

材料分子と水の界面において生ずるスペクトルの特徴的变化に関わる電子構造論的解析



鳥居 肇
静岡大学
教授

水と材料の分子レベル・ナノ集合レベルでの相互作用を捉えるにあたっては、分光学的測定による解析が有力な一手法ですが、従来の経験則に基づいた解析を超えて、より詳細かつ正確に解析しようとするれば、理論計算との組合せが、望ましい方法論です。本研究では、第一期で解析対象とした OH 伸縮振動に加えて、HOH 変角振動や材

料分子側の水素結合受容官能基の振動モードなどを対象として、分子間相互作用による振動モードのレスポンス

の詳細を明らかにし、これらを総合的に捉えた多面的解析を実在系に応用展開することを図ります。

