

令和 6 年 6 月 12 日現在

機関番号：34419

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2020～2023

課題番号：20K05438

研究課題名（和文）フラーレンC60の赤外発光メカニズムと宇宙存在度

研究課題名（英文）Infrared emission mechanism of fullerene C60 and its cosmic abundance

研究代表者

若林 知成（Wakabayashi, Tomonari）

近畿大学・理工学部・教授

研究者番号：30273428

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,400,000円

研究成果の概要（和文）：フラーレンC60の宇宙存在度の算定に関連して、C60薄膜の赤外発光スペクトル測定を実施するとともに、発光強度の温度依存性に関する理論的解析を行った。室温から90℃の範囲におけるC60分子の4本の赤外発光バンド強度の温度依存性について実験と理論のよい一致を示すことができた。実験室における分子の赤外発光スペクトル測定という新たな研究に途を拓くと同時に、星間物質関連分子の定量的研究に寄与することが期待される。この研究成果は米国物理学会のPhys. Rev. B 109, 035409 (2024)に掲載された。

研究成果の学術的意義や社会的意義

2010年に惑星状星雲の赤外発光スペクトルにおいて存在が明らかになったフラーレンC60だが、存在量については算定の根拠となる基礎的なデータが確立されていなかった。本研究では、実験室データを定量的に解析するための理論的枠組みを明確に示すことに成功した。これにより、なぜC60分子の赤外発光バンド強度が温度によってどのように変化するかをその理由とともに示すことができた。本研究が示す実験手法と解析方法はC60のみならず他の分子にも適用可能であることから、今後の発展が期待される。

研究成果の概要（英文）：In relation to estimation of the abundance of cosmic fullerene C60, laboratory measurements of infrared (IR) emission spectra of C60 thin films were conducted and theoretical analyses of temperature dependence of the IR emission band intensities were performed. Within the range between ambient temperatures and 90°C, temperature dependence of the four IR-active emission bands of C60 showed excellent agreement between experiments and theory. This work opened the way of experimental and theoretical studies on molecular IR emission and is expected to be applied to researches of cosmic abundance of molecules in space. The achievement of this study has been published in the APS journal of Phys. Rev. B, Vol. 109, 035409 (2024).

研究分野：物理化学，分子分光學，星間分子化学，ナノサイエンス

キーワード：赤外発光スペクトル 振動スペクトル 温度依存性 分子対称性 ボルツマン分布 自然放出

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。

### 1. 研究開始当初の背景

【惑星状星雲の C<sub>60</sub> と C<sub>70</sub>】2010年にさいだん座の惑星状星雲(Tc1)で観測された赤外発光バンドがフラレーン C<sub>60</sub>とその類縁体 C<sub>70</sub>に帰属されて以来(図1)[1]、複数の天体で同様の赤外発光バンドが観測され、宇宙空間における C<sub>60</sub>の存在量に注目が集まっている。惑星状星雲 Tc1に関する初期の見積りでは、中性の C<sub>60</sub>分子の存在量として太陽質量の  $5.8 \times 10^{-8}$  という値が報告されており[1]、水素が豊富とされる星間空間において炭素のみからなる単一の分子種が占める割合としてはかなり多い印象がもたれている。逆に、高融点の炭素質ダストは生成過程で水素が排除される可能性があり、もともと大きな存在量が見込まれることから、フラレーン C<sub>60</sub>が相当量あってもおかしくないとする見方もある。

こうした相反する議論がある一方で、存在量を推定するうえで前提となる仮定がいくつも含まれており、推定値そのものが大きな不確定因子を抱えていることも事実である。

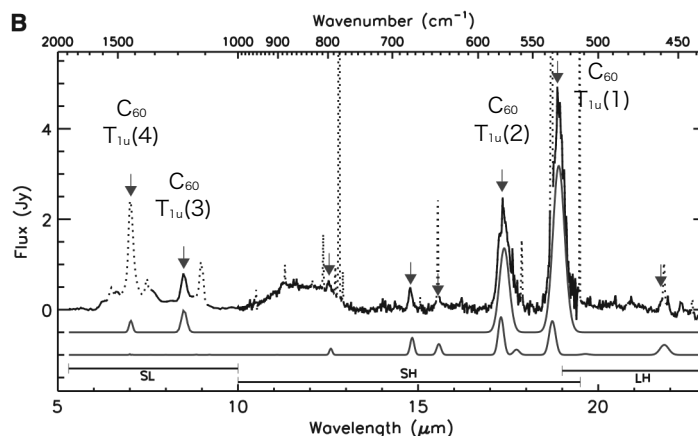


図1. 惑星状星雲 Tc1 の赤外発光スペクトル[1].

[1] J. Cami, J. Bernard-Salas, E. Peeters, and S. E. Malek, Detection of C<sub>60</sub> and C<sub>70</sub> in a Young Planetary Nebula. *Science* **329** (2010) 1180.

### 2. 研究の目的

本研究では、C<sub>60</sub>分子の存在量を赤外発光スペクトルから評価するうえで基礎となる分光学的データを再評価するとともに、赤外発光のメカニズムを分子科学的な観点から整理することにより、C<sub>60</sub>の宇宙存在度の見積りの精度向上に寄与することを目的とした。実験室データの少ない赤外線領域での発光スペクトル測定を実施するとともに、発光強度の定量的な評価に必要な理論的枠組みを構築することによって、フラレーン C<sub>60</sub>の赤外発光強度がなぜ、そしてどのように温度変化するのかを明らかにすることを目指した。

### 3. 研究の方法

#### ～～～ 実験 ～～～

【測定系の構築】試料となる C<sub>60</sub>分子の赤外発光スペクトルを測定するために、市販のフーリエ変換型赤外分光光度計(FTIR : Nicolet Magna 750)に必要な改良を加えた。分光器本体の外側に試料を置き、試料が放つ赤外線を金コートした凹面鏡で集光しながら FTIR 内部の干渉計に導いた(図2)。試料の位置が吸収測定に用いる内部光源と対称な位置関係になるように分光器内の光路上にアルミコートした反射鏡を置き、試料を外部光源とするパワースペクトルを測定した。

試料の温度調整を可能にするため、銅製のホルダーにヒーター線を巻き、通電することによって試料を加熱した。試料サイズは直径 15 mm とし、ビーム径は試料の位置で直径 8 mm 程度になるようにアパーチャーで調節した。試料の背後に高温部分があると、そこから発せられる赤外線がスペクトルを歪めるとともに、その赤外線を試料が吸収して目的の発光スペクトル強度が正確に測定できない事態を想定した。そこで、中心に直径 10 mm の穴の開いた試料ホルダーを用いることにした。

赤外分光において常に問題となる大気中の水蒸気と二酸化炭素による吸収の影響を抑えるため、試料と分光器を含む測定系全体をアクリルボックス内に収納し、窒素ガス発生装置(Iwatani GN-20)からの乾燥窒素ガス(毎分 20 L, 残留酸素 約 0.5%)を送り込んでページした。

【検出器の冷却】C<sub>60</sub>の4本の赤外吸収バンドのうち最も振動数が低いモードが 525 cm<sup>-1</sup>である。この低振動数モードの検出を問題なく行うため、装置内の DTGS 検出器をそのまま用いることにした。対応するビームスプリッターは臭化カリウム(KBr)である。実験開始後、室温から 50°C 付近までの信号が逆向きの負の値として表示されるなどの事象がみられたため、原因を探ったところ、赤外放射が周囲のそれと強度的に釣り合った場合に干渉成分が小さくなり、インターフェログラムの起点が定まらないことが判った。そこで、室温付近においても検出感度を確保する

ために、DTGS 検出器を固定しているホルダーにアルミ製の水冷ブロックを密着させ、そこに 5°C に冷却した不凍液を循環させた。これにより、室温付近まで赤外スペクトルを正常に測定することが可能になった。

【試料の形態】試料の背後にある物質が同じ温度に加熱されて赤外線を放つことを避ける目的で、当初は C<sub>60</sub> のみからなる板状の試料を用いた。C<sub>60</sub> 粉末をモールドに入れてプレス機で押し固めたものである。直径 15 mm、厚さ約 0.2 mm ほどの試料を崩れないようにそっとホルダーにおいて測定することができた。

その結果、得られたスペクトルは C<sub>60</sub> 分子由来の比較的鋭いバンド形状を示したものの、許容遷移のバンドに明らかな飽和がみられるなど、強度の定量に耐えるスペクトルではなかった。試料が厚すぎることが判明した。

次に、厚さ 0.001 mm 程度の薄膜を試料として作製するために、真空蒸着装置を立ち上げた。まず、KBr ペレットを作製してその表面に C<sub>60</sub> を蒸着し、KBr を水に溶解して C<sub>60</sub> 薄膜を銅リングですくい取ってフリースタANDING の C<sub>60</sub> 薄膜を得ようと試みたが、膜厚の薄い固体ではすぐに亀裂が生じて割れてしまった。樹脂基板に蒸着した後に、銅リングに転写する方法なども試したが、いずれもうまくいかなかった。

最終的に透明性の高い KBr の窓板(直径 15.0 mm、厚さ 1.0 mm)を業者から購入してその表面に C<sub>60</sub> を真空蒸着して生成した薄膜を KBr 基板ごと試料として用いることで、薄い試料が必要な点と背後の物質の赤外線の影響を抑える点の 2 つの問題を解決することができた。より薄く強度の高いフッ化カルシウム CaF<sub>2</sub> 基板(厚さ 0.5 mm)も試したが、800 cm<sup>-1</sup> 以下の振動数においてそれ自身の赤外放射が強すぎて目的にかなわなかった。以降、KBr 基板に蒸着した C<sub>60</sub> 薄膜を試料に用いることにした。

C<sub>60</sub> 薄膜の利点として、(1) 凝縮相の物質であり、赤外線プローブが照射される狭い領域に分光に必要な物質量が存在すること、(2) 固体試料なので温度が変化しても物質量が一定であり、定量的な解析が可能になること、(3) 分子性結晶なので分子間の相互作用が小さく、個々の分子の性質に基づいてスペクトルの解釈が可能であること、などが挙げられる。

【黒鉛と KBr 基板の測定】生データとして記録される赤外線パワースペクトルには、検出器の感度、ミラーの反射率、ビームスプリッターの透過率、これらの波長依存性が装置関数として含まれる。パワースペクトルの縦軸をエネルギーに基づく物理量に変換するには強度の校正手段が必要である。そこで、試料と同じサイズの黒鉛板を用意し、試料と置き換えてその赤外放射スペクトルを各温度において測定することにした。黒鉛の赤外放射スペクトルを各温度における黒体輻射とみなして強度の変換を行うためである。また、KBr 基板のみのスペクトルも各温度で測定し、ブロードなバックグラウンドの補正を行った。

【試料の温度制御】当初は試料ホルダーに巻いたヒーター線に直流電圧をかけて通電し、その電力に応じた平衡温度を熱電対で測定して実測値とした。しかし、おなじ電力で加熱した場合の試料表面の温度が KBr 試料と黒鉛板では系統的に異なることが判った。この違いは熱伝導率と放射率の違いによる。その後、試料ホルダーの更新にあわせて交流電源と固体式半導体リレーを組み合わせたフィードバック式の温度制御装置に置き換えている。

銅製の試料ホルダーは 200°C 付近から表面の酸化が進み、黒く変色して赤外線のバックグラウンドに変化を与えることが判った。そこで、高温でも表面が劣化しにくい白金板を試料が接する部分とその周囲に貼り付けた。これにより、400°C を超える温度まで、バックグラウンドに変化を生じることなく測定が可能になった。現在までに、試料ホルダーは銅製からアルミブロックに、ヒーター線は 3D プリンター用のカートリッジヒーターにそれぞれ置き換えられている。これらの改良により C<sub>60</sub> の昇華温度まで安定的に温度変化の測定ができるようになった。

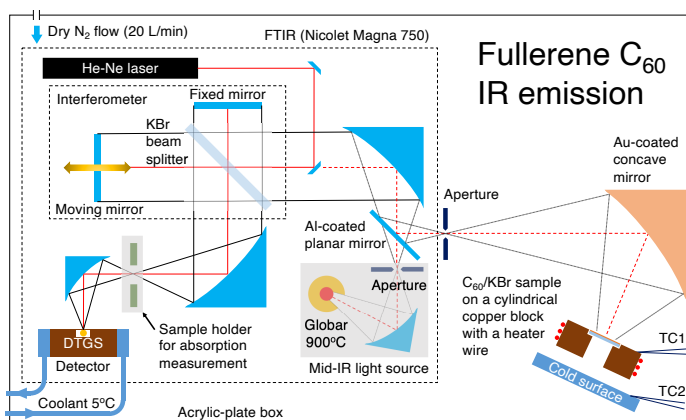


図 2. C<sub>60</sub> 薄膜の赤外発光スペクトル測定装置。

～～～ 理論 ～～～

【自然放出過程の定式化】自然放出のレートはアインシュタインの A 係数によって評価される。A 係数は誘導放出と誘導吸収の B 係数と定量的な関係があるが、変数に何を选ぶかによって係数や変数の依存性など表式が異なる。本研究では赤外分光実験を波数単位(cm<sup>-1</sup>)で行うことから、これを変数に選んで定式化した。まず、分子軌道計算プログラムで出力される赤外バンド強度を B 係数と関連づけたうえで、これを A 係数に変換し、調和振動解析で得られた基準振動モードの振動数とあわせて発光レートを計算した。

【統計的な取り扱いの必要性】C<sub>60</sub> 分子の赤外発光は室温以上の高い温度で観測されるため、その解析には振動励起状態の熱平衡分布を考慮する必要がある、必然的に統計的な解析となる。本研究では、平均化したモデルに頼らず、すべての振動励起状態を網羅的に数え上げたうえで、そのボルツマン分布に基づく赤外発光強度のシミュレーションを実行することにした。

その手順としては、(1) 調和振動解析に基づく基準振動モードの振動数と縮重度の計算、(2) 基準振動の組み合わせに基づく倍音と結合音の振動準位に関する励起エネルギーと縮重度のリスト化、(3) 振動準位の励起エネルギーと縮重度の振動状態密度(vibrational DOS)への変換、(4) 状態密度にボルツマン分布をかけ、さらに状態ごとの赤外発光強度で重みをつけることによる各温度における赤外発光スペクトルのシミュレーションという流れになる。手順(1)から(3)までは C<sub>60</sub> 分子の性質の明示的な考慮、手順(4)で多数の C<sub>60</sub> 分子からなるアンサンブルの統計的な振る舞いを評価する。

理想的には、十分高い励起エネルギーのレベルでカットオフを設定して、それより低い励起エネルギーの振動準位をすべて対象とすべきだが、数え上げの手順の都合により本研究では 1 量子励起から 7 量子励起までの振動エネルギー準位をすべて数えることにした。励起エネルギー 1863 cm<sup>-1</sup> までは倍音と結合音まで含めて振動励起状態のリストは完全であるが、それ以上の励起エネルギーでは励起状態に漏れがある。このことに注意して解釈をする必要があるが、6 量子励起までのシミュレーションと 7 量子励起までのシミュレーションにおいて、発光強度の絶対値に違いはあるものの、振動モード間の相対強度の温度変化は 360 K までの範囲でよく一致することを確認している。以下に具体的な手順を挙げる。

- (1) **C<sub>60</sub> 分子の調和振動解析** : Gaussian 16, Revision C.01 を用いて C<sub>60</sub> 分子の構造最適化と調和振動解析を行い、46 個の基準振動モードについて調和振動数と縮重度を得た。
- (2) **倍音と結合音のリスト作成** : プログラミング言語 C++を用いて、調和振動数と縮重度を基礎データとして読み込んだうえで、それらの組み合わせによって生じる倍音と結合音の振動励起準位を 7 量子励起まですべてリストアップする計算プログラムを作成し、これを実行した。生成した準位は 1 億 5 千万以上で、縮重度をかけた状態の総数は 1.1 兆を超える。これらのリストは 3 つのファイルに分割されており、合計 8 GB になる。
- (3) **状態密度 DOS への変換** : 生成した振動励起準位をその縮重度を考慮しながら励起エネルギーに対する状態密度に変換した。これも C++でプログラムを書いて実行した。励起エネルギー 12000 cm<sup>-1</sup> までの範囲を 1 cm<sup>-1</sup> 間隔でカテゴリ化した。C<sub>60</sub> 分子の 46 個の基準振動モードのうち、赤外活性モードは 3 重縮重の T<sub>1u</sub> モード 4 つしかない。したがって、多くの振動励起状態が赤外線を放出しないサイレント準位である。そこで、4 つの赤外活性モードのいずれかが 1 量子以上励起された基音、倍音、結合音をモードごとに積算した状態密度も T<sub>1u</sub>(1)から T<sub>1u</sub>(4)についてそれぞれ求めた。
- (4) **赤外発光スペクトルのシミュレーション** : リストアップした振動励起準位から生成した状態密度 DOS にボルツマン因子をかけ、それらの和をとって分配関数を計算することで各温度におけるボルツマン分布を求めた。これに、各状態の赤外発光強度をかけて発光スペクトルをシミュレートした。

#### 4. 研究成果

【**固体の赤外スペクトル**】 C<sub>60</sub> 粉末または C<sub>70</sub> 粉末を押し固めたペレット(厚さ約 0.2 mm)を用いた測定では、それぞれ分子性の発光バンドが多数観測されたものの、期待された赤外活性モードの信号は飽和しており、強度の定量が困難であることがわかった。本質的に強度の弱い倍音や結合音の信号が相対的に強く観測された。試料自身の自己吸収による効果が顕著に現れたためであり、バンドごとに光学的な厚みが異なることがわかった。C<sub>60</sub> 固体と C<sub>70</sub> 固体の赤外発光スペクトルの比較では、800 cm<sup>-1</sup> 以下の低振動数モードを中心に C<sub>70</sub> 分子の方が多くの赤外活性モードをもつことを確認することができた。また、C<sub>60</sub> の倍音と結合音の振動数は、薄膜にみられる弱い吸収帯の振動数に一致した。

【**C<sub>60</sub> 薄膜の赤外スペクトル**】 KBr 基板に蒸着した C<sub>60</sub> 薄膜は、赤外吸収スペクトルを測定した際のベースラインのうねりの周期から膜厚を計算することが可能である。厚さ 0.54 mm の試料では T<sub>1u</sub> モードの 4 本の吸収バンドが明確に現れ、最も強い T<sub>1u</sub>(1)の吸光度でもピーク値で 0.34 程度であった。この場合、倍音や結合音に由来する二次の吸収バンドは二、三を除いてほぼピークとして現れない。

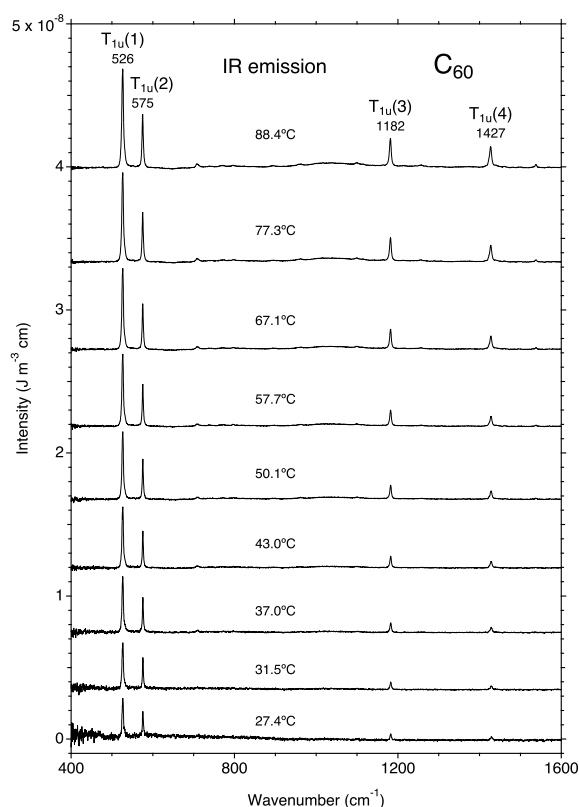


図 3. C<sub>60</sub> 薄膜の赤外発光スペクトル。

次に、同じ  $C_{60}/KBr$  試料を加熱した際の赤外発光スペクトルを測定した。ブロードなバックグラウンドの上に吸収スペクトルと同じ振動数の位置に  $T_{1u}$ モードに由来する4本の発光バンドが現れていることを確認した。これらの強度比は吸収スペクトルに似て最も低振動数側の  $T_{1u}(1)$ が一番強い点は共通しているが、高振動数側の  $T_{1u}(3)$ と  $T_{1u}(4)$ を比較すると、吸収では(4)の方が強いが発光では逆に(3)の方が強くなっているなど、定量的な違いがあった。これは、振動数の異なるモードの発光強度が試料分子の振動温度によって本質的に変化することによって由来する。

発光スペクトルの測定データは装置関数を含んだ強度スペクトルである。これを輻射エネルギーの関数に校正するために、同じ加熱条件において疑似黒体としての黒鉛の赤外スペクトルを測定した。また、試料スペクトルの幅広いバックグラウンドを補正するために、 $KBr$ 基板のみのスペクトルも別途測定した。すなわち、同じ形状(直径 15.0 mm、厚さ 1.0 mm)の  $C_{60}/KBr$  試料、黒鉛、 $KBr$  基板の3種類の赤外発光スペクトルを  $27^{\circ}C$ – $88^{\circ}C$ の範囲でそれぞれ測定した。

【温度依存性】図3は各温度で測定した  $C_{60}$  薄膜の赤外発光スペクトルである。バックグラウンドを補正したうえで、縦軸を単位波数( $cm^{-1}$ )あたりの輻射エネルギー密度( $J m^{-3} cm$ )に校正してある。4つの  $T_{1u}$ モードに着目すると、いずれも温度の上昇とともに発光強度が増加しているが、高振動数モード  $T_{1u}(3)$ と  $T_{1u}(4)$ の方が、低振動数モード  $T_{1u}(1)$ と  $T_{1u}(2)$ よりも温度上昇に伴う強度増加がより顕著であることがわかる。黒体放射と同様に、高温条件において高振動励起状態からの発光の寄与が増してくることを示している。発光バンドの面積強度( $J m^{-3}$ )を温度に対してプロットしたところ、室温から  $90^{\circ}C$ 付近にかけて強度はいずれも増加し、 $T_{1u}(1)$ で3倍程度、 $T_{1u}(3)$ で数倍に変化することが定量的に明らかになった。

【発光強度シミュレーション】7量子励起状態まで考慮した振動状態密度にボルツマン分布を適用し、赤外活性モードごとに発光レートと光子エネルギーおよびアボガドロ数をかけて、50 K から 400 K の温度範囲で発光強度を計算した。図4は、各温度でシミュレートした赤外活性モードごとの発光バンド強度を温度に対してプロットしたものである。

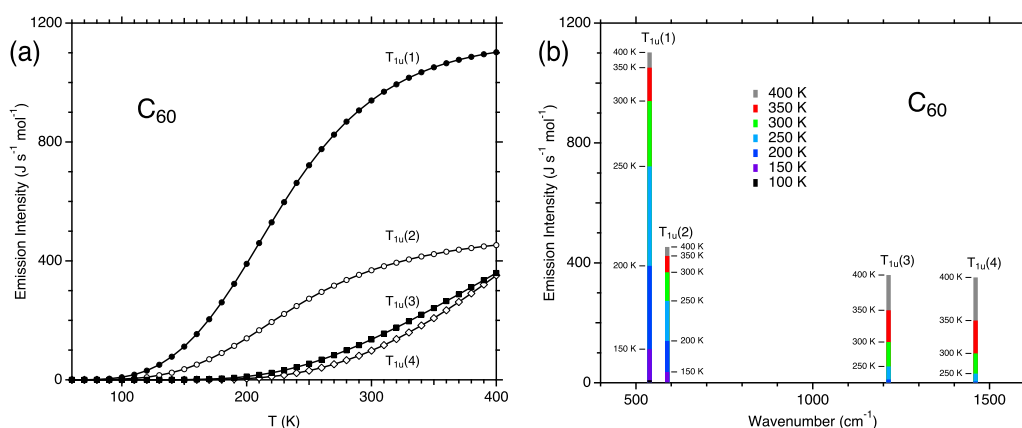


図4.  $C_{60}$  の4つの  $T_{1u}$  モードの赤外発光シミュレーション。

200 K 以下では  $2000 cm^{-1}$  以下の励起準位に分子の占有数が集中し、高い振動数の  $T_{1u}(3)$ と  $T_{1u}(4)$ の発光バンドは  $T_{1u}(1)$ と  $T_{1u}(2)$ に比べると無視できるほど強度が小さい。250 K 以上で  $T_{1u}(3)$ と  $T_{1u}(4)$ の発光バンドが明確にみられるようになり、300 K から 400 K に温度が上がるにつれて、より大きく強度が増す。室温付近では、 $2000 cm^{-1}$  から  $4000 cm^{-1}$  の励起エネルギーをもった  $C_{60}$  分子からの発光が主要になり、発光バンドの大部分が倍音準位と結合音準位の寄与であることがわかった。

図4(a)は各温度でシミュレートされたモードごとの発光バンド強度を温度に対してプロットしたものである。図4(b)は同じデータを振動数に対して重ねて表示したスペクトルである。4つの  $T_{1u}$ モードの発光強度が温度に応じてそれぞれ変化する様子がわかる。このシミュレーションにおいて350 K のバンド強度の相対値は、実験で得られた350 K のバンド強度の比(図3)とよく一致する。

図3の実験と図4の理論において絶対値を直接比較するにはさらなる検討を要するが、4つの振動モードの相対強度に関してはエネルギーベースで比較が可能である。各温度において  $T_{1u}(3)$ の強度を1に規格化した場合の  $T_{1u}(1)$ ~ $T_{1u}(4)$ の相対強度の比較では、基準となる  $T_{1u}(3)$ より振動数の低い  $T_{1u}(1)$ と  $T_{1u}(2)$ は温度とともに相対強度が下がり、 $T_{1u}(3)$ より振動数の高い  $T_{1u}(4)$ は相対強度が上がっていることが示され、実験と理論がよく一致することが確認された。

以上の考察から、本研究によって  $C_{60}$  の4つの発光バンドの強度が温度とともに系統的に変化する様子をその物理的な理由とともに明らかにすることができた。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計7件（うち査読付論文 7件/うち国際共著 3件/うちオープンアクセス 4件）

1. 著者名 Wakabayashi Tomonari, Suzuki Hal, Hatanaka Miho, Wakabayashi Hiroyuki, Kodama Takeshi	4. 巻 109
2. 論文標題 Infrared emission spectra of fullerene C60 thin films	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 035409(1-11)
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.109.035409	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 Maejima M., Shiromaru H., Kikuchi K., Kodama T., Wakabayashi T.	4. 巻 9
2. 論文標題 N@C60 formation by laser-induced breakdown in nitrogen gas flow	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Carbon Trends	6. 最初と最後の頁 100212 ~ 100212
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.cartre.2022.100212	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Wada Yoriko, Akagi Hiroshi, Kumada Takayuki, Itakura Ryuji, Wakabayashi Tomonari	4. 巻 2
2. 論文標題 Mass-Resolved Momentum Imaging of Three Dichloroethylene Isomers by Femtosecond Laser-Induced Coulomb Explosion	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Photochem	6. 最初と最後の頁 798 ~ 809
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.3390/photochem2030051	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Wakabayashi Tomonari, Szczepaniak Urszula, Tanaka Kaito, Saito Satomi, Fukumoto Keisuke, Ohnishi Riku, Ozaki Kazunori, Yamamoto Taro, Suzuki Hal, Guillemain Jean-Claude, Shiromaru Haruo, Kodama Takeshi, Hatanaka Miho	4. 巻 2
2. 論文標題 Phosphorescence of hydrogen-capped Linear polyynes C8H2, C10H2 and C12H2 in solid hexane matrices at 20 K	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Photochem	6. 最初と最後の頁 181 ~ 201
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.3390/photochem2010014	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 該当する

1. 著者名 Tomonari Wakabayashi, Urszula Szczepaniak, Kaito Tanaka, Satomi Saito, Keisuke Fukumoto, Riku Ohnishi, Kazunori Ozaki, Taro Yamamoto, Hal Suzuki, Jean-Claude Guillemin, Haruo Shiromaru, Takeshi Kodama, Miho Hatanaka	4. 巻 2
2. 論文標題 Phosphorescence of hydrogen-capped linear polyynes C <sub>8</sub> H <sub>2</sub> , C <sub>10</sub> H <sub>2</sub> and C <sub>12</sub> H <sub>2</sub> in solid hexane matrices at 20 K	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Photochem	6. 最初と最後の頁 181 - 201
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/photochem2010014	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 若林知成	4. 巻 301
2. 論文標題 ポリインの分光学的基礎と固体材料化の試み	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 炭素	6. 最初と最後の頁 18 - 29
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7209/tanso.2022.18	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 Szczepaniak Urszula, Ozaki Kazunori, Tanaka Kaito, Ohnishi Yuma, Wada Yoriko, Guillemin Jean-Claude, Crepin Claudine, Kolos Robert, Morisawa Yusuke, Suzuki Hal, Wakabayashi Tomonari	4. 巻 1214
2. 論文標題 Phosphorescence excitation mapping and vibrational spectroscopy of HC <sub>9</sub> N and HC <sub>11</sub> N cyanopolyynes in organic solvents	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Molecular Structure	6. 最初と最後の頁 128201 ~ 128201
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.molstruc.2020.128201	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13件 (うち招待講演 1件 / うち国際学会 4件)

1. 発表者名 T. Wakabayashi, H. Suzuki, M. Hatanaka, T. Kodama
2. 発表標題 Laboratory studies on the infrared emission spectra of fullerene C <sub>60</sub> thin films
3. 学会等名 Workshop on Interstellar Matter 2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Tomonari Wakabayashi, Koki Nakano, Miho Hatanaka, Takeshi Kodama
2. 発表標題 IR emission from vibrationally excited states of icosahedral fullerene C60
3. 学会等名 第65回 フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 大西 陸・福本圭祐・田中海斗・若林知成
2. 発表標題 ポリイン分子と炭素クラスターの光学遷移におけるフランク-コンドン解析
3. 学会等名 ナノ学会第20回大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Tomonari Wakabayashi, Yutaka Mukai, Kazuki Wakebe, Miho Hatanaka, Takeshi Kodama
2. 発表標題 Molecular IR emission of solid C60 and C70 fullerenes
3. 学会等名 Chemistry and Physics at Low Temperatures 2022 (CPLT2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Tomonari Wakabayashi, Urszula Szczepaniak, Jean-Claude Guillemin, Miho Hatanaka
2. 発表標題 Phosphorescence of hydrogen-capped polyynes in solid hexane matrices
3. 学会等名 Chemistry and Physics at Low Temperatures 2022 (CPLT2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年



1. 発表者名 若林知成・中野皇希・分部一樹・畑中美穂・兒玉 健
2. 発表標題 フラーレン薄膜の赤外発光スペクトル
3. 学会等名 第16回分子科学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 T. Wakabayashi, K. Nakano, M. Hatanaka, T. Kodama
2. 発表標題 Infrared emission spectra of fullerene C60 thin films
3. 学会等名 The 1st COST NanoSpace Joint Scientific Meeting (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 若林知成, 分部一樹, 畑中美穂, 兒玉健
2. 発表標題 Molecular IR emission of C60 and C70 thin plates
3. 学会等名 第61回フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 若林知成
2. 発表標題 Infrared spectroscopy of C60 molecules: From the laboratory detection to cosmic abundances
3. 学会等名 第59回フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 畑中美穂
2. 発表標題 発光材料の理論的設計：ランタノイド化合物を例に
3. 学会等名 ナノ学会合同部会シンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 若林知成、向井悠天、田中海斗、福本圭祐、畑中美穂、兒玉健
2. 発表標題 Simulation and measurement of the infrared emission spectra of C60
3. 学会等名 第60回フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 若林知成、向井悠天、田中海斗、福本圭祐
2. 発表標題 Phosphorescence excitation mapping of polyyne molecules isolated in solid acetonitrile at 20 K
3. 学会等名 第60回フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 田中海斗、峯山葵、大西陸、福本圭祐、若林知成
2. 発表標題 Molecular orbital calculations of small carbon molecules in the singlet and triplet states
3. 学会等名 第60回フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

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	畑中 美穂  (Hatanaka Miho)  (80616011)	慶應義塾大学・理工学部(矢上)・准教授   (32612)	
研究 分担者	兒玉 健  (Kodama Takeshi)  (20285092)	神奈川工科大学・公私立大学の部局等・教授   (32714)	

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
---------	---------