

分子基礎理論第二研究部門

中 村 宏 樹 (教授 (兼)) (1981 年 8 月 16 日 ~ 2006 年 3 月 31 日)^{*}

A-1) 専門領域：化学物理理論、化学反応動力学論

A-2) 研究課題：

- a) 化学反応の動力学
- b) 化学動力学のレーザー制御
- c) 多次元トンネル理論の構築と応用
- d) 分子機能の開発を目標として

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 化学反応の動力学：非断熱遷移状態理論を構築し、Zhu-Nakamura (ZN) 公式を組み込んだ。これを電子移動に応用し、Marcus の公式を改良する新公式を作ることに成功した。また、ZN 公式を活用して、古典的に許されない遷移をも取り扱え、しかも、現実の大次元系に適用出来るように古典軌道ホップ法を一般化した。
- b) 化学動力学のレーザー制御：半古典的最適制御理論を構築し、多次元系の制御を可能ならしめた。また、フォトリズム系の解析を行い、2次チャープによる励起過程の高効率化と円錐交差での遷移の高効率化を行うレーザー制御法を提唱した。
- c) 多次元トンネルの理論の構築と応用：我々が構築した理論をピニルラディカルに適用し、実験との良い一致を得て、理論の正しさを確認した。
- d) 分子機能の開発を目標として：上述のフォトリズム機能の制御に加えて、非断熱トンネル現象を利用して、炭素5員環に水素を透過させる可能性を解明した。

B-1) 学術論文

H. YAMADA, K. YOKOYAMA, Y. TERANISHI, A. SUGITA, T. SHIRAI, M. AOYAMA, Y. AKAHANE, N. INOUE, H. UEDA, K. YAMAKAWA, A. YOKOYAMA, M. KAWASAKI and H. NAKAMURA, "Selective Transition to the Closely-Lying States Cs ($7D_{3/2}$) and Cs ($7D_{5/2}$) by Femtosecond Laser Pulses," *Phys.Rev. A* **72**, 063404 (5 pages) (2005).

H. TAMURA, S. NANBU, T. ISHIDA and H. NAKAMURA, "Ab Initio Nonadiabatic Quantum Dynamics of Cyclohexadiene/Hexatriene Ultrafast Photoisomerization," *J. Chem. Phys.* **124**, 084313 (13 pages) (2006).

P. OLOYEDE, G. V. MIL'NIKOV and H. NAKAMURA, "Generalized Trajectory Surface Hopping (TSH) Method Based on the Zhu-Nakamura Theory," *J. Chem. Phys.* **124**, 144110 (2006).

G. V. MIL'NIKOV, T. ISHIDA and H. NAKAMURA, "Tunneling Splitting of Energy Level and Rotational Constants in the Vinyl Radical C_2H_3 ," *J. Phys. Chem. A* **110**, 5430–5435 (2006).

S. NANBU, T. ISHIDA and H. NAKAMURA, "Atomic Hydrogen Transmission through Five-Membered Carbon Ring by the Mechanism of Nonadiabatic Tunneling," *Chem. Phys.* **324**, 721–732 (2006).

H. TAMURA, S. NANBU, T. ISHIDA and H. NAKAMURA, "Laser Control of Reactions of Photo-Switching Functional Molecules," *J. Chem. Phys.* **125**, 034307 (10 pages) (2006).

Y. ZHAO, W. LIANG and H. NAKAMURA, "Semiclassical Treatment of Thermally Activated Electron Transfer in the Intermediate to Strong Electronic Coupling Regime Under the Fast Dielectric Relaxation," *J. Phys. Chem. A* **110**, 8204–8212 (2006).

Y. ZHAO and H. NAKAMURA, "Electron Transfer Rate Uniformly Valid from Nonadiabatic to Adiabatic Regime Based on the Zhu-Nakamura Theory," *J. Theor. Comput. Chem.* **5**, 1 (2006).

H. ZHANG, S. C. SMITH, S. NANBU and H. NAKAMURA, "HOCl Ro-Vibrational Bound-State Calculations for Nonzero Total Angular Momentum," *J. Phys. Chem. A* **110**, 5468–5474 (2006).

A. ISHKHANYAN and H. NAKAMURA, "Strong-Coupling Limit in Cold-Molecule Formation *via* Photoassociation or Feshbach Resonance through Nikitin Exponential Resonance Crossing," *Phys. Rev. A* **74**, 063414 (9 pages) (2006).

A. ISHKHANYAN, J. JAVANAINEN and H. NAKAMURA, "Landau-Zener Transition in Photoassociation of Cold Atoms: Strong Interaction Limit," *J. Phys. A* **39**, 14887 (2006).

H. NAKAMURA, "Dynamics of Nonadiabatic Chemical Reactions," *J. Phys. Chem. A* **110**, 10929–10946 (2006).

B-4) 招待講演

H. NAKAMURA, "Nonadiabatic Molecular Dynamics and Molecular Functions," 2nd Int. Conf. on Current Developments in Atomic, Molecular and Optical Physics with Applications, Delhi (India), March 2006.

H. NAKAMURA, 「非断熱遷移とトンネルの理論 古典的分子動力学の改善へ」NAREGI ナノサイエンス実証研究 第4回公開シンポジウム(基調講演)岡崎, 2006年4月.

H. NAKAMURA, 「化学動力学の理論的研究 反応の制御と機能の開発」原子衝突研究協会 第31回研究会(特別講演)岡崎, 2006年8月.

H. NAKAMURA, "Comprehension and Control of Chemical Dynamics," Inter. Conf. Quantum Chemistry, Kyoto, May 2006.

H. NAKAMURA, "WKB Theory of Tunneling Splitting in Polyatomic Molecules," Int. Conf. Low Temp. Chem., Chernogolovka, August-September 2006.

B-6) 受賞、表彰

中村宏樹, 中日文化賞 (2000).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員、委員

原子衝突研究協会委員 (1981-1994).

学会の組織委員

ICPEAC (原子衝突物理国際会議)第9回組織委員会, 経理担当 (1979).

ICPEAC (第17回及び第18回)全体会議委員 (1991, 1993).

ICPEAC (第21回)準備委員会委員, 運営委員会委員 (1999).

AISAMP (アジア原子分子物理国際シンポジウム) Advisory committee メンバー (1997, 2002).

Pacificchem 2000 シンポジウム組織者 (2000).

Workshop on Nonadiabatic Transitions in Quantum Mechanics. Internat. Advisory Committee Member (Moscow-Chernogolovka, August 2003).

Organizing Committee Member of 12-th ICPEAC (2006).

文部科学省、学術振興会等の役員等

学術審議会専門委員 (1991-1995, 1998-2002, 2002-).

学会誌編集委員

Computer Physics Communication, Specialist editor (1986.10-).

J. Chem. Phys., Member of Editorial Board (2003-2005).

Journal of Theoretical and Computational Chemistry, Executive editor (2001-).

Int. Rev. Phys. Chem., Member of Editorial Board (2005-).

Journal of Physical Chemistry, Member of Advisory Board (2007-).

Chemical Physics Letters, Member of Advisory Editorial Board (2007-).

科学研究費の研究代表者、班長等

特定領域研究計画班代表者 (1999-2001).

基盤研究代表者 (1998-2000, 2001-2003).

特別推進研究代表者 (2003-2005).

その他

岡崎高校スーパーサイエンスハイスクール活動支援 分子研総括責任者 (2002-2003).

理化学研究所基礎科学特別研究員審査委員 (2003-2005).

理研基礎科学特別研究員制度推進委員会委員及び審査委員会委員 (2003-2005).

理研ジュニア・リサーチ・アソシエイト制度推進委員会委員 (2003-2005).

理研独立主幹研究員制度推進委員会委員 (2004-).

財団法人東海産業技術振興財団顧問 (2004-).

愛知県科学技術会議委員 (2004-).

東京大学物性研究所協議会委員 (2004-).

B-10)外部獲得資金

特別推進研究,「Zhu-Nakamura 理論に基づく非断熱化学動力学の総合的研究」中村宏樹 (2003年-2005年).

基盤研究(B),「非断熱遷移と化学動力学諸問題の統合的理論研究」中村宏樹 (1998年-2000年).

特定研究(A),「物質設計と反応制御の分子物理化学」中村宏樹 (1999年-2001年).

基盤研究(B),「電子遷移を伴う多次元化学動力学理論の開発と応用」中村宏樹 (2001年-2003年).

*) 2004年4月1日分子科学研究所長