


平成 16 年 3 月 17 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15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 平民研究室	
所在地	東京都文京区本郷 7-3-1	
申請時点での 学年	博士課程一年	
研究題目	TDKS法を用いた励起状態分子動力学 計算プログラムの開発	
指導教官の所属・氏名	東京大学大学院工学系研究科 平民公彦教授	

氏名 千葉真人

## I 研究の成果 (1000字程度)

励起状態におけるダイナミクスの理論的解析が求められている。励起状態においてどのように反応が進んでいくかを完全に理論的に (*ab-initio* に) 見るためには、Born-Oppenheimer 近似により電子の運動と核の運動を分離し、*ab-initio* 電子状態計算により電子状態を決定し、その電子状態が各原子核に与える力を計算し、そしてその力を用いてニュートン力学に基づいて原子核の運動を記述するという方法をとる。しかし、励起状態のダイナミクス計算は、その計算コスト、そして計算精度の問題のためまだ広く行われていない。TDDFT 法 (Time-dependent density functional theory) は一電子励起のみを考慮した少ない計算次元数を持ち、なおかつ電子相関効果を含んだ高精度な励起状態計算が可能である。本研究では、理論的に求められた TDDFT 励起状態における各原子に働く力を計算するプログラムを開発し、低い計算コストで電子相関効果を含む高精度な励起状態分子動力学計算を行うことを目的とした。本研究では、その第一段階として TDHF 法 (Time-dependent Hartree-Fock theory) に基づく励起状態分子動力学計算プログラムの作成を目指した。プログラムの作成には、広く使われている *ab-initio* 分子軌道計算パッケージ GAMESS を利用した。現在のプログラム進行状況は、理論的に計算した励起エネルギー勾配が数値微分によって決定されたそれと一致するように作成したプログラムのチェックしている段階である。なお、TDHF をより高精度な TDDFT 化するために必要な密度汎関数の三次微分の計算コードについても Becke88 などの GGA 密度汎関数について既に完成している。また、TDDFT 法の欠点である長距離相互作用の取り込みについては、当研究室で開発された LRC 法を用いる予定である。これにより、現時点で最高レベルの計算精度の TDDFT 計算が可能になる。TDHF の励起エネルギー勾配のデバッグが終了次第、密度汎関数の三次微分項を組み込み TDDFT の励起エネルギー勾配計算を完成させ、TDDFT を用いて今までなかった高精度かつ大規模な励起状態分子動力学計算を行い、それを論文化する予定である。また、本研究の成果を本年度の第 8 回理論化学討論会で発表する予定である。

氏 名 千葉真人

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)

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)