

3-4 電子構造研究系

基礎電子化学研究部門

松本吉泰（教授）*）

A-1) 専門領域：表面科学

A-2) 研究課題：

- a) 固体表面上でのレーザー誘起反応ダイナミクス
- b) メタンの活性化
- c) パラジウムクラスター上でのメタンの光反応
- d) 清浄な半導体表面を用いた遠赤外領域の発光に関する研究
- e) 多光子光電子分光による表面電子状態の研究
- f) 表面活性酸素の反応性

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 金属および半導体表面上に単分子層吸着した分子種に紫外レーザー光を照射することにより多様な非熱的過程を誘起することができる。本研究グループは、これらの表面上の物理吸着種の光反応に注目して研究を行なっている。本年度は昨年度に引き続き、Si(100)表面に吸着した稀ガス(Xe, Kr)の光刺激脱離について研究を行なった。清浄表面においても、これらの吸着種が近赤外から紫外に至る広い波長範囲の光の照射によって脱離した。光反応断面積の波長依存性や脱離種の並進速度分布を測定し、その励起のメカニズムを考察した。その結果、基盤の光吸収によって生じた電子と空孔がバンド端まで緩和し、そこで表面状態を介して再結合する時に励起する表面フォノンが脱離を誘起しているのではないかとというモデルを提唱した。
- b) メタンは豊富に存在する天然資源であるが極めて反応性に乏しい。従って、これを活性化し、より有用な物質に変換することが望まれている。本研究では昨年度に引き続き、遷移金属表面上での表面光化学によりメタンを活性化し、励起メカニズムをより明らかにすることを試みた。特に、励起状態におけるメタンとの混成にどのような基盤の電子状態が関与しているのかを明らかにするために、貴金属である銅を基盤として実験を行ない、今まで行ってきた白金やパラジウムなどの遷移金属との比較を行なった。その結果、Cu(111)面でもメタンは193 nmの光で解離することが判明した。これは、基盤中のsp電子由来の電子状態が大きな役割を果たしている可能性を示している。
- c) NiAl(110)上に準備した平坦なアルミ酸化物の上にパラジウムクラスターを生成させ、これに吸着させたメタンの光反応を観測した。パラジウム単結晶表面と同様にメタンは193 nmの光照射によって解離、脱離をするが、その分岐比に明瞭なクラスターサイズ依存性があることを見出した。
- d) 最近、半導体結晶に極端パルス光を照射することにより、THz領域のコヒーレントな光が発生することが明らかになった。しかし、これらの実験はすべて大気中、常温の雰囲気のもとで行なわれている。したがって、結晶の表面状態によりどのように遠赤外光の発生が影響を受けるかについてはまったく明らかにされてこなかった。本年度は、InAs(100)結晶表面を超高真空下で清浄化し、酸化された表面との差を実験的に確かめた。その結果、清

浄表面の方が発光は強くなり、また、結晶の温度を下げることにより、さらに光強度が増加することが判明した。両方の要因により光強度は通常の条件に比べて20倍も増加することが観測された。この研究課題は猿倉グループとの共同研究で行なった。

- e) 表面光化学における励起メカニズムを明らかにする目的で、多光子光電子分光による吸着種の電子励起状態の研究を行なっている。Pt(111)表面上のCOについて詳細な測定を行なった。その結果、COの非占有軌道に由来すると思われる状態からの光電子スペクトルを観測し、その状態の吸着サイト依存性について明らかにした。また、この分光法におけるプローブ光に用いるために、フェムト秒の真空紫外光発生装置を試作した。
- f) Si(100)表面上ではCO₂は単に弱く吸着するのみで反応はしない。しかし、N₂Oと共吸着させることにより、両者の間で極めて効率よく酸素交換反応が起きることを昨年度見出した。これは、この共吸着系において効率よく反応中間体CO₃が生成されることによると考えられる。今年度はさらにCO₂と酸素との共吸着系での反応を研究し、以前の結果と比較検討した。N₂Oとの共吸着系のように一部CO₂の解離片としてCOも脱離してくるが、酸素の交換反応が低温ですでに起きていることを見出した。

B-1) 学術論文

Y. MATSUMOTO and K. WATANABE, "Comparative study of photochemistry of methane on Pt(111) and Pd(111) surfaces," *Surface Science* **390**, 250 (1997).

H. KATO, K. WATANABE and Y. MATSUMOTO, "Effective carbonate formation induced by thermal dissociation of N₂O on Si(100)," *Surface Science Letters* **398**, L297 (1998).

M. SEL, K. NAGAYAMA, K. KAJIKAWA, H. ISHII, K. SEKI, K. KONDO, Y. MATSUMOTO and Y. OUCHI, "Phase determination of second-order surface susceptibility tensor of liquid crystal monolayer using ultra-thin film local oscillator," *Jpn. J. Appl. Phys.* **37**, 1974 (1998).

T. ANAZAWA, I. KINOSHITA and Y. MATSUMOTO, "Two-Photon Photoemission Study of CO/Pt(111)," *J. Electron Spectroscopy and Related Phenomena* **88-91**, 585 (1998).

J. YOSHINOBU, M. KAWAI, S. TANAKA, K. WATANABE, Y. MATSUMOTO and M. KAMADA, "Electronic Structure in the valence region of chemisorbed and physisorbed species on Pd(110)," *J. Electron Spectroscopy and Related Phenomena* **88-91**, 665 (1998).

K. WATANABE, H. KATO and Y. MATSUMOTO, "Effective Conversion of CO₂ to Carbonate in Surface Oxidation Processes at Si(100)," *J. Phys. Chem. B* **102**, 8042 (1998).

B-3) 総説・著書

松本吉泰, 「表面吸着種の光化学と電子励起状態」, *真空* **41**, 555 (1998).

B-4) 招待講演

K. WATANABE and Y. MATSUMOTO, "Surface Photochemistry and Dynamics of Weakly Bound Systems," SPIE Conference on "Laser Techniques for Surface Science III," San Jose, CA (U.S.A.), January 1998.

松本吉泰, 「物理吸着種の光反応」, 東京大学生産技術研究所セミナー, 東京, 1998年7月.

B-6) 学会および社会的活動

学協会役員・委員

日本化学会東海支部代議員(1993-1994).

学会の組織委員

第1回日米分子科学若手ワークショップ組織代表者 (1991).

第8回化学反応討議会プログラム委員(1992).

第51回岡崎コンファレンス組織委員(1994).

分子研研究会「分子 - 表面ダイナミクス」組織委員(1995).

大阪大学 50 周年記念シンポジウム「固体表面動的過程」組織委員(1995).

IMS International Conference 組織委員(1997).

分子構造総合討論会プログラム委員(1997).

Ninth International Conference on Vibrations at Surfaces 組織委員(1997).

科学研究費の研究代表者、班長等

グループ研究「光科学の新展開」研究代表(1997-)

B-7) 他大学での講義、客員

慶應義塾大学理工学部非常勤講師, 1998 年 7 月 .

C) 研究活動の課題と展望

現在は主に「固体表面上でのレーザー誘起反応ダイナミクス」の研究課題のもとで金属や半導体の清浄表面に吸着した分子種の光誘起過程に関する研究をおこなってきた。今後もさらに、吸着種の幾何学的・電子的構造を明らかにすることにより、光誘起過程の機構と動的挙動に関する分子論的な理解を深めることに研究の主眼を置く。更に、固体表面上に超薄膜やクラスターを形成し、このようなナノ構造物質上での反応、光誘起過程、電子状態についての研究に発展させていく。

*) 1998 年 4 月 1 日総合研究大学院大学先導科学研究科光科学専攻教授

西 信 之 (教授)*)

A-1) 専門領域：クラスター化学、電子構造論、物理化学

A-2) 研究課題：

- a) 液体中でのクラスター形成による局所構造の発生と“Micro Phase”の生成
- b) 分子クラスターイオンにおける電荷共鳴相互作用と電荷移動ダイナミクス
- c) 分子クラスターイオンの構造と光誘起クラスター内電荷輸送

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 水は、分子として大きな極性を持ち、それ故の高いクラスター構造発生能力を有する。この水の中には、様々な親水性と言われる物質を1分子単位ではなく、クラスター単位で溶解することが明らかになってきた。これは、室温の水自身が、クラスターとなっており、相互作用する相手が(運動の力学的要請から)同等の質量あるいは体積をもつクラスター或いは高分子であるとき、はじめて安定となることによると考えられる。このことは、物理学の分野で超音波吸収や誘電緩和の実験から度々示唆されていたことであるが、直接の証明は行なわれなかった。我々は、低振動数ラマン散乱の実験からこれをアルコール類や酢酸などの幾つかの基本的な系で証明した。これらの物質は、水の中でクラスターとして存在しており、“Micro Phase”を形成している。この“Micro Phase”の存在は3成分以上の系でも、相互溶解形態に大きな影響を与える。このような系では、2成分系では見られなかった強い相互作用が期待され、分子の機能の発現という観点からは、様々な興味ある発見が期待される。
- b) 酢酸の純液体或いは水溶液中では、酢酸は環状の2量体として存在すると教科書にも書かれている。しかし、酢酸のような大きな双極子を有する分子が、双極子を持たない構造で極性媒体中で本当に安定化するのであるのかと言う疑問が、少なからぬ学生の間から教師に投げ掛けられていたのではなからうか。教壇に立った人間として真面目に疑問に回答を与えねばならない。分子間振動スペクトルの解析以外に直接的な証拠は得られない。そこで、酢酸の単結晶を徐々に融解させながら室温までの温度領域で低振動数ラマンスペクトルを観測した結果、振動バンドの幅は融解とともに大きく広がるが、ピークの位置は一部を除いてほとんど変化しないことが明らかになった。結晶構造にみられる酢酸のネットワーク水素結合構造を基本とする大きな双極子モーメントを有する酢酸クラスターの理論計算によって、スペクトルが再現されることがしめされた。また、水溶液の中のクラスターの振動スペクトルは、メタノール中のスペクトルとほぼ一致し、これが大きな双極子を持つ酢酸2量体構造によることが理論計算によって明らかにされた。
- c) ベンゼン分子と1個の水酸基をもつフェノール分子の錯体から1個の電子を取り去ってカチオンとしたとき、どのような構造をとるであろうか。面白いことに、イオンが高温(といっても100-200 K)の時と、低温では、その赤外・可視・紫外の振動および電子スペクトルは大きな違いを見せ、温度によって構造変化が起こることが明らかになった。どのような構造変化が起こるかについてのスペクトルの解析等を現在進めている。
- d) ベンゼン-トルエンなどの2成分混合クラスターイオンの電荷共鳴吸収スペクトルが複雑な構造を示し、これらがトルエンイオンの励起状態を含む4種の励起電荷共鳴状態であると帰属した。不純物としてトルエンを含む液体ベンゼン中でのイオンの動的移動、あるいは電荷のホッピング機構の基礎として重要であり、フェムト秒レーザーを用いた実験が進行中である。

B-1) 学術論文

K. EGASHIRA and N. NISHI, "Low frequency Raman Spectroscopy of ethanol-water binary solutions: Evidence for self-association of solute and solvent molecules," *Journal of Physical Chemistry* **102**, 4054-4057 (1998).

T. FUKUCHI, K. NISHI, S. SHIRAISHI, N. NISHI and H. SEKIYA, "Hole-Burning Spectra of Jet-Cooled Tropolone and Tropolone-Kr1 van der Waals Complex," *Jpn. J. Deuterium Sci.* **7**, 15-23 (1998)

H. HAMABE, T. FUKUCHI, S. SHIRAISHI, K. NISHI, Y. NISHIMURA, T. TSUJI, N. NISHI and H. SEKIYA, "Fluorescence Excitation and Hole-Burning Spectra of Jet-Cooled Tropolon-M (M = N₂, CO) van der Waals Complexes: Structures and Proton Tunneling in the S₁ State," *Journal of Physical Chemistry* **102**, 3880-3888 (1998).

K. KOSUGI, T. NAKABAYASHI and N. NISHI, "Low frequency Raman spectra of crystalline and liquid acetic acid and its mixture with water. Is the liquid dominated by hydrogen-bonded cyclic dimers?" *Chemical Physics Letters* **291**, 253-261 (1998).

K. OHASHI, M. NISHIGUCHI, Y. INOKUCHI, H. SEKIYA and N. NISHI, "Photodissociation spectrum of cyanobenzene dimer cation. Absence of intermolecular resonance interaction," *Res. Chem. Intermed.* **24**, 755-764 (1998).

K. OHASHI and N. NISHI, "Photodissociation dynamics of (C₆H₆)₃⁺: Role of the extra benzene molecule weakly bound to the dimer core," *J. Chem. Phys.* **109**, 3971-3982 (1998).

T. MATSUOKA, K. KOSUGI, K. HINO, M. NISHIGUCHI, K. OHASHI, N. NISHI and H. SEKIYA, "Electronic Spectra of Jet-Cooled Anthracene Dimer: Evidence of Two Isomers in the Electronic Ground State," *J. Phys. Chem.* **102**, 7598-7602 (1998).

B-3) 総説、著書

N. NISHI, "Size and Structure Effect" in *Functionality of Molecular Systems*, Springer-Verlag; Tokyo, pp. 262-283 (1998).

西 信之, 「水素結合性溶液のクラスター構造」, 季刊化学総説 **38**, 173-187 (1998).

B-4) 招待講演

西 信之, 「水の中のクラスター」, 精密工学研究会, 大阪, 1998年10月2日.

B-5) 受賞、表彰

西 信之, 井上學術賞(1991).

西 信之, 日本化学会學術賞(1997).

B-6) 学会および社会的活動

文部省、學術振興会等の役員等

日本學術振興会特別研究員等審査会専門委員

B-7) 他大学での講義、客員

福岡大学, 「クラスター化学」, 1998年1月.

C) 研究活動の課題と展望

新たに 10 μm の赤外領域から 195 nm の真空紫外領域において連続的に任意のエネルギーを持つ 2 種のパルス光を発生させる固体高出力ピコ秒レーザーと、これに同期して同じく赤外から真空紫外に至る波長領域の高出力フェムト秒レーザーのシステムが導入される。これによって、上記研究テーマの分光学的研究が飛躍的に発展すると期待される。この装置を用いた新しい分光法の開発を進めている。

* 1998年4月1日着任

電子状態動力学研究部門

藤 井 正 明 (教授)

A-1) 専門領域：物理化学、分子分光学

A-2) 研究課題：

- a) 赤外 - 紫外二重共鳴分光法による分子・クラスターの構造とその動的挙動
- b) イオン化検出赤外分光法による孤立分子・クラスターの高振動状態の研究
- c) パルス電場イオン化光電子分光法による分子カチオンの振動分光

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) ナフトールの溶媒和クラスターは電子励起状態でプロトン移動活性となる事が知られているがクラスターの構造は S_0 , S_1 共に確定しておらず、構造と反応性の関係は明瞭ではない。そこで赤外 - 紫外二重共鳴分光法である IR Dip 分光法を 1 - ナフトール・水及び 1 - ナフトール・アンモニアクラスターに適用し、基底状態 S_0 及び電子励起状態 S_1 での赤外スペクトルの観測に成功した。振動スペクトル解析、及び ab initio MO 計算（東京都立大学・橋本健朗助教授との共同研究）との比較の結果、1 - ナフトール・(水) $_n$ クラスター ($n=0-3$) では、 S_0 , S_1 どちらの状態でも水分子とナフトールが環状構造を形成することを明らかにした。これは、溶媒分子がナフタレン環を摂動しない配置ではプロトン移動反応が促進されない可能性を示唆する。これを確定するために溶媒分子数が 4 個で反応活性となる 1 - ナフトール・アンモニアクラスターに対しても同様の実験と解析を継続中である。
- b) イオン化検出赤外分光法は独自に開発した高感度赤外分光法であり波長可変赤外レーザーで生じる振動励起分子を紫外レーザーで選択的にイオン化して検出する二重共鳴分光法である。赤外遷移をイオン検出すること及びバックグラウンドフリーであることから極めて高い検出感度を有し、試料濃度が希薄な超音速ジェット中で吸収係数が極めて小さな高次倍音を明瞭に観測できる。この方法により孤立極低温フェノール分子の OH, CH 伸縮振動を 4 量子準位まで観測することに成功した。さらに OH 伸縮振動は高次倍音ほどバンド幅が狭くなる現象を見出した。これは熱浴の状態密度が急速に増大するにもかかわらず高次倍音で緩和が遅くなる可能性を示唆する。この機構を解明するために重置換フェノールのイオン化検出赤外スペクトルを測定したところ、OH 倍音とは異なり OD 伸縮振動は高次倍音になると線巾が広がることが判明した。さらに種々の重置換体のイオン化検出赤外スペクトルの測定から、OH 伸縮モードとベンゼン環 CC, CH 振動との特異的なカップリングが強く示唆された。簡単なモデルによる緩和機構の検討を行ない、高次倍音の緩和機構解明を試みている。
- c) パルス電場イオン化光電子分光法 (PFI-ZEKE法) は高励起リードベリ状態を電場イオン化して検出する高分解能光電子分光法であり、カチオンの振動分光を行う優れた手段である。我々は中性リードベリ状態を検出する特性に着目して装置の大幅な簡易化・汎用化を実現し、従来の光電子分光では困難な大きな分子カチオンの振動分光を行ってきた。従来この方法を主としてメチル基内部回転など、分子内大振幅振動を有する分子に適用し、イオン化による変化から電子状態と大振幅振動の関係を論じてきた。本年度は分子間の大振幅振動となる分子間振動を中心に発展を試み、cis-, trans-体をも有する 1 置換フェノール誘導体と水分子との水素結合クラスターの PFI-ZEKE スペクトルの観測に成功した。cis 体クラスターと trans 体クラスターではカチオンでの分子間振動の際を

明らかにし、その原因を明らかにするべく重水素化効果、理論計算などで回転異性体クラスターカチオンの構造と結合様式を検討している。

B-1) 学術論文

S. ISHIUCHI, H. SHITOMI, K. TAKAZAWA and M. FUJII, "Nonresonant Ionization Detected IR Spectrum of Jet-cooled Phenol - Ionization Mechanism and Its Application to Overtone Spectroscopy," *Chem. Phys. Lett.* **283**, 243 (1998).

T. WATANABE, M. MIYATA, Y. IKETAKI and M. FUJII, "Soft X-Ray Microscope Imaging Using Photo-excitation Processes and Double Resonance Absorption Processes," *J. Korean Phys. Soc.* **32**, 388 (1998).

R. YOSHINO, K. HASHIMOTO, T. OMI, S. ISHIUCHI and M. FUJII, "Structure of 1-Naphthol-Water Clusters Studied by IR Dip Spectroscopy and Ab Initio Molecular Orbital Calculation," *J. Chem. Phys.* **105**, 10201 (1998).

B-3) 総説、著書

藤井正明, 「ヤーン - テラー効果 (Jahn-Teller effect)」, *化学* **53**(3), 48 (1998).

B-4) 招待講演

藤井正明, 「イオンで計る赤外吸収 - 高感度赤外分光法の開発と分子・クラスターの振動分光」, 平成10年度日本分光学会東海支部講演会, 分子科学研究所, 1998年11月.

藤井正明, 「分子線レーザー分光の立場から見た低温マトリックス単離法」, 分子研研究会「低温マトリックス単離法の新展開」, 1998年11月.

B-5) 受賞、表彰

藤井正明, 日本化学会進歩賞受賞(1992).

藤井正明, 山下太郎学術奨励賞受賞(1992).

藤井正明, 分子科学奨励森野基金(1996).

B-7) 他大学での講義、客員

早稲田大学理工学総合研究センター, 客員研究員.

通産省電子技術総合研究所流動研究員.

科学技術庁金属材料技術研究所研究課題中間評価委員.

C) 研究活動の課題と展望

期せずして赤外 - 紫外二重共鳴分光もパルス電場イオン化分光もクラスターを研究対象とするように進展している。クラスターでも数個から数十個程度の集合体の構造と動的挙動の関係は明らかにされていないので、我々の研究手段で解明したいと考えている。一方、多量体クラスターを生成するには大排気量の真空ポンプが必要になるなど現有の真空装置では限界に達しつつある。この整備、改良が研究課題と密接に関係して問題になってきている。

鈴木俊法(助教授)

A-1) 専門領域：化学反応動力学、分子分光学

A-2) 研究課題：

- 基本的分子のエネルギー緩和及び光化学反応素過程
- 分子の非弾性および反応性散乱動力学
- 化学反応の立体動力学，ベクトル相関
- 超強レーザー場中での分子動力学

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- C_2H_2 の A 状態からの前期解離過程を，吸収，蛍光励起，共鳴多光子イオン化，増感燐光励起等の分光法を用いて観測し，解離エネルギー，解離障壁，解離におけるエネルギー分配，振動回転状態依存性，解離反応時間などを明らかにした。OCS の光解離によって生成する S(1D , 3P_j) 原子の散乱分布を画像観測法を用いて測定し，ab initio 曲面上での量子波束計算と比較することによって，変角振動方向での非断熱遷移の重要な役割を初めて明らかにした。CH₃CO ラジカルの時間分解画像観測によって，単分子解離速度を内部エネルギーの関数として初めて測定し，速度が RRKM 理論よりも 1 桁小さいことを見出した。また，ナノ秒画像観測法によって CH₃CO ラジカルの C-C 結合解離しきい値を正確に求めた。
- 化学反応によって生成する原子，分子の角運動量配向を記述する量子論，半古典論を定式化した。この理論を検証するため，2次元画像観測法によって，NO₂ の 355 nm 光解離によって生成する NO のベクトル相関を検出した。多極子展開の量子化軸を生成物の速度ベクトルにとる新しい記述と，Hund ケース(a) と (b) の中間カップリングケースにおける二光子吸収強度を厳密に取り込んだ理論と比較し，ベクトル相関の画像が初めて検証された。
- NO-Ar の衝突による回転非弾性散乱の状態選択微分散乱断面積を交差分子線法画像観測装置によって測定し，衝突エネルギー 66 meV における回転虹散乱を初めて観測した。O(1D) の反応性散乱を研究するための酸素原子線源の開発を行った。
- 超強レーザー場中での分子解離によって生成する多価イオンの散乱分布を初めて画像し，各種の 2 原子分子，3 原子分子の分子構造や解離過程を明らかにした。

B-1) 学術論文

H. KATAYANAGI, N. YONEKURA and T. SUZUKI, "C-Br bond rupture in 193 nm photodissociation of vinyl bromide," *Chem. Phys.* **231**, 345-353 (1998).

Y. MO and T. SUZUKI, "Quantal and semiclassical analysis of vector correlation in molecular photodissociation," *J. Chem. Phys.* **108**, 6780-6789 (1998).

T. SHIBATA, H. LI, H. KATAYANAGI and T. SUZUKI, "Dissociation of metastable CH₃CO radical observed by subpicosecond time-clocked photofragment imaging," *J. Phys. Chem.* **102**, 2643 (1998).

Y. SHI and T. SUZUKI, "Formation of metastable triplet acetylene from the A(1A_u) state near the dissociation threshold," *J. Phys. Chem. A* **102**, 7414-7419 (1998).

Y. MO and T. SUZUKI, "Geometrical factors of two-photon absorption for the determination of alignment and orientation," *J. Chem. Phys.* **108**, 4691-4692 (1998).

T. SUZUKI, H. KATAYANAGI, S. NANBU and M. AOYAGI, "Non-adiabatic bending dissociation in 16 valence electron system OCS," *J. Chem. Phys.* **109**, 5778-5794 (1998).

B-2) 国際会議のプロシーディングス

T. SUZUKI, T. SHIBATA and H. LI, "Dissociation of metastable CH₃CO radical studied by time-resolved photofragment imaging," *Laser Techniques for State-Selected and State-to-State Chemistry IV, SPIE*, **3271**, 2-6 (1998).

B-3) 総説、著書

Y. MO and T. SUZUKI, "Optical detection of angular momentum polarization and its application to photodissociation dynamics," *Advances in Multiphoton Processes and Spectroscopy*, S. H. Lin and Y. Fujimura, Eds., World Scientific.

B-4) 招待講演

T. SUZUKI, "Dissociation of metastable CH₃CO radical studied by time-resolved photofragment imaging," *Laser Techniques for State-Selected and State-to-State Chemistry IV, SPIE*, January 1998.

T. SUZUKI, "Photodissociation dynamics of polyatomic molecules studied by ion imaging," University of Perugia (Italy), June 1998.

T. SUZUKI, "C-C bond rupture in CH₃CO radical studied by time-clocked photofragment imaging," European Conference on Dynamics of Molecular Collisions XII, Bristol (UK), September 1998.

鈴木俊法, 「化学反応を観る」, 分子科学研究所研究会「2010年の分子科学を語る」, 岡崎, 1998年10月.

B-5) 受賞、表彰

鈴木俊法, 分子科学奨励森野基金, (1993).

鈴木俊法, 日本化学会進歩賞, (1994).

鈴木俊法, 日本分光学会論文賞, (1998).

B-6) 学会及び社会的活動

学会の組織委員

第1回日本台湾分子動力学学会議組織委員(1997).

分子構造総合討論会プログラム委員(1997).

化学反応討論会組織委員(1998).

第1回東アジア分子動力学学会議組織委員(1998).

C) 研究活動の課題と展望

1931年, HirshfelderらのH₃LEPポテンシャル面上での核運動の古典軌道計算によって, 化学反応動力学の理論研究が幕を開け, 量子化学計算による電子運動の解析, 量子力学的散乱計算による核運動の解析はたゆまぬ前進を

遂げてきた。一方、実験研究は、交差分子線法の開発によって、古典的な反応速度論から粒子散乱を直接観測する精緻な動力学研究へと研究が進んできた。我々は、交差分子線、超高速レーザー分光、および画像観測法を用いて、化学反応によって分子の電子状態や核配置が変化する様子を可視化し、反応の最も詳細な描像を明らかにする研究を進めている。一方、近年の成層圏オゾン層の破壊、オゾンホールのは出現は、基礎的な化学反応の研究が環境科学というグローバルな問題に深く関与していることを示した。フロンの使用はモントリオール議定書の批准以来削減されてはいるが、地球大気の循環速度が遅いため、今後二十年間はオゾン層の破壊は進むと予測されている。今後、各種新規化合物の規制を含む政策策定のために、化合物の迅速かつ詳細な反応研究が不可欠であり、化学反応を画像化する研究は、このような分野にも資することを目指している。