

|  |
|--|
| 研究室名   |
| <b>16-3-10 量子化学研究室</b>   |
| 最近の研究課題とその取り組みの概要  |
| <p>量子化学研究室では、超音速ジェット法により生成した孤立気相分子及び溶媒分子数を制御して溶媒和した分子クラスターに対して、レーザー分子分光法を適用して研究を行った。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、すなわち、複雑な解析手法が不要であり、分子そのものの電子状態の観測が可能であり、また、溶媒分子数が制御されているため、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、アミン等の溶媒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とそれに付随する励起状態ダイナミクスへの影響を解明することを目的としている。これらの観測結果を議論する際には理論計算を利用し、分子間相互作用の解析や電子励起に起因する構造変化及び電子構造変化に関する情報の取得を行う。これらの実験的、理論的結果の比較から、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>さらに、他の研究テーマとして、有機金属化学研究室と共同で研究を進め、量子化学計算を用いた金属錯体の安定性及び電子スペクトルの解析を行った。</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<br>山田勇治（助教）・博士（理学）  |
| 2024 年度の大学院生および卒論生の人数と研究テーマ  |
| M1: 3 名、4 年次生：6 名<br>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構造及び電子励起状態ダイナミクスに関する研究<br>量子化学計算を用いた金属錯体の電子スペクトル解析   |
| 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、量子化学実験、一般化学実験<br>化学研究 A、卒業論文、化学リテラシー、量子化学概論<br>(大学院) 構造物理化学講義 I、構造物理化学特別実験、構造物理化学特論 I、修士論文  |

|  |
|--|
| 山田勇治：(学部) 量子化学実験、化学研究 A、基礎化学演習   |
| 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<br>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   |
| <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Y. Yamada, Investigation of IVR Pathway of Phenol Molecules –Observation of Vibrational Quantum Beats-. <i>J. Spectrosc. Soc. Jpn.</i> 73(3), 73-77 (2023). (査読有)</li> <li>2. Y. Yamada, T. Kawao, S. Urayoshi, K. Nakayama, Y. Nibu, Isomer Stability Dependence of Hydrogen-Bonded Benzoxazole Clusters on Solvent Molecules. <i>J. Phys. Chem. A</i> 127(11), 2536-2544 (2023). (査読有)</li> <li>3. Y. Yamada, K. Nishizono, M. Kano, S. Koreki, N. Nagahora, Y. Nibu, Spectroscopic and Theoretical Studies on Conformational Stability of Benzyl Methyl Ether. <i>J. Phys. Chem. A</i> 127(23), 4940-4948 (2023). (査読有)</li> <li>4. 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)</li> </ol> |
| 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   |
| <p>Y. Yamada, K. Nishizono, M. Kano, S. Koreki, N. Nagahora, and Y. Nibu (invited),<br/>Conformational isomers of benzyl methyl ether. 8th Asian Spectroscopy Conference (ASC2023),<br/>Niigata, 2023 年 9 月</p> <p>Y. Yamada, F. Mineyama, Y. Nibu, Excited state dynamics of hydrogen-bonded acridine clusters<br/>with water and methanol. 38th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics, Fukuoka, 2023<br/>年6月</p>   |
| 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  |
| <p>仁部芳則：分光学会誌「分光研究」編集委員 (2017 年 6 月～2023 年 5 月)</p> <p>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～2023 年 9 月)</p>  |
| 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   |