

平成 18 年 / 月 20 日

氏名 千葉 真人



## 21世紀COEプログラム

拠点：大学院工学系研究科

応用化学専攻、化学システム工学専攻、

化学生命工学専攻、マテリアル工学専攻

“化学を基盤とするヒューマンマテリアル創成”

平成17年度リサーチ・アシスタント報告書

ふりがな 氏名	ちば まひと 千葉 真人	生年月日
所属機関名	東京大学大学院 工学系研究科 応用化学専攻	
所在地	東京都文京区本郷 7-3-1	
申請時点での 学年	博士課程三年	
研究題目	リアル系におけるシミュレーション及びダイナミクス	
指導教員の所属・氏名	工学系研究科 応用化学専攻 平尾公彦	

## I 研究の成果 (1000 字程度)

## (1) 時間依存密度汎関数法計算の効率化

前年度に、特定の励起状態についてその励起状態の主要な遷移にエネルギー寄与する小さな電子配置空間内で効率的に電子励起状態を計算する TDDFT 理論(State-Specific TDDFT, SS-TDDFT)を開発しその計算プログラムを作成した。本年度は SS-TDDFT をより大きなサイズの水クラスターやポリアセチレン分子などの大規模分子に適用し、計算精度を損なうことなく大幅な計算効率化に成功していることを確認した。尚、計算成果は論文にまとめられ、Chemical Physics Letters 誌に掲載されることが決定している。

## (2) 長距離補正 TDDFT による励起状態構造最適化及び MD シミュレーション

前年度に、時間依存密度汎関数理論(TDDFT)における分子の電子励起エネルギーの原子核座標微分計算プログラムを作成し、分子の電子励起状態における構造最適化・分子動力学計算プログラムを作成した。本年度はこの計算プログラムを開殻系分子も計算可能なように拡張を行い、様々な系に対して計算を行った。プロトン化 Schiff 塩基カチオン (PSB,  $C_6H_6NH_2^+$ ) の  $S_1$  励起状態について構造最適化計算を行った結果、長距離補正 TDDFT(LC-BOP)は、計算負荷の非常に高い高精度電子相関理論である CASPT2 法による構造に最も近い構造を与えたのに対し、従来の TDDFT(BOP 及び B3LYP)は CASPT2 法による構造の再現に失敗した (Table 1)。

また、2005年5月の理論化学討論会について、 $H_2CNH$  分子及び  $NH_3$  分子についての簡単な励起状態 MD シミュレーション及び、pyrrolyl pyridine 分子の電荷移動励起状態における励起状態構造最適化についての発表を行った。電荷移動励起状態について、長距離補正 TDDFT は従来の TDDFT とは異なる構造を与えたのにも関わらず、その構造は CASPT2 法による最安定構造に最も近かった。このことは、電荷移動励起状態について、長距離補正 TDDFT に含まれる長距離交換相互作用が重要であることを示している。以上の研究成果について、現在論文執筆中である。

Table 1 Optimized structure of PSB (in Å/ 6-31G\* basis set)

Param.	BOP	B3LYP	LC-BOP	CASPT2
C-C	1.38	1.38	1.38	1.39
C-C	1.58	1.50	1.43	1.42
C-C	1.34	1.35	1.4	1.42
C-C	1.51	1.48	1.43	1.43
C-N	1.34	1.33	1.33	1.36

II (1) 学術雑誌等に発表した論文A (掲載を決定されたものを含む.)

共著の場合、申請者の役割を記載すること。

(著者、題名、掲載誌名、年月、巻号、頁を記入)

- (1) 千葉真人 (代表執筆者)・常田貴夫・平尾公彦,  
**An efficient state-specific scheme of time-dependent density functional  
theory, Chemical Physics Letters, 2006, in press.**

氏 名 千葉 真人

II (2) 学会において申請者が口頭発表もしくはポスター発表した論文

(共同研究者 (全員の氏名)、題名、発表した学会名、場所、年月を記載)

(1) 千葉真人・常田貴夫・徳良誠健・平尾公彦、  
長距離補正 TDDFT を用いた励起状態 MD 法、第 9 回理論化学討論会、  
京都大学、2005 年 5 月。