

## 分子動力学研究部門

加 藤 立 久 (助教授)

A-1) 専門領域：凝聚系の分子分光学

A-2) 研究課題：

- a) フラーレン類のラジカルの磁気共鳴分光
- b) 液晶系の振動ラマン分光

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) フラーレン類のラジカルの磁気共鳴分光：金属内包フラーレンについて ESR測定から磁気的分子定数の大きさを決め、分子構造・電子構造に関する新しい情報を得た。特に一連のLa金属を内包して、炭素数の異なる金属内包フラーレンについてその電子状態とスピンドイナミクスを明らかにした。
- b) 液晶系の振動ラマン分光：液晶系について、入射レーザー光偏光面と配向方向の角度に依存した振動ラマン強度を測定し、液晶分子の配向状態を調べた。反強誘電性を示すMHPOBC液晶について、電圧応答において「V字応答」をする一連の液晶の配向オーダーパラメータを調べ、特殊な電圧応答のダイナミクス機構を明らかにした。

B-1) 学術論文

- N. HAYASHI and T. KATO, "Investigations of orientational order for an antiferroelectric liquid crystal by polarized Raman scattering measurements," *Phys. Rev. E* **63**, 021706 (2001).
- T. AKASAKA, T. WAKAHARA, S. NAGASE, K. KOBAYASHI, M. WAELCHLI, K. YAMAMOTO, M. KONDO, S. SHIRAKURA, Y. MAEDA, T. KATO, M. KAKO, Y. NAKDAIRA, X. GAO, E. V. CAEMELBECKE and K. M. KADISH, "Structure Determination of the La@C<sub>82</sub> Isomer," *J. Phys. Chem. B* **105**, 2971 (2001).
- C. YAMAMOTO, T. HAYASHI, Y. OKAMOTO, S. OKUBO and T. KATO, "Direct resolution of C<sub>76</sub> enantiomers by HPLC using an amylose-based chiral stationary phase," *Chem. Commun.* 925 (2001).
- N. HAYASHI, T. KATO, T. AOKI, T. ANDO, A. FUKUDA and S. S. SEOMUN, "Probable Langevin-Like Director Reorientation in an Interface-Induced Disordered SmC\*-Like State of Liquid Crystals Characterized by Frustration between Ferro- and Antiferro-electricity," *Phys. Rev. Lett.* **87**, 015701 (2001).
- S. OKUBO, T. KATO, M. INAKUMA and H. SHIOHARA, "Separation and Characterization of ESR-Active Lanthanum Endohedral Fullerenes," *New Diamond and Frontier Carbon Technology* **11**, 285 (2001).
- S. S. SEOMUN, J. K. VIJI, N. HAYASHI, T. KATO and A. FUKUDA, "Surface molecular alignment by in-plane anchoring in the cell showing the V-shaped switching," *Appl. Phys. Lett.* **79**, 940 (2001).
- T. IKOMA, Q. ZHANG, F. SAITO, K. AKIYAMA, S. TERO-KUBOTA and T. KATO, "Radicals in the Mechanochemical Dechlorination of Hazardous Organochlorine Using CaO Nanoparticles," *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **74**, 2303 (2001).

## B-2) 国際会議のプロシーディングス

**T. KATO, T. AKASAKA, K. TASHIRO and T. AIDA**, “An Inclusion Complex of a Cyclic Dimmer of Metalloporphyrin with La@C<sub>82</sub>,” *Proceedings of the International Symposium on Fullerenes, Nanotubes, and Carbon Nanoclusters*, P. V. Kamat, D. M. Guldi and K. M. Kadish, Eds., The Electrochemical Society, Inc., **11**, 354-357 (2001).

**S. OKUBO and T. KATO**, “Spin Dynamics of Lanthanum Metallofullerenes,” *The Proceedings of the International Symposium on Nanonetwork Materials, Fullerenes, Nanotubes, and Realated Systems*, S. Saito *et al.*, Eds., AIP Conference Proceedings **590**, 469-472 (2001).

## B-4) 招待講演

**T. KATO**, “Spectroscopic Study of Lanthanoid Metallofullerenes,” The Symposium on Recent Advances in the Chemistry and Physics of Fullerenes and Related Materials in the Electrochemical Society Meeting, Washington DC (U. S. A. ), March 2001.

**T. KATO**, “Electron Spin Resonance Measurements of Endo- Metallofullerenes,” The 5<sup>th</sup> Biennial International Workshop in Russia Fullerenes and Atomic Clusters, IWFAC’2001, St. Petersburg (Russia), July 2001.

## B-7) 他大学での講義、客員

名古屋大学工学部, 集中講義, 2001年10月22日.

東京都立大学理学部, 集中講義, 2001年12月20日-21日.

## C) 研究活動の課題と展望

研究所に導入された W-バンド( 95 GHz )パルスESR装置は, 我々の金属内包フラーレンの磁気共鳴分光研究に大きな新しい展開をもたらした。今後多数の金属内包フラーレンがならび相互作用した連結磁石系への発展を目指す。液晶系の振動ラマン分光研究では, 反強誘電液晶系に関する測定結果の蓄積ができ また電圧に対し「V字応答」する特殊な液晶系のダイナミクスに分子科学論的な検討を加えていきたい。