

**Ab initio 計算とレーザー誘起電子線回折によるエチレン分子の構造決定**

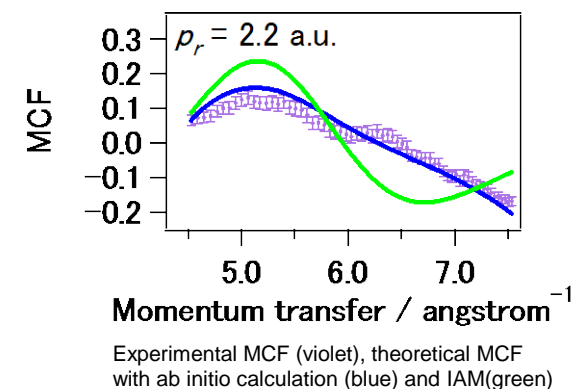
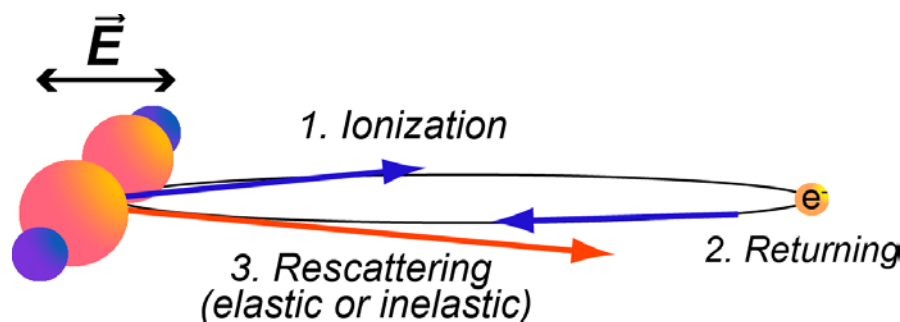
(東北大多元研) 伊藤雄太・奥西みさき・上田潔

(テキサスA&amp;M大学) Richard Carranza, Robert R. Lucchese

当論文誌は物理系では最高峰の専門誌である。

**Extraction of geometrical structure of ethylene molecules by laser-induced electron diffraction combined with *ab initio* scattering calculations**

Yuta Ito, Richard Carranza, Misaki Okunishi, Robert R. Lucchese, and Kiyoshi Ueda



レーザー誘起電子散乱・回折（左図）を用いてフェムト秒レーザーパルスによるエチレン分子の構造決定を行った。様々な原子間距離の組に対して *ab initio* 計算により分子散乱強度(MCF)を計算し（右図）、実験結果に対してフィティングすることで、低エネルギーの後方散乱を用いた場合でも、C-C距離とC-H距離の両方が求められることを示した。また通常の解析に用いられる独立原子モデル(IAM)では得られた結果が再現できないことも分かった。

*Ab initio* 散乱計算と低エネルギー電子によるレーザー誘起電子線散乱を組み合わせることで水素原子を含む多原子分子の分子構造を決定できることを初めて示した。

We established a new method to extract molecular geometry of polyatomic molecule using laser-induced electron diffraction combined with *ab initio* scattering calculations.