

石井研究室第9期および第11期卒業生における 電子論を用いた「感謝」の三次元可視化

Visualized 3D Wavefunction of "THANKS" by means of Electronic Theory
from Graduating Students (9th and 11th) at Ishiilab.



M2 小川 禪、山内 彰史、渡辺 洋平、渡邊 僚介
B4 石橋 昂大、岩倉 正訓、大賀 俊輔、濱野 一弘

Introduction

本研究室では以前から分子の電子状態についてDV-X α 法を用いて計算を行い、安定性や物質が発現させる様々な物性（伝導性、磁性、誘電性、光応答性など）について議論を行ってきた。本研究室は学生のみで成り立っているのではなく、石井知彦に惹かれ、学生がついていっていると考えられる。1年、及び3年に渡って石井研究室で電子論について研究を行ったことにより、感謝の気持ちすら波動関数として表すことが出来るという理論が、Y. Ogawaをはじめとした8人の研究チームによって報告されていることはあまりにも有名な話である。そこで本研究では、Fig. 1に示す卒業生8人の感謝の気持ちをDV-X α 法によって電子状態を計算し、VESTAを用いて波動関数の三次元可視化することによって、この理論を電子論的に実証することを目的としている。

Calculation Models and Method

NH₃O, N₂H₄, H₂N₂O, H₂O₂, CH₄, NH₃, O₆, H₂O₄の8モデルで計算を行った。これらのモデルを順に、①～⑧とする。また、計算モデルはケンブリッジ構造データベース（CSD）に報告されていないため、本研究室で以前から用いられている構造最適化プログラムWinMOPACによって作成したものである。

計算終了後、感謝の気持ちが最も現れる分子軌道であるHOMOの波動関数をVESTAを用いて三次元可視化し、解析を行なった。

Results

Fig. 2における波動関数の結果から、③を除く全てのモデルにおいてp軌道からなる波動関数が確認されることから、非常に効率良く感謝の意を表すことができた。また、例外である③に関しては計算を行う際のサンプルポイントが他のモデルと比較して少なかったため、正確に波動関数を再現できなかったのではないかと考えられる。しかしながら、HOMOであるにも関わらず末端水素にs軌道の波動関数が現れており、その広がり是非常に可愛らしさを備えていることから、やはりある程度の感謝の意が現れていると考えられる。

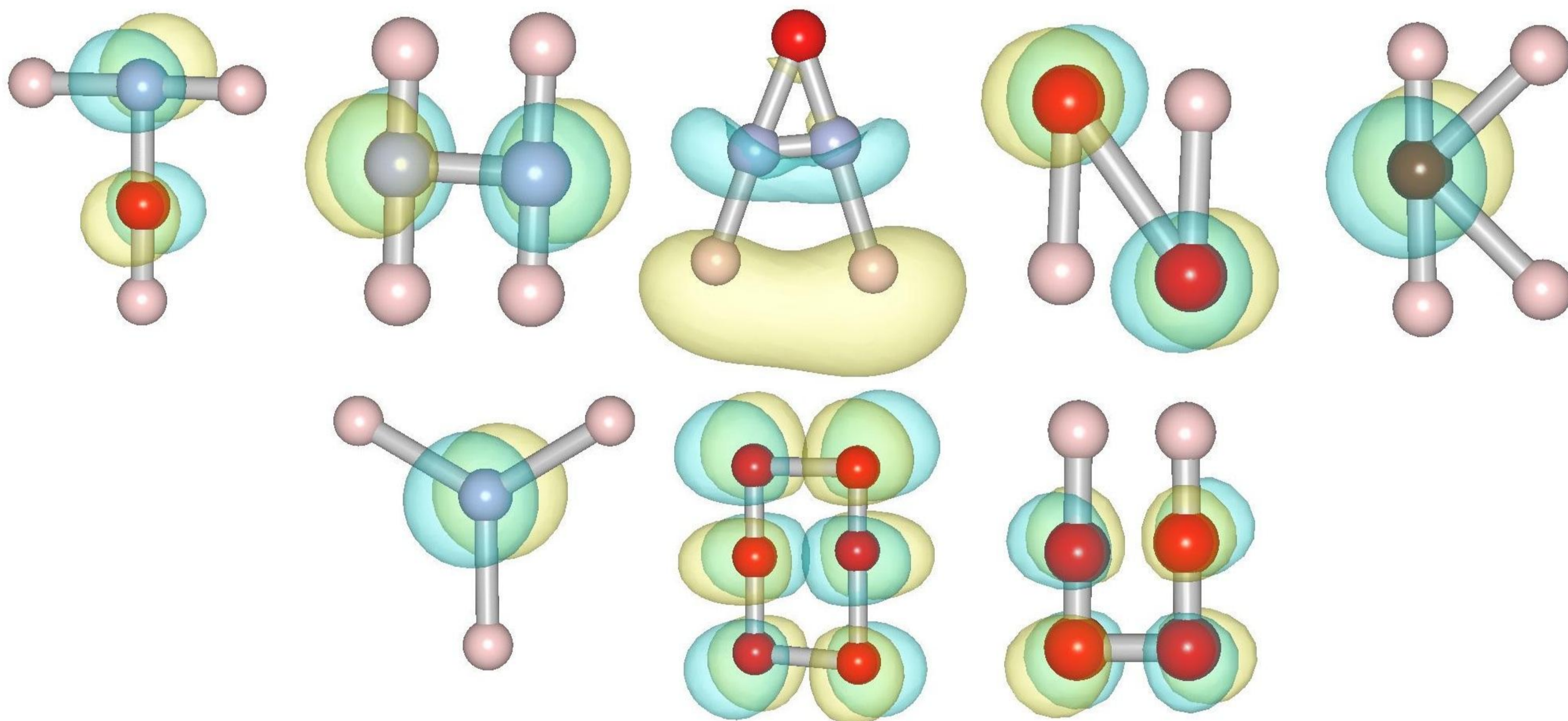


Fig. 2. 三次元可視化した「感謝」の波動関数

Conclusion

以上の結果から、感謝の意を波動関数として表すことが出来たとともに、以下の8つのことが言える。

- Y. Ogawa : 石井先生、3年間お世話になりました。先生のおかげで非常に楽しく大学生活を過ごせました。多謝！
- A. Yamauchi : 石井研で過ごした2年間は、とても楽しく密度の高い充実したものでした。ありがとうございました。
- Y. Watanabe : 色々ご迷惑をお掛けした3年間でしたが、様々な経験を経てとても成長できたと思います。
- R. Watanabe : 三年間お世話になりました。石井・渡邊ダイアグラムが完成できてよかったです。
- T. Ishibashi : 一年間お世話になりました。来年より雑用係、研究共に頑張っていこうと思います。よろしくお願いします。
- M. Iwakura : お世話になりました。これからもお世話になります。これからも石井研で研究できることを誇りに思い邁進します。
- S. Ohga : 一年間お世話になりました。今後ともご教授よろしくお願いします。
- K. Hamano : 卒論発表までいろいろとありましたが、無事にここまでたどり着けました。もう2年間、大学生活と研究をがんばります！！

これらをまとめると、卒業生8人全員が石井先生に感謝していると言える。またそれに伴い、新M1としての心構えまで見て取ることができた。

