

令和 6 年 6 月 5 日現在

機関番号：11301

研究種目：挑戦的研究(萌芽)

研究期間：2021～2023

課題番号：21K18926

研究課題名(和文)分子軌道の三次元観測法の開発と運動量空間分子分光の展開

研究課題名(英文) Momentum space chemistry by the development of a technique of imaging molecular orbitals in the three dimensional form

研究代表者

高橋 正彦 (Takahasi, Masahiko)

東北大学・多元物質科学研究所・教授

研究者番号：80241579

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 4,900,000円

研究成果の概要(和文)：レーザーパルス電場により生成する回転波束の詳細な検討を行い、申請当時と比較して信号強度を3桁向上させ、かつvelocity mismatch問題をも克服する優れた実験原理を見出した。そして、時間分解電子運動量分光装置の改造を行い、従来の空間平均した実験を通して、満足すべき性能を有することを確認した。さらに、2022年3月の福島県沖地震により稼働不可となった現有レーザーの代替品が納入された2023年9月以降、分子軌道形状観測実験を開始し、より高い解像度を得るために各種実験パラメータの最適値を検討している。以上のように、本研究が目的とする「分子軌道の三次元観測法の開発」に成功した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究により、多原子分子一般を対象として分子軌道を三次元的に見るといふ化学者全体の夢の一つを実現できる。これは、分子軌道は今や物質科学から生命科学に亘る自然科学の広範な分野で基盤の一つであること、また種々の近似を用いる理論計算を通じてのみしか波動関数形を窺い知ることのできない現状を考え合わせると、その波及効果は現段階では予測できないほど大きい。さらに、波動関数形に関する実験と理論の比較は、分子軌道理論の発展を促すに止まらず、化学結合や化学反応に対する理解にまで質的变化をもたらす可能性を持つ。

研究成果の概要(英文)： Firstly, we have developed an experimental principle for this research, through detailed analysis of the rotational wave packet created by using the pulsed laser, It is unique in its ability to increase the signal count rate by a factor of about 1000 and to prevent the velocity mismatch problem. We have then updated the time-resolved electron momentum spectroscopy (TR-EMS) apparatus. The update has been verified to be satisfactory by conducting traditional EMS experiments. Although the laser originally supposed to be used to create rotational wave packet was seriously damaged due to the big earthquake occurred in March, 2022, the alternative new one has installed in September, 2023. Since then, we have started the laser-pump and electron-probe experiments. In this way, the target goal of this research has successfully been achieved, which is to develop an experimental technique that enables one to look at individual molecular orbitals in the three-dimensional form.

研究分野：基礎物理化学

キーワード：分子軌道イメージング 運動量空間分子分光 配向分子 電子運動量分光

1. 研究開始当初の背景

福井謙一先生のフロンティア軌道理論が端的に示すように、反応性など分子の性質は分子軌道の形で決まる。こうした電子波動関数の形をより正確に知ることは依然、科学の中心的課題の一つであり、理論的波動関数が電子構造の詳細な理解に大きな貢献をしてきたことは周知のとおりである。しかし、その計算で得た波動関数の形は本当に正しいのか、変分原理を指針としてエネルギー以外の物理量も正確に予言する「真」の波動関数に最も迫ることができるのか、疑問が残る。通常の理論計算では CO 分子の双極子モーメントを再現できないことはよく知られた事実である。

上記のような状況を踏まえて、分子軌道の波動関数の形状を実験観測しようとする様々な手法がこれまでに提案されてきた。しかし、いずれも「帯に短し、襷に長し」の様相で、分子軌道の形状を自由自在に、かつ定量的に観測する実験手法は現在のところ皆無である。分子軌道は今や物質科学から生命科学に亘る自然科学の広範な分野で基盤の一つであり、また種々の近似を用いる理論計算を通じてのみしか波動関数形を窺い知ることのできない現状を考え合わせると、分子軌道の形状を定量的に実験観測することの波及効果は現段階では予測できないほど大きい。

一方、研究代表者が本研究構想を得るに至った主たる事項は以下の3点である。

- (1) 研究代表者は、電子相関や官能基間の分子内相互作用などこれまで行ってきた波動関数形を基礎とする運動量空間分子分光研究を通じて、気相分子アンサンブルの空間的にランダムな分子配向に起因する空間平均により波動関数形が持つ情報の如何に多くが失われるかを痛感してきた。
- (2) 研究代表者の「配向二原子分子の電子運動量分光」実験は、分子イオンの解離が分子回転よりも速く起これば解離イオンの飛行方向は電子衝突時の分子軸方向と同じとの axial recoil 解離を利用するため二原子分子にしか適用できず、分子軌道の三次元観測がもたらす数多くの情報を実体験すると共に多原子分子を対象とできる新規手法の必要性を強く認識した。
- (3) 研究代表者の「時間分解電子運動量分光」実験は、パルスレーザーで励起分子を瞬時的に生成し、そのタイミングに合わせてパルス電子線を入射して励起分子の HOMO 軌道の電子運動量分光計測を行ったもので、パルスレーザーとパルス電子線の時間的マッチングを取る技術は開発済みである。この研究代表者の電子運動量分光における実績と経験を、パルスレーザー電場を用いた気相分子の空間的配向制御技術と組み合わせれば、本研究構想を具現できると確信するに至った。

2. 研究の目的

本研究の目的は、多原子分子一般の分子軌道毎の空間的形狀を運動量空間において三次元観測する手法を開発することにより、波動関数形を基礎として分子の性質を従来とは逆転した視点から解明する運動量空間分子分光を飛躍的に深化・展開することである。

3. 研究の方法

本研究で実験的基盤とするものは、電子運動量分光 [M. Takahashi, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **82**, 751 (2009)] である。本分光は光吸収や光電効果とは異なる物理的性質を持つコンプトン効果を利用する手法で、気相分子 M の高速電子衝撃イオン化で生成する非弾性散乱電子と電離電子のうち、散乱角が共に 45° ($\theta_1 = \theta_2 = 45^\circ$) でエネルギーが等しい ($E_1 = E_2$) 二電子を同時計測する (図 1) 。

$e_0 + M \quad M^+ + e_1 + e_2$

入射電子のエネルギー E_0 と運動量 p_0 は既知なので、散乱前後のエネルギー保存則 ($E_{\text{bind}} = E_0 - E_1 - E_2$) から各々に固有のイオン化エネルギー E_{bind} を持つ電離軌道を選択して、運動量保存則 ($p = p_1 + p_2 - p_0$) からその電離電子がイオン化前に分子内で持っていた運動量 p の分布を決定できる。運動量 p の大きさは、散乱二電子間の方位角差 $\Delta\phi$ から分かる。しかし、標的気相分子の空間的ランダム配向により、計測する電子運動量はベクトルの p ではなくスカラーの $|p|$ となる結果、実験で得られる電子運動量分布は分子軌道 $\psi(p)$ を用いて表せば空間平均した $|\int d\Omega |\psi(p)|^2$ となる。これが通常の電子運動量分光である。

本研究では、上記の空間平均という実験的困難を克服し、多原子分子一般の分子軌道の三次元観測を可能とするために、パルスレーザー電場を用いた気相分子の空間的配向制御技術 [Oda *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 213901 (2010) など] を利

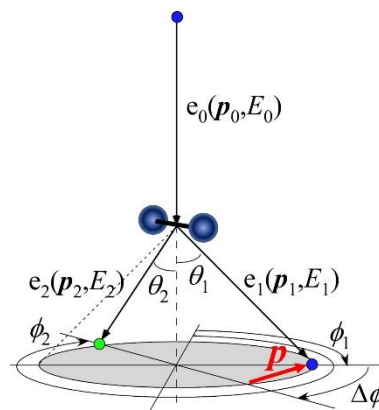


図 1 : 散乱の kinematics

用して標的分子の空間的配向を瞬時的に一樣に揃え、そのタイミングに合わせてパルス電子線を入射し電子運動量分光計測を行う。具体的には、研究代表者が現有の時間分解電子運動量分光装置 [M. Yamazaki *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 103005 (2015)] に 2 点の改造を図って本研究に転用する。装置改造の一点は、標的分子を配向させるには極低温の分子回転温度が必須であるので、現有装置の常温気体漏れ出し分子線を超音速分子線に置き換えること。装置改造のもう一点は、レーザーの仕様変更である。ただし、これに関しては、後述するように本研究計画を推進している途中で格段に優れた実験原理を見出すことができたので、その内容を大きく修正することとなった。すなわち、分子が配向する時間幅が研究代表者現有のパルス電子線 [M. Yamazaki *et al.*, *Rev. Sci. Instrum.* **84**, 063105 (2013)] の 1 ピコ秒幅に時間的に合致するように現有装置のレーザー (5 kHz, 4W) のパルス幅 120 フェムト秒を 1 ピコ秒幅へと仕様を変更するという申請時の研究計画での内容を、現有装置のレーザー (5 kHz, 4W) のパルス幅はそのまま繰り返し周波数 5 kHz を 1 kHz へと変更する内容に修正した。

4. 研究成果

本研究の成果は、以下の 3 点に概括される。

(1) 格段に優れた実験原理の創出

非共鳴レーザーパルス電場により生成する分子回転波束の時間発展を詳細に調べた。図 2 は、 N_2 分子を対象として得たシミュレーション結果の一例である。 $5 \times 10^{12} \text{ W/cm}^2$ の強度のフェムト秒パルスレーザー入射時に生成した回転波束は、レーザーパルスが消失した後に、周期的な集団運動を繰り返すことが見て取れる。最も強度の強い約 1 ピコ秒幅のピークが分子配列度の最も高い時間領域であり、その時間領域に合わせて 1 ピコ幅のパルス電子線を入射して電子運動量分光測定を行うことにより分子軌道の波動関数形を三次元観測しようというのが、本研究計画の申請段階時のアイデアであった。原理的にはこれで測定可能になるが、入射電子線のパルス幅を 1 ピコ秒にするということは、通常連続電子線と比較して信号強度が 10 の 12 乗分の一に激減するという意味を意味する。そこで、信号強度を桁違いに向上させることはできないか、徹底的に検討を重ねた。その結果、分子回転波束がコヒーレンスを消失するおよそ 10 ナノ秒まで活用できる、まったく新しいアイデアに基づく実験原理を見出した。その実験原理に基づき、10 ナノ秒幅のパルス電子線を用いた場合に得られる、 N_2 分子の配列度に関するシミュレーション結果を図 3 に示す。図 3 の上図は、配列用レーザーを用いない場合の結果で、これは気相分子のランダムな空間的配列の配列度 0.33 の値を示す。一方、配列用レーザーを用いた場合は、図 3 の下図に示すように、配列度 0.71 が得られることが見て取れる。この配列度 0.71 は図 2 の約 1 ピコ秒幅のピークが示す配列度 0.72 に匹敵するもので、このことは 10 ナノ秒幅のパルス電子線を用いてもなお、1 ピコ秒幅のパルス電子線で分子回転波束を時間的に狙い撃ちした場合と同様の高い配列度の実験データが得られることに加え、後述するように、5 桁以上向上できることを意味する。さらに、この場合、配列用レーザー光と検出用電子線の速度の違いにより実質的 pump-probe 時間分解能が桁違いに劣化するという velocity mismatch 問題が存在しないことになる。以上のように、いわばコロンプスの卵的な発想に基づいて、従来では予期できなかった高品質レベルで光ポンプ - 電子プローブ実験を可能とする、格段に優れた実験原理を創出することに成功した。

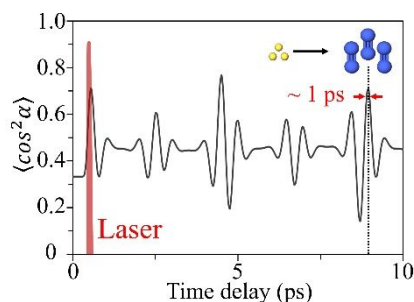


図 2 : N_2 分子回転波束の時間発展

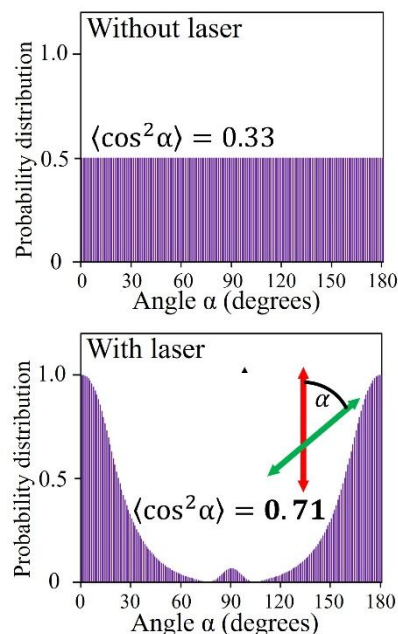


図 3 : N_2 分子の分子軸とレーザー電場との角度の分布

(2) 分子軌道形状の三次元観測装置の開発

研究代表者が現有の時間分解電子運動量分光装置を本研究に転用すべく、上記の新しい実験原理に基づいて装置改造を行った。主たる改造点は以下の 3 点である。一点は、標的分子を配向させるには極低温の分子回転温度が必須であるので、現有装置の常温気体漏れ出し分子線を超音速分子線仕様に改造したこと。ここでは、より高い標的分子濃度を得るために、市販品で利用可能な繰り返し周波数 2 kHz のパルス型超音速分子線バルブを用いることとした。装置改造の 2 点目は、現有装置のチタンサファイアレーザー (120 fs, 5 kHz, 4W) のパルス幅はそのまま、繰り返し周波数 5 kHz を 1 kHz へと変更した。これにより、パルス当たりのレーザー強度が 5 倍に強くなり、標的分子の高い配列度を約 8 倍の衝突領域体積で得られることになった。装置改造

の3点目は、パルス電子線源である。本研究計画の申請段階時のアイデアでは、フェムト秒レーザーの3倍波を励起源として、パルス幅1ピコ秒のフォトカソード型電子銃を用いる予定であったが、本研究で得た新しい実験原理によれば、10ナノ秒幅でよいので、電場偏向型パルス電子銃を新たに設計・製作した。以上の改造により、分子軌道形状の三次元観測装置として整備した装置の模式図を図4に示す。この装置の最大の特徴は、申請段階時に想定していたセットアップと比較して、時間幅の観点から10の4乗倍（10ナノ秒/1ピコ秒）、衝突体積領域の観点から32倍（上記の8倍に電子ビーム断面積の4倍を掛けたもの）で、都合、 3×10^5 倍もの桁違いに大きい信号強度を得られることにある。

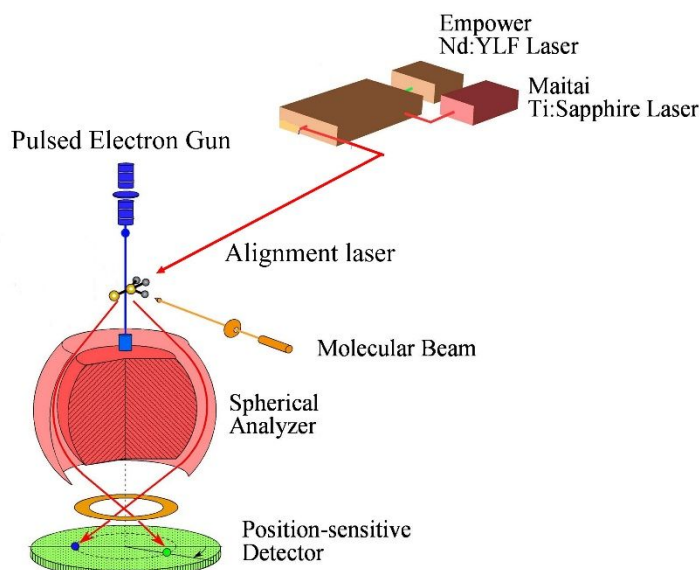


図4：開発した分子軌道形状の三次元観測装置の模式図

(3) 分子軌道形状の三次元観測装置を用いての測定

上記の分子軌道形状の三次元観測装置の構成要素であるフェムト秒レーザーが2022年3月16日に発生したM7.4の福島県沖の地震により稼働不可となった。幸いにも、国の地震復旧支援により、翌年2023年9月に代替品が納入された。これ以降、配列用パルスレーザーとパルス電子線の時間的マッチングを図るタイムゼロ測定など、各種予備実験を開始することができた。それら予備実験の一例として、図5にAr原子を対象として得たイオン化エネルギースペクトルを示す。この結果は、改造した装置のうちの電子運動量分光検出部が、極めて満足すべき性能を有することを示している。現在は、分子軌道形状の三次元観測実験へと歩みを移し、各種実験パラメータの調整を図っている。以上のように、本研究が目的とする「分子軌道の三次元観測法の開発」に成功した。

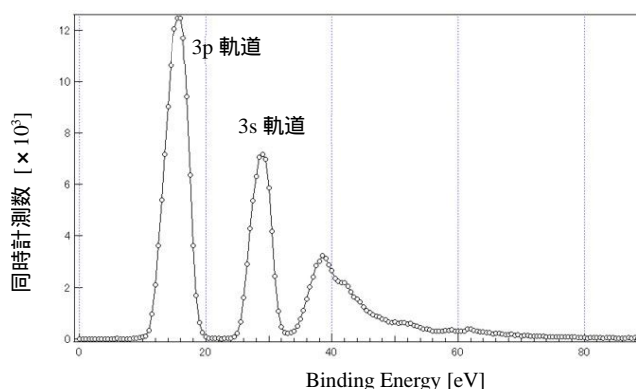


図5：開発した装置で測定したArのデータ例

現在は、分子軌道形状の三次元観測実験へと歩みを移し、各種実験パラメータの調整を図っている。以上のように、本研究が目的とする「分子軌道の三次元観測法の開発」に成功した。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計9件（うち査読付論文 9件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Yuichi Tachibana, Yuuki Onitsuka, Satoru Kanaya, Hirohiko Kono, Masahiko Takahashi	4. 巻 25
2. 論文標題 Electron-atom Compton profiles due to the intramolecular motions of the H and D atoms in HD	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 6653-6658
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1039/D3CP00339F	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Noboru Watanabe, Masahiko Takahashi	4. 巻 127
2. 論文標題 Theoretical Study of Valence Shell Excitation by Electron Impact in CCl ₄	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 1866-1873
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1021/acs.jpca.2c08619	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Noboru Watanabe, Masahiko Takahashi	4. 巻 108
2. 論文標題 Electron-impact dissociative ionization of SF ₆ studied by angle-resolved (e, e ⁺ ion) spectroscopy	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review A	6. 最初と最後の頁 042814-1-9
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevA.108.042814	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Watanabe Noboru, Takahashi Masahiko	4. 巻 55
2. 論文標題 Theoretical study of generalized oscillator strengths for the low-lying electronic excitations of CH ₃ Cl and CF ₃ Cl	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics	6. 最初と最後の頁 015201-1-10
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1088/1361-6455/ac4a22	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Tachibana Yuichi、Onitsuka Yuuki、Kono Hirohiko、Takahashi Masahiko	4. 巻 105
2. 論文標題 Direct and precise mapping of intramolecular H-atom motion in H2 by an electron-atom Compton scattering experiment	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review A	6. 最初と最後の頁 052813-1-4
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevA.105.052813	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Onitsuka Yuuki、Tachibana Yuichi、Takahashi Masahiko	4. 巻 24
2. 論文標題 Asymptotic behavior of the electron-atom Compton profile due to the intramolecular H-atom motion in H2	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 19716-19721
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d2cp02461f	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Watanabe Noboru、Kume Kenichi、Takahashi Masahiko	4. 巻 259
2. 論文標題 A joint experimental and theoretical study of the valence electron momentum distributions of trans-stilbene	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena	6. 最初と最後の頁 147240-1-7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.elspec.2022.147240	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Watanabe Noboru、Takahashi Masahiko	4. 巻 54
2. 論文標題 Vibrational effects on generalized oscillator strengths of ammonia	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics	6. 最初と最後の頁 135202-1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-6455/ac0769	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Watanabe Noboru, Takahashi Masahiko	4. 巻 104
2. 論文標題 Symmetry breaking in electron-impact dissociative ionization of linear symmetric molecules	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review A	6. 最初と最後の頁 032812-1-5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevA.104.032812	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

[学会発表] 計61件 (うち招待講演 12件 / うち国際学会 28件)

1. 発表者名 Sihan Long, Yuuki Onitsuka, Masahiko Takahashi
2. 発表標題 Development of a new pharmacological index by using the molecular orbital wavefunction in momentum space
3. 学会等名 2023 Tohoku Meeting of Chemical Society of Japan and 80th Anniversary International Conference of Tohoku Branch, The Chemical Society of Japan (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Noboru Watanabe, Masahiko Takahashi
2. 発表標題 Symmetry breaking in dissociative ionization of symmetric molecules by electron impact
3. 学会等名 XXXIII International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC 2023) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Masahiko Takahashi
2. 発表標題 Electron-atom Compton scattering: a new and unique tool for imaging intramolecular atomic motion
3. 学会等名 Electron-Molecule Collisions and Swarms (POSMOL 2023) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Noboru Watanabe, Masahiko Takahashi
2. 発表標題 Symmetry breaking in electron-impact dissociative ionization of symmetric molecules
3. 学会等名 22nd International Symposium on Correlation, Polarization and Ionization in Atomic and Molecular Collisions (COPIAMC 2023) (招待講演)(国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Masahiko Takahashi
2. 発表標題 Electron-atom Compton scattering: a powerful tool for imaging intramolecular atomic motion
3. 学会等名 National Taipei University of Technology & Tohoku University 2023 Joint Symposium (招待講演)(国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Satoru Kanaya, Yuuki Onitsuka, Noboru Watanabe, Hirohiko Kono, Masahiko Takahashi
2. 発表標題 Extension of atomic momentum spectroscopy from diatomic molecules to polyatomic molecules
3. 学会等名 38th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yuuki Onitsuka, Yuichi Tachibana, Satoru Kanaya, Hirohiko Kono, Masahiko Takahashi
2. 発表標題 Development of an imaging method of intramolecular atomic motion
3. 学会等名 38th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Sihan Long, Yuuki Onitsuka, Soichiro Nagao, Masahiko Takahashi
2. 発表標題 Combining momentum-space wavefunctions and frontier orbital theory for providing predictive insights into pharmacological activity
3. 学会等名 XXXIII International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC 2023) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Satoru Kanaya, Yuuki Onitsuka, Noboru Watanabe, Hirohiko Kono, Masahiko Takahashi
2. 発表標題 Development of atomic momentum spectroscopy of polyatomic molecules
3. 学会等名 XXXIII International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC 2023) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yuuki Onitsuka, Yuichi Tachibana, Satoru Kanaya, Hirohiko Kono, Masahiko Takahashi
2. 発表標題 Development of a new molecular spectroscopy technique: mapping atomic motions and elemental composition analysis of a molecule
3. 学会等名 XXXIII International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC 2023) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Isao Nakajima, Masakazu Yamazaki, Yuri Popov, Salim Houamer, Masahiko Takahashi
2. 発表標題 A binary (e, 2e) study on Ne at incident electron energies up to 4 keV: Asymptotic behavior of the (e, 2e) cross section to its high energy limits
3. 学会等名 XXXIII International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC 2023) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Noboru Watanabe, Masahiko Takahashi
2. 発表標題 Theoretical electronic excitation cross sections of CCl4
3. 学会等名 XXXIII International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC 2023) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Sihan Long, Yuuki Onitsuka, Masahiko Takahashi
2. 発表標題 Development of a new pharmacological index by using the frontier orbital wavefunction in momentum space
3. 学会等名 National Taipei University of Technology & Tohoku University 2023 Joint Symposium (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yuta Suzuki, Yuuki Onitsuka, Yukiyoshi Ohtsuki, Masahiko Takahashi
2. 発表標題 Construction of an apparatus for the study of stereodynamics of electron-molecule collision
3. 学会等名 National Taipei University of Technology & Tohoku University 2023 Joint Symposium (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 鈴木優太, 鬼塚侑樹, 大槻幸義, 高橋正彦
2. 発表標題 配列した多原子分子と電子の衝突立体ダイナミクス実験装置の開発 (II)
3. 学会等名 第19回原子・電子・光化学 (AMO) 討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 金谷諭, 鬼塚侑樹, 渡邊昇, 河野裕彦, 高橋正彦
2. 発表標題 多原子分子の原子運動量分光の開発
3. 学会等名 第19回原子・電子・光化学 (AMO) 討論会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 高橋正彦
2. 発表標題 電子で見る分子軌道 (ディスカッションリーダー)
3. 学会等名 第19回原子・電子・光化学 (AMO) 討論会 (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 高野実咲, 高橋正彦, 大野公一, 大島康裕, 山崎優一
2. 発表標題 時間分解電子運動量分光とGRRM法による反応中の分子軌道変化の解明
3. 学会等名 シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア2023」
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 高野実咲, 高橋正彦, 大野公一, 大島康裕, 山崎優一
2. 発表標題 時間分解電子運動量分光と反応経路自動探索法による反応中の分子軌道変化の解明
3. 学会等名 第17回分子科学討論会2023
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 佐藤巧, 黒子茜, 長谷川達士, 高橋正彦, 大島康裕, 山崎優一
2. 発表標題 高感度(e,2e)電子運動量分光装置の開発
3. 学会等名 第17回分子科学討論会2023
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 渡邊 昇, 高橋 正彦
2. 発表標題 CC14の価電子励起と遷移断面積に対する分子振動効果
3. 学会等名 第17回分子科学討論会2023
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 鬼塚 侑樹, 金谷 諭, 河野 裕彦, 高橋 正彦
2. 発表標題 定量的原子運動量分光の開発と分子科学への展開 (II)
3. 学会等名 第17回分子科学討論会2023
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 龍 思涵, 鬼塚 侑樹, 高橋 正彦
2. 発表標題 フロンティア軌道の運動量空間波動関数の形に基づく薬理活性の予測
3. 学会等名 第17回分子科学討論会2023
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 渡邊昇, 高橋正彦
2. 発表標題 CC14 の価電子励起に対する分子振動の影響
3. 学会等名 原子衝突学会第48回年会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 小西英, 坂口颯太, 高橋正彦, 大島康裕, 山崎優一
2. 発表標題 原子運動量分光の多元素への展開に向けた高感度装置の開発
3. 学会等名 原子衝突学会第48回年会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 佐藤巧, 黒子茜, 長谷川達士, 高橋正彦, 大島康裕, 山崎 優一
2. 発表標題 高感度(e,2e)電子運動量分光装置の開発と内殻イオン化過程の研究
3. 学会等名 原子衝突学会第48回年会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 鬼塚侑樹, 金谷諭, 高橋正彦
2. 発表標題 電子-原子コンプトン散乱を用いた物質内原子運動の可視化 - 原子のスピードガンの開発 -
3. 学会等名 第23回東北大学多元物質科学研究所研究発表会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Noboru Watanabe, Masahiko Takahashi
2. 発表標題 Symmetry breaking in electron-impact dissociative ionization of CO ₂ and N ₂
3. 学会等名 37th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Satoru Kanaya, Yuichi Tachibana, Yuuki Onitsuka, Noboru Watanabe, Hirohiko Kono, Masahiko Takahashi
2. 発表標題 Development of a theoretical method for predicting the atomic momentum distribution of polyatomic molecules
3. 学会等名 37th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Sihan Long, Soichiro Nagao, Yuuki Onitsuka, Masahiko Takahashi
2. 発表標題 Development of a new pharmacological index based on the momentum space distribution of the frontier molecular orbitals
3. 学会等名 37th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yuichi Tachibana, Yuuki Onitsuka, Masahiko Takahashi
2. 発表標題 Application of atomic momentum spectroscopy to a heteronuclear diatomic molecule
3. 学会等名 37th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yuuki Onitsuka, Masahiko Takahashi
2. 発表標題 Establishment of electron-Compton scattering as a molecular spectroscopy to directly observe intramolecular atomic motion
3. 学会等名 International Conference on Many Particle Spectroscopy of Atoms, Molecules, Clusters and Surfaces (MPS 2022) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Masahiko Takahashi
2. 発表標題 Electron-atom Compton scattering: A new and unique tool for imaging intramolecular atomic motion
3. 学会等名 18th International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE 2022) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 渡邊昇, 高橋正彦
2. 発表標題 CO2とN2の電子衝撃イオン化解離おける対称性の破れ
3. 学会等名 原子衝突学会第47回年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 鬼塚侑樹, 高橋正彦
2. 発表標題 電子-原子コンプトン散乱を用いた化学反応中に分子内原子に働く力の可視化に向けて
3. 学会等名 化学系学協会東北大会 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 渡邊昇, 高橋正彦
2. 発表標題 対称分子の電子衝撃イオン化解離に現れる対称性の破れ
3. 学会等名 第16回分子科学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 鬼塚侑樹, 立花佑一, 高橋正彦
2. 発表標題 定量的原子運動量分光の開発と分子科学への展開
3. 学会等名 第16回分子科学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 鈴木優太, 鬼塚侑樹, 大槻幸義, 高橋正彦
2. 発表標題 配列した多原子分子と電子の衝突立体ダイナミクス実験装置の開発
3. 学会等名 第16回分子科学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Sihan Long, Soichiro Nagao, Yuuki Onitsuka, Masahiko Takahashi
2. 発表標題 Development of a novel pharmacological index by using the frontier molecular orbitals in momentum space
3. 学会等名 第22回東北大学多元物質科学研究所研究発表会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 黒子茜、長谷川達士、高橋正彦、大島康裕、山崎優一
2. 発表標題 LUMO のイメージングに向けた高感度(e, 2e)電子運動量分光装置の開発
3. 学会等名 第22回東北大学多元物質科学研究所研究発表会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 山崎優一, 黒子茜, 高橋正彦, 大島康裕
2. 発表標題 時間分解電子運動量分光とGRRMで挑むフロンティア軌道の可視化
3. 学会等名 IQCE 量子化学探索講演会 2022「量子化学で探る化学の最先端」
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Satoru Kanaya, Yuichi Tachibana, Yuuki Onitsuka, Noboru Watanabe, Hirohiko Kono, Masahiko Takahashi
2. 発表標題 Experimental and Theoretical Development of Atomic Momentum Spectroscopy for Polyatomic Molecules
3. 学会等名 日本化学会第103春季年会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yuuki Onitsuka, Yuichi Tachibana, Masahiko Takahashi
2. 発表標題 Experimental determination of the high energy limit for the plane wave impulse approximation in atomic momentum spectroscopy
3. 学会等名 36th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yuichi Tachibana, Yuuki Onitsuka, Hirohiko Kono, Masahiko Takahashi
2. 発表標題 Development of a general protocol for achieving an intramolecular atomic momentum distribution using electron-atom Compton scattering
3. 学会等名 36th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yuuki Onitsuka, Yuichi Tachibana, Masahiko Takahashi
2. 発表標題 An atomic momentum spectroscopy study for elucidating the range of the validity of the plane wave impulse approximation
3. 学会等名 International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Noboru Watanabe, Masahiko Takahashi
2. 発表標題 Measurement of the forward-backward asymmetry in electron impact ionization of CO
3. 学会等名 International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yuichi Tachibana, Yuuki Onitsuka, Hirohiko Kono, Masahiko Takahashi
2. 発表標題 Direct observation of atomic motion in molecules using atomic momentum spectroscopy
3. 学会等名 International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yuuki Onitsuka, Yuichi Tachibana, Masahiko Takahashi
2. 発表標題 Investigation of the high energy limit for the plane wave impulse approximation in atomic momentum spectroscopy
3. 学会等名 International Symposium on Correlation, Polarization and Ionization in Atomic and Molecular Collisions (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Noboru Watanabe, Masahiko Takahashi
2. 発表標題 Forward-backward asymmetry in electron-impact ionization of CO studied by (e, e ⁺ ion) spectroscopy
3. 学会等名 International Symposium on Correlation, Polarization and Ionization in Atomic and Molecular Collisions (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yuichi Tachibana, Yuuki Onitsuka, Hirohiko Kono, Masahiko Takahashi
2. 発表標題 Development of a general protocol for observing atomic momentum distributions in molecules using electron-atom Compton scattering
3. 学会等名 International Symposium on Correlation, Polarization and Ionization in Atomic and Molecular Collisions (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 立花佑一, 鬼塚侑樹, 河野裕彦, 高橋正彦
2. 発表標題 電子散乱による分子内原子運動量分布の観測
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 渡邊昇, 高橋正彦
2. 発表標題 COの電子衝撃イオン化における分子配向依存性: 前方・後方異方性の観測
3. 学会等名 第15回分子科学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 高橋正彦
2. 発表標題 電子衝突を利用する新しい分子科学の開拓と深化
3. 学会等名 マテリアル・計測ハイブリッド研究センター キックオフシンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 鬼塚侑樹, 立花佑一, 高橋正彦
2. 発表標題 原子運動量分光法を用いた分子科学研究に向けて - 平面波撃力近似の高エネルギー極限の決定 -
3. 学会等名 第46回原子衝突学会年会 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 立花佑一, 鬼塚侑樹, 河野裕彦, 高橋正彦
2. 発表標題 電子衝突が可能にする分子内原子運動の直接観測
3. 学会等名 第46回原子衝突学会年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 高橋正彦
2. 発表標題 電子衝突で切り拓きたい分子科学
3. 学会等名 理研・新領域開拓課題「物質階層原理研究」&「ヘテロ界面研究」合同研究会（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 長尾壮一郎, 龍思涵, 鬼塚侑樹, 高橋正彦
2. 発表標題 運動量空間分子軌道の形で探る薬理学的指標の研究
3. 学会等名 第21回東北大学多元物質科学研究所研究発表会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 鈴木優太, 鬼塚侑樹, 大槻幸義, 高橋正彦
2. 発表標題 レーザー配列・配向制御した気体分子と自由電子の衝突の立体ダイナミクス研究の試み
3. 学会等名 第21回東北大学多元物質科学研究所研究発表会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Sihan Long, Soichiro Nagao, Yuuki Onitsuka, Masahiko Takahashi
2. 発表標題 Construction of a novel pharmacological index by using the molecular orbital wave function in momentum space
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 鈴木優太, 鬼塚侑樹, 大槻幸義, 高橋正彦
2. 発表標題 レーザー分子配列技術を用いた電子・分子衝突立体ダイナミクス研究のための装置の設計
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 金谷諭, 立花佑一, 鬼塚侑樹, 渡邊昇, 高橋正彦
2. 発表標題 多原子分子に対する原子運動量分布の量子化学計算法の開発
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会
4. 発表年 2022年

〔図書〕 計0件

〔出願〕 計1件

産業財産権の名称 ELECTRON SPECTROMETER	発明者 高橋正彦, 中島功雄, 鬼塚侑樹	権利者 同左
産業財産権の種類、番号 特許、特願17/652237	出願年 2022年	国内・外国の別 外国

〔取得〕 計1件

産業財産権の名称 Electron Spectrometer	発明者 Masahiko Takahashi et al.	権利者 同左
産業財産権の種類、番号 特許、US11,898,975B2	取得年 2024年	国内・外国の別 外国

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関