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) 内殻励起におけるスピン軌道相互作用と交換相互作用の研究
- c) 内殻励起を利用した禁制状態の研究

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:新しい実験手法として共鳴軟X線発光の偏光特性実験をスウェーデンのMAX-2施設で行っている。分子系特有の現象として他の系では知られていないような著しい偏光依存を見いだした(投稿準備中)。また、UVSOR施設における偏光軟X線吸収、共鳴光電子放出の実験では、遷移金属を含んだ系から希土類を含んだ系 RB_2C_2 (R =希土類)に展開して研究を進めている。内殻励起子やRydberg励起状態に対する環境効果の研究も進めている。
- b) 内殻励起におけるスピン軌道相互作用と交換相互作用の研究:イオウやリンの $2p$ 電子イオン化では1 eV前後の分裂幅で $2p_{3/2}$ と $2p_{1/2}$ ピークにスピン軌道分裂する。さらに $2p_{3/2}$ イオン状態に含まれる2状態が化学結合の異方性(分子場)でわずかに分裂している。一方、 $2p$ 電子の励起では励起電子と $2p$ 電子の間の交換相互作用も含めて考える必要があり、その電子構造は非常に複雑である。我々は独自の内殻励起分子の振動分光と解離ダイナミクスの研究手法を応用し、150 ~ 200 eVもの高い $2p$ 励起状態の電子スピン状態を40 meV前後の高分解能で解明するとともに、交換相互作用が励起対称性に大きく依存することをはじめてあきらかにした(投稿準備中)。
- c) 内殻励起を利用した禁制状態の研究:イオウやリンの $2p$ 励起状態ではスピン軌道相互作用で1重項に3重項が混合する。このような内殻励起を中間状態に選んだ場合、共鳴発光過程では双極子禁制なgerade対称の1重項価電子励起状態が観測できるとともに、スピン禁制な3重項価電子励起状態も観測できる。さらに、共鳴イオン化過程では通常の光電子分光法で観測される2重項価電子イオン化状態に加えて、これまで全く知られていなかった4重項価電子イオン化状態が観測できる。このように内殻励起を利用することで、基底状態からはdarkな電子励起状態を次々発見しているところである(投稿準備中)。

B-1) 学術論文

C. MIRON, M. SIMON, P. MORIN, S. NANBU, N. KOSUGI, S. L. SORESENSEN, A. NAVES DE BRITO, M. N. PIANCASTELLI, O. BJÖRNEHOLM, R. FEIFEL, M. BASSLER and S. SVENSSON, "Nuclear motion driven by the Renner-Teller effect as observed in the resonant Auger decay to the $X^2\Pi$ electronic ground state of N_2O^+ ," *J. Chem. Phys.* **115**, 864 (2001).

Y. TAKATA, T. HATSUI, N. KOSUGI, A. AGUI, M. MAGNUSON, C. SATHE, J. -E. RUBENSSON and J. NORDGREN, “Valence excitations observed in resonant soft X-ray emission spectra of $K_2Ni(CN)_4 \cdot H_2O$ at the Ni 2p edge,” *J. Electron Spectrosc.* **114**, 909 (2001).

Y. TAKATA, E. SHIGEMASA and N. KOSUGI, “Mg and Al K-edge XAFS measurements with a KTP crystal monochromator,” *J. Synchrotron Radiat.* **8**, 351 (2001).

Y. TAKATA, T. IWAZUMI and N. KOSUGI, “Resonant x-ray emission spectra of $K_2Ni(CN)_4 \cdot H_2O$ at the Ni K-edge,” *J. Synchrotron Radiat.* **8**, 404 (2001).

B-4) 招待講演

N. KOSUGI, “Molecular Inner-shell Spectroscopy. Symmetry and Dynamics of Inner-shell Excited States in Free Molecules and Molecular Solids,” Workshop on Advanced Spectroscopy of Organic Materials for Electronic Applications, Glumslöv (Sweden), June 2001.

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 (1994-1995, 1998-1999).

日本放射光学会将来計画検討特別委員会 (2001-).

日本分光学会東海支部幹事 (1993-1997).

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).

ICESS-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, 1997, 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及び国際諮問委員 (1997, 2000, 2001-).

COREDEC 内殻励起における脱励起過程国際会議プログラム委員 (2001).

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).

SRSM-2シンクロトロン放射と材料科学国際会議組織委員 (1998).

ICFA-24 次世代光源に関する先導的ビームダイナミクス国際ワークショップ組織委員(2001-).

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及び企画運営委員 (1994, 1995, 2001).

XAFS討論会プログラム委員 (1998, 2000, 2001).

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).

文部科学省、学振等の委員会委員

- 高エネルギー加速器研究機構運営協議員会委員(2001-).
- 高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所運営協議員会委員(2001-).
- 高エネルギー加速器研究機構加速器・共通研究施設協議会委員(2001-).
- 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(1997-2001).
- 新技術開発事業団創造科学技術推進事業研究推進委員(1985-1990).
- 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-).
- 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(1997-1999).

C) 研究活動の課題と展望

内殻電子が絡む研究は、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、クラスター、希ガスマトリックス、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。最近、メンバーが一新され、研究テーマとして第二フェーズに入った。第一フェーズでは内殻励起状態そのものをターゲットにして、多くの新しい知見を得てきた。基底状態からの直接イオン化・励起過程では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。そのため、第二フェーズでは内殻励起状態を中間状態として位置付けて、基底状態からの直接過程では見ることのできない価電子領域のイオン化・励起状態を実験的に明らかにしつつある。

ただし、約20年前に建設されたUVSOR施設の現在の光源は軟X線領域で二次過程の観測を行うには非力である。最近まで国際的に共同研究を行うことで凌いできたが、いろいろな制約があり、研究の進み具合も遅くなる。幸い、平成14年度はUVSOR光源加速器の高度化に加えて、施設スタッフとの共同チームによるアンジュレータ、分光器、測定装置のマッチングを最適にしたビームラインの高度化が可能となったため、一二年のうちに高度化された光源の性能を最大限に生かした放射光分子科学の新しい展開が図れるものと大いに期待している。