

超高分解能・超高感度電子運動量分光装置で切り拓きたい分子科学

(東北大学・多元物質科学研究所) 高橋 正彦

masahiko@tohoku.ac.jp

分子は二種類の荷電粒子、すなわち電子と原子核で構成されている。したがって、反応性や機能性など分子の様々な性質は、電子と原子核の分子内運動ないしはそれら運動の協奏にその根源的理解を求めることができるはずである。この観点に基づき、私は電子運動量分光と原子運動量分光を用いて電子と原子核の分子内運動を直接的に観察することを手段とする分子科学の研究をこれまで進めてきている [1, 2]

電子運動量分光と原子運動量分光は共に、高速電子を励起源とするコンプトン散乱 [3] を利用する実験手法である。前者は物質内電子によるコンプトン散乱を利用するもので、イオン化エネルギーの異なる電子毎に分けて電子運動量分布を与える、言い換えれば分子軌道一つ一つの波動関数の形状を運動量空間で観測する [1]。一方、後者は物質内原子核によるコンプトン散乱を利用するもので、質量の異なる原子核毎に分けて原子種一つ一つの運動量分布を与える [4]。いずれの手法も、光吸収や光電効果を用いては窺い知ることの困難な分子の性質の側面を見せてくれることにご注目頂きたい。

一方で、コンプトン散乱実験は keV オーダーの高いエネルギーを持つ電子を検出するので、通常の光電子分光と比較しうる高いエネルギー分解能を得ることが一般に困難である。そして、その実験的困難を克服しようとする試みが表題の超高分解能・超高感度電子運動量分光装置の開発である。これは、私たちがごく最近見出した電子分光の全く新しい計測原理 [5] と私たちが長年にわたって積み上げてきた超高感度電子運動量分光技術 [6] とを組み合わせた形の世界に比類のない超高分解能装置の開発計画であり、その研究目的として、以下の4つの課題に挑戦したいと考えている。

- (1) 振電相互作用の起源：分子振動による電子軌道の歪みを基準振動毎に分けて観測
- (2) フントの第一規則の起源：異なる多重度状態の電子軌道形状の違いの実験証明
- (3) 創薬化学：運動量空間電子波動関数を用いた分子薬理学と新規活性相関の提案
- (4) 化学反応ムービーの撮影：電子と原子核の運動とそれら協奏の実時間可視化

参考文献

- [1] M. Takahashi, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **82**, 751 (2009).
- [2] 高橋正彦, 表面と真空 **63**, No. 1, 13 (2020).
- [3] B. Williams (Ed.), “*Compton Scattering*” (McGraw-Hill, New York, 1977).
- [4] Y. Tachibana, M. Yamazaki, and M. Takahashi., *Phys. Rev. A* **100**, 032506 (2019).
- [5] I. Nakajima and M. Takahashi, *in preparation*.
- [6] M Yamazaki *et al.*, *Meas. Sci. Technol.* **22**, 075602 (2011).