

核と電子を等価に扱う密度汎関数理論とダイナミックス

メタデータ	言語: jpn 出版者: 公開日: 2022-07-01 キーワード (Ja): キーワード (En): 作成者: Nagao, Hidemi メールアドレス: 所属:
URL	https://doi.org/10.24517/00066562

This work is licensed under a Creative Commons Attribution-NonCommercial-ShareAlike 3.0 International License.



核と電子を等価に扱う密度汎関数理論とダイナミクス

Research Project

All

Project/Area Number

12042247

Research Category

Grant-in-Aid for Scientific Research on Priority Areas (A)

Allocation Type

Single-year Grants

Review Section

Science and Engineering

Research Institution

Kanazawa University

Principal Investigator

長尾 秀実 金沢大学, 理学部, 助教授 (30291892)

Project Period (FY)

2000 - 2001

Project Status

Completed (Fiscal Year 2001)

Budget Amount *help

¥4,000,000 (Direct Cost: ¥4,000,000)

Fiscal Year 2001: ¥1,700,000 (Direct Cost: ¥1,700,000)

Fiscal Year 2000: ¥2,300,000 (Direct Cost: ¥2,300,000)

Keywords

密度汎関数法 / 量子ダイナミクス / 強レーザー場 / 非断熱過程 / グリーン関数法

Research Abstract

昨年度において、核と電子を等価に扱う密度汎関数の理論および計算技術をグリーン関数を用いて定式化させてきた。核-核相関および核-電子相関についての近似を見積もった。また、密度汎関数法を用いた励起状態計算への拡張も行ってきた。本年度は昨年度の結果に基づき、核と電子を等価に扱う密度汎関数の実時間量子

ダイナミクスへの展開を行った。はじめに、核と電子を等価に扱う時間依存密度汎関数法を用いて、強レーザー場下の分子系へ応用した。この実時間量子ダイナミクスでは核-電子相関の近似精度が重要であることが分かった。電子および核のダイナミクスとダイナミクスの厳密解を比べてみると、現在用いている近似レベル以上のものが必要であることが分かり、今後の課題として核-電子相関ポテンシャルの再定式化が必要である。現在、昨年度展開していたグリーン関数法に基づいた交換相関の精密な取り扱い(GW法)を時間依存密度汎関数法へ取り込む方法を展開中である。密度汎関数法の弱点である励起状態の精度の改良も含め、数値計算に向けてのアルゴリズムの改良なども今後の課題であると思われる。

Report (2 results)


2001 Annual Research Report


2000 Annual Research Report


Research Products (9 results)


All Other

All Publications (9 results)


[Publications] Y.Ohta, et al.: "Calculation of quasiparticle energy of molecular systems by the GW method"International Journal of Quantum Chemistry. 84. 348-353 (2001) 


[Publications] T.Yoshimoto, et al.: "Non Born-Oppenheimer density functional theory for excited states by using Greens function techniques"International Journal of Quantum Chemistry. 84. 354-362 (2001) 


[Publications] Y.Ohta, et al.: "One approach toward the investigation of ionization process using intense laser field : Non Born-Oppenheimer"International Journal of Quantum Chemistry. (in press). 


[Publications] Y.Shigeta et al.: "Theoretical study on dependency of conductivity on structure of proton and electron coupled system"International Journal of Quantum Chemistry. 80. 882-891 (2000) 

[Publications] Y.Ohta et al.: "Adiabatic population inversion in multilevel systems"International Journal of Quantum Chemistry. 80. 1068-1075 (2000) 

[Publications] Y.Shigeta et al.: "Theoretical studies on the proton and electron transfer (PET) in a pseudo one-dimensional hydrogen bonded network"Journal of Molecular Liquid. (in press). (2001) 

[Publications] Y.Shigeta et al.: "A theoretical study on conductivity of model polymer including DNA base pair"International Journal of Synthetic Metals. (in press). (2001) 

[Publications] T.Bando et al.: "Intermolecular double proton transfer controlled by laser field"International Journal of Synthetic Metals. (in press). (2001) 

[Publications] Y.Ohta et al.: "Controll of proton tautomerization using laser field"International Journal of Synthetic Metals. (in press). (2001) 

URL:

Published: 2000-03-31 Modified: 2018-03-28