

## 研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： アト秒反応ダイナミクスコントローラーの創生
2. 研究代表者名及び主たる研究参加者名（研究機関名・職名は研究参加期間終了時点）

研究代表者

石川 顕一（東京大学大学院工学系研究科 教授）

主たる共同研究者

鍋川 康夫（理化学研究所光量子工学研究センター 専任研究員）

関川 太郎（北海道大学大学院工学研究院 准教授）

### 3. 事後評価結果

○評点（2020年度事後評価時）：

A 優れている
---------

○総合評価コメント

（以下、2020年度課題事後評価時のコメント）

当初目標はおおむね達成された。コロナ禍の影響で一部未達であるが半年の延長期間内に達成できる見通しである。イオン化・動的電子相関を伴う強レーザー場中やアト秒パルス中のダイナミクスに対する実時間第一原理シミュレーションコードの開発（東大G）、当初計画にはなかった時間依存結合クラスター理論（東大）、広帯域のアト秒パルス列光源を用いた解離経路差8fsでの化学反応制御（理研G）、高次高調波光源を用いた1,3-シクロヘキサジェンの光開環ダイナミクスの観測（北大G）など、3グループがそれぞれ世界トップクラスの基礎研究の成果を得た。以上の成果に基づくアト秒反応ダイナミクスコントローラーの実証の準備が整いつつあり、延長期間内に3つのグループが成果を持ち寄り密接に連携し、アト秒精度での分子反応制御の実証などにより科学技術のイノベーションに寄与することが期待される。

原著論文75、招待講演69は称賛に値するが、特許出願が無いのは残念である。

次のステップとして、基礎研究で終わらせず医療や創薬の分野への応用等を目指し、学理から社会実装へのギアチェンジを期待したい。例えば、多くの生命機能の制御因子や障害因子として重要な働きをするフリーラジカル（活性酸素や一酸化窒素など単純な分子が含まれる）の観測ができれば、このプロジェクトで得られた成果の医学・生物学への貢献度は極めて高くなると思われる。

（2021年10月追記）

本課題は、新型コロナウイルスの影響を受け、6ヶ月間期間を延長し理論開発、光源開発、分光技術開発を実施し、アト秒反応ダイナミクスコントローラーの構築に取り組んだ。

その結果、理論開発では、本CRESTの矢花チームの成果である多電子ダイナミクスの実時間第一原理計算コードを用い、磁気双極子相互作用と電気四重極子相互作用を考慮して、円偏光高次高調波分光のシミュレーションが可能となった。分光技術開発では、直線偏光アト秒パルスを楕円偏光・円偏光に変換するための $\lambda/4$ 波長素子の試作と評価を行い、これまで極端紫外域での応用研究で用いられている値と比較して非常に良い楕円率が得られた。アト秒反応ダイナミクスコントローラーの構築については、

開発したシステムで行うことのできる新たな反応制御のスキームとして、アト秒パルスの照射によって生成する分子イオンの振動波束と光電子の間のエンタングルメントを利用した量子制御を理論的に検討し、光電子スペクトルを解析的に高速計算する手法を開発した。残念ながら光源装置トラブルにより1, 3-シクロヘキサジエンでの反応制御の実証は成されなかったが、延長により、今後のイノベーションに向けた展開をより一層後押しする成果が得られた。