

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 6 年 6 月 3 日現在

機関番号：13801

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2021～2023

課題番号：21H01879

研究課題名(和文) 赤外分光と共振器QED理論による気相振動強結合に対するポテンシャル描像の確立

研究課題名(英文) Study on potential energy surface for gas-phase vibrational strong coupling by IR spectroscopy and cavity-QED theory

研究代表者

松本 剛昭 (Matsumoto, Yoshiteru)

静岡大学・理学部・准教授

研究者番号：30360051

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 14,100,000円

研究成果の概要(和文)：気相分子の振動強結合を実現し、そこで形成された振動ポラリトンの幾何構造を解明することを研究目的とした。そのための赤外分光システムの構築として、共振器透過スペクトルを測定するための赤外レーザーシステムの整備、ピエゾ駆動型並進ステージを用いた共振器制御法の開発を行った。さらに、気相振動ポラリトンの赤外スペクトルを観測するための高圧充填ガスセルの設計製作、光音響分光観測のため音波検出法の検討を行った。反射率97%の金ミラーで作られる光学共振器の透過特性である共振器透過スペクトルを測定したところ、設定した共振器間隔とフィネス(共振器の光閉じ込め特性)により予測されるスペクトルを再現することに成功した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

振動強結合により生成される振動ポラリトンは化学反応の速度を大きく変えることが知られている。これは2枚の鏡で作られる共振器が化学反応における触媒(あるいは阻害剤)として働くことを意味する。振動ポラリトンが化学反応に及ぼす影響を物理化学的に明らかにし、さらにその影響を制御できれば、一般的な触媒に代わるクリーンな化学反応制御に寄与できる可能性がある。我々の研究は化学反応制御の根本でもある分子構造の解明であり、反応速度や動力学を左右する因子をポテンシャルエネルギー曲面から考察することである。高精度の構造研究を目指すために、実験的に測定困難とされてきた希薄濃度の気相分子と我々はあえて対峙する。

研究成果の概要(英文)：Our research goal is to realize the vibrational strong coupling of gas-phase molecules and to elucidate the molecular geometry of vibrational polaritons formed in the coupling. For IR spectroscopy of the polaritons, we started up the IR laser system to observe the cavity transmission spectrum and developed the piezo-driven optical cavity to precisely control the cavity length. Furthermore, to observe the IR spectra of the gas-phase vibrational polaritons, we developed the high-pressure available gas cell and considered the opt-acoustic spectroscopy to detect the sonic wave from the IR-absorbing molecules. We tried to observe the cavity transmission spectrum by using the optical cavity formed by two gold mirrors with 97% reflectivity. The obtained spectrum was successfully reproduced by the given gap of the cavity about 50 μm and finesse (property of the light-trapping ability).

研究分野：物理化学、分子科学

キーワード：振動強結合 気相振動ポラリトン 赤外分光 共振器 ラビ分裂 共振器透過スペクトル 光音響分光

様式 C-19、F-19-1 (共通)

1. 研究開始当初の背景

・振動強結合の定義

振動強結合とは、分子振動と共振器モードとの間の強い相互作用である。光子を通じて量子力学的に相互作用する振動強結合は、光と分子が渾然一体となる「振動ポラリトン」という混成状態を形成する。振動ポラリトンが形成される必要条件是、分子振動と共振器モードが一致することである。2枚の鏡を向かい合わせたファブリーペロー型の共振器に分子があるとき、着目する分子振動のエネルギーに対応する波長が共振器の長さ(鏡間のギャップ) L と $L = n \times (\lambda/2)$ (ただし n は正の整数)の関係にあれば、光-物質混成状態である振動ポラリトンが形成される場合がある。共振器内部で振動強結合が生じると、上分枝と下分枝の分裂した状態で振動ポラリトンが形成される。この分裂は特にラビ分裂とよばれ、この分裂幅 E が分子振動の吸収線幅よりも広いことが強結合領域の相互作用が生じていることの証拠となる。振動強結合のもとにある分子は、原子核と電子だけでなく光子もその構成要素粒子であると言える。このような混成状態として存在する分子は、従来の分子とは異なる性質(例えば化学結合を記述する波動関数の形状や、それに対応する力の定数など)をもつと期待され、一般的な化学反応の規則に縛られない革新的な化学の描像を提供する可能性をもつ。

・振動強結合による化学反応制御の背景

2016年、仏ストラスブール大学のEbbesenらは、60 μm 間隔の微小共振器を用いた振動強結合の研究を報告した。研究対象はアルキルシラン化合物であり、そのシリル基脱離反応の速度が振動強結合によりどう変調されるかを観測している。C-Si伸縮振動の周波数と共振器モード周波数が一致するように微小共振器の間隔を微調整することで振動強結合が達成されると、その脱離反応の速度が5倍遅くなることがわかった。すなわち、共振器の存在自体が阻害剤として機能していることを示している。また同研究チームは水中の酵素反応が、水のOH伸縮振動が共振器と強結合するとその反応速度が速まることも報告した。この研究は、反応基質それ自体が光-物質混成状態とならなくても、溶媒環境が混成状態となることで反応速度が変調されるという興味深い知見を与えるものである。さらに最近では二次元赤外分光を組み合わせることで、振動ポラリトンの状態にある分子の高速度力学が実験的に示され、またその解釈が多くの理論研究により提示されるなど、振動強結合と化学反応の密接な結びつきを研究する大きな流れが特に欧米諸国を中心にして見られる。一方日本国内に目を向けると、北海道大学の2グループ及び奈良先端科学技術大学院大学の1グループが振動強結合に注目して革新的な化学反応制御に向けた研究を進めているが、欧米諸国と比較すると数的に不足していると言わざるを得ない。

振動強結合と化学反応を結びつける研究は、現在は黎明期から定常状態に入りつつある。これまでの研究を概観すると、対象とする物質あるいは化学反応のほぼ全てが溶液を中心とした凝集系である。その理由は、振動強結合の指標であるラビ分裂幅の大きさが試料濃度の平方根に比例することにある。十分に観測可能なラビ分裂を得るにはおよそ1 mol/Lほどの高濃度が必要であることが多くの研究で示されている。このことは、現状の研究手法あるいは研究方針を踏襲する限り、振動強結合と関連させる化学反応を凝集系に制限せざるを得ないということになってしまう。言い方を変えれば、現状では気相反応のような希薄条件で振動強結合を研究することが困難であるということである。

2. 研究の目的

・振動強結合の研究における解決すべき問題

Ebbesenらをはじめとした共振器内部での振動強結合の研究では、振動ポラリトンの形成による反応速度の変調は観測されているものの、反応速度に影響を与えると思われる因子は解明されていないのが実状である。特に振動ポラリトンが形成されたときの幾何構造変化に関する情報は皆無と言って良い。幾何構造の情報が得られれば、それは化学反応に関わるポテンシャルエネルギー曲面を構築できることに相当する。ではなぜ、これほど重要と考えられる振動ポラリトンの幾何構造が解明されていないのか？それは構造を知るための分光手法が振動強結合の研究環境と相性が良くないことが考えられる。

分子の幾何構造を知るにはそれ相応の分光法の適用が不可欠である。NMRや赤外分光、あるいはマイクロ波分光などが候補として挙げられる。NMR分光を適用するには、ファブリーペロー共振器をNMR装置に導入する必要があるが、原理的には可能であっても現実的ではない。なぜなら、NMR測定時の機械的振動が微小共振器の精度を悪くすることが多いに予想されるからである。共振器間隔が時々刻々と揺れてしまうため、分子振動と共振器の共鳴条件が容易に解除されてしまうはずである。次にマイクロ波分光については、一般的に気相分子に適用可能な手法であるため、凝集系を対象とした振動強結合の研究とはそもそも相性が良くない。残る候補として、赤外分光は最も可能性がある手法である。しかし、微小共振器の軸方向(鏡面に垂直な方向)から赤外光を照射してスペクトルを測定することは残念ながら原理的に不可能である。なぜなら、広帯域の赤外光を入射しても、共振器の間隔で決まる定在波のみが共振器内部で立ち上がるだけだからである。いわゆるエタロン効果により共振器透過スペクトルのみが観測されてしまう。したがって、微小共振器のわずかな隙間から赤外光を入射してスペクトル測定を行うことが

唯一の方法となる。しかし、溶液の場合はこれも原理的に不可能である。なぜなら、共振器内部に溶液を閉じ込めるには共振器それ自体をスペーサーなどにより閉じたものとする必要があり、共振器の隙間から光を入射してもそれを共振器内部に導入することが極めて困難であるからである(閉じるためのスペーサーが光透過性であれば可能性は上がるが、これも技術的に容易ではない)。以上より、幾何構造を決定するための考えうる分光手法は、溶液のような凝集系には適用が難しいと言わざるを得ない。したがって、赤外分光が適用できる凝縮系以外の物質を対象にして振動強結合を研究することが解決すべき問題である。その答えは、気相分子を研究対象とすることである。

・我々が考える問題解決の方法

振動強結合の研究対象として気相分子が適用されずにきた理由は極めて単純である。それは、希薄濃度の条件ゆえに強結合領域のラビ分裂を観測することが難しいからである。本研究課題を開始した2021年4月時点では、気相分子を研究対象とした報告は皆無であった(2023年に米国プリンストン大学のWeichmanの研究チームが気相メタン分子のCH伸縮振動の単一振動回転準位に着目したラビ分裂の観測に成功した)。それでもなお、振動ポラリトンの幾何構造を研究するのに気相分子が適している理由として次の3点が考えられる。

(1) 化学反応を分子レベルで理解するには反応素過程に注目するのが直接的である。素過程を考察するためには気相分子であることが必要十分条件である。

(2) 分子構造のわずかな変化を追跡するためには、溶媒環境を一切排除した孤立分子系であることが望ましい。溶液のような凝集系では、注目する分子と溶媒との衝突が繰り返され、その衝突緩和に由来する振動バンド幅の広がりが無視できない。もし振動強結合による分子幾何構造の変化がわずかであった場合、衝突広がりの寄与はスペクトル解析を困難なものとする。高精度なスペクトル解析を行うためには、希薄濃度の気相分子を対象とするのが最適である。

(3) 振動強結合した分子の赤外スペクトルを測定するには、微小共振器の隙間に赤外光を入射して吸収スペクトルを測定することが直接的である。気相分子を対象とするならば、共振器は開放系として問題ない。すなわち、ガスセルの内部で2枚の鏡を向かい合わせる単純な配置の実験装置を準備すれば良い。これは溶液研究における閉じた共振器とは真逆の方法である。開放系であれば、共振器の隙間に赤外光を入射して分光観測を行うことが原理的に可能となる。

・研究目的(何をどこまで解明するか)

本研究課題では、気相分子の振動ポラリトン形成による分子構造変化とその背景にあるポテンシャルエネルギー曲面との相関を解明することを目的として、振動強結合した気相分子の赤外スペクトルを観測するためのシステム開発を行う。研究対象として、気相のギ酸二量体(FA_2)を取り上げることとした。その利点は、振動強結合の強さを左右する赤外吸収断面積の大きさである。 1750 cm^{-1} 付近に観測されるC=O伸縮振動はあらゆる分子振動の中でも最大の吸収断面積をもつことが知られている。二量体では、二つのC=O振動が反対称的に連動することで単量体よりも赤外吸収が増強する。さらに振動ポラリトンを形成すると、強結合に関与した官能基に隣接した化学結合が大きな影響を受けることが予想される。 FA_2 にはC=O基に隣接するCH基や、分子間で隣接するOH基があり、これら伸縮振動を赤外分光で観測すればポラリトン形成による分子幾何構造の詳細な情報が得られると期待される。さらには、分子内だけでなく分子間の相互作用に振動強結合が与える影響についても、幾何構造の変化から読み取ることができるかもしれない。(注:上記は研究計画時点での目的であるが、研究を進めていく中で FA_2 ではなく CO_2 を対象とする方が気相分子の振動強結合を研究する上で得策であることに気がついた。その主な理由は、CO反対称伸縮振動の吸収断面積が FA_2 のものに劣らず大きいことと、高濃度溶液に匹敵するほどの密度を得ることが高圧充填により可能であることの2点である。)

振動ポラリトンを形成した気相分子の赤外分光はキャピティリングダウン分光法(CRDS)で行うこととする。振動強結合のためのファブリペロー共振器の間隔を1mmとし、その共振器軸と垂直方向にCRDS用の高反射率凹面鏡からなる共振器を作る。また、希薄濃度の気相分子の振動ポラリトンを高効率で生成するために、本研究ではCW量子カスケードレーザーによる赤外光子の外部供給を施すこととする。この状態でCRDSを適用することで、強結合状態にある気相分子の赤外スペクトルを高感度に観測できる。(注:上記のCRDSの適用については、研究を進めていく中で原理的に不可能であることがわかった。なぜなら、強結合のためのファブリペロー共振器の間隔が $100\text{ }\mu\text{m}$ 以下であることが必要不可欠であり、そのような共振器配置では2枚の鏡の隙間にCRDSのための赤外レーザーを導入することができないからである。そこでCRDSではなく光音響分光法を採用することに変更した。)

3. 研究の方法

・レーザー装置の立ち上げ

2021年12月にNd:YAGレーザー(Surelite EX, Continuum社製)を、2022年1月に赤外OPO/OPAシステム(Laser Vision社製)をそれぞれ納入した。本来であれば、Laser Vision社のDean Guyer氏(OPO/OPAシステムの製作者)が来日してOPO/OPAシステムの立ち上げおよび最適化までを行うこととなっていたが、コロナ禍の中で来日が困難であったことからこれを見送り、オンデマンド動画およびインストールマニュアルを手本として我々自身でインストール作業を行った。メーカーが提示しているスペック値によれば、 $3.0\text{ }\mu\text{m}$ 付近でのパルスエネルギーが $\sim 10\text{ mJ/pulse}$ であり、これについては確認できた。バンド幅は 4 cm^{-1} であることが提示されていた

が、OP0/OPA システムの出力を用いたスペクトル測定をする手段を持ち合わせていないため、確認することはできていない。しかしながら、波長掃引をした際に $2.7\ \mu\text{m}$ 付近で空気中の水蒸気に由来する破裂音を確認することができた。この OP0/OPA 出力が高エネルギーであるため、水分子の多光子イオン化が生じることが知られており、それを確認することで波長掃引機能が正常に動作していることは確認できた。

・ファブリーペロー光学共振器の構築

分子振動と共振器モードを強結合させて形成される振動ポラリトンを実験的に観測するには、 $100\ \mu\text{m}$ 以下の間隔をもつ微小共振器を構築し、さらに共振器特性を制御する必要がある。そこで、振動ポラリトンの形成に向けたファブリーペロー光学共振器のシステム構築を行うこととした。共振器概要を図 1 に示す。共振器を構成する 2 枚の鏡は、 CaF_2 基板（直径 $25\ \text{mm}$ 、厚さ $5\ \text{mm}$ ）の表面に金のコーティングを施した金属ミラー（反射率 $\sim 97\%$ ）を用いた。これらを一軸並進ステージに搭載したミラーマウントに固定し、2 枚の鏡の間隔を目測でおよそ $100\ \mu\text{m}$ とした。並進ステージのうちの一つはピエゾ駆動型であり、コントローラと接続することにより $50\ \text{nm}$ の精度で並進方向の位置を制御できる。

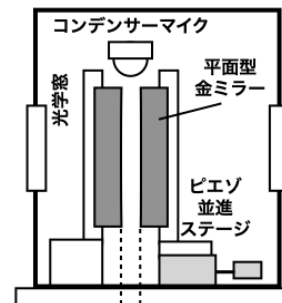


図 1 . 共振器概要

・共振器を含むレーザー光学系の構築

図 2 にレーザー光学系の概要全体図を示す。Nd:YAG レーザーで励起した赤外 OP0/OPA システム（発生可能な波長は $2.5\sim 4.5\ \mu\text{m}$ ）を、図 1 で解説したファブリーペロー光学共振器に入射する。これを共振器に適切な配置で入射するために、視認ガイドとして可視領域のダイオードレーザー（戻り光防止のためのアイソレータを含む）を用いる。共振器の赤外光透過側には液体窒素冷却型の赤外線検出器を用いる。また、振動ポラリトン形成した気相分子の赤外スペクトルを測定するために、共振器の隙間から赤外 OP0/OPA を入射するように光学系を配置する。さらに、ビームスプリッターなどを必要に応じて使用することで CW-QCL を共振器に入射する。

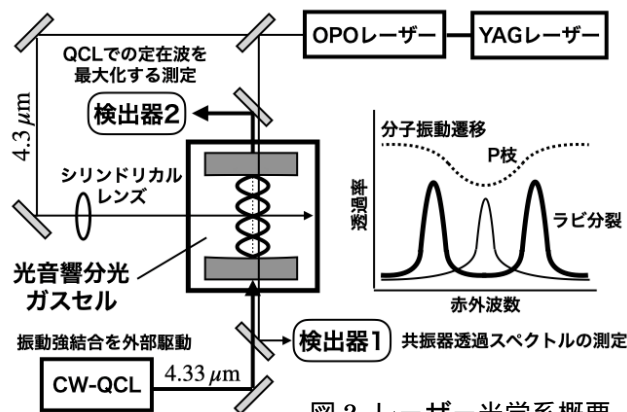


図 2 . レーザー光学系概要

・連続発振型量子カスケードレーザー (CW-QCL) の立ち上げ

本研究課題では、希薄濃度の気相分子の振動強結合を高効率で達成することを目的として、共振器外部から赤外光子を供給することを独自の的方法論とした。そこで、CW-QCL（波長 $4.3\ \mu\text{m}$ 、バンド幅 $1\ \text{cm}^{-1}$ ）を導入して、これを共振器に入射することを計画した。なおこの発振波長は CO_2 分子の C0 反対称伸縮振動を強結合させることを念頭においたものである。2024 年 5 月時点で QCL の発振確認まではできており、今後はファブリーペロー共振器との共鳴条件を探索すること、そしてラビ分裂を観測するための赤外 OP0/OPA システムとの二重共鳴条件の光学配置の最適化などを旨とする。

・振動強結合した気相分子の赤外分光を行うためのガスセルの設計と製作

気相分子の振動ポラリトンのラビ分裂および赤外スペクトルを観測するためのガスセルを設計製作した。10 気圧ほどの高圧充填に耐えうる必要があるため、ステンレス製の鋼管と CF フランジを溶接したものを製作した。セルの直径はおよそ $300\ \text{mm}$ 、高さは $200\ \text{mm}$ であり、ガスセル内部にファブリーペロー共振器を搭載することができる形状とした。さらに、共振器内部にある気相分子のみと赤外レーザーが相互作用するための手段として、共振器透過スペクトル（ラビ分裂を含む）と振動ポラリトンの赤外スペクトル（後述する光音響分光により測定）を観測するための赤外 OP0/OPA 出力をファブリーペロー共振器に近接させて入射することを検討した。そのためのレーザー入射ポートを現在設計中である。

・ラビ分裂の観測（ここに記載の内容は当初予定していた計画案である）

CO_2 の C0 反対称伸縮振動（波長 $4.3\ \mu\text{m}$ ）と共振器モードを強結合させた振動ポラリトンを用いて、ラビ分裂を通じて観測する。はじめに C0 振動の波長にチューニングした赤外 OP0/OPA を用いて、ファブリーペロー共振器の調整を行う。共振器間隔を $50\ \mu\text{m}$ とした状態で、共振器からの透過光が最大となるように共振器を微調整し、赤外波長を掃引して共振器透過スペクトルを観測する。次に、ガスセルに 10 気圧の CO_2 を充填する。この圧力は溶液におけるおよそ $0.1\ \text{mol/L}$ に相当する。この充填条件で赤外波長を掃引して再び共振器透過スペクトルを測定する。もし CO_2 が共振器と振動強結合してポラリトン形成していれば、上分枝ポラリトンと下分枝ポラリトンに由来するラビ分裂が観測されると期待される。ラビ分裂幅は試料濃度の平方根に比例することが定式化されているので、充填圧力の変化に伴うラビ分裂幅の変化を観測することで振動強結合の領域にあるか否かを判断する。さらにファブリーペロー共振器に CW-QCL も入射することで、振動強結合を促進するための赤外光子を外部から供給する。CW-QCL の波長は固定されているた

め、この波長と共鳴するように共振器長を微調整し、CW-QCL 透過強度が最大となる位置を決める。この状態で再び CO₂ を高圧充填してラビ分裂を観測する。ラビ分裂幅は共振器内部にある光子数の平方根にも比例することが知られているので、CW-QCL の入射光強度をパラメータとしてラビ分裂幅を観測することで、振動強結合の強さを制御できるか否かを判断できる。

・振動強結合した気相分子の赤外分光（ここに記載の内容は当初予定していた計画案である）

振動強結合した CO₂ の振動ポラリトンの赤外分光を行うために、当初はキャビティリングダウン分光法を適用する予定であった。しかし、ファブリーペロー共振器の間隔を 100 μm 以下とすることが本研究課題において本質的であることがのちに判明し、その共振器間隔の下ではキャビティリングダウン分光を行うことが原理的に困難であるため、光音響分光の手法を採用することとした。光音響分光法は赤外光子を吸収した分子が放出する熱を音波として検出する方法である。音波の検出法としてはマイクロフォンとカンチレバーを用いた二種類が一般的であるが、我々はより高感度であるとされるカンチレバー方式をとることを検討している（図 1 にはマイクロフォン方式が掲載されているが、これをカンチレバーに置き換える）。共振器のわずかな隙間に赤外 OPO/OPA をレンズで集光して入射し、共振器内部にある振動ポラリトンに吸収させる。振動ポラリトンの形成の有無に応じて赤外スペクトルを測定し、それらの差分をとって振動強結合による分子幾何構造の変化を解析する。

4. 研究成果

・共振器透過スペクトルの観測成功

反射率 97% の金ミラーを用いたファブリーペロー共振器に赤外 OPO/OPA を入射して、共振器透過スペクトルの測定を試みたが、透過光強度の波長依存性が一切観測されなかった。その理由として、50~100 μm の共振器間隔の場合、共振器透過スペクトルの自由スペクトル領域（free spectral range、隣り合う共振器モード間の振動数）が赤外 OPO/OPA の分解能である 4 cm⁻¹ と同程度であることが挙げられる。この結果より、本研究で用いるファブリーペロー共振器で有意な透過スペクトルを測定するには、入射する赤外レーザーの分解能を高くする必要がある。そこで、当研究室に現有の赤外レーザー（分解能 1 cm⁻¹、差周波発生法によるもの、図 3 に光学系概要を提示）を用いて再度共振器透過スペクトルの測定を試みたところ、波長依存性が明瞭に現れたスペクトルを観測することに成功した。その観測結果を図 4 に示す。いわゆるエタロン効果により、共振器に入射するレーザー強度と同程度の透過光強度が得られ、共振器内部で定在波の立ち上がりが発生していることを示唆する結果であった。解析の結果、共振器の間隔が 76 μm であり、そこから得られる自由スペクトル領域が平均で 67 cm⁻¹ であることがわかった。

ここで観測された共振器モードの次数は 47~49 であり、一般的な振動強結合で必要とされる次数と比較するとまだ比較的高いと思われる。ゆえに、共振器間隔をより狭くするための制御法を確立する必要があることがわかった。しかしながらこの観測の成功は、気相分子のラビ分裂を観測するための第一歩として極めて重要であり、2024 年度から振動強結合の研究を続ける上で明るい材料となった。さらに、基盤研究 B に採択された継続的研究（赤外分光と共振器 QED による気相分子集団の振動強結合状態の解明、24K01433）にて、赤外レーザー光源の高分解能化を進めるための指針を得ることができた。

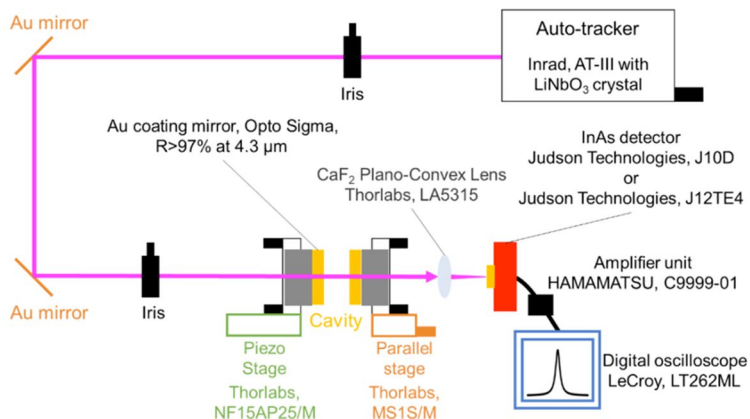


図 3. 共振器透過スペクトルを観測するための光学系概要

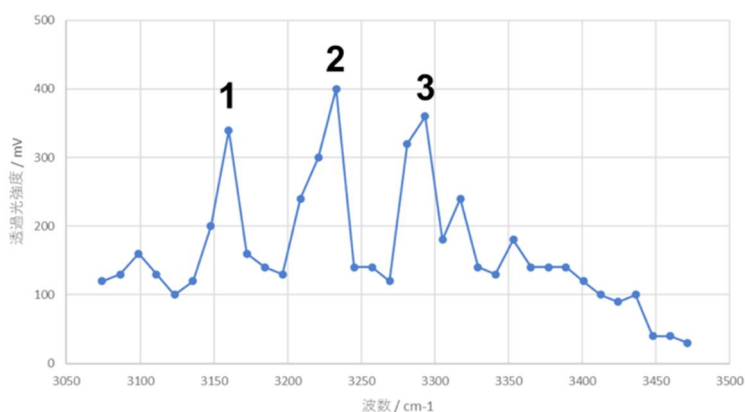


図 4. 3.0~3.2 μm 領域で観測された共振器透過スペクトル

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計6件（うち査読付論文 6件/うち国際共著 2件/うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Matsumoto Yoshiteru, Honma Kenji	4. 巻 25
2. 論文標題 IR cavity ringdown spectroscopy and density functional theory calculation of pyrrole-diethyl ketone clusters: impacts of carbon-chain flexibility on the diversity of N-H...O=C hydrogen bonds	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 19633 ~ 19647
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D3CP01466E	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 Ban Kazunori, Miyata Daisuke, Matsumoto Yoshiteru, Tahara Shinya, Takahashi Hiroaki, Morita Shin-ichi, Nakabayashi Takakazu	4. 巻 833
2. 論文標題 Visualization of the sequence of changes in the full wavenumber range by two-dimensional correlation spectroscopy	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Chemical Physics Letters	6. 最初と最後の頁 140930 ~ 140930
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cplett.2023.140930	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 Kawamura Shun, Yamaguchi Masato, Kono Satoshi, Arakawa Masashi, Yasuike Tomokazu, Horio Takuya, Terasaki Akira	4. 巻 127
2. 論文標題 Photodestruction Action Spectroscopy of Silver Cluster Anions, Ag _N ⁺ (<i>N</i> = 3?19), with a Linear Ion Trap: Observation of Bound Excited States above the Photodetachment Threshold	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 6063 ~ 6070
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.3c02900	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 Imamura Kosuke, Yasuike Tomokazu, Sato Hirofumi	4. 巻 160
2. 論文標題 Open-boundary cluster model with a parameter-free complex absorbing potential	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 034103-034103
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0184571	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 Arildii Dashjargal、Matsumoto Yoshiteru、Dopfer Otto	4. 巻 127
2. 論文標題 Microhydration of the Pyrrole Cation (Py ⁺) Revealed by IR Spectroscopy: Ionization-Induced Rearrangement of the Hydrogen-Bonded Network of Py ⁺ (H ₂) ₂	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 2523 ~ 2535
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.3c00363	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 Arildii Dashjargal、Matsumoto Yoshiteru、Dopfer Otto	4. 巻 128
2. 論文標題 Internal Energy Dependence of the Pyrrole Dimer Cation Structures Formed in a Supersonic Plasma Expansion: Charge-Resonance and Hydrogen-Bonded Isomers	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 3993 ~ 4006
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.4c01834	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

〔学会発表〕 計27件 (うち招待講演 2件 / うち国際学会 5件)

1. 発表者名 Yoshiteru Matsumoto
2. 発表標題 Microscopic preference for hetero-chiral propylene oxide dimer induced by H-bond of an achiral pyrrole molecule
3. 学会等名 8th Asian Spectroscopy Conference (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Reza Aulia、Yoshiteru Matsumoto
2. 発表標題 Structural analysis of alcohol-alkylsilane dihydrogen-bonded clusters probed by IR cavity ringdown spectroscopy
3. 学会等名 第17回分子科学討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yoshiteru Matsumoto
2. 発表標題 Hydration switching on the intermolecular orientation of pyrrole dimer cations probed by IR photodissociation spectroscopy
3. 学会等名 6th International Symposium of JSPS Core-to-Core Program on "Molecular Recognition Mechanism between Flexible Molecules" (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yuki Hayano, Yoshiteru Matsumoto
2. 発表標題 Hydrogen bonding structures of propargyl alcohol clusters probed by IR cavity ringdown spectroscopy
3. 学会等名 6th International Symposium of JSPS Core-to-Core Program on "Molecular Recognition Mechanism between Flexible Molecules"
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 山田千乃、松本剛昭
2. 発表標題 赤外分光によるピロール-テトラヒドロフランクラスターの特異的溶媒和の構造解明
3. 学会等名 第54回中部化学関係学協会支部連合秋季大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 小幡真緒、松本剛昭
2. 発表標題 赤外分光によるピロール-イソプロピルエーテルクラスターの異性体選択的水素結合の解明
3. 学会等名 第54回中部化学関係学協会支部連合秋季大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 今村洸輔、安池智一、佐藤啓文
2. 発表標題 自己エネルギーに基づくパラメータフリーな複素吸収ポテンシャルの構成
3. 学会等名 第25回理論化学討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 安池智一
2. 発表標題 金属ナノ粒子と分子の複合系におけるプレキシトン形成の微視的描像
3. 学会等名 第17回分子科学討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 平野奨、瀬井達也、安池智一
2. 発表標題 塩水中のステアリンの分散に及ぼすアルカンの影響
3. 学会等名 第74回コロイドおよび界面化学討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 長塚直樹、松口諒斗、小坂谷貴典、奥山弘、渡邊一也、安池智一
2. 発表標題 インジウムナノ粒子による深紫外近接場と分子の相互作用
3. 学会等名 表面界面スペクトロスコピー2023
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 長塚直樹、松口諒斗、奥山弘、安池智一、小板谷貴典、渡邊一也
2. 発表標題 インジウムナノ粒子による深紫外域局在プラズモンと吸着分子の相互作用
3. 学会等名 日本化学会第104春季年会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yoshiteru Matsumoto
2. 発表標題 Microscopic chiral-recognition in propylene oxide dimer induced by H-bond of an achiral pyrrole molecule
3. 学会等名 24th International Conference on Horizons in Hydrogen Bond Research (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yoshiteru Matsumoto, Otto Dopfer
2. 発表標題 Charge resonance interactions in pyrrole dimer cation and its hydrated clusters probed by IR spectroscopy
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 廣田亜莉朱、松本剛昭、石川春樹
2. 発表標題 赤外分光によるアセチレン-アルキルシランクラスターの二重二水素結合の構造解明
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 石原優佑、松本剛昭、河合信之輔
2. 発表標題 赤外分光による $^{13}\text{C}6\text{H}_6$ 巨大クラスターの観測
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 Yoshiteru Matsumoto, Kento Sakurai
2. 発表標題 Microscopic chiral-recognition in propylene oxide dimer induced by hydrogen bond of an achiral pyrrole molecule
3. 学会等名 37th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 吉田龍矢、渡邊一也、安池智一
2. 発表標題 グラフェン上の C_{60}/Ag 共吸着系の光学応答
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 安池智一
2. 発表標題 局在プラズモンナノキャピティを用いた化学反応制御
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 長塚直樹、渡邊一也、安池智一
2. 発表標題 グラフェンによるインジウム超薄膜の構造制御と深紫外プラズモン応答
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 平野奨、瀬井達也、安池智一
2. 発表標題 塩水中のステアリン酸自己組織化膜に及ぼす有機溶剤の影響
3. 学会等名 第73回コロイドおよび界面化学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 安池智一
2. 発表標題 局在プラズモンナノキャピティを用いた化学反応制御
3. 学会等名 凝縮系の理論化学2023
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 今村洸輔、安池智一、佐藤啓文
2. 発表標題 複素吸収ポテンシャルの自己エネルギーに基づく構築
3. 学会等名 凝縮系の理論化学2023
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 石原優佑、松本剛昭、河合信之輔
2. 発表標題 赤外分光によるベンゼンクラスターのCH伸縮フェルミトライアドの観測
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 松本剛昭、櫻井研人
2. 発表標題 水素結合の導入により増強される酸化プロピレンのキラル認識
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 廣田亜莉朱、松本剛昭、石川春樹
2. 発表標題 赤外分光によるアセチレン-アルキルシラン二水素結合クラスターの構造解明
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 廣田亜莉朱、松本剛昭
2. 発表標題 赤外分光によるアセチレン-アルキルシラン二水素結合クラスターの構造解明
3. 学会等名 第52回中部化学関係学協会支部連合秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yoshiteru Matsumoto
2. 発表標題 Charge resonance interaction in pyrrole dimer cation and its solvated clusters probed by IR spectroscopy
3. 学会等名 2nd International Symposium of JSPS Core-to-core program on "Molecular Recognition Mechanism between Flexible Molecules" (国際学会)
4. 発表年 2022年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 安池 智一	4. 発行年 2023年
2. 出版社 放送大学教育振興会	5. 総ページ数 216
3. 書名 分子の変化からみた世界	

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>Homepage of Matsumoto Laboratory @ Shizuoka U. https://wpp.shizuoka.ac.jp/matsumotolaboratory/</p>
--

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	安池 智一 (Yasuike Tomokazu) (10419856)	放送大学・教養学部・教授 (32508)	

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