



船井情報科学振興財団 海外留学奨学事業 第八回中間報告書

UC Berkeley の小林です。大学院四回目の秋学期が終わりました。実験、計算ともに進捗があり、一つのプロジェクトが収束し、またもう一つのプロジェクトも収束に向かっていきます。ここ半年の留學生活を報告致します。

1 研究

1.1 プロジェクト その1

8月にボストンで開催された米国化学会 (American Chemical Society, ACS) の年會にて “Non-adiabatic coherent electron dynamics in iodine monobromide probed by XUV attosecond transient absorption spectroscopy” というタイトルで口頭発表を行いました。内容を簡潔に説明すると、光化学反応中の擬交差過程をアト秒 XUV 吸収分光を使って直接観測するというものです。擬交差過程（一般には円錐交差過程）は人間の視覚を司るロドプシンという分子のシストランス変換反応をはじめ多くの光化学反応において速度を制御するカギとなる過程です。研究室加入当初から取り組んできたプロジェクトですが、学会直前にして結果がまとまっておらず、アブストラクトが受理されたのはいいものの、かなり焦っていました。ぎりぎりまで追い込んで追加測定を行い、結果これまでの解釈を覆すようなポジティブな結果が得られ、2週間程度でどうにかスライドを仕上げ、学会に間に合わせました。発表の際にはアト秒分光の分野で著名な研究者も何名か来てくださり、それなりに関心を持ってもらえたと思います。

学会の後にも追加測定を行いました。信号が多く見えすぎていることが問題だったので、レーザーの色を変え励起過程の選択性を高めることを狙い、結果実験データの質を大幅に上げることに成功しました。さらに計算も共同研究者からバージョンアップしたコードをもらい、それをもとに吸収スペクトルをシミュレーションしたところ、非常に良い一致が得られました。冬休みが始まる前から論文を書き始め、第一稿が完成しています。この春の雑誌への投稿を目指します。

1.2 プロジェクト その2

もうひとつ別のプロジェクトでも進捗がありました^{*1}。以前の報告書（第六回）で少しだけ触れた、計算が中心のサイドプロジェクトです。当時はダイナミクスを計算することを目指していましたが、結局スタティックな内容だけになりました。X線により作られる内殻励起状態のポテンシャル曲線と、それをもとに計算したX線吸収スペクトルについて、詳細な解析を与えたものです。分子の基底状態のX線吸収スペクトルの解析は多く行われていますが、その励起状態、しかも最安定構造から遷移状態そして解離状態という幅広い反応座標に渡ってX線吸収スペクトルの変化を計算した例はありませんでした。一つの理由は単純に計算が難しいということですが、

^{*1} Y. Kobayashi, T. Zeng, D.M. Neumark, S.R. Leone, “*Ab-initio investigation of Br-3d core-excited states in HBr and HBr⁺ toward XUV probing of photochemical dynamics*” Structural Dynamics, in press.

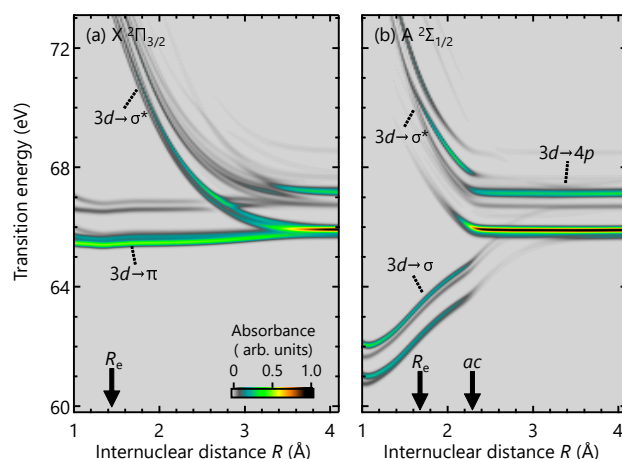


Figure 1: 量子化学計算により得られた、 HBr^+ の (a) 基底状態と (b) 励起状態からの XUV 吸収スペクトルです。分子結合の解離が進むにしたがって、吸収ピークの位置がどのように変化するかを予測しています。とりわけ面白いのが励起状態で、分子が疑交差を通過するときに吸収ピークが劇的な変化を示すことが予測されました。

別の理由として、計算したところで役に立たないということがありました。これまでの X 線分光は分子の基底状態のみに関心があり、励起状態の検出などに使われることはありませんでした。ですがアト秒光源の登場で状況は変わり、実験屋、とりわけアト秒分子分光の分野をリードしている私たちにとって、励起状態の詳細な計算の需要が高まりました。ですが誰もそういった計算をしていなかったの、実験屋ながら自分でやって論文にしたという経緯です。発表先にこだわりはなかったのですが、指導教官が中身を気に入ってくれたので少し色のついた雑誌に 12 月頭に投稿したところ、予想外に好意的な査読を受け約一か月でスムーズに受理されました。オープンアクセスなので出版されたらぜひダウンロードしてください。論文がどの程度引用されるかは別にして、計算もできる強みを自己アピールに加えられるのは良かったと思います。

1.3 その他

既存のプロジェクトが順調に収束しているのは嬉しいのですが、次のプロジェクトの方向性がいまいち決まりません。面白そうなアイデアはいくらでもあるのですが、どれも実現可能性が問題です。調べる分子を複雑なものにすとか、使うレーザー光の色を変えとか、口で言うのは簡単ですが、解析可能なだけの信号雑音比を得られる気がしません。卒業までの残り時間も問題です。挑戦的なプロジェクトで一山狙うか、これまでと同じ手法で堅実な結果を取りに行くのか、選択しなければならないと思います。

それと学会ではないのですが、11月に研究資金の年次報告会に同行しました。PIによる進捗報告が目的で学生はおまけですが、指導教官は気前よく同伴を許可してくれました。今年はプロジェクト始動から五年経った節目ということで、政府のお膝元であるワシントン DC、の隣のアーリントンで行われました。五角形で有名なペンタゴンや、ケネディも眠る国立墓地がある街です。各グループの進捗報告に加え、これからのアト秒科学の目指すべき方向などの議論もされました。大学教授とプロジェクトマネージャーが今後の資金繰りについて話し合うところを見ることができ、後学になりました。

2 生活一般

ついにカリフォルニア州の運転免許を取りました。筆記試験を二週間くらい勉強して突破し、実技試験も一か月練習して一度で合格しました。日本の運転免許は持っていますがずっとペーパードライバーだったので、やや苦勞しました。アメリカは車があると人生が変わります。ベイエリアは電車・バス充実しているので車は無くても生活できる、というのは正しいです。自家用車で行けるところはすべてタクシーでも行けます。ですがやはり自分で車を運転できると、フットワークが軽くなります。ちょっと離れたところにあるスーパー、レストラン、ショッピングモール、景色のいいところなんかも、週末時間があれば Zipcar して行こうかなと思えます。あと飛行機に乗る際にいちいちパスポートを出さずに済むのもよいです。慣れた現地人感を出すことができます。

毎秋恒例のフットボール観戦も楽しみました。今年はビッグゲーム（スタンフォードとの試合）がバークレーでの開催だったので、開場と同時に気合を入れて見に行きました。試合開始 90 分前でしたがまだ誰もおらず、ほぼ最前列の席を確保できました。散々な試合内容だったのでハーフタイムで切り上げて帰ってしまいましたが、記念となる体験でした。それとようやく大学のバスケを観戦しました。バスケはフットボールと比べると人気はないのですが、僕はこちらのほうが楽しめました。まず屋内競技場なので、気温が安定しており風も無く快適です。建物もフットボールスタジアムほどの大きさではないので、選手を間近で見ることができます。試合時間も二時間かからない程度と短く、テンポよく得点が重ねられていくので飽きることはありません。今後もシーズンパスを買って観戦しようと思います。

以上ご報告とさせていただきます。2019 年はさらに多くの研究成果を上げられるよう頑張ります。引き続きご支援をお願い申し上げます。



Figure 2: 大学のバスケの試合を観戦しました。



Figure 3: 両親がバークレーに遊びに来ました（二度目）。フットボールを見に行きました。



Figure 4: 学会でポストンに行った際に Red Sox の試合を観戦しました。



Figure 5: アーリントン国立墓地にあるケネディ大統領の墓です。この日も花が添えられていました。



Figure 6: ハロウィンのカボチャはもれなくリスのご飯になります。