

令和 2 年 6 月 16 日現在

機関番号：10101

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2015～2019

課題番号：15K17811

研究課題名（和文）演算子変換による効率的で汎用的な新奇時間発展法の開発：3項間漸化式法

研究課題名（英文）Development of efficient and general novel time-evolution method based on operator transformation: three-term recurrence relation method

研究代表者

赤間 知子 (Akama, Tomoko)

北海道大学・理学研究院・特別研究員 (RPD)

研究者番号：60580149

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,300,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、ダイナミクスを追跡する実時間発展シミュレーションを効率化する新奇な汎用的時間発展法を開発した。本手法は、時間発展を表す微分方程式中の演算子を変換することにより、エネルギーと時間軸も時間発展を計算しやすいものに変換される。これにより、時間発展はシンプルな3項間漸化式で記述され、計算コスト抑えることができる全く新しい手法である。本手法の適用範囲は広く、量子的現象、拡散、化学反応などの多様なダイナミクスのシミュレーションに対して用いることができる。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究で開発した時間発展法は、演算子の変換により、最も時間発展計算のしやすいエネルギー・時間軸に変換して計算を行うという新奇な視点での手法である。このため、従来の時間発展法で精度を保つために必要だが計算コストのかさむ高次項の計算が不要であり、計算コスト削減に成功した。また、従来法では高次項を打ち切り近似計算を行うが、本手法では打ち切りを含まずユニタリー性を維持した高精度な計算ができる。本手法は、量子現象を記述する時間依存Schrodinger方程式だけでなく拡散方程式や反応速度式に対しても拡張できる、汎用性が高い手法であり、様々なシミュレーションの計算コストを大幅に削減できると期待される。

研究成果の概要（英文）：In this study, we developed a novel and general time-evolution method to reduce the computational cost of real-time propagation of dynamics simulation. In this method, the operator in a differential equation describing time evolution (or dynamics) is transformed. And then, time and energy are also transformed into a new ones. On the transformed time axis, time evolution is described by simple three-term recurrence relation which is easy to evaluate, and the computational cost is reduced. This method can be applicable for various dynamics simulation such as quantum phenomenon, diffusion, and chemical reaction.

研究分野：化学

キーワード：3項間漸化式 効率的時間発展法 エネルギーと時間の変換 ユニタリー性 拡散方程式 反応速度式 双曲線関数

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

近年、理論化学に基づくシミュレーションは、化学の分野において、実験と並んで重要な役割を担うようになってきた。最先端の超高速分光実験で観測できるようになりつつある電子や原子核の量子的ダイナミクスは、時間依存(TD) Schrödinger 方程式によって記述することができる。分子のような多体系の場合、TD Schrödinger 方程式の膨大な自由度をすべて取り扱うことは現実的でないため、TD Schrödinger 方程式の近似理論である TD Hartree-Fock (HF)法や TD 密度汎関数理論(DFT)等が用いられている。これらの時間微分方程式を数値積分して解くという実時間発展(RT)法により、分子系の時間変化を追跡することができる。最近では RT-TDHF/TDDFT やより高精度な手法を用いて電子ダイナミクスを追跡する研究が行われるようになりつつあった。研究代表者もこれまでに、RT-TDHF/TDDFT による電子ダイナミクスの研究を行い、解析手法や適用範囲の拡大に取り組んできた。しかし、RT 法で必要となる数値積分計算では、初期値からスタートし、ある時間刻みで時刻を少しずつ進めながら何万ステップもの計算を行うため、計算コストが高くなる傾向がある。例えば、RT-TDHF/TDDFT における時間発展演算子の計算には Taylor 展開法、Runge-Kutta 法、split-operator 法等の数値積分法が用いられてきたが、計算コストが高く、実行できる分子系のサイズとシミュレーション時間には限りがあった。一方、核波束ダイナミクスの分野では、原子核の波動関数の TD Schrödinger 方程式に対するより効率的かつ高精度な解法として、Gray と Balint-Kurti により実核波束発展法が開発された。この方法では、ハミルトニアン演算子とエネルギーを \cos^{-1} 関数で変換することにより、TD Schrödinger 方程式を Chebyshev 多項式の 3 項間漸化式に変形して計算できる。エネルギーの逆変換によりスペクトル情報は再現でき、計算コストの大幅な削減に成功していたが、時間は近似になるため時間発展の正確な記述には適さないという問題点があった。

2. 研究の目的

本研究では、ダイナミクスを追跡する有用な手段である TD Schrödinger 方程式や拡散方程式、反応速度方程式等の時間微分方程式の RT シミュレーションの計算コストを削減するために、汎用的で効率的な時間発展法を開発することを目標とした。実核波束発展法を参考にして、演算子変換により導出された 3 項間漸化式に基づく時間発展法(3 項間漸化式法)を開発することを目的とした。時間発展を記述可能にするため時間の変換の式を導出し、ユニタリー性を検証して 3 項間漸化式法を確立し、TD Schrödinger 方程式やその近似式の計算の効率化を目指した。イオン化の記述に必要な非エルミート演算子や、強レーザー場中のダイナミクスの記述に必要な時間依存の演算子の計算も可能にするため、3 項間漸化式法を理論的に拡張にも取り組んだ。さらに、拡散方程式や反応速度方程式にも 3 項間漸化式法を応用し、計算を効率化することを目指した。

3. 研究の方法

(1) 3 項間漸化式法の開発と数値検証

TD Schrödinger 方程式やその近似式に対する効率的で高精度な時間発展を実現するために、実核波束発展法を参考にして、3 項間漸化式法を開発する。実核波束発展法で用いられる \cos^{-1} 関数の代わりに、 \sin^{-1} 関数による演算子変換を導入し、時間発展を記述する 3 項間漸化式を導出する。これを RT-TDHF/TDDFT に適用し、量子化学計算パッケージ GAMESS をベースにプログラムを実装して、本手法の時間発展の精度や計算コストを検証する。

(2) 時間の変換の導出

時間発展の記述を可能にするため、時間の変換式を導出する。具体的には、変換前後の関数がある時刻で等しくなるという条件を用いて導出を行う。演算子や時間の変換の式に表れるスケールリングパラメータの物理的意味の検証も行う。

(3) ユニタリー性の検証

一般的に、時間発展を行う際には、ノルムが保存し逆向きの時間発展も可能であるユニタリー演算子を用いることが良いとされている。本研究で開発した 3 項間漸化式法がユニタリー性を有しているかどうかについて検証する。

(4) 理論的拡張

時間依存方程式において通常のエルミート演算子に虚数ポテンシャルを加えることにより、電子ダイナミクスにおけるイオン化等を記述できるが、演算子全体は非エルミートになる。また、強レーザー場等の外場が時間変化する場合、演算子は時間依存になる。そこで、非エルミート演算子や時間依存演算子に対しても 3 項間漸化式法を適用できるように理論的拡張に取り組む。

(5) 拡散方程式・反応速度式への応用

濃度の拡散や熱伝導を記述する拡散方程式や、化学反応のダイナミクスを追跡できる反応速度式は、虚数単位 i を除けば TD Schrödinger 方程式等と同様の微分方程式の形をとる。3 項間漸化式法を拡散方程式・反応速度式にも応用するため、これらの式から時間発展を記述する 3 項間漸化式を導出する。虚数単位 i が含まれないことに留意し、 \sin^{-1} 関数の代わりに \sinh^{-1} 関数による演算子変換を用いて式の導出に取り組む。

4. 研究成果

(1) 3 項間漸化式法の開発と数値検証

TD Schrödinger 方程式等の時間依存方程式 $i\hbar \partial / \partial t \Psi(t) = \hat{A}\Psi(t)$ に対して、 $\Psi(t \pm \Delta t)$ は時間発展演算子 $\exp(\mp i\hat{A}\Delta t / \hbar)$ を用いて記述される。これに Euler の公式 $e^{\pm i\theta} = \cos \theta \pm i \sin \theta$ を適用し整理すると、

$$\Psi(t + \Delta t) = -2i \sin(\hat{A}\Delta t / \hbar) \Psi(t) + \Psi(t - \Delta t) \quad (a)$$

が得られる。(a)式は時間発展を記述する 3 項間漸化式になっているが、演算子 \hat{A} が正弦関数の中にあるため、計算は容易ではない。よりシンプルな 3 項間漸化式を得るため、3 項間漸化式法では逆正弦関数を用いた演算子の変換

$$f(\hat{A}) = \frac{\hbar}{\Delta t'} \sin^{-1}(a_s \hat{A} + b_s) \quad (b)$$

を導入する。 t' は演算子の変換に伴い変換された時間である。 a_s と b_s はスケール係数であり、 $-1 \leq a_s \hat{A} + b_s \leq 1$ を満たすように決める。エネルギーの次元を持つ演算子 \hat{A} の固有値 A_n ($n=1, 2, \dots$) も、(b)式と同様の式で変換される。変換された演算子 $f(\hat{A})$ に対する時間依存方程式 $i\hbar \partial / \partial t' \Phi(t') = f(\hat{A})\Phi(t')$ を考え、同様に式変形を行うと、シンプルな 3 項間漸化式

$$\Phi(t' + \Delta t') = -2i(a_s \hat{A} + b_s)\Phi(t') + \Phi(t' - \Delta t') \quad (c)$$

が得られる。3TRR 法では、(c)式を用いて $\Phi(t')$ と $\Phi(t' - \Delta t')$ から $\Phi(t' + \Delta t')$ を計算する、つまり変換された時間 t' 軸上での時間発展を記述する。変換されたエネルギーと時間についてそれぞれ逆変換を行うことで、元のエネルギーと時間の情報が得られる。(時間の変換の式については後述する。)

(c)式の 3 項間漸化式に基づいて時間発展を行う RT-TDHF/TDDFT 計算プログラムを、量子化学計算パッケージ GAMESS をベースに実装した。実装したプログラムを用いてホルムアルデヒド分子 CH_2O の RT-TDHF 計算を行い、従来の研究でよく用いられてきた 4 次の Runge-Kutta 法の結果と比較して、3 項間漸化式法を検証した。図 1 に分極ベクトルの時間発展、図 2 に吸収スペクトルを示す(3TRR: 3 項間漸化式法、RK4: 4 次の Runge-Kutta 法)。吸収スペクトル中のピークが励起エネルギーに対応する。3 項間漸化式法による結果は 4 次の Runge-Kutta 法の結果とほぼ完全に一致し、正しく時間発展を計算できていることがわかった。次に、いくつかの小分子の計算時間を表 1 に示す。4 次の Runge-Kutta 法の場合に比べて、3 項間漸化式法では 1 ステップ当たりの計算時間が約 4 分の 1 に削減された。このように、3 項間漸化式法を用いることにより、電子ダイナミクスを記述する RT-TDHF 計算を大幅に高速化することに成功した。

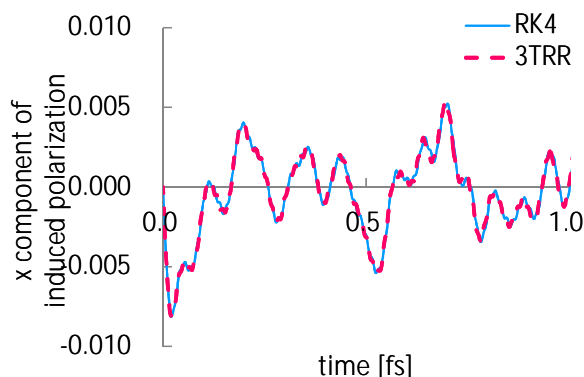


図 1. RT-TDHF 計算により得られた分極ベクトルの時間発展

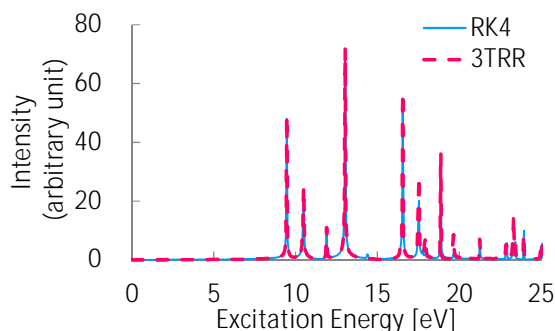


図 2. RT-TDHF 計算により得られた吸収スペクトル

(2) 時間の変換の導出

3 項間漸化式法において、エネルギーは演算子と同様の式で変換されるが、時間についてはどのような式で変換されるか自明でない。しかし、時間発展を記述するには、変換された時間軸上のダイナミクスを元の時間軸上に戻す必要がある。そこで、3 項間漸化式法を時間発展法とし確立するために時間の変換の式の導出を行った。変換前後の時間の対応と微分方程式における鎖則を適用することで、時間についての変換の式を導出することができた。時間の逆変換は

$$t = \frac{f(A_k)}{A_k} t' + t_0 = \frac{a_s f(A_k)}{\sin(\Delta t' f(A_k) / \hbar) - b_s} t' + t_0 \quad (d)$$

と表される。ここで $b_s = 0$ の場合は、sin 関数を Taylor 展開して高次項を打ち切ると、 $t \cong a_s \hbar t' / \Delta t'$

表 1. RT-TDHF 計算の計算時間

System	CPU time [sec]		Ratio
	RK4	3TRR	
H ₂	12.6	4.2	0.33
H ₂ O	63.2	16.9	0.270
CH ₂ O	335.0	85.6	0.2555
C ₆ H ₆	24041.7	6087.2	0.2532

(Xeon E5-2680 (2.70GHz), 1 core)

$+t_0$ と近似できる。つまり、時間の変換はほぼ線形の変換であり、時間発展の記述にも適していることを明らかにした。また、この式から、 $a_s \hbar \equiv \Delta t$ が導かれ、スケーリングパラメータ a_s は時間刻みに相当する物理的意味を持つことも明らかにした。また、 $\Psi(t)$ の時間以外の変数(例えば空間 \mathbf{r}) に依存する部分は、演算子の変換による影響を受けないので、 $\Phi(t')$ から得ることができる。

(3) ユニタリー性の検証

3 項間漸化式法は、4 次の Runge-Kutta 法の約 1/4 の計算時間で、時間発展やスペクトルをほぼ再現できることに加え、ノルム誤差も 10^{-14} 程度と小さかった。また、逆方向の時間発展の式も正方向の時間発展を記述する(c)式から簡単が得られる。そこで、時間発展法を評価する際の重要な観点であるユニタリー性について検証した。3 項間漸化式法では(c)式を用いて時間発展を行うが、(c)式と対になる次式も同時に成立している。

$$\Phi(t' + \Delta t') = 2 \cos(\sin^{-1}(a_s \hat{A} + b_s)) \Phi(t') - \Phi(t' - \Delta t') \quad (d)$$

(c)式と(d)式を合わせて考えることにより、

$$\Phi(t \pm \Delta t) = \exp(\mp i f(\hat{A}) \Delta t / \hbar) \Phi(t) \quad (e)$$

が得られる。演算子 \hat{A} がエルミート演算子の場合、この式の時間発展演算子 $\exp(\mp i f(\hat{A}) \Delta t / \hbar)$ はユニタリー演算子であることが証明でき、3 項間漸化式法がユニタリー性を有することが示された。

(4) 理論的拡張

電子ダイナミクスとともに生じうるイオン化現象は、TD Schrödinger 方程式等の演算子に虚のポテンシャル iV を吸収ポテンシャルとして加えることにより記述できる。 iV は反エルミート、元の演算子 \hat{A}_0 はエルミートであり $\hat{A} = \hat{A}_0 + iV$ は非エルミート演算子になる。非エルミート演算子の場合に対しても 3 項間漸化式法を拡張するため、研究開始当初はスケーリング係数に複素数を用いる複素スケーリングの方法を検討した。しかし、非エルミート演算子の固有値が複素数であることから、3 項間漸化式を導出する過程で現れる指数関数、正弦関数、余弦関数等を複素関数に拡張して考えると、非エルミート演算子の場合も同様の式が導出されることがわかった。この定式化に基づいてプログラムの実装を進め、非エルミート演算子の場合も 3 項間漸化式法による時間発展が可能であるという結果が得られた。

また、強レーザー場等の時間変化する外場 $V(t)$ が存在する場合、演算子 \hat{A} は時間依存となる ($\hat{A}(t) = \hat{A}_0 + V(t)$)。そのため、(c)式を用いると時間発展は近似的にしか記述できない。3 項間漸化式法を時間依存演算子の場合にも拡張するため、形式解を与える時間順序指数関数と、相互作用表示を用いて形式上は演算子が時間非依存の新しい時間微分方程式を構成する方法を用いて、定式化に取り組み、現在も研究を継続している。

(5) 拡散方程式・反応速度式への応用

拡散方程式や反応速度式は、一般化すると $d/dt \phi(t) = \hat{A} \phi(t)$ のように表せる。拡散方程式の場合は $\hat{A} = D \nabla^2$ (D : 拡散係数)、反応速度式の場合は $\hat{A} = \mathbf{K}$ (\mathbf{K} : 速度定数) である。この式の時間発展演算子 $\exp(\pm \hat{A} \Delta t)$ は虚数単位 i を含まないが、Euler の公式の代わりに指数関数と双曲線関数の関係式 $\exp x = \cosh x + \sinh x$ を用いると、上記と類似した演算子 $\sinh(\hat{A} \Delta t)$ を含む 3 項間漸化式が得られる。演算子の変換 $f(\hat{A}) = 1/\Delta t' \sinh^{-1} \hat{A}$ を導入すると、シンプルな 3 項間漸化式

$$\phi(t' + \Delta t') = 2 \hat{A} \phi(t') + \phi(t' - \Delta t') \quad (f)$$

が得られる。表 2 に、量子的な時間依存方程式の場合と拡散方程式・反応速度式等の場合の 3TRR 法の比較を示す。このように、三角関数の代わりに双曲線関数を用いた演算子変換により、拡散方程式や反応速度式に対しても 3 項間漸化式による効率的な時間発展を実現できると考えられる。さらに TD Schrödinger 方程式等の虚時間発展の場合も同様に定式化できることがわかった。

表 2. 量子的な時間依存方程式と拡散方程式に対する 3TRR 法の比較

	量子的な時間依存方程式	拡散方程式・反応速度式等
方程式	$i\hbar \partial/\partial t \Psi(t) = \hat{A} \Psi(t)$	$d/dt \phi(t) = \hat{A} \phi(t)$
時間発展式	$\Psi(t \pm \Delta t) = \exp(\mp i \hat{A} \Delta t / \hbar) \Psi(t)$	$\phi(t \pm \Delta t) = \exp(\pm \hat{A} \Delta t) \phi(t)$
変換関数	三角関数	双曲線関数
演算子変換	$f(\hat{A}) = \hbar/\Delta t' \sin^{-1}(a_s \hat{A} + b_s)$	$f(\hat{A}) = 1/\Delta t' \sinh^{-1} \hat{A}$
3 項間漸化式	$\Psi(t' + \Delta t') = -2i(a_s \hat{A} + b_s) \Psi(t') + \Psi(t' - \Delta t')$	$\phi(t' + \Delta t') = 2 \hat{A} \phi(t') + \phi(t' - \Delta t')$
時間変換	$t = \frac{a_s f^{\sin}(A_k)}{\sin\left(\frac{\Delta t'}{\hbar} f^{\sin}(A_k)\right) - b_s} t'$	$t = \frac{f^{\sinh}(A_k)}{\sinh\left(\Delta t' f^{\sinh}(A_k)\right)} t'$

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計4件（うち査読付論文 4件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Kei Yanagisawa, Yuichi Kitagawa, Takayuki Nakanishi, Tomoko Akama, Masato Kobayashi, Tomohiro Seki, Koji Fushimi, Hajime Ito, Tetsuya Taketsugu, Yasuchika Hasegawa	4. 巻 2017
2. 論文標題 Enhanced Luminescence of Asymmetrical Seven-Coordinate Eu(III) Complexes Including LMCT Perturbation	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 European Journal of Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 3843-3848
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/ejic.201700815	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 Kei Yanagisawa, Takayuki Nakanishi, Yuichi Kitagawa, Tomohiro Seki, Tomoko Akama, Masato Kobayashi, Tetsuya Taketsugu, Hajime Ito, Koji Fushimi, Yasuchika Hasegawa	4. 巻 2015
2. 論文標題 Seven-Coordinate Luminophores: Brilliant Luminescence of Lanthanide Complexes with C3v Geometrical Structures	5. 発行年 2015年
3. 雑誌名 European Journal of Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 4769-4774
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/ejic.201500820	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 Kondo Yusuke, Kobayashi Masato, Akama Tomoko, Noro Takeshi, Taketsugu Tetsuya	4. 巻 39
2. 論文標題 All-electron relativistic computations on the low-lying electronic states, bond length, and vibrational frequency of CeF diatomic molecule with spin-orbit coupling effects	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Computational Chemistry	6. 最初と最後の頁 964 ~ 972
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.25171	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 赤間 知子、小林 理、南部 伸孝	4. 巻 142
2. 論文標題 Development of efficient time-evolution method based on three-term recurrence relation	5. 発行年 2015年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 204104 1-6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) http://dx.doi.org/10.1063/1.4921465	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 0件 / うち国際学会 4件）

1. 発表者名 赤間知子・武次徹也
2. 発表標題 演算子変換を用いた効率的時間発展：3項間漸化式法の拡張
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 Tomoko Akama, Osamu Kobayashi, Shinkoh Nanbu, Tetsuya Taketsugu
2. 発表標題 Development of efficient time-evolution method based on operator transformation: three-term recurrence-relation method
3. 学会等名 XV International Workshop on Quantum Reactive Scattering (QRS2019 Workshop) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 赤間知子・武次徹也
2. 発表標題 演算子変換を用いた効率的時間発展：3項間漸化式法の開発と拡張
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 赤間知子・武次徹也
2. 発表標題 演算子変換に基づく効率的時間発展法の開発と拡張
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2019秋季年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 西田 叡倫・赤間 知子・小林 正人・武次 徹也
2. 発表標題 高精度励起状態計算のためのRT-TDHF法の開発
3. 学会等名 化学系学協会北海道支部2020年冬季研究発表会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 近藤有輔・小林正人・赤間知子・野呂武司・武次徹也
2. 発表標題 CeX (X=F,H)の擬縮退電子状態に対するスピン軌道相互作用を考慮した精密計算
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 赤間 知子・小林 正人・柳澤 慧・北川 裕一・中西 貴之・長谷川 靖哉・武次 徹也
2. 発表標題 7配位希土類錯体の構造・発光に関する理論的研究
3. 学会等名 第30回配位化合物の光化学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 小山拓也・赤間知子・武次徹也
2. 発表標題 AIMDおよび電子ダイナミクスを用いた解離性再結合反応 $\text{NH}_2^+ + \text{e}^-$ に関する理論的研究
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 小山拓也・赤間知子・武次徹也
2. 発表標題 IMD・電子ダイナミクスによる解離性再結合反応 NH_2^{++e-} に関する理論的研究
3. 学会等名 シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア2018」
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Akama Tomoko, Koyama Takuya, Taketsugu Tetsuya
2. 発表標題 Electron dynamics described by real-time TDHF/TDDFT calculation: Application to the dissociative recombination reaction
3. 学会等名 Workshop on Interstellar Matter 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 赤間知子・小林理・南部伸孝・武次徹也
2. 発表標題 演算子変換による効率的な時間発展法：3項間漸化式法
3. 学会等名 第20回理論化学討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 小山拓也・赤間知子・武次徹也
2. 発表標題 第一原理ダイナミクスによる NH_2^+ の解離性再結合反応に関する理論的研究
3. 学会等名 第20回理論化学討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 小山拓也・赤間知子・武次徹也
2. 発表標題 電子ダイナミクスとAIMDによる解離性再結合反応 $\text{NH}_2^+ + e^-$ の理論的研究
3. 学会等名 シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア2017」
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 小山拓也・赤間知子・武次徹也
2. 発表標題 解離性再結合反応 $\text{NH}_2^+ + e^-$ の理論的研究：電子ダイナミクスとAIMDによるアプローチ
3. 学会等名 第11回分子科学討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 赤間知子・小林理・南部伸孝・武次徹也
2. 発表標題 3項間漸化式に基づく効率的な時間発展法の開発
3. 学会等名 第19回理論化学討論会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 赤間知子・小林理・南部伸孝・武次徹也
2. 発表標題 演算子変換に基づく効率的な時間発展法の開発
3. 学会等名 第39回ケモインフォマティクス討論会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Takuya Koyama, Tomoko Akama, and Tetsuya Taketsugu
2. 発表標題 Theoretical study on dissociative recombination reaction of NH ₂
3. 学会等名 Workshop on Interstellar Matter 2016 (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Tomoko Akama and Tetsuya Taketsugu
2. 発表標題 Electron dynamics described by real-time time-dependent Hartree-Fock and/or time-dependent density functional theory (RT-TDHF/TDDFT) calculation
3. 学会等名 Workshop on Interstellar Matter 2016 (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 小山拓也・赤間知子・武次徹也
2. 発表標題 NH ₂ ⁺ の解離性再結合反応に関する理論的研究
3. 学会等名 化学系学協会北海道支部2017年冬季研究発表会
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

北海道大学量子化学研究室ホームページ
<https://wwwchem.sci.hokudai.ac.jp/~qc/member/akama/>

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
--	---------------------------	-----------------------	----