

フェムト秒X線光電子回折法でヨウ素分子構造を決定

高エネルギー加速器研究機構(KEK)、東京大学、立命館大学、千葉大学、京都大学、量子科学技術研究開発機構、理化学研究所、高輝度光科学研究センターの共同研究グループは、X線自由電子レーザー(XFEL)施設『SACLA』を用いたフェムト秒X線光電子回折法により、赤外パルス強レーザー電場中のヨウ素分子の構造を決定することに成功した。

これまで、光励起によりピコ秒からフェムト秒の時間領域で物質変化を起こす超高速光化学反応を光電子回折法により可視化した研究例はない。研究グループの一人、KEK物質構造科学研究所の柳下明名誉教授によると「光化学反応による原子の組み換えを決める化学空間は、現在のスーパーコンピューターをもってしても、系統的な探索を寄せ付けない途方もない空間です。したがって、フェムト秒X線光電子回折法により、超高速で進行する原子の組み換えを可視化すること、“分子ムービー”の観

KEK、東大、理研などの研究グループ成功

測は、超短パルスのフェムト秒XFELが出現するまでは、そのような観測は叶わぬ夢でした」という。

今回の実験では、フェムト秒のXFELパルスを用いて、YAGレーザー電場中のヨウ素分子のX線光電子回折像のスナップショット測定を行い、YAGレーザー電場パルスのピークでヨウ素分子の原子間距離は、平衡構造のそれよりも10%伸びていることを発見した。柳下名誉教授は「XFELパルスを照射するタイミングを連続的に変えて、一連のX線光電子回折像のスナップショット測定を行えば、分子ムービーを撮影することができるので、分子ムービーの上映までもう一步のところまで来たと言えます。今後は、“見ることは知ることなり”の精神で、フェムト秒X線光電子回折法による分子ムービーにより、超高速分子光化学反応ダイナミクスを可視化して、反応の解明さらには反応制御の方法を探索することを目指したい」としている。