

平成 17 年 3 月

月

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16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	博士課程二年	
研究題目	大規模系における励起状態MDプログラムの開発	
指導教官の所属・氏名	大学院工学系研究科 応用化学専攻 平尾公彦	

I 研究の成果 (1000 字程度)

(図表も含めて分かりやすく記入のこと)

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。この計算結果については、昨年 5 月の 1st Asian Pacific Conference on Theoretical and Computational Chemistry においてポスター形式で発表を行った。

従来の TDDFT 計算において十分取り込まれていなかった電子の長距離交換相互作用を理論的に取り込んだ TDDFT (LC-TDDFT) について、電子励起エネルギー勾配を定式化し、LC-TDDFT 理論における分子の励起状態の構造最適化・分子動力学計算プログラムを開発した。現在は、レチナール分子の励起状態をこのプログラムで計算中である。こちらは現在論文執筆中であり、5 月の第 9 回理論化学討論会において口頭発表形式で発表する予定である。

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)を開発し、その計算プログラムを作成した。窒素分子 (6-31+G(d)基底)、ベンゼン分子 (6-31G(d)基底) のそれぞれ下から 20 個の励起状態について、State-Specific TDDFT を用いて計算を行った。その結果、計算に必要な電子配置の数は、窒素分子について 217 次元から平均で 17 次元へ、ベンゼン分子については 1701 次元から平均で 52 次元に減少した。また本方法の厳密に解いた TDDFT 計算の結果からの 20 の励起状態についての平均の励起エネルギーの絶対誤差は、窒素分子については 0.00237eV、ベンゼン分子については 0.00782eV であった。また水クラスタ(H₂O)_n(n=1,5,10,20,30)について、6-31G(d)基底関数を用いて各分子について S₁励起エネルギーの計算を行った。その結果、励起エネルギーの TDDFT の厳密解からの誤差を 0.01eV 程度に保ちながらも、計算コストは通常の TDDFT 計算アルゴリズムと比較して大幅に下がっていることを確認した(Table 1)。この研究成果については、2 月の NAREGI ナノサイエンス実証研究第 3 回公開シンポジウムにおいてポスター形式で発表をしている。なお、こちらについても現在論文執筆中である。

Table 1 Number of dimensions, CPU times (sec) and excitation energy error (eV)

N	Dimension (SS)	Dimension (Full)	Time(SS)	Time(Full)	ΔE
1	12	70	0.6	2.9	0.000274
5	84	1750	173.6	424.2	0.013023
10	47	7000	804.4	22855.4	0.013301
20	37	28000	4444.9	25235.1	0.012047
30	5	54880	5785.3	72079.9	0.012031

* "SS" represents State-Specific TDDFT and "Full" represents exact TDDFT

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)

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 (常田貴夫、平尾公彦、Excited state dynamics of TDDFT、
1st Asian Pacific Conference on Theoretical and Computational Chemistry、
自然科学研究機構 岡崎カンファレンスセンター、2004年5月22日)

- ② (常田貴夫、平尾公彦、State specific implementation of time-dependent
density functional theory、NAREGI ナノサイエンス実証研究 第3回公開
シンポジウム、自然科学研究機構 岡崎カンファレンスセンター、2005年
2月14日)