

## 3-2 理論研究系

### 分子基礎理論第一研究部門

岩田末廣(教授)\*

A-1) 専門領域：理論化学

A-2) 研究課題：

- 分子構造理論における新しい方法と数値解析法の開発
- 水クラスターとその錯体
- 大気環境下の原子・分子過程の計算化学

A-3) 研究活動の概略と成果

- 固有値スペクトル分布を繰り返し法で求める方法により離散および連続スペクトルが混在する多準位へのフランク・コンドン因子を計算し、 $\text{CO}^+$ の ${}^2\Pi$ 準位へのZEKEスペクトルに観測される振動回転遷移の幅の異常な量子数依存性を解析し、新しい実験を提唱した。
- 水クラスター負イオン $(\text{H}_2\text{O})_n^-$ と1族金属 $\text{M}(\text{Li}, \text{Na})$ と水クラスターの錯体 $\text{M}(\text{H}_2\text{O})_n$ に共通して見いだされる $(\text{OH})\{e\}$ ( $\text{HO}$ )結合とも呼べる電子雲と複数の $(\text{OH})$ 結合の相互作用を理論的に調べた。振動スペクトルのパターンから $\{e\}$ 周辺の構造を同定できることも判明し、振動スペクトルの観測実験の重要性を提唱した。これらのクラスターの電子スペクトルを理論的に計算し、構造と水の配位数に敏感な吸収帯の存在を预言した。
- 大気環境で進行する様々な原子・分子過程を理論化学・計算化学の立場から研究する研究プロジェクト(科学技術振興事業団・計算科学技術活用型研究開発推進事業)を推進した。遠隔計測の基礎データとなる $\text{N}_2$ 、 $\text{O}_2$ 、 $\text{CO}$ とそのイオン $\text{N}_2^+$ 、 $\text{O}_2^+$ 、 $\text{CO}^+$ の各種分光学データを精密に計算し、電子・振動・回転スペクトルの絶対強度、放射寿命を見積もった。実際、人工衛星で測定された太陽の $\text{CO}$ 分子の赤外スペクトルの強度分布から太陽大気の温度分布を推定することを実証し、さらにオーロラの発光中に観測される $\text{N}_2^+$ の発光スペクトルを解析し回転温度と振動温度が著しく食い違っていることを示した。OHラジカルと飽和炭化水素および植物起源のイソプレンやテルペンとの反応寄港も解明した。

B-1) 学術論文

**K. OKADA and S. IWATA**, "Accurate Potential Energy and Transition Dipole Moment Curves of Several Electronic States of  $\text{CO}^+$ ," *J. Chem. Phys.* **112**, 1804 (2000).

**T. TSURUSAWA and S. IWATA**, "Theoretical Studies of the Water Cluster Anions Containing the  $(\text{OH})\{e\}\text{HO}$  Structure: Energies and Harmonic Frequencies," *Chem. Phys. Lett.* **315**, 433 (2000).

**T. TSURUSAWA and S. IWATA**, "The Electron-Hydrogen Bonds and the OH Harmonic Frequency Shifts in Water Cluster Complexes with a Group 1 Metal Atom,  $\text{M}(\text{H}_2\text{O})_n$  ( $\text{M} = \text{Li}$  and  $\text{Na}$ )," *J. Chem. Phys.* **315**, 433 (2000).

**M. J. WOJCIK, H. NAKAMURA, S. IWATA and W. TATARA**, “Theoretical Study of Multidimensional Proton Tunneling in the Excited State of Tropolone,” *J. Phys. Chem.* **112**, 6322 (2000).

#### B-4) 招待講演

**S. IWATA**, “How can we measure temperature of molecules in aurora and on the sun by accurate quantum chemical calculations?”

The annual meeting of Alexander von Humboldt Foundation, Smolenice (Slovakia), September 2000.

岩田末廣, 「分子軌道理論の開拓と分子科学への応用」, 日本化学会春季年会, 千葉, 2000年3月.

**S. IWATA**, “A few topics on one- and two-electron physical properties in the molecular orbital theories” Okazaki Conference “Molecular Orbital Theory for the New Millennium: Exploring New Dimensions and Directions of the Molecular Orbital Theory,” Okazaki, January 2000.

**S. IWATA, T. TSURUSAWA and F. CHEN**, “The electron-hydrogen bond: structural and spectroscopic properties,” IMS COE Conference ‘Interplay of theories and experiments in structural analyses of molecular clusters,’ Okazaki, December 1999.

#### B-6) 学会および社会的活動

##### 学会の組織委員

第三回世界理論有機化学会議プログラム委員会委員長: 豊橋(1993.7).

Symposium “Computational Quantum Chemistry” in PacfiChem’95 (Hawaii) (1995.12).

Symposium in PacfiChem2000 (Hawaii) (2000.12).

##### 文部省 学審等の委員

日本化学会関東支部委員(1976-78).

日本化学会学会賞等選考委員(1991-92).

学術振興会特別研究員等審査会専門委員(1994-95).

通産省産業技術部会・原子分子極限操作技術分科会委員(1992-).

慶応義塾大学大型研究助成審査委員(1994-).

東京工業大学総合情報処理センター外部評価委員(1995-95).

日本化学会学術賞等選考委員(1996-97).

東京大学物性研究所運営協議会委員(1996-).

北海道大学理学研究科化学専攻 外部評価委員(1998).

学術振興会特別研究員等審査会専門委員(2000-01).

##### 学術雑誌編集委員

日本化学会関東支部委員(1976-78).

「化学と工業」編集委員(1979-81).

*Bulltin of Chemical Society of Japan* 編集委員(1981-83).

日本化学会学会賞等選考委員(1991-92).

*Bulltin of Chemical Society of Japan* 編集委員(1991-93).

*Bulltin of Chemical Society of Japan* 副編集委員長(1994-97).

*Computer Physics Communication*, Specialist editor (1986-93).

*Theoretica Chimica Acta* (1994-97).

*Theoretical Chemistry Accounts* (1997-).

*Molecular Physics* (1999-).

科研費の班長・研究代表者

重点領域研究「化学反応理論」領域代表者(1993-96).

学術振興会産学協同研究支援事業「化学反応・分子設計の計算化学ネットワークの構築」世話役(1995).

科学技術振興偉業団・計算科学技術活用型特定研究開発推進事業 研究代表者(1998-2001).

\* 2000年4月1日広島大学大学院理学研究科教授