

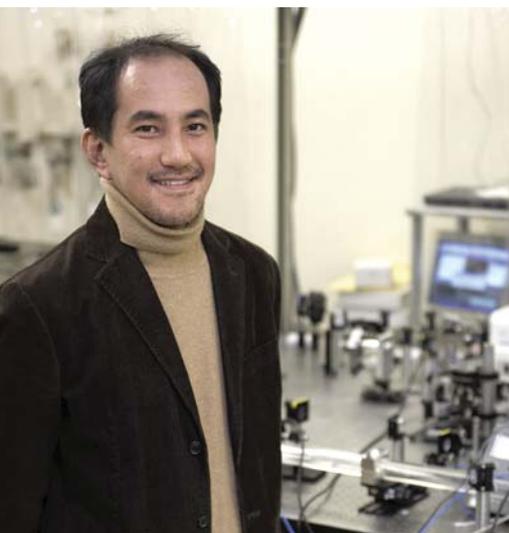
菱川明栄准教授に平成19年度分子科学奨励森野基金

高木康多助教に第2回日本物理学会若手奨励賞

彦坂泰正助教に第2回日本物理学会若手奨励賞

香月浩之助教に平成19年度光科学技術研究振興財団研究表彰

石村和也技術職員に第3回APCTCCポスター賞



フェムト秒のパルスレーザー光を集めて得られる強いレーザー場に置かれた分子は、通常の光との相互作用を扱う際の近似である摂動法では解釈できない特異なふるまいを示す。これは強レーザー場が、分子内の原子核と電子の間に働く相互作用と拮抗するほどの大きな電場成分を持つことに由来する。このため、強レーザー場における分子の動的過程を理解するには「光をまとった状態（光ドレスト状態）」として分子とレーザー場と一体的に扱うと見通しが良い。これは分子の基底状態と複数の励起状態の混合した状態と捉えることもできるが、その混ざり方は電磁波であるレーザーの振動（波動）電場の大きさによって刻一刻と変化しており、それに応じて核間ポテンシャル形状の変化と分子の動的過程が引き起こされることになる。

通常の光と異なり、強レーザー場では、

菱川明栄准教授に

「クーロン爆発イメージングによる強レーザー場中分子過程」で平成19年度分子科学奨励森野基金の研究助成が授与

一度に多数の電子が放出され、そのエネルギーも必ずしも飛び飛びではない。また、突然、電子を多数失った分子は正電荷を多数持った多価イオンに変化し、イオンは電荷間の反発的なクーロン力によって直ちにばらばらにちぎれてしまう。このような分子イオンの断片化現象は古くから内殻励起分子の脱励起過程などでも見つかっており、一般的に分子のクーロン爆発と呼ばれている。

菱川准教授は、クーロン爆発で生成した分子イオンの断片（フラグメントイオン）の持つ運動量を測定すれば、それまでよくわかっていなかったドレスト状態分子の構造変化についての情報を得られることに着目して、これまで強レーザー場中における分子の動的過程についての研究を進めてきた。特にフラグメントイオン毎にそれぞれの運動量（放出方向も含む）を観測するための手法として質量選別運動量(MRMI)画像観測法やコインシデンス運動量画像(CMI)観測法の開発をおこない、これらの新しい手法を駆使して、アセトニトリル分子では分子内水素移動が100フェムト秒程度の極めて短い時間内でおこること、二硫化炭素分子の爆発過程には同時に二つの炭素-イオウ結合が切れる場合と段階的に切れる場合があること、2価の二硫化炭素イオ

ンだけ取り出して見ると二つの結合が反対称的に伸び縮み（振動）する場合以外にエネルギー的に不利な対称的な伸び縮みが起きていることなど、強レーザー場によって新しい化学反応の経路が開かれることなどを明らかにしている。

さらに最近では、10フェムト秒領域の極短パルス高強度レーザーを用いた化学反応の制御に取り組み、レーザーの偏光方向に対する分子の向きによって動的過程が変化する様子を観測し、分子座標系で「電子をどの方向に揺さぶるか」によって分子の動的過程が制御できることを硫化水素分子に対して初めて示すことに成功した。

菱川グループは少人数ながら「クーロン爆発イメージングによる強レーザー場中分子過程」の全貌を捕まえるための高度な方法論の開発と観測に日々取り組んでいる。今回の助成は菱川准教授のこのようなチャレンジが認められたものであるが、国際会議の招待講演の依頼があったり、スウェーデンの研究者が技術を学ぶために次々と人を送り込んできたりしていることから、国際的にも認められていることがわかる。今後、光分子科学研究領域の柱のひとつとして強レーザー場の分子科学の推進が期待される。

(小杉信博 記)

高木康多助教に第2回日本物理学会若手奨励賞

物質分子科学研究領域・電子構造研究部門・助教の高木康多が平成19年度（第2回）日本物理学会若手奨励賞（領域9）を受賞した。受賞題目「走査トンネル顕微鏡を用いたキャリア注入によるGe(001)表面構造変化の研究」である。高木氏は平成19年9月1日に同部門横山Gに着任したばかりであり、今回の受賞はむろん分子研での研究ではなく、東京大学物性研究所（指導教員：小森文雄教授）における大学院博士課程在学中の成果である。むしろ彼が採用されることになった助教人事選考において、ひときわ際立った研究成果であったといえる。

今回の受賞研究概要は以下のようである。超高真空中で清浄化されたゲルマニウム単結晶の(001)表面は表面再構成が起き、美しい二量体の列（ダイマー列）が形成される。ここで、（準）安定な表面再構成構造には $c(4 \times 2)$ と $p(2 \times 2)$ と呼ばれる2種類の相があり、両者の安定性はエネルギー的にほとんど差がないことが知られている。彼は、

走査トンネル顕微鏡（STM）の探針に印加する電圧を制御することによって、このふたつの構造を双方向に任意に変化させることが可能であることを見出した。また、この表面構造変化のダイナミクスを詳細に調べることによって、この転移が、STM探針の作る局所電場に起因することに加えて、探針から注入されるキャリア（電子またはホール）と表面原子との非弾性散乱にも由来することを明らかにした。Ge表面に関するこの研究は、同様の表面再構成構造を持つSi(001)表面の研究の蓄積を基礎として進められ、また同時期に行われていたSi(001)表面の研究にも影響を与えた。これらの相補的な研究・議論はIV族半導体の(001)面という半導体表面研究における代表的な系の表面物性の理解に大きな進展をもたらした。またSTM探針からのキャリア注入による表面構造への影響を詳細に研究した例はあまりなく、固体表面の電子状態と表面構造へのSTM測定の影響



を理解する上で本研究の結果は今後の重要な指針となると考えられる。

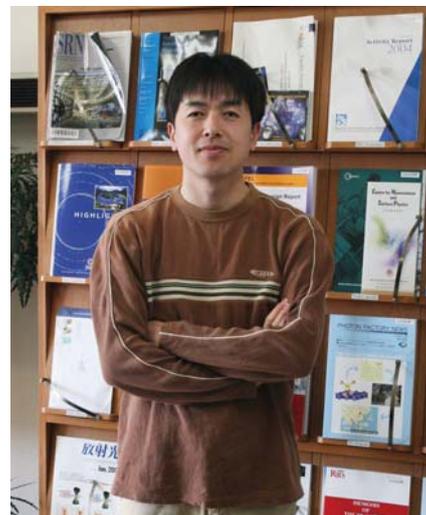
高木氏の自己紹介は本号で記載があるが、彼はこの一連の研究で博士の学位を取得した。その後、理研播磨（Spring-8）に博士研究員として勤務し、放射光X線誘起による元素選択的STMの開発を目指し、そこでも成果を挙げている。現在は横山Gで表面薄膜磁性の研究に従事し始めたところであるが、特に彼の持つSTMや放射光利用などの高度な表面技術を駆使することで、新たに参入してくれた表面磁性分野において、ますます研究が発展することを期待している。

（横山利彦 記）

彦坂泰正助教が「多重同時計測による原子分子の光多重電離過程の研究」で2008年日本物理学会若手奨励賞を受賞

光の中でも波長の短い（周波数の高い）紫外線やX線を物質に照射すると、原子核からのクーロン力によって捕らわれていた電子が物質から飛び出してくる。光電効果と呼ばれるこの現象の本質は、アインシュタインの光量子仮説によって説明される。すなわち、光はその周波数に応じたエネルギーを持つ粒子（光子）として振る舞い、物質中の電子はこのエネルギーを受け取ることによって運動エネルギーを獲得し、

原子核の束縛に打ち勝って物質から放出される。この光電効果の物理を説明する際には、一つの光子は一つの電子のみに作用してその状態を変えるという描像が前提となっている。しかしながら、物質としても最も単純な系である原子や分子の光電効果について詳細に調べてみると、この描像では説明できない現象が普遍的に見られることが分かってきた。最も顕著な例は、一つの光子の吸収によって原子や分子内の



複数の電子が同時に放出される現象であり、光多重電離と呼ばれている。光多重電離は、原子や分子内の電子がそれぞれ全く独立に運動している訳ではないことを直接的に示しており、このことは逆に、原子や分子の光多重電離過程の観測を通して、物質中の電子間の相互作用にアプローチできることを意味している。そのため、原子や分子の光多重電離過程は、原子分子科学において最もホットなトピックの一つとして注目されている。

光多重電離の詳細を理解するためには、放出される全ての電子の運動エネルギーの相関を観測することが極めて有効である。しかしながら、従来の手法では高効率で運動エネルギー相関を得ることはできず、光多重電離過程について断片的な情報しか得られていなかった。これに対し彦坂助教らは、運動エネルギー相関を高効率かつ精度良く測定出来る実験技術を導入し、原子や分子の光多重電離の研究において次々と特筆すべき研究成果を生み出している。今回の受賞は、以下に示した二例を含む原子分子の光多重電離に関する一連の研究に対するものである。

(1) 原子や分子の内殻電子を、電離しきい値より遙かに高い光子エネルギー

で電離すると、それに追従して外殻軌道からも電子が放出されることがある。このような光二重電離過程は、内殻電子が突然放出されるショックで外殻電子が飛び出すというモデル（瞬間近似）で説明されている。彦坂助教らは、この過程において放出された二つの電子の運動エネルギー相関を観測することに初めて成功し、その光子エネルギー依存性を測定した。その結果、光子エネルギーが十分に高い場合、光二重電離過程は瞬間近似で十分に説明できるが、光子エネルギーが低い領域では、このモデルでは説明できない振る舞いを示すことを突き止めた。この観測は、電子のスピンも考慮した新しい光二重電離ダイナミクス理論の構築の必要性を再認識させる実験結果として注目を集めている。

(2) 原子や分子を構成する電子の挙動は、ミクロな世界の力学である量子力学によって理解され、電子の状態はその量子状態を指定する波動関数によって記述される。一電子軌道近似に基づいて得られた波動関数は、原子軌道や分子軌道と呼ばれており、原子や分子の電子構造を理解する上で最も重用される基本的な概念である。しかし、原子番号が54付近の原子については、

この近似に基づいて光電子スペクトルを解釈できないことが古くから知られている。彦坂助教らは、キセノン原子の4p電離しきい値を超える光子エネルギーでの実験において、4d内殻軌道から同時に2つの電子が放出される二重電離が高効率に起こることを見出した。これは、4p電離強度が仮想的な電子遷移過程を介することにより、4d二重電離強度へ譲渡されたとして理解される。この研究は、光二重電離の観測によって、一電子軌道近似の破綻のメカニズムを顕在化し得ることを示した初めての实验である。

彦坂助教らの研究は、光多重電離のメカニズムとダイナミクス、更には関与する電子状態の分光情報等、関連するあらゆる側面についての理解を飛躍的に伸展させており、光多重電離過程の研究に新展開をもたらしている。彦坂助教は、これらの光多重電離に関する研究とともに、光イオン化動力学や分子動力学の研究などにおいても卓越した研究成果を挙げている。彦坂助教の原子分子科学の研究における更なる活躍を期待している。

(繁政英治 記)

香月浩之助教に平成19年度光科学技術研究振興財団研究表彰

光分子科学研究領域の香月浩之助教が、「分子振動波束干渉の制御及び高分解能時空間イメージング」に関する業績で、平成19年度の光科学技術研究振興財団研究表彰を受賞された。本表彰は、光科学に関する基礎的な研究又は光科学技術の向上に役立つ研究で独創的な成果を挙げた35歳以下の若手研究

者を対象としており、過去2年以内に発表された研究論文、講演、報告等の内容により対象者を選定する。

香月氏は、京都大学大学院在学中に、周波数領域の高分解能分光を用いて固体バラ水素という特殊な系における分子の量子ダイナミクスを研究し、固体における量子コヒーレンスを考察す



る上で重要な知見を提供した。その後、今回の表彰の対象である時間領域の超高速分光実験へと転向することになったが、これは、自らが実験で目の当たりにした分子の量子性をさらに極めたい、そして制御してみたいという自然な欲求に導かれてのことであったと推測される。

分子研に赴任してからは、それまで受動的な制御しかできなかったアト秒位相変調器（二つのフェムト秒レーザーパルス間の相対位相をアト秒レベルの分解能で調節する高安定光干渉計）に

能動的なフィードバック制御機能を付加し、これを主にヨウ素分子の振動波束に適用した。そして、波束干渉を過去にない精度で制御し、波束内の振動固有状態の位相振幅情報を読み出すことに成功した。さらに二つの波束がぶつかってすり抜けるときに生じる過渡的なさざ波を、フェムト秒ピコメートル領域の時空間分解能で可視化した。これらの研究結果は、過去2年のうちに、Science誌, Physical Review Letters誌, Physical Review A誌といった一流国際ジャーナルに発表され学術的に

大きなインパクトを与えただけでなく、新聞各紙にも取り上げられ社会的にも大きな反響を集めた。

香月氏は今後、これまで行ってきた量子固体の研究とコヒーレント制御の技術を融合させ、凝縮系におけるコヒーレント制御の研究を行っていく予定であり、これによって光科学の新しい地平が切り開かれるものと大いに期待される。今回の表彰が、その第一歩を記す道標となることを祈ってやまない。心よりお祝い申し上げる。

(大森賢治 記)

石村和也技術職員に第3回APCTCCポスター賞

理論・計算分子科学研究領域の石村和也技術職員が2007年9月に中国の北京で開催されたアジア・太平洋地域の理論・計算化学分野の代表的な国際学会である第3回Asian Pacific Conference on Theoretical & Computational Chemistry (APCTCC)において「New Parallel Algorithm for MP2 Energy and Gradient Calculations and its Applications」というタイトルでポスター賞を受賞した。

現在、大きな分子の電子状態計算には密度汎関数法が最も多く使われているが、通常用いられている汎関数では、ホストゲスト相互作用、分子認識、自己集合等で重要な役割をする非共有結合相互作用をうまく取り扱えないという致命的な欠点がある。これとは対照的に、簡便

に電子相関を取り込める分子軌道法の代表であるMP2(second-order Møller-Plesset perturbation)法は非共有結合相互作用を取り扱えるが、分子が巨大になると計算時間が急激に増大してしまうという問題がある。このために、計算負荷を軽減するための近似を導入する幾つかの方法がこれまでに提案されてきているが、いずれも計算精度に任意性があるばかりでなく、どのような分子にも適用できるとは限らない。石村技術職員は、便宜的な近似法をいっさい用いることなく、MP2法のエネルギーとエネルギー微分計算を高速に実行できる新しい並列計算アルゴリズムを開発してプログラム化した。このプログラムにより、今まで扱えなかったナノサイズ分子の精度の高いエネルギー計算や構造最適化計算を実



行できるようになったことが評価された。今回の受賞を心からお祝いするとともに、今後のさらなる進展を期待したい。

(永瀬 茂 記)