

研究成果報告書

研究テーマ (和文)	量子状態制御による単分子反応ダイナミックスの実空間観測		
研究テーマ (英文)	Real-space observation of molecular reaction dynamics by quantum state control		
研究期間	2021年 ~ 2022年	研究機関名 東京理科大学	
研究代表者	氏名	(漢字)	星野 翔麻
		(カタカナ)	ホシノ ショウマ
		(英文)	Shoma Hoshino
	所属機関・職名	東京理科大学理学部第一部化学科・講師(採択時: 助教)	
共同研究者 * 2名をこえる場合は、【別紙追加用紙】(P3)に3人目以降を追記してください。	氏名	(漢字)	
		(カタカナ)	
		(英文)	
	所属機関・職名		
	氏名	(漢字)	
		(カタカナ)	
		(英文)	
所属機関・職名			
概要 (600字~800字程度にまとめてください。)			
<p>反応中間体や反応生成物の量子状態分布を実験的に調べることは、化学反応ダイナミックスを解明する上で最も重要である。特に反応中間体の構造情報や、反応生成物の空間分布からは、反応のメカニズムに関する直裁的な情報を引き出すことが可能である。本研究課題では、高精度・高効率な量子状態の選択的励起と、イオンイメージング法の高い空間分解能を融合させ、気相分子の単分子反応ダイナミックスの実空間観測を行うことを目的としている。1年間の研究期間において、主にイメージングシステムの構築・改良に注力した。構築した観測システムのデモンストレーションとして、臭素分子のイオン化限界よりもわずかに低エネルギー領域 (~3000 cm⁻¹) に存在する Rydberg 状態における前期解離ダイナミックスおよび、ハロゲン化アシルの紫外光誘起解離ダイナミックスを調査した。臭素分子の前期解離過程に関しては、励起した Rydberg 状態から電子状態の混合を通じてイオン対状態へ移り変わり、さらに核間距離の長い領域で別の Rydberg 状態へ移動したのちに解離するという複雑な反応機構で解離が進行することが明らかとなった。ハロゲン化アシルの紫外光誘起解離ダイナミックスに関しては、紫外光励起によって強い結合が最初に切断されたのちに弱い結合が切断されるという従来の有機反応論 (Norrish I 型反応) とは全く異なるメカニズムを明らかにすることができた。現在、高精度な量子化学計算を行い、従来の有機反応論との相違点を理論モデルから説明することを試みている。</p>			

発表文献（この研究を発表した雑誌・図書について記入してください。）						
雑誌	論文課題	Predissociation Dynamics of Br ₂ in the [² Π _{1/2}] _c 5d; 0 _g ⁺ and [² Π _{3/2}] _c 6d; 0 _g ⁺ Rydberg States by Velocity Map Imaging Study				
	著者名	S. Hoshino et al.	雑誌名	ACS Omega		
	ページ	29072~29078	発行年	2 0 2 2	巻号	7
雑誌	論文課題	Optical-optical double resonance study of the H ⁺ 1(¹ D ₂) ion-pair state of I ³⁵ Cl: Rovibrational structure and electronic transition dipole moment function				
	著者名	S. Hoshino et al.	雑誌名	Journal of Molecular Spectroscopy		
	ページ	111644-1~111644-7	発行年	2 0 2 2	巻号	387
雑誌	論文課題					
	著者名		雑誌名			
	ページ	~	発行年		巻号	
図書	書名					
	著者名					
	出版社		発行年		総ページ	
図書	書名					
	著者名					
	出版社		発行年		総ページ	

英文抄録（100語～200語程度にまとめてください。）

In this research project, we aim to combine high-precision and high-efficiency selective excitation of quantum states with the high spatial resolution of ion imaging methods to perform real-space observation of the dynamics of molecular reactions of gas-phase molecules. During the one-year research period, we mainly focused on the construction and improvement of the imaging system. As a demonstration of the constructed observation system, we investigated the predissociation dynamics in the highly excited 0_g⁺ Rydberg state of the Br₂, and the UV dissociation dynamics of acyl halides. In the predissociation dynamics of Br₂, analysis of the total kinetic energy release suggested the existence of the predissociation pathways via the 0_g⁺ ion-pair states that interact with the lower and/or excited-core 0_g⁺ Rydberg states lying at long internuclear distance regions through the avoided crossing. We found that the UV dissociation dynamics of acyl halides is completely different from the conventional organic reaction theory (Norrish I-type reaction). The UV photodissociation of acyl halides proceeds through a stepwise reaction mechanism in which strong bonds are broken first, followed by weak bonds. Currently, we are trying to explain the difference from conventional organic reaction theory from a theoretical model by performing highly accurate quantum chemical calculations.