

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 6 月 13 日現在

機関番号：11301

研究種目：基盤研究(A) (一般)

研究期間：2012～2015

課題番号：24245001

研究課題名(和文) 動的分子軌道論による化学反応の多電子ダイナミクスの解明：その展開と実験検証

研究課題名(英文) Investigation of the multielectron dynamics of chemical reactions based on time-dependent molecular orbital picture: Its development and experimental verification

研究代表者

河野 裕彦 (Kono, Hirohiko)

東北大学・理学(系)研究科(研究院)・教授

研究者番号：70178226

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 30,300,000円

研究成果の概要(和文)：電子・原子核波束計算法を用いて、COやN2のレーザー場中の多電子ダイナミクスやアト秒パルスが発生する高次高調波のレーザー制御法を提案した。また、実験グループは、理論の予想通りCO2の等価な2つのC-O結合の一方だけを2色レーザーパルスの形状によって選択的に切断させることに成功し、化学反応制御の新たな可能性を示した。さらに、反応動力学計算を用いて、XFELによる多価カチオン生成とそのクーロン爆発を使った時間分解分子イメージングに対するシミュレーション法を確立して、ヨードウラシルなどに適用した。そのほか、分子ベアリングやDNA鎖切断の実時間シミュレーションを行い、それらの動力学を明らかにした。

研究成果の概要(英文)：We investigated the multielectron dynamics of molecules such as CO and N2 in intense laser fields by using electronic and nuclear wavepacket propagation methods and proposed laser control schemes of the generation of higher order harmonics which is a source of attosecond pulses. We experimentally demonstrated that the two C-O bonds of CO2 can be asymmetrically cleaved by changing the phase between two-color pulses, which provides a new possibility of the laser control of chemical reactions. We also established a method to simulate XFEL-induced Coulomb explosion of molecules for time-resolved molecular imaging. The results of application to iodouracil etc. are in good agreement with the experimental results.

研究分野：化学反応動力学理論

キーワード：多電子ダイナミクス 化学反応動力学 レーザー制御 クーロン爆発 時間分解分子イメージング 高次高調波発生 時間依存化学ポテンシャル 原子分割エネルギー

1. 研究開始当初の背景

近赤外域 (波長 λ ~800 nm) の高強度の光を生み出すチタンサファイアレーザーは分子科学に新たな展開をもたらしていた。このレーザーが発生する 10^{13} W/cm²以上の高強度の光は、分子中のクーロン力と拮抗する強い力を電子に及ぼし、分子の電子状態を光の半周期の間に大きく変化させて様々な非摂動論的現象を引き起こす。このような光において、パルス長を短く、あるいは、波長を長くすれば、解離を抑えることができ、分子制御の道具としても注目を集めていた。

このような光によるイオン化によって放出された電子がレーザー電場で揺さぶられ親イオンに再接近すると、軟X線(XUV)領域の高次高調波が発生する (Higher-order Harmonic Generation: HHG)。F. Krauszらは、波長15 nmの高調波を発生させ、100アト秒 (= 0.1 fs) の夢のパルスを作り出した。放出電子と親イオンとの相互作用を反映するHHGは分子構造や電子状態に依存し、N₂の最高占有軌道 (HOMO) の断層図が実験的に得られはじめていた。研究分担者菱川らは、コインシデンスイオン運動量画像計測などを用いて、分子が常にレーザー電場方向に伸長した構造をとることなど、強レーザー場中の分子の応答を明らかにしてきた。この手法を光電子画像計測と組み合わせ、イオン基底状態を経由しない解離性イオン化経路の存在も初めて証明した。現在ではさらに先端的な実験が展開されているが、実験だけでは、どの軌道からイオン化したかを同定することや、レーザー場からエネルギーを得るのは一つの電子か複数かに答えることは一般に困難であり、多電子の動きを記述する強力な理論の胎動が待たれていた。

2. 研究の目的

本研究の目的は、電子動力学理論と分子動力学理論の融合により、化学反応やイオン化過程における電子状態の変化を明らかにすることにある。多配置時間依存Hartree-Fock(MCTDHF)法などの手法を用いて、高強度近赤外パルスや軟X線アト秒パルスによって誘起される多電子ダイナミクスを追跡し、分子軌道間のエネルギー交換を定量化する時間依存軌道化学ポテンシャルに立脚した動的分子軌道論を展開する。各軌道からの光電子スペクトルの計算からイオン化軌道を同定し、時間分解電子・イオン計測

の実験結果との比較検証をとおして電子状態変化の軌道描像を確立する。非断熱遷移時における多電子ダイナミクスの理解も推し進める。また、時間分解光電子分光、高次高調波発生、自由電子レーザー (XFEL) によるクーロン爆発などを利用した時間依存分子イメージングの新しい手法を提案する。これらの電子ダイナミクスの理解に基づいてフラーレンなどの光反応制御のスキームを提案していく。そのほか、ナノマシンの重要なパーツと見なされている分子ベアリングやDNA鎖切断の実時間シミュレーションを行い、それらの動力学を明らかにして化学反応動力学理論に新しい展開をもたらす。

3. 研究の方法

分子の光イオン化や化学反応における多電子ダイナミクスを種々の電子波束計算法を用いて定量化する。軌道間のエネルギー交換は自然軌道の軌道化学ポテンシャルを用いて定量化する。まず、MCTDHF法を用いて、二原子分子の近赤外イオン化光電子スペクトルを計算する。窒素分子やLiHでは内殻からのXUVイオン化にも注目し、価電子との相互作用についても定量化する。種々の二原子分子に適用して、軌道間のエネルギー交換に基づく多電子ダイナミクスの理解を進める。パルスの変数を変え、特定の分子軌道の占有数やイオン化を増大させる制御法を探索する。これにより、高次高調波スペクトルとイオン化軌道に関連づけるスキームを確立する。

化学反応に対しては、ブタジエンの光環化反応などを対象に、非断熱遷移における各軌道の化学ポテンシャルの変化を求め、軌道間のエネルギー交換を定量化する。化学反応の非断熱遷移に際して、HOMOやLUMO軌道の化学ポテンシャルがどのように変化するかを時間依存の電子波動関数から求め、軌道間のエネルギー交換を定量化する。どの軌道の化学ポテンシャルや占有数が大きく変わったかを調べ、多電子ダイナミクスに関与する軌道を特定する。

また、時間依存断熱状態法を使ってC₆₀フラーレンの強レーザー場誘起大振幅振動を追跡し、その運動の時間分解分子イメージングが可能かどうか検証する。XFELによって分子は瞬時(5~10 fs程度)に多価カチオン(C₆₀では60+以上も生成)になるが、そのクーロン爆発を密度汎関数(DFT)法に近い精度を持ちながらも高速計算が可能な密度汎関数強束縛(DFTB)法を使ってフラグメントの運

動量（エネルギー）分布を計算する。様々な分子のクーロン爆発の実験結果を再現できるように DFTB 法を改良しながら、この運動量分布がクーロン爆発直後の分子構造をどのように反映しているか調べる。そのほか、有限長ナノチューブ中のフラーレン（分子ベアリング）の回転機構や DNA 鎖の鎖切断のダイナミクスなども DFTB 法を使って追跡し、化学反応中の電子の流れだけでは無くエネルギーの流れも解析し、化学反応を統合的に理解していく。

実験グループは、電子—イオンコインシデンス運動量画像計測系を用いて、軌道の情報が光電子角度分布から読み取れるか確認する。生成イオンとのコインシデンス計測によって、分子座標系での光電子運動量分布を得ることができる。種々のパルス条件で、NO の光電子を計測し、どの軌道からイオン化が進んでいるかを明らかにし、理論計算の結果と比較する。また、 ω と 2ω の 2 つのパルスの電場の位相を自在に変えて、空間的に非対称な電場波形を持つパルスをつくり、CO₂ の C-O 結合のように 2 つの等価な結合を選択的に切る実験を行う。これにより、熱的には不可能な異方性の高い結合解裂の実験法の提案につなげる。

4. 研究成果

光と相互作用する多電子系の多配置時間依存 Hartree-Fock(MCTDHF)法を LiH 分子などのダイナミクスに適用した。各電子配置 I に対する特性エネルギー E_I と分布移動速度 k_I を定義し、それらが多電子系のダイナミクスを特徴付ける指標であることを見いだした。すべての I が同じ E_I を持つ瞬間（量子定常状態）、電子は等速運動をする。また、 k_I がすべて 0 になる瞬間（古典定常状態）、電子の速度の期待値は 0 となっていた。また、LiF の非断熱遷移を調べた結果、擬交差を通過する時刻において全ての E_I が縮退することがわかった。

次に、LiH 分子を対象に近赤外 2 サイクルパルス中の電子ダイナミクスのシミュレーションを行った。パルスの異なった搬送波位相に対する計算から、H 原子核側に局在化した電子は Li 原子核側にイオン化しやすいことが確かめられ、Li 側に最も大きくポテンシャルが傾くような位相を選べば高次高調波の強度を増幅させることができることがわかった。また、パルスの搬送波位相によって、分子軌道のダイナミクスや高次高調波がどのように変化するか調べ、CO や N₂ の高調波発生が

HOMO だけではなく複数の原子価軌道が寄与する過程であることを明らかにした。CO 分子では、誘起双極子の搬送波位相依存性が軌道によって異なることを見だし、特定の高次高調波を増強する方法を提案した。

イオン化や化学反応における多電子ダイナミクス（動き）が時間に依存する自然分子軌道の化学ポテンシャルによって支配されていることを明らかにした。レーザー場中における分子軌道間の相互作用を軌道間のエネルギー交換で定量化（化学ポテンシャルによる定量化）する手法を、非断熱遷移を含む化学反応に拡張した。NaH の光解離反応に適用し、擬交差通過後から 4 シグマと 5 シグマの分子軌道の占有数と化学ポテンシャルが同周期で振動し、これらの軌道の変化が価電子のダイナミクスを決定づけていることを明らかにした。一般に、非断熱遷移により形状が大きく変化する分子軌道の対が存在することがわかった。

X 線自由電子レーザー(XFEL)とナノカーボンの相互作用にも研究を広げ、内殻励起によって生成するフラーレン超多価カチオン（電荷=20~60）の解離機構を解明した。この電荷領域では、原子カチオンが 10 fs 程度で放出されるクーロン爆発が起こり、続いて分子フラグメントの脱離が起こるという 2 段階機構を明らかにした。また、クーロン爆発が解離直前の分子構造を鋭敏に反映することに基づいて、ナノ分子の構造変化をフェムト秒オーダーでイメージングする手法を提案した。速い原子フラグメントは爆発前の分子の構造に敏感で、分子内振動の時間分解イメージングが可能であることを示唆している。C₆₀ における近赤外誘起振動ダイナミクスの時間分解クーロン爆発イメージングの原理検証計算も行った。XFEL によって生成した多価カチオンのクーロン爆発が解離直前の分子構造を鋭敏に反映することを利用して、ナノ分子の構造変化をフェムト秒の時間分解能でイメージングする手法を提案した。ヨードウラシルのクーロン爆発のシミュレーションも行い、XFEL 実験で得られたフラグメントの生成比やエネルギー分布を再現することに成功した。時間分解分子イメージングにつながる成果としては、分子構造を反映する原子フラグメント間の角度相関の実験結果の再現があげられる。

化学反応の動力学シミュレーションにおいては、全エネルギーを原子ごとに分割する原子分割エネルギー描像を確立した。これにより、DNA の鎖切断の機構を局所的・非局所

的な電子・エネルギー移動の観点から分類できることを明らかにした。分子ベアリングの回転に旋回と自転の2種類が存在し、化学反応動力学がナノサイエンスの発展に不可欠なツールであることも実証した。

実験グループは、高強度近赤外レーザー場におけるNO分子の電子状態変化を時間分解光電子分光によって追跡した。より詳細な理解のために、深紫外レーザーパルスによる1光子吸収をプローブとして計測を行った。この場合、これまで観測されていたB状態の代わりにA状態からの信号が観測でき、強レーザー場($\sim 10^{13}$ W/cm²)との相互作用によって複数の電子状態が共鳴的に生成することが見出された。また、位相制御された ω - 2ω の2色レーザー場におけるCO₂のクーロン爆発に着目し、フラグメントイオンの運動量分布を調べた。その結果、理論グループの予測どおり、CO₂の等価な2つのC-O結合の一方だけを2色レーザーパルスの形状によって選択的に切断させることができ、化学反応制御の新たな可能性を示すことができた。

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 37 件)

- ①時間依存断熱状態法による強レーザー場分子ダイナミクス、強光子場の化学、河野裕彦、加藤 毅、CSJ カレントレビュー18、日本化学会編 (化学同人、2015) pp.71-76 <http://www.kagakudojin.co.jp/book/b190456.html>
- ②ナノカーボンにおける光誘起解離反応の動力学シミュレーション、センターレポート、河野裕彦、山崎 馨、萱野 学、(自然科学研究機構岡崎共通研究施設 自然科学研究センター) 15, 208-211 (2015).
- ③X線自由電子レーザーパルスによるフラーレン超多価カチオンC₆₀⁹⁺の爆発解離の動力学シミュレーション—2段階爆発機構の提案—、山崎 馨・上田 潔・河野裕彦、東北大学サイバーサイエンスセンター大規模計算システム広報 SENAC Vol.48, No.3, 1-6 (2015)
- ④結晶性分子ジャイロスコープの構造と回転動力学の密度汎関数強束縛法によるシミュレーション、萱野 学、小林倫仁、Wilfredo Credo Chung、山崎 馨、瀬高 涉、河野裕彦、SENAC Vol. 48, No. 4, 1-9 (2015)
- ⑤Modulation of Energy Conversion Processes in Carbonaceous Molecular Bearings, S. Hitosugi, K. Ohkubo, Y. Kawashima, T. Matsuno, S. Kamata, K. Nakamura, H. Kono, S. Sato, S. Fukuzumi, and H. Isobe, Chemistry, An Asian Journal, **10**, 2404-2410 (2015), DOI: 10.1002/asia.201500673, 査読有
- ⑥Mechanism and Experimental Observability of Global Switching Between Reactive and Nonreactive Coordinates at High Total Energies, Hiroshi Teramoto, Mikito Toda, Masahiko Takahashi, Hirohiko Kono, Tamiki Komatsuzaki, Phys. Rev. Lett. **115**, 093003, (2015), DOI:<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.115.093003>, 査読有
- ⑦Ab initio quantum dynamical analysis of ultrafast nonradiative transitions via conical intersections in pyrazine, M. Kanno, Y. Ito, N. Shimakura, S. Koseki, H. Kono, and Y. Fujimura, Phys. Chem. Chem. Phys. **17**, 2012-2024 (2015), DOI:10.1039/C4CP04807E, 査読有
- ⑧Application of stochastic Liouville-von Neumann equation to electronic energy transfer in FMO complex, H. Imai, Y. Ohtsuki, and H. Kono, Chem. Phys. **446**, 134-141(2015). DOI:10.1016/j.chemphys.2014.11.014, 査読有
- ⑨Ab Initio Quantum Dynamical Study on Ultrafast Nonradiative Transition Pathways of Pyrazine, M. Kanno, Y. Ito, N. Shimakura, S. Koseki, H. Kono and Y. Fujimura, in “Ultrafast Phenomena XIX,” edited by K. Yamanouchi, S. Cundiff, R. D. Vivie-Riedle, M. Kuwata-Gonokami and L. DiMauro 176-179. (Springer, 2015), DOI:10.1007/978-3-319-13242-6_42, 査読有
- ⑩Coincidence momentum imaging of asymmetric Coulomb explosion of CO₂ in phase-locked two-color intense laser fields, T. Endo, H. Fujise, A. Matsuda, M. Fushitani, H. Kono, A. Hishikawa, J. Electron Spectrosc. Relat. Pheno. **207**, 50-54(2016), DOI:10.1016/j.elspec.2015.12.010, 査読有
- ⑪Reply to the ‘Comment on “Theoretical studies on a carbonaceous molecular bearing: association thermodynamics and dual-mode rolling dynamics” by E.M.Cabaleiro-Lago, J.Rodriguez-Otero and A. Gil, Chem. Sci., 2016, 7, Hiroyuki Isobe, Kosuke Nakamura, Shunpei Hitosugi, Sota Sato, Hiroaki Tokoyama, Hideo Yamakado, Koichi Ohno and Hirohiko Kono, Chem. Sci. **7**, 2929-2932 (2016), DOI:10.1039/C6SC00550K, 査読有
- ⑫W. Setaka, K. Inoue, S. Higa, S. Yoshigai, H. Kono and K. Yamaguchi, Synthesis of Crystalline Molecular Gyrotops and Phenylene Rotation inside the Cage, *J. Org. Chem.* **79**, 2014 pp 8288-8295, DOI: 10.1021/jo501539h, 査読有

- ⑬ K. Awasthi, K. Nakamura, H. Kono, N. Kobayashi, N. Ohta, Electroabsorption and electrophotoluminescence spectra of some subphthalocyanines, *Chem. Phys. Lett.* **599**, 2014, pp. 163-168, DOI:10.1016/j.cplett.2014.02.047, 査読有
- ⑭ S. Hitozugi, K. Ohkubo, R. Iizuka, Y. Kawashima, K. Nakamura, S. Sato, H. Kono, S. Fukuzumi, H. Isobe, Photoinduced electron transfer in a dynamic supramolecular system with curved π -structures, *Org. Lett.* **16**, 2014 pp. 3352-3355, DOI: 10.1021/ol501381x 査読有
- ⑮ S. Ohmura, H. Kono, T. Oyamada, T. Kato, K. Nakai and S. Koseki, Characterization of multielectron dynamics in molecules: A multiconfiguration time-dependent Hartree-Fock picture, *J. Chem. Phys.* **141**, 2014, pp. 114105, <http://dx.doi.org/10.1063/1.4894505>, 査読有
- ⑯ K. Yamazaki, T. Nakamura, N. Niitsu, M. Kanno, K. Ueda and H. Kono, Two-step explosion processes of highly charged fullerene cations C_{60}^{q+} ($q = 20-60$), *J. Chem. Phys. (Communication)* **141**, 2014, pp. 121105, <http://dx.doi.org/10.1063/1.4896656>, 査読有
- ⑰ S. Ohmura, T. Oyamada, T. Kato, H. Kono and S. Koseki, Molecular Orbital Analysis of High Harmonic Generation, *JPS Conf. Proc.* **1**, 013087(2014) 5 pages. DOI: <http://dx.doi.org/10.7566/JSPSC.1.013087>, 査読有
- ⑱ M. Kanno, Y. Ono, H. Kono and Y. Fujimura, Nonadiabatically Coupled π -Electron Rotation and Molecular Vibration in Aromatic Molecules Excited by Polarized UV/Vis Laser Pulses, *Chin. J. Phys.* **52**, 2014, pp. 617-651 DOI:10.6122/CJP.52.617, 査読有
- ⑲ 菅野 学, 池田 旭伸, 河野 裕彦, 化学反応における電磁場励起効果の計算化学, 最新マイクロ波エネルギーと応用技術, 産業技術サービスセンター, 2014, pp.83-87
- ⑳ Long-lived neutral H_2 in hydrogen migration within methanol dication, K. Nakai, T. Kato, H. Kono and K. Yamanouchi, *J. Chem. Phys.* **139**, 181103 1-4 (2013), <http://dx.doi.org/10.1063/1.4830397>, 査読有
- ㉑ Nuclear Flux Densities during a Model Pericyclic Reaction with Energies Well Above and Below the Potential Barrier, T. Bredttdmann, H. Kono, J. Manz, K. Nakamura and C. Stemmler, *ChemPhysChem* **14**, 1397-1404 (2013), DOI:10.1002/cphc.201200943, 査読有
- ㉒ Theoretical Verification of Nonthermal Microwave Effects on Intramolecular Reactions, M. Kanno, K. Nakamura, E. Kanai, K. Hoki, H. Kono, and M. Tanaka, *J. Phys. Chem. A* **116**, 2177-2183 (2012). DOI: 10.1021/jp212460v 査読有
- ㉓ Ultrafast Coherent Dynamics of Nonadiabatically Coupled Quasi-degenerate Excited States in Molecules: Population and vibrational coherence transfers, H. Mineo, M. Kanno, H. Kono, S. D. Chao, S. H. Lin, and Y. Fujimura, *Chem. Phys.* **392**, 136-142 (2012). DOI:10.1016/j.chemphys.2011.11.004, 査読有
- ㉔ Nanosecond Simulations of the Dynamics of C_{60} Excited by Intense Near-infrared Laser Pulses: Impulsive Raman Excitation, Rearrangement, and Fragmentation, N. Niitsu, M. Kikuchi, H. Ikeda, K. Yamazaki, M. Kanno, H. Kono, K. Mitsuke, M. Toda, and K. Nakai, *J. Chem. Phys.* **136**, 164304 (2012) 12 pages, DOI:org/10.1063/1.4704896 査読有
- ㉕ Laser-Polarization Effects on Coherent Vibronic Excitation of Molecules with Quasi-Degenerate Electronic States, M. Kanno, Y. Ono, H. Kono, and Y. Fujimura, *J. Phys. Chem. A* **116**, 11260-11272 (2012). DOI: 10.1021/jp305284w 査読有
- ㉖ Electronic Excited State Paths of Stone-Wales Rearrangement in Pyrene: Roles of Conical Intersections, K. Yamazaki, N. Niitsu, K. Nakamura, M. Kanno, and H. Kono, *J. Phys. Chem. A* **116**, 11441-11450 (2012), DOI: 10.1021/jp306894x 査読有
- ㉗ Theoretical Investigation of the Structures and Dynamics of Crystalline Molecular Gyroscopes, A. B. Marahatta, M. Kanno, K. Hoki, W. Setaka, S. Irle, and H. Kono, *The Journal of Physical Chemistry C* **116**, 24845-24854 (2012), DOI:10.1021/jp308974j 査読有
- ㉘ Time-Dependent Multiconfiguration Theory and Its Application to Ultrafast Electronic Dynamics of Molecules in an Intense Laser Field, T. Kato, T. Oyamada, H. Kono, and S. Koseki, *Progress of Theoretical Physics Supplement* **196**, 16-38 (2012), DOI:10.1016/j.chemphys.2009.09.017, 査読有
- ㉙ Laser-Induced Electronic and Nuclear Coherent Motions in Chiral Aromatic Molecules, M. Kanno, H. Kono, S. H. Lin, and Y. Fujimura, in "Quantum Systems in Chemistry and Physics: Progress in Methods and Applications", edited by K. Nishikawa, J. Maruani, E. J. Brändas, G. Delgado-Barrio and P. Piccuch, Springer, 121-148 (2012), DOI:10.1007/978-94-007-5297-9_6 査読有
- ㉚ Simulation of Nuclear Dynamics of C_{60} : From Vibrational Excitation by Near-IR Femtosecond Laser Pulses to Subsequent

Nanosecond Rearrangement and Fragmentation, N. Niitsu, M. Kikuchi, H. Ikeda, K. Yamazaki, M. Kanno, H. Kono, K. Mitsuke, M. Toda, K. Nakai, and S. Irle, in "Quantum Systems in Chemistry and Physics: Progress in Methods and Applications", edited by K. Nishikawa, J. Maruani, E. J. Brändas, G. Delgado-Barrio and P. Piccuch, Springer, 149-177(2012), DOI:10.1007/978-94-007-5297-9_7 査読有

- ③① Natural Orbital Analysis of Ultrafast Multielectron Dynamics of Molecules, H. Kono, T. Oyamada, T. Kato and S. Koseki. Multiphoton Processes and Attosecond Physics, Springer Proceedings in Physics, Vol.125, Chapter 48, 289-297(2012), DOI: 10.1007/978-3-642- 28948-4_48, 査読有

[学会発表] (計 31 件)

- ① H. Kono, An Atom Resolved View of Chemical Reactions: Application to Nanocarbons and Model DNAs, 第31回化学反応討論会, 2015年6月5日, 北海道大学, 札幌 (招待講演)
- ② M. Kanno, N. Inada, and H. Kono, Laser-polarization dependence of atomic/molecular multiphoton excitation within a single-active-electron model of spherical symmetry, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2015 (PACIFICHEM 2015), Dec.16,2015, Honolulu, Hawaii
- ③ H. Kono, K. Yamazaki, Y. Takehara, N. Niitsu, W. C. Chung, M. Kanno, and K. Ueda, First-principles simulation of the reaction dynamics and Coulomb explosions of C₆₀ induced by ultrashort intense laser pulses, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2015 (PACIFICHEM 2015), Dec.16, 2015, Honolulu, Hawaii (招待講演)
- ④ H. Kono, N. Hishinuma, M. Kanno, Y. Kino, and K. Akiyama, Molecular dynamics simulation of the strand break processes in model DNAs: Analysis of electron and energy transfer, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2015, Dec.19,2015, Honolulu, Hawaii (招待講演)
- ⑤ Dynamics and control of the internal rotations in molecular systems: Crystalline molecular gyroscopes, H. Kono, Telluride Science Research Center (TSRC) Workshop on Molecular Rotors, Motors, and Switches, July 2 (2014), Telluride, Colorado (招待講演)
- ⑥ Dynamics and control of molecular systems: Nanocarbons and crystalline molecular gyroscopes, H. Kono, 国立台湾大学講演会, 2015年1月15日, 国立台湾大学, 台湾 (招待講演)

- ⑦ An Atom Resolved View of Chemical Reactions: Application to the Dynamics of Nanocarbons and Crystalline, H. Kono, 国立交通大学応用化学系講演会, Jan. 16, 2015, 国立交通大学, 台湾 (招待講演)
- ⑧ Atoms and molecules in intense laser fields I, H. Kono, International Symposium on Ultrafast Intense Laser Science (ISUILS)12, Salamanca, Spain, October 6-11, 2013 (招待講演)

[図書] (計 2 件)

- ① Coherent ring currents in chiral aromatic molecules induced by linearly polarized UV laser pulses, M. Kanno, H. Kono, H. Mineo, S. H. Lin and Y. Fujimura, in "Materials and Applications for Sensors and Transducers II", edited by E. Hristoforou, D. S. Vlachos, Trans Tech Publications,381-384(2013), DOI: 10.4028/www.scientific.net/KEM.543.381
- ② C₆₀の高強度レーザー励起ダイナミクス, 河野裕彦, 「レーザーと化学 (化学の要点シリーズ4) 日本化学会編」, 共立出版, pp. 96-97, 2012年.

[産業財産権]

○出願状況 (計 0 件)

○取得状況 (計 0 件)

[その他]

ホームページ <http://www.mcl.chem.tohoku.ac.jp/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

河野 裕彦 (KONO, Hirohiko)
東北大学・大学院理学研究科・教授
研究者番号 : 70178226

(2) 研究分担者

菱川 明栄 (HISHIKAWA, Akiyosi)
名古屋大学・大学院理学研究科・教授
研究者番号 : 50262100
小関 史朗 (KOSEKI, Shiro)
大阪府立大学・大学院理学系研究科・教授
研究者番号 : 80252328

(3) 連携研究者

加藤 毅 (KATO, Tsuyoshi)
東京大学・大学院理学系研究科・准教授
研究者番号 : 10321986
菅野 学 (KANNO, Manabu)
東北大学・大学院理学研究科・助教
研究者番号 : 30598090
伏谷 瑞穂 (FUSHITANI, Mizuho)
名古屋大学・大学院理学研究科・講師
研究者番号 : 50446259
松田 晃考 (Matsuda, Akitaka)
名古屋大学・大学院理学研究科・助教
研究者番号 : 50446259