

令和 2 年 6 月 17 日現在

機関番号：15401

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2016～2019

課題番号：16H04098

研究課題名(和文)マイナーアクチノイド/ランタノイド分離に対する分子科学からの新展開

研究課題名(英文)Molecular-scientific studies on the separation of lanthanide/minor actinide in liquid phase

研究代表者

井口 佳哉 (Inokuchi, Yoshiya)

広島大学・理学研究科・教授

研究者番号：30311187

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 13,600,000円

研究成果の概要(和文)：原発からの高レベル放射性廃棄物を効率的に処理するために、溶媒抽出法によるランタノイド(Ln)/マイナーアクチノイド(MAn)の分離が行われているが、その分離の分子科学的なメカニズムは明らかになっていなかった。本研究では、LnやMAnと錯イオンを形成する有機配位子のチオール誘導体を合成し、金薄膜状に化学吸着させた。ここにLn水溶液を添加し、錯イオンを形成させ、その赤外スペクトルを表面増強赤外分光法により観測した。これにより、Ln/MAn錯イオン形成を赤外分光によって高感度に検出できること、またその赤外強度の濃度変化の測定により錯形成の平衡定数を決定できることが明らかとなった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究では、ランタノイド錯イオンの生成を赤外分光により検出可能であることを示した。この赤外スペクトルを解析することにより、錯イオンの配位構造や電子状態が明らかになる可能性がある。このことは、ランタノイド/マイナーアクチノイドの選択的分離の起源の分子科学的な解明につながる重要な結果であるといえる。選択的分離の起源が明らかになれば、その情報を有機配位子開発の現場へとフィードバックすることにより、より高選択的な分離が可能となる。その結果、高レベル放射性廃棄物の効率的な処理が可能となるため、その社会的意義は大きいといえる。

研究成果の概要(英文)：In this study, we investigate the structure of complexes formed between organic ligands and lanthanide ions by surface-enhanced infrared absorption (SEIRA) spectroscopy. We synthesize thiol derivatives of organic ligands, which are chemisorbed on a gold surface through the S-u covalent bond. Aqueous solutions of lanthanide ions are put on the gold surface, and lanthanide complexes are formed on the gold surface. Infrared spectra of the complexes are observed by SEIRA spectroscopy. Our experimental results demonstrate that the lanthanide complexes can be detected by SEIRA spectroscopy. In addition, we can determine the equilibrium constant for the complex formation by observing the concentration dependence on the IR band intensity.

研究分野：分子分光学

キーワード：高レベル放射性廃棄物 ランタノイド マイナーアクチノイド 溶媒抽出 表面増強赤外分光法 赤外分光

1. 研究開始当初の背景

クラウンエーテルなどに代表されるホスト分子は、ゲスト選択性を示すことが良く知られている。我々はこの数年来、ホスト・ゲスト錯体（特にクラウンエーテル）について、分子分光学的手法により、その電子状態、幾何構造、溶媒効果、ゲスト選択性について明らかにしてきた。この一連の研究により、ホスト・ゲスト錯体について、気相と溶液中で研究する方法論と実験手法の開発を行った。

この我々の研究方法を発展させ、次に取り組みたいと考えた系は、水溶液中のマイナーアクチノイド/ランタノイド分離の問題であった。原発からの高レベル放射性廃棄物（水溶液）には、ランタノイド（以下 Ln と略す）に加え、長寿命で放射性毒性の高いマイナーアクチノイド（ネプツニウム Np, アメリシウム Am, キュリウム Cm, 以下 MAn と略す）が含まれている。この高レベル放射性廃棄物をそのまま地層処分すると、数十万年～数百万年の単位でその危険性は持続し、かつ大量の廃棄物を処分する必要があることから、最終処分場の枯渇という問題が発生する。それに対し、この高レベル放射性廃棄物から MAn を選択的に分離し、これを核変換することによって、より短寿命、低毒性の核種へと変換する試みが続けられている（分離・核変換技術）。これにより、放射性廃棄物の毒性の持続時間を数百年単位まで短縮できる。また放射性廃棄物の量を 1/10 まで減らすことができるため、最終処分場の長期間にわたる確保も可能となり、地層処分を補完する技術として重要視されている。しかしこの処理を実現する上で非常に難しい問題のひとつは、水溶液中の MAn と Ln の分離である。MAn と Ln はその化学的性質が似ているために、これを選択的に分離することは容易ではない。これまでの研究では主に、有機化学の手法を用いて様々な有機配位子を合成し、より選択的に MAn の抽出を行うことをめざして研究が進められてきた。この先行研究の中で我々が注目したのは、MAn / Ln 選択性に関する次の 2 つの仮説であった（Jensen and Bond, *J. Am. Chem. Soc.*, 2002, 124, 9870 他）。

- ・ MAn, Ln が有機配位子と錯体を形成する場合、その f 電子が関与した共有結合が有機配位子との間で形成されている。
- ・ その共有結合性の有無が、MAn / Ln の選択的分離に関与している。

我々がこの数年来開発してきた方法では、錯体の電子状態、振動状態、幾何構造、ゲスト選択性に関する情報が得られることから、我々の手法を MAn, Ln と有機配位子の間に形成される錯イオンに適用すれば、その共有結合性、構造、選択性などを明らかにできるのではと考えた。

2. 研究の目的

本研究では、MAn, Ln と有機配位子の間に形成される錯イオンについて、分子科学的見地から、その電子状態、幾何構造、イオン選択性について研究を行う。これにより、高レベル放射性廃棄物中に含まれる MAn / Ln の分離能向上に対して分子論的指針を提示することを最終目標とした。錯イオンの分光学的情報を得る方法として、これまでに我々のグループで開発してきた表面増強赤外吸収分光法（SEIRA）を採用することとした。この高感度な赤外分光法を用いることにより、通常の赤外吸収分光よりも低濃度、微量なサンプル量での測定をめざした。MAn は、その強い放射性により、実験で取り扱うことのできる量に厳しい制限がある。これに対し我々は、赤外吸収の測定法として SEIRA を用いることにより、MAn にも適用可能な実験手法の実現をめざした。また、錯イオンの赤外スペクトルを観測し、その結果を量子化学計算を用いて解析することにより、錯イオンの幾何構造や電子状態を明らかにしたいと考えた。これにより、MAn / Ln の選択的分離と錯イオンの分子論的性質の間の因果関係を明らかにしたいと考え、研究を進めた。

3. 研究の方法

最初に、有機配位子のチオール化合物の合成を行った。これを、真空蒸着により形成した金薄膜上に化学吸着させる。この上に、Ln を含む水溶液を添加して、錯イオンを形成させた。この錯イオンの赤外スペクトルを、SEIRA により観測した。もし、イオンと配位子の間に共有結合が形成されていれば、赤外スペクトルにその共有結合に特有な振動が観測される。これにより、錯イオンの幾何構造、共有結合の有無について明らかにする。また、赤外吸収強度のイオン濃度依存性を測定することで、錯体形成の平衡定数を求めることを試みた。これにより、イオン選択的な錯体形成の有無について調べた。加えて、NEXAFS, XPS, CV（サイクリックボルタンメトリ）により、金薄膜上の配位子や錯イオンの数密度、配向などを決定し、イオン選択性との関係を明らかにすることもめざした。

上記の実験を解析するために、MAn, Ln のための密度汎関数法を用いて、錯イオンの構造やその電子スペクトル、赤外スペクトルの計算を行った。得られた構造の電子分布や、実験スペクトルと理論スペクトルとの比較から、錯イオンの電子状態、共有結合性について調べた。

4. 研究成果

本研究では、3種類の有機配位子の開発を行なった。これらの有機配位子において、錯形成で重要となっている骨格は、溶媒抽出の現場で実際に使用されているものであり、高選択的な分離が期待されるものである。これまでの溶媒抽出の研究により、MAn/Lnに配位する元素の種類(酸素、リン、窒素)によってその選択性が決まるとの経験則がある。そこで本研究では、酸素系、リン系、窒素系の有機配位子をそれぞれ合成し、その錯イオンについて研究を行うこととした。我々が有機合成した3種類の配位子は、それぞれ Diglycolamide (DGA), bis-2,4,4-trimethylpentyl phosphinic acid (Cyanex272), *N,N,N',N'*-Tetrakis (2-pyridylmethyl) ethylenediamine (TPEN)の骨格に基づいている。これらのチオール誘導体を有機合成により得た。FT-IRのATR測定用のSiプリズム上に金薄膜を真空蒸着し、ここに合成した有機配位子のチオール誘導体を含む溶液を添加して、金薄膜上に有機配位子を化学吸着させた。薄膜を洗浄後、Lnを含む水溶液を薄膜上に添加して、Ln錯イオンを形成させた。このSiプリズムの反対側から赤外光を導入し、ATRのセッティングで錯イオンの赤外スペクトルを観測した。このとき、金薄膜の吸収増強効果により、低濃度での赤外スペクトルの観測が可能である。DGA, Cyanex272の骨格をもつ有機配位子の錯イオンでは、錯形成にともない、C=O伸縮振動、P=O伸縮振動で強い信号が観測され、赤外分光により錯イオン形成の検出に成功した。またその赤外吸収強度のLnイオン濃度依存性により、その錯形成の平衡定数を決定し、LnについてはCyanex272の骨格をもつ有機配位子はDGAのそれよりも2桁以上高い錯形成能をもつことがわかった。一方、TPENの骨格をもつ有機配位子は、Ln錯イオンの形成にともなう赤外吸収の変化は非常に小さいことが明らかとなった。この実験結果は、TPENがLnよりもMAnにより親和性が高いことを示唆していると考えられ、今後MAnを用いたTPEN有機配位子の研究を進めていく予定である。

また、上記の研究と平行して、東海村の日本原子力研究開発機構内の放射性管理区域内での表面増強赤外分光の実験を行った。この実験では、広島大学において、ATR用のSiプリズムへの金薄膜の形成と有機配位子の化学吸着を行い、これを東海村に持参して管理区域内にある赤外分光装置にセットし、Lnを含む水溶液を添加して錯イオンを形成させる。この錯イオンの形成を赤外スペクトルにより確認することができた。これにより、今後の放射性MAnを利用した実験が日本原子力研究開発機構で可能であることを確認した。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計20件（うち査読付論文 20件/うち国際共著 5件/うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Chaki Nobumasa, Muramatsu Satoru, Iida Yuji, Kenjo Seiya, Inokuchi Yoshiya, Iimori Toshifumi, Ebata Takayuki	4. 巻 20
2. 論文標題 Laser Spectroscopy and Lifetime Measurements of the S1 State of Tetracyanoquinodimethane (TCNQ) in a Cold Gas Phase Free Jet	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 ChemPhysChem	6. 最初と最後の頁 996 ~ 1000
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cphc.201900214	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 Kinoshita Shin-nosuke, Inokuchi Yoshiya, Onitsuka Yuuki, Kohguchi Hiroshi, Akai Nobuyuki, Shiraogawa Takafumi, Ehara Masahiro, Yamazaki Kaoru, Harabuchi Yu, Maeda Satoshi, Ebata Takayuki	4. 巻 21
2. 論文標題 The direct observation of the doorway 1n * state of methylcinnamate and hydrogen-bonding effects on the photochemistry of cinnamate-based sunscreens	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 19755 ~ 19763
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C9CP02914A	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 Wada Kozue, Kida Motoki, Muramatsu Satoru, Ebata Takayuki, Inokuchi Yoshiya	4. 巻 21
2. 論文標題 Conformation of alkali metal ion-calix[4]arene complexes investigated by IR spectroscopy in the gas phase	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 17082 ~ 17086
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C9CP03194D	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 Inokuchi Yoshiya, Ebata Takayuki, Rizzo Thomas R.	4. 巻 123
2. 論文標題 UV and IR Spectroscopy of Transition Metal-Crown Ether Complexes in the Gas Phase: Mn ²⁺ (benzo-15-crown-5)(H ₂ O) ₀₋₂	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 6781 ~ 6786
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.9b05706	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 Kitamura Yuma, Muramatsu Satoru, Kida Motoki, Ebata Takayuki, Inokuchi Yoshiya	4. 巻 123
2. 論文標題 Geometric and Electronic Structures of Ag+(benzo-18-crown-6), Ag+(dibenzo-18-crown-6), and Ag+(dibenzo-15-crown-5) Complexes Investigated by Cold Gas-Phase Spectroscopy	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 9185 ~ 9192
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.9b06991	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 Kida Motoki, Kubo Mayuko, Ujihira Tomoyuki, Ebata Takayuki, Abe Manabu, Inokuchi Yoshiya	4. 巻 19
2. 論文標題 Selective Probing of Potassium Ion in Solution by Intramolecular Excimer Fluorescence of Dibenzo-Crown Ethers	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 ChemPhysChem	6. 最初と最後の頁 1331 ~ 1335
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cphc.201800163	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 Inokuchi Yoshiya, Ebata Takayuki, Rizzo Thomas R.	4. 巻 122
2. 論文標題 Microhydration of Dibenzo-18-Crown-6 Complexes with K+, Rb+, and Cs+ Investigated by Cold UV and IR Spectroscopy in the Gas Phase	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 3754 ~ 3763
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.7b12385	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 Kinoshita Shin-nosuke, Miyazaki Yasunori, Sumida Masataka, Onitsuka Yuuki, Kohguchi Hiroshi, Inokuchi Yoshiya, Akai Nobuyuki, Shiraogawa Takafumi, Ehara Masahiro, Yamazaki Kaoru, Harabuchi Yu, Maeda Satoshi, Taketsugu Tetsuya, Ebata Takayuki	4. 巻 20
2. 論文標題 Different photoisomerization routes found in the structural isomers of hydroxy methylcinnamate	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 17583 ~ 17598
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C8CP00414E	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 Kida Motoki, Shimoyama Daisuke, Ikeda Toshiaki, Sekiya Ryo, Haino Takeharu, Ebata Takayuki, Jouvot Christophe, Inokuchi Yoshiya	4. 巻 20
2. 論文標題 Pseudorotaxanes in the gas phase: structure and energetics of protonated dibenzylamine-crown ether complexes	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 18678 ~ 18687
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C8CP02707B	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 Kenjo Seiya, Iida Yuji, Chaki Nobumasa, Kinoshita Shin-nosuke, Inokuchi Yoshiya, Yamazaki Kaoru, Ebata Takayuki	4. 巻 515
2. 論文標題 Laser spectroscopic study on sinapic acid and its hydrated complex in a cold gas phase molecular beam	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 381 ~ 386
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.chemphys.2018.07.007	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 Y. Inokuchi, M. Kaneko, T. Honda, S. Nakashima, T. Ebata, and T. R. Rizzo	4. 巻 56
2. 論文標題 UV and IR Spectroscopy of Cryogenically Cooled, Lanthanide-Containing Ions in the Gas Phase	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Inorg. Chem.	6. 最初と最後の頁 277-281
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.6b02134	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 Y. Inokuchi, M. Kida, and T. Ebata	4. 巻 121
2. 論文標題 Geometric and Electronic Structures of Dibenzo-15-Crown-5 Complexes with Alkali Metal Ions Studied by UV Photodissociation and UV-UV Hole-Burning Spectroscopy	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 J. Phys. Chem. A	6. 最初と最後の頁 954-962
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.6b09653	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 Y. Inokuchi, K. Hirai, and T. Ebata	4. 巻 19
2. 論文標題 Electronic Structure and Conformational Conversion of Calix[4]arene Complexes with Alkali Metal Ions	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Phys. Chem. Chem. Phys.	6. 最初と最後の頁 12857-12867
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C7CP01580A	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 井口佳哉	4. 巻 70
2. 論文標題 気相分子分光を基盤とした超分子化学	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 化学と工業	6. 最初と最後の頁 892-893
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	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 F. Morishima, R. Kusaka, Y. Inokuchi, T. Haino, and T. Ebata	4. 巻 18
2. 論文標題 Cage Effect on Conformational Preference and Photophysics in the Host-Guest Complex of Benzenediols with 18-Crown-6	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Phys. Chem. Chem. Phys.	6. 最初と最後の頁 8027-8038
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c5cp07171b	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 井口佳哉	4. 巻 65
2. 論文標題 3原子分子クラスター内でのラジカルイオンの存在形態の研究～赤外光解離分光にもとづいて～	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 J. Spectrosc. Soc. Jpn.	6. 最初と最後の頁 33-41
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	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 T. Ebata and Y. Inokuchi	4. 巻 16
2. 論文標題 Laser Spectroscopic Study of Cold Gas Phase Host-Guest Complexes of Crown Ethers	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Chem. Rec.	6. 最初と最後の頁 1034-1053
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/tcr.201500287	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 Y. Inokuchi, M. Nakatsuma, M. Kida, and T. Ebata	4. 巻 120
2. 論文標題 Conformation of Alkali Metal Ion-Benzo-12-Crown-4 Complexes Investigated by UV Photodissociation and UV-UV Hole-Burning Spectroscopy	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 J. Phys. Chem. A	6. 最初と最後の頁 6394-6401
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.6b06626	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. Yamazaki, Y. Miyazaki, Y. Harabuchi, T. Taketsugu, S. Maeda, Y. Inokuchi, S.-N. Kinoshita, M. Sumida, Y. Onitsuka, H. Kohguchi, M. Ehara, and T. Ebata	4. 巻 7
2. 論文標題 Multi-Step Intersystem Crossing Pathways in Cinnamate-Based UV-B Sunscreens	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 J. Phys. Chem. Lett.	6. 最初と最後の頁 4001-4007
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcllett.6b01643	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 Y. Inokuchi, M. Kaneko, T. Honda, S. Nakashima, T. Ebata, and T. R. Rizzo	4. 巻 56
2. 論文標題 UV and IR Spectroscopy of Cryogenically Cooled, Lanthanide-Containing Ions in the Gas Phase	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Inorg. Chem.	6. 最初と最後の頁 277-281
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.6b02134	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59件(うち招待講演 7件/うち国際学会 23件)

1. 発表者名 S. Muramatsu, N. Chaki, Y. Iida, S. Kenjo, Y. Inokuchi, T. Iimori, and T. Ebata
2. 発表標題 Laser Spectroscopy of Tetracyanoquinodimethane (TCNQ) Isolated in a Cold Free-Jet: Unusually Long S1 Lifetime and Its Energy Dependence
3. 学会等名 第35回化学反応討論会(国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Y. Kitamura, S. Muramatsu, T. Ebata, and Y. Inokuchi
2. 発表標題 UV Spectroscopy of Cold Ag ⁺ -Benzo-Crown Ether Complexes in the Gas Phase
3. 学会等名 第35回化学反応討論会(国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 S. Hirata, T. Hirao, T. Haino, D. Kajiya, K. Saitow, S. Muramatsu, T. Ebata, Y. Inokuchi
2. 発表標題 SEIRA spectroscopic study of lanthanide complexes with bis(4-mercaptobutyl)phosphinic acid
3. 学会等名 第35回化学反応討論会(国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 S. Kinoshita, Y. Inokuchi, K. Nagamori, H. Nakata, Y. Onitsuka, H. Kohguchi, N. Akai, T. Shiraogawa, M. Ehara, K. Yamazaki, Y. Harabuchi, S. Maeda, T. Taketsugu, T. Ebata
2. 発表標題 Study on nonradiative decay process and trans-cis photoisomerization of the most simple cinnamate
3. 学会等名 第35回化学反応討論会(国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Y. Inokuchi
2. 発表標題 Crown Ether Complexes with Ion Guests Studied by Cold, Gas-Phase Spectroscopy
3. 学会等名 4th Symposium on Weak Molecular Interactions (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Y. Inokuchi
2. 発表標題 Microsolvation Effects on the Encapsulation of Metal Ions by Crown Ethers
3. 学会等名 ACS National Meeting & Expo (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 木下真之介, 村松悟, 井口佳哉, 高口博志, 白男川貴史, 江原正博, 山崎馨, 原淵祐, 前田理, 江幡孝之
2. 発表標題 超音速ジェットレーザー分光と化学反応経路自動探索法による桂皮酸エステルの trans cis 光異性化経路の解明
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 茶木信雅, 木下真之介, 村松悟, 井口佳哉, 飯森俊文, 江幡孝之
2. 発表標題 ジェット冷却した7,7,8,8-テトラシアノキノジメタン(TCNQ)およびTCNQ錯体のレーザー分光
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 村松悟, 木田基, Yuan Shi, 山本陽介, 井口佳哉
2. 発表標題 SN2遷移状態構造を有する超原子価5配位炭素化合物の気相光解離分光
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 北村優真, 村松悟, 江幡孝之, 井口佳哉
2. 発表標題 銀イオン-ベンゾクラウンエーテル包接錯体の極低温気相レーザー分光
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 和田梢, 木田基, 村松悟, 江幡孝之, 井口佳哉
2. 発表標題 極低温・気相分光による, アルカリ金属イオン-カリックス[4]アレーン錯体の包接構造の研究
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 木田基, 和田佳奈子, 村松悟, 山本陽介, 井口佳哉
2. 発表標題 気相中におけるスフェランド アルカリ金属イオン錯体の構造と包接能
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 氏平智章, 木田基, 下山大輔, 村松悟, 灰野岳晴, 江幡孝之, 井口佳哉
2. 発表標題 アルカリ金属イオン - ベンゾクラウンエーテル包接錯体のベンゼン位置と電子状態の相関
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 飯田祐士, 見生聖弥, 木下真之介, 村松悟, 井口佳哉, 江幡孝之
2. 発表標題 桂皮酸誘導体のレーザーアブレーション/超音速ジェットレーザー分光と励起状態無輻射過程に及ぼす水素結合効果の研究
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 平田早紀子, 平尾岳大, 加治屋大介, 村松悟, 齋藤健一, 灰野岳晴, 江幡孝之, 井口佳哉
2. 発表標題 表面増強赤外吸収分光法によるランタノイド錯イオンの構造と電子状態の研究
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 久保麻友子, 村松悟, 井口佳哉
2. 発表標題 極低温気相条件下におけるクラウンエーテル - アンモニウムイオン錯体の紫外 - 赤外分光
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Y. Inokuchi
2. 発表標題 Supramolecular Chemistry Studied by Cold Gas-Phase Spectroscopy
3. 学会等名 International Symposium for Nano Science (ISNS 2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Sakiko Hirata, Takehiro Hirao, Daisuke Kajiya, Satoru Muramatsu, Ken-ichi Saitow, Takeharu Haino, Takayuki Ebata, Yoshiya Inokuchi
2. 発表標題 Surface-enhanced infrared absorption spectroscopy of lanthanide complexes
3. 学会等名 The 16th Nano Bio Info Chemistry Symposium (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Mayuko Kubo, Satoru Muramatsu, Yoshiya Inokuchi
2. 発表標題 UV and IR spectroscopy of crown ether complexes with ammonium ion under cold gas-phase condition
3. 学会等名 The 16th Nano Bio Info Chemistry Symposium (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Shin-nosuke Kinoshita, Satoru Muramatsu, Yoshiya Inokuchi, Hiroshi Kohguchi, Takafumi Shiraogawa, Masahiro Ehara, Kaoru Yamazaki, Yu Harabuchi, Satoshi Maeda, Takayuki Ebata
2. 発表標題 Elucidation of trans-cis photoisomerization route of cinnamate by using supersonic jet/laser spectroscopy and an automated reaction route mapping method
3. 学会等名 The 16th Nano Bio Info Chemistry Symposium (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yuma Kitamura, Motoki Kida, Satoru Muramatsu, Takayuki Ebata, Yoshiya Inokuchi
2. 発表標題 UV spectroscopy of cryogenically cooled Ag ⁺ - benzo-crown ether complexes in the gas phase
3. 学会等名 The 16th Nano Bio Info Chemistry Symposium (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 松下高輔, 加治屋大介, 齋藤健一, 灰野岳晴, 江幡孝之, 井口佳哉
2. 発表標題 SEIRASに適した無電解金メッキ膜の作製と構造評価
3. 学会等名 第12回分子科学討論会2018福岡
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 井口佳哉
2. 発表標題 極低温・気相分光を基盤とした超分子化学
3. 学会等名 第12回分子科学討論会2018福岡 (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 久保麻友子, 安倍学, 江幡孝之, 井口佳哉
2. 発表標題 ジベンゾクラウンエーテル - 金属イオン錯体の 分子内エキシマー形成の研究
3. 学会等名 第12回分子科学討論会2018福岡
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 見生聖弥, 飯田祐士, 茶木信雅, 木下真之介, 井口佳哉, 山崎馨, 江幡孝之
2. 発表標題 レーザーアブレーション法によるシナピン酸と その水和錯体のジェット冷却レーザー分光
3. 学会等名 第12回分子科学討論会2018福岡
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 飯田祐士, 見生聖弥, 茶木信雅, 井口佳哉, 江幡孝之
2. 発表標題 レーザーアブレーション法/ジェット冷却法による桂皮酸誘導体と その水錯体のレーザー分光
3. 学会等名 第12回分子科学討論会2018福岡
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 中山晋吾, 木下真之介, 井口佳哉, 江幡孝之, 鬼塚侑樹, 高口博志, 下山大輔, 灰野岳晴, 門脇範人, 安倍学
2. 発表標題 methoxy ethylcinnamateの構造異性体における trans cis光異性化の研究
3. 学会等名 第12回分子科学討論会2018福岡
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 本田匠, 加治屋大介, 金子政志, 齋藤健一, 灰野岳晴, 江幡孝之, 井口佳哉
2. 発表標題 金薄膜に化学吸着したランタノイド-ジグリコールアミド錯イオンのSEIRA分光
3. 学会等名 第12回分子科学討論会2018福岡
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 木田基, 下山大輔, 池田俊明, 関谷亮, 灰野岳晴, 江幡孝之, Jouvet Christophe, 井口佳哉
2. 発表標題 気相中におけるプロトン付加ジベンジルアミン-クラウンエーテル 擬口タキサンの構造と形成メカニズム
3. 学会等名 第12回分子科学討論会2018福岡
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 氏平智章, 木田基, 下山大輔, 灰野岳晴, 江幡孝之, 井口佳哉
2. 発表標題 極低温気相紫外分光を用いたアルカリ金属イオン-ジベンゾ-24-クラウン-8包接錯体の構造と電子状態の研究
3. 学会等名 第12回分子科学討論会2018福岡
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 木下真之介, 宮崎康典, 井口佳哉, 江幡孝之, 井上昂輔, 長森啓悟, 鬼塚侑樹, 高口博志, 赤井伸行, 白男川貴史, 江原正博, 山崎馨, 原 澗祐, 前田理, 武次徹也
2. 発表標題 桂皮酸エステルの trans cis 光異性化の体系的な研究
3. 学会等名 第12回分子科学討論会2018福岡
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Shingo Nakayama, Shin-nosuke Kinoshita, Yoshiya Inokuchi, Takayuki Ebata, Yuuki Onitsuka, Hiroshi Kohguchi, Daisuke Shimoyama, Takeharu Haino
2. 発表標題 Study of the substituent effects on trans -> cis photoisomerization of cinnamic acid derivatives
3. 学会等名 The 15 th Nano Bio Info Chemistry Symposium (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 S. Kinoshita, Y. Miyazaki, Y. Inokuchi, T. Ebata, K. Inoue, K. Nagamori, Y. Onitsuka, H. Kohguchi, N. Akai, T. Shiraogawa, M. Ehara, K. Yamazaki, Y. Harabuchi, S. Maeda, T. Taketsugu
2. 発表標題 Systematic study on trans-cis photoisomerization of cinnamate derivatives
3. 学会等名 The 15 th Nano Bio Info Chemistry Symposium (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Motoki Kida, Daisuke Shimoyama, Toshiaki Ikeda, Ryo Sekiya, Takeharu Haino, Takayuki Ebata, Christophe Jovet, Yoshiya Inokuchi
2. 発表標題 Structure and energetics of protonated dibenzylamine-crown ether pseudorotaxane in the gas phase
3. 学会等名 The 15 th Nano Bio Info Chemistry Symposium (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 井口佳哉
2. 発表標題 極低温・気相分光による超分子化学の研究
3. 学会等名 IQCE量子化学探索講演会2018「量子化学で探る化学の最先端」(招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yoshiya Inokuchi
2. 発表標題 Crown Ether Complexes Studied by Cold, Gas-Phase Spectroscopy: Relationship between Structures and Functions
3. 学会等名 日本化学会第99春季年会(招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 見生聖弥, 井口佳哉, 江幡孝之
2. 発表標題 レーザーアブレーション法による不揮発性分子と包接錯体のジェット冷却レーザー分光
3. 学会等名 第11回分子科学討論会2017仙台
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 本田匠, 灰野岳晴, 江幡孝之, 井口佳哉
2. 発表標題 分光学的手法によるランタノイド/マイナーアクチノイド分離を目的とした研究
3. 学会等名 第11回分子科学討論会2017仙台
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 木田基, 江幡孝之, 井口佳哉
2. 発表標題 極低温気相条件下におけるジベンゾクラウンエーテル - 金属イオン錯体の構造と電子的相互作用に関する研究
3. 学会等名 第11回分子科学討論会2017仙台
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 井口佳哉, 平井健太, 江幡孝之
2. 発表標題 極低温気相紫外分光による, カリックス[4]アレーン - アルカリ金属イオン錯体の電子状態と配座異性体の研究
3. 学会等名 第11回分子科学討論会2017仙台
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 木下真之介, 宮崎康典, 井口佳哉, 江幡孝之, 住田聖太, 鬼塚侑樹, 高口博志, 赤井伸行, 白男川貴史, 江原正博, 山崎馨, 原淵祐, 前田理, 武次徹也
2. 発表標題 para-, meta-, ortho-hydroxy methylcinnamateの無輻射緩和経路とtrans cis異性化の研究
3. 学会等名 第11回分子科学討論会2017仙台
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 山崎馨, 木下真之介, 宮崎康典, 住田聖太, 鬼塚侑樹, 高口博志, 井口佳哉, 赤井伸行, 白男川貴史, 江原正博, 原淵祐, 前田理, 武次徹也, 江幡孝之
2. 発表標題 Hydroxy methylcinnamate における無輻射失活経路の置換位置依存性
3. 学会等名 第11回分子科学討論会2017仙台
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 中山晋吾, 井口佳哉, 高口博志, 鬼塚侑樹, 木下真之介, 江幡孝之
2. 発表標題 日焼け防止剤としての桂皮酸誘導体の無輻射過程の研究
3. 学会等名 第11回分子科学討論会2017仙台
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Shingo Nakayama, Yoshiya Inokuchi, Hiroshi Kohguchi, Yuuki Onitsuka, Shin-nosuke Kinoshita, and Takayuki Ebata
2. 発表標題 Study on the nonradiative process of cinnamic acid derivatives as sunscreen agents
3. 学会等名 The 14th Nano Bio Info Chemistry Symposium (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 S. Kinoshita, Y. Miyazaki, Y. Inokuchi, T. Ebata, M. Sumida, Y. Onitsuka, H. Kohguchi, N. Akai, T. Shiraogawa, M. Ehara, K. Yamazaki, Y. Harabuchi, S. Maeda, and T. Taketsugu
2. 発表標題 Study of nonradiative decay process and trans-cis isomerization of para-, meta-, ortho-hydroxy methylcinnamate
3. 学会等名 The 14th Nano Bio Info Chemistry Symposium (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Seiya Kenjo, Yoshiya Inokuchi, and Takayuki Ebata
2. 発表標題 Laser spectroscopic study of jet-cooled non-volatile molecules combined with laser ablation
3. 学会等名 The 14th Nano Bio Info Chemistry Symposium (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 井口佳哉, 江幡孝之
2. 発表標題 プロトン付加ジベンジルアミンとそのクラウンエーテル擬口タキサンの極低温気相紫外分光
3. 学会等名 第10回分子科学討論会2016神戸
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 中間真紀, 木田基, 江幡孝之, 井口佳哉
2. 発表標題 極低温気相分光による、ベンゾ-12-クラウン-4イオン錯体の紫外スペクトルとUV-UVホールパーニングスペクトルの観測
3. 学会等名 第10回分子科学討論会2016神戸
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 本田匠, 古谷祐詞, 灰野岳晴, 江幡孝之, 井口佳哉
2. 発表標題 SEIRA分光法と電気化学測定による有機層-水面に存在するクラウンエーテルの金属イオン包接状態の研究
3. 学会等名 第10回分子科学討論会2016神戸
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 江幡孝之, 森島史哉, 井口佳哉
2. 発表標題 レーザーアブレーション/超音速分子線を用いた包接化合物のレーザー分光
3. 学会等名 第10回分子科学討論会2016神戸
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 森島史弥, 井口佳哉, 江幡孝之
2. 発表標題 18-Crown-6の中性ゲスト分子に対する Induced-fit包接と分子認識能力
3. 学会等名 第10回分子科学討論会2016神戸
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 平井健太, 木田基, 江幡孝之, 井口佳哉
2. 発表標題 極低温気相紫外分光を用いた、calix[4]areneと4-tert-butyl-calix[4]areneの金属イオン包接構造の研究
3. 学会等名 第10回分子科学討論会2016神戸
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 木田基, 江幡孝之, 井口佳哉
2. 発表標題 極低温気相レーザー分光によるジベンゾ 15 クラウン 5イオン錯体の構造と分子間相互作用の研究
3. 学会等名 第10回分子科学討論会2016神戸
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Maki Nakatsuma, Motoki Kida, Takayuki Ebata, Yoshiya Inokuchi
2. 発表標題 Conformation of alkali metal ion-B12C4 complexes studied by UV spectroscopy under cold gas-phase conditions
3. 学会等名 The 13th Nano Bio Info Chemistry Symposium, The 8th Japanese-Russian Seminar on Chemical Physics of Molecules and Polyfunctional Materials (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Shin-nosuke Kinoshita, Yasunori Miyazaki, Yoshiya Inokuchi, Takayuki Ebata, Masataka Sumida, Yuuki Onitsuka, Hiroshi Kohguchi
2. 発表標題 UV-Deep UV pump-probe spectroscopic study on nonradiative decay process of cinnamate derivatives
3. 学会等名 The 13th Nano Bio Info Chemistry Symposium, The 8th Japanese-Russian Seminar on Chemical Physics of Molecules and Polyfunctional Materials (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Motoki Kida, Takayuki Ebata, Yoshiya Inokuchi
2. 発表標題 The geometric and electronic structures of dibenzo-15-crown-5 complexes with alkali metal ions studied by cold ion trap-laser spectroscopy
3. 学会等名 The 13th Nano Bio Info Chemistry Symposium, The 8th Japanese-Russian Seminar on Chemical Physics of Molecules and Polyfunctional Materials (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Seiya Kenjo, Shingo Nakayama, Fumiya Morishima, Yoshiya Inokuchi, Takayuki Ebata
2. 発表標題 Laser spectroscopic study of jet-cooled non-volatile molecules combined with laser ablation
3. 学会等名 The 13th Nano Bio Info Chemistry Symposium, The 8th Japanese-Russian Seminar on Chemical Physics of Molecules and Polyfunctional Materials (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Takumi Honda, Toshiaki Ikeda, Takeharu Haino, Takayuki Ebata, Yoshiya Inokuchi
2. 発表標題 Structure of metal ion-crown ether complexes on Au surface investigated by SEIRA and electrochemical measurements
3. 学会等名 The 13th Nano Bio Info Chemistry Symposium, The 8th Japanese-Russian Seminar on Chemical Physics of Molecules and Polyfunctional Materials (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Yoshiya Inokuchi
2. 発表標題 A Cold Spectroscopic Study on Ion Complexes of Crown Ethers in the Gas Phase
3. 学会等名 International Symposium: Recent Progress in Molecular Spectroscopy and Dynamics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2016年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 Y. Inokuchi	4. 発行年 2019年
2. 出版社 Springer	5. 総ページ数 45
3. 書名 Physical Chemistry of Cold Gas-Phase Functional Molecules and Clusters	

〔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	中島 覚 (Nakajima Satoru) (00192667)	広島大学・自然科学研究支援開発センター・教授 (15401)	
研究分担者	久米 晶子 (Kume Shoko) (30431894)	広島大学・理学研究科・准教授 (15401)	
研究分担者	和田 真一 (Wada Shin-ichi) (60304391)	広島大学・理学研究科・助教 (15401)	
研究分担者	灰野 岳晴 (Haino Takeharu) (80253053)	広島大学・理学研究科・教授 (15401)	