

谷村 吉 隆 (助教授)

A-1) 専門領域：化学物理理論、非平衡統計力学

A-2) 研究課題：

- a) 多次元分光法による溶液分子の振動モード解析の研究
- b) 冷却液体やガラスの自由エネルギー面の分光学的研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 溶液の分子間振動を対象とした2次元ラマン、溶液内分子の分子内振動を対象とした2次元赤外の2種類2次元分光法は近年研究者人口が増加し、競争の激しい分野となってきた。本年度は特に理論における進歩が著しく、MDや分子液体論を用いての研究に大幅な進展があった。かかる状況で、2次元分光における回転系や熱浴との非線形結合の効果を調べるなどの先駆的かつ基礎的な研究を行い論文にまとめた。また化学反応系についても計算を始めており、トロポロンのプロトン移動反応の2次元赤外分光スペクトルを現在計算中である。
- b) ラストレートした系の一般的なモデルとして、乱雑に配置した双極子を持つ分子系のモデルを提案し、その相転移現象や自由エネルギー面をレプリカ交換モンテカルロ法を用いて研究した。自由エネルギー面とダイナミックスの関係を調べるために、ハミルトン力学系に従うモンテカルロ法を考案した。スピンボゾン系についてそのモンテカルロ法を適用しその精度の検討を行った。

B-1) 学術論文

Y. TANIMURA, V. B. P. LEITE and J. N. ONUCHIC, “The Energy Landscape for Solvent Dynamics in Electron Transfer Reactions: a Minimalist Model,” *J. Chem. Phys.* **117**, 2172–2179 (2002).

Y. SUZUKI and Y. TANIMURA, “Probing a Colored-Noise Induced Peak of a Strongly Damped Brownian System by One- and Two-Dimensional Spectroscopy,” *Chem. Phys. Lett.* **358**, 51–56 (2002).

Y. SUZUKI and Y. TANIMURA, “Two-Time Correlation Function of a Two-Dimensional Quantal Rotator in a Colored Noise,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **71**, 2414–2426 (2002).

T. KATO and Y. TANIMURA, “Vibrational Spectroscopy of a Harmonic Oscillator System Nonlinearly Coupled to a Heat Bath,” *J. Chem. Phys.* **117**, 6221–6234 (2002).

S. -D. DU and Y. TANIMURA, “On Single-Mode Λ - and V-Type Micromasers: Quantum Interference *versus* Photon Statistics,” *J. Opt. B* **4**, 402–410 (2002).

O. HINO, Y. TANIMURA and S. TEN-NO, “Application of the Transcorrelated Hamiltonian to the Linearized Coupled Cluster Singles and Doubles Model,” *Chem. Phys. Lett.* **353**, 317–323 (2002).

B-3) 総説、著書

谷村吉隆, 「化学物理入門」, 数理科学別冊, サイエンス社 (2002).

カール・ヘス著, 松田和典、石橋晃、関俊司、谷村吉隆共訳, 「半導体デバイス理論」, 丸善 (2002).

B-4) 招待講演

Y. TANIMURA, “Femtosecond two-dimensional vibrational spectroscopy of liquids molecules,” ブラジル物理学会年会, Caxambu (ブラジル), May 2002.

Y. TANIMURA, “Femtosecond two-dimensional vibrational spectroscopy of liquids molecules,” Physics colloquio, University of Campina, ブラジル, May 2002.

Y. TANIMURA, “Dynamics of molecules in condensed phase; possible probe by 2D spectroscopy,” Physical chemistry Colloquium, State university of New York at Stony brook, 米国, June 2002.

Y. TANIMURA, “Quantum random walk generated from the quantum Fokker-Planck and master equation with Langevin force,” MIT, Boston (米国), July 2002.

Y. TANIMURA, “The Energy landscape for solvent dynamics in electron transfer reaction: A Minimalist Model,” The 3rd International Workshop on Diffusion-Assisted Reactions, Seoul, August 2002.

Y. TANIMURA, “Two-dimensional spectroscopy of glassy system,” The 1st Symposium on Multidimensional vibrational spectroscopy, Seoul, October 2002.

谷村吉隆, 「凝縮系の2次元分光: 実験と理論」, 複雑凝縮系の分子科学, 岡崎, 2002年11月.

B-5) 受賞、表彰

分子科学研究奨励森野基金 (2002).

B-6) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

日本物理学会代議員 (2001-).

日本物理学会庶務理事 (2002-).

通産省工業技術院研究人材マネジメント研究会諮問委員 (1999).

学会等の組織委員

第1回岡崎レクチャーズ(アジア冬の学校) Okazaki lectures (Asian winter school on “the new trends of biochemical physics”)

組織委員長 (2002年3月).

学会誌編集委員

Association of Asia Pacific Physical Bulletin, 編集委員 (1994-2000).

Journal of Physical Society of Japan, 編集委員 (1998-).

B-7) 他大学での講義、客員

Mahidol University(タイ), “Path Integral approach to chemical Physics,” 2002年1月4-5日.

Universidade Estadual Paulista, Campus Sao Jose do Rio Preto(ブラジル), “Path integrals for good children,” 2002年5月14-15日.

Gordon Summer School, “Path Integrals, Fokker Planck Equations and Stochastic Dynamics,” 2002年6月16-28日.

九州大学理学部, 「経路積分法の基礎とその分光への応用」, 2002年10月8-10日.

C) 研究活動の課題と展望

研究は一般にそうだが、理論は特に着想の時点でその良し悪しが決まると言っても過言ではなからう。しかしながら、人と違うことをしようとすると、それだけ失敗する可能性も高い。多くの資金を必要とする研究分野はそれだけ評価も厳しく、野心的な事を行い難い環境にある。幸いモデル化や解析的計算を多用する純理論ではほとんどお金がかからない。そのフットワークの軽さを用いて、パイオニア的な仕事をするのが純理論の使命と考える。定性的であれ十分興味深い現象を示せば、実験も大規模なシミュレーションも安心して実行することが出来よう。本年度は昨年引き続き、過冷却液体やガラス、たんぱくといったフラストレートした系の熱力学的性質とそのダイナミックスの関係を調べ、それを実験的に検証するすべについて探る。戦術はヒット・エンド・ランで戦略的要衝を落とし、正規軍がたどりつく前に次の目標に向かう。