

2022 年度
創発的研究支援事業 年次報告書

研究担当者	山崎優一
研究機関名	東京工業大学
所属部署名	理学院
役職名	准教授
研究課題名	電子・原子の運動量顕微鏡による化学動力学研究
研究実施期間	2022 年 4 月 1 日～2023 年 3 月 31 日

研究成果の概要

本研究では、我々独自の電子散乱分光技術と最先端レーザー等を高度に融合させ、分子内の電子や原子の運動の様子を自由自在に観測する「運動量顕微鏡」を実現し、電子と原子の波動関数形状の変化に立脚した新しい化学反応学を開拓することを目指している。2022 年度は前年度に引き続き「運動量顕微鏡」の実現のために試作を要する実験設備の開発を進めた。2021 年度に設計した漏れ出し分子線源、熱電子銃、球型電子エネルギー分析器および真空チェンバーの製作を東北大学多元物質研究所にて行い、磁気シールドケースとともに東京工業大学へ移設した。研究室に既存の二次元検出器や排気ポンプ等の市販品を装置に組み込み、並行して開発してきた高圧電源システムや信号処理システムと組み合わせ、装置の評価実験へ向けた準備をほぼ完了させた。また、2023 年度以降に予定している超音速分子線源の開発のためのシミュレーションを開始し、従来の漏れ出し分子線源よりも 1 桁以上の標的数密度が期待される予備的結果を得ている。

上記と並行して、研究計画書に掲げた理論解析法の開発を進めた。時間積算された時間分解電子運動量分光データから、光解離反応経路に沿った分子軌道形状の変化を抽出すべく、反応経路自動探索法によるアセチルラジカルの解離反応経路の網羅的探索を行った。現在までに、新しい反応中間体の存在を示唆する予備的結果を得ており、今後実験結果と比較しうる理論計算スペクトルの計算を試みる予定である。一方、原子運動量分光の多原子分子ならびに不安定過渡状態への拡張を目指して、スペクトルの理論計算法の開発も進めた。多原子分子の拡張に関しては、原子運動量分布に現れる量子干渉効果を初めて明らかにする、また、光解離反応の原子運動量分光スペクトルの計算を行い実験条件の指針を得るなどの成果があった。