

量子化学 I 分野

寺寄 亨 教授

教育について

〈教育目標〉

2010 年 10 月に着任し研究室配属の学生はまだいないため、教育については、専ら学部学生と大学院生への講義を行う。基礎的な内容を確実におさえ、具体的な問題へ展開してゆける素養を身につけることを目標とする。

〈教育内容〉

学部 3 年生の「分子構造論」および大学院生の「構造化学特論 I」の講義を担当した。「分子構造論」では、分子の振動と回転運動について量子化学的な取り扱いを述べ、分光データから如何にして分子構造の情報を導き出すかを講義した。期末試験の結果から、講義内容は概ね学生の身についたものと判断している。一方、「構造化学特論 I」では、自分の専門分野である原子分子クラスターの物理化学について講義し、原子の数によって劇的に変化するクラスターの物性や反応性について、研究例を具体的に紹介した。とりわけ、実験技術の詳細にも踏み込んで講義を行い、実験研究の醍醐味を伝えるように心がけた。課題として課したレポートから、これらが学生によく浸透したものと思っている。さらに、後期特別談話会にて口頭発表とポスター発表を行い、特に学部 3 年生に向けて、研究内容を具体的に伝える機会を持った。

〈担当した講義・実験科目〉

寺寄 亨

- (1) 分子構造論 学部教育（講義、学部 3 年後期、2 単位）
- (2) 構造化学特論 I 大学院教育（講義、大学院後期、2 単位）

研究について

〈研究目標〉

原子分子クラスターの基本的な特性を、質量分析技術と分光学を基礎として探究する。着任直後の今年度は、豊田工業大学を併任して研究を推進し、同大学の研究室にて主に金属クラスターの反応性の研究を、さらに共同研究先であるドイツの放射光施設 BESSY II にて遷移金属クラスターの磁性研究を推進する。

〈研究概要〉

孤立状態の金属クラスターを対象に、特異な物性・反応性と、それらの特徴づける電子構造・幾何構造の解明を主題に研究を推進した。第一に、金属クラスターが真空中の残留酸素ガスと高い反応性を示すことを見出した。この事実に着目し、反応断面積の評価と最終生成物に至る反応ダイナミクスの追跡を Cr クラスターについて行った。さらに

反応を利用した幾何構造の評価手段として、窒素分子の吸着数から Au クラスターの特徴的な幾何構造を同定できることを実証した。第二に、遷移金属クラスターの磁性に着目し、とりわけ、Mn や Cr のクラスターが固体金属とは全く異なる強磁性種であると予期されることから、その磁性発現メカニズムを分光学的な実験で明らかにすることを狙いとした。そのために、ドイツの放射光施設 BESSY II との共同研究を開始し、20 量体までの Fe クラスターについて内殻電子の吸収を捉える X線吸収・磁気円二色性分光 (XMCD) の測定に成功し、磁性発現の解明に向けた研究をスタートした。

〈研究課題と進展状況〉

主な研究課題は以下の通りである：

- (1) 金属クラスターの反応実験
- (2) 金属クラスターの磁性実験

課題(1)では、酸素との反応性がとりわけ高いクロムクラスターについて、多数回衝突条件下での酸化過程を 2 – 4 量体正イオンについて実験を行い、反応速度の解析から反応中間体の存在や反応経路の分岐比を明らかにした。さらに、金クラスターと窒素分子との吸着反応を 2 – 10 量体の範囲で調べ、7 量体以下の平面型クラスターにおいて吸着する窒素分子の数と構造とが相関していることを明らかにした。一方で、立体構造となる 8 量体以上では、分子吸着が起きないことを見出した。現在、反応速度の測定から反応ダイナミクスの解析を進めている。

課題(2)では、ベルリンの放射光施設 BESSY II チームと共同で、サイズの揃った遷移金属クラスターについて、X線磁気円二色性実験を成功させた。まず、代表的な磁性元素である鉄について、2 – 20 量体クラスターイオンの実験を行い、いずれも固体よりも大きなスピン磁気モーメントを持つことを見出した。一方で、単原子がもつ軌道磁気モーメントは 5 量体までにすでにほぼ消失してしまうことを突き止めた。このように、孤立状態のクラスターの磁気特性が初めて実験で捉えられるようになり、今後、種々の系への適用を計画している。

2. 1 研究分野

物理化学 (原子分子クラスター科学)

2. 2 研究課題

少数の原子・分子で構成されるクラスターの物性・反応性研究。とりわけ、原子の数 (サイズ) に依存して劇的に変化する特性を、質量分析法や分光学を基本とした実験で探究する。

2. 3 学術論文

[1] K. Egashira, A. Terasaki, and T. Kondow

“Photon-trap spectroscopy applied to molecules adsorbed on a solid surface: probing with a standing wave versus a propagating wave”

(光閉じ込め分光法の固体表面吸着分子への適用：定在波と進行波の特徴)

Appl. Opt. **49**, 1151-1157 (2010).

[2] G. Naresh Patwari, T. Ito, K. Egashira, and A. Terasaki

“Probing structures of small gold cluster cations with dinitrogen”

(窒素分子吸着による小さな金クラスターイオンの構造探索)

Chemistry - An Asian Journal **6**, 1834-1838 (2011).

[3] K. Egashira, C. Bartels, T. Kondow, and A. Terasaki

“Optical absorption spectrum of the silver dimer ion: Temperature dependence measured by photodissociation and photon-trap spectroscopy”

(銀2量体イオンの光吸収スペクトル:光解離法と光閉じ込め法による温度依存性測定)

Eur. Phys. J. D, in press.

2. 4 紀要・総説・著書等

[1] A. Terasaki

“Dynamics of a liquid droplet excited by infrared multi-photon absorption”

In *Advances in Multi-Photon Processes and Spectroscopy*, Vol. 19, Chap. 2, ed. by S. H. Lin, A. A. Villaeys, and Y. Fujimura (World Scientific, Singapore, 2010) pp. 31-66.

2. 5 国際会議における学術講演・海外での講義

[1] A. Terasaki (Invited talk)

“Spectroscopy of trapped atomic and cluster ions using an optical cavity: Photoabsorption, magneto-optical effects, and optical pumping”

Workshop on Ion Traps and Guides for Spectroscopy and Chemistry
Telluride, CO, USA (July 19-23, 2010)

[2] A. Terasaki (Lecture)

“Extension of cavity ring-down spectroscopy: from mass-selected trapped ions to surface-adsorbate molecules”

Physical Chemistry Seminar in Department of Chemistry, University of Illinois at Urbana-Champaign

Urbana, IL, USA (July 26, 2010)

[3] A. Terasaki (Lecture)

“Dynamics of a liquid droplet initiated by mid-IR laser pulse”

Group Seminar of Professor Wöste in Freie Universität Berlin

Berlin, Germany (August 25, 2010)

[4] K. Egashira, C. Bartels, A. Terasaki, and T. Kondow (Poster presentation)

“Photon-trap spectroscopy of trapped cluster ions: Measurements of direct photoabsorption and magneto-optical effects”

Molecular and Ionic Clusters Conference

Tokamachi, Japan (September 5-10, 2010)

[5] A. Terasaki, K. Egashira, C. Bartels, and T. Kondow (Poster presentation)

“Temperature dependence of optical absorption spectrum of the silver dimer ion measured by photodissociation and photon-trap spectroscopy”

Fifteenth International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters (ISSPIC 15)

Oaxaca, Mexico (September 19-26, 2010)

[6] A. Terasaki (Invited talk)

“Spectroscopy of free clusters by using an ion trap”

Molecular Photoscience Research Center International Symposium “New Horizons of Cluster Chemistry”

Kobe, Japan (October 9-10, 2010)

[7] A. Terasaki (Invited talk)

“Atomic and molecular clusters as post-nano materials”

The Fifth International Conference on Advanced Materials and Nanotechnology

Wellington, New Zealand (February 7-11, 2011)

[8] J. T. Lau, M. Niemeyer, K. Hirsch, A. Langenberg, V. Zamudio-Bayer, M. Vogel, M. Kossick, C. Ebrecht, K. Egashira, A. Terasaki, T. Möller, and B. von Issendorff (Hot topics talk)

“Spin and orbit contributions to magnetic moments of size-selected trapped Fe_n^+ and Co_n^+ cluster ions: XMCD study”

Symposium on Size Selected Clusters

Davos, Switzerland (March 20-25, 2011)

[9] K. Hirsch, S. Forin, M. Vogel, J. Rittmann, V. Zamudio-Bayer, A. Langenberg, M. Niemeyer, C. Ebrecht, K. Egashira, T. Möller, A. Terasaki, B. von Issendorff, and J. T. Lau (Poster presentation)

“Electronic structure of magnetic impurities in gold clusters”

Symposium on Size Selected Clusters
Davos, Switzerland (March 20-25, 2011)

[10] V. Zamudio-Bayer, K. Hirsch, J. Rittmann, M. Niemeyer, C. Ebrecht, M. Kossick, M. Vogel, A. Langenberg, K. Egashira, A. Terasaki, S. Minniberger, A. Rydlo, W. Harbich, T. Möller, B. von Issendorff, and J. T. Lau (Poster presentation)

“Electronic, optical, and magnetic properties of pure and doped silicon clusters”

Symposium on Size Selected Clusters
Davos, Switzerland (March 20-25, 2011)

2. 6 国内学術講演会における招待・特別講演

[1] 寺寄 亨 (招待講演)

「クラスター科学発展の軌跡と展望：近藤保先生を偲んで」

ナノ学会第8回大会

岡崎 (2010年5月13-15日)

2. 7 海外研究者の受け入れ

[1] Prof. Naresh Patwari Ganpathi, Associate Professor of Indian Institute of Technology Bombay (2010年5月16日～2011年1月31日) (前任地・豊田工業大学にて)

2. 15 学外における学界活動

[1] 豊田工業大学 併任

[2] ナノ学会 監事 (寺寄 亨)

[3] Member of International Advisory Committee of “Symposium on Size Selected Clusters” (寺寄 亨)

[4] 日本化学会 第91春季年会プログラム小委員会 部門幹事(04-物理化学-反応) (寺寄 亨)

[5] 分子科学会 運営委員 (寺寄 亨)

[6] Member of International Advisory Committee of “International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters” (寺寄 亨)