

3-7 極端紫外光科学研究系

基礎光化学研究部門

小 杉 信 博 (教授)

A-1) 専門領域：軟X線光物性，光化学

A-2) 研究課題

- a) 軟X線分光による内殻電子の光物性研究
- b) 内殻励起における多電子効果の研究
- c) 内殻励起分子の振動分光と解離ダイナミクスの研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 軟X線分光による内殻電子の光物性研究:これまで我々は3d遷移金属の2p内殻などが励起できるエネルギー領域の軟X線を励起源とした偏光軟X線吸収、共鳴光電子放出、共鳴軟X線発光の測定によって3d遷移金属錯体(配位子が分子イオンの系)の電子状態の研究を展開してきた。特に、分子系特有の共有結合に由来する新しい内殻励起、イオン化、脱励起の現象が現れることを実験的に明らかにしている。また、それらの現象は低次元系物質の物性を評価する方法として強力であることを示した。
- b) 内殻励起における多電子効果の研究:内殻イオン化しきい付近における脱励起過程には異常な挙動が観測されることが多く、二電子励起状態が介在しているのではないとの推測がなされたきたが、これまでその直接的証拠がなかった。内殻イオン化のシェイクアップサテライトと同様に、電子緩和効果が大きい内殻励起において二電子励起は一般的な現象のはずである。そこで、多電子励起を敏感に観測できる実験方法を開発し、さらに理論的アプローチも確立することで、二電子励起状態が内殻電子のイオン化しきい領域に一般的に存在しうることを示した。脱励起過程を理解する上で多電子効果は本質的である。
- c) 内殻励起分子の振動分光と解離ダイナミクスの研究:これまで我々はRydberg-原子価混合による振動準位異常 脱励起過程における Renner-Teller 効果や Jahn-Teller 効果の影響、振電相互作用により初めて許容になる振電状態、大きな交換相互作用(LS)によってスピン軌道相互作用の分裂が観測できない励起状態、イオン放出過程(解離)と電子放出過程の競争などを発見してきた。今回、さらに偏光方向、遷移双極子の方向、解離イオンの方向を実験的、理論的に押さえることで、内殻ホールの局在化の効果が解離ダイナミクスを考える上で本質的であることを明らかにした。

B-1) 学術論文

M. NEEB, A. KIVIMÄKI, B. KEMPGENS, H. M. KÖPPE, K. MAIER, A. M. BRADSHAW and N. KOSUGI, "Partial electron yield spectrum of N₂: doubly excited states at the K-shell threshold," *Chem. Phys. Lett.* **320**, 217 (2000).

A. NAVES de BRITO, S. SUNDIN, R. R. MARINHO, G. FRAGUAS, I. HJELTE, T. GEJO, N. KOSUGI, S. SORENSEN and O. BJÖRNEHOLM, "Memories of excited femtoseconds: effects of core-hole localization after Auger decay in the fragmentation of ozone," *Chem. Phys. Lett.* **328**, 177 (2000).

N. KOSUGI and T. ISHIDA, “Molecular field and spin-orbit splittings in the 2p ionization of second-row elements: A Breit-Pauli approximation applied to OCS, SO₂, and PF₃,” *Chem. Phys. Lett.* **329**, 138 (2000).

T. HATSUI, K. OKAMOTO, T. YOKOYAMA, Y. KITAJIMA, H. TANAKA, E. OJIMA, A. KOBAYASHI and T. OHTA, “Sulfur K-edge X-ray absorption spectra for BETS and BEDT-TTF charge transfer salts: a novel probe for the determination of hole concentration,” *Chem. Phys. Lett.* **330**, 309 (2000).

B-4) 招待講演

N. KOSUGI, “Rydberg-valence mixing in inner-shell excitation in some simple molecules,” Sonderforschungsbereich Metall-Substrat-Wechselwirkungen, Ruhr-Universität Bochum (Germany), October 2000.

B-5) 受賞, 表彰

小杉信博, 分子科学研究奨励森野基金研究助成(1987).

B-6) 学会および社会的活動

学協会役員, 委員

日本放射光学会庶務幹事(1994).

日本放射光学会評議員(1994-95, 98-99).

日本分光学会東海支部幹事(1993-97).

学会の組織委員

VUV-12真空紫外光物理国際会議プログラム委員(1998).

ICISS-8電子分光及び電子構造国際会議国際プログラム委員(2000).

SRIシンクロトロン放射装置技術国際会議国際諮問委員(1994, 97, 2000).

IWP光イオン化国際ワークショップ国際プログラム委員(1997).

IWP光イオン化国際ワークショップ国際諮問委員(2000).

内殻励起における脱励起過程国際会議プログラム委員(2000-01).

XAFS-VII X線吸収微細構造国際会議プログラム委員及び実行委員(1992).

XAFS-XI X線吸収微細構造国際会議組織委員及びプログラム委員(2000).

SRS-2シンクロトロン放射と材料科学国際会議組織委員(1998).

原子分子の光イオン化に関する王子国際セミナープログラム委員(1995).

アジア交流放射光国際フォーラム実行委員(1994, 95).

アジア交流放射光国際フォーラム企画運営委員(2001).

XAFS討論会プログラム委員(1998, 2000, 01).

ISSP-6放射光分光光学国際シンポジウムプログラム委員(1997).

文部省, 学振等の委員会委員

新技術開発事業団創造科学技術推進事業研究推進委員(1985-90).

東京大学物性研究所軌道放射物性研究施設運営委員会委員(1994-).

東京大学物性研究所高輝度光源計画推進委員会委員(1995-).

高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所放射光共同利用実験審査委員(1997-2001).

広島大学放射光科学研究センター顧問(1996-).

日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員(1997-99).

C) 研究活動の課題と展望

内殻電子が絡む研究は放射光の利用でますます広がりを見せているが、内殻励起特有の新しい現象の発見・理解やそれらの研究のための実験的・理論的方法論の開拓という観点から見直すとまだ多くの課題が残されている。我々は分子系(気体と固体)に対して内殻励起とその脱励起過程の研究を続けている。これまで測定装置上の制約を解決することで、幸いにしていくつか新しい現象を見つけることができた。昨年度から今年度にかけて本研究グループのメンバーは総入れ替えとなったため、一時的に弱体化したが、現在、研究内容も新メンバーとともに抜本的に見直して、第二フェーズを構築しようとしているところである。

基底状態からのイオン化・励起過程ではフランクコンドンの遷移が起きるため、ポテンシャル曲面のごく一部しか情報を得ることができない。第二フェーズでは、これまで研究の主ターゲットであった深い内殻励起状態を中間状態として位置付け、浅い内殻や価電子のイオン化・励起状態のうち基底状態からの直接過程では見ることのできない状態を実験的に明らかにする。また、このような高い励起状態を経る方法以外に、レーザなど他の励起源を組み合わせることで低い状態から順に研究していくアプローチも開発する。さらに、外場によって摂動を与えることで分子に電子状態変化を起こす方法を導入し、内殻励起から分子性固体における分子間相互作用を明らかにする方法を開発する。

現在、測定装置の制約についてはほとんどなくなっているが、研究の最後の詰めをUVSORで行うには光源が非力である。現状としては国内外の高輝度光源施設を利用しなければならない。そのため、国際共同研究を各メンバーが並行して進めている。