



平成14年度～平成16年度
科学研究費補助金（基盤研究 A(2)）
研究成果報告書

ボランの新奇水素結合構造に関する
レーザー分光研究

（課題番号 14204057）

平成17年 5月

研究代表者
藤井朱鳥
（東北大学 大学院理学研究科 助教授）

ボランの新奇水素結合構造に関する レーザー分光研究

(課題番号 14204057)

平成14年度～平成16年度
科学研究費補助金（基盤研究 A(2)）
研究成果報告書

平成17年 5月

研究代表者
藤井朱鳥
(東北大学 大学院理学研究科)

水素結合研究は、1922年に Latimer and Rodebush が初めて「水素結合」の概念を提案して以来、その物性や構造に関する膨大な研究成果の蓄積があり、生命体をはじめ自然界の様々な局面において、水素結合の化学物性や結合構造の特徴に基づく化学的役割については広く認知されている。

その飛躍的研究発展の原動力は、1950年代に現れた自記式赤外分光光度計の普及であった。その後、磁気共鳴法やX線結晶解析法などの高性能化やフーリエ変換赤外分光 (FTIR) 法の登場により更に発展した。しかし、凝集系における水素結合研究は、いずれも巨視的物性の研究に留まっていた。

1975年、超音速分子線レーザー分光法が米国シカゴ大グループで開拓されて分子分光学的研究法は革新的な変貌を遂げた。ほぼ同時期にその方法を利用した分子クラスター構造研究がスタートして、分子間構造に関する分子レベルの構造研究分野が開拓された。しかし、その分光計測は紫外可視領域に限定され、分子間構造研究は電子スペクトル観測による間接的解析に留まっていた。

1993年、本研究代表者らは、分子クラスターの赤外・紫外2重共鳴レーザー分光法を開拓し、分子間構造を敏感に反映する振動分光法を初めて分子クラスターに適用して、分子間構造に関する分子レベル解析法を拓いた。特に、水素結合性クラスター構造解析を世界に先駆けて実行し、振動分光解析と量子化学理論計算とを併用した分子間水素結合構造解析法を開拓して、その後の同様な研究を展開している国内外のグループによる研究の基本的モデルとなった。

ところで、一般に、水素結合 $A-H\dots X$ は、電気的陰性部位 A に結合した水素は電気的陽性に分極するので、陰性原子 (団) X に結合するものであると理解されている。しかし、金属 (M) やホウ素 B などの水素よりも電気陰性度が小さい原子に結合した水素は電気的陰性に分極するので、そのような部位 $H-M(B)$ は $A-H$ の水素受容体として作用することが出来るので、 $A-H\dots H-M(B)$ のような水素原子間での水素結合の可能性 (2水素結合とよばれる) がありうる。実際、理論計算では多くの例が示されており、 $Li-H\dots H-O-H$, $BH_3\dots NH_3$ 等において、結合エネルギーや結合形態が示されている。また、X線結晶解析の分野では、中心金属原子に結合した水素がアミン等の配位子の水素原子と異常に接近している場合が報告され、水素化金属に起因する特異な相互作用が存在することが指摘されている。しかしながら、その相互作用が結晶中の制限された空間内で発生するものであるか否かについては不明であるため、新奇相互作用が水素結合であることの実験的証明はされていない。

本研究課題では、ボラン及びその化合物が関与する2水素結合錯体の特異な幾何構造をレーザー分光学的に解明して、その電子構造や反応物性の特徴を明らかにすることを目標としている。特に、特殊な赤外・紫外レーザー2重共鳴分光法を駆使して、超音速分子線で生成する気相2水素結合クラスターの振動分光解析を行って、以下の点を明らかにする。

- (1) 2水素結合 $B-H\dots H-O$ の双方の水素伸縮振動 ($B-H$ 振動と $O-H$ 振動) の分子力場が低下していることを実証し、2水素結合形成の完全な実験的証明を行う。
- (2) 通常の水素結合体では水素結合角は直線的であることとは全く対照的に、理論的に予測される2水素結合角 $\angle BHH$ は 90° に近い。その実験的証拠を獲得して、電子状態の理論解析を行う。
- (3) 2水素結合錯体の光イオン化によって発生する水素分子脱離反応機構を解明する。

研究組織

平成14～15年度

研究代表者：三上直彦（東北大学・大学院理学研究科・教授）

研究分担者：藤井朱鳥（東北大学・大学院理学研究科・助教授）

研究分担者：前山俊彦（東北大学・大学教育研究センター・助手）

平成16年度（研究代表者の交代）*

研究代表者：藤井朱鳥（東北大学・大学院理学研究科・助教授）

研究分担者：三上直彦（東北大学・大学院理学研究科・教授）

研究分担者：前山俊彦（東北大学・大学教育研究センター・助手）

*) 前年度までの研究代表者三上直彦の平成16年度科研費

特別推進研究(2)採択に伴う研究代表者の交代

研究費

交付決定額（配分額）

（金額単位：千円）

	直接経費	間接経費	合計
平成14年度	31,200	9,360	40,560
平成15年度	8,000	2,400	10,400
平成16年度	4,600	1,380	5,980
総計	43,800	13,140	56,940

研究成果の概要

1. 超音速分子線法を用いて、フェノールとホウ素水素化物に関わる 2 水素結合体が自由空間において形成されることを発見し、電子スペクトルや赤外レーザー分光法を用いて、その結合が水素結合としての特徴を持っていることをはじめ実験的に実証した。(発表済み)
2. フェノール以外にもピリドンやアニリン等でも水素受容体として作用することを見出して、この結合がフェノールに限定された特殊なものではなく、一般性を持った 2 水素結合であることを示した。(発表済み)
3. 量子化学理論計算によって、これらの結合構造の最安定構造を解析し、結合エネルギーおよび振動スペクトルシミュレーション解析して、2 水素結合であることを確認した。(発表済み)
4. この結合体を光イオン化すると、水素分子脱離反応に起因するフラグメントが生成することを見出して、水素原子間距離が接近していることを別の観点からも実証した。(発表済み)
5. ホウ素化合物以外にも探索を進めて、シリコンの水素化物とフェノールとの 2 水素結合体の存在を確認して、同様のレーザー分光解析、量子化学理論解析を行って、2 水素結合体の形成を実証した。(未発表)
6. その他、新奇あるいは微弱水素結合体の探索を推進して、C-H... π 、C-H...O、等の結合構造解析を行い、振動分光法によって水素結合としての特徴を見出し、微弱水素結合として存在することを実証した。(一部発表済み)
7. 水やアルコールなどの水素結合性クラスターにおいて、分子間水素結合ネットワーク形態のレーザー分光解析を推進して、サイズの増大とともにどのような構造が主要なものであるかを解析した。(一部発表済み)
8. 典型的な水素結合体において、ピコ秒時間分解赤外紫外分光法を展開して振動緩和ダイナミクス研究を実施した。(一部発表済み)

(1) 学会誌等

1. C-H stretching vibration of benzene and toluene in their S_1 states observed by double resonance vibrational spectroscopy in supersonic jets, Chika Minejima, Takayuki Ebata, and Naohiko Mikami, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **4**, 1537-1541 (2002).
2. Dihydrogen bonded phenol-borane-dimethylamine complex: An experimental and theoretical study, G. Naresh Patwari, Takayuki Ebata, and Naohiko Mikami, *J. Chem. Phys.*, **116** (14), 6056-6063 (2002).
3. Structure and photoinduced excited state keto-enol tautomerization of 7-hydroxyquinoline-(CH_3OH)_n clusters, Yoshiteru Matsumoto, Takayuki Ebata, and Naohiko Mikami, *J. Phys. Chem. A* **106**(23), 5591-5599 (2002).
4. Vibrational spectroscopic evidence of unconventional hydrogen bonds, Asuka Fujii, G. Naresh Patwari, Takayuki Ebata, and Naohiko Mikami, *Int. J. Mass. Spec.*, **220**, 289-312 (2002).
5. Intramolecular Charge-Transfer process of Jet-Cooled (*p*-Cyanophenyl) pentamethyldisilane: Roles of the Torsional Motion and the Si-Si Bond Change, Haruki Ishikawa, Yoichi Shimanuki, Masuyuki Sugiyama, Yuko Tajima, Mitsuo Kita, and Naohiko Mikami, *J. Am. Chem. Soc.*, **124** (21), 6220-6530 (2002).
6. Gas phase dihydrogen bonding: clusters of borane-amines with phenol and aniline, G. Naresh Patwari, Takayuki Ebata, and Naohiko Mikami, *Chem. Phys.*, **283**, 193-207 (2002).
7. Rotational analysis of jet-cooled phenylpentamethyldisilane: vibronic interaction with intermolecular charge transfer state, Haruki Ishikawa, Masuyuki Sugiyama, Takasi Kishi, Mitsuo Kira, Naohiko Mikami, Okitsugu Kajimoto, and A. Mahipal Reddy, *Chem. Phys.*, **283**, 379-388 (2002).
8. Stimulated Emission Spectroscopy of SiH_2 : First Observation of the Spin-Orbit Interaction between the X^1A_1 and the a^3B_1 States, Haruki Ishikawa, Yasuhiko Muramoto, and Naohiko Mikami, *J. Mol. Spectrosc.*, **216**, 90-97 (2002).
9. Fluorescence enhancement detected IR(FEDIR) spectroscopy: a new background free IR spectroscopic technique for highly fluorescent molecules, G. Naresh Patwari, Takayuki Ebata, and Naohiko Mikami, *Chem. Phys. Lett.*, **361**, 453-456 (2002).
10. An Infrared Study of π -Hydrogen Bonds in Micro-solvated Phenol: OH Stretching Vibrations of Phenol-X($X=\text{C}_6\text{H}_6$, C_2H_4 , and C_2H_2) Clusters in the Neutral and Cationic Ground State, Asuka Fujii, Takayuki Ebata, and Naohiko Mikami, *J. Phys. Chem. A* **106** (37), 8554-8560 (2002).
11. Direct Observation of Weak Hydrogen Bonds in Microsolvated Phenol: Infrared Spectroscopy of OH Stretching Vibrations of Phenol-CO and $-\text{CO}_2$ in S_0 and D_0 , Asuka Fujii, Takayuki Ebata, and Naohiko Mikami, *J. Phys. Chem. A* **106** (43), 10124-10129 (2002).
12. Stimulated Raman spectroscopic study on intermolecular vibrations of size-selected benzonitrile clusters, Ryousuke Yamamoto, Takayuki Ebata, and Naohiko Mikami, *Eur. Phys. J. D* **20**, 403-408 (2002).

13. A New Electronic State of Aniline Observed in the Transient IR Absorption Spectrum from S_1 in a Supersonic Jet, Takayuki Ebata, Chika Minejima, and Naohiko Mikami, *J. Phys. Chem. A* **106** (46) 11070-11074 (2002).
14. Vibrational Spectroscopic Investigation of Dihydrogen Bonds in Gas Phase, G. Naresh Patwari, Takayuki Ebata, and Naohiko Mikami, *Bull. Polish Acad. Sciences; Chemistry*, **50** (4), 421-434 (2002).
15. NH Stretching Vibrations of Jet-Cooled Aniline and Its Derivatives in the Neutral and Cationic Ground States, Masahiro Honda, Asuka Fujii, Eiji Fujimaki, Takayuki Ebata, and Naohiko Mikami, *J. Phys. Chem. A* **107** (19), 3678-3686 (2003).
16. First observation of ionic π -hydrogen bonds; Vibrational spectroscopy of dihydrated naphthalene anion($Nph^-(H_2O)_2$), Hiroshi Kawamata, Toshihiko Maeyama, and Naohiko Mikami, *Chem. Phys. Lett.*, **370**, 535-541 (2003).
17. Infrared spectroscopy of hydrated benzene cluster cations, $[C_6H_6-(H_2O)_n]^+$ ($n=1-6$): Structural changes upon photoionization and proton transfer reactions, Mitsuhiro Miyazaki, Asuka Fujii, Takayuki Ebata and Naohiko Mikami, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **5**, 1137-1148 (2003).
18. IR induced *cis* \rightleftharpoons *trans* isomerization of 2-naphthol: Catalytic role of hydrogen-bond in the photoinduced isomerization, Takayuki Ebata, Kyouko Kouyama, and Naohiko Mikami, *J. Chem. Phys.*, **119** (6), 2946-2950 (2003).
19. Substitution effects on the excited-state intramolecular proton transfer of salicylic acid: an infrared spectroscopic study on the OH stretching vibrations of jet-cooled 5-methoxysalicylic acid, Eman Abd El-Hakam Abou El-Nasr, Asuka Fujii, Takayuki Ebata, and Naohiko Mikami, *Chem. Phys. Letters*, **376**, 788-793 (2003).
20. Spectroscopic Investigation on the Microscopic Solvation Effect on the Intramolecular Charge-Transfer Process of (p-Cyanophenyl) pentamethyldisilane in Supersonic Jets, Haruki Ishikawa, Masuyuki Sugiyama, Yoichi Shimanuki, Yuko Tajima, Wataru Setaka, Mitsuo Kira, and Naohiko Mikami, *J. Phys. Chem. A* **107** (49), 10781-10786 (2003).
21. Picosecond IR-UV pump-probe spectroscopic study of the dynamics of the vibrational relaxation of jet-cooled phenol. I. Intramolecular vibrational energy redistribution of the OH and CH stretching vibrations of bare phenol, Yuji Yamada, Takayuki Ebata, Masakazu Kayano, and Naohiko Mikami, *J. Chem. Phys.*, **120** (16), 7400-7409 (2004).
22. Picosecond IR-UV pump-probe spectroscopic study of the dynamics of the vibrational relaxation of jet-cooled phenol. II. Intracluster vibrational energy redistribution of the OH stretching vibrations of hydrogen-bonded phenol, Masakazu Kayano, Takayuki Ebata, Yuji Yamada, and Naohiko Mikami, *J. Chem. Phys.*, **120** (16), 7410-7417 (2004).
23. A Molecular Cluster Study on Activated CH/ π Interaction: Infrared Spectroscopy of Aromatic Molecule-Acetylene Clusters, Asuka Fujii, So-ichi Morita, Mitsuhiro Miyazaki, Takayuki Ebata, and Naohiko Mikami, *J. Phys. Chem.*, **A 108** (14), 2652-2658 (2004).
24. Characteristic distributions of negatively charged N-monosubstituted amide clusters generated by electron attachment in super sonic expansions, Toshihiko Maeyama and Naohiko Mikami, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **6**, 2725-2731

- (2004).
25. Infrared Spectroscopic Evidence for Protonated Water Clusters forming Nanoscale Cages, Mitsuhiko Miyazaki, Asuka Fujii, Takayuki Ebata, and Naohiko Mikami, *Science*, **304**, 1134-1137 (2004).
 26. A direct experimental evidence for an aromatic C-H...O hydrogen bond by fluorescence-detected infrared spectroscopy, V. Venkatesan, Asuka Fujii, Takayuki Ebata, and Naohiko Mikami, *Chem. Phys. Lett.*, **394**, 45-48 (2004).
 27. Fluorescence, REMPI, hole-burning, and FDIR spectroscopy of paracyanophenol-water complex, N. Biswas, S. Wategaonkar, T. Watanabe, T. Ebata, and N. Mikami, *Chem. Phys. Lett.*, **394**, 61-67 (2004).
 28. Binding Energy of the Benzene-Water Cluster Cations: An Ar-Mediated IR Photodissociation Study, Mitsuhiko Miyazaki, Asuka Fujii, and Naohiko Mikami, *J. Phys. Chem.*, **A 108** (40), 8269-8272 (2004).
 29. Electronic spectroscopy of benzene-water cluster cations, $[C_6H_6-(H_2O)_n]^+$ ($n=1-4$): spectroscopic evidence for phenyl radical formation through size-dependent intracuster proton transfer reactions, Mitsuhiko Miyazaki, Asuka Fujii, Takayuki Ebata, and Naohiko Mikami, *Chem. Phys. Lett.*, **399**, 412-416 (2004).
 30. Infrared Spectroscopy of Size-Selected Benzene-Water Cluster Cations $[C_6H_6-(H_2O)_n]^+$ ($n=1-23$): Hydrogen Bond Network Evolution and Microscopic Hydrophobicity, Mitsuhiko Miyazaki, Asuka Fujii, Takayuki Ebata, and Naohiko Mikami, *J. Phys. Chem.*, **A 108** (48), 10656-10660 (2004).
 31. Real-time detection of doorway states in the intramolecular vibrational energy redistribution of the OH/OD stretch vibration of phenol, Yuji Yamada, Naohiko Mikami, and Takayuki Ebata, *J. Chem. Phys.*, **121** (23), 11530-11534 (2004).
 32. Morphology of protonated methanol clusters: An infrared spectroscopic study of hydrogen bond networks of $H^+(CH_3OH)_n$ ($n=4-15$), Asuka Fujii, Satoko Enomoto, Mitsuhiko Miyazaki, and Naohiko Mikami, *J. Phys. Chem.*, **A**, 109, 138-141 (2005).
 33. Infrared and ab Initio Studies on 1,2,4,5-Tetrafluorobenzene Clusters with Methanol and 2,2,2-Trifluoroethanol: Presence and Absence of an Aromatic C-H...O Hydrogen Bond, V. Venkatesan, Asuka Fujii, Takayuki Ebata, and Naohiko Mikami, *J. Phys. Chem.*, **A**, **109**, 915-921 (2005).
 34. Laser Spectroscopic Investigation of Salicylic Acids Hydrogen-bonded with Water in Supersonic Jets: Microsolvation Effects for Excited State Proton Dislocation, Eman Abd El-Hakam Abou El-Nasr, Asuka Fujii, Toru Yahagi, Takayuki Ebata, and Naohiko Mikami, *J. Phys. Chem.*, **A**, in press (2005).
 35. First observation of the B^1A_1 state of SiH_2 and SiD_2 radicals by OODR spectroscopy, Yasuhiko Muramoto, Haruki Ishikawa, and Naohiko Mikami, *J. Chem. Phys.*, in press. (2005).
 36. Infrared and Ultraviolet Laser Spectroscopy of Jet-Cooled Substituted Salicylic Acids: Substitution Effects on the Excited State Intramolecular Proton Transfer in Salicylic Acid, Eman Abd El-Hakam Abou El-Nasr, Asuka Fujii, Takayuki Ebata, and Naohiko Mikami, *Mol. Phys.*, in press (2005).

(2) 国際研究集会発表

1. M. Miyazaki, A. Fujii, T. Ebata, and N. Mikami, "IR-spectroscopic study of hydrogen bonding structures of benzene-water cations", Gordon Research Conference on *Electronic Spectroscopy and Dynamics*, June 6-11, 2003, Bates College, Lewiston, ME, USA. (ポスター)
2. Y. Muramoto, H. Ishikawa, and N. Mikami, "Analysis of the quasi-linearity of the B 1A_1 state of SiH₂ and SiD₂ radicals", The 56th Ohio State University International Symposium on Molecular Spectroscopy, June 21-25, 2004, Ohio State Univ. Columbus Ohio, USA. (口頭講演)
3. Y. Muramoto, H. Ishikawa, and N. Mikami, "First observation of the B 1A_1 state of SiH₂ and SiD₂ radicals by OODR spectroscopy", The 56th Ohio State University International Symposium on Molecular Spectroscopy, June 21-25, 2004, Ohio State Univ. Columbus Ohio, USA. (口頭講演)
4. M. Sugiyama, H. Ishikawa, I. Baba, W. Setaka, M. Kira, and N. Mikami, "Transient IR absorption spectroscopy of the charge-transfer state of (p-cyanophenyl)pentamethyldisilane and methanol cluster", The 56th Ohio State University International Symposium on Molecular Spectroscopy, June 21-25, 2004, Ohio State Univ. Columbus Ohio, USA. (口頭講演)
5. N. Mikami, "IR-Dissociation Spectroscopic Study on Hydrogen-bond networks of Water Cluster Cations in Gas Phase", XXVII European Congress on Molecular Spectroscopy, 5-10, September 2004, Krakow, Poland. (招待講演 = 基調講演)
6. A. Fujii, M. Miyazaki, and N. Mikami, "IR-spectroscopic study of hydrogen bonding structures of benzene-water cations", Gordon Research Conference on *Molecular and Ionic Clusters*, September 5-10, 2004, Centre Paul Langevin, Aussois, France. (ポスター)
7. N. Mikami, "IR spectroscopic investigation of the network formation of hydrogen-bonded clusters generated in supersonic molecular beams", Discussion Meeting on Advances in Spectroscopy (DMAS 2005), Feb., 21-24, 2005, Bangalore, India. (招待講演 = 基調講演)
8. N. Mikami, "Spectroscopic Investigation on the Intramolecular Charge-Transfer Reaction of Phenylsilylanes", Seminar at IIT Bombay, 25 Feb., 2005, Mumbai, India.

(3) 国内学会等口頭発表

1. 宮崎充彦、藤井朱鳥、江幡孝之、三上直彦、「(C₆H₆-(H₂O)_n)⁺, n-1-6の赤外分光；イオン化に伴う構造変化とプロトン移動反応」、第18回化学反応討論会、平成14年6月19～21日、新潟。
2. 神山恭子、江幡孝之、三上直彦、「2-ナフトール水素結合クラスターの水素結合解離における cis-trans 異性化反応の発見」、分子構造総合討論会、平成14年10月1～4日、神戸。

3. 宮崎充彦、藤井朱鳥、江幡孝之、三上直彦、「ベンゼン-水クラスターカチオンの赤外分光；イオン化に伴う構造変化とプロトン移動反応」、分子構造総合討論会、平成14年10月1～4日、神戸。
4. 山本亮介、江幡孝之、三上直彦、「S₁電子状態のベンゾニトリルおよびシアノナフタレン-水クラスターの赤外光誘起振動前期解離ダイナミクス」、分子構造総合討論会、平成14年10月1～4日、神戸。
5. 山田勇治、榎野正一、江幡孝之、三上直彦、「水素結合クラスターのピコ秒時間分解赤外・紫外二重共鳴分光法：フェノール OH 伸縮振動エネルギー緩和ルートの解明」、分子構造総合討論会、平成14年10月1～4日、神戸。
6. 江幡孝之、山田勇治、三上直彦、「ピコ秒時間分解赤外・紫外ポンププローブ法によるフェノールおよびその水素結合クラスターのOH伸縮振動緩和の実時間観測と緩和機構の解明」、第19回化学反応討論会、平成15年6月11～13日、仙台。
7. 山田勇治、江幡孝之、三上直彦、「ピコ秒時間分解赤外・紫外ポンププローブ法によるフェノールの振動緩和の研究：振動量子ビートの観測とIVR経路の解明」、分子構造総合討論会、平成15年9月24～27日、京都。
8. 石川春樹、杉山益之、馬場逸平、瀬高渉、吉良満夫、三上直彦、「シアノフェニルジシランの分子内電荷移動反応における微視的溶媒効果：電荷移動状態の安定化と反応速度の変化」、分子構造総合討論会、平成15年9月24～27日、京都。
9. 宮崎充彦、藤井朱鳥、江幡孝之、三上直彦、「赤外可視分光によるベンゼン-水大サイズクラスターカチオンの構造および反応の研究」、分子構造総合討論会、平成15年9月24～27日、京都。
10. 森田宗一、藤井朱鳥、江幡孝之、三上直彦、「分子クラスターを用いたCH- π 相互作用の研究：ベンゼン誘導体・アセチレンクラスターの赤外分光」、分子構造総合討論会、平成15年9月24～27日、京都。
11. 石川春樹、杉山益之、馬場逸平、瀬高渉、吉良満夫、三上直彦、「シアノフェニルジシランの分子内電荷移動反応における微視的溶媒効果」、光化学討論会、平成15年11月22～24日、松江。
12. 榎本怜子、宮崎充彦、藤井朱鳥、江幡孝之、三上直彦、「大サイズ[H(MeOH)_n]⁺クラスターの赤外分光と水素結合構造」、分子構造総合討論会、平成16年9月27～30日、広島。
13. 村本泰彦、石川春樹、三上直彦、「SiH₂及びSiD₂ラジカルB状態のOODR分光」、分子構造総合討論会、平成16年9月27～30日、広島。
14. 藤井朱鳥、「大サイズクラスターイオンにおける3次元水素結合ネットワークの赤外分光」日本分光学会秋期講演会・シンポジウム平成16年11月4～5日、仙台。

主要關係論文

1. Dihydrogen bonded phenol-borane-dimethylamine complex: An experimental and theoretical study, G. Naresh Patwari, T. Ebata, and N. Mikami, *J. Chem. Phys.*, **116** (14), 6056-6063 (2002).
2. Gas phase dihydrogen bonding: clusters of borane-amines with phenol and aniline, G. Naresh Patwari, T. Ebata, and N. Mikami, *Chem. Phys.*, **283**, 193-207 (2002).
3. Vibrational spectroscopic evidence of unconventional hydrogen bonds, A. Fujii, G. Naresh Patwari, T. Ebata, and N. Mikami, *Int. J. Mass. Spec.*, **220**, 289-312 (2002).
4. Direct Observation of Weak Hydrogen Bonds in Microsolvated Phenol: Infrared Spectroscopy of OH Stretching Vibrations of Phenol-CO and -CO₂ in S₀ and D₀, A. Fujii, T. Ebata, and N. Mikami, *J. Phys. Chem. A* **106** (43), 10124-10129 (2002).
5. An Infrared Study of π -Hydrogen Bonds in Micro-solvated Phenol: OH Stretching Vibrations of Phenol-X(X=C₆H₆, C₂H₄, and C₂H₂) Clusters in the Neutral and Cationic Ground State, A. Fujii, T. Ebata, and N. Mikami, *J. Phys. Chem. A* **106** (37), 8554-8560 (2002).
6. Vibrational Spectroscopic Investigation of Dihydrogen Bonds in Gas Phase, G. Naresh Patwari, T. Ebata, and N. Mikami, *Bull. Polish Acad. Sciences; Chemistry*, **50** (4), 421-434 (2002).
7. First observation of ionic π -hydrogen bonds; Vibrational spectroscopy of dihydrated naphthalene anion(Nph⁻(H₂O)₂), H. Kawamata, T. Maeyama, and N. Mikami, *Chem. Phys. Lett.*, **370**, 535-541 (2003).
8. Substitution effects on the excited-state intramolecular proton transfer of salicylic acid: an infrared spectroscopic study on the OH stretching vibrations of jet-cooled 5-methoxysalicylic acid, Eman El-Nasr, A. Fujii, T. Ebata, and N. Mikami, *Chem. Phys. Letters*, **376**, 788-793 (2003).
9. A Molecular Cluster Study on Activated CH/ π Interaction: Infrared Spectroscopy of Aromatic Molecule-Acetylene Clusters, A. Fujii, S. Morita, M. Miyazaki, T. Ebata, and N. Mikami, *J. Phys. Chem.*, **A 108** (14), 2652-2658 (2004).
10. A direct experimental evidence for an aromatic C-H...O hydrogen bond by fluorescence-detected infrared spectroscopy, V. Venkatesan, A. Fujii, T. Ebata, and N. Mikami, *Chem. Phys. Lett.*, **394**, 45-48 (2004).
11. Fluorescence, REMPI, hole-burning, and FDIR spectroscopy of para-cyanophenol-water complex, N. Biswas, S. Wategaonkar, T. Watanabe, T. Ebata, and N. Mikami, *Chem. Phys. Lett.*, **394**, 61-67 (2004).
12. Infrared and ab Initio Studies on 1,2,4,5-Tetrafluorobenzene Clusters with Methanol and 2,2,2-Trifluoroethanol: Presence and Absence of an Aromatic C-H...O Hydrogen Bond, V. Venkatesan, A. Fujii, T. Ebata, and N. Mikami, *J. Phys. Chem.*, **A, 109**, 915-921 (2005).
13. Laser Spectroscopic Investigation of Salicylic Acids Hydrogen-bonded with Water in Supersonic Jets: Microsolvation Effects for Excited State Proton Dislocation, Eman El-Nasr, A. Fujii, T. Yahagi, T. Ebata, and N. Mikami, *J. Phys. Chem.*, **A**, in press (2005).
14. Infrared and Ultraviolet Laser Spectroscopy of Jet-Cooled Substituted Salicylic Acids: Substitution Effects on the Excited State Intramolecular Proton Transfer in Salicylic Acid, Eman El-Nasr, A. Fujii, T. Ebata, and N. Mikami, *Mol. Phys.*, in press (2005).

本報告書収録の学術雑誌等発表論文は本ファイルに登録していません。なお、このうち東北大学在籍の研究者の論文で、かつ、出版社等から著作権の許諾が得られた論文は、個別に **TOUR** に登録しております。