

総研大生受賞者紹介

北野 健太（物理科学研究科構造分子科学専攻） 平成21年度分子科学会優秀講演賞を受賞

総合研究大学院大学構造分子科学専攻博士課程の北野健太君が、2009年9月21～24日に名古屋大学で開催された第3回分子科学討論会において、優秀講演賞を受賞した。本討論会は皆様も良くご存知の通り、2000名にのぼる研究者が参加する分子科学分野で国内最大の学会である。その前身である分子科学総合討論会からの伝統を継承して、分子および分子集合体の構造・反応・物性について実験ならびに理論の面から深く掘り下げた議論が活発に繰り広げられる場となっている。2006年の分子科学会設立によって現在の名称に変更されたのと合わせて、優秀な口頭発表を行った若手研究者を表彰する「優秀講演賞」を設立し、本年度は60件以上の応募の中から9件が選出された。

今回の受賞対象となった北野君の発表は、「直線偏光極短パルスによる回転角運動量オリエンテーション」と題するも

のであり、分子回転の角運動量が実験室系で特定の方向にそろった状態を作り出す新しい試みに関して報告したものである。このような角運動量の整列状態（オリエンテーション）は、アンサンブル平均においても分子の異方性の情報を与え、原子・分子物理学ならびに化学反応力学において高い重要性を有する。従来の研究では、オリエンテーションの実現には円偏光のみが利用されてきた。北野君は、直線偏光の極短パルス対を用いても、パルス間隔と相対偏光角を適切に調節すれば回転角運動量のオリエンテーションが実現できることを理論的に導き、さらに、極低温に冷却された気体ベンゼン分子を試料として実験を行い、この新手法の有効性を実証した。この方法論は、分子の回転周期の時間内でオリエンテーションが実現できること、さらに、右回り・左回りの古典的剛体の回転に対応し



た量子波束を生成するものであることなど、数々の新しい特色があり、今後の幅広い応用が期待される。

北野君は、本研究成果をまとめて本年1月に博士論文として提出しており、また、内容の一部は既にPhysical Review Letters 誌に発表済みである。今回の受賞を大きな励みとして、今後、新天地において分子科学の発展におおいに貢献してくれることを期待している。

（光分子科学研究領域
大島 康裕・主任指導教員）

水上 渉（物理科学研究科機能分子科学専攻） 第3回分子科学討論会においてポスター賞を受賞

総合大学院大学機能分子科学専攻博士課程の水上渉君は、2009年9月21～24日に名古屋大学で開催された第3回分子科学討論会において優秀ポスター賞を受賞した。受賞対象となった水上君のポスター発表は、「密度行列繰り込み群によるポリカルベンが多参照電子状態とそのスピン配列」と題する研究発表であり、彼が総研大博士課程に進学後に学位取得のために精力的に取り組んでいる研究の一部である。今回水上君が、研究対象とした分子、ポリカルベンは、有機分子でありながら磁気的な性質をもつ有機磁性体の基本モデルとなる分子である。有機磁性体が単分子磁石としての分子デバイスとして機能するには、より大きな磁気モーメントを持ち、かつ寿命が長く、異

なるスピン状態間のエネルギー差が大きく高温でもスピン配列を崩さないものが望まれる。水上君は、ポリカルベンの磁気的な性質を詳細に解析するために、分子の電子状態に関して新しい理論手法を用いて高精度に大規模に理論計算することで、そのスピン状態の特異的な性質を初めて明らかにすることができた。水上君の成果は、カルベンの数に対する、高スピン状態と低スピン状態のエネルギー差が、カルベン数の増加にしたがい縮まるという発見であり、この性質は、従来型の古典スピン論に基づく理論解析（密度汎関数法など）の結果を覆すもので大変興味深い。この理論解析では、密度行列繰り込み群法に基づく新しい方法論（多参照法）を用いて、従来扱えなかつ



た多数の電子配置を取り扱うことで複雑な電子スピン状態を精密に一般的に取り扱うことで初めて解析可能となった。水上君は、スピン状態やその多体性に関して詳しい波動関数解析を行い、彼の発見の基本原則を説明することができた。今回の発表内容は、国際的学術雑誌に投稿中である。今回の受賞を糧に、今後の水上君のさらなる活躍を期待している。

（理論・計算分子科学研究領域
柳井 毅・主任指導教員）