

## 科学研究費補助金研究成果報告書

平成22年4月30日現在

研究種目：特定領域研究  
研究期間：2006～2009  
課題番号：18066010  
研究課題名（和文） 複合電子系の柔軟性による非線形光学物性の発現機構と分子設計  
研究課題名（英文） Mechanism and molecular design of nonlinear optical properties originating in the flexibility of complex electronic systems

## 研究代表者

中野 雅由 (NAKANO MASAYOSHI)  
大阪大学・大学院基礎工学研究科・教授  
研究者番号：80252568

研究成果の概要（和文）：電子的柔軟性をもつ複合電子系として、開殻分子系の非線形光学物性の発現機構を解明した。三次非線形光学物性と基底状態の磁氣的性質の関係式を導出し、ジラジカル性やスピン状態を制御因子とする新しい非線形光学物性の制御指針を構築した。また、実在開殻分子系の応答特性の高精度予測が可能な電子状態計算法を提案し、非線形光学物質の理論設計を行った。さらに *ab initio* MO 法に基づく量子マスター方程式を用いて動的な外場応答の計算法の開発に成功した。

研究成果の概要（英文）：We clarified the mechanism of generating nonlinear optical (NLO) phenomena of open-shell systems. The present study first elucidated a close connection between the magnetic interaction and third-order NLO properties, and then constructed novel control guidelines for NLO properties by tuning the diradical character and spin states. Several calculation methods for real open-shell molecules were proposed, and a new class of open-shell NLO molecules was designed. We also developed a quantum master equation approach based on the *ab initio* MO method, and succeeded in calculating dynamic NLO responses.

## 交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2006年度	4,100,000	0	4,100,000
2007年度	5,500,000	0	5,500,000
2008年度	5,500,000	0	5,500,000
2009年度	3,200,000	0	3,200,000
年度			
総計	18,300,000	0	18,300,000

研究分野：化学

科研費の分科・細目：基礎化学・物理化学

キーワード：電子状態, 量子化学, 開殻分子, 非線形光学, 量子マスター方程式, ジラジカル, スピン, 密度汎関数法

## 1. 研究開始当初の背景

(1) 非線形光学効果は近い将来の大容量・超高速の光通信や光情報処理技術の根幹をなす基本物質が持つべき物性として非常に重要であり、近年、優れた非線形光学効果をもつ物質系の分子レベルからの機構解明やそれに基づいたラショナルデザインが盛んに行われるようになってきている。ここ20年来の探索は主に有機共役分子およびその集合体に集中している。これらの探索における鍵となる戦略は、(a) 共役部の性質や長さ、

(b) ドナー/アクセプター基の強さ、(c) 荷電状態の変化、(d) 分子集団における分子間相互作用および配向制御、を調節することによる分子レベルからの非線形光学物性（超分極率）の制御である。超分極率は外部電場による電子の揺らぎやすさの高次の項に対応し、“柔らかい電子系”をもつ分子を設計すれば大きな非線形光学特性が得られると期待できる。実際、 $\sigma$ 結合のみからなる系に比べて、柔らかい $\pi$ 結合をもつ系は大きな非線形応答が観測され、これまで研究された典型的な非線形光学物質は $\pi$ 電子共役系に限られていた。しかしながら、これらは、殆ど閉殻構造をもつ系であり、開殻系については研究が行われていなかった。

(2) 我々は、世界に先駆けてニトロキシドラジカルを含む開殻系の三次非線形光学効果（第二超分極率 $\gamma$ ）の理論化学計算により検討し、通常の開殻共役分子と異なる興味深い特徴 $\gamma$ の符号が開殻系と逆（負）、 $\gamma$ 値の非常に大きな構造依存性や電子相関依存性などを見だし、開殻分子系からなる新規非線形光学物質の設計への道を開いたが、その複雑な電子状態や鋭敏な応答特性に起因する高精度大規模理論計算の必要性や合成/測定の実験の困難さから、その優れた物性発現の可能性にも関わらず、その機構解明や構造依存性は殆ど未開拓といってよい状況であったが、その当時、新しい非線形光学分子系として、一重項開殻分子系を提案し、簡単なモデル系に基づき、ジラジカル因子と非線形光学効果の関係の視点から新規の設計指針を提案し、具体系の解析を始める段階にあった。

(3) 当時、すでに静的な非線形光学物性の計算や解析手法の開発は数多く行われてきたが、動的な非線形光学物性の計算法や解析法はいくつか提案されていたものの実用的な方法論は少ない状況であった。一方、我々はデンドリマーでのエネルギー移動のシミュレーション用に開発を始めた散逸量子論をもとに *ab initio* MO 法等と結合した新しい

方法論を開発している状況であり、これはインコヒーレントなエキシトンダイナミクスだけでなくコヒーレントなダイナミクスも扱えるため動的な非線形光学物性の計算にも活用できると期待されていた。

## 2. 研究の目的

(1) 本研究では、空間的に異なるスピン相関をもつ複合電子系-開殻分子系-のもつ“柔らかい電子系”という視点から、新たに「スピン分極」を利用する開殻分子系の非線形光学効果の新しい機構（構造-特性相関）の解明と制御可能性の理論的予測を行い、その結果に基づいて大きな非線形光学物性をもつ新規物質系を提案することを目的とする。これは、(A) スピン状態（スピン多重度）、(B) 開殻一重項（ジラジカル）におけるジラジカル因子、を新しい制御パラメータとして、より電子的に柔らかく、電場に対する鋭敏な応答特性が期待される高スピン開殻分子やジラジカル分子系を新規非線形光学系として捉える立場である。

(2) これらの制御パラメータに基づき提案した具体的なモデル分子系の高精度大規模理論化学計算による機構解明を行うだけでなく、柔らかい電子系をもつ開殻分子系からなる新規制御可能非線形光学物質の量子設計指針の確立を目指す。

(3) 動的な三次非線形光学現象である二光子吸収については、電子系と分子振動や外場との間の相互作用に起因する緩和過程が重要であるので、電子状態理論と散逸量子論を結合した新しい方法論を開発し、動的超分極率スペクトルを求め、電子系の柔らかさと位相緩和過程が及ぼす効果を解明し、新規な開殻非線形光学物質系の量子設計と物性制御について研究する。さらにこれらの特異な分子からなる分子集団（超分子）系に関しては、エキシトン移動（エネルギー移動）など他にも興味深い動的量子現象が期待されるが、それらと動的な非線形光学特性との協奏関係、これらの現象の構造依存性についても検討する。

## 3. 研究の方法

(1) 「柔らかい電子系」の非線形光学物質系として、開殻分子系を取り上げ、(I) 開殻一重項分子系、(II) 荷電開殻分子系、の2つに分類し、比較的小さなモデル分子系を用いて、その静的超分極率を計算する。計算には、*ab initio* MO 法と密度汎関数法(DFT)法に基づく有限場法を用いる。基底関数依存性、電子相関依存性、汎関数依存性を明らかにし、大きな系にも適用可能で信頼できる結果を与

える方法論の選定を行う。(I)では、特に一重項ジラジカル系について超分極率のジラジカル因子依存性や三重項ジラジカルの結果と比較することによるスピン状態依存性を検討し、(II)では、スピン状態に加えて、荷電状態に対する超分極率の依存性を明らかにする。電子系の柔らかさの尺度として、スピン多重度やジラジカル因子、さらに荷電状態を取り上げ、これらに対する超分極率の変化を解析することにより、「開殻分子系の非線形光学物性」についての構造—特性相関を明らかにする。

(2)振動論に基づく状態和 (SOS) 法により開殻一重項ジラジカル系のジラジカル因子依存性の起源を解明する。2サイトジラジカル系を用い、Valence configuration interaction (VCI)法による解析を行う。これよりジラジカル因子や静的超分極率の局在化自然軌道で表した transfer 積分、交換積分、クーロン積分等の基本パラメータで記述した解析式を導出し、静的超分極率とジラジカル因子やこれらパラメータ依存性を解明する。静的超分極率のこれら各種パラメータ依存性を、基底状態、励起状態間の諸物性量 (遷移エネルギー、遷移モーメント等) の変化に基づいて理解でき、これらの因子を調節する分子の構造設計の指針を構築することが可能となる。二光子吸収スペクトルは共鳴非線形光学物性の一つであり、応用面では二光子吸収材料としてその機構解明や新規物質系の設計指針の構築が求められている。そこで開殻分子系での二光子吸収係数に関して、上記の基礎パラメータ依存性を解明する。静的な超分極率との違いを明らかにし、二光子吸収に対する開殻一重項分子系の特徴を議論する。

(3)(2)の解析に基づき、開殻一重項系の実在系分子について静的三次超分極率の ab initio MO 法および密度汎関数法による計算を行う。ターゲット分子としては、ジフェナレニル化合物、イミダゾール環を含む化合物、遷移金属  $\sigma$ -セスキノネチリガンド含有化合物、グラフェンナノフレーク等である。これら各系においてジラジカル性を制御する因子 (幾何構造、置換基効果、サイズ、芳香属性等) を明らかにする。結果より、開殻性を制御可能な物質設計指針の確立を目指す。

(4)(3)の計算には(1)で選定されたハイブリッドDFT計算法を用いるが、これらの方法は閉殻系の場合、大サイズ系では超分極率を過大に算出する欠点があることがわかっている。これは主に用いられている交換汎関数の電子間距離が大きい領域での振る舞いが悪いことが原因であるが、近年その解決法の一つとして提案された長距離補正DFT(LC-DFT)法の開殻一重項系の超分極率の計算への適用性について検討する。スピン混入を効果的

に取り除く方法論としてスピンプリップ法を用いた ab initio MO 法が提案されている。これらの手法の開殻分子系の超分極率への適用可能性についても検討する。これらの計算は購入した計算機クラスターで行う。

(5)動的超分極率は、動的な外場に対する分子系の非線形応答を表す物理量であり、通常振動論で扱われている。しかしながら共鳴領域、外場強度が大きい場合、外場の時間変動が非周期的である場合は、外場下での電子系のダイナミクスを直接解析する方が便利なが場合が多い。そこで本研究では、これまで超分子系のエネルギー移動 (エキシトン移動) を取り扱う方法論として開発してきた量子マスター方程式 (QME) 法と ab initio MO CI 法を結合させた MOQME 法をもとに動的非線形光学物性の解析に適用できる計算法および解析法を開発する。これらを用い、これまでに提案した開殻分子系やそれらからなる様々な幾何学構造をもつ分子集団系の電子状態計算に基づく量子ダイナミクスを実行し、非線形光学物性と他の動的物性 (エキシトン移動等) との協奏効果について検討する。

以上の結果を総合して、「高次の柔らかい電子系」という設計指針に基づく新規の開殻非線形光学物質の機構解明とその制御方法の確立を行う。

#### 4. 研究成果

(1)一重項ジラジカル分子の  $\gamma$  のジラジカル因子依存性の理解のために2電子2軌道活性空間の2サイトモデルを考慮した。ジラジカル因子は基底状態における2電子励起配置の混合割合の2倍で定義される。ジラジカル因子がゼロの場合は安定な結合を表し、1の場合は完全なジラジカル、を表す。Valence CI の結果から基底および励起状態に関するエネルギーや遷移モーメントの解析式を求め、以下の  $\gamma$  の表式を得た。

$$\frac{\gamma}{(R_{BA}^{4A}/U^3)} = -\frac{8q^4}{\left(1 + \sqrt{1-q^2}\right)^2 \left(1 - 2r_K + \frac{1}{\sqrt{1-q^2}}\right)^3} + \frac{4q^2}{\left(1 - 2r_K + \frac{1}{\sqrt{1-q^2}}\right)^2 \frac{1}{\sqrt{1-q^2}}} \quad (1)$$

ここで、 $U$ はオンサイトと隣接サイトクーロン積分の差、 $r_K = 2K/U$  ( $K$ :交換積分)、 $q = 1-y$ は、有効結合次数で結合の強さを表す。 $r_K \sim 0$ の場合、 $y$ と  $\gamma$  の関係を図 1a に示す。中間の  $y$  ( $\sim 0.3586$ ) において  $\gamma$  が最大をとることがわかる。これは、主に type (III-2) と呼ばれる基底状態から励起状態2つを経由する仮想遷移過程の寄与に起因する変化で、その原因は3状態 ( $S_{1g}$ ,  $S_{1u}$ ,  $S_{2g}$ ) の遷移モーメントと励起エネルギーの

ジラジカル因子依存性により説明できる。これらは基底状態 ( $S_{1g}$ ) と第二励起状態 ( $S_{2g}$ ) における双性イオン配置と共有結合配置の混合度合いの変化に起因するものであり、電子相関の程度の違いに起因する非線形光学特性の変化である。以上のように、ジラジカル因子と  $\gamma$  の関係が明らかになり、中間ジラジカル性をもつ系の3次非線形光学特性が従来の閉殻系より大きな  $\gamma$  を与えることが理論的に予測された。さらに有効交換積分  $J$  と  $U$  の比率である  $r_j$  と  $r_k$  により  $\gamma$  が記述されることを見出し (式(2))、磁氣的相互作用との関係を初めて明らかにした。

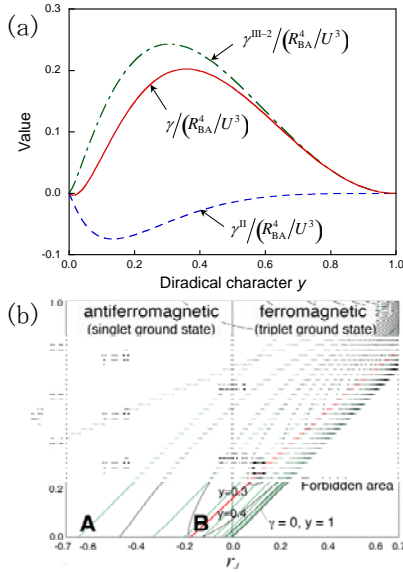


図1. (a)  $\gamma$  のジラジカル因子  $y$  依存性、(b)  $r_j$  -  $r_k$  面上の  $\gamma$  およびジラジカル因子

(2) 二光子吸収ピークを与える振動数  $\omega = \omega_{fg}/2$  の場合を考える。中性対称2サイトジラジカル分子系のVCI法による解を用いて

$$\sigma_{ND}^{(2)}(\omega_{fg}/2) = \frac{q^2}{4f_{fg}\sqrt{1-q^2} \left\{ (1-2r_k)^2 + f_{fg}^2 \left( 1-2r_k + \frac{1}{\sqrt{1-q^2}} \right)^2 \right\}} \quad (2)$$

とかけると明らかにした。左辺は無次元化二光子吸収断面積ピークである。緩和パラメータは  $\mathbf{h}\Gamma_{\beta\alpha} = f_{\beta\alpha}E_{\beta\alpha}$  と励起エネルギーに比例した値をとると近似する。このとき緩和パラメータの比は、励起エネルギーの比  $n_e$  ( $=E_{kg}/E_{fg}$ ) (ここでは、 $0 \leq n_e \leq 1$  を考える) となる。また、 $q=1-y$  はジラジカル因子  $y$  から求められる有効結合次数である。 $r_k$ - $y$  面上に無次元化二光子吸収断面積(2)の等値曲線をプロット (黒実線: 範囲 0-100 で間隔

5 の等値曲線) したものを図2に示す。各  $r_k$  における極大値を結んだ曲線 (尾根線) を赤実線で示す。 $r_j=0$  を示す青実線の上側が  $r_j > 0$  (強磁性的相互作用領域)、下側が  $r_j < 0$  (反強磁性的相互作用領域) である。式(1)の分母の  $E_{fg}$  が  $E_{kg}$  の2倍になるときに一光子共鳴と二光子共鳴が同時に起こり (二重共鳴)、二光子吸収断面積が著しく増大する。この共鳴増強の効果を検討するために、エネルギーの比  $n_e = E_{kg}/E_{fg}$  の等値曲線を緑実線でプロットする。二重共鳴は  $n_e = 0.5$  (このとき  $q$  の値に関わらず  $r_k = 0.5$ ) のときに生じることがわかる。図2より、まず  $\sigma_{ND}^{(2)}(\omega_{fg}/2)$  は、 $y > 0$  では  $r_k \sim 0.5$  のときに大きな値をとることがわかる。ただし、 $y$  が0および1に近づくと急速に0に接近する。 $(y, r_k) \sim (0.184, 0.504)$  で  $\sigma_{ND}^{(2)}(\omega_{fg}/2) \sim 96.9$  の最大値をとる。 $r_k$  に関わらず、静的な  $\gamma$  の場合と比較して極大値を与える  $y$  の値は小さいものの、中間ジラジカル性の場合に  $\sigma_{ND}^{(2)}(\omega_{fg}/2)$  が極大値を取ることがわかる。 $\sigma_{ND}^{(2)}(\omega_{fg}/2)$  の最大値を与える  $(y, r_k) \sim (0.184, 0.504)$  は、 $r_j = 0$  の曲線の上側 (右側)、すなわち基底状態が三重項の強磁性的相互作用領域に存在することは興味深い。これは、静的  $\gamma$  の場合のさらなる増大は基底状態が強磁性的相互作用を示す場合の中間ジラジカル性をもつ一重項励起状態において生じることと同じ傾向である。

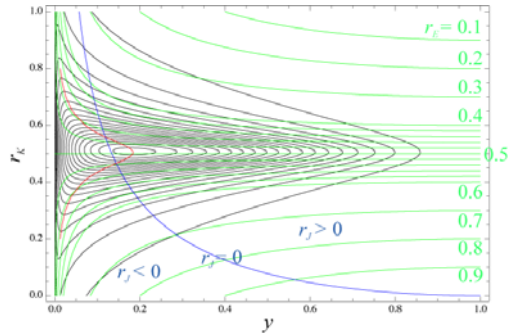


図2.  $r_k$ - $y$  面上の無次元化二光子吸収断面積  $\sigma_{ND}^{(2)}(\omega_{fg}/2)$

(3) 図3のジフェナレニル分子について、1) 中央複素環の修飾による芳香族性の変化 ( $X$  の変化)、2) フェナレニル環への置換基の導入 ( $Y_1, Y_2$ )、がジラジカル因子および  $\gamma$  値へ及ぼす効果を明らかにした。分子の構造最適化には UB3LYP/6-31G\*\* を使い、ジラジカル因子  $y$  の算出には UHF/6-31G\* による自然軌道 (UNO) を用いた。長軸方向の  $\gamma$  値は UBHandHLYP/6-31G\* を使い、Finite Field 法により算出した。また、中央複素環の芳香族性の判断指標としては NICS(1) を用いた。

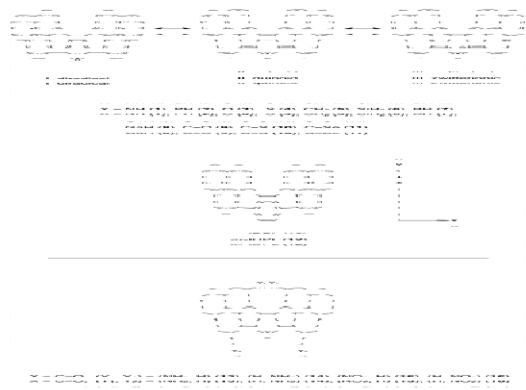


図3. 複素環含有ジフェナレニル化合物

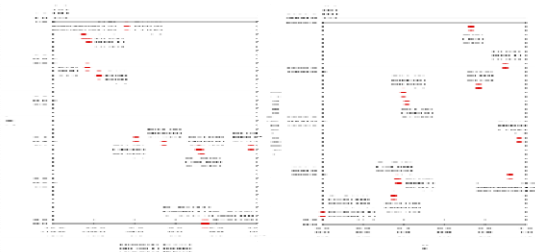


図4. (a) NICS(1) [ppm] vs  $y$ , (b)  $y$  vs  $\gamma$  [ $\times 10^3$  a.u.].

図4aに中央複素環のNICS(1)と分子全体のジラジカル因子 $y$ の関係を示す。負のNICSは芳香族性を示し、正のNICSは反芳香族性を示すことから、中央環の芳香族性が高いとジラジカル性が大きくなる傾向があることがわかる。これは、中央環の芳香族性が高い場合、両端のフェナレニル環でラジカルが安定化することによってジラジカル因子が増大するが、中央環の芳香族性が低い場合は中央環のキノイド構造の寄与が大きくなり、分子全体として閉殻系に近くなりジラジカル因子は小さくなるためである。図4bに $y$ と $\gamma$ 値の関係を示す。 $\gamma$ 値は $y$ が中間からやや大きい場合に最大をとる傾向が確認された。以上の結果から、中央環の修飾により、分子全体のジラジカル性と $\gamma$ 値を制御できる可能性が示された。

(4)  $\sigma$ -セミキノネート Ni 錯体は配位原子を適切に変えることでジラジカル性が変化する一重項ジラジカル錯体であることが知られている。図5に、本研究で考慮した開殻系 $[\text{Ni}(\sigma\text{-C}_6\text{H}_4\text{X}_2)_2]$  [ $X = \text{O (1), NH (2), S (3), Se (4), PH (5)}$ ]と閉殻系 $[\text{Ni}(\sigma\text{-C}_6\text{H}_4\text{XY})_2]$  [ $(X, Y) = (\text{NH}, \text{NH}_2) (6), (\text{S}, \text{NH}_2) (7)$ ]の構造を示す。図5に示したジラジカル錯体1-5の共鳴構造において、構造IIでは両端のフェニル環上で不対電子が非局在安定化し、構造Iでは配位原子X上の不対電子がNi原子を通して超交換相互作用することによりS-T gapが増

加するため、構造Iに比べ構造IIのジラジカル性は大きいと推測できる。

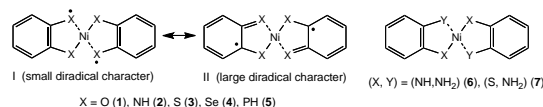


図5.  $\sigma$ -セミキノネート錯体

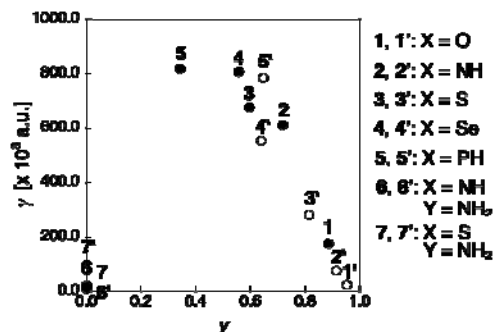


図6. 1-7 (●) と金属コア除去モデル 1'-7' (○)の $\gamma$ のジラジカル因子依存性。

図6は錯体1-7ジラジカル因子と $\gamma$ 値との関係を示している。中程度のジラジカル性を有する錯体(3, 4および5)は、ジラジカル性の大きい錯体(1)や閉殻錯体(6, 7)に比べ大きな $\gamma$ 値を示しており、金属含有系である本系においても、第二超分極率は、ジラジカル有機分子系と同様の構造-特性相関に従うことが明らかとなった。特に、中間ジラジカル錯体5 ( $y = 0.342$ ,  $\gamma = 819 \times 10^3$  au)の $\gamma$ 値は閉殻錯体7 ( $y = 0.0$ ,  $\gamma = 14 \times 10^3$  au)の $\gamma$ 値の約60倍に達する。すなわち、金属含有開殻一重項系が開殻系に比べ大きな三次NLO物性を示す可能性があることを示唆している。さらに、このタイプの一重項ジラジカル錯体では、配位原子Xによる系のジラジカル性と第二超分極率の制御可能性が期待できる。

(5) 本特定領域研究では、開殻性という新たな化学指標による非線形光学物性の変化を理論的に解明し、従来の閉殻系に比べてより大きな非線形光学物性を示すことを明らかにした。さらに、開殻性を制御する分子骨格の提案や化学修飾の方法について理論化学先導型の研究を進め、複数の分子設計指針を得た。一方で大規模な開殻分子系に適用可能な信頼できる電子状態計算法の選定を行い、UBHandHLYP法、LC-UBLYP法、SF-UDFT法等がこれらの計算に適用可能であることを明らかにした。これらの理論的成果は、実験家にも影響を及ぼし、我々の設計指針に基づいた実在系の合成とその非線形光学物性の測定が開始されている。しかし未解明な課題が数多く残されている(下記参照)。これらは理論化学先導より新たな概念や原理を発見できる課題としても大変興味深く、今後取り組んでいく予定である。

- (A) 開殻分子系のスピン状態 (マルチラジカル性の効果)、電荷状態の効果
- (B) 開殻分子からなる集合体の物性
- (C) 静的または動的な外場による開殻性ダイナミクス (Open-Shell Dynamics) と物性に及ぼす効果
- (D) 他の物性 (例えば磁性、導電性等) との多重機能発現
- (E) 外部環境 (結晶場や溶媒和) の効果 : 開殻分子系の散逸量子ダイナミクス
- (F) 金属-金属多重結合を含む系の非線形光学効果の開殻性との関係

#### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計46件)

- ① R. Kishi (1 番目), M. Nakano (2 番目), 他 7 名, Theoretical Study on Exciton Recurrence Motion in Anthracene Dimer Using the Ab Initio MO - CI Based Quantum Master Equation Approach, J. Phys. Chem. A, 査読有, 113, 2009, pp 5455-5462
- ② T. Minami, M. Nakano (2 番目), R. Kishi (5 番目), 他 3 名, Exciton dynamics of molecular aggregate systems composed of triangular lattice units: structural dependence of exciton migration and recurrence, J. Phys. Chem. C, 査読有, 112, 2008, 16675-16681.
- ③ H. Fukui, R. Kishi (2 番目), M. Nakano (11 番目), 他 8 名, Theoretical Study on Second Hyperpolarizabilities of Singlet Diradical Square Planar Nickel Complexes Involving o-Semiquinonato Type Ligands, J. Phys. Chem. A, 査読有, 112, 2008, pp.8423-8429.
- ④ S. Ohta, M. Nakano (2 番目), R. Kishi (6 番目), 他 14 名, Theoretical study on the second hyperpolarizabilities of phenalenyl radical systems involving acetylene and vinylene linkers: diradical character and spin multiplicity dependences, J. Phys. Chem. A, 査読有, 111, 2007, pp.3633-3641.
- ⑤ M. Nakano (1 番目), R. Kishi (2 番目) 他 7 名, Relationship between Third-Order Nonlinear Optical Properties and Magnetic Interactions in Open-Shell Systems: A New Paradigm for Nonlinear Optics, Phys. Rev. Lett., 査読有, 99, 2007, pp.033001.

[学会発表] (計177件)

- ① M. Nakano, Third-Order Nonlinear Optical Properties of Open-Shell Systems: Diradical Character and Spin State Dependences, ICCMSE 2008, highlighted keynote lecture, Hotel Belvedere Imperial, Crete, Greece, Sep. 26 (2008).
- ② M. Nakano, Theoretical and Computational

Design of Open-Shell Nonlinear Optical Systems, Multi-scale and Large-scale Simulation in DoD Materials Science, MITRE Cooperation, McLean, VA, USA, invited talk, June. 14 (2007).

- ③ M. Nakano, Theoretical Study on the Second hyperpolarizabilities of Diphenalenyl Radical Systems, ICCMSE 2006, invited talk, Hotel Panorama, Crete, Greece, Oct. 31 (2006).

[図書] (計2件)

- ① M. Nakano, Atoms, Molecules and clusters in electric fields, theoretical approaches to the calculation of electric polarizability, ed. by G. Maroulis, Series in Computational, Numerical and Mathematical Methods in Sciences and Engineering, Vol. 1, pp.679; Chapter 10, Third-order nonlinear optical properties of open-shell and/or charged molecular systems, pp.337-404 (Imperial College Press, 2006).

[その他]

- ① Masayoshi Nakano, International Conference of Computational Methods in Science and Engineering (ICCMSE) 2007, Research Excellence Award, European Society of Computational Methods in Science and Engineering (ECMSE), Sep. 27 (2007). <http://www.iccmse.org/ICCMSE2008/index.htm>
- ② 岸亮平, 第 89 日本化学会春季年会優秀講演賞(学術), 2009 年 5 月, <http://www.chemistry.or.jp/nenkai/89haru/data/89spal.pdf>
- ③ 論文誌表紙掲載 : R. Kishi, M. Nakano, et al., J. Phys. Chem. A, 113, 2009, pp 5455-5462, <http://pubs.acs.org/toc/jpcafh/113/18>

#### 6. 研究組織

##### (1) 研究代表者

中野 雅由 (NAKANO MASAYOSHI)  
大阪大学・大学院基礎工学研究科・教授  
研究者番号 : 80252568

##### (2) 研究分担者

岸 亮平 (KISHI RYOHEI)  
大阪大学・大学院基礎工学研究科・助教  
研究者番号 : 90452408

##### (3) 連携研究者

( )

研究者番号 :