

## 研究タイトル：原子分子の電子状態計算



氏名：	中島 慶治 / NAKASHIMA Keiji	E-mail：	knaka@ms.kochi-ct.ac.jp
職名：	嘱託教授	学位：	工学博士
所属学会・協会：	日本化学会		
キーワード：	分子軌道計算、原子		
技術相談 提供可能技術：	・原子・分子レベルのシミュレーションに関する技術相談についてなど		

### 研究内容：

#### ◆研究概要

- 芳香族分子の非極性溶媒中での光反応に関する理論的考察(量子化学関連)
- イオン-分子反応の理論的シミュレーション

#### ◆研究テーマと成果の例

##### (1) 光イオン化の理論的研究

炭化水素等の非極性溶媒中において、アニリンをイオン化しきい値近傍のエネルギーで多光子イオン励起して過渡的に生成する電流を観測すると、2つのしきい値が観測される。例えば、アニリンの  $\text{Si}(\text{CH}_3)_4$  溶液では、5.05eV と 5.98eV に過渡電流生成のしきい値が観測される。このうち、後者についてはアニリンから直接電子が飛び過程でアニリンイオンおよび電子の溶媒和エネルギーを考慮すれば説明できる。一方、前者については単純なイオン化で説明できず、何らかの反応によるイオンペアの生成等を考慮する必要がある。このような、紫外線照射でできるイオン性生物の予測をシミュレーションで行うことができます。

##### (2) イオン-分子反応の理論的シミュレーション

高エネルギー(10-数 keV)領域で、簡単な分子と Ar イオンなどの衝突反応ポテンシャルをコンピューターシミュレーションし、どんな立体的方向から反応が起こるか、どんな生成物が可能かなどの分析を行っています。