

所属学会等：

日本化学会
日本物理学会
日本分光学会
分子科学会
原子衝突研究協会
米国化学会

受賞：

平成10年度日本化学会学術賞（平成11年3月）
「原子衝突を利用する分光法の開発と分子表面特性の研究」

主な社会活動

1) 非常勤講師：

東京農工大学（1980年-1993年）
学習院大学（1983年-1984年、1990年-1995年）
青山学院大学（1988年）
東京工業大学（1993年）
静岡大学（1994年）
岩手大学（1999年）
九州大学（2003年）
大阪大学（2003年）
山口東京理科大学（2006年）
放送大学（2007年～）
いわき明星大学（2009年）

2) 主な役職等：

日本学術会議連携会員（平成18年－24年）
日本化学会理事（平成9年度－10年度）
日本化学会東北支部長（平成19年度）
日本化学会常議員・代議員等各種委員会委員・同東北支部役員
分子科学会運営委員
物性研究所共同利用専門委員会委員
分子科学研究所学会等連絡会議委員
日本分光学会代議員
日本化学会欧文誌編集委員・日本化学会誌編集委員
日本学術会議専門委員
日本学術振興会専門委員
21世紀COE理論解析グループリーダー（平成15－19年）

NSF 審査員

BOF 審査員(Universiteit Hasselt, Belgium)

Research Corporation(A Foundation for the Advancement of Science)審査員

Electron Dynamics and Spectroscopy 国際シンポジウム組織委員

国際量子化学会議 (ICQC) 組織委員・同サテライト会議代表

第19回化学反応討論会実行委員長 (2003年6月)

第1回分子科学討論会実行委員長 (2007年9月)

3) 教育活動等：(最近の主なもの)

出前授業

岩手県立水沢高等学校 (スーパーサイエンスハイスクール) (2004年)

サイエンスカフェ開催 (主催：日本学術会議、共催：日本化学会等)

「アトムの世界を操る化学のフロンティア」(2007年9月)

「新素材・新機能を作り出す化学のフロンティア」(2007年10月)

ノーベル化学賞受賞 Kroto 博士講演会・質問会開催 (2007年9月)

第6回化学イノベーションシンポジウム「明日をひらく化学のとびら」開催

(実行委員長、主催：日本化学会・同東北支部・同化学教育協議会、共催：
仙台市教育委員会等、2008年8月)

主な研究成果

化学現象の解釈や予測には、ポテンシャル表面を効果的に解析する研究手法の開発が重要です。そのため、ポテンシャル表面を解析する新たな実験法および理論解析法を開発し、物質の構造・物性・反応を支配するポテンシャル表面特性を解明して、基礎化学の新パラダイムの構築に貢献してきました。これまでの主な研究は次の3つに大別することができます。

- (1) 分子内ポテンシャル：分子振動解析
- (2) 分子間ポテンシャル：分子表面解析
- (3) 反応系ポテンシャル：反応経路解析

(左記3項目をリンクにし、該当部分に飛ばす)

これらのそれぞれにおいて、従来の手法とは異なる新しい研究手法を開発しました。

回転偏光子分光法を作り出し、 Hückel 法に匹敵する分子振動計算法を開発！

(1) 分子内ポテンシャル：分子振動解析

偏光の垂直成分と水平成分を同時計測することを可能にする「回転偏光子分光法」を考案して、多環芳香族炭化水素分子(PAH)の電子スペクトルの複雑な振動構造の精密観測に成功しました(図1)[1]。偏光子用ポラロイドを縦横交互に円盤上に並べ、その円盤を回転させながら観測光の縦偏光成分と横偏光成分とを交互に透過させることで、縦横両成分の差を交流電気信号として、縦横両成分の和を直流電気信号としてそれぞれ検出し、それらのアナログ演算によって縦偏光成分と横偏光成分の同時観測を実現しました。また、アナログ演算を利用して振動構造の全対称振動成分と非全対称振動成分をスペクトルの上下に明瞭に分離して観測することにも成功しました。

図1のように、PAHの電子スペクトルの振動構造の精密測定に成功しましたが、その当時は、観測結果の解析に必要な基準振動解析法が確立されていませんでした。このため、六角形の炭素環を含むPAHの分子振動計算法(M0/8法)を開発し(図2)[2]、多環芳香族炭化水素[3]やハニカム状ナノカーボンネットワーク[4]の振動状態の解析を簡便かつ高精度で行うことを可能にしました。

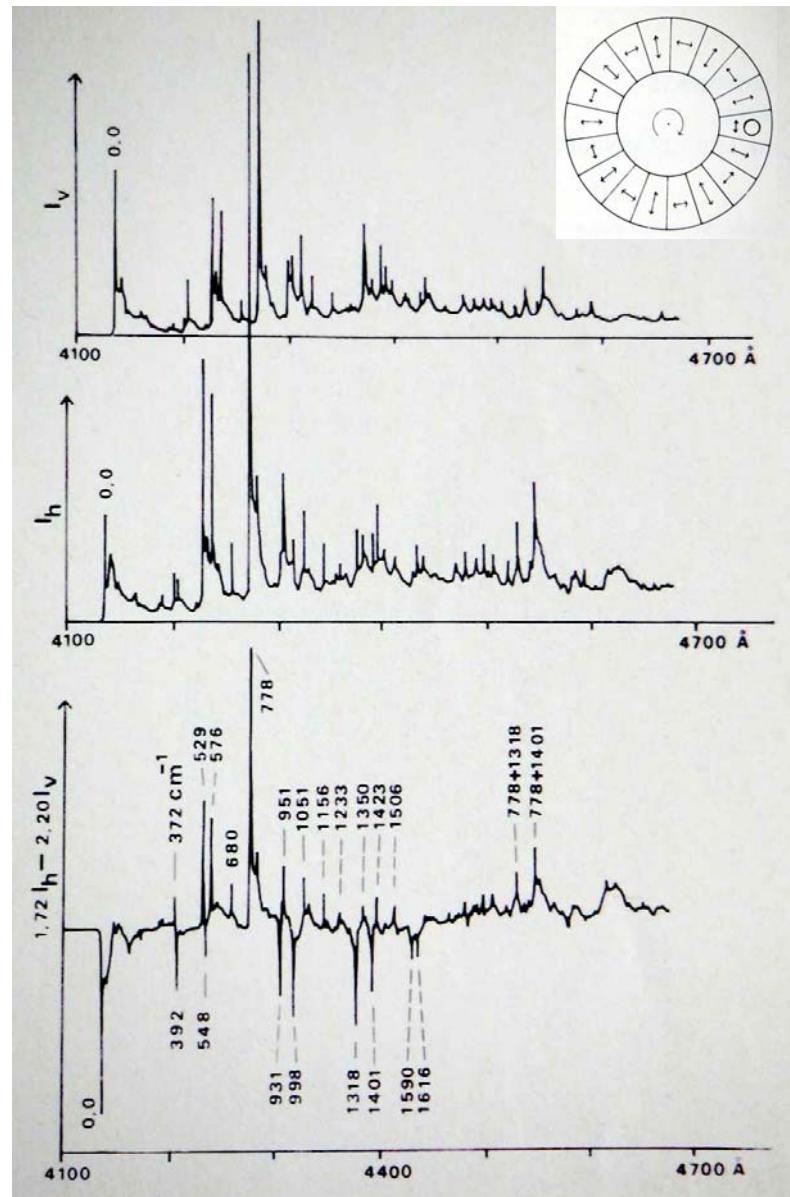


図1 回転偏光子分光によるPAH電子スペクトルの振動構造観測

MO/8 法は、わずか8個の力場パラメータを用いることで、ハニカム型炭素骨格構造をもつ任意の PAH の分子振動を、実測との平均誤差 $\Delta\nu = 20 \text{ cm}^{-1}$ 程度で予測計算できる方法です。

このような簡便な分子振動計算法の開発は、1930年代から、E. B. Wilson をはじめ、多数の専門家によって試みられていましたが、誰も達成できていませんでした。その理由は、PAH は π 電子共役系であるため、分子力場の構築が非常に難しかったからです。

MO/8 法は、 π 電子共役の効果によって直接隣り合っていない CC 結合どうしの間にも密接な相互作用があることを、Hückel 法で求められる結合間分極率というものを用いて考慮することで、50 年近くもの間、誰もつくることができなかつた「簡便かつ高性能な PAH 分子振動計算法」として世界の注目を集めようになりました。

図2に示したように、MO/8 法では、8 個の分子力場パラメータを全ての PAH にそのまま用いる計算で、実測振動数との平均誤差が約 20 cm^{-1} であるのに対し、MO/8 法とほぼ同時期に同じくころみで開発されたノルウェーの Cyvin らの方法では、ベンゼンでも誤差が 100 cm^{-1} を超えてしまい、最善でも 50 cm^{-1} を下回りません。これは、Cyvin の方法では、Wilson のモデルと同様、 π 電子の共役による CC 結合間の相関効果が全く考慮されていないためです[3]。

MO/8 法は、振動数だけでなくスペクトルの強度分布の計算にも非常に優れており[3]、最近よく用いられる DFT 法と比べ計算精度に遜色なく計算時間は DFT 法より数十万倍速く、ずっと短時間で計算できます。MO/8 法は、通常計算の難しい励起状態やイオン化状態にも拡張され、DFT 法や ab initio 法でできない計算に利用されています。また、デバイス開発で重要なナノカーボンやグラフェン類のように系が大きすぎて DFT 計算が困難な対象には、MO/8 法が極めて有用であり、ナノリボンなどに応用され注目されています[4]。

また、ポテンシャルの非調和性を直接考慮する分子振動計算はこれまで非常に困難でしたが、(3)で開発した反応経路探索法を応用することで、ポテンシャルの非調和性を効率的に考慮し、基本音のみならず結合音および倍音をも高い精度で解析することができる振動解析法を開発しました[5, 6]。水分子 2 量体の非調和振動解析は、ベンチマークとなるのですが、この分野の世界的リーダーとして著名な Bowen らが三万回の量子化学サンプリングで平均誤差 21 cm^{-1} 、Gerber らが千回のサンプリングで平均誤差 77 cm^{-1} を得たのに対し、私たちが開発した方法では、ずっと少ない 750 回のサンプリングで平均誤差 8.0 cm^{-1} という驚くほどの高精度を達成することができました[5, 6]。

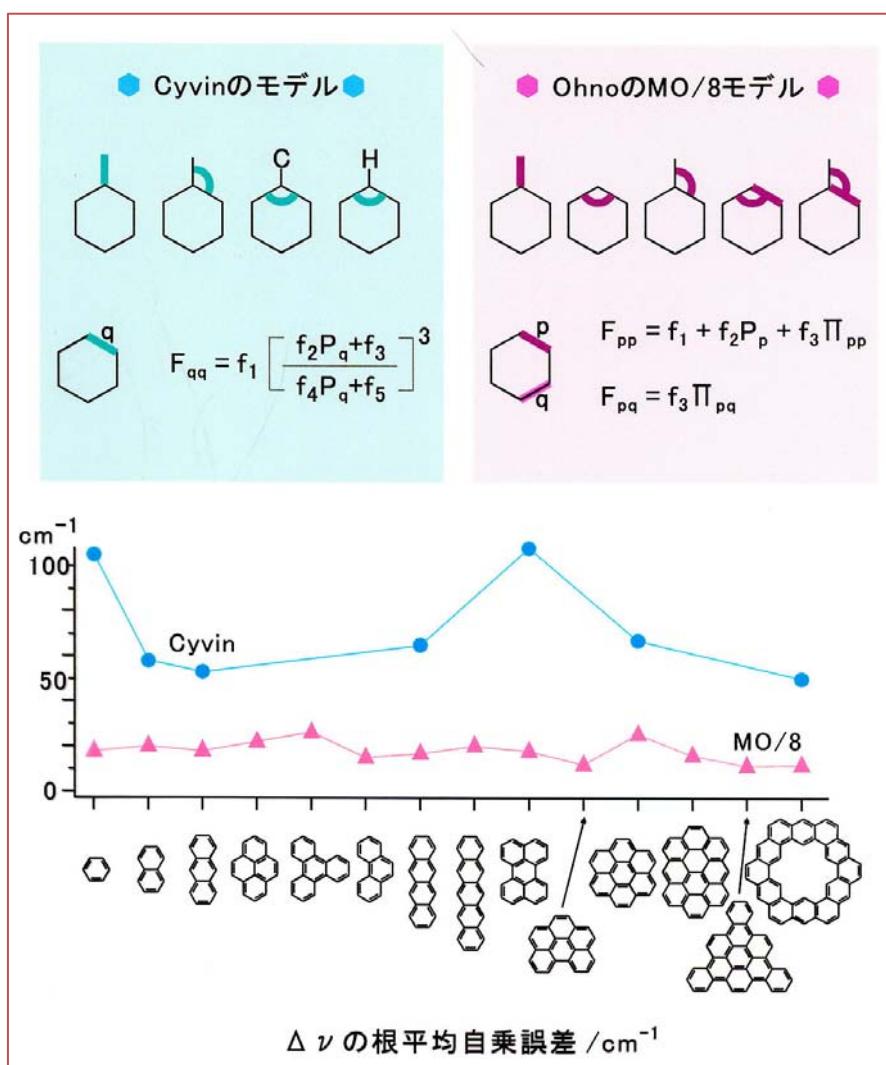


図2 PAH 分子振動計算法の開発

原子プローブを用い、分子軌道の空間的広がりと分子表面の硬軟粘着性を観測！

(2) 分子間ポテンシャル：分子表面解析

ヘリウムなどの希ガスの励起原子が分子と出会うと、分子中の電子を抜き取つて希ガスの励起電子が外へ飛び出る現象

(ペニングイオン化)が起こります。これは、希ガスの励起原子の内殻の空軌道と分子軌道との重なりが大きいほど起こりやすいことに着目し、分子表面の外側に広がる軌道ほど電子を抜き取られやすく、放出電子の運動エネルギーを分析して得られるペニングイオン化電子スペクトルのピーク強度が強くなることを発見しました(図3) [7, 8]。

この発見を契機にして、分子表面特性の観測に挑戦しました。

分子の表面に他の粒子が近づくとき、どのような相互作用が生じるか。これは、ミクロの世界の粒子同士の接触・衝突によって何が起こるかを支配するので重要ですが、これまで直接観測することは殆ど行われていませんでした。

この目的のために、2次元原子衝突ペニングイオン化電子分光法(2D-PIES 法)を開発し、原子をプローブとして用いて分子表面特性を実験的に観測することに成功しました[9]。もちろん、この 2D-PIES 法を作りだすには、非常に大きな困難がありました。それは2次元計測をしようとする

Penning Ionization

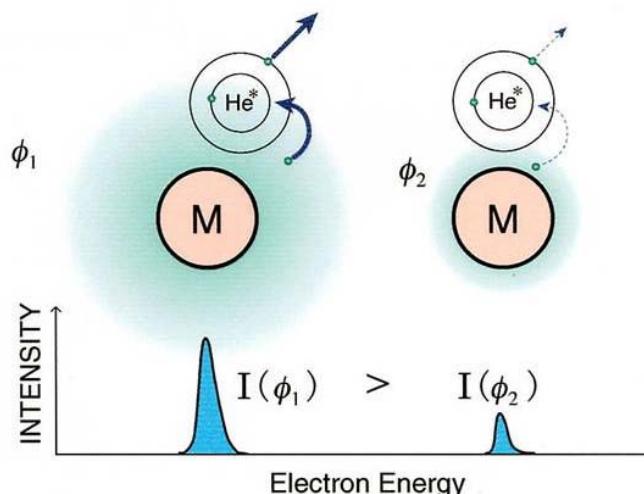
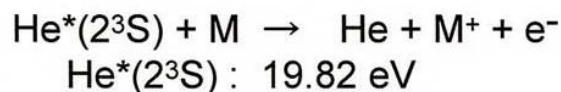


図3 ペニングイオン化の起こりやすさと分子軌道の広がり：外に広がる軌道ほど電子を抜き取られやすく、イオン化電子スペクトルの強度が強くなる。

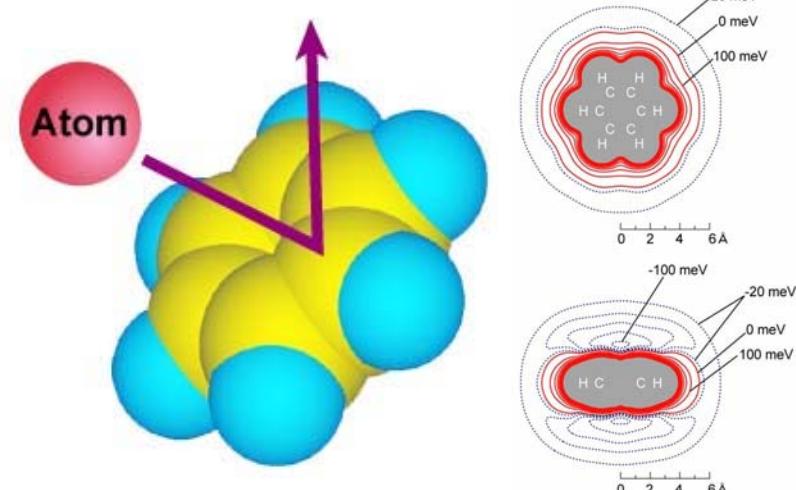


図4 原子プローブによるベンゼン分子表面の硬軟粘着性の観測： π 電子が分布する領域は「粘着性」があり、 σ 電子が分布するH原子付近は硬くC原子付近はやや軟らかいことが判明、

と、5桁も信号強度が下がってしまい、測定に膨大な時間がかかるって事実上測定不可能になることでした。この困難は、希ガスの準安定励起原子を発生させるビーム源の超強力化を行うなど、実験装置の性能改善に努めることで解決しました[10]。また、磁気ボトル効果などを利用することで信号検出感度を3桁以上高感度化してクラスターの励起原子衝突電子分光観測に成功し、特異な超励起状態を経由するイオン化機構の存在を実証しました[11, 12]。さらに、原子が分子表面に接近したときに、分子から原子に作用する力の硬軟粘着性を実験的に明らかにするとともに理論的に評価することを可能にしました(図4)[10, 13]。それとともに、分子のイオン化現象を支配するDyson軌道の空間的広がりを実験的に決定することに成功しました[14]。

不可能と思われていたことが可能になって実現した2D-PIES法の開発で、どのような技術開発を行ったかの概要を図5に示します。

希ガスの準安定励起原子A*を、図5の左上のように放電ノズルでつくると、ノズル内でたくさんできたA*の大半は、ノズル内の壁やガス粒子同士の衝突で脱励起されてしまい、ノズルの穴から外に取り出せる励起原子の割合は、非常に少なくなります。そこで、放電の電極をノズルの先端部分ではなく、原子ビームを切り出すスキマーのところに付け替えると、脱励起のほとんど起こらない空間に放電領域が染み出してくるので、A*のビーム強度を約3桁向上させることができました。

A*と試料分子との衝突速度を制御した実験を行うため図5左上の2段目のような3枚の回転円盤スリットからなる速度選別器を用いると、せっかくできたA*のうちのごく一部しか実験に利用できません。これを改善するために、回転円盤型スリットは1枚にして、そこから試料分子とぶつかるイオン化点までの飛行時間を利用して、衝突速度を考慮した計測を行うことで、約2000倍に計測信号強度を高めることができました。

単一スリットの円盤では、A*ビームの100分の1程度しか有効に利用せず、非常に大きな無駄があるので、擬似ランダムスリットを利用する時間相関法に切り替えることで、約50倍、計測信号強度を高めることができました。

ここまででは、A*の無駄を減らす工夫による計測信号強度の改善ですが、ペニングイオン化の信号強度は励起源のA*の強度に依存するだけでなく、イオン化過程で出てくる電子の計測効率にも依存します。

非常によく利用されている同心半球型の電子エネルギー分析器(図5左側最下段)では、イオン化過程で四方八方に飛び出た電子のうち電子エネルギー分析器の入り口にあるポンホールに入ったものだけが計測の対象になり、その他の電子は、まったく計測にかからず捨てられています。この無駄をなくすため、磁石とソレノイドを組み合わせてできる磁気ボトル効果で、電子を全て集めて一方向に導くことで、電子の捕集効率を3桁向上させることができました。

こうして、無駄をできるだけなくすよう装置の改良を積み重ねることで、計測信号強度を10桁(100億倍に)改善することができました。このようにして、最初は不可能かと思われる実験を実現し、それまで全くできなかった分子表面の硬軟粘着性の観測を可能にすことができました。

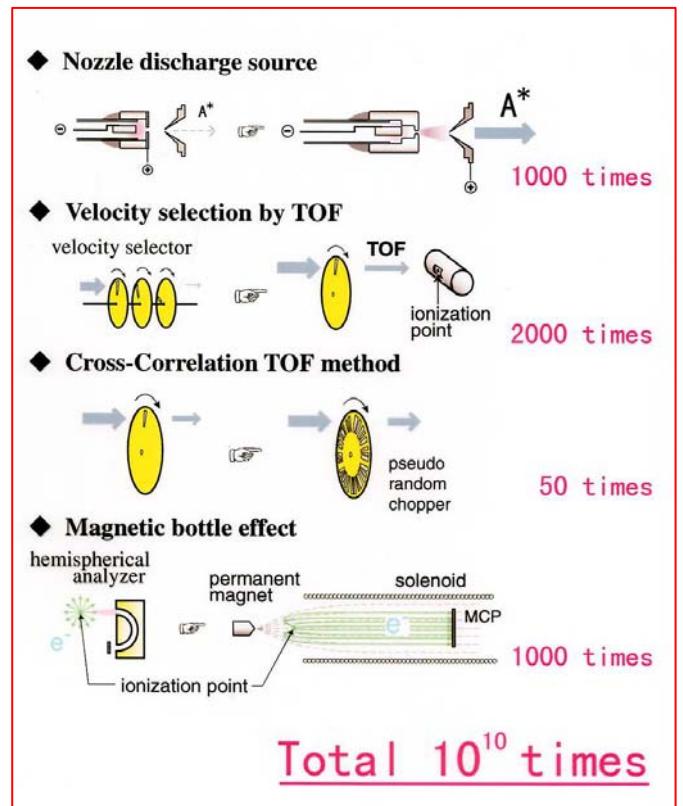


図5 2D-PIES法の開発で行った技術革新とそれによる計測信号の強化

定説を覆し、化学の世界の「羅針盤」を発見！ 未知の化学の理論的自動探索を可能に！

(3) 反応系ポテンシャル：反応経路解析

化学は、いろいろな原子が集まってできる物質の構造・性質・変化を追求し探究する学問です。したがて、個々の化学式($H_nC_mN_jO_k$ 等)について、

- (1) どのような化合物（異性体）が存在するか、
- (2) それらがどのように相互変換するか、また、
- (3) より小さなものへとどのように分解するか、その逆に、
- (4) 小さいものからどのようにして過不足なく合成することができるか。

これらは、化学の世界において、「何が可能であり何が不可能であるか（化学の可能性）」を明らかにする「化学の基本問題」であり、資源・エネルギー・環境など様々な観点から重要視されている元素戦略（元素を無駄にせず有効かつ安全に利用する）を進める上で非常に重要な問題です。

このような「化学の基本問題」に理論的に答えるためには、ポテンシャル表面の性質を調べる必要があります。これまで、ポテンシャル表面上の反応経路を次々と追跡する方法は存在しませんでしたが、反応が関係するポテンシャル表面の特徴を分析することによって、ポテンシャルの非調和下方歪（anharmonic downward distortion, ADD）が化学反応経路の進行方向を指示示す「羅針盤」のような働きを見つけることを見つけました[15]。

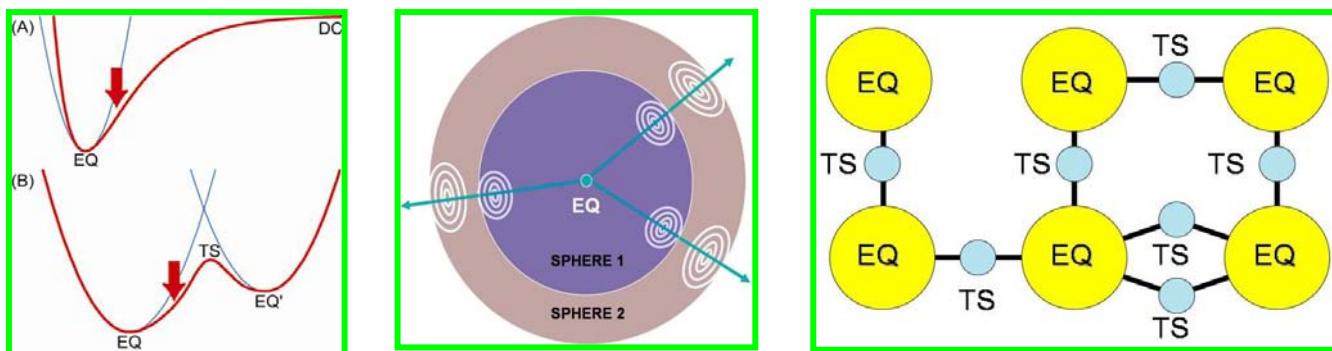


図6 (左) 化学反応経路の道標となる非調和下方歪（ADD：下向きの赤線）、(中央) 超球面上の極小点による反応経路の追跡、(右) 平衡構造(EQ)と遷移構造(TS)の芋づる式探索

図6左上段(A)のように平衡構造EQから化学結合が解離する場合(DC)でも、(B)のように遷移構造TSを越えて別な平衡構造EQ'へと結合の組換えが起こる場合でも、反応が進むにつれポテンシャルが放物線の形から下方に歪み、非調和下方歪み(Anharmonic Downward Distortion: ADD)が発生します。すなわちADDの大きな方向が化学反応の進む方向の「道標」となり、未知の化学反応ルートを探る「羅針盤」となります。この着想に基き、全ての反応経路を自動的に探索する方法(超球面探索法)を開発しました。

ADDは超球面上の実際のエネルギー値の極小として検出でき、図6中央のように、球を拡大しながら超球面上の極小点を辿ることで遷移構造TSを見つけ出し、反応経路を自動的に登坂することが初めて可能になりました。つまり、これまで発見不可能と考えられていた反応経路に沿う登坂ルートが、ADDが指示示す「羅針盤」によって、容易にみつけられるようになりました。

これによって、図6右のように芋づる式に全反応経路を有限の手数で探索して各化学組成について「化学反応経路の世界地図」を作製できるようになり[16]、先端的元素戦略や新触媒・新化合物の分子設計に役立つ新手法が確立しました[17]。

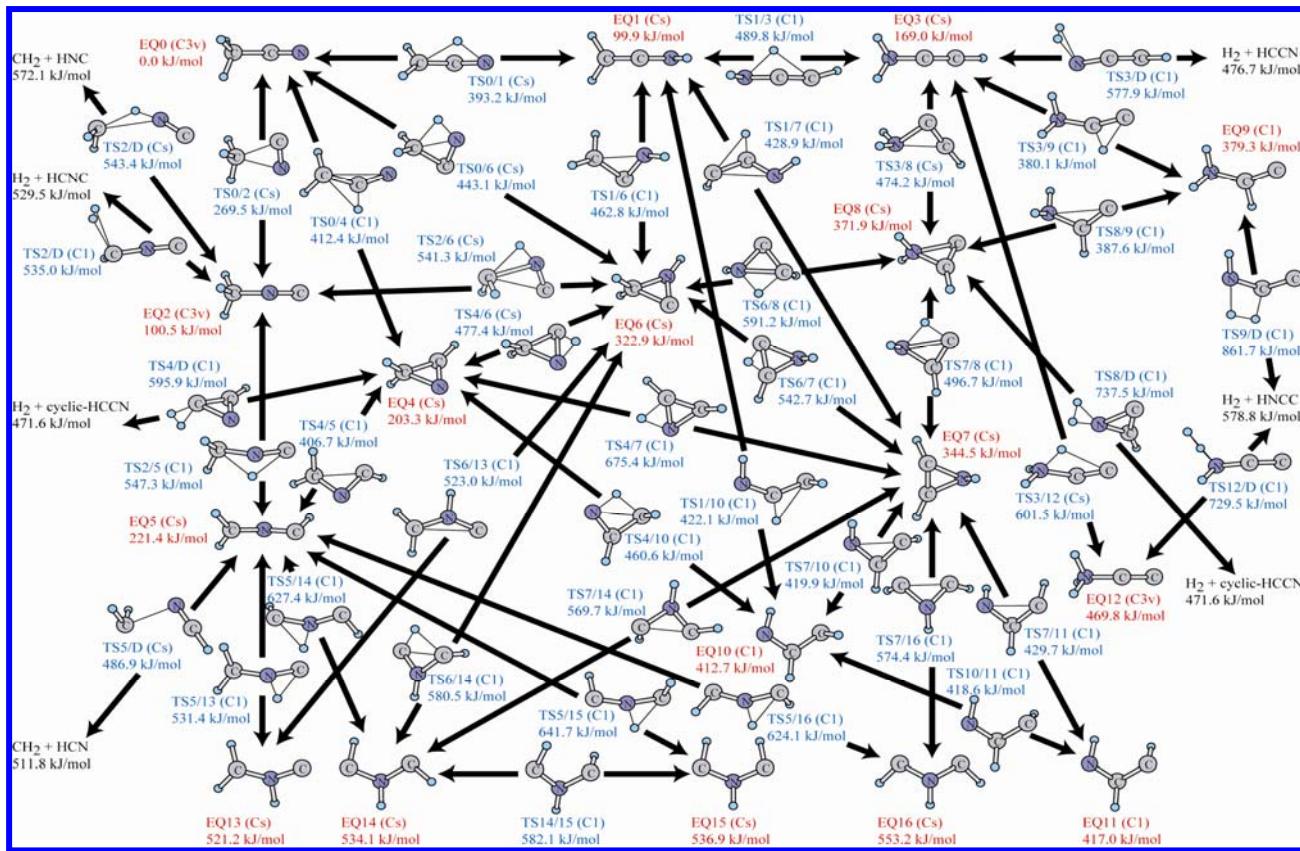


図7 $\text{H}_3\text{C}_2\text{N}$ の化学反応経路の世界地図

図7に、これまでほとんど不明であった $\text{H}_3\text{C}_2\text{N}$ の化学反応経路の世界地図を示しました[17,18]。この中には、すでに知っていたものも含まれますが、大部分は全く未知の反応経路であり、その遷移構造 (TS) も新たにみつけられました。このようにして、先に述べた、「化学の基本問題」(1)から(4)は、すべて解き明かすことができるようになりました。図5の中には、 $\text{H}_3\text{C}_2\text{N}$ の化学式であらわされるすべての異性体が含まれています ((1)の解)。また、それらどうしを結び付ける反応経路も、途中の遷移構造も含めて詳細に求められています ((2)の解)。また、より小さなものへと、たとえば、 CH_2 と HCN 、あるいは、 H_2 と HCCN などへと、分解して行く反応経路も、たくさん含まれています ((3)の解)。そして、このような分解経路を逆方向にたどれば、余分なものを生み出さなず、過不足なく $\text{H}_3\text{C}_2\text{N}$ を合成する反応経路が示されています ((4)の解)。つまり、「化学の基本問題」の正解が、私たちの化学反応経路探索法を用いて自動的に得られるのです。

ADD を利用した化学反応経路の探索は自動化できるため、私たちは、経験や直感に頼らずに、才能や幸運を前提とせずに、コンピュータを使って、未知の化学の扉を開くことができるようになりました。

このような化学反応経路の世界地図を量子力学に基づく理論計算で明らかにすることは、含まれる原子数が3を超えるとまったく不可能であるとされていました。1999年に出版された F. Jensen 著の世界的な計算化学の教科書(Introduction to Computational Chemistry, Wiley, 1999)にそう記されています。しかし、この記述は、私たちの発見によって、すっかり書き換えられることになりました。

私たちが見つけた ADD を利用する化学反応経路探索法は、これまでの定説を覆し、図7のように、原子数3を超える6原子系でも化学反応経路の世界地図を描くことを可能にしました。私たちが見つけた方法が、定説を覆し化学反応経路を悉く探索することを可能にしたことは、F. Jensen の著書の改訂版(Introduction to Computational Chemistry, 2nd Ed., Wiley, 2007)に掲載されています。

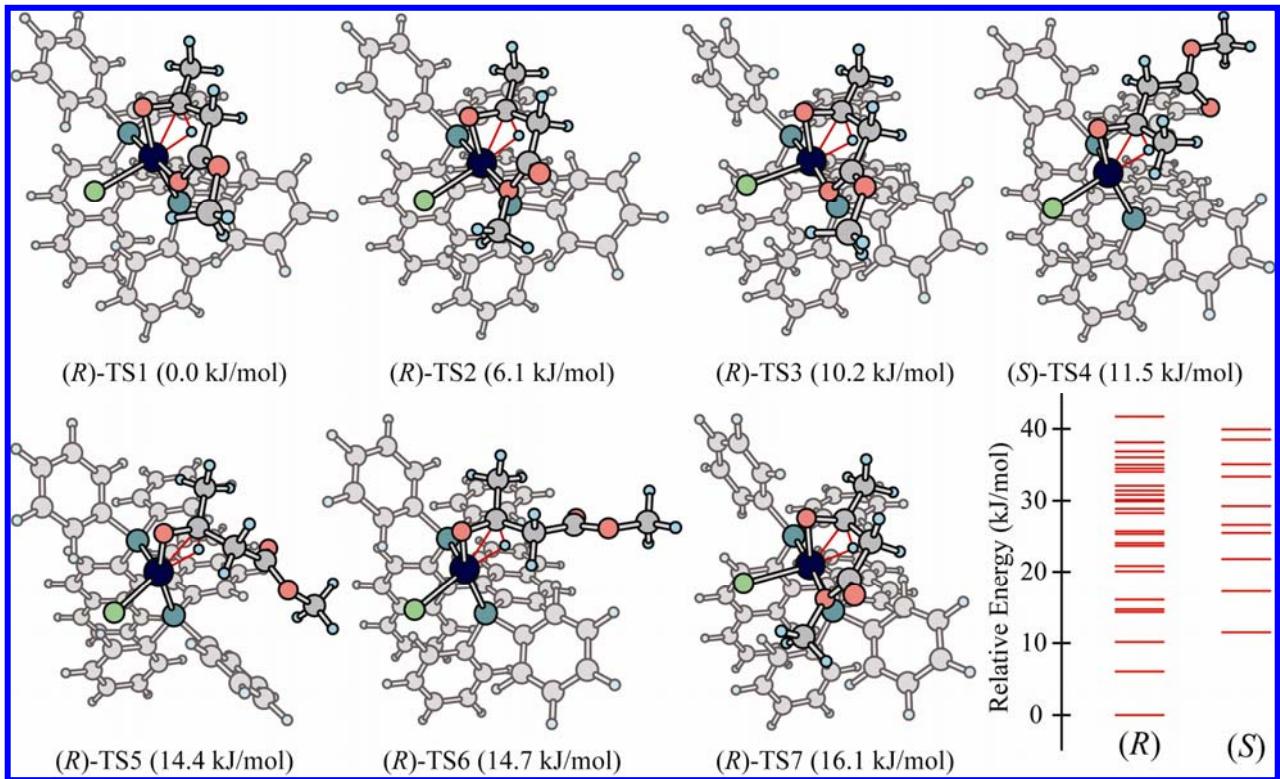


図8 BINAP-RuClH の遷移構造の R 体と S 体のエネルギー分布

ADD を利用することのメリットは、反応経路をすべて明らかにできることですが、その特色は、重要な遷移構造を自動的に効率よく見つけ出すことにも発揮されています。ノーベル化学賞を受賞された野依良治博士の BINAP 不斉触媒が、どのような遷移構造を経て光学活性体の一方のみを選択的に合成するのか、その深奥を理論的に暴きだすことができました[19]。図8に示したように、キラリティーをもつ R 体と S 体のどちらの遷移構造がエネルギー的に有利であるのか、私たちの反応経路探索法で調べると、R 体の方が圧倒的に有利であることがわかりました。私たちの反応経路探索法を用いると、この例のように、非常に重要な触媒反応機構を解明でき、新しい機能をもつ触媒の設計に重要な指針を与えることができます。このほか、光学活性体の一方と他方とを結ぶ反応経路は、これまでほとんど明らかにされていませんでしたが、ADD を利用する探索法によって、光学活性体の相互変換経路をみつけ出せるようになり、無益なものを有益なものに変換したり、有害なものを無害なものに変換したりすることを、自在に行う道が切り拓かれました[17]。

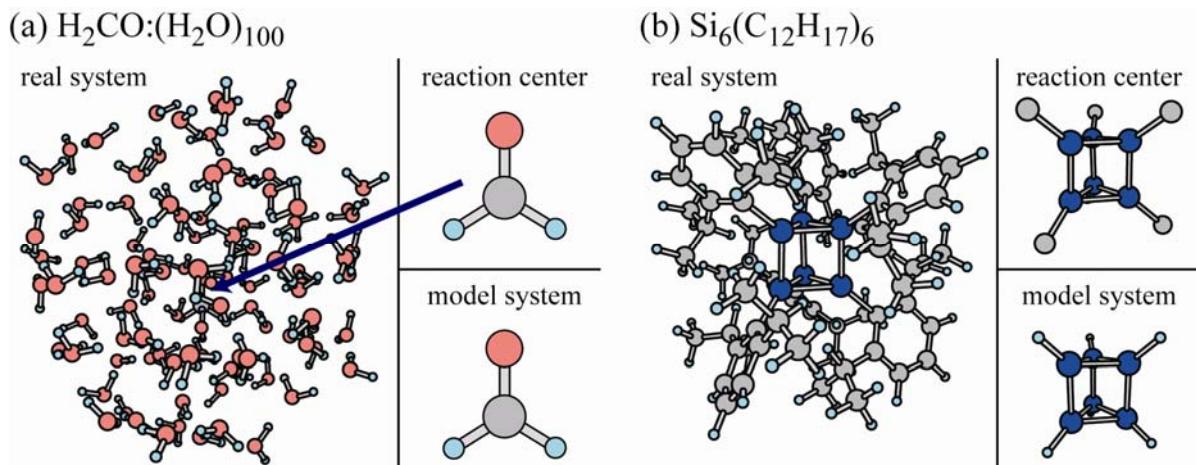


図9 巨大反応系 real system : (a) 100 個の水分子で溶媒和されたホルムアルデヒド分子 (b) 実際に合成されている hexasilaprizmane 誘導体 $\text{Si}_6(\text{C}_{12}\text{H}_{17})_6$ reaction center : 反応中心 model system : 量子化学(QM)計算のみを行うモデルシステム

私たちの化学反応経路探索法の対象は、化学反応の中心部分を量子化学計算(QM)で行い、溶媒和や嵩だかい置換基などを分子力場計算(MM)や半経験的方法などを用いて効率化することにより、100個の水分子で溶媒和された系や29個の原子を含む大きな置換基6個で囲まれた系のように、数百原子からなる巨大な系(図9参照)にも適用できるようになりました[20]。DNAや蛋白など、生命現象を支配する重要な物質への適用も可能になってきました。

私たちがみつけた化学反応経路探索法は、不可能とされていた定説を覆し、化学の世界の羅針盤として、化学における未知の世界の開拓にその優れた性質を発揮はじめています。

私たちが開発した「化学反応経路自動探索プログラム」にご関心のある方は、下記のアドレス宛、その旨、ご連絡ください。

「化学反応経路探索研究会：事務連絡用アドレス」 ohnok@mail.tains.tohoku.ac.jp

参考文献:

- [1] "A New Technique for Polarization Measurements of Luminescence with a Rotating Analyzer: Fluorescence Polarization of Coronene and 1,12-Benzoperylene", K. Ohno, H. Inokuchi, Chem. Phys. Lett., 33 (1975) 585-589.
- [2] "Normal Coordinate Calculations of Benzenoid Hydrocarbons. Theoretical Models of Simplified Valence Force Fields", K. Ohno, J. Mol. Spectrosc., 72 (1978) 238-251.
- [3] "A Simple Predictive Model for Planar Vibrations of Polycyclic Benzenoid Hydrocarbons", K. Ohno, J. Chem. Phys., 95 (1991) 5524-5538.
- [4] "Phonon Dispersions of Hydrogenated and Dehydrogenated Carbon Nanoribbons", M. Yamada, Y. Yamakita, K. Ohno, Phys. Rev. B, 77 (2008) 054302-(1,13).
- [5] "Finding Important Anharmonic Terms in the Sixth-Order Potential Energy Function by the Scaled Hypersphere Search Method: An Application to Vibrational Analyses of Molecules and Clusters", S. Maeda, Y. Watanabe, K. Ohno, J. Chem. Phys., 128 (2008) 144111-(1,11).
- [6] "Intramolecular Vibrational Frequencies of Water Clusters (H_2O)_n (n=2-5): Anharmonic Analyses Using Accurate Potential Functions based on the Scaled Hypersphere Search Method", Y. Watanabe, S. Maeda, K. Ohno, J. Chem. Phys., 129 (2008) 074315-(1,9).
- [7] "Study of Electron Distributions of Molecular Orbitals by Penning Ionization Electron Spectroscopy", K. Ohno, H. Mutoh, Y. Harada, J. Am. Chem. Soc., 105 (1983) 4555-4561.
- [8] "Exterior Electron Model for Penning Ionization. Unsaturated Hydrocarbons", K. Ohno, S. Matsumoto, Y. Harada, J. Chem. Phys., 81 (1984) 4447-4454.
- [9] "State-Resolved Collision Energy Dependence of Penning Ionization Cross Sections for N₂ and CO₂ by He ²³S", K. Ohno, T. Takami, K. Mitsuke, T. Ishida, J. Chem. Phys., 94 (1991) 2675-2687.
- [10] "Exterior Characteristics of Molecular Orbitals and Molecular Surfaces as Studied by Atomic Probes. K. Ohno", Bull. Chem. Soc. Japan, 77 (2004) 887-908.
- [11] "A Highly Sensitive Electron Spectrometer for Crossed-Beam Collisional Ionization: A Retarding-Type Magnetic Bottle Analyzer and its Application to Collision-Energy Resolved, Penning Ionization Electron Spectroscopy", Y. Yamakita, H. Tanaka, R. Maruyama, H. Yamakado, F. Misaizu, K. Ohno, Rev. Sci. Instrum., 71 (2000) 3042-3049.
- [12] "Penning Ionization Electron Spectroscopy of Van der Waals Clusters", K. Ohno, H. Tanaka, Y. Yamakita, R. Maruyama, T. Horio, F. Misaizu, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom., 112 (2000) 115-128.
- [13] "Observation of Anisotropic Interactions between Metastable Atoms and Target Molecules by Two-Dimensional Collisional Ionization Electron Spectroscopy", N. Kishimoto, K. Ohno, International Reviews in Physical Chemistry, 21 (2007) 93-138.

- [14] "Determination of Outer Molecular Orbitals by Collisional Ionization Experiments and Comparison with Hartree-Fock, Kohn-Sham, and Dyson Orbitals", M. Yamazaki, T. Horio, N. Kishimoto, K. Ohno, Phys. Rev. A, 75 (2007) 032721-(1,8).
- [15] "A Scaled Hypersphere Search Method for the Topography of Reaction Pathways on the Potential Energy Surface", K. Ohno, S. Maeda, Chem. Phys. Lett., 384 (2004) 277-282.
- [16] "Global Reaction Route Mapping on Potential Energy Surfaces of Formaldehyde, Formic Acid, and their Metal Substituted Analogues", K. Ohno, S. Maeda, J. Phys. Chem. A, 110 (2006) 8933-8941.
- [17] "Automated Exploration of Reaction Channels", K. Ohno, S. Maeda, Physica Scripta, 78 (2008) 058122 (1,8).
- [18] "Global Investigation on Potential Energy Surface of CH₃CN: Application of the Scaled Hypersphere Search Method", X. Yang, S. Maeda, K. Ohno, J. Phys. Chem. A, 109 (2005) 7319-7328.
- [19] "Lowest Transition State for the Chirality-Determining Step in Ru{(R)-BINAP}-Catalyzed Asymmetric Hydrogenation of Methyl-3-Oxobutanoate", S. Maeda, K. Ohno, J. Am. Chem. Soc., 130 (2008) 17228-17229.
- [20] "An Automated and Systematic Transition-Structure Explorer in Large Flexible Molecular Systems Based on Combined Global Reaction Route Mapping and Microiteration Methods", S. Maeda K. Ohno, K. Morokuma, J. Comp. Theoret. Chem. (in press).

Publication List of Koichi Ohno

< Original paper >

- 1 "Fluorescence Spectra of High-Purity Coronene Thin Film", T. Kajiwara, K. Ohno, S. Iwashima, H. Inokuchi, Bull. Chem. Soc. Japan, 42 (1969) 2734.
- 2 "Synthesis and Purification of Coronene", S. Iwashima, K. Ohno, T. Kajiwara, J. Aoki, Nippon Kagaku Zasshi, 90 (1969) 884-888.
- 3 "Fluorescence Spectra of Coronene-Perylene Mixed Crystal", S. Iwashima, K. Ohno, T. Kajiwara, J. Aoki, Nippon Kagaku Zasshi, 90 (1969) 1112-1114.
- 4 "Absorption Spectra of Gaseous Benzo(g,h,i)perylene and Coronene", J. Aihara, K. Ohno, H. Inokuchi, Bull. Chem. Soc. Japan, 43 (1970) 2435-2439.
- 5 "Thermoelectric Power of the Iodine Complexes of Aromatic Diamines and Thiazines", M. Sano, K. Ohno, H. Akamatu, Bull. Chem. Soc. Japan, 44 (1971) 3269-3271.
- 6 "Vibrational Analysis of Electronic Transition Bands of Coronene", K. Ohno, T. Kajiwara, H. Inokuchi, Bull. Chem. Soc. Japan, 45 (1972) 996-1004.
- 7 "A Self-Consistent Molecular Field Theory for Aggregates of Neutral Molecules", K. Ohno, H. Inokuchi, Theoret. Chim. Acta, 26 (1972) 331-350.
- 8 "Modified CNDO/2 Calculations of Ionization Potentials for Some Unsaturated Hydrocarbons", K. Ohno, T. Hirooka, Y. Harada, H. Inokuchi, Bull. Chem. Soc. Japan, 46 (1973) 2353-2355.
- 9 "Polarized Absorption, Fluorescence and Phosphorescence Spectra of Coronene in Triphenylene Matrix at 4.2 K", K. Ohno, H. Inokuchi, Chem. Phys. Lett., 23 (1973) 561-566.
- 10 "High-Resolution Photoelectron Spectroscopy of Naphthacene Polycrystal by Helium 21.22 eV Resonance Line", K. Seki, Y. Harada, K. Ohno, H. Inokuchi, Bull. Chem. Soc. Japan, 47 (1974) 1608-1610.
- 11 "Photoelectron spectrum of Dispiro(2,2,2)deca-4,9-diene. Conjugation of Walsh Orbitals of Cyclopropane Rings with Orbitals of Diene", Y. Harada, K. Ohno, K. Seki, H. Inokuchi, Chemistry Letters, 3 (1974) 1081-1086.
- 12 "Study of Radiative Properties of Phosphorescent Coronene in n-Octane by Microwave Induced Delayed Phosphorescence", K. Ohno, N. Nishi, M. Kinoshita, H. Inokuchi, Chem. Phys. Lett., 33 (1975) 293-297.
- 13 "A New Technique for Polarization Measurements of Luminescence with a Rotating Analyzer: Fluorescence Polarization of Coronene and 1,12-Benzoperylene", K. Ohno, H. Inokuchi, Chem. Phys. Lett., 33 (1975) 585-589.
- 14 "Electronic Spectra of Perylene and Coronene Evaporated Films as a Function of their Crystallinity", Y. Kamura, I. Shirotanji, K. Ohno, K. Seki, H. Inokuchi, Bull. Chem. Soc. Japan, 49 (1976) 418-422.
- 15 "Simple Calculations of Franck-Condon Factors for Electronic Transition Bands of Polyacenes", K. Ohno, Chem. Phys. Lett., 53 (1978) 571-577.

- 16 "Normal Coordinate Calculations of Benzenoid Hydrocarbons. Theoretical Models of Simplified Valence Force Fields", K. Ohno, J. Mol. Spectrosc., 72 (1978) 238-251.
- 17 "A Study of Franck-Condon Envelopes of the Photoelectron Bands of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons", K. Ohno, Chem. Phys., 37 (1979) 63-74.
- 18 "Normal Coordinate Calculations of Benzenoid Hydrocarbons. Classification and Characterization of Aromatic Planar Vibrations in Polyacenes", K. Ohno, J. Mol. Spectrosc., 77 (1979) 329-348.
- 19 "A Study of Excited-State Molecular Vibrations of Aromatic Hydrocarbons", K. Ohno, Chem. Phys. Lett., 64 (1979) 560-566.
- 20 "Photooxygenation Product of Dibenzo(a,j)perylene", T. Kajiwara, S. Fujisawa, K. Ohno, Y. Harada, Bull. Chem. Soc. Japan, 52 (1979) 2771-2777.
- 21 "Theory of Raman Scattering from Molecules. Summation over Vibrational States", K. Ohno, Chem. Phys. Lett., 69 (1980) 491-494.
- 22 "Application of Penning Ionization Electron spectroscopy to the Study of the Outermost Layer of the Solid Surface", T. Munakata, K. Ohno, Y. Harada, J. Chem. Phys., 72 (1980) 2880-2881.
- 23 "Vibronic Calculations in Aromatic Hydrocarbons", K. Ohno, Chem. Phys. Lett., 70 (1980) 526-531.
- 24 "Highly Disordered Amorphous Selenium Studied by Ultraviolet Photoemission Spectroscopy", T. Takahashi, K. Ohno, Y. Harada, Phys. Rev. , 21 (1980) 3399-3404.
- 25 "Assignment of Photoelectron Bands for Naphthalene and Anthracene by Penning Ionization Electron Spectroscopy", T. Munakata, K. Ohno, Y. Harada, K. Kuchitsu, Chem. Phys. Lett., 83 (1981) 243-245.
- 26 "Penning Electron Spectrum of Ferrocene. Evidence for Steric Effect on the Electronic Interaction Causing Penning Ionization", T. Munakata, Y. Harada, K. Ohno, K. Kuchitsu, Chem. Phys. Lett., 84 (1981) 6-8.
- 27 "Application of Penning Ionization Electron Spectroscopy to Stereochemistry. Steric Shielding Effect of Methyl Groups on Penning Ionization in Substituted Anilines", K. Ohno, S. Fujisawa, H. Mutoh, Y. Harada J. Phys. Chem., 86 (1982) 440-441.
- 28 "Application of Penning Ionization Electron Spectroscopy to the Study of Chemical Reactions on the Solid Surface. Photooxidation of Naphthacene and Rubrene", K. Ohno, H. Mutoh, Y. Harada, Surface Science, 115 (1982) L128-L132.
- 29 "Absorption Spectra of Volatile Aromatic Hydrocarbon Films in the Vacuum Ultraviolet Region", S. Hino, T. Veszpremi, K. Ohno, H. Inokuchi, K. Seki, Chem. Phys., 71 (1982) 135-144.
- 30 "Metamagnetic Behavior of an Organometallic Polymer; $((\text{Fe}(\text{C}_{13}\text{H}_{17}\text{N}_3)_2)\text{SO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O})_n$ ", T. Sugano, M. Kinoshita, I. Shirotani, K. Ohno, Solid State Communication, 45 (1983) 99-102.
- 31 "Photoelectron and Penning Ionization Electron Spectroscopic Investigation of Trimethyl Phenylsilane", T. Veszpremi, Y. Harada, K. Ohno, H. Mutoh, J. Organomet. Chem., 244 (1983) 115-118.
- 32 "Study of Electron Distributions of Molecular Orbitals by Penning Ionization Electron Spectroscopy", K. Ohno, H. Mutoh, Y. Harada, J. Am. Chem. Soc., 105 (1983) 4555-4561.
- 33 "Photoelectron and Penning Ionization Electron Spectroscopic Investigation of Trimethyl- and

- tert.Butyl-Thiophenes”, T. Veszpremi, Y. Harada, K. Ohno, H. Mutoh, J. Organomet. Chem., 252 (1983) 121-125.
- 34 “Penning Ionization Electron Spectroscopy of CO and Fe(CO)₅. Study of Electronic Structure of Fe(CO)₅ from Electron Distribution of individual Molecular Orbitals”, Y. Harada, K. Ohno, H. Mutoh, J. Chem. Phys., 79 (1983) 3251-3255.
- 35 “Penning Ionization Electron Spectroscopy of C₂H₅X(X = NH₂ , OH, SH, Cl, I). Relative Reactivity of Orbitals Localizing on Functional Groups upon Electrophilic Attack by Metastable Helium Atoms”, K. Ohno, K. Imai, S. Matsumoto, Y. Harada, J. Phys. Chem., 87 (1983) 4346-4348.
- 36 “Electron Spectroscopy of Semiconductor Surface by Impact of Metastable Rare Gas Atoms: Selenium”, Y. Harada, H. Ozaki, K. Ohno, Solid State Communication, 49 (1984) 71-74.
- 37 “Penning Ionization Electron Spectroscopy of Nitriles”, K. Ohno, S. Matsumoto, K. Imai, Y. Harada, J. Phys. Chem., 88 (1984) 206-209.
- 38 “Photoelectron and Penning Electron Spectroscopic Investigation of Phenylhalosilanes”, T. Veszpremi, Y. Harada, K. Ohno, H. Mutoh, J. Organomet. Chem., 266 (1984) 9-16.
- 39 “Orientation of Benzene Molecules Adsorbed on Graphite as Studied by Penning Ionization Electron Spectroscopy”, H. Kubota, T. Munakata, T. Hirooka, T. Kondow, K. Kuchitsu, K. Ohno, Y. Harada, Chem. Phys., 87 (1984) 399-403.
- 40 “Selective Observation of Outermost Surface Layer during Epitaxial Growth by Penning Ionization Electron Spectroscopy: Pentancene on Graphite”, Y. Harada, H. Ozaki, K. Ohno, Phys. Rev. Lett., 52 (1984) 2269-2272.
- 41 “Study of Wave Function Tails and Reactivity from Exterior Electron Model”, K. Ohno, S. Matsumoto, Y. Harada, J. Chem. Phys., 81 (1984) 2183-2184.
- 42 “Exterior Electron Model for Penning Ionization. Unsaturated Hydrocarbons”, K. Ohno, S. Matsumoto, Y. Harada, J. Chem. Phys., 81 (1984) 4447-4454.
- 43 “Observation of Structural Changes in Organic Monolayer Film by Penning Ionization Electron Spectroscopy: Fe-Phthalocyanin on Graphite”, Y. Harada, H. Ozaki, K. Ohno, T. Kajiwara, Surface Science, 147 (1984) 356-360.
- 44 “Photoelectron and Penning Ionization Electron spectroscopic Investigation of Some Silazanes”, T. Veszpremi, L. Bihatsi, Y. Harada, K. Ohno, H. Mutoh, J. Organomet. Chem., 280 (1985) 39-43.
- 45 ”Variations in Reactivity of Lone-pair Electrons due to Intramolecular Hydrogen Bonding as Observed by Penning Ionization Electron Spectroscopy”, K. Ohno, K. Imai, Y. Harada, J. Am. Chem. Soc., 107 (1985) 8078-8082.
- 46 “Study of Stereochemical Properties of Molecular Orbitals by Penning Ionization Electron Spectroscopy. Effects of Through-Space/Through-Bond Interactions on Electron Distributions”, K. Ohno, T. Ishida, Y. Naitoh, Y. Izumi, J. Am. Chem. Soc., 107 (1985) 8082-8086.
- 47 “Basis-Set Dependence of Exterior Electron Distributions of Molecular Orbitals”, K. Ohno, T. Ishida, Int. J. Quant. Chem., 29 (1986) 677-688.
- 48 ‘Penning Ionization Electron Spectroscopy of Molecules Containing the C=O Group. Aldehydes and

- Carboxylic Acids”, K. Ohno, S. Takano, K. Mase, J. Phys. Chem., 90 (1986) 2015-2019.
- 49 “Analysis of Stereochemical Properties of Molecular Orbitals of Trimethylsilylacetylenes by Penning Ionization Electron Spectroscopy”, H. Matsumoto, K. Akaiwa, Y. Nagai, K. Ohno, K. Imai, S. Masuda, Y. Harada, Organometallics, 5 (1986) 1526-1529.
- 50 “Penning Ionization Electron Spectroscopy of Monohalogenobenzenes, C₆H₅F, C₆H₆Cl, C₆H₅Br, and C₆H₅I”, S. Fujisawa, K. Ohno, S. Masuda, Y. Harada, J. Am. Chem. Soc., 108 (1986) 6505-6511.
- 51 “Intramolecular Interaction of Remote Sulfur Lone-Pairs Through Homoconjugation”, K. Kobayashi, K. Ohno, T. Ishida, S. Masuda, Y. Harada, Chemistry Letters, 16 (1987) 257-260.
- 52 “Application of Penning Ionization Electron Spectroscopy to Assignments of Electron Spectroscopic Bands of Anthracene”, T. Kajiwara, S. Masuda, K. Ohno, Y. Harada, J. Chem. Soc. Perkin II, 1988 (1988) 507-511.
- 53 “Radial Dependence of Exterior Electron Distributions of Molecular Orbitals”, K. Ohno, Theoret. Chim. Acta, 74 (1988) 239-249.
- 54 “The Influence of Basis Sets on Wavefunction Tails”, T. Ishida, K. Ohno, Int. J. Quant. Chem., 32 (1989) 257-266.
- 55 ”Penning Ionization Electron Spectroscopy of Group IV Tetramethyls: (CH₃)₄M (M = C, Si, Ge, Sn, Pb)”, M.Aoyama, S.Masuda, K.Ohno, Y.Harada, M.C.Yew, H.H.Hua, L.S.Yong, J. Phys. Chem., 93 (1989) 1800-1805.
- 56 “Penning Ionization Electron Spectroscopy of Diphenyl Charcogenides: PhOPh, PhSPh, and PhSePh”, W. Nakanishi, S. Masuda, T. Ishida, K. Ohno, Y. Harada, J. Org. Chem., 54 (1989) 540-544.
- 57 “Angular Distributions of Electrons Emitted by Collisional Ionization of Hydrogen Sulfide and Argon with Helium Metastable Atom”, K. Mitsuke, K. Kusafuka, K. Ohno, J. Phys. Chem., 93 (1989) 3062-3068.
- 58 “Photoelectron Spectroscopy of Small Argon Clusters by using an Electron-ion Coincidence Measurements”, K. Mitsuke, K. Ohno, J. Phys. Chem., 93 (1989) 501-503.
- 59 “Penning Ionization Electron Spectroscopy of Group IVB Trimethylphenils: (CH₃)₃MC₆H₅ (M = C, Si, Ge, Sn, Pb)”, M.Aoyama, S.Masuda, K.Ohno, Y.Harada, M.C.Yew, H.H.Hua, L.S.Yong, J. Phys. Chem., 93 (1989) 5414-5418.
- 60 “Kinetic Energy Dependence of Partial Cross Section for the Collisional Ionization of H₂O, H₂S, O₂, and Ar with He(²³S) Metastable Atoms”, K. Mitsuke, T. Takami, K. Ohno, J. Chem. Phys., 91(1989) 1618-1625.
- 61 “Observation of Unusually Enhanced Satellite Band in Penning Ionization Electron Spectra of Benzene and Toluene”, S. Masuda, M. Aoyama, K. Ohno, Y. Harada, Phys. Rev. Lett., 65 (1990) 3257-3260.
- 62 “Observation of Low-Lying Electronic States of (CO₂)₂⁺ by Using Photoelectron-Photoion Coincidence Measurements”, K. Mitsuke, K. Ohno, S. Kato, J. Phys. Chem., 94 (1990) 2313-2316.
- 63 “State-Resolved Collision Energy Dependence of Penning Ionization Cross Sections for N₂ and CO₂ by He ²³S”, K. Ohno, T. Takami, K. Mitsuke, T. Ishida, J. Chem. Phys., 94 (1991) 2675-2687.
- 64 “Penning Ionization Electron spectroscopy of Dichlorobenzenes”, S. Fujisawa, I. Oonishi, S. Masuda, K. Ohno, Y. Harada, J. Phys. Chem., 95 (1991) 4250-4254.

- 65 "Penning Ionization Electron spectroscopy of Halogenotoluenes: o-, m-, and p-CH₃C₆H₄X (X = Cl, Br, I)", S. Fujisawa, I. Oonishi, S. Masuda, K. Ohno, Y. Harada, J. Phys. Chem., 95 (1991) 5742-5749.
- 66 "Penning Ionization of (CH₃)₄C and (CH₃)_nCCl by Collision with He*(2³S) Metastable Atom", T. Takami, K. Mitsuke, K. Ohno, J. Chem. Phys., 95 (1991) 918-929.
- 67 "A Simple Predictive Model for Planar Vibrations of Polycyclic Benzenoid Hydrocarbons", K. Ohno, J. Chem. Phys., 95 (1991) 5524-5538.
- 68 "On the Asymptotic Behavior of Hartree-Fock Orbitals", T. Ishida, K. Ohno, Theoret. Chim. Acta, 81(1992) 355-364.
- 69 "Collision Energy-Resolved Penning Ionization Electron Spectra of Unsaturated Hydrocarbons with He*(2³S) Metastable Atoms", T. Takami , K. Ohno, J. Chem. Phys., 96 (1992) 6523-6530.
- 70 "Penning Ionization Electron Spectroscopy of Dichloro- and Trichlorotoluenes", S. Fujisawa, I. Oonishi, S. Masuda, K. Ohno, Y. Harada, J. Phys. Chem., 96 (1992) 6199-6203.
- 71 "Penning Ionization of CH₃SCN, CH₃NCO and CH₃NCS by Collision with He*(2³S) Metastable Atoms", T. Pasinszki, H. Yamakado, K. Ohno, J. Phys. Chem., 97 (1993) 12718-12724.
- 72 "Interaction Energy Contours of Molecules as Probed by a Test Atom", K. Ohno, S. Sunada, Proc. Ind. Acad. Sci.(Chem.Sci.), 106 (1994) 327-337.
- 73 "Planar Vibraions of Benzenoid Hydrocarbons. Comparison of Benzene Force Fields and Application of a Simple Predictive Model to Kekulene", K. Ohno, H. Shinohara, J. Phys. Chem., 98 (1994) 10063-10071.
- 74 "Theoretical Synthesis of Vibrational Spectra of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons. Infrared Spectra of Coronene", K. Ohno, H. Shinohara, J. Mol. Struct., 352/353 (1995) 475-479.
- 75 "Penning Ionization of Dichloroethylenes by Collision with He*(2³S) Metastable Atoms", K. Ohno, N. Kishimoto, H. Yamakado, J. Phys. Chem., 99 (1995) 9687-9693.
- 76 "Penning Ionization of HCHO, C₂H₄ and CH₂CHCHO by Collision with He*(2³S) Metastable Atoms", K. Ohno, K. Okamura, H. Yamakado, S. Hoshino, T. Takami, M. Yamauchi, J. Phys. Chem., 99 (1995) 14247-14253.
- 77 "Penning Ionization of CH₃CN and CH₃NC by Collision with He*(2³S) Metastable Atoms", T. Pasinszki, H. Yamakado, K. Ohno, J. Phys. Chem., 99 (1995) 14678-14685.
- 78 "Penning Ionization of CH₃OH,(CH₃)₂O, and (CH₃CH₂)₂O by Collision with He*(2³S) Metastable Atoms", H. Yamakado, M. Yamauchi, S. Hoshino, K. Ohno, J. Phys. Chem., 99 (1995) 17093-17099.
- 79 "Penning Ionization of Thiophene, Furan, Pyrrole by Collision with He*(2³S) Metastable Atoms", N. Kishimoto, H. Yamakado, K. Ohno, J. Phys. Chem., 100 (1996) 8204-8211.
- 80 "Collision-Energy/Electron-Energy Resolved Two-Dimensional Study of Penning Ionization of Ar by He Metastable Atoms 2³S and 2¹S", K. Ohno, H. Yamakado, T. Ogawa, T. Yamata, J. Chem. Phys., 105 (1996) 7536-7542.
- 81 "Effect of HOMO Levels on Chemiionization of Substituted Ethylenes by Metastable Helium Atoms", H. Yamakado, K. Okamura, K. Ohshima, N. Kishimoto, K. Ohno, Chemistry Letters, 26, 269 (1997).

- 82 "Interaction of C₂H₂ and HCN with ground-state atoms from H to Ar", S. Hoshino, K. Ohno, Elec. J. Theoret. Chem., 2 (1997) 180-194.
- 83 "Penning Ionization of CH₃SCH₃, CH₃SSCH₃, and CH₃CH₂SH by Collision with He*(2³S) Metastable Atoms", N. Kishimoto, R. Yokoi, H. Yamakado, K. Ohno, J. Phys. Chem. A, 101 (1997) 3284-3292.
- 84 "Penning Ionization of Cyclopropanes by Collision with He*(2³S) Metastable Atoms", H. Yamakado, T. Ogawa, K. Ohno, J. Phys. Chem. A, 101 (1997) 3887-3894.
- 85 "Collision-Energy-Resolved Penning Ionization Electron Spectroscopy of Nitriles: Conjugation Effects on Interactions with He*(2³S) Metastable Atoms", N. Kishimoto, J. Aizawa, H. Yamakado, K. Ohno, J. Phys. Chem. A, 101 (1997) 5038-5045.
- 86 "Outer Shape of Molecules as Probed by Ground-State Atoms from H to Ar", S. Hoshino, K. Ohno, J. Am. Chem. Soc., 119 (1997) 8276-8284.
- 87 "Penning Ionization of Cyclic Ethers by Collision with He*(2³S) Metastable Atoms", M. Yamauchi, H. Yamakado, K. Ohno, J. Phys. Chem., 101 (1997) 6184-6194.
- 88 "Raman Spectra of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons. Comparison of Calculated Raman Intensity Distributions with Observed Spectra for Naphthalene, Anthracene, Pyrene, and Perylene", H. Shinohara, Y. Yamakita, K. Ohno, J. Mol. Struct., 442 (1998) 221-234.
- 89 "Penning Ionization of Cobaltocene by Collision with He*(2³S) Metastable Atoms", H. Tanaka, H. Yamakado, K. Ohno, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom., 88-91 (1998) 149-154.
- 90 "Two-Dimensional Penning Ionization Electron Spectrum of N₂ by Collision with He*(2³S) Metastable Atoms", N. Kishimoto, M. Furuhashi, K. Ohno, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom., 88-91 (1998) 143-147.
- 91 "Collision Energy Resolved Penning Ionization Electron Spectra of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons", M. Yamauchi, Y. Yamakita, H. Yamakado, K. Ohno, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom., 88-91 (1998) 155-161.
- 92 "Study of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in the Solid State by Collision Energy Resolved Penning Ionization Electron Spectroscopy", H. Yamakado, Y. Sawada, H. Shinohara, K. Ohno, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom., 88-91 (1998) 927-932.
- 93 "Force Analysis by Molecular Orbitals - Partition of the Hellmann-Feynman Force into One-Electron Orbital Contributions", T. Ishida, K. Ohno, J. Mol. Struct. Theochem, 461-462 (1999) 335-349.
- 94 "Classical Trajectory Calculations of Collision Energy Dependence of Total and Partial Penning Ionization Cross Sections for He*(2³S)+N₂→He+N₂⁺+e", T. Ogawa, K. Ohno, J. Chem. Phys., 110 (1999) 3773-3780.
- 95 "Penning Ionization of Vinyl Chloride and Vinyl Iodide by Collision with He*(2³S) Metastable Atoms", N. Kishimoto, K. Ohshimo, K. Ohno, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom., 104 (1999) 145-154.
- 96 "Photoionization and Density Functional Study of Clusters of Alkali Metal Atoms Solvated with Acetonitrile M(CH₃CN)_n(M=Li,Na)", K. Ohshimo, H. Tsunoyama, Y. Yamakita, F. Misaizu, K. Ohno, Chem. Phys. Lett., 301 (1999) 356-364.
- 97 "Negative-Ion Photoelectron Spectroscopy of Cu Clusters Reacted with NO Molecules", F. Misaizu, M. Furuhashi, A. Takada, Y. Yamakita, K. Ohno, Euro. Phys. J. D, 9 (1999) 297-301.

- 98 "Two-Dimensional Penning Ionization Electron Spectroscopy of NNO, HCNO, and HNNN; Electronic Structure and the Interaction Potential with He*(2^3S) Metastable and Li(2^2S) Ground State Atoms", T. Pasinszki, N. Kishimoto, K. Ohno, J. Phys. Chem. A, 103 (1999) 6746-6756.
- 99 "Penning Ionization of NCCN by Experiment and Theory: a Two-Dimensional Penning Ionization Electron Spectroscopic and Quantum-chemical Study", T. Pasinszki, N. Kishimoto, T. Ogawa, K. Ohno, J. Phys. Chem. A, 103 (1999) 7170-7178.
- 100 "Classical Trajectory Calculations of Collision Energy Dependence of Partial Penning Ionization Cross Sections for He*(2^3S)+CH₃CN→He+CH₃CN⁺+e⁻", T. Ogawa, K. Ohno, J. Phys. Chem. A, 103 (1999) 9925-9930.
- 101 "Penning Ionization Electron Spectroscopic and Ab Initio Study of the Interaction and Ionization of HNCO and HNCS with He*(2^3S) Ground State Atoms", T. Pasinszki, N. Kishimoto, K. Ohno, J. Phys. Chem. A, 103 (1999) 9195-9203.
- 102 "Photoionization and Density Functional Study of Clusters of Acetone Containing Alkali Metal Atom, M((CH₃)₂CO)_n(M=Li, Na): Intracluster Electron Transfer from Metal to Acetone in 1:1 Complexes", H. Tsunoyama, K. Ohshima, Y. Yamakita, F. Misaizu, K. Ohno, Chem. Phys. Lett., 316 (2000) 442-448.
- 103 "Anionic Oligomerization of Acrylonitrile Molecules Initiated by Intracluster Electron Transfer from Alkali Metal Atoms: Photoionization Mass Spectrometry of M(CH₂=CHCN)_n(M=Li,Na and K)", K. Ohshima, F. Misaizu, K. Ohno, J. Phys. Chem. A, 104 (2000) 765-770.
- 104 "Penning Ionization of (NH₂)₂(X=O,S) with He*(2^3S) Metastable Atoms: Difference of Anisotropic Interaction around N=O and S Atoms", N. Kishimoto, Y. Osada, K. Ohno, J. Phys. Chem. A, 104 (2000) 1393-1399.
- 105 "Observation of Collisional Ionization Electron Spectra of Van Der Waals Clusters with Metastable He*(2^3S) Atoms: An Evidence for Autoionization from Superexcited Ar Clusters", H. Tanaka, R. Maruyama, Y. Yamakita, H. Yamakado, F. Misaizu, K. Ohno, J. Chem. Phys., 112 (2000) 7062-7067.
- 106 "Penning Ionization of [2,2]-Paracyclophe by Collision with He*(2^3S) Metastable Atoms", Y. Yamakita, M. Yamauchi, K. Ohno, Chem. Phys. Lett., 322 (2000) 189-198.
- 107 "Penning Ionization Electron Spectroscopy of Van der Waals Clusters", K. Ohno, H. Tanaka, Y. Yamakita, R. Maruyama, T. Horio, F. Misaizu, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom., 112 (2000) 115-128.
- 108 "A Highly Sensitive Electron Spectrometer for Crossed-Beam Collisional Ionization: A Retarding-Type Magnetic Bottle Analyzer and its Application to Collision-Energy Resolved, Penning Ionization Electron Spectroscopy", Y. Yamakita, H. Tanaka, R. Maruyama, H. Yamakado, F. Misaizu, K. Ohno, Rev. Sci. Instrum., 71 (2000) 3042-3049.
- 109 "Collision Energy Resolved Penning Ionization Electron Spectroscopy of Azines: Anisotropic Interaction of Azines with He*(2^3S) Atoms and Assignments of Ionic States", N. Kishimoto, K. Ohno, J. Phys. Chem. A, 104 (2000) 6940-6950.
- 110 "Penning Ionization of Substituted Benzenes (Aniline, Phenol, and Thiophenol) by Collision with He*(2^3S) Metastable Atoms", N. Kishimoto, M. Furuhashi, K. Ohno, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom., 113 (2000) 35-48.
- 111 "Penning Ionization Electron Spectroscopy of CO₂ Clusters in Collision with Metastable Rare Gas Atoms",

- R. Maruyama, H. Tanaka, Y. Yamakita, F. Misaizu, K. Ohno, Chem. Phys. Lett., 327 (2000) 104-110.
- 112 "Trajectory Calculations of Two-Dimensional Penning Ionization Electron Spectra of N₂ in Collision with Metastable He*(2³S) Atoms", K. Ohno, M. Yamazaki, N. Kishimoto, T. Ogawa, K. Takeshita, Chem. Phys. Lett., 332 (2000) 167-174.
- 113 "Two-Dimensional Penning Ionization Electron Spectroscopy of CO/He*(2³S)", M. Yamazaki, N. Kishimoto, M. Kurita, T. Ogawa, K. Ohno, K. Takeshita, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom., 114-116 (2001) 175-181.
- 114 "Penning Ionization of Amides by Collision with He*(2³S) Metastable Atoms", N. Kishimoto, Y. Osada, K. Ohno, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom., 114-116 (2001) 183-190.
- 115 "Intracluster Anionic Oligomerization of Acrylic Ester Molecules Initiated by Electron Transfer from an Alkali Metal Atom", H. Tsunoyama, K. Ohshima, F. Misaizu, K. Ohno, J. Am. Chem. Soc., 123 (2001) 683-690.
- 116 "Two-Dimensional Penning Ionization Electron Spectroscopy of Monohalogenobenzenes by He*(2³S): C₆H₅X(X=F,Cl,Br,I)", K. Imura, N. Kishimoto, K. Ohno, J. Phys. Chem. A, 105 (2001) 4189-4199.
- 117 "Collision-Energy-Resolved Penning Ionization Electron Spectroscopy of Difluorobenzenes: Anisotropic Interactions of Difluorobenzenes with He*(2³S) and Assignments of Ionic States", K. Imura, N. Kishimoto, K. Ohno, J. Phys. Chem. A, 105 (2001) 6073-6083.
- 118 "Anisotropic Interaction on Halogen Atom in C₂H₅X (X=Cl,F) with He*(2³S) as Probed by Two Dimensional Penning Ionization Electron Spectroscopy", K. Imura, N. Kishimoto, K. Ohno, J. Phys. Chem. A, 105 (2001) 6378-6385.
- 119 "Strong Raman Activities of Low Frequency Vibrational Modes in Alkylbenzenes: Conformation Specific σ-π Interactions between Alkyl Chain and Benzene Ring", K. Ohno, J. Kimura, Y. Yamakita, Chem. Phys. Lett., 342 (2001) 207-219.
- 120 "Intracluster Electron Transfer from Metal Atom/Cluster Followed by Anionic Oligomerization of Vinyl Molecules", K. Ohshima, H. Tsunoyama, F. Misaizu, K. Ohno, Euro. Phys. J. D, 16 (2001) 107-110.
- 121 "Size-Dependent Intracluster Reactions in Metal-Vinyl Molecule Clusters: Anionic Oligomerization Initiated by Electron Transfer", F. Misaizu, K. Ohshima, H. Tsunoyama, A. Furuya, K. Ohno, Trans. Mater. Res. Soc. Japan, 26(2001) 1135-1138.
- 122 "Collision-Energy-Resolved Penning Ionization Electron Spectroscopy of Dichlorobenzenes: Orbital Reactivity and Anisotropic Interaction of Dichlorobenzenes with He*(2³S)", K. Imura, N. Kishimoto, K. Ohno, J. Phys. Chem. A, 105 (2001) 9111-9122.
- 123 "Valence Electronic Force and Core Electronic Force. Significance of Core Electrons on Chemical Binding", T. Ishida, K. Ohno, J. Mol. Struct. Theochem, 574 (2001) 145-152.
- 124 "Intracluster Electron Transfer and Reactions in Alkali Metal Methacrylate Clusters", H. Tsunoyama, K. Ohshima, F. Misaizu, K. Ohno, J. Phys. Chem. A, 105 (2001) 9649-9658.
- 125 "Reactivity and Anisotropic Interaction of 1,3,5-C₆H₃F₃ and C₆F₆ with He*(2³S) Atoms: Comparison with mono- and di-fluorobenzenes", K. Imura, N. Kishimoto, K. Ohno, J. Phys. Chem. A, 105 (2001) 10787-10790.

- 126 "Collision Energy-Resolved Study of the Emission Cross Section and the Penning Ionization Cross Section in the Reaction of BrCN with He*(2³S) Metastable Atoms", K. Kanda, Y. Yamakita, K. Ohno, *Chem. Phys. Lett.*, 349 (2001) 411-420.
- 127 "Photoionization Mass Spectroscopy of Clusters of Alkali Metal Atoms with Methyl Vinyl Ketone and Acrolein: Intracluster Oligomerization Initiated by Electron Transfer From a Metal Atom", K. Ohshima, A. Furuya, H. Tsunoyama, F. Misaizu, K. Ohno, *Int. J. Mass Spectrom.*, 216 (2002) 29-40.
- 128 "Classical Trajectory Calculations of Penning Ionization Cross Sections for N₂ and CO by He*(2³S): Optimization of Anisotropic Model Potentials", Y. Yamazaki, S. Maeda, N. Kishimoto, K. Ohno, *Chem. Phys. Lett.*, 355 (2002) 311-318.
- 129 "Two Dimensional Penning Ionization Electron Spectroscopy of HCl with He*(2³S) Atom", K. Imura, N. Kishimoto, K. Ohno, *J. Phys. Chem. A*, 106 (2002) 3759-3765.
- 130 "Excited-State Vibrations of Benzene and Polycyclic Aromatic Hydrocarbons: Simple Force Field Models Based on Molecular Orbital Characteristics of Hexagonal Carbon Networks", K. Ohno, R. Takahashi, *Chem. Phys. Lett.*, 356 (2002) 409-422.
- 131 "Anisotropic Intermolecular Interactions and Through-Space/Through-Bond Intramolecular Interactions Observed by Collision-Energy-Resolved Penning Ionization Electron Spectroscopy", N. Kishimoto, H. Ogasawara, K. Ohno, *Bull. Chem. Soc. Japan*, 75 (2002) 1503-1513.
- 132 "Two-Dimensional Penning Ionization Electron Spectroscopy of Adamantanes and Cyclohexanes: Electronic Structure of Adamantane, 1-Chloroadamantane, Cyclohexane and Chlorocyclohexane and Interaction Potential with He*(2³S)", S. X. Tian, N. Kishimoto, K. Ohno, *J. Phys. Chem. A*, 106 (2002) 6541-6553.
- 133 "Penning Ionization of 1-Bromoadamantane and Bromocyclohexane by Collision with He*(2³S) Metastable Atom. Spin-Orbit Coupling Effect and Anisotropic Interaction around Bromine Atom", S. X. Tian, N. Kishimoto, K. Ohno, *J. Electron. Spectrosc. Relat. Phenom.*, 125 (2002) 205-219.
- 134 "Intracluster Multiple Trimer Cyclization of Acrylonitrile Clusters Initiated by Electron Transfer from a Potassium Atom: Size-Dependent Pathways in Metastable Dissociation of K⁺(CH₂=CHCN)_n Photons", K. Ohshima, F. Misaizu, K. Ohno, *J. Chem. Phys.*, 117 (2002) 5209-5220.
- 135 "Two-Dimensional Penning Ionization Electron Spectroscopy of Monobromothiophenes: Orbital Reactivity and Anisotropic Interaction with He*(2³S) Metastable Atom", S. X. Tian, N. Kishimoto, K. Ohno, *J. Phys. Chem. A*, 106 (2002) 7714-7721.
- 136 "Classical Trajectory Calculations for Two-Dimensional Penning Ionization Electron Spectra of N₂, CO, and CH₃CN with Metastable He*(2³S) Atoms", M. Yamazaki, S. Maeda, N. Kishimoto, K. Ohno, *J. Chem. Phys.*, 117 (2002) 5707-5721.
- 137 "Electronic Structure of 1-Adamantanol, Cyclohexanol, and Cyclohexanone and Anisotropic Interactions with He*(2³S) Atoms: Collision-Energy-Resolved Penning Ionization Electron Spectroscopy Combined with Quantum Chemistry Calculations", S. X. Tian, N. Kishimoto, K. Ohno, *J. Electron. Spectrosc. Relat. Phenom.*, 127 (2002) 167-181.
- 138 "Two-dimensional Penning Ionization Electron Spectroscopy of Carbon Dioxide: Spectral Assignments and Anisotropic Interactions with a He*(2³S) Metastable Atom", S. X. Tian, N. Kishimoto, K. Ohno, *Chem. Phys. Lett.*, 365 (2002) 40-48.

- 139 "Intramolecular Hydrogen Bonding in 2-Chloroethanol and 2-Bromoethanol and Anisotropic Interactions with He*(2^3S) Metastable Atoms: Two-Dimensional Penning Ionization Electron Spectroscopy Combined with Quantum Chemistry Calculations", S. X. Tian, N. Kishimoto, K. Ohno, J. Phys. Chem. A, 107 (2003) 53-62.
- 140 "A Simple Predictive Model for Molecular Vibrations of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons: an Extended Version of the MO/8 Model", K. Ohno, R. Takahashi, M. Yamada, Y. Isogai, Int. Elec. J. Mol. Design, 1 (2002) 636-658.
- 141 "Two-Dimensional Penning Ionization Electron Spectroscopy of CH₂ClII and CH₂ClCN, S. X. Tian, N. Kishimoto, K. Ohno, J. Phys. Chem. A, 107 (2003) 485-493.
- 142 "Negative-ion Photoelectron Spectroscopy of Acrylonitrile Clusters Containing a Sodium Atom", K. Ohshimo, M. Misaizu, K. Ohno, Euro. Phys. J. D, 24 (2003) 339-342.
- 143 "Photodissociation of Mg(CH₂=CHCN)_n⁺: Excited Electronic States of $n=1$ and 2 and Intracluster Electron Transfer for $n=3$ and 4", A. Furuya, K. Ohshimo, H. Tsunoyama, F. Misaizu, K. Ohno, H. Watanabe, J. Chem. Phys., 118 (2003) 5456-5464.
- 144 "Spin-Orbit Coupling Effect and Intramolecular Orbital Interactions: Penning Ionization of CH₂BrCl, CHBrCl₂, and CH₂BrCN by Collision with He*(2^3S) Metastable Atoms", S.X. Tian, N. Kishimoto, K. Ohno, J. Phys. Chem. A, 107 (2003) 2137-2147.
- 145 "Collision-Energy-Resolved Penning Ionization Electron Spectroscopy of OCS by Collision with He*(2^3S) Metastable Atoms", N. Kishimoto, T. Horio, S. Maeda, K. Ohno, Chem. Phys. Lett., 379 (2003) 332-339.
- 146 "A New Method for Constructing Multidimensional Potential Energy Surfaces by a Polar Coordinate Interpolation Technique", S. Maeda, K. Ohno, Chem. Phys. Lett., 381 (2003) 177-186.
- 147 "Photodissociation Spectroscopy of CH₃I⁺: Dissociation Processes via Charge Transfer and/or Chemical Bond Rupture", A. Furuya, H. Tsunoyama, F. Misaizu, K. Ohno, Chem. Phys. Lett., 382 (2003) 283-290.
- 148 "An Overlap Expansion Method for Improving ab initio Model Potentials: Anisotropic Intermolecular Potentials of N₂, CO, and C₂H₂ with He*(2^3S)", S. Maeda, M. Yamazaki, N. Kishimoto, K. Ohno, J. Chem. Phys., 120 (2004) 781-799.
- 149 "Collision-Energy-Resolved Penning Ionization Electron Spectroscopy of Substituted Ethylenes", N. Kishimoto, T. Oda, K. Ohno, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom., 137-140 (2004) 319-324.
- 150 "Penning Ionization Electron Spectroscopy of Cr(C₆H₆)(CO)₃ and Mn(C₅H₅)(CO)₃", N. Kishimoto, S. Fukuoka, H. Tanaka, K. Ohno, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom., 137-140 (2004) 313-318.
- 151 "Intracluster Cyclization Reaction Producing a Benzene Derivative: Photoionization Mass Spectrometric Study of Alkali Metal-Methyl Propionate Clusters", H. Tsunoyama, K. Ohshimo, F. Misaizu, K. Ohno, Int. J. Mass Spec., 232 (2004) 41-50.
- 152 "A Scaled Hypersphere Search Method for the Topography of Reaction Pathways on the Potential Energy Surface", K. Ohno, S. Maeda, Chem. Phys. Lett., 384 (2004) 277-282.
- 153 "A Crossed Molecular Beam Study on Collisional Ionization Dynamics of Acetonitrile and Benzene Molecules with He*(2^3S) Metastable Atoms", T. Horio, R. Maruyama, N. Kishimoto, K. Ohno, Chem. Phys. Lett., 384 (2004) 73-79.

- 154 "Novel Series of Giant Polycyclic Aromatic Hydrocarbons: Electronic Structure and Aromaticity", B. Hajgato K. Ohno, Chem. Phys. Lett., 385 (2004) 512-518.
- 155 "Exterior Characteristics of Molecular Orbitals and Molecular Surfaces as Studied by Atomic Probes. K. Ohno", Bull. Chem. Soc. Japan, 77 (2004) 887-908.
- 156 "Two-Dimensional Penning ionization Electron Spectroscopy of 2-Aminoethanol and Related Molecules by He*(2^3S) Atoms: Influence of Intramolecular Hydrogen Bonding on Collisional Ionization", R. Maruyama K. Ohno, J. Phys. Chem. A, 108 (2004) 4211-4218.
- 157 "Photoelectron Spectroscopy and Density Functional Theory Calculation of Na_n(CS₂) Cluster Negative Ions for n =1 and 2", F. Misaizu, H. Tsunoyama, Y. Yasumura, K. Ohshima, K. Ohno, Chem. Phys. Lett., 389 (2004) 241-246.
- 158 "Collision-Energy-Resolved Penning Ionization Electron Spectroscopy of p-Benzquinone: Study of Electronic Structure and Anisotropic Interaction with He*(2^3S) Metastable Atoms", N. Kishimoto, K. Okamura, K. Ohno, J. Chem. Phys., 120 (2004) 11062-11070.
- 159 "Determination of Outer Shape of Molecular Orbitals Based on Two-Dimensional Penning Ionization Electron Spectroscopy for N₂ and CO by He*(2^3S)", M. Yamazaki, S. Maeda, K. Ohno, Chem. Phys. Lett., 391 (2004) 366-373.
- 160 "Collision-Energy-Resolved Penning Ionization Electron Spectroscopy of Bromoethanes (CH₃Br, CH₂Br₂, and CHBr₃) by Collision with He*(2^3S) Metastable Atoms", N. Kishimoto, E. Matsumura, K. Ohno, M. Deleuze, J. Chem. Phys., 121 (2004) 3074-3086.
- 161 "Photoionization Efficiency Curve Measurements of an Alkali Metal Atom-Methyl Propiolate Clusters: Observation of Intracluster Cyclotrimerization Products". H. Tsunoyama, F. Misaizu, K. Ohno, J. Phys. Chem. A, 108 (2004) 5944-5949.
- 162 "Low Velocity Experiments for Collision Energy Dependence of Partial Ionization Cross Sections of C₂H₂ with He*(2^3S) Metastable Atoms", T. Horio, T. Hatamoto, N. Kishimoto, K. Ohno, Chem. Phys. Lett., 397 (2004) 242-246.
- 163 "Ab initio Studies on Synthetic Routes of Glycine from Simple Molecules via Ammonolysis of Acetolactone: Applications of the Scaled Hypersphere Search Method", S. Maeda, K. Ohno, Chemistry Letters, 33 (2004) 1372.
- 164 "No Activation Barrier Synthetic Route of Glycine from Simple Molecules (NH₃, CH₂, CO₂) via Carboxylation of Ammonium Ylide: a Theoretical Study by the Scaled Hypersphere Search Method", S. Maeda, K. Ohno, Chem. Phys. Lett., 398 (2004) 240-244.
- 165 "Multiple Photofragmentation Pathways with Different Recoil Anisotropy from a Metal Ion-Ligand Complex", F. Misaizu, A. Furuya, H. Tsunoyama, K. Ohno, Phys. Rev. Lett., 93 (2004) 193401-(1, 4).
- 166 "Two-Dimensional Penning Ionization Electron Spectroscopic Study on Outer Characteristics of Molecules", K. Ohno, M. Yamazaki, S. Maeda, N. Kishimoto, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom., 142 (2005) 283-293.
- 167 "Penning Ionization Electron Spectroscopy of C₆H₆ with He*(2^3S) Metastable Atoms and Classical Trajectory Calculations: Optimization of ab initio Model Potentials", M. Yamazaki, S. Maeda, N. Kishimoto, K. Ohno, J. Chem. Phys., 122 (2005) 044303-(1, 9).

- 168 "Electron Distribution and Intracluster Reaction in $[\text{Na}_n(\text{CS}_2)_2]^-$ Negative Ion Clusters", H. Tsunoyama, Y. Yasumura, K. Ohshima, F. Misaizu, K. Ohno, Euro. Phys. J. D, 34 (2005) 89-92.
- 169 "A New Approach for Finding a Transition State Connecting a Reactant and a Product without Initial Guess: Applications of the Scaled Hypersphere Search method to Isomerization Reactions of HCN, $(\text{H}_2\text{O})_2$, and Alanine Dipeptide", S. Maeda, K. Ohno, Chem. Phys. Lett., 404 (2005) 95-99.
- 170 "Energies of Low-Lying Excited States and Reactivity of Giant Polycyclic Aromatic Hydrocarbons with a Hole Inside", X. Yang, B. Hajgato, M. Yamada, K. Ohno, Chemistry Letters, 34 (2005) 506-507.
- 171 "Adsorption Reaction of Polar Organic Molecules on Si_n^+ Cluster Ions", W. Nakagawara, H. Tsunoyama, A. Furuya, F. Misaizu, K. Ohno, Int. J. Mod. Phys. B, 19 (2005) 2502-2507.
- 172 "Collision-Energy-Resolved Penning Ionization Electron Spectroscopy of HCOOH , CH_3COOH , and HCOOCH_3 by Collision with $\text{He}^*(2^3\text{S})$ Metastable Atoms", A. Borodin, M. Yamazaki, N. Kishimoto, K. Ohno, J. Phys. Chem. A, 109 (2005) 4721-4727.
- 173 "Global Mapping of Equilibrium and Transition Structures on Potential Energy Surfaces by the Scaled Hypersphere Search Method: Application to ab initio Surfaces of Formaldehyde and Propyne Molecules", S. Maeda, K. Ohno, J. Phys. Chem. A, 109 (2005) 5742-5753.
- 174 "Global Investigation on Potential Energy Surface of CH_3CN : Application of the Scaled Hypersphere Search Method", X. Yang, S. Maeda, K. Ohno, J. Phys. Chem. A, 109 (2005) 7319-7328.
- 175 "A Scaled Hypersphere Interpolation Technique for Efficient Construction of Multidimensional Potential Energy Surfaces", S. Maeda, Y. Watanabe, K. Ohno, Chem. Phys. Lett., 414 (2005) 265-270.
- 176 "Probing the Shape and Stereochemistry of Molecular Orbitals in Locally Flexiable Aromatic Chains: A Penning Ionization Electron Spectroscopy and Green's Function Study of the Electronic Structure of Biphenyl", N. Kishimoto, Y. Hagihara, K. Ohno, S. Knippenberg, J.-P. Francois, M.S. Deleuze, J. Phys. Chem. A, 109 (2005) 10535-10546.
- 177 "Size-Dependent Structures of $\text{Na}_n\text{I}_{n-1}^+$ Cluster Ions with a Methanol Adsorbate: A Combined Study by Photodissociation Spectroscopy and Density Functional Theory Calculation", F. Misaizu, M. Tsuruta, H. Tsunoyama, A. Furuya, K. Ohno, and M. Lintuluoto, J. Chem. Phys., 123 (2005) 161101.
- 178 "Development of a Cooled $\text{He}^*(2^3\text{S})$ Beam Source for Measurements of State-Resolved Collision Energy Dependence of Penning Ionization Cross Sections: Evidence for a Stereo Specific Attractive Well Around Methyl Group in CH_3CN ", T. Horio, M. Yamazaki, S. Maeda, T. Hatamoto, N. Kishimoto, K. Ohno, J. Chem. Phys., 123 (2005) 194308-(1,13).
- 179 "Global Analysis of Reaction Pathways on the Potential Energy Surface of Cyanoacetylene by the Scaled Hypersphere Search Method", X. Yang, S. Maeda, K. Ohno, Chem. Phys. Lett., 418 (2006) 208-216.
- 180 "Collision-Energy Resolved Penning Ionization Electron Spectroscopy of Styrene, 2-Vinylpyridine, and 4-Vinylpyridine by Collision with $\text{He}^*(2^3\text{S})$ Metastable Atoms", M. Yamazaki, N. Kishimoto, K. Ohno, Euro. Phys. J. D, 38 (2006) 47-57.
- 181 "Collision-Energy-Resolved Penning Ionization Electron Spectroscopy of Toluene and o,p-Chlorotoluenes: Stereodynamics in Collisional Ionization and Anisotropic Interactions with $\text{He}^*(2^3\text{S})$ Metastable Atoms", N. Kishimoto, M. Matsumoto, E. Matsumura, K. Ohno, Euro. Phys. J. D, 38(1), 75-84 (2006).

- 182 "Generation Mechanisms of Amino Acids in the Interstellar Space via Reactions between Closed-Shell Molecules", S. Maeda, K. Ohno, *Astrophys. J.*, 640 (2006) 823-828.
- 183 "Large Raman Scattering Activities for the Low-Frequency Modes of Substituted Benzenes: Induced Polarizability and Stereo-Specific Ring-Substituent Interactions", Y. Yamakita, Y. Isogai, K. Ohno, *J. Chem. Phys.*, 124 (2006) 104301-(1,18).
- 184 "Collision-Energy-Resolved Penning Ionization Electron Spectroscopy of Phenylacetylene and Diphenylacetylene by Collision with He*(2³S) Metastable Atoms", A. Borodin, M. Yamazaki, N. Kishimoto, K. Ohno, *J. Phys. Chem. A*, 110 (2006) 1783-1790.
- 185 "Probing Anisotropic Interaction Potentials of Unsaturated Hydrocarbons with He*(2³S) Metastable Atom: Attractive-Site Preference of σ -Direction in C₂H₂ and π -Direction in C₂H₄", T. Horio, T. Hatamoto, S. Maeda, N. Kishimoto, K. Ohno, *J. Chem. Phys.*, 124 (2006) 104308-(1,14).
- 186 "Aromaticity of Giant Polycyclic Aromatic Hydrocarbons with Hollow Sites: Super Ring Currents in Super-Rings", B. Hajgato, M. S. Deleuze, K. Ohno, *Chemistry A European Journal*, 12 (2006) 5757-5769.
- 187 "The Stark Effect and Field Ionization in Triplet Rydberg States of Helium Atoms", R. Takahashi, Y. Yamakita, N. Hori, K. Ohno, *Journal of Plasma and Fusion Research SERIES*, 7 (2006) 68-72.
- 188 "D-L Conversion Pathways between Optical Isomers of Alanine: Application of the Scaled Hypersphere Method to Explore Unknown Reaction Routes in a Chiral System", K. Ohno, S. Maeda, *Chemistry Letters*, 35 (2006) 492-493.
- 189 "Conversion Pathways between a Fullerene and a Ring among C₂₀ Clusters: Remarkable Difference in Local Potential Energy Landscapes around the Fullerene and the Ring", S. Maeda, K. Ohno, *J. Chem. Phys.*, 124 (2006) 174306-(1,7).
- 190 "Collision-Energy-Resolved Penning Ionization Electron Spectroscopy of Thiazole and Benzothiazole: Study of Ionic States and Anisotropic Interactions between a Metastable, He*(2³S) Atom and Hetero Cyclic Compounds", M. Yamazaki, N. Kishimoto, K. Ohno, *J. Phys. Chem. A*, 110 (2006) 7097-7104.
- 191 "Global Reaction Route Mapping on Potential Energy Surfaces of Formaldehyde, Formic Acid, and their Metal Substituted Analogues", K. Ohno, S. Maeda, *J. Phys. Chem. A*, 110 (2006) 8933-8941.
- 192 "Collision-Energy-Resolved Angular Distribution of Penning Electrons for N₂⁻ He*(2³S)", Y. Hanzawa, N. Kishimoto, M. Yamazaki, K. Ohno", *Chem. Phys. Lett.*, 426 (2006) 43-48.
- 193 "Photodissociation of Mg⁺-XCH₃ (X=F, Cl, Br, I) Complexes. I. Electronic Spectra and Dissociation Pathways", A. Furuya, F. Misaizu, K. Ohno, *J. Chem. Phys.*, 125 (2006) 094309-(1,12).
- 194 "Photodissociation of Mg⁺-XCH₃ (X=F, Cl, Br, I) Complexes. II. Fragment Angular and Energy Distributions", A. Furuya, F. Misaizu, K. Ohno, *J. Chem. Phys.*, 125 (2006) 094310-(1,14).
- 195 "Anisotropic Interaction and Stereo Reactivity in a Chemi-Ionization Process of OCS by Collision with He*(2³S) Metastable Atoms", T. Horio, S. Maeda, N. Kishimoto, K. Ohno, *J. Phys. Chem. A*, 110 (2006) 11010-11017.
- 196 "Photoinduced Dissociation Reactions of Silver Fluoride Cluster Ions", N. Hori, A. Furuya, M. Tsuruta, M. Misaizu, K. Ohno, *Euro. Phys. J. D*, 43 (2007) 41-44.

- 197 "Molecular Vibrations of [n]-oligoacence ($n = 2\text{-}5$, and 10) and Phonon Dispersion Relation of Polyacene", Y. Yamakita, J. Kimura, K. Ohno, *J. Chem. Phys.*, 126 (2007) 064904-(1,15).
- 198 "Determination of Outer Molecular Orbitals by Collisional Ionization Experiments and Comparison with Hartree-Fock, Kohn-Sham, and Dyson Orbitals", M. Yamazaki, T. Horio, N. Kishimoto, K. Ohno, *Phys. Rev. A*, 75 (2007) 032721-(1,8).
- 199 "Structures of Water Octamers (H_2O)₈: Exploration on Ab Initio Potential Energy Surfaces by the Scaled Hypersphere Search Method", S. Maeda, K. Ohno, *J. Phys. Chem. A*, 111 (2007) 4527-4534.
- 200 "Insight into Global Reaction Mechanism of [C_2 , H_4 , O] System from ab initio Calculations by the Scaled Hypersphere Search Method", X. Yang, S. Maeda, K. Ohno, *J. Phys. Chem. A*, 111 (2007) 5099-5110.
- 201 "A Computational Study of Titanocene-Catalyzed Dehydrocoupling of $\text{Me}_2\text{NH}\cdot\text{BH}_3$ Adduct: An Intramolecular Stepwise Mechanism", Y. Luo, K. Ohno, *Organometallics*, 26 (2007) 3597-3600.
- 202 "Infrared Photodissociation Spectroscopy of $\text{Al}^+(\text{CH}_3\text{OH})_n$ ($n = 1\text{-}4$)", A. Furuya, M. Tsuruta, F. Misaizu, K. Ohno, Y. Inokuchi, K. Judai, N. Nishi, *J. Phys. Chem. A*, 111 (2007) 5995-6003.
- 203 "Cooling Effects in the Stark Deceleration of Rydberg Atoms/Molecules with Time-Dependent Electric Fields", Y. Yamakita, R. Takahashi, K. Ohno, S. R. Procter, G. Maguire, T. P. Softley, *J. Phys. Conf. Ser.*, 80(2007) 012045.
- 204 "Quantum Chemistry Study of $\text{H}^+(\text{H}_2\text{O})_8$: A Global Search for Its Isomers by the Scaled Hypersphere Search Method and Its Thermal Behavior", Y. Luo, S. Maeda, K. Ohno, *J. Phys. Chem. A*, 111 (2007) 10732-10737.
- 205 "Global Reaction Route Mapping on Potential Energy Surfaces of C_2H_7^+ and C_3H_9^+ ", Y. Watanabe, S. Maeda, K. Ohno, *Chem. Phys. Lett.*, 447 (2007) 21-26.
- 206 "Automated Exploration of Absorption Structures of an Organic Molecule on $\text{RuH}_2\text{-BINAP}$ by the ONIOM Method and the Scaled Hypersphere Search Method", S. Maeda, K. Ohno, *J. Phys. Chem. A*, 111 (2007) 13168-13171.
- 207 "Observation of Anisotropic Interactions and Molecular Orbitals of CO upon Collision with $\text{He}^*(2^3\text{S})$ Atoms by Two-Dimensional Penning Ionization Electron Spectroscopy", N. Kishimoto, M. Yamazaki, Y. Hanzawa, T. Horio, K. Ohno, *J. Phys. Conf. Ser.*, 88 (2007) 012026.
- 208 "Phonon Dispersions of Hydrogenated and Dehydrogenated Carbon Nanoribbons", M. Yamada, Y. Yamakita, K. Ohno, *Phys. Rev. B*, 77 (2008) 054302-(1,13).
- 209 "Microsolvation of Hydrogen Sulfide: Exploration of $\text{H}_2\text{S}\cdot(\text{H}_2\text{O})_n$ and $\text{SH}\cdot\text{H}_3\text{O}^+\cdot(\text{H}_2\text{O})_{n-1}$ ($n = 5\text{-}7$) Cluster Structures on Ab Initio Potential Energy Surfaces by the Scaled Hypersphere Search Method", S. Maeda, K. Ohno, *J. Phys. Chem. A*, 112 (2008) 2962-2968.
- 210 "Finding Important Anharmonic Terms in the Sixth-Order Potential Energy Function by the Scaled Hypersphere Search Method: An Application to Vibrational Analyses of Molecules and Clusters", S. Maeda, Y. Watanabe, K. Ohno, *J. Chem. Phys.*, 128 (2008) 144111-(1,11).
- 211 "DFT Study on Isomerization and Decomposition of Cuprous Dialkyldithiophosphate and Its Reaction with Alkyl Radical", Y. Luo, S. Maeda, K. Ohno, *J. Phys. Chem. A*, 112 (2008) 5720-5726.
- 212 "A New Global Reaction Route Map on the Potential Energy Surface of H_2CO with Unrestricted Level",

- S. Maeda, K. Ohno, Chem. Phys. Lett., 460 (2008) 55-58.
- 213 "Intramolecular Vibrational Frequencies of Water Clusters $(H_2O)_n$ ($n=2\text{-}5$): Anharmonic Analyses Using Accurate Potential Functions based on the Scaled Hypersphere Search Method", Y. Watanabe, S. Maeda, K. Ohno, J. Chem. Phys., 129 (2008) 074315-(1,9).
- 214 "Automated Exploration of Reaction Channels", K. Ohno, S. Maeda, Physica Scripta, 78 (2008) 058122 (1,8).
- 215 "Decomposition of Alkyl Hydroperoxide by a Copper (I) Complex: Insights from Density Functional Theory", Y. Luo, S. Maeda, K. Ohno, Tetrahedron Letters, 49 (2008) 6841-6845.
- 216 "Conformation-Specific Raman Bands and Electronic Conjugation in Substituted Thioanisoles", Y. Yamakita, T. Okazaki, K. Ohno, J. Phys. Chem. A, 112 (2008) 12220-12227.
- 217 "Lowest Transition State for the Chirality-Determining Step in Ru{R)-BINAP}-Catalyzed Asymmetric Hydrogenation of Methyl-3-Oxobutanoate", S. Maeda, K. Ohno, J. Am. Chem. Soc., 130 (2008) 17228-17229.
- 218 "Automated Exploration of Stable Isomers of $H^+(H_2O)_n$ ($n=5\text{-}7$) via Ab Initio Calculations: An Application of the Anharmonic Downward Distortion Following Algorithm", Y. Luo, S. Maeda, K. Ohno, J. Comp. Chem., 30 (2009) 952-961.
- 219 "Isomer-Selected Photoreactions of Gas-Phase Cluster Ions", F. Misaizu, N. Hori, H. Tanaka, K. Komatsu, A. Furuya, K. Ohno, European Phys. J. D, 52 (2009) 59-62.
- 220 "Penning Ionization Electron Spectra of Pyrene, Chrysene, and Coronene in Collision with the Metastable $He(2^3S)$ Atoms in the Gas Phase", Y. Yamakita, M. Yamauchi, K. Ohno, J. Chem. Phys., 130 (2009) 024306-(1,13).
- 221 "Stereodynamics and Outer Valence Ionic States of Ferrocene in Collisional Ionization with a $He^*(2^3S)$ Metastable Atom by Two-dimensional Penning Ionization Electron Spectroscopy", N. Kishimoto, K. Ohno, J. Phys. Chem. A, 113 (2009) 521-526.
- 222 "Water-Catalyzed Gas-Phase Reaction of Formic Acid with Hydroxyl Radical: A Computational Investigation", Y. Luo, S. Maeda, K. Ohno, Chem. Phys. Lett., 469 (2009) 57-61.
- 223 "Automated Global Mapping of Minimum Energy Points on Seams of Crossing by the Anharmonic Downward Distortion Following Method: A Case Study on H_2CO ", S. Maeda, K. Ohno, K. Morokuma, J. Phys. Chem. A, 113 (2009) 1704-1710.
- 224 "Systematic Search for Isomerization Pathways of Hexasilabenzene for Finding its Kinetic Stability", M. Moteki, S. Maeda, K. Ohno, Organometallics, 28 (2009) 2218-2224.
- 225 "Anisotropic Interactions and Valence Ionic States of Dibenzenechromium Observed by Collision-Energy-Resolved Penning Ionization Electron Spectroscopy with $He^*(2^3S)$ Metastable Atoms", N. Kishimoto, K. Ohno, J. Phys. Conf. Ser. (in press).
- 226 "Phonon Dispersion and Vibronic Coupling in Carbon Nanoribbons", Y. Yamakita, K. Ohno, J. Phys. Conf. Ser. (in press).
- 227 "Collision-Energy-Resolved Penning Ionization Electron Spectroscopy of Glycine with $He(2^3S)$ Metastable Atoms: Conformational Isomers in Collisional Ionization", Y. Yamakita, K. Ohno, J. Phys. Chem. A (in

press).

228 "Outer Valence Ionic States of Cr(CO)₆ and η⁵-C₅H₅)Co(CO)₂ Observed by Two-Dimensional Penning Ionization Electron Spectroscopy", N. Kishimoto, K. Ohno, J. Phys. Chem. A (in press).

229 "An Automated and Systematic Transition-Structure Explorer in Large Flexible Molecular Systems Based on Combined Global Reaction Route Mapping and Microiteration Methods", S. Maeda K. Ohno, K. Morokuma, J. Comp. Theoret. Chem. (in press).

< Review Paper >

R1 "Coronene (I) : Structure and Properties", K. Ohno, Kagaku no Ryouiki, 29 (1975) 709-718.

R2 "Analysis of Solid Surfaces by Means of Rare Gas Metastable Atoms", Y. Harada, K. Ohno, Kagaku no Ryouiki, 37 (1983) 85-93.

R3 "Studies of Electronic States of Molecules and Solid Surfaces by Penning Ionization Electron Spectroscopy", Y. Harada, K. Ohno, Hyomen, 21 (1983) 373-384.

R4 "Observation of the Outermost Surface Layer of Solid by Penning Ionization Electron Spectroscopy", Y. Harada, K. Ohno, H. Ozaki, Hyomen Shori Kenkyu, 2 (1983) 169-176.

R5 "Observation of Electron Distributions on Outermost Layers of Solid Surfaces by Penning Ionization Electron Spectroscopy", Y. Harada, K. Ohno, (1984) 751-760. "Local Density Approximations", eds. J. Avery and J. P. Dahl, Plenum, New York and London.

R6 "Observation of Local Electron Distributions in Molecular Orbitals", . K. Ohno, Y. Harada, (1984) 761-770. "Local Density Approximations", eds. J. Avery and J. P. Dahl, Plenum, New York and London.

R7 "Magnetic Polymer", K. Ohno, Kobunshi, 33 (1984) 551-552.

R8 「オービタルを見る - 準安定励起原子を用いる分光法 -」, 大野公一, 原田義也, 現代化学, 157 (1984) 14-23.

R9 "A way of Looking into Molecular Orbitals - Recent Developments in Penning Electron spectroscopy", K. Ohno, Chemistry and Chemical Industry, 38 (1985) 88-90.

R10 "Stereochemistry of Molecular Orbitals by Penning Ionization Electron Spectroscopy", K. Ohno, Ionics, 133 (1986) 11-32.

R11 "Penning Ionization Electron Spectroscopy - Study of Molecules and Solid Surfaces", Y. Harada, K. Ohno, J. Chem. Soc. Japan, Chemistry and Industrial Chemistry, 1988 (1988) 1-16.

R12 「分子を見る - ペニング法による -」, 大野公一, 学術月報 1988年2月号 (1988) 15-21.

R13 "Penning Ionization - Outer Shape of Molecules. Theoretical Models of Chemical Bonding Part 3", K. Ohno, Y. Harada, (1991) 199-233. "Molecular Spectroscopy, Electronic Structure, and Intermolecular Interactions". ed. Z. B. Maksic, Springer-Verlag, Heiderberg.

R14 「原子プローブによる分子表面の研究」, 大野公一, 星野重男, 山門英雄, 表面 33 (1995) 408-415.

- R15 "Quantum Chemical Analysis and Electron Spectroscopic Observation of Atom-Molecule Interfacial Properties" , K. Ohno, S. Hoshino, T. Ogawa, H. Yamakado, Reports of Toyota Physical and Chemical Research Institute, 50 (1997) 109-117.
- R16 "Molecular Shape and Anisotropy Effects on Collisional Ionization Dynamics", K. Ohno, (2000) 677-686. "The Physics of Electronic and Atomic Collisions", eds. Y. Itikawa, K. Okuno, H. Tanaka, A. Yagishita, and M. Matsuzawa, American Institute of Physics, New York.
- R17 「時間相関2次元ペニンゲイオン化電子分光による励起ヘリウム原子一分子間相互作用の立体異方性」岸本直樹, 大野公一, 分光研究, 50 (2001) 157-166.
" Anisotropic Interaction between a Metastable He* Atom and Molecules by Cross-Correlation Two-Dimensional Penning Ionization Electron Spectroscopy", N. Kishimoto, K. Ohno, Bunko Kenkyu, 50 (2001) 157-166.
- R18 "Excited State Charge Transfer and Dissociation of Mg⁺-CH₃I Complex", F. Misaizu, A. Furuya, H. Tsunoyama, K. Ohno, (2005) 89-95. "Clusters and Nano-Assemblies: Physical and Biological Systems", eds. P. Jena, S. N. Khanna, and B. K. Rao, World Scientific, Singapore.
- R19 "Intracluster Anionic Polymerization Induced by Electron Transfer from Alkali Metal Atom to Unsaturated Hydrocarbon Molecules", H. Tsunoyama, K. Ohshimo, A. Furuya, W. Nakagawara, F. Misaizu, K. Ohno, (2005) 387-392. "Clusters and Nano-Assemblies: Physical and Biological Systems", eds. P. Jena, S. N. Khanna, and B. K. Rao, World Scientific, Singapore.
- R20 「2次元ペニンゲイオン化電子分光法による衝突反応の立体ダイナミクスの研究」, 岸本直樹, 大野公一, 真空, 48 (2005) 403-408.
"Study of Stereodynamics in Collisiponal Ionization by Two-Dimensional Penning Ionization Electron Spectroscopy", N. Kishimoto, K. Ohno, J. Vac. Soc. Japan, 48 (2005) 403-408.
- R21 "Observation of Anisotropic Interactions between Metastable Atoms and Target Molecules by Two-Dimensional Collisional Ionization Electron Spectroscopy", N. Kishimoto, K. Ohno, International Reviews in Physical Chemistry, 21 (2007) 93-138.
- R22 「励起原子プローブで分子を見る — 衝突イオン化における立体異方性の観測 —」, 岸本直樹, 大野公一, 日本物理学会誌, 62 (2007) 518-522.
"Metastable Atomic Probe Spectroscopy of Molecules – Observation of Stereodynamics in Collisional Ionization –", N. Kishimoto, K. Ohno, Butsuri, 62 (2007) 518-522.

< Text Book >

- B1 「量子物理化学」, 大野公一, (1989) 東京大学出版会, 東京.
- B2 「新版化学」, 井口洋夫, 木下実, 大野公一, 坂田祥光, 中村暢男, 福田豊, 目良誠二, 山本孝二, 西條元康, 鈴木彰, 齋藤幸一, (1989) 実教出版, 東京.
- B3 「分子科学とは – そのあらまし」, 井口洋夫, 馬場宏明, 大野公一, 植田夏, 小尾欣一, 笛野高之, 齋藤修二, 国府田隆夫, 松永義夫, 正畠宏祐, 村上幸人, 中原弘雄, 田附重夫, 木村啓作, 伊藤光男, 黒田晴雄, 大野公男, (1990) 日本学術振興会, 東京.
- B4 「化学 IB」, 井口洋夫, 木下実, 大野公一, 坂田祥光, 中村暢男, 宮本健, 歌川晶子, 齋藤幸一, 丹伊田敏, 山本孝二, (1994) 実教出版, 東京.

- B5 「化学 II」, 井口洋夫, 木下実, 大野公一, 坂田祥光, 中村暢男, 宮本健, 歌川晶子, 齊藤幸一, 丹伊田敏, 山本孝二, (1995) 実教出版, 東京.
- B6 「量子化学」, 大野公一, (1996) 岩波書店, 東京.
- B7 「化学入門」, 大野公一, 妹尾学, 今任稔彦, 高木誠, 福田豊, 池田功, (1997) 共立出版, 東京.
- B8 「化学入門」, 井口洋夫, 木下実, 大野公一, 坂田祥光, 中村暢男, 福田豊, 目良誠二, 山本孝二, 西條元康, 鈴木彰, 齊藤幸一, (1998) 実教出版, 東京.
- B9 「量子化学演習」, 大野公一, (2000) 岩波書店, 東京.
- B10 「基礎から学ぶ熱力学」, 大野公一, (2001) 岩波書店, 東京.
- B11 「化学 I」, 井口洋夫, 木下実, 中村暢男, 宮本健, 大野公一, 村田滋, 村上忠幸, 丹伊田敏, 渡辺範夫, 山本孝二, 齊藤幸一, 歌川晶子, 吉本千秋, (2002) 実教出版, 東京.
- B12 「化学 II」, 井口洋夫, 木下実, 中村暢男, 宮本健, 大野公一, 村田滋, 村上忠幸, 丹伊田敏, 渡辺範夫, 山本孝二, 齊藤幸一, 歌川晶子, 吉本千秋, (2003) 実教出版, 東京.
- B13 「図説量子化学 一分子軌道への視覚的アプローチ」, 大野公一, 山門英雄, 岸本直樹, (2002) 裳華房, 東京.
- B14 「大学生のための例題で学ぶ化学入門」, 大野公一, 村田滋, 錦織紳一, (2005) 共立出版, 東京.
- B15 「初步からの化学」, 萩野博, 大野公一, 吉良満夫, (2008) 日本放送出版協会, 東京.
- B16 「量子化学」, 濱田嘉昭, 大野公一, (2009) 日本放送出版協会, 東京.

< Translation >

- T1 「化学数学 ーその基礎とプログラミングー」, 石田俊正, 大野公一, (1992) マグロウヒル, 東京, 原著 : "Mathematics in Chemistry, An Introduction to Modern Methods", Henry G Hecht, (1990) Prentice Hall.

< Dictionary >

- D1 「英和化学用語辞典」, 萩野博, 山本学, 大野公一 編, (2008) 東京化学同人, 東京
- D2 「和英化学用語辞典」, 萩野博, 山本学, 大野公一 編, (2009) 東京化学同人, 東京