

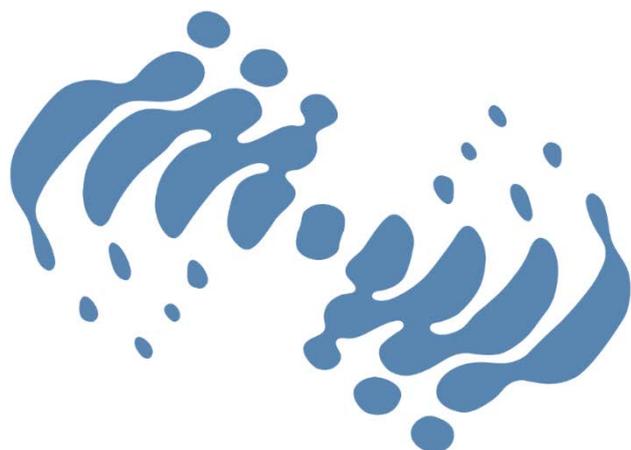
原子衝突学会誌

しょうとつ

第 11 巻
第 4 号
2014 年

シリーズ 「移動管法を使った原子分子科学とその周辺」
第 2 回 原子衝突分野におけるイオン移動度実験
田沼肇, 美齊津文典

キーワード 立体ダイナミクス 笠井俊夫



**THE ATOMIC COLLISION
SOCIETY OF JAPAN**

原子衝突学会賛助会員（五十音順）

アイオーピー・パブリッシング・リミテッド（IOP 英国物理学会出版局）

Institute *of* Physics

<http://journals.iop.org/>

アステック株式会社

ASTECH
CORPORATION

<http://www.astechcorp.co.jp/>

アドキャップバキュームテクノロジー株式会社

ADCAP

<http://www.adcap-vacuum.com>

有限会社イーオーアール



Electronics Optics Research Ltd.

<http://www.eor.jp/>

株式会社オプティマ

Optima Corp.

<http://www.optimacorp.co.jp/>

キャンベラジャパン株式会社

A
CANBERRA

<http://www.canberra.com/jp/>

クリムゾン インタラクティブ プライベート リミテッド

enago[™]

<http://www.enago.jp/>

<http://ulatus.jp/>

<http://www.voxtab.jp/>

株式会社サイエンス ラボラトリーズ



株式会社 サイエンス ラボラトリーズ

<http://www.scilab.co.jp/>

真空光学株式会社

真空光学株式会社 - Vacuum & Optical Instruments -

<http://www.shinku-kogaku.co.jp/>

スペクトラ・フィジックス株式会社

 Spectra-Physics®

<http://www.spectra-physics.jp/>

A Newport Corporation Brand

ソーラボジャパン株式会社

 THORLABS

<http://www.thorlabs.jp/>

ツジ電子株式会社

 TSUJICON

<http://www.tsujicon.jp/>

ツジ電子株式会社

株式会社東京インスツルメンツ

 TOKYO INSTRUMENTS, INC.

<http://www.tokyoinst.co.jp/>

株式会社東和計測

 Touwa Keisoku

<http://www.touwakeisoku.co.jp/>

株式会社トヤマ

 TOYAMA
サイエンスをかたちにするテクノロジー

<http://www.toyama-jp.com/>

株式会社ナバテック

真空機器の未来と歩む

 Navatec

<http://www.navatec.co.jp/>

仁木工芸株式会社



<http://www.nikiglass.co.jp/>

伯東株式会社



<http://www.g5-hakuto.jp/>

丸善株式会社



<http://kw.maruzen.co.jp/>

丸菱実業株式会社

丸菱実業株式会社

MARUBISHI CORPORATION

<http://www.ec-marubishi.co.jp/>

株式会社ラボラトリ・イクイップメント・コーポレーション



<http://www.labo-eq.co.jp/>

しょうとつ

第 11 卷 第 4 号



THE ATOMIC COLLISION
SOCIETY OF JAPAN

目 次

シリーズ「移動管法を使った原子分子科学とその周辺」 第 2 回 原子衝突分野におけるイオン移動度実験	田沼肇, 美齊津文典	...104
原子衝突のキーワード 立体ダイナミクス	笠井俊夫	...116
2014 年度 第 3 回運営委員会(文書持回)報告	庶務委員会委員長	...117
2014 年度 第 4 回運営委員会(文書持回)報告	庶務委員会委員長	...117
第 11 回 アジア原子分子物理学国際セミナー (AISAMP11: 11th Asian International Seminar on Atomic and Molecular Physics)のご案内		...117
Workshop on Interstellar Matter 2014のご案内		...118
第 8 回プラズマエレクトロニクス インキュベーションホールのご案内		...118
原子衝突学会優秀ポスター賞について	顕彰委員会委員長	...119
国際会議発表奨励事業に関するお知らせ	顕彰委員会委員長	...119
「しょうとつ」原稿募集	編集委員会事務局	...120
ユーザー名とパスワード		...120

移動管法を使った原子分子科学とその周辺 第2回 原子衝突分野におけるイオン移動度実験

田沼 肇^{1*}, 美齊津 文典²

¹ 首都大学東京 理工学研究科 物理学専攻 〒192-0397 東京都八王子市南大沢 1-1

² 東北大学 理学研究科 化学専攻 〒980-8578 宮城県仙台市青葉区荒巻字青葉 6-3

tanuma-hajime@tmu.ac.jp

平成 26 年 5 月 16 日原稿受付

気体中におけるイオン移動度に関する実験結果の具体例を紹介する。最も単純な、希ガス中におけるアルカリ原子イオン (閉殻系) から始めて、分子状態が分裂する開殻系、極低エネルギーでのみ観測される量子効果、さらには準安定原子イオンの移動度についても取り上げる。続いて、内部自由度のために理論的には非常に複雑となる分子イオンあるいは分子気体の場合について、単原子気体中の原子イオンでは起こりえない特徴的で重要な問題を幾つか紹介する。

1. はじめに

シリーズ第1回では徹頭徹尾、式と文章だけで解説を行ったが、今回は図とグラフを使って具体的な研究例を紹介していきたい。

前回は述べたように移動度は粒子間ポテンシャルを色濃く反映する。言い換えれば、イオン移動度はポテンシャルに非常に敏感なので、移動度測定は高精度なポテンシャル決定手段の一つである。そこで最初に、閉殻系と開殻系に分けて原子イオンの移動度と粒子間相互作用ポテンシャルの関係を詳細に紹介し、次にそれに関連した共鳴的電荷移行の効果およびイオンの波動性が現れる量子効果について述べ、最後に原子イオンを離れて二原子分子イオンを用いた研究について述べることにしたい。

なお、1990年代前半までに測定された気体中のイオン移動度のデータは E. A. Mason や L. A. Viehland らによってまとめられており、有用なデータベースになっている [1, 2, 3, 4]。これまでに4部が出版されているが、それぞれの冒頭部分にイオン移動度に関する簡潔な理論的説明があり、非常に有用な解説記事であることも紹介しておきたい。

2. 閉殻系

アルカリ原子イオンと希ガス原子の組み合わせでは、どちらもが閉殻電子構造を持った原子であるため、粒子間相互作用ポテンシャルは核間距離 R だけで表される。そのうえ、どちらの原子の電子励起状態も非常に高いエネルギーにしか存在しないため、移動管法で扱う 1 eV 以下の衝突では電子基底状態しか寄与しない。しかも、閉殻電子構造の原子同士では、核間距離が非常に小さな領域でも分子状態は $^1\Sigma^+$ しか存在しないため、完全に単一なポテンシャルだけを考えればよい。この状況はポテンシャル散乱問題としては理想的な状況と言える。実験的にもアルカリイオンは表面電離法によって容易に大強度イオンビームが得られるし、希ガスは安全で容易に入手可能であるから、非常に都合が良い。このため、イオン移動度を精密に測定して定量的な議論を行うためには最適な実験対象として 1970年代から 1990年代までの間に Georgia Institute of Technology の E. W. McDaniel のグループ [5, 6, 7, 8] を初めとして、Norwegian University of Science and Technology の

H. R. Skullerund [9, 10, 11, 12, 13, 14], Australian National University の M. T. Elford [15, 16, 17, 18, 19, 20], University of Singapore の P. P. Ong [21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28], 東北大の武部 [29, 30, 31] など, 完全には網羅できないほどの多数の研究機関で精力的に詳細な測定が行われた。

これらの実験と E. A. Mason, L. A. Viehland, および H. R. Skullerund らによる理論的研究によって, 室温における希ガス中 (He のみ液体窒素温度も含む) におけるアルカリ原子イオンの移動度と粒子間ポテンシャルはほぼ確立した。実験例は少ないものの同様に閉殻系であるハロゲン原子負イオンの移動度実験結果と, さらにイオン移動度実験では検証不可能な中性の希ガス間も含めて, 閉殻原子と希ガス原子のポテンシャルについては統一的な理解がなされ, 近似ではあるものの, かなり高精度な以下のような解析的モデル・ポテンシャル関数が提案されている [32]。

$$V(R) = V_{\text{ex}}(R) + V_c(R) \cdot h(R) \quad (1)$$

$$V_{\text{ex}}(R) = A \exp(-aR) - B \exp(-bR) \quad (2)$$

$$V_c(R) = - \sum_{j=2}^4 \frac{C_{2j}}{R^{2j}} \quad (3)$$

$$h(R) = \begin{cases} \exp[-(1.28R_m/R - 1)^2] & (\text{for } R \leq 1.28R_m) \\ 1 & (\text{for } R \geq 1.28R_m) \end{cases} \quad (4)$$

ここで R_m はポテンシャルが極小をもつ核間距離であり, ポテンシャル・パラメータである $A, B, a, b, C_4, C_6, C_8$ は論文で与えられている。斥力相互作用は電子密度の距離依存性を反映して指数関数で与えられ, 引力相互作用は静電的な分極相互作用 (polarization interaction) や分散相互作用 (dispersion interaction) に起因するため -4 から始める偶数次の負の冪乗項で与えられることが判る。ここで $h(R)$ という関数に疑問を感じる人もいると思われるが, 引力相互作用は R の冪乗に反比例するため, 大きな R では一定値 1 を取り, 小さな R で急激に減衰するような damping 関数を用いないと, このよ

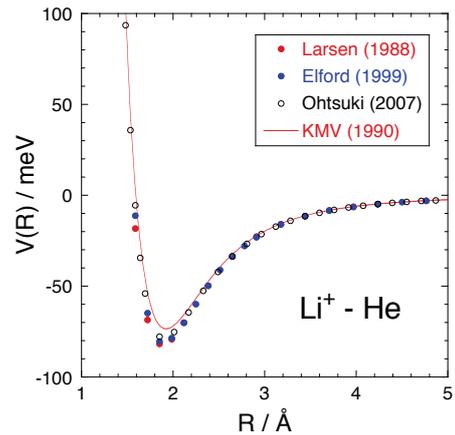


図 1: $\text{Li}^+\text{-He}$ の相互作用ポテンシャル. Larsen [33], Elford [20], Ohtsuki [34], KMV [32],

うな関数形では妥当なポテンシャルを表すことが難しいのである。なお, このポテンシャルは Koutselos–Mason–Viehland の 3 名の著者の頭文字を取って “KMV ポテンシャル” と呼ばれることが多い。

図 1 に大槻一雅による未発表のものを含む $\text{Li}^+\text{-He}$ 系に対する複数の相互作用ポテンシャルの計算結果を示したが, 4 つの報告値の間の差は非常に小さいこと, そして KMV ポテンシャルが非常に妥当であることが判る。 ($\text{Li-He})^+$ は 4 電子系であり, 近年の高精度な電子状態計算ではかなり正確な粒子間ポテンシャルが得られると言える。

以上のような詳細な研究が報告されてはいたが, 1990 年代では気体温度は液体窒素温度である 77 K が下限であり, それ以下の気体温度における測定は報告が全くなかった。そこで首都大学東京では, 液体ヘリウムを用いて 4.3 K の He 気体中におけるアルカリイオンの移動度測定を行った [35]。図 2 に典型的な 300 K における報告値 [11] と併せて, 異なる温度の He 気体中における ${}^7\text{Li}^+$ の換算移動度 K_0 を換算電場 E/N の関数として示した。

気体温度に大きく依存して, $E/N \rightarrow 0$ Td における移動度 (零電場移動度) が異なることが判る。その理由は, シリーズ第 1 回で述べたように, 気体分子の熱運動が零電場における平均衝

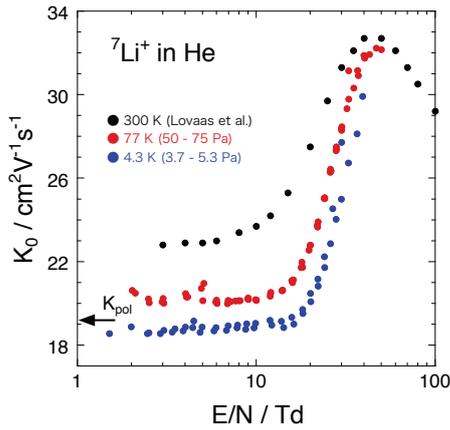


図 2: He 気体中における Li^+ の移動度 K_0 の換算電場 E/N 依存性.

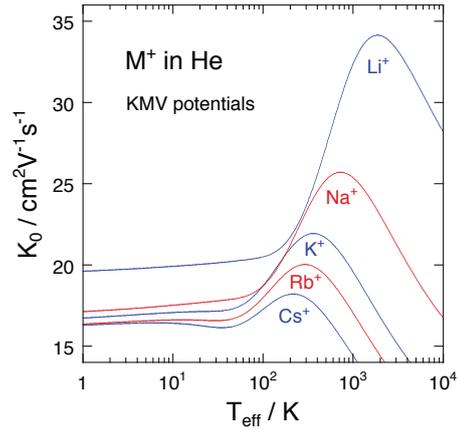


図 4: KMV ポテンシャルを用いて古典的に計算した 5 種類のアルカリイオンの He 気体中における移動度 $K_0(T_{\text{eff}})$.

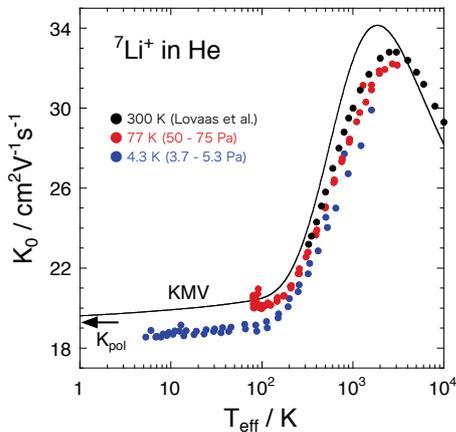


図 3: He 気体中における Li^+ の移動度 K_0 の実効温度 T_{eff} 依存性. KMV: KMV ポテンシャルを用いた古典論による計算値.

突エネルギーを決定するためである. 全く同じ測定データを実効温度 T_{eff} の関数として表すと, 図 3 に示したように, 殆ど気体温度依存性が消失して全てのデータが単一曲線上に乗っているように見える. この図には KMV ポテンシャルを用いて古典的に運動量移行断面積を計算し, 二温度理論にも基づいて求めた計算値も示してある. 完全に一致するとは言えないが, 5% 以内の違いしかなく, 定量的にも十分に再現できていると言える.

この結果は, 実効温度 T_{eff} によるスケールリングが広い気体温度範囲において有効であることを示していると同時に, 零電場移動度 $K_0(T, E/N = 0)$ が分極極限 K_{pol} に漸近するのは気体温度が非

常に低い場合に限ることも意味している.

首都大では他のアルカリイオンと He 気体の組み合わせについても 4.3 K における測定を行った [35]. 測定値と KMV ポテンシャルによる計算値との一致は Li^+ 以外のアルカリイオンでも充分高いので, ここでは図 4 に示した計算値を用いて議論する. 移動度が運動量移行断面積に反比例することから容易に理解できるように, 重いアルカリイオンほど断面積が大きいために移動度の値は小さくなっている. また, 移動度が極大を持つ実効温度をエネルギーに変換すると, 粒子間ポテンシャルの深さにほぼ対応することが知られているが, 軽いアルカリイオンほど KMV ポテンシャルの極大は深く, その傾向は定量的にも一致している.

また, $T_{\text{eff}} = 50$ K 付近の挙動を見ると, Rb^+ ではかすかに, Cs^+ では明瞭に極小が現れている. このような移動度の極小は分極相互作用に次ぐ長距離相互作用である $1/R^6$ に比例する引力項に由来するとされている. $1/R^6$ 項は, ポテンシャルの極小位置より粒子間距離が大きな領域では, 常に存在して分極相互作用に次いで重要な寄与を示すが, 必ずしも移動度に極小が現れる訳ではない. 理論的に十分な説明はされていないが, 実際の粒子間ポテンシャルと分極ポテンシャルを比較したときに, ポテンシャルの極小が分極ポテンシャルより深い場合に移動度

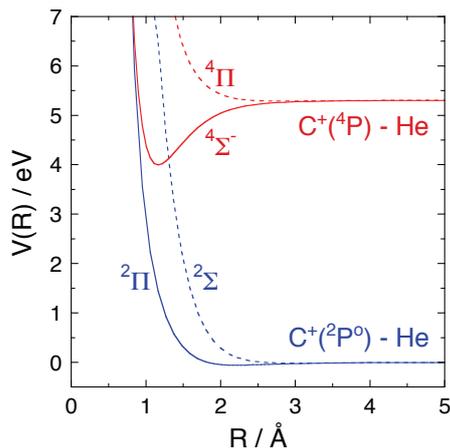


図 5: C^+-He の相互作用ポテンシャル [37].

に極小が現れることが指摘されている [36].

3. 開殻系

3.1 非対称系

開殻イオンと閉殻原子である希ガスとのポテンシャルは、核間距離 R が離れているときは分極相互作用が主要であるが、核間距離が近づくと複数の分子状態 (二原子分子としての電子状態) が生じるためにポテンシャルが分裂する. 例えば、基底状態の $C^+(1s^2 2s^2 2p)$ を LS 項で表すと $^2P_{3/2}$ であるが、 $J = 1/2$ と $3/2$ の状態は 7.86 meV しかエネルギー差がないので、スピン-軌道相互作用を無視して非相対論的に取り扱うことは十分に妥当である. 図 5 に示したように、He との相互作用によって核間距離が 2.5 Å 以下の領域では、基底状態 $^2\Pi$ と第一励起状態 $^2\Sigma$ が明瞭に分かれる [37]. 図 5 では判りにくいですが、 $^2\Pi$ 状態は核間距離 $R = 2.21$ Å に 58.1 meV、 $^2\Sigma$ 状態は $R = 2.99$ Å に 15.2 meV の深さのポテンシャル極小が存在している.

なお、この図には C^+ の第一励起状態 ($1s^2 2s 2p^2 \ ^4P$) の関与した粒子間ポテンシャルも示してあるが、これについては 5.2 節で再び述べる.

量子論的に散乱振幅を考える場合でも、古典的・半古典的に散乱軌道を考える場合でも、2つのポテンシャル経路の寄与を考えなくてはならない. 古典的近似では、それぞれの単一ポテ

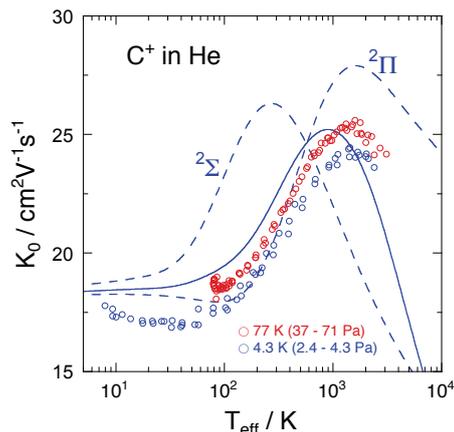


図 6: 基底状態の C^+ の He 気体中の移動度 [37]. 点線は単一の電子状態の粒子間ポテンシャルによる古典的な計算結果. 実線は2つの電子状態を考慮した場合の計算値.

ンシャルだけを考慮して運動量移行断面積を計算し、ポテンシャルの多重度の重みを付けた平均を取るのが標準的な処方箋である. 但し、分子状態 $^{2S+1}\Lambda$ の多重度は、原子の LS 項からの類推では $(2S+1)(2\Lambda+1)$ になるように思えるが、分子には球対称性が存在しないため、大きく異なる. 即ち、 $\Lambda = 0$ の場合は $(2S+1)$ 、 $\Lambda \neq 0$ の場合は Λ 型二重項のために $(2S+1) \times 2$ というのが分子項の多重度である. 従って、 C^+-He 系の場合、 $^2\Pi$ と $^2\Sigma$ の多重度はそれぞれ 4 および 2 となって、平均化された古典的な運動量移行断面積は以下のように書ける:

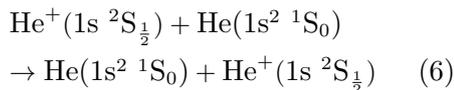
$$Q_D(\varepsilon) = \frac{2}{3}Q_{2\Pi}(\varepsilon) + \frac{1}{3}Q_{2\Sigma}(\varepsilon) \quad (5)$$

実際に、図 6 に測定したデータと共に、 $^2\Pi$ あるいは $^2\Sigma$ 状態のポテンシャルだけから求めた移動度を点線で、式 (5) を用いて計算した移動度を実線で示した. 単独のポテンシャルによる移動度は前述したポテンシャルの極小の深さに対応した実効温度付近に極大を持っており、実測と大きく異なっている. これに対して、運動量移行断面積について重みを掛けて平均した結果は、完全とは言えないものの実測値を良く説明していることが判る.

3.2 対称系

中性希ガス原子とその一価イオンのような組み合わせの場合は、重心に対する鏡映操作によって符号が変化しない gerade と符号が変化する ungerade の 2 つの状態が存在する。He⁺(1s ²S_{1/2})-He(1s² ¹S₀) の場合、粒子間距離が近づくと、基底分子状態 X ²Σ_g⁺ と第一励起状態 A ²Σ_g⁺ という 2 つの電子状態に分裂する。この 2 つの電子状態は核間距離が離れているときには完全に縮退しているが、X 状態のポテンシャル極小は $R \approx 1.1 \text{ \AA}$ にあって約 2.5 eV と深く、一方の A 状態は $R \approx 4.6 \text{ \AA}$ に深さ 2.1 meV という非常に浅い極小を持っている。弾性衝突が起こるときには両方のポテンシャルを経由する可能性があり、g-u 振動と呼ばれる量子力学的位相干渉効果が起こることが知られている。

その上、次式のような共鳴電荷移行反応も考慮しなくてはならない：



このため、散乱角 θ に He⁺ が弾性散乱された場合と、共鳴電荷移行によって生成した He⁺ が $\pi - \theta$ に散乱された場合は、同種粒子であるために粒子の区別は原理的に不可能である。このために散乱振幅は

$$f(\theta) = f_g(\theta) + f_g(\pi - \theta) + f_u(\theta) - f_u(\pi - \theta) \quad (7)$$

と表されることになる。最後の項の符号がマイナスになるのは、Bose-Einstein 統計に従う粒子で波動関数が反対称性を持っているためである。なお、Fermi-Dirac 統計に従う場合には第 4 項の代わりに第 2 項の符号のみがマイナスとなる。この散乱振幅の自乗を用いて微分散乱断面積を求めて、そこから運動量移行断面積、さらに移動度を求めた結果が A. S. Dickinson *et al.* によって報告されている [38]。なお、この論文については量子効果に関する次節で再び議論する。

同位体である ³He⁺-³He の場合、粒子間ポテンシャルは ⁴He⁺-⁴He と完全に同一であるが、³He の核スピンの $I = 1/2$ であるため、 $I = 0$ の

⁴He とは従う統計が異なり運動量移行断面積には差が生じる。移動度の理論式には換算質量 μ の平方根が含まれているため、この換算質量の比を用いたスケーリングを採用すると、³He⁺-³He と ⁴He⁺-⁴He の移動度を比較することができる。理論計算によればスケーリングを行っても両者には明らかな差が見られ、核スピンの起因する Boson と Fermion の違いが予想されているが [39]、残念ながら実験は未だに行われていない。

He⁺-Ar のように、g-u 振動も共鳴電荷移行反応も起きない場合であっても、核間距離が小さな領域では分子としての電子状態が分裂することによって複数のポテンシャルの効果は殆どの場合に存在する。理論的に厳密で正統的な取扱は、異なるポテンシャル経路を全て考慮した散乱振幅 $f(\theta, \varepsilon)$ から始めて、微分散乱断面積と運動量移行断面積を経て、正確な衝突積分を評価する方法である。しかしながら、先に C⁺-He 系についての実測および計算例を紹介したが、量子論的な散乱振幅を考えない古典的で近似的な取扱ですら、実際に報告されている系は極めて乏しいという事実は知っておいて頂きたい。

4. イオン移動度における量子効果

量子力学的な運動量移行断面積は古典論とは異なって衝突エネルギー ε の関数として表すと複雑に振動するが、移動度と直接結びつく衝突積分は衝突エネルギーについて積分した量であるため、その振動構造が実効温度の関数としての移動度の構造に反映することは殆どない。

量子力学的な効果が移動度に現れるのは、低エネルギー衝突の極限で $l = 0$ の s 波だけが散乱に寄与する場合と考えるのが自然である。s 波における位相のずれには次式のような関係が知られている [40]：

$$\tan \eta_0 = -ka \quad (8)$$

ここで k は衝突エネルギーと換算質量で決定される波数 ($k = \sqrt{2\mu E}/\hbar$)、 a は散乱長 (scattering length) と呼ばれる基本的な物理量である。こ

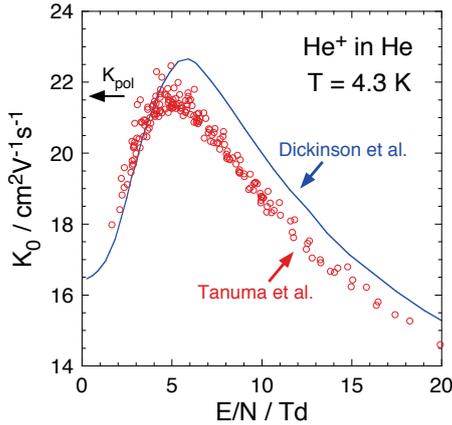


図 7: He 気体中における He^+ の移動度 K_0 の換算電場 E/N 依存性. 赤丸は本稿の著者等による実測値 [46], 実線は Dickinson らによる理論計算値 [38].

の散乱長 a を用いると, 位相のずれは次式で与えられる:

$$\eta_0 = n_0\pi + ka + \dots \quad (9)$$

ここで n_0 はポテンシャル井戸における束縛状態の数である. この関係から $\varepsilon \rightarrow 0$ の極限において

$$Q_D \rightarrow \frac{4\pi a^2}{(1 - ar_0 k^2/2)^2 + k^2 a^2} \quad (10)$$

となることが知られている [40]. ここで r_0 は有効レンジと呼ばれている. この式からは極低温 (あるいは極低エネルギー) の極限では $k \rightarrow 0$ となって, 断面積が一定値 $4\pi a^2$ になるため, 移動度 K_0 は $T_{\text{eff}}^{-1/2}$ という因子のために無限大に発散することになる. しかしながら, 未だにそのような兆候が実験で観測されたことはない.

これまでに移動度 K_0 において古典論からのずれが報告されているのは, He 気体中における He^+ および H^+ の移動度に対する計算結果 [38, 41, 42, 43] と He^+ に対する実験値 [44, 45, 46] のみである. ここでは移動度は E/N が小さくなるほど大きくなり, 5 Td 付近で K_{pol} に近づいたのち, E/N が小さくなるほど移動度も低下している. この極大はアルカリイオンに見られるものとは物理的な意味が全く異なる. この系では共鳴電荷移行反応の断面積が比較的高いエネルギー領域でも大きな値を持つため, 高い

E/N で小さな K_0 を持ち, 徐々に K_{pol} に漸近することが古典論からは予想される. ここでの $E/N = 5$ Td は $T_{\text{eff}} = 10$ K に対応する. 理論計算によれば, 衝突エネルギーに対して激しく振動する運動量移行断面積が, 10 K 以下の領域では平均化されずに大きな値を持つ. この大きな断面積の理由は, 小さな角運動量 ℓ 毎に起こる形状共鳴である. 古典論から大きくずれているが一つのピークだけなので強くは主張しにくい, オービティング共鳴の効果と言うこともできる. 詳細については引用した論文を参照して頂きたい. 因みに, イオン移動度における量子効果を論じた論文は, 理論も実験も (おそらく) これらで全てが網羅されている. だとすると, 理論も実験もそれぞれ一つのグループでしか研究されていないことになる. この件については, 当事者としては, 些かの寂しさを感じざるを得ない.

また, イオン移動度に量子効果が現れる条件が理論的に明確にされていない点は実験屋としては非常に不満である. He^+ の次に軽いイオンは ${}^6\text{Li}^+$ であるが, 少なくとも 4.3 K では量子効果の兆候すら観測できなかった. もし, 気体温度を 1 K に下げれば量子効果が観測されるというような理論的予想があれば, それに向けた実験的な工夫と努力を考えたいと昔から思っていた. イオンの質量とポテンシャル・パラメータから, イオン移動度に量子効果が現れることを予想する方法はないものであろうか?

5. 準安定原子イオン

原子イオンに関する最後の話題として, イオンの電子状態の分離を取り上げる. 但し, 移動管内部を通過するために ms 程度の時間を要するのが移動管実験であるから, 寿命が ms 以上ある準安定状態イオンに限定されることは予め御承知願いたい.

5.1 遷移金属原子イオンの電子状態分離

1990 年, California 大学 Santa Barbara 校の Bowers とその共同研究者は, He を緩衝気体と

する移動管中にコバルト原子一価イオン Co^+ を通過させると、その到着時間スペクトルが2本のピークに分裂することを見出した [47]。しかも、2本のピークの相対強度が、 Co^+ の生成条件に大きく依存することがわかった。具体的には、彼らは Co を含む金属錯体への電子衝撃によって Co^+ を生成しており、元となる錯体の種類と電子の運動エネルギーを換えると、図 8 に示したように2つのピークの強度比が大きく変化した [48]。 Co^+ の基底状態や励起状態のエネルギーやその電子配置は良く知られているので、電子衝撃エネルギーを変化させることによって、どの状態のイオンが生成するのかをある程度制御することが可能である。このようなイオンの生成エネルギーの考察から、これらのピークのうち、遅い成分が電子配置 $3d^8$ に対応する基底状態に起因し、早い成分が $3d^7 4s^1$ に基づく励起状態によることが明らかとなった。

さらに、同様の実験を第一列の遷移金属元素

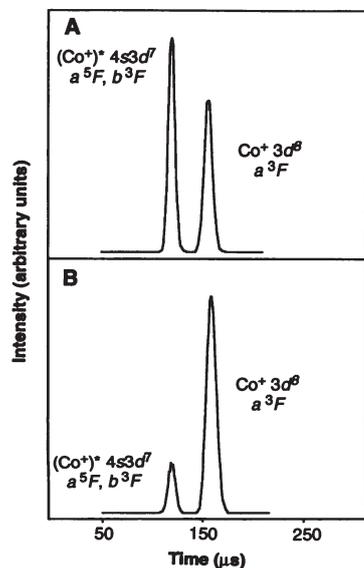


図 8: Co^+ イオンの移動管実験で得られた到着時間スペクトル [48]。 Co^+ の生成条件 A: $\text{Co}(\text{CO})_3\text{NO}$ への 75 eV での電子衝撃, B: シクロペンタジエニルコバルトジカルボニル $\text{CoCp}(\text{CO})_2$ への 50 eV での電子衝撃。遅い成分 (右側) が基底状態 a^3F ($3d^8$)、早い成分が励起状態 a^5F , b^3F ($3d^7 4s^1$) による。文献 [48] より AAAS の許可を得て転載。

のイオン Ti^+ , V^+ , Cr^+ , Mn^+ , Fe^+ , Ni^+ , Cu^+ , Zn^+ に系統的に適用した結果、図 9 に示すように以下のような傾向が見られた [49]。

- (1) これらのイオンの移動度は (分裂の仕方は金属の種類によって異なるが) ほぼ似た値を持つ。
- (2) Ti^+ , V^+ , Cr^+ では到着時間スペクトルのピークが3本に分裂する。
- (3) Mn^+ , Fe^+ , Ni^+ では Co^+ と同様に2本に分裂する。
- (4) Cu^+ , Zn^+ では分裂が見られない。

これらの結果はすべて、遷移金属原子に特有の電子配置による電子状態分離の結果として説明されている。すなわち、第一列遷移金属一価イオンの電子配置としては、主として $3d^n$ と $3d^{n-1} 4s^1$ の2種類が存在し、これらの間の遷移は光学的にパリティ禁制であり、容易に混じりあわない。これらの電子配置に起因した電子状態のイオンが He と衝突したときの相互作用を考える。通常のイオン移動度分析においては、イオンと He との間の長距離引力相互作用 (主として分極相互作用) が重要となる。実際、 $3d^n$ 電子配置に対応した電子状態のイオンと He との衝突では、分極相互作用の一種である電荷-誘起双極子相互作用

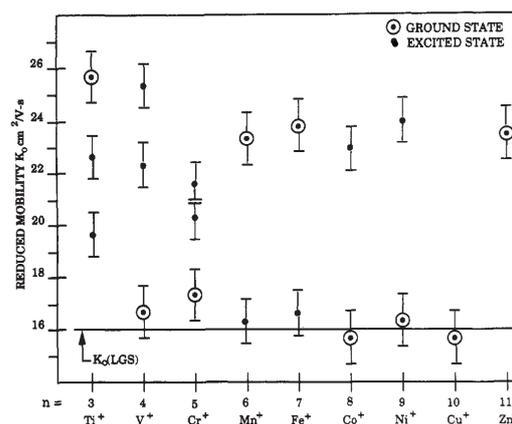


図 9: 第一列遷移金属元素の移動管実験で決定された換算移動度 K_0 [49]。基底状態のイオンのピークによるものは、プロットに丸印がつけられている。 $K_0(\text{LGS})$ は Langevin 極限を示す。文献 [49] より American Chemical Society の許可を得て転載。 Copyright 2014 American Chemical Society.

用だけを考慮した Langevin 理論に基づく移動度 (分極極限 K_{pol}) に近い値をもつという結果が得られている。これに対して、 $3d^{n-1}4s^1$ 電子配置に起因した電子状態のイオンでは、 $4s$ 軌道の電子と He の $1s$ 軌道電子との間の交換反発相互作用の存在によって、長距離引力との相殺が生じるため、実質的な衝突断面積の低下 (イオン移動度の増加) が起こる。実際に到着時間スペクトルが 2 本に分裂する場合、遅い方のピーク ($3d^n$ 電子配置に対応した電子状態に起因) に比べて、早い方のピーク ($3d^{n-1}4s^1$ 電子配置に対応した電子状態に起因) は、1.5 倍ほど大きい移動度が観測されている。

また、電子配置だけでなく、個々の電子状態による移動度の違いも一部観測されている。 $3d^n$ に対応した電子状態については、その分裂は観測されていないが、 $3d^{n-1}4s^1$ 電子配置に対応した電子状態では、分裂が見られている。3 本以上の分裂が観測された Ti^+ , V^+ , Cr^+ がその例である。これらのイオンでは、 $3d^{n-1}4s^1$ 電子配置の成分が 2 本に分裂し、早い方のピークがより高い電子状態に起因していると考えられているが、詳しい同定はまだなされていない。

なお、イオンの基底状態の電子配置が $3d^n$ 型か $3d^{n-1}4s^1$ 型かは、金属原子に依存する。このうち $3d^{n-1}4s^1$ 型が基底状態となるイオン (Ti^+ , Mn^+ , Fe^+) では、 $3d^n$ 型励起状態から基底状態への脱励起が、2 本の到着時間スペクトルのピーク間に残るイオン信号として観測されている。 $3d^n$ 型が基底状態となるその他のイオンでは、このような脱励起は見られない。このことは、前者のイオンでは、 $3d^{n-1}4s^1$ 型基底状態が He と衝突すると、その核間距離が狭くなるにつれて前述の反発相互作用が増して、 $3d^n$ 型励起状態との交差が生じて、状態間の遷移が起こりやすくなるためであると説明されている。

以上の Bowers らの研究では、金属錯体への電子衝撃によって金属イオンを生成し、主に金属イオンと分子との化学反応が、イオンの電子状態にどのように依存するのかという研究に適用されている。例えば、 Co^+ や Fe^+ をドリフト

セル内で電子状態分離しながら、微量のプロパン分子を導入して、それらのイオンの減衰と生成イオンを観測することによって、電子状態選択された金属イオンの化学反応性が議論されている [50]。

また、これとは異なる方法で生成された金属イオンに対する電子状態分離、さら第二列以降の遷移金属原子イオンに対する分離も報告されている。特に、スパッタリング [51] やレーザー蒸発法 [52, 53] を用いると、到着時間スペクトルに表れるピークの相対強度が Bowers らの報告と大きく変化し、生成条件による電子状態分布の違いが報告されている。また、Bowers らの報告では分離が観測されなかった Cu^+ での分離も現れ、 $3d^{10}$ 基底状態のほかに $3d^9 4s^1$ 電子配置に対応した励起状態への分布が増していることがわかる。

以上のような遷移金属原子イオンの電子状態分離は、最初の報告から 20 年以上が経過し、分析化学分野でもこれを利用した系統的な報告がされている [54]。ただし、前述のように、電子配置の違いによる分離以上の議論は進んでおらず、一部に同定の混乱も見られている。今後は、電子配置による分離同定から一歩進んで、どの電子励起状態が主として寄与しているのかといった研究が必要となると予想される。

5.2 準安定分子状態のポテンシャルの決定

遷移金属原子イオン以外については、電子状態を分離しただけでなく、その帰属も明示された報告が幾つかある [55, 56, 57, 58, 59]。しかしながら、粒子間ポテンシャルとの関係を詳細に議論した研究例は、恐らく次の論文でしか報告されていない [37]。

図 5 に示しておいたように、 C^+-He の場合、核間距離の小さい領域で準安定励起状態 ($1s^2 2s 2p^2 \ ^4P$) と He の相互作用ポテンシャルは $^4\Sigma^-$ と $^4\Pi$ の 2 つの分子状態に分離する。そのため、それぞれの単一ポテンシャルから計算した運動量移行断面積を 1:2 の重みを考慮して平均化することで、近似的な運動量移行断面積

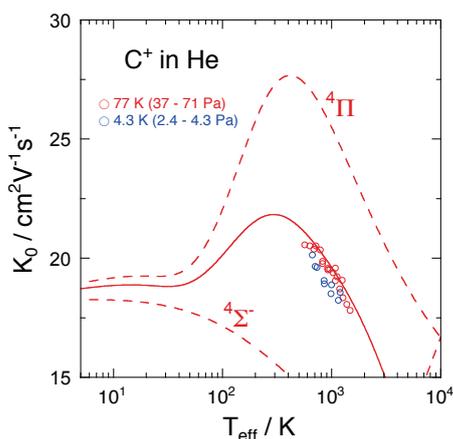


図 10: 準安定励起状態の $C^+(^4P)$ の He 気体中の移動度 [37]. 点線は単一の電子状態の粒子間ポテンシャルによる古典的な計算結果. 実線は 2 つの電子状態を考慮した場合の計算値.

を求めることができる. 図 10 に示したように, 単一ポテンシャルによる移動度の計算値と, 平均化した運動量移行断面積を用いた移動度は大きく異なり, 後者のみが実験値を説明する様子が明確に示されている.

6. 分子イオンの異常なイオン移動度

分子イオンは, 原子イオンとは異なって粒子間ポテンシャルが異方性を持ち, また回転と振動という内部自由度が存在する. しかしながら, meV 程度の低エネルギー衝突では遠距離的な分極相互作用が支配的と考えるのが自然であるため, $T_{\text{eff}} \rightarrow 0$ K の極限では原子イオン同様に分極極限 K_{pol} に漸近すると考えられていた. 実際, 東京都立大学 (現 首都大学東京) において液体ヘリウム温度の He 気体中で初めて測定された分子イオンである N_2^+ の移動度は, 確かに K_{pol} に漸近した [60]. しかし, 続いて測定された CO^+ , O_2^+ , NO^+ では, 何れも $T_{\text{eff}} < 100$ K の領域において K_{pol} を 10% 程度も下回ってしまった [60, 61, 62].

低 T_{eff} 領域での移動度が K_{pol} を下回るという常識から外れた測定結果の解釈として, 1) 分子イオンの回転励起, 2) 粒子間距離の 6 乗に反比例する引力相互作用など, 幾つかの可能性が提

案されたが, 典型的な二原子分子イオンである N_2^+ が例外であったため, 1992 年の最初の測定以来 10 年以上も原因を理解することができなかった. しかし, 2004 年に電気通信大学の大槻一雅と大学院生だった花之枝正俊によって正確な粒子間ポテンシャルを用いた古典的軌道計算が行われ, 分子イオンの移動度が一般的に K_{pol} を下回る機構と N_2^+ が例外である理由が明らかになった [63]. その解釈については, 全ての理論家の方に納得して頂けているわけではないのが現状であるようだが, 粒子間ポテンシャルさえ高精度であれば, 古典論によって説明できる現象であることは間違いないと思われる.

首都大では, その後も様々な二原子分子イオン・三原子分子イオンに関する測定を継続し, 大槻-花之枝モデルによる予想を覆すような結果も出ている. この問題については, 現在, 古典軌道計算による解釈を進めているところであり, 何れ解説記事を書かせて頂きたいと思っている.

7. 分子イオンのアラインメント制御

移動管の中を移動する構造を持った分子イオンはランダムな向きを向いている訳ではなく, 特定の向きに片寄っていることが LIF (レーザー誘起蛍光法) によって実験的に確認されている. この偏りを表現するには, 回転量子数の量子化軸への射影成分の分布が用いられるため, 偏光と同様に alignment parameter を用いて議論が行われるのが一般的である. ここでは, 論文を幾つかリストアップするに留めておき, 高強度レーザー場を使って行われている分子のアラインメント制御が, 移動管法という全く異なった方法によっても実現されていることを紹介しておきたい [64, 65, 66, 67, 68, 69, 70, 71, 72, 73, 74].

8. 分子気体中における実効温度

原子イオンが移動する移動管の中の気体が単原子分子である場合には, 原則として弾性衝突しか起こらない. しかし, 気体が構造を持った

分子である場合には、イオンとの衝突によって分子の回転・振動励起が起こる可能性がある。回転エネルギー準位の間隔は1 meV 以下(軽くて慣性モーメントの小さなH₂は7.5 meVと例外的に大きい)、振動エネルギー準位の間隔は二原子分子であっても0.1 eV程度で、多原子分子ではもっと小さい。このため、室温程度のエネルギーであっても十分に励起が可能だからである。このように非弾性衝突が起こる場合には、実効温度には補正が必要である。

既に述べたように、弾性衝突のみの場合の実効温度 T_{eff} は次式で与えられる:

$$T_{\text{eff}} = T + \frac{1}{3k} M v_d^2 \quad (11)$$

これに対して、分子の回転・振動励起が起こる場合、三温度理論によると実効温度 T'_{eff} は気体分子とイオンの質量比 M/m および非弾性エネルギー損失因子 (inelastic energy loss factor) ξ を用いて、次式で与えられる:

$$T'_{\text{eff}} = \left[1 + \frac{M}{m} \xi \right]^{-1} \left(T + \frac{1}{3k} M v_d^2 \right) \quad (12)$$

これらの2つの式から ξ は次のように表せることが判る:

$$\xi = \frac{m}{M} \left(\frac{T_{\text{eff}}}{T'_{\text{eff}}} - 1 \right) \quad (13)$$

ξ の実験的な決定については幾つかの報告があるが、理論的な理解は殆ど進んでいない。そもそも、分子気体中におけるイオン移動度の理論は単原子分子気体の場合とは複雑さが大きく異なるため、未だに定性的なレベルに留まっているのが現状である [75, 76]。

原子と多原子分子の間の相互作用ポテンシャルは、粒子間距離 R だけでなく分子配向の角度にも依存する。分子配向を決めるには3つのEular角 (α, β, γ) が必要である。このポテンシャル $V(R, \alpha, \beta, \gamma)$ を用いて衝突断面積を求めるのはかなり難しい。古典的な軌道計算法を考えても、衝突の間には R だけでなく、全ての角度が複雑に変化する。しかし、衝突が瞬間的で、最近接となる斥力コアでの相互作用だけで決定されると近似できる場合には、角度を全て固定し

て R だけが変化すると考える方法が知られている。この場合、球対称ポテンシャルと同様にして、量子論では位相のずれ、古典的には散乱角を計算することができる。その結果を角度について平均を取ることで、断面積を求める方法を Mason–Monchick 近似と呼ぶ [77, 78]。これは量子力学的な散乱理論において IOS (infinite order sudden) 近似として知られている計算方法に通じている [79]。

9. おわりに

様々な原子イオンに関する移動度実験の成果を詳しく紹介し、分子イオンと分子気体についても特徴的な現象を幾つか紹介した。厳密な理論を適用することが可能な系は限られているが、そこで培われた議論と経験が現在では複雑な系に見事に応用されている。その発展の様子については、このシリーズの第3回以降で解説されていく筈である。

参考文献

- [1] H. W. Ellis, *et al.*, Atomic Data and Nuclear Data Tables **17** (1976) 177.
- [2] H. W. Ellis, *et al.*, Atomic Data and Nuclear Data Tables **22** (1978) 179.
- [3] H. W. Ellis, *et al.*, Atomic Data and Nuclear Data Tables **31** (1984) 113.
- [4] L. A. Viehland and E. A. Mason, Atomic Data and Nuclear Data Tables **60** (1995) 37.
- [5] I. R. Gatland, *at al.*, J. Chem. Phys. **66** (1977) 537.
- [6] I. R. Gatland, *at al.*, J. Chem. Phys. **66** (1977) 5121.
- [7] I. R. Gatland, *at al.*, J. Chem. Phys. **68** (1978) 2775.
- [8] I. R. Gatland, *at al.*, J. Chem. Phys. **69** (1978) 4951.
- [9] H. R. Skullerud, J. Phys. B **6** (1973) 918.
- [10] H. R. Skullerud, *et al.*, J. Phys. D **19**

- (1986) 197.
- [11] T. H. Lovaas, *et al.*, J. Phys. D **20** (1987) 1465.
- [12] H. R. Skullerud, *et al.*, J. Phys. B **25** (1992) 1811.
- [13] H. R. Skullerud, *et al.*, J. Phys. B **29** (1996) 1925.
- [14] H. R. Skullerud, *et al.*, J. Phys. B **32** (1999) 4509.
- [15] M. T. Elford, Aust. J. Phys. **24** (1971) 705.
- [16] M. T. Elford and H. B. Milloy, Aust. J. Phys. **27** (1974) 211.
- [17] R. A. Cassidy and M. T. Elford, Aust. J. Phys. **35** (1985) 587.
- [18] R. A. Cassidy and M. T. Elford, Aust. J. Phys. **39** (1986) 25.
- [19] J. P. England and M. T. Elford, Aust. J. Phys. **40** 355.
- [20] M. T. Elford, *et al.*, J. Phys. B **32** (1999) 1873.
- [21] P. P. Ong and M. J. Hogan, J. Phys. B **24** (1991) 633.
- [22] P. P. Ong and M. J. Hogan, J. Phys. B **24** (1991) 3193.
- [23] P. P. Ong *et al.*, Phys. Rev. A **45** (1992) 3997.
- [24] P. P. Ong *et al.*, Phys. Rev. A **46** (1992) 5706.
- [25] P. P. Ong, *et al.*, J. Phys. B **26** (1993) 2649.
- [26] P. P. Ong, Phys. Rev. E **47** (1993) 4323.
- [27] P. P. Ong and T. L. Tang, J. Chem. Phys. **103** (1994) 963.
- [28] P. P. Ong and M-M. Li, Chem. Phys. **211** (1996) 115.
- [29] M. Takebe, *et al.* J. Chem. Phys. **73** (1980) 4071.
- [30] M. Takebe, *et al.* J. Chem. Phys. **76** (1980) 2672.
- [31] M. Takebe, J. Chem. Phys. **78** (1973) 7223.
- [32] A. D. Koutselos, E. A. Mason, and L. A. Viehland, J. Chem. Phys. **93** (1990) 7125.
- [33] P-H. Larsen *et al.*, J. Phys. B **21** (1988) 2519.
- [34] K. Ohtsuki, *private communication* (2007).
- [35] 的場史朗, 博士学位論文 (東京都立大学, 2008).
- [36] A. Yousef *et al.*, J. Chem. Phys. **127** (2007) 154309.
- [37] S. Matoba, *et al.*, J. Phys. B **41** (2008) 145205.
- [38] A. S. Dickinson, M. S. Lee, and L. A. Viehland, J. Phys. B **32** (1999) 4919.
- [39] M. S. Lee, A. S. Dickinson, and L. A. Viehland : *J. Phys. B* **33** (2000) 5121.
- [40] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics (Non-Relativistic Theory)* (Butterworth-Heinemann, 1977) Sec. 132–133.
- [41] A. S. Dickinson, J. Phys. B **1** (1968) 387.
- [42] A. S. Dickinson, J. Phys. B **1** (1968) 395.
- [43] A. S. Dickinson and M. S. Lee, J. Phys. B **11** (1978) L377.
- [44] T. M. Kojima, N. Saito, N. Kobayashi, and Y. Kaneko, J. Phys. Soc. Jpn. **61** (1992) 6.
- [45] N. Saito, T. M. Kojima, N. Kobayashi, and Y. Kaneko, J. Chem. Phys. **100** (1994) 5726.
- [46] H. Tanuma, H. Fujimatsu, and N. Kobayashi, J. Chem. Phys. **113** (2000) 1738.
- [47] P. R. Kemper and M. T. Bowers, J. Am. Chem. Soc. **112** (1990) 3231.
- [48] M. T. Bowers, P. R. Kemper, G. von Helden, and P. A. M. van Koppen, Science **260** (1993) 1446.
- [49] P. R. Kemper and M. T. Bowers, J. Phys.

- Chem. **95** (1991) 5134.
- [50] P. A. M. van Koppen, P. R. Kemper and M. T. Bowers, *J. Am. Chem. Soc.* **114** (1992) 10941.
- [51] W. S. Taylor, E. M. Spicer, and D. F. Barnes, *J. Phys. Chem. A* **103** (1999) 643.
- [52] Y. Ibrahim, E. Alsharaeh, R. Mabrouki, P. Momoh, E. Xie, and M. S. El-Shall, *J. Phys. Chem. A* **112** (2008) 1112.
- [53] F. Misaizu, N. Hori, H. Tanaka, K. Komatsu, A. Furuya, and K. Ohno, *Eur. Phys. J. D* **52** (2009) 59.
- [54] R. C. Dougherty, *Mass Spectrom. Rev.* **20** (2001) 1142.
- [55] B. R. Rowe *et al.*, *J. Chem. Phys.* **73** (1980) 194.
- [56] R. Johnsen and M. A. Biondi, *J. Chem. Phys.* **74** (1981) 305.
- [57] R. Johnsen, M. A. Biondi, and M. Hayashi, *J. Chem. Phys.* **77** (1982) 2545.
- [58] H. A. Fhadil, D. Mathur, and J. B. Hasted, *J. Phys. B* **15** (1982) 1443.
- [59] T. Koizumi, *J. Phys. B* **25** (1992) L335.
- [60] J. Sanderson, H. Tanuma, N. Kobayashi, and Y. Kaneko, *J. Phys. B* **26** (1993) L465.
- [61] J. Sanderson, H. Tanuma, N. Kobayashi, and Y. Kaneko, *J. Phys. B* **27** (1994) L433.
- [62] H. Hidaka, S. Jinno, H. Tanuma, and N. Kobayashi, *J. Phys. B* **36** (2003) 1515.
- [63] K. Ohtsuki, M. Hananoe, and M. Matsuzawa, *Phys. Rev. Lett.* **95** (2005) 213201.
- [64] R. A. Dressler, H. Meyer, and S. R. Leone, *J. Chem. Phys.* **87** (1987) 6029.
- [65] B. Follmeg and P. Rosmus, *J. Chem. Phys.* **93** (1990) 4687.
- [66] B. Follmeg, H-J. Werner, and P. Rosmus, *J. Chem. Phys.* **95** (1991) 979.
- [67] E. B. Anthony *et al.*, *J. Chem. Phys.* **106** (1997) 5413.
- [68] R. Baranowski and M. Thachuk, *J. Chem. Phys.* **110** (1999) 11383.
- [69] R. Baranowski and M. Thachuk, *J. Chem. Phys.* **111** (1999) 10061.
- [70] E. B. Anthony, V. M. Bierbaum, and S. R. Leone, *J. Chem. Phys.* **114** (2001) 6654.
- [71] R. Baranowski, B. Wagner, and M. Thachuk, *J. Chem. Phys.* **114** (2001) 6662.
- [72] R. Baranowski and M. Thachuk, *Phys. Rev. A* **63** (2001) 032503.
- [73] R. Baranowski and M. Thachuk, *Phys. Rev. A* **64** (2001) 062713.
- [74] X. Chen, R. Araghi, R. Baranowski, and M. Thachuk, *J. Chem. Phys.* **116** (2002) 6605.
- [75] L. A. Viehland, S. L. Lin, and E. A. Mason, *Chem. Phys.* **54** (1981) 341.
- [76] K. Iinuma *et al.*, *J. Chem. Phys.* **105** (1996) 3031.
- [77] L. Monchick and E. A. Mason, *J. Chem. Phys.* **35** (1961) 1676,
- [78] E. A. Mason and L. Monchick, *J. Chem. Phys.* **36** (1962) 1622.
- [79] G. A. Parker and R. T. Pack, *J. Chem. Phys.* **68** (1978) 1585.

「原子衝突のキーワード」

立体ダイナミクス(Stereodynamics)

1986年に第一回“Stereodynamics of Chemical Reactions”国際会議が、イスラエルのエルサレムで開催されました。いわばこの時点で「立体ダイナミクス(Stereodynamics)」の用語が国際的に認知されたと考えていいでしょう。同年、D. Herschbach, Y. T. Lee, J. Polanyiに化学反応の基礎研究への貢献でノーベル化学賞が授与されました。気相や固体表面上で繰り広げられる原子や分子、イオンなどの弾性、非弾性、そして化学反応過程は形状をもつ粒子の相互方向に大きく影響されるのは明らかです。この衝突時における分子相互の相対位置効果を「配向効果」あるいは「立体効果」と呼びます。そして国際学会の名称を敷衍すれば、とくに「化学反応における立体効果」が立体ダイナミクスを代表するひとつの分野とすることができます。

化学には、「立体化学(Stereo Chemistry)」と呼ばれる分野が旧来ありますが立体化学は、どちらかといえば分子や錯体の立体的構造に主眼を置いて反応性を議論する研究分野です。一方、立体ダイナミクスは衝突分子の動的挙動を分子レベル・波動関数レベルで観測して立体効果を解明する研究といえます。ちなみに、化学反応の速度定数 k の温度依存性を表すアレニウス(Arrhenius)式にも立体ダイナミクスに関する記述があります。

$$k(T) = A \exp(-E_a/RT),$$

ここで A は前指数因子で気体分子運動論によれば「衝突頻度」と「立体因子」の積です。 E_a は活性化エネルギー、 R は気体定数、 T は絶対温度です。このスカラー量の立体因子(steric factor)も反応の立体効果を表現していると理解できます。面白いことに、アレニウス式の活性化エネルギー E_a に立体異方性、つまり衝突配向角 θ 依存性を持たせて $E_a(\theta)$ とみなし立体効果を導入する場合があります。このように立体効果に関して従来のさまざまな解釈がなされていますが、ここで述べる「立体ダイナミクス」の特徴は化学反応の配向効果を衝突する原子・分子の形状や波動関数そして量子力学にもどづく相互作用のレベルにまで立ち戻って、

なぜそのような立体効果が現れるのかを実験により実証し、さらに理論によって理解しようとする空間方向・衝突の立体構造を重視した反応ダイナミクスであるということが出来ます。

原子・分子レベルで配向効果を明らかにするのが立体ダイナミクスであれば、その実験方法はおのずと真空環境あるいは分子回転や量子状態が変らない短時間で立体効果を観測する必要があります。配向分子を準備する方法としては六極不均一電場(磁場)配向法、強電場強制配向法、自然衝突アライメント法、あるいはさまざまなレーザー電場を用いた分子配向・配列方法がありますが、紙面の関係上、それらの手法の詳細、固有の特徴についてはここでは割愛します。アライメント(配列)法を用いれば分子軸のみが立体制御でき、配向法を用いれば分子の頭と尾も同時に立体選別することができます。そして立体ダイナミクスを応用してマクロに化学反応を制御しようとする場合には、分子配向が長時間保たれている配向制御法を選ぶ必要があるでしょう。立体ダイナミクスの実験例については参考文献[1,2]をご参照ください。

立体ダイナミクスは弾性、非弾性、反応性衝突過程に大きな役割を果たします。今後、生体反応など複雑反応系における立体効果の解明、地球生物圏のホモキラルの問題(アミノ酸が左手系のみであること)の解明など、多くの重要な研究課題が立体ダイナミクスに残されています[3]。

(国立台湾大学, 大阪大学名誉教授 笠井俊夫)

参考文献

- [1] K. Kuwata and T. Kasai, “The Chemical Dynamics and Kinetics of Small Radicals, Part II” World Scientific (1995).
- [2] 笠井俊夫, J. Vacuum Sci. Jpn. 真空, **53**, 629 (2010).
- [3] T. Kasai *et al.*, Phys. Chem. Chem. Phys., **16**, 9776 (2014).

2014 年度 役員・委員会

会長

高橋正彦 (東北大学)

幹事

城丸春夫 (首都大学東京) [副会長]

加藤太治 (核融合科学研究所)

中井陽一 (理化学研究所)

渡邊 昇 (東北大学)

運営委員

東 俊行 (理化学研究所)

岡田邦宏 (上智大学)

小田切丈 (上智大学)

佐甲徳栄 (日本大学)

城丸春夫 (首都大学東京)

中村信行 (電気通信大学)

星野正光 (上智大学)

森下 亨 (電気通信大学)

市村 淳 (宇宙科学研究所)

鵜飼正敏 (東京農工大学)

加藤太治 (核融合科学研究所)

北島昌史 (東京工業大学)

田沼 肇 (首都大学東京)

長嶋泰之 (東京理科大学)

中井陽一 (理化学研究所)

渡邊 昇 (東北大学)

常置委員会

庶務委員会

委員長：渡邊 昇 (東北大学)

編集委員会

委員長：中井陽一 (理化学研究所)

行事委員会

委員長：加藤太治 (核融合科学研究所)

広報渉外委員会

委員長：城丸春夫 (首都大学東京)

顕彰委員会

委員長：鵜飼正敏 (東京農工大学)

編集委員 岸本直樹, 北島昌史, 富田成夫, 中井陽一,
彦坂泰正, 日高宏, 間嶋拓也, 森林健悟



しょうとつ 第11巻 第4号 (通巻59号)

Journal of Atomic Collision Research

©原子衝突学会 2014

<http://www.atomiccollision.jp/>

発行: 2014年7月15日

配信: 原子衝突学会事務局 <acr-post@bunken.co.jp>