

光分子科学第三研究部門

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) 電子分光法の精密化と分子間相互作用の研究
- b) 内殻共鳴分光による未知の電子状態の研究
- c) 内殻励起の理論アプローチの開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 電子分光法の精密化と分子間相互作用の研究：本グループでは内殻電子や価電子の励起・イオン化分光法の精密化によって固体中の不純物状態や二成分気相クラスターの研究を進めてきた。最近では、実験技術的に難しかった液相、固液界面、有機分子やグラフェン等の積層表面等にも研究対象を拡大している。例えば、溶液（二成分液体）の溶質の周りの局所的な配位構造や電子構造を解明することに成功している。電極反応や触媒反応のその場観測やこれまでバンド形成が見つからなかったような弱い分子間相互作用によるバンド分散の観測等にも成功している。
- b) 内殻共鳴分光による未知の価電子状態の研究：内殻励起・イオン化過程を使うことで通常の価電子分光では暗状態の観測を実現した。1光子イオン化で4重項状態、1光子励起で3重項励起状態を作り出した。内殻共鳴による高振動励起状態や異なる双極子対称性の状態への遷移を利用することによって、非断熱遷移に複雑に絡み合って理解することが難しい価電子の高励起状態領域を分離して解明することにも成功した。このような内殻励起の特徴を生かした国際共同を推進している。
- c) 内殻励起の理論アプローチの開発：本グループで独自開発している軟 X 線内殻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 , カナダ CLS , 仏 SOLEIL , 伊 ELETTRA など）の実験研究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いる。最近、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も理論解析が要求されるようになった。そのため、新たに内殻励起計算用量子化学 CI コード GSCF4 の開発・整備を進めている。

B-1) 学術論文

M. NAGASAKA, N. KOSUGI and E. RÜHL, “Structures of Small Mixed Krypton-Xenon Clusters,” *J. Chem. Phys.* **136**, 234312 (7 pages) (2012).

M. NAGASAKA, E. SERDAROGLU, R. FLESCHE, E. RÜHL and N. KOSUGI, “Structures of Mixed Argon-Nitrogen Clusters,” *J. Chem. Phys.* **137**, 214305 (7 pages) (2012).

R. FLESCHE, E. SERDAROGLU, F. BLOBNER, P. FEULNER, X. O. BRYKALOVA, A. A. PAVLYCHEV, N. KOSUGI and E. RÜHL, “Gas-to-Solid Shift of C 1s-Excited Benzene,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **14**, 9397–9402 (2012).

- V. KIMBERG, T. GEJO, M. OURA, T. TOKUSHIMA, Y. HORIKAWA, H. ARAI, S. SHIN and N. KOSUGI**, “Rydberg-Valence Mixing and Interchannel Coupling in Resonant Oxygen 1s Inelastic X-Ray Scattering of O₂,” *Phys. Rev. A* **85**, 032503 (5 pages) (2012).
- C. MIRON, C. NICOLAS, O. TRAVNIKOVA, P. MORIN, Y.-P. SUN, F. GEL’MUKHANOV, N. KOSUGI and V. KIMBERG**, “Imaging Molecular Potentials Using Ultrahigh-Resolution Resonant Photoemission,” *Nat. Phys.* **8**, 135–138 (2012).
- A. LINDBLAD, V. KIMBERG, J. SODERSTROM, C. NICOLAS, O. TRAVNIKOVA, N. KOSUGI, F. GEL’MUKHANOV and C. MIRON**, “Vibrational Scattering Anisotropy in O₂. Dynamics beyond the Born-Oppenheimer Approximation,” *New J. Phys.* **14**, 113018 (2012).
- K. ATA, N. ENGEL, K. M. LANGE, R. GOLNAK, M. GOTZ, M. SOLDATOV, J. E. RUBENSSON, N. KOSUGI and E. F. AZIZ**, “The Chemical Bond in Carbonyl and Sulfinyl Groups Studied by Soft X-Ray Spectroscopy and Ab Initio Calculations,” *ChemPhysChem* **13**, 3106–3111 (2012).
- T. MARUYAMA, S. SAKAKIBARA, S. NARITSUKA, W. NORIMATSU, M. KUSUNOKI, H. YAMANE and N. KOSUGI**, “Band Alignment of a Carbon Nanotube/N-Type 6H-SiC Heterojunction Formed by Surface Decomposition of SiC Using Photoelectron Spectroscopy,” *Appl. Phys. Lett.* **101**, 092106 (4 pages) (2012).
- J. W. CHIOU, S. C. RAY, S. I. PENG, C. H. CHUANG, B. Y. WANG, H. M. TSAI, C. W. PAO, H.-J. LN, Y. C. SHAO, Y. F. WANG, S. C. CHEN, W. F. PONG, Y. C. YEH, C. W. CHEN, L.-C. CHEN, K.-H. CHEN, M.-H. TSAI, A. KUMAR, A. GANGULY, P. PAKONSTANTINO, H. YAMANE, N. KOSUGI, T. REIGIER, L. LIU and T. K. SHAM**, “Nitrogen-Functionalized Graphene Nanoflakes (GNFs:N): Tunable Photoluminescence and Electronic Structures,” *J. Phys. Chem. C* **116**, 16251–16258 (2012).
- H. YAMANE and N. KOSUGI**, “Hybridized Electronic States in Potassium-Doped Picene Probed by Soft X-Ray Spectroscopies,” *AIP Adv.* **2**, 042114 (6 pages) (2012).

B-4) 招待講演

N. KOSUGI, “Core-Level Shifts of Free and Interacting Molecules,” 15th International Conference on X-ray Absorption Fine Structure XAFS15, Beijing (China), July 2012.

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).

山根宏之, 日本放射光学会奨励賞 (2009).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本放射光学会評議員 (1994–1995, 1998–1999, 2002–2003, 2006–2007, 2009–2010, 2012–2013), 庶務幹事 (1994), 特別委員会委員 (将来計画 2001–2003, 先端的リング型光源計画 2005–2006, 放射光光源計画 2009–2011).

日本化学会化学技術賞等選考委員会委員 (2001–2002).

学会の組織委員等

SRI シンクロトン放射装置技術国際会議国際諮問委員 (1994–2009).
VUV 真空紫外光物理国際会議国際諮問委員 (2004–2008).
X線物理及び内殻過程の国際会議国際諮問委員 (2006–2008).
VUVX 真空紫外光物理及びX線物理国際会議国際諮問委員 (2008–).
ICISS 電子分光及び電子構造国際会議国際諮問委員 (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-11 電子分光及び電子構造国際会議・共同議長, 国際プログラム委員長 (2009).
ICISS-8,9,10,12 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, 2012).
IWP 光イオン化国際ワークショップ国際諮問委員・プログラム委員 (1997, 2000, 2002, 2005, 2008, 2011).
DyNano2010 短波長放射光によるナノ構造及びダイナミクス国際ワークショップ諮問委員 (2010, 2011).
台湾軟X線散乱国際ワークショップ組織委員 (2009).
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 X線吸収微細構造国際会議実行委員 (1992), 組織委員 (2000), プログラム委員 (1992, 2000), 国際諮問委員 (2003).
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).
日仏自由電子レーザーワークショップ副議長 (2002).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

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).
文部科学省放射光施設の連携・協力に関する連絡会議作業部会委員 (2007–2008).
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 (2003–2004).
日本学術振興会国際科学協力事業委員会委員 (2002–2003), 科学研究費委員会専門委員 (2007–2008, 2012), 特別研究員等審査会専門委員 (2009–2010), 国際事業委員会書面審査員 (2009–2010).
科学技術振興機構戦略的創造研究推進事業(さきがけ)領域アドバイザー (2008–).
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, 2011–2014).
高エネルギー加速器研究機構運営協議委員会委員 (2001–2003), 物質構造科学研究所運営協議委員会委員 (2001–2003), 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 (1994–2012).
日本学術会議放射光科学小委員会委員 (2003–2005).

学会誌編集委員

Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena, Editorial Board member (2005–2006), Editor (2007–).

その他

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).
アジア・オセアニア放射光フォーラムAOFSSR 国際諮問委員及びプログラム委員 (2007, 2009).
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 評価委員会委員 (2002, 2003, 2004), 専用施設審査委員会委員 (2007–2010), 登録機関利用活動評価委員会委員 (2008).

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), 放射光研究施設評価分科会委員 (2001–2002), 放射光戦略ワーキンググループ会議委員 (2007–2009), 放射光科学国際諮問委員会電子物性分科会委員 (2008).

核融合科学研究所外部評価委員会共同研究・連携研究専門部会委員 (2010–2011).

台湾放射光科学国際諮問委員会委員 (2008–2011).

台湾中央研究院研究計画審査委員 (2010–2012).

フィンランド Oulu 大学物理学教授選考外部専門委員 (2010).

フランス CNRS ANR 基盤研究審査員 (2010–2012).

フランス UPMC(Paris 6)/CNRS Multi-scale Integrative Chemistry (MiChem) プロジェクト外部審査委員 (2011).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(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).

科研費基盤研究(B), 「軟X線内殻分光による分子間相互作用系の局所電子構造研究」小杉信博 (2008年–2010年).

科研費基盤研究(A), 「軟X線分光による液体・溶液の局所電子構造解析法の確立」小杉信博 (2011年–2013年).

科研費若手研究(B), 「表面共吸着系の電子状態の同時観測法の開発と電極反応への展開」長坂将成 (2009年–2010年).

科研費若手研究(A), 「軟X線吸収分光法による電極固液界面の局所電子構造の解明」長坂将成 (2011年–2013年).

科研費若手研究(B), 「内殻励起を利用した有機半導体薄膜・界面の局所電子状態と電荷輸送ダイナミクスの研究」山根宏之 (2009年–2010年).

科研費若手研究(A), 「分子間バンド分散の精密観測による有機半導体の電気伝導特性の定量的解明」山根宏之 (2012年–2014年).

科研費挑戦的萌芽研究, 「動作環境における有機デバイス電子状態の「その場」観測」山根宏之 (2012年–2013年).

C) 研究活動の課題と展望

本研究グループは、放射光分子科学における新たな方法論、特に局所構造解析に関わる方法論、の開発・確立を主目的にしており、測定対象の現象として、内殻励起過程を中心とした研究から、脱励起過程も考慮した研究に重点をシフトし、試料として、孤立分子・クラスター系や分子固体を中心とした研究から、溶質・溶媒間や有機分子間の弱い相互作用など、これまで観測が困難とされてきた、より複雑な系や外場・環境効果に重点をシフトしている。その場観測手法や顕微分光法も駆使する必要がある。このような多様な分子システムへの応用研究は、以前のUVSOR-I光源の性能では全く不可能であり、UVSOR-IIをさらに高輝度化したUVSOR-III光源の性能が必須である。これまでアンジュレータ、分光器、測定装置のマッチングを最適にした軟X線ビームラインを建設し、高分解能軟X線吸収分光システム、高分解能光電子分光システム、高分解能軟X線発光分光システム等の開発を行ってきた。これらは放射光分子科学分野において国際的な競争力があり、国内のみならず国外の研究者との共同研究にも大きく貢献している。