

# 光照射下の電子の相互作用の解明と分光法の新規開発



二木 かおり Niki Kaori

大学院理学研究院助教

専門分野：表面科学

2003年 大阪大学基礎工学部卒業

2005年 東京大学大学院工学系研究科修士課程物理工学専攻修了

2008年 東京大学大学院工学系研究科博士課程物理工学専攻修了

2008年～2009年 東京大学生産技術研究所 特任研究員

2009年～2012年 中央大学理工学部助教

2012年～2017年 千葉大学大学院融合科学研究科助教

2017年～ 千葉大学大学院理学研究院助教

## — どのような研究内容か？

人類は様々な「物」の性質を知り、応用することで文明を発展させてきました。皆さんは「物の性質」を知りたい時どうしますか？私はまず電気をつけて「物」を見ます。一見何気ない行動ですが、光が物質中の電子と作用した結果、我々は物の性質を知ることが出来ます。

当研究室では主に、X線や紫外線（エネルギーの高い光である）を物質に照射した際、物質内部で起こる現象を説明する理論計算を行っています（図1）。

現在は「磁性体」と「半導体」の性質を探る新規手法を開発しています。両者とも世界の中で、日本が研究を主導してきました。

## 1. X線吸収分光法を用いた磁性体解析

円偏光と呼ばれる特殊な光を使うことで、物質の磁気的性質について調べることができます。当研究室では計算機を大型化させ、スペクトルに出現する磁気EXAFSと呼ばれる細かい振動構造が意味する性質の探求に取り組んでいます（図2）。

## 2. 紫外分光法を用いて有機半導体解析

有機半導体をなす分子結晶薄膜の電子の状態に迫る研究です。有機半導体は実用化され、応用分野ではウェアラブル装置への応用がどんどん進んでいます。しかし、電気を流さない分子が集合すると（結晶）電気を流す仕組みは分かっていません。我々の研究は分子が集合した薄い膜（分子結晶表面）の電子の状態を可視化し、どうして電気が流れるかを理解し

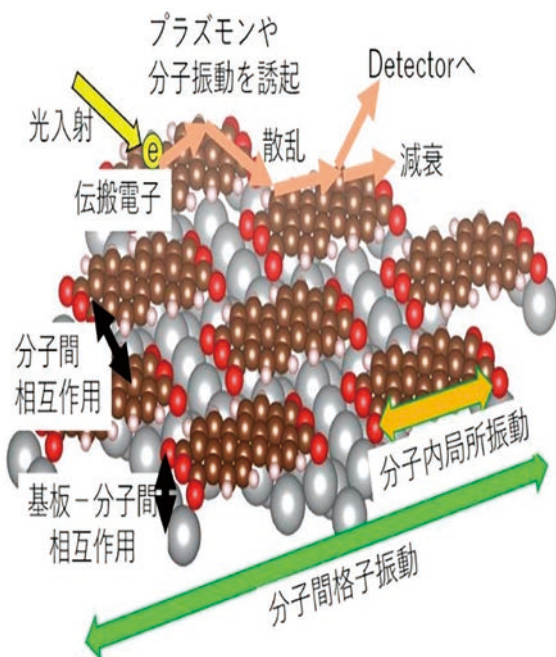


図1：光が電子や原子を駆動するダイナミックな過程

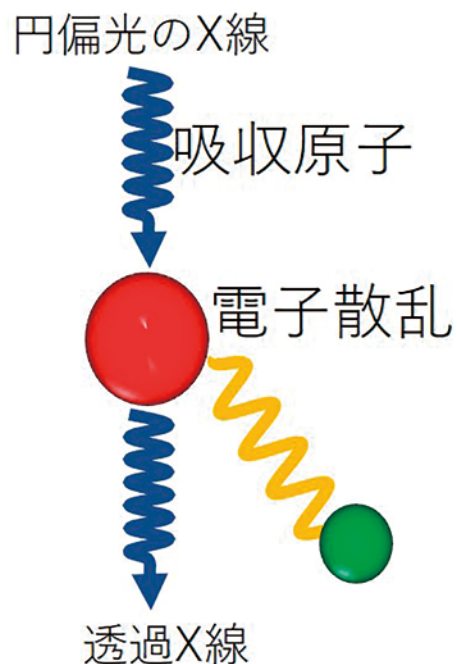


図2：XMCD概略図

ていく第一段階の研究です。

### —— 何の役に立つ研究なのか？

これまでどうして分子薄膜の電子の状態がわからなかったかということ、実験がとても難しかったからです。最近、実験の精度が上がり、分子が連なったものとして考える必要性が明らかになってきました。理論計算でも、分子と分子の弱い結合や、振動を取り入れた計算が始まっています。これまで誰も見たことがない未知の領域へと踏み込んだ計算が始まっています(図3)。国際的かつ分野融合型の研究のため、多くの異分野・海外の研究者と議論を重ねられる点が魅力です。

### —— 今後の計画は？

分子の間の弱い結合や、分子と基板の相互作用を取り入れた計算を行っていきます。分子の間の振動がどのように、物質を伝搬する電子に影響を与えるかを明らかにしていきます。AIを用いて薄膜表面の電子状態を明らかにする取り組みも始めます。

計算プログラムを国産の大型電子状態計算ソフトに組み込み、世界中の人が日本を拠点に研究をする足掛かりを作っていきます。

### —— 関連ウェブサイトへのリンク URL

研究室 HP

▶ <http://xafs.chem.chiba-u.jp/NikiGroup/index.html>

### —— 成果を客観的に示す論文や新聞等での掲載の紹介

Vacuum and Surf. Sci 63, 336-342 (2020).

J. Electron Spectros. Relat. Phenom. 233, 57-63 (2019).

Catalysis Today, 査読あり (2020) in print. DOI: 10.1016/j.cattod.2020.02.040

J. Electron Spectros. Relat. Phenom. 査読あり233, 57-63 (2019).

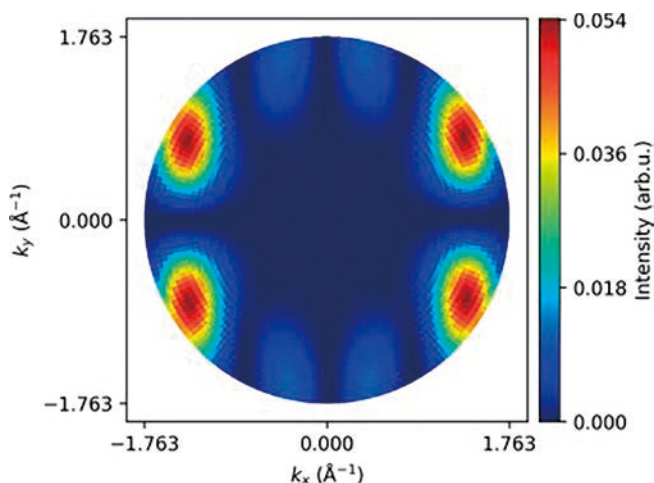


図3：理論計算結果

### —— この研究の「強み」は？

光照射下の物質中を伝搬する電子は多くの相互作用を受けています。光によって励起された電子の状態はほかの計算手法でも計算が可能です。我々の計算手法は、電子が薄膜の中で受ける「散乱」の効果も計算することが可能です。世界の中でオリジナルのプログラムを持つことで、誰も解決できない問題を解決できます。学生さんが主体的にテーマを提案したり、取り組んでくれることが研究を加速させています。

### —— 研究への意気込みは？

「とにかくこのテーマを形にする。かかわる人がHAPPYになる結果を残す。」という意気込みです。研究は毎日毎日、暗中模索の日々です。それでもめげずに、必要があればどこへでも行って知識を吸収し、何でもやって成果にまとめたいと思っています。成果がいずれ、日本の経済・教育の基盤形成に寄与できればうれしい限りです。

### —— 学生や若手研究者へのメッセージ

学生さんへ

大学4年生からは自分のテーマが与えられ、自力で解決していきます。大学の修士・博士課程で養う「基礎学力・解決力」は就活時や社会人になったときに強い武器になります。ここ数年「教育改革」「大学受験の変更」と騒がれていますが、大学自身は変わらず、「考える力」をもった人材を輩出する教育・研究を続けています。ぜひ修士・博士課程に進学し力を磨いてほしいです。実際、企業はここ最近博士を卒業した人材を求めていますよ。

若手研究者の方へ

私は修士・博士課程では実験を行い、様々な技術を叩き込んでいただきました。現在は5才の子供を育てながら研究を続けています。研究時間が限られてしまうのが悩みですが、あらゆる時間をやりくりし、周りの先生方、研究室の学生さん、保育園の先生、家族の協力を受けなんとか研究を続けています。最近心に残った言葉は「たゆたえども沈まず」と「変化するものだけが生き残る」です。とにかく挑戦していくことで未来は開けていくと思います。少なくとも動いていれば、未来はつながっていくようです。

### —— その他

表面真空学会ダイバーシティ委員

2008年東京大学発明コンテスト 大賞