

科学研究費助成事業(科学研究費補助金)研究成果報告書

平成25年 5月20日現在

機関番号: 11301 研究種目:基盤研究 研究期間: 2010 ~ 課題番号: 22550002	(C) 2012		
研究課題名(和文)	解離イオン同時計測電子エネルギー損失分光による空電子軌道 イメージング		
研究課題名(英文)	Unoccupied molecular orbital imaging by electron-ion coincidence spectroscopy		
研究代表者 渡邉 昇 (WATANABE NOBORU) 東北大学・多元物質科学研究所・准教授 研究者番号:90312660			

研究成果の概要(和文):空電子軌道の実験的観測に向けた基盤技術の確立を目的とし,電子衝 突時における標的分子の配向方向を規定して電子散乱断面積を測定する"配向分子の電子エネ ルギー損失分光法"の開発を行った。非弾性散乱電子と解離イオンとを同時計測する新規装置 を製作することで,分子の配向方向に依存した電子散乱断面積の変化をとらえることに成功し た。さらに,電子散乱実験から振電相互作用効果を視覚的に捉える手法を考案し,幾つかの分 子の価電子励起に適用した。

研究成果の概要 (英文): We have developed a method to observe differential electron scattering cross sections in molecular frame to provide a firm basis for unoccupied molecular orbital imaging. Coincidence detection of inelastically scattered electrons and fragment ions has made it possible to observe the angular dependence of the electron scattering cross section for a fixed in space molecule. Furthermore, vibronic effects on electronic excitations in molecules have been investigated using a newly developed method based on electron energy loss spectroscopy.

交付決定額

(金額単位:円)

-			(並領平匹・1)
	直接経費	間接経費	合 計
2010年度	1,500,000	450,000	1, 950, 000
2011年度	1, 300, 000	390, 000	1,690,000
2012年度	900,000	270,000	1, 170, 000
年度			
年度			
総計	3, 700, 000	1, 110, 000	4, 810, 000

研究分野:化学

科研費の分科・細目:基礎化学・物理化学

キーワード:電子エネルギー損失分光,一般化振動子強度,電子励起状態

1. 研究開始当初の背景

分子軌道は、今や自然科学の広範な分野に おいて基礎的概念となっている。その最大の 理由は、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の多くが HOMO(最高被占有軌道)やLUMO(最低空 軌道)といった個々の分子軌道の形によって 決まることであろう。こうした分子軌道の実 験的観測は古くから試みられてきており、中 でも電子線コンプトン散乱実験の発展形で ある電子運動量分光(EMS)は、約40年も の歴史を持つ。最近では、走査型トンネル顕 微鏡(STM)を用いた表面吸着分子のHOMO の観測[J.I. Pascual et al,, *Chem. Phys. Lett.* 321, 78 (2000)]や、強光子場中で発生する高次高 調波の測定から HOMO を再構築する"分子 軌道トモグラフィー"[J. Itatani et al., *Nature* 432, 867 (2004)]等の手法も提案されてきて おり、分子軌道の形を正確に知ることは、現 在においても依然自然科学の中心的課題と なっている。しかしながら、従来の実験が対 象としてきたのは主として被占有軌道であ り、HOMO と等しく分子の性質を支配する LUMO などの空軌道について定量的な観測 を実現するためには、更なる飛躍的展開を必 要とする。

このような状況のもと,研究代表者は一貫 して高速電子線やX線の散乱実験と独自の理 論的手法とを組み合わせた原子・分子の電子 状態研究を展開してきた。特に, 2001年以降 は個々の電子軌道を実験的に観測できる EMS の発展性に興味を持ち,本分光を用いた 研究を進めてきている。中でも、従来の EMS 研究の枠組みを超えた新たな研究への展開 に深い関心を抱き、これまでに"サテライト 遷移の観測による電子相関の研究"や"電子 線コンプトン散乱における二電子励起メカ ニズムの解明"などの成果を得ている[N. Watanabe et al, Phys. Rev. A 75, 052701 (2007) など]。さらに電子衝突時における標的分子の 配向方向を規定して EMS 断面積を測定する プロジェクトにおいても中心的な役割を果 たし、"配向分子の EMS 実験"を世界に先駆 けて実現した[M. Takahashi, N. Watanabe et al, Phys. Rev. Lett. 94, 213202 (2005)]。 (e,2e+M)分 光と名付けた本手法の開発により、標的気相 分子のランダムな配向により空間平均した 形でしか分子軌道を観測できないという EMS 最大の実験的困難を克服し, 被占有分子 軌道の3次元観測法の確立に向けた貴重な一 歩を踏み出すことができたのである。

こうした EMS 研究を展開する一方で,分 子の有する性質の理解には被占有軌道だけ でなく空軌道についても詳細な知見が必須 であるという認識の下,空軌道の実験的観測 の可能性についても議論を積み重ねてきた。 その結果,電子線非弾性散乱実験である電子 エネルギー損失分光(EELS)を基礎に置く実 験手法を新たに開発することで,空軌道のイ メージングが実現できるとの見通しを持ち, 本研究課題への着手に至った。

2. 研究の目的

本研究の目的は,分子軌道の中でも特に LUMOなどの空軌道に着目し,電子非弾性散 乱に基づくアプローチから軌道の形を実験 的に観測するための基盤技術を確立するこ とにある。電子衝突時における標的分子の配 向方向を規定して電子散乱断面積を測定す る"配向分子の電子エネルギー損失分光法" を新たに開発し,電子励起状態の波動関数形 をプローブすることで,空軌道の形という観 点から化学反応や分子認識,電磁波や荷電粒 子との相互作用に伴う電子励起過程などの 詳細な理解を目指した研究を展開する。 3. 研究の方法

散乱理論によれば、高速電子の衝突により 被占有軌道 φ_i から空軌道 φ_f へと電子が励起す る過程の遷移行列要素 $M_{\rm fi}(\mathbf{K})$ は、近似的に励 起に関与する軌道の積 $\varphi_i^* \varphi_f$ のフーリエ変換 で与えられる。

$$M_{fi}(\boldsymbol{K}) = \langle \varphi_f(\boldsymbol{r}) | \exp(i\boldsymbol{K} \cdot \boldsymbol{r}) | \varphi_i(\boldsymbol{r}) \rangle$$

K は標的分子が入射電子から受け取る運動量 (移行運動量)を示す。ここで、散乱前後の エネルギー変化から任意の軌道間の電子遷 移を選択し、それに対する EELS 断面積をベ クトル Kの関数として三次元的に観測すれば、 測定結果より軌道の積 φ^{*} φ を運動量空間で 再構築することができる。さらに EMS 研究 などで蓄積されてきた被占有軌道のデータ と組み合わせることで、空軌道そのものを求 めることも可能となるだろう。

上記の発想に基づき空軌道のイメージン グを行うためには、通常の EELS 法をさらに 発展させた実験手法の開発が必要となる。な ぜなら、従来の実験ではランダムに空間配向 した気相分子を標的としているため、得られ る測定結果は分子の方向に対して空間平均 されており、EELS 断面積に本来含まれる異 方的な分子軌道の形に関する情報が失われ てしまうためである。

通常の EELS 実験では、電子線を標的分子 (AB)に照射し、非弾性散乱された電子の強度 分布を散乱前後のエネルギー変化である損 失エネルギーE (= E_0 - E_s)と運動量変化である 移行運動量K (= k_0 - k_s)の関数として測定する。

 $AB + e_0^-(E_0, k_0) \rightarrow AB^* + e_s^-(E_s, k_s)$ 損失エネルギーから特定の軌道間の励起を 選択し、それに対する遷移強度を移行運動量 の大きさ K(=|K|)の関数として測定できる。こ こでスカラー量 Kを用いるのは、標的気相分 子のランダムな空間配向によって、測定から 得られる散乱断面積が空間平均されたもの となってしまうためである。

通常の電子エネルギー損失分光が持つ"空間平均"の実験的困難を克服するため、電子 衝突により生成した励起分子 AB*の後続解離 過程で生じるフラグメントイオン A⁺に着目 する。AB^{*}が分子回転より十分速やかに解離 を起こせば、A⁺の反跳方向は電子衝突時にお ける分子軸方向と一致する。この axial recoil 近似を利用して、解離イオンと散乱電子を同 時に計測することで、分子配向を規定して EELS 断面積を測定することができる。

本研究では、画像観測型イオン分析器を新たに製作し、既存の角度分解型 EELS 装置に 組み込むことで、非弾性散乱電子と解離イオ ンとの同時計測システムを構築する。本装置 に基づき、EELS 断面積を分子座標系におい て3次元観測するための基盤技術の確立を目 指した。こうした新規手法の開発に加え,電 子励起状態に応じて EELS 断面積が特徴的な K 依存性を示す性質を利用することで,分子 振動を介した電子状態間のカップリングを 視覚的に捉える手法を考案し,電子励起にお ける振電相互作用効果の研究を行った。

4. 研究成果

(1) 解離イオン同時計測 EELS 装置の開発 本研究で製作した実験装置の模式図を図 1に示す。電子銃で生成した高速電子線を散 乱点で試料ガスと交差させ,角度 0方向に非 弾性散乱された電子を半球型電子分析器で エネルギー分析した後,位置敏感型検出器で 計測する。半球型電子分析器と位置敏感型検 出器を組み合わせたエネルギー分散型電子 分析器の導入により,一定のエネルギー範囲 に亘って散乱電子を一挙に計測することが でき,既存の装置に比べ約一桁の検出効率の 向上を達成した。励起分子の後続解離過程に よって生じる解離イオンは, 散乱点上方に設 置した画像観測型イオン分析器を用いて計 測する。散乱点より放出された解離イオンは, 分析器内に入射すると平行電場によって散 乱面に対し垂直方向へ加速される。加速され たイオンは飛行管を通過した後、二次元検出 器に到達する。イオンの飛行時間と二次元検 出器上での到達位置から,その初期運動量を 決定でき,電子衝突時における分子軸の方向 がわかる。半球型電子分析器と画像観測型イ オン分析器は,研究所付属機械工場の技術職 員との連携のもと、新たに製作した。





これら分析器を組みあわせ,散乱電子と解 離イオンとの同時計測実験を行った。こうし た実験から得られる測定結果には,同じ事象 で生成した二粒子を観測する真の同時計測 信号だけでなく,異なる事象で生成した電子 とイオンとが偶然近い時間間隔で検出され る偶発信号も含まれる。同時計測実験では, 同じ事象で生成したペアを正確に対応づけ, 偶発信号の割合を減らすことがその成功の 鍵となる。そこで、N2の内殻励起を対象とした実験を行うことにより、最適な測定条件を 模索した。内殻励起分子は、オージェ過程を 経由して分子の回転周期よりはるかに短時 間で、ほぼ 100%イオン解離するため、本実 験のテストに絶好である。

測定では、従来の EELS 実験で用いていた 連続電子ビームに代え,電子パルス列を入射 電子として用いた。エネルギー1.5 keV のパル ス電子を窒素ガスに照射し, θ = 6°方向に非 弾性散乱された電子を検出している。散乱電 子は電子パルス発生からおよそ200 ns後に検 出され、次に電子よりもはるかに重い解離イ オンが 5µs 近辺で検出器に到達する。その後, 散乱点下部に設置した電極に電圧を印加し, 散乱点近傍に残存する親イオンなどの測定 対象以外の荷電粒子を全て排除した。この手 順を1セットとして、全てのイオンを検出し 終えた後、次の電子パルスを照射するという 操作を繰り返す。本手順で検出された電子と イオンは同じ電子パルスで生成したものに 限定されるため,連続電子ビームを用いた場 合に比べ, 偶発信号の割合を格段に減少でき る。

同時計測実験より得られた解離イオンの 飛行時間(TOF)スペクトルを図2に示す。



図2:解離イオンの飛行時間スペクトル (A)散乱電子と同期したイオン信号と (B)偶発信号の寄与。

電子パルス発生を基準としたイオンの検出 時刻を横軸にとり、その検出数をプロットし た。イオンと同時計測した散乱電子のエネル ギーより, N 1s 内殻軌道から π^{*}軌道に電子励 起した事象のみを選別している。5us 付近の ピークが N⁺解離イオンの検出によるもので ある。図には、異なる電子パルスから生成し た散乱電子と解離イオンとを計測した事象 から見積もった偶発信号の寄与も併せて示 している。一つの電子パルスによって生成さ れた電子とイオンを検出した事象から構成 した TOF スペクトルは, 偶発事象から構成し た結果よりも大きな強度を示している。この ことは、本測定により真の信号を観測するこ とができた確かな証左である。偶発信号の寄 与を差し引くことで、N₂内殻励起から生成し た非弾性散乱電子と解離イオンとの真の同 時計測信号を得ることができる。

得られた結果を用いて,予備的な解析を試

みた。本解析では、N⁺イオンの飛行時間と二 次元検出器上での到達位置から、その初期運 動量ベクトルを求め、電子衝突時における標 的分子の分子軸方向を特定する。ここでは、 散乱面に対する垂直軸から 60° 傾いた N_2 分子 に電子が衝突した事象を選別し、方位角 φ に 対する EELS 断面積の角度依存性(図3(a)を 参照)を求めた結果を図3(b)に示す。分子軸 方向の散乱面への射影が、移行運動量ベクト ルと平行になる場合を角度の基準($\varphi = 0^{\circ}$) とした。明確な角度依存性が現れていること がわかる。本結果は、電子衝突時における分 子の配向方向に依存した電子散乱断面積を 観測したことに相当する。

内殻電子の空間的広がりが小さいことか ら, Kがそれほど大きくない本実験条件では 双極子近似($\exp[iK\cdot r$] ~ 1+ $iK\cdot r$)が良く成 り立つと考えられる。そこで,双極子遷移が 支配的であるとの仮定に基づき,EELS 断面積 の ϕ 依存性を求め,実験値と比較することで 測定結果の妥当性を検証した。理論値を図3 (b)に実線として示す。理論値は,分布形状を 良く再現していることがわかる。以上の結果 から,本研究で開発した実験装置により,分 子の配向方向を規定した EELS 断面積を初め て観測できたものと結論した。

さらに、様々な散乱角で同様の測定を繰り 返せば、分子座標系において EELS 断面積の K 依存性を 3 次元的に測定することができる。 本研究で開発した実験装置には、未だ多くの 改良の余地が残されているが、以上の結果は EELS 実験による空軌道イメージングの実現

へ向けた大きな一歩 といえるだろう。本 結果を論文としてま とめるべく,現在, 実験結果の定量的な 解析を進めている。





図3: EELS 断面積の分子配向依存性 (a) 分子軸方向と K ベクトルとの関係と(b) N 1s $\rightarrow \pi^*$ 遷移断面積の ϕ 依存性。

(2) EELS を用いた振電相互作用効果の研究 分子振動と電子運動の相関,すなわち振電 相互作用が,分子の電子励起過程にしばしば 顕著な影響を与えることが知られている。光 学スペクトルに現れる禁制線の存在が,その 端的な例といえよう。禁制線の出現は,分子 振動にともなう電子波動関数の歪みにより 選択則が破れた結果である。こうした振電相 互作用効果は、スペクトルの解釈などの分光 学的興味に加え、その影響が分子の振動状態 に強く依存することから、プラズマ中や上層 大気中といった、分子の多くが振動励起した 高温環境下における化学反応を理解するた めの鍵となっている。

有名な Herzberg-Teller 展開によれば,振電 相互作用の本質は分子振動を介した電子状 態間のカップリングとして理解される。核変 位によって生じるポテンシャルの変化が相 互作用として働き,異なる電子状態を結びつ けるわけだ。電子励起過程において,混入し た電子状態への遷移から強度を貰い受ける, いわゆる intensity borrowing としてその寄与 が遷移強度へ現れることから,分子振動を介 した電子状態間のカップリングを実験的に プローブできれば,振電相互作用効果に関し て詳細な議論を展開することが可能になる だろう。

本研究において我々は、電子散乱実験にお ける入射電子から標的分子への運動量移行 K を新たなパラメータとして振電相互作用研 究に導入することで,電子状態間のカップリ ングを視覚的に捉えることが可能になると の着想を得た。EELS によれば、個々の電子 遷移に対する電子散乱断面積を移行運動量 の関数として観測できる。EELS 断面積は標 的始状態から終状態への遷移行列要素を含 む一般化振動子強度(GOS)に比例するが, この量は標的分子の電子励起状態に応じて 特徴的な K 依存性を示すため, その分布形状 を調べることで電子状態間のカップリング を論じることができるのである。例えば、あ る励起状態Aに別の状態Bがカップルした場 合, GOS の K 依存性は、これら状態への遷移 に対する分布の重ね合わせとして近似的に 与えられるだろう。こうした着想に基づき, 幾つかの分子の価電子励起における振電相 互作用効果を調べた。ここでは、CF4 に対す る結果〔雑誌論文#5,9〕を示す。

E = 12.6 eVに現れる CF_4 の $1t_1 \rightarrow 3s$ 遷移に ついて, GOS 分布の実験値と理論計算との比 較を図4に示す。理論的な GOS 分布の計算 には, 電子相関を高度に取り込んだ EOM-CCSD レベルの波動関数を用いた。運動 量移行の大きさがゼロとなる極限において, GOS は光吸収断面積に比例する光学的振動 子強度に収束することが知られており,一般 に運動量原点 (K = 0) で最大値をとる分布が 観測された場合,その遷移は双極子許容であ ると解釈される。ところが,本遷移は双極子 禁制であるにもかかわらず,許容遷移に特有 の分布形状が観測された。分子の対称性に基 づく考察によれば,禁制遷移の GOS は運動 量原点で強度を持ち得ない。実際,平衡核配





置を仮定して行った理論計算の結果(図中点 線)は期待通りの分布を示しており,低移行 運動量領域において実験と理論の間に顕著 な相違が現れている。この理論計算からの乖 離こそが,振電相互作用によって混入した他 の電子状態の寄与であると考えられる。そこ で,実験と理論計算との差を取ることでその 寄与を抜き出し,分布形状から混入した電子 状態の特定を試みた(図4挿入図)。得られ た結果は本遷移に隣接した13.8 eVの¹T₂遷移 に対する GOS 分布と形状がよく一致してお り,分子振動を介して¹T₂状態がカップルし たことを明確に示している。

より定量的に議論するため,分子振動の影響を考慮した理論計算を行った。我々は, (1)分子振動を調和振動子として扱えるこ と,および(2)電子遷移行列が原子核の変 位に応じてあまり急激には変化しないこと, という二つの条件を仮定した場合,分子振動 を考慮した GOS が近似的に次式で表せるこ とを示した〔雑誌論文#5〕。

$$f(K) = \frac{2E}{K^2} \left[M_{f0}(K, \boldsymbol{\theta}) + \sum_{L} \left\langle \boldsymbol{\xi}_{vL} \left| M_{f0}(K, \boldsymbol{Q}_L \hat{\boldsymbol{q}}_L) - M_{f0}(K, \boldsymbol{\theta}) \right| \boldsymbol{\xi}_{vL} \right\rangle \right],$$
$$M_{f0} = \frac{1}{4\pi} \int \left| \left\langle \Psi_f(\boldsymbol{r}; \boldsymbol{\varrho}) \right| \sum_{i} \exp(i\boldsymbol{K} \cdot \boldsymbol{r}_i) \Psi_0(\boldsymbol{r}; \boldsymbol{\varrho}) \right\rangle \right|^2 d\Omega_K$$

ここで、 Q_L は基準振動の座標、 ξ_{VL} は対応する振動の波動関数を表す。本式の第一項は平衡核間配置における分子のGOSに対応しており、第二項が分子振動の寄与である。

得られた計算結果を実線で示す。低移行運動量領域の強度が大幅に増加し、実験を完全に再現している。我々の用いた手法により、 GOS に対する分子振動の寄与を定量的に評価できることがわかった。ここで、CF4 がもつ4つの基準振動について考えてみよう。用 いた計算法によれば、分子振動の影響は個々 の基準振動の寄与の和として与えられるた め、それらを個別に評価できる。個々の振動 モードの関与を調べた結果、本遷移において 非対称伸縮振動の影響が支配的であること が明らとなった。以上の結果は、分子の対称 性に関する以下の考察により理解できる。

本遷移に隣接する 13.8eV の励起バンドは 4 $t_2 \rightarrow 3s$ および 1 $t_1 \rightarrow 3p$ の双極子許容遷移に 帰属されており,その電子終状態は ${}^{1}T_2$ 状態 である。一方,今考えている 1 $t_1 \rightarrow 3s$ 遷移の 励起終状態は ${}^{1}T_1$ であるが,非対称伸縮振動 によって分子の対称性が T_dから C_{2v} へと低下 することで,三重に縮退していた ${}^{1}T_2$ と ${}^{1}T_1$ 状態は,それぞれ ${}^{1}A_1$, ${}^{1}B_1$, ${}^{1}B_2$ 状態と ${}^{1}A_2$, ${}^{1}B_1$, ${}^{1}B_2$ 状態に分裂する。その結果, ${}^{1}B_1$ と ${}^{1}B_2$ 成 分がどちらも相互作用可能となり,4 $t_2 \rightarrow 3s$ および 1 $t_1 \rightarrow 3p$ 遷移からの intensity borrowing が起こったものと考えられる。

同様の機構に基づく禁制遷移の強度増大 は、CF₄に限らず正四面体型分子一般に起こ り得る。実際,正四面体構造を有する SiF₄の HOMO-LUMO 遷移においても,双極子禁制 でありながら許容遷移に特有の GOS 分布を 示すことが報告されているが,これも非対称 伸縮振動を介した intensity borrowing に由来 していると考えることができよう。本研究で 用いた手法は,様々な分子の価電子励起にお いて振電相互作用効果が果たす役割の解明 に大きく貢献できる。以上の成果は,国際会 議の招待講演としても採択された〔学会発表 #1,7〕。

5. 主な発表論文等

(研究代表者,研究分担者及び連携研究者に は下線)

〔雑誌論文〕(計10件)

- D. B. Jones, M. Yamazaki, <u>N. Watanabe</u>, M. Takahashi, Molecular-frame (e,2e) experiment for N₂ at large momentum transfer, *Physical Review A*, 査読有, 87 巻, 2013 年, 022714-1-5, DOI: 10.1103/PhysRevA.87.022714
- D. B. Jones, M. Yamazaki, <u>N. Watanabe</u>, M. Takahashi, Electron-impact ionization of N₂ at large momentum transfer above the double-ionization threshold, *Physical Review A*, 査読有, 86 巻, 2012 年, 062707-1-7, DOI: 10.1103/PhysRevA.86.062707
- N. Watanabe, M. Yamazaki, M. Takahashi, Vibrational effects on valence electron momentum distributions of ethylene, *The Journal of Chemical Physics*, 査読有, 137
 巻, 2012 年, 114301-1-8, DOI: 10.1063/1.4752653

④ <u>N. Watanabe</u>, X. J. Chen, M. Takahashi,

Interference Effects on (e, 2e) Electron Momentum Profiles of CF₄, *Physical Review Letters*, 査読有, 108 巻, 2012 年, 173201-1-5, DOI: 10.1103/PhysRevLett.108.173201

- ⑤ <u>N. Watanabe</u>, D. Suzuki, M. Takahashi, Vibronic effects on the 1t₁ → 3s Rydberg excitation in CF₄ induced by electron impact, The Journal of Chemical Physics, 查読有, 134 巻, 2011 年, 234309-1-7, DOI: 10.1063/1.3601873
- (6)M. Yamazaki, H. Satoh, M. Ueda, D. B. Jones, Y. Asano, N. Watanabe, A. Czasch, O. Jagutzki, M. Takahashi, A highly sensitive electron momentum spectrometer incorporating a multiparticle imaging detector, Measurement and Science Technology, 查読有, 22 巻, 2011 年, 075602-1-13, DOI: 10.1088/0957-0233/22/7/075602
- ⑦ <u>N. Watanabe</u>, M. Takahashi, Carbon 1s electron momentum spectroscopy of CF₄, 査 読有, 44 巻, 2011 年, 105201-1-6, DOI: 10.1088/0953-4075/44/10/105201
- ⑧ 山崎優一,<u>渡邉昇</u>,高橋正彦,物質内電子 運動の可視化法の開発と反応性・機能性 の起源の解明,マテリアルインテグレー ション,査読無,24巻,2011年,123-127
- <u>N. Watanabe</u>, D. Suzuki, M. Takahashi, Experimental and theoretical study on generalized oscillator strengths of the valence-shell electronic excitations in CF₄, The Journal of Chemical Physics, 査読有, 134 巻, 2011 年, 064307-1-12, DOI: 10.1063/1.3549135
- D. B. Jones, M. Yamazaki, <u>N. Watanabe</u>, M. Takahashi, Electron-impact ionization of the water molecule at large momentum transfer above the double-ionization threshold, Physical Review A, 查読有, 83 巻, 2011 年, 012704-1-8, DOI: 10.1103/PhysRevA.83.012704

〔学会発表〕(計 38 件)

- <u>N. Watanabe</u>, T. Hirayama, D. Suzuki, M. Takahashi, Angle-Resolved EELS Study of Vibronic Effects on Valence-Shell Electronic Excitations in Molecules, 10th Asian International Seminar on Atomic and Molecular Physics (招待講演), 2012 年 10 月 27 日, 台北, 台湾
- <u>渡邉昇</u>,山崎優一,高橋正彦,エチレンの電子運動量分布に対する分子振動の影響,第6回分子科学討論会,2012年9月18日,東京
- ③ <u>N. Watanabe</u>, T. Hirayama, D. Suzuki, M. Takahashi, Vibronic effects on the

valence-shell electronic excitations in CF₄ and CO₂ induced by electron impact, 28th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics, 2012 年 6 月 8 日, 福岡

- ④ 渡邉昇, 片渕啓介, Xiangjun Chen, 高橋正彦, 高速電子衝撃イオン化における 多中心干渉効果: CF₄ と CCl₄の電子運動 量分布, 日本物理学会第 67 回年次大会, 2011 年 3 月 24 日, 西宮
- ⑤ 渡邉昇,平山司,鈴木大介,高橋正彦, 角度分解型 EELS を用いた CO₂ の価電 子励起の研究,日本物理学会2011 年秋季 大会,2011 年9月21日,富山
- ⑥ 渡邉昇,山崎優一,高橋正彦,高速電子 衝撃実験で探る分子の電子状態,化学系 学協会東北大会 物理化学コロキウム (招待講演),2011年9月17日,仙台
- ⑦ <u>N. Watanabe</u>, Angle-resolved electron energy loss spectroscopy study on the valence-shell electronic excitations of molecules, *14th Asian Chemical Congress 2011* (招待講演), 2011 年9月6日, バンコク, タイ
- <u>N. Watanabe</u>, M. Takahashi, Binary (e,2e) study of multi-center interference effects on electron momentum densities of CF₄ and CCl₄, *International Symposium on (e,2e)*, *Double Photoionization and Related Topics* (招待講演), 2011 年 8 月 5 日, ダブリン, アイルランド
- <u>渡邉昇</u>,配向分子の電子エネルギー損失 分光による励起分子の電子状態の研究, *山田科学振興財団* 2011 年度研究交歓 会(招待講演),2011 年5月28日,東京
- <u>渡邉昇</u>、鈴木大介、高橋正彦,角度分解 型 EELS を用いた CF₄の価電子励起の 研究,日本物理学会 2010 年秋季大会, 2010 年9月 26日,大阪
- <u>N. Watanabe</u>, M. Takahashi, EMS study on the satellite transitions of the neon and argon valence shells, *International Workshop on Frontiers of Electron Momentum Spectroscopy 2010* (招待講演), 2010 年 9 月 9 日, 仙台
- 12 <u>N. Watanabe</u>, D. Suzuki, M. Takahashi, Valence shell electronic excitations of CF₄ studied by angle-resolved electron energy loss spectroscopy, *第26 回化学反応討論会*, 2010 年 6 月 4 日,東広島
- 6. 研究組織
- (1)研究代表者
- 渡邉 昇 (WATANABE NOBORU)東北大学・多元物質科学研究所・准教授研究者番号:90312660