

Ⅲ. 環境・安全分野の研究開発終了報告書

1. 研究開発課題名 大気環境分子の分光・化学反応データ計算システム

1.1 代表研究者 大学評価・学位授与機構 教授 岩田 末廣

1.2 概要

対流圏と成層圏の化学素過程をになう分子の分光学的諸量と化学反応過程に関連する諸量を量子化学の手法によって計算するシステムを構築し web で公開すると共に、かつ重要な系をターゲットに選択して研究期間中に実験グループや大気シミュレーション研究者に計算結果も提供した。

1.3 研究開発実施内容

各研究グループで課題を絞り込み、研究開発を進展させた。松見グループ(実験)及びこのグループを通じて広い大気環境化学(科学)研究者との交流も進み、研究面でのネットワーク作りができた。大気科学研究者に研究成果を広く利用し、その意見を研究開発に反映するために、web サイトを設計し、構築した。各研究グループの概要は次の通りである。

(1) 「大気環境分子の構造・分光・反応計算システムの設計・開発・応用」(総括担当:岩田末廣)

大気環境分子の分光・化学反応データ計算システム全体像の設計および研究ターゲット系の設定と研究遂行方法を探索した。岡機構・計算科学研究センターと協力して、情報を既存のデータや新規な計算から容易に取り出せるオンデマンドシステムを設計し、その試作システムを構築し、立ち上げた。窒素分子、一酸化炭素、OH ラジカルのような大気基本分子の精密計算によるデータベース作成し、また、OH ラジカルと生物起源揮発性炭化水素の化学反応過程を解明した。さらに、国際協力、特に PNNL(USA)の EMSL(環境分子科学研究所)との共同研究・情報交換を進めた。

(2) 「環境分子の化学反応速度の研究」(総括担当:青柳睦)

大気化学反応に関する量子ダイナミクスの研究システムの開発を進めた。多原子分子の系を正確に記述するポテンシャルエネルギー曲面を計算する電子状態理論と、その曲面上での量子論的な取り扱いの両面から、プログラム開発を進め、3 原子系に応用した。また、web を通じた公開用インターフェイスの開発も進めた。

(3) 「大気環境分子の静的および動的特性の理論研究およびその解析システムの開発」(総括担当: 藪下聡)

様々な大気分子の静的あるいは動的特性に対して詳細な検討を行うために、長寿命の不安定中間体や光イオン化過程用の基底関数およびその計算プログラムの開発を行った。スピン軌道相互作用やコリオリ相互作用を理論的に調べるためのプログラムを開発し、Cl₂や O₂分子に応用し、光吸収過程や光解離過程に関する詳細な理解を得た。またオゾン層破壊に対するヨウ素原子の寄与を考察した。大気分子の高い振動準位まで定量的に調べるため、多次元高振動状態

用基底を用いたプログラムを開発し、高次倍音スペクトルに応用した。

(4) 「不安定環境分子の構造・分光」(総括担当:橋本健朗)

SMILES プロジェクト探索予定分子の振動回転遷移計算システムを設計・開発し、更に回転常数などから分子(とその錯体)を web 上で検索するシステムを設計・作成した。また、大気環境に存在が予想される分子錯体が温暖化に寄与する度合いを検討するために錯体の赤外吸収強度の計算を系統的に進めた。水が関与するオゾン消滅化学過程の探索と反応機構も調べた。また、松見らと共同して $O(^1D) + O_2(X^3\Sigma^-)$ 衝突過程における電子脱励起過程の研究を進めた。

(5) 「環境分子反応系の探索研究」(総括担当:松見豊)

計算対象分子の探索のために、大気化学研究の現状を把握して、「大気環境分子の分光・化学反応データ計算システム」の研究対象に適切な具体的大気分子・反応系を抽出を行い、また、「大気環境分子の分光・化学反応データ計算システム」で計算した結果を実証するために実際のラボ実験を行った。

1.4 題目別実施内容

(1) 研究開発題目 1 「大気環境分子の構造・分光・反応計算システムの設計・開発・応用」

(総括担当:岩田末廣)

(1-a) 環境分子の構造・分光計算システムの設計・開発。(岩田、天能、池上)

- ・電子構造計算理論の開拓。分子の構造・分光・反応を理論的に研究するには、多電子理論をさらに発展させなければならない。電子相関理論とその解析法を研究し、さらに、分子間相互作用エネルギーの精密計算を可能にする新しい理論的手法を開発した。
- ・多原子分子 Franck-Condon 因子計算。多原子分子の電子遷移に伴う振動構造を調和振動子近似の範囲で厳密に計算するプログラムを整備した。
- ・電子遷移などに伴う離散準位と連続準位を同等に取り扱う計算理論を開発し、窒素分子イオンのスペクトル解析を行った。

(1-b) 環境中の分子クラスター計算法の開発と応用。(岩田、天能、鶴沢、佐藤、陳、橋本智裕)

- ・水クラスターと金属の錯体に新奇な化学結合を見だし、電子-水素結合と命名した。水素結合系の負イオンに一般的な結合と期待される。
- ・電子-水素結合を持つ系の電子遷移を計算する方法として、箱形ポテンシャルの波動関数を基底関数に加えた混合基底関数系に必要な分子積分計算方法を開発した。
- ・イオン圏と成層圏の境界で進行しているとされている NO^+ と水クラスターの反応に第 3 の分子が果たす役割を理論的に検討した。
- ・分子クラスターの熱的性質を調べる方法として、モンテカルロ計算と分子軌道計算を結合させ、水クラスターの構造変化を追跡した。

(1-c) 大気主成分 2 原子分子とそのイオンの理論分子分光学。(岩田、池上、岡田)

- ・CO 分子のポテンシャルエネルギー曲線と双極子モーメント関数の精密計算を行い、倍音、3 倍音領域の振動回転スペクトルの温度変化を精密に計算し、人工衛星上の分光器で観測され

た太陽上の CO 分子のスペクトルと比較し、太陽の気体の温度を見積もった。この研究によって、リモートセンシングの基礎データを量子化学計算が提供できることを実証した。

- ・ 同様に、 N_2^+ の励起状態間の振動回転電子遷移を計算し、オーロラ中の N_2^+ 分子は振動エネルギーと回転エネルギーが熱平衡になっていないこと、及びその温度分布が一日の間に変化することを示した。

(1-d) OH ラジカルと大気中の有機化合物の反応追跡計算システム。(岩田、橋本智裕、Salai Cheettu Ammal)

- ・ OH ラジカルと飽和炭化水素(メタン、エタン、プロパン)の反応経路を理論的に研究し、反応速度を見積もった。
- ・ OH ラジカルとイソプレンとの反応を理論的に追跡し、最終的に安定な酸化物に至るまでに、オゾンや NOx との反応や生成に関与する可能性を網羅的に解析した。
- ・ 反応経路追跡と共に遷移状態理論による反応速度の見積もりも行い、その適用性も検討した。

(1-e) 大気環境分子の分光・化学反応計算システムの開発 (岩田、青柳、橋本健朗、藪下、南部、菅原、三浦、橋本智裕、岡田)

大気中に存在する分子やその錯体の構造・分光・反応についての情報を既存のデータや新規な計算から容易に取り出せるオンデマンドシステムを設計し、その試作システムを構築し、立ち上げた。このシステムは、①分子分光解析計算システム、②化学反応解析システム、③構造予測オンデマンドシステムから構成されている。このシステムは、本プロジェクトで開発した有用なプログラムや手順(shell scripts など)を統合している。

(2) 研究開発題目 2 「環境分子の化学反応速度の研究」

(総括担当: 青柳睦)

(2-a) 三原子分子振動回転固有状態解析サブシステムの開発と HCP 分子への応用 (青柳・南部)

振動回転固有状態を数値的に解くために、コリオリ結合項まで含めた正確なハミルトニアンを決定し、解析プログラムを開発した。非経験的 MCSCF/MR-SDCI 法により HCP 分子の電子基底及び電子励起状態におけるポテンシャル曲面を決定し、これを基に正確な振動回転準位と強度を算出し、実験で得られていたスペクトルの帰属を行った。

- ・ ヤコビ座標系・振動回転ハミルトニアン行列の導出。高次のコリオリ結合項と慣性テンソルの遠心力歪項の導出を行った。角度方向にルジャンドル陪多項式関数を用いた表現行列の解析式を導いた。
- ・ 解析プログラムの開発。振動回転準位を解析する為のプログラムの開発を行った。励起準位の帰属を行うため、振動波動関数を 3 次元可視化コードを開発した。このプログラムを用い、HCP 分子の電子基底及び電子励起状態における振動回転準位を数値計算し、帰属を行った。

(2-b) 非断熱波束動力学計算システムの開発と 反応 $O(^1D) + HCl(^1\Sigma^+)$ への応用 (青柳・南部)

ClO_x ラジカル連鎖反応によるオゾン破壊プロセスにおいて、反応 $O(^1D) + HCl(^1\Sigma^+)$ の寄与を正しく評価する目的で、HCl が $O(^1D)$ と直接反応して $Cl + OH$ 及び $H + ClO$ を生じる 2 つの反

応経路について、反応のメカニズム、反応断面積、生成物内部量子状態分布、反応速度を理論的に解析する手法を開発し応用数値計算を行った。

- ・ 反応 $O(^1D)+HCl(^1\Sigma^+)$ の精密なポテンシャル超曲面の決定。4重基底関数(aug-cc-pvqz)を用いた状態平均 CASSCF/MR-SDCI 法により、 $O(^1D)+HCl(^1\Sigma^+)$ の電子基底及び励起状態に関する正確なポテンシャル超曲面の決定を行った。
- ・ ポテンシャル超曲面の解析形への変換するために、Shepard 法を改良した Moving Least Square 法を用い、(a) で得られたポテンシャル面の情報から解析関数に最適 Fit した。
- ・ 非断熱波束動力学計算のためプログラムを開発。透熱変換を行わずに、非断熱結合要素と断熱ポテンシャル超曲面の情報から非断熱波束動力学を解析するためのプログラムを開発した。分岐を含む2分子反応の反応フラックスを各生成物につき反応微分断面積、生成物内部量子状態分布を解析するための副プログラムを作成した。
- ・ 反応 $O(^1D)+HCl(^1\Sigma^+)$ への応用。HCl が $O(^1D)$ と直接反応して $Cl + OH$ 及び $H + ClO$ を生じる2つの反応経路について、反応のメカニズム、反応断面積、生成物内部量子状態分布、反応速度を数値的に解析し交差分子線実験及び、過去の半古典理論計算と比較・考察した。

(2-c) 直接 MCSCF-半古典軌道解析によるイオン分子反応の解析 (青柳・南部)

グローバルポテンシャルエネルギーの解析形を用いずに、動力学計算やスペクトルの計算においてポテンシャルエネルギー (及び核座標によるエネルギー微分係数) が必要になった時点でそれぞれの配座で必要な数値を直接求めることの出来るプログラムシステムを開発しイオン分子反応に応用した。

- ・ 状態平均 MCSCF 電子状態計算及びエネルギー勾配プログラムの開発。動力学計算に用いるポテンシャル面とその核座標に関するエネルギー勾配を効率よく求めるためのプログラムを開発した。電子励起状態の解析を行うため、次のステップである動力学計算の際に、前ステップにおける CI ベクトルとの最大重なりを考慮したコードを開発した。
- ・ Verlet 法による古典軌道解析プログラムの開発。シンプレクティック法による精度のよい、エネルギー勾配を各時間ステップで直接参照可能な古典軌道解析コードを開発した。
- ・ イオン分子反応の反応断面積、生成物内部状態分布の数値解析。解析的なポテンシャル関数を決定することが困難な4原子分子反応 $C+H_3^+ \rightarrow CH^++H_2$ に応用し、反応の全反応断面積、微分断面積、生成物内部状態分布を実験及び、過去の理論計算と比較しよい一致を得た。

(2-d) 硫化カルボニル(OCS)の紫外光解離反応の非断熱波束動力学解析 (青柳・南部・岡田)

硫化カルボニル(OCS)の紫外領域の光吸収(250 ~ 200nm)による $CO + S$ への解離過程の詳細を非断熱波束動力学法により理論的に解析し、CO分子の回転状態分布が bimodal となることを示した。

- ・ 非断熱過程を含む単分子光解離反応の波束動力学プログラムの開発。反応 $O(^1D)+HCl(^1\Sigma^+)$ 系へ応用した波束動力学プログラムを改良し、非断熱過程を含む単分子光解離反応に応用できる形に発展させた。
- ・ 断熱基底による非断熱動力学の応用計算。非断熱結合要素と断熱ポテンシャル超曲面の情報から、波束動力学計算によって OCS 分子の光解離反応を追跡した。光励起後、約 25fs で電子励起状態から電子基底状態への遷移が起こり、異なる内部回転分布を持つ CO 分子が生

成されることを見出した。

(2-e) Web インターフェイスを用いた分光定数解析と構造予測システムの開発（青柳・南部・岡田）

大気化学反応に関与する分子の分光データを理論的に解析・予測し結果を表示するため、表示端末に依存しない Web ブラウザからオンデマンドに操作可能なシステムを開発した。

- ・分光定数解析の実装。 クライアント側（通常は PC）の Java やマイクロソフト Active-X 環境において、二原子分子振動回転スペクトル及び分光定数を決定するためのプログラムを開発した。
- ・構造予測システムの開発。 電子状態計算に必要な分子構造や電荷、多重度などを Web ブラウザから入力する
- ・とサーバ上の電子状態プログラムが波動関数、安定構造や調和振動数など各種の分子物性値を計算し、それらの結果を再びブラウザ上に可視化表示する機能を開発した。

(3) 研究開発題目 3 「大気環境分子の静的および動的特性の理論研究およびその解析システムの開発」（総括担当: 藪下聡）

(3-a) 複素座標法に基づく共鳴状態用の複素基底関数と計算プログラムの開発と応用（藪下聡）

複素数軌道指数の ST0 基底関数を、実数軌道指数の GT0 で、あるいは複素数軌道指数の GT0 で展開し、新たな基底関数の作成を行った。

- ・アセチレン分子の光イオン化断面積を複素座標法で行い、13-16eV 付近の共鳴状態の帰属を行った。

θ トラジェクトリーの計算をさけるため、複素数軌道指数をエネルギー勾配法で最適化する方法の開発を行った。

(3-b) スピン軌道 CI 法の開発と、そのハロゲン化物や酸素分子への応用。（藪下聡）

- ・スピン依存 GUGA 法を用いて、時間反転対称性、二重点群を考慮したスピン軌道 CI プログラムの開発しコリオリ相互作用の計算プログラムの追加を行った。
- ・ Cl_2 の光分解生成物の $\text{Cl}(^3\text{P}_{3/2})$ と $\text{Cl}^*(^2\text{P}_{1/2})$ が生成する非断熱遷移の機構を調べ、分岐比、生成物の異方性、量子力学的干渉効果などの理論的検討を行った。
- ・ O_2 の Herzberg 帯の吸収強度を計算し、振動準位間の吸収強度はかなり定量的に得られた回転遷移強度には、多少の誤差があった。解離過程の非断熱性の検討を行った。

(3-c) $\text{IO}+\text{ClO}$ および $\text{IO}+\text{BrO}$ 反応機構に関する理論研究。（Tapas Kumar Ghosh）

- ・オゾン層破壊におけるヨウ素原子の寄与を調べるため、上記の反応の中間体、遷移状態、生成物の構造と反応熱を量子化学計算により求めた。実験的反応熱がわかっている場合については、かなり定量的な結果を得た。
- ・我々の量子化学計算と最近新たに得られた反応速度定数の実験的を比較することにより、オゾン層破壊におけるヨウ素原子の寄与は、以前 Solomon らが推定したほど大きくないことがわかった。

(3-d) 分子の振動・解離過程用の新基底関数系の探索と計算システムの作成。(菅原道彦)

- ・移動最小二乗近似法を基に、二・三次元用の汎用基底と計算システムの開発を行った。
- ・コヒーレントレーザーを用いた HOD の振動状態の制御問題への応用計算を行った。
- ・ニューラルネットワークにより波動関数を表現し、そのネットワークパラメータを遺伝的アルゴリズムで最適化し、振動状態を決定する計算法の開発を行った。
- ・開発された手法を、一次元調和振動子、モース型ポテンシャル、および二重井戸型ポテンシャルに適用し、励起状態固有関数を直接求めることに成功し、その有用性の確認を行った。

(3-e) ローカルモード (LM) 描像による高振動励起状態の理論計算。(藪下聡、菅原道彦)

- ・シスおよびトランス-ジクロロエチレンの CH 高次倍音振動スペクトルを、LM 描像による 1 次元振動計算により求め、その吸収強度のシス-トランス比の考察を行った。
- ・水分子のポテンシャルエネルギー及び双極子モーメントを ab initio 法により計算し、その高振動励起状態を LM 描像によって求め、理論と実験の一致が難しいとされる吸収強度においても比較的良い一致を得た。

(4) 研究開発題目 4 「不安定環境分子の構造・分光」(総括担当:橋本健朗)

(4-a) SMILES プロジェクト探索予定分子の回転準位計算システムの設計・開発 (橋本)

- 二原子分子について、振動励起による回転定数の変化を考慮した回転スペクトルシミュレーション用 JAVA アプリケーションを作成した。
- ・対称コマ分子について、剛体回転子近似下での回転スペクトルシミュレーション用 JAVA アプリケーションを作成した。
 - ・非対称コマ分子について、剛体回転子近似下でのエネルギー順位計算用 JAVA アプリケーションを作成した。

(4-b) 分光定数を指標とする大気環境分子錯体の構造予測システムの設計・開発 (橋本)

回転定数の実験的情報を手がかりに、2 分子錯体の構造を予測するシステムを開発した。

- ・1〜3 原子分子から構成される 2 分子錯体の構造を、対称性を考慮して 31 種類に分類した
- ・31 種類からユーザーが指定した候補配置で回転定数を網羅的に計算し、実験値を再現する構造を探索するシステムを JAVA 言語で開発した。
- ・アプレットを WWW ブラウザに実装し、インターネットからオンデマンドで利用できるようにした。

(4-c) 大気環境に存在が予測される分子錯体の安定性の理論的研究 (三浦、橋本、笠井)

地球の熱収支に小さくない寄与をしていると考えられながら、構造さえ分っていない O_2-H_2O 錯体を理論的に研究した。

- ・ポテンシャル面を多参照配置 CI 法により精密計算した。
- ・周期境界条件を持つ 1 次元ポテンシャルのシュレディンガー方程式を数値的に解くプログラムを開発した。
- ・ O_2-H_2O 錯体の内部回転を一次元モデル化し振動解析を行った。 C_{2v} 構造はポテンシャル極小ではないが、振動基底状態の最大確率構造であることを見出し、錯体形成に依る O_2 伸縮由来

の新たな赤外吸収バンドは出現しないと予測する事ができた。 計算で得た C_{2v} 構造は、回転定数の実験値をよく再現することを示した。

- ・アンモニウムラジカル アンモニア錯体の構造、電子状態、電子スペクトルを研究した。 MP2 法に依り NH_4 に NH_3 が 4 つまで結合した構造がえられ、この構造を用いて、MRSDCI 法により、電子スペクトルを計算し実験をよく再現することを示した。 不対電子の動径分布関数を計算し、アンモニア数の増加に伴い 1 中心リドベルグ様電子状態の性質が強まることを示した。 C_{2v} 構造はポテンシャル極小ではないが、振動基底状態の最大確率構造であることを見出し、錯体形成に依る新たな赤外吸収バンドは出現しないと予測した。
- ・分子中の電子分布のトポロジカルな性質を解析するプログラムを開発した。

(4-d) オゾン・水錯体のポテンシャル面と紫外吸収スペクトルの理論的研究 (三浦、橋本)

オゾンと水との錯体形成により、吸収バンドが移動するかを理論的に研究した。

- ・CASSCF 法によりポテンシャル面を計算し、安定構造を求めた。 その結果、錯体形成により、約 1eV 安定化することが分った。
- ・MRCI 法で紫外スペクトルを計算し、錯体を形成してもハートレー帯に対応するバンドはほとんど変化しないことを示した。

(4-e) $O(^1D) + O_2(X^3\Sigma^-)$ 衝突過程における電子脱励起過程の研究 (三浦、橋本)

成層圏における O_3 や N_2O の光解離で生じる $O(^1D)$ の電子脱励起過程を理論的に研究した。

- ・MRSDCI 法により直線型 O_2-O の三重項状態のポテンシャル曲線を精密計算し、 O_2-O 距離の長いところで、 $O(^1D) + O_2(X^3\Sigma_g^-)$ と $O(^3P) + O_2(b^1\Sigma_g^+)$ に相関する $1^3\Sigma^-$ ($7^3A''$) と $2^3\Sigma^-$ ($6^3A''$) の間に擬交差を見出した。
- ・擬交差における非断熱遷移確率を Zhu-Nakamura の公式で計算するプログラムを開発し、それによって計算された電子脱励起反応確率の衝突エネルギー依存性は、松見らの実験をよく再現することが分った。

(5) 研究開発題目 5 「環境分子反応系の探索研究」(総括担当:松見豊)

(5-a) 量子化学計算対象大気環境過程の探索。(松見、高橋、遠藤、住吉、尾関)

大気化学研究の現状を調べ、計算対象に適切な大気分子・反応系を探索した。

- ・活性な OH ラジカルの発生源。 近年、 $HOCl$ 、 $HOBr$ 、 HOI などのハロゲン含有化合物や、 HO_2 、 NO_2 、 RO_2 などの過酸化ラジカルの可視領域における光分解やラジカル反応が活性な OH ラジカルのソースとして重要だという指摘されている。 吸収スペクトルおよびその電子遷移の帰属、あるいは光解離過程の解明などを計算化学により研究することが非常に重要であることが分かった。これらの分子種は非常に不安定なラジカルであり、光吸収や光分解過程を、実験によって定量的に明らかにすることは大変難しいから、計算化学による定量的情報が重要となる。これらの課題は、藪下グループや青柳グループによって研究が進められた。
- ・対流圏オゾンの増加の原因探求。 対流圏におけるオゾン蓄積が地球温暖化に大きな影響をもたらすという試算があるから、成層圏でのオゾンの減少とは別の意味で原因追及が必要となっている。OH ラジカルなどの活性なラジカルと、森林を起源とするイソプレンなどの揮発性有機化合物との反応は、対流圏オゾンの直接的ソースとして極めて重要であると考えられ

おり、実験的に多くの研究がなされつつある。しかし、反応過程や反応速度定数の温度依存性には不明な点が残されたままである。反応中間体の構造や安定性、あるいは活性化障壁の大きさなどの情報は、これらの反応過程を理解する上で必要不可欠であり、計算化学による研究が期待されている。OH と有機化合物の反応過程は、岩田グループによって進められた。

- ・ 酸素、オゾンなどの水錯体の大気過程における役割。 場所によっては大量に存在する水分子と酸素やオゾンの錯体が地球温暖化や光化学過程に果たす可能性を検討する必要がある。それらの錯体の安定エネルギーおよび構造の量子化学計算がスペクトル実験の重要な指針となる。 水錯体の研究は、橋本グループと岩田グループによって進められた。

(5-b) 理論計算の実証実験。(松見、高橋、河野)

- ・ 理論計算と平行して、光解離生成物の持つエネルギーが失活する過程を実験的に研究した。成層圏 O(¹D)原子は O₂ や O₃ が太陽紫外線および真空紫外線により光分解されて生成される。そのため反応の余剰エネルギーの分配を受けておおきな並進エネルギーを有している。この大きな並進エネルギーは周辺空気分子(N₂、O₂)と衝突して緩和される。そこで、光分解で生成したホット O(¹D)原子の並進速度が、N₂ および O₂ と衝突して緩和する過程をレーザー分光法で調べるとともに、量子化学計算と比較して反応機構を考察した。次に、すでに量子計算の行われた O₃ の電子励起状態のポテンシャルと、実験結果とを比較した。その結果 O(¹D)+N₂ 反応では安定な一重項中間体 N₂O を経由して反応が進行するが、O(¹D)+O₂ 反応では O₃ の電子励起三重項ポテンシャル間のカップリングが重要であることが分かった。
- ・ ハロゲン原子の対流圏における反応過程について実験的解明を行い、理論化学計算の結果と比較検討した。成層圏と同様に対流圏においても塩素や臭素などのハロゲン原子が大気化学反応に関与し、対流圏オゾンの消失や炭化水素など酸化過程に大きな影響を与えている。これらのハロゲン原子は、海洋大気境界層内に多く存在する。海洋表面から発生した海塩粒子内での不均一反応により、ハロゲン化合物が放出され太陽光により光分解されて高濃度のハロゲン原子を海洋境界層内に生成すると考えられている。ハロゲン原子にはスピン軌道成分 ²P_{1/2}, ²P_{3/2} の二つの準位が存在しており、大気中での反応過程についてはまだわかっていないことが多い。そこで、塩素原子のスピン軌道成分と炭化水素の反応過程について実験的研究を行った。さらに、塩素化合物の光分解で生成する塩素原子のスピン軌道成分の生成分岐比の理論計算と実験結果との比較を行った。その結果、スピン軌道成分の反応依存性を明確にすることができた。

1.5 全体の総括と今後の課題

量子力学の第 1 原理にたつて分子を研究する分子計算科学は、この十数年間で、理論と計算技術及びその実装において著しく飛躍した。計算機ハードウェアの発展と相まって、分子計算科学は、化学を始めとする分子レベルの現象を研究するあらゆる分野で不可欠な研究道具となった。その一つの例は、天文学である。星間分子の観測や、宇宙空間での分子の形成と消滅の歴史の研究には精密な量子科学計算の結果が活用されている。

大気科学の対象も、その多くは気体分子やその集合体であり、分子計算科学の最適な研究課題である。しかしながら、このプロジェクトを始めた頃は、意外とこの観点での研究者は限られていた。USA の NASA Ames 研究所や Pacific Northwest National Laboratories (PNNL) に研究者はい

たがそれほど影響力ある研究は進められていなかった。ところが、この3年間にこの事情は大きく変化した。分子計算科学関連の主要雑誌には、大気環境の現象を解明するために、分子計算科学を駆使した論文が多く発表されるようになってきている。意識していたわけではないが、本研究プロジェクトはこの世界的な流れを先取りする形で出発したことになる。我が国の中でも、鷺田(京都大学教授)を代表とし平成13年度から始まっている科学研究補助金(特定)「大気化学・燃焼化学における新規ラジカル連鎖反応」においても、橋本、青柳らが参加を要請されている。このような意味で、本プロジェクトの開始は、大変時機を得たと言える。

本研究プロジェクトは、当初から、研究対象を具体的な大気環境中の分子過程を研究課題として選択し、その課題の解決を図りながら、汎用性のある計算システムを作っていくという手法を取ることにしていた。既述のように具体的な多くの成果も上がり、プログラムも新しく作られた。まだ、論文として発表にまで至らない研究も数多くある。それらを確実に論文として出版していかなければならない。また、新しく開発したプログラムは、まだ十分統合化されていないものもあり、公表はするものの事実上プログラム作成者と共同研究をしなければ、使えないものもある。今回開発したプログラムは、本来は一般性のあるプログラムなので、いっそうの完成度を上げる必要がある。

1.5.1 研究課題

本プロジェクト中において展開され、今後さらに発展させなければならない研究課題がいくつかある。計算技術上の問題もあるが、主は理論的に解決しなければならないものを含んでいる。そのうちの代表例をあげると、

- ① 非断熱遷移を含む反応過程の波束動力学
- ② 多自由度系の非断熱半古典シミュレーション
- ③ スピン軌道相互作用と非断熱遷移
- ④ 錯体の電子・振動・回転スペクトルのシミュレーションや錯体形成反応の平衡定数
- ⑤ 基底関数欠損誤差を含まない精度高い弱い分子間相互作用エネルギー

1.5.2 共同研究体制

本研究を契機に始まった大気科学、特に大気化学研究者との共同研究は今後も強めていかなければならない。分子計算科学者が寄与できる課題で、まだほとんど挑戦されていない課題がたくさんある。また、当初から課題に考えていた研究課題の中で、研究できなかった課題もある。その内の一つには、大気化学反応における安定同位体効果の問題である。大気中の CH_4 、 N_2O 、 H_2O 、 O_3 などの分子の安定同位体(D , ^{13}C , ^{15}N , ^{18}O)の比率から、地球温暖化やオゾン破壊に関する重要な情報が得られるとされている。どのような化学反応が同位体の比率の変化をもたらすかを調べる実験は困難であり、理論計算による反応機構や反応速度の研究が待たれている。また、熱的に励起した解離生成物の化学反応も分子計算科学でこそ研究できる課題といえる。

我々の理論計算を基礎にして、対流圏や成層圏のシミュレーションに、実際に役立てるためには、数値計算の技術とソフトウェアをもう数段階進展させ、これを長くても数ヶ月程度で完成できるようにすることが必要であろう。また、スペクトルを表示するためのインターフェイスなどを整備して、Webブラウザから分光定数解析と構造予測が行えるオンデマンドシステムをいっそう使いやすくする必要がある。

分子計算科学の手法は、今後、大気環境研究にますます重要になると予想される。PNNL の現在の主要な目的は環境科学になっているが、そこでは、この数年、新たな人材も集めて、分子計算科学をいっそう強化しようとしている。我が国でも、環境研究所などにおいても、NASA や PNNL に負けない分子計算科学プロジェクトを推進する必要があるだろう。本研究プロジェクトがその契機になることを期待したい。

1.6 研究開発実施体制

代表研究者氏名 岩田 末廣

所属・役職 大学評価・学位授与機構 評価研究部 教授

(1) 研究開発題目 1 「大気環境分子の構造・分光・反応計算システムの設計・開発・応用」

A. 参加研究者	所属	役職	研究開発項目
岩田末廣	分子科学研究所 広島大学大学院理学研究科 大学評価・学位授与機構 評価研究部	教授	本研究開発の統括、 環境分子の構造・分光の研究
天能精一郎	分子科学研究所 理論研究系理論第 1 名古屋大環境情報学部	助手 助教授 (平成 11 年度まで参加)	環境分子の構造・分光計算システムの設計・開発
池上努	分子科学研究所 理論研究系理論第 1	助手 (平成 11 年度まで参加)	環境分子の振動励起状態反応計算システムの設計・開発
鶴澤武士	分子科学研究所 理論研究系理論第 1	技官 (平成 11 年度まで参加)	環境分子と水分子クラスターの構造・反応計算システムの設計・開発
佐藤克彦	分子科学研究所 理論研究系理論第 1	学振 特別研究員 (平成 11 年度まで参加)	環境分子と水分子クラスターの構造・反応計算システムの設計・開発
陳飛武	分子科学研究所 理論研究系理論第 1	JST 研究員 (平成 11 年度)	環境分子と水分子クラスターの構造・反応計算システムの設計・開発
橋本智裕	広島大学大学院理学研究科 岐阜大学地域科学部	JST 研究員 (平成 11、12 年度) 助手(平成 13 年度)	大気環境下の化学反応の量子化学

Salai Cheettu Ammal	分子科学研究所 理論研究系理論第1	JST 研究員 (平成11年度)	大気環境下の化学反応の量子化学
---------------------	----------------------	---------------------	-----------------

B. 研究協力者	所属	役職	研究開発項目
鷺田伸明	国立環境研究所 大気圏環境部	博士	大気環境分子科学に関する調査研究
秋元肇	東京大学 先端技術科学技術研究センター	教授	大気環境分子科学に関する調査研究
川崎昌博	京都大学 工学研究科・分子工学	教授	大気環境分子科学に関する調査研究

C. 招聘した研究者等 (所属、役職)	招聘の目的	滞在先	滞在期間
Sotiris S. Xanthas (太平洋北西国立研究所 主席研究員)	研究課題{大気環境分子の分光・化学反応データ計算システム}に関する討議のため	岡崎国立共同研究機構 分子科学研究所 東京都立大学	平成11年3月17日 ～平成11年3月24日

(2) 研究開発題目2 「環境分子の化学反応速度の研究」

A. 参加研究者	所属	役職	研究開発項目
青柳睦	分子科学研究所 電子計算機センター	助教授	環境分子の化学反応速度の研究
南部伸孝	分子科学研究所 電子計算機センター	助手	環境分子の光化学反応ダイナミックスの研究
岡田一俊	岡崎国立共同研究機構 計算科学研究センター	JST 研究員 (平成12、13年度)	大気環境分子の光化学反応ダイナミックスと分光定数の研究

(3) 研究開発題目3 「大気環境分子の静的および動的特性の理論研究およびその解析システムの開発」

A. 参加研究者	所属	役職	研究開発項目
藪下聡	慶応義塾大学 化学科理論化学研究室	助教授	大気環境分子の微細構造相互作用の理論研究
菅原道彦	慶応義塾大学 化学科理論化学研究室	助手	量子力学計算のための解適合基底系の開発
Tapas K. Ghosh	慶応義塾大学 化学科理論化学研究室	助手(有期) (平成13年度)	I0+IC1 反応に関する理論的研究

(4) 研究開発題目 4 「不安定環境分子の構造・分光」

A. 参加研究者	所属	役職	研究開発項目
橋本健朗	東京都立大学 大学院理学研究科 情報理科学研究室	助教授	不安定分子の構造・分光計算システムの研究
三浦信明	東京都立大学 大学院理学研究科 情報理科学研究室	JST 研究員(平成 11、12、13 年度)	不安定分子の構造・分光計算システムの研究
B. 研究協力者	所属	役職	研究開発項目
笠井康子	郵政省通信総合研究所地球環境計測部	博士	成層圏分子の分光データ探索研究

(5) 研究開発題目 5 「環境分子反応系の探索研究」

A. 参加研究者	所属	役職	研究開発項目
松見豊	太陽地球環境研究所	教授	計算対象分子の探索研究、計算結果の実験的検証
高橋けんし	太陽地球環境研究所	助手	大気環境分子の計算実験との比較研究
河野光彦	太陽地球環境研究所	COE 研究員(非常勤)(平成 10、11 年度)	大気環境分子の計算実験との比較研究
B. 研究協力者	所属	役職	研究開発項目
遠藤泰樹	東京大学教養学部	教授	成層圏分子の分光データ探索研究
住吉吉英	東京大学教養学部	助手	成層圏分子の分光データ探索研究
尾関博之	宇宙開発事業団	招聘研究員	成層圏分子の分光データ探索研究

1.7 本事業により得られた研究成果

(1) 外部発表等

(a) 原著論文

別添 1

(b) 口頭・ポスター発表

別添 2

(2) 成果プログラム等

本研究遂行の過程で得られた計算プログラムのほとんどは、ホームページ(<http://hera.ims.ac.jp/index.html>)下にリンクされている。マニュアルやデータ例、出力例

もそこから参照できる。一部のプログラムはそこから download も可能にしてある。全体が、以下に述べるオンデマンドシステムとして統合化されている。

このシステムは

- ①分子分光解析計算システム
- ②化学反応解析計算システム
- ③構造予測オンデマンドシステム

から構成されている。出版された論文で用いた生のデータ類もこのシステムから取り出せる。

① 分子分光解析計算システム

(1-1) MOLYX ab initio MO パッケージ (責任開発者: 岩田)

このパッケージは、各計算段階(task)が独立なプログラムとなっていて、拡張性が容易であるように設計されている。Gaussian 98、MOLPRO、GAMESS との接合も shell scripts で容易に可能にしている。最新の機能として、ab initio MO による分子間相互作用計算で不可避であった BSSE という誤差を克服する新理論に基づく *LP MO* task を加えた。

使用言語: Fortran 95

ソースファイル 2500KB

ステップ数 84K

最大モジュール 56KB

最大必要メモリ 100MB

備考: 行列計算ライブラリに LAPACK を使用。分子積分計算は GAMESS のものを利用。

(1-2) 重原子系精密電子構造計算プログラムパッケージ (責任開発者: 藪下)

通常の量子化学計算ソフトウェアには含まれない、分子中の電子スピンの自由度をあらわに含むスピン軌道相互作用やコリオリ相互作用などの微細構造相互作用ハミルトニアンを配置間相互作用法で効率良く計算するため、分子の二重群、時間反転対称性、スピン依存ユニタリ一群などを十分考慮した計算方法を開発しプログラム化した (*LSCI*, *Columbus*)。この *Columbus* プログラムは、国際的な共同研究の一部として開発されており(次の公開版ではこのスピン軌道相互作用も導入される。詳細は、

http://www.itc.univie.ac.at/~hans/Columbus/columbus_main.html) に記述されている。公開はその正式リリースを待つ。ここではこのプログラムの小規模版である *LSCI* を、その前処理プログラムとともに公開する。

LSCI

使用言語: Fortran 77

ソースファイル 316 KB

ステップ数 9K

メモリ 32MB

備考: 行列計算ライブラリに LINPACK などを使用

(1-3) 分子の複素座標法プログラム (責任開発者: 藪下)

分子の電子共鳴状態の量子化学計算として、複素座標法を用いた CI 計算プログラム (CMOLCI)

を開発した。本プログラムは、複素数の軌道指数を持つ CST0 を実数軌道指数の GT0 の線形結合で表現し (CST0 基底関数群)、分子積分の計算の単純化をはかった。ここではこのプログラム CMOLCI と、次に述べる CST0 データを公開する。

CMOLCI

使用言語: Fortran 77

ソースファイル 1,400 KB

ステップ数 30K

メモリ 32MB

備考: 行列計算ライブラリに LINPACK, EISPACK などを使用。また実対称行列の固有値計算ライブラリーを複素対称行列に拡張して使用している。

(1-4) 複素座標法用の基底関数データ (責任開発者: 藪下)

分子の複素座標法の計算用に、複素数の軌道指数を持つ CST0 を実数軌道指数を持つ GT0 の線形結合で表現し、その実数軌道指数と複素数展開係数を最小二乗法で最適化した CST0-NG 基底関数群を作成した。ここでは、基底関数の線形従属性を避けるために、軌道指数が even-tempered (等比級数) の条件のもとで最適化したものを数値データの形式で公開する。1s, 2p, 3d 用 CST0-NG で項数 N は 3 ~ 6。CST0 の軌道指数の絶対値は 1、偏角は 0 ~ 40 度に対して最適化した。他の絶対値のものは、いわゆるスケーリング則により決定できる。

CST0

使用言語: Fortran 77

ステップ数 1K

ファイルサイズ 90KB

(1-5) 2 原子分子の高精度電子振動回転スペクトルの第 1 原理シミュレーター (責任開発者: 岩田、岡田)

振動回転の波動関数と振動回転準位間の遷移確率計算には *FEM1D-FEM1PROP* を開発し、使いやすい shell script を作成している。

FEM1D

使用言語: Fortran 95

ソースファイル 137KB

ステップ数 4K

モジュール 200KB

メモリ 400MB

FEM1PROP

使用言語: Fortran 95

ソースファイル 16KB

ステップ数 0.5K

モジュール 130KB

メモリ 8MB

(1-6) 1 変数シュレディンガー方程式数値解法 (開発責任者:橋本)

GESESE1D は 1 次元の有限要素法に基づき、時間に依存しない一般的な Schrodinger 方程式の束縛状態の解を数値的に求めるためのパッケージである。基本境界条件、周期境界条件を満たす 1 次元の問題を解くことができ、得られた波動関数から Franck-Condon Factor も計算することが出来る。

GENESE1D

使用言語: Fortran90

ステップ数: 2K

モジュールサイズ: 1.7MB

備考: プログラム中では LAPACK と NUMPAC を使用している。

(<http://www.netlib.org/lapack/>)

(<http://netnumpac.fuis.fukui-u.ac.jp/>)

(1-7) 3 原子分子振動回転状態計算プログラム (開発責任者:南部)

三原子分子の振動回転準位を量子論に基づき正確に計算するプログラムである。特に、核配置を記述する座標として、Jacobi 座標を用い、かつ、この座標の基で Coriolis 相互作用項も正確に考慮している。また基底関数は、動系方向に井戸型ポテンシャル基底を使い、角度方向に Legendre の陪関数を用いている。

RoVib3

使用言語: Fortran77

ステップ数: 5K

モジュールサイズ: 639KB

備考: ハミルトニアン行列の対角化に Lehoucq らにより開発された Lanczos 法を原理とする ARPACK を用いている。詳細は、<http://www.caam.rice.edu/software/ARPACK/> を参照のこと。

(1-8) 3 原子分子ポテンシャルエネルギー面生成プログラム (開発責任者:南部)

石田教授 (静岡大学) 及び、G. C. Schatz 教授 (Northwestern 大学) により新しく提案されたポテンシャルエネルギー超曲面を内挿するアルゴリズムを基に、三原子分子系へ応用したプログラムである。特に、非経験的分子軌道計算により得られた様々な核配置に関するポテンシャルエネルギーデータを用い、系のグローバルポテンシャルエネルギー面を自動的に内挿する。このプログラムは、まだ完成度が低いので、当面は非公開とするが、共同研究の形で応用計算に利用していく。

Shepard-IMLS-3

使用言語: Fortran90

ステップ数: 21K

モジュールサイズ: 1.01MB

備考: 特になし。

(1-9) 多原子分子電子振動スペクトルシミュレーター (責任開発者:岩田)

数原子分子の振動スペクトルは、ほとんどの場合、調和振動子近似で解析できる。しかしながら、電子状態が違くと分子の構造も変わるので、調和振動の座標(基準座標)も変わり、振動波動関数の重なり積分(Franck-Condon Factor, FCF)の計算は複雑になる。momoFCF は、汎用的 FCF 計算プログラムで、Gaussian 98 および GAMESS の出力から容易に FCF スペクトルを描くことができる。

momoFCF

使用言語: Fortran 95

ソースファイル 110KB

ステップ数 4K

モジュール 220MB

メモリ MB

(1-10) 多次元 (1 ~ 3 次元) 系振動状態計算プログラム(開発責任者:菅原)

移動最少二乗近似法を基にした量子力学計算用の汎用基底を用いて、任意の形状のポテンシャルを持つ 1 ~ 3 次元系における量子力学的振動状態を求めるプログラム群を作成した。(1、2、3 次元用のプログラムはそれぞれ、EFG_1D、EFG_2D、EFG_3D という名称)

EFG_1D

使用言語: Fortran77

ステップ数: 757

ファイルサイズ: 33KByte

EFG_2D

使用言語: Fortran77

ステップ数: 911

ファイルサイズ: 39KByte

EFG_3D

使用言語: Fortran77

ステップ数: 1008

ソースファイルサイズ: 42Kbyte

備考: 上記のプログラム中で NUMPAC ライブラリルーチンを使用。

② 化学反応解析計算システム

(2-1) 3 原子系反応確率計算 (開発責任者:南部)

三原子系における二分子反応の累積反応確率を量子論に基づき正確に計算するプログラムである。特に、実空間のみの扱いによる波束計算を行うことが可能なため大量なメモリーを必要としない。

TSRWP3

使用言語: Fortran77

ステップ数: 90K

モジュールサイズ: 360KB

備考: 上記のプログラム(1-7)RoVib3 を用い、遷移状態付近における振動回転状態を求め

る必要がある。

(2-2) 非断熱波束動力学プログラム(責任開発者:南部)

近接する電子励起状態との非断熱相互作用を考慮し、波束の量子力学的発展時間依存のシュレディンガー方程式を解くプログラムである。もちろん、1 準位のポテンシャルエネルギー上の波束動力学も計算する。

PDW3D

使用言語: Fortran90

ステップ数: 3K

モジュールサイズ: 115KB

備考: プログラム中では NUMPAC の二次元 FFT ルーチンを使用している。

(2-3) 非断熱遷移確率評価プログラム(責任開発者: 三浦、橋本)

擬交差する 2 本のポテンシャルカーブと目的の衝突エネルギー範囲とエネルギー刻み幅を入力として Zhu-Nakamura の公式に従って非断熱確率 p 及び、衝突後にポテンシャルの乗り移りが起こる確率 $p_{12}=2p(1-p)$ を計算する。

NATZNLZ

使用言語: Fortran77

ステップ数: 839 ステップ

備考: ガンマ関数の評価に NET NUMPAC ライブラリに含まれる関数副プログラム DCGAMA 及び DSINHP を利用している

(2-4) 反応軌跡直接追跡プログラム(責任開発者:木下朋子、南部、青柳)

多原子分子の反応を時間に沿って追跡するには、これでは配座に関し $3N-6$ 個 (N は原子数) の自由度の全てに対して電子状態計算を行いグローバルポテンシャルエネルギーの解析形を得なければならず、多大な労力を要した。このプログラムでは、ポテンシャルエネルギー関数の解析形を作らずに、動力学計算やスペクトルの計算においてポテンシャルエネルギー (及び核座標によるエネルギー微分係数) が必要になった時点でそれぞれの配座で必要な数値を直接計算する。多参照 SCF 法をもちいているので、化学結合の解離や結合の生成及び電子励起状態の反応やスペクトロスコピーにも応用が可能である。このプログラムは、まだ完成度が低いので、当面は非公開とするが、共同研究の形で応用計算に利用していく。

AIMS

使用言語: Fortran77

ステップ数: 700K

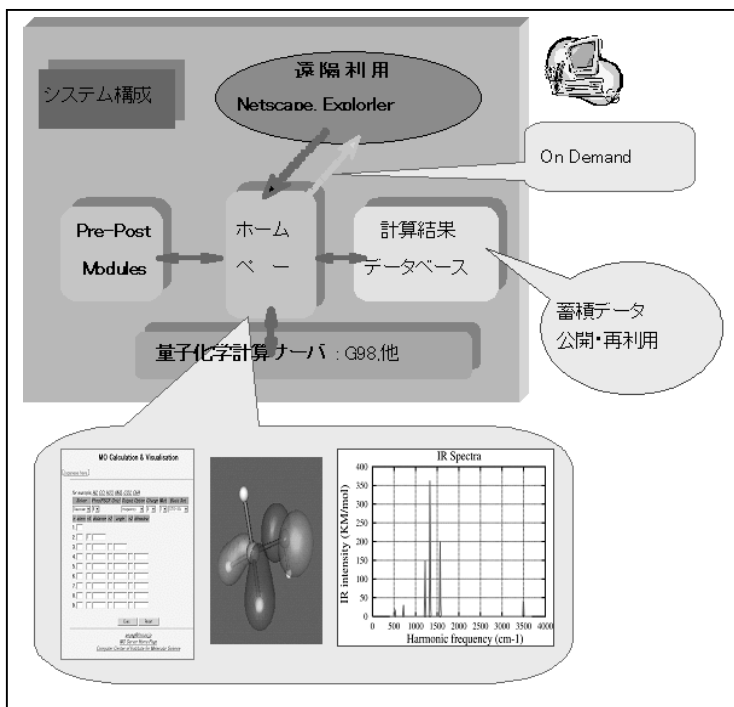
モジュールサイズ: 1.76MB

備考: プログラム中では LAPACK を使用している。

③ 構造予測オンデマンドシステム(開発総括: 青柳)

大気化学反応とそれに関与する分子の分光データを理論的に解析・予測する統合システムとして、データベース検索と計算結果を表示する、表示端末に依存しないオンデマンド Web サイトを構築している。このシステムでは、構成図に示すように、(i) 幅広い大気化学関連分野の

研究者に共通の GUI 環境を提供し、(ii)すでに計算した結果をデータベースとして蓄積し、そのデータベースの検索利用を可能にし、(iii)さらに、上記①分子分光解析計算システムと②化学反応解析計算システムのマニュアル及び一部のプログラムの計算実行環境とリンクし、“オンデマンド”でサーバ（またはクライアント PC）上で計算を実行し、(iv)その計算結果の可視化を行う、SMILE プロジェクトと関連して、回転定数から分子構造を推定するプログラム (RotMolStr Explorer)を開発し、また、電子密度の空間解析による分子の結合様式を調べるプログラム (Sph-AIMY) も開発した。



(3-1) AIMY （開発責任者：橋本）

Gaussian98 で作られた fchk ファイルを用いて、AIM 理論 (Atoms in Molecules) に基づき、Critical Point や Bond Path など分子やクラスター における電荷密度のトポロジカルな性質を解析する。

使用言語: Fortran 90

ソースファイル 215,040 Byte (サンプルを含む)

ステップ数 3,746

モジュール 641,924 Byte

メモリ 10 MB

備考: 行列計算ライブラリに LAPACK を使用

(3-2) RotMolStr （開発責任者：橋本）

分子の内部自由度を、指定した範囲で微小量ずつ変化させながら多数構造を発生させ、その中から入力データに見合う回転定数を再現する構造を探索するプログラム。単原子、二原子、三原子分子を構成分子とする二分子錯体を対象としており、対称性、配向を特定して 3 1 通り探索が行える。回転エネルギー準位の計算もできる。

使用言語: Java2 SDK, Standard Edition Version 1.2.2

モジュールサイズ: 1870KB (class ファイルの総ファイルサイズ)

備考: J LAPACK 0.3 (Java 版の LAPACK) を使用。

(3-3) 分子分光解析計算オンデマンドプログラム (開発責任者: 岡田、南部、青柳)

大気化学関連分野の研究者に対して、大気中に存在する分子について、その分子の構造や赤

外スペクトルなどを量子化学計算を用いて求める環境を提供することを目的として、web 上から量子化学計算プログラムを呼び出し、その結果を web 上で図示するサーバを構築した。また、すでに計算した結果をデータをデータベースにして、web 上から検索できるサーバーも同時に構築していた。

MO MOSRV

使用言語: html、shell script, Fortran 90, C

ソースファイル 277KB

モジュールサイズ 471KB

ステップ数 12K

(3) 特許出願

なし

(4) 新聞記事、雑誌記事、テレビ報道等

なし

(5) 受賞等

平成 12 年 3 月 日本化学会賞 日本化学会 岩田末廣

(6) ワークショップ等(主催分)

月 日	名 称	場 所	内 容	参加人数	備 考
1999/04/07	「大気内化学反応の基礎知識」勉強会	分子研	大気化学の実験研究家による講義	30 人	
1999/06/25	「分光・化学反応データ計算システム」研究会	都立大学	研究実施の詳細を検討	10 人	
2000/10/07	研究中間総括とその検討ワークショップ	分子研	これまでの研究成果を大気科学研究者に報告し意見を交流	30 人	
2000/11/20	「大気発光解析」研究会	板橋区立文化会館	オーロラや成層圏からの発光現象を研究している研究者と交流	10 人	
2001/4/28	オンデマンドシステムの実装	岡崎国立共同研究機構・計算科学研究センター	開発したシステムを公開する方法を検討。オンデマンド形式について勉強。	15 人	
2001/9/1	大気環境分子研究報告会	慶應義塾大・理工学部	これまでの研究成果を議論し、残された課題を検討。	20 人	

1.7 本事業により得られた研究成果の別添

(1) 外部発表等別添 1

(a) 原著論文

発表年	論文タイトル	掲載雑誌名 巻・号・ページ	著者名	整理番号
1999	Photodissociation dynamics of argon cluster ions	J.Chem.Phys., <u>110</u>	Tsutomu Ikegami and Suehiro Iwata	11/10C-1発01
1999	Structures and photoelectron spectroscopies of Si_2C_2^- studied with ab initio multicanonical Monte Carlo	J.Phys.Chem.A, <u>103</u>	Pradipta Bandyopadhyay, Seiichiro Ten-no and Suehiro Iwata	11/10C-1発02
1999	Theoretical study on spectroscopic properties of positive, neutral and negative species of BCl_2 and AlCl_2 : The stability of the neative species	J.Phys.Chem.A, <u>103</u>	Kyoung K.Baeck, Heechol Choi and Suehiro Iwata	11/10C-1発03
1999	Investigation of the potential energy surfaces for the ground X^1A_1 and excited C^1B_2 electronic states of SO_2	Chem.Phys.Letters, <u>303</u>	Petr Nachtigall, Jan Hrusak, Ota Bludsky and Suehiro Iwata	11/10C-1発04
1999	Theoretical studies of structures and ionization threshold energies of water cluster complexes with a group 1 metal, $\text{M}(\text{H}_2\text{O})_n$ ($\text{M}=\text{Li}$ and Na)	J.Phys.Chem.A, <u>103</u>	Takeshi Tsurusawa and Suehiro Iwata	11/10C-1発10
1999	On connection between the reference interaction site model integral equation theory and the partial wave expansion of molecular Orstein-Zernike equation	J.Chem.Phys., <u>111</u>	Seiichiro Tenno and Suehiro Iwata	11/10C-1発17
1999	Size-extensive calculations of static structure factors from the coupled cluster singles and doubles model	J.Chem.Phys., <u>111</u>	Noboru Watanabe, Seiichiro Ten-no, Sourav Pal, Suehiro Iwata and Yasuo Udagawa	11/10C-1発18
1999	Electronic Isomers in $[(\text{CO}_2)_n\text{ROH}]^-$ cluster anions. II. Ab initio calculations	J.Chem.Phys., <u>111</u>	Morihisa Saeki, Tatsuya Tsukuda, Suehiro Iwata and Takashi Nagata	11/10C-1発19
1999	Theoretical studies of $[\text{Si}_4\text{NO}]^-$ with ab initio MO and DFT methods	Chem.Phys.Letters, <u>310</u>	Wen-Ning Wang, Hai-Rong Tang, Kang-Nian Fan and Suehiro Iwata	11/10C-1発28

1999	Theoretical study of vibrational spectra for $\text{Cl}^- (\text{H}_2\text{O})$: Temperature dependence and the influence of Ar_n ($n=1-3$)	Chem.Phys.Letters,	Katsuhiko Satoh and Suehiro Iwata	11/10C-1 発42
1999	Structures, Spectroscopies and Reactions of Atomic Ions With Water Clusters	Advances in Chemical Physics, 110, Chapter 7, pp.433-523	Kiyokazu Fuke, Kenro Hashimoto and Suehiro Iwata	11/10C-1 発43
1999	Adaptive basis set for quantum mechanical calculation based on element-free Galerkin method	Chem.Phys.Letters, <u>314</u> , 52-528(1999)	Michihiko Sugawara	11/10C-1 発48
2000	Solvation Process of Na_m in Small Ammonia Clusters: Photoelectron Spectroscopy of $\text{Na}_m-(\text{NH}_3)_n$ ($m \leq 3$);	J. Electron. Spectros. Relat. Phenom., <u>106</u> , 127-139(2000)	R. Takasu, H. Ito, K. Nishikawa, K. Hashimoto, R. Okuda and K. Fuke	11/10C-1 発60
2000	Valence Photoionization and Autoionizing States of Acetylene Studied by the Complex Basis Function Method in the Random Phase Approximation	Chem.Phys.Letters, <u>316</u> , 257-265(2000)	Tomokazu Yasuike, Satoshi Yabushita	11/10C-1 発61
2000	Solvation of Sodium Dimer in Ammonia Clusters; Photoelectron Spectroscopy and ab Initio Study of $\text{Na}_2^-(\text{NH}_3)_n$	J.Phys.Chem., A <u>103</u> , 349-354(1999)	Ryozo Takasu, Kenro Hashimoto, Rei Okuda and Kiyokazu Fuke	11/10C-1 発65
2000	Accurate potential energy and transition dipole moment curves of several electronic states of CO^+	J.Chem.Phys.,	Kazutoshi Okada and Suehiro Iwata	11/10C-1 発66
2000	Theoretical studies of the water cluster anions containing the $\text{OH}\{\text{e}\}\text{HO}$ structure: energies and harmonic frequencies	Chem. Phys. Letters,	Takeshi Tsurusawa and Suehiro Iwata	11/10C-1 発67
1999	Spin-Orbit Configuration Interaction Using the GUGA and RCP and SO Operators	J.Phys.Chem., A <u>103</u> , 5791-5800(1999)	藪下 聡、Zhiyong Zhang, Russel M.Pitzer	11/10C-1 発70
1999	Ab Initio Molecular Orbital Studies of Isomerization Reaction from c-OSiH ₂ O to t-OSiHOH	J.Molecular Struct (THEOCHEM), <u>469</u> , 25-30(1999)	近藤重雄、徳橋幸一、青柳睦	11/10C-1 発71

1999	A Theoretical Study on Structures and Vibrational Spectra of C ₈₄ Fullerene Isomers	J.Molecular Struct., <u>461/462</u> , 453(1999)	西川武志, 木下朋子, 南部伸孝, 青柳睦	11/10C-1発72
1999	Ab Initio Study of PH ₂ + O ₂ Reaction by Gaussian-2 Theory	J.Phys.Chem., <u>103</u> , 8082(1999)	近藤重雄, 徳橋幸一, 杉江正昭, 青柳睦	11/10C-1発73
2000	Theoretical Study of the Potential Energy Surfaces and Bound States of HCP	J.Chem.Phys., <u>112</u> ,5866(2000)	南部伸孝、 S. K. Gray、 木下朋子、 青柳睦	12/10C-1発01
2000	Theoretical Study of [Na(H ₂ O) _n] ⁺ (n=1-4) Clusters: Geometries, Vertical Detachment Energies and IR Spectra;	J.Phys.Chem,A <u>104</u> ,3299-3307(2000)	K. Hashimoto, T. Kamimoto and K. Daigoku	12/10C-1発2
2000	Quantum dynamics and rate constant of the O(³ P)+HCl reaction	J.Chem.Phys., <u>113</u> ,227(2000)	S. Skokov、 T. Tsuchida、 南部伸孝、 J. M. Bowman、 S. K. Gray	12/10C-1発04
2000	Relaxation processes of translationally hot O(¹ D) by collision with O ₂	J.Phys.Chem., <u>104</u> ,3894-3899(2000)	平井鉦一、 谷口のり、 高橋けんし、 松見豊	12/10C-1発08
2000	The electron-hydrogen bonds and the OH harmonic frequency shifts in water cluster complexes with a group 1 metal atom, M(H ₂ O) _n (M=Li and Na)	J.Chem.Phys., <u>315</u> ,433-440, (2000),	鶴沢武士、 岩田末廣	12/10C-1発39
2000	Ab initio MO study of A, D and third ² Π states of CO ⁺	J. Elect. Spectr Related Phenon, <u>108</u> ,225-234(2000)	岡田一俊、 岩田末廣	12/10C-1発40
2000	Electronic and geometric structures of water cluster complexes with a group 1 metal atom: Electron-hydrogen bond in the OH{e}HO structure	Advances in Metal and Semiconductor Clusters,	岩田末廣、 鶴沢武士	12/10C-1発41
2001	BSSE Free SCF for molecular interaction in multi-component systems: Locally projected SCF with projection operator formalism	J.Chem.Phys.,	永田武史、 高橋修、 齊藤 昊、 岩田末廣	12/10C-1発44

2000	Theoretical Study of $[\text{Na}(\text{NH}_3)_n]^+$ ($n=1-4$)	J.Chem.Phys., <u>113</u> ,9540-9548(2000)	K. Hashimoto, T. Kamimoto, N. Miura, R. Okuda and K. Daigoku	12/10C-1 発50
2001	Accurate evaluation of Einstein's A and B coefficients of rovibronal transitions for carbon monoxide: Spectral simulation of $\Delta v=2$ rovibrational transitions in the solar atmosphere observed by a satellite	Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer,in press,	岡田一俊、青柳睦、岩田末廣	12/10C-1 発53
2000	Photodissociation of O_3 around 309 nm	J.Chem.Phys.,104,8936-8944(2000)	N. Taniguchi, K. Takahashi, Y. Matsumi	12/10C-1 発63
2000	Reaction kinetics of $\text{O}(^1\text{D})$ with CF_3CN	Physical Chemistry Chemical Physics 2,5578-5583(2000)	M. Kono and Y. Matsumi	12/10C-1 発64
2000	Numerical solution of the Schroedinger equation by a microgenetic algorithm	Chem.Phys.Letters., <u>327</u> ,429-438,(2000),	H.Nakanishi, M.Sugawara	12/10C-1 発80
2000	Oriented chlorine atoms as a probe of the nonadiabatic photodissociation dynamics of molecular chlorine	J.Chem.Phys., <u>113</u> ,9022-9031(2000)	A.J.Alexander, Z.H. Kim, S. A. Kandel, R.N. Zare, T.P.Rakitzis, Y.Asano, S.Yabushita	12/10C-1 発81
2001	High-level multireference methods in the quantum-chemistry program system COLUMBUS: Analytic MR-CISD and MR-AQCC gradients and MR-AQCC-LRT for excited states, GUGA spin-orbit CI and parallel density	Phys.Chem.Chem.Phys., <u>3</u> ,664-672(2000)	H.Lischka, R.Shepard, R.M.Pitzer, I.Shavitt, M.Dallos, T.Mueller, P.G.Szalay, M.Seth, G.S.Kedziora, S.Yabushita, Z.Zhang	12/10C-1 発82
2001	Solvation of Sodium Atom and Aggregates in Ammonia Clusters	Advances in Metal and Semiconductor Clusters, Vol.5,pP.1-38, Elsevier, (2001)	Kiyokazu Fuke, Kenro Hashimoto and Ryoza Takasu	12/10C-1 発83

2001	Photodissociation Spectroscopy of Li-H ₂ O and Li-D ₂ O Complexes	J.Phys.Chem.,A <u>105</u> ,6602-6608(2001)	R.Takasu, K.Nishikawa, N.Miura,A.Sabu, K.Hashimoto, C.P.Schulz, I.V.Hertel,and K.Fuke	12/10C-1発84
2001	Non-thermal steady-state translational distributions of O(¹ D) atoms in the stratosphere	Geophysical Research Letters	高橋けんし、谷口のり、佐藤佳宏、松見豊	13/10C-1発1
2000	Structures of carbazole-(H ₂ O) _n (n = 1-3) clusters studied by IR dip spectroscopy and a quantum chemical calculation	J.Phys.Chem.A, <u>105</u> ,8651-8657(2001)	M. Sakai, K. Daigoku, S. Ishiuchi, M. Saeki, K. Hashimoto and M. Fujii	13/10C-1発02
2001	Kinetics of the reactions of Cl*(² P _{1/2}) and Cl(² P _{3/2}) atoms with C ₃ H ₈ , C ₃ D ₈ , n-C ₄ H ₁₀ and iso-C ₄ H ₁₀ at 298K	Chem.Phys.letters, <u>346</u> ,16-22(2000)	櫃田佳波、高橋けんし、松見豊、Timothy J.Wallington	13/10C-1発23
2001	Theoretical analysis of CH stretching overtone vibration of 1,2-dichloroethylene	J.Phys.Chem.,A <u>103</u> ,xxx-xxx(2001)	高橋開人、菅原道彦、藪下聡	13/10C-1発30
2001	Theoretical study on the non-adiabatic transitions in the photodissociation processes of Cl ₂	J.Phys.Chem.,A	浅野由花子、藪下聡	13/10C-1発31
2001	Electronic states of NH ₄ (NH ₃) _n (n=0-4) cluster radicals	Chem.Phys.Letters, <u>346</u> ,81-88(2001)	Kota Daigoku, Nobuaki Miura, Kenro Hashimoto	13/10C-1発32
2001	Pico-second time-resolved infrared spectra of photo-excited phenol-(NH ₃) ₃ cluster	Chem.Phys.Letters, <u>347</u> ,87-92(2001)	Shun-ichi Ishiuchi, Makoto Sakai, Kota Daigoku, Tadashi Ueda, Takaya Yamanaka, Kenro Hashimoto, Masaaki Fujii	13/10C-1発33
20001	Electronic quenching of O(¹ D) by collisions with O ₂ : A theoretical study	J. Chem. Phys.,	Nobuaki Miura, Kenro Hashimoto, Kenshi Takahashi, Nori Taniguchi, and Yutaka Matsumi	13/10C-1発34

2001	Coherent control of wavepacket dynamics by locally desiged external field	Chem. Phys. Letters,	菅原道彦、 吉沢晋一、 藪下聡	13/10C-1発36
2001	Numerical solution of the Schrödinger equation by neural network and genetic algorithm	ComP.Phys.Comm.,104 , 366-388(2000)	菅原道彦	13/10C-1発37
2001	Quantum Control of Chemical Reaction Dynamics	Bull.Chem.Soc.Jpn., <u>74</u> ,11 67-1191(2001)	大槻幸義、 菅原道彦、 河野裕彦、 藤村勇一	13/10C-1発38
2001	Assignment of the in-plane molecular vibrations of the electron-donor molecule BDT-TTP based on the polarized Raman and infrared spectra, where BDT-TTP is 2,5-bis (1,3-dithiol-2-ylidene) 0-1,3,4,6-tetrathiapentalene	Spectrochim.Acta,in press	J. Outang, 薬師久弥, 木下朋子, 南部伸孝, 青柳睦, 三崎, 田中	13/10C-1発39
2001	Synthesis and Magnetic Properties of MnIIIMnIIMnIII Complexes with Hydroxo Bridges – Comparison of Magnetic Properties between Hydroxo and Alkoxo Bridged Complexes by the Density Functional Calculation	Bull.Chem.Soc.,Jpn.in press	広津, 青柳, 小島, 森, 吉川	13/10C-1発40
2001	Ab Initio Study of p-tert-Butylcalix[4]crown-6-ether Complexed with Alkyl Ammonium Cations	Bulletin of Korean Chemical Society, <u>22</u> , xxx (2001)	J.I. Choe, S.K.Chang, S. W. Ham, 南部, 青柳	13/10C-1発41
2001	Millimeter-wave Spectroscopy of the Internal Rotation Band of the He-HCN Cluster and Determination of the Empirical Intermolecular Potential Energy Surface	J.Chem.Phys.,in press	原田, 田中, 田中, 南部, 青柳	13/10C-1発42
2001	A new time-independent perturbation theory for multireference problem	Int.J.Quant.Chem.,In press	Fenwu Chen, E.R. Davidson, Suehiro Iwata	13/10C-1発48

2001	Spectral density calculation by using the Chevyshev expansion	J.ComP.Chem.,in press.	池上努、 岩田末廣	13/10C-1発49
2001	Electron correlation and coulomb hole deduced from X-ray scattering intensities: experimental and theoretical studies	Reviews in quantum chemistry: a celebration of the contributions of G. R. Parr, in press	渡邊昇、 天能精一郎、 岩田末廣、 宇田川康夫	13/10C-1発50
2001	Theoretical Study on the Weakly-Bound Complexes in the Reactions of Hydroxyl Radical with Saturated Hydrocarbons (Methane, Ethane, and Propane)	J.Phys.Chem.,	橋本智裕、 岩田末廣	13/10C-1発51

(b)口頭・ポスター発表

発表年月日 開催場所	発表タイトル	学会等の名称 (予稿集名、掲載ページ)	発表者	整理番号
1999/5/22 (Atlanta, Emory Univ.)	Theoretical vibrational spectroscopies of $M(H_2O)_n$: $M=F, Cl, Li$ and Na	In the frontiers of quantum chemistry and Chemical reactions'	Takeshi Tsurusawa, Katsuhiko Satoh and Suehiro Iwata	11/10C-1発05
1999/5/27 (岡崎,分子研)	オゾンの標準生成熱 ΔH の正確な測定	第15回化学反応討論会講演要旨集, P.115	谷口のり、高橋けんし、松見豊	11/10C-1発06
1999/5/27 (岡崎,分子研)	高速 $O(^1D)$ 原子と O_2 分子との衝突反応の研究	第15回化学反応討論会講演要旨集, P.175	平井鉦一、谷口のり、高橋けんし、松見豊	11/10C-1発07
1999/5/27 (岡崎,分子研)	HCP分子の電子励起状態に関する理論的研究	第15回化学反応討論会講演要旨集, P.199	南部伸孝	11/10C-1発08
1999/5/27 (岡崎,分子研)	円錐交差における非断熱遷移	第15回化学反応討論会講演要旨集,	池上努	11/10C-1発09
1999/6/6 (熱海)	CO分子の分光学諸量の精密計算	第5回大気化学討論会講演要旨集,	岡田一俊、岩田末廣	11/10C-1発11
1999/6/16 (京都,京都大)	N^+ および CO^+ のいくつかの電子状態における振動回転準位	第3回理論化学討論会講演要旨集,	岡田一俊、C.Y.Ng、岩田末廣	11/10C-1発12
1999/6/16 (京都,京都大)	水和ハロゲンクラスターの構造と振動分光に関する理論的研究	第3回理論化学討論会講演要旨集,	佐藤克彦、岩田末廣	11/10C-1発13
1999/6/16 (京都,京都大)	CISDおよびCCSD法を用いた分子の静的構造因子の計算	第3回理論化学討論会講演要旨集	渡辺昇、天能精一郎、S.Pal、岩田末廣、宇田川康夫	11/10C-1発14
1999/6/16 (京都,京都大)	水分子クラスター陰イオン、アルカリ金属・水クラスターの構造、及び分光学に関する理論的研究	第3回理論化学討論会講演要旨集	鶴沢武士、岩田末廣	11/10C-1発15
1999/6/17 (岡崎,分子研)	水クラスターとその錯体：量子化学計算で何ができるか	分子研研究会 '大気イオンクラスターの化学とその応用'	岩田末廣	11/10C-1発16

1999/7/1 (Szklarska Poreba, Poland)	Multicanonical MC algorithm with ab initio MO calculations: Investigation of structure and spectroscopy of clusters	5th International Conference COMPUTERS IN CHEMISTRY '99	Pradipta Bandyopadhyay, Seiichiro Ten-no and Suehiro Iwata	11/10C-1発22
1999/7/1 (Szklarska Poreba, Poland)	A new type of chemical interaction found in computational chemistry: Water cluster anions and the ion-pair state of $M(H_2O)_n$ ($M=Li, Na$)	5th International Conference COMPUTERS IN CHEMISTRY '99	Suehiro Iwata and Takeshi Tsurusawa	11/10C-1発23
1999/7/22 (岡崎, 分子研)	$X^-(H_2O)_n$ 錯体の理論振動 スペクトル: 水和ハロゲ ンクラスターの構造と振 動分光に関する理論的研 究	分子研研究会 '分子ク ラスタ-における分光 学の役割: その現状と将 来'	佐藤克彦、 岩田末廣	11/10C-1発24
1999/7/22 (岡崎, 分子研)	$(H_2O)_n^-$ と $M(H_2O)_n$ ($M=Li, Na$) に見いだされる特異 な(OH)-e-(HO)結合と振動 スペクトル	分子研研究会 '分子ク ラスタ-における分光 学の役割: その現状と将 来'	鶴沢武士、 岩田末廣	11/10C-1発25
1999/7/23 (Birmingham, U K)	Atmospheric photochemistry of ozone in the near-ultraviolet region	International Union of Geodesy and Geophysics, 1999, A P.19-20	松見豊	11/10C-1発26
1999/7/27 (仙台)	New basis set for quantum mechanical calculation based on element-free Galerkin method	XXI INTERNATIONAL CONFERENCE ON THE PHYSICS OF ELECTRONIC AND ATOMIC COLLISIONS, CONTRIBUTED PAPERS VOL, II p761	菅原通彦	11/10C-1発27
1999/8/22 (New Orleans, USA)	Wave packet study on photodissociation reaction	218 th Amer. Chem. Soc. national meeting Phys111.	Shinko Nanbu	11/10C-1発29
1999/9/12 (Beijing, China)	Accurate theoretical studies of rovibrational levels of several ionic states of CO^+ , N_2^+ and O_2^+	Beijing International Conference on photoelectron spectroscopy: Molecules, ions and clusters	Suehiro Iwata and Kazutoshi Okada	11/10C-1発30
1999/9/12 (Beijing, China)	Theoretical studies of water cluster anions and water cluster complexes with a group 1 metal atom $M(H_2O)_n$ ($M=Li, Na$): The unique size dependence of ionization energy and spectroscopic properties	Beijing International Conference on photoelectron spectroscopy: Molecules, ions and clusters	Suehiro Iwata, Takeshi Tsurusawa and Feiwu Chen	11/10C-1発31

1999/9/20 つくば	水クラスターの作る錯体の量子化学	超水分子の化学に関するワークショップ、	岩田末廣	11/10C-1発32
1999/9/20	レーザーと大気化学	レーザー学会中部支部学術講演会(予稿集なし)	松見豊	11/10C-1発33
1999/9/25 札幌	大気環境における分子過程の理論化学	日本化学会第77秋季年会 講演予稿集、	岩田末廣	11/10C-1発34
1999/9/25 札幌	The structures of the ground and excited states of (H3NHNH3) radical	日本化学会第77秋季年会 講演予稿集、	陳飛武、 岡田一俊、 岩田末廣	11/10C-1 発35
1999/9/27 (豊中市,阪大)	水クラスターとその錯体の量子化学	1999年分子構造総合討論会 要旨集、	岩田末廣	11/10C-1発36
1999/9/27 (豊中市,阪大)	大気環境中の2原子分子の量子化学	1999年分子構造総合討論会 要旨集	岡田一俊、 岩田末廣	11/10C-1発37
1999/9/27 (豊中市,阪大)	OHラジカルの関与する大気化学反応の理論的研究	1999年分子構造総合討論会 要旨集	橋本智裕、 岩田末廣	11/10C-1発38
1999年9/27-30 (豊中市,阪大)	Nam-(NH ₃) _n (m=1-3,n=0-4) の光電子スペクトルの理論研究	1999年分子構造総合討論会 要旨集,P.701	奥田玲、 紙本哲也、 橋本健朗	11/10C-1発39
1999/9/27 (豊中市,阪大)	塩化物の光分解における非断熱過程と生成物のClが示す orientation に関するスピン軌道CI法による理論計算	1999年分子構造総合討論会 要旨集,P.319	浅野由花子、 藪下聡	11/10C-1発40
1999/9/27 (豊中市,阪大)	要素フリーガラーキン法を用いた解適合基底系の開発	1999年分子構造総合討論会 要旨集,P.139	菅原通彦	11/10C-1発41
1999/10/13 (岡崎,分子研)	計算機で化学する	分子研フォーラム	岩田末廣	11/10C-1発44
1999/11/9 (仙台)	国際宇宙ステーション搭載のサブミリ波リムサウンダによる 成層圏大気微量成分の観測	地球電磁気学会	笠井康子、 落合啓、 尾関博之、 JEM/SMILES ミッションチーム	11/10C-1発45

1999/11/15 (岡崎,分子研)	Theoretical Study of Alkali-Metal Dissolution in Water and Ammonia Clusters	Information Exchange Seminar on Photoconversion and Photosynthesis :Past,Present and Future Prospects P.109	K.Hashimoto, T.Kamimoto, R.Okuda, K.Digoku, S.Suzuki and N.Miura	11/10C-1発46
1999/12/10 (つくば市、高エネ機構)	電子雲と相互作用しているHO結合の理論振動スペクトル:電子-水素結合	高エネ機構研究会	鶴沢武士、岩田末廣	11/10C-1発47
1999/12/20-22 (岡崎,分子研)	Theoretical Study of Alkali-Metal Dissolution in Polar Solvent Clusters	IMS COE Conference ABSTRACTS,P.5	K.Hashimoto	11/10C-1発49
1999/12/20 (岡崎、分子研)	The electron-hydrogen bond: structural and spectroscopic properties	IMS COE Conference ABSTRACTS,	Suehiro Iwata, Takashi Tsurusawa and Fenwu Chen	11/10C-1発50
1999/12/20 (岡崎、分子研)	Theoretical Study of Electronic and Vibrational Structures of $\text{Li}(\text{H}_2\text{O})_n$ and $\text{Na}(\text{H}_2\text{O})_n$ ($n=4,6,8$) Clusters	IMS COE Conference ABSTRACTS,P.63	Kota Daigoku, Tetsuya Kamimoto, Kenro Hashimoto,	11/10C-1発51
1999/12/20 (岡崎、分子研)	Theoretical Study of Photoelectron Spectroscopy for $[\text{Na}_m(\text{NH}_3)_n]^+(m=1-3, n=0-4)$	IMS COE Conference ABSTRACTS,P.62	Rei Okuda, Tetsuya Kamimoto, Kenro Hashimoto	11/10C-1発52
	Structure of Solvation Clusters of 1-Naphthol in their Ground and 1st Excited Singlet State : <i>Ab Initio</i> MO and IR Dip Spectroscopic Studies	IMS COE Conference ABSTRACTS,P.61	T.Shimizu, K.Hashimoto, M.Fujii	11/10C-1発53
2000/1/6 (豊橋)	Theoretical investigations on the mechanism of isoprene reaction with OH radical	大気化学シンポジウム 研究集会講演集	S. Salai Cheettu Ammal, Tomohiro Hashimoto, Suehiro Iwata	11/10C-1発54
2000/1/6 (豊橋)	OHラジカルと炭化水素の反応に関する理論的研究	大気化学シンポジウム 研究集会講演集	橋本智裕、岩田末廣	11/10C-1発55
2000/1/6 (豊橋)	JEM/SMILESによる大気微量成分の観測、観測周波数、観測分子、得られるデータ精度	大気化学シンポジウム 研究集会講演集	笠井康子、落合啓、尾関博之、JEM/SMILES ミッションチーム	11/10C-1発56
2000/1/6 (豊橋)	酸素-水錯体: FTマイクロ波分光法による構造決定とその温室効果	大気化学シンポジウム 研究集会講演集	笠井康子、遠藤泰樹、住吉吉英	11/10C-1発57

2000/1/6 (豊橋)	成層圏O(¹ D)原子の並進エネルギー分布	大気化学シンポジウム 研究集会講演集,P.87-89	谷口のり、 平井鉦一、 高橋けんし、 松見豊	11/10C-1発58
2000/1/6 (豊橋)	296-305nm領域における O ₃ の光解離反応：O(¹ D) 原子の生成量子収率スペ クトルの測定	大気化学シンポジウム 研究集会講演集, P.84-86	高橋けんし、 谷口のり、 松見豊	11/10C-1発59
2000/1/20 (岡崎,分子研)	Accurate theoretical studies of rovibronic states of CO and CO ⁺ : Simulation of rovibronic spectra.	Okazaki Conference 'Molecular Orbital Theory for the New Millennium'	Kazutoshi Okada, Tsutomu Ikegami, and Suehiro Iwata	11/10C-1発62
2000/1/20 (岡崎,分子研)	Electron correlation effect in X-Ray scattering cross section	Okazaki Conference 'Molecular Orbital Theory for the New Millennium'	N. Watanabe, H. Hayashi, Y. Udagawa, S. Ten-no, and S. Iwata	11/10C-1発63
2000/1/20 (岡崎,分子研)	A few topics on one- and two-electron physical properties in the molecular orbital theories	Okazaki Conference 'Molecular Orbital Theory for the New Millennium'	岩田末廣	11/10C-1発64
2000/3/28 (船橋市,日大)	分子軌道理論の開拓と分 子科学への応用	日本化学会第78回春季 年会 講演予稿集,	岩田末廣	11/10C-1発68
2000/3/30 (船橋市,日大)	Ab initio molecular dynamics法による溶媒和 アルカリ金属クラスター の研究	日本化学会第78回春季 年会 講演予稿集,P.616	鈴木里史、 三浦信明、 橋本健朗	11/10C-1発69
2001/6/1-3 (東広島市、広 島大)	HCP分子の電子励起状態 における前期解離過程の 理論的研究	第16回化学反応討論会 講演要旨集, P.54	南部伸孝、 S. K. Gray、 木下朋子、 青柳睦	12/10C-1発03
2000/12/17 (ホノルル)	Transition state real wave packet study of the bimolecular reaction for triatomic and tetra-atomic systems	2000年環太平洋国際化 学会議	南部伸孝、 S. K. Gray	12/10C-1発05
2000/5/11 (八王子,都立 大)	O ₂ ・H ₂ O錯体の分子間振 動に関する理論的研究 —安定構造探索と回転定 数の計算—	第4回理論化学討論会 講演要旨集, P.84	三浦信明、 左部顕芳、 橋本健朗	12/10C-1発6

2001/5/11 (八王子,都立大)	Naクラスターのアンモニアへの溶解と電子状態変化	第4回理論化学討論会 講演要旨集, P.11	橋本健朗, 紙本哲也, 三浦信明, 奥田玲, 大極光太	12/10C-1 発7
2000/5/11-13 (八王子,都立大)	チェビシェフ展開法を用いたスペクトル密度の計算	第4回理論化学討論会 講演要旨集,	池上努, 岩田末廣	12/10C-1発9
2000/5/11-13 (八王子,都立大)	OH{e}HO構造に特異な振動スペクトルと電子スペクトルの理論計算	第4回理論化学討論会 講演要旨集,	鶴澤武士, Fen-Wu Chen, 岩田末廣	12/10C-1発10
2000/5/11-13 (八王子,都立大)	CO, N ₂ 分子とそのイオン状態の電子振動回転準位間の遷移確率	第4回理論化学討論会 講演要旨集,	岡田 一俊, 岩田 末廣	12/10C-1発11
2000/6/2 (東広島市,広島大)	OHラジカルと炭化水素の反応に関する理論的研究	第16回化学反応討論会 講演要旨集,	橋本智裕, Salai Cheettu Ammal, 岩田末廣	12/10C-1発12
2000/5/11 (八王子,都立大)	I ₃ ⁻ の電子励起状態のスピン軌道CI計算	第4回理論化学討論会 講演要旨集, P.81	藪下 聡	12/10C-1発13
2000/5/11 (八王子,都立大)	ローカルモード描像を用いたオーバートーン振動計算	第4回理論化学討論会 講演要旨集, P.82	高橋開人, 菅原道彦, 藪下聡	12/10C-1発14
2000/5/11 (八王子,都立大)	最適化レーザー場によるHOD分子の量子ダイナミックス制御	第4回理論化学討論会 講演要旨集, P.86	吉沢晋一, 菅原道彦	12/10C-1発15
2000/6/1 (江東区文化センター)	遺伝的アルゴリズムによる振動状態計算法の開発	計算化学討論会 講演要旨集,P.178-179	中西宏美, 菅原道彦	12/10C-1発16
2000/6/1 (東広島市,広島大)	Cl ₂ および HCl の光分解における非断熱過程の理論的研究	第16回化学反応討論会 講演要旨集, P.107	浅野由花子, 藪下聡	12/10C-1発17
2000/6/2 (東広島市,広島大)	酸素分子のHerzbergバンドにおける吸収強度の精密計算	第16回化学反応討論会 講演要旨集, P.157	竹上竜太, 藪下聡	12/10C-1発18
2000/12/17 (ホノルル)	Theoretical studies on the electronic structures and dynamics of I ₃ ⁻	2000年環太平洋国際化学会議 part2,P.1053	藪下聡	12/10C-1発19

2000/12/15 (ホノルル)	Numerical solution of the Schrodinger equation by intelligent methods	2000年環太平洋国際化学会議 part2,P.493	菅原道彦、中西宏美	12/10C-1発20
2000/12/16 (ホノルル)	Theoretical study on the non-adiabatic transitions in the photodissociation processes of Cl ₂ and HCl molecules with the Rosen-Zener-Demkov model	2000年環太平洋国際化学会議 part2,P.1054	浅野由花子、藪下聡	12/10C-1発21
2000/12/16 (ホノルル)	Theoretical analysis of overtone vibration in simple XH molecules	2000年環太平洋国際化学会議 part2,P.694	高橋開人、菅原道彦、藪下聡	12/10C-1発22
2000/12/17 (ホノルル)	Ab initio calculation of absorption strength in the Herzberg band of O ₂	2000年環太平洋国際化学会議 part2,P.1061	竹上竜太、藪下聡	12/10C-1発23
2000/12/17 (ホノルル)	Control of HOD reaction dynamics by optical laser field	2000年環太平洋国際化学会議 part2,P.772	吉沢晋一、菅原道彦	12/10C-1発24
2000/12/14-19 (ホノルル)	Theoretical study on the atmospheric chemical reactions of OH radical with hydrocarbons	2000年環太平洋国際化学会議	橋本智裕、Salai Cheettu Ammal, 岩田末廣	12/10C-1発25
2000/12/14-19 (ホノルル)	Accurate calculations of rovibronic absorption and emission spectra of some atmospheric molecules	2000年環太平洋国際化学会議	岡田一俊、岩田末廣	12/10C-1発26
2000/12/14-19 (ホノルル)	Electronic spectra of water clusters having a OH{e}HO structure: Theoretical study	2000年環太平洋国際化学会議	岩田末廣、鶴沢武士、陳飛武	12/10C-1発27
2000/08/24-25	量子化学計算:分子分光学への貢献度をさらに上げるために何が課題か?	「九州分光学関連夏期セミナー」	岩田末廣	12/10C-1発28
2000/7/31-8/3	Theoretical photoabsorption spectra of metal-water clusters and water cluster anions	Canadian Conference on Computer Chemistry	岩田末廣	12/10C-1発29
2000/9/3-7	Accurate evaluations of spectroscopic properties of some diatomic molecules and their ions: Application to the atmospheric science	The 16 th International Conference on high-resolution molecular spectroscopy	岩田末廣	12/10C-1発30

2000/9/27-30 (駒場,東大)	HONOを生成するNO ⁺ と 水クラスターの反応	2000年分子構造総合討 論会 要旨集,	権藤好信、 橋本智裕、 岩田末廣	12/10C-1発31
2000/9/30 (駒場,東大)	O ₂ のHerzberg連続吸収帯 からの光分解過程に関す る理論的研究	2000年分子構造総合討 論会 要旨集, P.769	竹上竜太、 藪下聡	12/10C-1発32
2000/9/29 (駒場,東大)	振動状態計算法における 遺伝的アルゴリズムの応 用	2000年分子構造総合討 論会 要旨集, P.700	中西宏美、 菅原道彦	12/10C-1発33
2000/9/29 (駒場,東大)	ニューラルネットワーク を用いた振動状態計算法 の開発	2000年分子構造総合討 論会 要旨集, P.694	菅原道彦	12/10C-1発34
2000/9/29 (駒場,東大)	<i>cis</i> 及び <i>trans</i> ジクロロエ チレンの倍音吸収スペク トルに関する理論的考察	2000年分子構造総合討 論会 要旨集, P.699	高橋開人、 菅原道彦、 藪下聡	12/10C-1発35
2000/9/27-30 (駒場,東大)	精密量子化学計算による 大気計測基礎データ	2000年分子構造討論会 要旨集, P.691	岡田一俊、 青柳睦、 岩田末廣	12/10C-1発36
2000/9/27-30 (駒場,東大)	C + H ₃ ⁺ → CH + H ₂ に関す るDirect MCSCF MD 計算	2000年分子構造討論会 要旨集, P.786	木下朋子、 南部伸孝、 青柳睦	12/10C-1発37
2000/9/10-11	How can we measure temperature of molecules in aurora and on the sun by accurate quantum chemical calculations?	The annual meeting of the Alexander von Humboldt fellows	岩田末廣	12/10C-1発38
2001/1/11	Theoretical Studies of oxidation reaction processes of isoprene with OH radicals	大気化学シンポジウム 研究会集講演集,	橋本智裕、 岩田末廣	12/10C-1発42
2001/3/30	NO ⁺ (H ₂ O) _n X (X=CH ₃ OH) 系からのオキソニウムイ オン(H ₃ O ⁺)生成機構に関 する理論的研究	日本化学会平成13年春 期年会 講演予稿集,	権藤好信、 橋本智裕、 岩田末廣	12/10C-1発43
2000/9/27 (駒場,東大)	(CO ₂) _n ⁻ クラスターとCH ₃ I の反応機構に関する理論 的研究	2000年分子構造総合討 論会 要旨集, P.396	下里卓、 杉村勇司、 竹内和子、 滝口順子、 橋本健朗	12/10C-1発45
2000/9/29 (駒場,東大)	フェノールアンモニアク ラスターの理論的研究； プロトン移動と水素移動	2000年分子構造総合討 論会 要旨集, P.642	大極光太、 橋本健朗	12/10C-1発46

2000/5/31 (鳥羽国際観光 ホテル)	酸素・水錯体の安定構造 と回転定数の理論計算	第6回大気化学討論会 講演要旨集, P. 20	三浦信明、 左部顕芳、 橋本健朗	12/10C-1発47
2000/9/29 (駒場,東大)	大気環境中のO ₂ -H ₂ O及び O ₃ -H ₂ O錯体に関する理論 的研究	2000年分子構造総合討 論会 要旨集, P.683	三浦信明、 左部顕芳、 橋本健朗	12/10C-1発48
2000/9/27 (駒場,東大)	O(¹ D)+O ₂ (X)衝突におけ る電子脱励起過程に関す る理論的研究	2000年分子構造総合討 論会 要旨集, P.383	三浦信明、 左部顕芳、 橋本健朗	12/10C-1発49
2000/12/14 (ホノルル)	Microscopic Solvation of Alkali-Metal in Polar Solvent Clusters	2000年環太平洋国際化 学会議 PHYS832	K. Hashimoto	12/10C-1発51
2001/1/13	O(¹ D)+O ₂ (X)衝突におけ る電子脱励起過程に関す る理論的研究	第11回大気化学シンポ ジウム 研究集会講演 集,	三浦信明、 橋本健朗	12/10C-1発52
2000/6/1 (鳥羽国際観光 ホテル)	塩素原子と炭化水素の反 応	第6回大気化学討論会 講演要旨集, P.5	櫃田佳波、 高橋けんし、 松見豊	12/10C-1発54
2000/6/2 (東広島市、広島 大)	O(¹ D)とCF ₃ CNの反応ダイ ナミックス	第16回化学反応討論会 講演要旨集, P.181	河野光彦、 松見豊	12/10C-1発55
2000/6/3 (東広島市、広 島大)	オゾンの光解離における O(¹ D)生成反応断面積の モデル計算	第16回化学反応討論会 講演要旨集, P.163	高橋けんし、 谷口のり、 松見豊	12/10C-1発56
2000/6/3 (東広島市、広 島大)	大気成層圏中のO(¹ D)原 子の並進エネルギー分布	第16回化学反応討論会 講演要旨集, P.81	谷口のり、 高橋けんし、 佐藤佳宏、 松見豊	12/10C-1発57
2000/7/5 (札幌,北海道大 学)	Precise determination of the heat of formation for ozone	Quadrennial Ozone Symposium ABSTRACTS, P.817-818	N. Taniguchi、 K. Takahashi、 Y. Matsumi	12/10C-1発58
2000/7/5 (札幌,北海道大 学)	Quantum yield for O(¹ D) production in ozone photolysis: new recommendation values for atmospheric purpose	Quadrennial Ozone Symposium ABSTRACTS,P.539-540	Y. Matsumi、 F. J. Comes、 G.Hancock、 A. Hofzumahaus、 A. J. Hynes、 M. Kawasaki、 A.R.Ravishankara	12/10C-1発59

2000/7/25 (University of Cambridge)	Reaction Processes of O(¹ D) with HFCs	16th International Symposium on Gas Kinetics ABSTRACTS,P.822	M. Kono, K. Takahashi, Y. Matsumi	12/10C-1発60
2000/12/18 (ホノルル)	Photodissociation processes of ozone in the ultraviolet region	2000年環太平洋国際化学会議 PHYS1095	Y. Matsumi, K. Takahashi	12/10C-1発61
2000/3/20 (葉山、総研大)	Physics and atmospheric chemistry of ozone in the ultraviolet region	Spectroscopy in the 21st century,ABSTRACTS, P.27	Y. Matsumi, K. Takahashi	12/10C-1発62
2001/1/10 (豊橋)	水分子のOH結合の高次倍音振動スペクトルに対する理論的考察	第11回大気化学シンポジウム 研究集会講演集 研究集会講演集, P.242-243	高橋開人、菅原道彦、藪下聡	12/10C-1発65
2001/1/10 (豊橋)	酸素分子のHerzberg吸収帯に関する理論的研究	第11回大気化学シンポジウム 研究集会講演集 研究集会講演集, P.244-247	竹上竜太、藪下聡	12/10C-1発66
2001/3/13 (葉山、総研大)	Toward the practical applications of the complex-coordinate method to molecular resonance calculations	Frontiers of theoretical chemistry ABSTRACTS, P.19	藪下聡	12/10C-1発67
2001/3/19 (葉山、総研大)	Theoretical study on the photoabsorption and photodissociation in Herzberg band of O ₂ molecule	Spectroscopy in the 21 st century,ABSTRACTS, P.152	竹上竜太、藪下聡	12/10C-1発68
2001/3/19 (葉山、総研大)	Theoretical analysis of overtone vibration intensities of simple molecules	Spectroscopy in the 21 st century,ABSTRACTS, P.113	高橋開人、菅原道彦、藪下聡	12/10C-1発69
2001/3/20 (葉山、総研大)	Ab initio study on the reaction kinetics of IO + ClO reaction	Spectroscopy in the 21 st century,ABSTRACTS, P.15	T.K.Ghosh、藪下聡	12/10C-1発70
2001/3/24	Theoretical studies on the photodissociation of Cl ₂ and I ₃ ⁻	East-Asia workshop on chemical reactions ABSTRACTS,P.17	藪下聡	12/10C-1発71
2001/3/30 (神戸市,甲南大学)	遺伝的アルゴリズムを用いた振動状態計算法	日本化学会第79春季年会 講演予稿集,	菅原道彦、中西紘美、藪下聡	12/10C-1発72

2001/3/30 (神戸市,甲南大 学)	BSSE free SCF for molecular Interaction in multi-component system.	日本化学会平成13年春 期年会 講演予稿集,	永田武史, 高橋修, 斉藤晃, 岩田末廣	12/10C-1発73
2000/7/18 (岡崎市,分子 研)	単純な分子の複雑な光解 離過程 塩素分子	立体反応ダイナミクス の新展開 P.3	Yabushitasatoshi	12/10C-1発74
2000年9/27-30 (駒場,東大)	<i>ab initio</i> MO法とIR Dip法 によるS0及びS1での 1-Naphthol(NH3)n クラスターの構造解析	2000年分子構造総合討 論会 要旨集, P.225	清水俊彦, 下里卓, 大極光太, 橋本健朗, 藤井正明	12/10C-1発75
2000/9/29 (駒場,東大)	UV-IR二重共鳴分光法に よるカルバゾール溶媒和 クラスターカチオンの振 動分光	2000年分子構造総合討 論会 要旨集, P.631	酒井誠, 大極光太, 石内俊一, 佐伯盛久, 橋本健朗, 藤井正明	12/10C-1発76
2000/9/30 (駒場,東大)	I ₃ の光分解過程とその非 断熱性に関する理論的研 究	2000年分子構造総合討 論会 要旨集, P.784	藪下聡	12/10C-1発77
1999/8/22	Wave packet study on photodissociation reactions	218th American Chemical Society National Meeting & Exposition	青柳睦, 南部伸孝	12/10C-1発78
2000/12/17 (ホノルル)	Wave packet study of nonadiabatic photodissociation dynamics	2000年環太平洋国際化 学会議 PHYS1095	青柳睦, 南部伸孝	12/10C-1発79
2000/6/1 (東広島市,広島 大)	C + H ₃ → CH ⁺ + H ₂ に関す る Direct MCSCF MD 計 算	第16回化学反応討論会 講演要旨集, P.109	木下朋子, 南部伸孝, 青柳睦	12/10C-1発85
2000/6/1 (東広島市,広島 大)	アセチルラジカルnon- RRKM的振舞の一般化さ れた統計力学による解析	第16回化学反応討論会 講演要旨集, P.52	伊藤正勝, 青柳睦	12/10C-1発86
2000/9/27 (駒場,東大)	Tsallis統計によるアセチ ルラジカルnon-RRKM的 振舞の解析	2000年分子構造総合討 論会 要旨集, P.76	伊藤正勝, 青柳睦	12/10C-1発87
2000/9/27 (駒場,東大)	BDT-TTPの基準振動解析 とθ-(BDT-TTP) ₂ Cu(NCS) ₂ における電荷の不均化相 転移	2000年分子構造総合討 論会 要旨集, P. 108	薬師久弥, 青柳睦, 木下朋子, 南部伸孝, 御崎洋二, 田中一義, 欧陽建勇	12/10C-1発88

2001/05/23-25	酸素分子のHerzberg吸収帯の回転スペクトルに関する理論的研究	第17回化学反応討論会 講演要旨集, P.152	竹下竜太、 藪下聡	13/10C-1発3
2001/05/17-19 (仙台)	酸素分子のHerzberg吸収強度の理論計算	第5回理論化学討論会 講演要旨集, P.88	竹下竜太、 藪下聡	13/10C-1発04
2001/05/17-19 (仙台)	遺伝的アルゴリズムによるシュレディンガー方程式の数値的解法	第5回理論化学討論会 講演要旨集, P.108	中西紘実、 菅原道彦、 藪下聡	13/10C-1発05
2001/05/17-19 (仙台)	Quantum mechanical studies on the IO + ClO reaction	第5回理論化学討論会 講演要旨集, P.111	T. K. Ghosh, 藪下聡	13/10C-1発06
2001/05/17-19 (仙台)	複素座標法による波動関数の振る舞い	第5回理論化学討論会 講演要旨集, P.71	三澤秀章、 藪下聡	13/10C-1発07
2001/05/17-19 (仙台)	BSSE free locally projected SCF 法	第5回理論化学討論会 講演要旨集,	永田武史、 高橋修、 斉藤晃、 岩田末廣	13/10C-1発08
2001/05/17-19 (仙台)	$\text{NO}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ と $\text{NO}^+(\text{H}_2\text{O})_n \text{CH}_3\text{OH}$ のクラスター内反応: オキシニウム(H_3O^+)の生成機構	第5回理論化学討論会 講演要旨集,	権藤好信、 橋本智裕、 岩田末廣	13/10C-1発09
2001/07/13-15	BSSE free SCF for molecular interaction in multi-component systems: Locally projected molecular orbitals with projection operator formalism	V-th Girona Seminar	岩田末廣、 永田武史	13/10C-1発10
2001/07/21-25	BSSE-free Locally projected SCF method: Application to metallic cation clusters with rare gas atoms	International conference of molecular quantum mechanics	永田武史、 高橋修、 斉藤晃、 岩田末廣	13/10C-1発11
2001/05/17-19 (仙台)	イソプレンの酸化分解反応に関する理論的研究	第5回理論化学討論会 講演要旨集,	橋本智裕、 Salai Cheettu Ammal, 岩田末廣	13/10C-1発12
2001/09/24-27 (札幌プラザ)	局所射影分子軌道によるBSSE除外2次摂動法	2001年分子構造総合討論会 要旨集,	永田武史、 高橋修、 斉藤晃、 岩田末廣	13/10C-1発13

2001/09/24-27 (札幌プラザ)	HClの光分解における非 断熱遷移過程に関する理 論的研究	2001年分子構造総合討 論会 要旨集, P.339	浅野由花子、 藪下聡	13/10C-1発14
2001/09/24-27 (札幌プラザ)	複素座標法による波動関 数の振る舞いとその最適 化	2001年分子構造総合討 論会 要旨集, P.745	三澤秀章、 藪下聡	13/10C-1発15
2001/09/24-27 (札幌プラザ)	Theoretical study on the IO + ClO and IO + BrO reaction pathways	2001年分子構造総合討 論会 要旨集, P.337	T. K. Ghosh., 藪下聡	13/10C-1発16
2001/09/24-27 (札幌プラザ)	酸素分子のHerzbergバン ドにおける吸収強度の精 密計算	2001年分子構造総合討 論会 要旨集, P.464	竹上竜太、 藪下聡	13/10C-1発17
2001/09/24-27 (札幌プラザ)	遺伝的アルゴリズムを用 いた量子力学的振動状態 計算法の開発:多次元化へ の応用	2001年分子構造総合討 論会 要旨集, P.317	中西紘実、 菅原道彦、 藪下聡	13/10C-1発18
2001/09/24-27 (札幌プラザ)	-CH及び-OH高次倍音振 動スペクトルに関する理 論的研究	2001年分子構造総合討 論会 要旨集, P.118	高橋開人、 菅原道彦、 藪下聡	13/10C-1発19
2001/09/24-27 (札幌プラザ)	O(¹ D) + HCl 反応に関す るポテンシャル面の決定 と電子波束計算	2001年分子構造総合討 論会 要旨集, P.56	南部伸孝、 青柳睦	13/10C-1発20
2001/09/24-27 (札幌プラザ)	OCS分子の全自由度波束 ダイナミックス計算	2001年分子構造総合討 論会 要旨集, P.758	岡田一俊、 南部伸孝、 青柳睦	13/10C-1発21
2001/09/24-27 (札幌プラザ)	OH + OH 燃焼反応に関す る理論的研究	2001年分子構造総合討 論会 要旨集, P.331	木下朋子、 南部伸孝、 青柳睦	13/10C-1発22
2001/9/1	Kinetics of the reactions of Cl*(² P _{1/2}) and Cl(² P _{3/2}) atoms with C ₃ H ₈ , C ₃ D ₈ , n- C ₄ H ₁₀ and iso-C ₄ H ₁₀ at 298K	Chemical Physics letters	櫃田佳波、 高橋けんし、 松見豊、 Timothy J. Wallington	13/10C-1発23

2001/05/23-25 (箱根、九大)	オゾンのHartley帯における光解離	第17回化学反応討論会 講演要旨集, P.156	高橋けんし、 谷口のり、 林信介、 松見豊	13/10C-1発24
2001/05/31 (琵琶湖グランド ホテル)	230-408nmでのO ₃ の光分 解により生成する O(¹ D)/O(³ P)の分岐比測定	第7回大気化学討論会 講演要旨集, P.37	林信介、 高橋けんし、 松見豊	13/10C-1発25
2001/09/24-27 (札幌プラザ)	塩素原子のスピン軌道成 分Cl(² P _{3/2})及びCl*(² P _{1/2})の 化学反応性	2001年分子構造総合討 論会 要旨集, P.709	櫃田佳波、 高橋けんし、 松見豊	13/10C-1発26
2001/09/24-27 (札幌プラザ)	光励起フェノール・アン モニアクラスターのピコ 秒時間分解赤外スペクト ル:励起状態水素原子移動 反応のメカニズムの検討	2001年分子構造総合討 論会 要旨集, P.150	石内俊一、 酒井誠、 大極光太、 橋本健朗、 藤井正明	13/10C-1発27
2001/09/24-27 (札幌プラザ)	フェノール・アンモニア クラスター中の水素原子 移動反応に関する理論的 研究	2001年分子構造総合討 論会 要旨集, P.141	大極光太、 田中哲彦、 石内俊一、 酒井誠、 藤井正明、 橋本健朗	13/10C-1発28
2001/09/24-27 (札幌プラザ)	ナトリウム原子の水和ダ イナミックスの理論的研 究	2001年分子構造総合討 論会 要旨集, P.738	鈴木里史、 三浦信明、 橋本健朗	13/10C-1発29
2001/12/03-05	分子科学計算による大気 環境分子研究用オンデマ ンドシステム	第12回大気化学シンポ ジウム 研究集会講演 集,	青柳睦、 橋本健朗、 近藤紗登美、 左部顕芳、 大極光太、 三浦信明、 南部伸孝、 岡田一俊、 橋本智裕、 菅原道彦、 藪下聡、 岩田末広	13/10C-1発35
2001/5/23 (箱根、九大)	分子間力はどこまで実験 的に解明されるのか?	第17回化学反応討論会 講演要旨集, P.74	田中桂一、 原田賢介、 南部伸孝、 青柳睦	13/10C-1発43
2001/9/24 (札幌プラザ)	分子間振動のミリ波分光 により決定したAr-HCN クラスターの分子間ポテ ンシャル	2001年分子構造総合討 論会 要旨集, P.48	田中桂一、 原田賢介、 南部伸孝、 青柳睦	13/10C-1発44

2001/9/24 (札幌プラザ)	ラジカル反応・タンパク 折れ畳みにおける非平衡 性とTsallis統計	2001年分子構造総合討 論会 要旨集, P.69	伊藤正勝、 青柳睦、 岡本祐幸	13/10C-1発45
2001/9/24 (札幌プラザ)	金属内包フラーレン (La@C76)の赤外スペクト ルの理論的研究	2001年分子構造総合討 論会 要旨集, P.319	真木淳、 青柳睦、 加藤立久、 大窪清吾	13/10C-1発46
2001/9/24 (札幌プラザ)	CaNCの高励起状態に関 する研究	2001年分子構造総合討 論会 要旨集, P.480	南野智、 南部伸孝、 青柳睦	13/10C-1発47