

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 5 月 2 日現在

機関番号：14301

研究種目：基盤研究(B)

研究期間：2010～2013

課題番号：22350006

研究課題名(和文) 多次元分光スペクトルを用いた量子コヒーレンスの検出・制御の理論的研究

研究課題名(英文) Theoretical study of detection and control of quantum coherence using a multi-dimensional spectrum

研究代表者

谷村 吉隆 (TANIMURA, Yoshitaka)

京都大学・理学(系)研究科(研究院)・教授

研究者番号：20270465

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 14,500,000円、(間接経費) 4,350,000円

研究成果の概要(和文)：散逸場内にある系の量子コヒーレンスを散逸系の階層型方程式を用いて理論的に研究した。方程式を数値的に解くことにより低温で非マルコフ・非摂動的な熱浴の影響下にある量子ラチェット系や共鳴トンネルダイオード系を厳密に調べた。さらに強・弱の2モードの緩和がある場合を扱えるように階層方程式を拡張し、電子移動反応に適用し、多次元スペクトルを計算し解析を行った。方程式をさらに量子情報の問題にも適用し、非マルコフ性についても調べ、非線形応答関数が解析の鍵になることを示した。

研究成果の概要(英文)：We theoretically investigate a role of quantum coherence under a dissipative environment by means of the reduced hierarchy equations of motion approach. The set of equations treats the bath in a nonperturbative manner and is applicable to a low-temperature system with taking into account the non-Markovian correlation time of noise. In addition, this formalism allows us to treat both the classical limit and the tunneling regimes, and it is helpful for identifying purely quantum mechanical effects. By employing the Caldeira-Leggett Hamiltonian, we rigorously calculated the quantum dissipative dynamics of a ratchet system described by a periodic potential model and resonant tunneling problems. We then extended the reduced hierarchy equations of motion approach to include both overdamped and underdamped Drude to study electron transfer processes. Non-Markovianity was also studied from this approach. Nonlinear response functions were also utilized to analyze a role of quantum coherence.

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：散逸系の量子階層方程式 多次元分光 励起子 量子情報 共鳴トンネルダイオード 量子ラチェット

1. 研究開始当初の背景

散逸系の階層型運動方程式 (Hierarchy Equations of Motion, 以下 HEOM) は報告者が博士論文で導出した方程式 [YT & R. Kubo, JPSJ 58, 101 (1989)] を源流とする、量子散逸系の動的過程を非マルコフ・非摂動的に厳密に計算できる運動方程式 [YT, JPSJ, 75, 082001 (2006)] である。階層型方程式は光合成 Fenna-Matthews-Olson (FMO) 系の 2 次元電子分光 (2DES) 解析に用いられこと [石崎 & G. R. Fleming, PNAS 106, 17255 (2009)] を契機に、その有用性が急速に認識され Manolopoulos (Oxford 大)、Aspuru-Guzik (Harvard 大)、Nori (Michigan 大)、Yang (香港科学大) グループをはじめ、世界各国で用いられるようになった。

光合成 FMO アンテナ系の問題は、光により生成されたエキシトンの量子コヒーレンスが、異常に長寿命であるという 2DES の実験に端を発する。石崎・Fleming による階層方程式による解析は、タンパク質による非マルコフ的相互作用の強い揺らぎが重要なことを示唆し、量子情報の研究者も巻き込んだ大きな論争を引き起こした。階層型方程式はこの種の問題を厳密に扱える唯一の理論であり、論争で中心的な役割をしている。

階層型方程式は、多次元振動分光スペクトルを計算するために発展させた手法 [YT & Ishizaki, Acc. Chem. Res. 42, 1270 (2009)] で、系と環境 (熱浴) の相互作用を厳密に扱えるだけでなく、その階層要素のおかげで、系と環境の間の量子コヒーレンスも考慮可能で、時間依存した外場による過程や非線形応答関数も計算可能である。

これに対し一般化されたレッドフィールド方程式は、基本的に摂動論であり、また量子コヒーレンスの問題で多次元スペクトルを正しく再現できない。実際 FMO の 2 次元分光のシミュレーションは、階層型方程式でしか成功していない。しかしながら階層型方程式は計算コストが高いのが難点で、FMO 系に適用すべく Shi (北京科学院) らは、パデ近似により階層を簡略化する方法 [JCP 134, 194508 (2011)]、Kramer (Regensburg 大) グループはプログラムを GPU (Graphic Processor Unit) 上で走らせることで高速化を図っている。

特に Kramer らは、実験で得られたタンパク質ゆらぎのスペクトル分布をもとに階層方程式を解いて、多次元スペクトルを計算することにも成功しており [Kreisbeck & Kramer, JPC Lett 3, 2828 (2012)]、他の方法を一蹴した感がある。Schulten (Illinois 大) グループは階層型方程式をメモリーマップすることで並列性を高め [J. Chem. Theor. Comp 8, 2808 (2012)]、LH1+LH2 等のさらに大きな系にも適用している。

これら多くの研究者の寄与により、HEOM は光合成アンテナ系を始め生体分子の励起状態を調べる手法としては、スタンダードな理

論となり、量子情報や物性物理等にも適用され始めた。

2. 研究の目的

本プロジェクトは、量子コヒーレンスに敏感な多次元分光スペクトルを指標に、階層型方程式を用いて環境や外場の影響を解析する事により、量子コヒーレンスの重要性をポテンシャルで記述される量子トンネル系やエネルギー準位で記述される電子移動系やエキシトン系など、さまざまな系に対して調べ、量子コヒーレンスを生かした新たな分子反応過程を探ろうというものである。

3. 研究の方法

本研究では、殆んど全ての研究者が用いている、量子モンテカルロなどの他の方法によるエネルギー表示系ではなく、自由度が大きく数値的に不安定で計算がより困難な座標表示系で表される系を用いて、Wigner 空間で計算することに力を注いだ。この成果としてカルデラ・レゲットモデルに対する Wigner 表示での低温補正項を含めた階層型運動方程式のプログラムを作成した。以下に説明するように、これを用いて量子ラチェット系や、共鳴トンネル現象を示すナノデバイスに対する量子散逸過程を幅広いパラメータ領域で初めて厳密に解くことに成功した。

4. 研究成果

量子ラチェット系の研究

座標空間で計算を行うことの利点は、古典極限を取ることで、古典極限での階層方程式の結果と比較し、純粋な量子効果を容易に特定できることである。この特徴を生かして、ラチェット系について古典的な場合と量子的な場合について、緩和の強さや温度、ポテンシャルの高さなどを変えながら幅広い領域についてラチェット流の変化を調べた。特に、これまで理論的に厳密に調べる方法がなかったトンネル効果と散逸の影響については、詳細な議論を行った。この結果トンネルが容易に生じる浅いポテンシャルでは、低温領域でむしろ量子効果によりラチェット電流が抑制されることがわかった。この研究は、報告者がフンボルト財団の招きによりアウグスブルグの Hanggi 教授のもとに滞在する機会を得て開始したもので、近似的にしか調べられていなかった量子ラチェット系を厳密に解いた初めての研究である。

共鳴量子トンネル系の研究

ラチェット系と平行して共鳴量子トンネルダイオード系についての計算も行った。共鳴量子トンネル系とラチェット系の扱い方の一番の違いは、共鳴量子トンネル系では、電子が自ら作り出す電場をセルフコンシステントに考慮する必要がある点である。本研究では、このフィードバックにより外部から振動電場をかけなくても自励発振が生ずる

ことを、理論的に厳密に示すことに成功した。これまでのボルツマン方程式などによる結果は、数多くの近似や仮定に基づいたもので実験的にもその存在が定かではなかった。

具体的には共鳴トンネルダイオードの自励発振について Wigner 表示の階層方程式を用いて詳細な研究を行った。これまで数値的にも解けなかったカルデラ・レゲットハミルトニアンを、階層方程式を用いることにより厳密に解くことに成功した。これを2重量子井戸計算された I-V 線図と発振の系に電子の有効ポテンシャルの効果を取り入れることにより、異なるバイアス電圧に対する電流・電圧曲線を描き、負性抵抗や自励発振などを散逸場の影響下で初めて厳密に解くことにも成功した。自励発振は負性抵抗領域に現れるプラトーで起っているが、プラトーがあっても自励発振が起らない場合があること発見した。また、上部プラトーと下部プラトーの2つが現れる場合もあり、上部プラトーは高励起のトンネル状態がある場合に生じることを見出した。

ハミルトニアン系を厳密に解くことで、一点の曇りもない議論から自励発振を示したことの意義は大きい。

量子情報系における初期相関の問題

階層方程式は、非マルコフ過程を非摂動的に扱えるだけでなく、熱浴と系の量子相関の効果を取り入れられることも大きな利点の一つである。この特徴を生かして、ノンマルコフアニティと呼ばれる非マルコフ性の量子尺度を計算し、その効果を議論した。この問題は、エネルギー表現の階層方程式を用いて行った。そして、系と熱浴との初期相関が、非線形応答関数を計算する手法を応用することでより深く理解出来ることを示し、その解析を行った。結合強度が強い領域で熱浴とのエンタングルメントにより、通常の熱力学と様相が大きくことなることをポンプ・プローブなどの非線形分光スペクトルと結びつけながら研究を行った。

光合成 FMO 系のエキシトン輸送の研究

熱浴との相関の研究の延長として、光合成 FMO 系についての研究も行った。階層方程式は、この問題に対し広く用いられていたが、本研究では、特にエキシトンの輸送効率についての議論を行った。階層方程式自体の構造についても研究を進め、初期相関を入れた場合と入れない場合のコヒーレンスの差についても調べた。

電子移動反応系の研究

電子移動反応と多次元分光の関係についても研究を行った。これまでの研究は、ドルーデ型という構造を持たないスペクトル分布関数を用いて、主に研究をおこなわれていた。これにさらに、ブラウニアン型という、共鳴周波数をもつスペクトル分布関数を加えた2つのモードに対する計算を行った。この計算は、2つの独立した階層を扱うことになり、計算コストは大変高いが並列化等の処

理により初めて可能になった。マーカスのインバーテッドパラボラと呼ばれる化学反応律の変化を、シーケンシャルからスーパーエクスチェンジと呼ばれる電子移動反応領域について、非摂動的に統一的に議論し、それがどのように多次元分光スペクトルに反映されるかについてのシミュレーションを行い、コヒーレンスの変化を多次元分光スペクトルを通して調べられることを示した。

2つの熱浴と相互作用する系

ドルーデ型について研究をさらに発展させ、系と熱浴が強く結合していることにより生じる平衡統計力学からのずれについて詳細に研究した。具体的には、2スピン系に2つの熱浴をつけた研究を行った。この計算は2つの独立した階層を扱うことになり、計算コストは大変高いが並列化等の処理により初めて可能になった。結合強度が強い領域で熱浴とのエンタングルメントにより、通常の熱力学と様相が大きくことなることを2次元電子分光スペクトルと結びつけながら非断熱遷移や緩和の影響についても研究を行った。これにより電子移動と緩和を多次元分光で論じる可能性を開いた。

強い光で励起された系の動力学的研究

ミュンヘン工科大学 Domcke 教授と Gelin 博士との共同研究として、強いレーザー光で励起されている系の散逸効果に対するの研究を行った。この研究はこれまでレッドフィールド方程式を用いていたため、緩和の影響を摂動的にしか入れられなかったが、非摂動で非マルコフ的な緩和領域に階層方程式を用いることで、現実に近い状況下での解析が行えるようになった。

テラヘルツ・ラマン二次元分光の研究

チューリッヒ大学 Hamm 教授との共同研究として、THZ-Raman 多次元分光の分子動力学シミュレーション解析も行った。Hamm 氏らが提案していたラマン・テラヘルツ二次元分光に加えて、テラヘルツ・ラマン分光も行うことで、非調和振動性と不均一性の2つを系統的に調べられることをシミュレーションにより示した。この研究は階層方程式を現実的な系にどのように適用すればよいかを探る上で重要な知見を与えた。

非ガウス過程に対する研究

階層方程式で扱っている熱浴は、調和振動子の集団から構成されているためにガウ斯的揺動を生じる。しかし、実際は、ガウ斯的ではない揺動が重要となる場合もある。この方向に対する拡張の試みとして、非ガウス過程が輸送現象におよぼす影響を、確率過程の理論を拡張することにより議論した。

デコヒーレンス

系のデコヒーレンスについても、確率過程的モデルを用いて研究を行った。デコヒーレンスとは重なりあっている系の量子状態のコヒーレンスが、それぞれの時間発展が異なるために、時間とともに失われる様のことという。研究に結果、連続時間のランダムウォ

ーク過程について厳密解を発見した。以前の研究で知られている解は、2つしかなく、この厳密解の導出は大変重要である。連続時間のランダムウォーク過程を用いて結晶中電子のスピン decoherence についても研究を行った。調和振動子にモデルの解を適用して、非ガウシアン的な環境に対するスペクトルを計算した。この結果は、実験的に非ガウシアンの影響を調べるのに役立つ。非ガウシアン的な揺動の効果は、水や光合成の実験において重要であると考えられる。

まとめ

以上のように、本研究では、量子コヒーレンスを鍵として様々な問題を、階層方程式を用いて調べた。得られた多くの結果は、数值的に厳密に求められたもので、歴史的にみても初めて得られた結果ばかりである。非摂動・非マルコフ領域での量子散逸過程の研究は、本研究で用いた階層方程式がブレークスルーとなっており、今後、飛躍的に進歩すると考えられている。本研究では、そのような流れの先導する重要な成果が数多く得られた。

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 20 件)

1. A. Ueta, Y. Tanimura, and O. V. Prezhdo, *Distinct infrared spectral signatures of the 1, 2- and 1, 4-fluorinated single-walled carbon nanotubes: A molecular dynamics study*, J. Phys. Chem. Lett. **1**, 1307-1311 (2010)
2. A. G. Dijkstra and Y. Tanimura, *Correlated fluctuations in the exciton dynamics and spectroscopy of DNA*, New J. of Phys. **12**, 055005 [19 pages] (2010)
3. M. Tanaka and Y. Tanimura, *Multistate Electron Transfer Dynamics in the Condensed Phase: Exact Calculations from the Reduced Hierarchy Equations of Motion Approach*, J. Chem. Phys. **132**, 214502 [11pages] (2010)
4. A. G. Dijkstra and Y. Tanimura, *Non-Markovian entanglement dynamics in the presence of system-bath coherence*, Phys. Rev. Lett **104**, 250401 [4 pages] (2010).
5. A. Sakurai and Y. Tanimura, *Does \hbar play a role in multidimensional spectroscopy? Reduced hierarchy equations of motion approach to molecular vibrations*, J. Phys. Chem. A **115**, 4009-4022 (2011) Error correction)
6. T. Hasegawa and Y. Tanimura, *A polarizable water model for intramolecular and intermolecular vibrational spectroscopies*, J. Phys. Chem. B **115**, 5545-5553 (2011)
7. D. Packwood and Y. Tanimura, *Non-Gaussian stochastic dynamics of spins and oscillators*, Phys. Rev. E **84**, 061111 [9pages] (2011)
8. A. Ueta, Y. Tanimura, and O. V. Prezhdo, *Infrared spectral signatures of surface-fluorinated graphene - A molecular dynamics study*, J. Phys. Chem. Lett. **3**, 246-250 (2012)

9. A. Ueta, Y. Tanimura, and O. V. Prezhdo, *Infrared Spectral Signatures of Multilayered Surface-Fluorinated Graphene: A Molecular Dynamics Study*, J. Phys. Chem. C **116**, 8343-8347 (2012)
10. A. G. Dijkstra and Y. Tanimura, *Non-Markovianity: initial correlations and nonlinear optical measurements*, Phil. Trans. R. Soc. A **370**, 3658-3671 (2012)
11. A. G. Dijkstra and Y. Tanimura, *System bath correlations and the nonlinear response of qubits*, J. Phys. Soc. Jpn. **81**, 063301 [4pages] (2012)
12. S. Ueno, Y. Tanimura, and S. Ten-no, *Molecular dynamics simulation for infrared spectroscopy with intra-molecular forces from electronic properties of on-the-fly quantum chemical calculations*, Int. J. Q. Chem. **113**, 330-335 (2012)
13. A. G. Dijkstra and Y. Tanimura, *Role of the Environment Time Scale on Light-Harvesting Efficiency and Coherent Oscillations*, New J. Phys. **14**, 073027 [11pages] (2012)
14. P. Hamm, J. Savolainen, J. Ono and Y. Tanimura, *Note: Inverted Time-Ordering in 2D-Raman-THz Spectroscopy of Water*, J. Chem. Phys. **136**, 236101 [2pages] (2012)
15. D. Packwood and Y. Tanimura, *Dephasing by a continuous-time random walk process*, Phys. Rev. E. **86**, 011130 [9 pages] (2012)
16. Y. Tanimura, *Reduced hierarchy equations of motion approach with Drude plus Brownian spectral distribution: Probing electron transfer processes by means of two-dimensional correlation spectroscopy*, J. Chem. Phys **137**, 22A550 [9 pages] (2012)
17. A. Sakurai and Y. Tanimura, *An approach to quantum transport based on reduced hierarchy equations of motion: Application to a resonant tunneling diode*, J. Phys. Soc. Jpn **82**, 033707 [4 pages] (2013)
18. A. Kato and Y. Tanimura, *Quantum Suppression of Ratchet Rectification in a Brownian System Driven by a Biharmonic Force*, J. Phys. Chem. B **117**, 13132-13144 (2013)
19. M. F. Gelin, Y. Tanimura, and W. Domcke, *Simulation of femtosecond "double slit" experiments for a chromophore in a dissipative environment*, J. Chem. Phys. **139**, 214302 (2013)
20. A. Sakurai and Y. Tanimura, *Self-excited current oscillations in a resonant tunneling diode described by a model based on the Caldeira-Leggett Hamiltonian*, New J. of Phys. **16**, 015002 [24 pages] (2014)

[学会発表](計 43 件)

1. Y. Tanimura, A. G. Dijkstra, *Excitations in a dynamical bath: anisotropy decay in DNA Quantum transport and dynamics in materials and biosystems: From molecular mechanisms to mesoscopic functionality*, ACAM (アイルランド・ダブリン市), 2010/5/12.
2. 長谷川太祐・谷村吉隆, *多次元分光計算のための水分極ポテンシャルの開発*, 第13回理論化学討論会, 北海道大学 学術交流会館(札幌市), 2010/5/24.
3. Arend G. Dijkstra; Y. Tanimura, *Qbit dephasing in a quantum bath*, International Workshop on Statistical Physics of

- Quantum Systems, 東京大学駒場キャンパス, 2010/8/2.
4. Y. Tanimura, *Nonperturbative-NonMarkovian Quantum Dissipative Dynamics: Reduced Hierarchy Equations Approach*, Workshop on "Physics and Chemistry in Quantum Dissipative Systems" (招待講演), 京都大学 (京都市), 2010/8/10.
 5. Y. Tanimura, *Multi-Dimensional Spectroscopy in a Real Coordinate Space*, The 5th International Conference on Coherent Multidimensional Spectroscopy (招待講演), University of Minnesota, (米国・ミネアポリス), 2010/8/18.
 6. 櫻井敦教・谷村吉隆, *1次元および2次元振動分光スペクトルにおける量子効果と緩和の影響*, 第4回分子科学討論会 2010, 大阪大学豊中キャンパス (豊中市), 2010/9/17.
 7. 谷村吉隆, *散逸系の階層型量子運動方程式と多次元分光*, 第8回 京都大学福井謙一記念研究センターシンポジウム(招待講演), 京都大学福井謙一記念研究センター (京都市), 2010/12/3.
 8. Y. Tanimura; M. Tanaka, *Exploring electron transfer reaction processes by means of multi-dimensional spectroscopy*, Pacificchem 2010 (招待講演), Sheraton Waikiki, (米国・ホノルル市), 2010/12/15.
 9. Y. Tanimura; A. Sakurai, *Is quantum effect really important in linear and nonlinear vibrational spectroscopy?*, Pacificchem 2010(招待講演), Sheraton Waikiki (米国・ホノルル市) 2010/12/16.
 10. Arend G. Dijkstra; Y. Tanimura, *Correlated fluctuations in the exciton dynamics and spectroscopy of DNA*, Pacificchem 2010, Honolulu Convention Center (米国・ホノルル市), 2010/12/17.
 11. Arend G. Dijkstra; Y. Tanimura, *Excitation dynamics in a quantum mechanical bath*, Pacificchem 2010, Sheraton Waikiki (米国・ホノルル市), 2010/12/18.
 12. Y. Tanimura, *Non-Markovian, nonperturbative, nonsecular quantum hierarchy equations of motion approach*, 京都大学物理専攻 GCOE Symposium on "Emerging Frontiers of Physics" (招待講演), 京都大学 (京都市), 2011/2/21.
 13. Arend G. Dijkstra, 谷村吉隆, *Non-Markovianity in the nonlinear optical response*, 日本物理学会第66回年次大会, 新潟大学(新潟市), 2011/3/25.
 14. 田中翠・谷村吉隆, *熱浴と結合した電子3状態系のスペクトル研究*, 日本物理学会第66回年次大会, 新潟大学(新潟市), 2011/3/27.
 15. Y. Tanimura, *Theory of energy transfer beyond perturbative treatments*, Royal Society Theo Murphy International Scientific Meeting: Quantum-Coherent Energy Transfer: implications for biology and new energy technologies (招待講演), Kavli Royal Society International Centre (英国・バッキンガムシャー), 2011/4/29.
 16. Y. Tanimura, *Reduced hierarchy equations of motion approach to tunneling and nonadiabatic transition processes*, Spectroscopy and quantum phenomena in large molecular aggregates (招待講演), University of Bremen (ドイツ・ブレーメン), 2011/6/29.
 17. Y. Tanimura, *Reduced Hierarchy equations of motion approach to multidimensional spectroscopies of biological systems*, 7th Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics (ISTCP-VII) (招待講演), 早稲田大学(東京), 2011/9/3.
 18. Y. Tanimura, *Quantum Dissipative Dynamics Probed by Multidimensional Spectroscopies*, 7th Black Forest Focus on Soft Matter(招待講演), Hotel Saigerhoh (ドイツ レンツキルヒ市), 2012/3/16.
 19. 櫻井敦教・谷村吉隆, *ラチェット効果に対するノイズの相関の影響*, 日本物理学会第67回年次大会, 関西学院大学 (西宮市), 2012/3/24.
 20. 加藤彰人・谷村吉隆, *半導体中の電子トンネリングにおける散逸の影響の理論的研究*, 日本物理学会第67回年次大会, 関西学院大学(西宮市), 2012/3/26.
 21. Arend G. Dijkstra and Y. Tanimura, *Non-Markovianity: initial correlations and nonlinear optical measurements*, 日本物理学会第67回年次大会, 関西学院大学 (西宮市), 2012/3/24.
 22. Y. Tanimura, *Multidimensional spectroscopies to electron transfer processes*, Lund mini symposium (招待講演), Lund University (スウェーデン・ルンド市), 2012/5/31
 23. Y. Tanimura, *Exploring electron transfer processes by means of 2D-ES*, The 6th International Conference on Coherent Multidimensional Spectroscopy (招待講演), Hotel Berlin (ドイツ・ベルリン市), 2012/7/17
 24. 櫻井敦教, 谷村吉隆, *半導体中での電子ダイナミクスにおける散逸の効果の研究*, 第52回 分子科学若手の会 夏の学校, 東京大学本郷キャンパス, 2012/8/22
 25. 吉宗聖司, 谷村吉隆, *MD シミュレーションによる ZnCl₂ の研究*, 第52回 分子科学若手の会 夏の学校, 東京大学本郷キャンパス, 2012/8/22
 26. 吉宗聖司, 谷村吉隆, *分子動力学シミュレーションによる ZnCl₂ の構造と動的性質の研究*, 分子科学討論会, 東京大学, 2012/9/19
 27. 櫻井敦教, 谷村吉隆, *共鳴トンネルダイオードでの電位移動における散逸の効果*, 日本物理学会 2012 秋季大会, 横浜国立大学 (横浜市), 2012/9/20.
 28. 臼井宏太, 谷村吉隆, *階層型運動方程式を用いた熱流の研究*, 日本物理学会 2012 秋季大会, 横浜国立大学(横浜市), 2012/9/20.
 29. 加藤彰人, 谷村吉隆, *二調和混合により駆動された古典及び量子ラチェット系*, 日本物理学会 2012 年秋季大会, 横浜国立大学 (横浜市), 2012/9/20.
 30. Arend G. Dijkstra; Y. Tanimura, *Effect of the Time Scale of the Environment on Exciton Dynamics*, 日本物理学会 2012 年度秋季年大会, 横浜国立大学 (横浜市), 2012/9/21
 31. 伊藤広伸, 谷村吉隆, *分子動力学シミュレーションによるアルカリ金属ハライド水溶液の 1 次元振動分光スペクトル解析*, 分子科学討論会, 東京大学, 2012/9/21

32. Y. Tanimura, *Reduced Hierarchy Equations of Motion approach in a real space*, TU Munich, mini-symposium (招待講演), T.U. Munich, Garching (ミュンヘン市・ドイツ), 2012/9/26
33. 谷村吉隆、伊藤広伸, *Low-Frequency Vibrational Spectroscopies of Aqueous Alkali Halide Solutions in MD Simulation*, Symposium of Quantum and Classical Dissipative Dynamics, 分子科学研究所 (岡崎市), 2013/3/7
34. 櫻井敦教、谷村吉隆, *Self-excited Current Oscillations in a Resonant Tunneling Diode Described by a Model Based on the Caldeira-Leggett Hamiltonian*, Symposium of Quantum and Classical Dissipative Dynamics, 分子科学研究所 (岡崎市), 2013/3/8
35. 加藤彰人、谷村吉隆, *Quantum Ratchet Rectification in a Brownian System Driven by Biharmonic Force*, Symposium of Quantum and Classical Dissipative Dynamics, 分子科学研究所 (岡崎市), 2013/3/8
36. 臼井宏太、谷村吉隆, *Quantum Heat Transport through a Two Level System*, Symposium of Quantum and Classical Dissipative Dynamics, 分子科学研究所 (岡崎市), 2013/3/8
37. 櫻井敦教、谷村吉隆, *共鳴トンネルダイオードにおける電流の発振と電流-電圧曲線のプラトー現象の解析*, 日本物理学会第68回年次大会, 広島大学 東広島キャンパス, 2013/3/26
38. Yoshitaka Tanimura, Taisuke Hasegawa, and Hironobu Ito, *Water Potential for Vibrational Spectroscopy*, The XVIth International Conference on Time-Resolved Vibrational Spectroscopy (TRVS 2013), 別府湾ロイヤルホテル(別府市), 2013/5/21
39. 谷村吉隆 櫻井敦教, *An Approach to Quantum Transport Based on Reduced Hierarchy Equations of Motion*, 16th International Workshop on Computational Electronics, 奈良県新公会堂 (奈良市), 2013/6/7
40. 臼井宏太・谷村吉隆, *量子系における熱流*, 第53回分子科学若手夏の学校, 岡崎コンフェレンスセンター (岡崎市), 2013/8/19
41. 伊藤広伸・谷村吉隆, *低振動分光に対応した新しい分極水モデルの開発*, 第53回分子科学若手夏の学校, 岡崎コンフェレンスセンター (岡崎市), 2013/8/21
42. Y. Tanimura, *Self-excited Current Oscillations in a Resonant Tunneling Diode Described by a Caldeira-Leggett Model*, International Conference on Computational Modeling Methods and Applications, Northeast Normal University(中国・長春), 2013/9/27
43. Y. Tanimura, *Quantum Entanglement Detected by Multi-dimensional Spectroscopy*, Fourth Asian Spectroscopy Conference, 南洋理工大学(シンガポール), 2013/12/17

[図書](計0件)

[産業財産権]
出願状況(計0件)

名称:
発明者:
権利者:
種類:
番号:
出願年月日:
国内外の別:

取得状況(計0件)

名称:
発明者:
権利者:
種類:
番号:
取得年月日:
国内外の別:

[その他]
<http://theochem.kuchem.kyoto-u.ac.jp/members/tanimuraj.htm>

6. 研究組織
(1)研究代表者
谷村吉隆 (TANIMURA, Yoshitaka)
京都大学大学院理学研究科・教授
研究者番号: 20270465

(2)研究分担者 ()

研究者番号:

(3)連携研究者 ()

研究者番号: