

量子化学工学グループ

教授：中野 雅由， 准教授：高橋 英明， 助教：岸 亮平

URL: <http://www.cheng.es.osaka-u.ac.jp/nakanolabo/home.html>

E-mail: mnaka@cheng.es.osaka-u.ac.jp

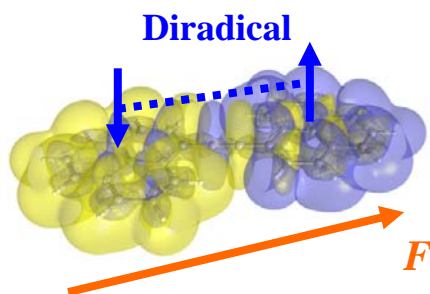


物質科学における理論の深化と新概念の創成

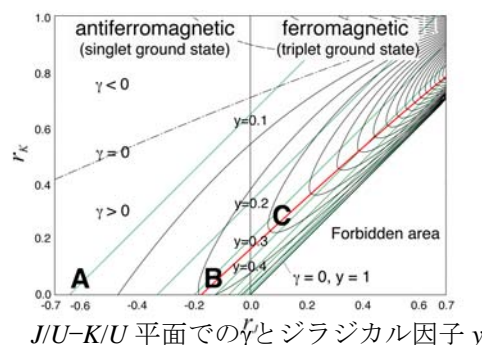
量子化学工学グループでは、古典力学、量子力学、電磁気学、統計力学、量子統計力学などを基礎とする理論化学（量子化学、量子ダイナミクス、分子シミュレーションなどを含む）を用いて、原子・分子などのミクロな物質から、中間（メゾスコピック）あるいはマクロサイズに至る集団系における構造-機能相関、時空間発展現象、非線形応答現象、凝縮相での反応ダイナミクス、協同量子非線形現象などの理論的解釈と予測を行い、物質の構造、性質、反応における様々な現象の根底にある真理を探究することを目的として研究を行っています。物質科学の理論の深化と新概念の創成を行い、これら根源的な原理に基づいて設計指針を構築することにより、工学的応用における真のブレークスルーを目指しています。

開殻分子系に基づく非線形光学効果の理論的解明と量子設計への展開

未開拓の中間および強電子相関系の非線形光学効果について、世界に先駆けて「開殻分子に基づく新規非線形光学物質の理論」を提案し、それに基づいて設計された物質系について量子化学を用いて研究を行っています。この研究は、実験家と協力し、「理論-合成-測定」の三位一体アプローチにより実施しています。理論設計指針に基づいて提案したフェナレニルラジカル含有ジラジカル分子系は、従来の閉殻分子系に比べて、はるかに大きな二光子吸収断面積を示すことが実験により見いだされ、二光子吸収材料としての応用が期待されています。



フェナレニルラジカル含有化合物の3次分極率(γ)

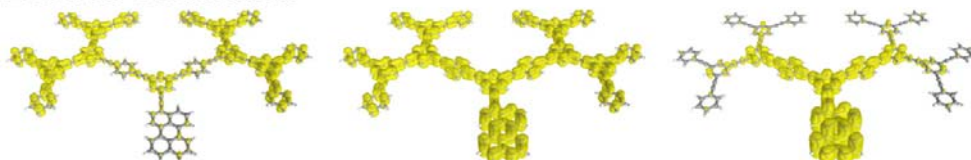


デンドリティック超分子系のエネルギー移動および非線形光学特性の研究

樹木状の高分子（デンドリマー）や分子集合体では、高効率かつ指向性の高いエネルギーの輸送を発現し、そのエネルギー移動過程は光吸収によって生成される電子とホール（エキシトン）の移動によって引き起こされていることが知られています。我々は、そのような時空間発展現象を扱うために、エキシトン-フォノンカップリングを含む量子マスター方程式を基礎とした量子ダイナミクスの方法論を新たに開発し、エキシトン移動のメカニズム、構造-特性相

関を抽出することで、新規なナノサイズ光収集系の量子設計の指針を構築することを目指しています。

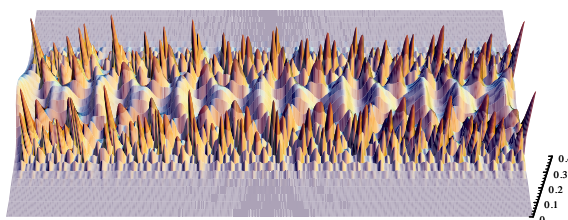
Electron Distribution



dendritic molecule "nanostar" のエキシトン（電子部分）分布の時間変化

物質と量子光の相互作用ダイナミクスおよび巨視的量子現象の散逸量子位相ダイナミクスの研究

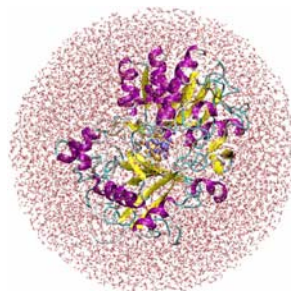
量子光学技術の進歩により生成された量子光と分子系の相互作用の量子ダイナミクスを解明し、原子・分子系のコヒーレンシーと光の量子統計性との関係について研究をしています。また、多成分ボーズ・アインシュタイン凝縮ガス（BEC）の量子ダイナミクスから巨視的量子状態（シュレーディンガーの猫）の生成とその時間発展について研究しています。このような「量子開放系」の研究は、古典-量子対応のより深い理解とともに、将来の量子情報デバイスの基本物質系の構築にも役立つと考えられます。



BEC における巨視的量子性の崩壊-復活現

凝縮系の化学反応

生体分子をはじめとする凝縮系の化学反応のメカニズムを明らかにすることは、生命の根源を知る上で重要となります。凝縮系では多様な反応経路が発生し得ますが、特に生体分子では、基質とタンパク質との相関によって特定の経路が選択的に起こると考えられています。このような生体分子の機能が、どのようなメカニズムによって発現するかを、量子化学と統計力学の理論をもとにした新しい方法論を開発し、それを用いて理論的に解明することを目指しています。



References (main papers in 2007)

- (1) Relationship between Third-Order Nonlinear Optical Properties and Magnetic Interactions in Open-Shell Systems: A New Paradigm for Nonlinear Optics, M. Nakano, R. Kishi et al., *Phys. Rev. Lett.* **99**, 033001-1-4 (2007).
- (2) Second Hyperpolarizabilities of Singlet Polycyclic Diphenalenyl Radicals: Effects of the Nature of the Central Heterocyclic Ring and Substitution to Diphenalenyl Rings, M. Nakano, N. Nakagawa, R. Kishi, et al., *J. Phys. Chem. A*, **111**, 9102-9110 (2007).
- (3) Finite-Field Spin-Flip Configuration Interaction Calculation of the Second Hyperpolarizabilities of Singlet Diradical Systems, R. Kishi, M. Nakano et al., *J. Chem. Theory Comput.* **3**, 1699-1707 (2007).
- (4) Theoretical Study on the Second Hyperpolarizabilities of Phenalenyl Radical Systems Involving Acetylene and Vinylene Linkers: Diradical Character and Spin Multiplicity Dependences, S. Ohta, M. Nakano et al., *J. Phys. Chem. A* **111**, 3633-3641 (2007).
- (5) Novel Quantum Mechanical/Molecular Mechanical Method Combined with the Theory of Energy Representation: Free Energy Calculation for the Beckmann Rearrangement Promoted by Proton Transfers in the Supercritical Water, H. Takahashi et al., *J. Chem. Phys.* **126**, 084508-1-10 (2007).