

武次 徹也



北海道大学 大学院理学研究院化学部門

札幌市北区北十条西8丁目

take@sci.hokudai.ac.jp

量子化学研究の最新の展開：振動状態理論・反応経路網・ダイナミクス

原子・分子の基礎方程式は Schrödinger 方程式であり、直後に提案された Born-Oppenheimer 近似により電子状態と原子核の運動は長らく分離して取り扱われてきたが、近年の電子状態理論の発展と計算機の高速化により、電子状態計算と原子核の運動を同時に取り扱う第一原理振動状態計算・第一原理動力学計算はその応用範囲を広げ、実験分光データが提示するミステリーの解決や、反応ダイナミクスにおける新しい概念に結び付く研究へと展開している。本講演では、我々のグループが最近報告した研究より、第一原理振動状態計算による Ar-PtCO 振動スペクトル算出と基音強度の消失の解明[1]、第一原理 MD による古典軌道の反応経路網に基づく解析の提案と金クラスター構造転移への応用[2]、電子励起状態に対する第一原理 MD によるスチルベン誘導体の長寿命 phantom state の解明[3]について紹介し、量子化学研究の今後の展望について述べる。

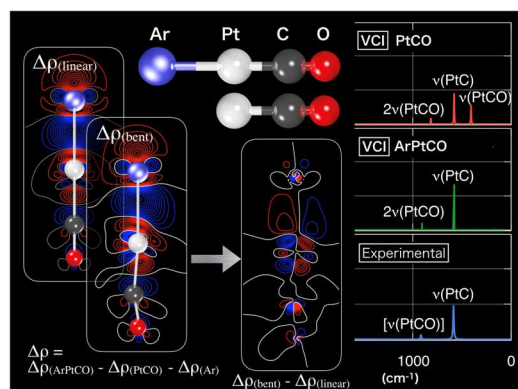


図 1. Ar-PtCO の差電子密度変化と理論および分光実験による振動スペクトル



図 2. 固有反応座標(IRC)による反応経路網上を超えていく動的反応経路の概念図

参考文献

- 1) Y. Ono, K. Yagi, T. Takayanagi, and T. Taketsugu, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, in press.
- 2) T. Tsutsumi, Y. Harabuchi, Y. Ono, S. Maeda, and T. Taketsugu, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, in press.
- 3) Y. Harabuchi, R. Yamamoto, S. Maeda, S. Takeuchi, T. Tahara, and T. Taketsugu, *J. Phys. Chem. A*, **120**, 8804-8812 (2016).