

## 量子化学分野

寺寄 亨 教授、原田賢介 講師、荒川 雅 助教

### 教育について

(量子化学研究室 I : 寺寄・荒川グループ)

〈教育目標〉

原子や分子を記述する量子化学の考え方を軸に、物質の成り立ちとその性質をミクロな視点から理解し、これら物理化学の素養を基礎に広く社会で活躍する人材の育成を目標とする。講義では、化学結合の形成、振動・回転など分子の運動、原子集合体の形成とその構造・物性など、物質の成り立ちについて理解を深めるとともに、物質の性質を調べる強力な手段である分光学について、光の性質や物質と光との相互作用を扱う。これらを題材に、学部学生・大学院生を対象として、最先端科学技術の要である量子論の基礎とその発展動向を講義する。学生実験では、講義で扱った事柄のいくつかを、実験・解析を通して体験することを目的とする。研究室では、さらに実践的な経験を積み、挑戦的な研究課題を成し遂げることを目標に、種々の実験技術の修得、ならびに、問題を解決しながら研究を遂行する実行力の養成を重視した教育を行う。これらと並行して、国際的な活動を通して、広く世界で活躍する人材の育成に注力する。

〈教育内容〉

講義では、学部 1 年生の基幹教育科目「基礎化学結合論」および学部 3 年生の専攻教育科目「分子構造論」を担当した。「基礎化学結合論」では、分子の形成について、古典的なルイス構造の考え方から現代的な量子論へと展開し、シュレーディンガーの波動方程式に基づいて原子軌道、分子軌道の理解へと導く化学結合の量子化学的な考え方を講義した。一方、「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、分光データから分子構造の情報を導き出す過程を講義した。学生にとってはどちらも苦手意識の高い科目と思われるが、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。

学部 3 年生向けの学生実験では、「窒素レーザーの製作」と「エレクトロニクス」を担当した。前者では、高電圧を印加して空気中の窒素分子を励起してレーザー発振させる装置を学生それぞれに体験させ、組み立てた窒素レーザーを励起光源として色素の蛍光観察を行って、レーザーの発振原理や光の回折・干渉を学ぶ課題とした。後者は、演算増幅器を用いた回路の作製、オシロスコープを用いた回路特性の測定、加算回路や積分回路・微分回路の組み立て・理解など、化学実験の測定手段として不可欠な電子回路の初歩を学ぶ課題とした。

研究室では、学部 4 年生 (2 名)、修士 1 年生 (3 名)、修士 2 年生 (2 名)、博士後期 1 年生 (1 名)、博士後期 2 年生 (1 名) を対象に教育を行った。新規配属の学部生には、まず、真空装置と電子機器からなる実験装置の操作を習得させ、一人で実験作業を行え

るように訓練した。また、理学部工場の実習に全員が参加して金属加工を体験し、実験に必要な簡単な部品は自作でき、複雑な装置は設計図を描けるようになった。それぞれに、金属クラスターの化学反応や分光、その理論解析などの課題を与え、卒業論文をまとめた。修士1年の学生は、卒業研究の成果をさらに発展させる研究に取り組んだ。修士2年の学生は、昨年度からの研究を継続して修士論文をまとめた。博士後期1年に進学した学生は、真空中の液体の蒸発過程の熱力学研究を発展させた。博士後期2年の学生は、合金クラスターの反応性研究を継続した。これらの成果を、当研究室が主催した国際会議(8月、12月)をはじめ、分子科学討論会(9月)、日本化学会春季年会(3月)等で発表した。特筆すべきこととして、博士後期2年の学生が、インドで開催された国際シンポジウムで **The Best Poster Award** を受賞した。国内では、博士後期1年の学生が、第9回分子科学討論会で優秀ポスター賞を受賞した。

一方、これら研究活動による教育と並行して、分子の量子論の基礎を丁寧に扱った英文教科書“**Molecular Physics and Elements of Quantum Chemistry**” (Haken and Wolf)の輪読を量子化学研究室 II と合同で行い、量子化学の基本とともに英文の読解力を養った。さらに、国際的な活動を通じた教育の一環として、日印二国間交流事業共同研究をインド工科大学ボンベイ校と協力して進め、大学院生の相互派遣を行った。また、分子科学研究奨励森野基金の支援を受けて **Nanoscale Atomic and Molecular Systems** に関する国際ワークショップを主催し、外国人招聘講師らからナノスケール物質の最先端研究について講義を受けて討論し、学術的な視野を広げた。ワークショップの運営には全ての大学院生が携わり、英語力を含め、文化面でも国際的な経験を積んだ。さらには、環太平洋国際化学会議 (Pacifichem) でシンポジウムを主催し、大学院生がポスター賞に挑んで発表を行った。

(量子化学研究室 II : 原田グループ)

〈教育目標〉

学部4年生については、分子分光学の初歩的な知識を獲得させるとともに、科学的・論理的に思考し討論することができるよう練習し、また与えられた研究課題を確実に実行できる能力を得させることを目標としている。修士課程の学生については、分子分光学の専門的な知識を獲得させるとともに、科学的・論理的に思考し討論することができる能力を向上し、研究課題を発展・展開することができるようにすることを目標としている。また発表の能力を高めるよう訓練する。博士課程の学生については、分子分光学の高度な知識を獲得させるとともに、新しい研究手法を開発したり、新しい理論を展開したり、自ら研究課題を見つけ出すことができる能力を培う。また外国語で論文を書ける力を得させることを目標としている。

〈教育内容〉

研究室セミナーでは、2種類のプログラムによって教育を行っている。一方は、英文テキストの輪読により、英文の読解力を鍛え、かつ分光学に関する基礎的な知識を授けることを目的とするもので、今年度は量子化学研究室 I と合同で、**H. Haken and H. C.**

Wolf, “Molecular Physics and Elements of Quantum Chemistry”を輪読した。他方は、研究の中間報告を主目的とするものである。研究の中間発表では、文献調査、実験の企画及び準備の状況、実験結果、解析結果、理論的考察などを報告させ、討論を行った。この他に、量子力学に関する講義・演習を行った。

(量子化学研究室 I・II)

〈担当した講義・実験科目〉

寺寄 亨

- (1) 基礎化学結合論 基幹教育 (講義、1 年前期、1.5 単位)
- (2) 分子構造論 専攻教育 (講義、3 年前期、2 単位)
- (3) 化学特別研究 専攻教育 (実験演習、4 年通年、8 単位)
- (4) 化学特別研究 I 大学院教育 (実験演習、修士 1 年通年、5 単位)
- (5) 化学特別研究 II 大学院教育 (実験演習、修士 2 年通年、5 単位)
- (6) 英語演習 I 大学院教育 (演習、修士 1 年後期、1 単位)
- (7) 英語演習 II 大学院教育 (演習、修士 2 年前期、1 単位)
- (8) 化学特別研究 大学院教育 (実験演習、博士後期 3 年間、12 単位)

原田 賢介

- (1) 構造化学実験 専攻教育 (実験、3 年後期、2 単位)
- (2) 量子化学 I 専攻教育 (講義、2 年前期、2 単位)
- (3) 基礎化学結合論 基幹教育 (講義、1 年後期、1.5 単位、1 クラス)
- (4) 自然科学総合実験 基幹教育 (講義、2 年前期、2 単位)
- (5) 化学特別研究 専攻教育 (実験演習、4 年通年、8 単位)
- (6) 化学特別研究 I 大学院教育 (実験演習、修士 1 年通年、5 単位)

荒川 雅

- (1) 化学実験基本操作法 専攻教育 (実験、学部 2 年後期)
- (2) 構造化学実験 専攻教育 (実験、3 年後期、2 単位)

〈修士論文〉

飛田 健一朗 「銀クラスター正イオンの光吸収分光：サイズによる電子の励起挙動の変化」

“Optical absorption spectroscopy of silver cluster cations: size-dependent characters of electronic transitions”

村上 遼平 「金属クラスターと気相分子・クラスターとの反応観察を目指した実験装置の開発」

“Development of apparatus for observation of metal-cluster reaction with molecules and molecular clusters”

〈卒業論文〉

重田 翼 「Reaction of silicon-oxide and magnesium-silicon-oxide cluster anions with a water molecule」

河野 知生 「金属クラスター負イオンと気相分子との反応実験に向けた装置開発と特性評価」

渡部 玲於 「Ar-DCN 分子錯体の  $j=2\leftarrow 1$  内部回転バンドのミリ波ジェット分光」

## 研究について

(量子化学研究室 I : 寺寄・荒川グループ)

〈研究目標〉

現行のナノ物質科学からさらに微細な物質を扱う次世代への開拓が進む中で、原子の数(サイズ)が数~数十個の原子分子クラスターに注目し、これら極微小な世界に特有の基礎物性を物理化学的な視点と手段で探究する。極微物質であるクラスターの特質は、原子 1 個の増減で物性や反応性が不規則かつ劇的に変化し(サイズ効果)、従来の常識を超えた新物質の発見が期待されることであり、元素代替等の視点からの期待も高い。我々は、原子数をパラメータとして千変万化するこれらクラスターを新たな物質群と捉え、究極のナノ物質科学の開拓を視野に入れて、物質科学の本質に迫る新たな学問分野の構築を目指して研究を推進する。具体的な研究手段として、質量分析技術で原子 1 個の精度でサイズが制御されたクラスターを生成し、反応動力学法やレーザー分光法など、最先端の実験手段を駆使して特性究明と物質創製に取り組む。

〈研究概要〉

種々の元素の中で、触媒や磁性材料など機能性物質の主たる構成要素である金属元素に特に着目している。研究の着眼点として、第一に、特異な物性・反応性の探索とともに、その基本となる電子構造・幾何構造が原子の数とともに如何に変化するかに注目し、構成原子数が正確に定まった孤立状態の金属クラスターを対象に、その特性解明を推進している。実験手段として、気相分子との反応実験、レーザー分光による吸収スペクトル測定、X 線による電子状態測定、磁気状態測定を行って研究に取り組んだ。第二に、これらクラスターの機能化を念頭に、クラスターが集合・組織化された新物質創製を目指した基礎研究を推進している。具体的には、気相中で生成した金属クラスターを液相溶媒に注入し、クラスター結晶の生成など、液相中のダイナミクスに立脚したプロセッシング技術の開発を目指しており、溶媒となる液滴の真空中での生成・操作と特性評価の研究に取り組んだ。

〈研究課題と進展状況〉

本年度は次の研究課題に取り組んだ：

- (1) 金属/金属化合物クラスターの反応追跡実験
- (2) レーザー分光による金属クラスターの電子遷移測定

- (3) X線による金属/金属化合物クラスターの電子状態計測
- (4) X線による金属/金属化合物クラスターの磁性測定
- (5) 真空中に生成した液滴の熱力学挙動

課題(1)「金属/金属化合物クラスターの反応追跡実験」では、第1のテーマとして、触媒材料等の反応性の鍵を握る遷移金属元素のd電子に着目した。原子上に局在したd電子は不対電子として存在して高い反応性を示すが、銀などにドーピングされてs電子系と相互作用すると、非局在化して反応性が低下する可能性がある。そこで、クラスター研究の手法で銀原子数を変えて系全体の電子数を制御し、s-d相互作用に対する電子数の効果を調べた。前年度に、銀クラスターにCo原子がドーピングされた $Ag_nCo^+$ クラスターの反応性を酸素分子に対して実験し、Co原子(3d<sup>7</sup>4s<sup>2</sup>)と銀(5s<sup>1</sup>)とで価電子が合計18個となる10量体( $n = 10$ )において、反応性が他のサイズ $n$ よりも小さく極小となることを見出した。これは、d電子が非局在化して18個の価電子が電子閉殻構造を形成する結果、不対電子が消失するためと説明された。本年度は、この電子数効果の一般性を調べるために、Co(3d<sup>7</sup>4s<sup>2</sup>)をNi(3d<sup>8</sup>4s<sup>2</sup>)、Fe(3d<sup>6</sup>4s<sup>2</sup>)、Mn(3d<sup>5</sup>4s<sup>2</sup>)に変えてさらに実験を行った。その結果、18電子での反応性極小が、NiではCoよりも顕著だったのに対し、Fe、Mnでは見られなかった。これら元素による違いについて、理論解析も進めている。この研究は、スピン制御の視点から物性研究としても注目される。

第2のテーマでは、宇宙空間での分子進化の問題に着目した。宇宙空間にはケイ酸塩鉱物が多く存在し、これら鉱物のイオン種、ラジカル種が触媒として働いて、CO、N<sub>2</sub>、H<sub>2</sub>などを原料に有機分子が生成されたと考えられている。そこで、負に帯電した酸化シリコンクラスター( $Si_nO_m^-$ ;  $n = 3-7$ ,  $m \doteq 2n+1$ )を鉱物種のモデルとして取り上げ、CO分子の吸着サイトの解明に取り組んだ。その結果、サイズ $n$ によらず共通の構造をもつ吸着サイトを特定することができ、有機分子生成反応の第一段階を明らかにした。これに関連して、日印二国間交流事業共同研究の一環で、有機金属クラスターの生成・反応実験にも取り組んだ。

課題(2)「レーザー分光による金属クラスターの電子遷移測定」では、銀クラスター中の電子の挙動に着目し、小さなクラスターからナノ粒子への成長に伴って、電子が集団励起される表面プラズモン共鳴が発現する過程を調べた。サイズ選別された $Ag_n^+$ クラスターを試料として、前年度までに $n \leq 14$ のクラスター種について紫外領域( $\lambda = 285-334$  nm)の吸収スペクトルを光分離法で測定し、複数のピークからなる構造に富むスペクトル形状から、光吸収が分子軌道間の電子遷移で起きることを示した。本年度は、光共振器とイオントラップを用いた光吸収の直接測定法で吸収断面積を新たに測定し、振動子強度の解析から、光吸収に関与する電子数の定量的な評価を行った。サイズ領域を $n = 35$ まで拡張して実験を行った結果、 $n = 25$ を超えるサイズで光吸収の振動子強度がナノ粒子と同様の大きさに達することを見出し、表面プラズモン共鳴の前兆を捉えた。

課題(3)「X線による金属/金属化合物クラスターの電子状態計測」では、触媒材料の活性サイトのモデルとなるクラスターを取り上げ、放射光を利用したX線吸収分光(XAS)を株式会社コンボン研究所との共同研究で行って、構成原子の化学状態分析を推進した。高エネルギー加速器研究機構・フォトンファクトリー(つくば)で2015年6月期、11月期および2016年2月期に配分された合計約3週間のビームタイムには、九州大学から大学院生5名を含む7名、コンボン研究所から1名が参加し、24時間体制での実験を実施した。具体的には、自動車の排気ガス浄化触媒として重要なセリウム酸化物に注目し、酸化セリウムクラスターを試料とした。前年度までに、セリウムM吸収端の吸収スペクトルを測定し、ピークエネルギー値から元素の酸化数を分析できることを明らかにした。本年度は、酸素K吸収端の測定を行って、酸素原子の電子状態研究を進めた。 $Ce_3O_n^+$  ( $n=4-7$ )に対して行った測定で、 $n=5-7$ において、 $n=4$ にはない明瞭なピークを捉えることができた。クラスターの幾何構造の解析結果との対応から、これらのX線吸収ピークが反応性の高い酸素原子の存在を示唆するものであることが明らかになった。これらの知見は、高効率なセリウム酸化物触媒の設計指針につながると期待される。

課題(4)「X線による金属/金属化合物クラスターの磁性測定」では、ドイツの放射光施設 BESSY II との共同研究を継続し、独自に開発した世界で唯一の実験装置でX線磁気円二色性(XMCD)分光を推進した。前年度までに、強磁性元素として知られる鉄、コバルト、ニッケルのクラスター $Fe_n^+$ 、 $Co_n^+$ 、 $Ni_n^+$ について、 $n=10$ 前後のサイズに注目した測定・解析で、固体に比べて大きなスピン磁気モーメントを持つ一方で、軌道磁気モーメントは固体と同様にほとんど消失することを明らかにしてきた。本年度は、この軌道磁気モーメント消失がどのサイズで起きるのかに焦点を絞り、最も基本となる2量体の研究を進めた。その結果、2量体の軌道磁気モーメントは消失せず、むしろ理論予測よりも大きいことを明らかにした。一方で、反強磁性元素マンガンのクラスターの磁性については長年にわたって議論が続いてきたが、2, 3量体イオンが特異的に強磁性スピン結合を示すことを決定づける成果を上げた。

課題(5)「真空中に生成した液滴の熱力学挙動」では、真空中で発生した気相金属クラスターを液相化学に展開することを目指して、まず、溶媒液滴を真空中に生成する実験に取り組んでいる。前年度までに、直径60ミクロン程度の水液滴は10ms程度で凍結するが、蒸気圧の低いエチレングリコール液滴は液相を保つことを、レーザー散乱で確認した。さらに長時間の観察を行うために、発生した液滴を真空中のPaul型イオントラップに捕捉し、サイズの変化や凝固に至るまでの時間を数十秒間にわたって測定することを可能にした。これをエチレングリコール液滴に適用した結果、次第に液滴径が減少したが、50秒後にも依然として液相を保っていることを突き止めた。本年度は、この現象の再現性を確かめる一方で、液滴径や温度の時間変化を理論解析して、シミュレーションで実験結果の説明を試みた。その結果、室温の真空槽からの熱放射が微弱ながら液滴を加熱し蒸発冷却を相殺することを突き止め、融点よりもやや高いほぼ一定の温度で、

液相を保ちながら蒸発を続けたことを明らかにした。この実験結果は、真空中の液滴が単純な予測よりも長く液相を保つことを示しており、真空中での液体利用に向けて重要な成果となった。

(量子化学研究室Ⅱ：原田グループ)

〈研究目標〉

高分解能の分光法によって基本的な分子種を研究し、分子の精密な構造、分子内ならびに分子間ポテンシャル、電子的および振動回転励起状態のダイナミクスを詳細に解明することを目標として研究を展開し、国際的にこの分野での高レベルの研究グループとして評価されている。我々のグループは、過去に化学的に安定な分子種について十分な研究実績をもつが、これを基盤として、近年は短寿命の分子種に重点を移し、フリーラジカルや分子クラスターを主な標的として研究している。

〈研究概要〉

マイクロ波・ミリ波領域におけるトンネル回転遷移の観測より、ビニルラジカル-d (H<sub>2</sub>CCD)では、電子スピンと核スピンの相互作用により、通常分子と比べ10億倍も早いオルト・パラ変換が起こることを報告してきた。本年度はビニルラジカル-d<sub>3</sub> (D<sub>2</sub>CCD)のトンネル回転遷移を観測し、ビニルラジカル-d<sub>3</sub>でも通常分子より1億倍速いオルト・パラ変換が起こっていることを明らかにした。またビニルラジカルのβ位の水素原子1個を重水素置換した HDCCH ラジカルのミリ波スペクトルを観測した結果、基底状態では、α位の水素のトンネル運動が阻害され、*cis*-HDCCH と *trans*-HDCCH が異性体として存在することが明らかとなった。

分子錯体の分子間ポテンシャルの研究では H<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O 分子錯体の回転遷移および Ar-DCN 分子錯体の内部回転遷移をミリ波領域で観測した。また、静岡大学との共同研究により、H<sub>2</sub>-DCN 分子錯体の回転遷移をフーリエ変換マイクロ波分光で観測し、(o)H<sub>2</sub>の内部回転による超微細構造を観測し、水素分子がほぼ自由回転していることを明らかにした。

〈研究課題と進展状況〉

マイクロ波分光、フーリエ変換分光などの高分解能分光法による、分子構造、励起状態ならびにダイナミクスの実験的研究、ならびに関連する理論的研究を行っている。現在設定している主な研究課題は、

- (1) ミリ波分光によるフリーラジカルの研究
- (2) ミリ波分光によるファンデルワールス錯体の研究

である。

課題 (1) では、紫外光解離法によりパルス超音速ジェット中にフリーラジカルを生成させ、多重反射光学系を組み込んだ吸収セルにより、ミリ波領域のスペクトルを測定して

いる。重水素化塩化ビニルの光解離により生成させたビニルラジカル重水素化物 HDCCH および  $D_2CCD$  のスペクトルを測定した。これによりオルト-およびパラ-ビニル間の核スピンの値を変えるような電子スピンと核スピンとの大きな相互作用を見出した。この相互作用によりビニルラジカル- $d_3$  では通常分子と比べ、1 億倍も早いオルト・パラ変換が起こっていることを明らかにした。またビニルラジカルの  $\beta$  位の水素原子 1 個を重水素置換した HDCCH ラジカルのミリ波スペクトルを観測した結果、基底状態では、 $\alpha$  位の水素のトンネル運動が阻害され、*cis*-HDCCH と *trans*-HDCCH が異性体として存在することが明らかとなった。

課題 (2) では、パルス超音速ジェットによって実現した超低温状態中でファンデルワールスクラスタを生成させ、これによるミリ波吸収を多重反射光学系を用いて直接観測する方法を用いている。本年度は  $H_2 \cdot H_2O$  分子錯体の回転遷移および Ar-DCN 分子錯体の  $J=2-1$  内部回転遷移をミリ波領域で観測した。また、静岡大学との共同研究により、 $H_2 \cdot DCN$  分子錯体の回転遷移をフーリエ変換マイクロ波分光で観測し、(o) $H_2$  の内部回転による超微細構造を観測し、水素分子がほぼ自由回転していることを明らかにした。

様々な課題に関連して、東京大学、静岡大学、シカゴ大学など内外のグループと共同研究を行っている。

## 2.1 研究分野

物理化学、クラスター科学、ナノ物質科学、レーザー分光、ミリ波分光

## 2.2 研究課題

少数の原子で構成されるクラスターからミクロンサイズの液滴までを対象に、質量分析法や分光学を基本とする実験で物性・反応性を探究する、原子・分子集合体の研究。ならびに、マイクロ波分光、フーリエ変換分光などの高分解能分光法による、分子構造、励起状態ならびにダイナミクスの実験的研究、および関連する理論的研究。

## 2.3 学術論文

- [1] V. Zamudio-Bayer, K. Hirsch, A. Langenberg, M. Niemeyer, M. Vogel, A. Ławicki, A. Terasaki, J. T. Lau, and B. von Issendorff  
Maximum spin polarization in chromium dimer cations demonstrated by X-ray magnetic circular dichroism spectroscopy  
*Angew. Chem. Int. Ed.* **54**, 4498-4501 (2015)

- [2] M. Arakawa, K. Kohara, and A. Terasaki  
Reaction of aluminum cluster cations with a mixture of O<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>O gases:  
Formation of hydrated-alumina clusters  
*J. Phys. Chem. C* **119**, 10981-10986 (2015)
- [3] V. Zamudio-Bayer, K. Hirsch, A. Langenberg, M. Kossick, A. Ławicki, A. Terasaki, B. von Issendorff, and J. T. Lau  
Direct observation of high-spin states in manganese dimer and trimer cations by X-ray magnetic circular dichroism spectroscopy in an ion trap  
*J. Chem. Phys.* **142**, 234301/1-6 (2015)
- [4] K. Egashira and A. Terasaki  
Optical absorption spectrum of the chromium dimer cation: Measurements by photon-trap and photodissociation spectroscopy  
*Chem. Phys. Lett.* **635**, 13-15 (2015)
- [5] V. Zamudio-Bayer, K. Hirsch, A. Langenberg, A. Ławicki, A. Terasaki, B. von Issendorff, and J. T. Lau  
Electronic ground states of Fe<sub>2</sub><sup>+</sup> and Co<sub>2</sub><sup>+</sup> as determined by x-ray absorption and x-ray magnetic circular dichroism spectroscopy  
*J. Chem. Phys.* **143**, 244318/1-6 (2015)
- [6] H. Fukazawa, M. Arakawa, H. Yamauchi, Y. Sekine, R. Kobayashi, Y. Uwatoko, S. Chi, and J. A. Fernandez-Baca  
Properties of ferroelectric ice  
*JPS Conf. Proc.* **8**, 033010/1-6 (2015)
- [7] K. Tanaka, M. Nakamura, M. Shirasaka, A. Sakamoto, K. Harada, and T. Tanaka  
Millimeter-wave spectroscopy of the FeCO radical in the  $\nu_2$  and  $\nu_3$  vibrationally excited states  
*J. Chem. Phys.* **143**, 014303/1-10 (2015)
- [8] M. Arakawa, R. Yamane, and A. Terasaki  
Reaction sites of CO on size-selected silicon-oxide cluster anions: a model study of chemistry in the interstellar environment  
*J. Phys. Chem. A* **120**, 139-144 (2016)

- [9] T. Hayakawa, K. Egashira, M. Arakawa, T. Ito, S. Sarugaku, K. Ando, and A. Terasaki  
X-ray absorption spectroscopy of  $Ce_2O_3^+$  and  $Ce_2O_5^+$  near Ce M-edge  
*J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **49**, 075101/1-8 (2016)
- [10] K. Ando, M. Arakawa, and A. Terasaki  
Evaporation processes of a liquid droplet of ethylene glycol in a vacuum  
*Chem. Lett.*, in press.
- [11] K. Takeda, S. Masuda, K. Harada, and K. Tanaka  
Millimeter-wave spectroscopy of the  $SiCl^+$  ion  
*Chem. Phys. Lett.*, in press.

## 2.4 紀要・総説・著書等

- [1] T. Tsukuda, A. Terasaki, and A. Nakajima  
Special Issue: Current Trends in Clusters and Nanoparticles  
The Journal of Physical Chemistry C, Volume 119, Number 20 (2015)
- [2] 荒川 雅  
鋹物組成クラスターイオンの生成と反応：星間空間での化学反応のモデルとして  
*Bull. Soc. Nano Sci. Tech.* (ナノ学会会報) **14** (2), 83-89 (2016)

## 2.5 国際会議における学術講演・海外での講義

- [1] K. Tanaka, K. Harada, Y. Sumiyoshi, M. Nakashima, and Y. Endo (Oral presentation)  
“Fourier-transform microwave and millimeterwave spectroscopy of the  $H_2\cdot HCN$  molecular complex”  
The 70th International Symposium on Molecular Spectroscopy  
Champaign-Urbana, IL, USA (June 22-26, 2015)
- [2] K. Harada, M. Hayashi, H. Matsubayashi, and K. Tanaka (Poster presentation)  
“Millimeter-wave spectroscopy of the HDCCH radical”  
Symposium on Advanced Molecular Spectroscopy

Tokyo (July 18-19, 2015)

- [3] M. Arakawa, R. Yamane, and A. Terasaki (Invited talk)  
“Reaction sites of a CO molecule on silicon-oxide cluster anions as a model of mineral surfaces”  
Workshop on Nanoscale Atomic and Molecular Systems  
Fukuoka (August 20, 2015)
- [4] M. Arakawa, R. Yamane, and A. Terasaki (Poster presentation)  
“Reaction of size-selected silicon-oxide cluster anions with CO and H<sub>2</sub>O as a model for chemistry on mineral surfaces”  
Pacifichem 2015: Symposium #168 “Frontiers of Metal Clusters and Nanostructures: From Fundamental Properties to Functionalities”  
Honolulu, HI, USA (December 15-20, 2015)
- [5] S. Sarugaku, R. Murakami, J. Matsumoto, M. Arakawa, and A. Terasaki (Poster presentation)  
“Chemical reactivity of silver-cobalt binary cluster ions: Effects of geometric and electronic structures”  
Pacifichem 2015: Symposium #168 “Frontiers of Metal Clusters and Nanostructures: From Fundamental Properties to Functionalities”  
Honolulu, HI, USA (December 15-20, 2015)
- [6] K. Ando, M. Arakawa, and A. Terasaki (Poster presentation)  
“Trapping a liquid micro-droplet in a vacuum toward wet chemistry of gas-phase clusters”  
Pacifichem 2015: Symposium #168 “Frontiers of Metal Clusters and Nanostructures: From Fundamental Properties to Functionalities”  
Honolulu, HI, USA (December 15-20, 2015)
- [7] K. Tobita, Y. Kiyomura, T. Ito, M. Arakawa, and A. Terasaki (Poster presentation)  
“Photodissociation spectroscopy of silver cluster cations up to 35 atoms: Size and temperature dependence of spectral profiles”  
Pacifichem 2015: Symposium #168 “Frontiers of Metal Clusters and Nanostructures: From Fundamental Properties to Functionalities”  
Honolulu, HI, USA (December 15-20, 2015)

- [8] A. Terasaki, K. Ando, and M. Arakawa (Invited talk)  
“Characterization of liquid micro-droplets in a vacuum: evaporative cooling and freezing”  
The 13th Trombay Symposium on Radiation & Photochemistry incorporating 6th Asia-Pacific Symposium on Radiation Chemistry (TSRP-APSRC 2016)  
Mumbai, India (January 5-9, 2016)
- [9] S. Sarugaku, R. Murakami, J. Matsumoto, M. Arakawa, and A. Terasaki (The Best Poster Award)  
“Geometric and electronic effects on reactivity of size-selected  $\text{Ag}_n\text{Co}^+$  cluster beam toward oxygen”  
The 13th Trombay Symposium on Radiation & Photochemistry incorporating 6th Asia-Pacific Symposium on Radiation Chemistry (TSRP-APSRC 2016)  
Mumbai, India (January 5-9, 2016)
- [10] A. Terasaki (Hot-topics talk)  
“Optical absorption of size-selected free silver cluster ions in the size range up to 35”  
Symposium on Size-Selected Clusters (S3C)  
Davos, Switzerland (February 28 - March 4, 2016)
- [11] M. Arakawa, R. Yamane, and A. Terasaki (Poster presentation)  
“Reaction site of a CO molecule on silicon-oxide cluster anions”  
Symposium on Size-Selected Clusters (S3C)  
Davos, Switzerland (February 28 - March 4, 2016)
- [12] K. Egashira, Y. Yamada, Y. Kita, M. Tachikawa, and A. Terasaki (Poster presentation)  
“Optical absorption spectra of the chromium dimer cation: Measurements by photon-trap and photodissociation spectroscopy combined with coupled-cluster calculations”  
Symposium on Size-Selected Clusters (S3C)  
Davos, Switzerland (February 28 - March 4, 2016)
- [13] A. Terasaki (Seminar talk)  
“X-ray absorption spectroscopy of size-selected free cerium-oxide cluster ions

for chemical analysis”  
BESSY II Seminar  
Berlin, Germany (March 9, 2016)

## 2.6 国内学術講演会における招待・特別講演

- [1] 荒川 雅  
「鈹物組成クラスターの生成と反応：鈹物表面反応の機構解明を目指して」  
ナノ構造・物性-ナノ機能・応用部会合同シンポジウム「若い力が切り拓くナノサイエンス・テクノロジー」  
福岡 (2015 年 11 月 27 日)
  
- [2] 寺寄 亨  
「最先端分光によるナノ触媒・磁性材料の特性評価と機能探索」  
国際ナノテクノロジー総合展・技術会議 (nano tech 2016) シンポジウム「産業応用へナノサイエンスとテクノロジーの新展開」  
東京 (2016 年 1 月 28 日)
  
- [3] 寺寄 亨  
「孤立イオン種の超高感度分光:金属クラスターなど希少物質の電子物性研究」  
日本物理学会第 71 回年次大会  
仙台 (2016 年 3 月 19 日)

## 2.7 海外研究者の受入

- [1] Jens-Uwe Grabow 教授 (ライプニッツ大学、ドイツ)  
分子科学研究奨励森野基金外国人研究者招聘  
2015 年 5 月 19 日-6 月 2 日  
森野レクチャー 於 九州大学国際ホール 2015 年 5 月 22 日  
演題：“Molecular rotation signals: Molecule chemistry .... and particle physics” (「時間領域回転分光が開く世界 : 分子科学から素粒子物理まで」)
  
- [2] Naresh Patwari Ganpathi 教授 (インド工科大学ボンベイ校)  
日本学術振興会 日印二国間交流事業共同研究  
2015 年 7 月 10-20 日
  
- [3] Bernd von Issendorff 教授 (フライブルグ大学、ドイツ)  
分子科学研究奨励森野基金外国人研究者招聘

2015年8月17日－9月3日

森野レクチャー 於 九州大学国際ホール 2015年8月20日

演題：“Matter at the nanoscale: study of the structure and dynamics of clusters”

## 2.9 外国人留学生の受入

- [1] Saurabh Mishra (インド工科大学ボンベイ校・大学院学生)  
日本学術振興会 日印二国間交流事業共同研究  
2016年3月15-29日

## 2.10 文部科学省科学研究費の採択

- [1] 挑戦的萌芽研究  
真空中に生成した液滴の熱力学過程の計測と生体分子解析への展開  
代表：寺寄 亨
- [2] 若手研究B  
氷への物質の溶解の探究  
代表：荒川 雅
- [3] 新学術領域研究（研究領域提案型）  
鋳物組成クラスターの気相反応による表面反応機構の探究  
代表：荒川 雅

## 2.12 受託研究・民間との共同研究

- [1] 住友財団 基礎科学研究助成  
金属クラスターに添加された磁性原子の電子局在／非局在挙動  
寺寄 亨
- [2] 日本学術振興会 日印二国間交流事業共同研究  
分光および反応実験による有機金属気相成長過程の探究  
寺寄 亨
- [3] 株式会社コンポン研究所 共同研究  
金属化合物クラスター・微粒子の反応性と電子状態の解析  
寺寄 亨

- [4] 九州大学教育研究プログラム・研究拠点形成プロジェクト (P&P) 特別枠  
サブナノサイズ物質の電子構造学理構築  
寺寄 亨
- [5] 2015 年度九州大学国際宇宙天気科学・教育センター共同研究  
星間分子および大気化学関連短寿命種の分光研究  
原田賢介
- [6] クリタ水・環境科学振興財団 国内研究助成  
鉱物表面での水の水素秩序化による有機物生成反応の促進  
荒川 雅

## 2.14 学会賞等受賞

- [1] 安東航太 優秀ポスター賞 (第9回分子科学討論会)  
「真空中で発生・捕捉した液滴の蒸発速度・凍結時間の測定」  
2015 年 9 月 16-19 日、東京
- [2] 猿楽 峻 The Best Poster Award (The 13th Trombay Symposium on  
Radiation & Photochemistry incorporating 6th Asia-Pacific  
Symposium on Radiation Chemistry (TSRP-APSRC 2016))  
“Geometric and electronic effects on reactivity of size-selected  
 $\text{Ag}_n\text{Co}^+$  cluster beam toward oxygen”  
2016 年 1 月 5-9 日、Mumbai, India

## 2.15 学外における学界活動

- [1] 分子科学研究所 運営会議委員 (寺寄 亨)
- [2] ナノ学会 理事 (寺寄 亨)
- [3] 株式会社コンボン研究所 研究顧問 (寺寄 亨)
- [4] Member of International Advisory Committee of “Symposium on Size  
Selected Clusters” (寺寄 亨)
- [5] Member of International Advisory Committee of “International Symposium  
on Small Particles and Inorganic Clusters” (寺寄 亨)
- [6] Member of International Advisory Committee of “International Symposium  
on Molecular Beams” (寺寄 亨)
- [7] 日本分光学会九州支部庶務幹事 (原田賢介)

- [8] 日本分光学会高分解能分光部会庶務幹事 (原田賢介)
- [9] 日本分光学会・分光研究編集委員 (原田賢介)

## 2.16 学内における活動 (各種委員会委員)

- [1] 教育改革企画支援室 室員 (寺寄 亨)
- [2] 理学研究院 研究支援体制検討専門委員会委員 (寺寄 亨)
- [3] 理学研究院 移転スケジュールワーキンググループ委員 (寺寄 亨)
- [4] 理学部 カリキュラムワーキンググループ委員 (寺寄 亨)
- [5] 化学部門 カリキュラム委員 (寺寄 亨)
- [6] 国際宇宙天気科学・教育センター講師・運営委員 (原田賢介)
- [7] 未来の科学者養成講座・化学部門責任者 (原田賢介)
- [8] 化学部門 助教会FD・HD 担当 (荒川 雅)