



小杉 信博（教授）

1976年京大卒 1981年東大理院修了、理学博士 東大理
助手・講師、京大助教授を経て1993年1月より現職 1996
年カナダ・マックマスター大学客員教授
TEL: 0564-55-7390
FAX: 0564-54-2254
電子メール: kosugi@ims.ac.jp

本研究グループでは放射光を利用した新しい軟X線分光法の確立と応用を目指して研究を推進しています。普通の光源では分子軌道を構成している複雑な外殻電子しか励起できないために、分子の個性を引き出すにはいろいろな方法で切り口を変えないといけません。それに対して、好きな波長の軟X線が手に入る放射光を利用すると、分子の個性を引き出すことが非常に簡単になります。つまり、軟X線によって原子核の近くにある内殻電子が励起できるために、励起先の分子軌道を原子の成分に容易に分解することができます。また、同じ元素でも化学的な環境の違いで内殻のエネルギー準位がわずかに違ってくるという性質も使えます。

詳しくは参考文献をお読みいただくとし、ここでは軟X線吸収の偏光異方性の研究紹介をしましょう。図1にニッケルのシアノ錯体の内殻吸収スペクトルを示しました。軟X線のエネルギーを850 eV から 890 eV あたりにするとニッケルの 2p 内殻電子を選んで励起させることができます。赤色の線は錯体の分子の面に平行に偏光方向を選んだときで、黄色の線は分子の面に垂直に偏光方向を選んだときの軟X線の吸収です。吸収があるということは内殻電子が励起できる先があるということになりますので、偏光依存性から励起先が何であるかについて知ることができます。分子軌道理論から導かれた分子軌道を図2に示しました。最初の強い吸収（赤色の

丸）はニッケルの 3d σ 軌道がシアノ基の σ^* 軌道と混成した軌道への励起、次に強い吸収（黄色）はニッケルの別の 3d σ 軌道がシアノ基の分子面内 π^* 軌道と混成した軌道への励起、面外で最も強い吸収（薄緑色）はニッケルの 3d π 軌道がシアノ基の π^* 軌道と混成した軌道への励起であることが世界で初めてわかりました。分子を変えていくと遷移金属の 3d 軌道と配位子の σ^* 、 π^* 軌道との混成の程度が変わりますので、ピーク強度も変化します。3d 軌道成分が多くなればなるほどピーク強度は強くなります。つまり、遷移金属あたり 5 個ある 3d 軌道のそれぞれが配位結合にどの程度、関与しているかが、スペクトルの偏光依存性と強度解析から簡単に知ることができるわけです。この新しい分光法によって物的に興味深い遷移金属を含む分子物質系の特性が明らかになってきています。

以上を一例として、内殻電子が局在していることを利用した新しいタイプの物性研究や光化学研究を実験、理論両面から広範囲にわたり研究しているところに本研究グループの特徴があり、世界的にもユニークな存在になっています。国内には研究者が少ない分野なので、世界的なレベルで研究を展開しています。

参考文献

- 1) 足立、小杉、「高分解軟X線放射光を用いた分子の振動分光」、日本物理学会誌 **52**, 96 (1997).
- 2) 高田、小杉、「内殻領域の共鳴光電子スペクトルの統一の見方——酸化ニッケル、金属ニッケル、ニッケル錯体の Ni 2p 吸収端での比較」、日本放射光学会誌 **12**, 117 (1999).

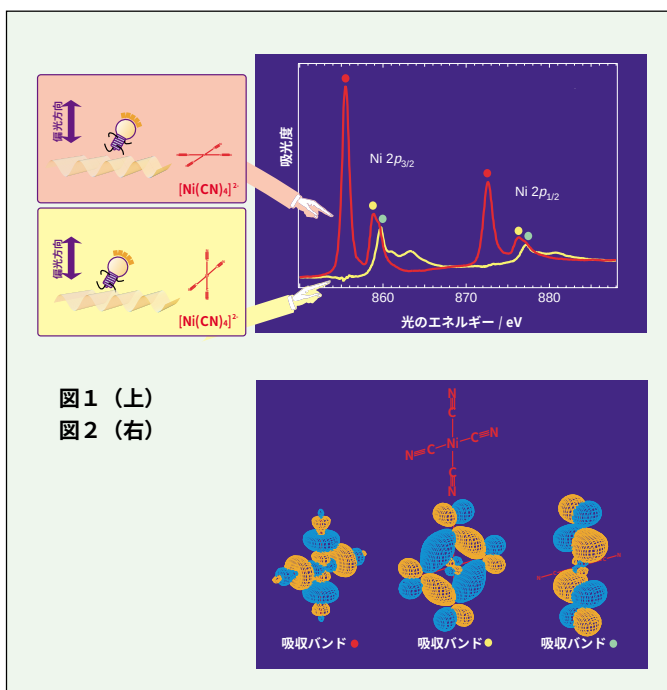


図1（上）
図2（右）