

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 5 月 21 日現在

機関番号：10101

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2014～2016

課題番号：26288001

研究課題名(和文)複合的因子を考慮した励起反応ダイナミクスの理論研究

研究課題名(英文)Theoretical study on excited-state dynamics with plural factors

研究代表者

武次 徹也 (Taketsugu, Tetsuya)

北海道大学・理学(系)研究科(研究院)・教授

研究者番号：90280932

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 13,000,000円

研究成果の概要(和文)：30原子サイズの実在分子の非断熱領域を含む励起反応ダイナミクスに対し、第一原理シミュレーションを行う理論手法としてスピン反転時間依存密度汎関数法に着目し、複数の電子状態から対象となる電子状態を追跡する手法を導入してダイナミクス計算を可能にした。最先端のレーザー分光実験研究と連携し、スチルベンおよびその誘導体の光異性化反応、さらに1,2-ブタジエンの光励起失活過程について反応機構とダイナミクスを解明し、実験だけでは理解が困難な反応収率、励起寿命、失活後の分子運動などを説明することに成功した。

研究成果の概要(英文)：For excited-reaction dynamics including nonadiabatic region, the spin-flip TDDFT is introduced with a tracking method to perform the first principles dynamics simulation. In collaboration with laser spectroscopic experiments, the reaction mechanism and dynamics of the photo-isomerization reaction of stilbene and its derivatives, as well as the excited state dynamics of 1,2-butadiene, are elucidated. The reaction quantum yield, the lifetime in the excited state, and molecular motion after deactivation are all well explained through the present theoretical simulations.

研究分野：理論化学

キーワード：光異性化反応 光励起緩和 励起ダイナミクス スピン反転時間依存密度汎関数法 スチルベン

1. 研究開始当初の背景

我々は、*ab initio* 電子状態計算により得られるポテンシャル曲面のデータを直接使って多原子分子反応や分子振動を議論することのできる理論計算手法として、「第一原理分子動力学 (AIMD) 法」および「第一原理非調和振動分光計算法」を開発してきた。AIMD 法は、*ab initio* 電子状態計算に基づき分子系の個々の原子に作用する力をそのつど計算し、ニュートンの運動方程式を数値的に解いて分子系のダイナミクスを追跡する古典軌道法であり、計算機の高速化に伴って広く適用されるようになってきているが、その対象は長らく電子基底状態にとどまっていた。そこで 2002 年より AIMD 法を電子励起状態に拡張する研究を始動し、非断熱遷移アルゴリズムを実装した励起状態 AIMD プログラムを開発して、星間分子 (HCNH^+ , H_3O^+ , HD_2O^+) の解離性再結合反応、スチルベン、アゾベンゼンのシス-トランス光異性化反応、DNA 塩基(シトシン)・色素分子(クマリン、マラカイトグリーン)の励起緩和過程、7-アザインドール-クラスターの励起プロトン移動による光互変異性へと適用して反応機構やダイナミクスを明らかにし、反応の量子収率、分岐比、励起寿命などについて定量的レベルで議論を展開してきた。たとえば、DNA 塩基の光安定性への洞察を得るために、11 種のシトシン誘導体の光励起緩和過程に対して AIMD 計算を実行し、無輻射遷移を起こす時の分子構造や電子構造の特徴、励起寿命を決定する因子を明らかにするとともに、分光実験による過渡吸収スペクトルを再現することに成功し、短い励起寿命が円錐交差を経由した無輻射緩和に起因することを示した。一方、実在分子系の電子励起状態過程については、非断熱効果に加えてさらに溶媒効果、トンネル効果、相対論効果などの因子が複合的に関与する過程に興味を持たれるが、モデルポテンシャルではなく実際の多原子分子系に対しこのような複合的非断熱過程を取り扱う分子理論は確立しておらず、電子励起状態の関与する光化学過程を研究対象とする分光学分野の実験研究者からは、実用的な理論計算手法の開発が待ち望まれている状況にあった。

2. 研究の目的

本課題では、多原子分子電子励起状態の非断熱反応ダイナミクスを第一原理計算に基づき解析する理論手法を確立し、最先端分光実験による励起反応素過程のダイナミクスに対する分子レベルでの解釈を可能にする実用的理論計算手法の構築を目標とした。State-of-the-art の域に達している「真空中・絶対零度の *ab initio* 電子状態理論 / 密度汎関数法」をフルに活用して多次元・多状態の非断熱力学の課題に取り組み、従来の分子理論の範疇を超えた複雑事象に対し量子化学に基づく定量的議論を展開する。状態遷移を考

慮した AIMD プログラムを基盤として複合的非断熱過程の理論的解明の実現を目指す。

3. 研究の方法

我々は本研究を遂行する上での基盤となる励起状態 AIMD プログラムを独自に開発している。本プログラムは量子化学計算プログラム MOLPRO とリンクしており、*ab initio* 計算 (CASSCF, CASPT2) で得られるエネルギー勾配、非断熱結合項に基づき原子核自由度および電子自由度の時間発展を行い、量子-古典混合法 (Tully の最少遷移数アルゴリズム) により非断熱遷移を考慮し、量子力学-分子力学混成法 (QM/MM 法) に基づき溶媒分子を露わに考慮した非断熱ダイナミクス計算が可能である。本課題では、複合的非断熱過程に適用可能な「第一原理反応動力学」の拡張という立場からいくつかの研究課題に取り組み、プログラムの拡充を試みる。

4. 研究成果

(1) 電子励起状態における分子の運動は基底状態で予想される一般的な化学反応の描像とは異なる場合が多く、その推定が困難である。そのため、系の励起状態に対する予備知識無しに適用可能な第一原理分子動力学法は、光化学反応の解析において強力な手法となる。近年、高精度電子状態計算に基づく第一原理分子動力学計算が光励起緩和過程に適用されるようになり、反応の動的特徴に関する知見が得られるようになってきた。現在広く用いられている CASSCF 法は動的電子相関が不十分なためエネルギーの定量性があまく、一方 CASPT2 法は精度が高い反面計算コストが高く原子数が 20 を超えた分子系では容易に破たんするため、より効率的で簡便な励起状態第一原理分子動力学計算手法の開発が求められている。本課題では、三重項状態を参照状態として一重項の基底・励起状態を計算する Spin-Flip 時間依存密度汎関数法(SF-TDDFT)に基づく励起状態第一原理分子動力学法を開発した。SF-TDDFT は、基底状態と励起状態の交差領域でもポテンシャルを連続的に見積もることができ、HOMO-LUMO の二電子励起状態も取り扱えるが、HOMO-LUMO 励起の三重項状態も解として得られることに加え、HOMO-LUMO 以外が関与する励起状態については一重項・三重項・五重項状態の混合状態として得られるため、目的とする状態を追跡することが困難であった。そこで我々は SF-TDDFT 法において目的の状態を追跡できる手法を新たに導入し、精度を落とすことなくコストを大幅に削減できる手法を完成させ、シススチルベンの $\pi\pi^*$ 励起後のダイナミクスへと適用した。シススチルベンは、紫外光照射によりトランス体または環化体へと異性化することが報告されていたが、本シミュレーションにより、反応経路は環化体につながるがダイナミクスの効果によりトランス体が有利に

生成することが示された。

更に本手法をジメチルスチルベンの励起ダイナミクスへと適用し、スチルベンの光異性化ダイナミクスがメチル基の導入によりどのように変化するかについて、置換基効果の解明を試みた。実験的には、ジメチルスチルベンではスチルベンと比べシス体からトランス体およびDHP体への分岐比が逆転し、シス体とトランス体の間に位置する垂直ねじれ構造が十ピコ秒のオーダーの寿命を持つことが報告されていた。SF-TDDFT法に基づく励起ポテンシャル曲面上での反応経路の計算とAIMDシミュレーションにより、中央のCC結合周りのメチル基の立体反発および質量効果により反応経路がDHP体の方向に変化しDHP体の分岐比が増大すること、垂直ねじれ構造付近の励起状態における安定構造と円錐構造が大きく異なるため通常は励起状態から基底状態への通過点になる垂直ねじれ構造の寿命が長くなることなどが明らかとなった。

(2) 北大工学部の関川博士と実験-理論の共同研究を行い、1,2-ブタジエンの励起ダイナミクスを調べた。実験では、1,2-ブタジエンの二光子吸収による光励起後の時間分解イオン化スペクトルから励起状態で解離することなく基底状態に高速失活する様子が確認され、励起直後に励起分子に由来するイオン化エネルギーが見積もられ、基底状態への失活後にイオン化スペクトルの強度が振動する様子が観測された。先端実験の結果を参照しつつ1,2-ブタジエンの励起反応ダイナミクスを先端理論計算(CASPT2/cc-pVDZ)に基づき理解するため、まず1,2-ブタジエンの基底状態での安定構造を求め、 S_1 への垂直励起エネルギーを計算し、 S_0 と S_1 の交差領域を調べ、3つの最小エネルギー円錐交差(MECI)構造(cis, linear, trans)を見出した。各MECI構造はエネルギーがほとんど同じであったが、フランク-コンドン(FC)構造から最急降下経路を計算したところlinear構造に到達した。続いて、アレン部分の角度と末端の CH_2 内部回転に対する2次元PESを作成したところ、FC領域から各MECIに至る経路が存在することがわかった。AIMD計算より3つの領域に到達する分岐比はcis : linear : trans = 4 : 88 : 8となり、linearへの失活経路が有利であった。linearの極小構造で励起分子のイオン化エネルギーを計算したところ実験値と良い一致を得たため、実験的に得られたスペクトルを励起分子のスペクトルと帰属した。AIMD計算からアレン部分の折れ曲がり振動と末端 CH_2 の内部回転運動が励起状態からの緩和過程で活性化されることがわかり、アレン部分の折れ曲がり振動の振動数がイオン化スペクトルの時間変化の振動数を再現することを確認した。

以上、最先端のレーザー分光実験技術を有する実験研究者と共同研究を行い、実験で観

測された電子励起状態からのイオン化エネルギーの時間発展に見られた知見を解明すべきポイントとして参照し、我々が有する励起ダイナミクスを調べるための理論計算手法を駆逐することで、実験を矛盾なく説明することに成功した。その成果は物理化学分野の水準の高い専門誌(J. Phys. Chem. Lett.)に掲載され、高い評価を受けた。

今後も引き続き、「複合的因子」の関与する電子励起状態における動的非断熱過程を調べる新たな計算手法の開発を目指した研究を展開する。数値的なモデルにとどまらず具体的分子系をターゲットとし、ab initio法またはDFT法に基づく第一原理計算を伴う反応経路探索・動力学計算を実施する。励起ダイナミクス分野で先端的な実験研究を展開する研究者の持つ描像を参照し、実験研究にとっても意義ある理論手法の開発を引き続き推進していきたい。

5. 主な発表論文等

[雑誌論文](計18件)

Y. Harabuchi, T. Taketsugu, and S. Maeda, "Combined Gradient Projection/Single Component Artificial Force Induced Reaction (GP/SC-AFIR) Method for an Efficient Search of Minimum Energy Conical Intersection (MECI) Geometries," Chem. Phys. Lett., 674, 141-145 (2017). 査読有

DOI:10.1016/j.cplett.2017.02.069

Y. Harabuchi, R. Yamamoto, S. Maeda, S. Takeuchi, T. Tahara, and T. Taketsugu, "Ab Initio Molecular Dynamics Study of the Photoreaction of 1,1'-Dimethylstilbene Upon $S_0 \rightarrow S_1$ Excitation," J. Phys. Chem. A, 120, 8804-8812 (2016). 査読有 DOI:10.1021/acs.jpca.6b07548

K. Yamazaki, Y. Miyazaki, Y. Harabuchi, T. Taketsugu, S. Maeda, Y. Inokuchi, S. Kinoshita, M. Sumida, Y. Onitsuka, H. Kohguchi, M. Ehara, and T. Ebata, "Multi-Step Intersystem Crossing Pathways in Cinnamate-Based UV-B Sunscreens," J. Phys. Chem. Lett., 7, 4001-4007 (2016). 査読有 DOI:10.1021/acs.jpcl.6b01643

R. Iikubo, T. Sekikawa, Y. Harabuchi, and T. Taketsugu, "Structural dynamics of photochemical reactions probed by time-resolved photoelectron spectroscopy using high harmonic pulse," Faraday Discuss., 194, 147-160 (2016). 査読有 DOI:10.1039/C6FD00063K

K. Saita, Y. Harabuchi, T. Taketsugu, O. Ishitani, and S. Maeda, "Theoretical study on mechanism of the photochemical ligand substitution of fac-[ReI(bpy)(CO)₃(PR₃)]⁺ complex," Phys. Chem. Chem. Phys., 18, 17557-17564 (2016). 査読有 DOI:10.1039/C6CP02314B

S. Maeda, Y. Harabuchi, M. Takagi, T. Taketsugu, and K. Morokuma, "Artificial Force Induced Reaction (AFIR) Method for Exploring

Quantum Chemical Potential Energy Surfaces," Chem. Rec., 16, 2232–2248 (2016). 査読有 DOI:10.1002/tcr.201600043

Y. Harabuchi, T. Taketsugu, and S. Maeda, "Nonadiabatic Pathways of Furan and Dibenzofuran: What Makes Dibenzofuran Fluorescent?" Chem. Lett., 45, 940-942 (2016). 査読有 DOI:10.1246/cl.160398

Y. Harabuchi, J. Eng, E. Gindensperger, T. Taketsugu, S. Maeda, and C. Daniel, "Exploring the Mechanism of Ultrafast Intersystem Crossing in Re(I) Carbonyl Bipyridine Halide Complexes: Key Vibrational Modes and Spin-Vibronic Quantum Dynamics," J. Chem. Theo. Comp., 12, 2335-2345 (2016). 査読有 DOI:10.1021/acs.jctc.6b00080

D. Murdock, R. A. Ingle, I. V. Sazanovich, I. P. Clark, Y. Harabuchi, T. Taketsugu, S. Maeda, A. J. Orr-Ewing, and M. N. R. Ashfold, "Contrasting ring-opening propensities in UV-excited α -pyrone and coumarin," Phys. Chem. Chem. Phys., 18, 2629-2638 (2016). 査読有 DOI:10.1039/C5CP06597F

Y. Harabuchi, T. Taketsugu, and S. Maeda, "Exploration of Minimum Energy Conical Intersection Structures of Small Polycyclic Aromatic Hydrocarbons: Impact on the Size Dependence of Fluorescence Quantum Yields," Phys. Chem. Chem. Phys., 17, 22561-22565 (2015). 査読有 DOI:10.1039/C5CP02103K

R. Iikubo, T. Fujiwara, T. Sekikawa, Y. Harabuchi, S. Satoh, T. Taketsugu, and Y. Kayanuma, "Time-Resolved Photoelectron Spectroscopy of Dissociating 1,2-Butadiene Molecules by High Harmonic Pulses," J. Phys. Chem. Lett., 6, 2463-2468 (2015). 査読有 DOI:10.1021/acs.jpcclett.5b00943

S. Maeda, T. Taketsugu, K. Ohno, and K. Morokuma, "From Roaming Atoms to Hopping Surfaces: Mapping out Global Reaction Routes in Photochemistry," J. Am. Chem. Soc. (Perspective), 137, 3433-3445 (2015). 査読有 DOI:10.1021/ja512394y

K. Niimi, T. Taketsugu, and A. Nakayama, "Matrix site effects on vibrational frequencies of HXeCCH, HXeBr, and HXeI: a hybrid quantum-classical simulation," Phys. Chem. Chem. Phys., 17, 7872-7880 (2015). 査読有 DOI:10.1039/C5CP00568J

C. Zhu, K. Niimi, T. Taketsugu, M. Tsuge, A. Nakayama, and L. Khriachtchev, "HXeI and HXeH in Ar, Kr, and Xe Matrices: Experiment and Simulation," J. Chem. Phys., 142, 054305 (2015). 査読有 DOI:10.1063/1.4906875

S. Maeda, Y. Harabuchi, T. Taketsugu, and K. Morokuma, "Systematic Exploration of Minimum Energy Conical Intersection Structures near the Franck-Condon Region," J. Phys. Chem. A, 118, 12050-12058 (2014). 査読有 DOI:10.1021/jp507698m

A. Nakayama, S. Yamazaki, and T. Taketsugu, "Quantum Chemical Investigations on the Nonradiative Deactivation Pathways of Cytosine Derivatives," J. Phys. Chem. A, 118, 9429-9437 (2014). 査読有 DOI:10.1021/jp506740r

Y. Harabuchi, K. Keipert, F. Zahariev, T. Taketsugu, and M. S. Gordon, "Dynamics Simulations with Spin-Flip Time Dependent Density Functional Theory: Photoisomerization and Photocyclization Mechanisms of Cis-Stilbene in $\pi\pi^*$ States," J. Phys. Chem. A, 118, 11987-11998 (2014). 査読有 DOI:10.1021/jp5072428

A. Makida, H. Igarashi, T. Fujiwara, T. Sekikawa, Y. Harabuchi, and T. Taketsugu, "Ultrafast Relaxation Dynamics in trans-1,3-Butadiene Studied by Time-Resolved Photoelectron Spectroscopy with High Harmonic Pulses," J. Phys. Chem. Lett., 5, 1760-1765 (2014). 査読有 DOI:10.1021/jz5003567

[学会発表](計 28 件)

T. Taketsugu, R. Yamamoto, T. Tsutsumi, Y. Harabuchi, and S. Maeda, "AIMD study on $\pi\pi^*$ -excited substituted-stilbene," 57th Sanibel Symposium, 2017 年 2 月 19-24 日, St. Simons Island (USA) ポスター発表

M. Kamiya and T. Taketsugu, "Ab initio excited-state molecular dynamics approach including spin-orbit coupling and nonadiabatic coupling effects: An application to the photodissociation of CH_3I ," 57th Sanibel Symposium, 2017 年 2 月 19-24 日, St. Simons Island (USA) ポスター発表

T. Taketsugu, "Ab initio MD study of branching reactions in the excited-state potential energy surface," GAMESS7557 Meeting, 2017 年 1 月 15-18 日, Kauai (USA) 招待講演

T. Taketsugu, "Ab Initio Approach to Photoreaction Dynamics," Thai-Japan Symposium in Chemistry, 2016 年 11 月 13-15 日, Chiang Mai (Thailand) 招待講演

T. Taketsugu, "On-the-fly dynamics study on the photoisomerization mechanism of stilbene and its derivative," Japan-France-Spain Joint-Symposium on Theoretical and Computational Science of Complex Systems, 2016 年 10 月 26-28 日, 京都大学福井謙一記念研究センター(京都府・京都市)招待講演

T. Taketsugu, "Theoretical study of substituent effects on excited-state dynamics of stilbene," 2nd Japan-Thai workshop on Theoretical and Computational Chemistry 2016, 2016 年 9 月 21-22 日, 横浜市立大学(神奈川県・横浜市)招待講演

山本梨奈、原淵祐、前田理、武次徹也、「スチルベン誘導体の光反応ダイナミクスに関する理論的研究」、第 10 回分子科学討論会、2016 年 9 月 13-15 日、神戸ファッションマー ト(兵庫県・神戸市)ポスター発表

佐藤壯太、原測祐、小野ゆり子、武次徹也、「振動マッピングによる AIMD 古典軌道解析手法の開発」第 10 回分子科学討論会、2016 年 9 月 13-15 日、神戸ファッションマート（兵庫県・神戸市）ポスター発表

T. Taketsugu, "Ab initio study of photo-isomerization reaction dynamics," International Symposium on Pure & Applied Chemistry (ISPAC) 2016, 2016 年 8 月 15-18 日, Kuching (Malaysia) 招待講演

T. Taketsugu, "Ab initio dynamics study on photo-chemical reactions," 2016 Joint Japan-Thai-Vietnam Workshop on Theoretical and Computational Chemistry, 2016 年 1 月 18 日、茨城大学（茨城県・水戸市）招待講演

T. Taketsugu, "Theoretical exploration of photo-isomerization dynamics," 2015 SNU-HU Chemistry Symposium on "Electrons in Chemistry," 2015 年 11 月 26-27 日, Seoul (South Korea) 招待講演

T. Taketsugu, "Ab initio excited-state molecular dynamics approach to photoreactions," 6th JCS International Symposium on Theoretical Chemistry, 2015 年 10 月 11-15 日, Smolenice (Slovakia) 招待講演

T. Taketsugu, "Development of theoretical approach to photo-excited reaction dynamics and its applications," NTU & HU Joint Symposium, 2015 年 9 月 30 日-10 月 3 日, Taipei (Taiwan) 招待講演

山本梨奈、原測祐、武次徹也、「スチルベンの光異性化反応ダイナミクスへの置換基効果に関する理論的研究」第 9 回分子科学討論会、2015 年 9 月 16-19 日、東京工業大学（東京都・大岡山）ポスター発表

武次徹也、「光励起反応のポテンシャル曲面とダイナミクス」スーパーコンピュータワークショップ FY2015「複雑な研究対象へ挑戦する計算分子科学」2015 年 9 月 7-8 日、岡崎コンファレンスセンター（愛知県・岡崎市）招待講演

T. Taketsugu, "Bifurcation of reaction pathway: global reaction route mapping and excited-state ab initio MD" Telluride Science Research Center (TSRC) workshop, "Geometry of Chemical Reaction Dynamics in Gas and Condensed Phases" 2015 年 7 月 27 日-8 月 7 日, Telluride (USA), 招待講演

T. Taketsugu, "Theoretical study on excited-state elementary processes: potential energy surfaces and on-the-fly dynamics" Seminar at the Chemistry Department, Universite de Strasbourg, 2015 年 6 月 9 日, Strasbourg (France), 招待講演

山本梨奈、原測祐、武次徹也、「Spin Flip-TDDFT/MD 法に基づく cis-ジメチルスチルベン光異性化に関する理論的研究」第 18 回理論化学討論会、2015 年 5 月 20-22 日、大阪大学豊中キャンパス（大阪府・豊中市）ポスター発表

佐藤壯太、原測祐、武次徹也、飯窪亮、藤原丈久、関川太郎「ab initio 分子動力学法に基づく 1,2-ブタジエンの超高速失活過程に関する理論的研究」第 18 回理論化学討論会、2015 年 5 月 20-22 日、大阪大学豊中キャンパス（大阪府・豊中市）ポスター発表

T. Taketsugu and Y. Harabuchi, "Theoretical Studies on Excited-State Elementary Processes," Vietnam Malaysia International Chemical Congress (VMICC) 2014, 2014 年 11 月 7-9 日, Hanoi (Vietnam) 招待講演

② Y. Harabuchi, K. Keipert, F. Zahariev, T. Taketsugu and M. S. Gordon, "Dynamics simulations with spin-flip TDDFT: photoisomerization of cis-stilbene in $\pi\pi^*$ states," 第 11 回アジア原子分子物理学国際セミナー (AISAMP11) 2014 年 10 月 6-10 日、東北大学片平さくらホール（宮城県・仙台市）ポスター発表

② 佐藤貴暁、岡井昌幸、原測祐、中山哲、武次徹也、「励起状態 QM/MM-MD シミュレーションによるクマリン 120 蛍光スペクトル溶媒依存性の解析」第 8 回分子科学討論会、2014 年 9 月 21-24 日、広島大学 東広島キャンパス（広島県・東広島市）ポスター発表

③ 新見佳祐、中山哲、前田理、武次徹也、「アルゴンマトリックス中のギ酸分子の光解離反応におけるコンフォメーションメモリー：励起状態 QM/MM-MD シミュレーション」第 8 回分子科学討論会、2014 年 9 月 21-24 日、広島大学 東広島キャンパス（広島県・東広島市）ポスター発表

④ 岡井昌幸、中山哲、山崎祥平、武次徹也、「ピリミジン誘導体の溶液内光物理過程に関する理論的研究」第 8 回分子科学討論会、2014 年 9 月 21-24 日、広島大学 東広島キャンパス（広島県・東広島市）ポスター発表

⑤ T. Taketsugu and Y. Harabuchi, "Theoretical Elucidation of Excited-State Elementary Processes: Reaction, Vibration, and Tunneling," New Frontiers in Chemistry: The 10th Hokkaido Univ.-Nanjing Univ. Joint symposium, 2014 年 8 月 22-24 日, 北海道大学（北海道・札幌市）招待講演

⑥ Y. Kondo, T. Kobayashi, T. Noro, Y. Harabuchi, S. Maeda, and T. Taketsugu, "Ab initio excited-state molecular dynamics approach based on the surface-hopping probability from wavepacket simulation," 30th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics, 2014 年 6 月 4-6 日, イーグレ姫路（兵庫県・姫路市）ポスター発表

⑦ 原測祐、K. Keipert, F. Zahariev, M. S. Gordon、武次徹也、「Spin-Flip TD-DFT 法に基づく第一原理分子動力学法の開発とシスチルベン光異性化ダイナミクスへの適用」第 17 回理論化学討論会、2014 年 5 月 22-24 日、名古屋大学 東山キャンパス ES 総合館（愛知県・名古屋市）口頭発表

⑧ 佐藤彩、原測祐、大谷優介、武次徹也、「ト

ロポロン分子内励起プロトン移動によるトンネル分裂の AIMD-WKB 計算」, 第 17 回理論化学討論会、2014 年 5 月 22-24 日、名古屋大学 東山キャンパス ES 総合館(愛知県・名古屋市)ポスター発表

〔図書〕(計 1 件)

(1) 関川太郎、飯窪亮、原測祐、佐藤壮太、武次徹也、菅沼洋輔、「単一次数高調波光源による気相分子の時間分解光電子分光」, レーザー研究 レーザー学会誌, 43, 833-837 (2015).

6. 研究組織

(1) 研究代表者

武次 徹也 (TAKETSUGU, Tetsuya)
北海道大学・大学院理学研究院・教授
研究者番号：90280932

(2) 研究分担者

前田 理 (MAEDA, Satoshi)
北海道大学・大学院理学研究院・准教授
研究者番号：60584836

(3) 連携研究者

中山 哲 (NAKAYAMA, Akira)
北海道大学・触媒科学研究所・准教授
研究者番号：10422007