

3-4 電子構造研究系

基礎電子化学研究部門

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) 分子クラスター磁石化合物の合成とその磁性、電子状態、構造の解明
- b) 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
- c) 溶液中および孤立状態での機能性分子の超高速反応ダイナミクス
- d) 分子クラスターイオンにおける分子間相互作用と電荷移動・エネルギー移動ダイナミクス

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 昨年合成法を見いだした常温磁石化合物の構造や物性、反応性が明らかとなり、光、又は熱によって $\text{Co}_4(\text{CO})_{12}$ からジクロロメタン溶媒中に遊離したコバルト原子が、2個のジクロロメタン分子と反応して溶媒和 CoC_2 と 4HCl を生じ、この溶媒和 CoC_2 が3次元的に集積して $(\text{CoC}_2)_n$ クラスターとなり、クラスターサイズ(n)の大きさの違いによって集積構造およびスピン反転ブロック温度の違いがでてくることが明らかになった。 n が500から1000の大きさになると、常温でも磁石としての性質を示すのである。

これは、アセチレン化コバルト(cobalt acetylide)と呼ばれるもので、これまで、合成法を初めとしてほとんど満足な報告はなされていない。アセトニトリルやベンゾニトリル溶媒中で、塩化コバルト(CoCl_2)とカルシウムカーバイド(CaC_2)のイオン交換反応によって (CoC_2) および (CaCl_2) を生成した後、水で原料と塩化カルシウムを洗って残った緑がかった黒いパウダーとしても得られる。この方法では、しかしながら、鉄やニッケルのような他の遷移金属原子や水を起源とする水酸基あるいは酸素などの混入が避けられず、スピン反転ブロック温度は4.6 Kと低いものしか得られていないが、保磁力は1.8 Kで400 Oeと比較的大きな値を示した。

スピン反転ブロック温度(T_B)を更に高温にするために、原料をコバルトの純度が高い $\text{Co}_4(\text{CO})_{12}$ としてジクロロメタン溶媒中で水銀ランプによってカルボニルをはずし、遊離コバルトと溶媒分子を結合させて $(\text{CoC}_2)_n$ クラスターが得られた。これは、透過電子顕微鏡写真には棒状、三つ又状、十文字の手裏剣状と束状のユニットを基本とした形状として観測された。この生成物の T_B は16 Kと3倍から4倍に上がった。

高圧反応容器を用いて、光反応に用いたものと同じ溶液を210度20気圧で反応させると、アモルファスカーボンマトリックスとし、その中にナノサイズの $(\text{CoC}_2)_n$ クラスター及び塩化コバルトが含まれていることが解った。塩化コバルトは水で洗い取ることができ、これは、副生成物の HCl が高温で $(\text{CoC}_2)_n$ クラスターをアモルファスカーボンと塩化コバルトに分解する為であることが明らかになった。平均の粒子径が12 nmの $(\text{CoC}_2)_n$ クラスターをアモルファスカーボン中に含む試料は、4.5 K以下で磁石になる成分と室温でも磁石となる成分の2成分としての振る舞いを見せ、後者は平均の粒径が12 nmの単結晶状微粒子成分であり、この粒子群の示す「磁化を磁場で割った値」は、ゼロ磁場では20 Kから300 Kにかけて徐々に増加した。ところが、10 Oeという僅かの磁場をかけながら冷却し、同様に20 Kから300 Kにかけて昇温すると、今度はより大きな値から

始まり、全く逆の勾配で減少した。即ち、磁場をかけない時は、マトリックス中に分散した $(\text{CoC}_2)_n$ クラスター粒子は磁気双極子相互作用によって磁化を打ち消しあうように配向するが、磁場をかけるとそれぞれの粒子の磁化の方向は外部磁場の方向に配向して大きな磁化を示すのである。また、保持力も20 Kで200 Oe、300 Kで260 Oeと高温ほど大きな値を示した。このような温度変化を示すのは、粒子が単一磁区から成る磁石になっているため、高温ほど磁化や保持力が小さくなる金属ナノ粒子磁石とは大きな違いを見せている。

高エネルギー加速器研究所で行われたXANESの測定から $(\text{CoC}_2)_n$ クラスターのコバルト原子は2価の陽イオン状態となっていることが判り、また、赤外スペクトルには、 CaC_2 に現れる C_2^{2-} のダブルレットの振動バンド構造が僅かに低波数側に現れたことから、 C_2 は2価の陰イオンとなっていることが明らかになった。 CoC_2 のコバルト原子はCa原子より7個ほど多くの電子を d 軌道に有しており、このうち4個の電子が原子価結合に与り、残りの3個がSOMOに入って高スピン状態を実現していると予想される。EXAFSの測定から、 CaC_2 の持つ岩塩構造に近いが、それぞれのイオンは σ あるいは $d-\pi$ 原子価結合によっても結ばれている形のコバルト酸化物(CoO)に近い状態になっているようである。この為、この化合物は水とは反応せず、安定である。重要なのは、 CoO は反強磁性であるが CoC_2 は強磁性であることである。

尚、この $(\text{CoC}_2)_n$ クラスターは、空気中で長期間安定な常温クラスター分子磁石であり、世界で初めての成果である。

- b) この研究テーマについては今年度は、論文発表および協力研究を主体に進められた。
- c) フォトクロミズムを示す N -サリシリデンアニリンの光吸収後の異性化過程を、溶媒の関与が無いジェット中で調べた。フォトクロミズムを示す最も単純な骨格であるエノール型 N -サリシリデンアニリンを320 nmの光で励起し、プローブとしてケト型の異性体のみが吸収を示す395 nmおよびエノール型のみを励起する790 nm光を用いた。その結果、エノール体の $^1\pi\pi^*$ 状態は、230フェムト秒以下で分子内プロトン移動反応状態に遷移し、シス型ケト体に転換されることが明らかとなった。この転換は励起状態で起こるが、続いて100ピコ秒以上の過程でトランス型ケト体を生じる。
- d) 3連四重極イオントラップ赤外レーザー光解離分光器を用いた分子クラスターイオンの構造とダイナミックスの研究は、今年度は水和蟻酸陽イオンと水和アニリンイオン($\text{An}^+(\text{H}_2\text{O})_n$)、アニリンイオンクラスター($(\text{An})_n^+$)、 $\text{An}^+(\text{ベンゼン})_2$ 等を中心として行われた。 $\text{H}^+(\text{HCOOH})_n\text{H}_2\text{O}(n=1-5)$ イオンでは、 n が1-3のクラスターでは HCOOH_2^+ イオンがコアを形成するが、 n が4-5となるとイオンコアが H_3O^+ に変化するコアスイッチングが観測された。 $\text{An}^+(\text{ベンゼン})_2$ では An^+ のNH基にベンゼンが一個ずつ水素結合した構造が安定であることがわかった。 $\text{An}^+(\text{H}_2\text{O})_n(n=1-8)$ では、 $n=1-4$ が鎖状構造をとり、 $n=5$ では環状構造が安定となるが、 $n=6-8$ では An^+ のプロトンが H_2O に移動するプロトン移動反応が起こっている事がわかった。

B-1) 学術論文

K. HINO, Y. INOKUCHI, K. KOSUGI, H. SEKIYA, Y. HOSOKOSHI, K. INOUE and N. NISHI, "Photochemical Generation of High Spin Clusters in Solution: Cyclopentadienyl-Vanadium) $_m\text{O}_n$," *J. Phys. Chem. B* **106**, 1290-1293 (2002).

H. MORI, H. KUGISAKI, Y. INOKUCHI, N. NISHI, E. MIYOSHI, K. SAKOTA, K. OHASHI and H. SEKIYA, "Structure and Intermolecular Hydrogen Bond of Jet-Cooled p -Aminophenol-(H_2O) $_1$ Studied by Electronic and IR-Dip Spectroscopy and Density Functional Theory Calculations," *Chem. Phys.* **277**, 105-115 (2002).

T. NAKABAYASHI and N. NISHI, "States of Molecular Associates in Binary Mixtures of Acetic Acid with Protic and Aprotic Polar Solvents: A Raman Spectroscopic Study," *J. Phys. Chem. A* **106**, 3491-3500 (2002).

Y. INOKUCHI and N. NISHI, “Infrared Photodissociation Spectroscopy of Protonated Formic Acid-Water Binary Clusters, $H^+(HCOOH)_nH_2O(n = 1-5)$. Spectroscopic Study of Ion Core Switch Model and Magic Number,” *J. Phys. Chem. A* **106**, 4529–4535 (2002).

T. NAKABAYASHI, S. KAMO, K. WATANABE, H. SAKURAGI and N. NISHI, “Observation of Formation Dynamics of Solvated Aromatic Cation Radicals Following Photoionization,” *Chem. Phys. Lett.* **355**, 241–248 (2002).

H. MORI, H. KUGISAKI, Y. INOKUCHI, N. NISHI, E. MIYOSHI, K. SAKOTA, K. OHASHI and H. SEKIYA, “LIF and IR Dip Spectra of Jet-Cooled *p*-Aminophenol-*M* ($M = CO, N_2$): Hydrogen-Bonded or van der Waals-Bonded Structure ?” *J. Phys. Chem. A* **106**, 4886–4890 (2002).

K. OHASHI, Y. INOKUCHI, N. NISHI and H. SEKIYA, “Intermolecular Interaction in Aniline-Benzene Hetero-Trimer and Aniline Homo-Trimer Ions,” *Chem. Phys. Lett.* **357**, 223–229 (2002).

Y. INOKUCHI, K. OHASHI, H. SEKIYA and N. NISHI, “Intracluster Proton Transfer in Aniline-Amine Complex Ions,” *Chem. Phys. Lett.* **359**, 283–288 (2002).

Y. HONKAWA, Y. INOKUCHI, K. OHASHI, N. NISHI and H. SEKIYA, “Infrared Photodissociation Spectroscopy of Aniline⁺-(water)_{1,2} and Aniline⁺-(methanol)_{1,2},” *Chem. Phys. Lett.* **358**, 419–425 (2002).

Y. INOKUCHI, K. OHASHI, H. SEKIYA and N. NISHI, “Positive Charge Distribution in (benzene)₁(toluene)₂⁺ and (benzene)₂(toluene)₁⁺ Studied by Photodissociation Spectroscopy,” *J. Chem. Phys.* **117**, 10648–10653 (2002).

B-4) 招待講演

西 信之, “Microscopic phase separation in binary mixtures of acetic acid with water and alcohols,” 85th Chemical Society of Canada Conference, Vancouver, B.C. (Canada), June 2002

西 信之, “Matrix embedded cobalt-carbon nano-cluster magnets: behavior as room temperature single domain magnets,” International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters 11, Strasbourg (France), September 2002.

西 信之, 「クラスターの科学」, 平成14年度総合研究大学院大学サマースクール, 神奈川県葉山総合研究大学院大学, 2002年8月.

西 信之, 「クラスターの科学」, プラズマ科学のフロンティア, 岐阜県土岐市, 核融合科学研究所, 2002年10月.

西 信之, 「高温高圧触媒イオン反応で単分子クラスター磁石を創る: その電子顕微鏡観測、磁気物性、質量分析、そして分光」, 第40回イオン反応研究会, 東京, 2002年11月.

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

「科学技術分野における女性研究者の能力発揮に関する分科会」委員.

文部科学省、学術振興会等の役員等

日本学術振興会専門委員.

B-7) 他大学での講義、客員

高知大学, 大学院特別講義「クラスター化学」, 2002年度後期.

名古屋大学, 特別講義「クラスターの化学」, 2002年度後期.

C) 研究活動の課題と展望

昨年度 転移温度が300 Kを遙かに越える $(\text{CoC}_2)_{n=600-1200}$ クラスター分子磁石の開発に成功した。この $(\text{CoC}_2)_n$ クラスターは、イオン結合と原子価結合のバランスによって組み立てられ、金属原子はその正電荷同士の反発を受け、 $(\text{C}_2)^{2-}$ イオンは負電荷同士の反発を受けるためNaCl型の配置を取るが、このコバルト原子にとっては8面体構造の天と地にあたる C_2 結合軸方向には σ 結合および $d-\pi$ 結合による原子価結合性の強い柱が立つことになる。CoOのOが C_2 に代わって、 Co-O-Co の3中心相互作用が $\text{Co-C}_2\text{-Co}$ の4中心相互作用になることによって反強磁性的な超交換相互作用がどうして強磁性的な相互作用に変化するのか、また、どうして高いスピン密度を持つようになるのか、解明すべき問題は多々ある。このような問題の解決には、理論家との共同研究を進めると同時に、クラスターに拘らずに、出来るだけ大きな結晶を作成し、精密な構造決定や物性測定、そして電子状態の解明を進めていかなければならない。一方、イオン性の金属化合物は、電気伝導性も大変興味深く、磁性のみならず電気的性質の追求も進めなければならない。

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
- d) 2 波長分光法を用いる超解像レーザー蛍光顕微鏡の研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 溶質・溶媒分子で構成される溶媒和クラスターは凝集相のミクロなモデルであり、その構造と反応性は凝集相での反応・緩和や溶媒効果を分子論的に理解する上で理想的な試料系である。同時に特に水素結合で形成される溶媒和クラスターは溶液と同じく光励起プロトン移動反応をを起こすが、反応活性にはクラスターサイズ依存性が有ることが知られている。しかし、このような反応活性な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。そこで本研究では赤外 - 紫外二重共鳴分光法の一つであるIR Dip分光法を主に水素結合で形成される反応活性な溶媒和クラスターに適用し、基底状態 S_0 、電子励起状態 S_1 、及びイオン化状態での赤外スペクトルの観測を行い、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)との比較からクラスターの構造を明らかにしてきた。

大排気量の分子線発生用真空槽に最大15 kVの高電圧加速電源、マスゲートといった大きなクラスターの検出に必要な装置開発・整備を行い、1-ナフトール30量体までの発生 / 検出に成功した。また、多量体クラスターの電子スペクトルと赤外スペクトルを二重共鳴分光法により測定し、クラスター構造が水素結合だけではなく π 電子の静電相互作用によっても大きく影響を受けていることを示した。

昨年度開発に成功したピコ秒赤外 - 紫外二重共鳴分光システムによる反応活性クラスターのピコ秒赤外分光は、依然として我々の独壇場であり、同種の研究は報告されていない。この方法によりフェノール \cdot (NH_3)₃クラスターのOH基ラジカル開裂反応の実時間観測に成功して反応生成物の異性体の存在を実証しており、さらに大きなクラスターへの適用、異性体検証が進行中である。同時に、 $\pi\sigma^*$ 状態がこの反応のチャンネルになっているという理論モデルとの対応、検証を行なっている。さらに、この $\pi\sigma^*$ によるモデルはOH、NHを有する芳香族分子全般に適用できるため、パリ南大のC. Jouvretらのグループとの日仏共同研究により、フェノール以外の分子でのOHラジカル開裂・水素原子移動反応の有無を検証中である。

- 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。カテコール、アミノフェノールの倍音分光に関して、Henrik Kjaergaard博士(University of Otago, NEW ZEALAND)と理論面に関して共同研究を継続している。このイオン化検出赤外分光法に波長可変ピコ秒レーザーを組み合わせ、振動励起準位からのIVR過程を実時間測定可能なピコ秒時間分解イオン

化検出赤外分光法の開発に成功した。これを7-アザインドール2量体に適用し、NH伸縮振動準位から分子間振動を含むdoor way状態へのIVRが、CH伸縮を励起した場合に比べて1ピコ秒速く起きること、IVRが段階的に起きることを実時間測定により明瞭に示すことに成功した。

- c) パルス電場イオン化光電子分光法(PFI-ZEKE法)は高励起リユ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。我々は中性リユ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。本年はフルオロフェノール水素結合クラスターに関して英国York大学K. Müller-Dethlefs教授と共同研究を行い、*cis, trans*-異性体で分子間振動が顕著に変化する事を見出した。
- d) 2台のレーザーを用いる分光法は回折限界を凌駕する空間分解能(超解像)に展開できる。即ち、1色のレーザーを集光した際に出来る像は回折限界で制限されているが、2つのレーザー光の重なり部分を取り出せば回折限界以下の空間分解能が得られるはずである。これをミレニアムプロジェクト(革新的技術開発研究)としてオリンパス光学・池滝慶記主任研究員、千葉大学工学部・尾松孝茂助教授、慶應義塾大学理工学部・山元公寿助教授との学際共同チームにより推進し、このアイディアに基づく顕微分光実験装置を製作、原理検証を行なった。現在回折限界の3倍、ナノスケールでの超解像分解能達成に成功した。

B-1) 学術論文

S. KINOSHITA, H. KOJIMA, T. SUZUKI, T. ICHIMURA, K. YOSHIDA, M. SAKAI and M. FUJII, "Pulsed Field Ionization Zero Kinetic Energy Photoelectron Study on Methylanisole Molecules in a Supersonic Jet," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **3**, 4889–4897 (2002).

H. G. KJAERGAARD, D. L. HOWARD, D. P. SCHOFIELD, T. W. ROBINSON, S. ISHIUCHI and M. FUJII, "OH- and CH-Stretching Overtone Spectra of Catechol," *J. Phys. Chem. A* **106**, 258–266 (2002).

K. YOSIDA, K. SUZUKI, S. ISHIUCHI, M. SAKAI, M. FUJII, C. E. H. DESSENT and K. MÜLLER-DETHLEFS, "The PFI-ZEKE Photoelectron Spectrum of *m*-fluorophenol and its Aqueous Complexes: Comparing Intermolecular Vibrations in Rotational Isomers," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **4**, 2534–2538 (2002).

M. SAKAI, S. ISHIUCHI and M. FUJII, "Picosecond Time-Resolved Nonresonant Ionization Detected IR Spectroscopy on 7-Azaindole Dimer," *Eur. J. Phys. D* **20**, 399–402 (2002).

S. ISHIUCHI, K. DAIGOKU, M. SAEKI, M. SAKAI, K. HASHIMOTO and M. FUJII, "Hydrogen Transfer in Photo-Excited Phenol/Ammonia Clusters by UV-IR-UV Ion Dip Spectroscopy and Ab Initio MO Calculations I: Electronic Transitions," *J. Chem. Phys.* **117**, 7077–7082 (2002).

S. ISHIUCHI, K. DAIGOKU, M. SAEKI, M. SAKAI, K. HASHIMOTO and M. FUJII, "Hydrogen Transfer in Photo-Excited Phenol/Ammonia Clusters by UV-IR-UV Ion Dip Spectroscopy and Ab Initio MO Calculations II: Vibrational Transitions," *J. Chem. Phys.* **117**, 7083–7093 (2002).

B-4) 招待講演

M. FUJII, "Pico-second Time-Resolved IR Spectroscopy on photochemically Reactive Clusters," Gordon Research Conference on Molecular Ionic Cluster, Ventura (U. S. A.), 2002年1月.

M. FUJII, “Pico-second Time-Resolved IR Spectroscopy on Photochemically Reactive Clusters,” IMS Research Symposium “Current Status and Prospects of Dynamics of Photon, Electron and Heavy-Particle Collisions,” Okazaki Conference Center, Okazaki (Japan), 2002年7月.

酒井 誠、藤井正明,「レーザー多重共鳴分光法」,「光波シンセシス」研究会, 仙台国際センター, 仙台, 2002年2月.

藤井正明,「2波長ファーフィールド超解像顕微鏡」,分子スケールナノサイエンス研究会, 岡崎コンファレンスセンター, 岡崎, 2002年3月.

酒井 誠、石内俊一、上田 正、山中孝弥、藤井正明,「ピコ秒赤外 - 紫外2重共鳴分光法の開発と水素結合クラスターの時間分解赤外スペクトル」,日本化学会春季年会特別企画「フェムト秒ダイナミクスと量子制御」, 早稲田大学西早稲田キャンパス, 東京, 2002年3月.

M. FUJII, “Pico-second Time-Resolved IR Spectroscopy on Photochemically Reactive Clusters,” “Kobe International Symposium 2002: Molecular Structure and Dynamics,” Rokko Oriental Hotel, Kobe (Japan), 2002年10月.

M. FUJII, “Pico-second Time-Resolved IR Spectroscopy on Photochemically Reactive Clusters,” “Laser and Applications Research Theme Meeting,” Otago University, Dunedin (New Zealand), 2002年11月.

M. FUJII, “Ion Detected Molecular Vibration and its Dynamics,” Department and Laser and Applications Research Theme Seminar, Otago University, Dunedin (New Zealand), 2002年11月.

B-5) 受賞、表彰

日本化学会進歩賞受賞(1992).

山下太郎学術奨励賞受賞(1992).

分子科学奨励森野基金(1996).

B-6) 学会および社会的活動

分子科学研究会・事務局.

日本化学会東海支部幹事.

日本分光学会東海支部幹事.

科学技術動向調査員.

C) 研究活動の課題と展望

ピコ秒波長可変赤外 - 紫外レーザー分光システムの開発により、クラスターに関する時間分解赤外分光が可能としたが、クラスターの時間分解赤外分光は世界初であり、1年経過した現在でも依然として我々だけが成功している方法である。この方法を気相に止まらず溶液内のクラスターに対しても展開しつつある。また、2波長蛍光Dip分光法と光学顕微鏡法を融合した2波長超解像顕微鏡も従来の方法の限界を突破する独創性の高い方法と自負している。平成15年4月から東京工業大学資源化学研究所に転任し分子研は併任となる。平成15年度は新任地への移行期であるが、常に独創性を念頭に分光とダイナミクスの独自の領域開拓を目指して邁進する。

鈴木俊法(助教授)

A-1) 専門領域：化学反応動力学、レーザー分光学

A-2) 研究課題：

- 超高速光電子観測法による化学反応の実時間観測と光イオン化立体動力学
- レーザー偏光分光法による化学反応の3次元立体動力学
- 交差分子線散乱法による化学反応の微分散乱断面積の測定

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- (1+1')フェムト秒画像観測分光によって、NOダイマーの光解離過程を研究した。200 nmで励起されたダイマーが350 fsで価電子励起状態からRydberg状態に内部転換し解離する様子が、光電子散乱分布の時間発展から明らかになった。価電子状態からの光イオン化光電子エネルギー分布は非常に広く、価電子状態が基底状態やイオン化状態のcis型構造から大きく構造変化していることが分かった。また、光イオンの画像観測から、解離生成するNO(X) + NO(A)ではNO(X)が振動の反転分布を示していることが判明し、価電子励起状態での分子構造の大きな変化と符合した。Rydberg状態からの光電子分布は時間とともに低波数シフトし、カチオン状態がRydberg状態よりも強く結合していることを反映した。NO単量体の光イオン化の研究では、回転波束運動を利用して分子固定系での光電子散乱分布を抽出する理論的な枠組みを構築し、予備的な実験結果を得た。米国の理論研究者の計算結果との比較を行い、イオン化波長依存性に興味深い理論・実験の不一致を見出した。このような気相の反応研究を液相にも展開する目的で、液滴ビーム装置の試作を行なった。
- ナノ秒画像観測分光によってN₂Oの光分解過程を研究した。成層圏における同位体濃縮の起源について提出された、N₂Oの同位体間のゼロ点振動数や変角振動数の差異による効果について検証するために、ゼロ振動状態と振動励起状態からの解離について検討した。解離過程における非断熱遷移効率は、変角振動の励起によって余り大きく変化しないことが明らかになった。さらに詳細な研究を行っている。
- 回転分子線源を用いた衝突エネルギー可変型交差分子線装置を設計、製作した。励起酸素原子O(¹D₂)の反応性散乱の実験準備を進めた。

B-1) 学術論文

H. KATAYANAGI and T. SUZUKI, "Non-Adiabatic Bending Dissociation of OCS: the Effect of Bending Excitation on the Transition Probability," *Chem. Phys. Lett.* **360**, 104 (2002).

B-3) 総説、著書

T. SUZUKI and S. NANBU, "Non-Adiabatic Bending Dissociation of OCS," *Low-Lying Potential Energy Surfaces, ACS Symposium Series* 828, Mark Hoffmann and Kenneth Dyall, Eds., Chapter 14 (2002).

H. KOHGUCHI and T. SUZUKI, "Rotational Inelastic Scattering of Free Radicals," *Annual Report on the Progress of Chemistry* (2002).

B-4) 招待講演

T. SUZUKI, "Femtosecond time-resolved photoelectron imaging," East Asian Workshop on Chemical Dynamics, Seoul (Korea), March 2002.

T. SUZUKI, "Femtosecond time-resolved photoelectron imaging of molecular dynamics," Japan-Taiwan-Sweden Workshop on Chemical Dynamics, Stockholm (Sweden), June 2002.

T. SUZUKI, "Femtosecond time-resolved photoelectron imaging of molecular dynamics," Gordon Conference on Atomic and Molecular Interactions, Rhode Island (U. S. A.), July 2002.

T. SUZUKI, "Femtosecond time-resolved photoelectron imaging of rotational wave packet motion and photoionization dynamics," International Workshop on Photoionization," Himeji (Japan), August 2002.

T. SUZUKI, "Femtosecond time-resolved photoelectron imaging on time-dependent molecular axis alignment and photoionization dynamics," Asian Physics Seminar, Nara (Japan), October 2002.

鈴木俊法, 「画像観測法による化学反応のマイクロスコープ」, 理化学研究所物質・工学交流セミナー, 和光, 2002年7月.

鈴木俊法, 「宇宙空間における酸素原子の化学反応」, 微小重力基礎化学検討会, 東京, 2002年10月.

鈴木俊法, 「Chemical Dynamics Microscopy: 化学反応を散乱画像観測で探る」, 東北物理化学コロキウム, 仙台, 2002年11月.

鈴木俊法, 「画像観測法による化学反応の研究」, 原子衝突研究協会秋の学校, 奈良, 2002年11月.

B-5) 受賞、表彰

鈴木俊法, 分子科学奨励森野基金 (1993年度).

鈴木俊法, 日本化学会進歩賞 (1994年度).

鈴木俊法, 日本分光学会論文賞 (1998年度).

B-6) 学会及び社会的活動

学会の組織委員等

第1回日本台湾分子動力学学会議主催者(1997).

分子構造総合討論会プログラム委員(1997).

第1回東アジア分子動力学学会議主催者(1998).

第15回化学反応討論会組織委員(1999).

分子研研究会「分子及び分子小集団の超高速反応ダイナミクスに関する研究会」主催者(1999).

国際シンポジウム, The International Symposium on Photo-Dynamics and Reaction Dynamics of Molecules, プログラム委員(1999).

分子研研究会「立体反応ダイナミクスの新展開」主催者(2000).

Gordon Conference on Atomic and Molecular Interactions, Discussion Leader (2000).

環太平洋化学会議 シンポジウム, New Frontiers in Chemical Reaction Dynamics, 主催者(2000).

分子科学研究会副委員長(1999-2002).

第16期分子科学研究会副委員長(2002-2004).

B-7) 他大学での講義、客員

岡山大学理学研究科化学専攻, 2002年11月27日 - 28日.

C) 研究活動の課題と展望

分子科学研究所における10年間の研究活動によって、光分解、光イオン化、分子線散乱の全てについて画像観測法を利用した(状態選択)微分散乱断面積レベルの研究を展開し、最高レベルの理論計算と比較しながら化学反応ダイナミクスの研究を展開した。生物化学・ナノサイエンス・環境科学など、分子レベルでの研究はあらゆる分野において必須の研究となっており、分子科学はその中心的な位置を占める。今後とも、化学反応を軸に分子科学の発展を目指す。