

平成23年度科学研究費補助金（特別推進研究）自己評価書 〔追跡評価〕

◆記入に当たっては、「平成23年度科学研究費補助金（特別推進研究）自己評価書等記入要領」を参照してください。

平成23年 5月13日現在

研究代表者 氏名	中村 宏樹	所属研究機関・ 部局・職	分子科学研究所・所長
研究課題名	Zhu-Nakamura 理論に基づく非断熱化学動力学の総合的研究		
課題番号	15002011		
研究組織 (研究期間終了時)	研究代表者 中村 宏樹（分子科学研究所・所長） 研究分担者 鈴木 俊法（理化学研究所・化学反応研究室・主任研究員） 石田 俊正（京都大学・福井謙一記念研究センター・助教授） Mil'nikov Gennady（分子科学研究所・理論分子科学研究系・特別 協力研究員） 南部 伸孝（九州大学・情報基盤センター・助教授）		

【補助金交付額】

年度	直接経費
平成15年度	162,000 千円
平成16年度	63,000 千円
平成17年度	30,000 千円
総計	255,000 千円

1. 特別推進研究の研究期間終了後、研究代表者自身の研究がどのように発展したか

特別推進研究によってなされた研究が、どのように発展しているか、次の(1)～(4)の項目ごとに具体的かつ明確に記述してください。

(1) 研究の概要

(研究期間終了後における研究の実施状況及び研究の発展過程がわかるような具体的内容を記述してください。)

研究の背景: ポテンシャルエネルギー曲面の円錐交差における状態遷移(非断熱遷移)は化学・生物現象において極めて基本的なメカニズムである。それに対する基本的解析理論を我々は構築したが(Zhu-Nakamura 理論)、その理論により(i)完全反射現象の発見、(ii)古典的に許されない遷移の取り扱い、及び、(iii)相互作用強度の大小に関わらない統一的取り扱いが可能となった。これは我々の理論で初めて可能となったものである。

本研究で目指したこと: Zhu-Nakamura 理論を活用して、(i)現実の化学・生物系の現象を解明する為の理論手法を構築する、(ii)多次元トンネル理論を構築し、この理論枠組みに組み入れる、(iii)化学動力学の制御と各種分子機能の開発と制御の理論を構築する。

本研究終了後: これらの理論的成果の上に、色々な分野の理論家と実験家の協力の下に具体的な分子系への幅広い応用を展開し、新しい分野として発展させることを目指したかった。しかし、研究期間の途中で研究所所長職に着任し、その後定年を迎えた為に、大変残念ながら、継続・発展を押し進めることができなかった。

しかし、平成 18 年 3 月に研究グループを解散した後にも、以下に述べる様に 21 報の論文発表、8 報のレビュー論文の執筆、国際会議での招待講演 21 件、単行本第二版の執筆等々の活動を行った(詳細は次ページ(2)に記述)。

(1) 原著論文の執筆:

各種理論の更なる展開とその応用を、主に下記の項目について行い、21 報の原著論文を発表した。

- ①大次元反応系への応用が可能な手法の開発 [Zhu-Nakamura 古典軌道ホップ (ZN-TSH) 法、Zhu-Nakamura 半古典初期値表現 (ZN-SCIVR) 法等] とその応用。
- ②レーザーによる化学動力学制御理論の開発 [半古典波束誘導最適制御理論 (SC-Guided-OCT) 等] とその応用。
- ③我々が開発した多原子分子のトンネル分裂理論 (Mil'nikov-Nakamura 理論) を高精度で現実系に適用。
- ④トンネル領域を検出する手法を開発し、トンネル効果の取り入れに成功。
- ⑤分子機能の制御と開発の可能性を具体系で実証 (レーザーの設計による分子の光変換の制御、完全反射現象の利用による水素吸蔵の可能性探索等)。
- ⑥非断熱遷移状態理論 (Zhao-Mil'nikov-Nakamura (ZMN) 理論) を発展させ、電子移動に適用して Marcus 理論 (ノベル賞受賞) の改良に成功。
- ⑦レーザー冷却による分子生成の理論を展開。

(2) レビュー論文 8 編の執筆:

特に、J. Phys. Chem. (Feature article) 2 編 (2006, 2010)、Phys. Chem. Chem. Phys. (Perspective) (2008)、Adv. Chem. Phys. (2008)、及び Chem. Sci. (Perspective) (2010) の 5 編は価値が高い。

(3) 国際会議での招待講演:

招待講演 17 件を既に済ませ、今年 5 月以降にあと 4 件を予定している。

(4) 単行本の執筆:

2002 年に出版した単行本 "Nonadiabatic Transition: Concepts, Basic Theories and Applications" by Hiroki Nakamura (World Scientific, Singapore) の第二版執筆の依頼を受け、最近原稿を書き上げた。

研究代表者自身の研究は、上述の通りの事情で残念ながら中断せざるを得なかったが、研究分担者によりそれぞれの分野で継続されている。今後の大きな発展を期待したい。以下にその例を挙げる。

- ①研究期間中に非断熱反応 $O(^1D) + HCl \rightarrow OH + Cl$ の交差分子線実験に成功したが、その後、 $O(^1D) + CD_4 \rightarrow OD + CD_3$ の実験に成功している。これは微分断面積を生成物の振動回転状態を選別して測定するという極めて難易度の高い実験で、その成果は Phys. Chem. Chem. Phys. の hot article に選ばれている。(鈴木)
- ②開発した半古典力学的手法 (ZN-TSH や ZN-SCIVR 法) を大次元系に適用することに成功している。例えば、7-アザインドール等の蛍光蛋白質内のプロトン移動過程、及び、蛍光タグ分子であり LED の材料としても期待されているインドリルマレイミド分子の光異性化過程等に適用し、その機構の解明に役立っている。(南部)
- ③古代大気における酸素発生メカニズムにおいて硫黄酸化物の光解離が重要な役割をしているが、硫黄同位体の非断熱解離の微妙な違いが酸素発生過程に影響していることを解明している。今年の NASA-NSF シンポジウムでも招待講演を行う。(南部)
- ④蛋白質環境下におけるレチナールの光異性化を ZN-TSH 法で取り扱い、ロドプシンとイソロドプシンの量子収率の違いや反応時間の長さの違いの解明に成功している。これは、QM/MM (Quantum Mechanics/Molecular Mechanics) 法と ZN-TSH 法を合体させた手法であり、極めて大きな次元を持つ系への有効な手法となる。(石田)

1. 特別推進研究の研究期間終了後、研究代表者自身の研究がどのように発展したか（続き）

(2) 論文発表、国際会議等への招待講演における発表など（研究の発展過程でなされた研究成果の発表状況を記述してください。）

2003年-2005年における発表状況：

- (1) 原著論文：25編
- (2) 国際会議招待講演：16件
- (3) レビュー論文執筆：4編。

2006年以降の状況：

(1) 原著論文 21 報

- 1). H. Tamura, S. Nanbu, T. Ishida and H. Nakamura, J. Chem. Phys. **124**, 084313 (2006).
- 2). P. Oloyede, G. V. Mil'nikov and H. Nakamura, J. Chem. Phys. **124**, 144110 (2006).
- 3). G. V. Mil'nikov, T. Ishida and H. Nakamura, J. Phys. Chem. **A110**, 5430 (2006).
- 4). S. Nanbu, T. Ishida and H. Nakamura, Chem. Phys. **324**, 721 (2006).
- 5). H. Tamura, S. Nanbu, T. Ishida and H. Nakamura, J. Chem. Phys. **125**, 034307 (2006).
- 6). Y. Zhao, W. Liang and H. Nakamura, J. Phys. Chem. **A110**, 8204 (2006).
- 7). Y. Zhao and H. Nakamura, J. Theo. Comp. Chem. **5**, 299 (2006).
- 8). H. Zhang, S. C. Smith, S. Nanbu and H. Nakamura, J. Phys. Chem. **A110**, 5468 (2006).
- 9). A. Ishkhanyan and H. Nakamura, Phys. Rev. **A74**, 063414 (2006).
- 10). A. Ishkhanyan, J. Javanainen and H. Nakamura, J. Phys. **A39**, 14887 (2006).
- 11). K. Nagaya, S. H. Lin and H. Nakamura, J. Chem. Phys. **125**, 214311 (2006).
- 12). V. G. Ushakov, V. I. Osherov and H. Nakamura, Russian Chem. Phys. **25**, 1 (2006).
- 13). Y. Zhao, M. Han, W. Liang and H. Nakamura, J. Phys. Chem. **A111**, 2047 (2007).
- 14). H. Yang, Ke-Li Han, S. Nanbu, H. Nakamura, G. G. Balint-Kurti, H. Zhang, S. C. Smith and M. Hankel, J. Chem. Phys. **128**, 014308 (2007).
- 15). H. Kohguchi, T. Suzuki, S. Nanbu, T. Ishida, G. V. Mil'nikov, P. Oloyede and H. Nakamura, J. Phys. Chem. **A112**, 818 (2008).
- 16). A. Kondorskiy and H. Nakamura, Phys. Rev. **A77**, 043407 (2008).
- 17). H. Zhang, M. Hankel, S. C. Smith, S. Nanbu and H. Nakamura, J. Phys. Chem. **A112**, 4141 (2008).
- 18). H. Yang, Ke-Li Han, S. Nanbu, H. Nakamura, G. G. Balint-Kurti, H. Zhang, S. C. Smith and M. Hankel, J. Phys. Chem. **A112**, 7947 (2008).
- 19). H. Zhang, S. C. Smith, S. Nanbu and H. Nakamura, J. Phys. Condensed Matter **21**, 144209 (2009).
- 20). T. Ishida, S. Nanbu and H. Nakamura, J. Phys. Chem. **A113**, 4356 (2009).
- 21). H. Zhang, S. C. Smith, S. Nanbu and H. Nakamura, Aust. J. Chem. **63**, 371 (2010).

(2) レビュー論文 8 編

- 1). H. Nakamura, "Dynamics of Nonadiabatic Chemical Reactions", J. Phys. Chem. (Feature) **A110**, 10929 (2006).
- 2). S. Zou, A. Kondorskiy, G. Mil'nikov and H. Nakamura, "Laser Control of Chemical Dynamics. I. Control of Electronic Transitions by Quadratic Chirping", Progress in Ultrafast Intense Laser Science edited by K. Yamanouchi et al (Springer-Verlag, 2007) pp95-117.
- 3). A. Kondorskiy, G. Mil'nikov and H. Nakamura, "Laser Control of Chemical Dynamics. II. Control of Wave Packet Motion", 同上, pp119-142.
- 4). H. Nakamura, "Nonadiabatic Chemical Dynamics—Control of Chemical Reactions and Development of Molecular Functions"(in Japanese), Molecular Science **1**, A0011 (2007).
- 5). G. Mil'nikov and H. Nakamura, "Tunneling Splitting and Decay of Metastable States in Polyatomic Molecules; Invariant Instanton Theory", Phys. Chem. Chem. Phys. (Perspective) **10**, 1474 (2008).
- 6). H. Nakamura, "Nonadiabatic Chemical Dynamics: Comprehension and Control of Dynamics and Manifestation of Molecular Functions", Adv. Chem. Phys. **138**, pp.95-212 (2008).
- 7). A. Kondorskiy, S. Nanbu, Y. Teranishi and H. Nakamura, "Control of Chemical Dynamics by Lasers: Theoretical considerations", J. Phys. Chem. (Feature) **A114**, 6171 (2010). [雑誌のカバー図面に採用される]
- 8). S. Nanbu, T. Ishida and H. Nakamura, "Future Perspectives of Nonadiabatic Chemical Dynamics", Chem. Science **1**, 663 (2010).

(3) 国際会議招待講演 21 件（中 4 件は今年度 5 月以降に予定）：2006 年 5 件（インド、岡崎 2 件、京都、ロシア）、2007 年 3 件（岡崎、イギリス 2 件）、2008 年 4 件（名古屋、キューバ、中国、ロシア）、2009 年 2 件（中国、名古屋）、2010 年 2 件（京都、アメリカ）、2011 年 4 件（岡崎、チェコ、中国、インド）、2012 年 1 件（イタリア）。

(4) 単行本第二版の執筆：“Nonadiabatic Transition: Concepts, Basic Theories and Applications”

(World Scientific, Singapore, 2nd edition) by H. Nakamura（刷り上がり約 500 ページで 2012 年 2 月出版の予定）。

1. 特別推進研究の研究期間終了後、研究代表者自身の研究がどのように発展したか（続き）

(3) 研究費の取得状況（研究代表者として取得したもののみ）

前述したとおり、研究期間（平成 15 年年度—平成 17 年度）の途中（平成 16 年）に研究所所長に就任し、その後退職した（平成 22 年）ために、残念ながら、研究代表者としての研究費取得はなかった。

(4) 特別推進研究の研究成果を背景に生み出された新たな発見・知見

非断熱遷移の重要性・有用性を改めて認識した：

例えば、生体分子系における円錐交差の重要性、レーザー・分子系相互作用における重要性、古代大気における酸素発生メカニズムでの役割、元素同位体分離における役割等々。

我々の理論の他分野への応用可能性：

周波数の周期チャープによる制御の理論（Teranishi-Nakamura 理論）が NMR における交差分極法の効率向上に貢献できる可能性や、Landau-Zener-Stueckelberg 量子干渉計などの量子デバイスへの応用可能性があることが分かった。

異分野間の学際的協力の重要性：

分子機能開発における非断熱遷移の重要性から、合成化学、レーザー実験、量子化学、動力学等々の広い分野に跨る協力体制が肝要であることが改めて認識された。

半古典力学的理論の開発により現実の化学・生物大次元系の取り扱いが可能となった：

我々が開発した理論（ZN-TSH, ZN-SCIVR, ZMN, 多次元トンネル理論など）によって古典的に許されない非断熱遷移の取り扱いや結合強度の大小に関わらない取り扱いが可能となり、様々な現実の大次元系の現象の理解が促進されることとなった。それに伴い、電子励起状態の重要性、高精度量子化学計算の重要性、on-the-fly 法（古典軌道を走らせながら、量子化学計算を行う方法）の有用性、多次元性の重要性等々が明らかとなった。量子化学、動力学理論、合成及びレーザー実験等々の協力により、将来大きく発展すると期待される。

各種制御理論の開発により化学動力学と分子機能の制御・開発の可能性が拡大した：

周波数の周期チャープ理論、非断熱トンネルにおける完全反射現象の活用、円錐交差における非断熱遷移の制御、半古典的波束誘導最適制御理論の構築などにより、各種化学動力学の制御や分子機能の制御と開発が現実的可能性のある課題として期待出来るようになった。レーザー以外の外場の活用・併用も考えられる。将来、様々な分野間の協力によって大きく発展しうると期待される。

2. 特別推進研究の研究成果が他の研究者により活用された状況

特別推進研究の研究成果が他の研究者に活用された状況について、次の(1)、(2)の項目ごとに具体的かつ明確に記述してください。

(1) 学界への貢献の状況（学術研究へのインパクト及び関連領域のその後の動向、関連領域への関わり等）

現象の基本に立ち返って遂行した基礎学術の研究であり、しかも、数式の展開を伴う解析的理論と手法の開発が大きな部分を占める研究であるので、深く広い理解を得るには、残念ながら、時間がかかる様である。特に、他分野への浸透には更なる努力が必要であろう。

それでも、以下の様なインパクトがあり、現在進行中の共同研究などを含めて、将来の発展に期待したい。

レビュー論文の執筆や招待講演の依頼など：

既に、1-（1）及び1-（2）で述べた通り、研究期間終了後も8編のレビュー論文執筆の依頼と国際会議における招待講演21件の依頼を受けている。更に、単行本”Nonadiabatic Transition: Concepts, Basic Theories and Applications” (World Scientific, Singapore, 2002)の第二版の執筆依頼を受け、原稿を書き終えた(2012年2月出版予定)。研究期間中ではあるが単行本「化学反応動力学」(朝倉書店、2004年)を出版している。

また、Zhu-Nakamura理論については、以下の教科書や専門書において取り上げられている：「電子・原子・分子の衝突」(高柳著、培風館、1996)、「光・物質・生命と反応」(垣谷著、丸善、1998)、「原子衝突入門」(金子著、培風館、1999)、「原子分子物理」(高柳著、朝倉、2000)、「非平衡系の科学IV」(高塚著、講談社、2001)、「原子衝突」(高柳著、朝倉、2007)、「理化学辞典」(岩波、第5版、1998)。

半古典力学的動力学理論の活用：

ZN-TSH及びZN-SCIVR法の応用については、1-（1）で述べた分担者による活用以外にも、いくつかの現実系への応用がなされている(例：B. Li and K-L. Han, JCP128, 114116 (2008))。また、電子移動反応の実験との協力研究が現在進行している。多次元トンネル理論については理論計算の協力研究、実験との協力、他の理論手法へのインパクトなどの効果が出ている(Mil'nikov et al, JCP123, 074308 (2005), Tanaka et al, J. Chem. Phys. 120, 3604 (2004), Richardson and Althorpe, J. Chem. Phys. 134, 054109 (2011)など)。また、固相Arマトリックスにおける水素移動に関する新しい協力研究も進行しつつある。

周波数周期チャープ制御理論の活用：

Landau-Zener-Stueckelberg型量子干渉計への活用の研究が行われている(例：Shevchenko et al, Physics Reports 492, 1 (2010))。また、同手法の分子過程における選択的励起の実験やNMR実験への応用研究が進行している。

研究分担者による研究の継続発展によりインパクトが拡がりつつある：

1-（1）でも述べたが、研究分担者によって以下の様に研究の更なる展開がなされており、今後の一層の発展への前奏になるものと期待している。

①交差分子線の極めて難度の高い実験の遂行に成功し、化学反応動力学研究のフロンティアを押し進めている。雑誌「化学64、38(2009)」に解説を執筆している。

②ZN-TSH法及びZN-SCIVR法の化学・生物大次元系への応用がすすめられている。ZN-TSH法のコードはインターネットからダウンロード可能な形にしており利用が拡がりつつある。また、合成化学者との共同研究も始まっており、今後の発展が期待される(例えば、Nakazono et al, Phys. Chem. Chem. Phys. 12, 9783 (2010))。

③電子移動に対するMarcus理論を改良する我々の理論の具体的分子系への応用が進められている。

④研究分担者によって国際会議等における招待講演なども多くなされている。中でも、「非断熱光解離における同位体分別」の研究は、国際同位体シンポジウム、宇宙地球同位体科学セミナー、日本地球惑星科学連合等において注目されてる。

2. 特別推進研究の研究成果が他の研究者により活用された状況（続き）

(2) 論文引用状況（上位10報程度を記述してください。）

【研究期間中に発表した論文】

No	論文名	日本語による簡潔な内容紹介	引用数
1	G. V. Mil'nikov, K. Yagi, T. Taketsugu, H. Nakamura, and K. Hirao, "Tunneling splitting in polyatomic molecules: Applications to malonaldehyde", J. Chem. Phys. 119 , 10 (2003).	Mil'nikov-Nakamuraの二重井戸における多次元エネルギー分裂の理論を、高精度量子化学計算を用いながら多原子分子に適用する手法を示した。マロンアルデヒド分子に適用し、全自由度を考慮する計算を行い、実験との極めて良い一致を得て、理論の有効性を実証した。	35
2	G. V. Mil'nikov, K. Yagi, T. Taketsugu, H. Nakamura, and K. Hirao, "Simple and accurate method to evaluate tunneling splitting in polyatomic molecules", J. Chem. Phys. 120 , 5036 (2004).	Mil'nikov-Nakamura理論を現実の多原子分子に効率よく、しかも精度よく適用する為の手法を提案した。各種の分子に適用し、全て実験との極めて良い一致を得ている。	25
3	A. Kondorskiy and H. Nakamura, "Semiclassical theory of electronically nonadiabatic chemical dynamics: Incorporation of the Zhu-Nakamura theory into frozen Gaussian propagation method", J. Chem. Phys. 120 , 8937 (2004).	形を凍結したガウス波束で初期状態を展開表現し、それを古典軌道に沿って伝搬するという半古典力学的手法にZhu-Nakamura理論を導入して、多次元の非断熱化学動力学過程を取り扱える様に定式化した。	23
4	Y. Zhao, G. V. Mil'nikov and H. Nakamura, "Evaluation of canonical and microcanonical nonadiabatic reaction rate constants by using the Zhu-Nakamura formulas", J. Chem. Phys. 121 , 8854 (2004).	ポテンシャルエネルギー曲面の円錐交差が関与する化学反応の反応速度定数の定式化を行った。相関関数から出発して、Zhu-Nakamura公式を組み込んで、カノニカル及びマイクロカノニカルの両方の場合について公式を得た。	17
5	H. Tamura, S. Nanbu, H. Nakamura and T. Ishida, "A theoretical study of cyclohexadiene/hexatriene photochemical interconversion: Multi-reference configuration interaction potential energy surfaces and transition probabilities for the radiationless decays", Chem. Phys. Lett. 401 , 487 (2005).	左記分子間の光変換に関するポテンシャルエネルギー曲面と遷移双曲面モーメントとの分子配置依存性の量子化学計算を実施。	19
6	S. Zou, A. Kondorskiy, G. V. Mil'nikov and H. Nakamura, "Laser control of electronic transitions of wave packet by using quadratically chirped pulses", J. Chem. Phys. 122 , 084112 (2005).	レーザー周波数を時間の2次関数でチャープすることによって、波束の電子励起を100%近い高効率で起こしうることの提案。Teranishi-Nakamura理論を波束に拡張した定式化と実例計算を示した。	17
7	H. Nakamura, "Nonadiabatic transition and chemical dynamics: Multi-dimensional tunneling theory and applications of the Zhu-Nakamura theory", J. Theo. Comp. Chem. 4 , 127 (2005).	多次元の非断熱化学動力学とトンネル過程を我々が開発したMil'nikov-Nakamura理論とZhu-Nakamura理論を用いて研究する方法の解説。	14
8	G. V. Mil'nikov and H. Nakamura, "Instanton theory for the tunneling splitting of low vibrationally excited states", J. Chem. Phys. 122 , 124311 (2005).	トンネル分裂のMil'nikov-Nakamura理論を振動励起状態に拡張したもの。	14
9	G. V. Mil'nikov, O. Kuhn and H. Nakamura, "Ground-state and vibrationally assisted tunneling in the formic acid dimer", J. Chem. Phys. 123 , 124311 (2005).	トンネル分裂のMil'nikov-Nakamura理論（基底及び励起振動状態に対する）を蟻酸ダイマーに応用し、実験との良い一致を得ると同時に二重水素移動のメカニズムを解明した。	22
10	A. Kondorskiy, G. V. Mil'nikov and H. Nakamura, "Semiclassical guided optimal control theory", Phys. Rev. A72 , 041401 (2005).	上記3のKondorskiy-Nakamura法を動力学のレーザー制御に適する形に定式化した。簡潔な式の導出に成功し、しかも、波束を誘導する形式で多次元系への応用を可能にした。	10

【研究期間終了後に発表した論文】			
No	論文名	日本語による簡潔な内容紹介	引用数
1	H. Tamura, S. Nanbu, T. Ishida and H. Nakamura, "Ab initio nonadiabatic chemical dynamics of cyclohexadiene/hexatriene ultrafast photo-isomerization", J. Chem. Phys. 124 , 084313 (2006).	左記分子のフォトクロミックな光変換の動力学を Zhu-Nakamura 公式を用いて、前頁5で求めたポテンシャルエネルギー曲面情報に基づき調べた。ヘキサトリエンへの変換効率が約0.5で実験との良い一致をみた。	15
2	P. Oloyede, G. Mil'nikov and H. Nakamura, "Generalized trajectory surface hopping method based on the Zhu-Nakamura theory", J. Chem. Phys. 124 , 144110 (2006).	Zhu-Nakamura 公式を活用して古典軌道ホップ法を一般化し、大次元系にも適用できるようにした。他の方法では不可能な古典的に許されない遷移の取り扱いも可能。ZN-TSH 法と呼ばれる様になった。	8
3	H. Tamura, S. Nanbu, T. Ishida and H. Nakamura, "Laser control of reactions of photo-switching functional molecules", J. Chem. Phys. 125 , 034307 (2006).	円錐交差での非断熱遷移を制御する方法を提案。これを用いて上記1の系でヘキサトリエンの生成効率をうんと高めることに成功した。分子機能の発現と制御に有効である。	12
4	Y. Zhao, W. Liang and H. Nakamura, "Semiclassical treatment of thermally activated electron transfer in the intermediate to strong electronic coupling regime under the fast dielectric relaxation", J. Phys. Chem. A110 , 8204 (2006).	前頁4の公式を電子移動に適用し、Marcus 理論を改良する簡便な公式を導出した。Marcus のノーマルケースについて、Marcus や Bixon-Jortner 公式を改良することを実証した。	13
5	H. Kohguchi, T. Suzuki, S. Nanbu, T. Ishida, G. V. Mil'nikov, P. Oloyede and H. Nakamura, "Collisional energy dependence of the O(¹ D)+HCl→OH+Cl(² P) reaction studied by crossed beam scattering and quasi-classical trajectory calculations on ab initio potential energy surfaces", J. Phys. Chem. A112 , 818 (2008).	標記の反応の微分断面積に関する交差分子線実験と理論計算を実施し、両者の良い一致を得ると同時に、非断熱反応機構の解明を行った。	9
6	T. Ishida, S. Nanbu and H. Nakamura, "Nonadiabatic ab initio dynamics of two models of Schiff base retinal", J. Phys. Chem. A113 , 4356 (2009).	レチナールの11-cisからの光異性化を分子の全自由度を考慮してZN-TSH法でon-the-fly法を用いて研究した。9-cisへの変換の蛋白質環境による障害を仮定すると実験と良い一致を示す。ZN-TSH法の大次元系への適用性を実証。	4
7	G. Mil'nikov and H. Nakamura, "Tunneling splitting and decay of metastable states in polyatomic molecules: Invariant instanton theory", Phys. Chem. Chem. Phys. 10 , pp. 1374-1393 (2008) [Perspective].	トンネル分裂とトンネルを介しての分解に関するMil'nikov-Nakamura理論の解説とその具体的な多原子分子への適用例。多自由度系の効率よい計算方法の説明も与えている。	8
8	H. Nakamura, "Nonadiabatic Chemical Dynamics: Comprehension and control of dynamics, and manifestation of molecular functions", Adv. Chem. Phys. 138 , pp. 95-212 (2008).	開発してきた各種理論の解説。これら理論を活用することによって、動力学的理解と制御、分子機能の開発と制御が可能であることを解説。	10
9	A. Kondorskiy, S. Nanbu, Y. Teranishi and H. Nakamura, "Control of chemical dynamics by lasers: Theoretical considerations", J. Phys. Chem. A114 , pp. 6171-6187 (2010) [Feature].	完全反射の利用、2次チャープ法の活用、円錐交差における遷移の制御、半古典的波束誘導最適制御理論等々、我々が開発してきたレーザー制御理論の解説とその各種過程への応用の説明。(6月号の表紙を飾った)	1
10	S. Nanbu, T. Ishida and H. Nakamura, "Future perspectives of non-adiabatic chemical dynamics", Chem. Sci. 1 , pp. 663-674 (2010).	電子励起状態が関与する非断熱化学動力学的重要性を、我々の研究成果を基に解説。更に、色々な分野の学際的協力が将来の発展にとって如何に大切かを説明。	0

3. その他、効果・効用等の評価に関する情報

次の(1)、(2)の項目ごとに、該当する内容について具体的かつ明確に記述してください。

(1) 研究成果の社会への還元状況（社会への還元の程度、内容、実用化の有無は問いません。）

化学動力学の基本的メカニズムに関する解析的な理論の開発・展開と言う基礎学術的な研究が本研究の主要命題であるので、基本的には「学界（学術）への貢献」のところで述べた内容と同じである。ただ、非断熱遷移と非断熱化学動力学の重要性は幅広い分野において益々認識され増大して行くと考えており、各種理論の具体的な応用も暫時拡がっていくと信じている。

研究代表者は最近、化学同人社が企画・出版した別冊化学「化学のブレークスルー」のPart II「理論化学のブレークスルー」（2010年）における座談会に招かれて、この分野の今後の発展性についての説明を行っている。この別冊は今後単行本としても出版される予定である。

将来は、色々な分野との学際的な協力が絶対に必要であり肝要であるが、差し当たりは以下の様な分野への貢献が考えられるであろう。

- ・化学・生物過程の解明、
 - ・分子の各種機能の開発と高効率化、
 - ・太陽光パネルや燃料電池におけるプロトンダイナミックスの解明、
 - ・元素の同位体分離への活用、
 - ・NMRの高効率化、
- など。

3. その他、効果・効用等の評価に関する情報（続き）**(2) 研究計画に関与した若手研究者の成長の状況（助手やポスドク等の研究終了後の動向を記述してください。）****研究分担者の現状：**

- ・鈴木 俊法 京都大学大学院理学研究科化学専攻 教授
- ・石田 俊正 京都大学福井謙一記念研究センター 准教授
- ・南部 伸孝 上智大学理工学部物質生命理工学科 教授
- ・MIL'NIKOV, Gennady 大阪大学工学部 研究員

若手研究者の成長状況（現在のポジション）：

- ・高口 博志 広島大学大学院理学研究科化学専攻 准教授
（当時 理研研究員）
- ・田村 宏之 東北大学原子分子材料科学高等研究機構（WPI-AIMR）助教
（当時 ポスドク）
- ・KONDORSKIY, Alexey P.N. レベデフ物理研究所（モスクワ、ロシア） 主任研究員
（当時 ポスドク）
- ・ZHAO, Yi State Key Laboratory of Physical Chemistry of Solid Surfaces,
Xiamen University (中国) 教授
（当時 ポスドク）