

研究室名
18-3-10 構造化学研究室
最近の研究課題とその取り組みの概要
<p>構造化学研究室では、超音速ジェット法により分子間力で結合した分子クラスターと呼ばれる極低温分子集合体を作り出し、レーザー分子分光法の手法を使って研究する。この手法では、凝集状態のように無数の溶媒分子が時々刻々と変化することが無いため、単純なスペクトルが得られる。従って、複雑な解析手法が不要であり、対象分子同士の分子間相互作用についてより詳細な議論が可能となる。当研究室では、窒素原子や酸素原子を芳香環に含む複素芳香族分子を研究対象とし、これらの分子と溶媒としてよく用いられる水やメタノール等の分子が結合した水素結合クラスターについて、電子スペクトルや赤外吸収スペクトルを観測している。水素結合は OH や NH 基などの水素原子を介して形成されるため、これらの置換基の関与する振動は水素結合クラスターの構造に応じて、その振動数や強度が変化する。クラスター形成に起因するスペクトル変化を観測し、さらに理論計算と比較する。これらの研究を通じて、水素結合を形成する際のクラスター構造の決定が可能となり、その構造の違いによる複素芳香族分子の電子構造に及ぼす水素結合の影響等の解明を目的としている。</p> <p>さらに、近年では、計算機の発達とともに様々な理論計算が可能となり、当研究室においても最新の非調和振動計算法や分子間相互作用解析法を研究対象系に適用させ、実験結果との比較を行なう事で、電子・振動分光の立場から分子間相互作用に対する新たな展開を目指している。</p> <p>キーワード：電子スペクトル、レーザー、水素結合、超音速ジェット、量子化学計算</p>
研究室の構成員
仁部芳則（准教授）・理学博士 山田勇治（助教）・博士（理学）
2020 年度の大学院生および卒論生の人数と研究テーマ
M2: 3 名、M1: 2 名、4 年次生：4 名 レーザー分光法及び量子化学計算を用いた極低温孤立気相分子の研究
教員の担当科目
仁部芳則：(学部) 量子化学A、量子化学B、量子化学C、基礎量子化学実験、一般化学実験 構造物理化学実験、化学特別研究、卒業論文、量子化学概論 (大学院) 化学講究Ⅱ、化学特別実験Ⅱ、構造物理化学特論Ⅰ、修士論文 山田勇治：(学部) 基礎量子化学実験、構造物理化学実験、化学実験
教員の所属学会
仁部芳則：日本化学会、日本分光学会、分子科学会、日本コンピュータ化学会 山田勇治：日本化学会、日本分光学会、分子科学会
最近5年間の学術論文
1. Y. Yamada, Y. Goto, Y. Fukuda, H. Ohba, Y. Nibu, Excited-State Dynamics Affected by Switching of a Hydrogen-Bond Network in Hydrated Aminopyrazine

Clusters. <i>J. Phys. Chem. A</i> 124(48), 9963-9972 (2020) (査読有)
2. Y. Yamada, Y. Goto, Y. Nibu, Drastic Change in Electronic Transition upon Hydrogen Bond Network Switching in 3-Aminopyridine-(H ₂ O) _n Clusters. <i>J. Phys. Chem. A</i> 124(17), 3728-3734 (2019) (査読有)
3. 山田勇治、山口修平、酒井みきな、仁部 芳則、ジェット冷却された孤立気相ベンジル誘導体の赤外スペクトル測定と非調和振動数解析 福岡大学理学集報 49巻2号 2019 (査読なし)
4. 登優友、山田勇治、仁部芳則、極低温クラスターによるピリジン誘導体の電子遷移に対する微視的溶媒効果の研究 福岡大学理学集報 49巻1号 2019 (査読なし)
最近5年間の学術著書
該当なし
最近5年間の学術国際会議での発表
Y. Yamada, M. Maeda, Y. Nibu, Electronic spectra of jet-cooled Imidazo[1,2,a]pyridine and its hydrogen-bonded clusters. 35th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics, Kyoto, 2019年6月
Y. Yamada, F. Mineyama, Y. Nibu, Opposite change in Hydrogen-bond strength in the electronically excited states of mono-hydrated benzoxazole cluster isomers. 34th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics, Kyoto, 2018年6月
Y. Yamada, M. Ogawa, Y. Nibu, Influence of Hydrogen-Bond Formation upon Intramolecular Interaction in Solvated 3-Aminopyridine Clusters. International Symposium on "Diversity of Chemical Reaction Dynamics, Himeji, 2017年6月
Y. Yamada, Y. Goto, H. Ohba, Y. Nibu, Switching of hydrogen-bond network and its effect on the excited state relaxation in hydrated aminopyrazine clusters. Recent Progress in Molecular Spectroscopy and Dynamics, Fukuoka, 2016年7月
K. Nishizono, Y. Yamada, Y. Nibu, Study on the conformational structure of monomer and solvated cluster of benzyl methyl ether. Recent Progress in Molecular Spectroscopy and Dynamics, Fukuoka, 2016年7月
最近5年間の代表者としての学外資金導入実績
該当なし
最近5年間の代表者としての学内資金導入実績
該当なし
最近5年間の学会等学術団体における役職など
仁部芳則：分光学会九州支部庶務幹事 (2015年4月～2018年3月)
仁部芳則：分光学会誌「分光研究」編集委員 (2017年6月～)
仁部芳則：第8回アジア分光学会国際会議 (ASC2021) 組織委員 (2019年9月～)
最近5年間の一般向け論文と著書、行政報告書など
該当なし
最近5年間の一般 (非学術) 集会での発表論文

該当なし

最近5年間の学術団体以外の団体での啓蒙活動や社会貢献活動とその役職など

該当なし