



船井情報科学振興財団 海外留学奨学事業 第九回中間報告書

UC Berkeley の小林です。大学院生活も四年目が終わりました。良い報告があります。

1 研究

Science に論文が出版されました*¹ (<https://science.sciencemag.org/content/365/6448/79>)。入学以来四年弱取り組んできたプロジェクトです。前月一月の報告書で第一原稿ができているとお伝えしましたが、その後十数回の書き直しを経て3月4日に投稿、5月29日に minor revision の決定通知、そして改訂版を投稿し6月11日に正式にアクセプトされました。

論文中では、アト秒過渡吸収分光と量子化学計算を用いて二原子分子 IBr の擬交差過程における価電子ダイナミクスを詳細に解き明かしました(下図)。実験、計算、論文の執筆と、すべて自分がリードしました。複雑な XUV 吸収信号のデータの解釈を分子軌道のエネルギーと占有の変化という基礎的な議論に落とし込み、読んでいてわかりやすく、かつ読了後には勉強になったと思える、そんな論文を書けたと思います。査読者の一人からも「楽しく読ませてもらった」とコメントを貰いました。

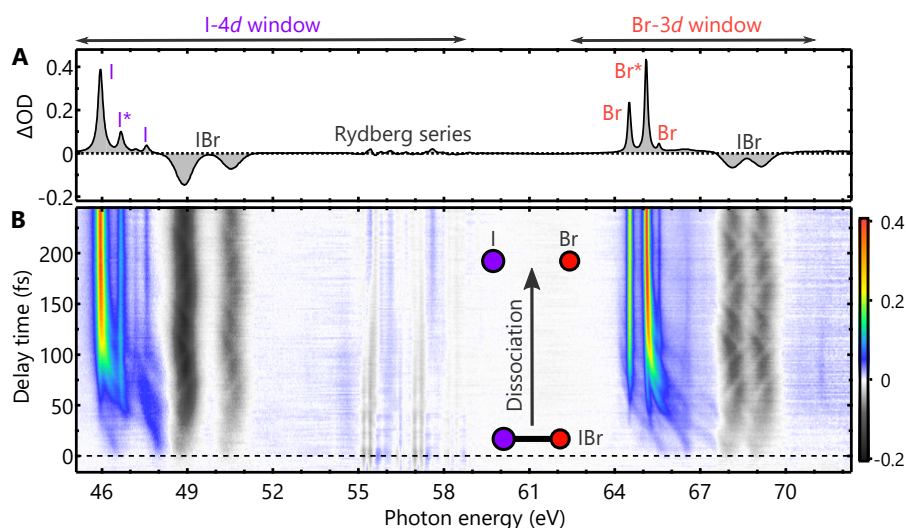


Figure 1: アト秒過渡吸収分光スペクトル。(A) 解離状態の吸収信号。ヨウ素と臭素両方の解離生成物のスピン軌道状態が識別されています。精度と量ともに優れた情報を引き出せるのがアト秒吸収分光の強みです。(B) 遅延時間で分解した信号。I-Br 結合が解離するにつれ、吸収信号の位置・強度が変化しています。論文中では、この実験結果を第一原理計算によって再現することに成功し、擬交差を含む複雑な電子状態の変化に直感的な説明を与えました。

*¹ Y. Kobayashi, K. F. Chang, T. Zeng, D. M. Neumark, S. R. Leone, "Direct mapping of curve-crossing dynamics in IBr by attosecond transient absorption spectroscopy," *Science* **365**, 79-83 (2019).

今回の喜びは格別です。単に有名ジャーナルに通ったからではなく、実験のデザイン、装置の改良、計算手法の習得など、多くの困難を乗り越えてきたプロジェクトだからです。内容もいぶし銀といったものでお気に入りです。読者をあっと言わせるコロンプスの卵的な鮮やかな手法というよりは、泥臭い実験と計算を組み合わせた実直な分子分光であり、このような論文をアクセプトしてくれた編集者と査読者の懐の広に感謝しています。

今後の予定ですが、ここ数か月で実験データを二つと計算結果を一つ取得したので、それぞれで論文を書けたらいいなと思っています。新しい学生とポスドクもこの夏加わったので、実験室は世代交代の準備をしています。これまでの四年間ずっと目の前の研究のことだけを考えて過ごしてきましたが、これからは外にも視野を広げていきます。

2 その他

LA で就職する友人のアパート探しのついでに、ロードトリップをしてきました。お正月以来ずっとパークレーに籠りっぱなしだったので、よい気分転換になりました。夏の LA は最高です。今回はオレンジカウンティを中心に探索しましたが、活気があり治安も良く、快適に生活できる場所だと思いました。

以上ご報告と致します。残りの一年も実りある研究生生活を送れるよう日々精進します。引き続きご支援をお願い申し上げます。



Figure 2: LA のビクトリアビーチで夕日を見ました。



Figure 3: Big C から臨むキャンパス。