

# 目 次

まえがき .....茅 幸二... i

1 序 論 .....茅 幸二... 1

- 1 マイクロクラスター 1 類 2
- 2 分子間力によるマイクロクラスターの分 文 献 3

## I マイクロクラスターの生成法とその検出

2 マイクロクラスターの生成法とその検出 .....中嶋 敦... 7

- 1 生成法 7
  - 1.1 超音速ジェット法 7 行時間型質量分析法 11/イオンサイク  
ロトロン共鳴(ICR) 11
  - 1.2 レーザー蒸発法 8
  - 1.3 スパッタリング法 8
  - 1.4 ガス中蒸発法 8
  - 1.5 溶液法 8
- 2 検出法 9
  - 2.1 質量分析法 9 2.2 検出器 12
  - ウィーンフィルター 9/2重収束磁場型 2.3 光電子分光法 14
  - 質量分析法 9/4重極質量分析 10/飛 半球型エネルギー分析器 14/飛行時間  
型電子エネルギー分析器 14
  - 2.4 電子線回折法 15
  - 2.5 ソフトランディング(Soft-Landing) 16
  - 文 献 17

## II 小さなクラスターの構造と運動

3 クラスタ構造の精密解析と大振幅振動 .....山内 薫...21

- 1 序 論——クラスターの内部運動解明への模索 21
- 2 分子クラスターの構造 22
  - 2.1 アンモニアダイマーの構造と大振幅振動 23
  - 2.2 ファンデルワールスクラスタの大振幅振動 25
- 3 電子励起状態のファンデルワールスクラスタ 25
  - 3.1 高分解能測定による構造決定 26
  - 3.2 質量選別スペクトルによる振動ダイナミックス解明 27
- 4 原子クラスターのリュードベリ状態のダイナミックス 29
  - 4.1 HgNe および HgAr の最低のリュードベリ状態 30
  - 4.2 HgAr<sub>2</sub> の最低リュードベリ状態の振電ダイナミックス 32
  - 4.3 収束するリュードベリ系列とイオンクラスタの構造の決定へのアプローチ 33
- 5 結 語 34
- 文 献 35

## 4 クラスターの電子状態——電子, 金属原子, 金属イオンの溶媒和

富宅喜代……39

- |                                   |                                |
|-----------------------------------|--------------------------------|
| 1 溶媒和電子クラスター 39                   | 6 溶媒和金属イオンの幾何構造と電子構造 48        |
| 2 溶媒和金属原子クラスター 42                 | 7 溶媒和金属イオンの光解離過程と金属イオンの酸化反応 51 |
| 3 溶媒和金属イオンクラスター 46                | 文献 53                          |
| 4 溶媒和金属イオンクラスターの生成 46             |                                |
| 5 金属イオン-溶媒分子(1:1)錯体の高分解能レーザー分光 47 |                                |

## 5 分子クラスターの振動分光 ……江幡孝之, 三上直彦…57

- |                      |   |
|----------------------|---|
| 1 分子クラスターの生成および選別 57 | 誘導放出分光法 60/赤外-紫外2重共鳴分光法 62/誘導ラマン-紫外2重共鳴分光法 64 |
| 2 分子クラスターの振動分光 58    | 文献 68   |
| 2.1 蛍光分光法 58         |   |
| 2.2 2重共鳴法 59         |   |

## III クラスターの反応

## 6 クラスターを出発点とする化学反応の制御……………梶本興亜…73

- |                              |                        |
|------------------------------|------------------------|
| 1 クラスターと反応制御 73              | 3.3 ケージ反応 79           |
| 2 配向の規定と反応の制御 73             | 3.4 表面衝突反応 80          |
| 2.1 生成物分布の制御——衝突方向の規定 73     | 4 数制御したクラスターとの2分子反応 80 |
| 2.2 反応経路の制御——励起原子軌道の方向の制御 75 | 4.1 2分子反応 80           |
| 2.3 反応速度の増大——クラスターイオン反応 76   | 5 2分子反応のフェムト秒ダイナミクス 81 |
| 3 溶媒和数制御——極性反応とケージ効果 77      | 5.1 2分子反応の時間スケール 81    |
| 3.1 電子移動反応 77                | 5.2 プロトン移動反応 82        |
| 3.2 イオン-分子反応 78              | 5.3 反応のコントロール 83       |
|                              | 文献 84                  |

## 7 クラスター内イオン・分子反応 ……三上直彦…85

- |  |                  |
|--|------------------|
| 1 水素結合クラスターイオン内のプロトン移動 85  | 89               |
| 1.1 $[\text{C}_6\text{H}_5\text{OH}\cdot\text{NH}_3]^+$ の最安定構造 87          | 2 光イオン化求核置換反応 91 |
| 1.2 $[\text{C}_6\text{H}_5\text{OH}\cdot(\text{H}_2\text{O})_n]^+$ のプロトン移動 | 3 まとめ 95         |
|  | 文献 96            |

## 8 金属および半導体クラスターの表面反応……………中嶋 敦, 茅 幸二…97

- |                              |                                |
|------------------------------|--------------------------------|
| 1 金属クラスターの生成・検出法と吸着反応性の測定 97 | 103                            |
| 2 金属クラスターの吸着反応性 99           | 3.2 シリコン-ナトリウム2成分クラスターの反応性 104 |
| 3 シリコンクラスターの反応性 103          | 文献 107                         |
| 3.1 シリコンクラスターイオンの反応性         |                                |

- 9 クラスタと固体表面との衝突過程と反応 .....寺寄 亨, 近藤 保...109
- 1 中性ファンデルワールスクラスタの多  
体散乱機構 110
  - 2 サイズ選別されたクラスタイオンを用  
いた衝突反応の探索 114
    - 2.1 ハロゲン化アルカリクラスタイオンの  
表面衝突反応 114  
Na<sub>N</sub>F<sub>N-1</sub><sup>+</sup>の劈開 114/Na<sub>N</sub>F<sub>N-1</sub><sup>+</sup>から  
シリコン表面へのF<sup>-</sup>移動反応 115
    - 2.2 金属および半導体クラスタイオンの表  
面衝突反応 116
    - 2.3 表面衝突解離過程における溶媒効果  
118
  - 3 新しい化学反応の可能性 120
- 文 献 121
- 10 クラスタイオンビームによる表面プロセス .....山田 公...123
- 1 ガスクラスタイオンビーム装置の特徴  
125
  - 2 分子動力学法によるシミュレーション  
126
  - 3 クラスタイオン注入と極浅イオン注入  
効果 128
  - 4 クラスタイオンビームスパッターと表  
面平坦化効果 131
  - 5 ラテラルスパッター特性 134
  - 6 ガスクラスタイオン援用薄膜形成  
135
- 文 献 137
- 11 写真の感光および現像と銀クラスタ .....谷 忠昭...139
- 1 銀塩写真感光材料と写真過程 139
  - 2 ハロゲン化銀粒子 139
  - 3 潜像中心の形成と現像 141
  - 4 最小潜像中心のサイズ 142
  - 5 銀クラスタの性質と潜像中心 143
  - 6 感光過程における銀クラスタの役割  
145
- 文 献 151
- IV 液体の局所構造としてのクラスタ
- 12 水の中でのクラスタ構造と変化 .....齊藤真司, 松本正和, 大峰 巖...155
- 1 これまでのモデル 156
  - 2 方法論 157
  - 3 水のダイナミクス——水素結合ネット  
ワーク構造の変化 158
  - 4 密度揺らぎ 162
  - 5 水素結合ネットワーク変化のダイナミッ  
クス 163
  - 6 緩和過程と物理量 165
  - 7 まとめ 170
- 文 献 170
- 13 水素結合性溶液のクラスタ構造 .....西 信之...173
- 1 同種分子どうしの混合溶液中での選択的  
な会合——水とエタノール混合状態の分  
子間結合のラマン分光 174
  - 2 希薄水溶液中でのアルコール分子どうし  
の会合——X線回折, 液体の質量分析,  
NMR 176
  - 3 エタノール-水混合溶液のクラスタ構造  
と機能 182
- 文 献 187

- 14 回折法による超臨界流体のクラスタリングの研究 .....西川恵子...189
- 1 超臨界流体の構造と回折実験 189                      3 超臨界流体の小角散乱実験 196
- 2 超臨界流体の広角散乱実験 191                      文 献 199

## V 金属および半導体クラスター

- 15 金属クラスター安定性——電子の殻から原子の殻へ .....茅 幸二...203
- 1 典型金属クラスターでの電子の殻構造 210  
207                      文 献 212
- 2 遷移金属クラスターに魔法数はないのか
- 16 金属クラスターの磁性 .....野末泰夫...213
- 1 金属磁性の特徴とクラスター 213                      ター 217
- 2 磁気モーメントと磁性 214                      常磁性クラスター 217/反磁性クラスター 219/クラスター間の相互作用と強磁性 221
- 2.1 局在磁気モーメントと磁性 214
- 2.2 遍歴電子系の磁性 215
- 3 非磁性元素クラスターの磁性 216                      4 磁性元素を含むクラスターの磁性 224
- 3.1 量子サイズ効果 216                      文 献 225
- 3.2 ゼオライト結晶中のアルカリ金属クラスター
- 17 シリコンクラスター・超微粒子の可視発光 .....林 真至...229
- 1 ポーラス(多孔質)シリコン 229                      3 シリコンクラスター 233
- 2 シリコン超微粒子 231                      文 献 236

ABSTRACTS : Development in Microcluster Science .....239

索 引 .....245

著者紹介 238, 248