

非線形偏微分方程式

堤 誉志雄 (数学科)
tsutsumi@ms.u-tokyo.ac.jp

様々な学問の中で、数学はもっとも古くから人類がかかわってきた学問の一つであろう。私の専門は非線形偏微分方程式論で、数学の中では解析学と呼ばれる分野に属する。偏微分方程式自身はたぶん19世紀頃に現われたものであろうから、2千年以上におよぶ数学全体の歴史から見ればかなり若い分野かもしれない。しかし微分というものが、長い間数学者や哲学者を悩ませてきた極限や無限という概念から生まれたものであることを考えると、根っこはずんぶん古いところにあるともいえる。

私が研究対象としているものは、Korteweg-de Vries 方程式、非線形 Schrödinger 方程式、非線形波動方程式などの、非線形波動現象の時間発展を記述するのに用いられている非線形偏微分方程式である。これらの非線形偏微分方程式は、流体力学、プラズマ物理、古典的場の理論などに起源を持つ。偏微分方程式が線形であるとは、重ねあわせの原理が成立するとき、すなわち関数 u と v が解であるなら定数 c_1 と c_2 に対して $c_1u + c_2v$ もまた解となるときに言う。偏微分方程式が線形でないとき、非線形という。数学の立場からまず問題となるのは、これらの方程式が“解ける”かどうかということである。“解ける”というのは、初期時刻 $t = 0$ で解の状態を規定したとき（これを初期条件という）、その初期状態から出発した解が少なくともある正の時刻まで常に存在するということである。このように初期条件を与えて偏微分方程式の解を求める問題を初期値問題という。一つの初期状態に対して唯一の解が対応するとき、その初期値問題の解は一意的であるという。しかし、一般に初期値問題の解が一意的であるとは限らない。また数学では普通、特殊解がいくつか見つかったからといって、その偏微分方程式が解けたとは言わない。解が少なくともある有限の時刻まで存在するときこれを時間局所解と

よび、時刻無限大まで存在するとき時間大域解とよぶ。同じ非線形偏微分方程式に対しても、初期値が異なれば解は時間大域的に存在したりしなかったりすることがありうる。この辺が非線形問題のおもしろいところである。

(一般に、非線形偏微分方程式の解の振る舞いは線形偏微分方程式の解の振る舞いに較べてずっと複雑である。) 解がある時刻で途切れて時間大域的に存在しないとき、解は爆発するという。これは解が存在しなくなる時刻では、解のある量（たとえば運動エネルギーに相当する量など）が発散することに由来する。

こうして、時間発展する非線形偏微分方程式の初期値問題を考えるとき、どのような初期値に対して解は時間大域的に存在し、どのような初期値に対して解は爆発するのかを調べることが研究の対象となる。さらに、もし解が時間大域的に存在するなら、時間が十分経た後に解はどのような振る舞いをするのか、あるいはもし解が爆発するなら、爆発時刻において解のどのような量がどのように発散するのかを調べることも重要である。このような問題を、函数解析的及び実解析的手法を用いて研究している。

研究の細部について触れることはやめにして、最後に専門外の人でも比較的読みやすい参考文献をいくつか挙げ、本稿を終わりにしたい。

参考文献

- [1] 増田久弥、非線形偏微分方程式、数理科学35巻11号 pp.5-8、1997年、サイエンス社。
- [2] 小澤徹、非線形シュレディンガー方程式、数理科学35巻11号 pp.36-44、1997年、サイエンス社。
- [3] 堤正義、非線形シュレディンガー方程式、数理科学47巻1号 pp.18-37、1995年、岩波書店。

保型形式論にあらわれる球関数

織田 孝幸 (数学科)

takayuki@ms.u-tokyo.ac.jp

本来の専門は「多変数保型形式の整数論的研究」である。丁度30年やっている勘定になる。ところが、ここ5・6年は比較的小さなリー群上の特殊関数を調べている。極めて特殊な実解析の問題で、見たところ整数論とは無関係なので、国外の研究者から、「最近おまえは専門を変えたよ、もっぱらの噂だ」と揶揄されている。真実は次のようなまっとうな理由から来ている。

有理数体 Q 上定義されたりー群 G 上の、算術的不連続部分群 Γ に関して左不変な保型形式 f は、 G の右作用によってそれを移動した関数全体のなす空間上に G の表現 π を生成する。全体を G の代わりに、 G のアデール化 G_A で、部分群 Γ を G の Q -有理点 G_Q で置き換えて同様に考え G_A 上の保型形式 f で生成される G_A の表現 π を問題にしてもよい。この保型形式 f を調べるための基本的手段として、しばしば f のFourier展開を考える。それなのにどうしたのか、この極めて基本的な問題について一般の保型形式に関してほとんど何も結果がない。

この間の研究上の「歴史的事情」は次の様なものだと考えている。元々日本とドイツの研究者の研究上の関心は、 G の等質空間が複素構造をもつ有界対称領域の算術的商などに集中していて、そこでは正則保型形式が定義できる。これは実解析的な関数と見たときコーシー・リーマンの偏微分方程式系によって非常に強い制約を受けるので、Fourier展開に表れる特殊関数も指数関数の様な簡単で自明なものになる。但し正則保型形式という、重要ではあるが、限られたものしか扱わない。

他方60年代後半から80年代前半に、北米の研究者たちは、保型形式の理論を表現論的な言葉で書き換え始め、特に表現の分類に多大な成果をもたらした。特に60年代後半の「松島-村上理論」は相対Lie環コホモロジーの理論として80年代半ばにはほぼ完成した。

しかしながら、Fourier展開には表現の分類のみでは十分でなく、個々の表現のある特別な実現（あるいは模型とも言う）の研究が必要である。この種のものではWhittaker模型といわれるものが比較的一般的に調べ

られている。だがこれも特別なFourier展開の極めて特別な項にしか対応しない。

比較的小さなリー群についてもよいから、何か具体的な結果を得、こういう状況を改善しようというのが、我々の最初の目標である。

問題を少し一般に定式化しよう。 R を G の閉部分群とする。 R の平滑な表現 η を考えそれを G に平滑に誘導する。それを $\text{Ind}(\eta)$ と略記する。このときから $\text{Ind}(\eta)$ へ絡空間 $\text{Hom}_G(\pi, \text{Ind}(\eta))$ を問題にする。 R が充分大きな部分群で、この絡空間が有限次元になるときが興味深い。とりわけこの空間が1次元以下になるときが応用上重要である。絡空間の零でない元 T の像 $\text{Im}(T)$ は、 π が既約であるときこれと同型な部分表現を $\text{Ind}(\eta)$ の中に定める。この π の実現、あるいは模型に属するベクトルが我々にとって興味のある、一般化された球関数である。

群 G の階数が1あるいは2のときに筆者および周辺の人によって、現在までにいろいろ結果を得ている。例えば G を階数2の実シンプレクティック群に限っても、 R として興味深いものは少なくとも7種類ある。問題は「豊富」である。絡空間の次元が1以下となるという「定理」もいろいろな場合に得ている。証明の方法は、球関数の動径成分の満たす微分-差分系を直接計算して得ているので、それぞれ可積分系の例が得られる。解としてあらわれる特殊関数は R に依存しそれぞれ異なり、今のところ一般的な性格を見定めがたい。

表現論の研究史の曙の時期には、球関数との関連が大きな動機であった。それ故、この種の具体的計算は常に意味がある、と言うのが表現論の専門家の意見で、素人である我々は大変元気づけられている。

応用は、現在出来ている L -関数の理論の他、近い将来ポアンカレ級数の構成に使えるはずと、信じている。理論的な課題は、球部分群 R の可能性が多すぎるので、結果を統一的に記述する（幾何学的？）言葉を見付けることにある。

オブジェクト指向に基づく並列・分散計算

米澤明憲 (情報科学専攻)

yonezawa@is.s.u-tokyo.ac.jp

我々の研究室では、この十年余り一貫して標題のような研究をしております。オブジェクト指向とは、いままではC++やJAVAなどのプログラミング言語の普及で計算機科学や情報科学以外の分野の人たちにも比較的良く知られるようになりましたが、プログラミングやソフトウェア構築の新しい方式です(新しいといっても、私は25年来この研究をしてきましたが)。一般に大きなソフトウェアやプログラムは多数のモジュールの集まりとして構成されますが、その構成の単位がオブジェクト指向方式で構築されたソフトウェアでは「オブジェクト」と呼ばれているものです。(FORTRANプログラムではそのモジュールの単位が関数やサブルーティンでした。)「オブジェクト」とは、あるデータとそのデータを(たとえば、データを読む、更新する、解釈する、変換するなどの)操作する手続きや関数群を一纏めにして記述して、プログラムの1個のモジュールとしたものです。(表面的にいうと、FORTRANにおいてCOMMONデータとそれを使う関数やサブルーティン群が一緒になって一つのプログラム単位を構成するとオブジェクトができると考えるといくらか分かり易いかもしれません。)オブジェクト指向で作られてソフトウェアはこのようなオブジェクトの集まりなのです。

さて、このオブジェクトという単位は、それを構成するデータを1つの集合Aと見做し、そのデータを操作する手続きや関数をAに対する演算と考えると、数学的に一つの代数系を作るとも考えられます。代数系という数学的実体ですから、これに対して数学的な「型」が考えられます。ですから、オブジェクトを対象とする、型の数学的理論も大いに研究されています。上で述べたようにオブジェクトは、またデータとそれを操作する手続きの併合体でした。1つのオブジェクトにおけるデータはある「もの」の状態を表現し、その手続・操作群はその「もの」の状態から生じる出力を規定したり、状態を次の状態に更新する機能とも考えられます。ですから1つのオブジェクトを1つのオートマトン(状態機械)と見做せます。オートマトンは状態を持つ様々なものを表現

することができるのは周知のことですが、たとえば1つのオートマトンが1つの計算機を表現することもできずし、1つの車や1人の人間、あるいは1つのドキュメントや図形、また、1物体から1原子まで、いろいろ「もの」がソフトウェアとして表現可能になります。

1つのオブジェクトが1つの計算機に対応するとき、沢山のオブジェクトが同時に実行されれば、並列処理がそのまま実現されることになります。オブジェクトは互いにメッセージを送り合って相互作用(通信)するので、複数のオブジェクトが互いに交信すればネットワークを構成することになり、それが自然に計算機ネットワークを表現しているわけです。また、沢山のオブジェクトを1つの計算機の上で、同時に擬似的に並行して実行させることもできます。

我々の研究室では、このようなオブジェクト概念に基づくソフトウェアを作ためのプログラミング言語、そのような言語で書かれたプログラムを並列計算機上で効率的に実行するためのマシンコードを生成するコンパイラ、そのような言語の数学的意味論、実際のソフトウェアの構築などの研究をしているわけです。最近ではインターネットなどで世界中のコンピュータがネットワークを構成していますが、ネットワーク上を移動するのはデータだけではありません。データとそれを使うプログラムもネットワーク上を移動します。ですから、データと手続きの併合体であるオブジェクトもネットワーク上を移動することができます。我々の最も進んだ研究では、そのようなオブジェクトがある計算機から他の計算機にネットワークの上を自力で自立的に移動するところを想定しています。オブジェクトはオートマトンのようなものですから、新しい世界では、オートマトンの多数の群れがネットワーク上を物理的に移動・徘徊して機能することになります。我々はそのようなオブジェクトをAMO (Autonomous Mobile Object)と呼んでいます。たとえば、超高機能の電子メールシステムは、電子マネーシステムもAMOの概念によって、うまく実現できることになるわけです。

乱流

神部 勉 (物理学専攻)
kambe@phys.s.u-tokyo.ac.jp

乱流 (Turbulent flow) という語は、流体の流れの状態を視覚的に表現している。乱流とよく対比して使われるのが層流 (laminar flow) である。これらが最もわかりやすいのは、管の中の流れを染料などで可視化したときである。後者は層状の規則的な流れを指し、前者は乱れた流れを指している。さらにこれらは、数学的に同じ境界条件に対する方程式の解の多重性にも関連している。

乱流を一語で流体力学的に特徴づけることが難しいため、いろいろな表現が乱流を表すのに使われる。不規則な流れ、乱れた流れというのは、一般的な定性的表現であろう。もう少し物理的表現になると、非平衡散逸力学系、非ガウス統計の力学系、間欠的変動の力学系などがある。後の2つの性質は、異常に強い乱流拡散係数、乱流粘性係数を生ずる原因にもなる。

乱流場には無数に多くの力学的活性モードがあり、それらは物理学の保存法則を破らない非線形相互作用を行ないながら時間発展するが、同時に運動エネルギーが散逸していく。この系の特徴は、運動エネルギーの大部分が大きいスケールの成分に属しているのに対し、その散逸はむしろ小さいスケールで卓越することであり、両者のスケールが大きく分離している。このような乱流力学系を特徴づけるのがエネルギー・カスケードの性質である。運動エネルギーが小スケールの成分に吸い込まれる結果、それを補うように大スケールから小スケールへとエネルギーの流れが統計的に生じ、中間スケールでは散逸なしに一定のエネルギー流束が単に通過していく。乱流の現象論では、この中間スケールは慣性領域とよばれており、そのような領域が存在することが、発達した乱流の条件と考えられている。乱流は自発的に熱力学的な平衡状態からずれる傾向があり、むしろ流束平衡と呼べる性質をもつ。

最近の計算機による直接シミュレーションで、乱流場の詳細な構造がわかるようになった。その結果明らかになったのは、乱流場は不規則変動が一様に分布しているというのではなく、図のようなフィラメント構造があって、それらが空間的・時間的にランダムに分布していることである。視覚的に worms と呼ばれることもあるが、それらは渦構造であるとともに、いわゆる散逸構造とも解釈される。

離散的構造なら信号の間欠性の説明が可能である。乱流が非平衡散逸力学系であることも問題ないであろう。当面の一番の問題は、フィラメント性のランダムな渦構造から、観測される非ガウス分布の統計法則および、カスケード現象と関連した慣性領域の存在を説明できるか否かである。各スケールでの速度差 (ベクトル) の確率

分布関数はどのような法則に従い、スケール間でどのように移り変わるであろうか。われわれの研究室ではそのような問題の解決に取り組んでおり、乱流の統計法則について新しい理論的手がかりを得ている。散逸性の幾何学的構造を有するランダムなベクトル場の統計法則の研究は、物理学の他の分野ではあまり見当たらず、おそらく流体の乱流場で始めて詳しく研究されることになった。その研究には、数学の統計理論、ベクトル場の統計理論、あるいは理論物理の諸理論の応用によって、総合的な取り組みが必要であろう。

このような散逸力学系の構造的ランダム・ベクトル場の統計法則を明らかにすることが、流体力学者の当面の理論的課題であるが、昨年あたりから頻りに各国で乱流の研究会が開かれるようになったのも、このようなことが刺激となっている。また、これらを主テーマとする国際的な IUTAM シンポジウムが筆者の提案によって来年日本で開催される予定にもなっている。



計算機シミュレーションによる乱流場の微細構造
216×216×216, 店橋護・宮内敏雄 (東工大, 1998)

高周波によるプラズマ加熱及び電流駆動

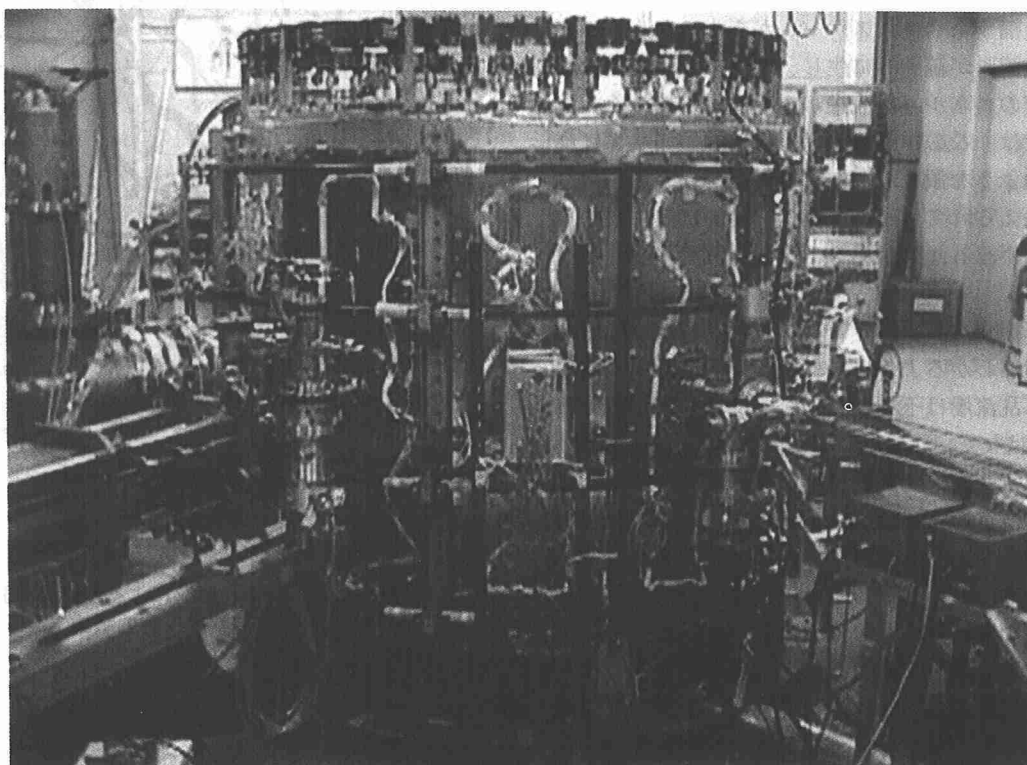
高瀬 雄一 (物理学専攻)
takase@phys.s.u-tokyo.ac.jp

新エネルギーの開発が人類にとって差し迫った課題である今日、高温プラズマを使った核融合研究の発展は目覚ましく、既に現存の装置 (EU の JET) で加熱入力と核融合出力が等しくなる「科学的臨界条件」をほぼ達成するに至っている。現在、次のステップとして日・欧・米・露の国際協力で、核融合反応による自己加熱が外部よりの加熱をはるかに上回る「燃焼プラズマ」実験装置、ITER の設計が進んでいる。この装置が日本に誘致される可能性は極めて高く、そうなれば日本が大型国際プロジェクトにおいて主導権を握る絶好のチャンスともなる。一方、今後核融合炉が経済的に受け入れられるようになるためには、装置の小型化、高効率化が必要となる。今までの主流はトカマクと呼ばれる装置であるが、最近注目されているのは「球状トカマク」と呼ばれる、トーラスを中心軸の近くまで太らせた形状の装置である。東大では、世界に先駆けて球状トカマク TST-M (写真) を使った研究を行っており、今後も斬新な研究で世界に貢献していきたいと考えている。

昨年7月に東大に移って来るまで従事していた、MIT の Alcator C-Mod トカマクにおける高周波電力を使った加熱・電流駆動研究の成果を生かし、球状トカマクの成功を左右すると考えられる非誘導電流駆動の研究

を進めたい。通常トカマクで用いられる電磁誘導による電流駆動では必然的にパルス運転になってしまうので、定常的に電流を流す手法の開発が必要であり、中でも高周波を使った電流駆動は有望とされている。この手法では、プラズマ外部より高周波電磁場をかけることにより、プラズマ内に波動を励起する。アンテナより進行波を励起し、この波のエネルギーと運動量を電子に吸収させることにより、プラズマ中に電流を流すことが可能となる (定在波、又は両方向の進行波を励起した場合には加熱のみが起こる)。このプラズマ電流の作る磁場はプラズマの閉じ込めに不可欠な役割を果たしている。

例として、Alcator C-Mod で行われたイオンバーンシュタイン波を用いた加熱実験で計測された加熱分布を図に示す。この場合プラズマ中に励起されるのは、磁気音波と呼ばれる波であるが、プラズマ内でモード変換が起こり、イオンバーンシュタイン波に変わり、それが電子に強く吸収される。これを利用してプラズマ内で波が吸収される位置を制御することができる。実験結果は理論上予測される結果と良く一致している。TST-M で使える加熱シナリオを目下検討中であるが、磁気音波を直接使った (モード変換を使わない) 加熱及び電流駆動が有力であると予測される。



TST-M 球状トカマク型マラズマ実験装置

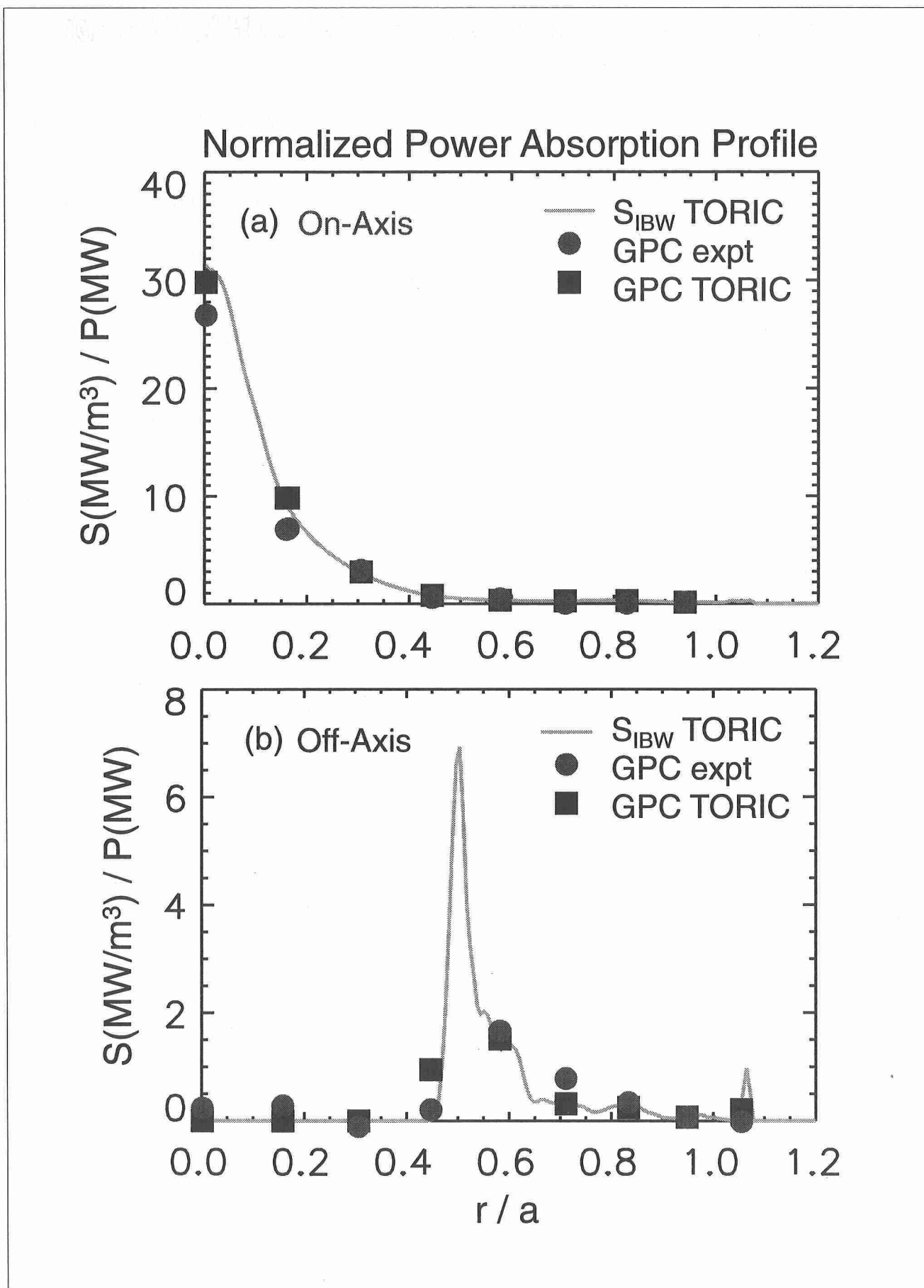


図 Alcator C-Mod トカマクで得られたイオンバーンシュタイン波による (a) 中心電子加熱、および (b) $r/a=0.5$ 付近での電子加熱。実験的に計測された電子加熱密度 (丸印) は、実線で示した計算結果とよく一致する。四角印は実験データと直接比較できるように、計算結果に電子温度測定器の装置幅の影響を加えたものである。

古い星に残る我々の銀河で起こった最初の超新星の痕跡

茂山 俊和 (天文学専攻)

shigeyama@astron.s.u-tokyo.ac.jp

質量数が8より大きい重元素は星の中の核融合反応によって合成される。星の進化と寿命はその質量で決まる。質量の小さな星は長生きして、銀河初期の情報を載せた光を未だに発しているものもある。質量の大きな星は短命で、例えば太陽の10倍以上の質量を持った星は生まれて1億年もたないうちに超新星爆発を起こして銀河に重元素を供給する。このように、銀河の元素の進化では、大質量星は元素の作り手として、小質量星は語り部としての役割を担っている。

というわけで、我々の銀河にある古い星からのスペクトルを解析することで、その星が作られた昔のガスの元素の組成比を知ることができる。一方、星の年齢は理論的なモデルとの比較から評価することができる。これら二つを比べて星の年齢と重元素量とには正の相関があることが知られていた。星の中で合成された重元素は超新星爆発によって放出され、このような超新星が銀河内でいくつも起こることによって汚染されたガスから次の世代の星が誕生するからである。しかし、この重元素量と年齢の関係がどこまで遡れるかを考える必要が出てきた。というのも、1990年代に入って、非常に重元素組成の少ない星の観測が進んできて、重元素量と水素の量の比が太陽大気のそれの一万分の一程度しかない星も見つかってきたからである。これらの星は我々の銀河の第一世代の大質量星の中で起こった元素合成に関する情報を持っている可能性がある。

第一世代の超新星と次の世代の星の関係はどうなっているのか。現在の銀河進化と星形成の理論では答えることができないので、ここでは2つの極端な状況を考えることにする。まず、第一世代の超新星が放出した重元素は銀河内で良く混ざって一様になった後、次の世代の星が誕生すると仮定する。せいぜい1億年後には重元素量はいろいろな質量の星で合成、放出された重元素量の平均となる。しかし、これでは古い星で観測された、星ごとに多様な元素組成比を説明することはできない。そこで、次に、一つの超新星が最終的に掃き集めるガスの中

から次の世代の星が生まれると仮定する。それぞれの超新星が他の干渉を受けずに次の世代の星を育むことになる。このように考えて計算したいくつかの元素の組成比は水素を含めて観測と良く合う様に見える。観測された星ごとに多様な組成比は、超新星爆発した星の質量によって合成、放出される重元素組成が異なることで説明できる。しかし、超新星爆発で放出される重元素量が理論的な計算から完璧に予言できるわけではない。実際、例えば鉄の放出量を計算することはできない。これは、超新星爆発のときに中性子星やブラックホールになる部分と放出される部分の境目がうまく予言できないためである。ちょうどその辺りで鉄は合成される。似たような場所で合成される元素にはコバルト、マンガン、ニッケルなどがある。逆に、観測された重元素組成比をもとにこれらの元素がどのような質量の星の超新星爆発によって放出されるのかを計算することができることに我々は気がついた。このようにして求めた星の質量の関数としての鉄の量は近傍で起こったいくつかの超新星で見積もられた鉄の量と星の質量の関係と矛盾しないことも確かめられた。さらに、観測されて組成比率のわかっている全ての元素について星の質量との関係を調べ、それらの銀河全体での平均が観測と合うか否かを現在調べている。今までに調べた4、5種類の元素では全てこのテストはパスしている。

従って、従来は古い星の元素組成比を見ると銀河全体の元素組成の進化がわかるだけだと思われていたが、実は、非常に古い星の元素組成比には個々の超新星爆発で放出される重元素量の情報が保存されていることを我々は見いだした。そして、その後の組成比の進化はこの非常に古い星が教えてくれる組成比によってある程度決まっているのだ。また、観測された非常に古い星の元素組成比との比較によって超新星爆発の理論モデルをテストできることになる。

この研究は国立天文台の辻本拓司氏との共同研究である。

地震発生物理学の進展と地殻活動予測シミュレーターの開発

松浦 充宏 (地球惑星物理学専攻)

matsuura@geoph.s.u.tokyo.ac.jp

地震発生の物理に関する研究はこの10年間に目覚ましい進歩を遂げ、断層域でのテクトニック応力の蓄積から準静的な破壊核の形成を経て動的破壊の開始・伝播・停止に至る全過程を基礎的物理学法則に基づいて定量的に記述することが可能となった。

地震の発生サイクルは、図に示すように、プレート間の相対運動に起因する地震断層域でのテクトニック応力の蓄積、破壊核形成域での準静的な応力解放とその周辺域での応力集中、地震発生時における地震断層域での急激な応力解放とそれに伴う地震波の放射、そして地震発生後の粘弾性的アセノスフェアの応力緩和が弾性的リソスフェア内に引き起こす応力再配分及び断層の固着に伴う強度回復の諸過程から成る。こうした一連の過程は、原理的には、弾性-粘弾性複合体の運動方程式と断層の構成則（摩擦法則）をカップルさせた非線形システムに駆動力としてのプレートの相対運動を与えることによって完全に記述される。ちなみに、断層構成則とは、断層面での破壊過程の進行を規定している物理学法則であり、断層すべりと剪断応力の関係として表現される。

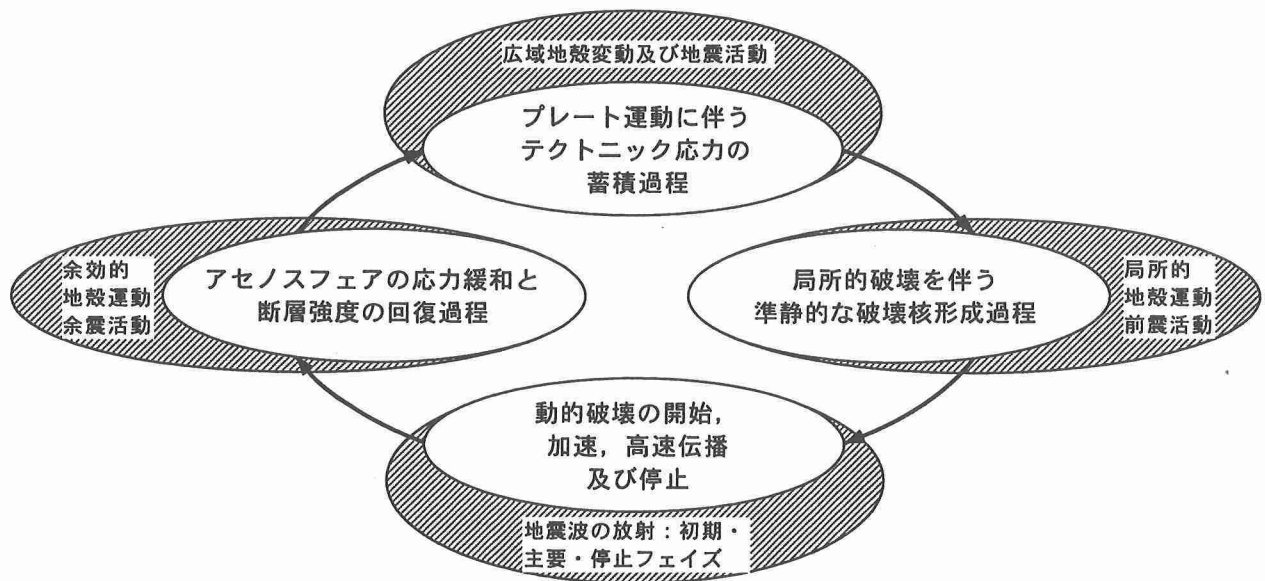
これまで、岩石実験に基づく二つの相補的な断層構成則として、すべりに依存する構成則とすべり速度と状態

に依存する構成則が提唱されてきたが、何れも地震時のすべりに伴う断層強度の低下と地震間の接触による断層強度の回復を自然な形で統一的に記述することが出来なかった。最近、我々は、断層面のすべりに伴う磨耗と接触に伴う凝着を考慮することにより、これら二つの相補的な構成則を合理的に統合した、すべりと時間に依存する新しい断層構成則を理論的に導出することに成功した。

こうした地震破壊過程を支配する物理学法則の研究やプレートの相対運動に起因するテクトニック応力の蓄積メカニズムに関する研究を基礎として、我々の研究グループは、今年度から、プレートの定常的な相対運動に伴う日本列島域の長期的な地殻変形及びプレート境界でのカップリングによるテクトニック応力の蓄積から準静的な破壊核の形成を経て動的破壊の開始・伝播・停止に至る大地震発生の全過程の定量的な予測を目指した、地殻活動予測シミュレーターの開発を進めている。

参考文献

松浦 充宏, 地震50巻特集号 (1998年), 213-227 (日本地震学会).



地震発生の全過程とそれに伴う地殻活動現象

強光子場の化学 — 新しい分子光科学の展開

山内 薫 (化学専攻)
kaoru@chem.s.u-tokyo.ac.jp

近年の超短パルスレーザー技術の発達は、分子内の核の運動を実時間でプローブすることを可能とした。すなわち、初めに分子を超短パルス光によって励起し、時間遅れをおいて再び超短パルス光を照射することによって、その時間遅れの関数として系のレスポンスを観測するという、いわゆる「ポンプ-プローブ実験」が盛んに行われるようになった。実際、電子励起状態にある分子の振動運動の様子を直接観測することが可能となっている。

その一方で、超短パルスレーザー光は、光のピーク強度をきわめて大きくできるという特徴を持つ。パルス幅100 fs (フェムト秒: $1 \text{ fs} = 10^{-15} \text{ s}$) のレーザーパルスを増幅し、1-10 TW (1 TW (テラワット) = 10^{12} W) の出力を得ることができる。このような光のビームを適当な光学系を用いて集光することによって、10-100 PW/cm² (1 PW (ペタワット) = 10^{15} W) もの光の強度を得ることが可能となる。この光子場の大きさは、水素原子中にある電子が感じるクーロン場の大きさと同じ程度である。したがって、このような光子場中の原子や分子の電子は、光の振動電場によって激しく揺さぶられることになる。

これまで分子光科学の分野では、光と分子の相互作用を議論するといっても、光の強度が摂動として扱える領域の話であった。ところが、この様に強い光子場では、「光吸収によってある状態からある状態に遷移が起きた」というような描像は当てはまらない。分子・原子と光子場は強く結合した状態にある。したがって、分子のある電子状態のポテンシャルというものを考えることは適当ではなく、光のエネルギーだけシフトしたポテンシャルどうしの相互作用によって生成した「ドレスト状態」(光のドレスをまとった状態)を考える必要がある。この強光子場の実現によって、分子光科学研究の新しい領域が開拓され始めた。

私の研究室では、このようなドレスト状態にある分子の短い時間におこるダイナミクスを観測し、光と分子の相互作用を探究するためのプロジェクトを進めている。強い光子場にさらされた分子は、光の偏光方向に並ぶことが知られている。分子はそのような短い時間に光の方

向にただちに整列し、それと同時に分子内の電子が光の振動電場によってつぎつぎと剥ぎとられ、多価イオンを形成する。この100 fs以下の極めて短い間に分子はすみやかにその構造を変化させる。そして、光との相互作用が終了した時点において、原子間のクーロン反発のために、大きな運動エネルギーとともにイオンフラグメント(主に原子イオン)が放出される。この化学結合の解離過程は「クーロン爆発」と呼ばれている。

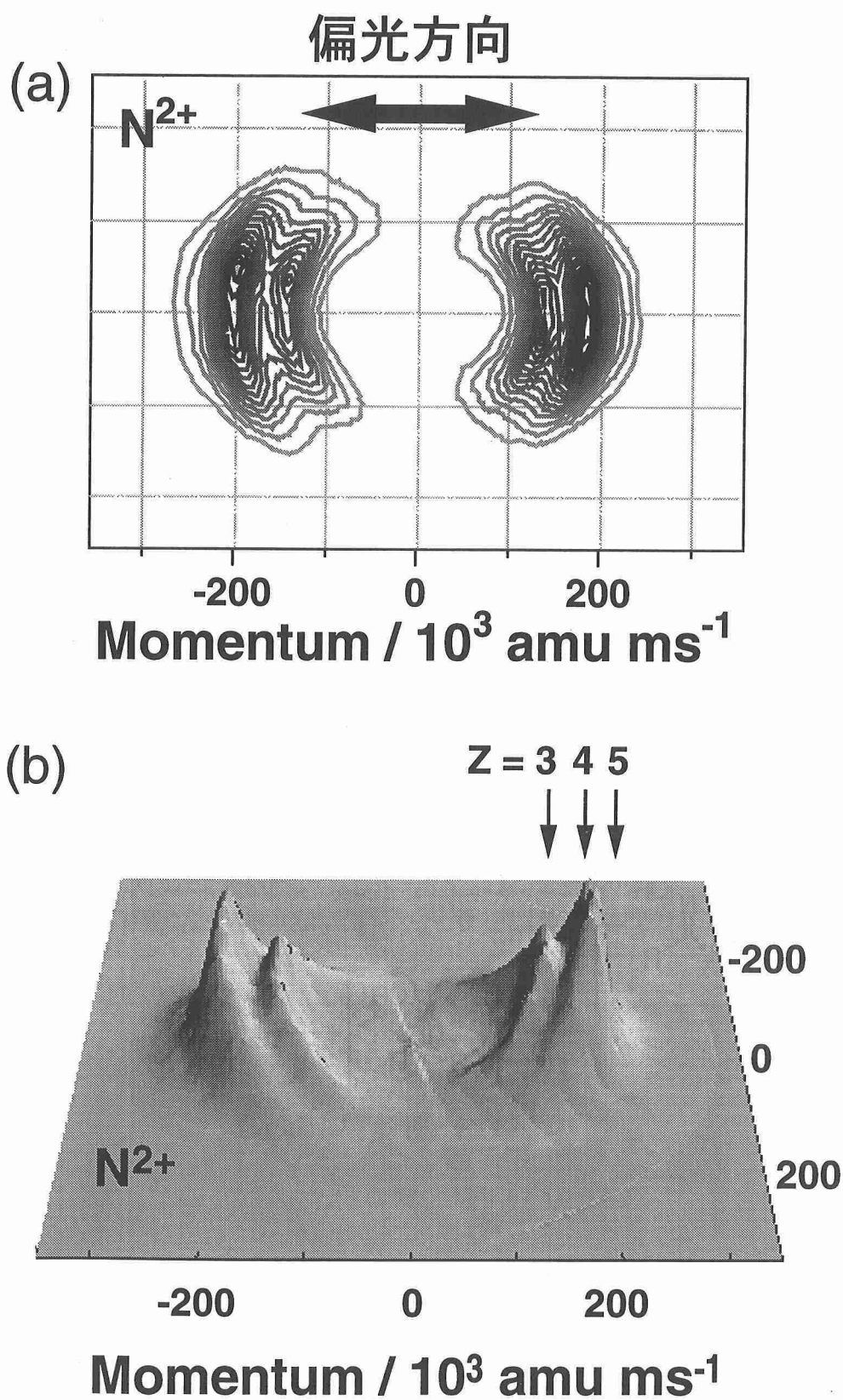
このような短時間に起こったダイナミクスを観測する方法として、われわれは質量選別運動量画像(MRMI: Mass-resolved momentum imaging)法を開発した。この方法では、クーロン爆発過程によって生じたイオンフラグメントを飛行時間型質量分析装置によって検出し、このフラグメントの射出方向の角度分布を求めるために、超短パルス光の偏光方向を検出器の方角に対して回転させる。得られた角度分布の情報は、運動量平面上に分布強度を持つ3次元情報として、等高線図または立体図として画像表示される。MRMI図の例を図1に示した。この例では、3種の多価イオン、NO³⁺、NO⁴⁺、NO⁵⁺から生成したN²⁺が少しづつ重なりながら観測されている。

この画像情報をさらに処理することにより、特定の多価親分子イオンから特定のフラグメントを生成する「単一の解離経路を表わすMRMI図」を抜き出すことも可能である。

そして、強光子場中での偏光方向への分子の超高速配向過程、さらには、もともと曲がった平衡構造をもつ分子が直線型へと速やかに構造を変えることなど、これまで知られていなかった光子場中での分子のふるまいが明らかにされつつある。分子配向や分子の幾何学的構造を光で制御するという分子光科学の新しい方向が開かれようとしている。

参考文献:

A.Hishikawa, A.Iwamae, K.Hoshina, M.Kono, and K.Yamanouchi, *Chem.Phys.* **231**, 315(1998).



NO^{z+} ($z=3-5$) のクーロン爆発によって生成した N^{2+} のMRMI図 (a)等高線図、(b)立体表示図

オキシム窒素原子上での置換反応による含窒素化合物の合成

奈良坂 紘一 (化学専攻)

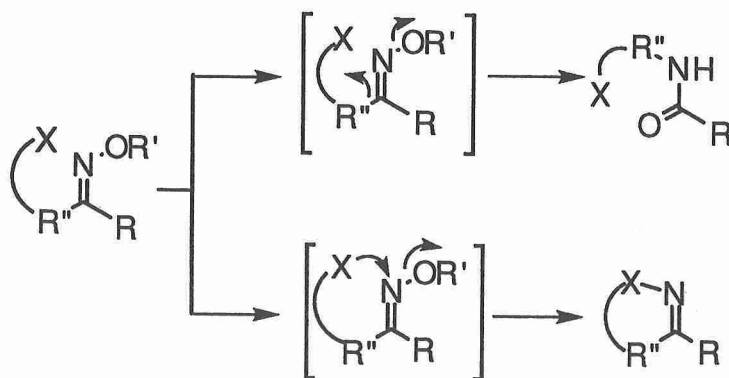
narasaka@chem.s.u-tokyo.ac.jp

アミノ化合物には生理活性を示すのが多く、医薬・農薬などに広く利用されている化合物である。一般にアミノ化合物の合成はニトロ化合物やニトリル、イミンなどの含窒素化合物を還元する方法と、炭素求電子剤に対し窒素求核剤を反応させる方法がもっぱら用いられてきた。これとは反対の組み合わせである、窒素求電子剤と炭素求核剤との反応によってもアミノ化合物を合成することが出来るが、従来のこのタイプの反応は適用範囲が限られており、有用性の高い反応はほとんど知られていない。

オキシム化合物は、工業的に6-ナイロンの原料であるε-カプロラクタムの合成に利用されているように、一般的には Beckmann 転位を起こす。最近我々はオキシム化合物を利用し、反応を適宜デザインすることにより、従来例のないオキシムの窒素原子上での求電子的な置換反応が進行することを見出した。さらにこの新しい形式の反応を利用して、各種複素環化合物やアミン類の有用

な合成法を開発している。例えば *m*-ヒドロキシフェネチルケトンの *O*-2,4-ジニトロフェニルオキシム誘導体に水素化ナトリウムを作用すると、芳香環が窒素原子上に攻撃した生成物である8-ヒドロキシキノリン類が合成できる。さらに、求核部位としてマロン酸エステルを持つオキシム誘導体を適当な条件下で処理すると、窒素原子上で置換反応が進行し、各種環状含窒素化合物を効率よく合成することができる。またベンゾフェノン *O*-スルホニルオキシム誘導体に対しアルキル銅試剤を作用すると、同様に窒素原子上で置換反応が進行し、加水分解により第一級アミンを収率よく与えることも見出している。通常 sp^3 炭素原子上での置換反応は容易に進行するが、 sp^2 窒素原子上での置換反応を効率よく行った例はなく、今回開発に成功したオキシム化合物を利用する反応は、各種の含窒素化合物の合成に新しい可能性を示したものといえよう。

Beckmann 転位



オキシム窒素原子上での置換反応

窒素原子上での置換反応を利用する骨格形成反応