



「化学反応と分子機能の基本メカニズムを理解し制御する理論」

(平成 15～17 年度 特別推進研究「Zhu-Nakamura 理論に基づく非断熱化学動力学の総合的研究」)

所属（当時）・氏名：分子科学研究所・所長・中村 宏樹

(現所属：分子科学研究所名誉教授、及び、国立交通大学（台湾）教授)

1. 研究期間中の研究成果

・背景（事象の初歩的な説明）：非断熱遷移とは状態変化の基本メカニズムで、物理、化学、生物における諸現象において極めて重要な役割をしている。我々はその最も基本的な解析的理論（Zhu-Nakamura 理論）を完成した（60 年ぶりの完全解）。

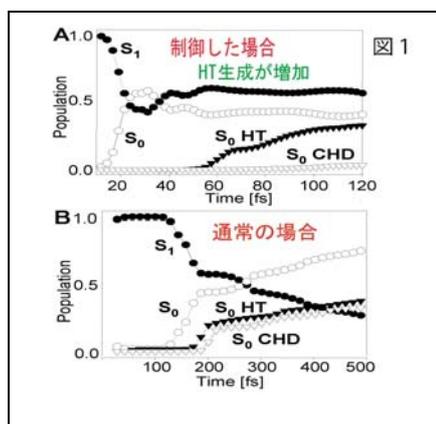
・研究内容及び成果の概要：この Zhu-Nakamura 理論を活用して、化学反応や分子機能発現の機構を理解する為の理論手法を開発すると同時に、レーザー等を用いて望ましい反応の効率を高める為の理論を構築した。

図 1 は、照射するレーザーパルスを上手く設計することによって、シクロヘキサディエン分子 (CHD) をヘキサトリエン (HT) に変換（電子励起状態を経由して変換）する効率が高められることを示している。各状態の存在確率の時間変化を表しており、HT と CHD の生成分岐比がレーザーで制御した場合には大きく改善されていることが分る (S_0, S_1 は電子的基底状態、及び、励起状態を表している)。図 2 は、NCH 分子の水素原子を炭素側から窒素側にレーザーで移動させた例を示している（6 次元計算の投影図）。

2. 研究期間終了後の効果・効用

・研究期間終了後の取組及び現状：研究所長に就任しその後退職を迎えてしまったが、研究分担者等によって、我々が開発した様々な理論と実験手法の有効性が、具体的な分子系への適用によって実証されている。

・波及効果：非断熱遷移は様々な過程において重要であるので、理論の具体的有効性が示されていけば、将来、各種化学・生物現象（応用上重要な太陽光パネルや燃料電池の機能改善等をも含む）の解明や分子機能（フォトクロミズムや分子スイッチ等々）の開発・制御において、或いは、NMR（核磁気共鳴）の高効率化等において役立つと期待される。



レーザーでNCHのHをC側からN側に移動

図 2

