

(様式 2)

議事録番号

提出 2013 年 9 月 24 日

会合議事録 (草稿)

研究会名： 不規則系物質先端科学研究会

日 時： 2013 年 9 月 7 日 10:00-12:00

場 所：京都大学宇治おうぼくプラザ セミナー室 1

出席者：(議事録記載者に下線)：

水野章敏 (学習院大学)、小野寺陽平 (京都大学)、臼杵毅 (山形大学)、木村耕治 (京都大学)、永谷清信 (京都大学)、松田和博 (京都大学)、石黒陽太郎 (京都大学)、島倉宏典 (新潟薬科大学)、社本真一 (日本原子力研究開発機構)、尾原幸治 (京都大学)、巽修平 (川崎重工業)、梶原行夫 (広島大学)

計 12 名。

議題：SPring-8、SACLA を利用した不規則系の最近の研究について講演を行う。
また SPRUC 移行後の研究会の状況変化について、整理を行うと共に今後の対応を議論する。

議事内容：

10:05-10:30 「分子性液体における動的・静的構造解析」 島倉宏典 (新潟薬科大)

カルコゲン-ハロゲン混合系の分子性液体の静的・動的構造について、BL04B2 の高エネルギー X 線、中性子準弾性散乱を用いて解析した結果が紹介された。階層性を持つ分子性液体の原子レベル静的構造解析で問題となる点について議論が行われた。また、今後の研究展望が語られた。

10:30-10:55 「アルカリ金属液体における電子状態の研究-非弾性 X 線散乱によるプラズモン測定-」 木村耕治 (京都大)

液体金属の電子状態を調べるために行った、BL12XU のアルカリ金属の非弾性 X 線散乱の結果が紹介された。液体中のプラズモンの線幅について、解析における講演者の新しい試みと、電子-イオン相関の議論が行われた。また今後の研究発展について、参加者を含めて議論が行われた。

11:10-11:45 「自由電子レーザーによる新規な物質状態の生成とその実時間追跡の試み」 永谷清信（京都大）

自由電子レーザー（FEL）を用いたクラスター研究が紹介された。特に「ナノプラズマ」と呼ばれるメソスケールにおける電子状態の特異性に着目した解説がなされた。実験データについては、主にプロトタイプ機（EUV-FEL）のものが紹介されたが、今後のXFELへの適用についても展望が語られた。また、クラスター以外の不規則系へのFELの適用についても具体的な提案が行われた。

11:45-12:00 研究会の現状と今後について 梶原行夫（広島大）

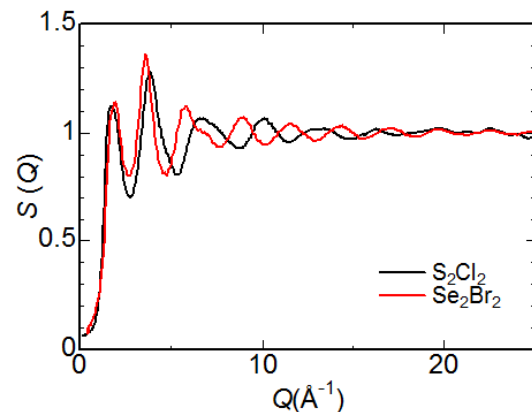
会員数の変化など、SPRUC移行後の研究会周辺の状況変化が紹介された。また、それに対して今後研究会で取り組むべき課題が整理され、議論が行われた。

なお、議事内容の資料として、各講演者の概要を以下に添付する。

分子性液体における動的・静的構造解析

新薬大薬^A、九大理^B、原子力機構^C、高輝度光科学研究センター^D
島倉宏典^{AB}、川北至信^C、尾原幸治^D、武田信一^B

カルコゲン-ハロゲンの混合系は1:1組成でX-A-A-X型(A:S, Se, X:Cl, Br)の分子を形成する高密度液体であり、L型、D型の光学異性体をもつ。また、液体 Se_2Cl_2 の中性子回折実験により[1]、構造因子の第一ピークには、隣接するSe鎖を平行に並べる配置の情報が含まれていることが報告されている。液体 Se_2Br_2 においては中性子準弾性散乱[2]とreverse Monte Carlo(RMC)構造モデリング法から、液体中にはパッキング



液体 S_2Cl_2 , Se_2Br_2 の構造因子

効果に由来する like-pair (L-L, D-D)と配向相関に由来する unlike-pair (L-D)が存在することが示唆された。一方で、液体 S_2Cl_2 におけるab-initio MDシミュレーション[3]から S_2Cl_2 にはセレン-ハロゲン系液体に含まれるような強い配向相関は存在していないことが報告された。

図に液体 Se_2Br_2 , S_2Cl_2 の構造因子を示す。分子間配向相関に関係している第一ピークはともに観測されており、振動の周期は違うものの全体として似た形をしていることが分かる。本講演では、液体 S_2Cl_2 についてRMCを行った結果を議論する。

[1] Maruyama K, Kawakita Y, Yao M, Endo H and Misawa M 1991 *J. Phys. Soc. Jpn.* **60** 3032

[2]H. Shimakura, Y. Kawakita, Y. Inamura, T. Kikuchi, H. Ueno, M. Nakamura, K. Nakajima, S. Ohira-Kawamura, K. Shibata, M. Arai, S. Takeda; *J. Phys. Conf. Ser.* **340** 012080 (2012)

[3] S. Ohmura, H. Shimakura, Y. Kawakita, F. Shimojo, M. Yao 82 (2013) 074602

アルカリ金属液体における電子状態の研究 —非弾性 X 線散乱によるプラズモン測定—

京大院理学研究科 木村耕治

液体のような構造が不規則な系では、電子状態がイオン構造にどのように依存するのかは、結晶ほど明瞭には解明されていない。電子とイオンからなる多体系の振る舞いをより一般的に理解するには、液体において電子状態とイオン構造の関係を明らかにすることは重要である。

電子の集団励起であるプラズモンの挙動は、電子-電子相互作用、電子-イオン相互作用を強く反映するため、物質内の電子の性質を知る上で極めて有用な情報となる。また、非弾性 X 線散乱 (IXS) は、電子線を用いる手法 (電子エネルギー損失分光) とは異なり、液体サンプルへ適用できるという利点を有する。

我々は、これまで、Spring-8 の BL12XU において IXS を行い、アルカリ金属液体中のプラズモンを観測してきた。講演では、固体および融点近傍の液体ルビジウム (Rb) に対する IXS 測定の結果を報告し、融解に伴う結晶構造の消失により Rb の電子状態がどのように変化するかについて議論する。また、現在、準備を進めている、高温・高圧領域でのプラズモン測定の展望についても述べる予定である。

自由電子レーザーによる新規な物質状態の生成とその実時間追跡の試み

京都大学 大学院理学研究科 永谷清信

近年、開発の進んでいる自由電子レーザー (FEL) 光源は、極紫外から X 線に及ぶ短波長領域でのレーザー利用を可能とする新規な光源であり、その高輝度、高干渉性、短パルス特性といった顕著な特徴を生かして新規な研究領域を開拓している。一方で、FEL の供する高強度パルス光と物質の相互作用については、十分な知見が得られているとは言いがたく、光源の高度利用のためにも基礎的な知見の収集が重要である。我々は SPring-8 Compact SASE Source 試験加速器を光源として用い、数個から数万個程度の原子が凝集したクラスターを試料として取り上げ、極紫外波長領域における高強度自由電子レーザーとの相互作用について主としてイオン・電子分光を用いて検討してきた[1-4]。実験で得られた知見からは、クラスターでは、FEL 照射によって生成した多数の電子・イオンが相互作用することで生成するナノプラズマと呼ばれる状態が形成されていることが示唆されている。また、ナノプラズマの形成により相互作用のあり方が孤立原子と大きく異なるだけでなく、FEL の強度、波長によって大きく異なることも見出されている。本口演では主に試験加速器利用での極紫外 FEL 利用研究の最近の結果、特にポンプ・プローブ計測を利用したナノプラズマのダイナミクスを中心に報告する。また、SACLA で得られる X 線自由電子レーザーでの実験の現状や展望についても紹介したい。

[1] H. Fukuzawa et al., Phys. Rev. A 79 (2009) 031201(R).

[2] H. Iwayama et al., J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 43 (2010) 161001.

[3] A. Sugishima *et al.*, Phys. Rev. A 86 (2012) 033203.

[4] H. Iwayama et al., J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 42 (2009) 134019.