

X線自由電子レーザーの拓く科学：計算科学からのアプローチ  
(早大先進理工) 今村 穰

X線自由電子レーザー(X-ray free electron laser; XFEL)とは、原子サイズと同等の短い波長を有する新しいレーザーである[1]。XFELでは高強度のX線フェムト秒パルスが生成可能なため、これまで困難であった化学反応の直接観測・単分子構造解析の実現可能性が議論されている。これらの実験が実現すれば、科学者の長年の夢である反応ダイナミクスの視覚化や難結晶性タンパク質・タンパク質単粒子の構造解析が可能となり、科学の大きな発展が期待される。一方、従来の光源では観測されなかった多重内殻イオン化が起こり、対象物質に損傷が起こることが報告されている。多光子過程であり複雑な振る舞いを示すXFELイオン化過程を理解・制御するためには、理論的なアプローチからの知見は必要不可欠である。特に、現在、世界で三か所のみで建設されているXFEL施設で行えるプロジェクト研究の数は極めて制限されており実験前の予備検討の重要性は明白である。

これまで我々はXFELにより生成される多重イオン化状態に関して以下の2点に関して検討を行ってきた。

(A) 多重イオン化状態の分子の安定性

(B) 内殻正孔による価電子励起吸収帯のシフトおよびそれを用いたパルス幅計測手法

(A)では、酸素分子、窒素分子の3価のイオン状態の安定性に関して高精度量子化学計算を行い、それぞれの分子がこれまで発見されていない準安定な基底・励起状態を有することを報告[2]した。また、それらの準安定状態の発生機構に関しても考察を加えた。

(B)では、アニリン分子における内殻電子の多重イオン化状態の価電子励起吸収帯に関して密度汎関数理論計算を行った。価電子励起吸収帯が可視光帯まで大幅に長波長シフトすることを発見し、そのシフトは内殻正孔の局在性に起因することを解明した。更に、吸収スペクトルの長波長シフトを用いたパルス幅計測手法を理論計算から提案した。パルス幅計測の実験条件に関しては、反応速度論の観点から検討を行った。以上の内容を将来の展望も含めながら紹介する予定である。

[1] L. Young *et al.*, *Nature*, 466, 56 (2010).

[2] Y. Imamura and T. Hatsui, *Phys. Rev. A.*, 85, 012524 (2012).

## プロフィール



学士 (工学), 京都大学, 1994 年 3 月.

修士 (工学), 京都大学, 1996 年 3 月.

博士 (理学), 総合研究大学院大学, 1999 年 3 月.

日本学術振興会特別研究員 (DC1), 総合研究大学院大学, 1997 年 4 月-1999 年 3 月.

日本学術振興会特別研究員 (PD へ切り替え), イリノイ大学, 1999 年 4 月-2000 年 3 月.

イリノイ大学博士研究員, 2000 年 4 月-2001 年 3 月.

ライス大学博士研究員, 2001 年 4 月-2004 年 3 月.

日本学術振興会特別研究員 (PD), 早稲田大学, 2004 年 4 月-2007 年 3 月.

早稲田大学助教, 早稲田大学, 2007 年 4 月-2010 年 3 月.

早稲田大学次席研究員, 早稲田大学, 2010 年 4 月-2012 年 3 月.

早稲田大学客員次席研究員, 早稲田大学, 2012 年 4 月-