

令和 5 年 4 月 21 日現在

機関番号：32621

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2018～2022

課題番号：18H01271

研究課題名(和文) 星間分子雲における低温イオン化学研究の新展開

研究課題名(英文) New development for studying cold ion chemistry in interstellar molecular clouds

研究代表者

岡田 邦宏 (Okada, Kunihiro)

上智大学・理工学部・教授

研究者番号：90311993

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 13,500,000円

研究成果の概要(和文)：星間分子生成で重要とされる低温イオン-極性分子反応の反応速度定数の並進・回転温度依存性の測定に成功し、反応速度定数における極性分子の回転準位分布依存性の重要性を実験的に初めて明らかにした。また、低温イオン-極性分子反応測定法の新たな提案を行い、その原理実証実験に成功した。理論的研究においては、反応速度定数と分岐比の評価及び反応機構の解明に必要な非断熱現象を取り込んだイオン-分子反応の反応動力学計算コードの開発に成功し、実験結果との比較及び反応機構の解明に向けた準備が整った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究はこれまでの手法では測定が困難な低温領域におけるイオン-極性分子反応の反応速度定数の測定法を新たに開拓し、実現したものである。その成果により、星間分子生成における極性分子の役割の重要性を実験的に明らかにした。特に低温イオン-極性分子反応の反応速度定数に対する極性分子の回転準位分布の重要性の実証に成功した点が学術的に意義のある点である。また、これまで試みられたことが無かったバッファーガス冷却イオンと低速極性分子線を組合せた低温イオン-極性分子反応測定法の提案と実証は、測定可能なイオンと極性分子の組合せ及び並進反応温度の範囲を飛躍的に増加させる点において学術的意義があると考えられる。

研究成果の概要(英文)：We have succeeded in measuring the translational and rotational temperature dependence of the rate constants of low-temperature ion-polar molecule reactions, which are important for interstellar molecule formation. We demonstrated for the first time the importance of the rotational level distribution dependence of polar molecules in the reaction rate constants. In addition, the proposal of a new method for measuring low-temperature ion-polar molecule reactions and the success of the proof-of-principle experiment pave the way for future experimental studies of low-temperature ion-polar molecule reactions. On the other hand, in the theoretical research, we have successfully developed a reaction dynamics simulation code for ion-molecule reactions that incorporates non-adiabatic phenomena, which is necessary for the evaluation of reaction rate constants and branching ratios and for the elucidation of the reaction mechanism.

研究分野：原子分子物理学，星間化学

キーワード：低温イオン極性分子反応 シュタルク分子速度フィルター イオントラップ イオンのクーロン結晶
星間分子 レーザー冷却

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

星間分子雲は恒星が誕生する領域として天文学における重要な研究対象であるとともに、その化学進化の研究を通して太陽系の成り立ちの解明に重要な手がかりを与えてくれる。そのような星間分子雲の物理的環境は極めて特異である。分子雲の数密度は概ね $10^2 \sim 10^6 \text{ cm}^{-3}$ ($10^{-14} \sim 10^{-9} \text{ Pa}$) であるため分子同士の衝突頻度は極めて低く、さらに環境温度は $10 \sim 100 \text{ K}$ であり、活性化エネルギーを要する化学反応はほとんど起こらない。それにも関わらず天文観測によってこれまでに 300 種程度の分子が発見されており、その数は年々増加している。このような分子雲の“化学進化”では、活性化エネルギーを要しないイオン分子反応や中性ラジカルが関与する反応が重要な役割を担っている。その中でも引力がより強く働くイオン-極性分子反応は、低温で捕獲断面積が大きくなるため中心的役割を担っている。しかしながら低温領域でのイオン-極性分子反応の実験的研究は非常に少ない。その理由は、極性分子の多くが 100 K 以下の低温で容易に凝縮してしまい、既存の実験方法では気相中の反応速度測定が困難だったからである。低温イオン-極性分子反応の反応速度定数の温度依存性や反応分岐比に関する実験データは皆無に等しい。一方、理論的研究においては極性分子の内部状態を量子論的に扱う半古典的イオン-極性分子捕獲理論 (Perturbed Rotational State Theory; PRS 理論) を用いることによって捕獲断面積、捕獲速度定数を求めることが可能であるが、実験データとの比較は十分になされていない。また、半古典的反応動力学計算をイオン-極性分子反応の研究に適用された例は殆どなく、反応機構を理解するためにも計算方法のさらなる開発が必要とされている。

2. 研究の目的

本研究の目的は、星間化学研究において重要であるにもかかわらず実験データが殆ど存在しない低温イオン-極性分子反応における反応速度定数の並進・回転温度依存性・分岐比を独自に開発した実験装置を用いて測定することである。また、捕獲速度理論をはじめとする理論計算との比較によって、低温イオン-極性分子反応の反応メカニズムに関する詳細な知見を得ること、その結果として星間化学及び反応物理化学の進展に貢献することを目指す。

3. 研究の方法

イオン-極性分子反応におけるイオン標的の生成では、主としてイオンのレーザー冷却法を用いた。まず、レーザーアブレーション法によって生成された Ca^+ イオンを線形ポールトラップ内に捕獲し、レーザー冷却を行う。イオンはクーロン結晶化し、極低温の状態がつくられる。 Ca^+ を反応標的とする場合、この状態で低速極性分子線を照射する。一方、 Ca^+ 以外の標的イオンを生成する場合、 Ca^+ クーロン結晶を生成した後、必要となる原子・分子イオンの親ガスをトラップチャンバーに導入し、電子銃またはパルス色素レーザーを照射することによって目的の原子・分子イオンを得る。

一方、本研究ではイオンの冷却にバッファガス冷却法を利用した反応速度測定も行った。トラップチャンバーに He ガスを導入してイオンを冷却することにより、レーザーを入射しない

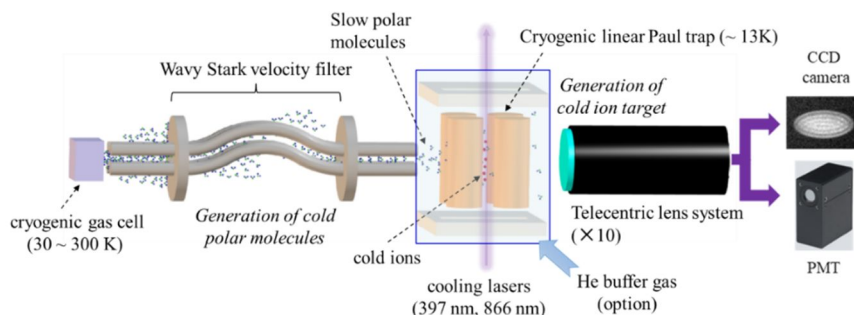


図 1. 温度可変低温イオン-極性分子反応測定装置

状態でもイオンが失われることなく反応速度測定を行うことが可能となる。イオントラップは極低温冷凍機により約 13 K まで冷却されているため、イオンの並進温度を約 200 K 程度に冷却することが可能である。

低温イオン-極性分子反応測定装置の概要を図 1 に示す。左側には冷却バッファガスセル及び波状シュタルク分子速度フィルターがあり、中心に冷却線形イオントラップが配置されている。右側には Ca^+ レーザー誘起蛍光検出系であり、倍率 10 倍のテレセントリックレンズを用いて Ca^+ イオンからの LIF を冷却 CCD 及光電子増倍管 (PMT) に集光し、LIF 画像と光子数強度を同時測定できるようになっている。レーザー冷却によって Ca^+ イオンのクーロン結晶を生成した後、反応標的となるイオンを導入し、低速極性分子線を照射する。その後、混合クーロン結晶の画像変化から反応速度を求める。

本実験条件では、低速極性分子とイオンが衝突する際に互いにランダムな向きをもつ熱的な

相対速度分布をもっていると考えられるので、イオン-極性分子間の並進反応温度 T_{trans} は以下の式を用いて求めた。

$$T_{\text{trans}} = \frac{\mu}{m_{\text{ion}}} T_{\text{ion}} + \frac{\mu}{m_{\text{PM}}} T_{\text{PM}}$$

ここで m_{ion} , m_{PM} , T_{ion} , T_{PM} はそれぞれイオンと極性分子の質量および並進温度であり、 μ は換算質量である (K. Okada et al., Phys. Rev. Appl. 4, 054009 (2015))。

本研究では、反応生成物イオンを含む混合クーロン結晶を外部に引き出し、飛行時間質量スペクトル(TOF-MS)を測定するためのセットアップを開発した。反応時間を変化させ、質量スペクトル強度の時間変化を測定することにより、生成物イオン毎に反応速度を決定することが可能である。図2に $\text{Ca}^+ + \text{CH}_3\text{F} \rightarrow \text{CaF}^+ + \text{CH}_3$ 反応によって生成された CaF^+ と Ca^+ の飛行時間スペクトルを分離して観測した例を示す。反応前に引き出されたクーロン結晶では55 μs 付近に Ca^+ に対応する単一のディップをもったTOF-MSが観測された(図2(b))。一方、反応後に生成された混合クーロン結晶を引き出して測定すると2つのディップをもったTOFスペクトルが測定され、シミュレーション結果である図2(a)との対応から、 $\text{Ca}^+ - \text{CaF}^+$ からなる混合クーロン結晶の質量分析に成功したことを確認した(図2(c))。一方、図2(d)に示した多数回のTOF測定から得られた積算スペクトルでは、質量分解能の低下がみられた。この結果から、現状のセットアップでは、1uの質量差を分解することができていない。TOFスペクトルの質量分解能がイオントラップの各設定電位およびクーロン結晶のサイズに大きく依存するためである。より高分解能なスペクトルを得るためには、引き出し電圧をより高く設定し、イオン数を数100個以下に制限して測定する必要があることが分かった。

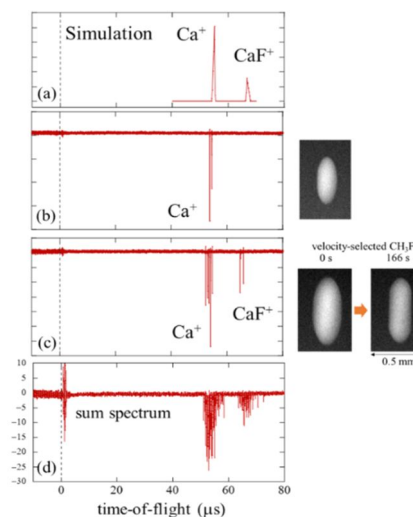


図2. $\text{Ca}^+ + \text{CH}_3\text{F} \rightarrow \text{CaF}^+ + \text{CH}_3$ 反応で生成された混合クーロン結晶の飛行時間質量スペクトル測定例。

4. 研究成果

本研究では、様々な低速極性分子 (CH_3CN , CH_3F , CH_3OH , $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$) の生成実験を行い、飛行時間法を用いてそれらの並進反応温度の測定を行った。図3 横軸はシユタルク分子速度フィルターに印加した高電圧の値 (正・負高電圧の絶対値)、縦軸は決定された並進温度である。回転準位シユタルクシフトの大きな分子ほど並進温度が高くなる傾向がある。 CH_3F の測定結果では、室温の場合に比べて30 Kに冷却されたガスセルの並進温度がやや高くなっていることが分かる。これは極性ガスとともに導入されたヘリウムバッファーガス(約80 Pa)によるブースト効果(分子の加速)が原因であると考えられる。

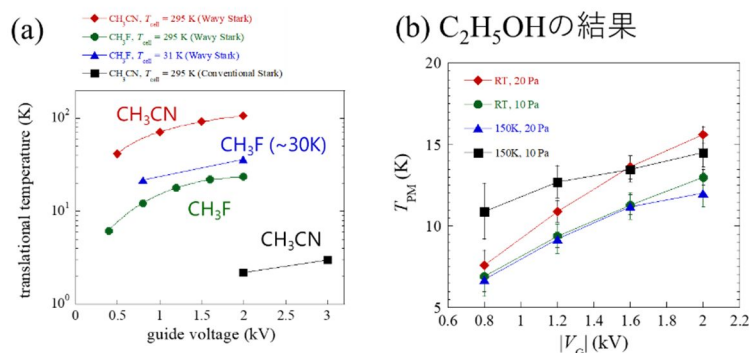


図3(a) 低速極性分子線の並進温度。 CH_3F (30 K)の測定ではヘリウムバッファーガスを約80 Paの圧力で導入している。それ以外は室温での測定結果である。(b) 低速エタノール分子線の並進温度。室温と150 Kの冷却セルでの測定結果。いずれもバッファーガスは導入していない。

本研究では低速分子線の数密度決定を行う新たな方法を開発した。これまでは真空槽に極性ガスを導入し、電離真空計による圧力(数密度)と2次電子増倍管付き四重極質量分析計によるイオン計数強度の相関測定を行い、低速分子線の計数強度を数密度に換算して求めていた。本研究では相関測定を行わずに数密度を直接測定した。真空計の値は N_2 ガス圧力に換算した値であるため、分子種ごとに窒素分子とのイオン化断面積比による補正を行い、真の数密度を求めた。

測定によって得られる数密度の不確かさは極高真空計の確度(約 15%)及び低速分子線の広がりによる不確かさ(約 10%)により決定された。図 4 に低速極性分子線のイオントラップ中心位置での数密度測定結果を示す。

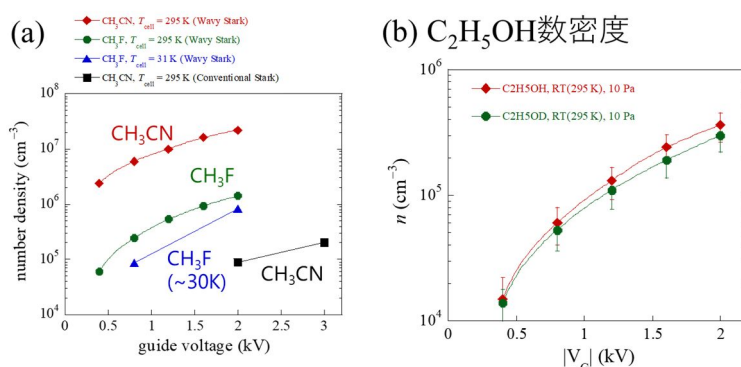


図 4(a) 低速極性分子線の数密度測定結果。CH₃F(30 K)の測定ではヘリウムバッファーガスを約 80 Pa の圧力で導入している。それ以外は室温での測定結果である。(b) 室温ガスセル及び 150 K の冷却ガスセルを用いて生成された低速エタノール分子線の数密度測定結果。いずれもバッファーガスは導入していない。

次に、本研究で行った CH₃CN + H₃O⁺反応の反応速度測定における結果について述べる。レーザー冷却した Ca⁺のクーロン結晶で H₃O⁺を共同冷却し、低速 CH₃CN を導入してからクーロン結晶の中心暗部の減少がなくなるまでの時間とその様子を観測した。測定例を図 5(a)に示す。横軸は反応時間、縦軸はクーロン結晶の中心暗部から求められた H₃O⁺の相対イオン数である。並進反応温度は 2.3 K、得られた反応速度は 1.6(0.1) × 10⁻³ s⁻¹であった。同様の測定を 5 回繰り返して反応速度定数を求めた。図 5(c)に捕獲速度定数と実験値を比較したグラフを示す。Su-Chesnavich 式(J. Chem. Phys. 1982, 76, 5183)による熱的捕獲速度定数は 4.9 × 10⁻⁸ cm³/s と求められ、実験値は熱的捕獲速度定数の約 14% であることが分かった。また、実験値は低速 CH₃CN 分子線の回転準位分布を考慮して求められた PRS 理論に基づく捕獲速度定数と比較しても小さく、反応確率が 1 よりも小さい。PRS 捕獲速度定数は 1.2(4) × 10⁻⁸ cm³s⁻¹ であり、反応確率は約 58% である。本研究の結果から、CH₃CN + H₃O⁺ → CH₃CNH⁺ + H₂O 反応にわずかな反応障壁が存在していることが分かった。今後は、波状シュタルク分子速度フィルターを用いた並進・回転温度依存性の測定を行い、反応動力学計算との比較を通して、反応機構の詳細を明らかにしていく予定である。

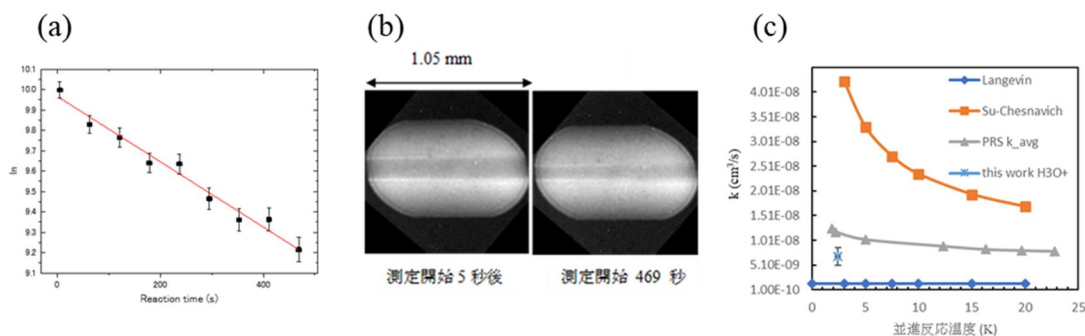


図 5. (a) CH₃CN+H₃O⁺反応速度測定グラフ。(b)反応時間 5 秒と 469 秒の Ca⁺クーロン結晶のレーザー誘起蛍光画像。中心暗部に H₃O⁺が存在している。(c) 反応速度定数と捕獲速度定数(理論値)との比較。

かにしていく予定である。

次に、低温イオン-極性分子反応における極性分子の回転温度冷却効果の観測結果について述べる。本研究では回転温度が冷却された CH₃F を用いて低速分子線を生成し、低エネルギー Ca⁺ + CH₃F → CaF⁺ + CH₃ 反応における反応速度定数の CH₃F 回転準位分布依存性の検出を試みた。極性分子を供給するガスセルの温度を室温または 30 K に設定した場合に得られる反応速度定数

の値を比較することによって回転温度冷却効果の有無を確認した。本研究で得られた反応速度定数の並進反応温度依存性を図 6 に示す。図中のプロット () は室温のガスセルを用いた測定結果であり, PRS 捕獲速度定数 (PRS 295K) の結果と誤差の範囲で一致した。一方, プロット () は 30 K に冷却されたガスセルを用いて測定された結果である。並進温度約 15 K では, ガスセル温度 30 K における反応速度定数の方が室温の場合よりも約 4 倍大きいことが分かる。この回転温度冷却効果は, 図 6 に示した PRS 捕獲速度定数どうしの比較 (PRS 30K 及び PRS 295K) からわかるように, CH_3F の回転温度が低いほど捕獲速度定数が大きくなり, 結果的に反応速度定数が大きくなったと理解できる。なお, 低温イオン-極性分子反応における反応速度定数の絶対値を比較することによって, 回転温度冷却効果を直接観測したのは本研究が初めてのことである。

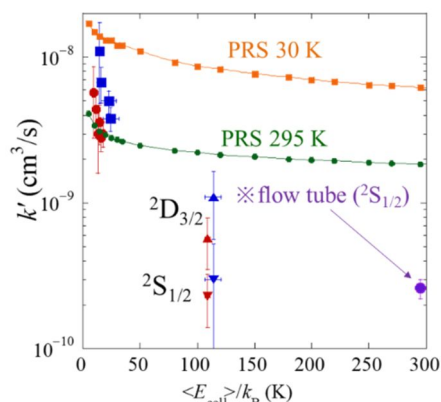


図 6. $\text{Ca}^+ + \text{CH}_3\text{F}$ 反応速度定数の並進温度依存性。 は SIFT 法による過去の測定値である。

本研究ではより高い並進反応温度 (約 110 K) での反応速度定数を測定するために, ヘリウムガス冷却された Ca^+ イオンと低速 CH_3F 分子線との反応速度測定も行った。この測定ではイオンをトラップ中に維持・冷却するためのレーザーを入射する必要がないため, Ca^+ の電子状態 $^2\text{S}_{1/2}$ 及び $^2\text{D}_{3/2}$ の反応速度定数を個別に測定することが可能である。結果を図 6 に示す。赤いプロット点は室温, 青いプロット点は 30 K の結果であり, は基底状態 $^2\text{S}_{1/2}$, は準安定状態 $^2\text{D}_{3/2}$ の結果を示している。明らかに準安定状態における反応速度定数が大きい。 $^2\text{D}_{3/2}$ は基底状態よりも約 1.7 eV エネルギーが高いため, 反応速度定数が大きくなったものと考えられる。紫のプロット点は過去に Selected Ion Flow Tube 法を用いて測定された室温における基底状態 $^2\text{S}_{1/2}$ の反応速度定数である (X. Zhao *et al.*, J. Phys. Chem. A 110, 10607 (2006))。本研究で測定された基底状態 $^2\text{S}_{1/2}$ の速度定数と誤差の範囲で一致している。また, 回転温度冷却されたフルオロメタン分子の反応速度定数が室温の場合に比べて大きな値をもち, 並進反応温度 15 K における結果と同様に回転温度冷却効果が観測されていることも分かった。本研究で行った $\text{Ca}^+ + \text{CH}_3\text{F} \rightarrow \text{CaF}^+ + \text{CH}_3$ 反応における反応速度定数の測定結果は, イオン-極性分子反応における極性分子の回転準位分布の重要性を示すものであり, 熱平衡状態ではない星間物質の化学進化シミュレーションでは, 極性分子の回転準位分布を考慮すべき場合があることを示唆している。

一方, 共同研究者の南部はイオン分子反応の速度定数, 分岐比などの情報を得るための反応動力学計算コードの開発を進展させた。まず, イオン-極性分子反応系における反応動力学計算に必要な初期条件 (座標・運動量) の決定法を特定し, 独自開発した *ab initio* 分子動力学計算プログラムによる動力学計算の準備を完了した。その応用として, $\text{CH}_3\text{CN}-\text{O}_2^+$ 反応系において, 宇宙空間に漂う二分子状態を再現する方法を考案した。量子化学計算を実施した結果, 二つの分子はコンプレックスを作り, 分子振動と分子間振動を続ける運動を行い, O_2^+ が二重に縮退した電子状態となることが分かった。 O_2^+ は CH_3CN に近づいては電子状態が二つに分離し, その二つの電子状態間で非断熱遷移を繰り返す結果となった。特に解離反応や異性化反応は起こらず, 深いポテンシャル井戸に分子コンプレックスが捕らわれ, 回転を続けることがわかった。一方, Bunkerらによる A + BC Trajectory program を発掘し, 研究室で開発されてきた非断熱非経験分子動力学プログラムに組み込む作業を実施した。また, 一重項・三重項間に現れる項間交差の非断熱現象を取り込む公式の開発に成功した。これまで Zhu-Nakamura 非断熱公式を利用していたが, NT 型および LZ 型擬交差においての項間交差では遷移確率がほぼ 0 となり, 実験とは全く異なる矛盾した結果を与えることが判明した。そこで, ZN 公式とは異なる透熱表現を基とする Yu らの Global-switching 法を新たに用いた。その結果, Rosen-Zener 型の交差において, 遷移確率が大きくなることが判明した。上記の結果に基づき, 一重項・三重項間に現れる項間交差の非断熱現象を取り込むプログラムの開発に成功した。プログラムの性能評価を目的に, アンモニア分子の第一電子励起状態への遷移による光解離過程の古典軌道計算 (1000 個) を実施し, 統計解析を行った結果, 約 6% の古典軌道が三重項状態を経て解離することが判明した。また, 強い燐光を放つ化学発光分子のシミュレーションに成功した。

以上の成果をまとめると, 星間分子生成で重要とされる低温イオン-極性分子反応の反応速度定数の並進・回転温度依存性の測定に成功し, 反応速度定数における極性分子の回転準位分布依存性の重要性を実験的に初めて明らかにした。また, 反応速度定数と分岐比の評価及び反応機構の解明に必要な非断熱現象を取り込んだイオン-分子反応の反応動力学計算コードの開発に成功し, 実験結果との比較及び反応機構の解明に向けて重要な進展が得られた。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計9件（うち査読付論文 9件/うち国際共著 3件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Kunihiro Okada, Kazuhiro Sakimoto, Yusuke Takada, and Hans A. Schuessler	4. 巻 153
2. 論文標題 A study of the translational temperature dependence of the reaction rate constant between CH ₃ CN and Ne ⁺ at low temperatures	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 124305 1-9
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1063/5.0013807	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Tianlong Jiang, Kenta Moriwaki, Osamu Kobayashi, Kazuya Ishimura, Sebastian O. Danielache, Shinkoh Nanbu	4. 巻 41
2. 論文標題 Theoretical analysis of the kinetic isotope effect on carboxylation in RubisCO	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 J. Comput. Chem.	6. 最初と最後の頁 1116-1123
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1002/jcc.26156	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Tianlong Jiang, Tamao Saito, Shinkoh Nanbu	4. 巻 92
2. 論文標題 Theoretical Molecular Dynamics Simulation of the DIF-1 Receptor Activation,	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Bull. Chem. Soc. Jpn.	6. 最初と最後の頁 1436-1443
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1246/bcsj.20190071	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Manabu Nakazono, Shinkoh Nanbu, Takeyuki Akita, Kenji Hamase	4. 巻 170
2. 論文標題 Synthesis, chemiluminescence, and application of 2,4-disubstituted phenyl 10-methyl-10 4-acridine-9-carboxylates	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Dyes and Pigments	6. 最初と最後の頁 107628(6 pages)
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.dyepig. 2019.107628	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Karolis Sarka, Shinkoh Nanbu,	4. 巻 123
2. 論文標題 Total Absorption Cross Section for UV Excitation of Sulfur Monoxide	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 J. Phys. Chem. A	6. 最初と最後の頁 3697-3702
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.9b01921	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Karolis Sarka, Sebastian O. Danielache, Alexey Kondorskiy, and Shinkoh Nanbu	4. 巻 516
2. 論文標題 Theoretical study of electronic properties and isotope effects in the UV absorption spectrum of disulfur	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 108-115
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.chemphys.2018.08.045	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 K. Sakimoto	4. 巻 98
2. 論文標題 Exotic molecules consisting of an antiproton and a hydrogen atom	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Phys. Rev. A	6. 最初と最後の頁 042503 1-14
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevA.98.042503	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 K. Sarka, S. Danielache, A. Kondorskiy, S. Nanbu	4. 巻 516
2. 論文標題 Theoretical study of electronic properties and isotope effects in the UV absorption spectrum of disulfur	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 108-155
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.chemphys.2018.08.045	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Okada Kunihiro, Sakimoto Kazuhiro, Schuessler Hans A.	4. 巻 126
2. 論文標題 Rotational Cooling Effect on the Rate Constant in the CH ₃ F + Ca ⁺ Reaction at Low Collision Energies	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 4881 ~ 4890
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.2c01063	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計24件 (うち招待講演 6件 / うち国際学会 7件)

1. 発表者名 Kunihiro Okada
2. 発表標題 An experimental study of cold ion-polar molecule reactions toward the application to astrochemistry
3. 学会等名 Pacifichem2021 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Kunihiro Okada, Tomoya Nakamura, Kazuhiro Sakimoto
2. 発表標題 Rotational cooling effect on the reaction rate constant of translationally cold Ca ⁺ + CH ₃ F CaF ⁺ + CH ₃ reaction
3. 学会等名 International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 岡田邦宏, 木村直樹, 崎本一博
2. 発表標題 冷却多重極線形イオントラップを用いた低温イオン-極性分子反応測定装置の開発
3. 学会等名 日本物理学会2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 村上龍大, 南部伸孝
2. 発表標題 ab initio 分子動力学法による熱活性化遅延蛍光分子の光化学反応機構の理論的研究
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 高久ゆりか, 南部伸孝
2. 発表標題 メチルアミンの真空紫外光解離過程における非断熱非経験的分子ダイナミク
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 神山昇大, 南部伸孝
2. 発表標題 アクリジニウムエステル of 化学発光機構に現れる項間交差過程における溶媒効果の理論的研究
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 南部伸孝
2. 発表標題 凝縮相における化学反応動力学
3. 学会等名 化学反応経路探索のニューフロンティア2021研究会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 S. Nanbu
2. 発表標題 Chemical Reaction Dynamics in Condensed phase
3. 学会等名 さくらサイエンス(日本-タイ)ワークショップ(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 岡田 邦宏, 高山 俊弘, 崎本 一博
2. 発表標題 極性分子の回転温度冷却を目的とした 冷却バッファーガスセルの開発
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 岡田 邦宏, 崎本 一博
2. 発表標題 温度可変シュタルク分子速度フィルターを用いたイオン-極性分子反応の温度依存性の測定
3. 学会等名 原子衝突学会第44回年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 K. Okada, S. Okazaki, K. Manba, K. Sakimoto
2. 発表標題 Reaction-rate measurements of cold ion-polar molecule reactions using a temperature variable wavy Stark velocity lter
3. 学会等名 31st International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC XXXI) (Deauville, France, from 23 to 30 July 2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 S. Nanbu
2. 発表標題 Nonadiabatic ab initio Molecular Dynamics of Photoisomerization Reaction in Solution
3. 学会等名 International Conference on Theoretical and High-Performance Computational Chemistry(Guiyang, P.R. China, November 2- 5, 2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Karolis Sarka, S. Nanbu
2. 発表標題 Calculation of quantum exact UV absorption cross-sections for interstellar and atmospheric chemistry
3. 学会等名 XV International workshop on quantum reactive scattering (QRS2019 Workshop) (Saitama Univ., Saitama, Japan, July 1-5, 2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 岡田邦宏
2. 発表標題 星間空間イオン - 極性分子反応の実験的研究の進展
3. 学会等名 日本物理学会第74回年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 崎本一博
2. 発表標題 イオン・ダイポール相互作用による共鳴散乱
3. 学会等名 日本物理学会第74回年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 崎本一博
2. 発表標題 反陽子と水素原子は分子として結合できるか？
3. 学会等名 日本物理学会2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Karolis SARKA and Shinkoh NANBU
2. 発表標題 Time-independent approach for fine-structure calculations in electronic spectra
3. 学会等名 Workshop on Interstellar Matter 2018 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 岡田邦宏, 菅田一輝, 木村直樹, 崎本一博
2. 発表標題 低速エタノール分子線とバッファーガス冷却Ca ⁺ イオンによる低温イオン-極性分子反応の実験的研究
3. 学会等名 日本物理学会2023年春季大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 岡田邦宏, 崎本一博, H. A. Schuessler
2. 発表標題 低速極性分子線とバッファーガス冷却イオンを組合わせた低温イオン-極性分子反応の研究
3. 学会等名 日本物理学会2022年秋季大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 木村直樹, 岡田邦宏, 崎本一博
2. 発表標題 冷却多重極線形イオントラップを用いた低温イオン-極性分子反応測定装置の開発II
3. 学会等名 日本物理学会2022年秋季大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 岡田邦宏, 崎本一博, H. A. Schuessler
2. 発表標題 低エネルギーイオン-極性分子反応における回転温度冷却効果の観測
3. 学会等名 原子衝突学会第47回年会 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 K. Okada, Y. Murayama, N. Kimura, K. Sakimoto
2. 発表標題 Experimental study toward the measurements of rotational state dependence of interstellar ion-polar molecule reactions at low temperatures
3. 学会等名 Workshop on Interstellar Matter 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 高久 ゆりか, 南部 伸孝
2. 発表標題 メチルアミンのS2状態からの真空紫外光解離過程に対する非断熱非経験的分子ダイナミクス
3. 学会等名 2022年分子科学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 神山 昇大, 高久 ゆりか, 村上 龍大, 南部 伸孝
2. 発表標題 アクリジニウムエステル誘導体の化学発光機構に現れる項間交差過程における溶媒効果の理論的解析
3. 学会等名 2022年分子科学討論会
4. 発表年 2022年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 T. MURAKAMI and S. NANBU	4. 発行年 2023年
2. 出版社 Jenny Stanford Publishing	5. 総ページ数 504
3. 書名 Time-Dependent Density Functional Theory: Nonadiabatic Molecular Dynamics, Chapter 1	

〔産業財産権〕

〔その他〕

上智大学理工学部・原子物理研究室 http://www.ph.sophia.ac.jp/~ttak-ken/ 上智大学・南部研究室 http://pweb.cc.sophia.ac.jp/nanbu_lab/index.html Matter-AntiMatter Reaction http://antimatter.isas.jaxa.jp/

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	南部 伸孝 (Nambu Shinkoh) (00249955)	上智大学・理工学部・教授 (32621)	

6. 研究組織（つづき）

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	崎本 一博 (Sakimoto Kazuhiro) (60170627)	国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構・宇宙科学研究所・助教 (82645)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関