顕微分光法による単結晶の偏光反射スペクトルの測定

横浜国立大学工学研究院 水口 仁

Jin MIZUGUCHI: Measurements of Polarized Reflection Spectra on Single Crystals by Means of a Microscope-Spectrophotometer

Measuring techniques have been described for the polarized reflection spectra on single crystals by means of a microscope-spectrophotometer. Key technical issues as well as basics for the spectrum evaluation have also been presented.

1. はじめに

昨今ではX線回折計や2次元検出器の飛躍的な進歩に伴い小さな試料の構造解析や解析時間の大幅な短縮が可能になった。これと並行して装置の価格も下がり、一般の研究室にも回折装置が整備される時代を迎えた。しかし、単結晶の電子構造的なキャラクタリゼーションとなると、依然として粉末試料や蒸着膜を使用することが多い。当然のことながら、単結晶そのもので物性の評価を行うのが一番である。

本稿では顕微鏡の光学系を使った顕微分光法について、主として紫外・可視・近赤外領域で行う有機結晶の測定例と測定技術を中心に解説する。

2. 顕微分光装置

顕微分光装置は図1に示すように、顕微鏡の光学系を使った分光装置で、透過、反射、蛍光スペクトル(発光および励起スペクトル)の測定ができる。紫外・可視・近赤外線領域ではレンズ系の光学系が使われ、赤外線領域では鏡面系(カセグレン系)が使われる。また、ラマンスペクトルの分野でもレンズ系の顕微分光装置が使われている。いずれの場合にも微少な試料面積でスペクトル解析を行うことを目的としている。顕微分光装置を使って測定できる最小面積は直径5 μm 程度である。したがって、単結晶が小さくてもX線構造解析ができる程度であれば光学的な測定はまったく問題ない。

顕微分光装置はシングル・ビーム方式であるので測定の前には必ずバックグラウンドの較正を行わなければならない。顕微分光法では顕微鏡の光学系を使用することを除けば、通常のダブルビームの測定装置と何ら変わらない。

透過スペクトルを測定する時には図1で光源Iにキセ

ノンランプを使い、分光器Iで分光して、光を試料の下方から導く。試料を通り抜けた光は“素通し”状態にある分光器IIを通り、検出器に入る。反射スペクトルの測定では分光器Iと光源Iをそれぞれ分光器I'、光源I'の位置に移し、単色光を試料の上面から導く。試料面で反射した光は先と同様に分光器IIを走り抜け検出器に入る。発光スペクトルの測定では光源Iに水銀ランプを使って試料を下方より励起する。励起光は分光器Iを“素通し”として水銀ランプをそのまま使用するか、あるいは分光器で励起波長を選択する(例えば2537 Å)。試料からの発光は分光器IIで分光されて検出器に入る。また、試料を上面から励起する場合には、分光器Iと光源IをI'の位置に移して同様の操作を行う。励起スペクトルの測定では、

図1 顕微分光装置の光学系。(Optical system for microscope-spectrophotometer.)

分光器IIの波長はモニターする発光波長に固定し、分光器IあるいはI'で励起光の波長を変化させる。目的に応じて試料を下方あるいは上方から励起することは先と同様である。以上のような操作で透過、反射、発光スペクトルの測定が行える。偏光板を使う測定の場合には光路に偏光子や検光子を随時導入する。

3. 偏光反射スペクトル

溶液や真空蒸着膜の吸収スペクトルは試料の透過スペクトルを測定し、反射成分が小さいとして $A = -\log T$ (A : absorbance, T : transmittance) の関係式で吸収スペクトルに変換している。単結晶でも Lambert-Beer の式が成立する程度に薄い試料であれば、同様の実験から吸収スペクトルが求まる。しかし、吸収係数が大きく、また非常に柔らかい有機物の結晶では 1000 Å 以下に単結晶を研磨することは至難の業である。そこで単結晶の反射スペクトルを測定し光学定数を評価することになる。

反射スペクトルと偏光板を組み合わせた偏光反射スペクトルは電子構造の研究には欠かせない測定法である。分子の遷移モーメントの方向や遷移モーメント間の相互作用(“励起子結合効果”)ならびに分子間電荷移動スペクトルなどを偏光反射スペクトルで検討することが可能である。

図2で一例を見てみよう。図2aに示す柱状結晶の1つの側面で分子が図2bのように配列していたとする。結晶の長軸に沿った偏光では分子の積層方向の情報が得られ、分子間の電荷移動スペクトルの測定に使われる。また、長軸に垂直な偏光では分子面の情報が得られ、通常は分子の π - π^* 遷移が観測される。遷移モーメントの方向を決めるには、分子面(長軸に垂直な面)を測定面として、この面上で偏光板を回し、反射強度が最大となる方向を見つければよい。遷移モーメントが2つあるような分子ではそれぞれの方向に偏光板を回転し、2つの遷移モーメント

図2 単結晶の晶壁と分子配列。(Crystal habit and molecular arrangement.)

トを分離する。これらの事例については6節で詳しく述べる。

4. 反射率, 屈折率, 消衰係数の分光特性

複素屈折率 ($\hat{n}$) は式 (1) のように実数の屈折率 (n) と虚数の消衰係数 (k) の和で表わされる。¹⁾ また、消衰係数と吸収係数 (α) の間には式 (2) の関係にある。

$$\hat{n} = n + ik \quad (1)$$

$$k = \frac{\lambda}{4\pi} \alpha \quad (2)$$

また、試料面の複素反射率 ($r(\omega)$) を角周波数 (ω) の関数として表すと式 (3) のようになる。

$$r(\omega) = \frac{n + ik - 1}{n + ik + 1} \quad (3)$$

これより実測される正反射率 (R : specular reflectance) は

$$R = r(\omega) r(\omega)^* = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} \quad (4)$$

となる。

式 (4) を少し変形すると

$$R = 1 + \frac{2nk}{(n+1)^2 + k^2} \quad (5)$$

となる。この式から明らかなように反射率は屈折率と消衰係数により変化し、消衰係数が屈折率よりも格段に大きなところでは反射率が1に近づくことがわかる。

反射率, 屈折率, 消衰係数の分光特性は一般に図3のようになり、屈折率は吸収のあるところでは大きく変化

図3 反射率, 屈折率ならびに消衰係数の分散曲線。(Relationship between reflectance, refractive index and extinction coefficient as a function of wavelength.)

し、正常分散から異常分散へと変化し、再び正常分散を示す。この時、異常分散の midpoint のところで消衰係数は極大となる。²⁾ 吸収帯が1つしか存在しない時には、屈折率の変曲点と消衰係数の極大点とが一致することがわかる。つまり、消衰係数の微分形が屈折率を与える。また、反射率は屈折率とほぼ同様な分散カーブを描き、反射率の極大点は消衰係数の極大点に近い。したがって、反射スペクトルは吸収スペクトルに比べるとややブロードであるが、ほぼ類似した形となる。また、実際の反射スペクトルでは短波長側の極小点が明瞭に認められない場合もある。

5. Kramers-Kronig 変換

反射スペクトルは実測スペクトルであるが、反射スペクトルから吸収帯が読み取りにくい場合もある。特にシアニン色素ではこのようなことが多い。³⁾ このような場合には数学的な応答関数の性質から反射スペクトルを吸収スペクトルに変換することが行われる。これが Kramers-Kronig 変換 (以下 KK 変換と略記) と呼ばれるものである。^{1), 4), 5)}

複素屈折率は式 (1) で示したように実数部の屈折率と虚数部の消衰係数の和で表わされる。この式の n と k はお互いに独立ではなく、応答関数で結ばれている。したがって、 n がわかれば k が求まり、また k が既知であれば n が計算される。

式 (3) の $r(\omega)$ は結晶面における入射光と反射光の比であるから、 $r(\omega)$ および R はそれぞれ式 (6), (7) のように書かれる。

$$r(\omega) = \rho(\omega) e^{i\theta(\omega)} \quad (6)$$

$$R = r(\omega) r(\omega)^* = \rho(\omega)^2 \quad (7)$$

ここで、 $\rho(\omega)$ は振幅、 $\theta(\omega)$ は位相である。これより式 (3) と (7) から n, k が計算できる。

$$n = \frac{1-R}{1+R-2\cos\theta\cdot\sqrt{R}} \quad (8)$$

$$k = \frac{-2\sin\theta\cdot\sqrt{R}}{1+R-2\cos\theta\cdot\sqrt{R}} \quad (9)$$

また、式 (6) と (7) から式 (10) が得られる。

$$\ln r(\omega) = \ln \sqrt{R} + i\theta(\omega) \quad (10)$$

ここで KK 変換を行えば反射率から位相を求めることができ、式 (8), (9) の関係から、それぞれ n, k が算出される。最後に式 (2) の k と α の関係を使えば吸収スペクトル (吸収係数の周波数あるいは波長依存性) が求まる。

以上のように KK 変換は概念的には非常に明快であるが KK 変換に必要な積分範囲は無限に広くなければなら

ない。現実的にはそれ程広い範囲で反射スペクトルを測定できないから、限られた波長範囲での反射データで変換を行う (“積分範囲の打ち切り”)。また、始波長や終波長が反射バンドにかかる時には、これらの点を避けて反射が一定な領域を始点と終点に選ばなければならない。KK 変換が常にうまくいくとは限らないのでスペクトルの解釈は慎重に行う必要がある。KK 変換スペクトルはあくまでも応答関数を前提とし、限られた波長範囲の測定データに基づいた人工的なスペクトルであることを肝に銘じておく必要がある。

6. 測定の実例

チタニルフタロシアニン (TiOPc) の結晶相 II は近赤外吸収を示すことで知られ、レーザー・プリンター (GaAsAl レーザー: 780 nm) の感光体として広く使われている。Hiller らの構造解析のデータ⁶⁾ をもとに偏光反射スペクトルの例を見てみよう。⁷⁾

6.1 TiOPc (II) の特徴

TiOPc (II) の分子構造を図 4 に示す。図 5 は分子の積層状態を示したものである。自由空間に置かれた TiOPc 分子 (溶液状態に相当) は 4 回対称を持つので励起状態は図 6 に示すように 2 重に縮退している (C_{4v})。したがって、可視域の光学吸収は 1 本の吸収バンドを与える (図 7)。しかし、結晶相 II の固体状態では分子間相互作用により分子

図 4 TiOPc の分子構造 (結晶相 II). (Conformation of the TiOPc molecule (phase II).)

図 5 TiOPc の分子配列 (結晶相 II). (Molecular arrangement of TiOPc (phase II).)

図6 TiOPc 分子の溶液ならびに固体状態のエネルギー準位 (結晶相 II). (Energy diagram for TiOPc in solution and in the solid state (phase II).)

図7 TiOPc の溶液ならびに蒸着膜吸収スペクトル (結晶相 II). (Absorption spectra in solution and in the solid-state of an evaporated film.)

が大きく歪んでいるのが特徴である (C_1). 対称性の低下 ($C_{4v} \rightarrow C_1$) は図6に示すように励起準位の分裂を誘起する. 図7に溶液スペクトルと結晶相 II の蒸着膜の吸収スペクトルを示す. 溶液スペクトルは1本の鋭い吸収バンドであるが, 固体スペクトルは可視全域に広がった特異なスペクトル形状を呈し, 吸収帯は近赤外領域まで延びている. 結晶相 II の偏光反射スペクトルの測定から, 近赤外吸収ならびに特異なスペクトル形状を説明することができる.

分子歪みの程度を図4で評価してみよう. 中心部の4つの窒素原子の作る面 (平面1) と4隅に位置するフェニル環 (平面2) の間の角度を測り, この角度が全部等しければ C_{4v} の対称性があると考ええる. 表1にMOPAC93で構造最適化した分子の結果と合わせて示す. 溶液状態に相当する最適化構造では C_{4v} の対称性が保たれている. これに対し, 結晶変態 II の分子 (C_1) はひどく歪んでいることがわかる.

分子歪みが電子スペクトルに及ぼす効果はX線座標を使った分子スペクトルの計算 (INDO/S ハミルトニアン)

表1 TiOPc の分子歪み. (Molecular distortion in phase II of TiOPc.)

平面1	平面2	結晶相 II	最適化構造
N1, N2, N3, N4	フェニル環 C2....C7	7.9°	7.1°
"	フェニル環 C10...C15	11.8°	7.1°
"	フェニル環 C18...C23	6.2°	7.0°
"	フェニル環 C26...C31	1.2°	6.8°
分子の対称性		C_1	C_{4v}

表2 TiOPc (結晶相 II) の分子スペクトル計算. (Spectroscopic calculations for one molecule in phase II of TiOPc.)

	吸収バンドA		吸収バンドB	
	波長 (nm)	振動子強度 (f)	波長 (nm)	振動子強度 (f)
結晶相 II (C_1)	678.8	0.624	775.1	1.023
最適化構造 (C_{4v})	736.9	0.803	738.0	0.800

で検討できる. 計算結果を表2に示す. 挿し絵のA, Bが遷移モーメントの方向で, どちらも分子面上にある. C_{4v} の対称性を保持する溶液状態では1本のスペクトルを与え, これは図7の溶液スペクトルからも明らかである. また, 結晶変態 II では分裂幅は極めて大きく ($\Delta\lambda = 96$ nm), 振動子強度も長波長側が大きくなっている. これは明らかにA, Bの2本のスペクトル線を与える.

6.2 偏光反射スペクトル (積層方向)

結晶 II の (010) 面で測定した偏光反射スペクトルを図8に示す. 偏光方向は図5に示す積層方向 ($\parallel(a, \bar{c})$ -diagonal) とこれに垂直な方向 ($\perp(a, \bar{c})$ -diagonal) である. 前者は積層方向の電荷移動遷移の情報を与え, 後者は分子面の情報に対応する. 積層方向に平行な偏光で励起した場合には, わずかな分散が600-900 nmに認められている. これが電荷移動遷移かどうかは慎重に検討しなければならない. 入射する偏光が分子面に完全に垂直で, しかも分子の積層方向に完全に平行である場合には電荷移動スペクトルと判断してもよいが, 少しでも正反射から外れると反射スペクトルは分子面の遷移モーメントの斜影成分をわずかに含むようになり, その結果小さな反射バンドが出現する. TiOPcのように遷移モーメントが非常に大きな場合にはこの効果が顕著に現れる. 以下の6.3節で述べる分子面の反射バンドを見ると, 図8で観測された積層方向のわずかな分散は分子面上に存在する遷移モーメントの積層方向の成分が原因であることがわかる.

図8 TiOPc (Phase II) の偏光反射スペクトル (測定面： $(0\bar{1}0)$). (Polarized reflection spectra of TiOPc (phase II) measured on the $(0\bar{1}0)$ plane.)

図9 TiOPc (Phase II) の偏光反射スペクトル (測定面： $(10\bar{1})$): (a) 遷移モーメント A および B に平行な偏光で励起, (b) 遷移モーメント A と B の対角方向の偏光で励起. (Polarized reflection spectra of TiOPc (phase II) measured on the $(10\bar{1})$ plane: (a) along the transition dipoles A and B, and along the diagonal direction between the transition dipoles A and B.)

積層方向に垂直な偏光 ($\perp (a, \bar{c})$ -diagonal) では 850 nm に大きな近赤外バンドと 730 nm あたりにショルダーが見える. この反射スペクトルは分子面の 1 つの偏光方向での遷移を見ているので, A 成分と B 成分の各々をある比率で含んでいる. A 成分と B 成分を分離するには分子面上で偏光板を回し, それぞれ A 成分と B 成分に平行な偏光で反射スペクトルを測定しなければならない. これ

を行ったのが図9である.

6.3 偏光反射スペクトル (分子面)

$(10\bar{1})$ 面 (ほぼ分子面) で偏光板を回転させ, A 方向の遷移と B 方向の遷移の分離した結果を図9に示す. 図9aから明らかなように A 成分のピークは 660 nm, B 成分は 860 nm (近赤外吸収) と明瞭に分離され, お互いに直交する A, B 成分がそれぞれ独立のピークを与えている. 更に, 反射率は A 成分が約 8%, B 成分が約 16% で, A 成分の振動子強度は B 成分の半分程度である. A, B 成分の極大波長の差 (約 200 nm) はバンドの分裂幅を与える. これらの結果は表2の計算結果と定性的に非常によく一致する. また, A, B 成分を合成したスペクトルは図9bのスペクトルを与え, これは図7の蒸着膜 (結晶相II) のスペクトルと一致する.

以上の結果を図6で整理すると, TiOPc 分子は溶液状態では C_{4v} の対称性を持ち, 励起状態は 2 重に縮退している. その結果, A, B 方向の光学遷移は重なり, 1 本の吸収バンドとなる. しかし, 溶液から固体に移行する際に分子は分子間相互作用により歪みを生じ, 分子の対称性は C_{4v} から C_1 に降下する. 分子歪みにより励起状態の 2 重縮退が解け, 励起エネルギー準位は分裂する. その分裂幅は分子歪みの程度に比例する. 励起準位の分裂に伴い, 2 本の光学遷移 (遷移モーメント A および B) が出現し, その長波長成分が近赤外吸収 (π - π^* 遷移) を与える.

7. 測定ならびにスペクトルの評価に関する注意事項

7.1 正反射が原則

反射測定は正反射 (specular reflection) が原則である. しかし, 完全な垂直入射では検出器に光が戻らないので, 入射角と反射角のなす角度を通常は 5° 位に設定してある. しかし, 赤外線の領域ではカセグレンの光学系を使うので, 入射角は最低でも 20° , 最近では感度を上げるために 45° 位のものが多くいようである. したがって, 得られた反射スペクトルも“拡散反射”的な情報も含んでおり, スペクトルの解析には十分な注意を要する.

7.2 単結晶の結晶面

有機分子性結晶の反射スペクトルの測定には単結晶の自然面 (晶壁) を使う. 有機結晶は柔らかいので無機結晶のように所望する結晶面を切り出して研磨することはできない. 反射測定には結晶表面が金属光沢を呈し, かつ多くの晶壁 (habit) が出ているものがよい. 結晶表面が荒れているものは反射率が低く, また得られた反射スペクトルも“拡散反射”に近い情報を含むことになる.

7.3 対物レンズの倍率

対物レンズの倍率は 8-10 倍程度が最も使いやすい. また, 作動距離の比較的長い対物レンズの方がゴニオメーターに載った単結晶の調整には適している. 逆に, 発光スペクトルの測定の場合には光を効率よく集光する立場

から、作動距離の短い高倍率の対物レンズ (例えば40倍) が使われる。

7.4 ゴニオメーター

構造解析の場合と同様に結晶をゴニオメーターにマウントする。あるいは、構造解析でマウントした結晶をそのまま顕微測定に使用する。ゴニオメーターのXYならびにアークを調整して、入射光が所望する結晶面に垂直に入射するようにする。この操作はなかなか面倒であるので、結晶を固定する際に工夫が必要である。板状結晶や針状結晶は結晶の長軸がキャピラリーに平行になるように調整しておくといふ (図2a)。通常はゴニオメーターを水平 (後述の図10a) に固定して、ゴニオメーターの ϕ 軸を回しながら結晶側面を順次測定していく。測定面によってはゴニオメーターを垂直方向に固定して使用することもある。

7.5 反射率の較正

反射率が既知の試料を使って、スペクトルの反射率を補正する。通常は較正表が添付されたシリコンカーバイドの標準試料を使うことが多い。

7.6 結晶面の帰属とスペクトル計算

単結晶の結晶面は予めX線で帰属し、各々の結晶面で分子がどのように配列しているかを調べておかなければならない。この結晶面の情報と下記に述べる遷移モーメントの情報を基礎に、どの結晶面でどの方向から偏光を導くかを決定する。

また、反射測定の前にはX線座標を使って1分子のスペクトルを計算し、分子の遷移モーメントの大きさや方向を求めておくことが望ましい。この計算は通常の半経験的な分子軌道法で十分である。有機分子性結晶では分子の個性が保たれているので、遷移モーメントの方向が溶液状態と異なることはほとんどない。

7.7 単結晶の裏面反射と干渉

反射スペクトルを測定している時に、測定波長が吸収帯のない領域にさしかかると反射率が急に上昇し、平坦

な反射が現れることがある。図11の600-700 nmの反射がこれにあたる。⁸⁾ この原因は吸収が存在しないスペクトル領域では入射光が結晶の裏面に到達し、そこで反射して再び表面に出てくるためである (図10a)。また、裏面からの反射光と入射光とが干渉して一連の干渉ピークを与えることもある。この効果は入射光を結晶面に垂直に導くことでかなり軽減することができる。また、厚みのある単結晶を使うことも有効である。

板状結晶の場合にはゴニオメーターを使わないで、試料を直接スライドガラスの上に置いて測定することもある (図10b)。上記の例でも明かなように、吸収帯のない領域では入射光が試料を透過し、更にスライドガラスの表面で反射して再び試料に戻る。このために一連の干渉ピークが出現することがある。その場合にはスライドガラスの表面を予め紙ヤスリで“けが”し、そこに黒マジックを塗るとよい。この処理によってスライドガラスからの反射をかなり抑制することができる。

7.8 光学定数を決めること

光学定数 (n と k) を求めるには2つの媒体中 (例えば空気とグリセリン) で反射スペクトルを測定し、数値的に n と k を算出することができる。しかし、顕微分光法で反射率を正確に測定することは難しい。1つには結晶面が金属光沢を示す完全な平滑面であるかの問題である。表面が曇っていたり、凸凹があったりすると反射率は減少する。また、反射測定の際には正反射に近くなるように目測でゴニオメーターを調節しているが、実際問題として本当に反射率が最大になっているかはわからない。以上の理由から、反射率の測定から定量的な光学定数を求めることはお勧めできない。更に、反射率の測定から、Kramers-Kronig の関係を用いて光学定数を算出することもできるが、その値にどれほど信頼性があるかは疑わしい。

7.9 遷移モーメント間の相互作用

単結晶では分子が規則正しく配列しているので、励起分子間の相互作用が無視できない。この相互作用は遷移

図10 単結晶の裏面反射と干渉: (a) 裏面反射 (ゴニオメーターは水平に固定), (b) スライドガラス上での測定. ((a) Reflection from the rear side of a single crystal (where the goniometer is fixed horizontally) and its resulting interference, and (b) reflection measurement on a slide glass.)

図11 ビフェニル・ピロピロール単結晶の偏光反射スペクトル (裏面反射: 600-700 nm). (Polarized reflection spectra of biphenyl-pyrrolopyrrole (reflection from the rear side: 600-700 nm).)

モーメント間の相互作用(“励起子結合効果”⁹⁾)と呼ばれるもので、遷移モーメントが大きな有機色素や有機顔料では顕著である。相互作用が大きい場合にはスペクトルシフトやDavydov分裂と呼ばれる“吸収帯の分裂”が起こり、固体のスペクトルが溶液状態の分子スペクトルと大きく異なることもある。¹⁰⁾ 偏光反射スペクトルの帰属にあたってはこの分野の基礎知識の習得も必要となる。

8. おわりに

以上、簡単ではあるが顕微分光法の概略を述べてきた。筆者らの研究室では構造解析と物性の評価を単結晶で行っている。X線構造解析で使った単結晶の反射スペクトルを顕微分光装置、顕微FT-IRや顕微ラマン装置で測定している。このようにすれば同一試料で一連の測定が可能であり、一貫性のあるデータが得られる。単結晶の偏光反射測定は微小面積の測定であるから多少の技術と慣れが必要である。測定にはそれなりの時間がかかるが、得られた“美しい結果”を見れば十分に報われる。粉末や蒸着膜試料のような不確定性も少なく、単結晶測定のメリットは大きい。本稿が顕微分光を手懸ける人達の一助になれば幸いである。

文 献

- 1) C. Kittel: *Introduction to Solid State Physics*, Sixth Edition, John Wiley & Sons, Inc. (1986).
- 2) H. Piller: *Microscope Photometry*, Springer-Verlag (1977).
- 3) T. Tani: *Photographic Sensitivity -Theory and Mechanism-*, Oxford University Press (1995).
- 4) J. L. Musfeldt, D. B. Tanner and A. J. Pane: *J. Opt. Soc. of Amer. A* **10**, 2648 (1993).
- 5) 高橋 博, 平石次郎, 石井紀彦: 分光研究 **25**, 153 (1976).
- 6) W. Hiller, J. Strähle, W. Kobel and M. Hanack: *Z. Krist.* **159**, 173 (1982).
- 7) J. Mizuguchi, G. Rihs and H. R. Karfunkel: *J. Phys. Chem.* **99**, 16217 (1995).
- 8) J. Mizuguchi: *J. Imaq Sci. Tech.* (2001) in press.
- 9) M. Kasha: In *Spectroscopy of the Excited State*, B. Di Bartolo, Ed; Plenum Press, p 337 (1976).
- 10) A. Endo, S. Matsumoto and J. Mizuguchi: *J. Phys. Chem. A* **103**, 8193 (1999).

プロフィール

水口 仁 Jin MIZUGUCHI
 横浜国立大学工学研究院物理情報工学専攻
 Graduate School of Engineering, Department of
 Advanced Physics and Information Technologies,
 Yokohama National University
 〒240-8501 横浜市保土ヶ谷区常盤台 79-5
 79-5, Jobandai, Hodogaya, Yokohama 240-8501,
 Japan
 TEL./FAX. 045-339-3369
 e-mail: mizu-j@ynu.ac.jp
 最終学歴: 上智大学理工学部化学科
 専門分野: 分子性結晶の電子構造
 現在のテーマ: 構造と物性の相関