

2023 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	2023 年 4 月 1 日～2024 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。

2023 年度は、前年度に試作・開発した電子・原子運動量分光装置の立ち上げおよびベンチマーク実験を主として進めた。電子運動量分光については、Ne を用いた評価実験の結果、開発した装置が所期の性能を有することを確認したのみならず、同型の既存装置と比べて検出効率が桁違いに向上したことが分かった。さらに、新規設計した減速レンズを用いることで、イオン化エネルギーの分解能を 2.8 eV から 1.2 eV へと大きく改善することに成功し、本分光の研究対象を拡大した。本装置の応用の一つとして、イオン化断面積が外殻軌道より桁違いに小さな内殻軌道 (Ar 2s, 2p 軌道や CF<sub>4</sub> C1s 軌道など) を対象とした電子運動量分光を行った。その結果、イオン化断面積の運動量依存性を高精度かつ広い運動量範囲 (~9 原子単位) にわたって観測し、従来用いられてきた散乱理論モデルのいずれも実験結果を再現しないことを明らかにした。一方、原子運動量分光については Xe を用いたベンチマーク実験を行い、入射電子エネルギーが 2 keV および 4 keV の場合について、シミュレーションの予測とほぼ一致するエネルギー分解能を得ることに成功し、さらには CH<sub>4</sub> を用いた原子運動量分光実験の予備的データを取得するなどの性能評価実験を進めた。

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、分子振動の効果を考慮した電子運動量分布およびイオン化エネルギースペクトルの自動計算プログラムや、3 原子分子の原子運動量分布の量子力学的計算法を開発するなどの成果を得た。以上により、電子・原子運動量分光を様々な系に適用する「運動量顕微鏡」の実現に繋がる技術的基盤の確立に成功した。