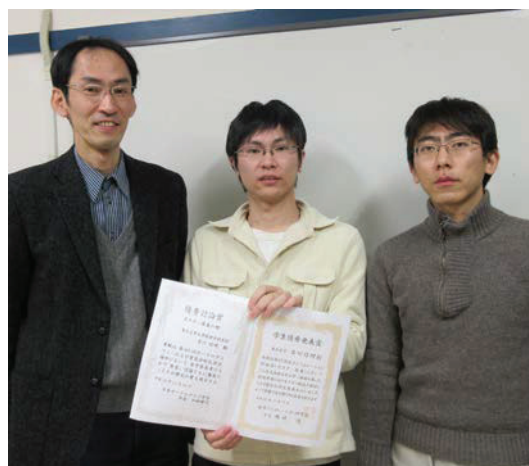
液液界面をイオンが輸送する現象は、抽出や膜分離、相間移動触媒などを含めて、多くの分野で非常に重要な現象です。界面化学、分析化学、電気化学などで基礎的なテーマともいえますが、しかしこれまであまり分子科学の研究対象とはみなされてきませんでした。界面透過を選択的に測定することが大変難しいため、イオンの界面透過に活性化障壁が存在するののかも、いまだに見解が統一されていません。このような状況は、界面を通過する際の詳細な分子の振る舞いや動力学を測定する手法がほとんどなかったためであると考えられ、そのため分子シミュレーションによる解明がとくに期待されます。吉川君の研究は、その意味で新しい視点を与えたものであると評価されました。

イオンが水と有機溶媒の界面を通過する際には、イオンが油相に入ってもしばらくは水界面から水を引き連れて、“water finger”と呼ばれる大きなゆらぎ構造をつくるのが、1990 年代に Benjamin による MD 計算で発見（予想）されました。このような柔らかなゆらぎ構造を実験的に観測することは、いまだに難しい問題であると思います。このような柔らかいゆらぎ構造は、イオンの輸送など界面の機能とも関係があるのではないかと、以前から示唆されていました。2000 年には電子移動反応の理論で有名な Marcus もこの問題に取り組み、液液界面の構造ゆらぎの影響に対する定性的な理論を与えております。それらの発展をふまえて吉川君は、water finger の形成・切断を記述する自然な反応座標を定義し、water finger の形成・切断に伴って自由エネルギーの活性化障壁が存在することを、初めて分子シミュレーションによって示すことに

成功しました。このような研究は、イオンの界面輸送を分子レベルで明らかにする道筋をつくるものとして、先駆的な意味をもっていると思います。

今回の受賞で特筆することとしては、分子シミュレーションのコミュニティのみならず、これまであまりつながりの強くなかった電気分析化学のような他分野で高く評価されたことと思います。我々の属する分子科学という分野は、原子・分子を精密に扱う点において強みがあり、今後この分子科学の強みを生かして他分野に拡大していくことが求められています。常々田原領域代表も、今後の分子科学の発展にとって研究対象を拓げていくことの重要性を指摘されていますが、本新学術領域の理念とも合致していると思います。

もう一つの特徴は、今回の研究は吉川君が研究の当初の萌芽的な段階から進めてきたことで、独自のプログラム開発がなされてきました。分子シミュレーションの計算手法としても、かなり高度な内容を含んでいます。森田グループの研究では、これまで界面和周波発生理論が知られていますが、それとは違った研究も実を結びつつあることが感じられます。



2つの賞状をもった吉川信明君（中央）。左は指導教員の森田明弘教授、右は共同研究者の王聴鏡君（M2）。