

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 6 月 26 日現在

機関番号：94309

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2012～2013

課題番号：24654184

研究課題名(和文)超精密量子化学で迫る宇宙と極限の科学

研究課題名(英文)Accurate Quantum Chemistry for Space and Ultimate Science

研究代表者

中嶋 浩之(Nakashima, Hiroyuki)

特定非営利活動法人量子化学研究協会・研究所・部門長

研究者番号：80447911

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,000,000円、(間接経費) 900,000円

研究成果の概要(和文)：水素のクラスターや関連化合物は、宇宙の化学反応のキー分子として知られている。これらは、軽い水素原子核の運動の量子効果を無視することができないため、Non-Born-Oppenheimer (Non-BO) 計算が本質的に重要となる。本研究では、我々が開発してきたシュレーディンガー方程式の正確な解法をNon-BO計算へ拡張し、水素分子イオンを対象に、電子・振動・回転励起状態の精密計算手法と、ポテンシャル面を逆算する解析法を提案した。また、BO近似の元に水素クラスターのシュレーディンガー解の計算も行った。今後の複雑な水素関連化合物への応用に際し、萌芽研究として理論的基礎を固めることができた。

研究成果の概要(英文)：Hydrogen clusters and its relative compounds are well known as the key molecules in space chemistry. Due to light hydrogen, however, the quantum effect of the nuclear motion cannot be ignored and the non-Born-Oppenheimer (non-BO) calculation should be essentially important in these systems. We extended the method for solving the Schroedinger equations to the non-BO calculations especially for accurately describing the electronic, vibrational, and rotational excited states, using hydrogen molecular ion as a target. We also proposed the analysis method to obtain the potential curve from the non-BO wave function. We also performed the very accurate calculations of the several hydrogen clusters on the BO approximation. The present study could establish a new basic theoretical method for space chemistry as an exploratory research and we will apply it to more complex hydrogen related compounds in near future to explore molecular evolution process in space.

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：地球惑星科学・地球宇宙化学

キーワード：シュレーディンガー方程式 ディラック方程式 Non-BO計算 星間分子 水素クラスター

1. 研究開始当初の背景

近年の天文学と宇宙科学の目覚ましい発展により、望遠鏡や実験技術の進歩と共にあらゆる波長領域の分光を駆使することで、宇宙の遙か遠くの星や星間空間の様子が分かってきた。また、記憶に新しい「はやぶさ」の快挙により、宇宙の微粒子そのものを分析することが可能となり、宇宙の分子進化や有機物・生物の発生メカニズムの解明に繋がるものとして脚光を浴びている。一方、このような「宇宙の化学反応」は、地球上では不安定な分子種やイオン種が中心的な役割を果たし、宇宙で最も多く存在する水素のクラスターや関連化合物(H_2^+ , H_2 , H_3^+ , H_3 , H_4^+ , H_5^+ , H_6^+ , CH^+ , CH_3^+ 等)が分子進化の出発点となり、C,N,O 原子からなる有機物の生成に繋がると考えられている。最近、星間塵表面での有機物生成に繋がる分子進化過程の解明が脚光を浴び、また超低密度・極低温の星間空間、強磁場等の極限環境下でも、多種多様な分子が形成されることが明らかになっている。また、宇宙の環境を模擬し、新奇の物質開拓を行う実験分野も大きな成功を修めている。しかし、未だこれらの物質科学現象の多くが謎に包まれており、理論的研究による解決が望まれている。

これらの化学反応は、地球上での常識的な反応機構とは異なるメカニズムで進行することが多い。例えば、適当な温度下ではポテンシャル面の活性障壁を乗り越えて起こる化学反応が、超低密度・極低温の宇宙空間、あるいは星間塵表面上では、量子的なトンネル効果により達成される。また、通常無視される原子核の運動の量子効果が、特に原子核の軽い水素関連化合物では本質的に重要になる。これらの現象を解明し、宇宙の分子進化の過程へと研究を進展させるためには、観測・実験と併せ、量子論の第一原理に基づく反応素過程を理論的に解明することが強く望まれてきた。しかし、この分野の理論研究は、分子雲中の分子進化のマクロな古典的シミュレーションや、分子動力学シミュレーションが主体で、反応メカニズムが分かっている量子的現象に対してパラメータの不確定性が大きい現状にある。一方、第一原理に基づく量子化学計算を宇宙の物質科学の諸問題に適用した例はあまり報告されていない。その理由は、現代の量子化学理論の多くが、不安定なイオン種の取り扱いや超強磁場などの特殊環境下の理論計算に困難を伴うこと、また理論計算の精度が不十分で、精密さが求められる当該分野に応用できる確信を持てなかったことにある。

一方、よく知られているように、化学はシュレーディンガー方程式 $H\psi = E\psi$ によって支配され、これを正確に解くことができれば、様々な物質科学現象の正確な予言が可能になる。我々は、これまで原子・分子のシュレーディンガー方程式の一般解法を開発し、予言学に足る高精度な量子化学の建設に

取り組んできた。我々の手法は開発途上ではあるが、最近理論と計算アルゴリズムの開発が大きく進展し、中程度の原子・分子の計算ができるようになった。現在、より大きな分子系に向けた計算アルゴリズムを開発中であるが、一般的な星間分子は小分子であるため、現状の理論をそのまま適用できるターゲットである。

2. 研究の目的

我々は、これまでに培ったシュレーディンガー方程式の解法の理論・方法論をベースに、理論的アプローチにより量子的メカニズムが主役となる宇宙の物質科学現象の理解と予測を目的に研究を展開している。

本萌芽研究では、まずその第一歩として、簡単な水素クラスターを対象とする。これらは、その単純な構造にも関わらず、軽い水素原子の自由度の大きさに起因し、複雑な電子・振動・回転励起状態の絡む未知の物性や現象が多い。しかし、既存の量子化学の理論研究は、原子核の運動と電子の運動を分離する Born-Oppenheimer (BO) 近似に基づく研究がほとんどで、原子核の運動を量子的に扱う Non-Born-Oppenheimer (Non-BO) 計算がほとんど行われていない。その理由は、Non-BO 計算への拡張に対する理論構造自体の困難と複雑さにある。しかし、軽い水素原子核を含む水素のクラスターや関連化合物では、原子核の運動の量子効果を無視することはできず、トンネル効果・ゼロ点振動・共鳴・散乱など、電子と原子核の運動が強くカップルする現象の記述に Non-BO 計算は必須である。一方、我々の理論体系は、系のハミルトニアンを基に電子と核の運動を同時に含む波動関数を展開するため、Non-BO 計算における理論上の困難を伴わない。また、シュレーディンガー方程式の正確な解法に基づいているため、得られる解の精密さも保証される。本萌芽研究では、このような Non-BO 計算に対する理論的基礎と実用的方法論や解析法の開発も目的とする。

3. 研究の方法

本研究では、シュレーディンガー方程式の一般解法として中辻により提案された自由完員関数法(Free Complement (FC) 法)を用いる。その特徴は、系を定義するハミルトニアン自身が、正確な波動関数を構成する完員関数を自動的に生成するということにある。適当な初期関数 ψ_0 から、ハミルトニアンを露わに含む次式から繰り返し(オーダー) n の波動関数 ψ_n を生成する。

$$\psi_{n+1} = [1 + C_n g(H - E_n)] \psi_n \quad (1)$$

ここで、 g は原子・分子ハミルトニアンに存在するクーロン発散項を抑える関数である。右辺を、構成する独立関数(完員関数: $\phi_i^{(n)}$)で置き換えると FC 波動関数((2)式)が得られる。

$$\psi_{n+1} = \sum_i^{M_n} c_i^{(n)} \phi_i^{(n)} \quad (2)$$

未知変数: $c_i^{(n)}$ は、積分を用いる変分法か積分フリーなサンプリング法: **Local Schrödinger Equation (LSE)** 法かで決定する。前者は積分可能な系に適用が限られるが、非常に高精度な解の計算が可能である。一方、後者はサンプリング法を用いるため、変分法に比べ数値計算精度は劣るが、原理上どのような原子・分子系にも適用が可能である。

上述のように、**FC 法は系のハミルトニアンが系に適した波動関数を自動的に生成するため、原子核の運動項を含むハミルトニアンにより、Non-BO 計算の完員関数を効率的に生成することができる。**

4. 研究成果

(1) Non-BO 計算に基づく H_2^+ イオンの電子・振動・回転準位

FC 法では、適当な初期関数にハミルトニアンをかけ、正確な波動関数への収束を得る完員関数を生成する。Non-BO 計算では、電子と原子核の座標を同時に扱い、 H_2^+ の計算では以下の初期関数 ψ_0 を用いた。

$$\psi_0 = (1 \pm P_{12}) \left[\sum_{j=1}^J \exp(-\alpha^{(j)} s) \exp(-\gamma^{(j)} (R - R_0^{(j)})^2) \cdot Y_{L,M}^{l_1, l_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right] \quad (3)$$

ここで、座標は Hylleraas 座標 ($s = r_1 + r_2$, $t = r_1 - r_2$, $R = r_{12}$) を採用し、軌道指数 $\alpha^{(j)}$, $\gamma^{(j)}$ 及び定数 $R_0^{(j)}$ は各励起状態の計算の目的に合わせ、最適な値を導入した(発表論文 2 参照)。 $Y_{L,M}^{l_1, l_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ は回転運動の対称性と関連する球面調和関数である。

表 1 に、電子状態: $1s\sigma_g, 3d\sigma_g$ 、振動準位: $v=0, 1, 2$ 、回転準位: $L=0-6$ ($1S, 3P, 1D, 3F, 1G, 3H, 1I$) に対応した絶対エネルギーと励起エネルギーを示した。各状態解は、互いに相関する電子と核の運動を含み、シュレーディンガー方程式の解として非相対論極限解とみなすことができる。数 cm^{-1} ~ 数 100cm^{-1} の回転励起、振動励起、電子励起共に極めて精密な値を計算することができ、宇宙でのマイクロ波・赤外観測や実験と直接比較可能な理論値である。

図 1 は、電子基底状態 ($1s\sigma_g$) における振動準位: $v=0-14$ に対し、電子座標を縮約した密度関数をプロットした。Non-BO 計算では、自動的に振動の非調和性も導入されるため、振動レベルが上がるほど、原子核の振動はより解離に近づいていることが示されている。

Non-BO 計算では、電子励起状態の各振動・回転状態は電子基底状態の解離状態(連続状態)に埋もれているため、厳密には共鳴状態とみなされる。しかし、連続状態とのカップリングは小さいため、束縛状態として計算しても影響はなかった。一方、複素座標変換法を用い、複素平面回転角 θ に関する固有値の依存性を計算したところ、図

2 に示されるように、 $\text{Re}(E) = -0.3$ a.u. 付近に未知の共鳴状態を検出した。この状態は、電子が片側の水素原子核にトラップされた状態であると推測される。極低温の宇宙では、これらの準安定共鳴状態も化学反応に重要に寄与することが考えられる。

表 1. Non-BO 計算に基づく H_2^+ の電子・振動・回転準位

State	Electronic state	v	Energy (a.u.)	ΔE^a (cm^{-1})	ΔE (cm^{-1})	
1S	$1s\sigma_g$	0	-0.597 139 063 079 175	-	-	
1P			-0.596 873 738 784 279	[1 ¹ S-1 ¹ P: R] 58.232	59.765	
1D			-0.596 345 208 488 434	[1 ¹ P-1 ¹ D: R] 116.000	119.530	
1F		-0.595 857 638 979 107	[1 ¹ D-1 ¹ F: R] 172.851	179.294		
1G		-0.594 517 169 232 902	[1 ¹ F-1 ¹ G: R] 228.357	239.059		
1H		-0.593 231 728 887 000	[1 ¹ G-1 ¹ H: R] 282.122	298.824		
1I		-0.591 710 864 888 091	[1 ¹ H-1 ¹ I: R] 333.791	358.589		
2S		1	1	-0.587 155 679 095 614	[1 ¹ S-2 ¹ S: V] 2191.100	-
2P				-0.586 904 320 912 623	[2 ¹ S-2 ¹ P: R] 55.167	59.765
2D				-0.586 403 631 504 762	[2 ¹ P-2 ¹ D: R] 109.889	119.530
2F			-0.585 657 611 848 892	[2 ¹ D-2 ¹ F: R] 163.732	179.294	
2G			-0.584 672 134 090 403	[2 ¹ F-2 ¹ G: R] 216.287	239.059	
2H			-0.583 454 795 822 121	[2 ¹ G-2 ¹ H: R] 267.175	298.824	
2I			-0.582 014 736 829 357	[2 ¹ H-2 ¹ I: R] 316.056	358.589	
3S			2	2	-0.577 751 904 414 194	[2 ¹ S-3 ¹ S: V] 2063.890
3P	-0.577 514 033 166				[3 ¹ S-3 ¹ P: R] 52.207	59.765
3D	-0.577 040 234 350				[3 ¹ P-3 ¹ D: R] 103.987	119.530
3F	-0.576 334 348 352			[3 ¹ D-3 ¹ F: R] 154.924	179.294	
3G	-0.575 401 996 775			[3 ¹ F-3 ¹ G: R] 204.628	239.059	
3H	-0.574 250 472 910			[3 ¹ G-3 ¹ H: R] 252.730	298.824	
3I	-0.572 888 507 609			[3 ¹ H-3 ¹ I: R] 298.917	358.589	
4S	$3d\sigma_g$			0	-0.173 966 193 626 485	[1 ¹ S-1 ¹ S: E] 11.515 eV
4P		-0.173 952 401 595 976			[1 ¹ S-1 ¹ P: R] 3.027	3.087
4D		-0.173 924 825 667 454			[1 ¹ P-1 ¹ D: R] 6.052	6.174
4F		-0.173 883 482 093 825		[1 ¹ D-1 ¹ F: R] 9.074	9.261	
4G		-0.173 828 395 223 351		[1 ¹ F-1 ¹ G: R] 12.090	12.348	
4H		-0.173 759 597 462 912		[1 ¹ G-1 ¹ H: R] 15.099	15.435	
4I		-0.173 677 129 223 016		[1 ¹ H-1 ¹ I: R] 18.100	18.522	
5S		1		1	-0.172 021 711 736 949	[1 ¹ S-2 ¹ S: V] 426.764
5P			-0.172 008 199 400 784		[2 ¹ S-2 ¹ P: R] 2.966	3.087
5D			-0.171 981 182 770 821		[2 ¹ P-2 ¹ D: R] 5.929	6.174
5F			-0.171 940 677 923 521	[2 ¹ D-2 ¹ F: R] 8.890	9.261	
5G			-0.171 886 708 928 938	[2 ¹ F-2 ¹ G: R] 11.845	12.348	
5H			-0.171 819 307 850 269	[2 ¹ G-2 ¹ H: R] 14.793	15.435	
5I			-0.171 738 514 603 855	[2 ¹ H-2 ¹ I: R] 17.732	18.522	
6S			2	2	-0.170 123 562 006 598	[2 ¹ S-3 ¹ S: V] 416.596
6P	-0.170 110 324 629				[3 ¹ S-3 ¹ P: R] 2.905	3.087
6D	-0.170 083 857 930				[3 ¹ P-3 ¹ D: R] 5.809	6.174
6F	-0.170 044 177 637			[3 ¹ D-3 ¹ F: R] 8.709	9.261	
6G	-0.169 991 307 230			[3 ¹ F-3 ¹ G: R] 11.604	12.348	
6H	-0.169 925 279 535			[3 ¹ G-3 ¹ H: R] 14.491	15.435	
6I	-0.169 846 130 566			[3 ¹ H-3 ¹ I: R] 17.371	18.522	

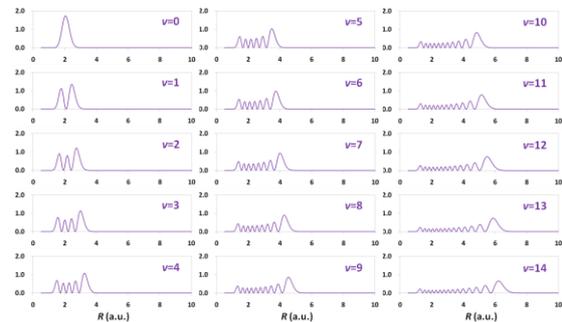


図 1. 高振動準位までの縮約密度関数

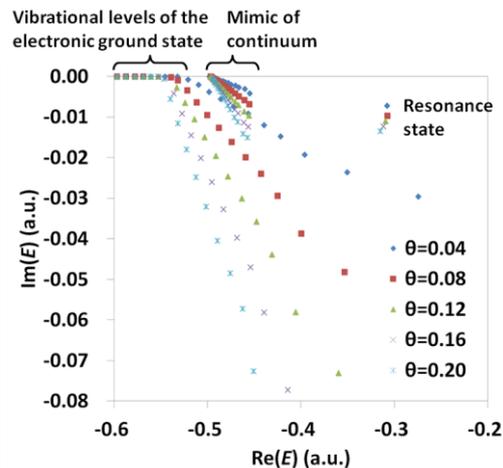


図 2. 複素座標変換法による共鳴状態

(2) Non-BO 解析的ポテンシャルカーブ

化学反応を理解する上で重要な量の一つとして、結合や反応のポテンシャルカーブが挙げられる。しかし、Non-BO 計算では、電子・振動・回転準位に対応する解がハミルトニアン固有状態として同時に得られ、ポテンシャルカーブの情報を直接得ることができない。そこで、本研究では Non-BO 波動関数からポテンシャルカーブの情報を抽出する解析法を提案した。

Non-BO 波動関数は、電子と原子核の座標を含むが、そのうちまず電子座標のみ積分した縮約密度関数を定義する。これは、 H_2^+ の S 対称性では、

$$f(R) = \int d\tau'_R \cdot \psi(r_1, r_2, R) \psi^*(r_1, r_2, R) \quad (4)$$

と定義される。ここで、 $d\tau'_R$ は電子座標のみ積分することを表している。 $f(R)$ は、原子核の振動・回転運動の密度とみなすことができるため、その平方根： $\varphi(R) = \sqrt{f(R)}$ は、BO 近似における原子核の運動のシュレーディンガー方程式、

$$\left[-\frac{1}{2\mu} \frac{d^2}{dR^2} + V(R) \right] \varphi(R) = E\varphi(R) \quad (5)$$

の解とみなすことができる。ここで、 μ は換算質量、 $V(R)$ は今求めたいポテンシャルカーブである。 $V(R)$ 以外は Non-BO 波動関数の解から逆算して与えられるため、(5)式を変形し、

$$V(R) = \frac{1}{2\mu} \frac{d^2\varphi(R)}{dR^2} \frac{1}{\varphi(R)} + E \quad (6)$$

として、ポテンシャルカーブを得ることができる。BO 近似におけるポテンシャルカーブは、各 R で電子のシュレーディンガー方程式を解いて得られる、エネルギーの離散的な点の集合だが、Non-BO ポテンシャルカーブ((6)式)は、あらゆる R で解析関数として定義される。

図 3 に、 H_2^+ の電子の基底・励起状態の Non-BO 波動関数から得られた解析関数のポテンシャルカーブを示す。BO 近似で得られるポテンシャルカーブとほぼ一致し、僅かな違いは Non-BO 計算における核の運動の効果が反映されている。

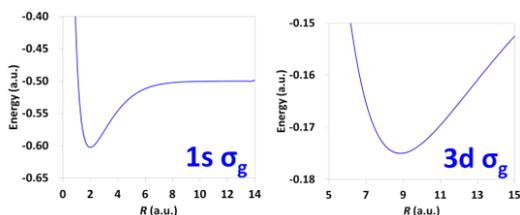


図 3. H_2^+ の Non-BO ポテンシャルカーブ

(3) 水素クラスターの計算

水素クラスターは、宇宙の化学反応の出発点であり、特に H_3^+ や H_5^+ は星間分子反応において最も重要なキー分子として知られて

いる。本研究では、FC-LSE 法を用い、図 4 に示す水素クラスターの精密なシュレーディング解の計算(BO 近似)を行った。

表 2 に、 H_3^+ , H_3 , H_5^+ で、FC 法のオーダーに対する解(エネルギー)の収束過程を示す。 H_3^+ , H_3 では、オーダー: n が 5 以上では絶対値として 1 cm^{-1} の精度(スペクトル精度)が得られ、 H_5^+ でも $n=4$ で 1 kcal/mol 未満の精度(化学精度)を達成している。

このように、FC 法では信頼のおける十分な精度でポテンシャル面を計算することができ、振動・回転準位や反応障壁を計算することで、観測・実験に対し、理論的基礎データを提供することができる。

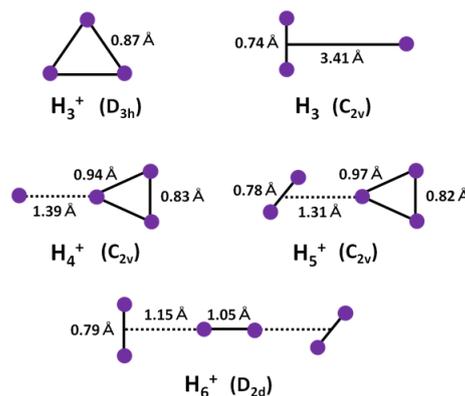


図 4. FC-LSE 法を適用した水素クラスター

表 2. FC 法による(上から) H_3^+ , H_3 , H_5^+ のシュレーディング解の計算

n	M_n	H-square error	エネルギー(a.u.)	$\Delta E = E_{FC-LSE} - E_{exact}$ (a.u.)
2	32	4.39×10^{-2}	-1.337 630 70	6.20×10^{-3}
3	120	1.12×10^{-2}	-1.342 867 70	9.68×10^{-4}
4	330	2.88×10^{-3}	-1.343 682 84	1.53×10^{-4}
5	792	6.77×10^{-4}	-1.343 833 93	1.69×10^{-5}
6	1716	1.54×10^{-4}	-1.343 843 10	-7.48×10^{-6}
Estimated exact*			-1.343 835 625 018 7	1 cm^{-1} 未満のスペクトル精度

* M. Pavanello, W. Tung, and L. Adamowicz, *J. Chem. Phys.* **131**, 184106 (2009).

n	M_n	H-square error	エネルギー(a.u.)	$\Delta E = E_{FC-LSE} - E_{exact}$ (a.u.)
2	51	1.78×10^{-2}	-1.672 199 25	2.35×10^{-3}
3	240	4.79×10^{-3}	-1.674 031 55	5.16×10^{-4}
4	940	1.18×10^{-3}	-1.674 480 23	6.72×10^{-5}
5	3152	3.26×10^{-4}	-1.674 547 10	3.25×10^{-6}
Estimated exact*			-1.674 547 421	1 cm^{-1} 未満のスペクトル精度

* M. Pavanello, W. Tung, and L. Adamowicz, *J. Chem. Phys.* **131**, 184106 (2009).

n	M_n	H-square error	エネルギー(a.u.)	$\Delta E = E_{FC-LSE} - E_{exact}$ (a.u.)
2	216	1.60×10^{-1}	-2.491 793	3.98×10^{-2}
3	1950	4.45×10^{-2}	-2.522 671	8.93×10^{-3}
4	14175	6.93×10^{-3}	-2.531 013	5.87×10^{-4}
Estimated exact*			-2.531 6	1 kcal/mol 未満の化学精度

* T. Pang, *Chem. Phys. Lett.* **228**, 555 (1994).

(4) まとめ

本研究では、シュレーディング方程式の正確な解法を基礎に、宇宙の物質科学現象の理解と予測に繋がる理論的手法の開発と応用を行った。軽い水素が主役の宇宙化学では、原子核の運動の量子効果を取り入れる Non-BO 計算が本質的に重要である。本研究

では、FC法に基づくNon-BOの精密計算手法を開発し、Non-BO波動関数から解析的ポテンシャルカーブを得る解析法も提案した。最も簡単なH₂⁺分子に適用し、これらの有用性を確かめた。また、BO近似の元に水素クラスターのシュレーディンガー解の精密計算を行い、観測・実験と直接比較が可能な十分な精度の解を得ることができた。

今後は、本萌芽研究の成果をより発展させ、複雑な水素クラスターや水素関連化合物へ応用する。シュレーディンガー方程式の正確な解に基づき、全幅の信頼における理論研究は他にはなく、宇宙の化学の反応機構の解明、安定構造や精密な振動・回転構造、重水素置換同位体効果など、宇宙での分子進化の理解に重要な知見を提供していきたい。

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 3 件)

- ① H. Nakashima, T. Shida, and H. Nakatsuji, “Electronic excitation spectra of radical anions of cyanoethylenes and cyanobenzenes: Symmetry adapted cluster-configuration interaction study”, *The Journal of Chemical Physics*, 査読有, 136 巻, 2012, 214306-1-13, DOI: 10.1063/1.4722335
- ② H. Nakashima, Y. Hijikata, and H. Nakatsuji, “Solving the non-Born-Oppenheimer Schrödinger equation for hydrogen molecular ion with the free complement method II: Highly-accurate electronic, vibrational, and rotational excited states”, *The Astrophysical Journal*, 査読有, 770 巻, 2013, 144-1-9, DOI: 10.1088/0004-637X/770/2/144
- ③ H. Nakashima and H. Nakatsuji, “Non-Born-Oppenheimer potential energy curve: Hydrogen molecular ion with highly accurate free complement method”, *The Journal of Chemical Physics*, 査読有, 139 巻, 2013, 074105-1-9, DOI: 10.1063/1.4818161

[学会発表] (計 7 件)

- ① 中嶋 浩之, 中辻 博, “FC-LSE 法の解法としての AB 法”, 第 15 回理論化学討論会, 2012 年 5 月 24 日-5 月 26 日, 東北大学(仙台)
- ② 中嶋 浩之, 中辻 博, “FC-LSE-AB 法による原子・分子系のシュレーディンガー解の計算”, 第 6 回分子科学討論会, 2012 年 9 月 18 日-9 月 21 日, 東京大学(東京)
- ③ H. Nakashima and H. Nakatsuji,

“Solving the Schrödinger equation of general molecule with the from atom to molecule method”,

The 17th Malaysian Chemical Congress (17th MCC) (招待講演), 2012 年 10 月 15 日-10 月 17 日, Kuala Lumpur (Malaysia)

- ④ H. Nakashima, A. Ishikawa, Y. Kurokawa, and H. Nakatsuji, “Solving the Schrödinger and Dirac equations of atoms and molecules with massively parallel computer”, The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC12), 2012 年 11 月 12 日-11 月 17 日, Salt Lake City (USA)
- ⑤ H. Nakashima and H. Nakatsuji, “Determinant-based antisymmetrization theory for the partially correlated wave functions: Nk algorithm”, 5th JCS International Symposium on Theoretical Chemistry (5th JCSI), 2013 年 12 月 2 日-12 月 6 日, Nara (Japan)
- ⑥ 中嶋 浩之, 中辻 博, “星間分子の超精密量子化学計算”, 「階層と全体」シンポジウム (招待講演), 2014 年 2 月 20 日-2 月 21 日, 桑山ビル(名古屋)
- ⑦ 中嶋 浩之, 中辻 博, “星間分子の超精密量子化学計算”, 国立天文台談話会 (招待講演), 2014 年 4 月 4 日, 国立天文台(東京)

[図書] (計 0 件)

[産業財産権]

○出願状況 (計 0 件)

○取得状況 (計 0 件)

[その他]

<http://qcri.or.jp/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

中嶋 浩之 (NAKASHIMA HIROYUKI)
特定非営利活動法人量子化学研究協会
量子化学研究協会研究所・第四部門・
部門長
研究者番号: 80447911

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

なし