

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) 内殻励起を利用した禁制価電子状態の研究
- c) 内殻励起の理論的アプローチの開発

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: 孤立分子、分子クラスター、希ガスマトリックスで分離した分子、低温で凝縮させた分子、分子イオンを含む分子結晶や高分子鎖等の電子構造を比較するために種々の実験を行っている。バルクの性質は孤立系から外挿して考えることができないことはよく知られているが、内殻分光では局所的な電子構造が切り出せるので、高分解能な実験によって特定原子サイト周辺の分子間相互作用の詳細が明らかにできる。最近の実験では、分子の電子構造の固体内から固体表面上への変化、固体の熱膨張による分子間相互作用の変化、低いRydberg状態と高いRydberg状態の隣接分子から受ける摂動の変化等、明らかにできた。実験データから分極相互作用や非局在(電荷移動)相互作用に加えて、交換相互作用の微妙な差が観測されていることがわかった。
- b) 内殻励起を利用した禁制価電子状態の研究: 1重項基底状態分子から1光子で4重項イオン化状態を観測し、また、3重項励起状態を観測する方法を開発した。これは軟X線による内殻励起を利用することで可能となる特徴ある方法であり、前者は光電子放出を利用する。後者は軟X線非弾性散乱を利用する。どちらも2次光学過程を使う。現在、光電子分光と軟X線発光の装置の性能向上のための改造を行っている。特に軟X線発光を観測する装置は従来のものと全く違う新しい発想でデザインしたものであり、完成すれば、この分野に大きく貢献するものと国内外で期待されている。
- c) 内殻励起の理論的アプローチの開発: 以前、本グループで開発した軟X線吸収スペクトルの量子化学計算コードGSCF3は世界の放射光施設(MAX、ALS、BESSY、DESY、CLS、Aladdinなど)の利用者によって活用されているが、放射光源施設の性能向上によって内殻励起の実験研究が進んできており、Static Exchangeレベルの近似を越えて、より詳細な現象を記述できる理論と実用的な計算コードの開発が要求されるようになってきた。現在、内殻励起に応用できるスピン軌道計算、量子欠損理論、R行列法、緊密結合法などの理論的アプローチをCI法の枠内に取り込む計算コードを開発している。

B-1) 学術論文

T. GEJO, Y. TAKATA, T. HATSUI, M. NAGASONO, H. OJI, N. KOSUGI and E. SHIGEMASA, "Angle-Resolved Photoion Spectroscopy of NO₂ and SO₂," *Chem. Phys.* **289**, 15–29 (2003).

N. KOSUGI, "Exchange Interaction in Core Excitation of Diatomic Systems," *Chem. Phys.* **289**, 117–134 (2003).

T. HATSUI, T. YAMAMOTO, H. TAJIMA and N. KOSUGI, "Cu L_{2,3}-Edge X-Ray Absorption Spectra of (2,5-Dimethyl-*N,N'*-Dicyanoquinonediimine)₂Li_{1-x}Cu_x Alloys," *Chem. Phys.* **298**, 189–193 (2003).

B-4) 招待講演

N. KOSUGI, "Spin-orbit and exchange interactions in molecular inner-shell spectroscopy," 9th International Conference on Electronic Spectroscopy and Structure, Uppsala University (Sweden), July 2003.

N. KOSUGI, "Status at UVSOR and theory on molecular inner-shell spectroscopy," Kolloquium, BESSY (Germany), July 2003.

N. KOSUGI, "Spin-orbit and exchange interactions in molecular inner-shell spectroscopy," Physikalisch-Chemisches Kolloquium, Würtzburg University (Germany), July 2003.

N. KOSUGI, "Progress Report from IMS: The UVSOR-II Project and the GSCF4 Project for Molecular Inner-shell Calculations," SSG Lecture Series, Frontier of Radiation Science & Instrumentation #34, Advanced Light Source (U. S. A.), August 2003.

B-6) 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-7) 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, 2002-2003).

日本放射光学会将来計画検討特別委員会 (2001-2003).

日本分光学会東海支部幹事 (1993-1997).

日本化学会化学技術賞等選考委員会委員 (2001-2002).

学会の組織委員

SRIシンクロトン放射装置技術国際会議国際諮問委員 (1994, 1997, 2000, 2003).

VUV-12真空紫外光物理国際会議プログラム委員 (1998).

VUV-14真空紫外光物理国際会議プログラム委員 (2003-2004).

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).

ICESS-9電子分光及び電子構造国際会議国際諮問委員 (2003).

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, 2002).

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).

XAFS-XII X線吸収微細構造国際会議国際諮問委員 (2003).

SRSM-2シンクロト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 (2002).
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組織委員及び実行委員 (1994, 1995, 2001, 2003-2004).
日仏自由電子レーザーワークショップ副組織委員長 (2002).
XAFS 討論会プログラム委員 (1998, 2000, 2001, 2002, 2003).
ISSP-6 放射光分光学国際シンポジウムプログラム委員 (1997).

文部科学省、学術振興会等の役員等

大学共同利用機関法人準備委員会自然科学研究機構検討委員 (2003).
日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員 (1997-1999).
日本学術振興会国際科学協力事業委員会委員 (2002-2003).
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).
高エネルギー加速器研究機構運営協議員会委員 (2001-2003).
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 (2001-2003).
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 (2001-2003).
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).
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研究施設評価分科会委員 (2001-2002).
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-).
極紫外・軟X線放射光源計画検討会議光源仕様レビュー委員会委員 (2001-2002).
Spring-8ビームライン(BL01B1, BL27SU)評価委員会委員 (2002, 2003).
広島大学放射光科学研究センター顧問 (1996-1999).
学術会議放射光科学小委員会委員 (2003-).

B-8) 他大学での講義、客員

広島大学理学部物理科学科及び大学院理学研究科物理科学専攻, 物理科学集中講義, 「軟X線分子分光理論」, 2003年12月.

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、表面吸着) に対して直線偏光軟X線を励起源として内殻励起とその脱励起過程(解離イオン放出、電子放出、軟X線放出) の研究を続けている。第一フェーズ約7年間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ることができた。ただし、基底状態からの直接イオン化・励起過程では、内殻励起の動的過程のごく一部の知見しか得ることができなかった。そのため、4年前に一新されたメンバーとともに始めた第二フェーズでは、第一フェーズの研究対象だった内殻励起状態を中間状態に設定し、そこからの脱励起過程(電子放出、軟X線放出) を調べ、基底状態からの直接過程では見ることのできないイオン化・励起状態の詳細な研究を展開することにした。この種の研究では、二次光学過程が利用できるため、寿命の短い内殻励起状態の寿命幅に支配されない高分解能分光も可能となる。ただし、そのためには高分解能軟X線分光の最新技

術を導入することが不可欠である。幸い平成14年度にはUVSOR光源加速器の高度化計画が開始でき、また、平成15年度にはアンジュレータ、分光器、測定装置のマッチングを最適にした最新の軟X線ビームラインの建設を始め、平成15年度末には光電子分光システムを完成させる予定である。平成16年度はさらに軟X線発光分光システムを完成させ、高輝度軟X線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を図っていく。