



Berkeley
UNIVERSITY OF CALIFORNIA

2018 年 1 月 30 日
2015 年度奨学生 小林雄貴

船井情報科学振興財団 海外留学奨学事業 第五回中間報告書

UC Berkeley の小林です。雨季に突入した Berkeley は曇りがちで、夏が待ち遠しく感じます。ここ半年の状況を報告致します。

1 進捗報告会

私の所属する Leone, Neumark 研は複数の予算を持っています。その中でも私の研究の予算は Army Research Office (ARO) から主に出ております。”ポストボルンオッペンハイマー近似超高速ダイナミクス”という共同テーマで複数の研究者が参加しており、年に一度全員で集まって進捗報告会をすることになっています。一年目は Berkeley、二年目は Tucson (アリゾナ大学)、そして三年目の今年は 11 月に Columbus (オハイオ州立大学) で開かれました。去年のミーティングは進級試験の直前ということで涙を呑んでの留守番をしていましたが(直前の実験ラッシュ、スライドの準備でがんばったのに・・・)、今年は参加できました。オハイオ州立大学のキャンパスはとても広く、また建物も綺麗でした。州立大学というものはみな貧乏なのだと思っていたのですが、カリフォルニアだけなのかもしれません。

大学院も三年目になりますが、まだ学会というものに参加したことがありませんでした。今回もあくまでカジュアルなミーティングでしたが、良い刺激を受けることができました。分子動力学における最速の電子過程の解明という同じ目標に向かって、他の研究者はどういった観点・手法で捌くのか、勉強になりました。自分のやっていることは気体分子の分光、つまり孤立した系の研究です。しかし現実の化学反応は孤立分子中ではなく、固体中や液体界面で起こります。孤立分子系の分光はほぼやり尽くされているように感じられ、実際新しく立ち上がる物理化学の研究室の多くは固体をターゲットとしています。今から方向性を変えるつもりはありませんが、ポストクの間、さらにその先独立するとしたときに、研究対象を何にするのかを考えています。とりあえず次の実験ではまだ孤立分子系ですが、大きな分子を試してみようと思っています。

2 研究

今学期は TA もなく、研究に専念することができました。新しい測定法の試験と、先学期得たデータの解析を進めました。これまでの実験では極端紫外線のアト秒パルスを探針兼観測として用いる吸収分光を行っていましたが、これをポンプとして用い分子の解離イオンを観測とする運動量画像法に切り替える、というのが目標でした。集めた部品を数ヶ月かけて取り付けどうにか信号を得るまではできたのですが、期待していたような結果は得ることができませんでした。観測法自体には問題はなく、アト秒パルスがポンプとして働くには強度が弱すぎるというのが原因です。まだ完全に諦めた訳ではないのですが、元の吸収分光でも新しいアイデアが出てきたので、しばらく放置することになりそうです。

データの解析はゆっくりとですが進んでいます。報告書を書いている今日は 1 月 30 日ですが、この段階で三本

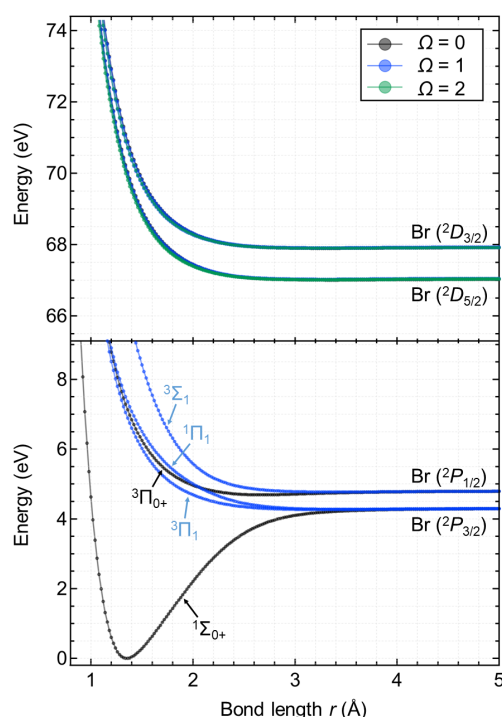


Figure 1: 二原子分子 HBr の断熱ポテンシャル曲線。上図は Br 3d 電子の励起状態、下図は価電子帯の状態を表します。60-70 eV という高いエネルギーの遷移が、アト秒分光の鍵になります。

の論文に同時に着手しています。三月末まで執筆に時間がとれるので、それまでに区切りをつけるのが目標です。計算が中心のプロジェクトについて結果の一部を報告します。Figure 1 に示すのは、HBr という単純な二原子分子のポテンシャル曲線です。価電子帯に加えて、内核軌道励起状態も計算していることがポイントです。アト秒パルス中の光子は 30-100 eV という高いエネルギーを持っており、分子との相互作用ではそのエネルギーに対応する内核軌道からの励起が引き起こされます。しかし内核励起状態は外殻軌道のイオン化ポテンシャルよりも高いところにあり、計算で取り扱うには含ませる電子配置の数を制限する必要があります。加えて重元素の内核軌道の場合にはスピン軌道効果が重要になることが多く、その場合相対論効果の取り込みも必要になります。そういった問題を解決して得られた電子構造計算結果が、先の Fig. 1 になります。今はこれを使って何かを示そうとしているところです。次回の報告書までにはまとまった内容を紹介できるとと思います。

3 生活一般

この冬は一ヶ月休みをとり、日本に帰省しました。分子分光をする研究室を訪問したほか、日本分光学会主催の”第 13 回若手研究者による先端的レーザー分光シンポジウム”で招待講演をしました。発表はグループセミナー以外ともにやったことがなかったので大変緊張しました。超高速時間分解の実験をしている人は比較的数量少なく、複雑系の状態測定を主とする方が中心だったと思いますが、様々な質問や意見を頂き、関心を持っていただけかと思います。

この秋学期はフットボールのシーズンチケットを買い、すべてのホームゲームに足を運びました。フットボールの試合は四時間くらいかかるので、だいたいハーフタイムで抜けてラボに戻っていました。中西部ほどの熱狂性はないにしろ、試合の日はキャンパス全体が祭りのような雰囲気になって楽しいです。どうして春にも試合

をやらないのか不思議です。他にはプロスポーツで地元 Warriors の試合をようやく観に行きました。後方の二階席で一人\$130 でした。来年にスタジアムがオークランドからサンフランシスコに移ってしまうので、それまでにもう一度観に行きたいです。車の免許はまだ取っていません。来学期こそ取ります。

以上ご報告と致します。来学期は実験結果を出せるよう頑張ります。変わらぬご支援をよろしくお願いします。



Figure 2: 秋学期の楽しみ、フットボール観戦。



Figure 3: 前年度全米一位に輝いた地元 Warriors の試合を観に行きました。



Figure 4: OSU で見つけたドーモ君。隣にはキティも。