

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 5 月 23 日現在

機関番号：11301

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2013～2015

課題番号：25620006

研究課題名(和文)電子非弾性散乱における干渉現象を利用した電子波動関数の位相プローブ法の開発

研究課題名(英文) Development of a method to observe the phase of electronic wave functions by means of interference phenomena in inelastic electron scattering processes

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) 3,100,000円

研究成果の概要(和文)：電子非弾性散乱過程で生じる干渉現象を利用した分子軌道の位相観測法の実現を目指し、電子衝撃イオン化断面積および電子励起断面積の高精度測定による干渉構造の抽出と解析手法の開発を行った。六弗化硫黄などの比較的単純な分子を対象とした一連の研究の結果、電子運動量分布に現れる干渉構造を利用して分子軌道の位相や対称性、構成原子軌道の配向方向をプローブするための基盤技術を確認することができた。さらに、より定量的な干渉効果の解析を目的として、イオン化断面積や電子励起断面積に現れる分子振動の影響についても調べた。

研究成果の概要(英文)：The main purpose of this study is to develop a method to determine the phase of molecular orbitals by means of interference phenomena in inelastic electron scattering processes. To this end, electron momentum spectroscopy experiments and electron energy loss spectroscopy experiments were performed for the nonbonding orbitals of simple molecules like SF₆, which are each constructed from the 2p atomic orbitals (AOs) on the constituting atoms. A detailed analysis of the results shows that the interference patterns afford a rare opportunity to experimentally clarify symmetries of the MOs. It is also demonstrated that they provide information about the spatial orientation of the constituent AOs. Furthermore, vibrational effects on electron momentum profiles and electron scattering cross sections have been investigated.

研究分野：化学

キーワード：原子・分子物理 分子軌道 電子分光

1. 研究開始当初の背景

分子軌道は自然科学の広範な分野における基礎的概念となっている。その最大の理由は、反応性などの分子の性質の多くが特定の分子軌道の空間的形狀や位相によって決まることであろう。このため、分子軌道の実験的観測が以前より試みられており、最近でも走査型トンネル顕微鏡を用いた表面吸着分子の電子軌道観測といった新たな手法が提案されてきている。分子軌道を正確に知ることは、現在においても自然科学の中心的課題となっているのである。

しかしながら、従来の試みの多くは波動関数 Ψ の二乗振幅である電荷密度 $|\Psi|^2$ の観測に相当しており、波動関数がかつプラスやマイナスの符号(位相)に関する情報が失われていた。例外として、強光子場中で発生する高次高調波の測定により、位相を含めた上で波動関数を再構築する“分子軌道トモグラフィ” [J. Itatani *et al.*, *Nature* **432**, 867 (2004)] が提案されているが、その対象は今のところ最高被占有軌道に限定されている。任意の軌道について波動関数の位相を自在に観測できるようになれば、電子状態研究の発展に大きく貢献できるだろう。

このような背景の下、研究代表者は高速電子の非弾性散乱過程で生じる干渉現象を利用することで、分子軌道の位相を実験的に決定できるとの着想を得た。事前に行った検証実験の結果 [N. Watanabe *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 173201 (2012)] から、電子線散乱実験に基づく電子波動関数の位相決定が実現可能であるとの確信が得られたことで、研究開始に至った。

2. 研究の目的

本研究の主眼は、電子非弾性散乱過程で生じる干渉現象を利用し、分子軌道の位相をプローブする新規手法を開発することにある。ここで対象とするのは、ある特定軌道からのイオン化や空軌道への電子遷移であるが、まずはイオン化過程を考えよう。LCAO 近似によれば、分子軌道は各原子核に局在した原子軌道の線形結合として与えられる。このため、特定の分子軌道からの電離は、個々の原子核近傍に局在した原子軌道からの電子放出がコヒーレントに起きたものと解釈でき、それらの間で分子軌道係数の符号を反映した干渉が生じる(図1)。このことは、空軌道への電子励起でも同様に成り立つ。そこで、電子衝撃イオン化実験である電子運動量分光や電子非弾性散乱実験である電子エネルギー損失分光を用いて干渉効果を観測すれば、分子軌道の位相決定が可能になるだろう。

このアイデアは、Cohen と Fano によって定式化された二原子分子の電離過程における干渉現象 [Phys. Rev. **150**, 30 (1966)] の、多原子分子一般に対する拡張である。彼らの理論によれば、二つの原子軌道 $\chi(r)$ で構成された分子軌道($\phi_{\pm} = \chi(r_1) \pm \chi(r_2)$)からのイオン化

断面積には、干渉効果により $1 \pm \sin(kR)/(kR)$ の変動が現れる。ここで、 k は電離電子の運動量を、また、 R は原子間距離を表す。分子軌道が結合性か反結合性かで、 \sin 項手前の符号が変化することにご注意いただきたい。分子軌道の位相の違いを反映して、干渉パターンの位相が反転するのである。この干渉現象は Stolterfoht らや Rolles らにより実証され、ヤングの二重スリット実験を原子スケールで実現した研究として脚光を浴びた [Phys. Rev. Lett. **87**, 023201 (2001), *Nature* **437**, 711 (2005)]。一方、本研究では、量子力学の原理検証という従来研究の枠組みを超え、非弾性散乱過程における干渉現象を新たな電子状態研究法として利用する。

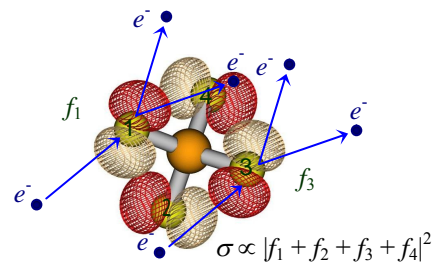


図1: 電子衝撃イオン化過程で生じる干渉現象の原理模式図。分子軌道を構成する複数の原子軌道からの電離がコヒーレントに起こり、散乱断面積 σ に干渉構造が生じる。

3. 研究の方法

イオン化過程を対象とする電子運動量分光(EMS)と電子励起過程を対象とする電子エネルギー損失分光(EELS)に基づき、電子非弾性散乱断面積に現れる干渉パターンを観測し、その振動構造と電子波動関数の関係を明らかにすることを目指した。

(1) EMS を用いた干渉現象の観測

電子線コンプトン散乱の発展形であるEMSでは、電子衝撃イオン化により生成した電離電子と非弾性散乱電子とを同時計測する。

$$M + e_0^-(E_0, \mathbf{k}_0) \rightarrow M^+ + e_1^-(E_1, \mathbf{k}_1) + e_2^-(E_2, \mathbf{k}_2)$$

散乱前後のエネルギー保存則から標的電子の束縛エネルギー $E_{\text{bind}} (= E_0 - E_1 - E_2)$ を、また、運動量保存則から生成イオンの反跳運動量 $p (= \mathbf{k}_0 - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)$ を決定することができる。EMS断面積の p 依存性は、標的電子軌道の運動量分布(電子運動量分布)に比例する。分子軌道を運動量空間で観測する本分光の特色から、EMSは分子の電子状態研究に広く用いられてきた。これに対し、本研究では電子衝撃イオン化過程における干渉現象に着目する。電子運動量分布に現れる干渉パターンの解析により標的分子軌道の位相を決定する手法を開発する。

(2) EELS を用いた干渉現象の観測

EELS 実験では、電子線を標的分子に照射し、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。

$$M + e_0^-(E_0, k_0) \rightarrow M^* + e_s^-(E_s, k_s)$$

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 ($=|K|$) の関数として求めることができる。

離散空準位への電子遷移に対する EELS 断面積の移行運動量依存性には、電子衝突以前に標的電子が属していた被占有軌道の性質を反映した干渉構造が生じる。この性質を波動関数の位相決定に用いる。

4. 研究成果

(1) EMS 断面積に現れる干渉効果の研究

EMS 断面積に現れる干渉効果と電子波動関数形状との関係を明らかにすべく、比較的単純な分子を対象とした実験を行った。ここでは、六弗化硫黄 (SF_6) 分子に対する結果について詳述する。 SF_6 のイオン化スペクトルに現れる最初の 4 つのバンドは、複数の F 2p 原子軌道で構成された非結合性軌道からの電離によるものであり、そのイオン化断面積には顕著な干渉効果の出現が期待される。さらに、2p 原子軌道の方向が異なる複数の組み合わせが存在し、軌道形状と干渉構造との関係を調べる上でも都合がよい。

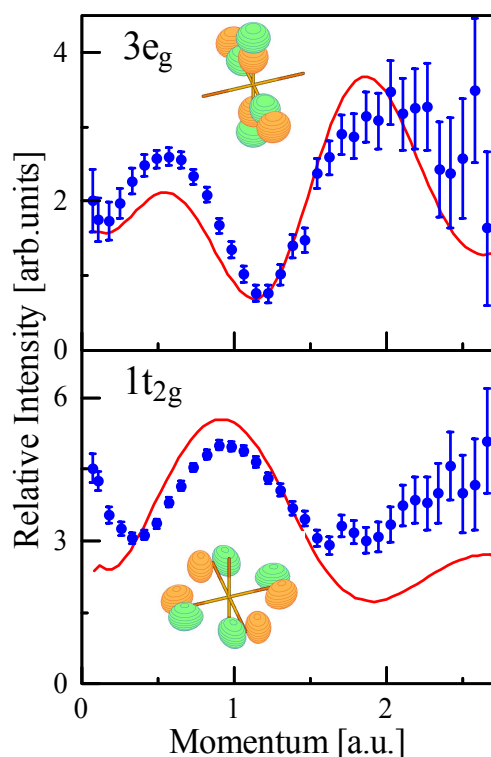


図 2 : $3e_g$ と $1t_{2g}$ 軌道の干渉構造

等価な原子軌道により構成された分子軌道の電子運動量分布は、原子軌道の電子運動量分布と干渉項の積で表される。そこで、実

験より求めた電子運動量分布と F 2p 原子軌道の理論的な電子運動量分布との比をとることで、干渉項を求めた。例として、 $3e_g$ と $1t_{2g}$ 軌道の結果を図 2 に示す。明確な振動構造が見取れ、干渉パターンの抽出に成功したことがわかる。得られた結果は分子軌道形状を反映した特徴的な振動構造を示しており、それらは図中に実線で示す密度汎関数 (DFT) 計算の結果とも矛盾がない。

軌道形状に応じた干渉構造の変化が意味することを明らかにすべく、次のモデルに基づく考察を行った。測定した非結合性軌道は主として F 2p 原子軌道より構成されるため、その線形結合で波動関数を近似する。本近似に基づき EMS 断面積の表式を求めたところ、干渉項は次式で与えられることが示された。

$$I(p) = h \left[1 + \sum_{j \neq k} \{ C_{jk}^{(0)} j_0(pR_{jk}) + C_{jk}^{(2)} j_2(pR_{jk}) \} \right] \quad (1)$$

ここで、 $h = \sum_j |c_j|^2$ は分子軌道係数 c_j で決まる定数である。 $j_0(pR_{jk})$ と $j_2(pR_{jk})$ は 0 次および 2 次の球ベッセル関数であり、j 番目と k 番目の F 原子間の距離 R_{jk} を反映した振動構造を与える。また、 j_0 や j_2 にかかる係数は、2p 原子軌道の方向を示す単位ベクトル \hat{u}_j やそれらベクトル間が成す角 θ_{jk} を用いて表される。

$$C_{jk}^{(0)} = c_j c_k \cos \theta_{jk} / h \quad (2)$$

$$C_{jk}^{(2)} = c_j c_k [\cos \theta_{jk} - 3(\hat{u}_j \cdot \hat{R}_{jk})(\hat{u}_k \cdot \hat{R}_{jk})] / h \quad (3)$$

ここで、 \hat{R}_{jk} は F-F 原子間を結ぶ軸方向を向く単位ベクトルである。2p 原子軌道が正と負の符号をもつ二つのローブより成る瓢箪形をしていることを考えれば、非結合性軌道の位相を論じることは、分子軌道を構成する 2p 軌道の空間的な配向方向を論ずることと等価である。よって、2p 軌道の方向で記述される $C_{jk}^{(0)}$ の $C_{jk}^{(2)}$ の表式は、干渉パターンと非結合性軌道の位相との関係性を表している。

SF_6 の高い対称性から、非結合性軌道の殆どは O_h 点群の既約表現となるように 2p 軌道を組み合わせるだけで $C_{jk}^{(0)}$ や $C_{jk}^{(2)}$ が決まるため、直ちに干渉項を導出できる。それらを実験と比較したところ、振動の振る舞いをよく再現していた。以上の結果から、上記モデルを用いることで干渉構造を解釈できること、さらに、干渉パターンから分子軌道計算に頼らずに軌道の対称性を決定できることが示された。

より具体的に分子軌道形状と干渉パターンの関係を考察するため、運動量原点 ($p=0$) での強度 $I(0)$ に着目した。 $j_0(0) = 1$ および $j_2(0) = 0$ であるから、 $I(0)$ の値は $\cos \theta_{jk}$ を用いて表される $C_{jk}^{(0)}$ で決まり、2p 軌道間の方向が揃っているほど強度が増す。実際、全ての原子軌道が共通の方向を向いた $5t_{1u}$ 軌道を含むイオン化バンドの測定結果は $p \sim 0$ で大きな値を示しており、運動量原点での強度が 2p 軌道の配向度合いを反映していることが実証された。次に、運動量が大きな領域に目を向け、干渉項の振る舞いを調べたところ、 $pR_{jk} \gg 1$

における振幅には、F-F 原子間軸方向を向く単位ベクトルと 2p 軌道方向を指すベクトル間の内積 $\hat{u}_j \cdot \hat{R}_{jk}$ が支配的に関与していることがわかった。この考察に基づけば、原子間軸からの 2p 軌道の傾きが大きいほど振動が早く減衰することになる。実験はこの予測を指示しており、 $pR_{jk} \gg 1$ の振幅から p 軌道の傾き角に関しての知見が得られることが示された。非結合性軌道を構成する p 軌道の空間的な配向方向と干渉構造との関係を明らかにできたのである〔雑誌論文#1〕。

本研究により、電子運動量分布に現れる干渉構造を利用して分子軌道の位相や対称性、構成原子軌道の配向方向をプローブするための基盤技術が確立された。現在、本手法を様々な分子に適用した研究を展開している。

(2) EELS 断面積に現れる干渉効果の研究

次に空軌道への電子励起過程における干渉効果を調べた。SF₆ の非結合性軌道から空軌道への励起は、複数の F 2p 軌道からの電子遷移がコヒーレントに発生しているとみなせ、電子散乱断面積に干渉構造が生じると予測できる。そこで、1t_{1g} 軌道からの電子励起を対象に、実験・理論双方からの検証を試みた。6a_{1g} および 4s 軌道への励起である 1¹T_{1g} 遷移と 2¹T_{1g} 遷移に対する結果を図 3 に示す。EELS 断面積を記述する際に広く用いられる一般化振動子強度 (GOS) として、理論値と実験値を図示している。GOS の理論計算には、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。

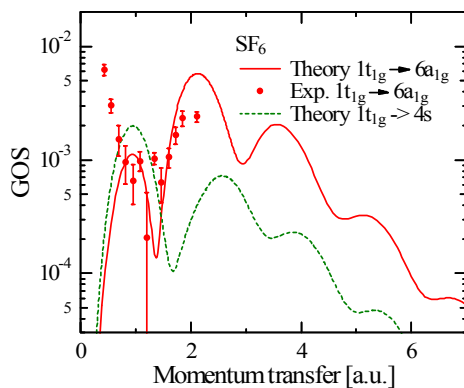


図 3 : SF₆ の 1¹T_{1g} 遷移と 2¹T_{1g} 遷移に対する一般化振動子強度分布

理論的な GOS 分布は明確な振動構造を示しており、電子励起過程においてもイオン化過程と同様に顕著な干渉効果が確認された。また、1¹T_{1g} と 2¹T_{1g} 遷移を比較すると、それぞれの GOS 分布は、空軌道の空間的な分布形状を反映して異なる振動構造を示している。この結果は、EELS 断面積に現れる干渉パターンを解析することで、励起軌道の波動関数形状に関する情報をも抽出できる可能性を示唆している。以上の理論予測を検証するため、1¹T_{1g} 遷移の GOS 分布を実験より求めた。測定結果は、 $K \sim 1.3$ a.u. に極小値を、 K

~ 2.1 a.u. で極大値を示し、振動構造の兆候をとらえているように見える。しかしながら、測定した運動量移行の範囲が十分とはいえず、より進んだ実験が必要である。移行運動量の増加に応じて急激に強度を減じる EELS 断面積を広範囲にわたって測定するため、実験装置の高感度化を計画している。

(3) 電子散乱断面積に与える分子振動の影響

本研究で対象としてきた電子非弾性散乱過程における干渉効果は、個々の構成原子近傍に局在した電荷分布により電子がコヒーレントに散乱されることで生じる。先の議論では原子が安定位置に停止していることを暗に仮定していたが、実際の分子は振動運動をしており、それに伴う核変位は何らかの形で干渉効果に影響を与える筈である。このため、干渉パターンから標的波動関数形状に関する情報を抽出する手法を確たるものとするためには、分子振動が測定結果に与える影響を明らかにしなければならない。そこで、EMS 断面積に対する分子振動の影響を詳細に調べた〔雑誌論文#2, 3, 7〕。

一例として、CH₂F₂ 分子を対象とした EMS 研究の結果を紹介する。CH₂F₂ の 2b₁ 軌道に対する電子運動量分布の実験値と理論値との比較を図 4 に示す。図中の点線は、平衡核配置における分子軌道計算より求めた理論的な電子運動量分布である。 $p \sim 0$ 近傍で計算は強度を著しく低く見積もっている。この要因として、まずは理論波動関数の精度不足が想起されるが、次に述べる理由により、それでは測定結果を説明できない。運動量空間表示の波動関数 $\psi(p)$ は位置空間波動関数のフーリエ変換で与えられるため、 $p = 0$ における値は電子波動関数の全空間にわたる積分を用いて表される。

$$\psi(p)_{p=0} = (2\pi)^{-3/2} \int \psi(r) dr \quad (4)$$

全対称軌道 (a₁ 軌道) を除いて(4)式の積分値はゼロとなるから、2b₁ 軌道の電子運動量分布は運動量原点で強度を持ち得ない。このことは分子の対称性に基づく本質的な要請であるため、理論波動関数の精度を幾ら改善したとしても $p \sim 0$ で観測された強度を説明できないのである。

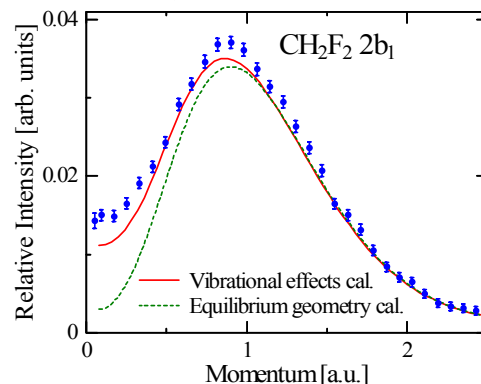


図 4 : 2b₁ 軌道の電子運動量分布

分子振動に伴う原子核の変位により分子が歪めば、 $p=0$ での強度に関する上記要請が緩和される。そこで、分子振動を考慮した独自の理論計算法を用い、その影響を調べた。得られた計算結果を実線で示す。低運動量領域における強度が大幅に増加し、実験を良く再現するようになった。以上の結果は、運動量原点近傍で観測された強度が分子振動に起因した $2b_1$ 軌道の歪みの反映であることを明らかにするとともに、ここで用いた計算法によって、多原子分子一般に対して分子振動が電子運動量分布に与える影響を定量的に評価できることを示している。

より詳細な解析から、 CH_2F_2 がもつ 9 種の基準振動の内、 ν_6 モードと ν_7 モードの寄与が支配的であり、なかでも CH 非対称伸縮振動である ν_7 モードが運動量原点での強度増加に最も寄与していることがわかった。この結果は $2b_1$ 軌道の形状を考えることで理解できる。図 5 に示す理論的な分子軌道パターンから見て取れるように、 $2b_1$ 軌道は 2 つの等価な CH 結合間に体積の等しいローブをもつ。これらローブの一方は正の符号を、もう一方は負の符号を有するため、波動関数の全空間にわたる積分 ((4)式)において正負の領域間で打ち消し合いが生じ、運動量原点での強度には寄与しない。ところが、CH 非対称伸縮振動によって CH 結合間のバランスが崩れると両者の打ち消し合いが不完全となり、その結果として、 $p \sim 0$ で運動量分布に強度増加が生じたのである。

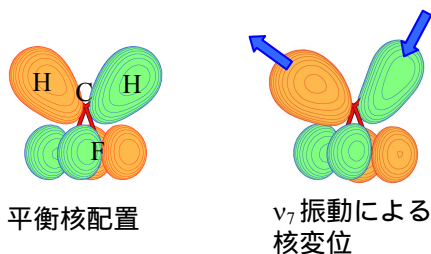


図 5 : CH 非対称伸縮振動による $2b_1$ 軌道の変化

更なる研究から、 SF_6 の最高被占有軌道を含む多数の軌道に対して、分子振動が顕著な影響を与えていることが明らかになった。比較的大きな分子の電子運動量分布に対する分子振動効果の重要性が強く示唆されるとともに、本研究で用いた手法が測定結果の定量的な解釈に有効であることが示されたのである。

ここで得られた知見は、散乱断面積に現れる干渉構造の定量的解析に資するだけに止まらない。特に重要な結果として、高振動モードのゼロ点振動のような振幅が小さな分子振動でさえ、電子波動関数に顕著な影響を及ぼし得ることが示されるとともに、特定の振動モードが分子の性質にしばしば支配的に関与することが明らかとなった。このことを踏まえ、 CO_2 と N_2O を対象に EELS 断面積

に対する分子振動の影響を調べたところ、屈曲振動によって励起確率が大幅に変化する電子励起の存在が確認された〔雑誌論文#4, 8〕。これらの結果に基づき、分子振動と電子運動との相関が分子の性質に与える影響を、その起源から明らかにしてゆくことを目指し、さらなる研究を展開している。なお、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#7, 15〕。

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 11 件)

N. Watanabe, M. Yamazaki, M. Takahashi, Relationship between interference pattern and molecular orbital shape in (e, 2e) electron momentum profiles of SF_6 , *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, 査読有, 209 巻, 2016 年, 78-86, doi: 10.1016/j.elspec.2016.04.004

F. Morini, N. Watanabe, M. Kojima, M. S. Deleuze, M. Takahashi, Electron momentum spectroscopy of dimethyl ether taking account of nuclear dynamics in the electronic ground state, *The Journal of Chemical Physics*, 査読有, 143 巻, 2015 年, 134309-1-11, doi: 10.1063/1.4931918

F. Morini, M. S. Deleuze, N. Watanabe, M. Takahashi, Theoretical study of molecular vibrations in electron momentum spectroscopy experiments on furan: An analytical versus a molecular dynamical approach, *The Journal of Chemical Physics*, 査読有, 142 巻, 2015 年, 094308-1-13, doi: 10.1063/1.4913642

N. Watanabe, M. Takahashi, Vibronic effects on the low-lying electronic excitations in N_2O induced by electron impact, *Journal of Physics B*, 査読有, 47 巻, 2014 年, 155203-1-7, doi:10.1088/0953-4075/47/15/155203

M. Yamazaki, H. Satoh, N. Watanabe, D. B. Jones, M. Takahashi, Oscillation of the electron-density distribution in momentum space: An (e, 2e) study of H_2 at large momentum transfer, *Physical Review A*, 査読有, 90 巻, 2015 年, 052711-1-5, doi: 10.1103/PhysRevA.90.052711

N. Watanabe, S. Yamada, T. Hirayama, A. Seki, D. Suzuki, and M. Takahashi, Development of a method to measure molecular frame EELS cross sections, *Journal of Physics: Conference Series*, 査読有, 635 巻, 2015 年, 072030, doi:10.1088/1742-6596/635/7/072030

N. Watanabe, M. Yamazaki, M. Takahashi, Vibrational effects on valence electron momentum distributions of CH_2F_2 , *The*

Journal of Chemical Physics, 査読有, 141 巻, 2014 年, 244314-1-8, doi: 10.1063/1.4904705

N. Watanabe, T. Hirayama, D. Suzuki, M. Takahashi, Vibronic effects on the low-lying electronic excitations in CO₂ induced by electron impact, *Journal of Chemical Physics*, 査読有, 138 巻, 2013 年, 184311-1-10, doi: 10.1063/1.4804190

渡邊昇, X 線散乱及び電子線散乱を用いた分子内電子運動と電子励起ダイナミクスの研究, *Molecular Science*, 査読有, 7 巻, 2013 年, A0059-1-18, doi: 10.3175/molsci.7.A0059

[学会発表](計 31 件)

渡邊昇, 山崎優一, 高橋正彦, SF₆ の電子運動量分布に現れる多中心干渉効果の研究, *原子衝突学会第 40 回年会*, 2015 年 9 月 28-30 日, 首都大学東京 (東京都八王子市)

中島功雄, 山崎優一, 渡邊昇, 高橋正彦, エチレンの電子運動量分布における bond oscillation の観測, *原子衝突学会第 40 回年会*, 2015 年 9 月 28-30 日, 首都大学東京 (東京都八王子市)

渡邊昇, 山崎優一, 高橋正彦, SF₆ の電子運動量分布における干渉効果の研究, *第 9 回分子科学討論会*, 2015 年 9 月 16-19 日, 東京工業大学 (東京都目黒区)

N. Watanabe, M. Yamazaki, and M. Takahashi, EMS study of vibrational effects on electron momentum distributions of C₂H₄ and CH₂F₂, *XXIX International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions*, 2015 年 7 月 22-28 日, Toledo (Spain)

N. Watanabe, M. Takahashi, Herzberg-Teller vibronic effects on electron-impact excitations of N₂O, *XXIX International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions*, 2015 年 7 月 22-28 日, Toledo (Spain)

N. Watanabe, S. Yamada, T. Hirayama, D. Suzuki, M. Takahashi, Development of an electron-ion coincidence spectrometer to examine EELS cross sections in molecular frame, *31st Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics*, 2015 年 6 月 3-5 日, 北海道大学 (北海道札幌市)

N. Watanabe, M. Takahashi, Vibrational effects on electronic transitions in molecules studied by high-energy electron scattering experiments, *18th Malaysian International Chemical Congress*, 2014 年 11 月 3-5 日, Kuala Lumpur (Malaysia) 招待講演

N. Watanabe, T. Hirayama, D. Suzuki, M. Takahashi, Vibronic effects on high-energy electron impact excitations of CO₂, *11th Asian International Seminar on Atomic and Molecular Physics*, 2014 年 10 月 6-10 日,

東北大学 (宮城県仙台市)

N. Watanabe, M. Takahashi, Vibronic effects on high-energy electron impact excitations of N₂O, *11th Asian International Seminar on Atomic and Molecular Physics*, 2014 年 10 月 6-10 日, 東北大学 (宮城県仙台市)

N. Watanabe, M. Yamazaki, and M. Takahashi, EMS study of vibrational effects on electron momentum distributions of CH₂F₂, *原子衝突学会第 39 回年会*, 2014 年 10 月 4-6 日, 東北大学 (宮城県仙台市)

渡邊昇, 山田聡, 平山司, 関淳志, 鈴木大介, 高橋正彦, 分子座標系における電子散乱断面積測定法の開発: 解離イオン同時計測 EELS, *第 8 回分子科学討論会*, 2014 年 9 月 21-24 日, 広島大学 (広島県東広島市)

N. Watanabe, M. Yamazaki, and M. Takahashi, Vibrational effects on electron momentum distributions of CH₂F₂, *30th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics*, 2014 年 6 月 4-6 日, イーグレ姫路 (兵庫県姫路市)

N. Watanabe, T. Hirayama, D. Suzuki, M. Takahashi, Vibronic effects on electronic excitations in CO₂ induced by electron impact, *International Symposium for the 70th Anniversary of the Tohoku Branch of the Chemical Society of Japan*, 2013 年 9 月 28-30 日, 東北大学 (宮城県仙台市)

渡邊昇, X 線および電子線散乱を用いた分子内電子運動と電子励起ダイナミクスの研究, *第 7 回分子科学討論会*, 2013 年 9 月 24-27 日, 京都テルサ (京都府京都市) 招待講演

N. Watanabe, M. Takahashi, Vibrational effects on electronic transitions in molecules studied by (e,2e) electron momentum spectroscopy and EELS, *International Symposium on (e,2e), Double Photo-ionization and Related Topics & 17th International Symposium on Polarization and Correlation in Electronic and Atomic Collisions*, 2013 年 8 月 1-3 日, Hefei (China) 招待講演

N. Watanabe, M. Yamazaki, M. Takahashi, Vibronic effects on electron momentum distributions of ethylene, *29th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics*, 2013 年 6 月 5-7 日, 東北大学 (宮城県仙台市)

6. 研究組織

(1) 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