

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。特に、演習問題などにおいて、具体的な数値を扱う訓練を重視した。

大学院講義では「構造化学特論 I」を担当し、光の性質を題材に、マクスウェル方程式から導かれる光の伝播について、物質境界面での透過、屈折、反射、偏光、さらには光学素子やレーザーの原理を題材に講義した。光学は多くの科学研究で重要性を増しており、化学専攻ばかりでなく物理学専攻の学生も交えて光技術の基礎を修得してもらう場とした。

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放電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・干渉を学ぶ課題に取り組んでもらった。後者では、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に取り組んでもらった。

研究室では、学部4年生(3名)、修士1年生(2名)、修士2年生(3名)、博士後期2年生(1名)、博士後期3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、実験に必要な部品や装置の設計図を描く訓練を行った。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、前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2年の学生は、真空中の液体の蒸発冷却過程の研究を進展させ、原著論文1報を発表した。博士後期3年の学生は、合金クラスターの反応性研究を進展させて原著論文2報を発表し、博士論文を完成した。これらの成果を、クラスター分野の中心的な国際会議 ISSPIC-18(8月)、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3年の学生が九州大学学生表彰(学術研究活動表彰)を受けた。また、修士2年の学生が第10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。

(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訓練し、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、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〉

講義では、学部2年生の基幹教育科目「基礎化学結合論」および学部2年生の専攻教育科目「量子化学I」を担当した。「基礎化学結合論」ではシュレーディンガー方程式を理解し、自分で波動方程式を書き下せるようになること、原子軌道、分子軌道、化学結合の量子論的解釈を理解し、簡単なヒュッケル法による計算ができるようになることを目標に講義した。「量子化学I」では、理論的には量子化学の原理をしっかりと理解させること、実用的には、シュレーディンガー方程式を書き下し、調和振動子の固有関数や、角運動量の固有関数を基底に用いて行列要素を計算し、永年方程式を作ることが出来る

能力を養うことを目標に講義・演習を行った。

学部 3 年生の学生実験では、本年度より「OCS 分子の回転スペクトル」の実験を開始した。マイクロ波共振器を用いて OC^{32}S と OC^{34}S の $J=1-0$ 遷移を観測し、分子構造を算出する実験で、分子構造決定の原理を学ぶ課題である。

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。

修士2年の学生は、ビニルラジカル D 化物の研究を進展・完了させ、修士論文を作成した。修士1年の学生は、卒論に引き続いて、Ar-DCN 分子錯体の内部回転バンドの測定・帰属を進め、分子科学討論会および九重分子科学夏期セミナーで発表した。4 年生は Ar-HCN 分子錯体の内部回転バンドを観測し、卒業論文を作成した。

〈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) 構造化学特論 I 大学院教育 (講義、大学院後期、2 単位)
- (5) 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)
- (6) 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)
- (7) 英語演習 I 大学院教育 (演習、修士 1 年後期、1 単位)
- (8) 英語演習 II 大学院教育 (演習、修士 2 年前期、1 単位)
- (9) 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、2 年前期、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)

〈博士論文〉

- 猿楽 峻 「イオントラップ質量分析法を用いた遷移金属添加銀クラスター正イオンのサイズ依存反応性の研究」
“Size-dependent reactivity of transition-metal-doped silver cluster cations studied by ion trap mass spectrometry”

〈修士論文〉

- 清村 侑矢 「銀クラスターのサイズ増大に伴う集団電子励起の発現」
“Emergence of collective excitation of electrons in the course of silver-cluster growth”
- 松本 淳平 「量子化学計算による遷移金属原子 (V, Co) をドーブした銀クラスターイオンの幾何構造・電子構造のサイズ依存性研究」
“Computational study of size-dependent geometric and electronic structures of transition-metal (V, Co) doped silver cluster ions”
- 松林 大夢 「ビニルラジカル D 置換体のミリ波ジェット分光」
“Millimeter-wave spectroscopy of the HDCCH and D₂CCD radicals”

〈卒業論文〉

- 藤本 周平 「銀クラスター正イオン (20–35 量体) の低温での光解離分光」
- 堀岡 正崇 「マンガン添加銀クラスター正イオンと酸素との反応過程の解析」
- 南川 賢人 「サイズ選別したニッケル添加銀クラスター負イオンの酸素に対する反応性」
- 松下 想 「Ar-HCN 分子錯体の $\nu_3 \leftarrow 2$ 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〉

現在のナノスケール材料よりもさらに微細な物質を扱う次世代のナノ物質科学の開拓を目的に、原子の数 (サイズ) が数~数十個の原子分子クラスターを対象として、これら極微小な物質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。クラスターの面白さは、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)、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注目度も高い。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、物質科学の本質を掘り起こす新たな学問分野の構築を目指して研究を推進する。具体的には、質量分析技術で原子 1 個の精度で制御されたクラスターを生成し、反応速度計測やレーザー・X線分光など、最先端の実験手段で特性解明に取り組む。さらに特異な化学種であるこれらクラスターを液相展開し、気相化学と液相化学との融合を

軸に新たな物質創製に挑む。

〈研究概要〉

触媒や磁性材料など機能性物質に関連した金属/金属化合物に着目し、構成原子数が正確に決まったクラスターを研究対象として、その特性解明を推進した。気相分子との反応実験、レーザーによる価電子帯の分光、X線による内殻電子の分光を実験手段として、原子の数で変化する特異な物性・反応性の探索に加え、その基本となる電子構造・幾何構造の解明に取り組んだ。また、これらクラスターを液相展開する目的で、真空中に生成した溶媒液滴の熱力学過程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化学反応過程
- (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化学状態測定
- (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蒸発冷却・凍結過程

課題(1)「金属/金属化合物クラスターの化学反応過程」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高い反応性を示すが、銀クラスター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制御して系全体の電子数を調節し、s-d相互作用に対する電子数の効果を調べた。前年度までに行ったCo, Ni原子ドーピングに引き続き、すべての開殻3d遷移金属(M=Sc~Ni)について Ag_nM^+ クラスターの反応性を酸素分子に対して系統的に調べた。その結果、CrとMnを除き、M原子($3d^m4s^2$)と銀($5s^1$)クラスターとで価電子数が合計18個となるサイズ $n = 17 - m$ において、反応性が極小を示すことを見出した。この18電子系においてs-d軌道混成を介して電子閉殻構造が形成されることが、これらの遷移金属に共通して見られることが明らかになった。

第2のテーマでは、宇宙空間での分子進化に着目した。宇宙空間にはケイ酸塩鉱物(例えば Mg_2SiO_4 , $MgSiO_3$)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き、CO, N_2 , H_2 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($Si_nO_m^-$: $n = 3-7$, $m \doteq 2n$)を鉱物イオン、ラジカル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、 $m = 2n, 2n+1$ 組成のクラスター中に存在する共通した構造の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。さらに、ケイ酸塩鉱物イオン種は水分子を吸着し、宇宙空間での水の運搬に寄与すると予測される。そこで、水分子の吸着に着目し、 $Si_nO_m^-$ と水分子との反応を探究した。その結果、水

分子はクラスター上で H と OH に解離して吸着することが明らかとなり、水分子の吸着には、 $\text{SiO}_3(\text{OH})$ 四面体構造の形成が不可欠であることが見出された。

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、前年度までに光吸収スペクトルを室温条件で測定し、 $n \geq 25$ でスペクトル幅が広がり、吸収の振動子強度がナノ粒子と同程度の大きさに達することから、これを表面プラズモン共鳴の前兆と解釈した。本年度は、液体窒素で冷却した低温条件での測定を新たに行い、 $n \geq 25$ では、温度に依らず広いスペクトル幅を示すことを突き止めた。これは電子の集団励起を裏付け、これまでの解釈を補強するデータとなった。

課題(3)「X線による金属/金属化合物クラスターの化学状態測定」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) を株式会社コンポ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。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た。セリウム酸化物クラスターの各原子について局所電子密度を実測し、構成原子の化学状態と反応性との関係を系統的に調べて、高活性なクラスター種に現れる特徴を明らかにすることを目的とした。昨年度の Ce_3O_n^+ ($n = 4\sim 7$) に引き続き、本年度は装置改良を経てさらに大きなクラスター種 Ce_4O_n^+ ($n = 6\sim 10$) の測定を進めるとともに、酸素 K 吸収端に加えてセリウム M 吸収端の測定を行った。特にセリウム M 吸収端のスペクトルは、酸素原子数の増加とともに Ce 原子の酸化が進み、酸化数が+3 から+4 に変化することを明瞭に示しており、組成と触媒活性との相関を議論する重要なデータを得た。

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、X線磁気円二色性 (XMCD) 分光を推進した。前年度に、Fe, Co クラスター-2 量体イオン (Fe_2^+ , Co_2^+) の磁気モーメントのスピ成分・軌道成分を測定し、これらが理論予測よりも大きな軌道磁気モーメントを持つなど、従来の理論を見直すべき事実を見出した。本年度は、同じく 3d 強磁性元素の Ni クラスター-2 量体イオン (Ni_2^+) の実験を行った。その結果、 Ni_2^+ の電子基底状態が $^4\Phi_{9/2}$ 状態 (軌道磁気モーメント $3 \mu_B$ 、スピン磁気モーメント $3 \mu_B$) であることを見出した。昨年度の結果と合わせて、これら Fe, Co, Ni の 2 量体イオンは、2 原子の 3d 電子が最大スピンをとるように結合し、しかも大きな軌道磁気モーメントを持つことを明らかにした。

課題(5)「真空中に生成した液滴の蒸発冷却・凍結過程」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、溶媒液滴を真空中に生成する実験に取り組んでいる。前年度までに比較的蒸気圧の低いエチレングリコール (EG) を試料として実験を行い、数秒で凍結すると予想した EG 液滴が、周囲の室温からの熱輻射

による加熱で、1 分以上にわたって液相を保つことを見出した。本年度は、溶媒としてより一般的な水を試料とし、水液滴について研究を進めた。真空中に直径の揃った水液滴を多数発生させ、統計的な観察で凍結割合の時間変化を計測した結果、直径 50 μm の液滴の半数が凍結するまでの所要時間は 7.6 ms だった。一方、蒸発冷却による水液滴の温度変化を計算すると、凍結時の温度は約 234 K だった。これらの結果から、核生成速度が急激に増加するこの温度領域で、過冷却状態の水液滴の凍結が一気に進むことが明らかになった。

(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、電子の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〉

ミリ波分光法により、ビニルラジカル-d (H_2CCD) では、通常の分子と比べ 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-d₃ (D_2CCD) のトンネル回転遷移を観測し、ビニルラジカル-d₃ でも通常の分子より 1 億倍速いオルト・パラ変換が起こ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を明らかにした。*cis*-HDCCH のスペクトルを解析し、分子構造を詳細に決定した。SiCl⁺イオンのミリ波スペクトルを論文発表した。また、台湾交通大学との共同研究により、SiCl⁺イオンのフーリエ変換マイクロ波分光により、Cl 核による超微細構造を観測した。また、OCS⁺イオンのフーリエ変換発光スペクトルを論文投稿し印刷中である。

分子錯体の分子間ポテンシャルの研究では、Ar-HCN 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 He-HCN 分子錯体の内部回転遷移を解離限界付近まで観測し、分子間ポテンシャルを精度良く決定した。

〈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 D₂CCD 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電子スピン・核スピン相互作用を観測した。この相互作用によりビニルラジカル-d₃では通常の分子と比べ、1 億倍早いオルト・パラ変換が起こる。またβ位の水素原子 1 個を重水素置換した HDCCH ラジカルを観測した結果、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。*cis*-HDCCH のスペクトルを解析し、分子構造を詳細に決定した。

SiCl⁺イオンのミリ波スペクトルを論文発表した。また、台湾交通大学との共同研究により、SiCl⁺イオンのフーリエ変換マイクロ波分光により、Cl 核による超微細構造を観測した。また、OCS⁺イオンのフーリエ変換発光スペクトルを論文投稿し印刷中である。

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。分子錯体の分子間ポテンシャルの研究では Ar-HCN 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 He-HCN 分子錯体の内部回転遷移を解離限界付近まで観測し、分子間ポテンシャルを精度良く決定した。

様々な課題に関連して、台湾交通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・ナノ物質科学、レーザー・X線分光、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、質量分析法と分光法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] 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).
- [2] 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).
- [3] K. Ando, M. Arakawa, and A. Terasaki
Evaporation processes of a liquid droplet of ethylene glycol in a vacuum
Chem. Lett. **45**, 961-963 (2016).
- [4] S. T. Akin, V. Zamudio-Bayer, K. Duanmu, G. Leistner, K. Hirsch, C. Bülow, A. Ławicki, A. Terasaki, B. von Issendorff, D. G. Truhlar, J. T. Lau, and M. A. Duncan
Size-dependent ligand quenching of ferromagnetism in $\text{Co}_3(\text{benzene})_n^+$ clusters studied with X-ray magnetic circular dichroism spectroscopy
J. Phys. Chem. Lett. **7**, 4568-4575 (2016).
- [5] V. Zamudio-Bayer, R. Lindblad, C. Bülow, G. Leistner, A. Terasaki, B. von Issendorff, and J. T. Lau
Electronic ground state of Ni_2^+
J. Chem. Phys. **145**, 194302/1-5 (2016).
- [6] S. Sarugaku, R. Murakami, J. Matsumoto, T. Kawano, M. Arakawa, and A. Terasaki
Size-dependent reactivity of nickel-doped silver cluster cations toward oxygen: Electronic and geometric effects
Chem. Lett. **46**, 385-388 (2017).
- [7] S. Sarugaku, M. Arakawa, and A. Terasaki
Space focusing extensively spread ions in time-of-flight mass spectrometry by nonlinear ion acceleration
Int. J. Mass Spectrom. **414**, 65-69 (2017).

- [8] M. Arakawa, T. Omoda, and A. Terasaki
Adsorption and subsequent reaction of a water molecule on silicate and silica cluster anions
J. Phys. Chem. C **121**, 10790-10795 (2017).
- [9] K. Takeda, S. Masuda, K. Harada, and K. Tanaka
Millimeter-wave spectroscopy of the SiCl^+ ion
Chem. Phys. Lett., **651**, 168-171 (2016).
- [10] Y. Nakashima, K. Harada, K. Tanaka, and T. Tanaka
High-resolution Fourier transform emission spectroscopy of the $A^2\Pi_1-X^2\Pi_1$ band of the OCS^+ ion
J. Chem. Phys., in press.

2.4 紀要・総説・著書等

- [1] 早川鉄一郎、荒川 雅、寺寄 亨
X線による孤立クラスターの電子状態計測 — ナノ触媒材料の高性能化を目指して —
光アライアンス (日本工業出版) Vol. 27, No. 8, 42-46 (2016).
- [2] 荒川 雅
鉍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).
- [3] 原田 賢介
ミリ波多重反射光学系の製作
分光研究 **65-4**, 210-213 (2016).

2.5 国際会議における学術講演・海外での講義

- [1] M. Arakawa (Seminar talk)
“Generation and reaction of clusters with mineral compositions: a model study of chemistry in the interstellar environment”
Seminar at Department of Chemistry, Indian Institute of Technology-Bombay,

Mumbai, India (Apr. 7, 2016)

- [2] A. Terasaki (Invited talk)
“Probing electronic structures of size-selected metal clusters by spectroscopy and chemical reaction”
International Symposium on Recent Progress in Molecular Spectroscopy and Dynamics
Fukuoka, Japan (July 7 - 9, 2016)
- [3] M. Arakawa and A. Terasaki (Poster presentation)
“Reaction of $\text{MgSi}_n\text{O}_m^-$ with CO and H_2O molecules: a model study of chemistry in the interstellar environment”
International Symposium on Recent Progress in Molecular Spectroscopy and Dynamics
Fukuoka, Japan (July 7 - 9, 2016)
- [4] S. Sarugaku, J. Matsumoto, T. Kawano, M. Arakawa, and A. Terasaki (Poster presentation)
“Size-specific reactivity of transition-metal-doped silver clusters with an oxygen molecule”
International Symposium on Recent Progress in Molecular Spectroscopy and Dynamics
Fukuoka, Japan (July 7 - 9, 2016)
- [5] K. Ando, M. Arakawa, and A. Terasaki (Poster presentation)
“Freezing process of a supercooled water droplet in a vacuum”
International Symposium on Recent Progress in Molecular Spectroscopy and Dynamics
Fukuoka, Japan (July 7 - 9, 2016)
- [6] Y. Kiyomura, K. Tobita, T. Ito, M. Arakawa, and A. Terasaki (Poster presentation)
“Size- and temperature-dependent optical absorption spectra of silver cluster cations”
International Symposium on Recent Progress in Molecular Spectroscopy and Dynamics
Fukuoka, Japan (July 7 - 9, 2016)

- [7] M. Arakawa and A. Terasaki (Poster presentation)
“Reaction of silicate clusters with CO and H₂O as a model study of chemistry in the interstellar environment”
Eighteenth International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters (ISSPIC 18)
Jyväskylä, Finland (August 14 - 19, 2016)
- [8] S. Sarugaku, J. Matsumoto, T. Kawano, M. Arakawa, and A. Terasaki (Poster presentation)
“Size-specific reactivity of transition-metal-doped silver clusters toward oxygen: Geometric and electronic effects”
Eighteenth International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters (ISSPIC 18)
Jyväskylä, Finland (August 14 - 19, 2016)
- [9] K. Ando, M. Arakawa, and A. Terasaki (Poster presentation)
“Liquid droplets in a vacuum for wet chemistry of gas-phase clusters”
Eighteenth International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters (ISSPIC 18)
Jyväskylä, Finland (August 14 - 19, 2016)
- [10] Y. Kiyomura, K. Tobita, T. Ito, M. Arakawa, and A. Terasaki (Poster presentation)
“Optical absorption spectroscopy of size-selected silver cluster cations: Size and temperature dependence”
Eighteenth International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters (ISSPIC 18)
Jyväskylä, Finland (August 14 - 19, 2016)
- [11] V. Zamudio-Bayer, C. Bülow, R. Lindblad, M. Timm, G. Leistner, A. Terasaki, B. von Issendorff, and J. T. Lau (Hot-topics talk)
“Spin states, orbital magnetic moments, and spin coupling in free atoms, molecules, complexes, and clusters”
Eighteenth International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters (ISSPIC 18)
Jyväskylä, Finland (August 14 - 19, 2016)
- [12] R. Lindblad, V. Zamudio-Bayer, A. Ławicki, K. Hirsch, C. Bülow, M. Timm,

A. Terasaki, B. von Issendorff, and T. Lau (Poster presentation)
“Gas phase studies of size-selected transition metal oxide clusters using XAS and XMCD”
Eighteenth International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters (ISSPIC 18)
Jyväskylä, Finland (August 14 - 19, 2016)

- [13] A. Terasaki (Seminar talk)
“Electronic properties of metal-cluster systems studied by spectroscopy and chemical reaction”
Seminar at Department of Chemistry, Indian Institute of Technology-Bombay
Mumbai, India (January 16, 2017)

2.7 海外研究者の受入

- [1] 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
2017 年 4 月 17–25 日

2.8 海外研究者の訪問

- [1] Eleanor E.B. Campbell 教授 (エジンバラ大学、イギリス)
講演題目: “Exploring the properties of fullerenes in the gas phase”
2016 年 4 月 21 日
- [2] Mats Jonson 教授 (エーテボリ大学、スウェーデン)
講演題目: “Spin gating of mesoscopic devices”
2016 年 4 月 21 日

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
2017 年 4 月 18–25 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）
有機分子の生成と進化における鉱物クラスターの触媒作用
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] 村田学術振興財団 研究助成
極微小金属の光学過程における電子の挙動
寺寄 亨
- [3] 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
- [4] 株式会社コンポン研究所 共同研究
セリウム化合物触媒の性能向上を目指したクラスター材料研究
寺寄 亨
- [5] 2016 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

2.14 学会賞等受賞

- [1] 清村侑矢 優秀ポスター賞（第10回分子科学討論会）
「銀クラスター正イオンの光吸収分光：光閉じ込め法による吸収断

面積の測定」

2016 年 9 月 13–15 日、神戸

- [2] 猿楽 峻 九州大学学生表彰（学術研究活動表彰）
2017 年 3 月 24 日

2.15 学外における学界活動

- [1] ナノ学会 理事・副会長（寺寄 亨）
[2] 分子科学会 運営委員（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] 分子分光研究会運営委員（原田賢介）
[8] 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] 化学部門 部門長（寺寄 亨）
[3] 理学部 国際コース検討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] 化学部門 助教会代表（荒川 雅）