

令和 5 年 6 月 15 日現在

機関番号：14501

研究種目：基盤研究(A) (一般)

研究期間：2018～2021

課題番号：18H03900

研究課題名(和文) 強相関分子科学に指向した決定論と確率論の融合による電子状態計算フロンティア

研究課題名(英文) New frontier of electronic structure calculations for strongly correlated molecular sciences from the fusion of deterministic and stochastic methodologies

研究代表者

天能 精一郎 (Ten-no, Seiichiro)

神戸大学・科学技術イノベーション研究科・教授

研究者番号：00270471

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 31,200,000円

研究成果の概要(和文)：完全結合クラスター(FCC)展開の実装を行い、励起空間と非線形演算に対するスクリーニングによるアダプティブなFCCR法の開発を行った。さらに、FCCR法を参照関数として二次摂動補正を行うFCCR(2)法と外挿法の併用により、強い電子相関を持つ分子の近似厳密解を得る手法の開発を行った。また、量子モンテカルロ法の枠組みで、結合クラスター理論と摂動論の両面から系のサイズに対するイニシエーター誤差の解決を試みた。さらに、スピン射影を用いた理論についても、動的電子相関や二次収束の手法開発を行い、遷移金属錯体などに対する機動力のある計算手法の確立を目指した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

触媒やレドックス作用の重要な役割を担う電子相関の強い物質は、複雑な電子配置のために理論的な取り扱いが困難である。この問題の解決を目指して、決定論と確率論に基づく最先端の電子状態計算手法の開発を総合的に行った。得られた研究成果は理論の独創性と幅広い応用を持ち、基礎学問と社会的な双方の意義を備えている。

研究成果の概要(英文)：We implemented the full coupled-cluster (FCC) expansion to develop an adaptive FCC reduction (FCCR) approach using screenings for excitation manifolds and nonlinear CC operations. The second order perturbative correction using the FCCR reference (FCCR(2)) along with extrapolations efficiently provides near-exact solutions of strongly correlated electronic systems. We further attempted to mitigate the initiator error of configuration space QMC with respect to the system size using the ideas in CC and many-body perturbation theories. A powerful means from spin-projection including the treatment of dynamic correlation and second-order optimizer is also developed to treat transition metal complexes.

研究分野：電子状態理論

キーワード：結合クラスター理論 量子モンテカルロ法 完全CI 強電子相関 スピン状態

1. 研究開始当初の背景

光化学系やニトロゲナーゼを構成する第一遷移元素を中心とした多核金属化合物の構造を基礎として、優れたレドックス性能や磁性・触媒作用を有する人工的な物質科学の展開が期待されている。しかしながら、その理論的取扱いは、多核遷移金属で特徴的な膨大な電子配置と密集した量子状態のために困難であり、物理化学研究の基礎をなす適切な電子状態計算が手付かずの状況にある。

2. 研究の目的

完全結合クラスター展開法(FCC)などの決定論と確率論的な射影空間のサンプリングを組み合わせることにより新奇な電子状態理論の枠組みを開発する。F12法により完全基底関数極限での励起状態と物性計算の数値解を得ることを可能にし、更に多階層計算手法や四成分相対論と接続することにより、従来不可能であった 10^{20} 以上の配置から成る量子自由度の取り扱いを広汎なシステムで可能にし、未到達の化学現象の解明の有力な手段を開拓する。

3. 研究の方法

完全結合クラスター(FCC)展開の実装を行い、励起空間と非線形演算に対するスクリーニングによるアダプティブなFCCR法の開発を行った。さらに、FCCR法を参照関数として二次摂動補正を行うFCCR(2)法と外挿法の併用により、強い電子相関を持つ分子の近似厳密解を得る手法の開発を行った。また、量子モンテカルロ法の枠組みで、結合クラスター理論と摂動論の両面から系のサイズに対するイニシエーター誤差の解決を試みた。さらに、スピン射影を用いた理論についても、動的電子相関や二次収束の手法開発を行い、遷移金属錯体などに対する機動力のある計算手法の確立を目指した。

4. 研究成果

(1)FCCR法の開発

バイナリー表現のクラスター演算子により相似変換された有効ハミルトニアンを直接展開することにより、粗演算に適した完全結合クラスター(FCC)展開を実現した。さらに、励起空間の生成と非線形演算に対する2種類のスクリーニング法を用いて、高精度完全結合クラスター還元(FCCR)法の実装を行なった。重要なクラスター演算子との一重交換子を通じてイテラティブに更新する励起空間の生成法を確立した。非線形演算部分においても、排他律項(EPV)の考慮により、変分的な振る舞いを示す早い収束がえられることを示した。アセン類の一重項-三重項ギャップやクロム二量体に適用し、手法の有効性を数値的に示し、Phys. Rev. Lett. 誌に発表した[1]。

さらに、FCCR法からの二次摂動であるFCCR(2)法とそれに基づいた外挿法の開発を行った(図1)。応用として、厳密解に近い有機半導体のスピンギャップやモデル銅酸化物の異性化エネルギーの計算を行った。また、世界の主要理論開発グループとの国際共同研究としてペンゼンの基底状態エネルギーのベンチマークに適用し、他の競合する手法と比較して高い有効性を示し、これらの成果を二編の論文としてJ. Phys. Chem. Lett. 誌に発表した[2, 3]。

(2)モデル空間量子モンテカルロ法の開発

結合クラスター法に基づく配置空間量子モンテカルロ法で、線形化した近似結合クラスターモデルの実装を行い、摂動分割することにより一般的な摂動モンテカルロ法の開発を行った。同様の摂動展開をCI法を基礎に行なったものと比較し、摂動成分に対する配置空間打ち切りの影響の解析を行った。この結果、二電子励起で配置空間の打ち切りを行った場合、CI展開を基礎とした摂動モンテカルロ法では、二次四電子励起波動関数のスポーニングに起因する三次波動関数と二次二電子励起波動関数からの転写項との打ち消しが不完全であるために、サイズに対する無矛盾が生じることを示した。これを解決するために、サイズ無矛盾を解消する一般的な摂動モンテカルロ法を提案した。また、イニシエーター誤差に対してBluntが提案した二次エプスタイン・ネスベット摂動補正を、三次摂動まで拡張しサンプリングを改良した手法の開発を行った。水や窒素分子などに対し手法の検証を行い、その有効性を確認した。以上の結果をJ. Chem. Phys. 誌に発表した[4, 5]。

(3)スピン射影手法の開発

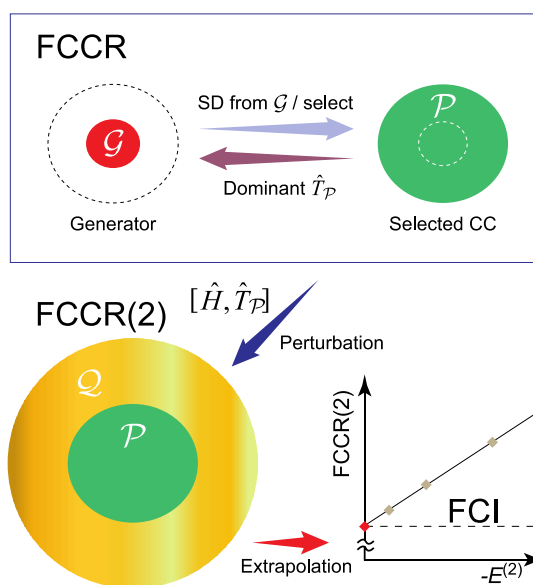


図1 FCCR(2)法の計算と外挿スキーム

スピン射影Hartree-Fock法に基づく動的電子相関の取り扱いについても、スピン汚染を完全に排除した近似的結合クラスター法の実装に成功し、サイズ矛盾を取り除いた上で、高い精度が得られることを示した[6]。また、ロバストな二次の摂動論を開発し、遷移金属錯体とクロム2量体のポテンシャルエネルギー曲線の計算に応用した[7]。さらに、計算手法の効率化による実用的な高度化を行った。具体的には安定な虚数のレベルシフトのよる計算速度の向上とプレコンディショニングやメモリー容量の改良である。修正された0次ハミルトニアンを開発を行い、マンガン錯体 $\text{Mn}_2\text{O}_2(\text{NHCHCO}_2)_4$ 等の対象分子でその有用性を検証し、アメリカ化学会JCTC誌に発表した[8, 9]。

(4) 光触媒への応用

課題の終盤は、開発手法の固体への応用等を見据えた半導体光触媒の応用計算を進めた。具体的には、バナジン酸ビスマス-黒リン界面、助触媒CoPiでの酸素発生反応機構、複合酸化物での過酸化水素発生反応であり、その成果をJPC C、PCCP、Nature Communications誌等に発表した[10, 11, 12]。

<引用文献>

1. E. Xu, M. Uejima, and S. L. Ten-no, “Full coupled-cluster reduction for accurate description of strong electron correlation”, *Phys. Rev. Lett.*, **121** 113001 (2018).
2. E. Xu, M. Uejima, and S. L. Ten-no, “Towards near-exact solutions of molecular electronic structure: Full coupled-cluster reduction with a second-order perturbative correction”, *J. Phys. Chem. Lett.*, **11** 9775-9780 (2020).
3. J. J. Eriksen, T. A. Anderson, J. E. Deustua, K. Ghanem, D. Hait, M. R. Hoffmann, S. Lee, D. S. Levine, I. Magoulas, J. Shen, N. M. Tubman, K. B. Whaley, E. Xu, Y. Yao, N. Zhang, A. Alavi, G. K.-L. Chan, M. Head-Gordon, W. Liu, P. Piecuch, S. Sharma, S. L. Ten-no, C. J. Umrigar, J. Gauss, “The ground state electronic energy of benzene”, *J. Phys. Chem. Lett.*, **11** 8922-8929 (2020).
4. B. Ladóczki and S. L. Ten-no, “Stochastic perturbation theory in a limited configuration space”, *J. Chem. Phys.*, **151** 114113 (2019).
5. B. Ladóczki, M. Uejima, and S. Ten-no, “Third-order Epstein-Nesbet perturbative correction to the initiator approximation of configuration space quantum Monte Carlo”, *J. Chem. Phys.*, **153** 114112 (2020).
6. T. Tsuchimochi and S. L. Ten-no, “Orbital-invariant spin-extended approximate coupled-cluster for multi-reference systems”, *J. Chem. Phys.*, **149** 174112 (2018).
7. M. Uejima and S. L. Ten-no, “Quadratically convergent self-consistent field of projected Hartree-Fock”, *J. Chem. Phys.*, **153** 164103 (2020).
8. T. Tsuchimochi and S. Ten-no, “Second-order perturbation theory with spin-symmetry projected Hartree-Fock”, *J. Chem. Theor. Comp.*, **15** 6688-6702 (2019).
9. T. Tsuchimochi, K. Yoshimura, Y. Shimomoto, and S. L. Ten-no, “Improved description and efficient implementation of spin-projected theory for practical applications”, *J. Chem. Theor. Comp.*, **17** 3471-3482 (2021).
10. T. Tsuchimochi, K. Takaoki, K. Nishiguchi, and S. L. Ten-no, “First principles investigation on the heterostructure photocatalyst comprising BiVO_4 and few-layer black phosphorus”, *J. Phys. Chem. C*, **125** 21840-21850 (2021).
11. T. Tsuneda and S. L. Ten-no, “Water-oxidation mechanism of cobalt phosphate co-catalyst in artificial photosynthesis: a theoretical study”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **24** 4674-4682 (2022).
12. Z. Zhang, T. Tsuchimochi, T. Ina, Y. Kymabe, S. Muto, K. Ohara, H. Yamada, S. L. Ten-no, and T. Tachikawa, “Binary dopant segregation enables hematite-based heterostructures for highly efficient solar H_2O_2 synthesis”, *Nat. Commun.*, **13** 1499 (2022).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計16件（うち査読付論文 16件 / うち国際共著 2件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Zhang Zhujun, Tsuchimochi Takashi, Ina Toshiaki, Kumabe Yoshitaka, Muto Shunsuke, Ohara Koji, Yamada Hiroki, Ten-no Seiichiro L., Tachikawa Takashi	4. 巻 13
2. 論文標題 Binary dopant segregation enables hematite-based heterostructures for highly efficient solar H ₂ O ₂ synthesis	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 1499
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-022-28944-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 Tsuneda Takao, Ten-no Seiichiro L.	4. 巻 24
2. 論文標題 Water-oxidation mechanism of cobalt phosphate co-catalyst in artificial photosynthesis: a theoretical study	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 4674 ~ 4682
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d1cp05816a	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 Tsuchimochi Takashi, Takaoki Kaname, Nishiguchi Kazutaka, Ten-no Seiichiro L.	4. 巻 125
2. 論文標題 First-Principles Investigation on the Heterostructure Photocatalyst Comprising BiV ₄ and Few-Layer Black Phosphorus	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 21840 ~ 21850
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.1c06247	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 Tsuchimochi Takashi, Mori Yuto, Ten-no Seiichiro L.	4. 巻 2
2. 論文標題 Spin-projection for quantum computation: A low-depth approach to strong correlation	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 43142
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.2.043142	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 Ladoczki Bence, Uejima Motoyuki, Ten-no Seiichiro L.	4. 巻 153
2. 論文標題 Third-order Epstein-Nesbet perturbative correction to the initiator approximation of configuration space quantum Monte Carlo	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 114112 ~ 114112
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0022101	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 Eriksen Janus J. et al.	4. 巻 11
2. 論文標題 The Ground State Electronic Energy of Benzene	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 8922 ~ 8929
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcllett.0c02621	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 Uejima Motoyuki, Ten-no Seiichiro L.	4. 巻 153
2. 論文標題 Quadratically convergent self-consistent field of projected Hartree-Fock	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 164103 ~ 164103
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0025280	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 Xu Enhua, Uejima Motoyuki, Ten-no Seiichiro L.	4. 巻 11
2. 論文標題 Towards Near-Exact Solutions of Molecular Electronic Structure: Full Coupled-Cluster Reduction with a Second-Order Perturbative Correction	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 9775 ~ 9780
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcllett.0c03084	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 Tanimoto Shoichi, Yoshida Norio, Yamaguchi Tsuyoshi, Ten-no Seiichiro L., Nakano Haruyuki	4. 巻 59
2. 論文標題 Effect of Molecular Orientational Correlations on Solvation Free Energy Computed by Reference Interaction Site Model Theory	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Chemical Information and Modeling	6. 最初と最後の頁 3770 ~ 3781
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jcim.9b00330	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 Ladoczek Bence, Ten-no Seiichiro L.	4. 巻 151
2. 論文標題 Stochastic perturbation theory in a limited configuration space	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 114113 ~ 114113
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5109820	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 Tsuchimochi Takashi, Ten-no Seiichiro L.	4. 巻 15
2. 論文標題 Second-Order Perturbation Theory with Spin-Symmetry-Projected Hartree-Fock	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Chemical Theory and Computation	6. 最初と最後の頁 6688 ~ 6702
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jctc.9b00897	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 Tsuchimochi Takashi, Ten-no Seiichiro L.	4. 巻 149
2. 論文標題 Orbital-invariant spin-extended approximate coupled-cluster for multi-reference systems	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 044109 ~ 044109
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5036542	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 Xu Enhua, Uejima Motoyuki, Ten-no Seiichiro Lenka	4. 巻 121
2. 論文標題 Full Coupled-Cluster Reduction for Accurate Description of Strong Electron Correlation	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 113001 ~ 113001
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevLett.121.113001	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 Johnson Cole M., Doran Alexander E., Ten-no Seiichiro L., Hirata So	4. 巻 149
2. 論文標題 Monte Carlo explicitly correlated many-body Green's function theory	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 174112 ~ 174112
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5054610	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 Tsuchimochi Takashi, Ten-no Seiichiro L.	4. 巻 40
2. 論文標題 Extending spin-symmetry projected coupled-cluster to large model spaces using an iterative null-space projection technique	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Computational Chemistry	6. 最初と最後の頁 265 ~ 278
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.25587	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 Tsuchimochi Takashi, Yoshimura Kosuke, Shimomoto Yuma, Ten-no Seiichiro L.	4. 巻 17
2. 論文標題 Improved Description and Efficient Implementation of Spin-Projected Perturbation Theory for Practical Applications	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Chemical Theory and Computation	6. 最初と最後の頁 3471 ~ 3482
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jctc.1c00324	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19件(うち招待講演 12件/うち国際学会 12件)

1. 発表者名 Seiichiro L. Ten-no
2. 発表標題 The full coupled-cluster approach for accurate treatment of strongly correlated electrons
3. 学会等名 New Horizons in Scientific Software: from Legacy Codes to Modular Environments (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Seiichiro L. Ten-no
2. 発表標題 Selected coupled-cluster for strong electron correlation
3. 学会等名 Workshop on Strongly Correlated Electrons (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Seiichiro L. Ten-no
2. 発表標題 Full coupled-cluster reduction for strongly correlated electrons
3. 学会等名 The Ninth Conference of the Asia-Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists (APATCC 2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Seiichiro L. Ten-no
2. 発表標題 Explicitly correlated F12 theory on modern electronic structure calculations
3. 学会等名 10th Triennial Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics (ISTCP2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Seiichiro L. Ten-no
2. 発表標題 Full coupled-cluster reduction for strongly correlated electrons
3. 学会等名 9th Molecular Quantum Mechanics Conference (MQM2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Seiichiro L. Ten-no
2. 発表標題 Selected coupled-cluster and stochastic perturbation theory
3. 学会等名 New Frontiers in Electron Correlation Workshop (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Bence Ladoczki、Seiichiro L. Ten-no
2. 発表標題 Stochastic perturbation theory in a limited configuration space
3. 学会等名 第22回理論化学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Shotaro Sakurai, Kotaro Okano, Kazutaka Nishiguchi, Seiichiro Ten-no
2. 発表標題 First-principles study of the interfaces of SrTiO ₃ with mediator and cocatalyst for the hydrogen evolution in the Z-scheme artificial photosynthesis
3. 学会等名 International Workshop on Frontier of Science and Technology for Solar Energy Conversion
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 土持崇嗣、天能精一郎
2. 発表標題 強電子相関系のイオン化ポテンシャル
3. 学会等名 第13回分子科学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Takashi Tsuchimochi and Seiichiro L. Ten-no
2. 発表標題 Ionization potentials for multi-reference systems via post-PHF: Extended Koopmans Theorem
3. 学会等名 9th Molecular Quantum Mechanics Conference (MQM2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 土持崇嗣、天能精一郎
2. 発表標題 拡張 Koopmans 定理を用いた強相関系におけるイオン化ポテンシャルの計算
3. 学会等名 第22回理論化学討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Ladoczki Bence、天能精一郎
2. 発表標題 確率論的手法とUnlinked図形の寄与に関する研究
3. 学会等名 第21回理論化学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Seiichiro L. Ten-no
2. 発表標題 Selected coupled-cluster approaches from stochastic and deterministic algorithms
3. 学会等名 The 7th (Japan-Czech-Slovakia) Symposium on Theoretical Chemistry (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Seiichiro L. Ten-no
2. 発表標題 Selected coupled-cluster approaches from stochastic and deterministic algorithms
3. 学会等名 Low-scaling and Unconventional Electronic Structure Techniques (LUEST2018) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Seiichiro L. Ten-no
2. 発表標題 Selected coupled-cluster approaches from stochastic and deterministic algorithms
3. 学会等名 The Molecular Electronic Structure in Metz (MESM) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Ladoczki Bence、天能精一郎
2. 発表標題 イニシエーター近似の摂動補正に関する研究
3. 学会等名 第12回分子科学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 上島基之、天能精一郎
2. 発表標題 量子化学プログラムGELLANの開発
3. 学会等名 第12回分子科学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Seiichiro L. Ten-no
2. 発表標題 Full coupled cluster reduction
3. 学会等名 Mainz-Kobe joint workshop on solving the full configuration interaction problem (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Seiichiro L. Ten-no
2. 発表標題 Stochastic and deterministic coupled-cluster approaches for accurate treatment of strong electron correlations
3. 学会等名 Quantum Simulations: From Chemistry to Materials Science (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

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0件

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			
米国	University of Illinois	California Institute of Technology	University of California, Berkeley	他3機関
ドイツ	Max-Planck Institute	Johannes Gutenberg-University		