



國立交通大學
National Chiao Tung University

出國報告（出國類別：國際會議、學研訪問）

第 29 屆化學反應國際會議及訪問東
北大學高橋正彥教授實驗室

服務機關：應用化學系

姓名職稱：朱超原 教授

派赴國家：日本 仙臺 東北大學

出國期間：2013/06/02~06/09

報告日期：2013/07/21

摘要

過去四十年來，動量空間的電子軌道的實驗方法已被發展出來，這種方法被稱為電子動量譜學 (EMS)，是建立在電子碰撞電離反應的 Bethe 區域附近包含在 1 千電子伏或更高階的電子能量。高橋正彥教授係世界上最先提出使用 EMS 方法去看三維分子軌道，在高能的電子和原子或分子碰撞中，一個原子或分子從初始狀態到另一個電子能量較高狀態的，結果將具有較低的動能非彈性散射的電子出現，這樣一個特定的碰撞過程中發生的概率用相應的雙微分截面來表示。

EMS 型實驗的理論，由 McCarthy、Smirnov 及 Neudatchin(核結構理論家) 獨立的提出了 (P, 2P) 反應的理論工作，在反應中，一個質子從細胞核噴出由於高能量的質子轟擊，以及觀察到的非彈性散射的質子；高橋正彥教授提出 (e, 2e) 電子與分子碰撞反應的實驗，在反應中，一個電子從細胞核噴出由於高能量的電子轟擊，以及觀察到的非彈性散射的電子，由高橋正彥教授提出這個方法去看三維分子軌道，我將在 (e, 2e) 電子與分子碰撞反應的看三維分子軌道理論研究方面和高橋教授實行合作。

『第 29 屆化學反應國際會議』原本是日本國內的會議，從第 19 屆起擴展為國際會議，這個會議每一年舉行一次，大會範圍非常具體，包含氣相、凝縮相、表面、界面領域的化學反應速度論、動力學、勵起狀態等相關實驗和理論。

目次

一、目的.....	4
二、過程.....	5
三、心得及建議.....	8
四、附錄.....	9

本文

一、目的

『第 29 屆化學反應國際會議』原本是日本國內的會議，從第 19 屆起擴展為國際會議。化學反應國際會議”是化學動力學與化學反應動力學領域的重要國際會議，每一年舉辦一次。研討會涉及在氣相、凝縮相、表面、界面中的光子、電子、原子、分子、分子團簇等相互作用以及化學反應等多個前沿相關實驗和理論，藉此機會我們更有機會接觸有關化學反應動力學之研究。本屆會議的演講和海報更多注重傳統的原子分子動力學實驗和理論—基礎的理論計算(MRCI, SACI, Onion 第一原理量子化學方法，量子散射理論，直接的分子動力學理論，…)和實驗小分子動力學(分子束技術，雷射輔助電子動量光譜技術，二維的頻率加總振動能譜技術，紅外-紫外光-可見光光譜超快激發-探測技術，…)，熱門的模擬生物分子和材料設計動力學較少。

起源於 2012 年 10 月 23 日—27 日在臺北中研院原分所舉行的“第十屆亞洲原子分子物理國際研討會”(AISAMP 10)。“亞洲原子分子物理國際研討會”是原子分子物理領域的重要國際會議，每兩年舉辦一次。由於研討會涉及原子分子結構理論、冷原子物理、量子資訊、飛秒鐳射-原子分子相互作用以及精密光譜測量等多個前沿熱點課題，因此吸引了來自世界各地的 80 多名專家學者參加。日本東北大學高橋正彥教授係世界上原子與分子碰撞理論與實驗研究的專家，其通過實驗觀察分子軌道的研究成果世界有名，因在相關理論計算研究的方面需要協助與合作，故邀請我在參加該校所舉辦“第 29 屆化學反應國際會議”的前後順道訪問其實驗室，以進行演講、提供指導，並提供了相關領域的最新研究進展。此次學術訪問與合作，除了透過雙方交流不僅可以促進日本東北大學與臺灣國立交通大學的良好合作，對於國際上相關領域的研究單位和研究組更能相互瞭解，為今後進一步的合作打下了基礎。在提昇本校學術地位及研究發展水準的方面，也將有極大的助益。

此次參訪完成的工作及具體成果為近年來在(e,2e) 電子與分子碰撞反應的實驗與理論研究方面領域的進展，雙方以得到了互相交流合作的共識。

二、過程

本屆會議內容涉及本領域國際最新研究動態及前沿工作，直接反映了未來發展走向。其中大會邀請 5 人擔任大會報告，22 人擔任口頭報告共近百篇的壁報展出。會議組織委員會邀請我擔任大會報告之一講述〈分子動力學理論中的電子非絕熱躍遷及量子穿隧理論〉。我的學術講演涉及基礎分子動力學理論方面，我發展了一種統一的半經典理論來模擬分子動力學中的電子非絕熱躍遷及量子穿隧幾率的解折公式。這個新的解折公式很容易應用到分子動力學中的非波恩－奧本海默軌跡，去處理因位能曲面交叉/非交叉引起的非絕熱躍遷。依照量子力學原理，一個系統的能量及波函數與所有原子核及電子的運動狀態有關，但由於原子核的質量遠超過電子，因此一般來說原子核的運動遠較電子為慢，在波恩－奧本海默近似下，體系波函數可以被寫為電子波函數與原子核波函數的乘積。因位能曲面交叉，波恩－奧本海默近似失敗。因此電子非絕熱躍遷及量子穿隧將在不同的波恩－奧本海默態中出現。我們的新解折公式解決了這個問題。非絕熱躍遷及量子穿隧新解折公式在研究原子分子動力學理、光化學理論、原子分子激發態吸收與發射光譜理論、原子和分子反應過渡隧道的基本程序、化學反應的理論方法、勢能表面反應動力學、非絕熱化學反應動力學理論、化學動力學理論與多維電子躍遷中有廣泛的應用。此次演講吸引了五個人來提問和討論，這是一次富有成果的會談和討論，有些人對半古典理論中的非絕熱躍遷幾率計算精度提問，我向他們解釋我們的半古典理論中為什麼包含更多的量子效應，並向他們解釋為什麼高能的原子分子碰撞中非絕熱量子穿隧影響仍然重要。本屆會議規模不大，但是內容仍然很精彩，個人受益良多，我對下述的三篇論文顯示特

別濃厚的興趣。對擴展我研究領域很有幫助。

國際知名學者 Gereon Niedner-Schatteburg 教授講述 <雙色光子過渡金屬錯合物及過渡金屬錯合物碎裂動力學能增強紅外光光譜> 如何使用雙色光子飛秒雷射來量測分子紅外光光譜訊號。傳統的單色光子偵測不到的分子紅外光光譜，有時誤認為是不發射亦不吸收電子激發態，雙色光子都可以偵測到很強訊號。過渡金屬錯合物之電子光譜，是判斷其配位基種類、氧化態等等的重要依據。過渡金屬錯合物的核心金屬離子可以與許多種類的分子與離子鍵結，因此在催化劑、電致發光及光電研究 (例如：磷光材料製備的 OLED 元件)是非常有用的。

國際知名學者 Nobuhiro Ohta 教授講述 <電場在光激發電子動力學及複合分子材料中的應用> 如何利用外加均勻電場來研究分子的吸收和熒光光譜的變化，從而來偵測分子基態和激發態結構。也可以用來研究生物分子和材料的新特性和新功能。近年來由於先進材料發展及對生物分子的深入研究，電子轉移反應的重要性日益顯著。電子轉移過程在許多化學反應中扮演了不可或缺的角色。隨著電子轉移，反應物的價數改變，伴隨著能量的移轉或是化學鍵的變化，如氧化還原反應、電化學反應及光誘導電荷分離反應等。電子轉移耦合值的大小往往會影響及決定其反應速率，因此，用理論計算的方法估計電子轉移耦合值，不但能提供一深入了解實驗結果的途徑，而且也可提供功能性分子設計的重要依據。

國際知名學者 Shinkoh Nanbu 教授講述 <己二烯與己三烯之間的光化學異構化反應的理論研究> 如何通過量子化學計算構建 on-the-fly 勢能面的直接的分子動力學程式來研究己二烯與己三烯分子異構反應中平衡構型、過渡態及圓錐交叉的動力學。例如：光能量收集在樹狀分子內部進而誘發光化學反應，而實驗方法並無法觀察到此類振動能量的傳遞與樹狀分子內部的異構化機制。因此，需要用理論分子動力模擬。

此次參訪日本東北大學多元物質科學研究所量子電子科學研究分野高橋正彥教授實驗室，了解到高橋實驗室工作及具體成果為近年來在(e,2e)

電子與分子碰撞反應的實驗與理論研究方面領域的進展。高橋正彥教授係世界上最先提出使用 EMS 方法去看三維分子軌道，在高能的電子和原子或分子碰撞中，一個原子或分子從初始狀態到另一個電子能量較高狀態的，結果將具有較低的動能非彈性散射的電子出現，這樣一個特定的碰撞過程中發生的概率用相應的雙微分截面來表示。

我在參訪其實驗室期間，聽取了高橋實驗室山崎助理教授報告〈分子振動對乙烯分子的價電子動量分佈的影響〉，渡邊昇副教授報告〈(e, 2e)碰撞電子動量光譜實驗技術在研究同步游離激發化學反應動力學中應用〉，與高橋組學生討論提供指導，我在多元物質科學研究所進行相關領域的學術演講〈法蘭克-康登模擬計算分子振動的電子光譜〉，古典的法蘭克-康登原理的近似是：分子實體內及其週圍環境的原子核位置改變時發生的電子轉移。此結果的狀態稱為法蘭克-康登 Franck-狀態，且其轉移為一種垂直轉移。此原理的量子力學形式是電子轉移的強度與發生轉移的兩個振動狀態波函數間重疊積分。此次演講吸引了多人來提問和討論，互相交流研究分野的成果。

透過此次雙方的進一步接觸，促進了日本東北大學與臺灣國立交通大學的良好交流，已為今後進一步的合作打下基礎，對於國際上相關領域的研究單位和研究組織亦能漸漸由此相互瞭解，在提昇本校學術地位及研究發展水準的方面，亦得到極大的助益。現準備和日本東北大學高橋實驗室的研究群準備長期合作研究。實際上，高橋實驗室兩名研究生(Keiya Oishi and Hiroyuki Nakazawa) 10 月份來我的實驗室學習半經典理論來模擬分子動力學中的電子非絕熱躍遷及量子穿隧幾率的解折公式，絕熱躍遷幾率的計算方法，而且將約束哈密頓方法用於限制性分子動力學模擬過程中。

三、心得及建議

這次國際會議討論熱烈，顯示出本研究領域的勃勃生機，會議吸引了國際大批學者參加，參與者來自世界各地人數，其中日本、韓國、臺灣、德國、英國等上百位知名學者參加了這次會議，成為名副其實的化學反應學國際研究盛會。我看到了組織委員會提出了非常大的努力，順利地組織好每一個細節 (very Japanese)，其嚴謹的態度非常值得學習及效法；在會議中，我使用日語演說，我認為，這次大會是全面成功的，我學到了很多東西，交大應可多多舉辦類似的國際研討會。

日本的景氣雖然不好，但是政府對於學術科學計算方面的研究還是沒有忽略，最近日本政府在日的好幾個單位投入一大批經費恢復理論計算模擬作用的研究，這方面的研究決定了其構造而引起世界科學發達的國家投入很可觀的經費研究作用的機制，為期十年成果相當豐富，後來平靜了一陣子，最近因為對於基礎的方面的研究得到相當豐富的成果，而引起日本政府因為能源的關係而再度投入大批經費做理論計算相關的研究。此次學術訪問與合作，除了透過雙方交流不僅可以促進日本東北大學與臺灣國立交通大學的良好合作，對於國際上相關領域的研究單位和研究組更能相互瞭解，為今後進一步的合作打下了基礎，在提昇本校學術地位及研究發展水準的方面，也將有極大的助益，現在我和日本東北大學高橋實驗室的研究群準備長期合作研究。

四、附錄

參訪日程表

時間	主題	地點	世話人
102年6月2日 16:00~19:00	研究討論	高橋實驗室	山崎優一助理教授
102年6月3日 9:00~12:00 13:30~15:00 16:00~17:00	研究討論 朱教授演講 參觀高橋實驗室	高橋實驗室 多元物質科學研究所 高橋實驗室	山崎優一助理教授 高橋正彦教授 高橋正彦教授
102年6月4日 9:00~12:00 13:30~17:00	高橋組學生報告 與高橋組學生討論	高橋實驗室 高橋實驗室	山崎優一助理教授 山崎優一助理教授
102年6月5~7日	參加國際會議	SKURA Hall	高橋正彦教授
102年6月8日 9:30~12:00 13:30~17:00	包含研究討論 山崎助理教授報告 渡邊副教授報告	高橋實驗室 高橋實驗室	高橋正彦教授 高橋正彦教授
102年6月9日 10:00~12:30	研究討論	高橋實驗室	山崎優一助理教授