

令和 2 年 5 月 19 日現在

機関番号：14301

研究種目：基盤研究(S)

研究期間：2015～2019

課題番号：15H05752

研究課題名(和文) 電荷分離，プロトン移動，電子伝達，巨大電子状態揺らぎの非断熱電子化学

研究課題名(英文) Nonadiabatic Electron Dynamics in Chemistry of Charge Separation, Proton Transfer, Electron Transmission, and Huge Electronic-State Fluctuation

研究代表者

高塚 和夫 (Takatsuka, Kazuo)

京都大学・福井謙一記念研究センター・研究員

研究者番号：70154797

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 126,800,000円

研究成果の概要(和文)：非断熱電子動力学理論(時間領域量子化学)＝動く電子の化学の基礎理論を構築しつつ、この研究領域を開発・開拓するとともに、特に電荷分離、プロトン移動、電子伝達、巨大電子状態揺らぎに関わる重要な化学現象群に応用を行った。その結果、光合成の根源となる水分子の分解過程の触媒サイクルの基本的メカニズムの解明、超高凝縮重系の電子状態における化学結合論の構築、多次元非断熱相互作用による鏡像対称性を含む分子の対称性の破れの理論とその化学効果、自動イオン化などで電子が分子外に放出される過程の実時間動力学的研究、等で従来の化学理論では扱うことすらできなかった現象の定量的解析と概念化を行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究は、個別の社会的な問題を特定して解決を図るというよりは、化学・物質科学の新しい研究領域を開拓し、方法論を研ぎ澄まし、未知の概念・法則等を打ち建てようとするものである。しかし、化学や物質科学が、人類社会における物質的基盤をなし、生物学や薬学にまで広がる福利・厚生に基本的な役割を果たすことから、新しい化学領域を拓き、ひいては新しい物質の開発・発見につながることを通して、将来的に社会的貢献を為すものと考えている。

研究成果の概要(英文)：We have established basic theories to develop the beyond-Born-Oppenheimer chemistry and apply to explore novel chemical phenomena. The main results we have successfully studied include: 1) Mechanism of charge-separation dynamics and catalytic cycle of water splitting in Photo System II by Mn4CaO5 cluster in plants: We have also found what we call collision induced charge separation. 2) Chemistry without potential energy surfaces: The dynamics in dense manifolds of quasi-degenerate electronic states has been scrutinized, in which the notion of neither adiabatic potential states nor potential energy surface lose their senses. A characteristic chemical bonding has been found in boron clusters, which we call the dynamical chemical bonds, based on what we call hyper-resonance. 3) Symmetry breaking in multi-dimensional nonadiabatic chemical dynamics: We have found a novel nonadiabatic interaction, which can distinguish right and left in molecular mirror symmetry.

研究分野：化学動力学理論、非断熱電子动力学、励起状態化学动力学

キーワード：電子动力学 非断熱化学动力学 電子移動 プロトン移動 時間領域量子化学

1. 研究開始当初の背景

分子の電子状態理論(量子化学)は偉大な成功を納め、現在では各領域において実用的手段として応用されるに至っている。その基礎となっている概念は、「電子は原子核の運動に無限のスピードで追従することができて、電子波動関数はほとんど常に定常状態(時間無依存状態)を取っていると考えてよい」とするボルン・オッペンハイマー(BO)近似(1927)である。このような、時間に依存しない電子状態の理論では、energeticsの枠組みにとどまり、時間とともに激しく変動する電子状態の化学を研究対象とすることができなかった。また、主にレーザー技術の発達により、実験研究の最先端では、分子内の電子の動力学までもが追跡できる時代に入っており、新しい理論化学の基礎的枠組みが必要となっていた。

2. 研究の目的

本研究では、定常電子状態理論では扱うことができない非断熱電子動力学現象を対象とし、関連する新しい時間領域の化学研究を開拓することを目的とする。概念としての「超BO化学」を「BO近似からかけ離れているために、新しい現象や法則が出現する化学領域」とし、新しい化学を進展させる。その代表的な化学現象に関わる具体的課題として、(1)光合成における水の分解、電荷分離とそれに引き続く電子伝達動力学とプロトンリレーの機構の解明、(2)超高擬縮重電子状態が原子核運動とカップルして激しく大きく揺らぐ電子状態の化学反応と、それが提供する反応場の解明と設計、(3)生体膜を通過して一方向に輸送されるプロトンポンプの動的電子機構の解明、タンパク質の中のプロトン・電子同時動力学の量子論的動作原理などの解明、(4)イオン化過程非断熱電子動力学などのアト秒レーザーによる計測と応用に関わる理論の展開、などを目標とする。また、新たな研究領域を更に拡大するための理論的方法論を進展させる。

3. 研究の方法

上記の目標を達成し、今後、非断熱電子化学を化学・分子科学の一分野としてさらに発展させる礎として、我々が定式化した「Path-branching法」等を様々な形で用いている。特に、大規模な分子において、分子内の全電子波束、全原子核分岐経路の動力学に関する非経験的計算などを、並列計算を含む形でプログラム化し、理論・計算・系のモデル化、現象解明、現象予測、などに応用した。

研究チームとしては、高塚を研究全般の中心として、山下が細胞や生体膜におけるプロトン移動や電子同に関わる分子動力学を、高橋が理論形式の数物理学的側面、特に、プロトンの運動の量子効果・半古典力学について担当した。チーム全体としては、高塚が、分担者の山下と高橋と議論を積み重ねながら、サポートされる形態で研究を進めた。全体として質・量とも高い成果が挙げたが、二人の分担者の個別の研究室における固有の研究の転回と進展もあって、共著論文は出版できなかった。これは反省点である。しかし、本研究を通して、研究代表者はもちろん研究分担者にとっても高い水準のチームを作れたと自負している。

4. 研究成果

本研究プロジェクトは、超ボルン・オッペンハイマー化学(時間領域量子化学)を開拓し、理論が先導する新たな化学領域を創り、世界をリードしつつ、次世代の化学として大きな広がり流れと作ることが目的であった。抽象論だけではなく、研究目的の欄で掲げた課題に取り組む中で、以下の具体的な成果を達成することによって、この領域の重要性を示すことができた。

「水分子の光分解における電荷分離、プロトン移動、電子伝達の動力学的原理と機構の解明」

植物の光合成系に関わるPhoto System II (PSII)における酸化マンガングラスタによる水分子の分解と酸素発生($2\text{H}_2\text{O} + 4h\nu \rightarrow 4\text{H}^+ + 4\text{e}^- + \text{O}_2$)及び、工学的な水の光分解の機構解明は、生物化学的な原理的な問題というのみならず、社会のエネルギー問題としても、広く重大な関心がもたれている。簡単に見えるこの最も基本的なメカニズムの解明、特にPSIIにおける水の分解を果たす触媒サイクルの機構の解明は、生物化学の最も重要なチャレンジの一つである。幸い、この触媒の裸の組成 Mn_4CaO_5 とその構造については、我が国の研究者の大きな貢献もあり、ほぼ明らかになっている。また、この過程による副産物である酸素分子生成の化学的メカニズムにも大きな量子化学的関心が集まっている。

我々は、水分解過程が励起状態におけるプロトン移動や電子移動を始めとする多数の化学的構成要素から成り立っていることを考慮して、いわゆるbuilding-block法によって、最も基本的かつ単純な電荷分離系から出発し、構成要素を一つ一つ追加する中で、その要素の役割と働きを明らかにし、最終的に、触媒サイクルの機構の量子力学的動作原理を同定した。結局、5年有余の時間が必要であった。

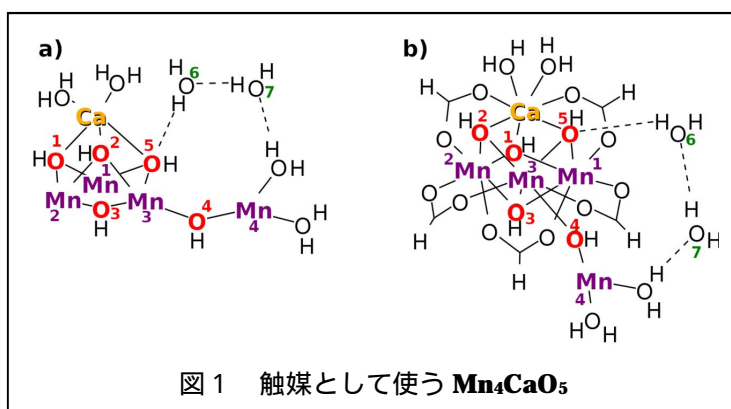
この積み上げ研究の中で明らかになったことを、列挙し、最後にそれらが組み合わさって、PSIIの水分解の触媒反応サイクルができる化学的仕組みについて簡単に述べる。

A) Mn酸化物を触媒として有機化合物に発生する電荷分離は、我々が以前に発見していた普遍的な電子動力学的ダイナミクスであるCoupled proton electron-wavepacket

transfer (CPEWT)によって引き起こされることを明らかにした。ここでは、特にアミノ酸残基中の窒素原子上に存在する多重の擬縮重系が関与して出来る円錐交差を通過する非断熱過程が重要な動力学的因子となっている。

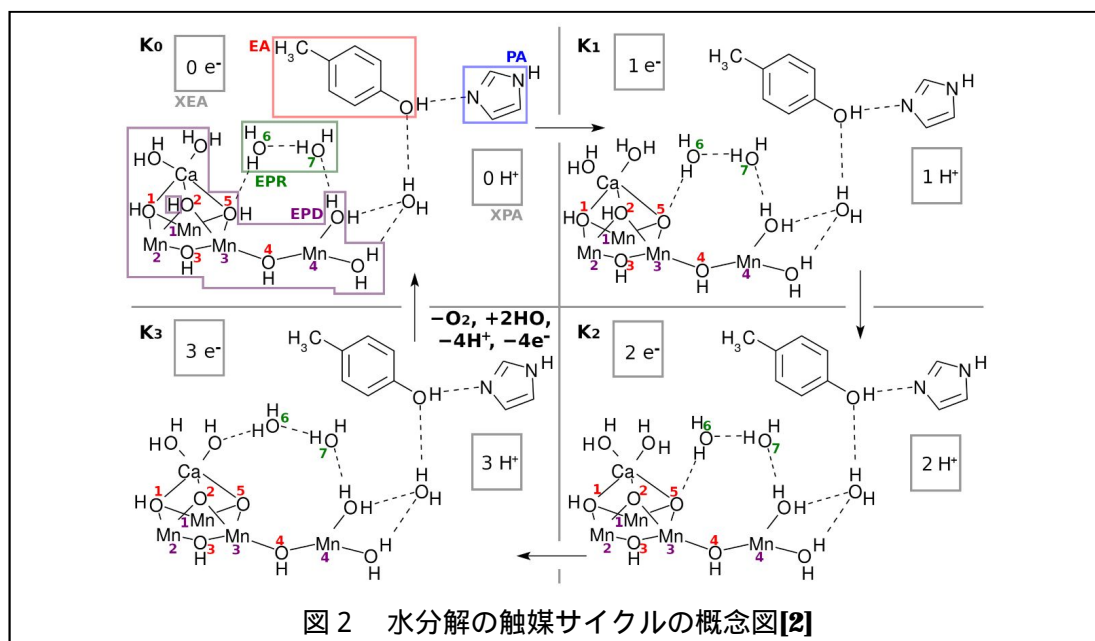
B) 電荷分離により引き離されたプロトンと電子の再結合を妨げる要素として、Mn酸化物につけたCa原子の役割と、プロトン・電子受容体の分子構造をY字型に分岐させることが有効であることが分かった。

C) Y字型に結ばれた電子受容体とプロトン受容体が、水分子を挟んでMn酸化物とつながり、その水分子がバルクの水と水素結合ネットワークで繋がった系でも、有効に電荷分離動力学が起きることが分かった。さらに、この系にプロトンと電子のバッファーを加えて、電荷の調整の役割を果たさせると、1原子Mn酸化物でも、4光子過程で、 $2\text{H}_2\text{O} + 4h\nu \rightarrow 4\text{H}^+ + 4\text{e}^- + \text{O}_2$ を実現する光触媒サイクルになりうることが明らかになった。また、この光化学過程では、水分子クラスターから過酸化物の中間生成過程を通して酸素分子が最終的に生成する。



D) 植物の光合成では、光吸収は触媒以外の場所で起こり、水の分解は Mn_4CaO_5 の電子基底状態で起きると広く信じられている。これは、「基底状態の分子が発光する」と言明するようなもので、量子力学的には、まったく信じがたいことであり、もし真実であるならば何か特別の「化学原理」が存在するに違いない。そこで、電荷移動中心構成する部分システムに、セミキノンカチオン (SQ^+) を基底状態で衝突させたところ、上のEAから SQ^+ へ、次いで、EPDから穴

ができたEAへと電子が順次起き、さらにEPDからプロトンリレーを通して、PAにプロトンが伝達されることが分かった。これは、基底状態でも SQ^+ の接近経路上に円錐交差が生まれることによる。この collision induced charge separation を、生物学的な化学発光 (chemiluminescence (bioluminescence)) に倣って、chemi-charge-separation と呼んだ。[1]



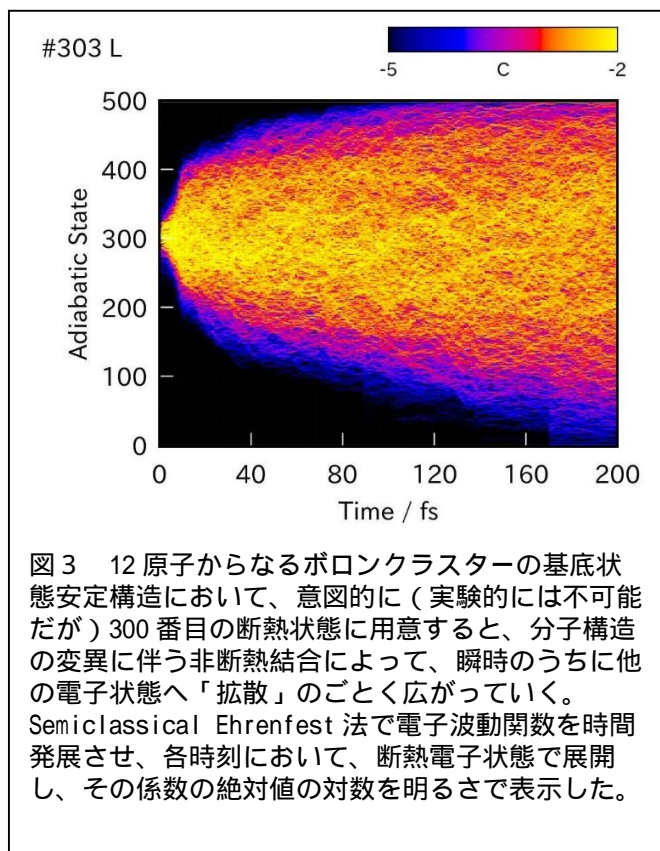
E) 上の chemi-charge-separation では、分離される電子は逐次的かつ非可逆的に一方向に移動する。これと、交互に起きる coherent と decoherent なダイナミクスの繰り返しで、分子間に一方向性の電子流が可能となる。こうして、分子レベル (化学反応レベル) での一方向性輸送の動作原理が内在すること、およびその機構をも明らかにした。この原理は、プロトンの一方向性流れの機構としても類似に仕組みで働く。生体分子膜のプロトンの一方向性移動とどのように関連しているか分担者の山下とさらに追跡中である。

F) 2核Mn酸化物錯体を使って、水分解のための光触媒サイクルを構築することを試みたところ、一つのMn原子とその周りが、電荷分離を起こすべくプロトンと電子をタンパク側に送っているのに対し、もう一つのMn酸化物のサイトが、電荷分離過程の度に失われるプロトンと電子の補給 (reloading) を行うことが明らかになった。このように、2原子Mn酸化物であれば、それぞれが役割分担することで、一つのクラスターが自己完結的に触媒サイクルを構成できることが分かった。これは、生命系における水分解能力の進化において、本質的な意味があるものと考えられる。

G) 以上の成果は、個別にも水分子の光分解の素過程の研究として本質的である。これらの基礎研究を積み上げた結果、最終的に、植物の光合成系における PSII (Photo System II) における水分解の基底状態の Mn_4CaO_5 錯体 (図1参照) による触媒サイクルの基本的メカニズムの解明に至った (図2参照)。地球上の動物を含むほぼすべての生命は、太陽光による水の分解から得られるプロトンと電子を基本としたエネルギーシステムの中で生きており、その意味でも、本研究による触媒サイクルの機構の解明は、生物化学上の大きな発見であると考えられる。また、 Mn_4CaO_5 錯体は、人工的に考えられてきたものとは全く別の原理にしたがう「電池」であることも分かった。自然がいかに巧妙に Mn_4CaO_5 錯体の奇妙な分子構造と機能を利用しているかも明らかになった。[“Charge separation and successive reconfigurations of electrons and protons driving water-splitting catalytic cycle with tetranuclear Mn oxo complex. On the mechanism of water splitting in PSII”, Kentaro Yamamoto and Kazuo Takatsuka, Phys. Chem. Chem. Phys., **22**, 7912-7934 (2020).]

「超高擬縮重系内での巨大電子状態揺らぎ」

福井謙一の前線軌道理論は、量子力学的化学反応理論の最大の成果の一つである。この理論は、**HOMO** (最高被占分子軌道) と **LUMO** (最低空軌道) のエネルギー差が十分あり、**HOMO** とそれ以下、および、**LUMO** とそれ以上の分子軌道のエネルギー差も十分存在している場合に成立する。この条件が破れ、電子状態の間に擬縮重が発生すると、前線軌道理論はおろか、量子化学の基礎である **Born-Oppenheimer (BO)** 近似すら破綻する。特に、ボロンクラスターの励起状態のように、電子擬縮重が分子構造の至るところで稠密に発生している場合には、分子構造の少しの変位や分子振動によって、電子状態の混合がフェムト秒単位で発生する (図3参照)。この状況下では、断熱ポテンシャル面という通常の化学概念自体が破綻するが、それでも分子は解離もイオン化を起こすことなく非常に長寿命で存在し続ける。励起状態の化学では、このような状況は必ずしも例外ではなく、その興味深い性質から、今後の新しい化学として発展すると考えている。



化学では、このような状況は必ずしも例外ではなく、その興味深い性質から、今後の新しい化学として発展すると考えている。

このような超擬縮重状態の化学領域に挑むには、私共が開発してきた「非断熱電子動力学理論」が必要である。私達は、この領域において、福井理論をその特別な場合として含む、より一般的かつ普遍的な形の化学反応論と化学結合論をも目指して研究を進めている。超高擬縮重系の非断熱動力学電子状態もその一つであり、その極めて特徴的な電子状態の解明を「**dynamical bonding**」や「**hyper resonance**」という概念に昇華させた。

この典型例であるボロンクラスターの励起状態は、さらに、極めて興味深い新しい反応場を作り出すことが分かってきた。窒素分子、マグネシウム分子、水分子、**LiF**などをクラスターに入れることによって、何か新しい化学が起きていることが観測されている。しかしながら、この計算と解析はきわめて難しく、この基礎研究の期間内では終了せず、最大の発展的問題の一つとして研究を継続している。

「イオン化電子動力学」

光電子分光法は、電子状態や分子振動のエネルギー順位を、dark stateの存在を考えないで (光学禁制の心配なく) 観測できることから、物理化学の研究室に普遍的に設置されている実験手法である。嘗ては、主として、静的な状態のエネルギー準位を測定するための手法だった

が、1999年頃から、時間分解光電子分光法 (TRPES) とそのイメージング法への応用が相まって、超高速化学反応過程の実時間計測の手法として利用されだした。実際、高塚らは1999年頃に TRPES の全過程量子論的 *ab initio* 理論計算を初めて行い、2003年には非断熱過程における波動関数の分波過程の直接観測が、TRPES を使って直接観測できることを初めて示した。一方、自動イオン化過程のように、分子内で電子波動関数が沸騰するかのように高速で変動し、原子核との非断熱結合により、最終的にイオン化チャンネルに送り込まれる様子を実時間追跡することは、分子内電子動力学過程研究の一つの極みである。我々は本研究で、直接イオン化、及び Auger 過程を含む二次電子放出過程の非断熱電子動力学の理論とアルゴリズムの構築と実計算を果たした。電子の放出過程に対応する無限遠点までの波動関数の追跡は実際上無理なので、分子内電子フラックスを計算することによって、散逸電子によるポピュレーションの減少を評価する方法を考案した。従来の量子化学や定常状態散乱理論の方法は、正確にイオン化エネルギーやスペクトル幅を計算することにとどまっていた(勿論、簡単なことは決していないが)。また、水素分子イオンレベルの超小分子がレーザー場に置かれている場合のシュレディンガー方程式を数値的に解くという研究もあった。しかし、多原子分子内で沸騰するかのような電子運動を眼前に広げてみせる本研究は、理論化学史上の重要な転回点を与えるものであると考える。

「断熱理論における分子の対称性の非断熱領域における破れと制御」

従来、Landau-Zener 理論に代表されるような古典的な非断熱遷移研究では、多次元現象であっても1次元の動力学に還元して考えるため(それ以外に理論が無かったからだ)、非断熱過程が異なる規約表現に属する電子状態を混合して、分子の対称を破ってしまうこと、およびそれに関連する動力学現象についてほとんど論考がなかった。分光学では、古くから知られている Jahn-Teller が、実は、非断熱結合による対称性の破れの一つの美しい例になっている。

非断熱電子動力学理論を通して、我々は、非断熱結合が電子状態混合を通して引き起こす分子の対称性の破れと制御、及びそれに関連する様々な現象の発見を行った。一例として、分子の鏡像対称性を破る相互作用の発見について以下に述べる。

原子核が電子雲の中を運動する際、「異方的かつ摩擦に似た多次元的な力」が原子核に働くことを、2007年に高塚が発見している。("Generalization of classical mechanics for nuclear motions nonadiabatically coupled with electron wavepacket dynamics and in quantum-classical mixed representation", Kazuo Takatsuka, J. Phys. Chem. A, **111**, 10196-10204 (2007).) これは、非断熱相互作用の理論の歴史で初めて発見された多次元力であり、かつ、この力が磁場中を運動する荷電粒子に働くローレンツ力と類似性をもつことも明らかになった。Longuet-Higgins と Herzberg によって発見された、円錐交差近縁を通過する化学反応において発生する量子力学的位相 (Longuet-Higgins 位相) と、量子電磁力学における Aharonov-Bohm 位相 (ベクトルポテンシャルの中を荷電粒子が運動したときに波動関数が獲得する量子位相) は数学的に同等な仕組みから生まれ来て、ともにその物理的効果の発現として量子干渉効果が観測されることは、以前から知られていた。特に、前者は、化学反応動力学や分子分光学において重要な役割を果たすことが、実験研究でも確認されている。同様に、化学動力学と電磁力学の対照性において高塚が発見したのは、原子・分子間に働く非断熱相互作用と磁場中を通過する荷電粒子に働くローレンツ力が対応しているということである。この新たに発見された原子核に働く力を Lorentz-like force と呼ぶ。磁場の向きが反転すれば、そこを通過する荷電粒子が受けるローレンツ力の向きも反転する。一次元方向に揃った一様磁場には、右も左もないが、荷電粒子が受ける力は、フレミングの左手の法則で表されるように、幾何学的に左右を弁別したものになる。同様に、一平面上に配置された原子集団(分子)が作る非断熱相互作用の場の方向によって、同じ平面上を接近してくる原子(分子)の感ずる力の方向が、非断熱相互作用が作る場と接近してくる原子(分子)との間の相対的幾何学的配置によって、量子力学的に決まってくるのである。これは、平面に配置された原子・分子群から、光学対掌体が等価ではない一定の確率で別れてくることを意味している。分子の光学活性の発生を引き起こす相互作用が、量子論自体に宿されていることが見い出された。ここで発見された原子核に働く Lorentz-like force は、真に多次元的かつ異方性をものであり、学理的にも、分子の対称性の理論や分光学などに新たなページを開くものである。

これらのほか、「タンパクの機能と非断熱遷移」、「更なる新たな領域を拡大していく柱となる基礎理論の構築：場の中の非断熱電子動力学(凝縮相・溶媒中の非断熱電子動力学理論)、(強レーザー場中の非断熱電子動力学のための相対論的な場の量子論(経路積分法と波束動力学法))」などの成果があるが省略する。

以上のように、静的量子化学による energetics の世界を突き抜けると、いかに興味深く重要な化学現象が待ち受けているか、その一端を提示することができたと思う。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計40件（うち査読付論文 39件 / うち国際共著 8件 / うちオープンアクセス 22件）

1. 著者名 Kentaro Yamamoto and Kazuo Takatsuka,	4. 巻 123
2. 論文標題 On the Elementary Chemical Mechanisms of Directional Proton Transfers: A Nonadiabatic Electron-Wavepacket Dynamics Study	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 J. Phys. Chem. A	6. 最初と最後の頁 4125-4138
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.9b01178	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Kota Hanasaki and Kazuo Takatsuka	4. 巻 151
2. 論文標題 Relativistic theory of electron-nucleus-radiation coupled dynamics in molecules: Wavepacket approach	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 J. Chem. Phys.	6. 最初と最後の頁 84102
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5109272	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Kota Hanasaki and Kazuo Takatsuka	4. 巻 100
2. 論文標題 Relativistic formalism of nonadiabatic electron-nucleus-radiation dynamics in molecules: Path-integral approach.	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Phys. Rev. A	6. 最初と最後の頁 52501
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevA.100.052501	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Kentaro Yamamoto and Kazuo Takatsuka	4. 巻 152
2. 論文標題 Binuclear Mn oxo complex as a self-contained photocatalyst in water-splitting cycle: Role of additional Mn oxides as a buffer of electrons and protons	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 J. Chem. Phys.	6. 最初と最後の頁 24115
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5139065	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Kazuo Takatsuka	4. 巻 4
2. 論文標題 Maupertuis-Hamilton least action principle in the space of variational parameters for Schroedinger dynamics; A dual time-dependent variational principle	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 J. Phys. Comm.	6. 最初と最後の頁 35007
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/2399-6538/ab7b34 (open access)	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Kentaro Yamamoto and Kazuo Takatsuka	4. 巻 22
2. 論文標題 Charge separation and successive reconfigurations of electrons and protons driving water-splitting catalytic cycle with tetranuclear Mn oxo complex. On the mechanism of water splitting in PSII.	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Phys. Chem. Chem. Phys.	6. 最初と最後の頁 7912-7934
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d0cp00443j	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 T. Yamashita, R. Okajima, K. Miyanabe, and K. Tsumoto	4. 巻 2186
2. 論文標題 Modified AMBER force-field (FUJI) parameters for sulfated and phosphorylated tyrosine residues: Development and application to CCR5-derived peptide systems	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 AIP Conf. Proc	6. 最初と最後の頁 30013
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5137924	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Y. Matsuno, T. Yamashita, M. Wagatsuma and H. Yamakage	4. 巻 10
2. 論文標題 Convergence in LINE-1 nucleotide variations can benefit redundantly forming triplexes with lncRNA in mammalian X-chromosome inactivation	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Mobile DNA	6. 最初と最後の頁 33
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1186/s13100-019-0173-4	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 T. Koyama, M. Nakamoto#, K. Morishima#, R. Yamashita#, T. Yamashita#, K. Sasaki, Y. Kuruma, N. Mizuno, M. Suzuki, K. Okada, R. Ieda, T. Uchino, S. Tasumi, S. Hosoya, S. Uno, J. Koyama, A. Toyoda, K. Kikuchi, T. Sakamoto	4. 巻 29
2. 論文標題 A SNP in a Steroidogenic Enzyme Is Associated with Phenotypic Sex in <i>Seriola</i> Fishes	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Current Biology	6. 最初と最後の頁 1901-1909
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cub.2019.04.069	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kazuo Takatsuka	4. 巻 515
2. 論文標題 Nonadiabatic nuclear and electronic quantum wavepacket dynamics	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Chem. Phys.	6. 最初と最後の頁 52, 59
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2018.07.006	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Andres Tehlar, Aaron von Conta, Yasuki Arasaki, Kazuo Takatsuka, and Hans Jakob Woerner	4. 巻 149
2. 論文標題 Ab-initio calculation of femtosecond-time-resolved photoelectron spectra of N ₂ after excitation to the A-band	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 J. Chem. Phys.	6. 最初と最後の頁 34307
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.1063/1.5029365	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Rei Matsuzaki and Kazuo Takatsuka	4. 巻 40
2. 論文標題 Electronic and nuclear flux analysis on nonadiabatic electron transfer reaction: A view from single-configuration adiabatic Born-Oppenheimer representation	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 J. Comput. Chem	6. 最初と最後の頁 148, 163
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.1002/jcc.25557	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Rei Matsuzaki and Kazuo Takatsuka	4. 巻 150
2. 論文標題 Electronic and nuclear fluxes induced by quantum interference in the adiabatic and nonadiabatic dynamics in the Born-Huang representation.	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 J. Chem. Phys.	6. 最初と最後の頁 14103
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.1063/1.5066571	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Yasuki Arasaki and Kazuo Takatsuka	4. 巻 150
2. 論文標題 Chemical bonding and nonadiabatic electron wavepacket dynamics in densely quasi-degenerate excited state manifold of boron clusters.	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 J. Chem. Phys.	6. 最初と最後の頁 114101
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.1063/1.5094149	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 A. von Conta1, A. Tehlar, A. Schletter, Y. Arasaki, K. Takatsuka and H. J. Woerner	4. 巻 9
2. 論文標題 Conical-intersection dynamics and ground-state chemistry probed by extreme-ultraviolet time-resolved photoelectron spectroscopy	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Nature Comm.	6. 最初と最後の頁 3162
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) DOI: 10.1038/s41467-018-05292-4	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 1.T. Yamashita, R. Okajima, N. Shoji	4. 巻 2040
2. 論文標題 Efficiency Strategy for Peptide Design: a Comparative Study on All-atom, Coarse-grained, and Machine Learning Approaches	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 AIP Conf. Proc.	6. 最初と最後の頁 20014
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) doi: 10.1063/1.5079056	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 1.R. Kurokawa, R. Komiya, T. Oyoshi, Y. Matsuno, H. Tani, M. Katahira, K. Hitachi, Y. Iwashita, T. Yamashita, K. Kondo, R. Yoneda, Y. Yamaoki, N. Ueda, T. Mashima, N. Kobayashi, T. Nagata, A. Kiyoshi, M. Miyake, F. Kano, M. Murata1, N. Hamad, K. Sasaki, N. Shoji	4. 巻 4
2. 論文標題 Multiplicity in Long Noncoding RNA Biomedical Sciences	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Biomedical Sciences	6. 最初と最後の頁 18, 23
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) doi:10.11648/j.bs.20180402.11	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 1.K. Miyanabe, T. Yamashita, Y. Abe, H. Akiba, Y. Takamatsu, M. Nakakido, T. Hamakubo, T. Ueda, JMM. Caaveiro, and K. Tsumoto,	4. 巻 57
2. 論文標題 Tyrosine sulfation restricts the conformational ensemble of a flexible peptide, strengthening the binding affinity for an antibody	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Biochemistry	6. 最初と最後の頁 4177, 4185
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) DOI: 10.1021/acs.biochem.8b00592	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 1.T. Yamashita	4. 巻 30
2. 論文標題 Toward rational antibody design: recent advancements in molecular dynamics simulations	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Int. Immunol.	6. 最初と最後の頁 133, 140
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) doi:10.1093/intimm/dxx077	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Kentaro Yamamoto and Kazuo Takatsuka	4. 巻 20
2. 論文標題 Collision induced charge separation in ground-state water splitting dynamics	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 PCCP,	6. 最初と最後の頁 12229-12240
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c8cp00520f	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kazuo Takatsuka	4. 巻 published on line
2. 論文標題 Adiabatic and nonadiabatic dynamics in classical mechanics for coupled fast and slow modes: sudden transition caused by the fast mode against the slaving principle.	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Mol. Phys.	6. 最初と最後の頁 xxxx
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/00268976.2018.1430389	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kentaro Yamamoto and Kazuo Takatsuka	4. 巻 20
2. 論文標題 On photocatalytic cycle of water splitting with small manganese oxides and the roles of water cluster as a direct resource of oxygen molecules.	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 PCCP	6. 最初と最後の頁 6708-6725
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/00268976.2018.1430389	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Takahide Matsuoka and Kazuo Takatsuka	4. 巻 148
2. 論文標題 Nonadiabatic electron wavepacket dynamics behind molecular autoionization.	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 J. Chem. Phys.	6. 最初と最後の頁 14106
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) doi.org/10.1063/1.5000293	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Kazuo Takatsuka	4. 巻 147
2. 論文標題 Theory of molecular nonadiabatic electron dynamics in condensed phases.	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 J. Chem. Phys.	6. 最初と最後の頁 174102
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.4993240	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Yasuki Arasaki and Kazuo Takatsuka	4. 巻 493
2. 論文標題 Time-resolved photoelectron signals from bifurcating electron wavepackets propagated across conical intersection in path-branching dynamics.	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Chem. Phys.	6. 最初と最後の頁 42-48
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.chemphys.2017.06.008	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 T. Yamashita and Y. Takamatsu,	4. 巻 1906
2. 論文標題 n Ensemble Docking Calculation of Lysozyme and HyHEL-10: Insight into the Binding Mechanism	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 AIP Conf. Proc.	6. 最初と最後の頁 30022
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kentaro Yamamoto, Kazuo Takatsuka,	4. 巻 475
2. 論文標題 Dynamical mechanism of charge separation by photoexcited generation of proton-electron pairs in organic molecular systems. A nonadiabatic electron wavepacket dynamics study.	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 39- 53
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.4947302	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Yuta Mizuno, Yasuki Arasaki, and Kazuo Takatsuka	4. 巻 145
2. 論文標題 Real-time observation of wavepacket bifurcation on nonadiabatically coupled field-dressed potential energy curves by means of spectrogram of induced photon-emission from molecules driven by CW laser.	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 J. Chem. Phys.	6. 最初と最後の頁 184305 1-11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.4966965	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Hiroki Ichikawa and Kazuo Takatsuka,	4. 巻 121
2. 論文標題 Chemical modification of conical intersections in photoisomerization dynamics of butadiene derivatives.	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 J. Phys. Chem. A	6. 最初と最後の頁 315-325
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cphc.201601237	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kentaro Yamamoto and Kazuo Takatsuka	4. 巻 18
2. 論文標題 Photoinduced charge separation catalyzed by Mn-oxides onto a Y-shaped branching acceptor efficiently preventing charge recombination	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 ChemPhysChem	6. 最初と最後の頁 1-13
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cphc.201601237	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kazuo Takatsuka	4. 巻 146
2. 論文標題 Lorentz-like force emerging from kinematic interactions between electrons and nuclei in molecules. A quantum mechanical origin of symmetry breaking that can trigger molecular chirality.	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 J. Chem. Phys.	6. 最初と最後の頁 084312 10 pages
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.4976976	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Takahide Matsuoka and Kazuo Takatsuka	4. 巻 146
2. 論文標題 Dynamics of photoionization from molecular electronic wavepacket states in intense pulse laser fields: A nonadiabatic electron wavepacket study.	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 J. Chem. Phys.	6. 最初と最後の頁 134114 1-14
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.4979672	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Takefumi Yamashita	4. 巻 2
2. 論文標題 Towards Physical Understanding of Molecular Recognition in the Cell: Recent Evolution of Molecular Dynamics Techniques and Free Energy Theories	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Biomedical Sciences	6. 最初と最後の頁 34-47
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.11648/j.bs.20160205.11	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Takako Sakano, Md. Iqbal Mahmood, Takefumi Yamashita*, and Hideaki Fujitani	4. 巻 13
2. 論文標題 Molecular dynamics analysis to evaluate docking pose prediction	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Biophys. Physicobiol.	6. 最初と最後の頁 181-194
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2142/biophysico.13.0_181	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Kentaro Yamamoto, Kazuo Takatsuka	4. 巻 16
2. 論文標題 An Electron Dynamics Mechanism of Charge Separation in the Initial-Stage Dynamics of Photoinduced Water Splitting in X_Mn_Water (X=OH, OCaH) and Electron-Proton Acceptors	5. 発行年 2015年
3. 雑誌名 ChemPhysChem.	6. 最初と最後の頁 2534-2537
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/cphc.201500416	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Zhong-wei Li, Takehiro Yonehara, Kazuo Takatsuka	4. 巻 464
2. 論文標題 Nonadiabatic electron wavepacket study on symmetry breaking dynamics of the low-lying excited states of cyclic-B4	5. 発行年 2015年
3. 雑誌名 Chem. Phys.	6. 最初と最後の頁 14-25
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.chemphys.2015.10.012	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Y. Arasaki, Y. Mizuno, S. Scheit, K. Takatsuka	4. 巻 144
2. 論文標題 Stark-assisted quantum confinement of wavepackets. A coupling of nonadiabatic interaction and CW-laser	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 J. Chem. Phys.	6. 最初と最後の頁 044107(10pages)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.4940341	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 K. Takatsuka, K. Matsumoto	4. 巻 18
2. 論文標題 Classical and semiclassical dynamics in statistical environments with a mixed dynamical and statistical representation	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 PCCP	6. 最初と最後の頁 1771-1785
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C5CP06161J	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Yuta Mizuno, Yasuki Arasaki, Kazuo Takatsuka	4. 巻 144
2. 論文標題 A perturbation theoretic approach to the Riccati equation for the Floquet energies, spectral intensities, and cutoff energy of harmonic generation in photoemission from nonadiabatic electron-transfer dynamics driven by infrared CW laser fields	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 J. Chem. Phys.	6. 最初と最後の頁 024106(13pages)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.4939580	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Yasuki Arasaki, Yuta Mizuno, Simona Scheit, Kazuo Takatsuka	4. 巻 144
2. 論文標題 Stark-assisted quantum confinement of wavepacket. A coupling of nonadiabatic interaction and CW-laser	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 J. Chem. Phys.	6. 最初と最後の頁 044107(10pages)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.4940341	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

[学会発表] 計66件(うち招待講演 26件/うち国際学会 29件)

1. 発表者名 Kazuo Takatsuka
2. 発表標題 Recent progress in the theory of nonadiabatic chemical reactions; From nuclear wavepacket to electron dynamics
3. 学会等名 Quantum Reactive Scattering 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kazuo Takatsuka
2. 発表標題 Time-domain quantum chemistry beyond the Born-Oppenheimer paradigm
3. 学会等名 Asia-Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists (APATCC 2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kentaro Yamamoto and Kazuto Takatsuka
2. 発表標題 A Chemical Mechanism of Unidirectional Proton Transfers Driven by Coupled Proton and Electron-Wavepacket Transfers
3. 学会等名 Asia-Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists (APATCC 2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Takefumi Yamashita
2. 発表標題 Effects of alanine substitution on antigen-antibody interaction: A molecular dynamics study
3. 学会等名 International Congress on Pure & Applied Chemistry (ICPAC) Yangon 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Takefumi Yamashita
2. 発表標題 Effect of the interfacial water molecule on the antigen-antibody interaction: A molecular dynamics study
3. 学会等名 15th International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (CC symposium of ICCMSE 2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 相对論的な電子 核結合動力学の定式化
2. 発表標題 花崎 浩太、高塚 和夫
3. 学会等名 第22回理論化学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 山本憲太郎, 高塚和夫
2. 発表標題 一方向的なプロトン移動の化学的な機構について: 非断熱電子動力学による研究
3. 学会等名 第22回理論化学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 高塚和夫
2. 発表標題 パラメータ空間上の(分子)量子動力学: 量子力学的時間依存変分法について
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 花崎 浩太、高塚 和夫
2. 発表標題 分子における相対論的電子力学の定式化
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 山本憲太郎, 高塚和夫
2. 発表標題 二核Mn錯体に触媒される光水分解サイクルについて: 追加のMn酸化物の電子-プロトンバッファとしての役割
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 山下雄史
2. 発表標題 分子力学シミュレーションを用いた抗体設計の可能性: "動き" に含まれる親和性のエッセンス
3. 学会等名 第414回CBI学会講演会「実験と計算化学を用いた抗体医薬設計の最近の進展」(招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 山下雄史
2. 発表標題 アラニン置換による抗体親和性の向上のメカニズム "Mechanism of antibody-affinity enhancement through alanine-substitution"
3. 学会等名 日本生物物理学会年会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 山下雄史
2. 発表標題 分子動力学シミュレーションでせまるタンパク質間相互作用 “Molecular dynamics simulations reveal the protein-protein interaction mechanism”
3. 学会等名 シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア2019」(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kazuo Takatsuka
2. 発表標題 Recent Progress in Nonadiabatic Electron Wavepacket Dynamics
3. 学会等名 Mini-workshop on nonadiabatic chemistry (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Kazuo Takatsuka
2. 発表標題 Nonadiabatic phenomena: From wavepacket bifurcation to machinery behind biochemical dynamics
3. 学会等名 International Conference on Nonadiabatic Dynamics (ICND 2018) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 高塚和夫
2. 発表標題 Jahn-Teller, Hellmann-Feynman, 多次元非断熱動力学
3. 学会等名 理論化学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 新崎康樹, 高塚和夫
2. 発表標題 Hyper-resonanceあるいは動的化学結合; 新しい化学結合様態
3. 学会等名 分子科学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 松崎 黎, 高塚 和夫
2. 発表標題 非断熱過程における電子と原子核のフラックス
3. 学会等名 理論化学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 山本憲太郎, 高塚和夫
2. 発表標題 一方向的なプロトン移動の化学的な機構について: 非断熱電子動力学による研究
3. 学会等名 第16回京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 山本憲太郎, 高塚和夫
2. 発表標題 生物系に見られる一方向的なプロトンおよび電子移動の化学的な機構について
3. 学会等名 分子科学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 山本憲太郎, 高塚和夫
2. 発表標題 電子の往復運動に駆動されるプロトンポンプの化学的な機構について: 非断熱電子動力学による解析
3. 学会等名 理論化学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 岡島亮, 山下雄史
2. 発表標題 分子動力学計算を用いた抗原抗体界面に存在する塩橋の安定性を決定する要因の研究
3. 学会等名 分子科学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 佐々木皓平・山下雄史
2. 発表標題 高精度な分子動力学計算のための静電相互作用パラメータの検討
3. 学会等名 日本化学会年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 佐々木皓平・山下雄史
2. 発表標題 高精度な分子動力学シミュレーションの為の分子間相互作用モデルの改良
3. 学会等名 日本化学会年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 庄司直幸・山下雄史
2. 発表標題 粗視化モデルにおけるエポキシ樹脂のネットワーク構造と物性値の関係
3. 学会等名 高分子討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 庄司直幸・山下雄史
2. 発表標題 粗視化モデルにおけるエポキシ樹脂の分子構造と物性値の関係
3. 学会等名 分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 庄司直幸・山下雄史
2. 発表標題 粗視化モデルを用いたエポキシ樹脂の物性値と分子構造の関係性についての解析
3. 学会等名 日本化学会年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kazuo Takatsuka
2. 発表標題 Time-Domain Quantum Chemistry
3. 学会等名 Nonadiabatica2018 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Kazuo Takatsuka
2. 発表標題 Electron Dynamics in Chemical Reactions: Time-Domain Quantum Chemistry
3. 学会等名 Mizushima-Raman Lecture, CRSI, (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Kazuo Takatsuka
2. 発表標題 Molecular Science beyond the Born-Oppenheimer Paradigm
3. 学会等名 Sadhan Basu Memorial Lecture, IACS (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Kazuo Takatsuka
2. 発表標題 Nonadiabatic electron dynamics in chemical reactions: Basic theory for chemical reactions in the age of real-time observation
3. 学会等名 APCTCC8. Mumbai (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Kentaro, Kazuo Takatsuka
2. 発表標題 Photocatalytic cycle of water splitting with small manganese oxides and the roles of water cluster as a direct resource of oxygen molecules
3. 学会等名 Sanibel Symposium, Florida (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Takahide Matsuoka and Kazuo
2. 発表標題 Auger Decay Process in Water Molecule: A Nonadiabatic Electron Dynamics Treatment
3. 学会等名 2nd_International_Symposium_on_Attosecond_Science, Riken (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Kazuo Takatsuka
2. 発表標題 Molecular Science of Nonadiabatic Electron Wavepackets: Trying to bridge between ultrafast nonadiabatic dynamics and chemistry
3. 学会等名 Okazaki Conference, Okazaki (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Takefumi Yamashita,
2. 発表標題 A Molecular Dynamics Study on Antigen-Antibody Recognition
3. 学会等名 13th International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering, Greece (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Satoshi Takahashi
2. 発表標題 Beyond semiclassics for heavy particle dynamics in chemical reactions
3. 学会等名 International Symposium: Computational Chemistry, Greece (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 高塚和夫
2. 発表標題 古典力学における時間階層性と非断熱過程 - 隷従原理と隷従者の反乱 -
3. 学会等名 分子科学討論会, 東北大学
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 松岡貴英, 高塚和夫
2. 発表標題 高強度レーザー中の非断熱電子波束の対称性の破れについて
3. 学会等名 分子科学討論会, 東北大学
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 山本 憲太郎, 高塚和夫
2. 発表標題 生物系から着想を得た単純な系における衝突誘起の逐次的な電子移動; 非断熱の電子波束による研究
3. 学会等名 分子科学討論会, 東北大学
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 高橋 聡, 高塚 和夫
2. 発表標題 配位空間の幾何学と量子波束ダイナミクス
3. 学会等名 分子科学討論会, 東北大学
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 松岡貴英, 高塚和夫
2. 発表標題 水分子のイオン化の背景にある非断熱電子動力学: Auger電子と高強度レーザーによる光電子について
3. 学会等名 第20回理論化学討論会, 京都
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 山本 憲太郎, 高塚 和夫
2. 発表標題 電子波束動力学的な電荷分離の機構によって駆動されるMn酸化物中の水の光分解サイクル
3. 学会等名 第20回理論化学討論会, 京都
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 山下雄史
2. 発表標題 分子動力学シミュレーションによるタンパク質の分子認識の研究: 分子デザインへの挑戦
3. 学会等名 量子系分子科学セミナー (理化学研究所計算科学研究機構)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 高塚和夫
2. 発表標題 溶媒中の電子移動の非断熱電子動力学: Marcus理論の分子論
3. 学会等名 第19理論化学討論会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Kazuo Takatsuka
2. 発表標題 Quantum Chemistry beyond the Born-Oppenheimer Approximation
3. 学会等名 Japan-France-Spain Joint-Symposium on Theoretical and Computational Science of Complex Systems (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Kazuo Takatsuka
2. 発表標題 Chemistry of nonadiabatic electron flow: Symmetry Breaking in Chemical Reactions Kazuo Takatsuka
3. 学会等名 GAMESS7557 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Kazuo Takatsuka
2. 発表標題 Molecular Science of Nonadiabatic Electron Wavepackets: Trying to bridge between ultrafast nonadiabatic dynamics and chemistry
3. 学会等名 The 77th Okazaki Conference Series (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 新崎康樹, 高塚和夫
2. 発表標題 Semiclassical computation of photoelectron signals from conical intersection dynamics
3. 学会等名 The 77th Okazaki Conference Series (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Kentaro Yamamoto, Kazuo Takatsuka
2. 発表標題 Photochemical mechanism of charge separation taken out of water molecule
3. 学会等名 第19理論化学討論会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Kentaro Yamamoto, Kazuo Takatsuka
2. 発表標題 光化学系IIにおける水分解の初期段階の機構について; Y字型Coupled Proton-Electron Transfer
3. 学会等名 第10回分子科学討論会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Kentaro Yamamoto, Kazuo Takatsuka
2. 発表標題 Photodynamical electron-wavepacket mechanism of water-splitting catalyzed by manganese oxides involving hydrogen-bond network
3. 学会等名 The 77th Okazaki Conference Series (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 松岡貴英, 高塚和夫
2. 発表標題 強レーザー場中の励起分子からのイオン化過程の非断熱電子動力学
3. 学会等名 第19回理論化学討論会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 松岡貴英, 高塚和夫
2. 発表標題 強光子場中多原子分子の電離過程における非断熱電子動力学
3. 学会等名 第10回分子科学討論会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Takahide Matsuoka, Kazuo Takatsuka
2. 発表標題 Dynamics of photoionization from molecular electronic wavepacket states in intense pulse laser fields
3. 学会等名 第77回岡崎コンファレンス (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Takefumi Yamashita
2. 発表標題 Molecular Dynamics Analysis of Protein Complex Structures
3. 学会等名 10th International Conference on Computational Physics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Takefumi Yamashita
2. 発表標題 On Quantitative Understanding on Antigen-Antibody Interaction through All-atom Molecular Dynamics Simulations
3. 学会等名 3rd Symposium on Biophysics Postgraduate Research in Hong Kong (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Kazuo Takatsuka
2. 発表標題 Science of nonadiabatic transitions and electron dynamics
3. 学会等名 Theoretical Challenges in Small Molecule Dynamics (The 15th ICQC Meeting) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2015年

1. 発表者名 高塚和夫
2. 発表標題 力学と統計力学の混合表示による凝縮相反応論の試み：エントロピー汎関数による枠組み
3. 学会等名 第9回分子科学討論会
4. 発表年 2015年

1. 発表者名 米原丈博, 高塚和夫
2. 発表標題 ホウ素クラスターを媒体とした 外場駆動化学反応改変と電子動力学
3. 学会等名 第9回分子科学討論会
4. 発表年 2015年

1. 発表者名 新崎康樹, 高塚和夫
2. 発表標題 連続外場で駆動された擬交差系からの発光と波束の空間束縛の振動量子波束動力学計算による研究
3. 学会等名 第9回分子科学討論会
4. 発表年 2015年

1. 発表者名 山本憲太郎, 高塚和夫
2. 発表標題 X-Mn-Water (X=OH, OCaH) と電子-プロトン受容体系における水の光分解の初期段階の電荷分離の電子動力的メカニズム
3. 学会等名 第9回分子科学討論会
4. 発表年 2015年

1. 発表者名 高塚和夫
2. 発表標題 経路と波動と量子位相
3. 学会等名 SRPS2015 (招待講演)
4. 発表年 2015年

1. 発表者名 Kazuo Takatsuka
2. 発表標題 Coupled electronic and nuclear dynamics in excited states
3. 学会等名 The 2015 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2015年

1. 発表者名 Satoshi Takahashi, Kazuo Takatsuka
2. 発表標題 Beyond semiclassics for heavy particle dynamics in chemical reactions
3. 学会等名 The 2015 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM) (国際学会)
4. 発表年 2015年

1. 発表者名 Takehiro Yonehara, Kazuo Takatsuka
2. 発表標題 Exploration of chemical reactions driven by non-adiabatic electron wave packets created
3. 学会等名 The 2015 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2015年

1. 発表者名 Kazuo Takatsuka
2. 発表標題 Progress in the theory of nonadiabatic electron dynamics
3. 学会等名 APTCC7 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2016年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

高塚研究室 http://http://mns2.fukui.kyoto-u.ac.jp/

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	高橋 聡 (Takahashi Satoshi) (20456180)	東京大学・大学院総合文化研究科・助教 (12601)	

