



中村 宏樹 (所長)

1963年東京大学卒 1965年東京大学助手 1969年工学博士
 1971~1973年 The Ohio State Univ. 及び Univ. of Pittsburgh 博士研究員
 1974年東京大学講師 1979年東京農工大学助教授
 1981年分子科学研究所教授
 TEL: 0564-55-7310
 FAX: 0564-53-4660
 電子メール: nakamura@ims.ac.jp

当研究室では、分子あるいはその集合体が引き起こす様々な動力学現象の基本メカニズムの解明と理論の開発を行っている。¹⁾ 現在の主要研究テーマとその概要は次の通りである。

化学反応動力学

化学反応は化学の基礎であり、物質変換及びエネルギー変換の基礎である。我々の目的は、化学反応素過程の動力学機構を理解し、有効に反応を起させる方策を探り、出来ればそれを自在に制御する理論を構築する事である。その為に、簡単な系の量子動力学を正しく評価する方策を身に付けて機構の理解を深めると同時に、それを規準として大きな反応系に適用可能な半古典力学的な理論の開発を進める。また、それに必要な基本メカニズムの理論構築と機構の解明を行う。後者には、後で述べる非断熱遷移やトンネル現象等の理論構築がある。例えば、Zhu-Nakamura理論を用いて電子状態の変わる大きな反応系を正しく有効に取り扱うことの出来る理論が構築され得る。

非断熱遷移の理論

非断熱遷移は物理、化学、生物の様々な分野に於ける動力学過程の基本メカニズムとして極めて重要である。我々は、その解析的基礎理論の開発を進めている。最近の大きな成果はポテンシャル交差による非断

熱遷移の基礎的な解析理論を60年振りに完成したことである (Zhu-Nakamura理論)^{2,3)} これ以外の型の非断熱遷移の理論の構築をも進めている。

多次元トンネル理論

量子力学誕生以来重要な量子効果として知られているトンネル現象の多次元理論は依然として大変不十分な状態にある。我々はこの確立をも目指している。最近、インスタントン理論を大変有効な形で多原子分子に適用出来る定式化と具体的応用に成功した。⁴⁾

化学動力学過程の制御^{5,6)}

レーザー場によってポテンシャル交差を人工的に誘起する事が可能で、しかもそこでの非断熱遷移をレーザーを操作することによって制御する事が出来る。この我々独自の理論を現在展開・応用せんとしている。

高励起状態の特異な性質とその動力学⁷⁾

電子的に高く励起した超励起分子と振動高励起分子は、特異な運動形態や様々な崩壊過程を有し、現象論的にも理論的にも興味ある対象である。これらの動力学と同型性の解明を進めている。

参考文献

- 1) H. Nakamura, "Theoretical Studies of Chemical Dynamics: Overview of Some Fundamental Mechanisms," *Ann. Rev. Phys. Chem.* **48**, 299 (1997).
- 2) 中村宏樹, 「化学現象を支配する非断熱遷移の理論 60年振りの完全解」, *現代化学* **8**, 36 (1996).
- 3) H. Nakamura, "Nonadiabatic Transition: Concepts, Basic Theories and Applications," World Scientific; Singapore (2002).
- 4) G. V. Mil'nikov, *et al.*, "Tunneling Splitting in Polyatomic Molecules: Application to Malonaldehyde," *J. Chem. Phys.* **119**, 10 (2003).
- 5) Y. Teranishi and H. Nakamura, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 2032 (1998).
- 6) K. Nagaya, Y. Teranishi and H. Nakamura, "Control of Molecular Processes by a Sequence of Linearly Chirped Pulses," *J. Chem. Phys.* **117**, 9588 (2002).
- 7) M. Hiyama and H. Nakamura, "Characteristics and Dynamics of SuperExcited States of Diatomic Molecules" in *Structure and Dynamics of Electronic Excited States*, Springer Verlag, p. 298 (1999).

専門領域

機能分子科学専攻



反応動力学理論
 半古典力学
 非断熱遷移理論
 超励起分子
 統計性と選択性