

信 定 克 幸 (助 教 授) (2004 年 6 月 1 日 着 任)

A-1) 専門領域：分子物理学、電子動力学

A-2) 研究課題：

- a) 分子系における多電子ダイナミクスの実時間解析
- b) 有機分子で保護された金属クラスターの電子物性

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 素粒子などの原子核の内部構成粒子を考慮に入れなければ、分子は多数の原子核と多数の電子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区別できる。過去の分子科学におけるダイナミクスの研究では、主として多数の原子核を対象として、そのダイナミクスの問題に焦点が絞られていた。(正確に言えば、断熱近似の範囲内で電子系の自由度を原子核の自由度に取り込んでしまい、多数の原子系の問題を取り扱うこと、すなわち多原子ダイナミクスの問題に帰着する。)当然ながら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その実時間観測・解析が難しく、十分に研究が行われていない。そこで、多電子系の実時間ダイナミクスの本質を理解すべく、強レーザー場中における銀クラスターの多重イオン化の理論的・数値計算的研究を行った。多電子ダイナミクスを理論的に取り扱うためには、電子相関を出来る限り正しく取り込みながら、電子の時間発展を記述しなければならないが、ここでは時間依存密度汎関数理論(TDDFT)に基づく数値的解析方法を採用した。その結果、銀クラスターのように価電子(s電子)と内殻電子(d電子)から構成されるような系では、s電子の動的变化を遮蔽するようにd電子が集団的に動き、この遮蔽効果のために多重イオン化率が抑制されることが分かった[*Chem. Phys. Lett.* **404**, 365–369 (2005)]。現在、ナノメートルサイズのリング状分子を対象として、円偏光レーザーパルス照射により誘起される電流の実時間ダイナミクスの研究を行っている。
- b) 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、しばしばMonolayer-Protected Metal Cluster(MPC)と呼ばれている。一般的にMPC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、磁化率、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。本研究では、チオラート分子によって保護された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を行った。その結果、チオラート分子中の硫黄原子が複数の金原子を架橋配位し、金クラスターを非常に安定化させることが分かった。また、吸収スペクトルの詳細な同定を行った。更に、王冠型をした非常に特徴的な構造を持つ金チオラート錯体の存在可能性を理論的に示し、その電子構造と光学的性質の解析を行った。これらの研究成果については、学術論文投稿準備中である。

B-1) 学術論文

K. SHIRATORI, K. NOBUSADA and K. YABANA, “Multiple Ionization of a Silver Diatomic Molecule in an Intense Laser Field,” *Chem. Phys. Lett.* **404**, 365–369 (2005).

Y. NEGISHI, K. NOBUSADA and T. TSUKUDA, “Glutathione-Protected Gold Clusters Revisited: Bridging the Gap between Gold(I)-Thiolate Complexes and Thiolate-Protected Gold Nanocrystals,” *J. Am. Chem. Soc.* **127**, 5261–5270 (2005).

T. YASUIKE and K. SOMEDA, “Reply to Comment on ‘Origin of Light- Induced States in Intense Laser Fields and Their Observability in Photoelectron Spectra’,” *Phys. Rev. A* **71**, 017402 (3 pages) (2005).

Y. KUBOTA and T. ODAGAKI, “Resonant Transmission of a Soliton Across an Interface between Two Toda Lattices,” *Phys. Rev. E* **71**, 016605 (4 pages) (2005).

B-4) 招待講演

K. NOBUSADA, “Optical Response of Monolayer-Protected Gold Clusters,” Japan-Korea Joint Symposium on Frontiers in Molecular Science, Okazaki (Japan), March 2005.

信定克幸, 「Gold-Thiolate Clusters and Complexes: Electronic and Photochemical Properties」, 科研費特定研究 分子スピ
ン 金ナノ粒子勉強会, 岡崎, 2005年8月.

信定克幸, 「Photoinduced electron dynamics in Nanorings」, 電子励起と電子相関に関する研究会, 札幌, 2005年11月.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

日本物理学会領域1(原子・分子分野)世話人 (2003-2004).

科学技術振興機構地域振興事業評価委員会専門委員 (2005-).

学会の組織委員

分子構造総合討論会プログラム委員 (2001).

日韓共同シンポジウム実行委員 (2005).

総研大アジア冬の学校実行委員 (2005-).

B-8) 他大学での講義、客員

産業技術総合研究所客員研究員, 2003年8月-.

筑波大学計算科学研究センター共同研究員, 2004年8月-.

B-10) 外部獲得資金

奨励研究(A), 「ヘムタンパク質に結合した一酸化炭素分子の振動エネルギー緩和の動力学」, 信定克幸 (2000年-2002年).

基盤研究(C), 「ナノメートルサイズの分子における多電子ダイナミクスの理論的研究」, 信定克幸 (2005年-).

岩崎ファンド海外研究助成, 「DYNAM 2000 REACTIVE AND NON REACTIVE QUANTUM DYNAMICS」, 信定克幸
(2000年).

第1回理学未来潮流 Grant, 「有限少数多体系における特異な現象の発見とその解釈」, 信定克幸 (2001年-2002年).

松尾学術研究助成金, 「貴金属クラスターの電子・イオンダイナミクスの理論的研究」, 信定克幸 (2002年-2004年).

C) 研究活動の課題と展望

これまでの分子科学におけるダイナミクスの研究では、多原子系のダイナミクスが主たる研究テーマであったが、最近の実験の目覚ましい進歩により、数フェムト秒からアト秒に至る超高速の多電子ダイナミクスの実時間観測が可能になってきた。しかしながら、多電子ダイナミクスの基礎理学的理解は全く十分ではなく、ましてや多電子ダイナミクスが今後、分子科学一般

や応用科学へどのように展開していくのかはほとんど分かっていない。そこで我々の研究グループでは、基礎理学的理解を目標として、理論的・数値的解析両方の観点から、多電子ダイナミクスの研究を行っている。これまでのところ、孤立系分子を対象として多電子ダイナミクスの研究を行ってきたが、今後は周りの環境と相互作用している分子系、特に電子的エネルギーの量子散逸を含む系の多電子ダイナミクスの理論的研究を行うことを計画している。例えば、表面吸着分子や溶媒と相互作用している分子、ヘテロな分子を多数含む大きな金属クラスターなどの系において、多電子がどのような振る舞いをするのか、特に超高速の多電子ダイナミクス（非線形光学応答や電荷移行反応）の過程に注目して研究を進めたいと考えている。また、現在進めている研究を電子ダイナミクスだけに限定せず、スピンドイナミクスや励起子ダイナミクスも含め、分子系における量子多体系ダイナミクスの実時間解析へと展開する予定である。