

平成 21 年 5 月 15 日現在

研究種目：特定領域研究

研究期間：2006～2009

課題番号：18066016

研究課題名（和文） 高速化量子ダイナミクス理論の開発

研究課題名（英文） Development of accelerated quantum dynamics theory

研究代表者

中井 浩巳 (NAKAI, Hiromi)

早稲田大学・理工学術院・教授

研究者番号：00243056

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：量子効果、核・電子軌道理論、非経験的分子動力学法、エネルギー密度解析、高速化、高精度化

1. 研究計画の概要

本研究では、従来発展してきた電子状態理論に対して、原子核の量子的な振る舞いを考慮したダイナミクスの新理論を構築することを目的とする。具体的には、(I) 電子状態理論と分子動力学法を組み合わせた、非経験的分子動力学(AIMD)法の方法論的な発展、(II) 核と電子の波動関数の同時決定が可能な、核・電子軌道 (NOMO)理論の拡張を行う。また、これらの理論により従来取り扱うことが困難であった対象を研究することが可能になると期待される。そこで、(III) 実在系へ新たに開発した理論を適用し、数値検証および応用研究を行っていく。

2. 研究の進捗状況

(I)の AIMD 法の方法論的な発展に関しては、SCF 計算の高速化および効果的な構造探索手法の開発に成功した。(II)の NOMO 理論の拡張については、密度汎関数理論(DFT)への拡張、多重井戸型ポテンシャル系への適用、電子-核相関をあらわに取り込んだ取扱いなどの発展があった。また、本研究課題で最も重要は NOMO 理論の時間発展形式への拡張にも成功した。その他、当初予定にはなかった大規模・高精度計算のための手法や種々の解析手法の開発にも成功した。

3. 現在までの達成度

おおむね順調に進展している。

現在までの達成度は概ね良好である。当初予定していなかったものも大きな発展を見せたことは特筆すべきことである。

4. 今後の研究の推進方策

最終年度である平成 21 年度は、(III)の実在系への適用に関して重点的に推進する予定である。

5. 代表的な研究成果

(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 40 件)(すべて査読有)
代表的な 5 件は以下のとおりである

T. Atsumi and H. Nakai, "Molecular orbital propagation to accelerate self-consistent-field convergence in an *ab initio* molecular dynamics simulation", *J. Chem. Phys.* **128** (9), 094101 1-9 (2008).

M. Kobayashi, Y. Imamura, and H. Nakai, "Alternative linear-scaling methodology for the second-order Møller-Plesset perturbation calculation based on the divide-and-conquer method", *J. Chem. Phys.* **127** (7), 074103 1-8 (2007).

Y. Imamura, A. Takahashi, and H. Nakai, "Grid-based energy density analysis: Implementation and assessment", *J. Chem. Phys.* **126** (3), 034103 1-10 (2007).

A. Nakata, Y. Imamura, and H. Nakai, "Hybrid exchange-correlation functional for core, valence, and Rydberg excitations: core-valence-Rydberg B3LYP", *J. Chem. Phys.* **125** (6), 064109 1-9 (2006).

M. Hoshino and H. Nakai, "Elimination of

translational and rotational motions in nuclear orbital plus molecular orbital theory: application of Møller-Plesset perturbation theory”, *J. Chem. Phys.* **124** (19), 194110 1–10 (2006).

〔学会発表〕(計 146 件)

2006 年度：国際会議 14 件、国内学会・研究会 32 件、計 46 件、

2007 年度：国際会議 18 件、国内学会・研究会 42 件、計 60 件、

2008 年度：国際会議 12 件、国内学会・研究会 28 件、計 40 件

うち、招待講演は国際会議 10 件、国内学会・研究会 10 件、計 20 件

代表的な 5 件は以下のとおりである

“Acceleration of SCF convergence in ab initio direct molecular dynamics simulations”, H. Nakai, *Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC) 2008*, (Shanghai, China), September 23-27, 2008.

“Development of linear scaling electronic structure calculations based on divide-and-conquer method”, H. Nakai, *The 8th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC2008)*, Sydney Convention and Exhibition Centre at Darling Harbour (Sydney, Australia), September 14-19, 2008.

“Excited states for degenerate systems”, H. Nakai, *The 13th International Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics (QSCP-XIII)*, Michigan State University (East Lansing, MI, USA), July 6-12, 2008.

“Extension of divide-and-conquer Method to Correlated Wave Function Theory”, H. Nakai, *3rd Asia-Pacific Conference on Theoretical & Computational Chemistry (APCTCC)*, (Beijing, P.R. China), September 22-26, 2007.

“Development of rigorous nonadiabatic theory and its applications”, H. Nakai, *The 11th Quantum Systems in Chemistry and Physics (QSCP-XI)*, (St. Petersburg, Russia), August 20-25, 2006.

〔図書〕(計 10 件)

ただし、総説を含む

代表的な 5 件は以下のとおりである

“化学の領域を広げる巨大分子の電子状態計算”, 小林正人, 中井浩巳, *化学*, **64** (1), 38–42 (2009).

“メソ物質設計のための線形スケーリング量子化学計算”, 中井浩巳, *化学と工業*, **61** (10), 961 (2008).

“エネルギー密度解析による表面モデル

の検証および触媒作用の解明”, 中井浩巳, 菊池那明, 今村穰, *触媒*, **50** (7), 601–607 (2008).

“New expression of the chemical bond in hydrides using atomization energies”, Y. Shinzato, H. Yukawa, M. Morinaga, T. Baba, H. Nakai, *Adv. Quant. Chem.*, **54**, 145-160 (2008).

“Nuclear orbital plus molecular orbital (NOMO) theory: Simultaneous determination of nuclear and electronic wave functions without Born-Oppenheimer approximation”, H. Nakai, *Int. J. Quant. Chem.* **107**, 2849–2869 (2007).

