

# 非断熱遷移

## —— 概念、基礎理論、及び応用

中村宏樹

自然科学研究機構 分子科学研究所

- § 1. 非断熱遷移とは — その概念と学際性
  - 1—1. 物理、化学、生物
  - 1—2. その他：経済、日常生活 (ex. 落語) (?)
  - 1—3. 概念の一般化、抽象化
- § 2. 言語学
  - 2—1. 断熱表示と透熱表示
  - 2—2. 言葉の使い方
- § 3. 研究の歴史 (Landau-Zener-Stueckelberg の理論)
  - 3—1. Landau の理論
  - 3—2. Zener の取り扱い
  - 3—3. Stueckelberg の理論
  - 3—4. その後 1991 年迄の理論
- § 4. 半古典力学概論
  - 4—1. 1次元 WKB 理論 (漸近展開)
  - 4—2. 多次元理論
- § 5. 背景の数学 — Stokes 現象
- § 6. Zhu-Nakamura(朱-中村) 理論
  - 6—1. 理論導出の概略
  - 6—2. 最終公式のまとめ
  - 6—3. 面白い現象
- § 7. Zhu-Nakamura 理論の使い方 — 1次元問題
  - 7—1. 基本的要素
  - 7—2. 散乱過程

- 7—3. 共鳴過程
- 7—4. 束縛状態
- § 8. Zhu-Nakamura 理論の使い方 — 多次元問題
  - 8—1. 古典軌道ホップ法の一般化
  - 8—2. 初期値表現半古典論への適用
  - 8—3. Herman-Kluk 凍結波束伝播法への適用
  - 8—4. 非断熱 遷移状態理論
- § 9. その他の1次元モデル (省略?)
  - 9—1. Rosen-Zener モデル
  - 9—2. 指数関数モデル
  - 9—3. Demkov-Kunike モデル
  - 9—4. 多準位問題
  - 9—5. その他の厳密解が求まっている例
- § 10. 具体的応用例 — その1: 非断熱分子動力学
  - 10—1. 電子的断熱反応
  - 10—2. 電子的非断熱反応
  - 10—3. 電子移動? Marcus 理論の改良
- § 11. 具体的応用例 — その2: レーザー場による分子過程の制御
  - 11—1. 光子場の半古典論
  - 11—2. Floquet 表示と光の衣を着た状態
  - 11—3. 制御の色々なアイデア
  - 11—4. 準周期的場による非断熱遷移
  - 11—5. 完全反射現象を利用した制御
  - 11—6. 周期チャープを利用した制御
  - 11—7. 半古典論的最適制御理論
- § 12. 具体的応用例 — その3: 分子機能の開発と制御
  - 12—1. 分子スイッチ
  - 12—2. フォトクロミズム、ナノチューブへの水素吸蔵(?) など
- § 13. 将来展望

参考文献 (単行本)

- (1) Hiroki Nakamura, “Nonadiabatic Transition: Concepts, Basic Theories, and Applications” (World Scientific, Singapore, 2002).
- (2) 中村宏樹 「化学反応動力学」(朝倉書店、2005).
- (3) E.R.E.Nikitin and S.Ya. Umanskii, “Theory of Slow Atomic Collisions” (Springer, Berlin, 1984).
- (4) M.S.Child, “Molecular Collision Theory” (Academic Press, London, 1974).
- (5) E.S.Medvedev and V.I.Osherov, “Radiationless Transitions in Polyatomic Molecules” (Springer, Berlin, 1991).
- (6) V.I.Osherov and L.I.Ponomarev (eds.) “Nonadiabatic Transition in Quantum Systems” (Institute of Problems of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, Chernogolovka, 2004).