

3-4 電子構造研究系

基礎電子化学研究部門

西 信 之 (教授) (1998 年 4 月 1 日着任)

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) 炭素 - 金属ハイブリッドナノ構造体の創成 (遷移金属アセチリド化合物を用いて炭素被覆ナノ金属ワイヤー、磁性ナノロッドを作る。)
- b) 還元法による π 電子系マトリックス中の金属ナノシート、ナノ粒子の生成とその機構。金属プラズモン励起によるナノ粒子間の相互作用
- c) 超高速分光法によるフォトクロミック反応、光異性化反応ダイナミクス
- 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
- e) 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

A-3) 研究活動の概略と主な成果

我々は、物質がクラスターを単位として振る舞うことを明らかにすると共に、その有する特性を最大限に活かすための基礎研究を行っている。水素結合性分子集合系での気相クラスターの構造・反応・計算の仕事は、1980年代から続けているが、その決着は多くの場合精度の高い理論計算と実験との一致という道筋が決まった手法に依っており、東北大学、東京大学、九州大学との共同研究でこれを進めている。液相に於ける混合の問題、特にクラスター形成による局所構造の発生と2種の分子がクラスター集団レベルで初めて混合するという "Micro Phase" の生成を、分子間振動のラマン分光によって発見したが、今後は密度揺らぎに基づくレーリー散乱の裾の異常に注目して新しい展開を行おうとしている。

- a), b) 溶液中でのミクロな相分離は、実は、カーバイドのような多成分系にも見られる。これをその機構から明らかにし、積極的に利用してナノ構造体を構築しようというのが a) b) のテーマである。現在最も力を入れているのは、「光還元法による π 電子系マトリックス中の炭素 - 金属ハイブリッドナノ構造体の創成」というテーマで、有機 - 金属イオン性クラスター分子の結晶薄膜に光を照射し、電荷移動励起状態で有機陰イオンから金属陽イオンへの電子移動による中性化を実現すると、中性金属原子が集合してゆく。ある大きさ以上になると金属プラズモン励起状態を生成し、金属粒子の中で自由電子が発生し、光の電場によって双極子となり、この双極子同士が引き合って合体し、2次元に伸びたナノシートとなり、やがて厚さ10 nmから300 nmの大きな金属シートに成長するというものである。これは、熱励起が表面積最小の球状ナノ粒子を生じる現象と対照的であり、電場方向にシートの成長が見られる。紫外励起が有効であり、フォトマスクを用いたナノリソグラフにも成功している。即ち、未照射部分の結晶は溶媒によって除去されるが、光によって偏析した部分は溶媒に不溶であり有機部分は π 電子系で繋がった高分子となっている。この π 電子系で繋がった高分子は誘電体であり金属ナノシートとの界面で、表面プラズモンを生じる。ナノシートが光の波長よりはるかに短く、誘電体の中にこのようなシートが金属シートの厚さの2倍程度の間隔で分散したものの光学的性質にも興味をもたれる。更に、ナノシートの合体成長過程をお得意の低振動数ラマン分光によって追跡し、その機構を探っている。表面プラズモンが関わるラマン散乱は強度の大きな増強があり、極めて有効なア

ブローチになりうる。

一方、約1 eVのバンドギャップを持つn型半導体のCu₂C₂ナノワイヤーの合成に成功したが、これに熱をかけて銅ワイヤーに炭素が被覆したナノケーブルの作成等にも成功した。このシステムの構造と電気伝導特性を理論計算と実験の対応をさせながら調べている。

また、磁性への興味から様々な遷移金属アセチリド化合物の合成と構造、磁気特性を調べ、光や熱による様々なナノ合金生成、炭素複合体生成とナノ構造の発生を調べている。このような複合体は、純金属粒子の欠点である保持力の大きな増加が見られ、スピン反転温度も極めて高くなるという特徴を持っている。

- c) ジアリルエテンを初めとする様々なホトクロミックシステムや光異性化を示す分子系のフェムト秒・ピコ秒時間分解スペクトルの観測を通じて、これらの反応のダイナミクスを調べている。主として、九州大学、東京工業大学等との共同研究を主体としている。
- d) イオントラップトリプル四重極質量選別システムと、赤外・可視・紫外波長掃引レーザーシステムとを組み合わせ、質量選別された特定のクラスターに光を吸収させ、エネルギーが最終的には付着したアルゴン原子等を解離させることを利用して、クラスターの吸収スペクトルを測定している。得られたスペクトルと精密な理論計算によって得られたスペクトルを比べあわせて、構造決定を行っている。最近では金属イオンの水和構造の決定を行っている。東京大学、九州大学、広島大学および東北大学との共同研究が主体となっている。
- e) 混合系を中心とした液体の中のクラスター構造を、低振動数ラマン分光や液滴の断熱膨張による質量分析を中心に調べている。特に、溶質と溶媒のミクロな相分離状態について系統的な研究が行われている。

B-1) 学術論文

A. MURAOKA, Y. INOKUCHI, N. NISHI and T. NAGATA, “Structure of [(CO₂)_n(H₂O)_m]⁻ (n = 1–4, m = 1,2) Cluster Anions. 1. Infrared Photodissociation Spectroscopy,” *J. Chem. Phys.* **122**, 094303 (2005).

K. WATANABE, A. KOKAJI, Y. INOKUCHI, I. RZEZNICKA, K. OHSHIMO, N. NISHI and T. MATSUSHIMA, “Orientation of Nitrous Oxide on Palladium (1 1 0) by STM,” *Chem. Phys. Lett.* **406**, 474–478 (2005).

K. SAKOTA, C. OKABE, N. NISHI and H. SEKIYA, “Excited State Double Proton Transfer in the 7-Azaindole Dimer in the Gas Phase. 3. Reaction Mechanism Studied by Picosecond Time-Resolved REMPI Spectroscopy,” *J. Phys. Chem. A* **109**, 5245–5247 (2005).

J. NISHIJO, C. OKABE, J. BUSHIRI, K. KOSUGI, N. NISHI and H. SAWA, “Formation of Carbon-Encapsulated Metallic Nano-Particles from Metal Acetylides by Electron Beam Irradiation,” *Eur. Phys. J. D* **34**, 219–222 (2005).

S. -Y. LEE, B. -H. BOO, H. -K. KANG, D. -G. KANG, K. JUDAI, J. NISHIJO and N. NISHI, “Reexamination of the Structures and Energies of Li₂C₂ and Li₄C₄,” *Chem. Phys. Lett.* **411**, 484–491 (2005).

J. NISHIJO, K. KOSUGI, H. SAWA, C. OKABE, K. JUDAI and N. NISHI, “Water-Induced Ferromagnetism in Cobalt Acetylide CoC₂ Nanoparticles,” *Polyhedron* **24**, 2148–2152 (2005).

K. JUDAI, J. NISHIJO, C. OKABE, O. OHISHI, H. SAWA and N. NISHI, “Carbon-Skinned Metallic Wires and Magnetic Nanocrystals Prepared from Metal Acetylides,” *Synth. Met.* **155**, 352–356 (2005).

B-4) 招待講演

N. NISHI, “Microscopic Phase Separation in Binary Mixtures of Hydrogen-bonding Molecules,” Indian Institute of Science Special Lecture, Bangalore (India), 2005年1月.

N. NISHI, “Carbon-skinned metallic wires and magnetic nanocrystals prepared from metal acetylides,” 国際会議「Optical Probe 2005」, Bangalore (India), 2005年1月.

B-5) 特許出願

特許番号:3413491,「質量分析用インターフェース、質量分析計および質量分析方法」, 西 信之(岡崎国立共同研究機構長), 米国特許, 特許番号:USPat. 6,620,624, 2000年.

特許番号:3733428,「磁気クラスター、磁気記録媒体、磁気クラスターの製造方法、および磁気記録媒体の製造方法」, 西 信之(岡崎国立共同研究機構長), US Pat. Appl. 10/347,600, 2002年.

特願2004-026797,「遷移金属アセチリド化合物、ナノ粉末、および遷移金属アセチリド化合物の製造方法」, 西 信之、小杉健太郎(自然科学研究機構長), 2004年.

特願2004-026839,「炭素被覆遷移金属ナノ構造体の製造方法、炭素被覆ナノ構造体パターンの製造方法、炭素被覆遷移金属ナノ構造体、及び炭素被覆ナノ構造体パターン」, 西 信之、小杉健太郎(自然科学研究機構長), 2004年.

B-6) 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-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員

Pacificchem2005 シンポジウム #110“ Frontiers in Structural and Functional Studies of Atomic and Molecular Clusters and Nano-Particles ”組織委員長.

文部科学省、学術振興会等の役員等

日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員 (2004-2005).

学会誌編集委員

Chemical Physics Letters, member of Advisory Board (2005-2008).

科学研究費の研究代表者、班長等

文部科学省 ナノテクノロジー支援プロジェクト「分子・物質総合設計支援・解析支援プロジェクト」総括責任者.

その他

総合研究大学院大学物理科学研究科研究科長 (2004.4-2005.3).

B-8) 他大学での講義、客員

東京工業大学総合理工学部,「クラスターの科学」, 2005年11月17日.

B-10)外部獲得資金

基盤研究(B),「分子イオンクラスター蒸着法による高密度電荷集積と光刺激ダイナミクス」,西 信之 (1995年-1999年).

基盤研究(B),「水溶液中の特異なクラスター集合構造の発生と機能の発現」,西 信之 (1999年-2002年).

日本学術振興会未来開拓学術推進事業,「光によるスーパークラスターの創成とその光計測:単分子磁石の実現」,西 信之 (1999年-2004年).

文部科学省 ナノテクノロジー支援プロジェクト,「分子・物質総合設計支援・解析支援プロジェクト」,西 信之 (2002年-2006年).

基盤研究(B),「金属アセチリド化合物を用いたナノ複合金属炭素構造体の創成と構造科学」,西 信之 (2005年-2007年).

C) 研究活動の課題と展望

2004年にはナノレベルで金属原子と炭素原子のハイブリッド化合物をアセチリドとして実現し,更にこれを用いて金属原子結晶とグラファイトのような炭素層を接合し,金属に結合した皮革や炭素ナノチューブとして金属ワイヤーを包接することに成功した。2005年は,長年培ってきた励起3重項の長寿命と電荷移動状態励起による中性化反応,そしてクラスターの励起状態の性質に関する30年以上に亘る研究経験をナノの世界構築に最大限に活かした発見があった。電子顕微鏡の中に,金属ナノシートが光励起によってのみ出現するのである。溶液の世界で,水とアルコールがミクロスコピックな相分離をクラスターレベルで起こしていることを明らかにしてきたが,それと同じ熱力学的な理由から成分の偏析が起こり,熱では球状のナノ粒子が,光ではナノシートが生じ,異なった電子スペクトルを与えるのである。光の場合は,これら微小ナノシートが次々に集合して広い1枚のシートに合体してゆく。恐るべき光の場のなせる技である。フォトリソグラフで金属ナノ回路を大量生産することもできるが, π 電子系を含む誘電体ポリマーの中にナノシートがラメラ状に分散している初期の物質形態も大変興味深い。とにかく,まず様々な分光学的手法を動員してイメージング手法とカップルさせて,光子場におけるプラズモン励起状態粒子間の相互作用について研究を深めたい。更に,炭素と金属の系に珪素を入れ込んで有機物でも,金属でも,セラミックスでもない,しかし,いずれの性質をも具備した新しい高分子材料を開発してみたい。

電子状態動力学研究部門

大 森 賢 治 (教授)(2003 年 9 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：原子分子光科学、量子光学

A-2) 研究課題：

- a) アト秒精度のコヒーレント制御法の開発
- b) 量子論の検証実験
- c) コヒーレント分子メモリーの開発
- d) 分子ベースの量子情報科学
- e) 強光子場非線形過程の制御
- f) 高精度の化学反応制御

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) コヒーレント制御は、物質の波動関数の量子位相を操作する技術である。その応用は、量子コンピューティングや結合選択的な化学反応制御といった新たなテクノロジーの開発に密接に結び付いている。量子位相を操作するための有望な戦略の一つとして、物質の波動関数に波としての光の位相を転写する方法が考えられる。例えば、二原子分子に核の振動周期よりも短い光パルスを照射すると、「波束」と呼ばれる局在波が結合軸上を行ったり来たりするような状態を造り出す事ができる。この波束は複数の振動固有状態の重ね合わせであり、結合の伸び縮みに対応した古典的な運動をする。波束の発生に際して、数フェムト秒からアト秒のサイクルで振動する光電場の位相は波束の量子位相として分子内に保存されるので、光学サイクルを凌駕する精度で光の位相を操作すれば波束の量子位相を操作することができる。我々はこの考えに基づき、独自に開発したアト秒位相変調器(APM)を用いて、二つのフェムト秒レーザーパルス間の相対位相をサブ10アト秒レベルの精度で操作するとともに、このパルス対によって分子内に発生した二つの波束の相対位相を同様の精度で操作する事に成功した。さらに、これらの高度に制御された波束干渉の様子を、オングストロームの空間分解能とフェムト秒の時間分解能で観測する事に成功した。
- b) APMを用いて、分子内の2個の波束の量子干渉を100%のコントラストで完全制御する事に成功した。また、この高精度量子干渉を量子論的な重ね合わせ状態の検証に応用した。同様に、デコヒーレンス検出器として用いる事によって、熱的な分子集団の回転位相緩和や固体中の光学コヒーレントフォノンの発生に伴うデコヒーレンスを検出する事に成功した。
- c) 光子場の位相情報を分子波束の量子位相として転写する分子メモリーの開発を行なった。ここでは、フェムト秒光パルス対によって分子内に生成した2個の波束間の量子位相差をサブ10アト秒レベルの精度で操作し、これらの干渉の結果生成した第3の波束を構成する各振動固有状態のポピュレーションを観測することによって、それぞれの光パルスの位相情報が高精度で分子内に転写されていることを証明することができた。また、フェムト秒光パルス対の時間間隔をアト秒精度で変化させることによって波束内の固有状態のポピュレーションの比率を任意に操作できることを実証した。
- d) 分子メモリーを量子コンピューターに発展させるためには、 ρ で行ったポピュレーション測定だけでなく、位相の

測定を行う必要がある。そこで我々は ρ の第 3 の波束の時間発展を別のフェムト秒パルスを用いて実時間観測した。これによって、ポピュレーション情報と位相情報の両方を分子に書き込んで保存し、読み出すことが可能であることを実証した。振動固有状態の組を量子ビットとして用いる一分子量子コンピューターの可能性が示された。

- e) アト秒精度のコヒーレント制御法を、強光子場中の希ガス原子の越しきい値イオン化過程に応用する事に成功した。
- f) サブ10アト秒レベルの量子位相精度を達成したことによって電子励起状態を介した反応制御が可能になった。このような反応制御の第一段階として、3原子分子での高精度波束干渉実験の準備を進めている。多原子分子は複数の振動モードをもっているため、 ρ で開発した位相変調パルス発生装置とAPMを組み合わせたシンプルな波束干渉を用いて解離の分岐比を制御できる可能性がある。

B-4) 招待講演

K. OHMORI, “High-Precision Coherent Control of Molecules,” The Fourth Asian Photochemistry Conference, Taipei (Taiwan), January 2005.

K. OHMORI, “Phase Sensitive Memory in Molecular Wave Packets; READ and WRITE,” International Seminar on Atomic Processes in Intense Laser Fields and Related Many-Body Phenomena, Hayama (Japan), January 2005.

大森賢治, 「分子の内部量子状態を用いた光位相敏感メモリー」, 強光子場科学懇談会, 浜松, 2005年1月.

K. OHMORI, “Phase Sensitive Memory in Molecular Wave Packets; How to READ and WRITE with molecules,” Seminar at Pennsylvania University, Philadelphia (U.S.A.), February 2005.

K. OHMORI, “Phase Sensitive Memory in Molecular Wave Packets; How to READ and WRITE with molecules,” Seminar at Temple University, Philadelphia (U.S.A.), February 2005.

K. OHMORI, “Phase Sensitive Memory in Molecular Wave Packets; READ and WRITE,” 11th Japan-Korea Joint Symposium on Frontiers in Molecular Science, Okazaki (Japan), March 2005.

大森賢治, 「分子の内部量子状態を用いた光位相敏感メモリー」, 理研・分子研合同シンポジウム「エクストリームフォトリクス研究」, 和光, 2005年4月.

大森賢治, 「分子の内部量子状態を用いた光位相敏感メモリー」, 東京大学化学システム工学セミナー, 東京, 2005年6月.

大森賢治, 「アト秒への道」, ディスカッションリーダー, 分子科学シンポジウム, 岡崎, 2005年6月.

大森賢治, 「分子振動波束の時間位置分解観測と精密量子制御のためのイメージング表示」, 自然科学研究機構連携研究プロジェクト「Imaging Science」第1回シンポジウム, 岡崎, 2005年8月.

大森賢治, 「アト秒コヒーレント制御法の開発と応用」, 東京工業大学流動機構セミナー, 東京, 2005年10月.

K. OHMORI, “Visualizing Picometric Quantum Ripples of Ultrafast Wave-Packet Interference,” International Symposium on Ultrafast Intense Laser Science 4, Honolulu (U.S.A.), December 2005.

K. OHMORI, “Ultrahigh-Precision Coherent Control of Molecular Wave Packets,” Pacificchem 2005, Honolulu (U.S.A.), December 2005.

B-6) 受賞、表彰

大森賢治, 東北大学教育研究総合奨励金 (1995).

大森賢治, 光科学技術研究振興財団研究表彰 (1998).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

分子科学研究会委員 (2002-).

分子科学会設立検討委員 (2005-).

学会の組織委員

International Conference on Spectral Line Shapes 国際プログラム委員 (1998-).

21st International Conference on the Physics of Electronic and Atomic Collisions 準備委員, 組織委員 (1999).

The 5th East Asian Workshop on Chemical Reactions 組織委員長 (2001).

分子構造総合討論会実行委員 (1995).

第19回化学反応討論会実行委員 (2003).

原子・分子・光科学(AMO) 討論会プログラム委員 (2003-).

その他

平成16年度安城市シルバーカレッジ「原子のさざ波と不思議な量子の世界」.

岡崎市立小豆坂小学校 第17回・親子おもしろ科学教室「波と粒の話」.

B-7) 他大学での講義、客員

東北大学多元物質科学研究所, 客員教授, 2004年4月 - 2005年3月.

北海道大学工学部, 「超高速量子動力学 ~ 量子光学の基礎からアト秒分光まで ~ 」, 2005年11月16日 - 18日.

B-10) 外部獲得資金

基盤研究(A), 「サブ10アト秒精度の量子位相操作と単一分子量子コンピューティング」, 大森賢治 (2003年 - 2005年).

特定領域研究(2)「強レーザー光子場における分子制御」計画班, 「単一原子分子のアト秒コヒーレント制御」, 大森賢治 (2003年 - 2005年).

基盤研究(B), 「アト秒波束干渉制御法の開発と量子コンピューティングへの応用」, 大森賢治 (2001年 - 2002年).

特定領域研究(A)「物質設計と反応制御の分子物理化学」, 「ファンデルワールス半衝突反応のフェムト秒ダイナミクスと超高速光子制御」, 大森賢治 (1999年 - 2001年).

基盤研究(C), 「強レーザー場中の金属クラスターのクーロン爆発および高調波発生の実時間観測と制御」, 大森賢治 (1999年 - 2000年).

C) 研究活動の課題と展望

今後我々の研究グループでは APMを高感度のデコヒーレンス検出器として量子論の基礎的な検証に用いると共に より自由度の高い量子位相操作技術への発展を試みる。そしてそれらを希薄な分子集団や凝縮相・固体・表面に適用することによって「アト秒量子エンジニアリング」と呼ばれる新しい領域の開拓を目指している。当面は以下の4テーマの実現に向けて研究を行なっていきたい。

デコヒーレンスの検証と抑制: デコヒーレンスは物質の波としての性質が失われて行く過程である。量子論における観測問題と密接なつながりをもつ重要なテーマであるとともに、テクノロジーの観点からは、反応制御や量子情報処理のエラーを引き起こす主要な要因である。その本質に迫り、制御法を探索する。

高精度の化学反応制御:サブ10アト秒レベルの量子位相精度は紫外光を用いたコヒーレント制御を可能にする。これによって分子の電子励起状態を利用した高精度の反応制御が可能になるであろう。

アト秒軟X線パルス源の開発と応用:強光子場中の高次非線形過程をコヒーレント制御し、効率の良いアト秒軟X線パルス源の開発を目指す。これをアト秒時間分解分光に用いる。

分子ベースの量子情報科学の開拓:高精度の量子位相操作によって分子内の複数の自由度を用いる任意のユニタリ変換とそれに基づく高度な量子情報処理の実現を目指す。

これらの研究の途上で量子論を深く理解するための何らかのヒントが得られるかもしれない。その理解はテクノロジーの改革を促すだろう。我々が考えている「アト秒量子エンジニアリング」とは、量子論の検証とそのテクノロジー応用の両方を含む概念である。

大 島 康 裕 (教授) (2004 年 9 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：分子分光学、化学反応動力学

A-2) 研究課題：

- a) 大振幅な構造変形運動に関する量子波束の生成と観測
- b) 非断熱相互作用による量子固有状態分布移動の実現
- c) 気相芳香族クラスターにおける分子間相互作用の精密決定

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) さまざまなタイプの分子について運動量子波束の追跡が行えるような、高い適応性を持ったフェムト秒実時間分光法の開発を進めている。特に、ねじれ振動のように大規模な構造変形へとつながる運動の量子波束観測に重点を置いている。昨年度において、相対位相をランダムに変調した同一波長パルス対を用いる干渉計測法 (COIN ; Coherence Observation by Interference Noise) により、*p*-フルオロトルエンの S_1-S_0 遷移におけるメチル基内部回転量子波束の観測に成功している。本年度は、より高強度のパルス対を用いることにより、非線形コヒーレント光学過程の 1 種である TRFD (Time-Resolved Fluorescence Depletion) による内部回転量子波束の観測に成功した。COIN と TRFD による結果を対照することにより、電子遷移の振電準位構造を特定できることを示した。*o*-フルオロトルエンでは、TRFD によって電子励起状態における内部回転量子波束が観測されたが、さらに *m*-クレゾールを対象とした測定を行うことにより、電子基底状態における量子波束の観測にも成功した。これらの結果により、一般の多原子分子においても、基底状態 → 励起状態 → 基底状態という経路にわたって、数%以上の効率でコヒーレントな分布移動が実現できることを実証した。
- b) 本年度より、高強度な極短パルス電場と分子とのインパルス的な相互作用によって量子固有状態分布を非断熱的に移動する手法の開発を開始した。具体的には、ジェット冷却により初期分布を制限した分子集団に、再生増幅フェムト秒チタンサファイアレーザーの基本波出力により非共鳴的に相互作用を加え、その後、ナノ秒レーザー光による共鳴多光子イオン化によって固有状態分布測定を行う。このための TOF 質量分析用真空チャンバーを新たに作成した。さらに、最も簡単な系である 2 原子分子の 1 例として NO を取り上げ、回転温度 ~2 K の Boltzman 分布で表されるスペクトルが、フェムト秒レーザーの照射によって有意に変化することを実証した。また、非断熱的な分布移動に関するモデル計算コードの開発も行った。
- c) 芳香環の関与する分子間相互作用ポテンシャルを精密に研究する目的で、TOF 質量選別法と組み合わせたレーザー分光によってベンゼンクラスターの電子遷移の観測を行っている。本年度は、 π 水素結合を有する典型的な系であるベンゼン - 水の 1:1 クラスターについて重点的に研究を行なった。2 重共鳴レーザー分光の一種であるホールバーニング法を適用することにより、小さな遷移強度しか持たない分子間モード励起バンドを高感度で検出することに成功した。水に関する 3 つの同位体種について測定を行い、観測された系統的なバンドシフトから振動モードの帰属を行った。特に、 40 cm^{-1} 以下という低波数領域に、特徴的な同位体シフトを示す極めて微弱な遷移が存在することを見出した。これらは水分子の 3 次元的な内部回転運動に対応した振動バンドであり、既に報告されている 6 次元動力学計算と比較すると、極めて大きく低波数側にずれている。この結果は、計算で用いられたモデルポテンシャルの形状に問題があり、実際はより異方性の低いポテンシャルであることを示すものである。また、HDO のクラス

ターでは H_2O や D_2O では禁制なバンドが明瞭に観測されるようになることから、非対称的な同位体置換によって分子間ポテンシャル自体が歪むことが明らかになった。

B-1) 学術論文

Y. OHSHIMA, K. SATO, Y. SUMIYOSHI and Y. ENDO, "Rotational Spectrum and Hydrogen Bonding of the H_2O -HO Radical Complex," *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 1108-1109 (2005).

B-3) 総説、著書

大島康裕, 「レーザー誘起蛍光と関連技術」, 第5版実験化学講座9「物質の構造I 分光 上」, 日本化学会編, 丸善, 4.4章(2005).

B-6) 受賞、表彰

大島康裕, 分子科学研究奨励森野基金 (1994).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

日本分光学会装置部会企画委員 (1995-1999).

日本化学会近畿支部幹事 (2001-2003).

日本化学会東海支部幹事 (2005-).

分子科学研究会委員 (2004-).

分子構造総合討論会運営委員 (2004-).

学会の組織委員

The East Asian Workshop on Chemical Reactions, Local Executive Committee (1999).

分子構造総合討論会実行委員 (2002-2003).

化学反応討論会実行委員 (2005-2006).

学会誌編集委員

日本化学会誌(化学と工業化学) 編集委員 (2001-2002).

B-10) 外部獲得資金

一般研究(C), 「ラジカル反応における分子間相互作用」, 大島康裕 (1995年).

一般研究(B), 「溶媒和クラスター内エネルギー散逸過程の実時間領域測定」, 大島康裕 (1996年-1997年).

三菱油化化学研究奨励基金, 「分子配置の量子波束制御と化学反応コントロール」, 大島康裕 (1998年).

基盤研究(B), 「微視的溶媒和による無輻射過程の制御機構の解明」, 大島康裕 (1998年-2000年).

日本証券奨学財団研究調査助成, 「1重項酸素生成機構の分子論的解明」, 大島康裕 (2000年-2001年).

旭硝子財団研究助成, 「1重項酸素生成機構の分子論的解明」, 大島康裕 (2000年-2001年).

日本原子力研究所黎明研究, 「気体分子の配向完全制御と動的構造決定への応用」, 大島康裕 (2002年).

住友財団基礎科学研究助成, 「気体分子の配向完全制御と動的構造決定への応用」, 大島康裕 (2002年).

基盤研究(B),「孤立少数自由度系における構造相転移の実験的探索」, 大島康裕 (2002年-2004年).

光科学技術振興財団研究助成,「コヒーレント光による分子運動の量子操作」, 大島康裕 (2003年-2004年).

特定領域研究(強光子場分子制御)(公募),「強光子場による分子配列・変形の分光学的キャラクタリゼーション」, 大島康裕 (2003年-2005年).

C) 研究活動の課題と展望

極短パルス光を用いるa) b)の研究は順調に進捗したところであり,光パルスのパラメーターの最適化,さらに,波形整形技術の導入によって,目的とする運動状態のさらなる効率的な生成を追求したい。その上で,特定の運動状態から(光解離・異性化などの)化学反応を進行させる研究へと発展させる。c)に関しては,実験データを再現するモデルポテンシャルの構築が急務であり,国内外の理論研究者との共同研究の道を探りたい。また,電子基底状態における分子間振動準位構造についても幅広いエネルギー領域で高精度のデータを得るために,高分解能非線形コヒーレント分光を適用する予定である。そのために,現在着手しているフーリエ限界ナノ秒パルス光源の開発を至急進める。