

ボルン オッペンハイマ - 描像を超えた動的分子理論と新しい化学の展開

高塚 和夫 (東京大学・大学院総合文化研究科・教授)

【研究の概要等】

化学動力学は、フェムト秒 (10^{-15} 秒) の時間スケールでおきる超高速化学反応を直接追跡すべく、原子核の波動関数の時間変化を直接検出する技術や理論を発展させてきた。本研究では、現代化学の基本的概念を提供してきたボルン オッペンハイマー描像 (質量および時間スケールの大きな相違故、電子と原子核の運動を分離して考える分子像) を超え、化学動力学理論において積み重ねてきた我々自身の実績に立って、新しい時代の分子の動力学理論を創成し発展させる。特に原子核の運動と強くカップルする電子波束動力学の展開を中心に据え、次世代の超高速化学反応学と反応制御の理論を開拓することを目的とする。電子 原子核同時動力学が本質的な役割を果たす例を二件挙げる。(1) 水素結合とプロトン移動は、最も基本的な化学反応というだけではなく、生体内反応や物性物理学においても重要性を持っているが、プロトン移動には電子移動が伴うことが一般的である。本研究では、プロトン移動 - 電子移動同時動力学の運動機構と電子流の分子内通過経路等の解明を行う。(2) 強いレーザーを分子に照射すると、電子と原子核の間に働く引力と同程度の力を作用させることができる。このような極限状況では、ボルン オッペンハイマー近似は容易に破れ、ベクトルポテンシャル中の電子 核同時動力学を研究する必要がある。これらの研究目的に沿った新しい方法論を発展応用させながら、電子状態の制御を通じた化学反応の制御の可能性を追求する。

【当該研究から期待される成果】

本研究では、現代物理化学の鍵を握っていると考えられる幾つかの具体的な実験事実や理論的問題意識をとりあげ、定性的および定量的に解析していく。しかし、個別の成果とは別に、期待される最大の成果は、ポテンシャルエネルギー曲面の概念が破綻する諸現象に対して、新しい理論的方法論を提供し、次世代の研究分野を開拓していくことであると考え。分子の知られざる姿と性質を引き出したい。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

“Non-Born-Oppenheimer paths in anti-Hermitian dynamics for nonadiabatic transitions.” Kazuo Takatsuka, J. Chem. Phys. **124**, 064111 (2006).

“Nonadiabatic chemical dynamics in an intense laser field: Electronic wavepacket coupled with classical nuclear motions.” Kiyoshi Yagi and Kazuo Takatsuka, J. Chem. Phys. **123**, 224103 (2005).

【研究期間】 平成18年度 - 22年度

【研究経費】 17,800,000 円

【ホームページアドレス】

<http://mns2.c.u-tokyo.ac.jp/>