

グローバルCOE講演会報告書

大学院理学研究科 鈴木 俊法

研究集会名： グローバルCOE講演会

講演者： Prof. Vlasta Bonačić-Koutecký (Department of Chemistry Humboldt-Universität zu Berlin)

演題： “Theoretical methods for nonadiabatic dynamics in complex systems and its control by laser”

場所： 京都大学大学院理学研究科 6号館(北館 7階) 772号室

日時： 2010年3月11日 16:00 - 18:00

参加者： 化学専攻・教員、博士研究員、大学院生、学部生

参加者総数： 約10名

講演内容： Bonačić-Koutecký 教授は、分子内における電子の運動を量子力学的に扱いながら、原子核の運動は古典力学的に近似する QM/MM (Quantum Mechanics / Molecular Mechanics)法の第一人者である。現在、当研究室(理学研究科化学専攻物理化学研究室)と超高速光電子分光による化学反応のリアルタイム観測に関する共同研究を行っている。

数原子程度の単純な系に対しては、電子運動と核の運動の両方を量子力学的に計算することが可能であるが、大きな分子に対しては計算時間の観点から現実的には不可能である。同教授は時間依存の密度汎関数法(TD-DFT)を用いて、各瞬間の核座標における電子状態を計算し、原子核に働く力や非断熱遷移確率を算出して、気相孤立下のみならず、水溶液中における多原子分子の光化学反応のシミュレーションを行っている。講演は QM/MM 法に関する基本的事項から説明し、同手法を用いて得られたピラジン($C_4H_4N_2$)とフラン(C_4H_4O)に関する光化学反応のシミュレーション結果について示した。時間分解光電子スペクトルのシミュレーション結果は、当研究室で得られた実測結果を非常に良く再現しており、QM/MM法の定量性がはっきりと示された。さらに同教授は、水溶液中のアニリン($C_6H_5NH_2$)の光化学反応についてもシミュレーションを行い、こちらも当研究室で最近得られたアニリン水溶液に対する実測結果を再現していることが示された。講演最後の質疑応答では、多数の質問が寄せられ、非常に好評であった。

