

令和 3 年 6 月 4 日現在

機関番号：10101

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2017～2020

課題番号：17K05738

研究課題名(和文)大規模複雑電子構造系の遷移状態・電子励起状態計算法の確立と生体反応への応用

研究課題名(英文) Establishing transition-state and excited-state calculation methods for large complicated electronic structure systems and their application to biomolecular reactions

研究代表者

小林 正人 (Kobayashi, Masato)

北海道大学・理学研究院・准教授

研究者番号：40514469

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,700,000円

研究成果の概要(和文)：本研究課題では、大規模で複雑な電子構造を持つ系の遷移状態探索や電子励起状態を取り扱うための量子化学理論を確立するために、大規模系の電子状態計算法である分割統治(DC)法、静的電子相関を簡便に取り扱うHartree-Fock-Bogoliubov(HFB)法、励起状態計算を行う実時間発展時間依存(RT-TD)法の3つの土台に対して理論的拡充と融合を行った。特にDC法については、近似に伴う誤差を自動的に制御する手法の整備も並行して推進した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

DC法は、従来は系の大きさに対して3乗以上の大きさで増加する計算時間を大幅に短縮することができるが、近似に伴い誤差が混入する問題があった。本研究により、生体内化学反応のような大規模系の反応過程の計算を、近似に伴う誤差を適切に制御しながら、実行することができるようになった。また、大規模で複雑な電子構造を持つ系の計算は、従来は専門家であっても難しいものであったが、これを簡便に実行可能なDC-HFB法と、これを用いた構造・遷移状態最適化手法の開発に成功した。

研究成果の概要(英文)：In this research project, in order to establish a quantum chemical theory for enabling transition-state search and treating excited states of large systems with complex electronic structures, we have theoretically expanded and integrated three foundations: the divide-and-conquer (DC) method for calculating electronic structures of large systems, the Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) method for simply treating static electronic correlations, and the real-time time dependent (RT-TD) method for calculating excited states. In particular, for the DC method, we also developed a method to automatically control the error associated with the DC approximation.

研究分野：電子状態理論

キーワード：理論化学 量子化学 電子相関 大規模系計算 励起状態計算 遷移状態 エネルギー勾配

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、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

化学系の性質を量子論に基づいて数値的に明らかにする量子化学計算は、実験により直接観測できない遷移状態の構造を特定してエネルギーを求めることが可能であるため、化学反応過程を詳しくするためのツールとして利用されている。特に近年になって、Global Reaction Route Mapping (GRRM) や Nudged Elastic Band (NEB) をはじめとする化学反応経路探索手法の展開により、従前よりもはるかに容易に遷移状態探索を行うことが可能となっている。しかし、量子化学計算に要する時間は最低でも系の大きさの3乗に比例して増加するため、タンパク質中で起きる生体内化学反応など大規模系を扱うためには何らかのトリックを使わなくてはならない。また、ニトロゲナーゼや光合成反応中心の光化学系などのエネルギー固定を担うタンパク質などでは、複雑電子構造を持つ遷移金属が中心的役割を果たしている。このような系を正しく取り扱うためには、「静的電子相関」と呼ばれる効果を適切に取り込まなくてはならないが、その取扱いは、量子化学計算が広く浸透した現在であっても、専門家ですら困難なものである。特に、そのような系の励起状態計算は、多くの理論的・計算的な困難を伴うものであり、既存の方法とは全く異なるアプローチが求められている。

大規模系の量子化学計算を実現するため、系全体をいくつかの部分系に分割して計算を行い、それらの計算結果を統合して全体の電子状態を求めるフラグメンテーション型のリニアスケールリング計算法が、1990年代頃から世界的に研究されてきた。代表者らもこの一種である分割統治(DC)法を提案してきた。DC法はバッファ領域という重なりを持った部分系分割により、他のフラグメンテーション理論よりも高い精度で大規模系を記述できる手法である。本手法をウィルスのタンパク質複合体と阻害剤の反応解析に応用したこともあるが、この時に求めた遷移状態は反応座標を適当に決めて近似的に求めたものであった。

複雑電子構造を取り扱うために静的電子相関を取り込んだ量子化学計算手法としては、CASSCF波動関数や、それに摂動論による補正を加えたCASPT2法、MRMP法がこれまで広く用いられてきた。しかしこれらの手法では、静的電子相関を取り込む軌道・電子の数(活性空間)が増えるに従って指数関数的に計算時間が増大する上、これによって計算精度が大きく変化してしまう。密度行列繰り込み群(DMRG)法の登場により、取り扱える軌道・電子の数は劇的に増加したものの、フラグメンテーション理論との組み合わせは非常に困難であり、これまで全く試みられていない。申請者は近年、原子核物理の分野で主に用いられてきたHartree-Fock-Bogoliubov(HFB)法に注目した研究を展開してきた。HFB法は、二電子が強く相関した波動関数をペア行列という形式を用いて記述することで、活性空間のようなパラメータを用いず、簡便かつ実効的に静的電子相関を取り込むものである。代表者は本手法のエネルギー勾配を導出して、静的電子相関が大きな寄与を持つ1重項ピラジカル分子の構造をHFB法に基づき定量的に決定したほか、DC法と組み合わせたDC-HFB法により、大規模複雑電子構造系の計算を可能とする実践的方法を世界に先駆けて提案している。しかし、DC-HFB法に対しては、構造探索に欠かせないエネルギー勾配は定式化されていなかった。また、HFB法に基づく電子励起状態計算は、量子化学の枠組みでは試みられていなかった。

2. 研究の目的

本研究では、大規模で複雑な電子構造を持つ系の遷移状態探索や電子励起状態を取り扱うための量子化学理論を確立し、計算プログラムを構築することを大目標とした。大規模系計算理論としてはDC法を、複雑電子構造計算理論としてはHFB法を核とした理論的枠組みを構築する。これらに、遷移状態構造探索の肝となるGRRMプログラム、励起状態計算理論への拡張を担う実時間発展法を主軸とした時間依存理論を有機的に結合して、上記目標を達成する。

当初の段階的な目標としては、以下を挙げた。まず遷移状態構造探索法について、DC-HFB法に対するエネルギー勾配を提案する。同時に、DCプログラムとGRRMプログラムを結合して、大規模系の遷移状態構造探索を可能とする。また、最近代表者らが提案した、計算の過程でプログラムが能動的に部分系やバッファの取り方を変化させるアダプティブなDC法の概念を電子相関計算やエネルギー勾配に拡張し、大規模電子相関計算やエネルギー勾配計算の精度担保を実現する。電子励起状態については、時間依存(TD)HFB理論を量子化学に対して定式化し、CASSCF法を中心とした枠組みに代わる新規で簡便な複雑電子構造系の励起状態計算理論を提案する。さらに、DC-HFB法に対してもTD法を適用した理論提案を行い、大規模系複雑電子構造系の電子励起状態計算法を確立する。実際の研究では、のTD-HFB法について理論的に解決しなくてはならない問題が生じたため、の研究を進めることはできなかったが、TD-HFB法の問題を解決し量子化学計算に適用する基礎の構築までは進めることができた。

3. 研究の方法

(1) DC-HFB 法に対するエネルギー勾配の定式化と GRRM との接続

本研究の基本理論のひとつである DC-HFB 法に対してエネルギー勾配を定式化し、大規模複雑電子状態系の構造最適化・遷移状態計算を可能とする。代表者は過去に HFB 法に対する厳密エネルギー勾配 や、DC 法に対するエネルギー勾配 を定式化しており、これらに基づき DC-HFB エネルギー勾配を導き、プログラムをコードして検証する。さらに、効率的な構造最適化や遷移状態探索を可能とするため、反応経路自動探索プログラム GRRM との連結も行う。

(2) アダプティブ DC 法の電子相関理論・エネルギー勾配計算への拡張

代表者は本研究申請時においてすでに、エネルギー誤差の予測に基づき DC 法の精度に大きな影響を与えるバッファ領域を自動決定するアダプティブ DC 法を Hartree-Fock (HF) 法や DFT などの一体近似のエネルギー計算に対して開発していた。本手法を高精度計算や遷移状態構造最適化にも適用するため、アダプティブ DC 法を電子相関理論 (主に MP2 法や HFB 法) とエネルギー勾配計算に対して拡張する。

(3) TD-HFB 方程式の電子励起状態計算に対する再定式化

原子核物理の分野ですでに知られている TD-HFB 方程式を化学系の電子励起状態計算に対して再定式化する。研究分担者の赤間が豊富な経験を持つ実時間発展形式の TD 方程式をそのまま利用することを当初計画したが、電子数の期待値が大きく振動する問題が発生した。そこで、電子数の問題が原理的に発生しない正準軌道 (Cb) を用いる Cb-TD-HFB 法 の実装を行う方向に研究期間中に方針変更した。

4. 研究成果

(1) DC-HFB 法に対するエネルギー勾配の定式化

HFB エネルギーは、密度行列 D とペア行列 K で構築される一般化密度行列 R の汎関数として表される。そのエネルギー勾配は、Hellmann-Feynman 項と密度行列 D とペア行列 K の勾配を含む Pulay 項から成り、Pulay 項は HF エネルギー勾配と全く同様に計算できることが示されている。また、DC 法は (一般化) 密度行列を部分系の (一般化) 密度行列の寄与の和として近似的に取り扱う手法であるため、DC-HF 法で Pulay 項を厳密に取り扱うことは難しいことが分かっている。DC-HF エネルギー勾配の近似式として、通常の HF エネルギー勾配の Pulay 項を DC 的に取り扱う方法(A) と、DC-HF エネルギーを微分して部分系の密度行列の冪等性を仮定する方法(B) が提案されており、方法(B)の近似の精度の方が高いことが知られている。本研究ではこれと同様に、DC-HFB 法に対して 2 種類のエネルギー勾配表式を導出した。

2 種類の DC-HFB エネルギー勾配を実装し、ペンタデカセンの構造最適化計算で精度の検証を行った。図 1 に、ジグザグ端の C-C 結合長を示す。HFB 法では、中央付近の環ではほとんど結合長に差が見られないが、HF 法では 0.02 Å 程度以上の結合交代が生じることが知られている。図 1 の DC 計算では、中央領域に対して左右 4 つの環をバッファ領域に含めている。方法(A)の DC-HFB エネルギー勾配を用いた場合、通常の HFB 法との間に目に見える誤差が生じているが、方法(B)の DC-HFB エネルギー勾配は通常法とよく一致していることが確認された。DC-HFB 法においても、方法(B)の近似精度が高いことが数値的に示された。

なお、GRRM プログラムとの接続は、DC 法を導入している GAMESS プログラムの入出力と連携することにより達成することができた。また、GRRM プログラムに導入されている DS-AFIR 法 (指定された 2 つの構造間の遷移状態を求める方法) を利用することにより、生体内反応の遷移状態計算を行うことができることも確かめられた。

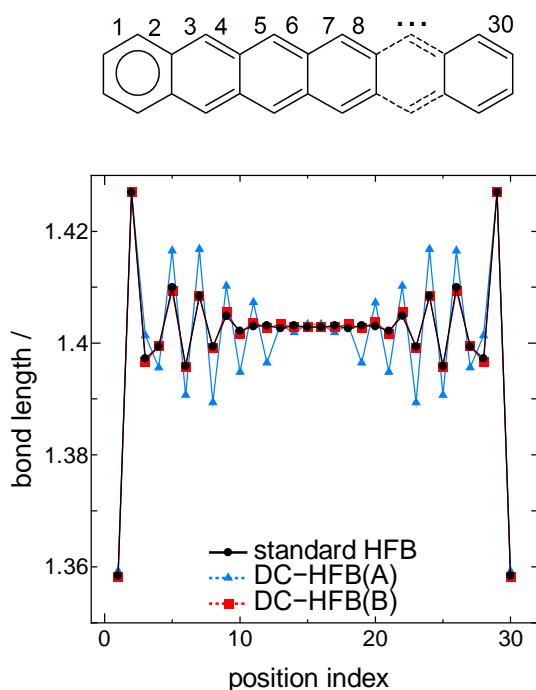


図 1. (DC-)HFB 計算によるペンタデカセンの最適化構造におけるジグザグ端の C-C 結合距離 (6-31G**, $\zeta = 0.8$).

(2) アダプティブ DC 法の電子相関理論・エネルギー勾配計算への拡張

まず、DC-MP2 法における部分系の電子相関エネルギーに対して、Häser らによって提案された原子軌道 Laplace MP2 法の考えと Schwarz の不等式を用いることで、バッファ領域に存在する原子当たりのエネルギー変化を概算する式を導出した。見積もった原子当たりのエネルギー変化を用いて、アダプティブ DC-HF 計算で決定したバッファ領域から電子相関計算への寄与が小さいと判定された原子を取り除くことにより、電子相関計算に対して適切なバッファ領域を構築する手法を開発した。

水分子 100 個の箱型モデル系に対して本手法を適用し、電子相関エネルギー誤差に対する閾値依存性を調べた (表 1)。閾値 $e_{\text{thresh}}^{\text{corr}}$ を厳しくすることで、エネルギー誤差は系統的に減少している。また、閾値が小さくなるにつれて、各部分系における長軸半径の平均値 $\langle I_{\text{local}}^{\text{corr}} \rangle$ も増加している。これらの結果から、各部分系がエネルギーに対して適切なバッファ領域を選択していることが確認できた。また、計算時間についても従来の DC 法と同様に線形スケーリングを達成した。

さらに、DC-HF 法や DC-HFB 法によるエネルギー勾配の誤差をバッファ領域により自動的に制御する手法も構築している。アダプティブ DC-SCF 計算では、各部分系は重なりなく分割された中央領域に 2 層型のバッファ領域を加えて構築される。本研究では、これと同様にして 2 つのバッファ領域間の密度行列の変化から、部分系の外側バッファ領域に属する原子のエネルギー勾配への寄与の上限値を見積もる式を提案した。

表 1. 水 100 分子の計算における DC-MP2 相関エネルギー ($E_{\text{corr}}^{(2)}$) と部分系の平均主軸半径 ($\langle I_{\text{local}}^{\text{corr}} \rangle$) のエネルギー誤差許容閾値 ($e_{\text{thresh}}^{\text{corr}}$) に対する依存性.

$e_{\text{thresh}}^{\text{corr}} / \mu E_h$	$E_{\text{corr}}^{(2)} / E_h$	$\langle I_{\text{local}}^{\text{corr}} \rangle / \text{Å}$
100.00	-19.102140	5.596
10.00	-19.103891	6.038
1.00	-19.104999	6.380
0.10	-19.105661	6.761
0.01	-19.106160	7.131

(3) TD-HFB 方程式の電子励起状態計算に対する再定式化

TD Schrödinger 方程式に HFB 波動関数を代入して式変形することにより、電子密度行列 \mathbf{D} とペア行列 \mathbf{K} で表される HFB 一般化密度行列 \mathbf{R} に対する実時間発展形式の TD-HFB 方程式を導いた。この方程式を 4 次の Runge-Kutta 法により数値的に解くプログラムを GAMESS に実装した。原子間距離を 2.5 Å とした H₂ 分子に本手法を適用し、各時刻の電子密度行列 \mathbf{D} から分極ベクトルの時間変化を計算した (図 2 上)。TD-HFB 法では複数の高い振動数の成分が現れていることが分かる。解析の結果、これは TD-HFB 法では密度行列 \mathbf{D} から求められる電子数の期待値が振動しているためであることが分かった。また、各時刻の密度行列を電子数にスケール方法も実装したが、図 2 上のような振動を回避するには至らなかった。

そこで、基底関数を各時刻の電子密度行列 \mathbf{D} の正準基底 (Cb) とするように時間発展させ、ペア行列 \mathbf{K} は対角近似とする Cb-TD-HFB 法を適用することとした。Cb-TD-HFB 法は原子核物理の分野で提案された方法であり、原理的に電子数が時間によって変化しないことが証明されている。この Cb-TD-HFB 法を GAMESS に実装して同じ系の分極ベクトルの時間変化を計算した (図 2 下)。フーリエ変換すると、2 つの許容励起に対応する励起エネルギー (2.07 eV と 27.4 eV) を得ることができた。

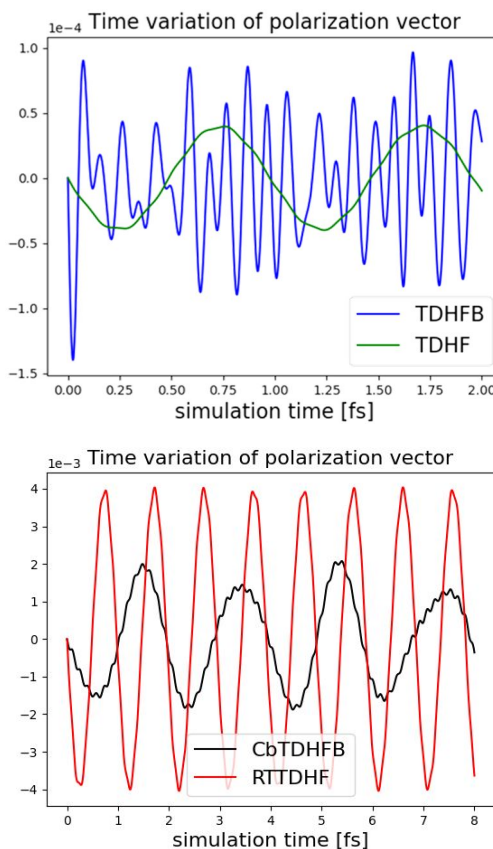


図 2. (上) TD-HFB 法、(下) Cb-TD-HFB 法による H₂ 分子 ($r = 2.5 \text{ Å}$) の分極ベクトルの大きさの時間変化と TD-HF 法の結果の比較 (6-31G, $\zeta = 0.8$).

< 引用文献 >

- V. N. Staroverov and G. E. Scuseria, J. Chem. Phys. 117, 11107 (2002).
M. Kobayashi, J. Chem. Phys. **140**, 084115 (2014).
M. Kobayashi, T. Kunisada, T. Akama, D. Sakura, and H. Nakai, J. Chem. Phys. **134**, 034105 (2011).
M. Kobayashi, T. Fujimori, and T. Taketsugu, J. Comput. Chem. **39**, 909 (2018).
S. Ebata *et al.*, Phys. Rev. C **82**, 034306 (2010).
W. Yang and T.-S. Lee, J. Chem. Phys. 103, 5674 (1995).
M. Häser, Theor. Chim. Acta **87**, 147 (1993).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計5件（うち査読付論文 5件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 Toshikazu Fujimori, Masato Kobayashi, Tetsuya Taketsugu	4. 巻 42
2. 論文標題 Energy based automatic determination of buffer region in the divide and conquer second order Moller-Plesset perturbation theory	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Computational Chemistry	6. 最初と最後の頁 620-629
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1002/jcc.26486	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 小林正人, 藤森俊和, 武次徹也	4. 巻 -
2. 論文標題 分割統治量子化学計算におけるバッファ領域決定の自動化	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Computer Chemistry, Japan	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	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 Masato Kobayashi, Haruka Onoda, Yusuke Kuroda, Tetsuya Taketsugu	4. 巻 18
2. 論文標題 Surface Adsorption Model Calculation Database and Its Application to Activity Prediction of Heterogeneous Catalysts	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Computer Chemistry, Japan	6. 最初と最後の頁 251-253
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.2477/jccj.2019-0053	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 Yusuke Kuroda, Masato Kobayashi, Tetsuya Taketsugu	4. 巻 48
2. 論文標題 Dispersion Interaction and Crystal Packing Realize an Ultralong C-C Single Bond: A Theoretical Study on Dispirobis(10-methylacridan) Derivatives	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 137-139
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1246/cl.180864	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 Masato Kobayashi, Toshikazu Fujimori, Tetsuya Taketsugu	4. 巻 39
2. 論文標題 Automated error control in divide-and-conquer self-consistent field calculations	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Computational Chemistry	6. 最初と最後の頁 909-916
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jcc.25174	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24件 (うち招待講演 7件 / うち国際学会 8件)

1. 発表者名 小林正人
2. 発表標題 量子化学計算 × インフォマティクスによる触媒・表面吸着系の解析
3. 学会等名 岐阜大学人工知能センター講演会 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 小林正人
2. 発表標題 量子化学計算とデータ科学の併用による触媒・表面吸着系の解析と予測
3. 学会等名 計算科学研究センターワークショップ2021 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Toshikazu Fujimori, Masato Kobayashi, Tetsuya Taketsugu
2. 発表標題 Automatic fragmentation in the divide and conquer quantum chemical calculations with the energy error estimation
3. 学会等名 日本化学会第101春季年会
4. 発表年 2021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 準粒子表現により擬縮退系の励起状態計算を可能にするTDHFB法の開発
3. 学会等名 分子科学会オンライン討論会2020
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Masato Kobayashi
2. 発表標題 Surface model calculation database for predicting catalytic activity: An application to methane steam reforming
3. 学会等名 Ninth Conference of the Asia-Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists (APATCC2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 小林 正人
2. 発表標題 データ科学を利用した表面吸着系量子化学計算結果の解析と触媒への応用
3. 学会等名 「レア・イベントの計算科学」第3回ワークショップ (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masato Kobayashi
2. 発表標題 Data Scientific Analysis of Quantum Chemical Calculation Results for Surface Adsorption Systems and Its Application to Catalysis
3. 学会等名 第36回計算機マテリアルズデザインワークショップ(36th CMD Workshop) (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Masato Kobayashi, Toshikazu Fujimori, Ryosuke Kodama, Tetsuya Taketsugu
2. 発表標題 Automatic Error Control and Static Electron Correlation Treatment in Divide-and-Conquer Method
3. 学会等名 XV International Workshop on Quantum Reactive Scattering (QRS2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Toshikazu Fujimori, Masato Kobayashi, Tetsuya Taketsugu
2. 発表標題 Energy-based automatic fragmentation in the linear-scaling divide-and-conquer electron correlation calculations
3. 学会等名 Ninth Conference of the Asia-Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists (APATCC2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masato Kobayashi, Koji Miyakoshi, Yohei Onodera, Shinji Kohara, Tetsuya Taketsugu
2. 発表標題 Systematic Density-Functional Tight-Binding (DFTB) Molecular Dynamics (MD) Study on MgO-SiO ₂ Melts and the Structural Analysis with Persistent Homology
3. 学会等名 14th International Conference on the Structure of Non-Crystalline Materials (NCM14) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 藤森俊和・小林正人・武次徹也
2. 発表標題 分割統治エネルギー勾配計算に対するバッファ領域自動制御法の開発
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 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 Toshikazu Fujimori, Masato Kobayashi, Tetsuya Taketsugu
2. 発表標題 Automatic error control scheme for the divide-and-conquer electronic structure calculation
3. 学会等名 16th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC) (国際学会)
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 藤森 俊和・小林 正人・武次 徹也
2. 発表標題 分割統治電子相関計算に対する誤差の自動制御化
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 小林 正人
2. 発表標題 大規模系の量子化学計算とデータ科学を利用した量子化学計算結果の解析・触媒への応用
3. 学会等名 分子科学研究所講演会（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Masato Kobayashi
2. 発表標題 Calculation, Analysis, and Prediction for Catalyst and Surface Adsorption Systems with Informatics Techniques and Automated Reaction Path Search
3. 学会等名 2nd International Workshop on Phase Interfaces Science for Highly Efficient Energy Utilization（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 藤森 俊和・小林 正人・武次 徹也
2. 発表標題 分割統治型MP2計算における誤差自動制御スキームの開発
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 藤森 俊和・小林 正人・武次 徹也
2. 発表標題 分割統治MP2計算における相関パツファ領域の自動決定
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 藤森俊和・小林正人・武次徹也
2. 発表標題 分割統治SCF計算における誤差の自動制御手法の開発
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 小林正人・児玉良輔・武次徹也
2. 発表標題 分割統治Hartree-Fock-Bogoliubovエネルギー勾配法の開発
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 Y. Kuroda, C.-P. Hsu, T.-G. Ong, M. Kobayashi, T. Taketsugu
2. 発表標題 Theoretical study on analog of carbodicarbene: NBO and mechanism of addition reaction
3. 学会等名 The 11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC2017) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 黒田悠介・小林正人・武次徹也
2. 発表標題 DSAP類縁体のC-C単結合長に関する理論的研究：環境効果の検討
3. 学会等名 第28回基礎有機化学討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 T. Fujimori, M. Kobayashi, T. Taketsugu
2. 発表標題 Automatic error control in the divide and conquer quantum chemical calculations
3. 学会等名 CPMD2017 Workshop (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	赤間 知子 (Akama Tomoko) (60580149)	北海道大学・理学研究院・特別研究員 (RPD) (10101)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関