

機関番号：12601

研究種目：若手研究 (B)

研究期間：平成 21 年度 ～ 平成 22 年度

課題番号：21750025

研究課題名 (和文)

弱い分子間力を正確に記述する第一原理分子動力学法の開発

研究課題名 (英文)

Ab initio molecular dynamics accurately describing weak interactions

研究代表者

佐藤 健 (SATO TAKESHI)

東京大学・大学院工学系研究科・特任助教

研究者番号：30507091

研究成果の概要 (和文)：

密度汎関数理論 (DFT) は分散力を記述できない。よく行われる経験的な分散力補正は新しい系への適用が難しい。そこで本研究では、電子密度応答関数に対する局所近似 (Local Response) に基づいて分散力 (Dispersion) を非経験的に算出する LRD 法を考案し、弱い相互作用を高精度かつ効率的に記述できる新しい手法を開発した。LRD 法は分子中の原子間分散力係数を基底状態電子密度の汎関数として与える。さらに、多中心相互作用への拡張や自己無撞着的解法の実装を行い、複雑な分子集合体の高精度量子化学計算を可能にした。

研究成果の概要 (英文)：

Density functional theory (DFT) cannot describe the dispersion interaction. Empirical dispersion corrections are unreliable for newer systems. In this work, we propose a new method to compute the dispersion interaction based on the local response approximation (LRD). Our goal is a method that accurately describes weak interactions with a low computational cost. The LRD method gives dispersion coefficients between atoms in a molecule as a functional of the ground-state electron density. A generalization to the multicenter interactions and the self-consistent field implementation enable accurate quantum chemical calculations of complex molecular assemblies.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
21 年度	1,600,000	480,000	2,080,000
22 年度	600,000	180,000	780,000
年度			
年度			
年度			
総計	2,200,000	660,000	2,860,000

研究分野：化学

科研費の分科・細目：基礎科学・物理化学

キーワード：理論化学、密度汎関数理論、分子間力、分散力

## 1. 研究開始当初の背景

生体分子などの大規模な分子集合体では分散力などの弱い分子間相互作用が重要な役割を果たしている。密度汎関数理論 (DFT) は大規模系に適した理論だが、分散力の記

述に問題がある。よく行われる経験的な分散力補正は新しい系への適用が難しい。

## 2. 研究の目的

弱い相互作用を高精度かつ効率的に記述で

きる新しい量子化学計算手法の開発を目指した。

### 3. 研究の方法

電子密度応答関数に対する局所近似 (Local Response) に基づいて分散力 (Dispersion) を非経験的に算出する LRD 法を提案し、汎用量子化学計算プログラムに実装した。これを様々なベンチマーク計算に適用し、計算精度と計算効率を検証した。

### 4. 研究成果

LRD 法は分子中の原子間分散力係数を基底状態電子密度の汎関数として与える。原子半径や原子分極率などの経験的物理量は不要であり、任意の構造に適用できる。従来の DFT と同等の計算コストで、系の電子状態を考慮した分散力計算を行うことができる。全てのベンチマーク計算において、高精度な結合クラスター理論の結果を良く再現することが確認された。さらに、多中心相互作用への拡張や自己無撞着的解法の実装を行い、複雑な分子集合体の高精度量子化学計算を可能にした。今後 LRD 法を第一原理分子動力学計算に拡張し、生体分子のテラヘルツ分光などに応用したいと考えている。

### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 4 件)

1. “Local response dispersion method II. Generalized multicenter interactions”, T. Sato and H. Nakai, J. Chem. Phys. 133, 194101/1-9, 2010 【原著論文・査読有り】
2. “Efficient evaluation of the Coulomb force in Gaussian and finite-element Coulomb method”, Y. Kurashige, T. Sato (他 2 名, 3 番目), J. Chem. Phys. 132, 244107-244113, 2010. 【原著論文・査読有り】
3. “Calculations of Alkane Energies Using Long-Range Corrected DFT Combined with Intramolecular van der Waals Correlation”, J-W. Song, T. Sato (他 2 名, 3 番目), Org. Lett. 12, 1440-1443, 2010. 【原著論文・査読有り】
4. “Density functional method including weak interactions: Dispersion coefficients based on the local response approximation”, T. Sato and H. Nakai, J. Chem. Phys. 131, 224104-224115, 2009. 【原著論文・査読有り】

[学会発表] (計 8 件)

1. “Local response dispersion method with non-local atomic polarizabilities”, T. Sato, CECAM workshop on van der Waals forces in DFT, RPA and beyond, EPFL Lausanne, Switzerland, June 30, 2010. 【招待講演】

2. “弱い相互作用を記述する密度汎関数理論の開発：局所応答近似に基づく分散力計算”, 佐藤健, 中井浩巳, 第 3 回分子科学討論会, 名古屋, 2009 年 9 月 23 日 【口頭発表】

3. “Dispersion coefficients based on the local response approximation”, T. Sato and Hiromi Nakai, DFT09, Lyon, France, August 31, 2009 【ポスター発表】

4. “Density functional method including weak interactions: dispersion coefficients based on the local response approximation”, T. Sato and H. Nakai, CREST International Symposium on Theory and Simulation of Complex Molecular Systems, Kyoto, Japan, July 20, 2009. 【ポスター発表】

5. “Dispersion coefficients based on the local response approximation” T. Sato and H. Nakai, 13th International Congress of Quantum Chemistry, Helsinki, Finland, June 24, 2009. 【ポスター発表】

6. “局所応答近似に基づく分散力計算手法の開発”, 佐藤健, 中井浩巳, 第 12 回理論化学討論会, 東京, 2009 年 5 月 30 日 【口頭発表】

7. “Dispersion coefficients based on the local response approximation”, T. Sato and H. Nakai, The International Conference on Simulations and Dynamics for Nanoscale and Biological Systems, Tokyo, Japan, March 5, 2009. 【ポスター発表】

8. Dispersion coefficients based on the local response approximation”, T. Sato and H. Nakai, 49th Sanibel Symposium, GA, USA, March 1, 2009. 【ポスター発表】

[図書] (計 0 件)

[産業財産権] (計 0 件)

[その他] (計 0 件)

### 6. 研究組織

(1) 研究代表者

佐藤 健 (東京大学・大学院工学系研究科・特任助教)

研究者番号 : 30507091

(2) 研究分担者 なし

(3) 連携研究者 なし