

信定 克幸 (准教授)

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

専門領域

構造分子科学専攻

実在する分子系は通常、有限温度において周りの環境と相互作用していることが多く、必然的に分子系と周りの環境の間では熱的エネルギーの出入り(熱的揺らぎ)や電子のやり取り(電子数の揺らぎ)が起こり得る。我々のグループでは特に電子数の揺らぎを持つ分子、すなわち電子溜めと相互作用している分子系において引き起こされる量子多体系ダイナミクスの理論的解明を目標として研究を進めている。振動エネルギーや回転エネルギーの緩和過程に関しては多くの優れた研究例があるが、電子エネルギーの散逸に関する研究は、理論的にも実験的にもあまり行われていないのが現状である。例えば多電子系の場合、電子相関や可干渉性等の量子多体系特有の問題が露骨に現れること、また一般的に電子が関わる現象は非常に短い時間スケールで起こることが、散逸を含む多電子系ダイナミクスの研究を難しくしている大きな要因である。この研究課題には電子的揺らぎを取り込む問題と量子多体系ダイナミクスを記述する問題の2つが存在する。電子的揺らぎの研究においては、表面吸着分子系や電極反応を電子レベルで記述するための非平衡定常状態理論の開発とその方法論の適用を行っている。最近、表面吸着原子系を記述するための新しい方法論を開発した。この方法論では表面吸着原子系を有限サイズのクラスターで近似しているが、クラスターの端において適切な境界条件を課すことで半無限系であるはずの表面を正しく記述することに成功した。一方、量子多体系ダイナミクスの研究においては、レーザーパルス照射により引き起こされる電子ダイナミク

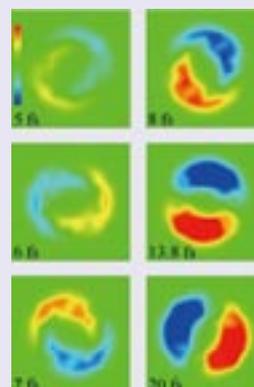
スの詳細な解明を時間依存密度汎関数理論に基づいて行った。最近の成果としては、リング状分子に円偏光レーザーパルスを照射することにより、効率的にリング内に電流を誘起し、同時に磁気モーメントを発生できることを示した。

複数の有機分子で保護(又は修飾)された金属クラスターは、裸の金属クラスターとは異なる化学的・物理的性質(例えば、線形・非線形光学応答、伝導性、磁性、触媒作用、化学反応性など)を示すことから基礎理学・応用科学両方の観点から盛んに研究されている。我々は、チオラート分子によって保護された様々な金クラスターを対象として、その電子構造と光学的性質の解明も行っている。従来チオラート分子は金クラスターの表面を覆うような形で結合すると思われてきたが、我々は最近、金原子と硫黄原子が1対1で結合した強固なAu-Sネットワークを形成し、このネットワーク構造が金チオラートクラスターを安定化する大きな要因であることを明らかにした。

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する。

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 and K. Yabana, "Photoinduced electric currents in ring-shaped molecules by circularly polarized laser pulses," *Phys. Rev. A* **75**, 032518 (2007).
- 3) T. Iwasa and K. Nobusada, "Theoretical Investigation of Optimized Structures of Thiolated Gold Cluster $[\text{Au}_{25}(\text{SCH}_3)_{18}]^+$," *J. Phys. Chem. C* **111**, 45 (2007).
- 4) T. Yasuike and K. Nobusada, "Open-Boundary Cluster Model for Calculation of Adsorbate-Surface Electronic States," *Phys. Rev. B* **76**, 235401 (12 pages) (2007).



左回りの円偏光レーザーパルスを照射した後のリング状分子に発生する電荷密度の時間的変化。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。共鳴励起のため、レーザーパルスを切った(13.8 fs)後も、電荷密度は時間的に変化し続けていることが分かる。