

科学研究費助成事業（学術研究助成基金助成金）研究成果報告書

平成 25 年 5 月 8 日現在

機関番号：22604

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2012～2012

課題番号：24655018

研究課題名（和文）磁性体・電子材料を意識した相対論・擬縮退・電子相関効果の
統合電子状態理論の試み研究課題名（英文）Combined Electronic Structure Theory of Relativity, quasi-degeneracy,
and Electron Correlation Oriented Towards Electric and Magnetic
phenomena in molecules

研究代表者

波田雅彦 (Hada Masahiko)

首都大学東京・大学院理工学研究科・教授

研究者番号：20228480

研究成果の概要（和文）：

本研究では、擬縮退、相対論、動的電子相関、の効果を取り込んだ精密かつコンパクトな真に有効な電子状態理論をめざした理論・計算方法を開発し、希土類を含む重原子擬縮退系、重原子を含む磁性体、電子材料等の物性予測、設計に資するための基礎的研究を実施した。

天能は、重原子を含む分子の電子相関を高精度で取り扱うための四成分相対論的MP2-F12法の開発を行った。直接摂動論に基づく電子間の短距離での振る舞いを考慮し、運動バランスを満たす二電子基底を初めて多電子系に適用した。更に、電子相関の強い物質での擬縮重状態や励起状態を取り扱うための新しい量子モンテカルロ法を提案した。モデル空間での有効ハミルトニアンを確率的に求める手法を発展させ、これまでと全く異なる電子状態計算を可能にした。中野は、相対論的分子軌道法において、電子占有数を制限した複数の活性空間に対する多配置SCF法およびこれを基盤とした多参照摂動論を新たに開発し、磁性材料・電子発光材料のモデルともなる希土類元素錯体、遷移金属化合物の励起状態へと適用した。また、相対論的效果を高度に取り入れた手法を評価するため、負エネルギー軌道スピノールの効果について系統的な調査を実施した。波田は、多電子無限次Douglas-Kroll-Hess法と励起状態理論であるSAC-CI法を基礎にして、相対論と電子相関を含めた励起状態計算プログラムを作成し、金属化合物の磁気的物性の計算を実施した。柳井は、重元素を含む分子系の電子状態の高精度な理論計算を実現するための非経験的密度行列繰り込み群法の開発を行った。その実証研究として、密度行列繰り込み群法を多核金属錯体へと応用する拡張的計算を実現し、実験での解釈が難しい金属酸化数に関する理論解析を与えることができた。また、重原子に現れるスピン軌道相互作用を取り入れる方法論を開発することに成功した。

研究成果の概要（英文）：

In this research project, we developed the electronic structure theories and methods which can be applied to quasi-degenerate systems, relativistic and dynamic electron-correlation problems, and executed some fundamental researches of molecular properties in electric and magnetic substances.

Ten-no developed a four-component relativistic MP2-F12 method to treat molecules with heavy elements accurately. He investigated the short-range behavior of electrons based on the direct perturbation theory and applied a kinetically-balanced relativistic geminal basis to multi-electronic systems for the first time. Furthermore, Ten-no proposed a new quantum Monte Carlo (QMC) method to treat quasi-degenerate and excited states of strongly correlated systems. He developed the model space QMC (MSQMC) method to determine an effective Hamiltonian stochastically. MSQMC transcends the limitation of the standard *ab initio* methods.

Nakano developed the relativistic occupation restricted multiple active space multiconfigurational self-consistent field method (ORMAS-SCF) method and second-order perturbation theory based on it. He applied them to the excited states of rear-earth

and transition metal compounds as model complexes of magnetic or electroluminescent materials. He also made a systematic investigation on the effect of the negative energy spinors in order to estimate the methods including the highly relativistic effects.

Hada combined the many-electron Infinite-order Douglas-Kroll-Hess (IODKH) method with the SAC-CI method which is an accurate electronic structure method for excited states. He applied this method to molecular magnetic properties of heavy-metal complexes.

Yanai developed *ab initio* density matrix renormalization group (DMRG) method to achieve high accuracy electronic structure calculations for molecular systems containing heavy elements. As its practical application, the DMRG method was applied for the study of the electronic structures of multi-nuclear transition metal complexes. Our calculations provided detailed theoretical analysis of oxidation states of metal sites where there are considerable difficulties in interpreting experimental observations. In addition, the method to incorporate the spin-orbit effects, typically arising in heavy metal systems, into the DMRG wave function was developed.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
交付決定額	3,100,000	930,000	4,030,000

研究分野：化学

科研費の分科・細目：基礎化学

キーワード：統合電子状態理論、密度行列繰り込み群、相対論的 F12 法、相対論的多配置 SCF 法、モデル空間モンテカルロ法、多電子 DKH 法、多配置理論、ランタノイド錯体

1. 研究開始当初の背景

現代の量子化学理論は、孤立相にある分子においては実験にも匹敵するほどの精密計算、生体分子のような大規模分子においては、機能解明・反応予測が可能なほどの定量性を期待できる時代になりつつある。しかしながら、一方で、希土類磁石のような磁性体材料、EL 素子などの電子発光材料、多核遷移金属系の分子磁性など、複数の開殻原子が系内に存在し、それらが、時に強く、時に弱く結合する重原子擬縮退系においてはどうか。

このような系においては、近接軌道をもつ開殻原子が結合し、原子数のべき乗で近接準位が増大し、擬縮退系をなす。また、(分子)系の中に非局在した電子と希土類原子中の 4f 電子のように局在した電子が共存し、強い電子相関を有する。さらには、重原子の存在によって、相対論的な効果が重要な意味を持つ。現代では、これらの効果は、単純な分子系、金属系においては、大きさが異なり、個別に取り入れることは可能である。しかし、重原子擬縮退系 (= 強相関係) では各効果の大きさが拮抗し、真に物性・反応を理解し、定量的に記述するためには、すべてを適切に取り入れる必要がある。現代の量子化学理論は、未だその段階に至っていない。

2. 研究の目的

上記の状況に鑑み、擬縮退効果、動的電子

相関効果、相対論効果をすべて取り込んだ強相関係の電子状態理論を構築することを究極の目的とし、萌芽的な試みとして、三つの方向から

1. 擬縮退理論を基盤とした強相関係問題へのアプローチ(分子研 柳井、九大 中野)

2. 動的電子相関理論を基盤とした強相関係問題へのアプローチ(神戸大 天能)

3. 相対論的電子理論を基盤とした強相関係問題へのアプローチ(首都大 波田、分子研 柳井、九大 中野)

を行いこれらの統合を模索する。すなわち、これまで申請者らが開発してきたそれぞれの効果を有効に記述する理論を基盤に、協力体制の下、他の効果を取り込むアプローチを行う。

3. 研究の方法

代表者・分担者自身の開発による、密度行列繰り込み群 (DMRG) 法 (柳井)、F12 法 (天能)、多電子無限次 Douglas-Kroll-Hess 法 (波田)、擬縮退摂動論 (MCQDPT) (中野) を基盤に、同じく自らの手法である正準変換理論、多配置摂動論、相対論 SAC-CI 法等を駆使することにより、多方向から、すべての効果を取り込んだ理論を提案し、希土類を含む重原子擬縮退系に適用する。

4. 研究成果

【天能 G】

天能は、F12 法を四成分相対論に拡張する目的で、ノーペア近似に基づく新規のジェミナル展開法を提案した。Levy-Leblend 型の方程式で非相対論極限でのカスプ条件を満たすキネティックバランスを考慮したジェミナル基底を導出した。更に、大成分の完全基底への直交成分を利用する事により、実用的な計算に適した相対論的な強い直交射影演算子を発展させた。以上を二次のメラー・プレセット摂動理論に実装し、そのパフォーマンスを調べた。一例として、(11s6p5d4f3g2h) 基底を用いた He 型原子の相関エネルギーを図に示す。通常の方法と F12 法とでは、このサイズの基底関数を用いても有意な差が見られる。又、相対論と電子相関のクロスタームは Xe^{52+} を超えると顕著となる事が分かる。更に、AuH についても平衡核間距離や振動周波数の計算を行い、相対論的な F12 法で著しく実験との一致が改善される事を示した。

更に天能は、金属クラスター等の擬縮重電子状態を取り扱うために、エネルギー依存分割 (EDP) に基づく有効ハミルトニアンを統計的に求める、モデル空間モンテカルロ (MSQMC) 法を開発した。MSQMC 法では、ヒルベルト空間をモデル空間 (P-空間) とそれ以外の Q-空間とに分割し、Q-空間からの寄与をモデル空間内での有効ハミルトニアンに取り込む事により、多状態を同時に取り扱う事が可能である。図に示す様に、モデル空間の各スレーター行列式に対して独立のセットの Walker が虚時間発展を行う事により、多状態の有効ハミルトニアンを形成していく。パイロット計算として、 H_4 モデルと N_2 分子について MSQMC 法を適用し、結合解離に伴う基底状態と励起状態の完全 CI エネルギーにスムーズに収束する事を示した。本手法は多電子過程を含む高電子励起状態やコンカルインターセクションにも用いる事が可能であり、今後の発展が期待される。

【波田 G】

波田は、鉛原子を含んだ 5 員環化合物 Plumbole に配位子が結合した化合物 Plumpole+ X_2 ($X = THF, Py, NHC$) の分子物性について研究した。非共有電子対を有する配位子 X が、鉛原子の空軌道 $6p \cdot$ に配位することによって、5 員環・電子が形式的に $(4n+2)$ 個となり芳香族性の発現が期待される。しかしながら、Plumpole+ X_2 には明瞭な結合交代が観測され、分子構造的観点から芳香属性は否定された。一方、Plumpole+ X_2 の NICS(0) 値は、plumbole(13ppm) と plumbole²⁺ (-5 ppm) の中間付近(5~2 ppm)に位置することから、NICS 値の観点からは弱い芳香族性を持つことが示唆される。次に、²⁰⁷Pb-と ¹³C-NMR 化学シフトを検討した。計算方法は相対論項を考慮した ZORA-DFT 法であり、比較の為に非相対論計算も示した。

plumbole+ X_2 ($X = THF, NHC$) の化学シフトを下表に示す。

表. ²⁰⁷Pb-, ¹³C-NMR 化学シフトの実験値と計算値 (ppm)。基準物質は TMSi と TMPb。

	plumbole+THF ₂			plumbole+NHC ₂		
	non-R.	Rela.	Exptl.	Non-R.	Rela.	Exptl.
²⁰⁷ Pb	652.1	2566.0	5193.5	-97.6	1853.6	1793.1
¹³ C _α	170.1	225.6	223.1	178.2	214.6	201.9
¹³ C _β	181.2	193.2	179.2	179.4	184.1	172.4

非相対論計算との比較から、Pb-NMR 化学シフトの相対論効果は極めて大きい。C-NMR に於いても、C \cdot が低磁場シフトであるという実験的傾向を相対論計算だけが再現しており、軽原子においても相対論効果は必須であることが解る。重原子に隣接した原子が低磁場シフトする傾向は、重原子効果の一般的傾向と逆であり、注目すべき点である。核スピン-スピン結合定数の $J(Pb-C_{\alpha})$ の計算も実施し、実験値と適切に一致することを確認した。更に、励起スペクトルの計算を実施し、磁気許容な励起エネルギーと前述の C-NMR 化学シフトに明瞭な相関があることを示した。

一方、波田は、アルカリ土類金属-Li 分子における永久双極子モーメントと放射寿命の評価について研究した。近年、冷却分子を用いて新たな量子物性を探索する研究に注目が集まっている。アルカリ土類金属とリチウム原子の結合した分子 (AEM-Li) は、冷却分子形成に優位な特徴を持つ。測定感度を高めるためには、単一量子状態での滞在確率が高い方が望ましい [3-2, 3-5]。本研究では、MgLi, CaLi, SrLi, BaLi 分子における電子基底状態の永久双極子モーメント (PDM) とポテンシャル曲線を CCSD(T) 法で求めた [3-6, 3-7, 3-8]。そして振動状態を求め放射寿命を計算した。電子基底状態での $v=0$ における放射寿命は短いもので 22 秒と求まった。これは典型的な冷却分子実験の時間スケールに対して十分に長く、これらの分子が測定に有利であることを示した。今後は、相対論的 SAC-CI を用いて精密な励起状態計算を実施して測定実験との共同研究を進める。

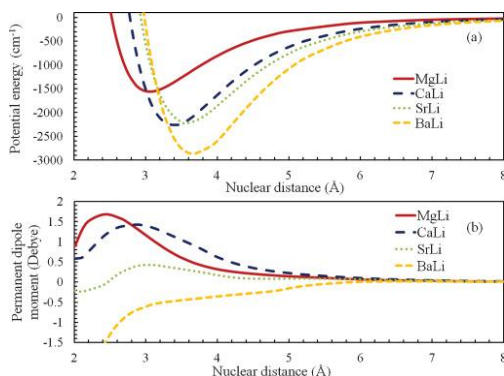


図. XLi ($X=Mg, Ca, Sr, Ba$) の基底状態エネルギー曲線

【中野G】

中野は、擬縮退理論、相対論的電子理論を基盤とした強相関問題へのアプローチとして、相対論的分子軌道法において、電子占有数を制限した複数の活性空間に対する多配置SCF法(相対論的ORMAS-SCF法)およびこれを基盤とした多参照摂動論(相対論的ORMAS-GMCQDPT法)を新たに開発し、磁性材料・電子発光材料のモデルともなる希土類元素錯体、遷移金属化合物の励起状態へと適用した。相対論的ORMAS-SCF法は活性軌道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。この方法による波動関数を基にした多参照摂動計算により、四塩化白金二価イオンの計算では、1/45の電子配置数と1/26の計算時間で、高度な参照波動関数MRSDCIを参照関数として用いたものと比較して0.1eV以内の精度で励起スペクトルを得ることができた(表参照)。その他、相対論的効果を高度に取り入れた手法を評価するため、負エネルギー軌道(スピノール)の効果について系統的な調査を実施した。

表. $[\text{PtCl}_4]^{2-}$ の励起エネルギー (eV)

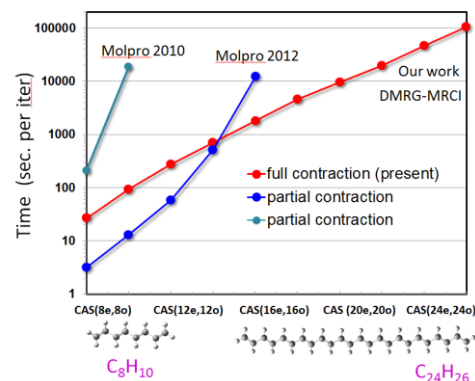
State	GMC-QDPT		Expt.
	ORMAS	MRSDCI	
1A _{1g}	1.986	1.982	
1A _{2g}	2.071	2.067	
1E _g	2.113	2.113	2.12
1B _{2g}	2.395	2.396	2.34
1B _{1g}	2.477	2.474	
2E _g	2.563	2.563	2.57
2A _{1g}	2.722	2.718	
3E _g	2.946	2.943	2.97
2A _{2g}	3.129	3.103	
2B _{2g}	3.380	3.377	3.23
4E _g	3.553	3.542	
2B _{1g}	3.817	3.821	3.67
# of Dets.	1770	79705	
CPU time	1835.9 s	47222.1 s	

【柳井G】

柳井は、分子系の電子状態の高精度な理論計算を実現するための非経験的密度行列繰り込み群法の開発を行った。本研究では、密度行列繰り込み群を出発して動的電子相関を多参照配置間相互作用法による見積もるDMRG-MRCI法が開発された。MRCI法は、高精度理論として古くから用いられてきた計算法であるが、従来法では適用可能な活性化軌道のサイズに限界があった。本開発はその適

用サイズを飛躍的に広げた。DMRG-MRCI法をポリフィリンのスピンギャップ計算に応用し、CAS(26e, 24o)という世界最大の活性空間による計算を達成(1.53eV)し、実験から見積もられたエネルギーギャップ(1.58eV)を高精度再現した。また、本手法の計算効率を測定した結果(下図)、本手法は従来法と比較して圧倒的に高い拡張性を持つことが分かった。

DMRG-MRCI法のベンチマーク計算: ポリエン鎖長 vs 計算時間



密度行列繰り込み群法を多核金属錯体へと応用する拡張的計算を実現し、実験での解析が難しい金属酸化数に関する理論解析を与えることができた。光合成系 II 酸素発生中心のMn4Caクラスターに関して、配置理論を用いた量子化学計算により任意の構造におけるMnイオンの個々の酸化状態の決定を行った。本研究ではマンガンの3d軌道と架橋酸素の2p軌道の計35軌道からなる活性軌道空間内の多配置効果を考慮したDMRG-CASSCF法によりMn4Caクラスターの高精度な波動関数を計算し個々のMnの酸化状態の解析を行った。解析の結果、QM/MM構造における基底状態は妥当な酸化状態(Mn2III Mn3IV Mn4IV Mn5III)を再現したのに対し、XRD構造においては09, 10からMn4, 5への電荷移動状態(Mn2III Mn3IV Mn4III Mn5II)が基底状態となった。励起状態計算をあわせて行った結果、この電荷移動状態はQM/MM構造において基底状態より約30kcal/mol高いエネルギーを持つ励起状態として存在することが確認され、参照となる(Mn2III Mn3IV Mn4IV Mn5III)とは明らかに異なる電子状態である事が示された。また、重原子に現れるスピン軌道相互作用を取り入れる方法論を開発することに成功した。

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15件)

1. Effect of the Axial Ligand on the Reactivity of the Oxidized Porphyrin

p-Cation Radical Complex: Higher Stabilization of the Product State Relative to the Reactant State, A. Takahashi, D. Yamaki, K. Ikemuma, T. Kurahashi, T. Ogura, M. Hada, and H. Fujii, *Inorg. Chem.* 51(13), 7296-7305, 2012 (dxdoi.org/10.1021/ic3006-597)

2. Accuracy estimations of overtone vibrational transition frequencies of optically trapped ^{174}Yb ^6Li molecules, Masatoshi Kajita, Geetha Gopakumar, Minori Abe, and Masahiko Hada, *Phys. Rev. A* 85, Issue 6, 062519, 2012 (DOI: 10.1103/PhysRevA.85.062519).

3. Nuclear Magnetic Shielding and Aromaticity of [18]Annulene and Its Quasi-Möbius-Type Analogues. Hirotaka Tanimura, Yasusi Honda, Ken-ichi Sugiura, and Masahiko Hada, *Bull. Chem. Soc. Jpn., Additions and Corrections*, 84(11), 1244-1244, 2012 (doi:10.1246/bcsj.20120271).

4. A QM/MM-MD study on protein electronic properties: Circular dichroism spectra of oxytocin and insulin, Y. Kitagawa, Y. Akinaga, Y. Kawashima, J. Jung, and S. Ten-no, *Chem. Phys.*, (Recent Advances in Electron Correlation Methods and Applications in honor of Debashis Mukherjee) 401 95-102 (2012). <http://dx.doi.org/10.1016/j.chemphys.2011.10.022>

5. Versatile supramolecular gelators that can harden water, organic solvents and ionic liquids, N. Minakuchi, K. Hoe, D. Yamaki, S. Ten-no, K. Nakashima, M. Goto, M. Mizuhata, and T. Maruyama, *Langmuir*, 28 9259-9266 (2012). <http://dx.doi.org/10.1021/la301442f>

6. Explicitly correlated four-component relativistic second order Møller-Plesset perturbation theory, S. Ten-no and D. Yamaki, *J. Chem. Phys. (communications)*, 137 131101 (2012) (4 pages). <http://dx.doi.org/10.1063/1.4757415>

7. Molecular dynamics simulation for infrared spectroscopy with intra-molecular forces from electronic properties of on-the-fly quantum chemical calculations, S. Ueno, Y. Tanimura, and S. Ten-no, *Intern. J. Quantum Chem.*, 113 330-335 (2012). <http://dx.doi.org/10.1002/qua.24179>

8. Improved constrained optimization for reaction-path determination in the generalized hybrid orbital quantum

mechanical /molecular mechanical calculations, J. Jung, S. Re, Y. Sugita, and S. Ten-no, *J. Chem. Phys.*, 138 044106 (2013) (10 pages). <http://link.aip.org/link/doi/10.1063/1.4775812>

9. Alternative formulation of explicitly correlated third-order Møller-Plesset perturbation theory, Y. Ohnishi and S. Ten-no, *Mol. Phys.*, in press (2013) (Kutzelnigg Festschrift).

10. 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, 6208-6216 (2012). DOI : 10.1002/chem.201200463

11. 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, 12854-12863 (2012). DOI : 10.1002/chem.201201399

12. 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, 12879-12890 (2012). DOI : 10.1021/ic301835c.

13. 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, and R. Akiyama, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 81, SA024/1-8 (2012). DOI : 10.1143/JPSJS.81SA.SA024

14. Extended implementation of canonical transformation theory: parallelization and a new level-shifted condition, T. Yanai, Y. Kurashige, E. Neuscammann, G. K-L. Chan, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 14, 2012, 7809-7820, 10.1039/C2CP23767A

15. More π Electrons Make a Difference: Emergence of Many Radicals on Graphene Nanoribbons Studied by Ab Initio DMRG Theory, W. Mizukami, Y. Kurashige, T. Yanai, *J. Chem. Theo. Comp.* 9, 2012, 401-407, 10.1021/ct3008974

[学会発表] (計 16 件)

1. Ab initio study of permanent electric

- dipole moment and radiative lifetimes of alkali-earth-Li molecules, G. Gopakumar, M. Abe, M. Kajita, M. Hada, 5th Asian Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC5), Dec. 9-13, 2011, Rotorua, New Zealand
2. 電子の電気双極子モーメント (EDM) 探査のための相対論的分子理論の開発、阿部穰里, G. Gopakumar, B. P. Das, 波田雅彦, D. Mukherjee, 日本コンピュータ化学会 2012 春季年会、2012 年 5 月 17-18 日、東京工業大学大岡山キャンパス
 3. 鉛原子を含む芳香族性化合物に関する量子化学的研究、河村俊秋, 阿部穰里, 斎藤雅一, 波田雅彦、日本コンピュータ化学会 2012 春季年会、2012 年 5 月 17-18 日、東京工業大学大岡山キャンパス
 4. 鉛原子を含む 5 員環化合物の NMR スペクトルに関する量子化学的研究、河村俊秋, 阿部穰里, 斎藤雅一, 波田雅彦、第 15 回理論化学討論会、2012 年 5 月 24-26 日、仙台市福祉プラザ
 5. NMR and NICS Calculations of Novel π -Ring Framework Containing Heavy Group-14 Elements, T. Kawamura, M. Abe, M. Saito, M. Hada, 14th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC2012), June 25-30, 2012, Boulder, USA
 6. 同位体の核の体積効果 Born-Oppenheimer 近似補正を考慮する相対論的理論の構築、阿部穰里、根本佳介、今福裕史、波田雅彦、日本地球化学会年会、2012 年 9 月 11-13 日、九州大学箱崎キャンパス文系地区
 7. Relativistic calculation of effective electric field for electron EDM in molecules, M. Abe, G. Gopakumar, B. P. Das, M. Hada, D. Mukherjee, 6th Fundamental Physics Using Atoms2012, Sep. 28-30, 2012, Tohoku University, Japan
 8. Ab initio study on ground and excited states of ${}^6\text{Li}^{40}\text{Ca}$ and ${}^6\text{Li}^{88}\text{Sr}$, G. Geetha, M. Abe, M. Hada, M. Kajita, 6th Fundamental Physics Using Atoms2012, Sep. 28-30, 2012, Tohoku University, Japan
 9. 反強磁性二核コバルト (II) 錯体の電子状態に関する理論的研究、豊田泰全、干場興志郎、阿部穰里、崎山博史、波田雅彦、日本コンピュータ化学会 2012 年秋季年会、2012 年 10 月 13-14 日、山形大学
 10. Relativistic Quantum-Chemical Calculations of Heavy-Metal NMR Chemical Shifts and Nuclear Spin-Spin Coupling, M. Hada, T. Kawamura, M. Abe 1st International Congress on Emerging Advanced Nanomaterials (ICEAN), Oct. 21-26, 2012, Brisbane, Australia
 11. 相対論的分子軌道法における負エネルギースピノールの効果, 分子科学討論会, 鈴木聡、渡邊祥弘、中野晴之, 2012 年 9 月 18 日, 東京
 12. ORMAS-MCSCF 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, 東京
 13. 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, 2012 年 9 月 18 日, 東京
 14. 多参照摂動法と原子価結合法によるシラベンゼン類の励起状態の解析, 二宮幸浩、中垣雅之、川島雪生、中野晴之, 2012 年 9 月 18 日, 東京
 15. Density Matrix Renormalization Group and Associated Dynamic Correlation Methods: Theory and Applications, T. Yanai, The XIVth International Congress of Quantum Chemistry, 2012 June 29, Boulder CO, USA.
 16. Ab Initio Density Matrix Renormalization Group and Associated Dynamic Correlation Methods: Theory and Applications, T. Yanai, The 49th Sanibel Symposium, 2013 Feb. 20, St. Simons Island, GA, USA.
- [その他]
ホームページ等
6. 研究組織
- (1) 研究代表者
波田雅彦 (HADA MASAHIKO)
首都大学東京・大学院理工学研究科・教授
研究者番号: 20228480
 - (2) 研究分担者
天能精一郎 (TENNO SEIICHIRO)
神戸大学・システム情報学研究科・教授
研究者番号: 00270471
 - (3) 研究分担者
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
 - (4) 研究分担者
柳井毅 (YANAI TAKESHI)
分子科学研究所・理論分子科学第一研究部門・准教授
研究者番号: 00462200