

令和 2 年 6 月 1 日現在

機関番号：22604  
研究種目：基盤研究(B) (一般)  
研究期間：2017～2019  
課題番号：17H03011  
研究課題名(和文) 高次相対論項とQED補正を含んだ電子相関理論に基づく電磁気分子物性の高精度計算  
研究課題名(英文) Accurate quantum-chemical calculations of electro-magnetic molecular properties including electron-correlation and QED  
研究代表者  
波田 雅彦 (Hada, Masahiko)  
首都大学東京・理学研究科・教授  
研究者番号：20228480  
交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 14,000,000円

研究成果の概要(和文)：本研究において実施した主要な研究内容の概要は以下の通りである。  
(1) 電子の電気双極子モーメントdeに関連する分子物性である分子内の有効内部電場を相対論的量子化学計算で求め、有効内部電場が増強されるメカニズムを解析した。(2) 原子核EDMの主要な要因の一つである核のシッフモーメント(NSM)に対する電子状態項の計算方法について精度検証を実施した。(3) 分子物性の解析に適する自然摂動軌道(NPO)法を開発した。その方法を、表面増強ラマン散乱(SERS)、置換ベンゼンの<sup>13</sup>C-NMR化学シフト、Pdナノ粒子に吸着したCOの赤外吸収強度、の3つ系に適用した。

#### 研究成果の学術的意義や社会的意義

重原子を含んだ化合物の物性を電子の運動状態から始めて正確に計算するためには、ミクロな現象を扱う量子力学と高エネルギー運動を扱う相対性理論が必要となる。これらの扱う理論・方法が相対論的量子化学であり、重原子化合物の電子状態を計算する理論・方法はほぼ確立されつつある。しかし、分子物性については未だ未開発な部分が多く、本研究はこの部分の発展に寄与するであろう。  
また、最近の電子材料には希少金属などの重原子を含む多種類の化合物が利用されており、これらの開発には前述のような計算手法が必須である。前述した計算やそれを利用した解析が容易に可能になれば、重原子化合物の材料開発に間接的に寄与するであろう。

研究成果の概要(英文)：The outline of this research project is summarized as the following three items.

(1) Effective internal electric field in molecules, which interacts with electron's electric dipole moment (eEDM) which is concerned with the CP violation, was calculated by the well-correlated relativistic quantum-chemical method. The QED effect is also considered approximately. (2) The accuracy assessment of quantum-chemical calculations for electric part of the nuclear Schiff moment (NSM) was carried out. (3) The natural perturbation orbital (NPO) method, which is suitable for analysis of molecular properties, was developed. This method was applied to the surface-enhanced RAMAN scattering, C-13 NMR chemical shift of various benzene compounds, and IR spectrum intensity of CO adsorbed on Pd surface.

研究分野：量子化学

キーワード：核磁気共鳴 NMR 相対論的量子化学 電子の電気双極子モーメント 重原子化合物

## 様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

#### 相対論的電子相関理論の未達成部分

4成分Dirac法は周期表の殆どの原子で化学的精度を与えるため、電子状態理論の精度検証には使えるが、実用的なサイズの分子への利用はやや困難が伴う。一方、水素類似原子(1電子系)に於いて4成分Dirac法と等価な2成分ハミルトニアンが報告され(2002年)、その後、種々の高次2成分相対論に基づく方法が提案された。我々も2電子間相互作用を露わに相対論的に扱ったIODK/IODK法を提案し、NMR計算と組み合わせた結果を報告した。Dirac法と等価で、かつ、使い易い2成分相対論法の完成が相対論的電子論のひとつのmilestoneである。

一方、高次相対論と電子相関とを組み合わせた方法を概観すると、SO項を露わに考慮し難い点でどの方法もそれなりに不十分である。我々は、相対論ハミルトニアンに基づいたSAC-CI法によりゼロ磁場分裂を計算し、従来法を凌駕する高精度計算が可能であることを示し、また、IODK/IODKとMP2法を組み合わせたNMR計算など実施した。しかし、我々が計算の高速化・大規模化を怠ったので、ソフトウェアは開発版の域を出ず、中規模~大規模分子への応用には至っていない。この点で改良の余地は大きいと考えている。

#### DFT計算の信頼性の問題

例えばZORA-DFT法は、相対論的なNMRの計算法として、優れた方法であるが、DFT法であるがゆえの難点を持つ。例えば、Plumboleと呼ばれる鉛を含む五員環化合物のPb-NMRをZORA-DFTで計算した場合、汎関数に加えるHartree-Fock exchange項の比率を変化させると右図のように化学シフトは500ppm以上も変化し、exchange比率を標準値から少し変えると(35%近傍)、鉛化学シフトの計算値は実験値と丁度一致する。DFT法の信頼性に疑問が生じる由縁である。我々は、DFT法ではなくてあくまで波動関数理論を主体とする。重原子NMR計算にはDFTの精度を凌駕する波動関数理論で、スピン依存項が正確に扱える必要がある。この点については、我々は、スピン依存項を取り込めるGeneralized UHF法をreferenceにしたGUHF-CCSD法を提案し、そのプログラムを完成した。また、申請者は過去にDirac-CCSD法によるNMR計算のプログラムを開発し、精度検証を報告した。

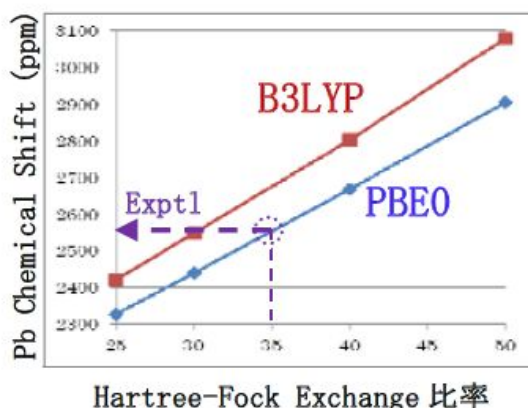


図. Pb 化学シフトが Hartree-Fock 交換項比率に依存する様子。

#### QED補正の必要性と困難

Quantum Electrodynamics (QED)の補正は、物性に依って違いはあるが、化学計算に残された最後の数%の補正であると云われる。Auのイオン化ポテンシャルの場合(次項の表)、実験値と相対論的CCSD(基底はspdfghik)との差は0.0285eV、QED補正は-0.0255eVとなり、残念ながらQED補正は逆方向である。この程度の差は原子核サイズの微妙な調整でも生じるので、QED補正による絶対値の議論は時期尚早な場合もある。化学で扱うべきQED補正は現在の処は限られている。計算化学において有意義なQED補正の一つの候補はパリティ非保存(PNC)現象であろう。例えばキラル分子でのNMR化学シフトの変化である。CHBrClのC-13 NMR化学シフトのQED補正值は $10^{-10}$ ppm程度と見積もられているが、Pb-やFl-NMRの場合、QED補正は精密分析の分野で有意な値になるかもしれない。

#### NMR 計算結果に於ける解析方法の困難

NMR スペクトルはあらゆる分野で使われている。NMR スペクトル変化を説明することは、単に化合物の同定に役立つだけでなく、化学反応や化合物にたいして抱いている化学者の直感を具体化することに繋がる。約30年前には中辻らがNMR化学シフトを常磁性成分/反磁性成分へ分解して解析し、p-electron/d-hole機構、d-d遷移機構などを提案した。後に申請者らも加わって、スピン-軌道相互作用に由来するスピン依存項の解析を進めた。Kauppらもスピン依存項の解析に於いて軌道と軌道を経由する場合に分けた解析を提案している。これらは比較的小さな分子や、対称性の高い金属錯体には有用であったが、対称性の低い中規模分子への適用は困難である。解り易い・適用範囲の広い解析方法を確立することは重要な課題であろう。

Table 1. The Ionization Potential, IP, and the Electron Affinity, EA, of the Au Atom from the CCSD Calculations<sup>a</sup> of Eliav et al.<sup>36</sup> and Landau et al.<sup>37</sup>

Property	NonRel	Rel	Exptl	Exptl-Rel	QED
IP	7.057	9.197	9.22554(2)	0.0285	-0.0255
EA	1.283	2.295	2.30861(3)	0.014	

## 2. 研究の目的

上述の状況を考慮して、申請者は以下の(1)～(3)の研究テーマを実施する。

(1) 相対論(IODK) + 電子相関を組み合わせた NMR 計算法の開発とその解析方法の提案。

(2) 電子 EDM、電子 - 核の S-PS 相互作用の解析

従来より研究を進めてきた電子の Electron Dipole Moment (EDM) による Parity 非保存 (PNC) 現象に、原子核上で生じる Scalar-Pseudo Scalar 相互作用も考慮し、PNC の大きさを総合的に予測する。

## 3. 研究の方法

研究目的の冒頭に示した研究テーマ(1)(2)では、主として高精度な相対論補正項を与える無限次 Douglas-Kroll(IODK)法の応用計算を実施する。プログラム開発の際には CAS 計算に於いて DMRG 理論を導入を進める。テーマ(3)では、(1)が未完成の段階は IODK-MP2 により Pb 化合物や Pt 錯体での NMR 化学シフトの解析方法を検討し、IODK-CASPT2 が完成後に精密計算を実施する。テーマ(4)では、従来は 4 成分 Dirac-CCSD で計算してきた電子 EDM に対する分子内有効電場の計算、及び、核上の電子による Scalar-Pseudo scalar(S-PS)相互作用を、高次の 2 成分相対論で実施して計算効率を上げるとともに、分子の化学特性とこれら物理物性の関連について議論する。QED 補正項の導入とその計算法のプログラム開発も進め、電子 EDM の計算に利用する。

## 4. 研究成果

### 4.1 核の電気双極子モーメント

電子の電気双極子モーメント(EDM)と並んで Charge-Parity(CP)対称性破れの原因と考えられる核の EDM の主要因と考えられる核シッフモーメント(NSM)についての電子項の検討を実施した。NSM は、CP 対称性を破る相互作用により、原子核内の電荷分布が球対称からずれることで生じる。従来の電子状態項では、核上の電子密度の微分値(X)という近似表現が用いられてきた。本研究では、Gauss 型基底による電子状態項の厳密表現を用いて、従来の X による表現が不十分であることを示す。NSM による静電ポテンシャル $\varphi$ と電子の相互作用エネルギーは

$$\langle s | -e\varphi(\mathbf{r}) | p \rangle = -e^2 \langle s | \mathbf{n} | p \rangle \left\{ \int_0^{r_n} \left[ \frac{1}{Z} \langle \mathbf{r}_n \rangle \int_0^{r_n} U_{sp} dr + \mathbf{r}_n \left( \frac{1}{r_n^3} \int_0^{r_n} U_{sp} r^3 dr - \int_0^{r_n} U_{sp} dr \right) \right] \rho d^3 r_n \right\}$$

と表される。ここで $e$ は電気素量、 $Z$ は核電荷、 $\rho$ は原子核密度、 $r_n$ は核子の座標、 $r$ は電子の座標、 $\mathbf{n}$ は $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$ を表す。 $\varphi$ は核近傍の parity 対称性を破る演算子であるため、 $s$ 軌道と $p$ 軌道の行列要素のみが大きな値を持つ。 $U_{sp}(r)$ は以下のように表され

$$U_{sp}(r) = f_s(r)f_p(r) + g_s(r)g_p(r)$$

$f(r)$ と $g(r)$ はそれぞれ動径関数の Large 成分と Small 成分を表す。上式で電子状態に依存する項は $r_n$ の関数となり、以下に表される。

$$\int_0^{r_n} U_{sp} dr, \quad \frac{1}{r_n^3} \int_0^{r_n} U_{sp} r^3 dr - \int_0^{r_n} U_{sp} dr$$

例として(3)式の2つめの項に関し、Gauss 型基底関数を用いた  $s, p$  関数で展開すると

$$\sum_{k,l} C_k^s C_l^p N_k^s N_l^{pz} \left( -\frac{3 \exp(-\alpha'_{k,l} r_n^2)}{4 \alpha'^2_{k,l} r_n^2} + \frac{3\sqrt{\pi} \operatorname{erf}(\sqrt{\alpha'_{k,l}} r_n)}{8 \alpha'^{5/2}_{k,l} r_n^3} - \frac{1}{2 \alpha'_{k,l}} \right) \quad (1)$$

$$= \sum_{k,l} C_k^s C_l^p N_k^s N_l^{pz} \left( -\frac{3}{10} r_n^2 + \frac{3}{28} \alpha'_{k,l} r_n^4 - \frac{1}{36} \alpha'^2_{k,l} r_n^6 + \dots \right) \quad (2)$$

となる。(1)式は Gauss 型基底関数を用いた厳密表現、(2)式は厳密表現をマクローリン展開した表現である。 $C$ は分子軌道係数、 $N$ は規格化定数、 $\alpha'_{k,l}$ はブラケットの基底関数の軌道指数の和、 $\operatorname{erf}(x)$ は誤差関数を表す。(2)式の $r_n$ の2乗項の係数は、電子密度の微分表現である $X$ に比例するため、従来法を用いることは(2)式の第一項だけで関数を近似することに対応する。NSM を最終的に計算するためには、電子状態項を $r_n$ の関数として求めた後に、原子核波動関数を用いて期待値計算を行う必要がある。しかし(1)式のように誤差関数を含んだままでは、期待値の積分計算が困難になる。そのため電子状態項が、マクローリン展開などでべき乗に展開されている必要がある。

原子核 EDM が観測できるのは重原子を含む反磁性分子である。本研究では実験が行われてい

る TIF に加え、 $\text{HgF}^+$ 、 $\text{HgO}$ 、 $\text{RaF}^+$ 、 $\text{RaO}$  分子について Dirac-Fock 法を用いて電子状態項の計算を行った。(1)式と(2)式を原子核半径の領域で図示することで、厳密表現と従来の表現である  $Xr_n^2$ 、およびマクローリン展開による高次項を比較した。また低次項のみで厳密表現を再現するために、最小二乗法による多項式関数も求めた。例として  $\text{RaO}$  分子の HOMO に対して、電子状態項の

(1)式(厳密表現)と(2)式を、原子核半径の領域で本項の Fig.1 に示した。NSM における電子状態項では、核表面付近 ( $1.0\sim 1.5 \times 10^{-4}$  a.u.)において、より厳密表現を再現する必要がある。Fig.1 より、2 乗項のみを用いる従来の表現では、核表面付近での厳密表現を約 2 倍過大評価しており、不十分であることが分かった。また高次のマクローリン展開では、50 乗項を含んだ表現でも、核表面付近の厳密表現は再現されなかった。したがって、マクローリン展開は実用的ではないと考えられる。また、 $r_n$  ( $0\sim 1.5 \times 10^{-4}$  a.u.)の領域で、最小二乗法から近似多項式関数を求めたところ、6 乗項といった低次の表現でも、核表面付近の厳密表現をバランスよく再現することが分かった。この最小二乗法を、HOMO だけでなく、任意の分子軌道に対して応用することで、電子相関を考慮した計算も実現可能となる。

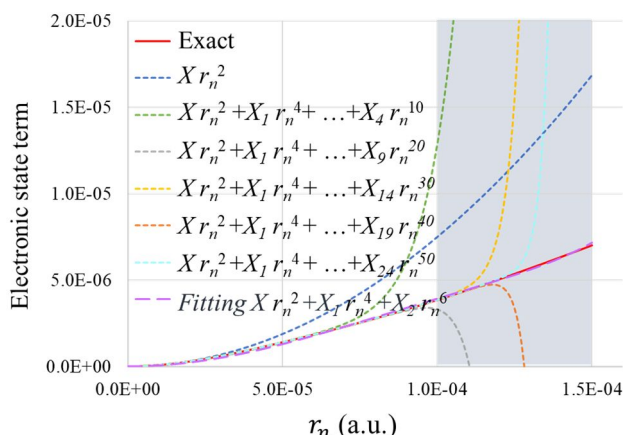


Fig.1 The electronic state term of RaO

#### 4.2. 電子の電気双極子モーメント (EDM) の探索を目指す分子内部電場 $E_{\text{eff}}$ の増幅機構の解析、及び QED 補正について

前節 4.1 の核 EDM と並行して電子 EDM に作用する分子内部電場  $E_{\text{eff}}$  が分子中でどのように増幅されるかを解析した。我々は、Yb, Hg, Ra 化合物の計算を通して、 $E_{\text{eff}}$  が従来から提唱されていた分子極性と関連するのではなく、軌道相関によって予測される孤立電子軌道の形状 (主として s-p 混成の程度) によって決まると提唱し、これを Dirac-CCSD レベルによる正確な計算によって示した。

また、 $E_{\text{eff}}$  の計算には核近傍の電子状態が重要となるため QED 補正が重要であることが予測された。我々は 4 成分 Dirac-CCSD 法に QED 補正を加える計算方法を開発した。真空偏極 (VP) 項は Uehling が示した原子での解析式を、自己エネルギー (SE) 項は Flambaum の有効ポテンシャルを導入し、Dirac に実装した。テスト計算を実施すると、 $\text{UO}_2^{2+}$ 、 $\text{UNO}^+$ 、 $\text{NN}_2$  化合物において 2p $\rightarrow$ 5f の励起エネルギーで 7.3eV 程度の QED 効果が見られた。化合物ごとの変化は僅かであるが、絶対値への寄与は大きい。

表. ウラン化合物の励起エネルギー (2p $\rightarrow$ 5f) と QED 効果

	QED 無し	QED 込み	QED 効果
$\text{UO}_2^{2+}$	17051.293	17044.007	-7.285
$\text{UNO}^+$	17050.658	17043.372	-7.286
$\text{NN}_2$	17050.383	17043.097	-7.286

また、AuH の Au 核上の電場勾配  $Q_{zz}$  については、Dirac-CCSD(T)/QZ 基底で 1.625au (実験値 1.456au) を 0.036au だけ実験値に近づける効果があった。これは重原子の精密計算において QED 効果が重要であることを示している。我々の計算対象である  $E_{\text{eff}}$  については、QED 効果は 1~2% 程度の効果であった。これは 2 電子項にある Gaunt 補正項や分子骨格の振動補正項と同程度であることを示しており、今後の精密計算には QED 項が必要であることが示された。

#### 4.3(a) 置換ベンゼンの C-13 NMR 化学シフトの自然摂動軌道による解析

置換ベンゼンの  $^{13}\text{C}$ -NMR 化学シフトは、その置換基の違いを反映することが知られている。実際に、電子供与性のアミノ基が置換したアニリンでは、電子豊富なオルト、パラ位の炭素の化学シフトは無置換ベンゼンを基準にして高磁場シフトする。同様に、電子求引性のニトロ基が置換したニトロベンゼンでは、電子不足なオルト、パラ位の炭素の化学シフトは低磁場シフトすることが予想されるが、オルト位の炭素では逆の傾向を示す (図 2)。本研究では、この傾向を解析した。

解析の結果、得られた自然摂動軌道の傾向はどの分子でも類似しており、化学シフトに寄与



するのは図3に示す2つの軌道対 ( $\sigma_x - \pi_x^*$ ,  $\sigma_y - \pi_y^*$ )のみということが分かった。さらに、置換基による化学シフトの変化は、各軌道の共鳴核近傍の電子の多寡と軌道対の軌道エネルギー差に依存し、前者は置換基の電子供与性および電子求引性の傾向と一致した。結果として、ニトロベンゼンのオルト位の炭素の低磁場シフトは、 $\sigma_x - \pi_x^*$ 軌道対の軌道エネルギー差の減少に由来する。

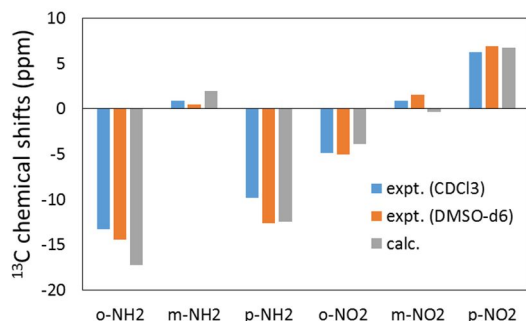


図2. 無置換ベンゼンを基準にした置換ベンゼンの<sup>13</sup>C-NMR化学シフト

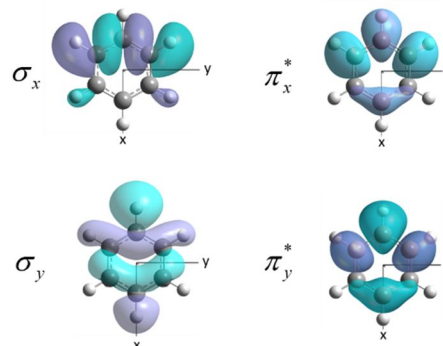


図3. ベンゼンの自然摂動軌道：占有軌道（左）と仮想軌道（右）

#### 4.3(b) Pdナノ粒子に吸着したCOの赤外吸収強度

金属ナノ粒子に吸着した分子のIRスペクトルはその吸着サイトの違いを反映することが知られている。図4に示すPdナノ粒子に吸着したCOでは、得られるCO伸縮の振動数は同程度であるが、吸収強度が著しく異なることが知られている。解析の結果、両モデルともに2つの軌道対 ( $\sigma - \sigma^*$ ,  $\pi - \pi^*$ )が吸収強度に大きく寄与しているが、atopモデルではCO近傍に電子が局在化しているのに対し、low-coordinateモデルではPdクラスター全体に電子が非局在化していることが分かった。この傾向はCO伸縮に対する全電子の差電子密度にも表れ、両者の違いはCO伸縮によって生じる静電ポテンシャルの変化がPd表面に与える影響の違いに由来すると考えられる。

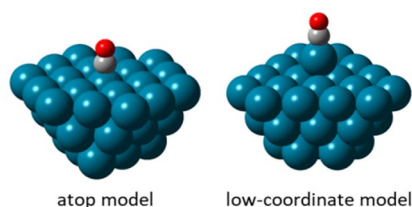


図4. Pdナノ粒子に吸着したCO

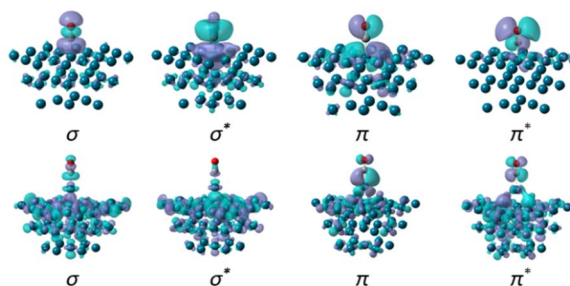


図5. CO on Pd クラスターの自然摂動軌道：atop（上）とlow-coordinate（下）モデル

#### 4.4 Be核の電子捕獲(EC)壊変を速める化合物探索

電子捕獲壊変(陽子 + 電子 → 中性子 + 電子ニュートリノ)が起きる放射性核種は、核上の電子密度  $\rho(0)$  と半減期  $T_{1/2}$  が反比例関係にあることが理論的に示されている。しかし、 $\rho(0)$  を増減させる化合物の研究は、C<sub>60</sub> フラーレン中の<sup>7</sup>Beの  $\rho(0)$  が約1.7%増加(半減期約1.5%減少)するという結果が、現在得られている最高の増減率である。本研究では、 $\rho(0)$  が分子中で増加するメカニズムを理論計算より解析し、現実的に合成可能かつ  $\rho(0)$  が増加する新規化合物の提案を目指して検討を実施した。種々のBe化合物を検討した結果、2s(Be)からの電子供与が起きない化合物が理想的であることが示された。そこで、各希ガス結晶中のBeの  $\rho(0)$  を検討したところ、(i)格子定数が常圧時と比べて小さいときは、希ガス結晶からの電子供与により  $\rho(0)$  が増加する。(ii)格子定数が常圧時より大きくなるに従い2s軌道の電子が外側に広がり  $\rho(0)$  が減少する。(iii)さらに高圧にすると、希ガス元素との電子間反発により2s軌道が収縮し  $\rho(0)$  が最大で約0.5%増加する。格子定数の小さなBeを含む希ガス結晶は、高圧下で生成できる可能性がある。また、理論的にはC<sub>60</sub>中のBeにおける  $\rho(0)$  よりも増加が見込まれる場合もあるため、この系はBe核の半減期短縮に有望であると考えられる。現在、やや進度が遅れてしまったが、Dirac-CCSD-CASPT2レベルの計算方法をDMRG法を組み合わせることで開発中であり、重原子を含むEC改変の計算に応用する予定である。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計18件（うち査読付論文 18件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Yamada Kento, Nishikubo Ryosuke, Oga Hikaru, Ogomi Yuhei, Hayase Shuzi, Kanno Shohei, Imamura Yutaka, Hada Masahiko, Saeki Akinori	4. 巻 5
2. 論文標題 Anomalous Dielectric Behavior of a Pb/Sn Perovskite: Effect of Trapped Charges on Complex Photoconductivity	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 ACS Photonics	6. 最初と最後の頁 3189 ~ 3197
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsp Photonics.8b00422	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 Shimizu Toshihiko, Hashimoto Kenro, Hada Masahiko, Miyazaki Mitsuhiro, Fujii Masaaki	4. 巻 20
2. 論文標題 A theoretical study on the size-dependence of ground-state proton transfer in phenol?ammonia clusters	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 3265 ~ 3276
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C7CP05247B	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 Kanno Shohei, Imamura Yutaka, Hada Masahiko	4. 巻 122
2. 論文標題 First-Principles Calculations of the Rotational Motion and Hydrogen Bond Capability of Large Organic Cations in Hybrid Perovskites	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 15966 ~ 15972
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.8b05570	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 Imamura Yutaka, Tashiro Motomichi, Katouda Michio, Hada Masahiko	4. 巻 707
2. 論文標題 Extrapolation of polymer gap by combining cluster and periodic boundary condition calculations with H?ckel theory	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Chemical Physics Letters	6. 最初と最後の頁 44 ~ 48
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cplett.2018.07.023	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 Sunaga A., Prasanna V. S., Abe M., Hada M., Das B. P.	4. 巻 98
2. 論文標題 Enhancement factors of parity- and time-reversal-violating effects for monofluorides	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review A	6. 最初と最後の頁 042511(1-6)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevA.98.042511	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Nakatani Naoki, Hada Masahiko	4. 巻 40
2. 論文標題 Can large active space CASSCF calculation make sense to the reaction analysis of iron complex? A benchmark study of methane oxidation reaction by FeO +	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Computational Chemistry	6. 最初と最後の頁 414 ~ 420
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.25640	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 Sunaga A., Abe M., Hada M., Das B. P.	4. 巻 95
2. 論文標題 Analysis of large effective electric fields of weakly polar molecules for electron electric-dipole-moment searches	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Physical Review A	6. 最初と最後の頁 012502(6pages)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevA.95.012502	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Nakada Marisa, Kuwabara Takuya, Furukawa Shunsuke, Hada Masahiko, Minoura Mao, Saito Masaichi	4. 巻 8
2. 論文標題 Synthesis and reactivity of a ruthenocene-type complex bearing an aromatic -ligand with the heaviest group 14 element	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Chemical Science	6. 最初と最後の頁 3092 ~ 3097
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C6SC04843A	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 Saito Masaichi, Akiba Tomoki, Furukawa Shunsuke, Minoura Mao, Hada Masahiko, Yoshikawa Hiroshi Y.	4. 巻 36
2. 論文標題 Anisotropic Crystals Based on a Main-Group Coordination Polymer with Alignment of Rigid Skeletons	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Organometallics	6. 最初と最後の頁 2487 ~ 2490
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.organomet.7b00217	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 Imamura Yutaka, Tashiro Motomichi, Katouda Michio, Hada Masahiko	4. 巻 121
2. 論文標題 Automatic High-Throughput Screening Scheme for Organic Photovoltaics: Estimating the Orbital Energies of Polymers from Oligomers and Evaluating the Photovoltaic Characteristics	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 28275 ~ 28286
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.7b08446	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 Velloth Archana, Imamura Yutaka, Kodama Takeshi, Hada Masahiko	4. 巻 121
2. 論文標題 Quantum Chemical Study on Endohedral Heteronuclear Dimetallofullerene M1M2@1h-C80 toward Molecular Design	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 27700 ~ 27708
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.7b08302	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 Kanno Shohei, Imamura Yutaka, Saeki Akinori, Hada Masahiko	4. 巻 121
2. 論文標題 Rotational Energy Barriers and Relaxation Times of the Organic Cation in Cubic Methylammonium Lead/Tin Halide Perovskites from First Principles	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 14051 ~ 14059
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.7b04589	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 Tada Tsukasa, Fukushima Takanori, Hada Masahiko, Majima Yutaka	4. 巻 121
2. 論文標題 Quantum Chemical Studies on Electron-Accepting Overcrowded Ethylene with a Polarizable Skeleton	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 7797 ~ 7806
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.7b09172	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 SUNAGA Ayaki, ABE Minori, HADA Masahiko	4. 巻 16
2. 論文標題 Theoretical Study of Formulation of Hyperfine Coupling Constant in Relativistic Framework Four-component	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of Computer Chemistry, Japan	6. 最初と最後の頁 81 ~ 82
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2477/jccj.2017-0034	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 MIYAMOTO Masaya, OYAMA Yuki, HADA Masahiko	4. 巻 16
2. 論文標題 Analysis of Electron Spin Density Induced by External Static Magnetic Field in Closed-shell Heavy Atomic Systems	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of Computer Chemistry, Japan	6. 最初と最後の頁 91 ~ 92
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2477/jccj.2017-0031	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 Yoshizawa Terutaka, Hada Masahiko	4. 巻 147
2. 論文標題 Calculations of nuclear magnetic shielding constants based on the exact relativistic method two-component	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 154104 ~ 154104
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5001256	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 Kanno Shohei, Imamura Yutaka, Hada Masahiko	4. 巻 121
2. 論文標題 Theoretical Study on Rotational Controllability of Organic Cations in Organic/Inorganic Hybrid Perovskites: Hydrogen Bonds and Halogen Substitution	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 26188 ~ 26195
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.7b07721	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 Yi Jun, Yang Wenhong, Sun Wen-Hua, Nomura Kotohiro, Hada Masahiko	4. 巻 121
2. 論文標題 Vanadium NMR Chemical Shifts of (Imido)vanadium(V) Dichloride Complexes with Imidazolin-2-iminato and Imidazolidin-2-iminato Ligands: Cooperation with Quantum-Chemical Calculations and Multiple Linear Regression Analyses	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 9099 ~ 9105
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.7b08328	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14件 (うち招待講演 8件 / うち国際学会 14件)

1. 発表者名 A. Sunaga, M. Abe, B. P. Das, M. Hada
2. 発表標題 Analysis of enhancement factors of electron EDM and scalar-pseudoscalar interaction for atoms and molecules
3. 学会等名 7th Japan-Czech-Slovakia (JCS) Symposium on Theoretical Chemistry (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 S. Kanno, Y. Imamura, M. Hada
2. 発表標題 Novel Material Search Scheme by Informatics: Application to Perovskite Solar Cell
3. 学会等名 Computational Chemistry meets Artificial Intelligence (CC2AI-2018) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 A. Sunaga, M. Abe, B. P. Das, M. Hada
2. 発表標題 Relativistic study of parity and time reversal symmetry-violating interaction using atoms and molecules
3. 学会等名 6th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 M. Abe
2. 発表標題 Relativistic ab initio calculations of uranium isotope fractionations」
3. 学会等名 Uranium-Biogeo Conference 2018 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 M. Hada
2. 発表標題 Metal NMR Chemical Shifts and Analyses in the Framework of Non-Relativistic and Relativistic Theories
3. 学会等名 International Conference on Emerging Advanced Nanomaterials (ICEAN) 2018 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 S. Kanno, Y. Imamura, M. Hada
2. 発表標題 Novel Perovskite Material Search by Materials Informatics: Application to Water Splitting Photocatalyst and Solar Cell
3. 学会等名 International Conference on Emerging Advanced Nanomaterials (ICEAN) 2018 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 N. Nakatani, J.Yi, M.Hada
2. 発表標題 Theoretical studies on the XANES spectra of transition metal complexes
3. 学会等名 The 4th China-Japan-Korea Workshop on Theoretical & Computational Chemistry (CJK-WTCC4) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Jun Yi, N.Nakatani, M.Hada, K.Tsutsumi,K.Nomura
2. 発表標題 A TD-DFT Study of the XANES spectra for Vanadium Complex Catalyst in Polyolefin Reaction
3. 学会等名 Pure and Applied Chemistry International Conference 2019 (PACCON) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 M. Abe
2. 発表標題 Relativistic Quantum Chemical Calculations of Nuclear Electric Dipole Moments in Diamagnetic Molecules
3. 学会等名 The 11th International Workshop on Fundamental Physics Using Atoms (FPUA), (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 M. Hada
2. 発表標題 Quantum-Chemical Calculations on NMR chemical shifts of Molecules Containing Lead
3. 学会等名 The Collaborative Conference on Materials Research (CCMR2017) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1 . 発表者名 M. Hada
2 . 発表標題 Relativistic Quantum-Chemical Calculations of NMR Chemical Shifts in Molecules Containing Heavy Metals
3 . 学会等名 The EMN Meeting on Computation and Theory 2017 (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2017年

1 . 発表者名 A. Sunaga, M. Abe, M. Hada
2 . 発表標題 Anomalous increase of relativistic effect for hyperfine coupling constant of outer orbitals
3 . 学会等名 The 12th International Conference on Relativistic Effects in Heavy-Element Chemistry and Physics(REHE) (国際学会)
4 . 発表年 2017年

1 . 発表者名 T. Tsutsui, M. Abe, B. P. Das, M. Hada
2 . 発表標題 Effective electric field for electron 's electric dipole moment in BiO molecule: fcomparison between Dirac CCSD and CASPT2
3 . 学会等名 The 12th International Conference on Relativistic Effects in Heavy-Element Chemistry and Physics(REHE) (国際学会)
4 . 発表年 2017年

1 . 発表者名 A. Sunaga, M. Abe, M. Hada
2 . 発表標題 Analysis of hyperfine structure in Dirac theory: anomalous increase of relativistic contraction of outer orbitals
3 . 学会等名 The 11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists(WATOC) (国際学会)
4 . 発表年 2017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
研究 分担者	豊田 和男  (Toyota Kazuo)  (60347482)	大阪市立大学・大学院理学研究科・講師   (24402)	
研究 分担者	阿部 穰里  (Abe Minoru)  (60534485)	首都大学東京・理学研究科・助教   (22604)	
連携 研究者	多田 宰  (Tada Tsukaza)  (10793474)	首都大学東京・理学研究科・特任教授   (22604)	
連携 研究者	中谷 直輝  (Nakatani Naoki)  (00723529)	首都大学東京・理学研究科・准教授   (22604)	
連携 研究者	藤井 浩  (Fujii Hiroshi)  (80228957)	奈良女子大学・自然科学系・教授   (14602)	