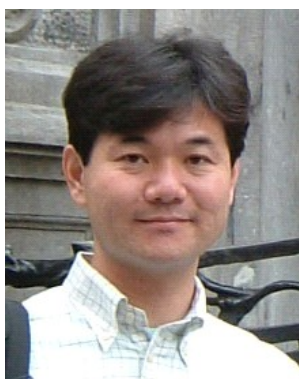


立川 仁典 (たちかわ まさのり)



横浜市立大学大学院生命ナノシステム科学研究科教授

【E-mail】 tachi@yokohama-cu.ac.jp

【専門】 理論化学

【キーワード】 多成分系分子理論、経路積分法、
水素結合、陽電子化合物

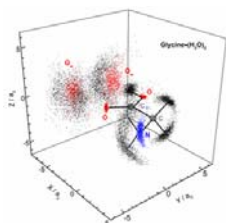
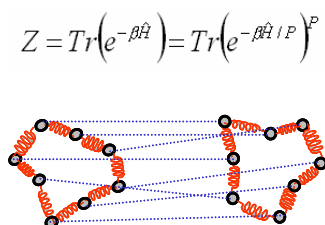
【公募研究課題名】

量子・熱ゆらぎを考慮した生体分子高次系クラスターの理論的解明

〈研究グループアクティビティ〉

・ *Ab initio* 経路積分分子動力学法

核に対して経路積分を、電子に対して第一原理計算を適用し、全自由度の量子力学的取り扱いを研究



・ 多成分系分子軌道法の開発

電子・核といった、多成分系に対する分子軌道(MC_MO)法や密度汎関数(MC_DFT)法の開発および具体的な応用計算

HF level

CI level

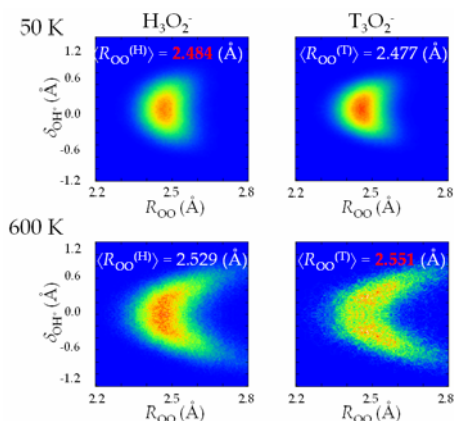
$$f^e \varphi_i^e = \varepsilon_i^e \varphi_i^e$$

$$f^p \varphi_p^p = \varepsilon_p^p \varphi_p^p$$

$$\langle \Phi_I^e | \langle \Phi_J^p | \hat{H}_{tot} | \Phi_{I'}^e \rangle | \Phi_{J'}^p \rangle$$

・ 低障壁水素結合クラスターの理論的研究

低障壁水素結合クラスターにおける、H/D 同位体効果に関する研究



・ 陽電子化合物の理論的研究

陽電子が分子中に照射された際の、電子状態、骨格構造変化に関する研究

