

平成 21 年 5 月 21 日現在

研究種目：基盤研究 (A)
研究期間：2005～2008
課題番号：17205001
研究課題名 (和文) 時間相関超高感度電子分光の開発と界面反応過程のリアルタイム観測
研究課題名 (英文) Development of cross-correlation highly sensitive electron spectroscopy and real-time measurement of chemical reactions at interface
研究代表者
大野 公一 (OHNO KOICHI)
東北大学・大学院理学研究科・教授
研究者番号：60012499

研究成果の概要：準安定励起原子と分子の衝突反応過程において、時間相関超高感度電子分光法を開発することで、衝突エネルギーと電子エネルギーの2パラメーターを分解する2次元電子分光法を固体表面に適用することに初めて成功し、界面での化学反応過程をリアルタイムで観測すること、並びに、分子表面に関する研究を推進することが出来た。

交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2005年度	22,900,000	6,870,000	29,770,000
2006年度	9,300,000	2,790,000	12,090,000
2007年度	2,900,000	870,000	3,770,000
2008年度	2,700,000	810,000	3,510,000
年度			
総計	37,800,000	11,340,000	49,140,000

研究分野：化学

科研費の分科・細目：基礎化学・物理化学

キーワード：電子分光、準安定励起原子、衝突エネルギー、表面反応過程、電子構造、電子相関効果、分子軌道

1. 研究開始当初の背景

研究代表者らは、準安定励起原子と分子との衝突イオン化過程で放出された電子を検出するペニングイオン化電子分光法において、衝突エネルギーと電子エネルギーの2パラメーターを分解した2次元ペニングイオン化電子分光法を確立して、分子表面や、分子と原子の衝突過程ダイナミクスの研究を推進してきた。

一方、準安定励起原子を用いた衝突イオン化過程を固体表面に適応した場合には、イオン化状態に対応する分子軌道の立体的分布と観測される反応確率の多寡を比較するこ

とで、表面に吸着した分子の配向と反応過程に関する議論が行われていたが、衝突エネルギー選別2次元ペニングイオン化電子分光法などによる時間分解計測から、衝突反応過程のダイナミクスの情報を引き出すことは実現されていなかった。

2. 研究の目的

本研究課題では、実現されていなかった固体表面の衝突エネルギー選別2次元ペニングイオン化電子分光法を時間相関法と高感度化の組み合わせによって確立し、界面の反応過程のダイナミクスを議論することを目

He*(2³S) Metastable Atom by Two-Dimensional Penning Ionization Electron Spectroscopy”, J. Phys. Chem. A, 113, 521-526, 2009, 査読有

(3) Naoki Kishimoto, Masakazu Yamazaki, Yoshinori Hanzawa, Takuya Horio, and Koichi Ohno, “Observation of anisotropic interactions and molecular orbitals of CO upon collision with He*(2³S) atoms by two-dimensional Penning ionization electron spectroscopy”, J. Phys. Conf. Ser., 88, 012026(1-11), 2007, 査読有

(4) Masakazu Yamazaki, Takuya Horio, Naoki Kishimoto, and Koichi Ohno, “Determination of outer molecular orbitals by collisional experiments”, Phys. Rev. A, 75, 032721(1-8), 2007, 査読有

(5) Naoki Kishimoto and Koichi Ohno, “Observation of Anisotropic Interactions between Metastable Atoms and Target Molecules by Two-Dimensional Collisional Ionization Electron Spectroscopy”, Int. Rev. Phys. Chem., 26, 93-138, 2007, 査読有

(6) Naoki Kishimoto, Makoto Matsumoto, Eiichi Matsumura, and Koichi Ohno, “Collision-Energy-Resolved Penning Ionization Electron Spectroscopy of Toluene and Chlorotoluenes: Stereodynamics in Collisional Ionization and Anisotropic Interactions with He*(2³S) Atoms”, Euro. Phys. J. D, 38, 75-84, 2006, 査読有

(7) Masakazu Yamazaki, Naoki Kishimoto, and Koichi Ohno, “Collision-Energy-Resolved Penning Ionization Electron Spectroscopy of Styrene, 2-Vinylpyridine, and 4-Vinylpyridine with He*(2³S) Metastable Atoms”, Euro. Phys. J. D, 38, 47-58, 2006, 査読有

(8) Takuya Horio, Satoshi Maeda, Naoki Kishimoto, and Koichi Ohno, “Anisotropic interaction and stereo reactivity in a chemi-ionization process of OCS by collision with He*(2³S) metastable atoms”, J. Phys. Chem. A, 110, 11010-11017, 2006, 査読有

(9) Masakazu Yamazaki, Naoki Kishimoto, and Koichi Ohno, “Collision-Energy-Resolved Penning Ionization Electron Spectroscopy of Thiazole and Benzothiazole: Study of Ionic States and Anisotropic Interactions between a Metastable He*(2³S) Atom and Hetero Cyclic Compounds”, J. Phys. Chem. A, 110, 7097-7104, 2006, 査読有

(10) Andriy Borodin, Masakazu Yamazaki, Naoki Kishimoto, and Koichi Ohno, “Collision-Energy-Resolved Penning Ionization Electron Spectroscopy of Phenylacetylene and Diphenylacetylene by Collision with He*(2³S) Metastable Atoms”, J. Phys. Chem. A, 110, 1783-1790, 2006, 査読有

(11) Takuya Horio, Takuro Hatamoto, Satoshi

Maeda, Naoki Kishimoto, and Koichi Ohno, “Probing anisotropic interaction potentials of unsaturated hydrocarbons with He*(2³S) metastable atom: Attractive-site preference of σ -direction in C₂H₂ and π -direction in C₂H₄”, J. Chem. Phys., 124, 104308(14pages), 2006, 査読有

(12) Yoshinori Hanzawa, Naoki Kishimoto, Masakazu Yamazaki, and Koichi Ohno, “Collision-energy-resolved angular distribution of Penning electrons for N₂-He*(2³S)”, Chem. Phys. Lett., 426, 43-48, 2006, 査読有

(13) Takuya Horio, Masakazu Yamazaki, Satoshi Maeda, Takuro Hatamoto, Naoki Kishimoto, and Koichi Ohno, “Development of a Cooled He*(2³S) Beam Source for Measurements of State-Resolved Collision Energy Dependence of Penning Ionization Cross Sections: Evidence for a Stereo Specific Attractive Well Around Methyl Group in CH₃CN”, J. Chem. Phys., 123, 194308 (13 pages), 2005, 査読有

(14) Masakazu Yamazaki, Satoshi Maeda, Naoki Kishimoto, and Koichi Ohno, “Penning ionization electron spectroscopy of C₆H₆ by collision with He*(2³S) metastable atoms and classical trajectory calculations: Optimization of ab initio model potentials”, J. Chem. Phys., 122, 044303(9 pages), 2005, 査読有

(15) Naoki Kishimoto, Yusuke Hagihara, Koichi Ohno, Stefan Knippenberg, Jean-Pierre François, and Michael S. Deleuze, “Probing the Shape and Stereochemistry of Molecular Orbitals in Locally Flexible Aromatic Chains: A Penning Ionization Electron Spectroscopy and Green’s Function Study of the Electronic Structure of Biphenyl”, J. Phys. Chem. A, 109, 10535-10546, 2005, 査読有

(16) Andriy Borodin, Masakazu Yamazaki, Naoki Kishimoto, and Koichi Ohno, “Collision-Energy-Resolved Penning Ionization Electron Spectroscopy of HCOOH, CH₃COOH, and HCOOCH₃ by Collision with He*(2³S) Metastable Atoms”, J. Phys. Chem. A, 109, 4721-4727, 2005, 査読有

[学会発表] (計 7 件)

(1) Koichi Ohno, Naoki Kishimoto, and Satoshi Maeda, “Development of New Techniques to Study Collisional Reaction Dynamics and Interaction Potential Energy Surfaces”, The 8th Asian International Seminar on Atomic and Molecular Physics (AISAMP8), November 24-28, Perth, Australia, 2008.

(2) Naoki Kishimoto, Yasuhiko Kudo and Koichi Ohno, “Collision-energy-resolved metastable impact electron spectroscopy of molecules adsorbed on a metal surface”, The 12th

International Symposium of Stereodynamics of Chemical Reactions, Dalian, China, October 13-18, 2008.

(3) Koichi Ohno, "Global Reaction Route Mapping on the Potential Energy Surface via the Anharmonic Downward Distortion Following", The World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC) 2008, Sydney, Australia, September 18, 2008.

(4) Naoki Kishimoto
"Observation of Molecular Orbitals and Anisotropic Interactions by Two-Dimensional Collisional Ionization Electron Spectroscopy", The 2nd Imaging Techniques in Atomic and Molecular Physics Symposium, Hefei, China, April 10-13, 2008.

(5) Naoki Kishimoto, Takuya Horio, Masakazu Yamazaki, and Koichi Ohno
"Observation of Anisotropic Interactions and Molecular Orbitals by Two-Dimensional Penning Ionization Electron Spectroscopy", ICPEAC XXV (International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions) Special Reports, Freiburg, July 26-31, 2007.

(6) Naoki Kishimoto and Koichi Ohno
"Anisotropic interactions between a metastable atom and a target molecule by two-dimensional Penning ionization electron spectroscopy", MOLEC XVI (European Conference on Dynamics of Molecular Systems), Italy, September 11-15, 2006.

(7) Naoki Kishimoto, Takuya Horio, and Koichi Ohno, "Determination of anisotropic interactions and valence ionic states by collision-energy/electron-energy-resolved Penning ionization electron spectroscopy", The ICQC2006 Satellite Symposium in Sendai on Recent Advances in Theoretical and Spectroscopic Studies on Electron Dynamics and Related Phenomena, Matsushima, May 16-19, 2006.

[図書] (計 0 件)

[産業財産権]

○出願状況 (計 0 件)

名称 :
発明者 :
権利者 :
種類 :
番号 :
出願年月日 :
国内外の別 :

○取得状況 (計 0 件)

名称 :
発明者 :
権利者 :
種類 :
番号 :
取得年月日 :
国内外の別 :

[その他]
ホームページ等

6. 研究組織

(1) 研究代表者

大野 公一 (OHNO KOICHI)

東北大学・大学院理学研究科・教授

研究者番号 : 6 0 0 1 2 4 9 9

(2) 研究分担者

()

研究者番号 :

(3) 連携研究者

山北 佳宏 (YAMAKITA YOSHIHIRO)

東北大学・大学院理学研究科・助教

研究者番号 : 3 0 2 7 2 0 0 8

岸本 直樹 (KISHIMOTO NAOKI)

東北大学・大学院理学研究科・講師

研究者番号 : 6 0 3 0 2 0 8 0