

Development of efficient geometry optimization method at ground and excited states towards large systems

マシュコフツェフ, デニス

<https://hdl.handle.net/2324/7182498>

出版情報 : Kyushu University, 2023, 博士 (理学), 課程博士

バージョン :

権利関係 : Public access to the fulltext file is restricted for unavoidable reason (2)

氏名	MASHKOVTSSEV DENIS
論文名	Development of efficient geometry optimization method at ground and excited states towards large systems (大規模系に向けた基底状態および励起状態の効率的構造最適化法の開発)
論文調査委員	主査 九州大学 教授 青木 百合子 副査 九州大学 准教授 草場 彰 副査 九州大学 教授 吉澤 一成

論文審査の結果の要旨

本論文は、オーダーN量子化学計算法に遺伝的アルゴリズムや新射影法を導入し、基底状態及び励起状態の効率的かつ高精度構造最適化法を構築したもので、大規模原子分子系の構造・機能・反応の解明・設計のための理論化学の発展に貢献するところが大きい。よって、本論文は博士（理学）の学位論文に値するものと認める。