

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) (1993 年 1 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：軟 X 線光化学、光物性

A-2) 研究課題：

- a) 軟 X 線内殻分光による分子間相互作用の研究
- 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 線内殻分光による分子間相互作用の研究：孤立分子，分子クラスター，マトリックス分離した分子，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。内殻分光では内殻励起した原子のサイトで局所的に射影した電子構造（電子構造そのものが局在しているわけではない）がわかる。最近の分光技術では 100 eV を越える軟 X 線領域でも 1 meV 精度の高分解能実験が可能になり，注目した原子サイトに影響を及ぼしている弱い相互作用を抜き出して明らかにできる。例えば，サイズに依存したいろいろなサイト（角，末端，面，クラスター内部など）での分子間相互作用を区別でき，それらの成分比からクラスターの大きさや構造が推定できる。分子イオンの電荷分布が電子状態により違うこともわかる。さらに，内殻励起軟 X 線吸収エネルギーのシフト量（赤方，青方の違いもある）から分子間の配向までわかる。
- b) 内殻励起を利用した禁制価電子状態の研究：これまで内殻電子の大きなスピン軌道相互作用を利用して 1 重項基底状態分子から 1 光子イオン化で 4 重項状態を観測する共鳴光電子分光法，および 1 重項基底状態分子から 1 光子励起で 3 重項励起状態を観測する軟 X 線共鳴ラマン分光法の開発を行ってきた。これら全く新しいスピン禁制光電子放出，スピン禁制価電子励起は軟 X 線を利用することで初めて可能となる 2 次光学過程に基づく。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，現在，分子振動が分離できるレベルであるエネルギー分解能 5000 を越えるところまで開発が進んでいる。
- c) 内殻励起の理論的アプローチの開発：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（スウェーデン MAX，米 ALS，独 BESSY，独 DESY，カナダ CLS，米 Aladdin，伊 Elettra など）の利用者によって簡単な分子から高分子などの大きな分子まで 10 年以上前から活用されてきた。ところが，ここ 10 年ほどの間に放射光源の性能向上によって内殻励起の実験研究が大きく進み，多電子励起，スピン軌道相互作用，円偏光度などの新たな観測データに対して理論支援が要求されるようになった。そのため，実験家のための使いやすい内殻励起計算用量子化学 CI コード GSCF4 を開発・整備している。

B-1) 学術論文

M. HIYAMA and N. KOSUGI, “Application of R Matrix/MQDT Method to Valence and Core Excitations in NO,” *J. Phys. B* **39**, 1797–1811 (2006).

I. L. BRADEANU, R. FLESCH, N. KOSUGI and E. RÜHL, “C 1s- π^* Excitation in Variable Size Benzene Clusters,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **8**, 1906–1913 (2006).

N. KOSUGI, “Orbital Picture in Molecular Inner-Shell Excited States of Rydberg-Valence Mixed Character,” *Brazilian J. Phys.* **35**, 957–960 (2005).

B-3) 総説、著書

加藤浩之、古川雅士、初井宇記、谷口正輝、川合知二、小杉信博、川合真紀, 「電子構造計測から探るDNA 分子内の電荷移動機構」*表面科学* **27**, 469–474 (2006).

B-4) 招待講演

N. KOSUGI, “Soft X-ray spectroscopy for molecular systems,” Taiwan-Japan Workshop on Scientific Opportunities with Taiwan Photon Source (NSRRC), Hsinchu (Taiwan), April 2006.

T. HATSUI, T. HORIGOME and N. KOSUGI, “Development and Performance of a Transmission-Grating Spectrometer for Soft X-ray Emission Studies,” The 9th International Conference on Synchrotron Radiation Instrumentation SRI2006, Daegu (Korea), May-June 2006.

N. KOSUGI, “Molecular Spectroscopy and Electronic Structure Theory,” Sokendai Asian Winter School on Frontiers in Molecular Science: Electronic and Structural Properties of Molecules and Nano Materials, Okazaki (Japan), November 2006.

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).

初井宇記, 日本放射光学会奨励賞 (2006).

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, 2006-2007).

日本放射光学会将来計画検討特別委員会 (2001-2003).

日本放射光学会先端のリング型光源計画特別委員会 (2005-2006).

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

VUV 真空紫外光物理国際会議国際諮問委員 (2004-2012).

ICESS 電子分光及び電子構造国際会議国際諮問委員 (2006-).

X線及び内殻過程の国際会議国際諮問委員 (2006-).

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, 2003, 2006).

VUV-12, VUV-14 真空紫外光物理国際会議プログラム委員 (1998, 2004).

ICISS-8,9,10 電子分光及び電子構造国際会議国際プログラム委員 (2000, 2003, 2006).

IWP 光イオン化国際ワークショップ国際諮問・プログラム委員 (1997, 2000, 2002, 2005).

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).

ICORS2006 第20回国際ラマン分光学会議プログラム委員 (2006).

IWSXR 軟X線ラマン分光及び関連現象に関する国際ワークショップ組織委員長 (2006).

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 (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, 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, 2000-2006).

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、学術振興会等の役員等

文部科学省科学技術・学術審議会専門委員(研究計画・評価分科会)(2005-2007).

文部科学省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).

大学共同利用機関法人自然科学研究機構教育研究評議員 (2004-2006).

高エネルギー加速器研究機構運営協議会委員 (2001-2003).

高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所運営協議会委員 (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).

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-).

日本学術会議放射光科学小委員会委員 (2003-2005).

広島大学放射光科学研究センター顧問 (1996-1999).

学会誌編集委員

Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena, Editorial Board member (2005-).

その他

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 (BL01B1, BL27SU, R&D) 評価委員会委員 (2002, 2003, 2004).

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).

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戦略WG委員 (2006-).

B-10)外部獲得資金

基盤研究(B),「内殻励起による分子性遷移金属化合物の光物性研究」小杉信博 (1999年-2001年).

基盤研究(B),「内殻励起を利用したスピン禁制イオン化・励起状態の研究」小杉信博 (2003年-2005年).

科学技術振興調整費(若手任期付研究員支援)「次世代軟X線発光分光器の開発」初井宇記 (2003年-2006年).

科学技術振興機構戦略創造事業さきがけ,「価電子をその場観測する顕微軟X線発光分光法の開発」初井宇記 (2006年-2009年).

C) 研究活動の課題と展望

今年度は方法論の開発に集中したため成果発表の機会があまりなかったが,その一方で,多くの国際会議の運営に関わり研究分野の国際交流に貢献した。我々はこれまで孤立分子系や弱い相互作用系に対して直線偏光軟X線を励起源として内殻励起過程とその脱励起過程の研究で貢献してきた。特に最近では脱励起過程の研究に重点をシフトし,基底状態からの直接過程では見ることでない価電子領域のイオン化・励起状態の研究を展開すべく実験装置と理論計算コードの開発に着手した。内殻励起状態を中間状態とするこの種の二次光学過程では,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が可能となるが,遷移確率の少ない過程でもあるので,高輝度で高分解能軟X線分光の最新技術を導入することが不可欠である。そこで,高度化されたUVSOR光源の性能をフルに引き出せるように,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線ビームラインを建設し,クラスター研究用光電子分光システムと高分解能軟X線発光分光システムの開発に取り組んだ。今後,これらの装置を利用して測定試料の状態に依らないその場観測可能な分光法としての方法論の確立と基礎過程の研究を展開していく。