



# 共鳴エネルギー移動と発光減衰曲線の コンピュータシミュレーション

## Resonance Energy Transfer and Computer Simulation of Luminescence Decay Curves

田 縁 正 治

双極子-双極子相互作用によるエネルギー移動が起こる系でドナーの発光減衰曲線のコンピュータシミュレーションを行った。このシミュレーションでは、まずドナーとアクセプターがランダムな分布であることを仮定しコンピュータで一様分布する疑似乱数を生成してドナーとアクセプターの距離を設定した。そして、励起状態から基底状態への遷移は自然放出が確率過程であることからこの過程を疑似乱数で表すことで行った。その結果、ドナーの発光減衰曲線は、初めは速く減衰し、時間が経つと遅くなるような結果を得た。理論的な研究からエネルギー移動の効率はドナーとアクセプターの距離の6乗に逆比例し、ドナーの発光減衰曲線は非指数関数的になることが知られている。また、実験的研究によると非指数関数的な減衰曲線が得られている。本研究の結果は理論および実験結果と一致することが確認できた。更にアクセプターの発光寿命が短い場合のアクセプターの減衰曲線もシミュレーションで得た。これらの結果は理論計算が困難な場合でも実験結果を解析する手段を提供する良い方法であると考えられる。

**キーワード：**発光減衰曲線、双極子-双極子相互作用、エネルギー移動、コンピュータ、シミュレーション

### 目 次

- I 序論
- II シミュレーション環境
  - 1 ソフトウェア開発環境
  - 2 グラフィックス
- III 理論背景
  - 1 自然放出と誘導放出
  - 2 双極子-双極子相互作用

#### IV 発光減衰曲線

- 1 シミュレーションの条件
- 2 ドナーの発光減衰曲線
- 3 アクセプターの発光減衰曲線

#### V 結果と考察

---

### I 序論

原子力発電所の運転停止や地球温暖化などの問題から、現在はエネルギーを効率的に作り出すための研究が重要視されている。通常、エネルギーの源はポテンシャルエネルギーや化学エネルギーや原子力エネルギーなどが考えられる。ポテンシャルエネルギーは水力など、化学エネルギーは化石燃料としてこれまでに有効利用されてきたが、もとをたどれば太陽光のエネルギーの間接的な利用である。光を直接エネルギーに変えることができれば効率の良いエネルギーの利用が可能となることから、最近では環境にやさしいいわゆるサステイナブルなエネルギーとして、太陽光発電に代表されるような光のエネルギーが注目を集めている。

ひとつの光子のエネルギーはその振動数にプランク定数を掛けて計算することができる<sup>1</sup>ので、物質が光を吸収したときに利用可能な最大エネルギーを計算することができる。しかし、実際はさまざまな原因でこの最大エネルギーを利用できる訳ではない。光と物質の相互作用は、古典的には負の荷電粒子である電子が電磁波としての光によって揺り動かされることが主要なメカニズムである。現代科学ではこの古典的な描像を量子力学的な演算子に置き換えることによって相互作用が表現される。光と物質の相互作用の結果、さまざまな現象が起こることが知られている。たとえば、基底状態から励起状態に遷移することで光のエネルギーを物質に取り込むので、この過程は光合成の初期段階を説明するために有用である。光が物質に吸収されなくてもラマン散乱やレーリー散乱が起こることもある。地球温暖化の原因物質とされる温室効果ガスは原子核が振動するいわゆる基準振動の振動数が赤外線領域にあり、地球外に放出されるはずの光エネルギーを吸収して熱エネルギーに変換する。

物質が光を吸収した後もさまざまな過程が考えられる。分子が電子的に高いエネルギー状態である励起状態にあるならば通常は第一励起状態まで無輻射的に遷移し、その後無輻射的かあるいは発光して基底状態に戻ることがある。この一連の過程はKashaの法則として知られている<sup>2</sup>。第一励起状態からの過程では前述の過程の他にわずかな例外がある。その例外は、相対論的な効果である電子スピンと軌道角運動量の相互作用により、いわゆる系間交差あるいは項間交差とよばれる過程が起こり、励起三重項状態に遷移することである<sup>2</sup>。励起三重項状態と区別するために初めの第一励起状態は励起一重項状態と呼ばれる。この励起三重項状態にある分子がドナーとな

り、その励起エネルギーを他のアクセプター分子に移動する過程は電子の交換相互作用が原因とされている<sup>3</sup>。この過程はドナーとアクセプターの分子間距離に依存するので、分子の分布によっては理論計算が困難なことが多い。

本研究では、双極子-双極子相互作用によりエネルギー移動が起こる場合を対象とする。分子間相互作用によるエネルギー移動は量子力学的な過程であるから、その遷移は確率的であると考えられる。したがって、ランダムな数を基にすることでエネルギー移動をコンピュータでシミュレーションを行うことが可能になると考えられる。そこで、本研究ではドナーが第一励起状態にあり、アクセプターが基底状態にある状態でエネルギー移動が共鳴的に起こる場合のコンピュータシミュレーションを試みる。双極子-双極子相互作用の効率は分子間距離の6乗に逆比例することが知られている<sup>3</sup>。そのため、交換相互作用よりも遠くまで届くとされ、多くの分子でその研究がなされてきたことからここでの試みは十分な意義を持つと考えられる。本研究に先立ってドナーとアクセプターの間の距離に逆2乗で依存する相互作用を仮定してコンピュータシミュレーションが試みられた<sup>4</sup>。本研究はすでに試みられたコンピュータシミュレーションを双極子-双極子相互作用の場合に応用するものである。

## II シミュレーション環境

### 1 ソフトウェア開発環境

前はコンピュータソフトウェアの開発言語としてJavaを選択した<sup>5</sup>。その理由は11億台のデスクトップで実行されており、30億台の携帯電話で実行されているといわれるように多くの人が利用していて普及率が高いことであった。その言語仕様はオブジェクト指向という言葉で表わされるようにそれまでに開発された言語の良い部分を取り入れて洗練されている<sup>6</sup>。また、無料で入手することができることから、本研究の成果を多くの人が利用することができることも理由としてあげられた。Javaには本研究で必須である疑似乱数を生成する機能が用意されていることも重要な理由であった。以上の理由はそのまま本研究でも受け継がれた。

開発環境として本研究でも統合開発環境としてEclipse<sup>7</sup>を採用した。EclipseはEclipseコンソーシアムが開発している統合開発環境で、機能が豊富なことが魅力である。本研究ではディストリビューションとしてEclipse Classic4.2を選択した。

### 2 グラフィックス

前はグラフィックス環境として、SWTを利用した。SWTは重量コンポーネント<sup>8</sup>の呼びだしと呼ばれ、その処理はJNI (Java Native Interface) を通じてプラットフォームが提供するシステムコールを呼びだしている。32ビットのWindowsの場合はWin32APIを呼び出すことになる。この場合はOSが提供する機能を高度に引き出すことができる反面、移植性に劣る。一方

でSwingは軽量コンポーネントと呼ばれ、JavaVM上で実行されることから、実行速度の面で不安視されることがある。本研究では移植性に勝るSwing<sup>6</sup>を利用してその速度などを調べることとした。

### III 理論背景

#### 1 自然放出と誘導放出

励起状態にある分子が基底状態に戻る過程は大きく分けて自然放出と誘導放出の2つある。誘導放出は与えた電磁場を振動電場と考えることにより説明ができ、与えた電磁場と位相がそろった光子を放出するとされている。これがレーザーの原理<sup>9</sup>となっている。一方で自然放出は放出される光の位相や方向がばらばらで半古典論ではその説明が困難であるかのように見える。しかし、これらは電磁場を量子化することによって得られる多数のモードを考慮することにより自然に説明できる。調和振動子が持つ零点振動によって誘導放出と同様に説明でき、さらに多数のモードがあることから、位相や方向がばらばらであることも説明できる。

本研究では最終的にこの自然放出による発光過程を通じて分子の中のエネルギーの変遷を研究する手法を発展させるものである。特に、コンピュータによるシミュレーションを行うので、観測可能な現象だけでなく、観測不可能な量にまで言及することが可能である。

#### 2 双極子—双極子相互作用

高エネルギーの紫外線などを使うとドナーを第一励起状態に励起することができる。励起状態となった分子は自然放出により発光して基底状態に戻る。光を放出しないで無輻射的に基底状態に戻る過程を加えても、発光の減衰曲線は指数関数的となる。しかし、励起状態にある分子がその励起エネルギーを他の分子に移動させることにより、非指数関数的な減衰曲線が観測されることがある。この減衰曲線はエネルギーを受け取る分子の性質や空間的な分布により影響を受け、解析が困難なことがある。本研究では2つの分子の間のエネルギーのやり取りをコンピュータによるシミュレーションを行うことで理論的な研究が困難な場合でも解析可能にするための手段を開発する。エネルギーのやり取りがあることから始状態と終状態が存在する。初めにこの状態を明確にしておく。エネルギーを渡す方の分子をドナー、受け取る側の分子をアクセプターと呼ぶ。初状態ではドナーが励起状態にあり、アクセプターが基底状態にあると考える。終状態はドナーが基底状態にあり、アクセプターが励起状態にあると考える。これらの2つの状態間の移行がエネルギー移動と考えられる。注意しなければならないのはここで議論しているのは発光を伴わないエネルギー移動であり、再吸収のような過程によるエネルギーの移動は輻射的では考慮していない。この無輻射的なエネルギー移動の研究例は多い<sup>10,11</sup>。

Försterによるとこの相互作用はドナーとアクセプターの距離 $R$ の6乗に逆比例する。2つの

遷移双極子があることから双極子-双極子相互作用と呼ばれる。量子力学によれば遷移の確率はいわゆるGolden Ruleによることから、本研究ではエネルギー移動の確率は距離 $R$ の6乗に逆比例する<sup>12</sup>としてコンピュータによるシミュレーションを行う。

## IV 発光減衰曲線

### 1. シミュレーションの条件

2つの分子間でエネルギー移動が起こる場合を取り扱うので、ドナーとアクセプター間の距離が重要である。本研究では、アクセプターはドナーの周りにランダムに分布しているとし、前回と同じ分布関数を用いることにした。また、ランダムな数も前回と同じ数を用いることにした。ドナーの寿命よりは若干長い時間を観測時間とし、この観測時間を500分割して各短い時間の間に発光したドナーの数をカウントした後にグラフ上の1点とすることにした。時間の単位は応用範囲を広くするために特に指定しなかった。ドナーの寿命に合わせてとれば良いと考えられる。また、発光強度についても単位は指定しなかった。これはドナーから発光される光子の総数が直接観測値になる訳ではなく、観測系の口径や感度に依存するからである。

### 2. ドナーの発光減衰曲線

自然界の現象、特に原子や分子のレベルで起こる現象の説明は量子力学によらなければならない。量子力学によると励起状態にある分子が自然放出や無輻射的に基底状態に遷移する過程は確率的であることが知られている。したがって、本研究ではこの確率をランダムな数を用いて表現してコンピュータシミュレーションを行う。このような条件では、理論的にも実験的にも励起状態からの発光は指数関数的になる。本研究の基になった研究ではコンピュータシミュレーションによる発光の減衰曲線を調べたが、その結果指数関数的となり、理論・実験の両方と一致する結果を得た。また、前回はドナーとアクセプター間のエネルギー移動の確率が距離の2乗に逆比例する場合を扱った。今回はFörsterに始まる研究<sup>12</sup>で明らかになった双極子-双極子相互作用が原因でエネルギー移動が起こる場合を扱う。この場合はドナーとアクセプター間のエネルギー移動の効率は距離の6乗に逆比例する。前回よりもエネルギー移動により到達する距離が短くなり、効率が悪くなることが予想された。

グラフィックス環境として、前回はSWTを利用したが今回はSwingを利用してその扱いやすさを比較することも本研究の目的のひとつである。SWTでは

```
import org.eclipse.swt.widgets.Canvas;  
import org.eclipse.swt.widgets.Display;  
import org.eclipse.swt.widgets.Shell;  
import org.eclipse.swt.graphics.*;
```

とインポート宣言を行い、

```
Display display = new Display();
Shell shell = new Shell(display);
shell.setText("Energy Transfer");
Canvas canvas = new Canvas(shell, org.eclipse.swt.SWT.NONE);
canvas.setBounds(0,0,700,700);
shell.open();
GC gc = new GC(canvas);
gc.setClipping(0,0,700,700);
```

とCanvasクラスのオブジェクトを作成し、そのグラフィックコンテキストGCを取得して

```
gc.drawLine(xStart, yHeight, xStart+observeN, yHeight);
```

のようにしてグラフを描いていた。Swingではこれとは全く違う方法で描くことになった。

```
import java.awt.*;
import java.awt.event.*;
```

とインポート宣言を変更し、

```
public class DDEnergyTransfer extends JFrame{
```

とJFrameクラスのサブクラスを作成してウインドウを作成した。そしてそのウインドウの中に

```
class Canvas extends JPanel{
```

とJPanelのサブクラスとして作成したパネルを張り付け、そのpaintComponentメソッドを

```
public void paintComponent(Graphics gc){
```

とオーバーライドしてその中で

```
gc.drawLine(xStart + t-1, yHeight - prevY, xStart+t, yHeight-currentY);
```

のように書いてグラフを描いた。SWTとは全く異なる手法であり、SWTからSwingへの書き換えは機械的ではない。また、シミュレーションの計算においても変化があった。SWTの場合はemittedNというint型の変数を用意し、発光したドナーの数をカウントした後にすぐにグラフを描いた。Swingではシミュレーションの計算を行うメソッドとグラフを描くメソッドが分離されるため、emittedNをint型の配列とし、あらかじめすべての要素に計算結果を代入しておき、グラフを描くときはその配列からデータを取り出すことで処理した。

実際のシミュレーションでは前回とはわずかに違う方法に変更し、それがエネルギー移動をより明確に表現することに役立った。つまり、前は時刻  $t=0$  を励起直後とし、励起状態にあるドナーの分布がランダムと考えられる状態としたが、グラフは  $t=1$  から描いていた。実際の実験でも観測は励起直後からではなく、励起光がなくなってからある時間間隔をおいてから行うことが多い。しかし、今回は時刻  $t=0$  から観測することとした。この結果、非指数関数的な減衰曲線がより明確に見えることが分かった。実際の減衰を観測するためのコードは

```
for(int t=0; t<observedN; t++){
```

と時刻の経過を表現し、

```
emittedN[t] = 0;
```

と初期化しておき、励起状態にある各ドナーごとにランダムな数で光を発して基底状態に戻る確率を計算し発光したドナーの数をemittedN[t]に加算しながら代入した。そして同じ時間間隔に、もうひとつの緩和過程である双極子-双極子相互作用によるエネルギー移動の確率を

```
double judge =
```

```
rnd[rndN+]/distance[i]/distance[i]/distance[i]/distance[i]/distance[i]/  
distance[i]*tRate;
```

と計算し、その結果が0.5より大きい場合にエネルギー移動が起こると判定した。このようにして発光したドナーの数をカウントした結果を時間とともにグラフにしたのが図1である。横軸は時刻0にドナーを励起した後の経過時間、縦軸はドナーの発光強度を表す。したがって、図1はドナーの発光減衰曲線を表している。このグラフは図1の下方に描かれたグラフである。対数表示と記したもうひとつの減衰曲線は前記の減衰曲線の対数をとったものである。ドナーとアクセプターの距離はランダムに分布しているので、ドナーとアクセプターの距離が近いペアもあれば、遠いペアも存在する。したがって、実験的には、時刻0からの経過時間が短い時は減衰速度が速く、その後だんだん減衰速度が遅くなるのが観測されている。ここでのシミュレーション結果である図1を見ると実験結果と同じ傾向が明瞭に表現されていることが確認された。また、対数表示から分かるように経過時間が長くなると、ほぼ直線的になっており、エネルギー移動が効率良く起こ

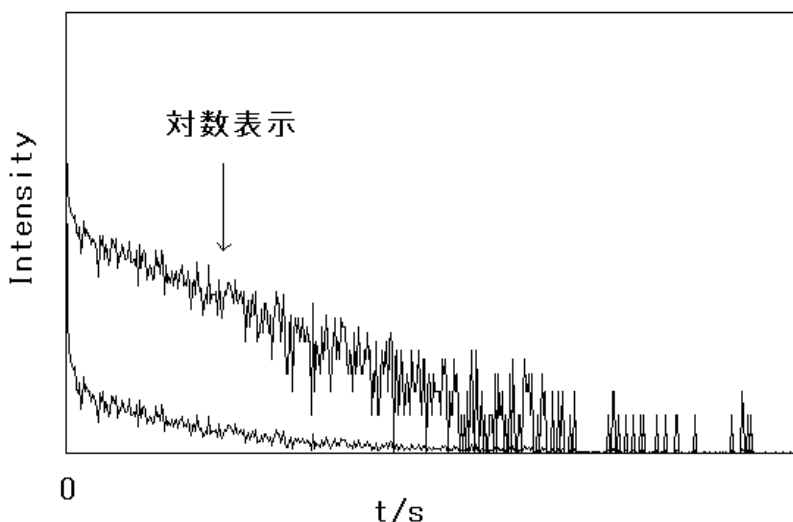


図1 ドナーの発光減衰曲線



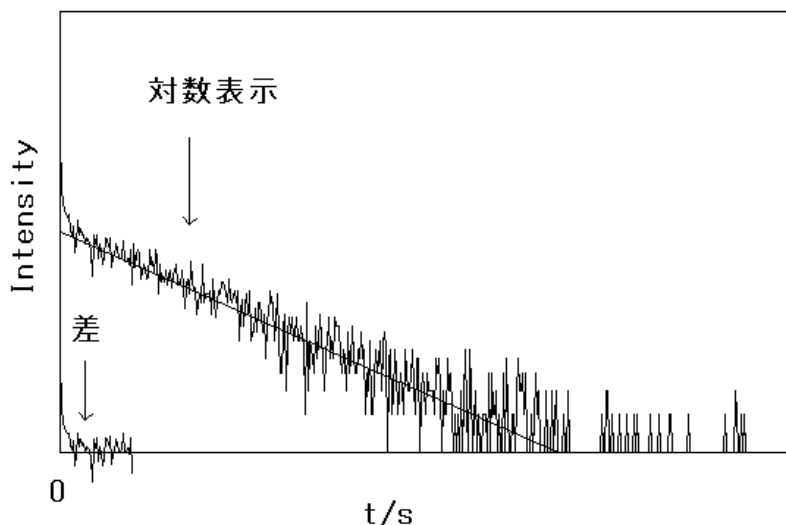


図2 ドナーの発光減衰曲線の非指数関数的な部分

るのは経過時間が短い間であることもわかる。

図2はドナーの発光減衰曲線のうち、非指数関数的な部分を取り出した減衰曲線である。ドナーからアクセプターへのエネルギー移動はドナーとアクセプターの分子間距離が短いペアは早い時間にエネルギー移動が起こり、分子間距離が長いペアは遅い時間にエネルギー移動が起こると考えられる。そして、ある一定時間が経過すると、分子間距離が長く、実質的にドナーの寿命の間にはエネルギー移動が起こらないと考えられるペアのみが残ると考えられる。そこで、発光強度の対数をとって表示した減衰曲線ではほぼ直線とみられる後半領域はドナーからアクセプターへのエネルギー移動が実質的に起こっていない時間帯とみることができるので、この自然放出のみの領域の強度を全体の発光強度から差し引くことでエネルギー移動が原因で引き起こされた減衰曲線のみを抽出することが可能となる。このような観点から描いた減衰曲線が図2である。理論的な研究に有用な情報と考えられる。

### 3. アクセプターの発光減衰曲線

分子の波動関数やエネルギー移動に関する理論的な研究によるとSchrödinger方程式を厳密に解くのは不可能であるが<sup>13</sup>、そのエネルギー移動の実験による研究にも困難が伴う。エネルギー移動が起こる場合はドナーとアクセプターの2種類の分子が存在する。通常ドナーの発光減衰曲線が議論されるが、もう一方の分子であるアクセプターの発光減衰曲線も考えることができる。しかし、このアクセプターの発光減衰曲線は通常議論されない。その理由は大きく2つあると考えられる。

第1の理由は、発光スペクトルの重なりにある。エネルギー移動が起こる場合はドナーの励起エネルギーがアクセプターの励起エネルギーよりも大きい。この事実を実験と結びつけると、ドナー分子の発光は、発光スペクトルで表わされるようにある波長範囲に広がっている。ドナーの発光減衰曲線はこの中のある波長に分光器を調整して測定する。スペクトルがある波長範囲に広がる理由は、基底状態に振動状態があり、その振動エネルギーが存在することである。次にこの事実を量子力学の基本的な取扱いで議論する。分子の全ハミルトニアン $\mathcal{H}$ は電子の運動エネルギー $T_e$ の他に核の基準座標によって表わされた運動エネルギー $T_N(Q)$ 、および電子と原子核すべてについてのCoulomb相互作用 $V(r,Q)$ 、スピン-軌道相互作用 $\mathcal{H}_{SO}(r,Q)$ を用いて

$$\mathcal{H}=T_e(r)+T_N(Q)+V(r,Q)+\mathcal{H}_{SO}(r,Q)$$

と表わされる<sup>12</sup>。通常、電子と原子核は質量に大きな違いがあることから、原子核がつくるポテンシャル場の中を電子が運動するとして全波動関数 $\Psi(r,Q)$ は電子の波動関数 $\psi(r,Q)$ と核の基準振動を表わす波動関数 $\chi(Q)$ の積で表わされる。

$$\Psi(r,Q)=\psi(r,Q)\cdot\chi(Q)$$

こうすると変数分離が可能となり、全エネルギー $E$ は電子のエネルギー $E_e$ と核の振動エネルギー $E_N$ の和となる。

$$E=E_e+E_N$$

したがって励起状態から遷移する基底状態は電子エネルギーと振動エネルギーの和となり、発光スペクトルは電子エネルギーの差に相当する波長から、振動エネルギーの分だけ差し引いたエネルギーに相当する波長へと広がる。つまり、発光スペクトルは通常電子エネルギーの差に相当する波長から長波長側に広がっている。この広がり単に広がっているのではなく分子の基準振動に対応していることから、分子に特有の広がりをしており、これを利用して分子の性質を知ることができる。アクセプターの発光スペクトルも同様であるが、その始まりはドナーよりも長波長側であることから、ドナーの発光スペクトルと重なってしまう。したがって、純粹にアクセプターのみ発光強度を観測できる波長がほぼ存在しないといえる。この困難に対しては、別にドナーが存在しない状態でアクセプターの発光スペクトルを測定しておき、ドナーが存在する場合のスペクトルとの差を取ることでアクセプターの寄与の割合を知ることが不可能ではない。また、ドナー分子だけの発光が観測できる波長領域でドナーの発光減衰曲線を観測した結果を利用するとドナーとアクセプターが混在する発光減衰曲線からアクセプター分子の発光減衰曲線を入手することが不可能ではないものの、精度のよい発光減衰曲線を入手することは困難と考えられる。

第2の理由はエネルギー移動の効率にある。ドナーを励起状態にするために行われる通常の方法のひとつとして紫外線を照射する方法がある。アクセプターの電子励起エネルギーはドナーのそれよりも小さいことから、ドナーを励起するために使った励起光はアクセプターも励起状態に上げてしまう。直接励起したことによるアクセプターの発光は、エネルギー移動に起因するアクセプターの発光よりも強く、更にこの2種類の発光を分離することができない。

以上のように実験によるアクセプターの減衰曲線の観測には困難が伴うが、コンピュータを利用したシミュレーションではこの困難を取り除くことが可能であり、それにより分子間相互作用についてより多くの議論を行うことを可能にする。本研究ではアクセプターの寿命が十分短く、エネルギー移動で受け取った励起エネルギーはすぐに発光されるという条件でシミュレーションを行った。図3は双極子-双極子相互作用によりエネルギー移動が起こっている系において、図1と同じ手法で時間を分割し、各短い時間間隔の間にエネルギー移動の確率をカウントしてそれが直接アクセプターの発光に変換されると考えてシミュレーションを行った結果である。カウントした結果は対数をとって表示している。図1よりも明瞭に非指数関数的であることが分かり、エネルギー移動に関する議論がやりやすくなると考えられる。

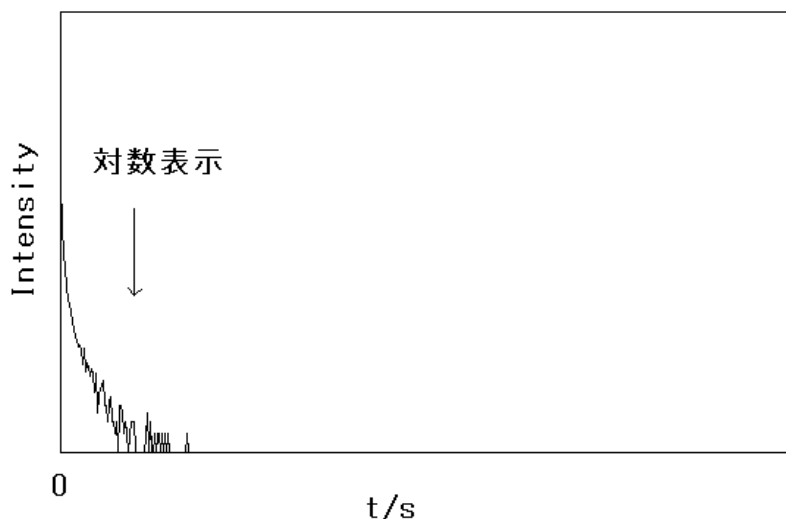


図3 アクセプターの発光減衰曲線

## V 結果と考察

本研究の目的である双極子-双極子相互作用によるエネルギー移動が原因で発光減衰曲線が指数関数的でなくなることのコンピュータシミュレーションは十分に達せられた。前回のシミュレーションよりもドナーとアクセプターの間の距離に依存する割合が大きいため、エネルギー移動の影響が弱くなる可能性があった。しかし、実際は十分な強度で表現することができた。これは前回の結果からある程度時間間隔、パラメータ、アクセプターの分布に関する情報があったため

である。前回はなかなか非指数関数的な減衰曲線にたどりつかなかったが、今回は短時間でシミュレーションの結果を得ることができた。今後、他の分布や他のエネルギー移動の機構へ応用しやすくなった。

本研究のもうひとつの目的であるグラフィックス環境をSwingに変えたことの影響を調べることは良い方向で結論が出せる。つまり、Swingに変えたことによる影響は限定的で、ランダムな数によるシミュレーションは200万個のランダムな数を用意して行う計算部分が主に処理時間が必要であり、グラフィックスでは500個の点を直線でつなぐ処理のみであることが原因だと考えられる。また、前回はシミュレーションとその結果を描く処理がひとつのメソッドの中で行われたが、今回はシミュレーションの演算結果を一旦配列に代入したことにより、シミュレーションの処理とグラフィックスの処理が分離されたために、グラフィックスの遅さが目立たなかったと考えられる。Swingによるエネルギー移動のシミュレーションはJavaの環境でも十分に行えることが立証されたことから、今後は、理論の検証、実験の解析など多くの応用が可能となった。

## 参考文献

- <sup>1</sup> 湯川秀樹 1978年 古典物理学から量子力学へ 岩波講座現代物理学の基礎 3 量子力学 I 3-42頁 株式会社岩波書店
- <sup>2</sup> S.P.McGlynn, T. Azumi, and M. Kinoshita 1969 *MOLECULAR SPECTROSCOPY OF THE TRIPLET STATE*, Prentice Hall Inc
- <sup>3</sup> N. J. Turro 1978 *Modern Molecular Photochemistry*, The Benjamin/Cummings Publishing Company, Inc
- <sup>4</sup> 田縁正治 2012年 発光減衰曲線のコンピュータシミュレーション、宮崎公立大学人文学部紀要 第20巻 第1号
- <sup>5</sup> <http://java.com/ja/>
- <sup>6</sup> 河西朝雄 2001年 標準Javaプログラミングブック、技術評論社
- <sup>7</sup> <http://www.eclipse.org/>
- <sup>8</sup> <http://study-swt.info/index.html>
- <sup>9</sup> M. Sargent III, M. O. Scully, and W. E. Lamb, Jr 1974 *LASER PHYSICS*, Addison-Wesley Publishing Company, Inc
- <sup>10</sup> K. K. Haldar and A. Patra 2008 *Efficient resonance energy transfer from dye to Au@SnO<sub>2</sub> core-shell nanoparticles* Chem. Phys. Lett. Vol.462 pp.88-91 ELSEVIER
- <sup>11</sup> Y. R. Khan, T. E. Dykstra, and G. D. Scholes 2008 *Exploring the Förster limit in a small FRET pair* Chem. Phys. Lett. Vol 461 pp.305-309 ELSEVIER
- <sup>12</sup> 安積徹、又賀昇 1980年 岩波講座現代科学23 エネルギー変換の化学 53-110頁 岩波書店

- <sup>13</sup> 馬場健 2007年 励起状態における化学結合・エネルギー移動・反応ダイナミクスに関する理論的研究 <http://dspace.wul.waseda.ac.jp/dspace/bitstream/2065/28659/3/Honbun-4637.pdf>

