

---

分子・励起分子・イオンの電子構造と反応・ダイナミックスの解明

---

平成24年度～平成28年度私立大学戦略的研究基盤形成支援事業

研 究 成 果 報 告 書

平成29年5月

学校法人名 上 智 学 院

大学名 上 智 大 学

研究組織名 理 工 学 部

研究代表者 東 善 郎

(上智大学理工学部物質生命理工学科)

## は し が き

平成 24 年度から平成 28 年度まで私立大学戦略的研究基盤形成支援事業として「分子・励起分子・イオンの電子構造と反応・ダイナミックスの解明」の研究プロジェクトが行われた。本研究プロジェクトは、本学において原子物理学，物理化学，生物物理学，計算科学を専門とする理工学部教員が参加し，地球上における環境分子，上層大気および星間空間に存在する励起分子・イオン，さらには生体分子のような比較的大きいサイズの分子に関する電子構造と反応過程を，実験と理論計算の両面から系統的に研究することにより，環境対策技術を開発するために不可欠な衝突・反応断面積や各種分光データ等の基礎データベースを構築し，分子科学に関する新たな研究拠点を形成することを目的とした。本研究報告書では，研究成果の概要に加え，すでに出版された成果の研究論文の別刷りをもって報告書に代えた。原子物理学，物理化学をはじめとする分子科学研究分野の発展に本報告が役立てば幸いである。

## 研究プロジェクト参加研究者

研究者名	所属・職名	プロジェクトでの研究課題	プロジェクトでの役割
東 善郎	上智大学理工学部・教授	分光実験による電子構造の解明	総括・実験・解析
岡田邦宏	同上	イオン・分子・励起分子による反応ダイナミクスの研究	イオン・分子反応
小田切丈	上智大学理工学部・准教授	分光実験による電子構造の解明	蛍光, 及びイオン測定実験
久世信彦	上智大学理工学部・教授	分光実験による電子構造の解明	マイクロ波分光・電子線回折
近藤次郎	上智大学理工学部・准教授	分光実験による電子構造の解明	X 線構造解析
高橋和夫	同上	イオン・分子・励起分子による反応ダイナミクスの研究	燃焼反応・イオン飛行時間差測定
南部伸孝	上智大学理工学部・教授	分子シミュレーションとモデリング	理論計算
星野正光	上智大学理工学部・准教授	分光実験による電子構造の解明	光電子分光実験
(共同研究機関等)			

## 研究の概要

### (1) 研究プロジェクトの目的・意義及び計画の概要

本研究プロジェクトは、主に次の3つのグループ(a) 電子構造実験グループ、(b) 反応素過程グループ、(c) 分子シミュレーショングループにおいて系統的な分子レベルの研究を行うことを目的とした。

#### (a) 電子構造実験グループ

環境分子、上層大気、また宇宙空間に存在する分子、そして生体関連分子に対する超高分解能 VUV 光電子分光実験、X 線内殻光電子分光実験、光吸収実験等を行うことで、分子内電子状態に関する詳細な知見を得る。また、将来的にはイオンの位置敏感型時間分解測定と上の光電子分光実験を組み合わせることにより、電子状態を特定した分子の光解離ダイナミクスに関する基礎的なデータの測定を行う。

- 1) 世界最高のエネルギー分解能を誇る SCIENTA-R4000 光電子分光装置と高エネルギー加速器研究機構大型放射光施設フォトンファクトリーにおける高分解能軟 X 線、および真空紫外線を光源として組み合わせることで、従来では行われることのなかった回転の内部自由度まで分離した分光が期待される。この実験手法を環境分子や上層大気に存在する分子に適用することにより、これまで測定されなかった高分解能分光データの測定を行う。
- 2) 生物科学の分野において、紫外線吸収は塩基配列と立体構造さらには動的構造変化との関係を調べる分析ツールとして使用されているが、詳細な分光データとして測定された例はなく、光電離断面積や光吸収断面積を測定することだけでも基礎科学として意義があり、さらには生体に放射線が照射された際の生体分子への影響に関する素過程としても重要である。さらに分子スイッチとして機能する核酸分子は研究対象としてきわめて興味深く、その塩基配列と動的構造変化の関係、さらには抗生物質などのリガンドが構造変化に及ぼす影響について各種分光法を用いて解析する。
- 3) 気体電子回折法について、元来もっている特徴を生かした上で、新しいタイプの実験を行うことが出来るように実験装置の開発をおこなう。試料ガスを真空装置内で噴射するためのノズル（高温熱ノズル、エアロダイナミックレンズ）の製作と回折データ検出系の開発を行うことで、熱分解反応生成物やエアロゾルクラスターといった分子を対象とした気体電子回折の新しい研究手法の確立を目指す
- 4) マイクロ波分光を用いて実験室系の回転スペクトルの測定を中心として、電波天文

観測とあわせ星間分子の研究を行う。実験室系では熱分解反応や有機合成反応より新規の直線炭素鎖分子の分子定数の決定とその反応メカニズムの解明を研究する。そしてこれらの研究結果を踏まえ、星間分子やエアロゾル関連分子に関する光電子分光の測定を試み、これら分子に関する高分解能の基礎分光データを得ることを計画している。

## (b) 反応素過程グループ

- 1) イオン-分子反応研究：上層大気及び星間分子雲における分子生成では、室温から低温( $\sim 10\text{K}$ )にわたるイオン-分子反応が重要な役割を演じている。その中でも、とりわけ分子イオンと極性分子間の反応が重要である。なぜなら極性分子がもつ永久双極子モーメントと分子イオン間には強い引力が働くため、他の反応と比較して反応速度定数が非常に大きくなるからである。それにも関わらず低温・低密度環境での分子イオン-極性分子反応の実験的研究は十分に行われていない。本研究の目的の一つは、従来にはない実験装置を開発することによって、極低温・低密度環境における分子イオン-極性分子反応の系統的測定を実現し、星間分子雲の研究で利用されている反応速度データベースへ貢献することである。

本研究では、シュタルク分子速度フィルターとレーザー冷却法を組合わせた新しい反応速度測定法を確立し、様々な分子イオンと極性分子の組合せに対して系統的測定行っていく。具体的には、レーザー冷却で生成された  $\text{Ca}^+$  クーロン結晶を用いて分子イオンを極低温に冷却し、シュタルク分子速度フィルターによって生成された数  $\text{K} \sim 10\text{K}$  の極性分子と衝突させ、反応速度を測定する。本計画で導入したパルス色素レーザーによる共鳴多光子イオン化法によって様々な分子イオン標的を生成し、系統的測定を行う計画である。

本研究で開発した実験方法は、星間分子雲の物理的環境に近い条件でイオン-極性分子反応を測定できる現状で唯一の方法である。従来は室温の外挿値や理論計算で求められていた反応速度定数を、実験的に決定できること、また、得られた実験データによって理論値を検証できることが本研究の意義であると考えられる。

- 2) 不安定化学種の燃焼反応研究：地球上において気相ラジカル、励起分子、イオン等の活性化学種が存在し反応する場として、燃焼現象がある。燃焼排ガスである二酸化炭素は、地球温暖化の温室効果ガスの元凶として削減が不可欠であるが、代替エネルギーへの転換がスムーズに行われず、しばらくの間はこれまでよりも少ない燃料で大きなエネルギーを得るための『高効率燃焼』が地球温暖化対策の主流になると考えられる。しかし、高効率燃焼とトレードの関係にあるのが、窒素酸化物 ( $\text{NO}_x$ ) や粒子状物質 (PM, すす) 等の微量有害燃焼排出物の問題である。そこで本研究では、燃料過剰燃焼から発生する  $\text{NO}_x$  の生成反応機構を明らかにするとともに、上層大気中での  $\text{NO}_x$  が関与するラジカル連鎖反応、イオン-分子反応について速度論的

研究を行う。また PM に関しては、多環芳香族炭化水素 (PAH) が前駆体となって生成することはほぼ間違いないが、詳細な生成反応機構は明らかではない。PM の生成反応は低級炭素化合物の重合であるため、反応論的には星間物質の生成と類似しているが、反応温度・圧力が全く異なるため生成物に違いが生じる。このように温度・圧力が変わることによって主反応がどのように移り変わってゆくかを調べることも本研究の目的の一つとなる。

### (c) 分子シミュレーショングループ

本研究では、第一原理計算である量子化学計算およびその結果に基づく厳密量子力学の両方を実施し、理論検証を行う。そして、本プロジェクト実験チームとスペクトル同定やデータ解析に協力し、正確な基礎データの構築をサポートすることを主な目的とする。

具体的な方法は、3 個の原子以下から構成される分子の系においては、ボルン・オッペンハイマー (BO) 近似の基、電子状態のポテンシャルエネルギーを配置間相互作用法により様々な分子座標に対する大域的なポテンシャル関数を決定後、独自に開発した実空間波束発展法に基づく量子化学力学を実施し、非調和性を考慮した振動準位やアインシュタインの A 係数および B 係数の決定を行う。また、電子励起状態では BO 近似の敗れである非断熱遷移が予想される。その場合は、断熱近似の基で非断熱遷移要素 (スピン-軌道相互作用を含む) を求め、非断熱現象を考慮した量子力学を実施する。

その一方、四原子分子以上の系からタンパク質においては、on-the-fly で電子状態のポテンシャルエネルギーおよびその傾きを求めながら分子力学 (MD) シミュレーションを QM/MM モデル等を応用しながら実施する。具体的には、我々は二つの方法を開発している。①「朱-中村理論」に基づく Trajectory-Surface-Hopping (TSH) 法 および ②半古典凍結ガウス波束発展法 がある。①の方法では、非断熱遷移現象を効果的に考慮することができ、②方法では従来の MD では考慮できない、原子核の運動における位相の効果が考慮可能となり、視覚の初期過程である網膜内レチナル分子の光吸収スペクトルなどを理論的に検証することが可能である。このような道具立てで、理論検証を実施することを目的とする。

具体的テーマとしては、以下について実施する。エアロゾルと関係がある硫黄を含む分子として、SO, SO<sub>2</sub>, SO<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>S 分子の光吸収断面積の理論的決定を実施する。さらに、これらの分子の内、SO<sub>2</sub> および H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> 分子については、水溶液中での光解離過程を、非断熱分子力学 (Nonadiabatic MD) シミュレーションを実施し、液相での物理化学的特徴を見出す。また、得られた結果を公表し、大気モデリングに利用されるデータとして、公表する。

## (2) 研究組織

研究代表者：東（総括，全体連携の調整），研究者数：8名，大学院生：約20名。

### (a) 電子状態を探索する電子構造実験グループ

- (ア) 光電子分光担当（星野，東，小田切）
- (イ) マイクロ波分光・電子線回折担当（久世）
- (ウ) 生体分子分光担当（近藤）

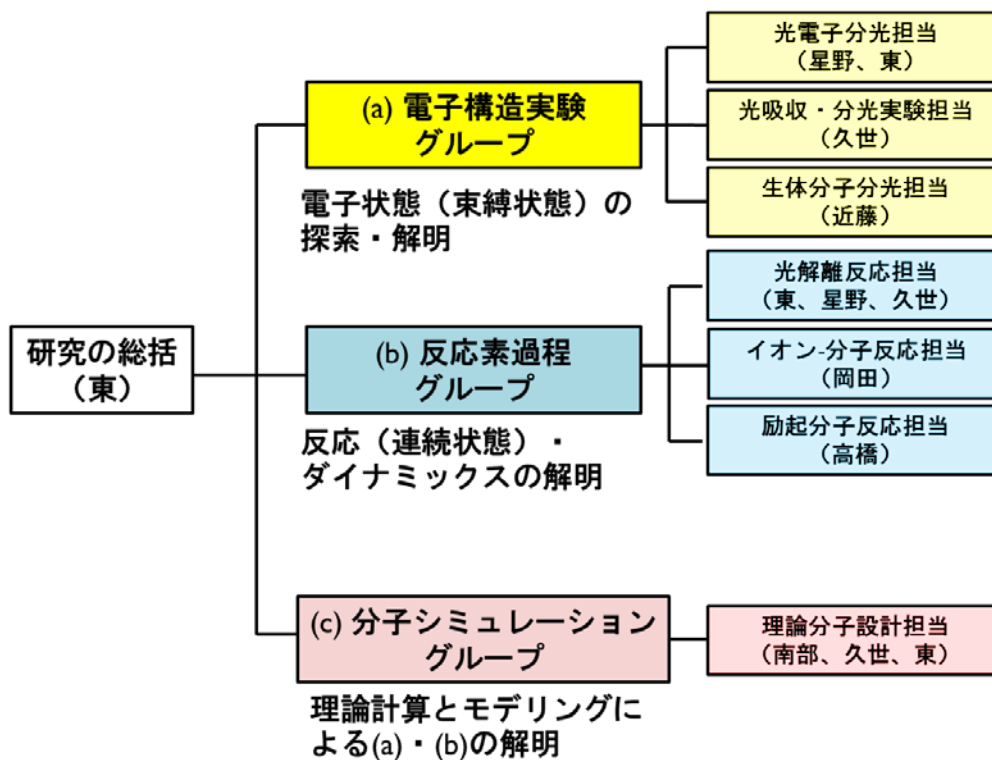
### (b) 反応ダイナミクスを扱う反応素過程グループ

- (ア) 光解離反応担当（東，小田切，久世）
- (イ) イオン-分子反応担当（岡田）
- (ウ) 励起分子反応担当（高橋）

### (c) 理論計算とモデリングを行う分子シミュレーショングループ

- (ア) 理論分子設計担当（南部，久世，東）

以上3つのグループで構成され，相互にデータや資料の提供，計算によるデータ分析などを行うことで多面的に環境分子から生体分子の電子状態から反応過程までの解明を目指す。また，外部共同利用実験施設（高エネルギー加速器研究機構，理化学研究所，ロレンスバークレー国立研究所）との連携を図っている。大学からテクノセンターの利用その他積極的な支援を受けている（下図は申請時の構成）。



### (3) 研究施設・設備等

本研究プロジェクトにおける主要な研究設備は以下の通りである。

- ① 高分解能電子分光装置 Scienta R4000・特注 R4000 専用真空槽・R4000 用ガスセル GC50 (高エネルギー加速器研究機構放射光研究施設光源棟実験ホールに設置)
- ② 位置敏感型時間分解検出システム (運動量分布画像観測法)  
(理工学部小田切研究室, 4-293 約 40m<sup>2</sup> に設置)  
上記の装置は, 高エネルギー加速器研究機構放射光研究施設ビームラインと組み合わせ, シンクロトロン放射光 (軟 X 線・真空紫外線) を光源とした共同利用ユーザーとして用いる。
- ③ パルス色素をレーザーシステム (理工学部岡田研究室, 4-390 約 46m<sup>2</sup> に設置)
- ④ イオン飛行時間差分析器 (理工学部高橋研究室, 4-495 約 46m<sup>2</sup> に設置)

### (4) 研究成果の概要

本報告書では, 研究プロジェクトの各研究課題に基づき, (a) 電子構造実験グループ, (b) 反応素過程グループ, (c) 分子シミュレーショングループに分けて研究成果について報告する。

#### (a) 電子構造実験グループ

高エネルギー加速器研究機構フォトンファクトリー (KEK-PF) におけるシンクロトロン放射光を光源として利用し, 光電効果により標的となる気相原子分子から放出された光電子を超高分解能電子分光装置 SCIENTAR-4000 で測定するための測定システムの立ち上げを行った。

- 1) **Auger 電子分光実験**: 光イオン化ダイナミックスの基礎的な研究として, SCIENTAR-4000 等を用いた高分解能光電子分光測定により, Kr, Xe といった希ガスの Auger 電子分光が進められた。特に興味深い知見が得られたのは, 光イオン化閾値近傍においてである。衝突後効果により光電子が再捕獲される現象を詳細に調べた。最終イオンの Rydberg 状態が Auger 電子構造に印加され, Rydberg 列構造が出現する様子を始めて高分解能測定した。通常の遷移則に反する conjugate process が支配的に起こっている様子が発見され, さらに角度相関に関する興味深い知見が得られた。また本研究は「量子のもつれ」を明らかにする新たな例としても注目され, 異論専門家との共同研究について現在検討中である。
- 2) **加熱分子の光電子分光実験**: 本研究プロジェクトにおいて実施された光電子分光実験のみならず, 従来から行われてきた気相原子分子を標的とした原子分子過程に関する実験は, 大部分が室温で行われ, 振動基底状態の分子標的に対して行われてきた。



しかしながら、一般に分子が室温程度であることは惑星大気などの環境下では稀であり、分子の一部は振動励起状態にある。このような振動励起状態へ励起された状態における光電子分光や光吸収実験は、惑星大気シミュレーション等で大変重要な基礎データにもかかわらずほとんど行われていない現状であった。そこで、本グループでは、抵抗加熱により分子を加熱することで、振動状態を制御し、始状態が振動励起した分子の光電子分光実験を行ってきた。そのための分子加熱装置を開発し、地球温暖化でも重要な二酸化炭素分子に対して、750K 程度までの加熱に成功し、KEK-PF の共同利用ビームタイムにおいて、高分解能光電子分光実験や真空紫外吸収分光実験を行い、顕著な温度効果の測定に成功した。

- 3) **低エネルギー電子エネルギー損失分光実験**：一般に、共同利用実験におけるビームタイムは測定時間が限られている。そこで、限られた測定時間で得られた実験データの正当性を速やかに検証するために、ビームタイムの制限を受けない実験室における電子分光実験を合わせて行い、加熱分子に関する基礎データの測定や予備実験を行うことで、低エネルギー電子をプローブとした分子レベルの振動励起過程に関する知見を得ることに成功した。さらに今後、生体分子の光電離や電子分光実験へ拡張を目的とした水分子の電子散乱断面積の測定も合わせて行った。これは、生体の大半が水であることから水が放射線に照射された際の基礎データとしても重要である。また、ビームタイム以外でも継続して測定を行うために、電子分光装置 SCIENTAR-4000 と He ランプ光源を組み合わせて用いるためのガスノズルの開発を行い、オフラインでも測定ができる状況を確認し、効率よく測定を行うための装置開発も行った。
- 4) **時間分解蛍光測定**：真空紫外領域における時間分解蛍光測定のための装置が立ち上げられた。KEK および岡崎の放射光実験施設においてシングルバンチ運転を利用して希ガスをターゲットとした測定が進められている。アルゴンおよびネオンの測定により、蛍光寿命が原子の電子構造の配置間相互作用にきわめて強く依存することが明らかになり、さらに様々なケースについて解析が進められている。
- 5) **気体電子線回折実験**：気体電子回折の実験装置と解析プログラムの開発が進められた。エアロゾル分子クラスターの構造決定を目的として、真空装置内に収められるエアロダイナミック・レンズの試作を行った。また2次と3次の力の定数を使って分子振動の平均二乗振幅と短縮補正項の計算を行い、気体電子回折と回折分光の併用データ解析において、分子振動の非調和性と振動の分子内の大振幅振動ポテンシャルの決定をともに扱うことのできる解析スキームを確立し、\*Methyl Trifluoroacetate:について以前の研究よりも詳細かつ精密な構造データを決定した。さらに2つの分子内内部回転自由度を考慮した気体電子回折の解析プログラムの開発を行い、いくつかの分子についてこの解析モデルで構造決定を進めている。
- 6) **マイクロ波分光実験**：マイクロ波分光では星間分子候補の直線炭素鎖分子 HC<sub>4</sub>OH のスペクトル観測のほか、チオシアン基・アジ基などを有する新規化合物の回転スペク

トル観測をテーマに加えた。2015年度より従来のシュタルク変調型マイクロ分光器に加え、簡単なセットアップの変更で周波数変調型マイクロ分光器になるように装置システム開発を行った。また最近フーリエ変換型マイクロ分光器の導入も進め、3タイプの分光器を用いた回転スペクトルの観測が可能となる拠点づくりを行った。

- 7) **生体分子分光実験**：生体分子分光実験研究については、水銀イオンがチミン塩基に特異的に結合して T-Hg(II)-T という特殊な金属仲介塩基対を形成すること、そしてこれによって特定の配列をもつ DNA 分子が水銀イオンの有無によって非らせん状態と二重らせん状態の間で構造を変化させて分子スイッチとして働くことを X線結晶解析、NMR 法、紫外分光法で明らかにした (論文 4 報)。また、タンパク質生合成の ON/OFF を制御する RNA 分子スイッチについては、その動的構造変化に及ぼす抗生物質の影響について X線解析で明らかにした (論文 5 報)。

#### (b) 反応素過程グループ

本研究グループでは、極限環境における反応素過程の研究をキーワードとして (1) 星間空間における分子生成過程で重要な低温イオン-極性分子反応(同位体分子種を含む)の研究、及び (2) 燃焼現象や上層大気中での NO<sub>x</sub> が関与するラジカル連鎖反応、イオン-分子反応の速度論的研究、(3) プラズマ、放射線化学において重要な高励起分子状態からの解離反応ダイナミクスに関する研究、を行った。以下にその研究成果を記す。

- 1) **星間分子雲における低温イオン-極性分子反応の研究**：並進温度 10 K 以下において複数種の分子-イオン極性分子反応の測定に成功した。これまでに  $\text{CH}_3\text{CN} + \text{N}_2\text{H}^+ \rightarrow \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{N}_2$ ,  $\text{CH}_3\text{CN} + \text{Ne}^+ \rightarrow \text{products}$  の反応速度測定の結果について誌上発表を行った。また、入射ガスノズルの温度を 210 K まで低下させることにより、 $\text{CH}_3\text{CN} + \text{Ne}^+$ ,  $\text{CH}_3\text{CN} + \text{N}_2\text{H}^+$  の各反応において反応速度定数を決定し、ノズル温度が 295 K (室温) の場合と比較した。その結果、並進温度よりもむしろアセトニトリル分子の有効回転温度が反応速度定数を支配していることを示唆する結果を得た。一方、低速エタノール分子 ( $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ ) と極低温  $\text{Ne}^+$  との  $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} + \text{Ne}^+ \rightarrow \text{products}$  反応速度定数を並進温度 10 K 以下の低温ではじめて決定した。また、ガスノズルの温度を 295 K, 218 K と変化させたときの反応速度定数を比較し、殆ど変化がないことを見出した。この結果は、 $\text{CH}_3\text{CN} + \text{Ne}^+$  反応の場合と異なり、シュタルク分子速度フィルターを通過した低速エタノール分子線の有効回転温度に違いがないことが理由であることが分かった。以上の内容は、日本物理学会で発表された。また、本研究の内容の一部は、研究室所属大学院生の修士論文に収録されている。
- 2) **温度可変シュタルク分子速度フィルターの新規開発と性能評価**：温度可変シュタルク分子速度フィルターのモンテカルロシミュレーション、設計、及び実機の製作を行った。3種の極性分子 ( $\text{ND}_3$ ,  $\text{CH}_3\text{CN}$ , 及び  $\text{CH}_3\text{F}$ ) に対してシミュレーションを行い、フィルター偏向部の曲率半径を 50~1000 mm, 偏向角 5~30 度の範囲で変化させることにより、凡そ 3~100 K 程度の範囲で極性分子の並進温度を変化させるこ

とが可能であることを確かめた。また、シミュレーション結果に基づく設計を行い、温度可変シュタルク分子速度フィルターを完成させた。曲率半径  $R$  と偏向角  $\theta$  が  $(R, \theta) = (50 \text{ mm}, 30^\circ), (600 \text{ mm}, 10^\circ)$  の 2 種類の速度選別部を実際に製作し、低速分子線の生成実験を行なった。その結果、反応速度測定に十分な数密度 ( $>10^5 \text{ cm}^{-3}$ ) を維持したまま、低速  $\text{ND}_3$ 、及び  $\text{CH}_3\text{CN}$  の並進温度をそれぞれ  $6 \sim 29 \text{ K}$ 、 $9 \sim 37 \text{ K}$  まで変化させることが可能であることを示し、曲率半径  $R$  と偏向角  $\theta$  の大きく異なる電極を交換することによって、分子線の出射位置を変化させることなく、低速分子線の並進温度を大きく変更できることを実証した。一方、冷却ガスセルを用いた低速極性分子の生成実験を行い、約  $100 \text{ K}$  程度まで内部温度が冷却された低速分子線の生成を確認した。本研究の内容は日本物理学会、原子衝突学会で発表された。

- 3) **冷却イオントラップの開発と運転**：温度可変シュタルク分子速度フィルターに接続された、新たな温度可変・冷却イオントラップを新規に製作し、実際に冷凍機を動作させ、イオントラップ内の環境温度を約  $12 \text{ K}$  まで低下させることに成功した。 $\text{Ca}^+$ イオンのレーザー冷却実験にも成功し、分子イオンの回転温度を制御した低温イオン-極性分子反応の測定が可能な実験装置を完成させた。また、冷却イオントラップ中においてカルシウムイオンのレーザー冷却を行い、 $\text{Ca}^+$ のクーロン結晶中に極低温  $\text{CaH}^+$ を生成する方法を確立した。約  $12.8 \text{ K}$  という低温環境において  $\text{Ca}^+ - \text{CaH}^+$  混合クーロン結晶を生成し、 $\text{CaH}^+$ の振動回転基底状態の占有密度を約  $55\%$  (推定) まで高める手法を開発した。また、パルス色素レーザーを利用した  $\text{CaH}^+$ の光解離実験を行った。 $\text{Ca}^+$ のクーロン結晶に埋め込まれた  $\text{CaH}^+$ イオンに、 $283 \sim 287 \text{ nm}$  のパルスレーザーを照射し  $\text{CaH}^+$ が  $\text{Ca}^+$ と  $\text{H}$  に解離することを実験的に確認した。また、光解離レートを測定することによって、これまで測定されていなかった波長帯で光解離断面積を評価することができた。さらに、極めて少数の  $\text{Ca}^+$ クーロン結晶中 (4 個) に 1 個の  $\text{CaH}^+$ を生成し、光解離させることにも成功し、単一  $\text{CaH}^+$ イオンを用いた分光が可能であることを実証した。本研究の内容は日本物理学会で発表された。
- 4) **共鳴多光子イオン化 (REMPI) による分子イオンの生成と分光**：分子イオン生成のために導入したパルス色素レーザーの立ち上げと動作確認を行った。Wiley-McLaren 型飛行時間質量分析計を製作し、パルス色素レーザーによる窒素分子、及び酸素分子の共鳴多光子イオン化 REMPI に成功した。実験では、波長  $282 \sim 287 \text{ nm}$  に亘る REMPI スペクトル (電子振動回転遷移スペクトル) の測定にも成功した。さらに、 $2+1$  REMPI によって  $\text{Ca}^+$ クーロン結晶中に十分な量の酸素分子イオン  $\text{O}_2^+$ を生成し、低速  $\text{CH}_3\text{CN}$  分子線と衝突させ、低温イオン-極性分子反応の測定に応用することに成功した。一方、重要な星間分子の一つである水分子イオン ( $\text{H}_2\text{O}^+, \text{D}_2\text{O}^+$ ) の  $(2R+1)$  REMPI による生成をこれまで測定されたことのないレーザー波長帯 ( $280 \sim 287 \text{ nm}$ ) で試み、効率的なイオン生成が可能な波長の探索を行った。 $\text{D}_2\text{O}^+, \text{H}_2\text{O}^+$ の REMPI スペクトルでは、それぞれ  $280.08 \text{ nm}$ 、 $280.04 \text{ nm}$  付近でピークを確認したが、いずれ

も短波長にむかうほどイオン信号強度が大きくなることが確認された。この理由は、本研究で用いたレーザーの2光子エネルギーが約 8.86 eV であるのに対し、共鳴二光子遷移によって生成される水分子の電子励起状態  $1^1A_2$  のエネルギーがわずかに高いため（理論計算では 9.04 eV）であると考察された。得られた実験結果のいくつかは日本物理学会で発表された。また、本研究の内容は、卒業研究生の卒業論文に収録されている。

- 5) **混合クーロン結晶の分子動力学シミュレーション**: 低温イオン-極性分子反応の測定で必要となる  $Ca^+$  クーロン結晶中に生成された分子イオンのイオン数, 及びイオン温度を推定するために, 広範な条件での分子動力学シミュレーションを実行し, 以下のことを明らかにした。
  - ・ 従来から利用されてきた断熱近似によって推定される  $Ca^+$  のイオン温度の評価方法は不十分であり, 分子動力学シミュレーションによる推定が必要であることを明らかにした。
  - ・ 混合クーロン結晶中のイオンの絶対数を決定するために, ゼロ平均規格化相互相関値を計算する手法を新たに提案し, その有効性を実証した。
  - ・ 混合クーロン結晶中のイオンの相対数を求める簡便な方法を提案した。
  - ・ 本研究の内容は誌上発表された。
- 6) **高温流通反応管-真空紫外光イオン化飛行時間型質量分析装置 (VUV-TOFMS) の製作と評価**: 多環芳香族炭化水素 (PAH) の生成メカニズムを実験的に解明するために, 上記装置を立ち上げ, 評価を行った。サンプリング部分に独自の工夫を施したところ, PAH を 0.1ppm 以下という高感度で観測可能となり, 不安定中間体の検出もできるようになった。
- 7) **多環芳香族炭化水素 (PAH) の生成メカニズムの実験的解明**: 上記装置を用いて, 以下の PAH 生成メカニズムを実験的に明らかにした。
  - ・ ベンゼン, トルエン, エチルベンゼンの熱分解および Fuel-Rich 燃焼を行い, PAH 生成に及ぼす芳香族環アルキル基側鎖の影響について検討し, 反応経路を解明した。
  - ・ 重水素置換した芳香族を燃料として用い, PAH 生成反応における水素原子の挙動について実験的に明らかにした。
  - ・ 化学構造の異なる C6 炭化水素としてベンゼン (芳香族), シクロヘキサン (シクロアルカン), ヘキサン (直鎖アルカン), 2-メチルペンタン (枝分れアルカン) の熱分解および Fuel-Rich 燃焼を行い, PAH 生成反応における炭素骨格構造の違いについて検討し, 反応経路を解明した。
  - ・ バイオ燃料として代表的な炭化水素であるエチルターシャリーブチルエーテル (ETBE) の PAH 生成メカニズムについて, 炭素の枝分かれ骨格が同じである 2,2-ジメチルペンタン (2,2-DMP) と直鎖エーテルであるエチルノルマルブチルエーテル (ENBE) と比較することにより, ETBE からなぜ多量の PAH が生成するのかを

反応論的に初めて明らかにした。

- 8) **量子化学計算によるスス前駆物質の生成反応メカニズム解明**：実験的に得られた上記 PAH 生成メカニズムの知見を理論的に検証するため、CBS-QB3 等の高精度量子化学計算により、反応経路探索を行った。
- 9) **窒素酸化物の実用燃焼生成メカニズム解明**：実際のエンジンから排出される窒素酸化物および PAH について、科学的な抑制コンセプトに基づいた運転パラメーター制御を行い、一応の成果をおさめた。
- 10) **真空紫外域の光吸収における光解離断面積測定**：メタン、アンモニア、アセチレン、水といった、基礎的にも環境の観点からも重要な分子に対し、分子解離ダイナミックスの解明を目的に、真空紫外域の光吸収に伴う励起水素原子を生成する光解離断面積の測定を行った。いずれもイオン化ポテンシャル以上の内部エネルギーを持つ超励起状態において断面積が共鳴的に増大し、これらの状態が分子解離に対して果たす重要な役割を明らかにすることができた。
- 11) **回転状態を制御した水素分子の光解離実験**：分子 2 電子励起状態の解離ダイナミックスにおける非断熱遷移の影響を調べるため、最も簡単な分子である水素分子に対し、回転状態を制御した光解離実験を行った。液体ヘリウムと磁性体触媒によるパラオールソ水素変換器および液体窒素冷却ガスセルを用い、ゼロ回転準位のみの水素ガスを用意することにより、光解離断面積の回転準位依存性が大きくないことを明らかにし、 $^1\Sigma_u^+ - ^1\Pi_u^+$ 間の非断熱遷移の影響について評価した。また、同じ目的で、水素分子 2 電子励起状態からの原子対生成過程における同位体効果を調べた。
- 12) **運動量画像観測法の開発**：イオンフラグメントを含む解離反応のダイナミックスを調べるため、運動量分布画像観測法の装置開発を行った。広いエネルギー範囲で利用可能な 7 極電子銃、運動量分布画像観測法のためのイオン捕集電極を製作し、位置敏感検出システムのキャリブレーションを行った。

### (c) 分子シミュレーショングループ

25 億年前に起きた大酸化事変後、地球上酸素が存在するようになり、酸化大気出現する。しかし、それ以前までは還元大気であり、還元大気に関連する単体硫黄  $S_2$ ,  $S_3$ ,  $S_4$ ,  $S_6$ ,  $S_8$  および酸化大気に関連する  $SSO$ ,  $SCO$ ,  $SO_2$ ,  $SO$ ,  $H_2SO_4$  の連鎖反応における光解離現象が重要だと Kasting が 2000 年の *Science* 誌にて報告している。特に、その年代の地層の中にある硫黄の同位体比率が現在の比率とは全く異なり、その理由は地球科学分野では全く見出されていない歴史的な問題である。さらに、この問題は現代では、ハッブル宇宙望遠鏡での木星のイオにおいて単体硫黄が観測されており、近い将来移住する惑星における成分分析等において重要な役割を果たす課題である。

そこで、我々のグループは、 $SCO$  および  $SO_2$  の研究を終えていることから、本課題にて  $SO$  および  $S_2$  の光解離断面積の決定を、厳密量子動力学計算を実施し、両分

子とも光解離による同位体分別係数を決定した。特に  $S_2$  分子に関しては全く実験結果がないことから、世界的に大きな成果であり、NASA が開催した 2 度の国際会議にて報告した。現在、世界の注目を還元大気の大気連鎖反応へ向けさせることに成功している。次に、 $H_2SO_4$  の 4 つ電子励起状態に対する非断熱 *ab initio* 動力学計算を実施し、これまで想定されていない反応経路の解明に成功した。

さらに、半古典凍結ガウス波束発展法に基づく非断熱 *ab initio* 動力学法の開発を実施し、アンモニアの紫外線領域における光吸収断面積の理論的決定を実施した。実験で観測されている結果と比較した場合、ピークの位置については良い一致を見たが、ピークの幅を再現することが今後の課題となった。主な理由は、ポテンシャルトンネルと動的トンネル効果の考慮が、見積もる上で重要となる古典軌道において考慮されていない。また、溶液内光反応の解明などにも成功していることから、大気科学における硫酸や硝酸の溶液内光反応の解明を実施し、今後報告する予定である。

上記の研究を研究期間中に実施し、関連する 21 報の国際査読論文および 2 報の国際査読総説の報告および 12 件の国際招待講演の業績を得た。

## (5) 優れた成果が上がった点

### (a) 電子構造実験グループ

- ・ 希ガス原子の内殻電離過程における閾値近傍の光電子と Auger 電子との電子相関の効果、および放出された低エネルギー光電子がその効果により原子に再捕獲される過程について、より高分解能で測定したことで、新たな電子状態に関する知見を得ることに成功した。
- ・ 超高分解能電子分光装置 SCIENTA R4000 および分子線加熱装置の開発を行い、これまで測定が行われてこなかった分子、特に二酸化炭素などの直線三原子分子の分子振動状態を制御した測定が可能となった。
- ・ 低エネルギー電子分光実験を合わせて行い、放射光実験の基準となる加熱分子の振動励起状態に関する新たな知見を得た。
- ・ X 線構造解析手法をシンクロトロン放射光や紫外分光法を用いて行い、たんぱく質や DNA 分子の動的構造変化に対し詳細な知見を得ることで、原子分子レベルから生体分子まで非常に幅広い範囲の分子構造の系統的な理解につなげることができた。
- ・ 気体電子回折のデータ解析において、分子振動の非調和性と振動の分子内の大振幅振動ポテンシャルの決定をともに扱うことのできる解析スキームを確立した。
- ・ 2 つの分子内内部回転自由度を考慮した気体電子回折の解析プログラムの開発を行い、取り扱う分子系の拡張が可能になった。
- ・ シュタルク変調型、周波数変調型、フーリエ変換型の 3 タイプのマイクロ波分光器を用いた回転スペクトルの観測が可能となった。

## (b) 反応素過程グループ

- ・ 並進温度 10 K 以下における  $\text{CH}_3\text{CN} + \text{N}_2\text{H}^+ \rightarrow \text{CH}_3\text{CNH}^+ + \text{N}_2$ ,  $\text{CH}_3\text{CN} + \text{Ne}^+ \rightarrow \text{products}$  反応の反応速度定数をはじめて実験的に決定した。
- ・ 低速極性分子の並進温度を星間分子雲の環境温度 (数 K~100K) に亘って変化させることが可能な新しい低速極性分子源 (wavy Stark velocity filter) を提案・開発し、実際に低速分子線の生成に成功した。
- ・ レーザー冷却イオンの混合クーロン結晶のレーザー誘起蛍光画像と分子動力学計算によってえられるシミュレーション画像の比較から、共同冷却された分子イオン数を求める方法論を新たに提案し、実験に応用することに成功した。
- ・ 冷却イオントラップ中で  $\text{CaH}^+$  の分子イオンの長時間閉じ込めに成功し、 $\text{CaH}^+$  の振動回転基底状態の占有密度を約 55% (推定) まで高めた。
- ・ 極低温に冷却された  $\text{CaH}^+$  イオンの光解離実験を単一粒子感度で行う方法を開発し、新しい光解離波長を見出すことに成功した。
- ・ VUV-TOFMS のサンプリング部分に独自の工夫を施すことにより、PAH を 0.1ppm 以下という超高感度で観測可能となり、不安定中間体の検出にも成功した。
- ・ PAH 生成に及ぼす芳香族環アルキル基側鎖の影響について検討し、反応経路を解明した。
- ・ PAH 生成反応における水素原子の挙動について実験的に明らかにした。
- ・ バイオ燃料として代表的なエチルターシャリーブチルエーテル (ETBE) の PAH 生成メカニズムを解明し、ETBE からなぜ多量の PAH が生成するのかを反応論的に初めて明らかにした。
- ・ 実験室レベルの研究で得られた成果から、窒素酸化物および PAH の科学的な抑制コンセプトを構築し、これに基づいて実際のディーゼルエンジン運転パラメーター制御を行い、一応の成果をおさめた。
- ・ 解離反応における分子 2 電子励起状態の大きな寄与を明らかにした。研究対象としたいずれの系においても、励起水素原子生成にいたるまでに、分子状態間の非断熱遷移が高い確率で起こっていることが結論づけられた。このような非断熱遷移は、真空紫外から極紫外域に存在する高い分子励起状態としては観測例がほとんどない。断面積に見られる始状態の回転状態依存性または同位体効果を調べることにより、このような解離ダイナミクスに対する理解を深めた。

## (c) 分子シミュレーショングループ

実験では観測されていない、あるいは同位体分別係数が決定されていない系について光解離過程の解明に成功した。また、溶液な光異性化反応では、溶媒効果による生成比率が異なる現象を理論的に解明した。

## (6) 課題となった点

### (a) 電子構造実験グループ

孤立した分子の電子構造を精密に決めるためには、本プロジェクトで導入した高分解能電子分光装置に加え、大強度の光源が必要となる。また、従来、孤立系の原子や分子を標的とした実験は、標的数密度が十分得られないため、他の物性分野の測定と比較して測定時間が必要であることが問題として挙げられる。そのため、現在共同利用ビームタイム以外の時間でも測定が可能な電子分光装置や He ランプ光源の設置を行った。そこで、十分な測定時間を確保するための実験装置が整ったことから、これまで以上に原子分子の電子構造に関するこれまで得られていない詳細な知見を得ることができると期待される。

### (b) 反応素過程グループ

低温イオン-極性分子反応の分岐比を測定する手段の開発が課題として挙げられる。生成物イオンを含む混合クーロン結晶をイオントラップ外部に引き出し、飛行時間測定による質量分析手法を開発することが課題である。この手法が完成すれば、これまで不可能であった反応の分岐比の測定が可能となる。

今回のプロジェクトにより、炭化水素燃料からの PAH 生成メカニズムの解明はほぼ達せられた。しかし、PAH が重合して実際の PM を生成する過程は未だ明らかではないポストプロジェクトの研究課題として取り組んでいきたい。

### (c) 分子シミュレーショングループ

古典軌道を利用した半古典力学の開発において、ポテンシャルトンネルと動的トンネル効果の考慮が不可欠である。量子モンテカルロ法などがあるが、分子力学の枠組みの中で開発が出来れば、既存の古典 MD シミュレーション法へ容易に応用が可能となり、早期の開発が求められる。それに対し我々は既にモデル系ではあるが、理論を開発し論文を報告している。現在、既存の古典 MD シミュレーション法へ応用し、その性能評価が不可欠である。

三原子分子系において、やはり量子波束法が近年利用されることが多いが、人工的に設定する複素ポテンシャルが、連続状態の波動関数の位相に大きな影響を及ぼしている。従って、緊密結合法に基づく厳密量子力学プログラムの整備が求められる。我々は、過去に作成したプログラムがあることから、そのプログラムを最新のライブラリーに対応できるよう整備し直し、単体硫黄  $S_3$  や SSO など光解離過程の系へ応用し、千分率での精度が求められる同位体分別係数の決定を行う必要がある。



## (7) 研究期間終了後の展望

### (a) 電子構造実験グループ

上でも述べたように気相原子分子を標的とした原子分子過程の測定は、手法によらず測定時間を要するのが現状である。そのため、当初予定していたスケジュールから多少遅れはあるが、本プロジェクト期間中に、原子分子の微視的視点から物質の電子構造を詳細に研究するための実験装置が整い、測定手法が確立したことから、研究機関終了後は、これらの装置・手法を用いた系統的な測定を開始する予定である。具体的には、これまで個々の標的原子分子の光電子分光実験やたんぱく質の X 線結晶解析、気体電子線回折やマイクロ波分光で行ってきた各々の測定を相互に結び付ける研究を実施する予定である。例えば、DNA 構成分子の光電子分光実験によるたんぱく質の X 線構造解析のミクロな視点からの理解、大気環境分子の電子分光や電子線回折実験から、(c)分子シミュレーショングループとの連携による理論計算を用いた詳細な電子構造の理解を進めていく予定である。

### (b) 反応素過程グループ

反応の分岐比を測定する手法の開発を除いて、実験技術開発はほぼ終了し、分子-イオン極分子反応の測定を系統的に進めることができる段階にまで到達した。今後は広範囲にわたる並進・回転温度での低温イオン-極性分子反応の系統的測定を行なっていく、星間化学データベースへ貢献することを目標とする。また、測定を通して低温イオン分子反応における量子効果及び同位体効果の発見をめざし、理論的研究へのフィードバックを目指す。

PAH が重合して実際の PM を生成する過程を衝撃波管等と用いた実験と量子化学計算により明らかにしていく予定である。

解離反応のダイナミクスを理解するには、断面積だけでなくフラグメントの放出エネルギーおよび放出角度分布を調べるのが重要である。このため、運動量分布画像観測装置を放射光実験ステーションに持ち込み、解離性光イオン化反応、イオン対生成反応におけるイオンフラグメントの運動量分布測定を目指す。

## (8) 研究成果の副次的効果

### (a) 電子構造実験グループ

近年、イオン液体と呼ばれるアニオンとカチオンから構成される塩であるのにも拘わらず常温で液体状態の化合物であり、多くの優れた特性を持っていることから、新たなグリーン溶媒や電子デバイスなどへの応用が期待されている物質として注目され

ている。このイオン液体の特性を活かした電気化学的な応用を考えると、電子的構造を理解することが必要不可欠である。本プロジェクトにおける電子構造実験グループと KEK との共同研究において、電子分光装置 SCIENT R4000 をイオン液体標的に対して用い、KEK-PF における軟 X 線ビームラインにおける光電子分光実験、およびオージェー電子分光実験が行われている。特に、共鳴オージェー電子分光の手法により、占有軌道がアニオンとカチオンのいずれに帰属されるのか直接的な情報が得られている。現在、多様な分野で広く注目されるイオン液体標的に対し、原子分子レベルで電子構造を理解するための研究が始まったことは、非常に意義深いと考えられる。

マイクロ波分光の実験室データの観測から派生して、様々な分子種の天文観測を行った。東京理科大学などとの共同研究により、国立天文台野辺山において低質量星形成領域 L1527 におけるラインサーベイを行い、いくつかの直線炭素鎖分子の回転遷移のスペクトルを観測した。この領域では初観測となるスペクトル線が何本もあり、それらの成果は論文・学会発表にまとめられた。

#### **(b) 反応素過程グループ**

冷却イオントラップの開発により、分子イオンの回転温度冷却が可能となった。今後、分子イオンの振動回転遷移分光による陽子-電子質量比の時間変化検知実験へむけた応用や、分子イオンの精密レーザー分光への応用などが考えられる。また、本研究で開発した温度可変シュタルク分子速度フィルターは、その広い並進温度可変範囲(数 K~100 K) から、低速分子線を利用した他の研究、例えば、分子線同士の低温衝突実験や極性分子の精密分光研究への応用が期待される。

今回開発した高温流通反応管-真空紫外光イオン化飛行時間型質量分析装置 (VUV-TOFMAS) は、PAH の生成経路解明だけでなく、不安定化学種の燃焼反応研究を行う研究装置として今後活用が期待できる。さしあたって、自動車ノッキングの原因ともなっている低温酸化反応の研究にも併用して成果を得たい。

## (9) 研究業績リスト

### A) 雑誌論文

1. M. Kitajima, T. Kishino, T. Okumura, N. Kobayashi, A. Sayama, Y. Mori, K. Hosaka, T. Odagiri, M. Hoshino, and H. Tanaka: "Low-energy and very-low energy total cross sections for electron collisions with N<sub>2</sub>", *Eur. J. Phys.* 2017 (accepted)
2. Nobuhiko Kuze, Osamu Ohashi, and Takeshi Sakaizumi "Microwave spectrum, molecular structure, dipole moment, and quantum chemical calculations of *s-trans-(E)*-2-methyl-2-propenal oxime", *J. Mol. Spectrosc.* 2017 (in press).
3. K. Sarka, S. O. Danielache, A. Kondorskiy, and S. Nanbu, "Theoretical study of electronic properties and isotope effects in the UV absorption spectrum of disulfur," *Chemical Physics* **488-489**, 36-42 (2017).
4. M. Nakazono, Y. Oshikawa, M. Nakamura, H. Kubota, S. Nanbu, "Strong Chemiluminescent Acridinium Esters under Neutral Conditions: Synthesis, Properties, Determination, and Theoretical Study," *J. Org. Chem.* **82**, 2450-2461 (2017).
5. A. Ohta, O. Kobayashi, S. O. Danielache, S. Nanbu, "Nonadiabatic ab initio Molecular Dynamics with PME-ONIOM Scheme of Photoisomerization Reaction between 1,3-Cyclohexadiene and 1,3,5-cis-Hexatriene in Solution Phase," *Chemical Physics*, **485-486**, 45-59 (2017).
6. A. Matsugi, K. Takahashi, "Thermal Decomposition of 2,3,3,3- and trans-1,3,3,3-Tetrafluoropropenes", *The Journal of Physical Chemistry A*, 2017 (submitted).
7. H. Yoshizawa, H. Nagashima, Y. Murakami, K. Takahashi, "Kinetic Studies on the Reactions of Furan, 2-Methylfuran, and 2,5-Dimethylfuran with Atomic Oxygen at Elevated Temperatures", *Chemistry Letters* 2017 (submitted)
8. M. Hoshino, D. Dufлот, P. Limaо-Vieira, S. Ohtomi, and H. Tanaka, "Experimental scaling of plane-Born cross sections and ab initio calculations for electron-impact excitation and dissociation of XF<sub>4</sub> (X = C, Si, and Ge) molecules", *J. Chem. Phys.* **14**, 144306 (2017)
9. Norihiro Suzuki, Satoshi Kosugi, Yumi Ito, Naoki Ito, Tatsuro Nagoshi, Nobuhiko Kuze, James R Harries, James P Sullivan, Tetsuo Nagata, Emma Sokell, Fumihiro Koike, and Yoshiro Azuma, "Probing electron correlation through radiative lifetime measurements upon inner-valence photoionization of Ne and Ar", *J. Phys. B: At. Mo. Phys.* **49** 145002 (2016)
10. S. Ohtomi, M. Hoshino, A. Suga, H. Kato, D. Dufлот, P. Limaо-Vieira, and H. Tanaka, "Studies on GeF<sub>4</sub> Valence and Rydberg States by Electron Impact Spectroscopy and Ab Initio Calculations", *J. Phys. Chem. A* **120**, 9170 (2016).
11. H. Tanaka, M. J. Brunger, L. Campbell, H. Kato, M. Hoshino, and A. R. P. Rau, "Scaled plane-wave Born cross sections for atoms and molecules", *Rev. Mod. Phys.* **88**, 25004 (2016).

12. M. Hoshino, Y. Ishijima, H. Kato, D. Mogi, Y. Takahashi, K. Fukae, P. Lima-Vieira, H. Tanaka and I. Shimamura, "Change in resonance parameters of a linear molecule as it bends: Evidence in electron-impact vibrational transitions of hot COS and CO<sub>2</sub> molecules", *Eur. Phys. J. D* **70**, 100 (2016).
13. M. Matsui, M. Hoshino, H. Kato, F. Ferreira da Silva, P. Lima-Vieira, and H. Tanaka, "Measuring electron-impact cross sections of water: elastic scattering and electronic excitation of a<sup>3</sup>B<sub>1</sub> and A<sup>1</sup>B<sub>1</sub> states", *Eur. Phys. J. D* **70**, 77 (2016).
14. \* 岡田邦宏, "イオンのクーロン結晶が拓く星間分子生成反応の研究", *日本物理学会誌* 71巻, No.10, 695 (2016).
15. A. Matsugi, H. Shiina, T. Oguchi, K. Takahashi, "Time-Resolved Broadband Cavity-Enhanced Absorption Spectroscopy behind Shock Wave", *The Journal of Physical Chemistry A*, **120**, 2070-2077 (2016).
16. M. Kogoma, K. Takahashi, K. Tanaka, "Surface treatment of fluorinated polymers using atmospheric pressure glow discharge system", *Journal of Photopolymer Science and Technology*, **29**, 421-425 (2016).
17. A. Takamine, M. Wada, K. Okada, Y. Ito, P. Schury, F. Arai, I. Katayama, K. Imamura, Y. Ichikawa, H. Ueno, H. Wollnik, H.A. Schuessler, "Towards high precision measurements of nuclear g-factors for the Be isotopes", *Nuclear Inst. and Methods in Physics Research*, **B376**, 307-310 (2016).
18. T. Suzuki, Y. Suzuki, T. Kawamoto, R. Miyamoto, S. Nanbu, H. Nagao, "Dinuclear Ruthenium(III)-Ruthenium(IV) Complexes, Having a Doubly Oxido-Bridged and Acetato- or Nitrate-Capped Framework," *Inorg. Chem.*, **55**, 6830-6832 (2016).
19. H. Nakamura, S. Nanbu, Y. Teranishi, A. Ohta, "Development of semiclassical molecular dynamics simulation method," *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **18**, 11972-11985 (2016).
20. Takenori Dairaku, Kyoko Furuita, Hajime Sato, Jakub Severa, Katsuyuki Nakashima, Jiro Kondo, Daichi Yamanaka, Yoshinori Kondo, Itaru Okamoto, Akira Ono, Vladimir Sychrovsky, Chojiro Kojima\* & Yoshiyuki Tanaka\*. "Structure determination of an AgI-mediated cytosine-cytosine base pair within DNA duplex in solution with 1H/15N/109Ag NMR spectroscopy." *Chem. Eur. J.*, **22**, 13028-13031 (2016).
21. Hiroki Kanazawa, Md. Mominul Hoque, Masaru Tsunoda, Kaoru Suzuki, Tamotsu Yamamoto, Gota Kawai, Jiro Kondo\* & Akio Takénaka\*. "Structural insights into the catalytic reaction trigger and inhibition of D-3-hydroxybutyrate de-hydrogenase." *Acta Crystallogr.*, **F72**, 507-515 (2016). \* **Selected as a Cover Picture**
22. Satoshi Horikoshi, Kota Nakamura, Mari Kawaguchi, Jiro Kondo & Nick Serpone. "Effect of microwave radiation on the activity of catalase. decomposition of hydrogen peroxide under microwave and conventional heating." *RSC Advances.*, **6**, 48237-48244 (2016).
23. Jiro Kondo, Yusuke Nomura, Yukiko Kitahara, Satoshi Obika\* & Hidetaka Torigoe\*. "Crystal structure of 2',4'-BNANC[N-Me]-modified antisense gapmer in complex with the target RNA." *Chem. Commun.*, **52**, 2354-2357 (2016).

24. K. Hosaka, K. Shiino, Y. Nakanishi, T. Odagiri, M. Kitajima, and N. Kouchi: "Dynamics of the  $Q_2 \ ^1\Pi_u(1)$  state studied from the isotope effect on the cross sections for the formation of the 2p atom pair in the photoexcitation of  $H_2$  and  $D_2$ ", *Phys. Rev. A* 93[6], 063423 (2016)
25. Y. Hikosaka, R. Mashiko, T. Odagiri, J. Adachi, H. Tanaka, T. Kosuge, and K. Ito: "Photoelectron recapture and reemission process associated with double Auger decay in Ar", *Phys. Rev. A* 93[6], 063412 (2016)
26. Mitsunori Araki, Shuro Takano, Nami Sakai, Satoshi Yamamoto, Takahiro Oyama, Nobuhiko Kuze, and Koichi Tsukiyama "Precise observations of the  $^{13}C$  isotopic fractionation of  $HC_3N$  in the low-mass star-forming region L1527", *Astrophys. J.*, 833:291 (2016).
27. Satoshi Kosugi, Masatomi Iizawa, Yu Kawarai, Yosuke Kuriyama, A L David Kilcoyne, Fumihiko Koike, Nobuhiko Kuze, Daniel S Slaughter and Yoshiro Azuma, "PCI effects and the gradual formation of Rydberg series due to photoelectron recapture, in the Auger satellite lines upon Xe 4d photoionization" *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **48** 115003 (2015)
28. M. Hoshino, P. Lima-Vieira, A. Suga, H. Kato, F. Ferreira da Silva, F. Blanco, G. Garcia, and H. Tanaka, "Crossed-beam experiment for the scattering of low- and intermediate-energy electrons from  $BF_3$ : A comparative study with  $XF_3$  ( $X = C, N, \text{ and } CH$ ) molecules", *J. Chem. Phys.* **143** (2015) 024313.
29. \* Kunihiro Okada, Masanari Ichikawa, Michiharu Wada, and Hans A. Schuessler, "Quasi-equilibrium characterization of mixed ion Coulomb crystals", *Phys. Rev. Appl.* **4**, 054009 (2015), (11 pages)
30. \* K. Okada, M. Ichikawa, M. Wada, "Characterization of ion Coulomb crystals for fundamental sciences", *Hyperfine Interactions*, May 2015, DOI:10.1007/s10751-015-1188-y
31. Yusuke Takada and Kunihiro Okada, "Reaction rate measurements between sympathetically cooled ions and velocity selected polar molecules: search for the deuterium isotope effects", *Journal of Physics: Conference Series* **635** (2015) 022031
32. \* Kunihiro Okada and Masatoshi Kajita, "Toward laser spectroscopy of rotationally cooled  $CaH^+$  ions trapped in a cryogenic linear Paul trap", *Journal of Physics: Conference Series* **635** (2015) 032060
33. K. Furuse, Y. Sawada, K. Takahashi, M. Kogoma, K. Tanaka, "Defluorination treatment of polytetrafluoroethylene by  $B_2H_6/He$  plasma at atmospheric pressure", *Journal of Photopolymer Science and Technology*, **28**, 465-469 (2015).
34. A. D. Kondorskiy, S. Nanbu, "Electronically nonadiabatic wave packet propagation using frozen Gaussian scattering," *J. Chem. Phys.*, **143**, 114103/16pages (2015).
35. O. Kobayashi, S. Nanbu, "Application of particle-mesh Ewald summation to ONIOM theory," *Chem. Phys.*, **461**, 47-57 (2015).
36. A. Ohta, O. Kobayashi, S. O. Danielache, S. Nanbu, "Nonadiabatic ab initio molecular dynamics of photoisomerization reaction between 1,3-cyclohexadiene and 1,3,5-cis-

- hexatriene," *Chem. Phys.* **459**, 45-53 (2015).
37. T. Akama, O. Kobayashi, S. Nanbu, "Development of efficient time-evolution method based on three-term recurrence relation," *J. Chem. Phys.*, **142**, 204104/6pages (2015).
  38. T. Murakami, A. Ohta, T. Suzuki, K. Ikeda, S. O. Danielache, S. Nanbu, "Theoretical study of ultraviolet induced photodissociation dynamics of sulfuric acid," *Chem. Phys.* **452**, 17-24 (2015).
  39. Yoshiyuki Tanaka\*, Jiro Kondo, Vladimir Sychrovsk, Jakub Šebera, Takenori Dairaku, Hisao Saneyoshi, Hidehito Urata, Hidetaka Torigoe & Akira Ono\*. "Structures, physicochemical properties, and applications of T-HgII-T, C-AgI-C, and other metallo-base pairs." *Chem. Commun.*, 51, 17343-17360 (2015). \* **Selected as an Inside Cover Picture**
  40. Jiro Kondo\*, Yoshinari Tada, Takenori Dairaku, Hisao Saneyoshi, Itaru Okamoto, Yoshiyuki Tanaka & Akira Ono "High-resolution crystal structure of Silver(I)-RNA hybrid duplex containing Watson-Crick-like C-Silver(I)-C metallo-base pair" *Angew. Chem. Int. Ed.*, **54**, 13323-13326 (2015).
  41. K. Hosaka, Y. Nakanishi, R. Kogo, P. Schmidt, Y. Torizuka, K. Shigemura, T. Odagiri, A. Knie, K. Jankala, A. Ehresmann, M. Nakano, Y. Kumagai, K. Shiino, M. Kitajima and N. Kouchi: "Angular correlation measurements of a pair of Lyman- $\alpha$  photons emitted in the photodissociation of H<sub>2</sub>", *J. Phys. Conf. Ser.* 635, 112016 (2015)
  42. M. Kitajima, K. Shigemura, K. Hosaka, T. Odagiri, M. Hoshino and H. Tanaka: "Total cross sections for electron scattering from noble-gas atoms in near- and below-thermal energy collisions", *J. Phys. Conf. Ser.* 635, 112016 (2015)
  43. \*Nobuhiko Kuze, Takashi Watado, Yuri Takahashi, Takeshi Sakaizumi, Osamu Ohashi, Minako, Kiuchi, Kinya Iijima "Molecular structure and internal rotation of CH<sub>2</sub>Cl group of chloropropanone oxime: gas electron diffraction, microwave spectroscopy, and quantum chemical calculation studies", *Struct. Chem.*, 26, 1241-1257 (2015).
  44. \*Nobuhiko Kuze, Atsushi Ishikawa, Maho Kono, Takayuki Kobayashi, Noriyuki Fuchisawa, Takemasa Tsuji, and Hiroshi Takeuchi "Molecular Structure and Internal Rotation of CF<sub>3</sub> Group of Methyl Trifluoroacetate: Gas Electron Diffraction, Microwave Spectroscopy, and Quantum Chemical Calculation Studies", *J. Phys. Chem. A*, 119, 1774-1786 (2015).
  45. Y. Kawai, Th. Weber, Y. Azuma, C. Winstead, V. McKoy, A. Belkacem, and D. S. Slaughter. "Dynamics of the Dissociating Uracil Anion Following Resonant Electron Attachment", *J. Phys. Chem Lett.* **5**, 3854-3858, (2014)
  46. Y. Nakanishi, K. Hosaka, R. Kougo, T. Odagiri, M. Nakano, Y. Kumagai, K. Shiino, M. Kitajima and N. Kouchi: "Angular correlation of a pair of Lyman- $\alpha$  photons produced in the photodissociation of H<sub>2</sub>", *Phys. Rev. A* 90[4], 043405 (2014)
  47. T. Nagata, K. Kawajiri, S. Kosugi, N. Suzuki, M. Kemmotsu, T. Nandi, E. Sokell, F. Koike

- and Y. Azuma, “Photoion spectroscopy on isolated Mn atoms in the 2p-3d excitation region: II. Decay processes of the excited states”, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **47**, 215002 (2014) (7 pp)
48. N. Numadate, K. Okada, N. Nakamura, H. Tanuma, “Development of a Kingdon ion trap system for trapping externally injected highly charged ions”, *Review of Scientific Instruments* **85**, 103119 (2014).
  49. S. Hasegawa, S. Obara, F. Yoshida, Y. Azuma, F. Koike, and T. Nagata, “Photoion-yield study K-shell photoionization spectra of atomic beryllium between 1s2s2 and 1s(2s2p3P)4s”, *Phys. Rev. A* **90**, 032503 (2014)
  50. T. Nagata, K. Kawajiri, S. Kosugi, N. Suzuki, M. Kemmotsu, T. Nandi, E. Sokell, Y. Azuma and F. Koike, “Photoion spectroscopy on isolated Mn atoms in the 2p → 3d excitation region: I. Total photoion-yield spectrum” *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **47** 185006 (2014)
  51. K. Shigemura, M. Kitajima, M. Kurokawa, K. Toyoshima, T. Odagiri, A. Suga, H. Kato, M. Hoshino, H. Tanaka, and K. Ito, “Total cross sections for electron scattering from He and Ne at very low energies”, *Phys. Rev. A* **89**, 022709 / 9 pages (2014)
  52. N. Shiga, M. Mizuno, K. Kido, P. Phoonthong and K. Okada, “Accelerating the averaging rate of atomic ensemble clock stability using atomic phase lock”, *New Journal of Physics* **16**, 073029 (2014) .
  53. A. Takamine, M. Wada, K. Okada, T. Sonoda, P. Schury, T. Nakamura, Y. Kanai, T. Kubo, I. Katayama, S. Ohtani, H. Wollnik, and H. A. Schuessler, “Hyperfine Structure Constant of the Neutron Halo Nucleus <sup>11</sup>Be<sup>+</sup>”, *Physical Review Letters* **112**, 162502 (2014) .
  54. S. O. Danielache, S. Tomoya, A. Kondorskiy, I. Tokue, S. Nanbu, “Non-adiabatic calculations of ultraviolet absorption cross-section of Sulfur Monoxide; Isotopic effects on the photo-dissociation reaction,” *J. Chem. Phys.*, **140**, 044319/11pages (2014).
  55. Juan Pablo Maianti, Hiroki Kanazawa, Paola Dozzo, Rowena D. Matias, Lee Ann Feeney, Eliana S. Armstrong, Darin J. Hildebrandt, Timothy R. Kane, Micah J. Gliedt, Adam A. Goldblum, Martin S. Linsell, James B. Aggen, Jiro Kondo & Stephen Hanessian\*. “Toxicity modulation, resistance enzyme evasion, and A-site X-ray structure of broad-spectrum antibacterial neomycin analogs” *ACS Chem. Biol.*, **9**, 2067-2073 (2014).
  56. Hiroshi Yamaguchi, Jakub Šebera, Jiro Kondo (Joint First Author), Shuji Oda, Tomoyuki Komuro, Takuya Kawamura, Takenori Dairaku, Yoshinori Kondo, Itaru Okamoto, Akira Ono, Jaroslav V. Burda, Chojiro Kojima, Vladimir Sychrovsky\* & Yoshiyuki Tanaka\*. “The structure of metallo-DNA with consecutive thymine–HgII–thymine base pairs explains positive entropy for the metallo base pair formation” *Nucleic Acids Res.*, **42**, 4094-4099 (2014).

57. Jiro Kondo, Tom Yamada, Chika Hirose, Itaru Okamoto, Yoshiyuki Tanaka & Akira Ono. “Crystal structure of metallo-DNA duplex containing consecutive Watson-Crick-like T-HgII-T base pairs” *Angew. Chem. Int. Ed.*, **53**, 2385-2388 (2014).
58. Nina Sesto, Marie Touchon, José Marques Andrade, Jiro Kondo, Eduardo P. C. Rocha, Cecilia Maria Arraiano, Cristel Archambaud, Eric Westhof, Pascale Romby\* & Pascale Cossart\*. “A PNPase dependent CRISPR system in *Listeria*” *PLoS Genet.*, **10**, e1004065 (2014).
59. Y. Kumagai, T. Odagiri, M. Nakano, T. Tanabe, I. H. Suzuki, K. Hosaka, M. Kitajima, and N. Kouchi, “Cross sections for the formation of H (n = 2) atom via superexcited states in photoexcitation of methane and ammonia”, *J. Chem. Phys.* **139**, 164307 / 7 pages (2013).
60. T. Okabayashi, H. Kubota, H. Yamabe, M. Araki, N. Kuze, “Microwave spectroscopy of AgCCH and AuCCH in the  $\tilde{X}^1\Sigma^+$  states”, *Chemical Physics Letters*, **577**, 11-15 (2013).
61. M. Hoshino, M. Horie, H. Kato, F. Blanco, G. García, P. Limão-Vieira, J. P. Sullivan, M. J. Brunger, and H. Tanaka, “Cross sections for elastic scattering of electrons by CF<sub>3</sub>Cl, CF<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, and CFCI<sub>3</sub>”, *The Journal of Chemical Physics* **138**, (2013) 214305.
62. P. Limao-Vieira, D. Duflot, K. Anzai, H. Kato, M. Hoshino, F. Ferreira da Silva, D. Mogi, T. Tanioka, H. Tanaka, “Studies of low-lying triplet states in 1,3-C<sub>4</sub>F<sub>6</sub>, c-C<sub>4</sub>F<sub>6</sub> and 2-C<sub>4</sub>F<sub>6</sub> by electron energy-loss spectroscopy and ab initio calculations”, *Chemical Physics Letters* **574** (2013) 32
63. M. Hoshino, H. Murai, H. Kato, Y. Itikawa, M.J. Brunger, H. Tanaka, “Resolution of a significant discrepancy in the electron impact excitation of the 3s[3/2]<sub>1</sub> and 3s'[1/2]<sub>1</sub> low-lying electronic states in neon”, *Chemical Physics Letters* **585**, (2013) 33.
64. Y. Ito, P. Schury, M. Wada, S. Naimi, T. Sonoda, H. Mita, F. Arai, A. Takamine, K. Okada, A. Ozawa, and H. Wollnik, “Single-reference high-precision mass measurement with a multireflection time-of-flight mass spectrograph”, *PHYSICAL REVIEW C* **88**, 011306(R) (2013).
65. M. Hoshino, H. Murai, H. Kato, M. J. Brunger, Y. Itikawa, and H. Tanaka, “Electron impact excitation of the low-lying 3s[3/2]<sub>1</sub> and 3s'[1/2]<sub>1</sub> levels in neon for incident energies between 20 and 300 eV”, *The Journal of Chemical Physics* **139**, (2013) 184301.
66. H. Murai, Y. Ishijima, T. Mitsumura, Y. Sakamoto, H. Kato, M. Hoshino, F. Blanco, G. García, P. Limão-Vieira, M. J. Brunger, S. J. Buckman, and H. Tanaka, “A comprehensive and comparative study of elastic electron scattering from OCS and CS<sub>2</sub> in the energy region from 1.2 to 200 eV”, *The Journal of Chemical Physics* **138**, (2013) 054302
67. J. A. Schmidt, M. S. Johnson, S. Hattori, N. Yoshida, S. Nanbu, and R. Schinke, “OCS photolytic isotope effects from first principles: sulfur and carbon isotopes, temperature dependence and implications for the stratosphere,” *Atmos. Chem. and Phys.*, **13**, 1511-1520,



(2013)

68. T. Sonoda, M. Wada, H. Tomita, C. Sakamoto, T. Takatsuka, T. Furukawa, H. Iimurad, Y. Itoe, T. Kubo, Y. Matsuo, H. Mita, S. Naimi, S. Nakamura, T. Noto, P. Schurye, T. Shinozuka, T. Wakui, H. Miyatake, S. Jeong, H. Ishiyama, Y. X. Watanabe, Y. Hirayama, K. Okada, A. Takamine, “Development of a resonant laser ionization gas cell for high-energy, short-lived nuclei”, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* 295, 1 (2013).
69. \*K. Okada, T. Suganuma, T. Furukawa, T. Takayanagi, M. Wada, H. A. Schuessler, “Cold ion–polar-molecule reactions studied with a combined Stark-velocity-filter– ion-trap apparatus”, *Physical Review A* 87, 043427 (2013) .
70. Y. Ito, P. Schury, M. Wada, S. Naimi, T. Sonoda, H. Mita, F. Arai, A. Takamine, K. Okada, A. Ozawa, and H. Wollnik, “Single-reference high-precision mass measurement with a multireflection time-of-flight mass spectrograph”, *Phys. Rev. C* **88**, 011306(R) (2013).
71. S. Naimia, S. Nakamura, Y. Itob, H. Mita, K. Okada, A. Ozawa, P. Schury, T. Sonoda, A. Takamine, M. Wada, H. Wollnik, “An rf-carpet electrospray ion source to provide isobaric mass calibrants for trans-uranium elements”, *International Journal of Mass Spectrometry* in press, Available online 7 January 2013; <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijms.2012.12.009>
72. Moran Shalev, Jiro Kondo, Dmitry Kopelyanskiy, Charles L. Jaffe, Noam Adir & Timor Baasov. “Identification of the molecular attributes required for aminoglycoside activity against *Leishmania*” *Proc. Natl. Acad. Sci. USA.*, **110**, 13333-13338 (2013).
73. Jiro Kondo, Anne-Catherine Dock-Bregeon, Dagmar K. Willkomm, Roland K. Hartmann & Eric Westhof. “Structure of an A-form RNA duplex obtained by degradation of 6S RNA in a crystallization droplet” *Acta Crystallogr.*, **F69**, 634-639 (2013).
74. Jiro Kondo, Mai Koganei, Juan Pablo Maianti, Vu Linh Ly & Stephen Hanessian. “Crystal structures of a bioactive 6'-hydroxy variant of sisomicin bound to the bacterial and protozoal ribosomal decoding sites” *ChemMedChem*, **8**, 733-739 (2013).
75. T. Osawa, K. Kawajiri, N. Suzuki, T. Nagata, Y. Azuma, and F. Koike, “Photoion-yield study of the 3p–3d giant resonance excitation region of isolated Cr, Mn and Fe atoms” *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **45**, 225204 (2012)
76. G. Purohit, Prithvi Singh, Vinod Patidar, Y. Azuma, and K. K. Sud, “Effects of target polarization and postcollision interaction on the electron-impact single ionization of Ne(2p), Ar(3p), and Na(3s) atoms”, *Phys. Rev. A* **85**, 022714 (2012)
77. T. Odagiri, T. Tanabe and N. Kouchi, “Dynamics of entangled H(2p) pair generated in the photodissociation of H<sub>2</sub>”, *J. Phys.: Conf. Ser.* **388**, 012024 / 8 pages (2012).
78. T. Odagiri, M. Nakano, T. Tanabe, Y. Kumagai, I. H. Suzuki, M. Kitajima and N. Kouchi, “Three-body neutral dissociations of a multiply excited water molecule around the double ionization potential”, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **45**, 215204 / 7 pages (2012).

79. M. Kitajima, M. Kurokawa, T. Kishino, K. Toyoshima, T. Odagiri, H. Kato, K. Anzai, M. Hoshino, H. Tanaka, and K. Ito, “Ultra-low-energy electron scattering cross section measurements of Ar, Kr and Xe employing the threshold photoelectron source”, *Eur. Phys. J. D* **66**, 130 / 9 pages (2012).
80. Mitsunori Araki, Shuro Takano, Hiromichi Yamabe, Koichi Tsukiyama, and Nobuhiko Kuze, “Radio Search for H<sub>2</sub>CCC toward HD 183143 as a Candidate for a Diffuse Interstellar Band Carrier”, *Astrophysical Journal Letters*, **753:L11**, 1-3 (2012).
66. Nobuhiko Kuze, Chiaki Ohno, Shinya Morisaki, Yo Sugawara, Koichi Tamagawa, Shigehiro Konaka, “A study of the structure and conformation of 1,1-dicyclopropylethene by gas electron diffraction and ab initio calculations”, *Journal of Molecular Structure*, **1014**, 26-31 (2012).
- P. Limão-Vieira, K. Anzai, H. Kato, M. Hoshino, F. Ferreira da Silva, D. Dufлот, D. Mogi, T. Tanioka, and H. Tanaka, “Electronic Excitation to Singlet States of 1,3-C<sub>4</sub>F<sub>6</sub>, c-C<sub>4</sub>F<sub>6</sub> and 2-C<sub>4</sub>F<sub>6</sub> by Electron Impact - Electron Energy-Loss Spectroscopy and ab Initio Calculations “, *The Journal of Physical Chemistry A* **116**, (2012) 10529.
67. W. C. Chung, Shinkoh Nanbu, Toshimasa Ishida, “QM/MM Trajectory Surface Hopping Approach to Photoisomerization of Rhodopsin and Isorhodopsin: The Origin of Faster and More Efficient Isomerization for Rhodopsin,” *J. Phys. Chem. B*, **116**, 8009-8023 (2012).
68. \*K. Okada, N. Kimura, T. Suganuma, K. Shiina, T. Furukawa, T. Takayanagi, M. Wada, and H. A. Schuessler, “Laser-induced reactions between a Ca<sup>+</sup> Coulomb crystal and polar molecules”, *Journal of Physics: Conference Series Volume 388*, 012025 (2012), (6 pages)

## B) 学会発表

### 2016 年度

1. Hiroki Kanazawa, Juan. P. Maianti, Stephen Hanessian, Jiro Kondo: “Crystal structures of the bacterial ribosomal RNA in complex with fluorinated aminoglycosides”, ISNAC2016 (The 43th International Symposium on Nucleic Acid Chemistry), 2016 年 9 月 27-29 日, 熊本大学黒髪キャンパス (熊本市)
2. Masayoshi Kokaku, Masayuki Tera, Jiro Kondo: “Structural and crystal polymorphisms of RNA G-quadruplex formed by r(UGGGU)”, ISNAC2016 (The 43th International Symposium on Nucleic Acid Chemistry), 2016 年 9 月 27- 29 日, 熊本大学黒髪キャンパス (熊本市)
3. Yoshinari Tada, Takenori Dairaku, Hisao Saneyoshi, Yoshiyuki Tanaka, Akira Ono, Jiro Kondo: “Fabrication and crystallization of silver-DNA hybrid nanowire”, ISNAC2016 (The 43th International Symposium on Nucleic Acid Chemistry), 2016 年 9 月 27- 29 日, 熊本大学黒髪キャンパス (熊本市)

4. Atsuhiko Yoshimura, Koichi Sugawara, Jiro Kondo: “Crystallographic studies of RNA-cleaving deoxyribozymes”, ISNAC2016 (The 43th International Symposium on Nucleic Acid Chemistry), 2016年9月27-29日, 熊本大学黒髪キャンパス (熊本市)
5. Jiro Kondo, Yoshinari Tada, Takenori Dairaku, Hisao Saneyoshi, Yoshiyuki Tanaka, Akira Ono. Crystal structure of silver-DNA hybrid nanowire. ISNAC2016 (The 43th International Symposium on Nucleic Acid Chemistry), 2016年9月27-29日, 熊本大学黒髪キャンパス (熊本市)
6. 近藤次郎: “DNA ナノマテリアル・ナノメディシンの Structure-Based Design”, JST 新技術説明会, 2016年9月15日, JST 東京本部別館ホール (東京都)
7. Jiro Kondo, Yoshinari Tada, Takenori Dairaku, Hisao Saneyoshi, Itaru Okamoto, Yoshiyuki Tanaka, Akira Ono, RNA 2016. 2016年6月28日-7月2日, 京都国際会館 (京都市)
8. Hiroki Kanazawa, Juan. P. Maianti, Stephen Hanessian, Jiro Kondo: “Interactions between the bacterial ribosomal RNA and fluorinated aminoglycosides”, RNA2016, 2016年6月28日-7月2日, 京都国際会館 (京都市)
9. 田中敦也, 菱山直樹, 大富翔平, 加藤英俊, 星野正光, 田中大: “電子衝撃による NO 分子の電子励起断面積測定”, 日本物理学会 2016 年秋季大会, 2016 年 9 月 13-16 日, 金沢大学角間キャンパス (金沢市)
10. 菱山直樹, 大富翔平, 田中敦也, 星野正光, 田中大: “PF<sub>3</sub> 分子の電子分光 I: 弾性散乱過程”, 日本物理学会 2016 年秋季大会, 2016 年 9 月 13-16 日, 金沢大学角間キャンパス (金沢市)
11. 大富翔平, 菅惇史, 加藤英俊, 星野正光, D. Duflot, P. Limão-Vieira, 田中大: “電子衝撃による XF<sub>4</sub> (X = C, Si, Ge) 分子の電子励起過程の研究 II”, 日本物理学会 2016 年秋季大会, 2016 年 9 月 13-16 日, 金沢大学角間キャンパス (金沢市)
12. 星野正光, 菱山直樹, 田中敦也, 大富翔平, 加藤英俊, 田中大: “アセトン分子の低エネルギー電子分光”, 原子衝突学会第 41 回年会, 2016 年 12 月 10-11 日, 富山大学 五福キャンパス(富山県富山市)
13. 田中敦也, 菱山直樹, 大富翔平, 加藤英俊, 星野正光, 田中大: “電子エネルギー損失分光法による NO 分子の電子励起過程”, 原子衝突学会第 41 回年会, 2016 年 12 月 10-11 日, 富山大学 五福キャンパス(富山県富山市)
14. 菱山直樹, 山崎義基, 尾形昌洋, 石塚雅典, 大富翔平, 田中敦也, 星野正光, 田中大: “NH<sub>3</sub> 分子の低エネルギー電子分光: 弾性散乱過程”, 原子衝突学会第 41 回年会, 2016 年 12 月 10-11 日, 富山大学 五福キャンパス(富山県富山市)
15. 菱山直樹, 大富翔平, 田中敦也, 星野正光, 田中大: “電子衝撃による PF<sub>3</sub> 分子の弾性散乱微分断面積の絶対値測定”, 原子衝突学会第 41 回年会, 2016 年 12 月 10-11 日, 富山大学 五福キャンパス(富山県富山市)
16. 大富翔平, 菅惇史, 加藤英俊, 星野正光, D. Duflot, P. Limão-Vieira, 田中大: “EELS

- による  $\text{XF}_4$  分子( $X = \text{C, Si, Ge}$ )の電子励起状態と *ab initio* 計算”, 原子衝突学会第 41 回年会, 2016 年 12 月 10-11 日, 富山大学 五福キャンパス(富山県富山市)
17. 高田裕介, 木村直樹, 和田道治, Hans A. Schuessler, 岡田邦宏: “リニア型シュタルク分子速度フィルターによる低速分子線の生成”, 日本物理学会第 72 回年次大会, 2017 年 3 月 17-20 日, 大阪大学豊中キャンパス (大阪府豊中市)
  18. \* 高田裕介, 岡田邦宏: “温度可変シュタルク分子速度フィルターの開発”, 原子衝突学会第 41 回年会, 2016 年 12 月 10-11 日, 富山大学 五福キャンパス(富山県富山市)
  19. Yusuke Takada, Kunihiro Okada: “Study on the Effective Rotational Temperature Dependence of the Reaction-Rate Constants between Cold Ions and Slow Polar Molecules”, 12th European Conference on Atoms, Molecules and Photons, September 5-9, 2016, Goethe-University, Campus Westend, Frankfurt am Main
  20. 高田裕介, 岡田邦宏: “温度可変シュタルク分子速度フィルターの開発 II”, 日本物理学会 2016 年秋季大会, 2016 年 9 月 13-16 日, 金沢大学角間キャンパス (金沢市)
  21. 木村直樹, 岡田邦宏, 和田道治, 中村信行, 大前宣昭, 香取秀俊: “多価イオン精密分光に向けた冷却コンバインドイオントラップの製作”, 日本物理学会 2016 年秋季大会, 2016 年 9 月 13-16 日, 金沢大学角間キャンパス (金沢市)
  22. (招待講演) 岡田邦宏: “イオンのクーロン結晶が拓く低温イオン化学”, 第 64 回質量分析総合討論会, ホテル阪急エキスポパーク (大阪) 2016 年 5 月 18 日
  23. 阿部悠太, 小田切丈, 大類卓, 白鳥貴久, 海田正司, 谷内一史, 熊谷嘉晃, 穂坂綱一, 北島昌史, 河内宣之: “回転状態を制御した水素分子二電子励起状態からの Lyman- $\alpha$  光子放出断面積”, 日本物理学会第 72 回年次大会, 2017 年 3 月 17-20 日, 大阪大学豊中キャンパス (大阪府豊中市)
  24. 青木真, 青戸真之介, 小田切丈: “電子-窒素分子衝突による解離性イオン化過程解明のためのフラグメントイオンの運動量分布測定”, 日本物理学会第 72 回年次大会, 2017 年 3 月 17-20 日, 大阪大学豊中キャンパス (大阪府豊中市)
  25. 鳥塚祐太郎, 穂坂綱一, Schmidt Philipp, 谷内一史, 小田切丈, Knie Andre, Jankala Kari, Ehresmann Arno, 向後陵子, 北島昌史, 河内宣之: “水素( $\text{H}_2$ ,  $\text{D}_2$ ,  $\text{HD}$ )の光解離により生成する 2p 原子ペアのもつれと前駆 2 電子励起状態の対称性” 日本物理学会第 72 回年次大会, 2017 年 3 月 17-20 日, 大阪大学豊中キャンパス
  26. 前田卓郎, 穂坂綱一, 小田切丈, 北島昌史, 河内宣之: “ $\text{H}_2\text{O}$  の二電子励起における標識付き電子エネルギー損失スペクトルの強い形状変化: 入射電子エネルギー 100eV, 電子散乱角  $6^\circ$  と  $9^\circ$  の比較” 日本物理学会第 72 回年次大会, 2017 年 3 月 17-20 日, 大阪大学豊中キャンパス
  27. 南崎開, 穂坂綱一, 土田明代, 谷内一史, 小田切丈, 北島昌史, 河内宣之: “解離性一電子励起に対する二電子励起の促進:  $\text{NH}_3$  の光子標識付き角度分解電子衝突実験”,

- 日本物理学会第72回年次大会, 2017年3月17-20日, 大阪大学豊中キャンパス
28. 阿部悠太, 小田切丈, 大類卓, 白鳥貴久, 海田正司, 谷口卓郎, 谷内一史, 熊谷嘉晃, 穂坂綱一, 北島昌史, 河内宣之: 「回転状態を制御した水素分子二電子励起状態の光解離断面積」, 2016年度量子ビームサイエンスフェスタ, 2017年3月14-15日, つくば国際会議場(茨城県つくば市)
  29. 谷口卓郎, 金安達夫, 小田切丈, 田中宏和, 足立純一, Pascal LABLANQUIE, 彦坂泰正: 「N<sub>2</sub>分子の1s励起に伴う共鳴2重Auger過程」, 2016年度量子ビームサイエンスフェスタ, 2017年3月14-15日, つくば国際会議場(茨城県つくば市)
  30. 穂坂綱一, 鳥塚祐太郎, Philipp Schmidt, 小田切丈, Andre Knie, Kari Jankala, Arno Ehresmann, 北島昌史, 河内宣之: 「H<sub>2</sub>の光解離で生成する2p-3p原子ペアの観測」, 量子ビームサイエンスフェスタ, 2017年3月14-15日, つくば国際会議場(茨城県つくば市)
  31. 佐山篤, 小林尚正, 森湧真, 奥村拓馬, 北島昌史, 穂坂綱一, 小田切丈, 星野正光, 田中大: 「しきい光電子源を用いたN<sub>2</sub>Oの超低エネルギー電子衝突全断面積の測定」, 量子ビームサイエンスフェスタ, 2017年3月14-5日, つくば国際会議場(茨城県つくば市)
  32. 金安達夫, 小田切丈, 中川心陽, 増子亮平, 田中宏和, 足立純一, 彦坂泰正: 「O<sub>2</sub>内殻イオン化サテライト状態の多重Auger崩壊」, 2016年度量子ビームサイエンスフェスタ, 2017年3月14-15日, つくば国際会議場(茨城県つくば市)
  33. 中川心陽, 小田切丈, 長坂将成, 小杉信博, 金井要, 岩橋崇, 大内幸雄, 足立純一: 「放射光分光実験によるイオン液体の電子的構造の研究」, 2016年度量子ビームサイエンスフェスタ, 2017年3月14-15日, つくば国際会議場(茨城県つくば市)
  34. 彦坂泰正, 増子亮平, 小田切丈, 足立純一, 田中宏和, 小菅隆, 伊藤健二: 「Arのダブルオージェに起因した電子再捕獲・再放出過程」, 第30回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム, 2017年1月7-9日, 神戸芸術センター(兵庫県神戸市)
  35. 阿部悠太, 小田切丈, 大類卓, 白鳥貴久, 海田正司, 谷内一史, 熊谷嘉晃, 穂坂綱一, 北島昌史, 河内宣之: 「パラ水素分子2電子励起状態の光解離断面積」, 第30回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム, 2017年1月7-9日, 神戸芸術センター(兵庫県神戸市)
  36. 青木真, 青戸真之介, 小田切丈: 「フラグメントイオンの運動量画像観測装置の開発」, 原子衝突学会第41回年会, 2016年12月10-11日, 富山大学五福キャンパス(富山県富山市)
  37. 阿部悠太, 小田切丈, 大類卓, 白鳥貴久, 海田正志, 谷内一史, 熊谷嘉晃, 穂坂綱一, 北島昌史, 河内宣之: 「回転状態を制御した水素分子二電子励起状態からのH(2p)原子生成断面積」, 原子衝突学会第41回年会, 2016年12月10-11日, 富山

大学 五福キャンパス(富山県富山市)

38. 彦坂泰正, 増子亮平, 小田切丈, 足立純一, 田中宏和, 小菅隆, 伊藤健二: 「多電子同時計測による光電子再捕獲・再放出過程の研究」, 原子衝突学会 第 41 回年会, 2016 年 12 月 10-11 日, 富山大学 五福キャンパス(富山県富山市)
39. 金安達夫, 小田切丈, 中川心陽, 増子亮平, 田中宏和, 足立純一, 彦坂泰正: 「多電子同時計測による O<sub>2</sub> 分子の多重 Auger 過程の観測」, 原子衝突学会 第 41 回年会, 2016 年 12 月 10-11 日, 富山大学 五福キャンパス(富山県富山市)
40. 小林尚正, 佐山篤, 北島昌史, 小田切丈, 星野正光, 田中大: 「超低エネルギー電子-O<sub>2</sub> 衝突の全断面積の測定」, 原子衝突学会 第 41 回年会, 2016 年 12 月 10-11 日, 富山大学 五福キャンパス(富山県富山市)
41. 佐山篤, 小林尚正, 森湧真, 奥村拓馬, 北島昌史, 小田切丈, 星野正光, 田中大: 「N<sub>2</sub>O 分子を標的とした低エネルギー電子衝突全断面積測定」, 原子衝突学会 第 41 回年会, 2016 年 12 月 10-11 日, 富山大学 五福キャンパス(富山県富山市)
42. 鳥塚祐太郎, 穂坂綱一, Schmidt Philipp, 谷内一史, 小田切丈, Knie Andre, Jankala Kari, Ehresmann Arno, 北島昌史, 河内宣之: 「水素(H<sub>2</sub>, HD, D<sub>2</sub>)の光解離で生成する Lyman- $\alpha$  光子ペアの角度相関」, 第 10 回分子科学討論会 2016, 2016 年 9 月 13-15 日, 神戸ファッションマート(兵庫県神戸市)
43. 穂坂綱一, 鳥塚祐太郎, Schmidt Philipp, 谷内一史, 小田切丈, Knie Andre, Jankala Kari, Ehresmann Arno, 北島昌史, 河内宣之: 「2 電子励起水素分子のダイナミクス-H<sub>2</sub>, HD, 及び D<sub>2</sub> からの 2p 原子ペア生成断面積の比較」, 第 10 回分子科学討論会 2016, 2016 年 9 月 13-15 日, 神戸ファッションマート(兵庫県神戸市)
44. K. HOSAKA, Y. TORIZUKA, K. YACHI, P. SCHMIDT, A. KNIE, K. JANKALA, A. EHRESMANN, T. ODAGIRI, M. KITAJIMA, and N. KOUCHI: “Unexpected isotope effect on the cross section of 2p pair formation in the photoexcitation of H<sub>2</sub>, D<sub>2</sub> and HD”, 第 32 回化学反応討論会, 2016 年 6 月 1-3 日, 大宮ソニックシティ(埼玉県さいたま市)
45. S. Nanbu: “Nonadiabatic dissociation in UV-photolysis of sulfuric acid,” The 8th International Symposium on Isotopomers, La Cité Nantes Events Center, 3-6 October 2016, Nantes, France
46. S. Nanbu: “Theoretical Studies on the Mechanisms of Photochemical Reactions of Sulfur-containing Compounds”, Mass-Independent Fractionation of Sulfur Isotopes: Possible Molecular Origins, 6-10 June 2016, Telluride Science Research Center, Denver, US.
47. Mitsunori Araki, Shuro Takano, Yoshiaki Minami, Kei Niwayama, Nobuhiko Kuze, Takahiro Oyama, Kazuhisa Kamegai, and Koichi Tsukiyama “Study of CH<sub>3</sub>CN in Diffuse Clouds by “Hot Axis Effect”” Workshop on Interstellar Matter 2016, 19–21 October 2016, Hokkaido Univ. Japan.
48. Mitsunori Araki, Shuro Takano, Nami Sakai, Satoshi Yamamoto, Takahiro Oyama, Nobuhiko

- Kuze, and Koichi Tsukiyama “Detections of long carbon chains  $\text{CH}_3\text{CCCCH}$ ,  $\text{C}_6\text{H}$ , linear- $\text{C}_6\text{H}_2$  and  $\text{C}_7\text{H}$  in the low-mass star forming region L1527” Workshop on Interstellar Matter 2016, 19–21 October 2016, Hokkaido Univ. Japan.
49. Mitsunori Araki, Shuro Takano, Nami Sakai, Satoshi Yamamoto, Takahiro Oyama, Nobuhiko Kuze, and Koichi Tsukiyama “Detections of Long Carbon Chains  $\text{CH}_3\text{CCCCH}$ ,  $\text{C}_6\text{H}$ ,  $1\text{-C}_6\text{H}_2$  and  $\text{C}_7\text{H}$  in the Low-Mass Star Forming Region L1527” The 24th International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy, 30 August-3 September 2016, Praha, Czech Republic
  50. Mitsunori Araki, Shuro Takano, Nami Sakai, Satoshi Yamamoto, Takahiro Oyama, Nobuhiko Kuze, and Koichi Tsukiyama The Precise Radio Observation of The  $^{13}\text{C}$  Isotopic Fractionation For Carbon Chain Molecule  $\text{HC}_3\text{N}$  in The Low-Mass Star Forming Region L1527 International Symposium on Molecular Spectroscopy 20-24 June 2016, Champaign-Urbana, IL, USA,
  51. 久世信彦, 依光杏奈, 石塚卓也: “非調和振動補正項の計算における分子内大振幅振動の影響”, 第 10 回分子科学討論会 2016 年 9 月 13 日-15 日, 神戸ファッションマート (神戸)
  52. 安部凜, 宮崎彩音, 小山貴裕, 荒木光典, 高野秀路, 久世信彦, 住吉吉英, 築山光一, 遠藤泰樹: “大質量星形成領域 Sgr B2(M)での HOCO ラジカルの探査”, 第 10 回分子科学討論会 2016 年 9 月 13 日-15 日, 神戸ファッションマート (神戸)
  53. 小山貴裕, 安部凜, 宮崎彩音, 荒木光典, 高野秀路, 久世信彦, 住吉吉英, 築山光一, 遠藤泰樹: “大質量星形成領域 Sgr B2(M) における  $\text{HC}_3\text{N}$  の同位体比の高精度決定”, 第 10 回分子科学討論会 2016 年 9 月 13 日-15 日, 神戸ファッションマート (神戸)
  54. 荒木光典, 高野秀路, 坂井南美, 山本智, 小山貴裕, 久世信彦, 築山光一: “低質量星形成領域 L1527 における長鎖炭素鎖分子  $\text{CH}_3\text{CCCCH}$ ,  $\text{C}_6\text{H}$ ,  $1\text{-C}_6\text{H}_2$ ,  $\text{C}_7\text{H}$  の検出”, 第 10 回分子科学討論会 2016 年 9 月 13 日-15 日, 神戸ファッションマート (神戸)
  55. 宮崎彩音, 安部凜, 小山貴裕, 荒木光典, 高野秀路, 久世信彦, 住吉吉英, 築山光一, 遠藤泰樹: “大質量星形成領域 Sgr B2(M)に対する 3 mm, 7 mm 帯でのラインサーベイ”, 第 10 回分子科学討論会 2016 年 9 月 13 日-15 日, 神戸ファッションマート (神戸)

## 2015 年度

56. 金澤宏樹, Juan Pablo Maianti, Stephen Hanessian, 近藤次郎: “フッ素化アミノグリコシドの細菌リボソーム RNA との相互作用”, 日本核酸医薬学会第 1 回年会, 2015 年 11 月 30 日-12 月 2 日, 京都テルサ (京都市)
57. 近藤次郎, 野村祐介, 北原佑季子, 小比賀聡, 鳥越秀峰: “2',4'-BNANC[N-Me]修飾をもつアンチセンスギャップマーの X 線結晶解析”, 日本核酸医薬学会第 1 回年会, 2015 年 11 月 30 日-12 月 2 日, 京都テルサ (京都市)
58. 吉村篤彦, 菅澤孝一, 近藤次郎: “8-17 デオキシリボザイムの結晶学的研究”, 日本核

- 酸医薬学会第1回年会, 2015年11月30日-12月2日, 京都テルサ(京都市)
59. 近藤次郎, Eric Westhof: “核酸塩基-アミノ酸相互作用の分類”, GE Life Sciences Day 2015, 2015年7月24日, パシフィコ横浜(横浜市)
  60. 近藤次郎, Eric Westhof: “RNA-リガンド相互作用の分類”, GE Life Sciences Day 2015, 2015年7月24日, パシフィコ横浜(横浜市)
  61. 金澤宏樹, Juan Pablo Maianti, Stephen Hanessian, 近藤次郎: “フッ素化アミノグリコシドとリボソームRNAの複合体のX線結晶解析”, GE Life Sciences Day 2015, 2015年7月24日, パシフィコ横浜(横浜市)
  62. 星野正光, 松井翠, 望月有, 小田切丈, 重村圭亮, 近藤篤史, 北島昌史, 渡邊昇, 足立純一, 田中大: “加熱分子のVUV吸収断面積測定”, 第29回日本放射光学会年会, 2016年1月9-11日, 東京大学柏の葉キャンパス/柏の葉カンファレンスセンター(千葉県柏市)
  63. 大富翔平, 菅淳史, 加藤英俊, 星野正光, D. Duflot, P. Limão-Vieira, 田中大: “電子衝撃による $\text{XF}_4$  ( $\text{X} = \text{C}, \text{Si}, \text{Ge}$ )分子の電子励起過程の研究”, 日本物理学会第71回年次大会, 2016年3月19-22日, 東北学院大(仙台市)
  64. 望月有, 村井肇, 加藤英俊, 星野正光, 田中大, 「電子衝撃による希ガス原子の電子励起過程の研究», 原子衝突学会第40回年会, 2015年9月28-30日, 首都大学東京南大沢キャンパス(八王子市)
  65. 松井翠, 加藤英俊, 星野正光, P. Limão-Vieira, 田中大: “低エネルギー電子衝撃による $\text{H}_2\text{O}$ 分子の断面積精密測定”, 原子衝突学会第40回年会, 2015年9月28-30日, 首都大学東京南大沢キャンパス(八王子市)
  66. 大富翔平, 松井翠, 望月有, 菅敦史, 加藤英俊, 星野正光, D. Duflot, P. Limão-Vieira, 田中大: “ $\text{XF}_4$  ( $\text{X} = \text{C}, \text{Si}, \text{Ge}$ )分子の低エネルギー電子分光”, 原子衝突学会第40回年会, 2015年9月28-30日, 首都大学東京南大沢キャンパス(八王子市)
  67. 重村圭亮, 奥村拓馬, 小林尚正, 森湧真, 北島昌史, 小田切丈, 星野正光, 田中大: “ $\text{H}_2, \text{D}_2, \text{CO}_2$ と低エネルギー電子との衝突断面積の高分解能測定”, 原子衝突学会第40回年会, 2015年9月28-30日, 首都大学東京南大沢キャンパス(八王子市)
  68. 望月有, 村井肇, 加藤英俊, 星野正光, 田中大: “電子衝撃による希ガス原子の電子励起過程の研究”, 日本物理学会2015年秋季大会, 2015年9月16-19日, 関西大学千里山キャンパス(大阪府吹田市)
  69. 長島広貴, 田中邦翁, 高橋和夫: “大気圧高温反応流通管-レーザー光イオン化TOFMSを用いたPAH生成経路の解明-PAH生成に及ぼす燃料の化学構造の影響-”, 第53回燃焼シンポジウム, 2015年11月, つくば国際会議場(茨城県つくば市).
  70. PEI, Shaoqing, 飯沢光拓, 長島広貴, 高橋和夫: “高圧衝撃波管を用いたガソリン成分炭化水素の高圧着火特性評価I-イソオクテンおよびメチルシクロヘキサンの着火遅れ計測と反応モデルの検証-”, 第53回燃焼シンポジウム2015年11月, つく



ば国際会議場 (茨城県つくば市).

71. \* 岡田邦宏, 梶田雅稔: “クーロン結晶化した極低温分子イオン  $\text{CaX}^+$  ( $\text{X} = \text{O}, \text{H}$ ) の光解離”, 日本物理学会第 71 回年次大会, 2016 年 3 月 19-22 日, 東北学院大泉キャンパス (仙台市)
72. \* 高田裕介, 岡田邦宏: “温度可変シュタルク分子速度フィルターの開発”, 日本物理学会第 71 回年次大会, 2016 年 3 月 19-22 日, 東北学院大 (仙台市)
73. \* 岡田邦宏: “陽子-電子質量比測定のための冷却  $\text{CaH}^+$  のレーザー分光: 現状と展望”, 第 8 回光領域および精密周波数発生の回路技術調査専門委員会, 2015 年 12 月 8 日, 情報通信研究機構 (小金井市)
74. \* 高田裕介, 岡田邦宏: “低温イオン-極性分子反応における回転温度依存性の検出”, 原子衝突学会第 40 回年会, 2015 年 9 月 28-30 日, 首都大学東京南大沢キャンパス (八王子市)
75. \* 高田裕介, 岡田邦宏: “共鳴多光子イオン化によって生成した冷却  $\text{O}_2^+$  分子イオンと低速極性分子の反応速度測定”, 日本物理学会 2015 年秋季大会, 2015 年 9 月 16-19 日, 関西大学千里山キャンパス (大阪府吹田市) .
76. 園田哲, 和田道治, 飯村秀紀, 片山一郎, Reponen.M, 小島隆夫, Sonnenschein.VB, 富田英生, 久保敏幸, 吉田光一, 稲辺尚人, 福田直樹, 竹田浩之, 鈴木宏, 日下健祐, 若杉昌徳, 新井重昭, 新井郁也, Schury.P, 伊藤由太, 宮武宇也, 石山博恒, 今井伸明 E, 平山賀一, 渡辺裕, 岡田邦宏: “RIBF におけるパラサイト低速 RI ビーム生成とガスジェットレーザー核分光の開発”, 日本物理学会 2015 年秋季大会, 2015 年 9 月 25-28 日, 大阪市立大学杉本キャンパス (大阪市)
77. \* Kunihiro Okada and Masatoshi Kajita, “Toward laser spectroscopy of rotationally cooled  $\text{CaH}^+$  ions trapped in a cryogenic linear Paul trap”, XXIX International Conference on Photonic, Electronic, and Atomic Collisions (ICPEAC2015), 22-28 July 2015, Toledo, Spain
78. \* Yusuke Takada and Kunihiro Okada, “Reaction rate measurements between sympathetically cooled ions and velocity selected polar molecules: search for the deuterium isotope effects”, XXIX International Conference on Photonic, Electronic, and Atomic Collisions (ICPEAC2015), 22-28 July 2015, Toledo, Spain
79. N. Numadate, K. Okada, N. Nakamura, H. Tanuma, “Challenge for laboratory observation of forbidden x-ray transitions in solar wind charge exchange”, XXIX International Conference on Photonic, Electronic, and Atomic Collisions (ICPEAC2015), 22-28 July 2015, Toledo, Spain
80. 穂坂綱一, 鳥塚祐太郎, 谷内一史, Philipp Schmidt, Andre Knie, Kari Jankala, Arno Ehresmann, 小田切丈, 北島昌史, 河内宣之: “2 電子励起水素分子のダイナミクス 2p 原子ペア生成断面積に現れる同位体効果 “日本物理学会第 71 回年会, 2016 年 3 月 19-22 日, 東北学院大泉キャンパス (仙台市)

81. 穂坂綱一, 鳥塚祐太郎, 谷内一史, Philipp Schmidt, Andre Knie, Kari Jankala, Arno Ehresmann, 小田切丈, 北島昌史, 河内宣之: “水素分子( $H_2$ , HD, 及び  $D_2$ )の光解離による 2p 原子ペア生成断面積”量子ビームサイエンスフェスタ, 第 33 回 PF シンポジウム, 2016 年 3 月 15-16 日, つくば国際会議場(茨城県つくば市)
82. 小林尚正, 重村圭亮, 北島昌史, 小田切丈, 星野正光, 田中大: “しきい光電子源を用いた超低エネルギー電子- $O_2$  衝突全断面積の測定”2015 年度量子ビームサイエンスフェスタ, 2016 年 3 月 15-16 日, つくば国際会議場(茨城県つくば市)
83. 小田切丈, 阿部悠太, 谷内一史, 大類卓, 白鳥貴久, 海田正司, 熊谷嘉晃, 穂坂綱一, 北島昌史, 河内宣之: “パラ  $H_2$  分子 2 電子励起状態からのライマン  $\alpha$  光子放出”, 2015 年度量子ビームサイエンスフェスタ, 2016 年 3 月 15-16 日, つくば国際会議場(茨城県つくば市)
84. 穂坂綱一, 仲西祐子, 向後陵子, Philipp Schmidt, 鳥塚祐太郎, 谷内一史, 小田切丈, Andre Knie, Kari Jankala, Arno Ehresmann, 中野元善, 熊谷嘉晃, 椎野健一, 北島昌史, 河内宣之: “水素分子の光解離により生成する  $H(2p)$  原子ペアの量子もつれ”, 第 29 回日本放射光学会年会, 2016 年 1 月 9-11 日, 東京大学柏の葉キャンパス/柏の葉カンファレンスセンター (千葉県柏市)
85. 小田切丈, 大類卓, 白鳥貴久, 海田正司, 阿部悠太, 谷内一史, 熊谷嘉晃, 穂坂綱一, 北島昌史, 河内宣之: “パラ水素分子 2 電子励起状態の光解離”, 第 29 回日本放射光学会年会, 2016 年 1 月 9-11 日, 東京大学柏の葉キャンパス/柏の葉カンファレンスセンター (千葉県柏市)
86. 鳥塚祐太郎, 穂坂綱一, 谷内一史, Schmidt Philipp, 小田切丈, Knie Andre, Jankala Kari, Ehresmann Arno, 北島昌史, 河内宣之: “ $H_2$  および HD 分子の光解離で生成する Lyman- $\alpha$  光子ペアの角度相関”, 第 9 回分子科学討論会, 2015 年 9 月 16-19 日, 東京工業大学大岡山キャンパス (東京都目黒区)
87. 重村圭亮, 奥村拓馬, 小林尚正, 森湧真, 北島昌史, 小田切丈, 星野正光, 田中大: “放射光を用いた低エネルギー電子と  $D_2$  との衝突全断面積測定”, 第 9 回分子科学討論会, 2015 年 9 月 16-19 日, 東京工業大学大岡山キャンパス (東京都目黒区)
88. S. Nanbu, “Nonadiabatic ab initio MD simulations in solution,” The Seventh Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC7), 25-28 January 2016, Kaohsiung, Taiwan.
89. S. Nanbu, “Theoretical study of ultraviolet induced photodissociation dynamics of sulfuric acid,” The international chemical congress of pacific basin societies (Pacifichem 2015), 15-20 December 2015, Honolulu, HAWAII, U.S.A.
90. Nobuhiko Kuze, “2D Potential Energy Surfaces of N-Benzylidene Aniline and 1, 3-Dichloropropanone Oxime by Gas Electron Diffraction and Computational Methods” 26th Austin Symposium on Molecular Structure and Dynamics @ Dallas 3 March 2016 Dallas,

Texas, USA.

91. Nobuhiko Kuze, Yuuki Tajimi and Atsushi Ishikawa “Effects of the anharmonic vibrational corrections on molecular structures of acetates and oximes: gas-phase electron diffraction and quantum-chemical studies” The international chemical congress of pacific basin societies (Pacifichem 2015), 15-20 December 2015, Honolulu, HI, USA.
92. Yuuki Tajimi, Rie Nomura and Nobuhiko Kuze “Rotational spectrum and quantum chemical calculations for methyl trimethyl acetate” The international chemical congress of pacific basin societies (Pacifichem 2015), 15-20 December 2015, Honolulu, HI, USA.
93. Nobuhiko Kuze, Atsushi Ishikawa, Yuya Ono “Large-amplitude motions for methyl trifluoroacetate and 2, 5-dimethylfuran by GED, MW and quantum chemical calculation” 16th European Symposium on Gas Electron Diffraction 23 June 2015, Frauenchiemsee, Germany.
94. Mitsunori Araki, Shuro Takano, Nobuhiko Kuze, Takahiro Oyama, Koichi Tsukiyama “Detectability of prolate symmetric-top molecules in diffuse clouds by a “hot-axis effect”” Workshop on Interstellar Matter 3 March 2015, Sapporo, Hokkaido, Japan.
95. 荒木光典,高野秀路,坂井奈美,山本智,小山貴裕,久世信彦,築山光一: “低質量星形成領域 L1527 における 42-44GHz 帯の炭素鎖分子ラインサーベイ”,第 9 回分子科学討論会, 2015 年 9 月 16 日-19 日, 東京工業大学大岡山キャンパス (東京)
96. 多治見雄暉,野村梨絵,石川敦士,久世信彦: “Methyl trimethyl acetate のマイクロ波分光”, 第 9 回分子科学討論会, 2015 年 9 月 16 日-19 日, 東京工業大学大岡山キャンパス (東京)
97. 2014 年度
98. 金澤宏樹, Juan Pablo Maianti, Stephen Hanessian, 近藤次郎: “フッ素を導入した新規アミノグリコシドと細菌リボソーム RNA の複合体の X 線結晶解析”, 第 3 回物構研サイエンスフェスタ, 2015 年 3 月 17-18 日, つくば国際会議場 (茨城県つくば市)
99. Jiro Kondo, Tom Yamada, Chika Hirose, Itaru Okamoto, Yoshiyuki Tanaka & Akira Ono: “Crystal structure of metallo-DNA duplex containing T-Hg(II)-T base pairs”, 23<sup>rd</sup> Congress and General Assembly of International Union of Crystallography, August 2014, Montreal(Canada).
100. (招待講演) Jiro Kondo: “Crystal structures of metallo-DNA/RNA molecules”,UK-Japan collaborative symposium on Nucleic Acids -From Duplexes to Quadruplexes-, July 2014, Reading (UK).
101. 近藤篤史, 重村圭亮, 北島昌史, 小田切丈, 星野正光, 田中大: “しきい光電子源を用いた CO<sub>2</sub> の電子衝突全断面積の高分解能測定”, 日本物理学会第 70 回年次大会, 2015 年 3 月 21-24 日, 早稲田大学早稲田キャンパス (東京都)
102. 松井翠, 加藤英俊, 星野正光, P. Limão-Vieira, 田中大: “H<sub>2</sub>O 分子の低エネルギー

- 一電子分光”,日本物理学会第70回年次大会,2015年3月21-24日,早稲田大学早稲田キャンパス(東京都)
103. 星野正光,松井翠,望月有,小田切丈,重村圭亮,近藤篤史,北島昌史,渡邊昇,足立純一,田中大:“加熱されたCO<sub>2</sub>分子のVUV吸収断面積測定II,日本物理学会第70回年次大会,2015年3月21-24日,早稲田大学早稲田キャンパス(東京都)
  104. \*高田裕介,岡田邦宏,和田道治,H. A. Schuessler,“低温イオン—極性分子反応における同位体効果の観測”,日本物理学会第70回年次大会,2015年3月21-24日,早稲田大学早稲田キャンパス(東京都)
  105. 長島広貴,吉澤春香,山田将大,高橋和夫:“フランおよびフラン誘導体と酸素原子との高温反応”,平成26年度衝撃波シンポジウム,2015年3月,ホテル天坊(群馬県伊香保).
  106. Y. Kuriyama, D.S. Slaughter, Y. Azuma and A. Belkacem, "Dissociative electron attachment studies of Pyrazine", 11th Asian International Seminar on Atomic and Molecular Physics, 6-10 October 2014, Sendai, Japan
  107. Satoshi Kosugi, Masatomi Iizawa, Yu Kawarai, Yosuke Kuriyama, A. L. David Kilcoyne, Fumihiko Koike, Nobuhiko Kuze, Daniel Slaughter and Yoshiro Azuma: "PCI effects and the gradual formation of Rydberg series due to photoelectron recapture, in the Auger satellite lines upon Xe 4d<sub>5/2-1</sub> photoionization", 11th Asian International Seminar on Atomic and Molecular Physics, 6-10 October 2014, Sendai, Japan
  108. Naoki Inoue, Tatsuro Nagoshi, Norihiro Suzuki, Yumi Yoda, Satoshi Kosugi, James Harries, Fumihiko Koike, and Yoshiro Azuma: "Fluorescence Lifetime of 2s2p<sup>5</sup>(3P)<sup>n</sup>l correlation satellites of Ne", 11th Asian International Seminar on Atomic and Molecular Physics, 6-10 October 2014, Sendai, Japan
  109. Norihiro Suzuki, Tatsuro Nagoshi, Yumi Yoda, Naoki Inoue, Satoshi Kosugi, James Harries, Fumihiko Koike, and Yoshiro Azuma: "Radiative Lifetime Measurements of rare gas (nsn<sup>6</sup>) ions produced by photoionization", 11th Asian International Seminar on Atomic and Molecular Physics, 6-10 October 2014, Sendai, Japan
  110. M. Kemmotsu, K. Kawajiri, S. Kosugi, N. Suzuki, T. Nandi, E. Sokell T. Nagata, F. Koike, Y. Azuma: "Photoion spectroscopy of isolated Mn atoms in the 2p-3d excitation region", 11th Asian International Seminar on Atomic and Molecular Physics, 6-10 October 2014, Sendai, Japan
  111. Y. Kuriyama, D.S. Slaughter, Y. Azuma and A. Belkacem: "Dissociative electron attachment studies of Pyrazine", 30th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics, 4-6 June 2014, Hyogo, Japan

112. S.Kosugi, G.Purohit, T.Nagata, N.Suzuki, Y.kawarai, Y. Yoda, K. Kawajiri, Y. Azuma, "Penning ionization with metastable  $\text{Li}^{+*}$  ( $1s2s^3S^1S$ ) ions", 30th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics, 4-6 June 2014, Hyogo, Japan
113. 鈴木紀裕, 名越達郎, 依田優美, 井上直紀, ジェームス R ハリーズ, 小池文博, 東善郎: "シングルバンチ放射光を用いた Ne の時間分解蛍光寿命測定", 日本物理学会 2014 年秋季大会, 2014 年 9 月, 中部大学 (愛知県春日井市)
114. 山田将大, 高橋和夫: "大気圧高温反応流通管-レーザー光イオン化 TOFMS を用いた PAH 生成経路の解明", 第 52 回燃焼シンポジウム, 岡山, 2014 年 12 月.
115. M. Hoshino, P. Limão-Vieira, H. Kato, H. Cho, F. Ferreira da Silva, D. Almeida, F. Blanco, G. García, O. Ingólfsson, and H. Tanaka: "ELASTIC DIFFERENTIAL CROSS SECTIONS FOR FLUORINE COMPOUND MOLECULES BY LOW ENERGY ELECTRON IMPACT", 9<sup>th</sup> International Conference on Atomic and Molecular Data and Their Applications, 21-25 September 2014, Jena, Germany.
116. M. Hoshino, P. Limão-Vieira, H. Kato, H. Cho, F. Ferreira da Silva, D. Almeida, F. Blanco, G. García, O. Ingólfsson, and H. Tanaka: "Elastic Scattering from plasma molecules and radicals", 6<sup>th</sup> Conference on Elementary Processes in Atomic Systems, 9-12, July 2014, Bratislava, Slovakia.
117. 望月有, 村井肇, 加藤英俊, 星野正光, 田中大: "電子衝撃による Ar 原子の電子励起過程の研究", 日本物理学会 2014 年秋季大会, 平成 26 年 9 月 7 日-10 日, 中部大学, 愛知
118. 松井翠, 福岡健武, 望月有, 加藤英俊, 星野正光, P. Limão -Vieira, 田中大: "電子衝撃による水分子の電子励起過程に関する研究", 日本物理学会 2014 年秋季大会, 2014 年 9 月, 中部大学 (愛知県春日井市)
119. 星野正光, 松井翠, 望月有, 小田切丈, 重村圭亮, 近藤篤史, 北島昌史, 渡邊昇, 足立純一, 田中大: "加熱された  $\text{CO}_2$  分子の VUV 吸収断面積測定", 日本物理学会 2014 年秋季大会, 2014 年 9 月, 中部大学 (愛知県春日井市)
120. 穂坂綱一, 椎野健一, 仲西祐子, 小田切丈, 北島昌史, 河内宣之: " $\text{H}_2$  と  $\text{D}_2$  の光解離による  $2p$  原子ペア生成断面積の絶対値測定", 日本物理学会第 70 回年次大会, 2015 年 3 月 21-24 日, 早稲田大学早稲田キャンパス (東京都)
121. 近藤篤史, 重村圭亮, 北島昌史, 小田切丈, 星野正光, 田中大: "しきい光電子源を用いた  $\text{CO}_2$  の電子衝突全断面積の高分解能測定", 日本物理学会第 70 回年次大会, 2015 年 3 月 21-24 日, 早稲田大学早稲田キャンパス (東京都)
122. 大類卓, 白鳥貴久, 海田正司, 小田切丈, 谷内一史, 熊谷嘉晃, 穂坂綱一, 北島昌史, 河内宣之: "パラ水素二電子励起状態からの Lyman- $\alpha$  光子放出断面積の測定", 日本物理学会 第 70 回年次大会, 2015 年 3 月 21-24 日, 早稲田大学早稲田キャンパス (東京都)

123. 重村圭亮, 近藤篤史, 北島昌史, 小田切 丈, 星野正光, 田中大: “しきい光電子源を用いた CO<sub>2</sub> の電子衝突全断面積測定”, 第3回物構研サイエンスフェスタ, 2015年3月17-18日, つくば国際会議場 (茨城県つくば市)
124. 穂坂綱一, 椎野健一, 仲西祐子, 小田切丈, 北島昌史, 河内 宣之: “H<sub>2</sub> と D<sub>2</sub> の光解離による 2p 原子ペア生成”, 第3回物構研サイエンスフェスタ, 2015年3月17-18日, つくば国際会議場 (茨城県つくば市)
125. 大類卓, 白鳥貴久, 海田正司, 小田切丈, 谷内一史, 熊谷嘉晃, 穂坂綱一, 北島昌史, 河内宣之: “パラ水素二電子励起状態からの Lyman- $\alpha$  光子放出”, 第3回物構研サイエンスフェスタ, 2015年3月17-18日, つくば国際会議場 (茨城県つくば市)
126. \*Masanari Ichikawa and Kunihiro Okada: “Characterization of ion Coulomb crystals for cold ion chemistry”, 原子衝突学会第39回年会, 2014年10月4-6日, 東北大学片平キャンパス (仙台市) .
127. 岡田 邦宏: “多光子イオン化による同位体シフト測定の提案”, 第7回 停止・低速不安定核ビームを用いた核分光研究会 (SSRI), 2014年3月3日-4日, 理化学研究所仁科センター (和光)
128. Nobuhiko Kuze, Ryosuke Tanemura, Ryo Noda, and Tomoko Soyama: “THREE TOPICS IN GAS-PHASE STRUCTURES OF MALTOL, DIACETYLENE AND ETHYLENE: GAS ELECTRON DIFFRACTION, IR AND MD STUDIES, 25th Austin Symposium on Molecular Structure and Dynamics, 2 March 2014, Dallas (Texas, USA)
129. Atsushi Ishikawa, Nobuhiko Kuze, Maho Kohno: “MOLECULAR STRUCTURES OF METHYL TRIMETHYLACETATE AND METHYL TRIFLUOROACETATE BY GAS-PHASE ELECTRON DIFFRACTION AND QUANTUM CHEMICAL CALCULATION”, 25th Austin Symposium on Molecular Structure and Dynamics, 2 March 2014, Dallas (Texas, USA)

### 2013年度

130. 松井翠, 星野正光, 田中大: “電子衝撃による加熱された水素分子の回転励起断面積」、原子衝突学会第38回年会、2013年11月16日-17日、理化学研究所、埼玉
131. 望月有, 星野正光, 村井肇, 加藤英俊, 田中大: “電子衝撃による Ne, Ar 原子の電子励起断面積測定」原子衝突学会第38回年会、2013年11月16日-17日、理化学研究所、埼玉
132. 岡田邦宏, 中里直矢, 和田道治, H. A. Schuessler: “冷却イオントラップによる CaH<sup>+</sup> の振動回転基底状態の生成と検出”, 日本物理学会第69回年次大会、2014年3月27-30日、東海大学湘南キャンパス (神奈川県平塚市)
133. 沼館直樹, 岡田邦宏, 中村信行, 田沼肇: “太陽風起源禁制 X 遷移の実験室観測を目的とした多価イオントラップの開発III”, 日本物理学会第69回年次大会、2014年3月27-30日、東海大学湘南キャンパス (神奈川県平塚市) .
134. 園田哲, 和田道治, 飯村秀紀, 上野秀樹, 富田英生, 足立義貴, 高塚卓旦, Wendt.K, 久保敏幸, 若杉昌徳, 日下健祐, 眞家武士, 山澤秀行, 藤縄雅, 片山一郎, 新井郁

- 也, Schury.P, 篠塚勉, 涌井崇志, 松尾由賀利, 古川武, 宮武宇也, 石山博恒, 今井伸明, 平山賀一, 渡辺裕, 鄭淳讚, 岡田邦宏, 伊藤由太, 中尾愛子, “RIBF-SLOWRI 共鳴イオン化レーザーイオン源(PALIS)の開発とレーザー核分光への応用”, 日本物理学会 2013 年秋季大会, 2013 年 9 月 25-28 日, 徳島大学常三島キャンパス (徳島)
135. 沼館直樹, 岡田邦宏, 中村信行, 田沼肇, 太陽風起源禁制 X 遷移の実験室観測を目的とした多価イオントラップの開発II”, 日本物理学会 2013 年秋季大会, 2013 年 9 月 25-28 日, 徳島大学常三島キャンパス (徳島)
136. \*市川雅成, 古川貴浩, 和田道治, H. A. Schuessler, 岡田邦宏, 低速極性分子と共同冷却分子イオンの反応速度測定 III”, 日本物理学会 2013 年秋季大会, 2013 年 9 月 25-28 日, 徳島大学常三島キャンパス (徳島)
137. 山田将大, 高橋和夫, “PM形成メカニズムに及ぼす芳香族炭化水素のアルキル側鎖の影響”, 第 51 回燃焼シンポジウム, 2013 年 12 月, 東京.
138. 大類卓, 白鳥貴久, 小田切丈, 熊谷嘉晃, 穂坂綱一, 北島昌史, 河内宣之: “回転状態を制御した水素分子二電子励起状態の光解離”, 日本物理学会第 69 回年次大会, 2014 年 3 月 27-30 日, 東海大学湘南キャンパス (神奈川県平塚市)
139. 椎野健一, 仲西祐子, 穂坂綱一, 小田切丈, 北島昌史, 河内 宣之: “H<sub>2</sub> と D<sub>2</sub> の光解離による 2p 原子ペア生成の断面積”, 日本物理学会第 69 回年次大会, 2014 年 3 月 27-30 日, 東海大学湘南キャンパス (神奈川県平塚市)
140. 望月雄太, 穂坂綱一, 土田明代, 谷内一史, 重村圭亮, 小田切丈, 北島昌史, 河内 宣之: “二電子励起状態における H<sub>2</sub>O の光子標識付き電子エネルギー損失スペクトル -入射電子エネルギー100eV, 小散乱角における測定-”, 日本物理学会第 69 回年次大会, 2014 年 3 月 27-30 日, 東海大学湘南キャンパス (神奈川県平塚市)
141. (Hot Topics) 重村圭亮, 北島昌史, 小田切 丈, 加藤英俊, 星野正光, 田中 大, 伊藤健二: “e-H<sub>2</sub> 分子の Feshbach 共鳴エネルギーの決定”, 原子衝突学会第 38 回年会, 2013 年 11 月 16~27 日, 理化学研究所 (埼玉県)
142. 仲西 祐子, 穂坂 綱一, 向後 陵子, 中野 元善, 熊谷 嘉晃, 椎野 健一, 鈴木 功, 小田切 丈, 北島 昌史, 河内 宣之: “水素分子の光解離により生成する Lyman- $\alpha$  光子ペアの角度相関関数”, 第 7 回分子科学討論会, 2013 年 9 月 24~27 日, 京都府民総合交流プラザ (京都)
143. K. Shigemura, M. Kitajima, T. Odagiri, A. Suga, H. Kato, M. Hoshino, H. Tanaka, K. Ito: “Total cross sections for electron scattering from He and Ne in cold electron collisions”, XXVIII International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions, 24-30 July, 2013, Lanzhou, China
144. K. Shigemura, M. Kitajima, T. Odagiri, A. Suga, H. Kato, M. Hoshino, H. Tanaka, and K. It: “Total cross section for electron scattering from He, Ne, Ar, Kr, and Xe at ultra-low energy”, POSMOL 2013, 19-21 July 2013, Kanazawa, Japan

145. Y. Kumagai, T. Odagiri, M. Nakano, Y. Nakanishi, K. Shiino, S. Oorui, I. H. Suzuki, K. Hosaka, M. Kitajima, and N. Kouchi: “Superexcited states resulting in metastable atomic hydrogen in the 2s state formation in photoexcitation of acetylene”,第 29 回化学反応討論会, 2013 年 6 月 5-7 日, 東北大 (仙台市)
146. Yu Kwarai, Daniel Slaughter, Hidehito Adaniya, Yoshiro Azuma and Ali Belkaem: “Dissociative electron attachment on ammonia NH<sub>3</sub>, ND<sub>3</sub>”,XVIII International Symposium on Electron-Molecule Collisions and Swarms, 19-21 July 2013, Kanazawa, Japan.
147. S. Kosugi ,G. Purohit ,T. Nagata ,N. Suzuki ,Y. Kwarai ,Y. Yoda ,K. Kawajiri and Y. Azuma: “Penning ionization with metastable Li<sup>+</sup>(1s2s<sup>3</sup>S<sup>1</sup>S)ions”,International Symposium on Electron-Molecule Collisions and Swarms, 19-21 July 2013 Kanazawa,Japan
148. (招待講演) M. Hoshino, H. Murai, Y. Mochizuki, H. Kato, M. J. Brunger, Y. Itikawa, and H. Tanaka: “Electron-impact-excitation cross sections of Ne for incident energies between 20 to 300 eV”,XVIII International Symposium on Electron-Molecule Collisions and Swarms, 19-21 July 2013, Kanazawa, Japan
149. M. Hoshino, Y. Ishijima, M. Matsui, H. Kato, I. Shimamura, D. Mogi, T. Tanioka, P. Limão-Vieira, M. J. Brunger, and H. Tanaka: “Shift in the resonance positions of a linear molecule by bending: Evidence in electron-impact vibrational transitions of hot COS molecules”, XVIII International Symposium on Electron-Molecule Collisions and Swarms, 19-21 July 2013, Kanazawa, Japan.
150. Nobuhiko Kuze, Atsushi Ishikawa, Yuya Ono, “LARGE-AMPLITUDE MOTIONS FOR METHYL TRIFLUOROACETATE AND 2, 5-DIMETHYLFURAN BY GED, MW AND QUANTUM CHEMICAL CALCULATION”, 15th European Symposium on Gas Electron Diffraction, Frauenchiemsee, Germany; 26 June 2013

## 2012 年度

151. (招待講演) \*K. Okada, “Study of cold ion chemistry using ion traps”,One-day symposium on E-ring based molecular science, 7 February 2013, Tokyo Metropolitan University (Tokyo).
152. 沼館直樹, 岡田邦宏, 中村信行, 田沼肇, 太陽風起源禁制 X 遷移の実験室観測を目的とした多価イオントラップの開発”,日本物理学会第 68 回年次大会, 2013 年 3 月 26-29 日, 広島大学 (広島)
153. 相田裕也, 大橋隼人, 岡田邦宏 A, 田沼肇 B, 中村信行, 電荷交換分光実験のための極端紫外分光器の開発, 日本物理学会第 68 回年次大会, 2013 年 3 月 26-29 日, 広島大学 (広島)
154. \*市川雅成, 古川貴浩, 和田道治, H. A. Schuessler, 岡田邦宏, 低速極性分子と共同冷却分子イオンの反応速度測定II”,日本物理学会第 68 回年次大会, 2013 年 3 月



26-29 日, 広島大学 (広島)

155. 向後陵子, 穂坂綱一, 仲西祐子, 中野元善, 熊谷嘉晃, 鈴木功, 小田切丈, 北島昌史, 河内宣之: “水素分子の光解離により生成する Lyman- $\alpha$  光子対の角度相関関数測定”, 日本物理学会第 68 回年次大会, 2013 年 3 月 26-29 日, 広島大学 (広島)
156. 熊谷嘉晃, 小田切丈, 田辺健彦, 中野元善, 仲西祐子, 向後陵子, 穂坂綱一, 北島昌史, 河内宣之鈴木功: “SB モードを利用した準安定原子検出による分子二電子励起状態ダイナミクスの研究”, 物構研サイエンスフェスタ、第 30 回 PF シンポジウム、2013 年 3 月 14-15 日, つくば国際会議場 (茨城県つくば市)
157. 重村圭亮, 北島昌史, 小田切丈, 加藤英俊, 菅惇史, 星野正光, 田中大, 伊藤健二: “しきい光電子源を用いた超低エネルギー電子衝突実験 — He および Ne の電子衝突全断面積 —”, 物構研サイエンスフェスタ、第 30 回 PF シンポジウム、2013 年 3 月 14-15 日, つくば国際会議場 (茨城県つくば市)
158. 仲西 祐子, 穂坂 綱一, 向後 陵子, 中野 元善, 熊谷 嘉晃, 椎野 健一, 鈴木 功, 小田切 丈, 北島 昌史, 河内 宣之: “水素分子の光解離により生成する Lyman- $\alpha$  光子ペアの角度相関関数(非対向配置)”, 物構研サイエンスフェスタ、第 30 回 PF シンポジウム、2013 年 3 月 14-15 日, つくば国際会議場 (茨城県つくば市)
159. (招待講演) \*K. Okada, “Cold ion chemistry using the ion trap technique”, Workshop on Interstellar Matter (ISM2012), 17-19 Oct. 2012, Hokkaido University, Japan.
160. \*K. Okada, “Cold chemical reactions between sympathetically cooled molecular ions and slow polar molecules”, 19th International Mass Spectrometry Conference (IMSC2012), 15-21 Sept. 2012, Kyoto, Japan.
161. K. Okada, T. Furukawa, M. Ichikawa, M. Wada, H. A. Schuessler, “A study of cold ion-polar molecule reactions between sympathetically cooled molecular ions and slow polar molecules”, 23rd International Conference on Atomic Physics (ICAP2012), 23-27 July 2012, Ecole Polytechnique, Palaiseau, France.
162. \*古川貴浩, 市川雅成, 和田道治, H. A. Schuessler, 岡田邦宏, 低速極性分子と共同冷却分子イオンの反応速度測定, 日本物理学会第 67 回年次大会, 2012 年 9 月, 関西学院大学
163. 古川貴浩, 市川雅成, 和田道治, H. A. Schuessler, 岡田邦宏, “シュタルク分子速度フィルターを用いた極低温分子イオン-極性分子反応の研究”, 分子分光研究会 2012 年 5 月 18 日, 上智大学
164. Jiro Kondo, Tom Yamada, Chika Hirose, Itaru Okamoto, Yoshiyuki Tanaka & Akira Ono. “Crystal structure of DNA duplex containing two consecutive T-Hg(II)-T base pairs”, The 40<sup>th</sup> International Symposium on Nucleic Acid Chemistry, November 2013, (Yokohama, Japan).

165. (招待講演) 近藤次郎. “X線結晶解析で見る RNA 分子スイッチの「動き」 = 「働き」”, 第 63 回結晶化学研究会, December 2012 (Tokyo, Japan).
166. Jiro Kondo, Mai Koganei, Tomoko Kasahara, Stephen Hanessian. “Towards the structure-based design of antiprotozoal agents: crystal structures of aminoglycosides with an unsaturated sugar ring bound to the ribosomal A sites”, The 39<sup>th</sup> International Symposium on Nucleic Acid Chemistry, November 2012 (Nagoya, Japan).
167. 近藤次郎. “アミノグリコシド系抗生物質に対する薬剤耐性獲得メカニズムの構造基盤”, 平成 24 年度日本結晶学会年会, October 2012 (Sendai, Japan).
168. 近藤次郎. “A structural basis for the antibiotic resistance conferred by an A1408G mutation in 16S rRNA” 第 50 回生物物理学会. (Nagoya, Japan, September 2012).
169. 重村圭亮, 北島昌史, 小田切丈, 加藤英俊, 菅惇史, 星野正光, 田中大, 伊藤健二: 「He および Ne の超低エネルギー電子衝突全断面積」 日本物理学会 2012 年秋季大会, 2012 年 9 月 18~21 日, 神奈川 (横浜国立大学)
170. 重村圭亮, 北島昌史, 小田切丈, 加藤英俊, 菅惇史, 星野正光, 田中大, 伊藤健二: 「しきい光電子を電子源とする超低エネルギー電子ビームを用いた H<sub>2</sub> 分子の Cold Electron Collision 実験」 原子衝突学会 第 37 回年会, 2012 年 7 月 28~29 日, 東京 (電気通信大学)
171. 仲西祐子, 穂坂綱一, 小田切丈, 田邊健彦, 中野元善, 熊谷嘉晃, 鈴木功, 北島昌史, 河内宣之: 「量子もつれ H(2p)原子ペアの崩壊ダイナミクス」 日本物理学会 第 67 回年次大会, 2012 年 3 月 24-27 日, 関西学院大学 西宮上ヶ原キャンパス (兵庫)
172. 重村圭亮, 北島昌史, 小田切丈, 加藤英俊, 安斉和俊, 菅惇史, 星野正光, 田中大, 伊藤健二: 「しきい光電子源を用いた超低エネルギー電子衝突実験 —He の電子衝突全断面積—」 第 29 回 PF シンポジウム, 2012 年 3 月 15-16 日, つくば国際会議場 (つくば)
173. Arisa Kunimatsu, Saori Tanabe, Satoshi Ogawa, Nobuhiko Kuze, Aya Nakane, Toshiaki Okabayashi, Mitsunori Araki, “MICROWAVE SPECTRA OF THE LINEAR CARBON-CHAIN ALCOHOL HC<sub>4</sub>OH”, The 22nd International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy, Praha, Czech Republic, 4 September 2012
174. Mitsunori Araki, Shuro Takano, Hiromichi Yamabe, Koichi Tsukiyama, Nobuhiko Kuze, “RADIO SEARCH FOR H<sub>2</sub>CCC TOWARD HD 183143 AS A CANDIDATE FOR A DIFFUSE INTERSTELLAR BAND CARRIER”, The 22nd International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy, Praha, Czech Republic, 6 September 2012

## C) シンポジウム・学会等の実施状況、インターネットでの公開状況等

1. 国際査読総説である *International Reviews in Physical Chemistry*, **36**, 229-286 (2017)において研究室のホームページを掲載させ、そこから開発したプログラムのダウンロードが可能であることを掲載し、実際に研究室のホームページよりダウンロードが可能になっている。ただし、統計情報は取得していない。

## D) その他の研究成果等

特許出願

1. 出願番号：特願 2016-062547  
発明の名称：DNA-金属ハイブリッドナノワイヤーおよびその製造方法。  
出願人：近藤次郎、多田能成  
出願日：2016年03月25日

次ページより、各研究分野の概要とすでに出版された成果の研究論文の別刷りを(a) 電子構造実験グループ、(b) 反応素過程グループ、(c) 分子シミュレーショングループの順番に示す。

# 分子・励起分子・イオンの電子構造と反応・ダイナミックスの解明

## 電子構造実験グループ：振動励起分子の高分解能電子分光実験

星野 正光・小田切 丈

### 1 研究目的

現在数多く存在する様々な種類の気相原子・分子の電子状態や内部エネルギーを探索するために有効な手法は、対象となる標的原子・分子に電子やイオンなどの荷電粒子や真空紫外線や軟 X 線といった光子を入射し、散乱、または放出された電子や生成イオン、発光のエネルギーや運動量、角度分布を測定することである。そこで、環境分子、上層大気、また宇宙空間に存在する分子、さらには生体関連分子を標的とした高分解能電子エネルギー損失分光実験、高分解能真空紫外光電子分光実験、X 線内殻光電子分光実験、光吸収実験等を行うことで、分子内電子状態に関する詳細な知見を得ることを本研究の目的とした。また将来的には、電離や解離による生成イオンの位置敏感型時間分解測定と光電子分光実験を組み合わせることにより、電子状態を特定した分子の光励起・解離ダイナミックスに関する基礎的なデータの測定を行うことも視野に入れて実験装置の開発も行う。

特に、本研究では、従来の高分解能電子エネルギー損失分光法に加えて、世界最高のエネルギー分解能を誇る VG Sinenta 社 (現 Scienta Omicron 社) 高分解能電子分光装置 SCIENTA R4000 と高エネルギー加速器研究機構フォトンファクトリーにおける高分解能軟 X 線、および真空紫外線を光源として組み合わせることで様々なプローブを用い、従来では行われることのなかった分子の振動・回転の自由度まで分離した分光研究を多面的に行う。この電子エネルギー損失分光法と光電子分光実験を、応用上注目されるプラズマプロセス分子から、環境分子や上層大気、星間空間に存在する様々な分子まで拡張し、さらに基底状態ではなく励起状態の分子を標的とした電子分光実験を行うことで、励起分子、特に振動励起分子の電子構造の知見を得ることも目指した。一般的な分子を標的とした電子分光実験は室温下で行われるため、大半の分子が振動基底状態にある。しかしながら、太陽系惑星大気を考える際には、数百 K 以上の高温環境下の分子も存在しており、このような環境では分子の一部は、振

動励起状態にあることが知られている。例えば、代表的な直線三原子分子である二酸化炭素  $\text{CO}_2$  分子を考える。ボルツマン分布を考えると、室温 (300 K) では、振動基底状態が約 92%、振動（主に変角振動）励起状態が 8%程度であるのに対し、例えば、大気主成分が  $\text{CO}_2$  分子である金星大気の表面温度（約 700 K）では、約 49%が振動基底状態、残りが振動励起状態となる。このように温度が変化すると、分子の振動励起状態を制御できることから、温度可変のガスセルを開発することにより、 $\text{CO}_2$  のような対称性の良い直線分子の対称性を低下させることで生じる Renner-Teller 効果に関する研究への拡張も期待される。

## 2 研究方法

本研究では、孤立した原子や分子の内部状態を測定するために、電子エネルギー損失分光法と光電子分光法を用いた。両者は、プローブが低エネルギー電子と光子の違いはあるが、どちらの手法も標的と相互作用後に散乱、または放出された電子を、静電半球型エネルギー分析器を用いてエネルギー分析することで、標的原子分子の励起エネルギーや生成イオンの電子状態に関する情報を得ることができる特徴を持つ。本研究では、後者の光電子分光装置の立ち上げ、および振動励起分子を生成するための専用の加熱ガスセルを開発したので、以下ではその詳細について記す。

### 2.1 超高分解能電子分光装置 SCIENTA R4000 と実験セットアップ

本研究において、原子・分子の光電離過程により放出された電子のエネルギー分析には、光電子分光装置として世界最高のエネルギー分解能を誇る VG Sinenta 社（現 Scienta Omicron 社） 高分解能電子分光装置 SCIENTA R4000 を、光源には高エネルギー加速器研究機構フォトンファクトリーにおけるシンクロトロン放射による高分解能軟 X 線、および真空紫外線を用いた。本研究では、電離により放出された閾値近傍の低エネルギー電子も計測するため、電子分光装置 R4000 に加えて、磁場遮蔽用の厚さ 3 mm のミューメタルを装備した R4000 専用の特注真空チェンバー、および試料ガス導入部である専用ガスセル GC50 を組み合わせて設置され、4 台のターボ分子ポンプと 3 台のドライポンプで排気される。到達真空度は、約  $5.0 \times 10^{-6}$  Pa 程度である。電子分光装置 R4000 の半球は、平均軌道半径が 200

mm であり、ドップラー幅の小さい Xe 原子を標的として、電子の通過エネルギーを 2 eV、スリットを 0.1 mm としたときに、エネルギー分解能は約 4 meV を達成できる超高分解能電子分光装置である。図 1 に実際にフォトンファクトリー-BL20A に設置された SCIENTA R4000 の写真を示した。エネルギー分析された光電子は、約 1800 V の高電圧が印可された有効径 40φ のマイクロチャンネルプレート (MCP) により増幅され、蛍光体の発光に変換されることで、CCD カメラにより記録される。



図 1. フォトンファクトリー-BL20A に設置された SCIENTA R4000 の写真。右側の半球部分が、平均軌道半径 200 mm のエネルギー分析器部分である。

また、本エネルギー分析器 R4000 は、真空槽全体が回転するよう回転機構が設計されている。放出電子の角度分布に関する情報が得られることも特徴の一つである (図 2)。標的試料ガスは、専用のガスセル GC50 により、真空槽に導入される (図 3)。先端部分のガスセルには、補正電極が装備されており、電離により生成されたイオンやガスセル内の接触電位の補正を行えるよう工夫されており、SCIENTA R4000 と組み合わせることで、より高分解能を実現できる。

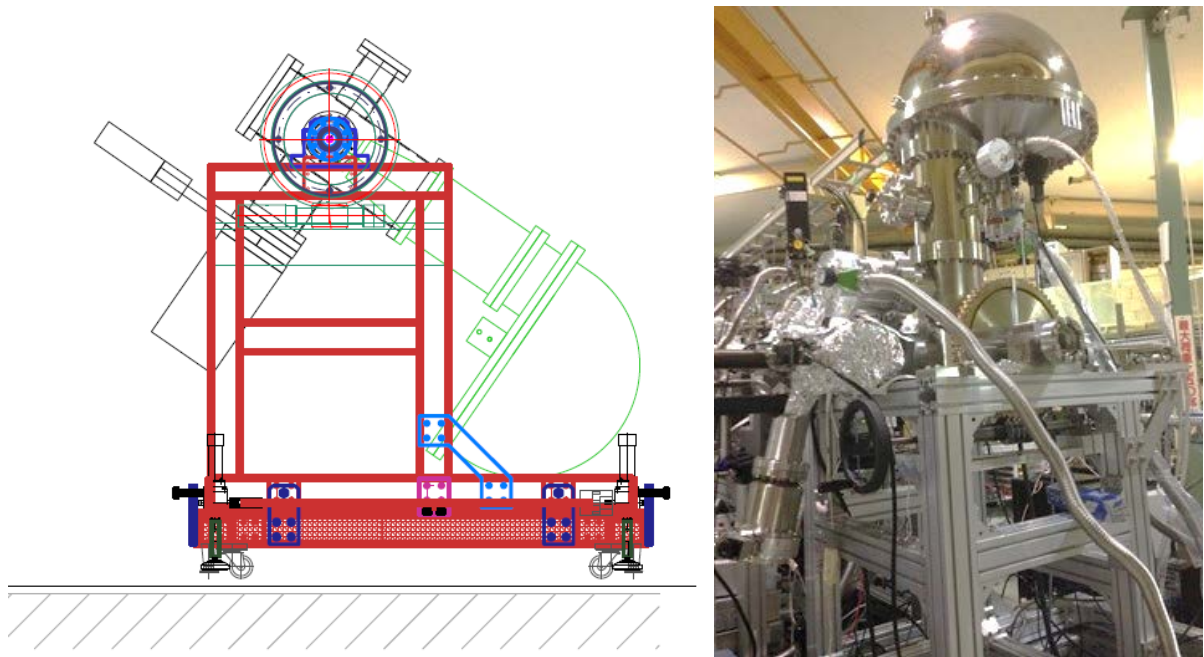


図2. 今回製作された SCIENTA R4000 の架台と回転機構 (左)。真空槽全体がビーム軸に対して、歯車によって回転するよう設計されている。右は、実際に床面に対して垂直方向へ回転させたときの写真。



図3. 本研究で用いられた専用ガスセル GC50。右側から左に向かって、放射光が入射し、図のように光電子が放出される。実際の長さは、真空槽の長さに合わせて調整されている。

## 2.2 分子線加熱用ガスセル

本研究において、標的分子の温度を制御した光電子分光実験を実施するにあたり、専用の加熱ガスセルの設計、開発を行った。その理由は、従来、使用してきた専用のガスセル GC50 は、特注であることから室温での測定に特化しており、加熱することができないためである。図4に本研究で開発した分子線加熱用ガスセルの写真を示した。開発は、上智大学



テクノセンターにて行われた。ガスセルは、直径 20φ、長さ 80 mm の円筒形であり、材質はステンレス SUS316 で作られている。理由は、SUS316 は非磁性であることから、低エネルギー電子が放出された際に残留磁場の影響を防ぐためである。図 4 のように放射光が入射する。

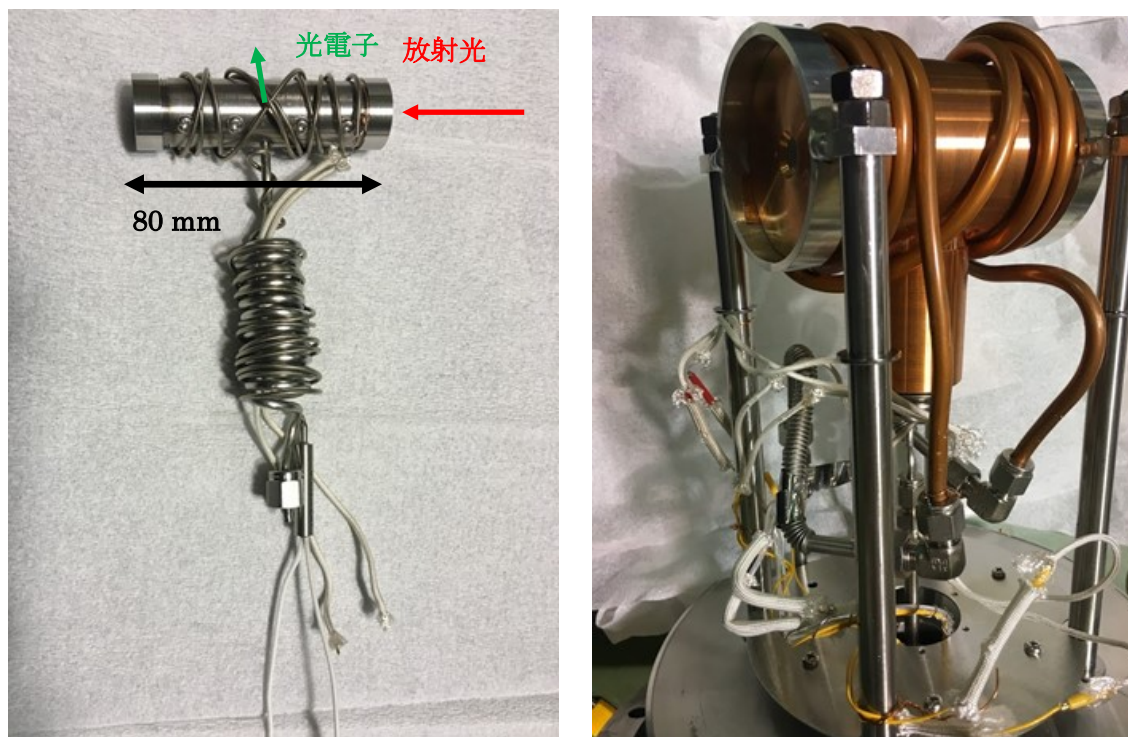


図 4. 今回新たに製作された分子線加熱ガスセル (左)。SUS316 製、直径 20φ、長さ 80 mm の円筒型ガスセル。ガスセルは、直径 1.4φ、長さ 1400 mm のシース線ヒーター (200 W) が巻かれており、通電することで抵抗加熱によりガスセルを直接加熱することが可能。さらに、ガスセルの周囲を銅製の円筒で覆い、水冷パイプに冷却水を循環することで、分光器への熱の拡散を防いでいる。

このガスセルには、直径 1.4φ、長さ 1400 mm、最大電力 200 W のシース線ヒーターが巻かれており、このヒーターに通電することにより、ガスセルを直接加熱することで間接的にガスセル内の分子を加熱することができる。標的分子は、主に加熱された壁との衝突により加熱されることから、分子と加熱された壁の衝突回数を増やすために、図 4 (左) のようにガスの導入パイプ (SUS, 1/8 インチ) をらせん状に巻き、その部分もヒーターにより加熱することにより、効率よく分子を加熱することができる。ガスセルの温度は、室温から約 800 K まで加熱することが可能であり、常時ガスセルに設置された熱電対 (アルメルクロメル K 対) でモニターされている。なお、本ガスセルには、専用ガスセルである GC50 と同様に接触電位補正用の電極が取り付けられており、必要に応じてガスセル内の電場を補正す

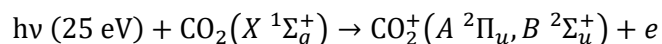


ることも可能である。

このガスセルは、図4（右）のように絶縁体を通して、銅製の円筒シュラウドに固定されている。どの銅製の円筒は、1/4インチの銅製パイプが巻かれており、パイプに冷却水を循環させることで、分光器やビームラインへの熱の拡散を防ぐよう設計されている。実際に加熱時、ガスセルの温度が600 Kまで加熱されたとき、銅製の円筒シュラウドの温度は、約400 Kでかなり熱の拡散を防げていることがわかる。

### 3 研究成果

以上述べたように今回新たに開発した分子線加熱用ガスセルを用いて、CO<sub>2</sub>分子標的に対して得られた光電子スペクトルの結果について述べる。まず初めに、本研究において、新たに開発された分子線加熱ガスセルの動作を確認するために、室温におけるCO<sub>2</sub>分子の光電子スペクトルの測定を行った。その結果、既存の専用ガスセルであるGC50と同等の強度で、同様なスペクトルの観測に成功したことから、本ガスセルは、室温において問題なく動作していることが確認された。次に、分子線ガスセルのヒーターに電流を流すことで、ガスセルを500°C（約800 K）まで加熱可能なことを確認した。図5に、本研究で測定された室温と330°C（約600 K）で測定されたCO<sub>2</sub>分子の光電子スペクトルの温度依存性を示した。図5の測定範囲は、電子基底状態のCO<sub>2</sub>に光エネルギー25 eVの光子が入射することで、光電離により運動エネルギー7 eV程度の光電子が放出され、A<sup>2</sup>Π<sub>u</sub>、およびB<sup>2</sup>Σ<sub>u</sub><sup>+</sup>イオン終状態が生成されたことを示すエネルギー領域であり、反応式で示すと以下のように書ける。



室温における運動エネルギー6.8 eVあたりに観測された最大のピークは、B<sup>2</sup>Σ<sub>u</sub><sup>+</sup>イオン終状態の振動基底状態B<sup>2</sup>Σ<sub>u</sub><sup>+</sup>(0 0 0)を表す。本測定で得られた強度は、相対値であるためこのピークの高さに規格化して示した。なお、運動エネルギー7.55 eV付近のピークが、A<sup>2</sup>Π<sub>u</sub>イオン終状態の振動基底状態A<sup>2</sup>Π<sub>u</sub>(0 0 0)を表す。また、運動エネルギー7 eVあたりに観測された楕型の構造は、A<sup>2</sup>Π<sub>u</sub>イオン終状態の対称伸縮振動励起状態A<sup>2</sup>Π<sub>u</sub>(ν<sub>1</sub> 0 0)を表す。

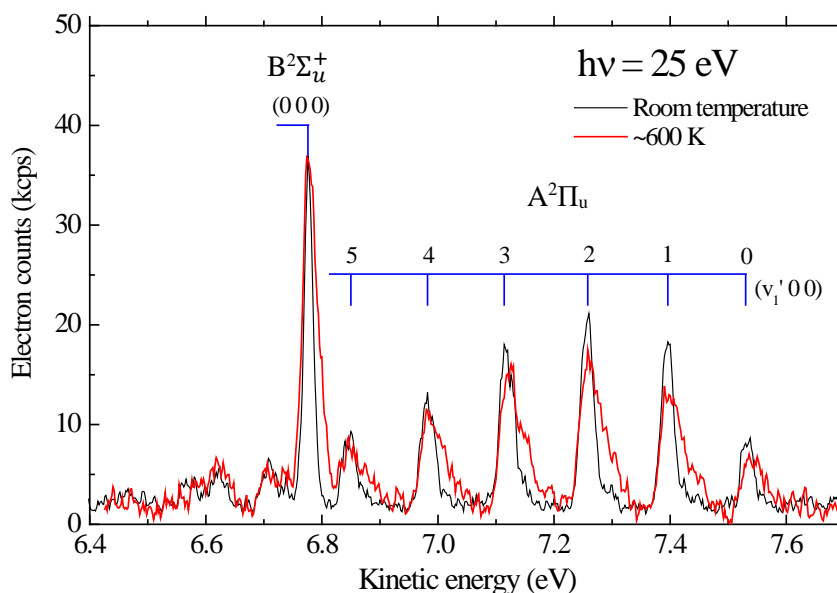


図5. 光子エネルギー25 eVで測定されたCO<sub>2</sub>分子の光電子スペクトルの温度依存性。黒線が室温（300 K）、赤線が高温（600 K）で測定されたスペクトルを表しており、青線はそれぞれのイオン終状態における振動励起状態の帰属を示している。

一方、図5より、高温（～600 K）の光電子スペクトルのそれぞれのピークの形状は、室温のそれとは異なっていることがわかる。室温で対称な形状を示したそれぞれのピークは、運動エネルギーの高い側にテールを引いており、A<sup>2</sup>Π<sub>u</sub>イオン終状態については、室温で観測されているピークの強度が相対的に減少していることが分かった。このテールの増加は、先行研究により変角振動励起状態（0 1 0）からの励起であることが帰属されており、本研究で開発された分子線加熱用ガスセルにより分子が加熱され、振動始状態が変角振動していることを示唆している。さらに、室温で観測されたピークも相対的に減少していることから、高温で振動基底状態が減少していることとも矛盾がないことが分かる。以上のように、加熱されたCO<sub>2</sub>分子の光電子スペクトルの測定において、振動励起状態からの電離過程の観測に成功したのは本研究が初めてである。

#### 4 まとめと今後の展望

本プロジェクトにおける電子構造実験グループにおいて、高分解能電子分光装置 SCIETA R4000 を用いた振動励起分子の電子状態に知見を得ることを目的とし、標的分子を加熱により振動始状態を制御するための専用の分子線加熱用ガスセルを上智大学テクノセンターと共同により、開発し、その動作確認、および加熱したCO<sub>2</sub>分子からの光電子スペクトルの測定

に成功した。一般に、孤立した原子・分子の電子構造を精密に分光するには、本プロジェクトで導入した高分解能電子分光装置に加え、高強度の光源が必要となる。また、気相を標的とした実験は、元来、十分な標的数密度が得られないため、他の物性分野の測定と比較して測定時間が必要であることが問題として挙げられる。そのため、現在共同利用ビームタイム以外の時間でも測定が可能な電子衝撃法や He ランプ光源の設置を行っており、十分な測定時間を確保するための実験装置が整ってきたことから、これまで以上に分子や振動励起分子の電子構造に関するより詳細な知見を得ることができると期待される。今後は、本測定で得られた高温における光電子スペクトルに関して、より高分解能で測定することで、イオン終状態の振動準位をより精密に分光することを目指し、その測定結果とボルツマン分布から得られる振動始状態分布から、変角振動した CO<sub>2</sub> 分子のイオン終状態に関する情報を引き出すことを目標としている。

最後に、本実験装置を用いた応用例と今後の発展について説明する。近年、イオン液体と呼ばれるアニオンとカチオンから構成される塩であるのにも拘わらず常温で液体状態の化合物であり、多くの優れた特性を持っていることから、新たなグリーン溶媒や電子デバイスなどへの応用が期待されている物質として注目されている。このイオン液体の特性を活かした電気化学的な応用を考えると、電子的構造を理解することが必要不可欠である。本プロジェクトにおける電子構造実験グループと KEK との共同研究において、電子分光装置 SCIENT R4000 をイオン液体標的に対して使い、KEK-PF における軟 X 線ビームラインにおける光電子分光実験、およびオージェー電子分光実験が現在行われている。図 6、図 7 に現在行われている実験装置の概略図と写真を示した。特に、共鳴オージェー電子分光の手法により、占有軌道がアニオンとカチオンのいずれに帰属されるのか直接的な情報が得られている。現在、多様な分野で広く注目されるイオン液体標的に対し、原子分子レベルで電子構造を理解するための研究が始まったことは、非常に意義深いと考えられる。

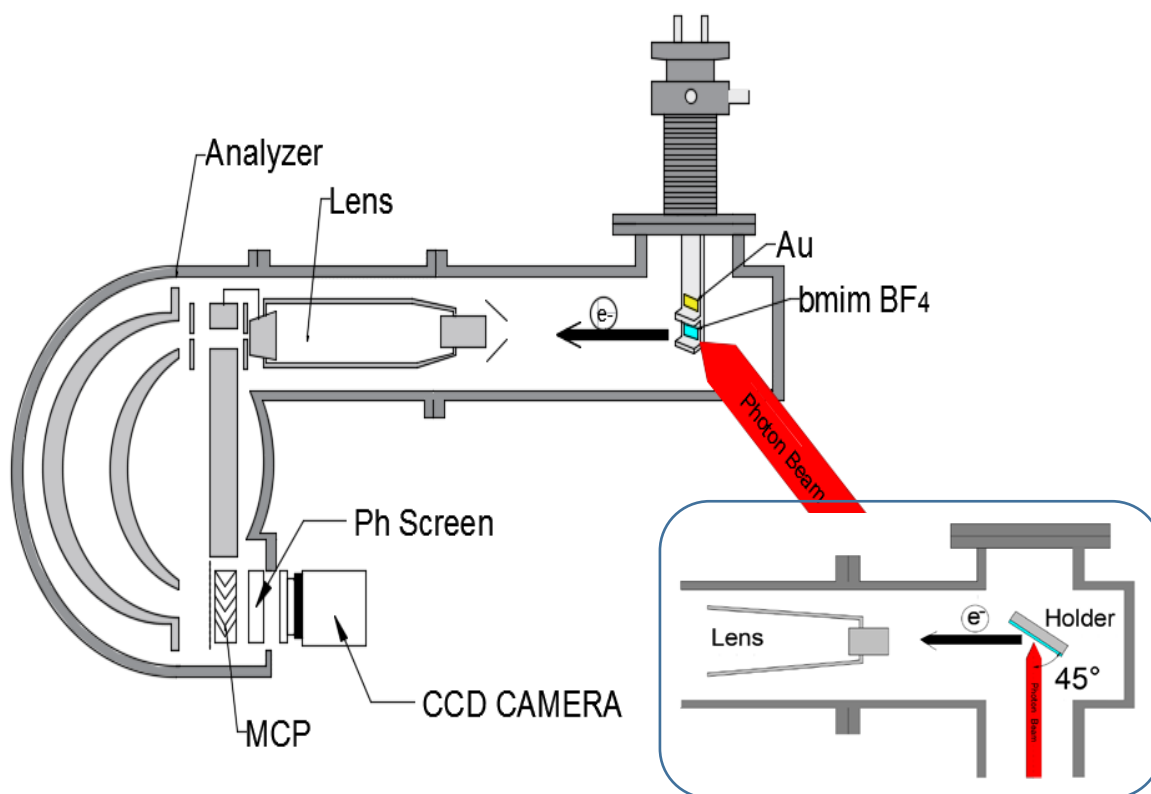


図 6. 軟 X 線ビームラインにおける電子分光装置 SCIETA R4000 を用いたイオン液体標の実験のための光電子分光実験セットアップの概略図。標的ガスセルの部分をもイオン液体の塗布された金板に置き換え、マニピュレータにより相互作用領域にイオン液体を導くことができる。



図 7. KEK-PF BL20A 真空紫外線ビームラインに設置された電子分光装置 SCIETA R4000 とイオン液体標的を設置した直線導入部。