



A01 班森田 G 城塚達也さんらの論文がカナダのリサーチ会社 Advances in Engineering の注目論文として紹介されました

森田 明弘（東北大理・A01 計画研究代表者）

A01 班森田グループの研究分担者で、現在茨城大学工学部の城塚達也助教を筆頭とする我々の論文が、カナダのリサーチ会社 Advances in Engineering (AIE) 社の featured article として紹介されました。

<https://advanceseng.com/third-order-susceptibility-sum-frequency-generation-spectra-molecular-dynamics/>

AIE 社は、主要な学術雑誌に掲載された工学系論文の中から特に重要と認めた研究を自社のホームページで紹介しています。このたび取り上げられたのは、以下の論文です。

論文題目: "Effect of Third-Order Susceptibility in Sum Frequency Generation Spectroscopy: Molecular Dynamics Study in Liquid Water"

著者: T. Joutsuka, T. Hirano, M. Sprik, and A. Morita*

雑誌巻号: *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2018**, *20*, 3040–3053.

本論文は新学術領域特集号"Complex molecular systems: supramolecules, biomolecules and interfaces" に含まれ、その内容は以前のニュースレターNo. 54 でも紹介いたしました。当時 PCCP の Hot Article にも選ばれましたが、その後学会でも波及効果が注目される成果となっています。

本論文は荷電した界面での和周波発生 (SFG) 分光において、界面で発生する電場による SFG スペクトルへの寄与($\chi^{(3)}$ 効果)を分子動力学シミュレーションによ

り計算し、その意義を定量的に明らかにしました。荷電した界面は電気化学での電極・溶液界面や界面活性剤の Langmuir 膜、鉍物-水界面など広く見られ、 $\chi^{(3)}$ 効果は電気化学における拡散層からの SFG シグナルを明らかにするうえでも重要です。近年では SFG 分光の応用の発展に伴って荷電した界面への応用も広がっており、本論文は荷電界面での SFG の解析にとって基礎となる意義を確立しています。SFG の $\chi^{(3)}$ 効果を扱う研究では、その後実験・理論によらず常に参照される仕事となっています。

本論文を契機にして、我々や UC San Diego の F. Paesani らの理論グループと Ohio State University の H. Allen らの実験グループとの共同研究 [1]も行われました。大気中の海塩粒子の表面反応の解明を目指して、パルチミン酸単分子層と水溶液の界面の SFG 分光を検討し、拡散層からの $\chi^{(3)}$ 効果を取り入れた解析を可能としました。さらにその後、城塚らは電解質を加えたときの $\chi^{(3)}$ 効果を包括的に計算し、電解質の濃度が約 0.1 M 以上になると、 $\chi^{(3)}$ の振幅自体が減少していくことも明らかにしました [2]。電解質水溶液中の SFG 分光の定量的な理解にとって、今後基礎となる成果です。

引用文献

[1] S. K. Reddy et al. *Chem* **2018**, *4*, 1629.

[2] T. Joutsuka et al. *J. Phys. Chem. C* **2018**, *122*, 11407.

The screenshot shows the website for Advances in Engineering. At the top, there are navigation links: About AIE, Guidelines for Featured Authors, Key Scientific Article Certificate, Consulting Services, Privacy Policy, and a search bar. Below this is the journal's logo and a banner image. A horizontal menu lists various engineering fields: Materials Engineering, Chemical Engineering, Electrical Engineering, Mechanical Engineering, Nanotechnology, Civil Engineering, and General Engineering. The main content area displays the title of the featured article: "EFFECTS OF THIRD-ORDER SUSCEPTIBILITY IN SUM FREQUENCY GENERATION SPECTRA". Below the title are social media icons for Facebook, Twitter, Google+, and LinkedIn. A section titled "Significance" begins with the text: "Non-linear spectroscopies, such as second-harmonic generation (SHG) and sum frequency generation (SFG), have in the past been utilized to reveal detailed