慶應義塾大学学術情報リポジトリ
Keio Associated Repository of Academic resouces

Title	原子・分子の共鳴状態および光イオン化過程の理論研究
Sub Title	Theoretical study of resonance states and photoionization of atoms and molecules
Author	藪下, 聡(Yabushita, Satoshi) 岩田, 末廣(Iwata, Suehiro)
Publisher	
Publication year	2020
Jtitle	科学研究費補助金研究成果報告書 (2019.)
JaLC DOI	
Abstract	連続状態波動関数が漸近領域で満たす境界条件はその微分断面積の議論に必要不可欠であるが、可積分 (L2) 法ではその取り扱いが困難であった。この解決のために、光イオン化の遷移モーメントに「2ポテンシャル公式」を用い、非同次シュレーディンガー方程式の解を複素基底関数(CBF)法によって表現する方法を考案した。 1電子ウラン正イオンのK殻光イオンの問題に非同次Dirac方程式を応用した。全断面積、微分断面積は以前の理論計算とも、また中性ウラン原子の実験結果ともよく一致した。この計算結果は、電磁場の多極子効果と小成分波動関数の重要性を示し、相対論を含む計算におけるCBF法の有用性が分かった。 Boundary conditions satisfied by continuum states at the asymptotic region are essential for the discussion of differential cross sections, and have been a long-standing obstacle to some L2 methods. To solve this problem, we rely on the so-called two-potential formula to represent transition moments, and apply the complex basis function (CBF) method to solve the driven-type Schrödinger equation for photoionization differential cross sections. The K-shell photoionization cross sections of the one-electron uranium cation have been studied using the inhomogeneous Dirac equation. The total and differential cross sections showed good agreement with the previous theoretical values and also with experimental values for the neutral uranium atom, emphasizing the importance of the multipole effect of electromagnetic fields, and significant effects caused by the small component wave functions. These results demonstrated the effectiveness of the CBF method in relativistic treatment.
Notes	研究種目：基盤研究 (C) (一般) 研究期間：2016～2019 課題番号：16K05668 研究分野：理論化学
Genre	Research Paper
URL	https://koara.lib.keio.ac.jp/xoonips/modules/xoonips/detail.php?koara_id=KAKEN_16K05668seika

慶應義塾大学学術情報リポジトリ(KOARA)に掲載されているコンテンツの著作権は、それぞれの著作者、学会または出版社/発行者に帰属し、その権利は著作権法によって保護されています。引用にあたっては、著作権法を遵守してご利用ください。

The copyrights of content available on the KeiO Associated Repository of Academic resources (KOARA) belong to the respective authors, academic societies, or publishers/issuers, and these rights are protected by the Japanese Copyright Act. When quoting the content, please follow the Japanese copyright act.

様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９－１、Ｚ－１９　（共通）

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

令和　２ 年　 ５ 月 ２７ 日現在

機関番号：３２６１２
研究種目：基盤研究(C)（一般）
研究期間：2016～2019
課題番号：１６Ｋ０５６６８

研究課題名（和文）原子・分子の共鳴状態および光イオン化過程の理論研究

研究課題名（英文）Theoretical study of resonance states and photoionization of atoms and molecules

研究代表者
藪下　聡（Yabushita, Satoshi）

慶應義塾大学・理工学部（矢上）・教授

研究者番号：５０２１０３１５

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　3,700,000円

研究成果の概要（和文）：連続状態波動関数が漸近領域で満たす境界条件はその微分断面積の議論に必要不可欠であるが、可積分(L2)法ではその取り扱いが困難であった。この解決のために、光イオン化の遷移モーメントに「２ポテンシャル公式」を用い、非同次シュレーディンガー方程式の解を複素基底関数（CBF）法によって表現する方法を考案した。
１電子ウラン正イオンのK殻光イオンの問題に非同次Dirac方程式を応用した。全断面積、微分断面積は以前の理論計算とも、また中性ウラン原子の実験結果ともよく一致した。この計算結果は、電磁場の多極子効果と小成分波動関数の重要性を示し、相対論を含む計算におけるCBF法の有用性が分かった。

研究成果の学術的意義や社会的意義
古くから多くの研究分野で物質の構成元素やその化学環境を調べるためにX線光電子分光法（XPS）が利用されてきた。特に最近の極短時間計測法では、光電子角度分布の測定を通して、分子構造の時間変化が議論されている。微分断面積の評価は容易でないが、将来的にはこのような研究分野に有用な基礎情報を提供できると期待される。

研究成果の概要（英文）：Boundary conditions satisfied by continuum states at the asymptotic region are essential for the discussion of differential cross sections, and have been a long-standing obstacle to some L2 methods. To solve this problem, we rely on the so-called two-potential formula to represent transition moments, and apply the complex basis function (CBF) method to solve the driven-type Schrödinger equation for photoionization differential cross sections.
The K-shell photoionization cross sections of the one-electron uranium cation have been studied using the inhomogeneous Dirac equation. The total and differential cross sections showed good agreement with the previous theoretical values and also with experimental values for the neutral uranium atom, emphasizing the importance of the multipole effect of electromagnetic fields, and significant effects caused by the small component wave functions. These results demonstrated the effectiveness of the CBF method in relativistic treatment.

研究分野：理論化学

キーワード：複素基底関数法　光イオン化微分断面積　２ポテンシャル公式　振動数依存分極率　相対論効果　多極子展開　局所射影分子軌道摂動論　分子間相互作用理論

※科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。

１．研究開始当初の背景

電子状態理論の長足の進歩により多くの分子系のイオン化エネルギーは第一原理計算により予測可能になったが、光イオン化効率となると話は違う。簡単な分子の始状態を Hartree-Fock 解で近似する光イオン化断面積の理論は、1980 年代にほぼ完成したが、複雑な多体効果を包括的に取り扱う計算手法は未完成で、今でも個々の研究者よって ad hoc に開発されている。

光電子は散乱波として表現されるため、電子散乱の手法に基づく計算手法がよく用いられたが､複雑な多体効果の扱いには不向きである｡一方､モーメント法に代表される量子化学手法は、複雑な電子状態にも対応できるが、微分断面積や部分断面積は評価できないといったジレンマがあった。本研究課題で基礎とする複素基底関数（CBF）法を使えば、微分断面積は評価できるものの、H 原子の問題に 50～60 個もの基底関数が必要で非現実的であった。[1]

本研究代表者は、このような問題意識のもと、本研究課題が引き継いだ2012～2015年の基盤研究（C）（一般）やその前段階の研究によって、CBF法を用いて連続状態の情報を取り出すには、複素数軌道指数を最適化することが重要で、その上でCBF法を使えば漸近領域における位相シフトや、微分断面積や部分断面積の計算は現実的になると予測した。また、複素座標法をDiracハミルトニアンに用い、Stark効果に含まれる相対論効果を調べたHoらの研究[2]をヒントに、CBF法が相対論や電磁場の多重極効果を含む形式に拡張可能かどうかに興味を持った。

２．研究の目的

(1) 光イオン化全断面積だけでなく微分断面積も計算可能な手法の開発を目指す。特にCBF法において、光イオン化断面積と直結する振動数依存分極率をそのCBFに含まれる軌道指数に対して最適化することの意味を明確にする。この意味づけは、応用計算において基底関数を設定する際に有用なヒントになる。

(2) 過去の全断面積の計算において、CBF法は自動イオン化やチャネル結合などの多電子効果を正確に表現することが分かっていた。そこでCBF法による全断面積から微分断面積や部分断面積を取り出す方法を、(1)で得た概念を基礎に調べる。

(3) 最近、分子の内殻X線領域の光電子分光が盛んになっていることに鑑み、(1) (2)で開発した手法の、相対論や電磁場の多重極効果を含む形式への拡張可能性とその有効性を調べる。

３．研究の方法

(1) 注目しているN電子系HamiltonianをH、エネルギーがE_0の束縛始状態をΦ_0、光子の角振動数をω、電気的双極子モーメントの振動電場成分をμとすると、光イオン化全断面積は、グリーン関数あるいはその虚数部分を用いて､以下の振動数依存分極率の形式で書かれる(原子単位系)。

$$\sigma(\omega) = -\frac{4\pi\omega}{c}\ \mathrm{Im}\lim_{\eta\to+0} <\Phi_0|\mu(E_0+\omega-H+i\eta)^{-1}\mu|\Phi_0> \qquad ①$$

$$= \frac{4\pi^2\omega}{c} <\Phi_0|\mu\delta(E_0+\omega-H)\mu|\Phi_0> \qquad ②$$

始状態Φ_0と電磁場との相互作用により、分子の電子波動関数には、次の driven（非同次）型シュレーディンガー方程式の解である１次摂動波動関数$\Psi^{(1)}$が誘起される。

$$(E_0+\omega-H)\Psi^{(1)} = \mu\Phi_0 \qquad ③$$

③式は、Hylleraas 型汎関数　$I[\tilde{\Psi}] = (\tilde{\Psi},(H-E)\tilde{\Psi}) + 2(\tilde{\Psi},\mu\Phi_0)$　④

の変分解が満たすオイラー方程式であり$(E=E_0+\omega)$､その解 $\tilde{\Psi}^{\mathrm{opt}} = (E-H)^{-1}\mu\Phi_0 = G(E)\mu\Phi_0$ を使うと、汎関数の極値は次式のように振動数依存分極率になる。（比例定数は無視）

$$I[\tilde{\Psi}^{\mathrm{opt}}] = (\Phi_0\mu,(E-H)^{-1}\mu\Phi_0) \qquad ⑤$$

この⑤式で $(..,..)$ は通常のブラケットとは異なりブラ側の複素共役は取らない。さらに $\mu\Phi_0$を実数として③式の両辺の虚部を取ると、$(E_0+\omega-H)\mathrm{Im}[\tilde{\Psi}^{\mathrm{opt}}]=0$ ⑥
より 1 次摂動波動関数$\tilde{\Psi}^{\mathrm{opt}}$の虚部は$E=E_0+\omega$ の連続正則解である。つまり Hylleraas 型汎関数に CBF を使い、その表式に含まれる線形・非線形の複素数パラメータを最適化することは、振動数依存分極率を非線形複素数パラメータについて最適化することであり、その最適化された虚部は全断面積を、また線形方程式の解は、その虚部に正則連続解を含む 1 次摂動波動関数$\Psi^{(1)}$を高精度に与えると期待できる。このように CBF 法を用いた従来の光イオン化断面積の計算は、driven 型シュレーディンガー方程式を、変分的に解く基底関数展開法であると解釈できる。

以上の解釈の妥当性を調べるため、単純な水素原子の問題に応用し、正則・非正則クーロン関数の複素スレーター型軌道(cSTO)の組による変分的な展開、および外向クーロン関数の複素ガウス型軌道（cGTO）の組による最小二乗展開という、二つの方法で数値検証を行った。

(2) $E=E_0+\omega$の終状態は、色々な意味で縮重している。②式の全断面積の値は終状態のユニタリー変換に依存しないため境界条件を特段意識する必要はないが、光イオン化微分断面積や終状態のイオン状態を区別する部分断面積の議論には、その境界条件が本質的である。この N 電子系連続終状態が満たす境界条件は、通常(-)と記される内向波型である。特に漸近領域において、生成物の N-1 電子系束縛状態の電子準位を量子数 n、付随する連続波動関数のうち角度部分が球面調和関数$Y_{l,m}(\theta,\varphi)$のものを$|\Phi_{n,lm}{}^{(-)}(E)>$と記し、この状態の完全性の関係式

$$\delta(E-H)=\sum_{nlm}|\Phi_{nlm}{}^{(-)}(E)><\Phi_{nlm}{}^{(-)}(E)| \qquad ⑦$$

を②式に代入すると、全断面積は次のように、終状態の各量子数で特徴付けた電気的遷移

$$\sigma(\omega)=\frac{4\pi^2\omega}{c}\sum_{nlm}<\Phi_0|\mu|\Phi_{nlm}{}^{(-)}(E_0+\omega)><\Phi_{nlm}{}^{(-)}(E_0+\omega)|\mu|\Phi_0> \qquad ⑧$$

双極子の二乗和として表記される。この N 電子連続終状態$|\Phi_{n,lm}{}^{(-)}(E)>$は、漸近領域において、N-1 電子系イオン状態 n の$\Psi_{N-1,n}$、およびその角度部分が$Y_{l,m}(\theta,\varphi)$である 1 電子連続波動関数$\varphi_{k,lm}$の積を反対称化した $|\Phi^0_{n,lm}(E)>=\mathcal{A}\{\Psi_{N-1,n}\varphi_{k,lm}\}$ と等しく、後者は$H^0|\Phi^0_{n,lm}(E)>=E|\Phi^0_{n,lm}(E)>$ を満たす。ここでH^0は、N 電子系 Full-Hamiltonian Hから相互作用ポテンシャルVを除いた 0 次 Hamiltonian $H^0=H-V$ $(V(r)\to 0\,(r\to\infty))$ である。これら二つの波動関数が、Green 関数$G^{(-)}(E)$を使った次の Lippmann-Schwinger 方程式

$$|\Phi_{n,lm}{}^{(-)}(E)>=|\Phi^0_{n,lm}>+G^{(-)}(E)V|\Phi^0_{n,lm}> \qquad ⑨$$

で関係づけられることから、⑧式中の遷移モーメントは（以下の表記でエネルギー(E)を省略）

$$<\Phi_{nlm}{}^{(-)}|\mu|\Phi_0>=<\Phi^0_{nlm}|\mu|\Phi_0>+<\Phi^0_{nlm}|VG^{(+)}\mu\Phi_0> \qquad ⑩$$

と二つの遷移行列の和で表現される。この表式は 2 ポテンシャル公式とよばれ、例えば Band と Freed によって分子の光解離の計算に用いられた。さらに Hylleraas 型汎関数の変分解$\tilde{\Psi}^{\mathrm{opt}}$に含まれる G として$G^{(+)}$を使った解が、丁度⑩式右辺第 2 項に含まれる $G^{(+)}\mu\Phi_0$である。つまり、⑩式には、1 電子関数 $\varphi_{k,lm}$、および全断面積の計算で評価してきた一次摂動波動関数$\tilde{\Psi}^{\mathrm{opt}}=G^{(+)}\mu\Phi_0$の 2 種類の連続波動関数が含まれる。(1)で議論したように、いずれも Hylleraas 型汎関数を用いて変分的に、あるいは最小自乗法を用いて最適化して評価出来る。以上の解釈と計算手法の妥当性を調べるために H_2 の光電子の角度依存性を調べた。

(3) 重原子の内殻では相対論効果が顕著で、その 1 電子軌道の大成分と小成分が異なる軌道角運動量とパリティを持つことから、その光電子角度分布に顕著な相対論効果が現れる可能性がある。またそのイオン化に必要な短波長の電磁波との相互作用に双極近似は使えない。そこで(1)で定式化した CBF 法を相対論の枠組みに拡張し、ウラン原子の K 殻に対応する、Z=92 の水素様 1 電子原子に応用し、その有効性を調べた。(1)の非相対論との大きな違いは、Dirac ハミルトニアンを用いること、波動関数が 4 成分になること、③式で$\mu\Phi_0$の代わりに$\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{A}\Phi_0$を用いること

などである。ここで$\boldsymbol{\alpha}$は、大成分と小成分を Pauli 行列で結ぶ４×４行列で、電磁場のベクトルポテンシャル$\boldsymbol{A} = \mathbf{u}_q \exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})$ は部分波展開して用いた。CBF 法による$\Psi^{(1)}$は、漸近領域の情報を直接与えないため、適当な接続点でその虚部を 4 次 Runge-Kutta 解に接続し、同次微分方程式の解として漸近領域まで数値積分し、位相シフトを評価した。基底関数としては、Φ_0に even-tempered 実数 STO を、また$\Psi^{(1)}$に even-tempered 実数 STO と複素 STO を用いた。

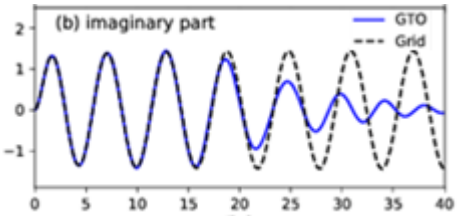
４．研究成果

(1) 表１は水素原子 1s→*k*p チャンネルの振動数依存分極率を、角波数 *k*(au)ごとに、５個の 2p-cSTO に含まれる複素数軌道指数を (1)の方法で最適化して得た遷移モーメント(au)の値を示したもので、以前の R 行列や対数微分の方法に比べても、非常に高精度である。他の角運動量チャンネルでも同様であった。

表１ 水素原子 1s→*k*p チャンネルの遷移モーメント(au). ５個の 2p-cSTO の軌道指数を同時に最適化。

k	Optimized five 2p-cSTOs	R-matrix propagation	Log derivative method	Exact
0.4472	0.648160582009	0.6483	0.64684	0.648160582215
0.6325	0.577908711459	0.5777	0.57729	0.577908711392
0.7746	0.49707564166	0.4971	0.49673	0.497075641693
0.8944	0.426861644392	0.4267	0.42667	0.426861644400
1.0000	0.368801474387	0.3690	0.36865	0.368801474361
1.0954	0.321180965257	0.3211	0.32109	0.321180965241
1.1832	0.281977188329	0.2819	0.28190	0.281977188340
1.2649	0.249455771109	0.2495	0.24940	0.249455771134

数個の cGTO を使って同様の最適化を試みたが、その収束半径は非常に小さいようで収束した結果は得られなかった。特に分子の計算では cGTO の使用は避けられない。そこで別の方法として解析的クーロン外向波を数個の cGTO の組で最小二乗展開し、先に説明した２ポテンシャル表式を用い、RPA 法を使った水素分子の分子固定光電子角度分布の計算を行った。



r/Bohr

図１．*k*=1 (au) の *k*p クーロン外向波に対して５個の 2p-cGTO を最小二乗フィットし、15 個の even-tempered 実数 2p-GTO を追加して評価した一次摂動波動関数の虚部（青線）と対応する数値解（破線）。

図１に、*k*=1 (au) の 1s→*k*p チャンネルに対して、最小二乗展開によって決定した５個の 2p-cGTO に、even-tempered な１５個の実数 2p-GTO を追加して評価した一次摂動波動関数の虚部を、その数値解と比較した。*r*=15～20 (Bohr) 程度まで、クーロン関数を忠実に表現する。

(2) 図２に RPA 法による分子固定光電子角度分布の光子エネルギー依存性を Polar plot として示す。特に平行配置では顕著なエネルギー依存性を示すが、この結果は、終状態の $k\sigma_u$ 軌道の主成分が、ω=21.3eV では赤色の p 波から、ω=72.6eV では緑色の f 波に変化することに起因するもので、文献[3]とよく対応し、以前の Cherepkov らの解析を支持する結果である。以上、CBF 法の適用により、実数 GTO 基底関数に数個の cGTO を追加することにより光イオン化微分断面積までの計算可能性を示し、今後の発展の足がかりを築いた。

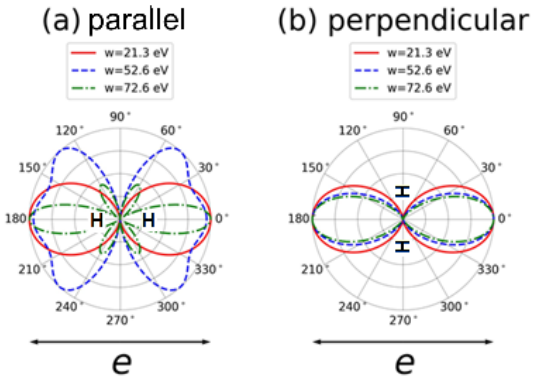


図２． RPA 法による水素分子の分子固定光電子角度分布の ω (eV) (光子エネルギー) 依存性。(a)， (b) は分子軸が下側 e (振動電場の分極方向) に対してそれぞれ、平行、垂直に配向している。

(3) 図 3 に Z=92 の水素様原子の $\omega = 279$ keVにおける$\Psi^{(1)}$の動径波動関数$\psi^{(1)}$を示した。基底関数展開による$\mathrm{Im}\psi^{(1)}$(Im CBF)は、数値解(Exact)と原子領域で良く一致している。また、小成分の振幅は大成分の 30% にもなる。

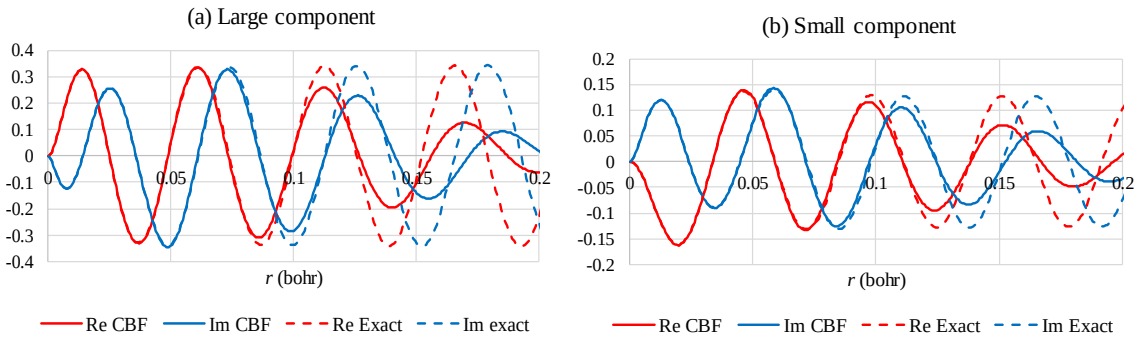


図3. U^{91+} に対応するZ=92の水素様原子の$\omega = 279$ keV における$1s_{1/2} \rightarrow kp_{3/2}$ チャネルの一次摂動動径関数 (a) 大成分、(b) 小成分。

図 4 は、$\omega = 279$ keVにおける U の K 殻光イオン化微分断面積を示すが、我々の値(This work)は、中性 U 原子の実験値[4]、Pratt らによる計算値[5]ともよく一致した。微分断面積の極大が前方（光の伝搬方向）にシフトする傾向は、この高エネルギーでは、光子から光電子への運動量移行が顕著になるためで、古典的には磁気的な Lorentz 力の影響と解釈できるが、この振る舞いは、双極近似を用いた非相対論(Nonrelativistic)では表現できない。その他、電磁場の多重極効果、小成分波動関数の重要性を議論した。相対論の枠内でも CBF 法の有効性が示され、今後の展開が期待される。

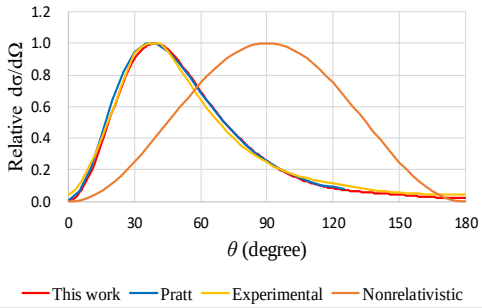


図 4. 光子エネルギー$\omega = 279$ keV における U 原子の K shell 微分断面積。U^{91+}の他の計算値[5]、および中性 U 原子の実験値（相対値）[4] の角度分布ともよく一致した。

その他、ICN 分子の$\tilde{A}$バンド光分解反応に含まれる量子干渉効果を詳細に解析し、1980 年代から未解明のままであった、生成物 CN の回転準位 N の微細構造準位分布比 $P(F_1=N+1/2)/P(F_2=N-1/2)$が, N とともに振動する原因、および従来その遷移モーメントは垂直成分のみであるとされた 5A'($^1\Pi_1$) 励起状態が顕著な非コンドン効果のために、全体の 15-20%程度もの平行成分の吸収強度を持つこと、その平行成分が生成物 CN の空間配向を正確に評価するために重要であること、などを明らかにした。希土類(Ln^{3+})と COT^{2-}配位子からなる $Ln(COT)_2^-$錯体の光電子スペクトルを解析し、Ln の 4f 電子と配位子との交換相互作用の重要性を明確にした。

また研究分担者の岩田は、分子間相互作用理論、局所射影分子軌道摂動論を構築し、並列計算プログラムを開発した。多数の分子からなる相互作用系における非加成性の解析方法を開発した。水クラスターにおいて、隣接分子からの影響を含めた指標を新たに導入し、クラスターの安定性、水素結合の強度に対する第 2、第 3 隣接分子の寄与を定量的に表現することに成功した。

参考文献 [1] C. W. McCurdy *et al.*, *Phys. Rev.*A **35**, 657 (1987). [2] I. A. Ivanov *et al.*, *Phys. Rev. A* **69** 023407 (2004). [3] M. Brosolo *et.al.*, *Chem. Phys.* **159**, 185 (1992). [4] Z. Sujkowski, *Ark. Fys.***20**, 269 (1961). [5] R. H. Pratt *et al.*, *Phys. Rev.* **134**, A898 (1964).

５．主な発表論文等

〔雑誌論文〕　計9件（うち査読付論文　9件／うち国際共著　2件／うちオープンアクセス　4件）

１．著者名 Tapas K. Ghosh, Satoshi Yabushita	４．巻 9
２．論文標題 Ab initio investigation on the IOOBr isomers and reaction pathways of the IO+BrO Reaction	５．発行年 2019年
３．雑誌名 International Journal of Research in Chemistry and Environment (IJRCE)	６．最初と最後の頁 1-9
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

１．著者名 Furuhashi Naoto、Yabushita Satoshi	４．巻 -
２．論文標題 K-shell photoionization cross sections of one-electron uranium cation by relativistic complex basis function method	５．発行年 2020年
３．雑誌名 Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics	６．最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） DOI: 10.1088/1361-6455/ab7fc0	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 －

１．著者名 Kashimura Tatsuhiko、Ikezaki Tomoya、Ohta Yusuke、Yabushita Satoshi	４．巻 40
２．論文標題 Potential energy surfaces and nonadiabatic transitions in the asymptotic regions of ICN photodissociation to study the interference effects in the F1 and F2 spin‐rotation levels of the CN products	５．発行年 2018年
３．雑誌名 Journal of Computational Chemistry	６．最初と最後の頁 482-499
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） DOI: 10.1002/jcc.25736	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 －

１．著者名 Kashimura Tatsuhiko、Yabushita Satoshi	４．巻 123
２．論文標題 Importance of the Parallel Component of the Transition Moments to the 1Π1 (5A') and 3Π1 (3A') Excited States of ICN in the A-Band Photodissociation	５．発行年 2019年
３．雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	６．最初と最後の頁 4000～4013
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） DOI:10.1021/acs.jpca.9b01127	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 －

1．著者名 Matsuzaki Rei、Yabushita Satoshi	4．巻 38
2．論文標題 Calculation of photoionization differential cross sections using complex Gauss-type orbitals	5．発行年 2017年
3．雑誌名 Journal of Computational Chemistry	6．最初と最後の頁 2030-2040
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） DOI: 10.1002/jcc.24848	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 －

1．著者名 Erika Nakajo, Tomohide Masuda, and Satoshi Yabushita	4．巻 120
2．論文標題 Theoretical Study on the Photoelectron Spectra of Ln(COT)2-: Lanthanide Dependence of the Metal-Ligand Interaction	5．発行年 2016年
3．雑誌名 Journal of Physical Chemistry, A	6．最初と最後の頁 9529-9544
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1021/acs.jpca.6b10930	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 －

1．著者名 Rei Matsuzaki, Satoshi Yabushita	4．巻 38
2．論文標題 Optimization of complex Slater-type functions with analytic derivative methods for describing photoionization differential cross sections	5．発行年 2017年
3．雑誌名 Journal of Computational Chemistry	6．最初と最後の頁 910-925
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1002/jcc.24766	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 －

1．著者名 Nakajo Erika、Yabushita Satoshi	4．巻 678
2．論文標題 Theoretical study on the anion photoelectron spectra of Ln(COT) 2- including the spin-orbit effects	5．発行年 2017年
3．雑誌名 Chemical Physics Letters	6．最初と最後の頁 259～264
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.cplett.2017.04.049	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 －

1．著者名 Suehiro Iwata, Dai Akase, Misako Aida, Sotiris Xantheas	4．巻 18
2．論文標題 Electronic origin of the dependence of hydrogen bond strengths on nearest-neighbor and next-nearest-neighbor-hydrogen bonds in polyhedral water clusters, (H2O)n, n=8, 20 and 24.	5．発行年 2016年
3．雑誌名 PCCP	6．最初と最後の頁 19746-19756
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1039/c6cp02487d	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 該当する

〔学会発表〕　計45件（うち招待講演　9件／うち国際学会　13件）

1．発表者名 古橋直人，藪下聡
2．発表標題 重原子の内殻からの光電子角度分布に関する複素基底関数法を用いた理論研究
3．学会等名 第13回分子科学討論会
4．発表年 2019年

1．発表者名 藪下　聡，鹿志村達彦
2．発表標題 ICN分子の遷移双極子モーメントの非コンドン効果：実験結果の再解釈
3．学会等名 第13回分子科学討論会
4．発表年 2019年

1．発表者名 久賀谷有人，露木雅文，藪下聡
2．発表標題 線形応答関数を利用したROH類分子のOH伸縮振動における双極子モーメント関数の核座標微分量の理論解析
3．学会等名 第13回分子科学討論会
4．発表年 2019年

１．発表者名
Satoshi Yabushita, Tatsuhiko Kashimura

２．発表標題
Quantum Interference Effects in ICN photodissociation reaction

３．学会等名
Ninth conference of the Asia-Pacific Associaton of Theoretical and Computational Chemists (APATCC2019)（招待講演）（国際学会）

４．発表年
2019年

１．発表者名
Naoto Furuhashi, Satoshi Yabushita

２．発表標題
Relativistic effects in the K-shell photoionization differential cross sections of heavy elements with the complex basis function method

３．学会等名
Ninth conference of the Asia-Pacific Associaton of Theoretical and Computational Chemists (APATCC2019)（国際学会）

４．発表年
2019年

１．発表者名
Satoshi Yabushita

２．発表標題
Theoretical studies of photon-molecule interactions

３．学会等名
Taiwan-Japan Workshop on Theoretical Chemistry（招待講演）（国際学会）

４．発表年
2019年

１．発表者名
Iwata Suehiro

２．発表標題
Strictly Local MO for Weak Molecular Interaction

３．学会等名
Configuration Interaction: Computational Chemistry in Sao Paulo（招待講演）（国際学会）

４．発表年
2019年

１．発表者名
古川千紗、石橋千晶、岩田末廣、松澤秀則

２．発表標題
Cube型Na+(H2O)7とCl-(H2O)7クラスター中の水-水間水素結合に対するイオンの影響

３．学会等名
第13回分子科学討論会

４．発表年
2019年

１．発表者名
狩野祐来、岩田末廣、松澤秀則

２．発表標題
電子相関項に対するcounterpoise法の欠陥の検証：希ガスクラスターの場合

３．学会等名
第13回分子科学討論会

４．発表年
2019年

１．発表者名
Keigo Suzuki, Konato Kuroki, Zenitsubo Narumi, Yoshinobu Gondoh, Tomohiro Hashimoto, Suehiro Iwata

２．発表標題
Theoretical study on NaCl-water clusters: NaCl(H2O)n (n=1, 8)

３．学会等名
第13回分子科学討論会

４．発表年
2019年

１．発表者名
岩田末廣

２．発表標題
1．BSSEの原因：OBIとCBI　2．第2、第3隣接分子と水素結合の強さ

３．学会等名
IQCE研究会（招待講演）

４．発表年
2019年

１．発表者名
Iwata Suehiro

２．発表標題
Perturbation Theory based on Absolutely Localized MO for Weak Molecular Interaction

３．学会等名
Workshop on computational molecular science（招待講演）（国際学会）

４．発表年
2019年

１．発表者名
鹿志村達彦,池崎智哉,太田悠介，藪下　聡

２．発表標題
ICN分子のAバンド光解離反応における量子干渉効果

３．学会等名
第12回分子科学討論会

４．発表年
2018年

１．発表者名
露木雅文，久賀谷有人、金森英人，藪下聡

２．発表標題
ローカルモード描像と線形応答関数による直鎖ポリイン分子のπg+πu結合音の吸収強度の理論解析

３．学会等名
第12回分子科学討論会

４．発表年
2018年

１．発表者名
古舘駿貴，久賀谷有人，藪下聡

２．発表標題
水素結合系ROH…YのOH伸縮振動に伴う双極子モーメント関数の向きの変化に関する理論的研究

３．学会等名
日本化学会第99春季年会

４．発表年
2019年

１．発表者名
Satoshi Yabushita, Tatsuhiko Kashimura, Takahide Matsuoka

２．発表標題
Theoretical study of quantum interference effects in photodissociation reactions

３．学会等名
7th JCS SYMPOSIUM（国際学会）

４．発表年
2018年

１．発表者名
古舘駿貴，森本涼介，藪下聡

２．発表標題
水素結合系ＸＨ…Ｙにおけるｘｈ伸縮振動の基音及び倍音吸収強度に関する理論的研究

３．学会等名
第12回分子科学討論会

４．発表年
2018年

１．発表者名
久賀谷有人，露木雅文，藪下聡

２．発表標題
ROH類分子のOH伸縮振動における双極子モーメント関数と その核座標微分量の理論解析

３．学会等名
第12回分子科学討論会

４．発表年
2018年

１．発表者名
古橋直人，藪下聡

２．発表標題
相対論効果を考慮した複素基底関数法による光イオン化断面積の理論計算

３．学会等名
第12回分子科学討論会

４．発表年
2018年

１．発表者名
Masafumi Tsuyuki, Shunki Furudate, Yuto Kugaya, Satoshi Yabushita,

２．発表標題
Graphical and cDFT approaches to the study of fundamental and overtone absorption intensities of some OH stretching vibrations

３．学会等名
59th Sanibel Symposium（国際学会）

４．発表年
2019年

１．発表者名
Suehiro Iwata

２．発表標題
Hydrogen Bonds in Water Clusters (H2O)8 and (H2O)12: Importance of the Second and Third Neighbor Hydrogen Bonds

３．学会等名
Energy Landscape 2018, Hotel Elite City, Kalamata, Greece（招待講演）（国際学会）

４．発表年
2018年

１．発表者名
赤瀬大，相田美砂子、大野公一，岩田末廣

２．発表標題
水分子間水素結合に対する第2隣接水素結合の影響解析

３．学会等名
第12回分子科学討論会、福岡国際会議場、福岡

４．発表年
2018年

１．発表者名
古川千紗、岩田末廣、松澤秀則

２．発表標題
水-;水間の水素結合鎖に対するイオンの影響：Na+(H2O)6

３．学会等名
第12回分子科学討論会、福岡国際会議場、福岡

４．発表年
2018年

１．発表者名
小澤史章，岩田末廣，松澤秀則

２．発表標題
Prism型Br-(H2O)5に対するH2O付加の影響に関する理論研究

３．学会等名
第12回分子科学討論会、福岡国際会議場、福岡

４．発表年
2018年

１．発表者名
斉藤暖人，中尾一心，権藤好信，橋本智裕，岩田末廣

２．発表標題
水素と水のクラスターに関する理論的研究

３．学会等名
第12回分子科学討論会、福岡国際会議場、福岡

４．発表年
2018年

１．発表者名
Keigo Suzuki, Konato Kuroki, Zenitsubo Narumi, Yoshinobu Gondoh, Tomohiro Hashimoto, Suehiro Iwata

２．発表標題
Theoretical study on NaCl-water clusters: NaCl(H2O)n (n=1-8)

３．学会等名
日本化学会第99春期年会、岡本キャンパス、甲南大学、神戸

４．発表年
2019年

１．発表者名
Satoshi Yabushita

２．発表標題
Hypersensitive transitions and metal-ligand interactions in lanthanide complexes

３．学会等名
International Symposium for Theoretical Design of Materials with Innovative Functions Based on Element Strategy and Relativistic Electronic Theory, Tokyo Metropolitan University, Hachioji, Tokyo.（招待講演）（国際学会）

４．発表年
2017年

１．発表者名
Satoshi Yabushita

２．発表標題
Photoionization Cross Sections and Resonance State Energies with Optimized Complex Basis Functions

３．学会等名
APCTCC8 (the eighth Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry),IIT Bombay, Mumbai, India（招待講演）（国際学会）

４．発表年
2017年

１．発表者名
松崎黎、藪下聡

２．発表標題
複素基底関数法による光イオン化微分断面積の計算

３．学会等名
第20回理論化学討論会

４．発表年
2017年

１．発表者名
中條恵理華，増田友秀，藪下聡

２．発表標題
Ln(COT)2- の負イオン光電子スペクトルに関する理論的研究

３．学会等名
第20回理論化学討論会

４．発表年
2017年

１．発表者名
Tatsuhiko Kashimura, Tomoya Ikezaki, Yusuke Ohta, and Satoshi Yabushita

２．発表標題
Theoretical study on the non-statistical F1/F2 rotational fine structure level distribution in the A-band ICN photodissociation

３．学会等名
34th International Symposium on Free Radicals, Aug27-Sep 1,2017, Hayama, Japan（国際学会）

４．発表年
2017年

１．発表者名
藪下聡

２．発表標題
電子状態と分子動力学の接点

３．学会等名
第11回分子科学討論会（招待講演）

４．発表年
2017年

１．発表者名
斉藤暖人、雪野真慧、権藤好信、橋本智裕、岩田末廣

２．発表標題
水素と水のクラスターに関する理論的研究

３．学会等名
第11回 分子科学討論会

４．発表年
2017年

１．発表者名
古川千紗、石橋千晶、岩田末廣、松澤秀則

２．発表標題
ナトリウムイオン－水クラスター及び塩化物イオン－水クラスター中の水－水間の水素結合の強さに関するイオンの影響

３．学会等名
第11回 分子科学討論会

４．発表年
2017年

１．発表者名
T. Kashimura, T. Ikezaki, Y. Ohta, S. Yabushita

２．発表標題
Non-statistical F1/F2 rotational distribution of the CN fragments derived from the A-band photodissociation of ICN

３．学会等名
32nd symposium on chemical kinetics and dynamics（国際学会）

４．発表年
2016年

１．発表者名
中條恵理華，増田友秀，藪下聡

２．発表標題
Ln(COT)2の負イオン光電子スペクトルに関する理論的研究

３．学会等名
第10回分子科学討論会

４．発表年
2016年

１．発表者名
松崎黎、藪下聡

２．発表標題
複素GTO基底関数を用いた光イオン化微分断面積の計算手法の検討

３．学会等名
第10回分子科学討論会

４．発表年
2016年

１．発表者名
伊東 容，渡邊輝比古，藪下 聡

２．発表標題
複素基底関数法と自由完員関数法を用いた水素分子自動イオン化状態の共鳴位置と幅の理論計算

３．学会等名
第10回分子科学討論会

４．発表年
2016年

１．発表者名
保坂遼、藪下聡

２．発表標題
OH基の振動に伴う酸とアルコールの分子内電荷分布の変化

３．学会等名
第10回分子科学討論会

４．発表年
2016年

１．発表者名
Satoshi Yabushita1, Matsuoka Takahide1, and Tatsuhiko Kashimura1

２．発表標題
Quantum Interference Effects in Simple Photodissociation Reactions

３．学会等名
Stereodynamics 2016（国際学会）

４．発表年
2016年

１．発表者名
井上　知大、藪下　聡

２．発表標題
I2分子の低励起状態への遷移双極子モーメントと吸収スペクトルの理論計算

３．学会等名
日本化学会 第97春季年会

４．発表年
2017年

１．発表者名
鹿志村 達彦、池崎 智哉、太田悠介、藪下聡

２．発表標題
ICN分子のAバンド光解離生成物CNの回転微細構造準位F1/F2の非統計的分布に関する理論的研究

３．学会等名
日本化学会 第97春季年会

４．発表年
2017年

１．発表者名
赤瀬大、相田美砂子、大野公一、岩田末廣

２．発表標題
水クラスター(H2O)８と(H2O)１２中の水素結合ネットワーク: 隣の隣の水分子からの影響

３．学会等名
第10回分子科学討論会

４．発表年
2016年

１．発表者名
石橋千晶、 岩田末廣、 松澤秀則

２．発表標題
ハロゲン化物イオン-水クラスター中の水-水間水素結合の強さに対する負イオンの影響

３．学会等名
第10回分子科学討論会

４．発表年
2016年

１．発表者名
赤瀬大、相田美砂子、岩田末廣

２．発表標題
LPMO PT によるFused cube 水12 量体の解析：電荷移動項と水素結合ネットワークの相関

３．学会等名
第10回分子科学討論会

４．発表年
2016年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕
慶應義塾 研究者情報データベース
https://kris.keio.ac.jp/html/100011672_ja.htmlk=%E8%97%AA%E4%B8%8B%E8%81%A1#item_koara_2

出 版 (Publication List, Review List)
http://home.n08.itscom.net/iwatasue/

６．研究組織

	氏名 （ローマ字氏名） （研究者番号）	所属研究機関・部局・職 （機関番号）	備考
研究分担者	岩田　末廣 (Iwata Suehiro) (20087505)	慶應義塾大学・理工学部（矢上）・訪問教授 (32612)	