

平成 26 年 5 月 27 日現在

機関番号：17102

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2011～2013

課題番号：23550018

研究課題名(和文) 溶液内擬縮退系のための多配置電子状態理論とシミュレーション手法の開発

研究課題名(英文) Development of multiconfigurational electronic structure theory and simulation method for quasidegenerate systems in solution

研究代表者

中野 晴之(Nakano, Haruyuki)

九州大学・理学(系)研究科(研究院)・教授

研究者番号：90251363

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 4,100,000円、(間接経費) 1,230,000円

研究成果の概要(和文)：溶液内擬縮退系の化学現象を解明する手法を提供するため、(1) 複雑な電子状態計算を念頭に置いた電子状態理論の開発、(2) 溶液内反応の自由エネルギー面構成のための手法の開発を進め、これらを総合して用いることにより、実際に金属系をはじめとする溶液中の化学現象にアプローチした。主なものでは、新しい相対論的多配置SCF法とそれに基づく多参照摂動論の開発、MnO<sub>4</sub>アニオン、CrO<sub>4</sub>ジアニオンの励起エネルギーに対する溶媒効果と溶媒和構造の解明、アミノ酸の混合溶媒中での溶媒和の解析、混合溶媒中におけるグリシンのプロトン移動反応の解析等を行った。

研究成果の概要(英文)：We developed (1) multiconfigurational electronic structure methods for complex molecular systems and (2) simulation methods for the free energy surface construction of chemical reactions in solution phase, and applied them to chemical phenomena including metal complexes in solution: development of the new relativistic MCSCF method and perturbation theory, analysis of the solvent effect and on the excitation spectra of the MnO<sub>4</sub> anion and CrO<sub>4</sub> dianion, analysis of solvation in a mixed solvent of amino acid, and analysis of proton transfer reaction of glycine in a mixed solvent, etc.

研究分野：化学

科研費の分科・細目：基礎化学・物理化学

キーワード：理論化学 擬縮退系 多配置電子状態理論 シミュレーション技法 相対論的電子状態理論

## 1. 研究開始当初の背景

大規模な系の電子状態は、比較的穏やかな電子状態(単一の電子配置でよく記述される状態)については、密度汎関数法の高度の発展によりここ10年で長足の進歩が見られた。しかし、遷移金属を含み、エネルギー準位が近接する開殻系は準位同士の混合により、本質的に多電子配置状態となる。開殻部分を複数持つ複核錯体の電子状態を記述するには、大きな制限が伴う。なんらかの、部分(単一の開殻)から全体を構成する電子状態の手法が必須である。

また、これとともに、有限温度の溶液内の分子を記述するためには、ポテンシャルエネルギー面の理解では不十分で自由エネルギー面の構築が必要不可欠となる。自由エネルギー面を構築するには、計算量が莫大になってしまうため、電子状態理論を用いた化学反応の研究の大半はいまだにポテンシャルエネルギー面を基に議論することが大半である。自由エネルギー面を構築するための汎用性の高い方法が必要となる。

## 2. 研究の目的

溶液内あるいは生体内の複核遷移金属錯体などは近接準位が存在し、その結果、擬縮退した複雑な電子状態を呈する。さらに、有限温度の溶液内の分子を記述するためには、ポテンシャルエネルギー面の理解では不十分で自由エネルギー面の構築が必要不可欠となる。本研究では、溶液内の擬縮退した複雑な電子状態の記述法としての多配置電子状態理論、および、溶液内あるいは生体内などの環境の効果を有効に取り込み、自由エネルギー面を一般的に構築するシミュレーション手法をあわせ開発し、溶液内の遷移金属系で、従来手法では十分に明らかにすることのできない問題に適用することを目的とした。

## 3. 研究の方法

溶液内擬縮退系の化学現象を解明する手法を提供するため、(1) 複雑な電子状態計算を念頭に置いた電子状態理論の開発、(2) 溶液内反応の自由エネルギー面構成のための手法の開発、を進め、これらを総合して用いることにより、実際に金属系をはじめとする溶液中の化学現象にアプローチした。まず、手法の開発を中心とし、1. 複雑な電子状態の記述を目指した多配置電子状態理論、2. 化学反応の自由エネルギー面を構成するための手法、3.  $f$  電子・ $d$  電子のための相対論的電子状態理論の開発を行う。以降は、これを継続するとともに、1, 2, 3 の研究結果を融合させることにより、溶液内金属錯体の電子励起状態を考慮した分子シミュレーションの実現をめざした。

## 4. 研究成果

複雑な電子状態の記述を目指した多配置

電子状態理論、化学反応の自由エネルギー面を構成するための手法、 $f$  電子・ $d$  電子のための相対論的電子状態理論の開発を行い、溶液内の遷移金属系等に適用した。以下に主なものを記す。

## (1) 新しい相対論的多配置SCF法とそれに基づく多参照摂動論の開発

重原子を含む分子を記述するのに適した方法として、Dirac-Fock-Roothaan 方程式を出発とした多状態の多参照摂動法である相対論的 GMC-QDPT がある。これまでの研究ではいくつかの原子の励起スペクトルの計算を行い、全角運動量子数の違いによる副準位のエネルギー差までよい精度で計算できることを確かめてきた。スピン多重度による制限がかかる非相対論の場合と異なり、相対論的な多配置 SCF 法ではすべてのスレーター行列式を用いるため計算負荷は大きくなりがちである。また、励起状態を扱うために多くの状態を同時に扱えばその分計算負荷は増える。そのため、大きな分子はもちろん原子の場合ですら、計算負荷が大き過ぎ計算が実行できない場合があった。たとえば、Gd 原子の基底状態 ( $^1D_2$ ) を  $4f, 5d, 6s$  からなる 26 スピノールを活性空間に用いた CASSCF 法ではその次元は 500 万を超える。また、遷移金属の場合には  $(n+1)d$  軌道まで活性空間に入れなければならない場合があり、この場合も CASSCF 法では取り扱えない。そこで、コンパクトでありながら重要度の高い行列式をとりこぼしのないように含まれる CI/MCSCF 法を開発し、その波動関数を参照波動関数とすることで計算負荷を低減し、より大規模な系に対しても相対論的 GMC-QDPT の適用を可能にした。本研究では、occupation restricted multiple active space (ORMAS) CI/MCSCF 波動関数を相対論的波動関数に拡張し、参照波動関数に採用した。ORMAS-CI/MCSCF は活性空間を部分空間に分割し、各部分空間の占有電子数を指定することで重要な電子配置を効率よく生成することができる方法である。相対論的 GMC-QDPT のプログラムに ORMAS-CI/MCSCF 法を実装し、ランタニド原子や遷移金属原子の励起状態を計算した。

## (2) 相対論的計算におけるno-virtual-pair近似と電子相関エネルギーに関する研究

理論計算による原子や分子の電子状態解析においてスピン軌道相互作用などの相対論効果を十分に考慮するためには、四成分相対論計算を用いる。これらの計算には電子の解だけではなく負の運動エネルギーを持つ粒子の解が含まれるが、通常、no-virtual-pair (NVPA) 近似により、負の運動エネルギーを持つ粒子は切り捨てて電子のみを陽に取り扱っている。これまで、NVPA近似による電子相関エネルギーへの影響をヘリウム型イオン原子について一連の計算により調査してきた。今回、負の運動エネルギーを持つ

粒子の取り扱いについてさらに調査を行った。その結果、使用するハミルトニアンによって負の運動エネルギーを持つ粒子の空間が変化していることを確認した。

### (3) 相対論的分子軌道法における二成分法の近似精度

原子・分子における相対論効果は四成分法によって精度良く取り扱うことができるが、その計算コストの高さがしばしば問題となる。そこで、ディラック方程式の解のうち主に電子状態を記述する正運動エネルギー解を負運動エネルギー解と分離し、実質的に半分の二成分を取り扱う、いわゆる、二成分法が数多く提案されている。それらの近似の基本思想の違いが計算される物理量にどのような影響を与えるかは興味深い。四成分法の結果とのずれは、ただ近似のもたらす誤差というだけでなく、正と負のエネルギー解の分離の方法という相対論的分子軌道法の本質的な部分に関わるからである。そこで代表的な二成分法 (Breit-Pauli (BP) 近似, ZORA法, IORA法, RESC法, Douglas-Kroll (DK) 近似, IOTC法) のふるまいと近似精度の違いについて議論した。核電荷96のクーロン場において、単一のs型ガウス型波動関数をもつ電子のエネルギー $E$ を計算し、エネルギーとガウス関数の指数 $\alpha$ の関係を求めた。この結果から、二成分法によって見積もられるエネルギーについて以下の知見を得た。第一は、 $\alpha$ が大きいときの漸近的な挙動である。 $\alpha$ は運動量の大きさの二乗 ( $p^2$ ) に比例するため、 $\alpha$ と $E$ の絶対値が十分に大きな領域では、グラフの傾きから $p^2$ に対し運動エネルギーが何次に比例するかを読み取れる。第二は、BPA法以外はすべて $\alpha = 10000$ 付近に最小値をもつことから、変分的に軌道を決定するための必要条件は満たしていることである。第三は近似精度である。 $\alpha$ の全区間においてDK法は非常に精度良く四成分法を近似しており、また、IOTC法は完全に四成分法のエネルギーを再現する。

### (4) 四成分相対論的多配置摂動論による原子スペクトルの計算

f ブロック錯体は特徴的な鋭い蛍光ピークを持ち、蛍光標識物質として利用されている。このような物質の励起状態の理解および分子設計のために量子化学計算の果たす役割は大きい。重元素を含む化合物では電子相関とともに相対論効果が重要であり、四成分相対論的分子軌道法が有効であると考えられる。我々のグループで開発している四成分相対論的 GMC-QDPT は任意の多配置波動関数を参照とする多参照多状態摂動法であり、相対論効果と電子相関を高精度に取り込むことができる。本研究では四成分相対論的 GMC-QDPT による励起状態計算を各種の原子について行いその精度を検証した。例として、スカンジウム Sc とイットリウム Y をとると、基底状態の副準位の分裂は高い精度で

求められる一方で、 $ns^2(n-1)d^m \rightarrow ns^1(n-1)d^{m+1}$  遷移は誤差が大きい傾向がみられた。 $ns^2(n-1)d^m \rightarrow ns^1(n-1)d^{m+1}$  遷移エネルギーは比較的小さいため、各状態の相関エネルギーの誤差が励起エネルギーの精度に大きく影響すると考えられる。原因として、基底関数が電子相関の記述に不充分、参照波動関数が truncated CI 型では適当ではなく、多配置 SCF 関数を参照とする必要がある、二次摂動法で相関エネルギーを正しく記述できていない、という可能性を考え、この問題を検討した。

### (5) 軽元素系における相対論効果

原子中の内殻電子は原子核に捕縛されないように高速で運動している。その速さは原子核の陽子数が増加するにつれて大きくなり、次第に光速に近づくため、相対性理論による記述が必要となる。この相対論効果は、原子を例にとると、全エネルギーについては、Al 原子, Si 原子のあたりで電子相関効果とほぼ拮抗し、それ以降でははるかに大きくなる。しかしながら、相対論効果は内殻電子に集中しているため、重原子では顕著に表れるものの軽い原子のみを取り扱う際には影響が小さく、従来は非相対論的計算で十分とされてきた。しかしながら、近年の四成分の相対論的な密度汎関数理論、および、波動関数に基づく理論が整備され、高精度の計算が可能になったことにより、小さな相対論的效果をも精度よく評価することが可能になった。本研究では H から Ar の第 3 周期までの元素を含む軽元素系の物理量に対する相対論的效果について評価を行った。具体的には、H から Ar の第 3 周期までの元素を含む、原子といくつかの二原子分子に対して、二原子分子については平衡核間距離と分光定数を、原子 (といくつかの二原子分子) については第一イオン化エネルギー、電子親和力を計算した。相対論効果そのものは全体の値の中では小さいが、原子番号との相関があり、これを明らかにした。

### (6) クマリン 120 の電子励起状態における動的挙動に関する研究

クマリン 120 はクマリン分子の 7 位の水素をアミノ基で置換した非常に強い蛍光特性を持つ物質である。第一電子励起状態からの無放射過程の違いから、極性溶媒中においては、無極性溶媒中に比べ蛍光量子収率が増大すると考えられており、その過程として TICT (twisted intramolecular charge transfer) 状態の存在、アミノ基の平面構造から三角錐構造への反転運動 (open-closed umbrella-like motion) が提案されている。しかしながら、クマリン 120 の第一電子励起状態における動的挙動の詳細については実験では捉えにくく、一方、理論では電子励起状態の記述が難しいため、これまでに十分に明らかにされていない。本研究では、分子シミュレーションを用い、クマリン 120 の電子励起状態における動的挙動

に関する調査を行った。クマリン 120 分子の基底状態の安定構造においては、アミノ基は三角錐構造であったが、 $\pi \rightarrow \pi^*$  の性質をもつ第一励起状態の安定構造においては、アミノ基は平面構造となる。第一励起状態におけるダイナミクスについて調査したところ、気相中、水中共にアミノ基の平面構造を経由する反転運動がみられた。気相中においては、分子は平面構造へ緩和する一方、水中においては、アミノ基の三角錐構造において存在した窒素原子と水分子の水素結合が第一励起状態への遷移後にはずれ、アミノ基は平面構造を経て、反転運動を続けた。水中における二つの構造について理解するために、動力学経路上のこれら二つの構造に対応するスナップショット構造に基づいて解析を行った。蛍光エネルギーには差は見られなかったものの、振動子強度は平面構造が二倍程度大きかった。

#### (7) $\text{MnO}_4^-$ , $\text{CrO}_4^{2-}$ の励起エネルギーに対する溶媒効果と溶媒和構造

気相中の化学反応は計算手法と計算機の発達によって高精度に予測できるところまで近づいている。しかし実際の化学反応は気相中よりも溶液中で起こることが多く、溶媒の存在が大きな影響を与える系を対象とした理論計算を行う際には溶媒による効果を取り込むことが必要となる。しかしながら、溶液中のアボガドロ数オーダーの溶媒分子を含むすべての電子を考慮した計算を行うのは現実的に不可能であるため、効率的な溶媒のモデル化が不可欠となる。本研究では、 $\text{MnO}_4^-$  と  $\text{CrO}_4^{2-}$  の励起エネルギーとそれに対する溶媒効果、溶媒和構造について調査した。特に溶媒モデルとして、連続誘電体モデルの一つである PCM 法と積分方程式に基づく計算手法である RISM-SCF 法を用いて、特徴的なスペクトルが観測される LMCT (ligand-to-metal charge transfer) 励起に焦点をあて比較した。LMCT 状態の電子構造、励起状態に対する溶媒効果 (電荷移動型でありながら対象イオンの高い対称性により溶媒効果は小さいこと等)、および、溶媒構造などについて明らかにした。

#### (8) RISM-SCF 法によるメロシアニン類の励起スペクトルに対する溶媒効果と溶媒和構造

メロシアニンは分子内に窒素原子や酸素原子などのヘテロ原子を持つ分子で、色素として用いられている。このヘテロ原子の存在による極性のため、メロシアニンは気相中と溶液中で電子状態が大きく異なり、溶液中で励起スペクトルが変化するソルバトクロミズムを示す。また、励起スペクトルは溶媒の種類によっても変化する。溶媒分子がメロシアニンの電子状態に与える影響を調べることは興味深い。本研究では、直鎖状のモデル系メロシアニンである streptopolymethine-merocyanine (SPMC) の溶液中での励起スペクトルを時間依存密度汎関数理論 (TD-DFT)

法および reference interaction site model (RISM)-SCF 法によって求め、スペクトルの鎖長依存性、溶媒依存性、および溶媒和構造を系統的に調査した。対照分子として、直鎖状シアニン (streptopolymethinecyanine; SPC)、直鎖状ポリエン (acyclic polyene; AP) についても同様の計算を行い、これらとの比較も併せて行った。

#### (9) アミノ酸の混合溶媒中での溶媒和の解析

アミノ酸はタンパク質を構成する基本単位であり、タンパク質の構造はアミノ酸同士およびアミノ酸と環境 (溶媒等) の相互作用によって決定される。したがって、アミノ酸と環境との相互作用の分子論的理解はタンパク質構造を理解する上で非常に重要である。アミノ酸はアミノ基とカルボキシル基の両方を持ち、水中において双性イオン型 (ZW 型) を、一方で疎水的な環境では中性分子型 (NT 型) を取ることが知られており、溶媒中のアミノ酸の構造・安定性・相互作用を理解するためにはどちらの構造をとるのかの知見も不可欠である。本研究ではアミノ酸と環境の相互作用の分子論的描像を得るために、水・アセトニトリルの混合溶媒におけるアミノ酸の構造・安定性および溶媒和構造を理論的に調査した。アミノ酸としてグリシン、アラニン、フェニルアラニンの三種を対象に、水・アセトニトリル混合溶媒のモル分率を変えて、各モル分率での最安定構造および溶媒との相互作用を議論した。グリシンとアラニンを例にとれば、グリシン、アラニンともにモル分率の増加に伴い NT 型が次第に安定となった。また、アラニンはグリシンと比べて低いモル分率で NT 型が安定である。これは、アラニン中の疎水基であるメチル基の影響によるものと解釈した。

#### (10) 混合溶媒中におけるグリシンのプロトン移動反応の解析

プロトン移動反応は基礎的な化学反応の一つであり、溶媒の影響を強く受けることが知られている。その一つとしてアミノ酸の分子内プロトン移動が挙げられる。アミノ酸は水などの極性溶媒中では双性イオン (ZW) 型を取るが、極性の低い溶媒中では中性型 (NF) を取る。しかし、これらの混合溶媒中での構造や、プロトン移動反応のプロファイルについて詳しい報告はなされていない。本研究ではグリシンを例にとり、水 ( $\text{H}_2\text{O}$ )・アセトニトリル ( $\text{CH}_3\text{CN}$ ) 混合溶媒中での分子内プロトン移動反応のプロファイル、および溶媒効果の分子論的理解を目指した理論的研究を行った。混合溶媒中の  $\text{CH}_3\text{CN}$  のモル分率  $M$  を変えて NF と ZW の自由エネルギー差 ( $\text{NF}-\text{ZW}$ ) を求めたところ、自由エネルギー差は  $M$  が増大すると減少した。これより、ZW に対し  $\text{H}_2\text{O}$  が  $\text{CH}_3\text{CN}$  よりも安定化に寄与していると考えられる。主な要因は、グリシン中の O 原子と  $\text{H}_2\text{O}$  溶媒由来の H 原子の

水素結合である。さらに、得られた配位数より、ZW について M の増大に対して自由エネルギーが増加する理由は、安定化に寄与する水素結合が減少するからであると結論した。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計 16 件)

1. “N,S,P-Hybrid Donor- $\pi$ -Acceptor Organic Dyes for Dye-Sensitized Solar Cell: Synthesis, Optical Properties, and Photovoltaic Performances”  
Y. Matano, Y. Hayashi, H. Nakano, H. Imahori  
Heteroatom Chem. in press (2014 予定), 査読有, doi:未定
2. “Theoretical analysis of salt effect on intramolecular proton transfer reaction of glycine in NaCl aqueous solution”  
Y. Kasai, N. Yoshida, H. Nakano  
J. Mol. Liq. in press (2014 予定), 査読有, doi:10.1016/j.molliq.2014.02.013
3. “Covalently Linked 5,15-Diazaporphyrin Dimers: Promising Scaffolds for Highly Conjugated Azaporphyrin  $\pi$ -System”  
Y. Matano, D. Fujii, T. Shibano, K. Furukawa, T. Higashino, H. Nakano, H. Imahori  
Chem. Eur. J. **20** (12), 3342–3349 (2014), 査読有, doi:10.1002/chem.201304626
4. “Synthesis and photoreactivity of  $\alpha$ -diketone-type precursors of acenes and their use in organic-device fabrication”  
M. Suzuki, T. Aotake, Y. Yamaguchi, N. Noguchi, H. Nakano, K.-I. Nakayama, H. Yamada  
J. Photochem. Photobiol. C **18**, 50–70 (2014), 査読有, doi:10.1016/j.jphotochemrev.2013.10.003
5. 「相対論的多参照摂動論とその混合近似二次形式」  
鈴木聡, 戎崎遼, 渡邊祥弘, 中野晴之  
J. Comput. Chem. Jpn. **13** (1), 32–42 (2014), 査読有, doi:10.2477/jccj.2013-0021
6. “Solvent effect on excited states of merocyanines: A theoretical study using the RISM-SCF method”  
Y. Tanaka, N. Yoshida, H. Nakano  
Chem. Phys. Lett. **583**, 69–73 (2013), 査読有, doi:10.1016/j.cplett.2013.08.004
7. “Three-dimensional Reference Interaction Site Model Self-consistent Field Study of the Solvation and Electronic Structures of  $[\text{Cr}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+}$  in Aqueous Solution”  
S. Fujishige, Y. Kawashima, N. Yoshida, H. Nakano  
J. Phys. Chem. A **117** (34), 8314–8322 (2013), 査読有, doi:10.1021/jp405876g
8. “Nickel(II) and Copper(II) Complexes of  $\beta$ -Unsubstituted 5,15-Diazaporphyrins and Pyridazine-Fused Diazacorrinoids: Metal-Template Syntheses and Peripheral Functionalizations”  
Y. Matano, T. Shibano, H. Nakano, H. Imahori  
Chem. Eur. J. **18** (20), 6208–6216 (2012), 査読有, doi:10.1002/chem.201200463
9. “Retro-Diels-Alder Approach to the Synthesis of  $\pi$ -Expanded Azuliporphyrins and Their Porphyrinoid Aromaticity”  
T. Okujima, T. Kikkawa, H. Nakano, H. Kubota, N. Fukugami, N. Ono, H. Yamada, H. Uno  
Chem. Eur. J. **18** (40), 12854–12863 (2012), 査読有, doi:10.1002/chem.201201399
10. “Free Base and Metal Complexes of 5,15-Diaza-10,20-dimesitylporphyrins: Synthesis, Structures, Optical and Electrochemical Properties, and Aromaticities”  
Y. Matano, T. Shibano, H. Nakano, Y. Kimura, H. Imahori  
Inorg. Chem. **51** (23), 12879–12890 (2012), 査読有, doi:10.1021/ic301835c
11. “Efficient and Accurate Approximation to Relativistic Multireference Perturbation Theory”  
S. Suzuki, R. Ebisuzaki, Y. Kawashima, Y. Watanabe, H. Nakano  
Kyushu University Global-COE Program, Science for Future Molecular Systems **5**, 41–43 (2012), 査読無, doi:無
12. “Solvent Effect on the Fluorescence Spectra of Coumarin 120 in Water: A Combined Quantum Mechanical and Molecular Mechanical Study”  
Y. Kawashima, S. Yamamoto, T. Sakata, H. Nakano, K. Nishiyama, R. Akiyama  
J. Phys. Soc. Jpn. **81**, SA024/1–8 (2012), 査読有, doi:10.1143/JPSJS.81SA.SA024
13. “Solvent effect on the absorption spectra of coumarin 120 in water: A combined quantum mechanical and molecular mechanical study”  
T. Sakata, Y. Kawashima, H. Nakano  
J. Chem. Phys. **134** (1), 014501/1–11 (2011), 査読有, doi:10.1063/1.3506616
14. “Identification of geometrical isomers using vibrational circular dichroism spectroscopy: a series of mixed-ligand complexes of diamagnetic Co(III) ions”  
H. Sato, H. Uno, H. Nakano  
Dalton Trans. **40** (6), 1332–1337 (2011), 査読有, doi:10.1039/C0DT01342K
15. “Parallel Implementation of the Four-Component Relativistic Quasidegenerate Perturbation Theory with General Multiconfigurational Reference Functions”

R. Ebisuzaki, Y. Watanabe, Y. Kawashima,  
H. Nakano

J. Chem. Theory Comp. **7** (4), 998–1005  
(2011), 査読有, doi:10.1021/ct2000205

16. “A combined quantum mechanical and molecular mechanical method using modified generalized hybrid orbitals: implementation for electronic excited states”  
Y. Kawashima, H. Nakano, J. Jung, S. Ten-no  
Phys. Chem. Chem. Phys. **13** (24), 11731–11738 (2011), 査読有,  
doi:10.1039/c1cp20438f

〔学会発表〕(計 13 件)

1. “Theoretical Analysis of Co-Solvent Effects on Intramolecular Proton Transfer Reaction of Glycine in Water–Acetonitrile Mixture”  
Y. Kasai, N. Yoshida, H. Nakano  
33rd International Conference on Solution Chemistry, July 7–12, 2013, Kyoto
2. 「相対論的分子軌道法における種々の二成分法の近似精度について」  
井上頌基, 鈴木聡, 渡邊祥弘, 中野晴之  
第 16 回理論科学討論会, 2013 年 5 月 15 日 ~ 17 日, 福岡
3. 「ORMAS-MCSCF 法に基づく相対論的多参照摂動法の開発」  
鈴木聡, 渡邊祥弘, 中野晴之  
分子科学討論会, 2012 年 9 月 18 日 ~ 21 日, 東京
4. 「RISM-SCF 法によるメロシアン類の励起スペクトルに対する溶媒効果と溶媒和構造」  
田中佑一, 吉田紀生, 中野晴之  
分子科学討論会, 2012 年 9 月 18 日 ~ 21 日, 東京
5. 「no-virtual-pair 近似による希ガス原子の相対論的電子相関エネルギーへの影響」  
渡邊祥弘, 井上頌基, 戎崎遼, 中野晴之  
第 5 回分子科学討論会, 2011 年 9 月 20 日 ~ 23 日, 岡山
6. “Four-component relativistic multireference perturbation theory”  
R. Ebisuzaki, S. Suzuki, Y. Kawashima, Y. Watanabe, H. Nakano  
7th Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics (ISTCP-VII), September 2–8, 2011, Tokyo

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕

- 出願状況 (計 0 件)
- 取得状況 (計 0 件)

〔その他〕

ホームページ <http://ccl.scc.kyushu-u.ac.jp/>

6 . 研究組織

(1)研究代表者

中野晴之 (NAKANO, HARUYUKI)  
九州大学・理学研究院・教授  
研究者番号 : 90251363

(2)研究分担者

なし

(3)連携研究者

川島雪生 (KAWASHIMA, YUKIO)  
理化学研究所・計算科学研究機構・研究員  
研究者番号 : 90452739

渡邊祥弘 (WATANABE, YOSHIHIRO)  
九州大学・理学研究院・助教  
研究者番号 : 20315055

吉田紀生 (YOSHIDA, NORIO)  
九州大学・高等研究院・准教授  
研究者番号 : 10390650

常田貴夫 (TSUNEDA, TAKAO)  
山梨大学・燃料電池ナノ材料研究センター・教授  
研究者番号 : 20312994