量子開放系分子における多電子ダイナミクスの理論

専門領域

構造分子科学専攻

信定　克幸（助教授）

1991年東北大学理学部卒業　1995年東京大学大学院理学系研究科博士課程中退　博士（理学）　1995年分子科学研究所助手、1999年北海道大学理学部助手を経て2004年６月より現職

TEL: 0564-55-7311　FAX: 0564-53-4660

電子メール: nobusada@ims.ac.jp

分子は多数の電子と多数の原子核から構成される複合粒子系とみなすことができ、更に分子が関わる諸問題を現象として分類すれば、定常状態の問題とダイナミクスの問題に大別できる。過去の分子科学におけるダイナミクスの研究では、主として多数個の原子核のダイナミクスを議論していた。（正確に言えば、断熱近似の範囲内で電子系の自由度を消去してしまい、多原子ダイナミクスの問題として取り扱う。）一方、電子ダイナミクスも研究の対象に成り得るが、通常その変化は多原子ダイナミクスと比べると圧倒的に速く、実験的にも理論的にも実時間観測・解析が難しく、十分に研究が行われていない。我々の研究室では、金属原子を含む分子系を対象として、実時間多電子ダイナミクスの本質を理解すべく研究を行っている。具体的な研究課題は以下のようである。

①貴金属クラスターの線形・非線形光学応答

時間依存密度汎関数理論に基づき、実時間多電子ダイナミクスを解析するための方法論を開発し、レーザー場中での貴金属クラスターの多電子ダイナミクス（高次高調波発生、多重イオン化、電荷移動）の数値計算的解析を行っている。また、複数の有機分子で保護された金属クラスター（Monolayer-Protected Metal Cluster：MPC と呼ばれる）の電子ダイナミクスの研究も行っている。一般的にMPCは、裸の金属クラスターとは異なる物理的・化学的性質を示すが、定常的性質・動的性質共に十分に分かっていないのが現状である。ここでは、チオラート分子によって保護された貴金属クラスターの電子構造の特定から始め、その光吸収や発光などの光学的性質の解明を行っている。

②量子開放系分子における多電子ダイナミクス実時間解析

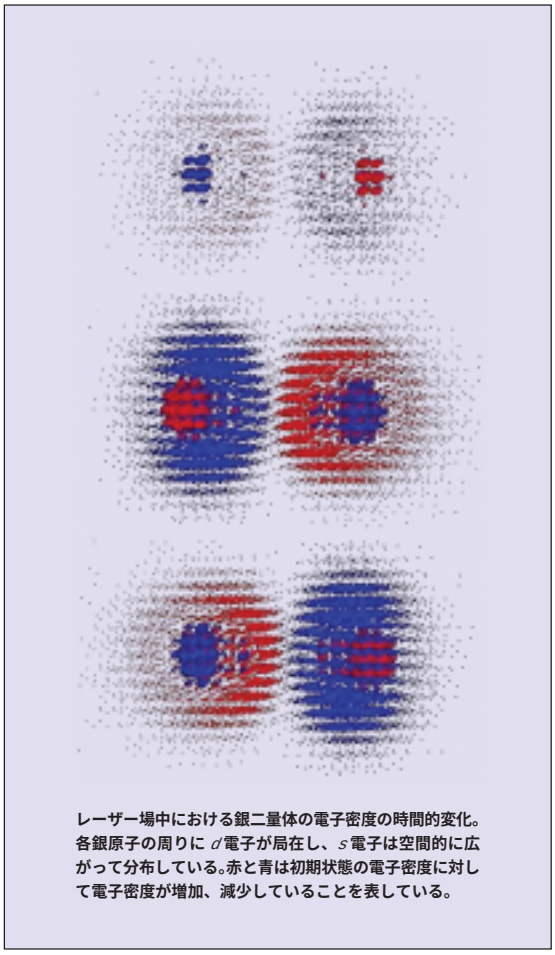
課題①の研究を、周りの環境と相互作用している分子（量子開放系分子と呼ぶ）における多電子ダイナミクスの研究へと発展させる。量子開放系分子では電子エネルギーの量子的散逸が起こるが、現在のところその散逸の詳細は理論的に十分に分かっていない。この問題を解決するために、化学ポテンシャルを基本的な物理量として導入し、電子的量子散逸系を扱うための理論的方法論を構築する。方法論を確立した後、金属表面吸着分子系における多電子ダイナミクス、ここでは電荷移動とそれに伴う金属表面や吸着分子の動的変化の解明を行う。

オリジナルな研究のシナリオを描くことが出来る精神的にも体力的にも頑強な若者の参加を期待しています。

参考文献

1) K. Nobusada and K. Yabana, “High-order harmonic generation from silver clusters: Laser-frequency dependence and the screening effect of *d* electrons,” *Phys. Rev. A* **70**, 043411 (2004).

2) K. Nobusada, “Electronic structure and photochemical properties of a monolayer-protected gold cluster,” *J. Phys. Chem. B* **108**, 11904 (2004).



レーザー場中における銀二量体の電子密度の時間的変化。各銀原子の周りに *d* 電子が局在し、*s* 電子は空間的に広がって分布している。赤と青は初期状態の電子密度に対して電子密度が増加、減少していることを表している。