

令和 2 年 6 月 23 日現在

機関番号：11301

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2016～2018

課題番号：16H04091

研究課題名(和文) 複数の反応サイトを有するナノ・バイオ分子の反応動力学と原子分割エネルギー描像

研究課題名(英文) Reaction dynamics of nano- and bio-molecules with multiple reaction sites and its atom-resolved energy picture

研究代表者

河野 裕彦 (Kono, Hirohiko)

東北大学・理学研究科・客員研究者

研究者番号：70178226

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 12,200,000円

研究成果の概要(和文)：電荷・エネルギーの原子分割法や大規模系に適した非断熱動力学法を開発し、ナノ・バイオ分子の反応ダイナミクスの理論的理解を進めた。放射線や光によって高密度・高エネルギーで発生したOHラジカルがDNA周辺の水の壁を透過し、多くの1本鎖切断をクラスター的に起こすことを示し、DNAの2本鎖切断の機構を解明した。また、OH修飾C60の様々なナノカーボンへの光変換や光駆動分子モーターの高速トランスシス光異性化などの励起状態ダイナミクスを解明した。さらには、多配置時間依存電子動力学法を使って、強い光によるイオン化に多電子相関に起因する障壁が存在することを示し、新たなトンネルイオン化描像を提案した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

ラジカルによるDNAの2本鎖切断の理論的解明により、現在、実験グループと鎖切断のみならず塩基酸化などDNA損傷の全貌解明のための共同研究が進展している。強レーザー場化学、DNA損傷の定性・定量解析、損傷検出化学プローブの設計・合成、反応動力学理論の4チームが連携し、遺伝子の損傷・修復・複製の分子論構築を目指している。また、XFELパルスによる分子のクーロン爆発のシミュレーションを行い、実験で得られた解離イオンのエネルギーや角度相関から、反応中の分子構造を抽出するイメージング理論も構築した。以上、本理論研究は、観測された動力学過程の機構解明のみならず、さらなる実験立案を導く成果をもたらした。

研究成果の概要(英文)：We developed the atom-resolved method for energy and the nonadiabatic surface hopping method suitable for large systems to deeply investigate the reaction dynamics of nano- and bio-molecules. The methods are applied to simulate the dynamics of DNA damage. We found the mechanism of a double strand break: Dense, high energy OH radicals generated by radiation or light penetrate the water barrier around a DNA and cause a cluster of single strand breaks via H-abstraction from pentose moieties (leading to P-O skeletal breaks). We also clarified the dynamics of the light-transformation of OH-functionalized fullerenes into nanocarbons and ultrafast trans-cis isomerization of a light-driven molecular motor. For electron dynamics, using the multiconfiguration time-dependent method, we revealed that a hump structure due to electron correlation is formed on the top of the field-induced distorted barrier, which provides a new picture of tunnel ionization beyond the single-electron approximation.

研究分野：化学反応動力学理論 強レーザー場化学

キーワード：多電子ダイナミクス 1電子有効ポテンシャル 強レーザーパルス 非断熱遷移 ヒドロキシルラジカル DNA鎖切断 光駆動分子モーター クーロン爆発

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

X線自由電子レーザー(XFEL)の光やフェムト秒(fs)チタンサファイアレーザーが生み出す高強度超短近赤外パルスは、分子科学に新しい展開をもたらしている。例えば、波長 $\lambda=2000$ nm、光強度 $I=10^{13}$ W/cm²の近赤外光をDNA水溶液に照射すると、生成したヒドロキシル(OH)ラジカルなどがDNAに1本鎖切断や2本鎖切断を誘起することが報告されている[1]。興味深いことに、2本鎖切断は、同じ I でも λ が長くなるにつれて増える。広範囲の λ や I を選べるレーザーを使えばDNA損傷を引き起こす活性種の様々な状態や密度を用意できることを示唆しており、新たな光は物質制御のツールとしての期待も大きい。一方、DNAのようなバイオ分子やナノ分子は多様な反応サイトを有しており、どのような反応を呈するかについては、様々な条件下で起こる基底状態や励起状態の反応を理論的に探索・解析する必要がある。研究開始当初、このような目的に対して、既存の量子化学計算による反応解析だけでは不十分で、大きな分子に適用可能な励起状態動力学法や電子の高速外場応答に対する電子動力学法のさらなる展開とともに、反応ダイナミクスの局在性・非局在性の議論を可能とする指標(各原子のエネルギーなど)の定量化などが必要とされていた。ナノ・バイオ系の先端的な実験と相互フィードバックが可能で、新たな実験立案に資する理論の胎動が待たれている状況にあった。

2. 研究の目的

(1) 本研究の目的は、複数の反応サイトを有するナノ・バイオ分子の化学反応ダイナミクスを、エネルギーと電荷の移動の観点から統合的に理解することにある。全系のエネルギーや電荷を原子ごとに割り当て(原子分割法[2])、それらの移動がどの範囲で起こっているか、つまり、化学反応の局所・非局所性を定量化する。この考えに基づき、多自由度系の多様な反応機構を分類する理論を確立し、新たな光反応制御の提案につなげる。

(2) バイオ系としては、多くの同質な反応サイトを持つDNAを対象に、様々な鎖切断機構の解明を目指す。また、大規模系に適用可能な非断熱動力学法を開発し、ナノ・バイオ系の励起状態ダイナミクスのシミュレーションを行う[3]。強い光によって水中で発生したOHラジカルが引き起こす修復困難な2本鎖切断が、2つの独立な1本鎖切断か、あるいは協奏過程かを原子分割法を使って明らかにする。強い光による水中のラジカル発生はイオン化から始まるので、高強度近赤外パルスによるイオン化の機構、とくに、電子相関の効果に関して二原子分子を対象にして多配置時間依存Hartree-Fock法で調べる[4][5]。本方法から1体の有効ポテンシャルを導き、その形状変化とレーザー場強度や振動数との相関について検討する。

(3) ナノ系への応用としては、まず、C₆₀を取りあげ、その光誘起の電子・振動ダイナミクスに開発した様々な手法を適用する[6]。その成果に基づいて、C₆₀(OH)₂₄ポリヒドロキシフラーレンの様々なナノカーボンへの光変換[7]や光駆動分子モーターのトランス-シス異性化の励起状態ダイナミクスなどの機構解明に挑む。自在回転部位をもつ結晶性分子コマの回転子ダイナミクスとそのテラヘルツ制御、ならびにフラーレンあるいはその誘導体(回転部位)を有限長ナノチューブに入れた分子ベアリングの構造と回転機構についても調べる[8]。

(4) 反応追跡のための分子イメージング法の構築を目指して、高強度XFEL超短パルスによるナノ・バイオ分子のクーロン爆発のオージェ崩壊を含んだ動力学モデルを構築し、実験で得られる解離イオンの運動エネルギー分布や2体角度相関などの測定量を計算する[9]。C₆₀やヨウ素含有分子のクーロン爆発に適用し[10][11]、得られた測定量の情報から逆に反応中の分子構造を抽出する反応イメージング理論を確立する。

3. 研究の方法

(1) 結合の組み替えが起こる反応サイト(周辺の原子の集まり)を多数有するナノ・バイオ分子の化学反応の特性、とくに、局所・非局所性を明らかにするため、半経験的電子状態計算法である密度汎関数強束縛(DFTB)法を使ったピコ秒からナノ秒の反応動力学シミュレーション(DFTB/RDと略す)を行う。構造探索には、高精度のDFT法も使う。DFTB法のなかでも、分子内の電荷揺らぎを考慮した電荷自己無撞着密度汎関数強束縛(SCC-DFTB)法、とくに、水素結合や分子内の電荷揺らぎをより正確に記述できるSCC-DFTB3を採用する。計算はDFTB+プログラムを使って実行する。電子状態計算で得られた系の断熱ポテンシャルエネルギーを構成単位である各原子に割り当てる原子分割ポテンシャルを導出する[2]。原子の運動エネルギーを加えた原子ごとのエネルギー(原子分割エネルギー)やMulliken電荷を使って、反応時にエネルギーや電荷の移動がどの範囲で起こっているかを定量化する。C₆₀(OH)₂₄のナノカーボンへの転換反応におけるヒドロキシル(OH)基の役割解明や多数の切断箇所が存在しうる短鎖DNAの鎖切断などのナノ・バイオ系に適用する。

(2) 大きな分子の励起状態ダイナミクスに対応するため、Zhu-Nakamuraの非断熱遷移公式の多次元版を利用し、その計算に必要な透熱ポテンシャルの傾きを断熱ポテンシャル上の古典軌道の1階と2階の時間微分から推定する方法を開発した[3]。非断熱遷移の結合行列を計算せず、断熱ポテンシャル曲面が滑らかな場合にも透熱勾配を適正に評価でき、非断熱遷移確率を高速かつ数値的にも安定に求めることができる大規模系に適した方法になっている。励起電子状態

の計算には、既存の量子化学計算や TD-DFT の手法に加えて、大きな分子に対しては線形応答理論に基づいた時間依存密度汎関数強束縛 (TD-DFTB) 法を用いる。

(3) 研究代表者らは、電子運動の理解とその光制御の基本原理の確立を目指し、電子相関を適切に取り込んだ多配置時間依存 Hartree-Fock(MCTDHF)法を開発してきた[12]。本手法では、レーザー電場存在下の時間 t に依存する多電子波動関数 $\Psi(t)$ を、種々の電子配置 J に対応する Slater 行列式 $\{\Phi_J(t)\}$ を使って、 $\Psi(t) = \sum_J C_J(t)\Phi_J(t)$ のように展開する。強いレーザー光の電場は古典場として扱える。 $\{\Phi_J(t)\}$ 中の分子軌道と係数 $C_J(t)$ の運動方程式は、時間依存変分法に基づいて導かれる。CO などの二原子分子に適用し、トンネルイオン化や高次高調波発生の機構の理解を進めてきた。本研究では、MCTDHF 法の枠組みから、1 体の密度行列を対角化する分子軌道 (つまり、自然軌道) の運動方程式を求め、自然軌道に対する 1 体の有効ポテンシャル $V^{\text{eff}}(\mathbf{r}, t)$ を定義する。 $V^{\text{eff}}(\mathbf{r}, t)$ の時間変化から、電子の相関を含む多電子ダイナミクスの 1 体描像が導ける[4]。

(4) 本研究では、また、高強度超短 XFEL パルスによるクーロン爆発を利用して、ナノ・バイオ分子の構造変化を追跡する分子イメージング法の確立を目指す。そのため、内殻イオン化からオーグメント崩壊による多重正電荷の発生と生成した電子励起状態からの電子緩和をモデル化し、原子核の古典力学に従った動きを SCC-DFTB 法で評価する動力学モデルを開発する[9]。大きな計算コストをかけることなく、化学結合の効果と分子中の電荷分布を適切に記述できる利点を有する方法である。

4. 研究成果

(1) MCTDHF 法を使って、電荷に偏りがある CO などの異核二原子分子の近赤外パルスによるトンネルイオン化とそれに続く高次高調波発生がレーザー電場の符号にどのように依存するかを解明した。具体的には、各自然軌道 $\{i\}$ が従う運動方程式から有効一体ポテンシャル $V_i^{\text{eff}}(\mathbf{r}, t)$ を導出して、電子相関を反映した一体描像を確立した。CO 分子の場合、レーザー電場によって電子に C 方向への力がかかったときにだけ、C 原子側に電子分布が偏っている HOMO 軌道からトンネルイオン化が進み、電場で歪んだ一体ポテンシャル障壁の上に電子相関による“こぶ”が形成されることがわかった[4]。そのため、その外側にある電子密度成分が主にイオン化する。電場が逆方向のときは、ポテンシャル障壁が遠方に形成されイオン化が抑制される。他の二原子分子でも電子密度が上昇した領域に電子相関による“こぶ”状の障壁が形成されており、電子相関のトンネルイオン化への関与が一般的な効果であることを明らかにした[5]。また、各自然軌道が生み出す高次高調波のスペクトルが、搬送波位相に対して異なった依存性を示すことも明らかにした。以上、自然軌道の一体描像に基づく多電子ダイナミクスの理解が、イオン化や高次高調波発生の制御スキームの立案に有用であることを示した。

(2) 強い光を使えば、分子に異方的な運動を引き起こすこともできる。空間的に非対称な 2 色レーザーを用いると CO₂ 分子の等価な 2 つの C-O 結合の一方を選択的に解離させることができることを理論的に示してきたが、この選択的結合解裂を名古屋大学の菱川グループと共同で実験的に証明した[13][14]。また、高強度近赤外レーザーパルスによって C₆₀ が扁長と扁平構造を交互に取る hg(1)振動モードが励起されることを、日米独の共同研究によって理論的・実験的に明らかにした[6]。

(3) 放射線や強い光を水溶液に照射すると、OH ラジカルが発生する。光強度 I 、波長 λ の光の場合、水分子からトンネルイオン化で放出された電子は $I\lambda^2$ に比例した運動エネルギーをもち、衝突した他の水分子を励起する。カチオン H₂O⁺ と励起された H₂O* が水溶液中に高濃度で生成する状態を、水分子多量体カチオンでモデル化し、開発した非断熱遷移動力学法[3]を適用した。その結果、2 eV 程度の高い運動エネルギーをもつ OH ラジカルが発生することを明らかにした。高エネルギーの OH ラジカルが発生すると、DNA 周辺の水分子の壁を透過 (OH と H₂O 分子の交換過程) して DNA の五炭糖から H を引き抜き、リン酸基内の DNA 骨格を形成する P-O 結合を切断する。高エネルギー OH が高密度で発生するほど (DNA の螺旋の 1 ピッチ以内)、2 本鎖切断 (複数の独立した 1 本鎖切断) が起こりやすいことを明らかにした。DNA は熱によっても 1 本鎖切断を起こす (2 本鎖切断を起こすほどの頻度ではない)。原子分割エネルギーを使ってこの 1 本鎖切断過程を分析した結果、次の 3 段階で起こることがわかった。(i) 1 つのヌクレオチドの塩基から五炭糖に電子が流れ、逆に塩基に向かうエネルギーが塩基-五炭糖間の結合切断に使われ、(ii) 続いて五炭糖からリン酸基に H が移動し、(iii) その後、五炭糖からリン酸基に電子が流れ、エネルギーが逆にながれて、DNA 骨格の五炭糖とリン酸基を結ぶ C-O 結合が切れる。

水溶液中の鎖切断の確率は、塩基対の種類には依存しないこともわかった。以上の成果に基づいて、現在、強レーザー場化学、DNA 損傷の定性・定量解析、損傷検出化学プローブの設計・合成の 3 実験グループと鎖切断のみならず塩基酸化など DNA 損傷の全貌解明のための共同研究を展開している。

(4) 開発したクーロン爆発の動力学モデルを 5-ヨードウラシルなどヨウ素含有分子に適用した結果、測定された解離イオンの運動エネルギー分布や解離イオン間の角度分布をうまく再現し、クーロン爆発の早い段階で分子から放出された原子イオンほど、高い運動エネルギーをもって

放出されることがわかった[9]。また、解離イオン間の角度分布も分子の幾何構造を反映しており、これらの測定量から逆に分子の構造を推定する方法、つまり、分子イメージング法が実現できることを示した。このようなクーロン爆発動力学モデルは大きな分子にも適用可能で、高強度XFELによって10 fs以内に60 価に達するようなC₆₀のクーロン爆発では、放出されたC原子イオンの運動エネルギーに、数 eV にピークをもつ低エネルギーと瞬時に放出される100 eV を越える高エネルギーの2成分が現れることを明らかにしていた[15]。この高エネルギー成分の角度分布が放出時に分子の構造を反映することを利用すれば、理論的・実験的に実証された近赤外パルス誘起のhg(1)振動モードに沿った構造変化[6]やその後の振動緩和に関与する振動モードの時間変化を追跡できる。本研究期間では、そのために必要な具体的な実験データ処理法(解離イオンの角度分布異方性の時解析など)を提案した[10]。

X線照射された重原子含有分子は、内殻イオン化後の多段階オーグジュ緩和とともに価数が上昇し、クーロン爆発によって原子イオンが放出される。XFELと近赤外パルスを組み合わせた時間分解の実験結果を新たな速度論モデルを使って解析し、各電荷状態の生成・緩和速度(フェムト秒オーダー)の決定に成功した[11]。

(5) 実時間発展TDDFTB法を使って、C₆₀の電子励起とそれに伴う原子核のダイナミクスを調べた。具体的には、波長940 nm、ピーク強度 7×10^{12} W/cm²、半値全幅52 fsのパルス照射の際のC₆₀のEhrenfestダイナミクスを追跡した。パルス照射中にC₆₀が最も変形する $t=70$ fs付近で、軌道の擬交差、LUMO占有数の最大値、扁長率の最大値が相関し、hg(1)モードの振幅が、電子励起によって基底状態のポテンシャル上より数倍大きくなっていることがわかった。

(6) C₆₀は頑強なケージ型20面体構造を有する。一方、その化学修飾された誘導体はC₆₀と比べると低いエネルギーで多様な反応を起こす。Krishnaらは[7]、C₆₀(OH)₂₄を主成分とするポリヒドロキシフラーレン(PHF)の粉末に低強度ながら定常の近赤外($\lambda=785$ nm)レーザーを照射すると、温度は2600 Kを越え、カーボンナノチューブ(単層および多層)やカーボンオニオン(多層フラーレン)が生成することを確認した。C₆₀では同様の反応は見られず、OH基がC₆₀骨格の開裂を促進していることが示唆されていた。C₆₀(OH)₂₄には多くの構造異性体が存在し得るが、図1(a)の安定構造のように24個のOH基がケージの円周上に位置する構造が最も安定である。

光励起の効果を調べるために、C₆₀(OH)₂₄の最安定構造に実験と同じ波長785 nmの連続光を照射するDFTB/RDシミュレーションを行った(電子状態は時間依存電場も断熱変数として含んだ最低断熱状態)。図1はその1例である。PHFはOH基に起因する大きな電気双極子モーメント(C₆₀(OH)₂₄では6.6 D)をもつ。このOH基とレーザー電場の相互作用は、電場が2.6 fsの周期で高速に振動しても平均化された0にはならず、PHFが感じるポテンシャルに分子配向依存性が生まれ、その勾配に沿って分子全体の回転が誘起される。同時に、OH基自体も振動励起され、分子全体が加熱される。パルス消失時における、C₆₀(OH)₂₄の振動の増加量は、双極子を持たないC₆₀の50倍程度あり、C₆₀(OH)₂₄が光からエネルギーを獲得する上で、OH基がもたらす双極子が重要な役割を果たしていることがわかった。

以上の結果から、近赤外定常レーザーに曝されたPHFでは、まずPHFの回転・振動が誘起され高温(>2600 K)に達していると推定される。高温状態にしたC₆₀(OH)₂₄のDFTB/RDでは、頑強なC₆₀骨格上のOH同士が接触し、複数箇所脱水反応(図1(b)の上部のH₂O参照)が起こった。OHの残された酸素(骨格のCと結合している)とOH基を失った炭素が結合する3員環のエポキシド、または、6員環と5員環が接する単結合の間に酸素が割り込むエーテルが複数箇所生成した(図1(c))。両構造に至る活性化エネルギーは2 eV程度であった。つぎに、両構造を行き来しながらエポキシド構造からケトン、ケテンの中間体を経由してCOが脱離する(図1(d)の上部)。この骨格からCを引き抜くCO脱離の活性化エネルギーは約4 eVで、C₆₀が起こす反応のなかで最も障壁の低いStone-Wales骨格転位の活性化エネルギー7.4 eVよりかなり低い。同様の機構で2回目のCO脱離が別の箇所で行くと、次第にケージが大きく変形し、不安定化した炭素骨格のC-C結合が直接開裂(unzipping)しはじめる(図1(e)(f))。10 ps程度で多環芳香族の

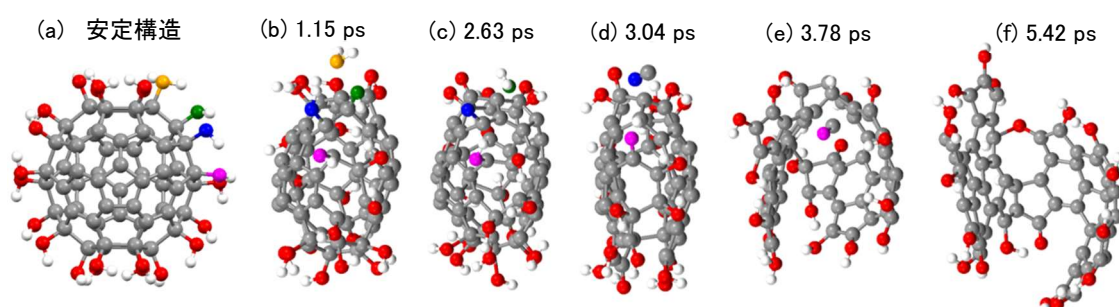


図1. C₆₀(OH)₂₄の初期安定構造($t=0$)と約2600 Kの典型的なトラジェクトリにおける崩壊ダイナミクス。橙、緑、青、紫の酸素を含むH₂OとCOが脱離する。

グラフェン様シート（ナノフレーク）が形成される。図1は隣接したOH基の間で複数回の脱水やCO脱離が連続した例で、円周上のあらゆる位置で起こるこれらの反応は、エネルギーがその反応サイトに流れ込んでいる間（ $< 数十\text{ fs}$ ）に完結する。高温状態のPHFでは、衝突前でもCO脱離をきっかけに炭素骨格が開裂してナノフレーク状になり得ることを明らかにし、ナノフレーク同士の衝突・結合を経て様々な大型ナノカーボンへと成長するシナリオを導いた。

(7) 硬軟併せ持つ複雑な構造の分子をボトムアップ的に合成することが可能になってきている。たとえば、剛性の高い分子フレーム中（固定子）に自由に回転する部位（回転子）を導入することができる。そのような分子集合体の性質（物性）は回転子の運動によって顕著な変化を示し、ナノデバイスの重要なパーツとして大きな役割を担うことが期待されている。我々は、すでに合成されている結晶性分子ジャイロスコープ（分子コマ）とナノマシンの基本パーツとなり得るフラレン内包分子ベアリングを取りあげ、その機能を支配すると考えられる分子運動（回転運動）の原理をDFTなどの電子状態計算やナノ秒からマイクロ秒のDFTB/RDによって明らかにした。たとえば、 C_{60} や C_{70} ならびにそれらの誘導体を回転子として、剛性と柔軟性を併せ持つ有限長カーボンナノチューブのベアリング部に詰め込んだカーボンナノチューブベアリングを対象にした。回転子とベアリングとの会合エネルギーが熱エネルギーより十分大きく（ $> 10\text{ kcal/mol}$ ）安定な会合体を形成する一方で、回転子が熱エネルギー程度の活性化エネルギーで“回転運動”していることを明らかにした[8]。また、結晶性分子コマ中の回転子に双極子モーメントを賦与すると（たとえば、F置換フェニレン基）、回転子は周りながらテラヘルツ波のエネルギーを効率よく吸収する。そのエネルギーが、振動エネルギーとして 10 ps の時間スケールで周囲の固定子に流れていくことを、原子分割法を使って示した[2]。

(8) 2016年ノーベル化学賞の対象となった分子モーターは、光や熱による異性化を利用して一方向の回転運動を達成した。このような光化学反応の機構を解明するために、開発した非断熱動力学法[3]を、2つのシクロペンタジエン5員環（ナフタレンが縮合）が二重結合でつながったすでに合成されたキラル分子モーターに適用した。励起状態経由のトランス-シス異性化のシミュレーションを行い、光励起から数ピコ秒という短い時間で異性化が起こり、光照射中に高速で異性体間を遷移している可能性を示した。

(9) 反応や電子運動に対する汎用動力学法として、ガウス基底自動選択展開法を開発した[16]。この方法では、ガウス基底間の重なりを適切に調整して配置して（von Neumann 格子）、計算精度と安定性を確保する。電子ダイナミクスの場合、物質波の波長が短くなる原子核付近の領域では短い間隔で並んだ細かい基底を選び、原子核から離れるにつれて大きな間隔で並んだ幅の広い基底を選ぶ。分子ダイナミクスの場合も、ポテンシャル面に応じて展開に最適な基底を選ぶ。係数の時間発展から得られた波束の変化に合わせて自動的に基底を選び直す方法で、3次元トンネル系や強レーザー場中の電子ダイナミクスに適用して、その有効性を確認した。多原子分子のトンネルや反応のダイナミクスに対しては、任意に選び出した構造に対応した多次元ガウス波束（ガウス関数の積）の線形結合を用意して、その係数の時間発展を求めればよい。すべての計算はデカルト座標で行える汎用性の極めて高い方法になっている。

- [1] A. K. Dharmadhikari, H. Barambe, J. A. Dharmadhikari, J. S. D'Souza and D. Mathur, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 138105 (2014).
- [2] 菅野 学, 花崎浩太, 山崎 馨, T. A. Niehaus, 河野裕彦, DFTB法のナノ・バイオ分子動力学への応用, 分子シミュレーション研究会誌”アンサンブル”, **81**, 24 (2018).
- [3] K. Hanasaki, M. Kanno, T. A. Niehaus, and H. Kono, *J. Chem. Phys.* **149**, 244117 (2018).
- [4] S. Ohmura, T. Kato, T. Oyamada, S. Koseki, H. Ohmura and H. Kono, *J. Phys. B* **51**, 034001(2018).
- [5] S. Ohmura, T. Kato, H. Ohmura, S. Koseki, H. Kono, *J. Phys. B* (2020) in press.
- [6] H. Fuest, Y. H. Lai, C. I. Blaga, K. Suzuki, J. Xu, P. Rupp, H. Li, P. Wnuk, P. Agostini, K. Yamazaki, M. Kanno, H. Kono, M. F. Kling, and L. F. DiMauro, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 053002 (2019).
- [7] V. Krishna, N. Stevens, B. Koopman, and B. Moudgil, *Nature Nanotech.* **5**, 330 (2010).
- [8] Z. Sun, T. Mio, T. Okada, T. Matsuno, S. Sato, H. Kono and H. Isobe, *Angew. Chem. Int. Ed.* **58**, 2040 (2019).
- [9] T. Takanashi et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19**, 19707 (2017).
- [10] K. Yamazaki, N. Niitsu, M. Kanno, K. Ueda, and H. Kono, *J. Chem. Phys.* **151**, 124305 (2019).
- [11] H. Fukuzawa et al., *Nature Commun.* **10**, 2186 (2019).
- [12] T. Kato and H. Kono, *J. Chem. Phys.* **128**, 184102 (2008).
- [13] T. Endo, H. Fujise, A. Matsuda, M. Fushitani, H. Kono, A. Hishikawa, *J. Electron Spectrosc. Relat. Pheno.* **207**, 50 (2016).
- [14] T. Endo, H. Fujise, Y. Kawachi, A. Ishihara, A. Matsuda, M. Fushitani, H. Kono and A. Hishikawa, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19**, 3550 (2017).
- [15] K. Yamazaki, T. Nakamura, N. Niitsu, M. Kanno, K. Ueda, H. Kono, *J. Chem. Phys.* **141**, 121105 (2014).
- [16] Y. Arai, K. Suzuki, M. Kanno, H. Kono, *Chem. Phys. Lett.* **708**, 170 (2018).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計35件（うち査読付論文 28件 / うち国際共著 15件 / うちオープンアクセス 15件）

1. 著者名 T. Takanashi, K. Nakamura, E. Kukkk, K. Motomura, H. Fukuzawa, K. Nagaya, S. Wada, Y. Kumagai, D. Iablonskyi, Y. Ito, Y. Sakakibara, D. You, T. Nishiyama, K. Asa, Y. Sato, T. Umemoto, K. Kariyazono, K. Ochiai, M. Kanno, K. Yamazaki, K. Kooser, C. Nicolas, C. Miron, G. Kastirke, X. J. Liu, A. Rudenko, S. Owada, T. Katayama, T. Togashi, K. Tono, M. Yabashi, H. Kono, K. Ueda	4. 巻 19
2. 論文標題 Ultrafast Coulomb explosion of a diiodomethane molecule induced by an X-ray free-electron laser pulse	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 19707 ~ 19721
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) http://dx.doi.org/10.1039/C7CP01669G	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 Atsushi Fujiwara, Yusuke Inagaki, Hiroyuki Momma, Eunsang Kwon, Kentaro Yamaguchi, Manabu Kanno, Hirohiko Kono, Wataru Setaka	4. 巻 19
2. 論文標題 A crystalline molecular gyrotop with a biphenylene dirotor and its temperature-dependent birefringence	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 CrystEngComm	6. 最初と最後の頁 6049 ~ 6056
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) http://dx.doi.org/10.1039/C7CE01081H	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 Tomoyuki Endo, Hikaru Fujise, Yuuna Kawachi, Ayaka Ishihara, Akitaka Matsuda, Mizuho Fushitani, Hirohiko Kono, Akiyoshi Hishikawa	4. 巻 19
2. 論文標題 Selective bond breaking of CO ₂ in phase-locked two-color intense laser fields: laser field intensity dependence	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 3550 ~ 3556
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) http://dx.doi.org/10.1039/C6CP07471E	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 Yanjie Wen, Chia-Liang Yen, Linyin Yan, Hirohiko Kono, Sheng-Hsien Lind, Yong-Chien Ling	4. 巻 20
2. 論文標題 Magnetism-tuning strategies for graphene oxide based on magnetic oligoacene oxide patches model	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 3678 ~ 3686
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) http://dx.doi.org/10.1039/C7CP06405E	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 菱沼 直樹, 及川 啓太, 岡田 朝彦, 菅野 学, 山崎 馨, Wilfredo Credo Chung, 齋藤 敦子, 河野 裕彦	4. 巻 50
2. 論文標題 DNA 鎖切断の反応動力学シミュレーションと AVS/Express を用いた三次元可視化	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 東北大学サイバーサイエンスセンター 大規模科学計算システム 広報 (SENAC)	6. 最初と最後の頁 No1, 3~12
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 Kiyonobu Nagaya, Hirohiko Kono and Kiyoshi Ueda	4. 巻 -
2. 論文標題 Ultrafast dynamics of a nucleobase analogue illuminated by an ultrashort intense X-ray pulse of SACLA	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 SPring-8/SACLA Research Frontiers	6. 最初と最後の頁 84~85
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 オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 S. Ohmura, T. Kato, T. Oyamada, S. Koseki, H. Ohmura, H. Kono	4. 巻 51
2. 論文標題 A single-electron picture based on the multiconfiguration time-dependent Hartree-Fock method: application to the anisotropic ionization and subsequent high-harmonic generation of the CO molecule	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics	6. 最初と最後の頁 034001, 1~16
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.1088/1361-6455/aa9e45	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 Manabu Kanno, Nobuyoshi Inada, Hirohiko Kono	4. 巻 147
2. 論文標題 Single-active-electron analysis of laser-polarization effects on atomic/molecular multiphoton excitation	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 154310, 1~18
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.1063/1.4994876	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 菅野 学, 花崎 浩太, 山崎 薫, Tomas A, Niehaus, 河野 裕彦	4. 巻 81
2. 論文標題 DFTB法のナノ・バイオ分子動力学への応用	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 分子シミュレーション研究会会誌 " アンサンブル "	6. 最初と最後の頁 24 ~ 32
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 菅野学, 河野裕彦	4. 巻 -
2. 論文標題 結晶性分子マシンの光駆動回転シミュレーション	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 CSJカレントレビュー-26「分子マシンの科学」	6. 最初と最後の頁 133 ~ 139
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 河野裕彦, 菅野学, 中村公亮, 菱沼直樹, 及川啓太, Wilfredo Credo Chung, 花崎浩太	4. 巻 17
2. 論文標題 自在回転部位を有するナノ複合分子の構造と動力学	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 センターレポート (自然科学研究機構 岡崎共通研究施設 計算科学研究センター)	6. 最初と最後の頁 191 ~ 194
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 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 該当する

1. 著者名 D. T. Ha, K. Yamazaki, Y. Wang, M. Alcamí, S. Maeda, H. Kono, F. Martin, and E. Kukk	4. 巻 145
2. 論文標題 Fragmentation network of doubly charged methionine: Interpretation using graph theory	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 094302, 1 ~ 9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.4962061	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. Nagaya, K. Motomura, E. Kukkk, H. Fukuzawa, S. Wada, T. Tachibana, Y. Ito, S. Mondal, T. Sakai, K. Matsunami, R. Koga, S. Ohmura, Y. Takahashi, M. Kanno, A. Rudenko, C. Nicolas, X.-J. Liu, Y. Zhang, J. Chen, M. Anand, Y. H. Jiang, D.-E. Kim, K. Tono, M. Yabashi, H. Kono, C. Miron, M. Yao, and K. Ueda	4. 巻 6
2. 論文標題 Ultrafast Dynamics of a Nucleobase Analogue Illuminated by a Short Intense X-ray Free Electron Laser Pulse	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Physical Review X	6. 最初と最後の頁 021035,1~9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevX.6.021035	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 K. Nagaya, K. Motomura, E. Kukkk, Y. Takahashi, K. Yamazaki, S. Ohmura, H. Fukuzawa, S. Wada, S. Mondal, T. Tachibana, Y. Ito, R. Koga, T. Sakai, K. Matsunami, K. Nakamura, M. Kanno, A. Rudenko, C. Nicolas, X.-J. Liu, C. Miron, Y. Zhang, Y. Jiang, J. Chen, M. Anand, D. E. Kim, K. Tono, M. Yabashi, M. Yao, H. Kono, K. Ueda	4. 巻 194
2. 論文標題 Femtosecond charge and molecular dynamics of I-containing organic molecules induced by intense X-ray free-electron laser pulses	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Faraday Discussions	6. 最初と最後の頁 537 ~ 562
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C6FD00085A	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 N. Ohta, K. Awasthi, K. Okoshi, K. Manseki, H. Miura, Y. Inoue, K. Nakamura, H. Kono, and E W-G Diau	4. 巻 120
2. 論文標題 Stark Spectroscopy of Absorption and Emission of Indoline Sensitizers: A Correlation with the Performance of Photovoltaic Cells	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 26206 ~ 26216
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.6b08531	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 寺本 央, 戸田 幹人, 河野 裕彦, 高橋 正彦, 小松崎 民樹	4. 巻 71
2. 論文標題 化学反応の行き先を変える"スイッチ" エネルギーの上昇で反応経路が切り替わる新現象	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 化学	6. 最初と最後の頁 No.5, 25 ~ 30
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 河野 裕彦, 山崎 馨, 菅野 学	4. 巻 16
2. 論文標題 ナノカーボンの転移・解離反応の動力学理論: ナノ分子・生体分子の反応動力学イメージングを目指して	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 自然科学研究機構自然科学研究センター計算科学研究センターレポート	6. 最初と最後の頁 191 ~ 194
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 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 菅野 学, 河野 裕彦	4. 巻 -
2. 論文標題 結晶性分子マシンの光駆動回転シミュレーション	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 CSJカレントレビュー-28 分子マシンの展開 分子の動きとその機能を見る	6. 最初と最後の頁 71 ~ 76
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 Yuta Arai, Kazuma Suzuki, Manabu Kanno, Hirohiko Kono	4. 巻 708
2. 論文標題 Automatic spatial extension of a time-dependent wavefunction expanded in terms of Gaussians: Application to multidimensional tunneling	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Chemical Physics Letters	6. 最初と最後の頁 170 ~ 176
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.cpllett.2018.07.022	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 Benoit Mignolet, Manabu Kanno, Noriyuki Shimakura, Shiro Koseki, Fran¸oise Remacle, Hirohiko Kono, Yuichi Fujimura	4. 巻 515
2. 論文標題 Ultrafast nonradiative transition pathways in photo-excited pyrazine: Ab initio analysis of time-resolved vacuum ultraviolet photoelectron spectrum	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 704 ~ 709
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.2018.07.015	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 Thomas A. Niehaus, Mehdi Meziane, Franck Lepine, Alexandre Marciniak, Kaoru Yamazaki, and Hirohiko Kono	4. 巻 91
2. 論文標題 Pulse shape and molecular orientation determine the attosecond charge migration in Caffeine	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The European Physical Journal B	6. 最初と最後の頁 152, 7pages
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.1140/epjb/e2018-90223-5	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 Manabu Kanno, Hirohiko Kono, Yuichi Fujimura	4. 巻 8
2. 論文標題 Laser-Control of Ultrafast -Electron Ring Currents in Aromatic Molecules: Roles of Molecular Symmetry and Light Polarization	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Applied Sciences	6. 最初と最後の頁 2347, 37pages
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) doi:10.3390/app8122347	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, Manabu Kanno, Thomas A. Niehaus, and Hirohiko Kono,	4. 巻 149
2. 論文標題 An efficient approximate algorithm for nonadiabatic molecular dynamics	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 244117, 17pages
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.1063/1.5046757	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 H. Fuest, Y. H. Lai, C. I. Baga, K. Suzuki, J. Xu, P. Rupp, H. Li, P. Wnuk, P. Agostini, K. Yamazaki, M. Kanno, H. Kono, M. F. Kling, and L. F. DiMauro	4. 巻 122
2. 論文標題 Diffractive Imaging of C60 Structural Deformations Induced by Intense Femtosecond Midinfrared Laser Fields	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 053002, 6 pages
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevLett.122.053002	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 Zhe Sun, Tatsuru Mio, Tomohiko Okada, Taisuke Matsuno, Sota Sato, Hirohiko Kono and Hiroyuki Isobe	4. 巻 58
2. 論文標題 Unbiased Rotational Motions of an Ellipsoidal Guest in a Tight Yet Pliable Host	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 2040 ~ 2044
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.201812771	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 Yuji Nakashima, Kenichi Okutsu, Keita Fujimoto, Yuri Ito, Manabu Kanno, Motoyoshi Nakano, Keiji Ohshimo, Hirohiko Kono, and Fuminori Misaizu	4. 巻 21
2. 論文標題 Visible photodissociation of the CO ₂ dimer cation: fast and slow dissociation dynamics in the excited state	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 3083 ~ 3091
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c8cp07068g	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 Hironobu Fukuzawa, Tsukasa Takanashi, Edwin Kukk, Koji Motomura, Shin-ichi Wada, Kiyonobu Nagaya, Yuta Ito, Toshiyuki Nishiyama, Christophe Nicolas, Yoshiaki Kumagai, Denys Iablonskyi, Subhendu Mondal, Tetsuya Tachibana, Daehyun You, Syuhei Yamada, Kohei Ochiai, Manabu Kanno, Kaoru Yamazaki, Hirohiko Kono, Kiyoshi Ueda	4. 巻 10
2. 論文標題 Real-time observation of X-ray-induced intramolecular and interatomic electronic decay in CH ₂ I ₂	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 2186, 8pages
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.1038/s41467-019-10060-z	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 Kaoru Yamazaki, Naoyuki Niitsu, Manabu Kanno, Kiyoshi Ueda, and Hirohiko Kono	4. 巻 151
2. 論文標題 Capturing the photo-induced dynamics of nano-molecules by X-ray free electron induced Coulomb explosion laser	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 124305, 9pages
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.1063/1.5115072	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 河野裕彦, 菅野学, 中村公亮, 花崎浩太, 及川啓太, 岡田朝彦, 落合宏平	4. 巻 18
2. 論文標題 XFELによる内殻イオン化と超高速電子・エネルギー移動の動力学理論 Core-ionization by XFEL and theory of ultrafast dynamics of energy and charge transfer	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 センターレポート (自然科学研究機構 岡崎共通研究施設 計算科学研究センター)	6. 最初と最後の頁 185 ~ 188
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 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 中村公亮, 落合宏平, 花崎浩太, 菅野学, 山崎 馨, 高梨 司, 福澤宏宣, 上田 潔, 永谷清信, 河野裕彦	4. 巻 51
2. 論文標題 X線自由電子レーザーによる分子の超高速崩壊のシミュレーションモデル	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 SENAC	6. 最初と最後の頁 No. 1 p.3 ~ 13
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 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 菅野学, 高橋みなみ, 花崎 浩太, 原田 宣之, 河野裕彦	4. 巻 52
2. 論文標題 複雑系に有効な非断熱分子動力学計算法の開発と分子モーター光異性化反応への適用	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 SENAC	6. 最初と最後の頁 No.1 3 ~ 13
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 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 河野裕彦	4. 巻 10
2. 論文標題 E = hvの呪縛を解く高強度レーザー場の化学	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 量子の世界	6. 最初と最後の頁 1 ~ 5
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 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 S.Ohmura, T.Kato, H.Ohmura, S.Koseki, H.Kono	4. 巻 -
2. 論文標題 Analysis of the multielectron dynamics in intense laser-induced ionization of CO by the time-dependent effective potentials for natural orbitals	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 J.Phys.B	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) -	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 H Kono, S Ohmura, T Kato, H Ohmura and S Koseki	4. 巻 1412
2. 論文標題 Time-dependent effective potential for the ultrafast correlated electron dynamics of molecules in intense laser fields: Application to anisotropic ionization of CO	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Conference Series	6. 最初と最後の頁 042004 ~ 042004
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) doi:10.1088/1742-6596/1412/4/042004	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 Sho Koh, Kaoru Yamazaki, Manabu Kanno, Hirohiko Kono, Kaoru Yamanouchi	4. 巻 742
2. 論文標題 Ionization and dissociation dynamics of H2O in ultrashort intense near-IR laser fields by the time-dependent adiabatic state method and the time-dependent configuration interaction method	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemical Physics Letters	6. 最初と最後の頁 137165, 7pages
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.cplett.2020.137165	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 -

〔学会発表〕 計23件 (うち招待講演 13件 / うち国際学会 12件)

1. 発表者名 吉田 将隆、大槻 幸義、河野 裕彦
2. 発表標題 非対称コマ分子の3次元整列の最適制御と時間分解 X 線回折像のシミュレーション
3. 学会等名 第20回理論化学討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 河野 裕彦, 中村 公亮, 落合 宏平, 岡田 朝彦, 及川 啓太, 菱沼 直樹, 花崎 浩太, 菅野 学, 高梨 司, 永谷 清信, 上田 潔
2. 発表標題 XFEL 誘起超高速ダイナミクスの実験・理論展開
3. 学会等名 第20回理論化学討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 花崎 浩太, 河野 裕彦
2. 発表標題 非断熱力学の代替アルゴリズムに関する研究
3. 学会等名 第20回理論化学討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 T. Okada, K. Oikawa, N. Hishinuma, K. Hanasaki, M. Kanno, H. Kono
2. 発表標題 Reaction dynamics simulation of single and double strand breaks in DNAs
3. 学会等名 33rd Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 K. Oikawa, T. Okada, N. Hishinuma, K. Hanasaki, M. Kanno, H. Kono
2. 発表標題 DNA damage induced by thermal effect and hydroxyl radicals: Chemical reaction dynamics simulations
3. 学会等名 33rd Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 K. Ochiai, K. Nakamura, Y. Takahashi, M. Kanno, K. Yamazaki, T. Takanashi, H. Fukuzawa, K. Tono, K. Nagaya, K. Ueda, H. Kono
2. 発表標題 Development of a reaction dynamics model for the Coulomb explosion of I-containing molecules induced by intense XFELs
3. 学会等名 33rd Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 及川 啓太, 岡田 朝彦, 菱沼 直樹, 花崎 浩太, 菅野 学, 河野 裕彦
2. 発表標題 DNA鎖切断の分子論：動力的解析によるアプローチ
3. 学会等名 第11回分子科学討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 吉田 将隆、大槻 幸義、河野 裕彦
2. 発表標題 時間分解3次元X線回折イメージングに向けた非対称コマ分子の最適整列制御
3. 学会等名 第11回分子科学討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 河野裕彦
2. 発表標題 XFEL誘起の超高速クーロン爆発とDNA鎖切断のシミュレーション
3. 学会等名 第18回物質科学研究討論会 (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hirohiko Kono, Naoki Hishinuma, Keita Oikawa, Kazuki Ishimoda, Manabu Kanno, Yasushi Kino, Kimio Akiyama
2. 発表標題 Reaction dynamics simulation of DNA strand breaks: Analysis based on atom resolved energy and charge
3. 学会等名 Molecules and Laser Fields - An Honorary Andre Bandrauk Symposium (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 K.Ueda, K.Nagaya, K.Motomura, E.Kukk, Y.Takahashi, K.Yamazaki, S.Ohmura, H.Fukuzawa, S.Wada, S.Mondal, T.Tachibana, Y.Ito, R.Koga, T.Sakai, K.Matsunami, K.Nakamura, M.Kanno, A.Rudenko, C.Nicolas, X.-J.Liu, C.Miron, Y.Zhang, Y.Jiang, J.Chen, M.Anand, D.E.Kim, K.Tono, M.Yabashi, M.Yao, H.Kono
2. 発表標題 Femtosecond Charge and Molecular Dynamics of I-containing organic molecules Induced by Intense X-Ray Free-Electron Laser Pulses
3. 学会等名 Ultrafast Imaging of Photochemical Dynamics: Faraday Discussion (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 河野 裕彦
2. 発表標題 DNAの鎖切断：反応動力学と電子論
3. 学会等名 化学反応経路探索のニューフロンティア(SRPS2016) (招待講演)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Y. Takahashi, M. Kanno, N. Hishinuma, K. Nakamura, K. Nagaya, H. Fukuzawa, S. Ohmura, K. Ueda, H. Kono
2. 発表標題 Simulation of XFEL-induced Coulomb explosion: Momentum correlations and energy distributions of fragment ions of multiply charged 5-iodouracil
3. 学会等名 第 32 回化学反応討論会 (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Hirohiko Kono
2. 発表標題 Molecules in intense laser fields II: Toward observation of the dynamics of molecules in intense laser fields
3. 学会等名 International Symposium on Ultrafast Intense Laser Science 15 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Hirohiko Kono, Shu Ohmura, Tsuyoshi Kato, Manabu Kanno, Kota Hanasaki
2. 発表標題 Theoretical approaches to the electronic and Reaction dynamics of molecules induced by intense laser fields
3. 学会等名 ACS National Meeting & Expo, "Strong Field Chemistry" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hirohiko Kono, Tsuyoshi Kato, Shu Ohmura, Kaoru Yamazaki, Manabu Kanno
2. 発表標題 Multiconfigurational theories for the dynamics of molecules in intense laser fields: Anisotropic ionization of CO and structural deformation of C60
3. 学会等名 International Symposium on Ab Initio Electron Dynamics Simulations (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hirohiko Kono
2. 発表標題 Field-induced ultrafast dynamics of molecules: Development from fundamentals to applications
3. 学会等名 International symposium on "Ultrafast Molecular Dynamics" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hirohiko Kono, Shu Ohmura, Tsuyoshi Kato, Hideki Ohmura
2. 発表標題 Time-dependent effective potential for the ultrafast electron dynamics of molecules in intense laser fields: Application to anisotropic ionization of CO
3. 学会等名 ICPEAC2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hirohiko Kono
2. 発表標題 Anisotropic tunnel ionization of CO: Signature of multielectron correlation in effective potential
3. 学会等名 ISUILS2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 河野裕彦
2. 発表標題 光誘起超高速動力学の複雑系への展開を目指して
3. 学会等名 福井謙一記念研究センターワークショップ「複合系の理論化学・計算化学：最近の研究状況と展望」(招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 河野裕彦
2. 発表標題 光誘起分子動力学の複雑系への展開
3. 学会等名 強光子場科学研究懇談会平成29年度第3回懇談会 (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 河野裕彦
2. 発表標題 動力学理論の光誘起高速ダイナミクスへの展開
3. 学会等名 第12回分子科学討論会2018福岡（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 落合 宏平, 中村 公亮, 山崎 馨, 菅野 学, 高梨 司, 福澤 宏宣, 遠野 健介, 永谷 清信, 上田 潔, 河野 裕彦
2. 発表標題 XFELに誘起されるヨウ素含有分子およびフラーレンのクーロン爆発とその反応動力学モデルの開発
3. 学会等名 第12回分子科学討論会2018福岡
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 T. Kato, K. Yamanouchi and H. Kono	4. 発行年 2018年
2. 出版社 Royal Society of Chemistry, Cambridge	5. 総ページ数 44
3. 書名 Chap.5 “Time-dependent Multiconfigurational Theories of Electronic and Nuclear Dynamics of Molecules in Intense Laser Fields” in Attosecond Molecular Dynamics, eds. Marc J. J. Vrakking, Franck Lepine	

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>研究紹介「分子制御から分子マシンへ」 http://www.chem.tohoku.ac.jp/research/research_outcome/p008.html プレスリリース「X線自由電子レーザーの超短パルスでリボ核酸塩基分子中の電荷と原子の動きを可視化！」 https://www.tohoku.ac.jp/japanese/2016/06/press20160617-01.html プレスリリース「X線照射で始まる超高速反応の観測に成功 レントゲンによるX線の発見から120年で初」 https://www.sci.tohoku.ac.jp/news/20190517-10277.html 研究全般に関しては東北大学大学院理学研究科化学専攻数理化学研究室のHP http://web.tohoku.ac.jp/mcl/ja/index.html にある。</p>

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	小関 史朗 (Koseki Shiro) (80252328)	大阪府立大学・理学(系)研究科(研究院)・教授 (24403)	
連携 研究者	加藤 毅 (Kato Tsuyoshi) (10321986)	東京大学・理学(系)研究科(研究院)・准教授 (12601)	
連携 研究者	菅野 学 (Kanno Manabu) (30598090)	東北大学・理学(系)研究科(研究院)・助教 (11301)	