

[3-5] 分子動力学法による多次元振動分光スペクトルの直接計算

京都大学大学院理学研究科化学専攻

長谷川太祐 hasegawa@kuchem.kyoto-u.ac.jp

谷村吉隆 tanimura@kuchem.kyoto-u.ac.jp

1. はじめに

シミュレーションを辞書で引くと模擬実験と出てくる。シミュレーションの基本は、与えられた条件下で運動方程式をできるだけ正確に解くことである。シミュレーションは、よほど小さい系を除き、計算に多くの曖昧さを含んでいるのが、“普通”であり、その正当性を確認するには、“現実世界”の実験結果との比較が不可欠である。多体のシミュレーションで、まず比較されるのが熱容量などの平衡熱力学量や平衡構造などで、次のステップとして赤外吸収スペクトル等、運動の情報と比較され、これに合わせてアルゴリズムやポテンシャルなどが作成されてきた。吸収スペクトルなどの動的物理量と、熱力学量や構造などの平衡物理量で合わせたシミュレーション結果を比較する場合は注意が必要である。なぜなら、動的物理量は、レーザーパルス等で系を非平衡状態にし、その緩和を見るという非平衡過程であり、その時観測される物理量は分子系全体の分極率や磁化率等の多体の物理観測量で、基準振動モード等、平衡系を基本にした運動方程式そのものから導出される量と異なる場合が多いからである。実験と比較するためには、実験状況まで含めてシミュレートする必要がある。

実験と言っても、しかしながら線形分光等の線形応答の範囲の実験ではこの違いはあまり顕著にならない。線形応答の実験は物理的には観測する物理量 A の応答関数として、以下のように定義される。

$$R^{(1)}(t_1) = \frac{i}{\hbar} \langle [A(\mathbf{q}(t_1)), A(\mathbf{q}(0))] \rangle \quad (1)$$

ここで、 \mathbf{q} は全分子の配置を示し、 A はラマン分光の場合はラマン分極テンソル Π 、赤外分光なら双極子 μ である。古典シミュレーションでは、応答関数は交換子を $i[\cdot, \cdot]/\hbar \rightarrow \{\cdot, \cdot\}$ とポアソン括弧に置き換える事により計算される。 N モードからなる系を考えよう。通常、物理量とは分子座標の 1 次形 $A(\mathbf{q}) \sim \sum_N A_i q_i$ で表される。もし各モードが調和振動的であるなら、応答関数はガウス積分を実行することにより解析的に計算され[1]

$$R^{(1)}(t_1) = \sum A_i^2 \sin \omega_i t_1 \quad (2)$$

となり、核の運動が調和振動的と仮定する基準振動解析と双極子や分極率の強さ A_i を除き一致する。基本的に線形応答は複雑な分子の動きを調和振動子の集まりとして解析する手法なのである。分子振動は調和振動的振る舞いが基本的に強く、非調和振動子性や、分極等の非線形性等の影響は(2)式において高次からの補正としか入らない。線形分光は、基準座標解析など簡便な方法で結果を比較できるのはよいのだが、非調和振動的である構造変化やモード間のエネルギー散逸等、化学的に重要な過程の検証に不十分である。

多次元振動分光法は、分子の非調和振動的動きを探るのに優れた実験方法であり、この実験結果と計算結果を比較することにより、ポテンシャルの妥当性など確度の非常に高い検証が可能である。“現実世界”側からも、タンパク質等の複雑な分子の多次元スペクトルを解析するという非常に強い要求があり、シミュレーションの大きな原動力となっている。多次元分光は多次元 NMR の振動分光版と称される事があるが、多次元 NMR の発展が、その解析プログラム発展に大きく依存していた事からも、この事情は理解できよう。

多次元分光シグナルを計算するためには、非線形の測定そのものをシミュレーションに含めて考える必要があり、またその敏感性ゆえに高精度のポテンシャル関数も必要となるなど、数々の問題

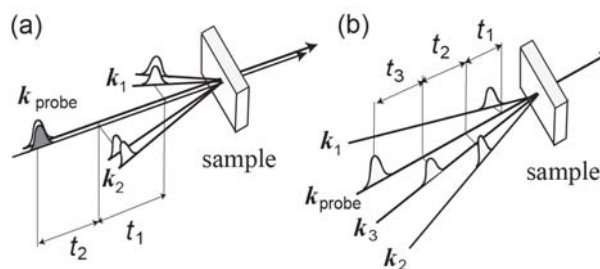


図1 (a) 2次元ラマン分光と(b) 2次元赤外分光のパルス配置。実験はパルス間の時間間隔を変化させながらシグナルをとり多次元マップとして系の解析を行う[2]。

をクリアする必要がある。これに向けて、現在各国で精力的な研究がおこなわれており、非線形応答のシミュレーションという新しいパラダイムを形成しつつある。本稿ではこの中でも、究極のシミュレーションともいえる非線形振動分光のフル分子動力学シミュレーションについて概説を行う。

2. 多次元振動分光

2.1 2次元ラマン分光と2次元赤外(IR)分光

多次元振動分光の歴史は Tanimura と Mukamel による理論モデルに基づいた提案に始まる[3]。この文献は、5次の2次元ラマン分光について主に述べられているが、赤外多次元分光の可能性（当時はラマンより赤外の実験の方が難しかった）、3次の2次元赤外分光に対応する7次の応答関数の導出等、多次元振動分光の基本となる事も含まれている。多次元分光の応答関数は以下のように書かれる[2]。 ($t_{123} \equiv t_1 + t_2 + t_3$ 等と定義した)

$$R_{Raman}^{(5)}(t_2, t_1) = -\frac{1}{\hbar^2} \left\langle \left[\left[\Pi(\mathbf{q}(t_{12})), \Pi(\mathbf{q}(t_1)) \right], \Pi(\mathbf{q}) \right] \right\rangle \quad (3)$$

$$R_{IR}^{(3)}(t_3, t_2, t_1) = \frac{-i}{\hbar^3} \left\langle \left[\left[\left[\mu(\mathbf{q}(t_{123})), \mu(\mathbf{q}(t_{12})) \right], \mu(\mathbf{q}(t_1)) \right], \mu(\mathbf{q}) \right] \right\rangle \quad (4)$$

ここで、(3) は2次元ラマン分光の応答関数で Π は分子の分極率、(4) は2次元 IR の応答関数で μ は双極子である。線形応答の場合と異なり、もし、これらの物理量は分極率や分極が分子座標の1次形で表され、かつモードが調和振動的であるならゼロとなる。これは2次元ラマンの場合は、カノニカル平均のために、期待値が $\langle qqq \exp[-\beta q^2] \rangle$ のように奇数のガウス積分になるため、2次元 IR は交換子をばらばらにした時に表れる負符号をもった項と正の項が干渉して打ち消しあうためである。信号が現れるためには分極の非線形性やポテンシャルの非調和性が必要で、このことは、線形分光では補正でしかなかった非調和振動子性が、多次元分光ではリーディングオーダーになる事を示している。多次元振動分光の鋭敏さはここから来るのである。

提案はラマンを中心に行われたが、実験的には多次元ラマン分光より、多次元 IR 分光の方が容易である事が判明し、多次元 IR の方が多次元ラマン分光より先行して行われた。これまでのところ、多次元ラマンは分子間振動、多次元 IR はより高周波の分子内振動を中心に行われている[4]。

2.2 2次元ラマンのフル MD シミュレーション

2次元ラマン分光のフル分子動力学シミュレーションは①平衡法、②非平衡法、③平衡・非平衡ハイブリット法の三種類の方法がある。

① 平衡法は、3体の応答関数を古典表式

$$R_{Raman}^{(5)}(t_2, t_1) = \left(\frac{1}{k_B T} \right)^2 \left\langle \Pi(\mathbf{q}(t_{12})) \dot{\Pi}(\mathbf{q}(t_1)) \Pi(\mathbf{q}) \right\rangle - \frac{1}{k_B T} \left\langle \Pi(\mathbf{q}(t_{12})) \{ \Pi(\mathbf{q}(t_1)), \dot{\Pi}(\mathbf{q}) \} \right\rangle \quad (5)$$

と直し、平衡シミュレーションで求めた古典軌道をもとに、そこに現れるポアソン括弧に由来する軌道の変化

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{q}(t)}{\partial \mathbf{q}(0)} & \frac{\partial \mathbf{q}(t)}{\partial \mathbf{p}(0)} \\ \frac{\partial \mathbf{p}(t)}{\partial \mathbf{q}(0)} & \frac{\partial \mathbf{p}(t)}{\partial \mathbf{p}(0)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 H}{\partial \mathbf{q} \partial \mathbf{p}} & \frac{\partial^2 H}{\partial \mathbf{p} \partial \mathbf{p}} \\ -\frac{\partial^2 H}{\partial \mathbf{q} \partial \mathbf{q}} & -\frac{\partial^2 H}{\partial \mathbf{q} \partial \mathbf{p}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{q}(t)}{\partial \mathbf{q}(0)} & \frac{\partial \mathbf{q}(t)}{\partial \mathbf{p}(0)} \\ \frac{\partial \mathbf{p}(t)}{\partial \mathbf{q}(0)} & \frac{\partial \mathbf{p}(t)}{\partial \mathbf{p}(0)} \end{pmatrix}$$

を評価し計算する手法である。この行列はカオスの世界でおなじみの安定性行列と言われる量と結びついた系の運動に大変敏感な量であり、多次ラマン分光の敏感性を特徴づける量である。平衡法による計算は、Saito・Ohmine [5], Ma・Stratt [6], Nagata・Tanimura [7,8]らにより用いられ、液体や表面吸着した分子の多次元分光解析などに用いられている。この方法は平衡 MD シミュレーションで軌道を計算し蓄えておく必要があるため、膨大なディスクスペースを必要とするのが弱点である。

②の非平衡法は、計算機上で非線形の実験をそのままシミュレーションしようという方法である。具体的には MD を回して平衡状態に達した系に、レーザーパルスに相当する外力を加え、その応答

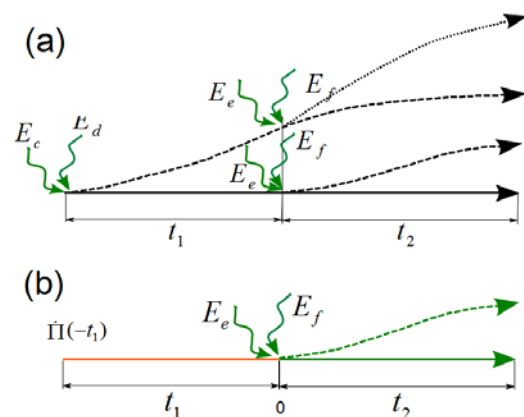


図2. (a) 非平衡法と(b) 平衡・非平衡ハイブリット法の MD 軌跡。非平衡法では低次の寄与を除くため合計4つの軌跡を異なる全ての t_1, t_2 について計算する必要があるが、ハイブリット法では t_1 間隔を平衡法で計算するため2つで済む。

を分極率から観測するというものである。プログラム上の実装は簡単なのであるが、5次のラマン応答だけを見るためには、より低次の3次の次数の寄与を取り除く必要があり、低次のシミュレーションを同時に行う必要がある。また、多次元マップをとるために異なるパルス時間間隔でシミュレーションを繰り返す必要もあり、サンプリングは平衡法に比較すると膨大なものとなる。また、外力が強すぎると7次などのより高次の寄与が混ざってしまうため、その検証にも注意を要する。これらのデメリットはあるが、それでもディスクに保存されたデータを用いる平衡法より計算は高速である場合が多い。非平衡法による計算は、Jansen・Snijders・Duppen[9]らにより行われている。

③平衡・非平衡ハイブリット法は、我々が開発した、①と②の良いところ取りした手法である[10]。①の問題点は、入れ子になったポアソン括弧由来の安定性行列の部分の収束性の悪さであり、②の問題点は異なる時間間隔や低次のシグナルを取り除くためのサンプリングの多さにある。ハイブリット法は、入れ子になったポアソン括弧の1次の部分は非平衡法で計算しようというもので、これ

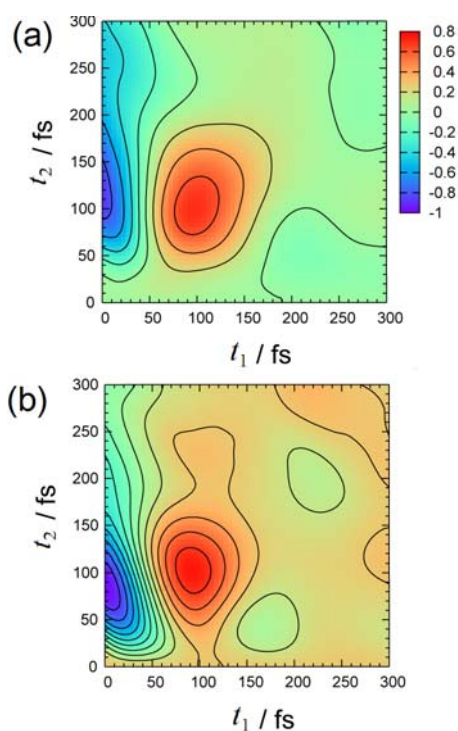


図3. ホルムアミド液体の分子間振動に対し、(a) modified-T と (b) OPLS ポテンシャルを用いて計算した2次元ラマン分光 zzzzz 成分の結果。多次元分光は非調和振動子性がリーディングオーダーに現れるため差異が顕著に表れる。この液体に対しては実験も行われている。詳細は[11]参照。

により安定性行列を直接評価することなく、またサンプリングを大幅に減らして多次元分光信号を得ることが可能である。その効果は顕著で、①や②の方法に比較し、計算時間は20倍以上改善された。我々は高速性を用いて数々の溶液に対する多次元分光のシミュレーションを行うと同時に、直接分子動力学ならではの利点である信号強度の見積もりも行った。その結果をもとに、トロント大学 Miller グループが実際に実験を行い、ホルムアミド溶液の分子間振動に対して、予想された信号強度でシグナルを検出する事に成功している[11]。また、異なるポテンシャル関数に対して、2次元ラマン信号を計算し、線形吸収スペクトルでは判別することができないポテンシャル関数も、2次元ラマン分光では差となって現れ、ポテンシャル関数に対する究極の検証になりうる事も示されている。(図3参照)

初期の Jansen らの二硫化炭素液体に対する計算結果は、Saito・Ohmine の結果と合致しなかったのだが、これは Jansen らが能勢・フーバー熱浴を付加したために生じたエラーだと Jansen らにより報告されている。この例が示すように多次元分光は動力学の違いにも大変敏感であり、計算には細心の注意が必要である。この敏感性は安定性行列の部分に由来するもので、これを用いた液体の相転移や軌跡の安定性などカオス的な議論も行われている。安定性行列の効果を直接測定できるというのは、2次元ラマン分光の優れた特徴の一つである。

2.3 2次元赤外分光のフル MD シミュレーション

赤外分光のフル分子動力学シミュレーションは、交換子の次数が一次高くなっているために、2次元ラマン分光より格段に難しく、2008年によく計算結果が報告された。直接計算以外の方法として、分子振動のモデルを仮定し、そのパラメータを分子動力学シミュレーションで求め、その結果を非線形応答関数の表式に代入して計算するパラメーター化による計算がよく行われている[12,13]。光学的活性なモードが少数でよく定義されているような系では、比較的有効であるが、散逸が強い場合や、多数のモードが強く結合しているような系では、このようなパラメーター化のアプローチは大変困難になる。この点、フル MD シミュレーションによる方法は、原理的にあらゆる状況に適用可能である。

フル MD によるやり方も、①平衡法、②非平衡

法, ③平衡・非平衡ハイブリット法の3つが考えられる. これまでのところ, ②の非平衡法のみが実現されている.

非平衡法はそのままでは図4(a)のようにパルス励起ごとに軌跡が増え(シミュレーション上は摂動の1次の誤差を抑えるために, それぞれの励起に対して正の摂動と負の摂動の2つを考える)8つの軌跡が必要である. 多次元シグナルマップを得るためには, これを異なる時間間隔で計算し直す必要があり, 高次になることによる収束性の悪さもあって計算量は莫大なものになる.

幸いMDで用いるLiouville演算子は時間反転可能であり, 軌跡は初期の平衡状態から計算する必然性はない. この特性を利用したものが, 計算の出発点を2つ目と3つ目の間に設定し, 一部は時間を逆発展させて計算するという前進・後退軌跡分割法である[14]. この方法を用いることにより, まず必要な非平衡軌跡が図4(b)のよう4つに減少させる事が出来る. また, 2次元IRでは固定した t_2 に対する t_1, t_3 についてのフーリエ成分を求めそのピーク形状の変化から揺らぎの相関を調べるという相関2次元分光法が多用されているが, 前進・後退軌跡分割法は, 中心から計算を始めるため計算効率が非常に高い.

この手法を用いて計算したHF液体の分子間振動に対する2次元IRシグナルと, 2次元相関スペクトルを図5に示す.(2次元相関スペクトルの計算方法や解釈の仕方については[4]を参照)

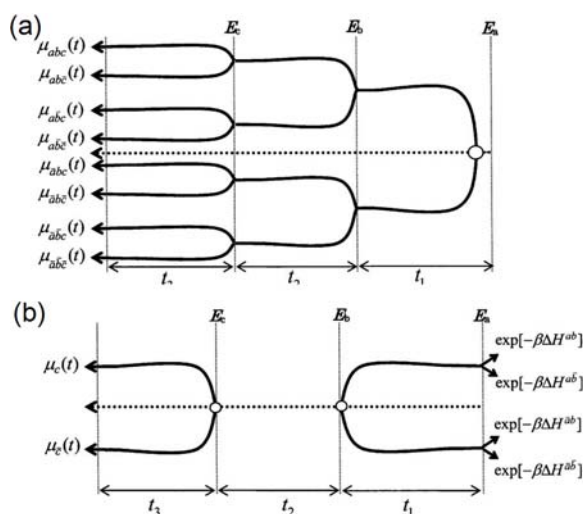


図4. (a) 2次元IRに対する非平衡MD法の軌跡と(b) 非平衡前進・後退軌跡分割法による軌跡. (b)ではシミュレーションは t_2 から始まり始時間と終時間で期待値を計算して平均を取る. [14]参照.

HFは水素結合の強い液体であり, 水素結合に起因した分子間振動が顕著に観測される. 図5(a)は計算された応答関数を時間領域でプロットしたものである. 相関スペクトルは

$$I_C(\omega_3, t_2, \omega_1) = \text{Im} \left\{ \int_0^\infty dt_1 \int_0^\infty dt_3 e^{-i\omega_1 t_1} e^{-i\omega_3 t_3} R_R^{(3)}(t_3, t_2, t_1) \right\} + \text{Im} \left\{ \int_0^\infty dt_1 \int_0^\infty dt_3 e^{i\omega_1 t_1} e^{-i\omega_3 t_3} R_{NR}^{(3)}(t_3, t_2, t_1) \right\}$$

で定義される. ここで $R_R^{(3)}(t_3, t_2, t_1)$ はリフェージング, $R_{NR}^{(3)}(t_3, t_2, t_1)$ は非リフェージング部分の応答関数で, 実験ではレーザーの波数ベクトルの方向を利用して光学的Liouville経路の寄与を分離して得るという位相整合条件を選ぶ事で求められる. しかしながら, MDシミュレーションBoxの大きさは波長に比較してはるかに小さく, シミュレーションでこの効果を取り入れるためには, 生の応答関数に対して位相整合変換[15]を施すか, エコー的な寄与だけなら t_2 についてフーリエ変換を行い, 余分な寄与を取り除いた後, 逆変換して用いる必要がある. このようにして計算した相関スペクトルが図5(b)である. 600cm^{-1} 近辺のピークは水素結合の振動に対応している. 負のピークが下に伸びているのは非調和振動子の寄与のためである.

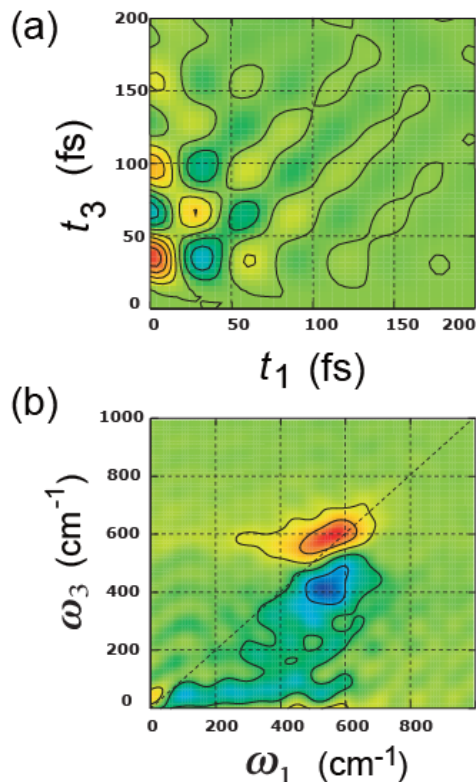


図5. (a) HF液体の分子間振動の時間領域の2次元IR信号と, (b) 2次元相関スペクトル. t_2 はゼロと設定した. 詳細は[14]参照.

現在の赤外分光の実験技術ではこの振動領域の実験は困難であるが、テラヘルツ領域の多次元分光が可能になればこのようなピークが観測される可能性がある[16].

2次元 IR のフル MD シミュレーションは現時点で HF 液体の他、水の分子間振動に対する例が報告されているだけだが [17], 現時点での実際の実験の主要なターゲットである分子内振動に適用する技術上の問題は何かなく、計算されるのは時間の問題であろう。分子内振動は分子間振動に比較して振動数が高く量子効果による影響が懸念されるが、分子振動における主要な量子効果はゼロ点振動であり、分光は振動準位間の差を見ているため、振動分光においてはこの差は現れ難いと考えられる。この事は、モデル系における2次元 IR の応答関数の表式が、非調和振動子性が弱い領域では古典的な表現も量子的な表現も同じになっている事から推察される[18]。より非調和振動子性が強い場合はブラウニアン系について厳密量子計算とその古典極限の計算を比較する事によって確認可能であり、現在計算が進められている。なお、MD よりモデルパラメーターを取り出して計算する手法ではこの問題は顕在化しにくい、量子的な表式を用いても MD 部分は古典であり、その妥当性はフル MD の場合と同様である。

3. まとめ

凝縮相を対象とした場合、理論のよしあしはさまざまな要素に覆い隠されて出にくいものである。近年複雑な物質を対象に様々なシミュレーションが行われているが、その成否の検証は実験しかないのが現状であろう。しかし、序章で述べたように通常の線形応答の実験は、理論の良し悪しを議論できるほど敏感ではない。より堅固な議論をしようとするなら、多次元分光の実験結果との比較が必須である。現時点で行われている実験は、よく調べられて比較的解釈の容易な分子を対象としたものが多いが、これは未知で複雑な分子に対する多次元分光シグナルが、複雑すぎて解析できなるといふ実験上の制約もさることながら、解析上の制約によるところも大きい。多次元分光は敏感であり、系やダイナミクスが異なれば、アウトプットも確実に異なる。タンパクのフォールディング過程やプロトンチャンネル等の多次元分光シミュレーションが可能となれば、実験も次のステージへと進化を遂げるであろう。また、量子効果を含むような複雑なダイナミクスは現実問題と

して、なんらかのモデル化は避けて通れない。タンパクや液体のような複雑な系を、いかに単純なモデルで表すかは理学の美学であり、複雑な過程を理解するための重要なステップである。これまで提唱されてきた様々なモデルによる結果と、シミュレーション結果、実験結果を比較することにより、複雑な系に対する我々の認識がより深まるものと期待される。多次元振動分光の直接シミュレーションはこの一角を担う重要な柱となるであろう。

しかしながら、その道のりは決して平坦ではないのも事実である。そもそも現時点でも MD シミュレーションは、電子状態を無視し、ポテンシャルや分極などを手で設定するアドホック的なものである。これに対し高次分光は、分極率や分極のみならず、誘起双極子・双極子相互作用など、電子状態に起因した相互作用に敏感であり、アドホック的にそれらを加えようとするとな関数形がどんどん複雑になり、唯でさえ時間を要する計算がもっと遅くなる。例えそれをクリアーしたとして、実験もより高次と進んでおり、計算精度に対する要求もより高くなっていく。これらを考慮して将来を予想すると、今後は第一原理分子動力学による多次元振動分光の計算が不可避と思われる。幸い多次元分光の計算は、サンプリングが重要であり並列化しやすい。第一原理計算に立脚した多次元振動分光シミュレーションは、あるいはその前段階としての QM/MM シミュレーションは、次世代超並列計算機の重要なターゲットになるであろう。

本稿ではフル MD 以外の多次元分光の進展についてほとんど触れる余裕がなかったが、量子散逸系によるモデル計算や、液体論に基づく考察など様々な研究が行われている。多次元分光に関しパワーポイントによるレクチャーノートをホームページ上で公開しているので、さらに興味があれば以下を参考されたい。

<http://theochem.kuchem.kyoto-u.ac.jp/members/tanimuraj.htm>

参考文献

- [1] 谷村吉隆, 化学物理入門, サイエンス社, 数理科学臨時別冊(2002).
- [2] Y. Tanimura, Stochastic Liouville, Langevin, Fokker-Planck, and master equation approaches to quantum dissipative systems, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **75**, 082001 (2006).

- [3] Y. Tanimura and S. Mukamel, Two-dimensional femtosecond vibrational spectroscopy of liquids, *J. Chem. Phys.* **99**, 9496 (1993).
- [4] Edit by S. Mukamel, P. Hamm, and Y. Tanimura, The topic of Coherent Multidimensional Optical Spectroscopy, Special issue of *Acc. Chem. Res.* July (2009) in press.
- [5] S. Saito and I. Ohmine, Off-Resonant Fifth-Order Response Function for Two-Dimensional Raman Spectroscopy of Liquids CS₂ and H₂O, *J. Chem. Phys.* **119**, 9073 (2003).
- [6] A. Ma and R. M. Stratt, Fifth-Order Raman Spectrum of an Atomic Liquid: Simulation and Instantaneous-Normal-Mode Calculation, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 1004 (2000).
- [7] Y. Nagata and Y. Tanimura, Two-dimensional Raman spectra of atomic solids and liquids, *J. Chem. Phys.* **124**, 024508 (2006).
- [8] Y. Nagata, Y. Tanimura and S. Mukamel, Two-dimensional Infrared Surface Spectroscopy of CO on Cu(100); Probing Intermolecular Coupling of Adsorbates, *J. Chem. Phys.* **126**, 204703 (2007).
- [9] T. L. C. Jansen, J. G. Snijders, and K. Duppen, The third- and fifth-order nonlinear Raman response of liquid CS₂ calculated using a finite field nonequilibrium molecular dynamics method, *J. Chem. Phys.* **113**, 307 (2000).
- [10] T. Hasegawa and Y. Tanimura, Calculating fifth-order Raman signals for various molecular liquids by equilibrium and nonequilibrium hybrid MD simulation algorithm, *J. Chem. Phys.* **125**, 074512 (2006).
- [11] Y. L. Li, L. Huang, R. J. Dwayne Miller, T. Hasegawa, and Y. Tanimura, Two-Dimensional Fifth-Order Raman Spectroscopy of Liquid Formamide: Experiment and Theory, *J. Chem. Phys.* **128**, 234507 (2008).
- [12] H. Torii, Effects of Intermolecular Vibrational Coupling and Liquid Dynamics on the Polarized Raman and Two-Dimensional Infrared Spectral Profiles of Liquid *N,N*-Dimethylformamide Analyzed with a Time-Domain Computational Method, *J. Phys. Chem. A* **110**, 4822 (2006).
- [13] W. Zhuang, T. Hayashi, and S. Mukamel, *Angew. Chem. Int.* 2009, in press.
- [14] T. Hasegawa and Y. Tanimura, Nonequilibrium molecular dynamics simulations with a backward-forward trajectories sampling for multidimensional infrared spectroscopy, *J. Chem. Phys.* **128**, 064511 (2008).
- [15] T. Kato and Y. Tanimura, Multi-dimensional vibrational spectroscopy measured from different phase-matching conditions, *Chem. Phys. Lett.* **341**, 329 (2001).
- [16] K. Okumura and Y. Tanimura, Two-dimensional THz spectroscopy of liquids: nonlinear vibrational response to a series of THz laser pulses, *Chem. Phys. Lett.* **295**, 298 (1998).
- [17] T. Yagasaki and S. Saito, Ultrafast intermolecular dynamics of liquid water: A theoretical study on two-dimensional infrared spectroscopy. *J. Chem. Phys.* **128**, 154521 (2008).
- [18] K. Okumura, D. M. Jonas, and Tanimura, Two-dimensional spectroscopy and the harmonically coupled anharmonic oscillators, *Chem. Phys.* **266**, 237 (2001).

著者紹介



長谷川太祐 (修士 (理学)) :

〔経歴〕2007年京都大学理学研究科化学専攻修士課程修了。京都大学理学研究科化学専攻博士課程学生。〔専門〕分子動力学シミュレーションによる分光解析〔趣味〕. ジョギング

著者紹介



谷村吉隆氏 (博士 (理学)) :

〔経歴〕1989年慶応義塾大学理工学研究科物理学専攻博士課程修了, イリノイ州立大学, ロチェスター大学ポスドクを経て, 94年分子科学研究所助教授, 2003年京都大学理学研究科化学専攻教授〔現職〕. 〔専門〕非平衡統計力学, 〔趣味〕登山 (1980年ガルワールヒマラヤ Kharchakund 峰 6632m 初登頂).