

馬詰研究奨励賞海外研修等実施報告書

令和 8年 5月 22日

工 学 研 究 科 長 殿

所 属： 分子工学 専攻
課 程： 博士後期課程 3 回生
氏 名： 鈴木 さら

研修の目的	溶液中における分子の光化学過程を、励起状態 QM/MM シミュレーションを用いて解析する。また、受入先で独自に開発されている、Grassmann 内挿・外挿法などの電子状態計算に関する方法論について学ぶ。		
研修の期間	2026年1月31日から2026年4月28日		
研修の実施先	日程	滞在地	研修実施機関名等（指導教員名）
	2026年2月2日 ~2026年4月27日	ピサ	ピサ大学化学科 (DCCI) (Prof. Benedetta Mennucci)
研修の概要	光励起後に分子の対称性が失われ、電荷分布が非対称化する励起状態対称性破れは、溶媒環境の影響を強く受ける光化学過程として知られている。この現象を示す代表的なモデル分子であるドナー・アクセプター・ドナー型四極子分子を対象として、溶液中における励起状態 QM/MM シミュレーションを行い、実験的に観測された時間分解 IR スペクトル形状の溶媒依存性の起源について解析した。		
研修の成果等	普段の研究では、主に静的な電子状態計算に基づいて溶媒効果の解析を行っている。本研修では、実際にシミュレーションをおよび解析を行うことで、電子励起後の分子過程において、溶媒環境の時間変化が果たす役割について理解を深めることができた。また、電子状態を Grassmann 多様体上の点と見なす方法論について学ぶことで、電子状態に対する新たな視点を得るとともに、今後の研究に展開できそうなアイデアを得ることができた。		
その他 ※本海外研修経験による将来の抱負等	本留学で取り組んだテーマについては学会発表を予定しており、論文化にむけて、帰国後も研究および受入先とのディスカッションを継続している。最後に、このような貴重な機会をご支援していただいたことに深く感謝申し上げます。		