

電子構造研究系

電子構造研究系では、分子および分子の集合体がそれらの電子構造の違いによって多様な固有の性質を発現することに注目し、化学反応、電子移動、エネルギー移動、情報伝達などの分子機構を電子構造の立場から明らかにし、物質・エネルギー変換の分子論的基礎を確立することを目指している。

基礎電子化学部門

(後列)

中林孝和

(中列左から)

加茂 理、小杉健太郎、

寛 美知子、鈴木優子

(前列左から)

井口佳哉、西 信之、

日野和之



1. 溶液の中のクラスター

水はそこに溶けている分子を組織化したクラスター構造に配列したり、逆に自身の構造を破壊することによって強い静電力を持つ分子を安定化し、この分子を核とする大きなクラスターを形成する。このようなクラスターは溶液の物性を決めるばかりでなく、反応場を形成し、分子集合体の機能発現に重要な役割を果たす。このような機構を構造との関わりに注目して明らかにしている。

2. 分子クラスターイオンの電荷共鳴と電荷輸送

π 電子を持つ分子クラスターイオンにおける電荷の極在性、クラスター内の分子運動に同期した電荷のホッピング、赤外光による電荷分離と電荷移動の機構を、イオントラップ分光法、液体中におけるイオン生成に伴う超高速時間分解分光法等によって調べ、光によるナノスケールの電子輸送制御の可能性を探っている。

3. スーパークラスターの光合成と磁性、光計測

単分子でありながら極めて大きなスピン多重度を持つスーパークラスターを合成し、様々なクラスター分析の手法を動員して光によるその生成機構を解明し、実用可能な単分子磁石への道を探っている。

(左から)

鈴木優子、佃 達哉



4. ナノクラスターの創製と機能発現機構の解明

ナノメートルサイズの金属クラスターは、バルクの金属や原子とは異なる化学的・物理的な性質を持ったユニークな物質系である。まず、溶液中での金属クラスターの生成過程を追跡することによって、構造やサイズが揃ったクラスターの大量合成の方法の確立を目指す。また、調製したクラスターの反応性を調べ、幾何・電子構造との相関に注目しながら

ら、クラスターの機能が発現する機構を明らかにする。

電子状態動力学研究部門

1. 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

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により選択的にイオン化して検出するイオン化検出赤外分光法により、孤立分子状態での高振動状態を観測する。さらに、高振動状態からの緩和過程（反応初期過程）や振動誘起反応の可能性を追求する。

2. パルス電場イオン化（PFI-ZEKE）光電子分光法による分子カチオンの振動分光

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（分解能 $\sim 10^{-4}$ eV）により、分子カチオンの振動回転構造を観測し、気相分子カチオンの分子構造と緩和過程を研究する。

3. 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

凝縮相の一部である、気相分子クラスターに赤外 - 紫外二重共鳴分光法である IR-Dip 分光法を適用し、基底状態（ S_0 ）、電子励起状態（ S_1 ）、カチオン（ D_0 ）さらには、光反応生成物の赤外スペクトルを観測する。振動スペクトル解析および Ab initio MO 計算との比較から、分子・クラスターの構造と動的挙動の関係を研究する。

4. 交差分子線画像観測法による化学反応動力学の研究

高分解能画像観測装置を組み込んだ交差分子線装置により、反応性散乱の微分散乱断面積を求め、量子化学計算で求められたポテンシャル曲面上での散乱計算と詳細に比較することにより、反応動力学を明らかにする。特に、成層圏オゾン層における化学反応を明らかにする目的で、 $O(^1D)$ 原子の反応について研究プロジェクトを進めている。

5. フェムト秒時間分解光イオン化法による化学反応の実時間追跡

フェムト秒時間分解光電子画像観測法により、孤立多原子分子や分子小集団における超高速位相緩和を実時間追跡し、非断熱動力学を明らかにする。



（後列左から）

酒井 誠、佐伯盛久、
渡邊武史、石内俊一

（前列左から）

藤井正明、稲垣いつ子



（後列左から）

坪内雅明、高口博志

（前列左から）

鈴木俊法、HOSSAIN, Delwar、
片柳英樹

電子構造研究部門（客員研究部門）

ヘテロポリ酸が金属酸化物の諸物性を分子論的に理解する上での格好の化合物であることに着目し、これを基盤とした分子素子の構築や無機医薬の実現に力を注いでいる。

1．ヘテロポリ酸の合成と構造化学（混合原子価状態，希土類金属等を含む種々のヘテロポリ酸の合成を行い化学構造を支配する構造化学的原理と電気および磁氣的性質との関連に関する詳細を求める。）

2．ヘテロポリ酸の光化学と応用（酸素→金属への電荷移動吸収帯の光励起により生ずる励起三重項状態の酸化還元反応やエネルギー移動の詳細を求め，触媒，EL素子，クロミック素子，発光素子，分子磁石等への応用を試みている。）

分子エネルギー変換研究部門（外国人客員研究部門）

分子及び分子集合体の性質とその機能をエネルギー変換の観点から広く研究する。そのため新しい物性をもつ物質系を斬新な手法を用いて合成・構築するとともに，その分子機能（光起電力，光触媒効果，表面電子移動，選択的触媒反応）発現の分子過程を分光学的手法等により研究し，化学的エネルギー変換の新しい原理を確立する。