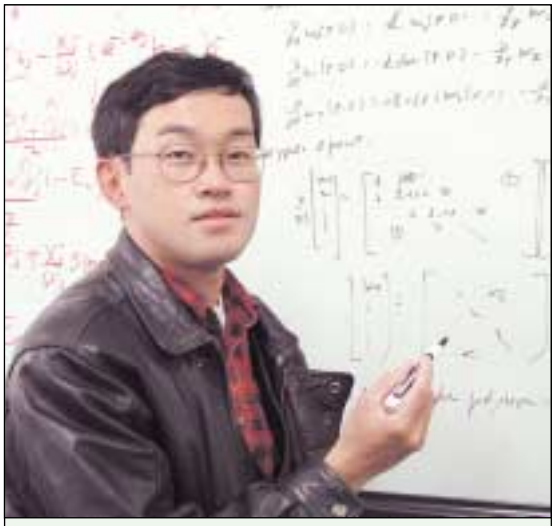
分子系における量子効果と散逸の理論的研究



谷村　吉隆（助教授）

1984年慶大工卒　1989年慶大理工博士課程修了、理学博士（物理）　イリノイ大学アーバナ・シャンペン校ベックマン研究所及びロチェスター大学化学科博士研究員を経て1994年4月より現職

TEL: 0564-55-7311　FAX: 0564-53-4660

電子メール: tanimura@ims.ac.jp

ホームページ: http://fuji.ims.ac.jp/defaultj.html

いつの時代においても、科学の最先端は知識のたどり着く、地平線にあると言えるだろう。今世紀の物理と化学の発展は著しく、最近ではその知識の地平線が、大きく重なる様になってきた。分子科学は、その二つがぶつかり合う所に生じた研究領域であり、無限とも言える多様性を示す分子、そして、その集合体を対象としている。この多様性こそが分子科学の持つ面白さであり、また難しさなのだが、その研究には理論、実験を問わず、あらゆる分野のあらゆる知識を総動員する必要がある。当研究室では、この様な多様な現象に秘められた共通原理を、様々な角度から、理論的に総合的に探求していく事を目標としている。具体的には(1) 凝縮相中分子の超高速分光の基礎理論の開発、(2) 化学反応における量子過程と散逸効果の研究、(3) 溶媒中の分子の電子移動反応のモンテカルロシュミレーション、(4) 光合成キノン分子のプロトン移動反応と電子移動反応、(5) 有機導体の量子化学計算による研究等を行っている。固体系から、生物系まで幅広く研究しているが、電子移動や化学反応等を支配している量子効果と、そこに及ぼす溶媒等の散逸系の効果について、特に重点を置いている。いずれの問題も、化学や物理的な実用性のみならず非平衡統計力学や量子力学の基礎理論等、現代物理に残された最も基礎的な問題でもある。物理的にも数学的にも非常に基礎的な研究を行っているが、計算結果は、スペクトル等の実験観測量として提示する等、実用性の高い研究を心がけている。用いる手法も、スピングラス理論、経路積分法、Fokker-Planck方程式、モンテカルロ法、量子化学計算、CI法等と多岐に渡っているが、これら解析的、数値的手法を全て独自に開発しており、その先進性こそが我々の最大の武器である。

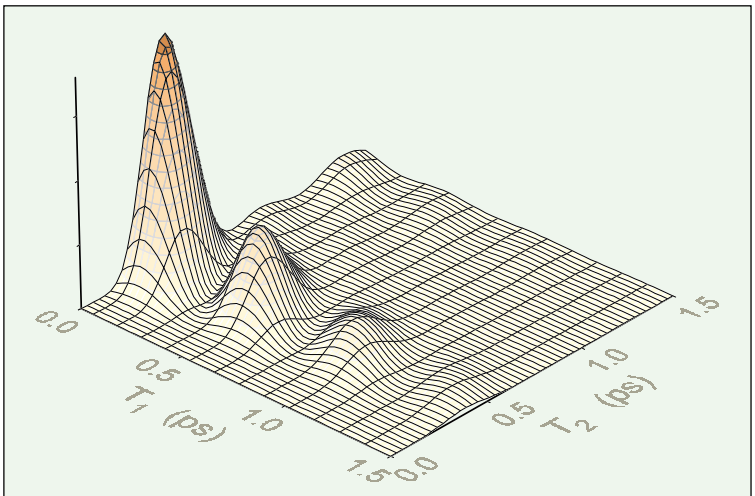
例えば、2次元ラマン分光法は、我々が量子ブラウン運動理論を拡張する事により理論的に提唱したもので、その有用性が認められ世界各地でその実験が行われる様になったが、これは新しい理論手法を用いて導出出来た結果を、最新の実験技術と結びつけて、実験可能な観測量として提示したからに他ならない。基礎的な研究者は、しばしば独善的になりがちであるが、分子科学は、基礎的な研究も、実用性と離れる事なく行えると考えており、我々もその様な研究を心がけている。だからといって、単に実験の精度を検証するだけの様な、主体性のない研究に力を注ぐつもりはなく、あくまで概念的に新しい事を提示する事を目標としている。

当研究室は、物理・化学の様々なバックグランド（例えば素粒子論や量子化学等）を持った人間が集まっており、物理学者が化学、化学者が物理学等、それぞれの基礎と異なる分野の知識を身につける事により、独特な切り口から切り込む事をモットーにしている。そして、多様な問題を取り扱う事により、分子科学全体のグローバルな流れを知り、その共通原理を探る事により、自らの手で、知識の水平線を少しでも広げる事を目指している。

参考文献

1) 谷村吉隆，「溶液内化学反応ダイナミックスと超高速分光」，日本化学会編，季刊化学総説 **44**, 103 (2000).

2) 谷村吉隆，「2次元ラマン分光による溶液系の解析」，電気化学および工業物理化学，**38**, 125 (2000).



モースポテンシャル系における2次元ラマン応答