

令和 4 年 6 月 28 日現在

機関番号：11301  
研究種目：基盤研究(B) (一般)  
研究期間：2018～2021  
課題番号：18H01932  
研究課題名(和文) フリーラジカルの分子軌道イメージング

研究課題名(英文) Molecular orbital imaging of radical species

研究代表者

渡邊 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

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 11,700,000円

研究成果の概要(和文)：最高被占有軌道などの特定の分子軌道の形が、分子の示す反応性や機能性を強く支配することが知られている。本研究では、反応で重要な役割を果たす不安定化学種や振動励起分子の分子軌道形状を可視化する測定法の開発に取り組んだ。熱解離で生成した化学種の電子運動量分光実験が可能であることを実証するとともに、振動励起に応じた分子軌道形状の歪みをとらえることに成功している。これにより、主として安定基底状態を対象に行われてきた分子軌道イメージング研究を、励起分子にまで展開する見通しが得られた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

種々の化学反応を牽引するラジカル等の不安定化学種を対象とした電子挙動に関する研究は、現在、量子化学計算の独壇場となっている。しかしながら、計算で得られる結果の正しさには疑問が残る。確かに安定分子に対しては高精度な理論予測が可能となってきたが、化学結合の開裂で生成した高活性化学種は一般に大きな内部エネルギーをもち、高い振動励起状態にあるので、核運動と電子運動との相関が無視できず安定分子の平衡核配置近傍とは状況が大きく異なっているためである。この課題に対し、本研究では不安定化学種の分子軌道形状を実験的に可視化するという、新たな研究の道をひらいた。

研究成果の概要(英文)：It is known that the reactivity and functionality of molecules are strongly governed by the shape of certain molecular orbitals, such as the highest occupied orbital. In this study, we have attempted to develop a method to visualize the molecular orbital shapes of unstable chemical species, which play important roles in chemical reactions and vibrationally excited molecules. We have demonstrated the feasibility of electron momentum spectroscopy experiments on chemical species formed by thermal dissociation, and also succeeded in capturing the distortion of molecular orbitals in response to vibrational excitation. This study has opened up the prospect of extending molecular orbital imaging research, which has been conducted mainly on stable ground states, to excited molecules.

研究分野：物理化学

キーワード：原子・分子物理 電子分光

## 様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

分子の反応性は価電子軌道の形に強く支配される。ラジカル反応はその端的な例といえよう。光吸収や熱エネルギーによる安定分子の解裂で生成する  $\text{CH}_3$  や  $\text{OH}$  などのフリーラジカルは、強い化学活性を有し、大気中の光化学反応や燃焼反応などの様々な連鎖反応を担うドライビングフォースとなっている。これら化学種がもつ高い反応性は共有結合の切断で生じた対電子に起因するが、高活性と謂えどもラジカルが相手分子の任意の結合部位にアタックするわけではない。ハロゲンラジカルのアルケンへの付加が水素のより少ない炭素側で起こることは、逆マルコフニコフ則としてよく知られた事実である。このように反応が起こる位置には選択性があり、それが反応の経路や生成物を決めている。分子軌道の“かたち”が反応に大きく影響し、位置選択性を与えるためである。以上のことは、反応を支配する電子波動関数の形状を実験的に可視化できれば、多様なラジカル反応をその起源から明らかにできることを強く示唆している。

現在、ラジカルのような不安定化学種の電子波動関数形状に関する研究は、量子化学計算の独壇場となっている。しかしながら、計算で得られる結果の正しさには疑問が残る。確かに安定分子に対しては高い精度による理論予測が可能となってきたが、分子解離で生成したラジカルは一般に大きな内部エネルギーをもち、高い振動励起状態にあるため、核運動と電子運動との相関が無視できず安定分子の平衡核配置近傍とは状況が大きく異なっている。果たしてこのような系でも既存の理論的枠組みで分子の性質を十分に説明できるものであろうか。この問いに答えるためには、実験的な電子波動関数の観測が有効である。反応の最前線にあるラジカルの電子波動関数形状を、近似理論に頼らず“実験的にみる”ことが出来るようになれば、ラジカル反応研究へブレークスルーをもたらすだろう。

### 2. 研究の目的

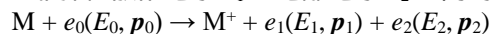
本研究の最大の目的は、電子線コンプトン散乱実験の発展形である電子運動量分光法 (EMS) [1] に基づき不安定化学種の分子軌道形状を可視化する手法を開発することで、電子波動関数形状の観点からラジカル連鎖反応を理解する研究法を構築することにある。さらに、結合開裂で生じる解離化学種の多くは高い振動励起状態にあることから、核運動が電子波動関数形状へ与える影響を明らかにして行くことも本研究の課題とした。

ラジカルの分析は 1971 年にノーベル化学賞を受賞した Herzberg による先駆的分光研究を嚆矢とする。その後、ラジカルを対象とした分光研究は大きな発展を遂げ、振動・回転スペクトルの精密測定により安定構造とその振動準位が詳らかにされてきた。一方、これら化学種がもつ反応性の由来を解き明かして行くためには、反応を駆動する分子内電子の振る舞いが鍵となる。そこで、これまでの分光研究では取り上げられることの極めて少なかった分子軌道形状に光をあてることで、多様なラジカル反応の駆動原理を明らかにして行くことを目指し、研究を開始した。

### 3. 研究の方法

分子軌道は、今や自然科学の広範な分野における基礎的概念になっている。その最大の理由は、反応性など分子の性質の多くが HOMO (最高被占有軌道) などの特定の分子軌道の形状により決まることであろう。このため分子軌道の実験観測は以前より試みられてきており、中でも高速電子衝撃イオン化実験である EMS は約半世紀もの歴史を持つ。近年でも光電子角度分布を用いた表面吸着分子の分子軌道観測 [2] 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” [3] などが提案されてきており、分子軌道の形を正確に知ることは自然科学の中心的課題となっている。しかしながら、分子軌道観測の研究対象の殆どは安定分子であり、フリーラジカルへの適用は成されて来なかった。化学的に活性で安定に存在しないラジカルでは高い試料密度が得られず、既存の測定法では検出感度が不十分であったがためである。

上記の実験的困難の克服を目指し、広いエネルギーと運動量領域にわたって一挙に荷電粒子を計測する画像観測法を駆使した高感度 EMS 装置を利用する。ここで用いる電子運動量分光は、電子衝撃イオン化で生成した非弾性散乱電子  $e_1$  と電離電子  $e_2$  を同時計測する実験手法である。



散乱前後のエネルギー保存則より求まる束縛エネルギー  $E_{\text{bind}} (= E_0 - E_1 - E_2)$  から特定の軌道を選択でき、運動量保存則からその軌道に属する電子がイオン化以前にもっていた運動量  $\mathbf{p} (= \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_0)$  がわかる。散乱理論によれば、EMS 断面積 ( $\sigma_{\text{EMS}}$ ) は標的電子が属していた分子軌道  $\varphi(\mathbf{r})$  のフーリエ変換の二乗振幅 (即ち、電子運動量分布) に比例するため、運動量空間において個々の分子軌道を可視化できる。

$$\sigma_{\text{EMS}} \propto |\psi(\mathbf{p})|^2, \quad \psi(\mathbf{p}) = (2\pi)^{-3/2} \int \exp(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}.$$

安定分子を対象とした従来の EMS 研究を不安定化学種の分子軌道イメージング法へと発展させるべく、加熱により試料分子を熱解離させることで不安定化学種を生成する高温ノズルを開発した [4]。SUS 製のノズル本体は、その内部に設置した高ワット数 (250W) のハロゲンランプに

より 1,000 K 程度まで昇温出来る。ノズル内に導入された気相分子は熱解離した後、内径 0.4 mm の穴より反応領域へ噴出する。このとき、ハロゲンランプへ通電することで生じる磁場が入射・散乱電子の運動を歪めることから、5 秒間隔で周期的にランプの ON・OFF を繰り返し、OFF 時に検出された電子の信号のみを記録することで、磁場の影響を防いだ。

#### 4. 研究成果

##### (1) 振動励起に伴う分子軌道形状の歪み観測

熱解離化学種の測定に先立ち、開発した高温ノズルを利用して振動励起分子の EMS 測定を行った。分子内の電子運動を考える場合、一般に、質量の大きな原子核は平衡位置に静止していると仮定される。実際、この平衡核配置近似は、EMS 研究でも長く用いられてきた。しかしながら、近年の研究により振動基底状態にある分子においてさえ、分子振動にともなう微小な核変位が分子軌道形状へ顕著な影響を与える場合のあることが示されている [5-7]。温度上昇により分子振動が励起されれば、核変位が増幅され、電子波動関数への影響は更に大きくなるだろう。種々の化学反応はしばしば高温環境下で起こり、関与する分子は振動・回転励起している。また、連鎖反応を牽引する解離化学種の多くは高い内部エネルギーを有しており、高振動励起状態にある。このような状況下にある分子の性質理解には、振動励起が電子運動へ与える影響に対する知見が重要となることは想像に難くない。

以上の背景の下、ジメチルエーテルを対象に室温 (300 K) と高温条件 (980 K) で EMS 実験を行った。ジメチルエーテルは酸素原子を中心に二つのメチル基が結合した分子であり、21 個の基準振動モードをもつ。中でも二種のメチル基ねじれ振動と C-O-C 変角振動が、980 K までの加熱により主に励起される。

図 1 は最高被占有軌道に対する実験結果である [4]。二つの温度で測定した電子運動量分布を比較すると、運動量が 1 a.u. 以下の領域で加熱により強度が減少している様子が見て取れる。この結果は、振動励起に伴う分子軌道形状の実験観測にはじめて成功したことを意味している。更なる考察のため、低振動数の分子振動の影響まで扱える理論計算法を考案し、電子運動量分布を求めた。図中に実線で示す計算結果は、観測された温度依存性をよく再現している。実験と理論を組み合わせた詳細な検討を行うことで、得られた温度依存性はメチル基のねじれに伴う CH 結合領域での電子分布の変化を反映していることを明らかにしている。本研究により、振動励起に伴う電子波動関数の歪み観測という EMS 研究の新たな方向性が拓かれた。

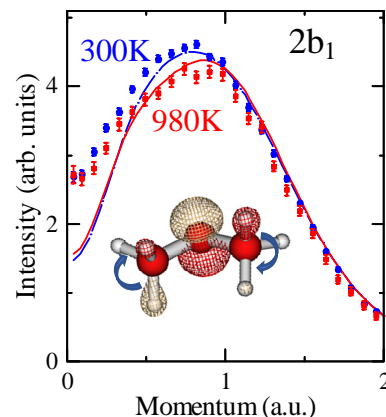


図 1 ジメチルエーテルの振動励起にともなう電子運動量分布の変化

##### (2) 熱解離化学種の EMS 測定

振動励起分子に対する研究過程において高温ノズルを用いた EMS 測定に必要なノウハウが蓄積されたため、これを活用し、熱解離生成物の分子軌道観測へ挑んだ。CF<sub>3</sub>I、メタノールおよびエタノールを対象に測定を試みている。ここでは、メタノールに対する実験の予備的な解析結果を示す。

測定はメタノールが熱解離する 930 K、および室温で行った。図 2 において、得られたイオン化エネルギースペクトルを比較している。室温でのスペクトルには、メタノールがもつ各軌道の束縛エネルギー位置に対応するイオン化バンドが表れている。ここで、加熱により試料分子が解離していれば、標的化学種が異なるためにスペクトルは大きく変化する。実際、930 K での測定結果には大幅な変化が見られ、解離分子の信号を確かにとらえたことが分かる。また、メタノールが存在すれば現れる 12 eV 以下での強度が見られないことから、用いた実験条件でメタノールは完全に解離したと判断できる。メタノールの熱解離では、主に CO、H<sub>2</sub> および H<sub>2</sub>CO の生成が報告されている。これら分子の理論的なイオン化エネルギースペクトルを作成し、実験と比較した結果、実験で見られた最初の二つのピークは、それぞれが CO 5 軌道と H<sub>2</sub> 1s<sub>g</sub> 軌道からのイオン化に対応づけられ、これら分子が観測されたことを示している。一方、H<sub>2</sub>CO がもつ 11 eV 付近での強度は見られず、用いた条件において殆ど生成していない。このことは、H<sub>2</sub>CO は限られた温度領域で少量しか生成しないという熱解離研究の結果と合致している。

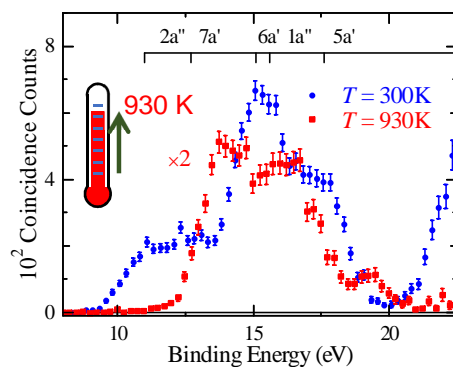


図 2 EMS 測定より求めたメタノールのイオン化エネルギースペクトル

このように、観測された化学種を特定できたものの、用いた理論解析では実験のピーク強度比を再現できなかった。観測した分子が高い振動励起状態にあることが要因の一つと考えられる。用いた理論計算では分子振動を無視し、原子核は平衡配置に停止していると仮定したが、前述のように、結合エネルギーの再分配により解離分子は一般に大きな振動エネルギーをもつ。理論か

らの相違は、分子振動に伴う大きな核変位に応じた分子軌道形状の変化をとらえたことを示唆しており、更なる解析を進めている。

なお、ここで観測された解離化学種は安定分子のみであるが、本測定により解離分子の EMS 実験が可能であることを実証できた。今後は本手法を更に発展させ、解離化学種中の電子運動に関する研究を開拓していく。

### (3) 放電型ラジカルビーム源の製作

熱解離による不安定化学種生成の試みと並行して、放電を用いたラジカルビーム源の開発に取り組み、EMS 装置に組み込んだ。図 3 は製作した放電ノズルの模式図である。ガラス管を介して試料ガスを導入し、その先端に装着した絶縁キャップ中央の穴より噴出させる。噴き出した試料ガスの一部が前方に設置したスキマーを通過し、本体チャンバー内の散乱点へ到達する。ガラス管内に配置した電極へ高電圧を印加することで電極とスキマー間に放電を起こし、通過する分子を励起させることでラジカルビームが得られる。Ar を導入した予備実験で、放電に成功した。その後、EMS で必要な長時間の積算実験に耐える安定な放電条件の保持と、十分な試料密度の達成を目指し、実験条件の精査と装置の改良を進めている。本手法が確立すれば、熱解離では生成が困難な種々のラジカル種に対しても分子軌道形状の観測が可能となるだろう。

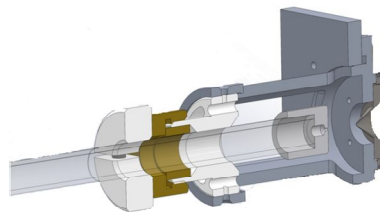


図 3 放電型ラジカルビーム源

### (4) 不揮発性の大型機能性分子に対する EMS 測定

フーリエ変換の性質から、空間的にブロードに広がった位置空間の波動関数は運動量空間で鋭い分布として観測されるため、EMS は化学反応や分子認識において重要な役割を果たす分子の外側へ広がった電子分布に鋭敏であり、このことは、運動量空間において波動関数形状を観測する上で大きな利点となる。反応の最前線たる外側の電子分布に鋭敏であることを利用し、電子運動量分布を分子の薬理作用のスクリーニングへ利用する試みも行われており、運動量空間での電子波動観測は、分子の機能性予測やその起源探索などへ大きな可能性を秘めている。

しかしながら、本分光研究の長い歴史にも拘わらず、測定対象の殆どはサイズの小さな単純分子であり、機能性を示す分子や生体分子などの比較的大きな分子への適用は限られてきた。十分な試料密度を得ることが難しいことが、測定を阻む大きな要因となっている。EMS では気化させた試料を真空チャンバー内で電子ビームと交差させるが、多くの場合、サイズが大きな分子の蒸気圧は低い。例えば、DNA や RNA の構成塩基であるチミンとウラシル、および光異性化反応を起こすトランス-スチルベンの蒸気圧は、水の値よりも数桁も小さく、室温では殆ど気化しないことから、これら分子の EMS 研究は報告されていない。ただ、これら分子も 100 ~ 200 °C 程度まで加熱すれば気化することが分かっており、本研究で開発した高温ノズルを改造して用いれば、これら分子の軌道形状観測が可能になる。

そこで、分子科学において興味を持たれつつも蒸気圧の低さから EMS 実験の対象外となってきた種々の大型分子に対する測定を可能とするための技術構築を目的とし、その第一歩として、高温ノズルを用いたトランス-スチルベンの EMS 測定に取り組んだ。スチルベンエチレンの二つの水素がフェニル基に置き換わった分子であり、光吸収でトランス体からシス体へあたかもスイッチのように構造変化することが知られている。この性質から本分子は多くの関心を集め、これまでに様々な分光研究が報告されてきたが、その蒸気圧の低さから本分子に対する EMS 実験はこれまで報告されていない。

散乱点近くに配置した高温ノズル内へ粉末状のトランス-スチルベンを封入し、90 °C に加熱することで試料を気化させた。最もエネルギー準位の高い 5 つの被占有軌道に対する実験結果を図 4 に示す。なお、エネルギー的に近接した  $3a_u$ 、 $3b_g$  および  $2b_g$  軌道については実験的な分離が不可能な為、それらの和として結果を示している。得られた電子運動量分布は、どれも運動量原点で最小値を持つ“p型”分布をもつ。このような分布形状は p 原子軌道一般にみられるもの

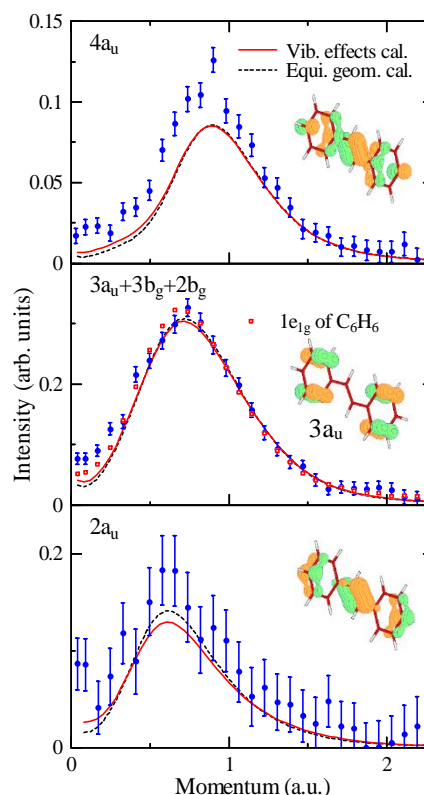


図 4 トランス-スチルベンの電子運動量分布

であり、測定した被占有軌道が炭素 2p 軌道から成る 軌道であるとする帰属に矛盾しない。しかしながら、三つの分布を詳細に比べると、p 型分布であることは共通しているものの最大値の位置が異なっており、イオン化エネルギーの上昇に応じてピークは低運動量側に変位して行く。

分子軌道理論によれば、最高被占有軌道である  $4a_u$  軌道は二つのフェニル基がもつ 軌道とエチレン基の 軌道が反結合的に結びつくことで構成される。一方、 $2a_u$  軌道は上記 軌道が結合的に結びついており、残りの  $3a_u$ ,  $3b_g$ ,  $2b_g$  軌道はフェニル基の 軌道のみで構成された非結合性軌道として帰属される。実際、 $\{3a_u + 3b_g + 2b_g\}$  イオン化バンドの電子運動量分布は、ベンゼン単体の 軌道に対する測定結果と非常に類似しており、上記帰属を支持している。また、量子論において運動量演算子は位置に対する微分演算子で与えられることから、位置空間波動関数の傾きが大きいほど運動量分布は高エネルギー側に大きな強度をもつ。波動関数は一般に節の近傍でその傾きが大きくなることから、 $4a_u$  軌道のピーク位置が非結合性軌道に比べ高運動量側にシフトしているのは、 軌道間の反結合的な結びつきで生じた波動関数の節に起因していると考えられる。一方、節の増加がない結合性の  $2a_u$  軌道では、エチレン基の 軌道が比較的大きな低運動量成分をもつことから、その寄与により非結合性軌道に比べて低運動量側にピークをもつ。以上の解析結果は、 軌道の電子運動量分布に見られるピークの位置が軌道の結合性を反映することを明確に示している。

今後、本研究で開発した不揮発性分子の導入法を、現在開発が進められている高分解能電子分析機器と組み合わせれば、運動量空間分子軌道イメージングの対象を様々な生体分子や大型機能性分子にまで広げることが可能になるであろう。

#### (5) 励起分子軌道イメージング

ラジカル生成の前段階にある励起分子の性質理解には、励起分子軌道の形が鍵を握る。電子衝突により被占有軌道から空軌道へ電子が励起する確率は、これら軌道間の積に対するフーリエ変換で記述されるため、そこには軌道形状の情報が刻み込まれている。このため、電子散乱実験は励起軌道観測へ絶好の機会を与えるが、通常の測定法では標的気相分子のランダム配向により測定結果は空間平均され、分子軌道の異方的形状に関する情報が失われていた。この実験的困難に対し、我々は不安定励起分子の後続解離で生じる解離フラグメントの放出方向が分子軸方向と一致する性質を利用して、分子配向を規定して測定を行う手法を開発してきた。本手法を発展的に用い、励起分子の立体形状を観測する新たな手法の確立を目指している。例として、 $O_2$  の  $2\sigma_g \rightarrow 1\pi_g$  遷移に対する電子散乱断面積の分子軸方向依存性を示す (図 5)。移行運動量ベクトルの方向を基準とした角度分布は、励起  $1\pi_g$  軌道の形状を反映して分子軸と並行および垂直方向で最小値をとる特徴的な形状を示している [8]。

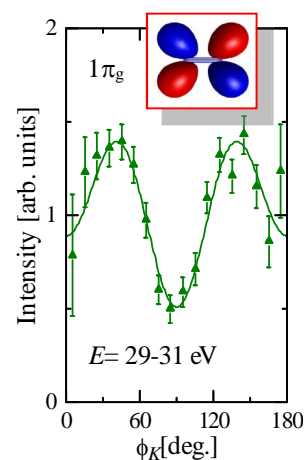


図 5  $O_2$  の  $2\sigma_g \rightarrow 1\pi_g$  遷移に対する電子散乱断面積の分子軸方向依存性

#### < 引用文献 >

1. E. McCarthy and E. Weigold, Electron momentum spectroscopy of atoms and molecules, Rep. Prog. Phys., 54 巻, 1991, 789-879.
2. P. Puschnig *et al*, Reconstruction of Molecular Orbital Densities from Photoemission Data, Science, 326 巻 2009, 702.
3. J. Itatani *et al*, Tomographic imaging of molecular orbitals, Nature, 432 巻, 2004, 867-871.
4. N. Watanabe, K. Takahashi, K. Sato, M. Takahashi, Temperature-dependent electron momentum spectroscopy on the molecular orbitals of dimethyl ether, J. Phys. Chem. A, 124 巻, 2020, 10258-10265.
5. N. Watanabe, M. Yamazaki, M. Takahashi, Vibrational effects on valence electron momentum distributions of ethylene, J. Chem. Phys., 137 巻, 2012, 114301.
6. N. Watanabe, M. Yamazaki, M. Takahashi, Vibrational effects on valence electron momentum distributions of  $CH_2F_2$ , J. Chem. Phys., 141, 2014 巻, 244314.
7. N. Watanabe, K. Sato, M. Takahashi, Electron momentum spectroscopy study on the valence electronic structure of methyl formate, J. Chem. Phys. 150 巻, 2019, 194306.
8. N. Watanabe, S. Yamada, M. Takahashi, ( $e$ ,  $e$  + ion) study on electron-induced dissociative ionization of  $O_2$ , Phys. Rev. A, 99 巻, 2019, 022704.

## 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 2件）

1. 著者名 Noboru Watanabe, Keita Takahashi, Kimihiro Sato, and Masahiko Takahashi	4. 巻 124
2. 論文標題 Temperature-Dependent Electron Momentum Spectroscopy on the Molecular Orbitals of Dimethyl Ether	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 10258 ~ 10265
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.0c08799	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 53
2. 論文標題 Generalized oscillator strengths of low-lying electronic excitations in acetylene	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics	6. 最初と最後の頁 075202-1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-6455/ab6cc5	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 100
2. 論文標題 Revisiting electron-correlation effects on valence shake-up satellites of neon	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review A	6. 最初と最後の頁 032710-1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/physreva.100.032710	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, Hirayama Tsukasa, Takahashi Masahiko	4. 巻 99
2. 論文標題 Vibrational effects on electron-impact valence excitations of SF6	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review A	6. 最初と最後の頁 062708-1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/physreva.99.062708	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, Sato Kimihiro, Takahashi Masahiko	4. 巻 150
2. 論文標題 Electron momentum spectroscopy study on the valence electronic structure of methyl formate	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 194306-1-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5097201	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 152
2. 論文標題 Forward-backward asymmetry in electron impact ionization of CO	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 164301-1-7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0006256	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, Yamada So, Takahashi Masahiko	4. 巻 99
2. 論文標題 (e,e+ion) study on electron-induced dissociative ionization of O <sub>2</sub>	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review A	6. 最初と最後の頁 022704-1-11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevA.99.022704	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14件 (うち招待講演 4件 / うち国際学会 8件)

1. 発表者名 渡邊昇
2. 発表標題 電子散乱分光で探る分子内電子挙動
3. 学会等名 第7回森野ディスカッション (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Keita Takahashi, Kimihiro Sato, Noboru Watanabe, and Masahiko Takahashi
2. 発表標題 Vibrational effects on the electron momentum distributions of dimethyl ether at high temperatures
3. 学会等名 The 2nd edition of the International Symposium of CEFMS-NCTU, RCAS-AS (Taiwan) and 5-star Alliance (Japan) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Noboru Watanabe, So Yamada, and Masahiko Takahashi
2. 発表標題 Relation between the spatial shape of excited molecular orbital and molecular-frame electron scattering cross section
3. 学会等名 XXXI International conference on photonic, electronic, and atomic collisions, Deauville (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Filippo Morini, Noboru Watanabe, Masataka Kojima, Michael Simon Deleuze, and Masahiko Takahashi
2. 発表標題 Dynamical investigation of the electron momentum distributions of adamantane
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 2019年

1. 発表者名 渡邊昇、平山司、高橋正彦
2. 発表標題 電子散乱分光を用いたSF6の価電子励起における振電相互作用効果の研究
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年



1. 発表者名 Noboru Watanabe, Masahiko Takahashi
2. 発表標題 Stereodynamics in electron-impact ionization of molecules studied by molecular-frame electron energy loss spectroscopy
3. 学会等名 The international Conference on Many Particle Spectroscopy of Atoms, Molecules, Clusters and Surfaces, Budapest, Hungary (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Noboru Watanabe, Masahiko Takahashi
2. 発表標題 Stereodynamics in electron-impact ionization of diatomic molecules studied by (e, e <sup>+</sup> ion) spectroscopy
3. 学会等名 13th Asian International Seminar on Atomic and Molecular Physics, Mumbai, India (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Noboru Watanabe, Masahiko Takahashi
2. 発表標題 Stereodynamics in electron-impact ionization of diatomic molecules studied by electron-ion coincidence spectroscopy
3. 学会等名 International Workshop on Atomic and Molecular Collisions, Udaipur, India (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Noboru Watanabe, So Yamada, Masahiko Takahashi
2. 発表標題 (e, e <sup>+</sup> ion) study on electron-induced dissociative ionization of O <sub>2</sub>
3. 学会等名 13th Asian International Seminar on Atomic and Molecular Physics, Mumbai, India (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Noboru Watanabe, So Yamada, Masahiko Takahashi
2. 発表標題 Electron-ion coincidence study on electron-induced dissociative ionization of O <sub>2</sub>
3. 学会等名 34th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics, Kizugawa (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 佐藤公洋, 渡邊昇, 高橋正彦
2. 発表標題 ホルムアミドの電子運動量分光: 大振幅振動の分子軌道形状への影響と高温実験への展開
3. 学会等名 第12回分子科学討論会, 福岡
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 佐藤公洋, 渡邊昇, 高橋正彦
2. 発表標題 高温分子線源を用いた振動励起分子の電子運動量分光
3. 学会等名 第18回東北大学多元物質科学研究所研究発表会, 仙台
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔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
---------	---------