

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 4 年 6 月 24 日現在

機関番号：22701

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2018～2020

課題番号：18H01945

研究課題名(和文)量子多成分系理論の高度化とシステム構築：プロトニクス・ポジトロニクスへの展開

研究課題名(英文)Development on quantum multicomponent theories and these application to protonics and positronics

研究代表者

立川 仁典 (Tachikawa, Masanori)

横浜市立大学・データサイエンス学部・教授

研究者番号：00267410

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 15,850,000円

研究成果の概要(和文)：これまで申請者は、従来の第一原理計算だけでは取扱えない水素原子核自身の量子力学的振舞いや陽電子・ミューオンを含む化合物を研究対象とするために、量子多成分系分子理論を独自に開発してきた。本研究課題では、より実構造に近い理論計算を実現するために、申請者が開発してきた量子多成分系分子理論手法を高精度化し、かつ周囲環境を適切に取込む、(1)多階層量子多成分系理論の高度化である。それにより、水素・陽子が関わるプロトニクスや陽電子が関わるポジトロニクスといった技術に対して、可能な限り実構造に近い、量子水素系、陽電子系の高精度・大規模計算を実現した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

従来の量子化学計算においては、原子核を固定された点電荷として扱っていたが、この手法だけでは原子核自身の波動性を取り込むことはできなかった。そこで申請者らは、より実在系に近い理論計算実現のために、量子多成分系分子理論を独自に開発し、核の量子効果や陽電子も含めた高精度・大規模計算を実現した。それにより、水素・陽子が関わるプロトニクスや陽電子が関わるポジトロニクスといった技術に対して、基盤的情報を与えることに成功した。今後、プロトトンネリングや、非破壊測定として用いられる陽電子プローブへの応用が強く期待される。

研究成果の概要(英文)：We developed quantum multi-component molecular theories, such as multi-component molecular orbital, density functional theory, quantum Monte Carlo, and ab initio path integral methods, to include the nuclear quantum effect, positronic or muonic quantum ones. In this project, we have improved our quantum multi-component molecular theories for multi-level computation. We have calculated some quantum hydrogen systems and positronic compounds by our improved quantum multi-component molecular theories.

研究分野：理論化学

キーワード：量子多成分系理論 量子水素 陽電子化合物 ミューオニウム化合物 生体超分子

## 1. 研究開始当初の背景

これまで申請者は、従来の第一原理計算だけでは取扱えない水素原子核自身の量子力学的振舞い(量子水素)や陽電子・ミュオンを含む化合物を研究対象とするために、(1)量子多成分系分子理論を独自に開発してきた。それにより、従来の量子化学手法だけでは計算が困難な、分子性結晶の相転移や生体超分子内の水素移動における、量子水素の効果に関する理論研究を重ねてきた。それに伴い、申請者が逸早く理論的に着目し続けてきた小さな水素の大きな量子揺らぎの重要性が、多彩な分野の実験系研究者においても注目され始めている。また陽電子(電子の反物質、ポジトロン)においても、申請者は当初より未開拓領域として挑戦的に着眼し、有機化合物への陽電子付着に関する理論研究を重ねてきた。一方、申請者は、実験系研究者との密な議論を重ねることで、(2)申請者の独自手法を駆使した高精度・大規模計算を実現し、量子論的遷移状態という新概念の提唱や、世界最高精度と自負する高精度計算の達成など、当該分野における国際的優位性を着実に維持してきた。これにより、水素や陽電子に対する基盤情報を実験系研究者に与えてきたものの、現状では限られたクラスターモデル計算にとどまり、周囲環境を十分に考慮した実構造における量子水素の挙動解明には至っていない。

## 2. 研究の目的

本研究課題の第一の目的は、より実構造に近い理論計算を実現するために、申請者が開発してきた量子多成分系分子理論手法を高精度化し、かつ周囲環境を適切に取込む、(1)多階層量子多成分系理論の高度化である。それにより第二の目的である、水素・陽子や陽電子が関わる実在系に対して、可能な限り実構造に近い、(2)量子水素系、陽電子系の高精度・大規模計算を実現することにある。

## 3. 研究の方法

(1)多階層量子多成分系理論の高度化：申請者が独自に開発してきた量子多成分系理論の中で、多成分系分子軌道(MO)法、多成分系量子モンテカルロ(QMC)法、多成分系密度汎関数(DFT)法、多成分系経路積分(PI)法の高度化を実施した。

(2)量子水素系、陽電子系の高精度・大規模計算：具体的な高精度・大規模計算として、量子水素系、および陽電子化合物の高精度計算を実施した。

## 4. 研究成果

(1)多階層量子多成分系理論の高度化：

申請者が独自に開発してきた量子多成分系理論の中で、多成分系分子軌道(MO)法、多成分系量子モンテカルロ(QMC)法、多成分系密度汎関数(DFT)法、多成分系経路積分(PI)法の高度化を実施した。多階層量子多成分系理論手法のために、局在基底、平面波基底、分子力場を多階層的に取込む手法の開発、および高並列化効率を見据えて階層的 MPI/OpenMP を応用したプログラム実装を行った。また多階層量子多成分系理論手法において微分計算のための新たなプログラムも実装し、ヘシアン計算のプログラムを実装している。

(2)量子水素系、陽電子系の高精度・大規模計算：

量子水素系としては、水素内包 C<sub>60</sub> フラーレン(H<sub>2</sub>@C<sub>60</sub>)の経路積分計算を行い、C<sub>60</sub>H<sub>2</sub>系に与える量子揺らぎの影響を理論的に見出した。本手法に基づいて計算した H<sub>2</sub>@C<sub>60</sub> の水素分布を図1に示す。水素結合長に関して同位体効果を含む詳細な議論を行った。また、得られた構造分布を用いて、水素原子における化学シフトの計算とその解析を行い、定性的に実験値の同位体シフトを再現するとともに、水素原子上での化学シフトが、フルラーレンの作る常磁性および反磁性磁場の寄与を含んでおり、かつ、そのうち常磁性磁場の寄与がフルラーレン炭素骨格の量子揺らぎの影響で強磁場方向へ大きく揺らいでシフトしていることを示した。

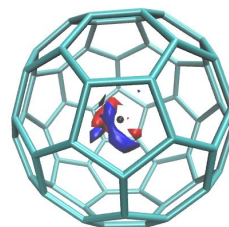


図1. 経路積分法から得られた H<sub>2</sub>@C<sub>60</sub> における水素原子分布

量子水素系としては、低障壁水素結合(LBHB)を有する periplasmic phosphate binding protein (PPBP) のモデル分子(酢酸)に対してリン酸とヒ酸がそれぞれ水素結合を形成するようなクラスターに対して、核の量子効果を含めた高精度・大規模計算を実現した。リン酸の水素

結合における原子の方がヒ酸の場合よりも分極が大きくなっているため、この分極の効果により、リン酸でプロトン移動が頻繁に起きるといった LBHB 特有の性質を示すことがわかった。

四角酸( $\text{H}_2\text{SQ}$ :  $\text{C}_4\text{H}_2\text{O}_4$ )結晶は常温では強誘電体であるが、温度上昇により反強誘電体へと相転移することが知られている。また、結晶を構成する水素を重水素に置換した  $\text{D}_2\text{SQ}$  では、相転移温度が約 150K も上昇することが知られている。しかしながら、実験のみでは水素原子の振る舞いを直接解析することが困難であるため、この相転移温度に対する H/D 同位体効果の機構解明に至っておらず、理論計算を用いた解析が望まれる。そこで経路積分法を用いて、この課題に挑戦した。四角酸結晶と水素結合部位を図 2 に示す。経路成分の計算結果から、水素結合長は  $\text{D}_2\text{SQ}$  のほうがより大きく変化する傾向にあることが分かった。また、水素・重水素原子については、水素結合の中央部分において違いがみられた。

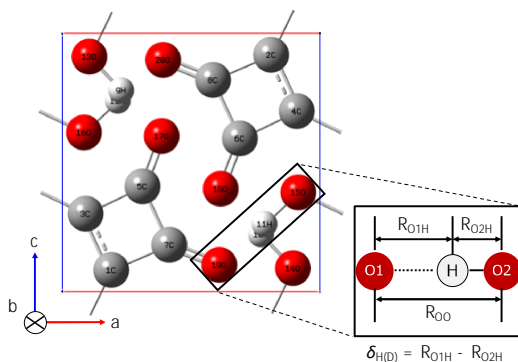


図 2 . 四角酸結晶と水素結合部位

陽電子化合物においては、海外研究協力者の Surko (米)らが実測した、アセトアルデヒド分子の陽電子吸着能をターゲットとした。高精度な多成分系分子理論だけでなく、非調和性を含めた分子振動状態も考慮したところ、各振動準位によって陽電子吸着能が変化することを見出した。

多成分系分子軌道(MC\_HF)法および量子モンテカルロ法(MC\_QMC)を用いて、 $[\text{H}^-; e^+; \text{H}^-]$ の最安定構造とその安定性に関する系統的研究を行った。各手法で計算した PEC および MC\_HF 法で計算した陽電子密度を図 3 に示す。図 3 より、 $[\text{H}^-; e^+; \text{H}^-]$ 系において 0.76、3.26 に 2 つの極小点(M1, M2)が存在することが示された。また、M1, M2 では、陽電子の結合構造が異なることがわかった。さらに精密な MC\_QMC 法による計算結果では、M1 の方が M2 に比べ全エネルギーが低くなり、最小エネルギー状態が入れ替わった。相関効果による全エネルギーの低下と、陽電子および電子軌道を解析したところ、最小エネルギー状態(M1)では  $\text{H}_2$  分子に  $\text{Ps}^-$  が吸着しているような構造を持つことがわかった。このような構造は、1 粒子基底関数に基づいた HF や CI 法による再現が困難であり、MC\_QMC 法によって記述できたと考えられる。MC\_DMC 法による大きな全エネルギー低下の要因は、 $\text{Ps}^-$  あるいは  $\text{Ps}$  を形成する粒子間相互作用を取り込んだことであると予測できた。

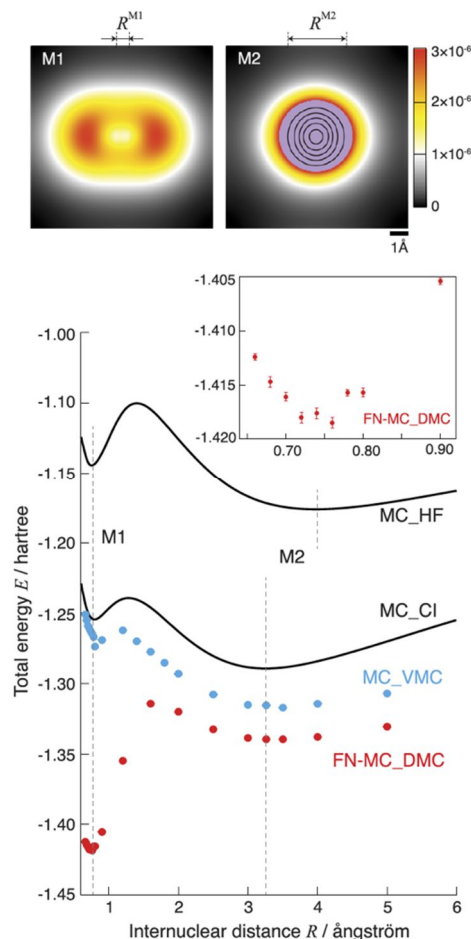


図 3 . 各手法による PEC と陽電子密度

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計49件（うち査読付論文 48件 / うち国際共著 2件 / うちオープンアクセス 4件）

1. 著者名 Sugiura Yutaro, Suzuki Kento, Koido Shoichi, Takayanagi Toshiyuki, Kita Yukiumi, Tachikawa Masanori	4. 巻 1147
2. 論文標題 Quantum dynamics calculation of the annihilation spectrum for positron-proline scattering	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Computational and Theoretical Chemistry	6. 最初と最後の頁 1~7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.comptc.2018.11.013	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Suzuki Kento, Sugiura Yutaro, Takayanagi Toshiyuki, Kita Yukiumi, Tachikawa Masanori	4. 巻 123
2. 論文標題 Hydration Effect on Positron Binding Ability of Proline: Positron Attachment Induces Proton-Transfer To Form Zwitterionic Structure	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 1217~1224
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.8b11653	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Ishibashi Rina, Tachikawa Masanori, Udagawa Taro	4. 巻 92
2. 論文標題 Theoretical Study on Hydrogen-Tritium Exchange Reactions between Several Organic and HTO Molecules: A Multicomponent QM Study	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Bulletin of the Chemical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 592~599
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/bcsj.20180308	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Mashiko Takako, Hiraoka Shuichi, Nagashima Umpei, Tachikawa Masanori	4. 巻 123
2. 論文標題 Molecular Dynamics Study on Dynamical Features of Reorganization Process for Nanocapsule Formed with Gear-Shaped Amphiphile Molecules	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 5176~5180
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.9b02156	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Sugiura Yutaro, Takayanagi Toshiyuki, Kita Yukiumi, Tachikawa Masanori	4. 巻 73
2. 論文標題 Positron binding to hydrocarbon molecules: calculation using the positron?electron correlation polarization potential	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The European Physical Journal D	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1140/epjd/e2019-100147-y	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ito Aiko, Kawatsu Tsutomu, Tachikawa Masanori	4. 巻 123
2. 論文標題 Quantum Stabilization of the Frustrated Hydrogen Bonding Structure in the Hydrogen Fluoride Trimer	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 7950 ~ 7955
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.9b04407	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Zhan Yi-Yang, Jiang Qi-Chun, Ishii Kentaro, Koide Takuya, Kobayashi Osamu, Kojima Tatsuo, Takahashi Satoshi, Tachikawa Masanori, Uchiyama Susumu, Hiraoka Shuichi	4. 巻 2
2. 論文標題 Polarizability and isotope effects on dispersion interactions in water	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Communications Chemistry	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s42004-019-0242-0	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Wakahara Takatsugu, Nagaoka Kahori, Nakagawa Akari, Hirata Chika, Matsushita Yoshitaka, Miyazawa Kun'ichi, Ito Osamu, Wada Yoshiki, Takagi Makito, Ishimoto Takayoshi, Tachikawa Masanori, Tsukagoshi Kazuhito	4. 巻 12
2. 論文標題 One-Dimensional Fullerene/Porphyrin Cocrystals: Near-Infrared Light Sensing through Component Interactions	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 ACS Applied Materials & Interfaces	6. 最初と最後の頁 2878 ~ 2883
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsami.9b18784	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kobayashi Osamu, Kato Tomoki, Mashiko Takako, Haketa Yohei, Maeda Hiromitsu, Tachikawa Masanori	4. 巻 10
2. 論文標題 Computational simulation of anion binding association mechanisms contributing toward rotation of pyrrole rings in dipyrrolyldiketone BF <sub>2</sub> complexes	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 RSC Advances	6. 最初と最後の頁 12013 ~ 12024
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C9RA09285D	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Kanematsu Yusuke, Kato Hiroyuki S., Yoshimoto Shinya, Ueda Akira, Yamamoto Susumu, Mori Hatsumi, Yoshinobu Jun, Matsuda Iwao, Tachikawa Masanori	4. 巻 741
2. 論文標題 A computational examination of the electric-field-induced proton transfer along the interface hydrogen bond between proton donating and accepting self-assembled monolayers	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemical Physics Letters	6. 最初と最後の頁 137091 ~ 137091
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cplett.2020.137091	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Daengngern Rathawat, Kobayashi Osamu, Kungwan Nawee, Ngaojampa Chanisorn, Tachikawa Masanori	4. 巻 120
2. 論文標題 Nuclear quantum and H/D isotope effects on three centered bonding diborane: Path integral molecular dynamics simulations	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 International Journal of Quantum Chemistry	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/qua.26179	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Suzuki Kento, Takayanagi Toshiyuki, Kita Yukiumi, Tachikawa Masanori, Oyamada Takayuki	4. 巻 1123
2. 論文標題 Quantum dynamics calculations for e <sup>-</sup> + LiH Li <sup>+</sup> + [H ; e <sup>-</sup> ] dissociative positron attachment using a pseudopotential model	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Computational and Theoretical Chemistry	6. 最初と最後の頁 135 ~ 141
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.comptc.2017.11.023	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kawatsu Tsutomu, Tachikawa Masanori	4. 巻 20
2. 論文標題 Quantum fluctuations of a fullerene cage modulate its internal magnetic environment	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 1673 ~ 1684
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C7CP06401B	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Udagawa Taro, Tachikawa Masanori	4. 巻 8
2. 論文標題 Reaction mechanism of hydrogen-tritium exchange reactions between several organic and HTO molecules: a role of the second HTO	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 RSC Advances	6. 最初と最後の頁 3878 ~ 3888
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C7RA13110K	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Kato Hiroyuki S., Yoshimoto Shinya, Ueda Akira, Yamamoto Susumu, Kanematsu Yusuke, Tachikawa Masanori, Mori Hatsumi, Yoshinobu Jun, Matsuda Iwao	4. 巻 34
2. 論文標題 Strong Hydrogen Bonds at the Interface between Proton-Donating and -Accepting Self-Assembled Monolayers on Au(111)	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Langmuir	6. 最初と最後の頁 2189 ~ 2197
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.langmuir.7b03451	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Zhan Yi-Yang, Ogata Kazuho, Kojima Tatsuo, Koide Takuya, Ishii Kentaro, Mashiko Takako, Tachikawa Masanori, Uchiyama Susumu, Hiraoka Shuichi	4. 巻 1
2. 論文標題 Hyperthermostable cube-shaped assembly in water	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Communications Chemistry	6. 最初と最後の頁 14-14
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s42004-018-0014-2	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Tanaka Naru, Zhan Yi-Yang, Ozawa Yuka, Kojima Tatsuo, Koide Takuya, Mashiko Takako, Nagashima Umpei, Tachikawa Masanori, Hiraoka Shuichi	4. 巻 54
2. 論文標題 Semi-quantitative evaluation of molecular meshing via surface analysis with varying probe radii	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Chemical Communications	6. 最初と最後の頁 3335 ~ 3338
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c8cc00695d	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Harada Ryuhei, Mashiko Takako, Tachikawa Masanori, Hiraoka Shuichi, Shigeta Yasuteru	4. 巻 20
2. 論文標題 Programed dynamical ordering in self-organization processes of a nanocube: a molecular dynamics study	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 9115 ~ 9122
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C8CP00284C	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Sugiura Keita, Tachikawa Masanori, Udagawa Taro	4. 巻 8
2. 論文標題 Nuclear quantum effect and H/D isotope effect on $\text{Cl} \cdot + (\text{H}_2\text{O})_n \rightarrow \text{HCl} + \text{OH} \cdot (\text{H}_2\text{O})_{n-1}$ ( $n = 1-3$ ) reactions	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 RSC Advances	6. 最初と最後の頁 17191 ~ 17201
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C8RA02679C	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Zhan Yi-Yang, Tanaka Naru, Ozawa Yuka, Kojima Tatsuo, Mashiko Takako, Nagashima Umpei, Tachikawa Masanori, Hiraoka Shuichi	4. 巻 83
2. 論文標題 Importance of Molecular Meshing for the Stabilization of Solvophobic Assemblies	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Organic Chemistry	6. 最初と最後の頁 5132 ~ 5137
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.joc.8b00495	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -



1. 著者名 Zhan Yi-Yang, Kojima Tatsuo, Koide Takuya, Tachikawa Masanori, Hiraoka Shuichi	4. 巻 24
2. 論文標題 A Balance between van der Waals and Cation- Interactions Stabilizes Hydrophobic Assemblies	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Chemistry - A European Journal	6. 最初と最後の頁 9130 ~ 9135
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.201801376	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Sugiura Yutaro, Suzuki Kento, Takayanagi Toshiyuki, Kita Yukiumi, Tachikawa Masanori	4. 巻 39
2. 論文標題 Reduction of OH vibrational frequencies in amino acids by positron attachment	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Computational Chemistry	6. 最初と最後の頁 2060 ~ 2066
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.25387	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Sugimoto Hideya, Tachikawa Masanori, Udagawa Taro	4. 巻 119
2. 論文標題 Multicomponent QM study on the reaction of HOSO <sub>2</sub> ?+?NO <sub>2</sub> with H <sub>2</sub> O: Nuclear quantum effect on structure and reaction energy profile	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 International Journal of Quantum Chemistry	6. 最初と最後の頁 e25895 ~ e25895
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/qua.25895	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kawashima Yukio, Sawada Keisuke, Nakajima Takahito, Tachikawa Masanori	4. 巻 40
2. 論文標題 A path integral molecular dynamics study on intermolecular hydrogen bond of acetic acid-arsenic acid anion and acetic acid-phosphoric acid anion clusters	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Computational Chemistry	6. 最初と最後の頁 172 ~ 180
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.25562	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ono Kuniaki, Oyamada Takayuki, Kita Yukiumi, Tachikawa Masanori	4. 巻 74
2. 論文標題 Theoretical analysis of the binding of a positron and pair-annihilation in fluorinated benzene molecules	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The European Physical Journal D	6. 最初と最後の頁 1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1140/epjd/e2020-100538-3	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ishida Yusuke, Funahashi Haruki, Tachikawa Masanori, Udagawa Taro	4. 巻 49
2. 論文標題 Geometrical H/D Isotope Effect of Blue-shifting Dihydrogen-bonded Clusters	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 745 ~ 748
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/cl.200198	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kobayashi Osamu, Noda Kunihiro, Ikuma Naohiko, Shiota Dai, Ishimoto Takayoshi, Tachikawa Masanori	4. 巻 124
2. 論文標題 Experimental and Computational Analyses of the Oxidation Mechanism of the Poly(arylsilane) Family as the Side Reaction during the Baking Process	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 16149 ~ 16158
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.0c02416	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Sugiura Yutaro, Suzuki Haruya, Otomo Takuma, Miyazaki Takaaki, Takayanagi Toshiyuki, Tachikawa Masanori	4. 巻 41
2. 論文標題 Positron?electron correlation polarization potential model for positron binding in polyatomic molecules	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Computational Chemistry	6. 最初と最後の頁 1576 ~ 1585
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.26200	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Sakagami Hiroki、Tachikawa Masanori、Ishimoto Takayoshi	4. 巻 120
2. 論文標題 Hydrogen/deuterium adsorption and absorption properties on and in palladium using a combined plane wave and localized basis set method	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 International Journal of Quantum Chemistry	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/qua.26275	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Funahashi Haruki、Tachikawa Masanori、Udagawa Taro	4. 巻 22
2. 論文標題 Determining if Reaction Selectivity Can Be Controlled by the H/D Isotope Effect in CH $\cdot\cdot\cdot$ O Interactions	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Organic Letters	6. 最初と最後の頁 9439 ~ 9443
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.orglett.0c03351	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Sugiura Yutaro、Takayanagi Toshiyuki、Tachikawa Masanori	4. 巻 120
2. 論文標題 Theoretical calculation of positron annihilation spectrum using positron electron correlation polarization potential	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 International Journal of Quantum Chemistry	6. 最初と最後の頁 26376-1 ~ 26376-5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/qua.26376	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Suzuki Haruya、Otomo Takuma、Iida Ryusei、Sugiura Yutaro、Takayanagi Toshiyuki、Tachikawa Masanori	4. 巻 102
2. 論文標題 Positron binding in chloroethenes: Modeling positron-electron correlation-polarization potentials for molecular calculations	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review A	6. 最初と最後の頁 52830-1 ~ 52830-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevA.102.052830	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ito Shumpei, Yoshida Daisuke, Kita Yukiumi, Tachikawa Masanori	4. 巻 153
2. 論文標題 First-principles quantum Monte Carlo studies for prediction of double minima for positronic hydrogen molecular dianion	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 224305 ~ 224305
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0022673	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kuwahata Kazuaki, Tachikawa Masanori	4. 巻 93
2. 論文標題 Nuclear Quantum Effect on the Geometry of $\text{NH}_4^+\text{H}_2$	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Bulletin of the Chemical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 1558 ~ 1563
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/bcsj.20200120	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Sakagami Hiroki, Tachikawa Masanori, Ishimoto Takayoshi	4. 巻 11
2. 論文標題 Theoretical study of the H/D isotope effect of $\text{CH}_4/\text{CD}_4$ adsorption on a Rh(111) surface using a combined plane wave and localized basis sets method	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 RSC Advances	6. 最初と最後の頁 10253 ~ 10257
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D0RA10796D	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Yodsin Nuttapon, Sakagami Hiroki, Udagawa Taro, Ishimoto Takayoshi, Jungsuttiwong Siriporn, Tachikawa Masanori	4. 巻 504
2. 論文標題 Metal-doped carbon nanocones as highly efficient catalysts for hydrogen storage: Nuclear quantum effect on hydrogen spillover mechanism	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Molecular Catalysis	6. 最初と最後の頁 111486 ~ 111486
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.mcat.2021.111486	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Udagawa Taro, Murphy Rhys B., Darwish Tamim A., Tachikawa Masanori, Mori Seiji	4. 巻 94
2. 論文標題 H/D Isotope Effects in Keto-Enol Tautomerism of $\alpha$ -Dicarbonyl Compounds ?Importance of Nuclear Quantum Effects of Hydrogen Nuclei?	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Bulletin of the Chemical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 1954 ~ 1962
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/bcsj.20210083	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Furushima Miku, Yoshida Daisuke, Kita Yukiumi, Shimazaki Tomomi, Tachikawa Masanori	4. 巻 23
2. 論文標題 Theoretical investigation of the enhancement of positron affinity by the vibration and dimerization of non-polar carbon disulfide	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 21512 ~ 21520
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D1CP02808A	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Shimazaki Tomomi, Tachikawa Masanori	4. 巻 23
2. 論文標題 A theoretical study on solvatofluorochromic asymmetric thiazolothiazole (TTz) dyes using dielectric-dependent density functional theory	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 21078 ~ 21086
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D1CP02047A	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ishimoto Takayoshi, Sakagami Hiroki, Kanematsu Yusuke, Tachikawa Masanori	4. 巻 561
2. 論文標題 H/D isotope effect between adsorbed water (H <sub>2</sub> O, D <sub>2</sub> O, and HDO) and H <sub>2</sub> O- and D <sub>2</sub> O-ice Ih(0001) basal surfaces based on the combined plane wave and localized basis set method	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Applied Surface Science	6. 最初と最後の頁 150100 ~ 150100
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.apsusc.2021.150100	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Tachikawa Masanori、Yoshida Daisuke	4. 巻 62
2. 論文標題 Theoretical Study For Positron Binding and Annihilation of Alcohol Clusters	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Few-Body Systems	6. 最初と最後の頁 48 ~ 53
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s00601-021-01636-x	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ozaki Maya、Yoshida Daisuke、Kita Yukiumi、Shimazaki Tomomi、Tachikawa Masanori	4. 巻 6
2. 論文標題 Positron Binding and Annihilation Properties of Amino Acid Systems	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 29449 ~ 29458
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.1c03409	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kuwahata Kazuaki、Tachikawa Masanori	4. 巻 62
2. 論文標題 Path Integral Molecular Dynamics Study on $\{NH\}_4^+ H_{20}$	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Few-Body Systems	6. 最初と最後の頁 96 ~ 102
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s00601-021-01689-y	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Iida Ryusei、Suzuki Haruya、Takayanagi Toshiyuki、Tachikawa Masanori	4. 巻 104
2. 論文標題 Contribution of vibrational overtone excitations to positron annihilation rates for benzene and naphthalene	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review A	6. 最初と最後の頁 62807-1 ~ 62807-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevA.104.062807	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ishii Kiriko、Shimazaki Tomomi、Tachikawa Masanori、Kita Yukiumi	4. 巻 787
2. 論文標題 Development of anharmonic vibrational structure theory using backflow transformation	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Chemical Physics Letters	6. 最初と最後の頁 139263 ~ 139263
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cplett.2021.139263	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kimura Yuka、Kanematsu Yusuke、Sakagami Hiroki、Rivera Rocabado David S.、Shimazaki Tomomi、Tachikawa Masanori、Ishimoto Takayoshi	4. 巻 126
2. 論文標題 Hydrogen/Deuterium Transfer from Anisole to Methoxy Radicals: A Theoretical Study of a Deuterium-Labeled Drug Model	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 155 ~ 163
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.1c08514	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kuwahata Kazuaki、Tachikawa Masanori	4. 巻 553
2. 論文標題 Atomic mass dependence of the nuclear quantum effect in NH <sub>4</sub> +(H <sub>2</sub> O)	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 111381 ~ 111381
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.chemphys.2021.111381	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yamashita Takuma、Hiyama Emiko、Yoshida Daisuke、Tachikawa Masanori	4. 巻 105
2. 論文標題 Spontaneous radiative dissociation of the second bound state of positronium hydride	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review A	6. 最初と最後の頁 12814-1 ~ 12814-5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevA.105.012814	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Udagawa Taro, Kuwahata Kazuaki, Tachikawa Masanori	4. 巻 1208
2. 論文標題 Competitive nuclear quantum effect and H/D isotope effect on torsional motion of H2O2: An ab initio path integral molecular dynamics study	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Computational and Theoretical Chemistry	6. 最初と最後の頁 113542 ~ 113542
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.comptc.2021.113542	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

[学会発表] 計15件 (うち招待講演 12件 / うち国際学会 13件)

1. 発表者名 Masanori Tachikawa
2. 発表標題 Theoretical study on substituent and solvent effects for nanocube formed with gear-shaped amphiphile molecules
3. 学会等名 THAILAND-JAPAN Symposium in Chemistry (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masanori Tachikawa
2. 発表標題 Ab initio study of the effect of molecular vibrations on the positron-binding to polyatomic molecules
3. 学会等名 The 23rd International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE23) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masanori Tachikawa
2. 発表標題 Path integral simulation for accurate calculation of hyperfine coupling constants of hydrogenated and muoniated molecules
3. 学会等名 Isotopes 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年



1. 発表者名 Masanori Tachikawa
2. 発表標題 Ab initio study of the effect of molecular vibrations on the positron-binding to polyatomic molecules
3. 学会等名 15th International Workshop on Slow Positron Beam Techniques & Applications (SLOPOS-15) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masanori Tachikawa
2. 発表標題 Path integral simulation for accurate calculation of hyperfine coupling constants of muoniated molecules
3. 学会等名 Ninth Conference of the Asia-Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists (APATCC2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masanori Tachikawa
2. 発表標題 Molecular dynamics study on substituent and solvent effects for nanocube formed with gear-shaped amphiphile molecules
3. 学会等名 NanoBio&Med2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Masanori Tachikawa
2. 発表標題 "Path integral simulation for accurate HFCC values on muoniated acetone radical",
3. 学会等名 7th French-Japanese Workshop on Computational Methods in Chemistry (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Masanori Tachikawa
2. 発表標題 "Path Integral Simulation for Hydrogen bonded systems: Protonic quantum nature and its isotope effect"
3. 学会等名 Asian Workshop of Experiment and Theory in Quantum Beam Molecular Sciences (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Masanori Tachikawa
2. 発表標題 "Path integral simulation on muoniated acetone radical"
3. 学会等名 3rd International Symposium of Quantum Beam Science (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Masanori Tachikawa
2. 発表標題 "Path integral simulation on muoniated acetone radical"
3. 学会等名 7th JCS symposium (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Masanori Tachikawa
2. 発表標題 Ab initio study of the effect of molecular vibrations on the positron-binding to polyatomic molecules
3. 学会等名 The 8th Asia-Pacific Conference on Few-Body Problems in Physics (APFB2020) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 立川仁典
2. 発表標題 エキゾチック分子の量子化学
3. 学会等名 IQCE量子化学探索講演会2021「量子化学で探る化学の最先端」(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 立川仁典
2. 発表標題 水素の量子ゆらぎを考慮した第一原理分子理論の構築と重水素化学への展開
3. 学会等名 計算で物事を理解する予測する～産業界の実問題に立ち向かうサイエンス～(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Masanori Tachikawa
2. 発表標題 Multi-component density functional theory study of H/D isotope effect on phase transition of hydrogen-bonded organic conductor -H <sub>3</sub> (Cat-EDT-TTF) <sub>2</sub>
3. 学会等名 MRM2021 Materials Research Meeting (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Masanori Tachikawa
2. 発表標題 Quantum Monte Carlo calculation on the effect of molecular vibrations for the positron-binding to polyatomic molecules
3. 学会等名 PACIFICHEM 2021 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

http://www-user.yokohama-cu.ac.jp/~tachi/index.html  
横浜市立大学量子物理化学研究室（立川・島崎・北グループ）

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計1件

国際研究集会	開催年
6th Japan-Thai Workshop on Theoretical and Computational Chemistry・横浜（オンライン開催）	2021年～2021年

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関		
タイ	チェンマイ大学	ウボンラチャタニ大学	