

令和 5 年 8 月 3 日現在

機関番号：13901

研究種目：挑戦的研究（萌芽）

研究期間：2021～2022

課題番号：21K18931

研究課題名（和文）投影増強波法を導入した分子電子状態計算の新システムの構築

研究課題名（英文）Development of Gaussian-type function based projector-augmented waves method

研究代表者

柳井 毅 (Takeshi, Yanai)

名古屋大学・理学研究科(WPI)・教授

研究者番号：00462200

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 4,900,000円

研究成果の概要（和文）：射影増強波法（PAW）と呼ばれる擬ポテンシャル法の数値安定性・効率性に着目し、それを量子化学計算法の基底関数系（ガウス型基底）に組み入れる手法を開発してきている。本研究では、この手法を拡張し、一般化勾配近似（GGA）での汎関数の取り組みおよびMESHグリッドの導入による手法開発を行った。またその基底関数と擬ポテンシャルのセット（PAW-Ln）の開発に成功した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

今計算法は、従来型の全電子の計算を高い精度で再現できる基盤的な手法ありながら、一方で、数値計算の面で優位性をもつ。Gauss型関数としては、高指数を持つ基底を取り除いた圧倒的にコンパクトな基底系を利用しても、遜色のない精度を得ることができる。Meshグリッドを用いた計算を達成し、その結果がBeckeグリッドを用いた従来型と遜色のない、あるいは、潜在的には優位性を示すような結果を得る。本基底関数が全電子基底の結果を高精度に再現することができることを示すことに成功した。

研究成果の概要（英文）：We proposed a scheme to incorporate the PAW method into the conventional quantum

chemical DFT implementation based on Gauss-type function (GTF) basis. The potentially high usability of the GTF-based PAW method, referred to as GTF-PAW, was previously shown, while its implementation was limited to the local density approximation (LDA). The GTF-PAW-based formulation and implementation to raise the level of the functional treatment to the generalized gradient approximation (GGA) was developed. In addition, we introduced the uniform mesh grid for DFT's quadrature in place of the conventional Becke grid. With the test calculations performed on illustrative molecules, it is confirmed that the conventional approach to implement GGA within GTF basis code can be straightforwardly integrated into the GTF-PAW method, allowing for the numerically stable treatment of the gradients of density.

研究分野：計算化学

キーワード：密度汎関数理論 射影増強波法 擬ポテンシャル 基底関数 ガウス型関数

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、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

密度汎関数理論 (DFT) は、電子密度を用いて物質のエネルギーやその他の物性を算出する電子状態計算法であるが、その簡便性と精度から、物理・化学・生物など幅広く物質科学の理論計算を牽引している[1]。本研究では、量子化学計算で用いられている DFT 計算ソルバーの心臓部である数値計算アルゴリズムを置き換える新しい高速・高精度計算法の開発に挑み、その計算法の展開による新しい量子化学計算の枠組みの開拓を目指す。我々は、最近、射影増強波法 (PAW) [2, 3] と呼ばれる擬ポテンシャル法の数値安定性・効率性に着目し、それを量子化学計算法の基底関数系 (ガウス型基底) に組み入れる試みを提案している [4] その研究では、PAW 法との組み合わせから、量子化学計算の分子軌道などの基本的な数値表現オブジェクトに要する情報量を大幅に縮小できるという技術的なシードを獲得している。また、その組み合わせから生じる新しい演算処理の数値的安定なアルゴリズムおよびプログラム開発を達成している。例えば、従来の s 型基底 15 個を用いた表現を、高々 3 個により 10^{-4} ハートリーのエネルギー誤差で再現可能であることを示した。ガウス型基底と PAW の組み合わせるこの枠組みを「GTF-PAW 法」と以降呼ぶ。

[1] S. Hammes-Schiffer, Science 355, 28 (2017).

[2] P.E. Blöchl, Phys. Rev. B 50, 17953 (1994).

[3] G. Kresse and D. Joubert, Phys. Rev. B 59, 1758 (1994).

[4] X.-G. Xiong, and T. Yanai, J. Comp. Theo. Chem. 13 (7), 3236-3249 (2017).

2. 研究の目的

本研究の目的は、GTF-PAW 法の優位性を活用した、現実的な量子化学計算を実現する高速・高精度 DFT ソルバーの開発である。そのために、既存の DFT の計算手法の枠組みの大部分を GTF-PAW 上で再構築し、高性能化を達成する手法開発およびプログラム実装を行う。これはシードの芽生えに相当する。PAW 法は、固体物理で大成功している手法である[5]。PAW 法のプラットフォームと分子系の量子化学理論との融合は未開拓であり、理論計算の方向性を根底から転換する潜在性がある。本研究はその探究である。前述どおり、DFT 法は物質科学の理論計算に幅広く寄与しているものであり、本研究の成果は学術分野の多岐にわたり波及し得るものである。

[5] K. Lejaeghere et al., Science 351, aad3000 (2016) .

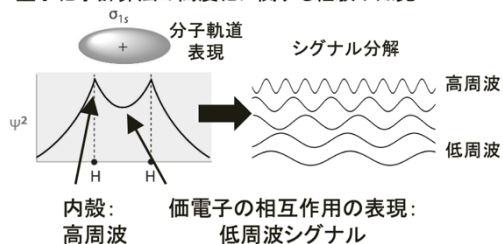
3. 研究の方法

DFT 計算プログラムの高速化を可能とする GTF-PAW 法の試作的なプログラムを開発してきたが、その実装は密度関数 ρ のみの局所密度近似にも基づく基礎的なレベルに留まっている。本研究が目的とする現実的な量子化学計算法の達成のために、以下に示す具体的な手法開発を通じた研究方法を示す。

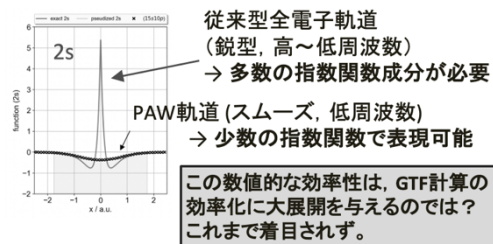
(1) 汎関数モデルの高度化：密度関数の微分 $\nabla \rho$ まで考慮する一般化勾配近似 GGA、及び Hartree-Fock 交換を PAW-GTF の枠組みに組み入れる定式・実装を行う。これにより、最も利用される混成 B3LYP 汎関数[5]が実装される。既に試作レベルは達成している。B3LYP レベルの PAW 擬ポテンシャルや PAW 部分波のデータセットを元素毎に生成する手法の構築は達成しており、分子系への実装の道筋も立っている。

(2) GTF 基底セットの開発:GTF-PAW 法では、擬ポテンシャルの対として、ガウス型基底関数 (GTF)

量子化学計算法の高度化に関する経験や知見

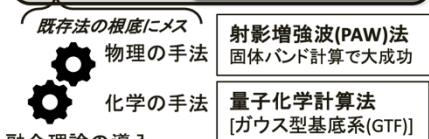
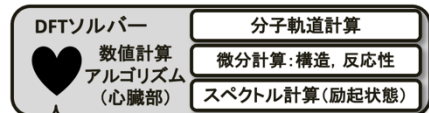


平面波法 (固体周期系の計算)、ウェーブレット法 (柳井)
 ・価電子成分に計算を集中 → 計算を効率化・高精度化
 ・内殻成分を省略: 効果的な情報圧縮

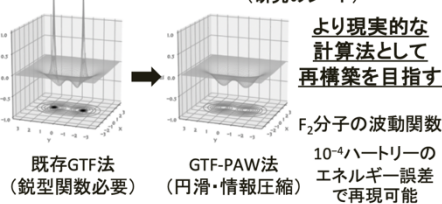


研究目的

密度汎関数理論(DFT)計算法の新しい枠組みの挑戦的開拓: 思い切った手段によるDFT計算の高速化・高精度



GTF-PAW法 分子軌道の数値計算の高速化・高精度化の基礎理論
 柳井 JCTC 2017 [4] 局所密度近似[ρ]レベルでのプロトタイプ (研究のシード)



が用いられる。GTF-PAW 計算の効率化のためには、その縮約型 GTF の最適なパラメータ（基底セット）は、新しく決め直す必要がある。

以上の(1)と(2)で基底部分を固め、その上で量子化学計算ソルバーの構築を行う。ただし、局所近似の部分の実装は、事前にその実装研究が可能であるので着手する。

(3) 解析的エネルギー微分法の開発: 反応ポテンシャル $E(R_A)$ 上での分子構造の決定や反応機構の理解には核座標に関する解析的エネルギー微分計算 $\{ \partial E / \partial R_A \}$ が不可欠となる。GTF-PAW 法に基づく Kohn-Sham エネルギーに対する解析的エネルギー微分の定式化およびその実装を行う。平面波基底の PAW 法では、高効率のエネルギー微分法の定式化や実装は先行研究にて報告済みである[2, 3]。既存の PAW 法に加えて、GTF との接続から生じる別の演算処理の定式化および実装を新たに行う。

4. 研究成果

我々の先行研究[4]を拡張し、密度関数の微分 $\nabla \rho$ まで考慮する一般化勾配近似 GGA を GTF-PAW 法に組み入れる開発を達成した[6]。この開発では、従来型量子化学計算の DFT 理論の直接的な融合として定式化された。スムーズな疑似密度関数とその微分は、スムーズでコンパクトなガウス型関数によって表現される。本微分は、White-Bird の微分法に密接に関係しており、効率よくかつ数値的に安定に密度関数の微分を求めることができる。さらに、密度関数のスムーズさに着目し、数値グリッドに関する研究を行った。量子化学計算の従来型の数値グリッドは原子中心を考慮する Becke グリッドが用いられ、我々の先行研究[4]でもこのグリッド法に用いていた。本研究では、さらに、Mesh グリッドと呼ばれる平面波用の DFT コードで用いられる効率の良いグリッドを適用することを試みた。本研究の結果では、単純に二原子分による基礎的なチェック、水素交換反応(右図)、フラーレンによる計算を実施し、検証を行った。全般的に、本手法は、高精度に従来型全電子計算を再現することが示された。Gauss 型関数としては、高指数を持つ基底を取り除いた圧倒的にコンパクトな基底系を利用しても、遜色のない精度を得ることが示された。また、Mesh グリッドを用いた計算を達成し、その結果が Becke グリッドを用いた従来型と遜色のない、あるいは、潜在的には優位性を示すような結果を得ることができた。

GTF-PAW 実装に基づき、擬ポテンシャルの対として、ガウス型基底関数(GTF)の開発を行った[7]。コンパクト一般短縮型分極無矛盾基底(PAW-Ln)法という基底を導入した。この基底の特徴は極めて少数の primitive 基底で構成されており、計算上大変有利な基底関数と考えられる。さまざまなベンチマーク計算を行い、本基底関数+擬ポテンシャルのセットの精度について検証を行った。PAW-L1 は、2 重価電基底のクオリティー、PAW-L2 は 3 重価電基底のクオリティーに対応するものである。本基底関数が全電子基底の結果を高精度に再現することができることを示すことに成功した。

今計算法は、従来型の全電子の計算を高い精度で再現できる基盤的な手法ありながら、一方で、数値計算の面で優位性をもつ。今後は、本手法を多様な量子化学計算に適用できるように、ハイブリッド汎関数への展開が望まれる。その展開に関する研究は現在進められており、その適用性に期待される。

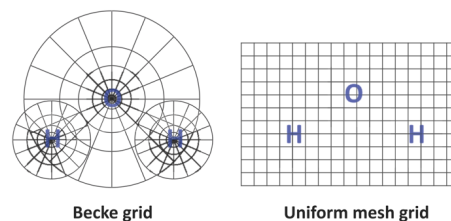


図 DFT に用いられる従来型 Becke 数値グリッドと本 PAW 法で用いられた Mesh グリッド

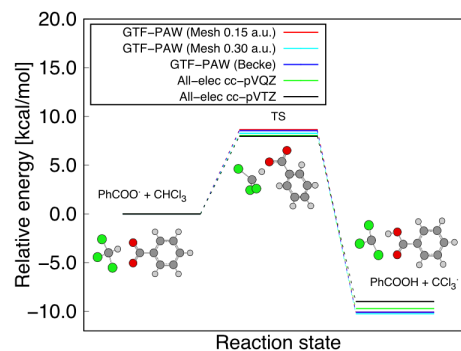


図 B3LYP に基づく、 $\text{PhCOO} + \text{CHCl}_3 \rightarrow \text{PhCOOH} + \text{CCl}_3$ の PAW 計算によるエネルギーダイアグラム。

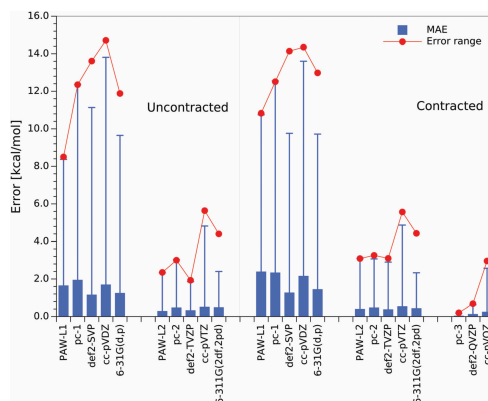


図 GTF-PAW 法に基づく、新規基底関数系+PAW 擬ポテンシャル PAW-L1, PAW-L2 のベンチマーク計算(原子化エネルギーの予測)の結果。

(2020).

[7] Q. M. Phung, M. Hagai, X.-G. Xiong, and T. Yanai, “Polarization Consistent Basis Sets with Projector Augmented Wave Method,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **22**, 27037–27052 (2020).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計24件（うち査読付論文 23件 / うち国際共著 1件 / うちオープンアクセス 4件）

1. 著者名 Fujimoto Kazuhiro J., Minoda Takumi, Yanai Takeshi	4. 巻 125
2. 論文標題 Spectral Tuning Mechanism of Photosynthetic Light-Harvesting Complex II Revealed by Ab Initio Dimer Exciton Model	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 10459 ~ 10470
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.1c04457	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 Phung Quan Manh, Muchammad Yasin, Yanai Takeshi, Ghosh Abhik	4. 巻 1
2. 論文標題 A DMRG/CASPT2 Investigation of Metallocorroles: Quantifying Ligand Noninnocence in Archetypal 3d and 4d Element Derivatives	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 JACS Au	6. 最初と最後の頁 2303 ~ 2314
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacsau.1c00417	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 該当する
1. 著者名 Nomoto Atsuro, Inai Naoto, Yanai Takeshi, Okuno Yukihiro	4. 巻 126
2. 論文標題 Substituent and Solvent Effects on the Photoisomerization of Cinnamate Derivatives: An XMS-CASPT2 Study	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 497 ~ 505
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.1c08504	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 Kawano Shin-ichiro, Nakaya Masato, Saitow Masaaki, Ishiguro Atsuki, Yanai Takeshi, Onoe Jun, Tanaka Kentaro	4. 巻 144
2. 論文標題 Thermally Stable Array of Discrete C60s on a Two-Dimensional Crystalline Adlayer of Macrocycles both in Vacuo and under Ambient Pressure	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 6749 ~ 6758
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.1c13610	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 Fujimoto Kazuhiro J., Hobbs Daniel C. F., Umeda Miki, Nagata Akihiro, Yamaguchi Rie, Sato Yoshitaka, Sato Ayato, Ohmatsu Kohsuke, Ooi Takashi, Yanai Takeshi, Kimura Hiroshi, Murata Takayuki	4. 巻 14
2. 論文標題 In Silico Analysis and Synthesis of Nafamostat Derivatives and Evaluation of Their Anti-SARS-CoV-2 Activity	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Viruses	6. 最初と最後の頁 389 ~ 389
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/v14020389	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 Uehara Takahiro N, Nonoyama Takashi, Taki Kyomi, Kuwata Keiko, Sato Ayato, Fujimoto Kazuhiro J, Hirota Tsuyoshi, Matsuo Hiromi, Maeda Akari E, Ono Azusa, Takahara Tomoaki T, Tsutsui Hiroki, Suzuki Takamasa, Yanai Takeshi, Kay Steve A, Itami Kenichiro, Kinoshita Toshinori, Yamaguchi Junichiro, Nakamichi Norihito	4. 巻 63
2. 論文標題 Phosphorylation of RNA Polymerase II by CDKC;2 Maintains the Arabidopsis Circadian Clock Period	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Plant and Cell Physiology	6. 最初と最後の頁 450 ~ 462
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1093/pcp/pcac011	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 Fujimoto Kazuhiro J., Hobbs Daniel C. F., Umeda Miki, Nagata Akihiro, Yamaguchi Rie, Sato Yoshitaka, Sato Ayato, Ohmatsu Kohsuke, Ooi Takashi, Yanai Takeshi, Kimura Hiroshi, Murata Takayuki	4. 巻 14
2. 論文標題 In Silico Analysis and Synthesis of Nafamostat Derivatives and Evaluation of Their Anti-SARS-CoV-2 Activity	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Viruses	6. 最初と最後の頁 389 ~ 389
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/v14020389	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 Ito Masato, Shirai Shusuke, Xie Yongfa, Kushida Tomokatsu, Ando Naoki, Soutome Hiroki, Fujimoto Kazuhiro J., Yanai Takeshi, Tabata Kenichi, Miyata Yasuo, Kita Hiroshi, Yamaguchi Shigehiro	4. 巻 61
2. 論文標題 Fluorescent Organic Radicals Stabilized with Boron: Featuring a SOMO-LUMO Electronic Transition	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	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) 10.1002/anie.202201965	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 Takiguchi Asahi, Inai Naoto, Kang Seongsoo, Hagai Masaya, Lee Seokwon, Yanai Takeshi, Kim Dongho, Shinokubo Hiroshi	4. 巻 58
2. 論文標題 5-Thiaporphyrinium cation: effect of sulphur incorporation on excited state dynamics	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Chemical Communications	6. 最初と最後の頁 5956 ~ 5959
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D2CC00522K	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 Cruz J. Csar, Garza Jorge, Yanai Takeshi, Hirata So	4. 巻 156
2. 論文標題 Stochastic evaluation of four-component relativistic second-order many-body perturbation energies: A potentially quadratic-scaling correlation method	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 224102 ~ 224102
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0091973	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 Nambo Masakazu, Ghosh Koushik, Yim Jacky C.-H., Tahara Yasuyo, Inai Naoto, Yanai Takeshi, Crudden Cathleen M.	4. 巻 12
2. 論文標題 Desulfonylative Coupling of Alkylsulfones with gem-Difluoroalkenes by Visible-Light Photoredox Catalysis	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ACS Catalysis	6. 最初と最後の頁 9526 ~ 9532
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acscatal.2c02233	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 Saitow Masaaki, Uemura Kazuma, Yanai Takeshi	4. 巻 157
2. 論文標題 A local pair-natural orbital-based complete-active space perturbation theory using orthogonal localized virtual molecular orbitals	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 084101 ~ 084101
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0094777	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 Ami N, Maeda Akari E, Takahara Tomoaki T, Matsuo Hiromi, Nishina Michiya, Ono Azusa, Shiratake Katsuhiko, Notaguchi Michitaka, Yanai Takeshi, Kinoshita Toshinori, Ota Eisuke, Fujimoto Kazuhiro J, Yamaguchi Junichiro, Nakamichi Norihito	4. 巻 63
2. 論文標題 Structure-Function Study of a Novel Inhibitor of Cyclin-Dependent Kinase C in Arabidopsis	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Plant and Cell Physiology	6. 最初と最後の頁 1720 ~ 1728
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1093/pcp/pcac127	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 Fujimoto Kazuhiro J., Minami Shota, Yanai Takeshi	4. 巻 7
2. 論文標題 Machine-Learning- and Knowledge-Based Scoring Functions Incorporating Ligand and Protein Fingerprints	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 19030 ~ 19039
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.2c02822	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 Fujimoto Kazuhiro J., Miyashita Tomoya, Dewa Takehisa, Yanai Takeshi	4. 巻 12
2. 論文標題 Determination of FRET orientation factor between artificial fluorophore and photosynthetic light-harvesting 2 complex (LH2)	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Scientific Reports	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) 10.1038/s41598-022-19375-2	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 Kawashima Hiroyuki, Fukui Norihito, Phung Quan Manh, Yanai Takeshi, Shinokubo Hiroshi	4. 巻 3
2. 論文標題 Planarization of a bowl-shaped molecule by triple-decker stacking	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Cell Reports Physical Science	6. 最初と最後の頁 101045 ~ 101045
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.xcrp.2022.101045	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 Fukaya Natsumi, Ogi Soichiro, Sotome Hikaru, Fujimoto Kazuhiro J., Yanai Takeshi, Bumer Nils, Fernndez Gustavo, Miyasaka Hiroshi, Yamaguchi Shigehiro	4. 巻 144
2. 論文標題 Impact of Hydrophobic/Hydrophilic Balance on Aggregation Pathways, Morphologies, and Excited-State Dynamics of Amphiphilic Diketopyrrolopyrrole Dyes in Aqueous Media	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 22479 ~ 22492
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.2c07299	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 Iino Tsubasa, Shiozaki Toru, Yanai Takeshi	4. 巻 158
2. 論文標題 Algorithm for analytic nuclear energy gradients of state averaged DMRG-CASSCF theory with newly derived coupled-perturbed equations	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 054107 ~ 054107
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0130636	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 Ueda Ayaka, Aihara Yusuke, Sato Shinya, Kano Keiko, Mishiro-Sato Emi, Kitano Hiroyuki, Sato Ayato, Fujimoto Kazuhiro J., Yanai Takeshi, Amaike Kazuma, Kinoshita Toshinori, Itami Kenichiro	4. 巻 18
2. 論文標題 Discovery of 2,6-Dihalopurines as Stomata Opening Inhibitors: Implication of an LRX-Mediated H ⁺ -ATPase Phosphorylation Pathway	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 ACS Chemical Biology	6. 最初と最後の頁 347 ~ 355
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acscchembio.2c00771	査読の有無 無
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 Noto Naoki, Yada Akira, Yanai Takeshi, Saito Susumu	4. 巻 62
2. 論文標題 Machine Learning Classification for the Prediction of Catalytic Activity of Organic Photosensitizers in the Nickel(II) Salt Induced Synthesis of Phenols	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	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) 10.1002/anie.202219107	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 Masteran Conner, Kumar Ashutosh, Teke Nakul, Gaudel Bimal, Yanai Takeshi, Valeev Edward F.	4. 巻 158
2. 論文標題 Comment on “Canonical transcorrelated theory with projected Slater-type geminals” [J. Chem. Phys. 136, 084107 (2012)]	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 057101 ~ 057101
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0135257	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 Fujimoto Kazuhiro J., Minowa Fumika, Nishina Michiya, Nakamura Shunta, Ohashi Sayaka, Katayama Kota, Kandori Hideki, Yanai Takeshi	4. 巻 14
2. 論文標題 Molecular Mechanism of Spectral Tuning by Chloride Binding in Monkey Green Sensitive Visual Pigment	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 1784 ~ 1793
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcllett.2c03619	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 Hagai Masaya, Sugiyama Mahito, Tsuda Koji, Yanai Takeshi	4. 巻 -
2. 論文標題 Artificial neural network encoding of molecular wavefunctions for quantum computing	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Digital Discovery	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) 10.1039/D2DD00093H	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 Uemura Kazuma, Saitow Masaaki, Ishimaru Takaki, Yanai Takeshi	4. 巻 158
2. 論文標題 Local N-electron valence state perturbation theory using pair-natural orbitals based on localized virtual molecular orbitals	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	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) 10.1063/5.0143793	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2件（うち招待講演 2件 / うち国際学会 1件）

1. 発表者名 柳井毅
2. 発表標題 Basic things of multiconfigurational wavefunction methods
3. 学会等名 Virtual Winter School on Computational Chemistry (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 柳井毅
2. 発表標題 ニューラルネットワーク波動関数を用いた量子化学計算法
3. 学会等名 第24回情報論的学習理論ワークショップ (招待講演)
4. 発表年 2021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
---------------------------	-----------------------	----

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