

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 6 月 15 日現在

機関番号：63903

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2013～2015

課題番号：25288013

研究課題名(和文) 非経験的密度行列繰り込み群法を基軸とする多状態間電子過程の理論構築と応用

研究課題名(英文) Theory and its applications based on density matrix renormalization group for multiple-electronic-state chemical processes

研究代表者

柳井 毅 (YANAI, Takeshi)

分子科学研究所・理論・計算分子科学研究領域・准教授

研究者番号：00462200

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 14,400,000円

研究成果の概要(和文)：電子励起や異なるスピン状態、酸化状態を経由し、電子状態の状態変化を伴いながら化学反応が進む電子過程の機構解明に向けて、非経験的密度行列繰り込み群(DMRG)法をベースとする手法開発および応用計算を行った。複数の電子状態を経由する電子過程を取り扱うための理論手法として、多状態二次擬縮重摂動理論を開発した。開発された手法は、多核金属錯体(光合成系IIマンガングラスタ、diferrate、デサチユラーゼ)および光機能有機分子(スピロピラン)電子状態計算に応用され、反応機構や結合状態等が解明された。

研究成果の概要(英文)：We developed an advanced quantum chemical theory based on density matrix renormalization group (DMRG) for accurately describing complex chemical phenomena associated with reaction pathways mediated through several different electronic states, such as excited states, spin states, oxidation states, etc. In order to properly account for electronic processes involved with multiple electronic states, the multi-state second-order quasi-degenerate perturbation theory was developed and implemented into an efficient computer program. Using the resulting theoretical method, we studied multinuclear transition metal complexes (manganese cluster, diferrate, desaturase) and photofunctioning organic molecule (spiropyran) to elucidate electronic details of the reaction mechanisms and chemical bondings.

研究分野：理論化学

キーワード：密度行列繰り込み群 化学反応 励起状態 フォトクロミック 酵素反応 電子相関 量子化学 理論計算

### 1. 研究開始当初の背景

(1) 酵素や光合成などでの反応の過程では、しばしば複数の電子状態(励起、スピン、酸化状態)を経由することが知られる。例えば、光合成反応中心マンガングラスタが触媒する酸素生成反応( $2\text{H}_2\text{O} \rightarrow 4\text{H}^+ + 4\text{e}^- + \text{O}_2$ )や光化学フォトリック反応などの励起状態反応などである。これらの分子基盤の解明は、実験・理論の両面において学術研究の最前線に位置づけられ、また応用先として人工バイオ触媒や蛍光プローブへの展開が期待される。それらの反応を理論的に理解するためには、量子力学(QM)に基づく計算法が不可欠であり、高い信頼性で解析可能な理論手法の開発が望まれていた。

(2) 二つの断熱状態が交差・接近し非断熱過程を経由する反応や多原子価の金属錯体の酸化還元反応や原子価の組み替えなどに現われる多状態性を正確に記述するには「複数の電子配置の重ね合わせ」として表すことが要求される(多配置法)。近年、我々はこの課題に対するブレークスルーとして「密度行列繰り込み群(DMRG)」法を分子のQM計算に取り入れた先駆的な開発を行い、従来不可能とされてきた膨大な数の電子配置を用いた計算を実現する基礎開発を進めていた。DMRGに基づく量子化学計算法を用いて、上述の多状態が関与する反応系の理論解明は未開拓の領域であり、その適応可能性の検証は重要であると考えられた。その為には、DMRG法を多状態系へ拡張する理論手法の開発が必要であった。

### 2. 研究の目的

(1) 本研究では、DMRG法を基軸とする高精度計算手法を開発し、多状態間電子過程を伴う化学反応や複数スピン状態が関与する磁気物性に対して定量的な電子状態解析を行うことを目的とした。DMRG法は、多配置理論の枠組みにあり、多様な状態を柔軟に記述可能であり、また計算のスケラビリティも高い。この適用可能性に基づき、これまで適応が難しいとされてきた系への計算の実現を目指した。

(2) 多状態 DMRG 法を用いることで電子状態の記述の「定性」性は飛躍的に向上するが、エネルギー差の計算値は実験値と直に比較するには「定量」性(1 kcal/mol 程度の精度)に研究当初の段階では難があった。その為、動的電子相関を摂動的に補正する必要があった。本研究では、動的電子相関の効率的な補正法を開発することを目指した。具体的には、DMRG法と多状態二次摂動論MS-CASPT2法とを組み合わせることが有望と考えた。我々はそれまでの研究成果として「単」状態CASPT2法を開発しており、それをベースに多状態へ拡張することを目的とした。またさらに、精度の向上を目指し、多参照配置間相互作用法(MRCI)の開発も視野に入れた。

(3) DMRG 波動関数計算と実験観測との対応づ

けを容易にするために、DMRG 波動関数から磁気的物性値を算出する基礎的手法の開発を目指した。

(4) 計算法の具体的な応用対象として、多核金属錯体酵素が関与する電子状態解析を行った。また、有機機能分子の励起エネルギーレベルやフォトリック光化学反応に対する励起状態ポテンシャルプロファイルの計算も対象とし、その反応機構の解明を目指した。

### 3. 研究の方法

(1) 本研究課題では、複数の電子励起状態間のエネルギー準位を正確に求める手法開発が必須となる。特に、状態間の乗り移りを許す過程は、擬縮重な状態であり、電子相関が効く。「単」状態 CASPT2 理論では擬交差・円錐交差の記述に難があるので、DMRG 法をベースとして多状態理論へと拡張した。その為には、DMRG 法を拡張し、状態間の遷移密度行列を求める必要がある。遷移密度行列とMS-CASPT2有効ハミルトニアンとの内積から行列要素  $H_{ij}$  を算出する。小次元の  $H_{ij}$  の直交固有状態として、目的の高精度な断熱ポテンシャルが求められる。

(2) 精度の向上を目指し、多参照配置間相互作用法(MRCI)の開発を行った。MRCI は、参照関数から派生する励起配置を用いたCI法である。DMRG 波動関数を参照関数とするCI法の定式化(DMRG-MRCI法)とその計算機への実装が行われた。ハミルトニアン行列の演算式は、4体の密度行列が含まれるが、その演算コストや保存量は許容範囲を超えるので、その近似法を導入した。

(3) DMRG 法の波動関数から超微細結合定数を評価する方法の開発を行った。この物理量を再現するには動的相関や内殻軌道分極を正しく考慮することが不可欠である。そのためには通常では扱えないような大きな活性軌道空間が必要になり、それを解くにはDMRG法が適している。超微細結合定数は、DMRG 波動関数からスピン差密度を求めることで算出可能である。

(4) DMRG 計算法の応用対象として、光合成系IIの金属コアである酸素生成複合体(マンガングラスタ)、鉄二核水分解触媒におけるO-O結合生成反応、および脂肪酸の不飽和化酵素反応を触媒するデサチウラーゼ金属酵素の電子状態計算を行った。マンガングラスタでは、X線構造に対するDMRG多電子波動関数計算を実行した。電子密度を求め、酸化数、電子占有の様子を理論的に算出し、分子構造と電子状態の関係性を検証した。

(5) ferrate( $\text{K}_2\text{FeO}_4$ )による人工系での水分解反応に関する反応速度論的実験研究が報告され、酸素生成の前駆体であるO-O結合が鉄(VI)二核中間体によって触媒されることが示唆された。我々は、二核鉄の価電子軌道を活性軌道として

全て考慮し、更に double shell 効果を含む大規模な活性空間 (36e,32o) を用いた DMRG-CASPT2 および DMRG-MRCI を実行した。

(6) デサチュラーゼ金属酵素の反応モデルを密度汎関数計算から導き、高精度な反応プロファイルを導くために、モデル反応構造に対して DMRG-CASPT2 計算を実行した。エネルギー障壁の値を精密に見積もることにより、実験データとの比較から反応経路の決定を試みた。

(7) スピロピラン化合物の光開環反応の電子励起反応プロファイルを特定するために、DMRG-CASPT2 法を用いた高精度計算を実行した。本計算では、共役軌道および結合に関与する価電子軌道を全て取り入れた大きな活性化空間を用いた多参照計算を実行した。

#### 4. 研究成果

(1) 単状態 DMRG-CASPT2 法を拡張し、多状態 CASPT2 法の定式化を行い、高速な計算プログラムを完成することができた。DMRG-CASSCF 計算では取り込みが難しい動的電子相関を効率よく取り込む計算が可能となった。並列計算に対応するために、摂動要素をメモリー分散する実装を行い、大規模系への適用が可能となった。また、resolution-of-identity 法を分子積分計算に取り入れる拡張も実装した。結果、例えば、二千基底を超える大規模な摂動計算も実行できる。

(2) DMRG-CASSCF 波動関数を参照とする MRCI 法の定式化および計算機への実装を実現した。MRCI 方程式は、数千項の複雑なテンソル縮約から構成される。我々は、Wick の定理に基づき、多体方程式の自動導出及び、並列計算コードへ変換するテンソル生成ライブラリ Femto を開発し、それを用いて MRCI プログラムを導出した。精度に関するベンチマークとして、全ての軌道を含めた、26 電子 in 24 軌道から成る完全活性空間を用いて、ポルフィリンの S0-T0 状態間の断熱励起エネルギーを計算した。その結果、実測値との非常に良好な一致が確認された。

(3) DMRG 法の波動関数から超微細結合定数を評価する方法の開発を行った。小分子(BO, CO<sup>+</sup>, CN, AIO)に適用し、本手法が超微細結合定数を高い信頼性で計算できることを示した。特に、強相関効果が顕著である AIO 分子の場合には、従来法では精密な評価が困難であったが、本手法を用いて高精度計算が達成され、Al<sup>+</sup>O<sup>-</sup> と Al<sup>2+</sup>O<sup>2-</sup> のイオン状態の競合が強相関状態の主要因であることを示した。DMRG 法を遷移金属や重原子を含む分子に対しても適用できるように、相対論的手法を導入した。本理論では、重原子効果の中で、EPR で支配的となるスカラー相対論項を記述するために、Douglas-Kroll-Hess 変換を三次まで展開し、EPR 観測演算子に生じる誤差を取り除く相対論的変換法を初め

て導出した。4d 遷移金属を含む原子・分子系 (Ag, PdH, RhH<sub>2</sub>) の計算を行った。高次の相対論効果が、超微細結合定数を評価する上で重要な因子であることを示し、計算誤差を約 2% 程度に抑えられることを示した。

(4) 本研究ではマンガンの 3d 軌道と架橋酸素の 2p 軌道の計 35 軌道からなる活性軌道空間内の多配置効果を考慮した DMRG-CASSCF 法により Mn<sub>4</sub>Ca クラスターの高精度な波動関数を計算し個々の Mn の酸化状態の解析を行った。また分光実験により同定され、現時点で正しいとされる S1 中間状態の酸化状態 (Mn<sup>2</sup>III Mn<sup>3</sup>IV Mn<sup>4</sup>IV Mn<sup>5</sup>III) を再現するか否かを指標とした構造の妥当性の検討を行った。解析の結果、QM/MM 構造における基底状態は妥当な酸化状態 (Mn<sup>2</sup>III Mn<sup>3</sup>IV Mn<sup>4</sup>IV Mn<sup>5</sup>III) を再現したのに対し、XRD 構造においては O<sub>9</sub>, 10 から Mn<sub>4</sub>, 5 への電荷移動状態 (Mn<sup>2</sup>III Mn<sup>3</sup>IV Mn<sup>4</sup>III Mn<sup>5</sup>II) が基底状態となった。励起状態計算をあわせて行った結果、この電荷移動状態は QM/MM 構造において基底状態より約 30kcal/mol 高いエネルギーを持つ励起状態として存在することが確認され、参照となる (Mn<sup>2</sup>III Mn<sup>3</sup>IV Mn<sup>4</sup>IV Mn<sup>5</sup>III) とは明らかに異なる電子状態である事が示された。

(5) 鉄二核水分解触媒における O-O 結合生成に関する電子レベルでの機構解明を行った。大規模な活性空間 (36e,32o) を用いた DMRG-CASPT2 および DMRG-MRCI 計算の結果から、O-O 結合生成におけるラジカルカップリングの化学結合論を提示した。また、反応中間構造に対する電子状態計算の結果から、反応ポテンシャルの定量的計算を示した。

(6) デサチュラーゼ金属酵素の高精度計算に基づく検証の結果、金属活性中心は、不飽和脂肪酸に直接作用するのではなく、タンパク中のプロトン(H<sup>+</sup>)を活性の助けとして用いて複合的に C-H 開裂反応を進めることが分かった。9種類の反応モデルのそれぞれに関して、活性化エネルギーが高精度計算から得られ、本研究が提案するプロトン補助型の反応モデルが唯一実験値を再現するという点が重要な決め手になった。また、計算された電子の同時確率分布(波動関数)を詳しく解析すると、この C-H 開裂は、結合電子2つが C と H 原子に均等に移動する均等開裂とよばれる電子的特徴をもつことが分かった。本研究の高精度計算から予測された C-H の均等開裂は、不飽和化を説明する電子論の観点からも理にかなったものと言える。

(7) DMRG-CASPT2 理論に基づく高精度計算から、スピロピラン化合物の光開環反応の電子励起反応プロファイルを導くことができた。本研究の計算では、C-O と C-N の結合開裂過程に関与する S1 状態の最小エネルギー経路を与えることに成功した。S1 状態から S0 状態への非断熱遷移が OH 結合の揺らぎを通じて進むことを示

すことができた。また、DMRG-CASSCFレベルの構造最適化計算を世界で初めて実現することができた。

## 5. 主な発表論文等

(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 22 件)

M. Okamura, M. Kondo, R. Kuga, Y. Kurashige, T. Yanai, S. Hayami, M. Yoshida, K. Yoneda, S. Kawata and S. Masaoka, A pentanuclear iron catalyst designed for water oxidation, *Nature*, **530**, 465-468 (2016) [査読有]. 10.1038/nature16529

M. Saitow, Y. Kurashige, and T. Yanai, Fully internally contracted multireference configuration interaction theory using density matrix renormalization group: A reduced-scaling implementation derived by computer-aided tensor factorization, *J. Chem. Theo. Comp.* **11**, 5120-5131 (2015) [査読有]. 10.1021/acs.jctc.5b00270

K. Yamamoto, P. Pandit, T. Nakamura, Y. Kurashige, T. Yanai, G. Nakamura, S. Masaoka, S. Higashibayashi, Acid-regulated reversible electron transfer through disproportionation to a stable radical, *Chem. Sci.* **6**, 4160-4173 (2015) [査読有]. 10.1039/C5SC00946D

S. Horiuchi, Y. Tachibana, K. Yamamoto, S. Kawamata, K. Takase, T. Matsutani, K. Masai, Y. Kurashige, T. Yanai, and T. Murahashi, Remarkable Metal Binding Ability of Carotenes: Decanuclear Homo- and Heterometal Chains Stabilized by  $\beta$ -Carotene Sandwich, *Nature Comm.* **6**, 6742 (8 pages) (2015) [査読有]. 10.1038/ncomms7742

T. Yanai, G. I. Fann, R. J. Harrison, and G. Beylkin, Multiresolution quantum chemistry in multiwavelet bases: excited states from time-dependent Hartree-Fock and density functional theory via linear response, *Phys. Chem. Chem. Phys.* (12 pages) (2015) [査読有]. 10.1039/C4CP05821F

T. N. Lan, J. Chalupský, and T. Yanai, Molecular  $g$ -tensors from analytical response theory and quasi-degenerate perturbation theory in framework of complete active space self-consistent field method, *Mol. Phys.* **113**, 1750-1767 (2015) [査読有]. 10.1080/00268976.2015.1012128

Y. Ishikawa, S. Kimura, K. Takase, K. Yamamoto, Y. Kurashige, T. Yanai, and T. Murahashi, Modulation of Benzene or Naphthalene Binding to Palladium Cluster Sites by the Backside-Ligand Effect, *Angew. Chem. Int. Ed.* **54**, 2482-2486, (2015) [査読有]. 10.1002/anie.201409499

T. N. Lan, Y. Kurashige, and T. Yanai, Scalar relativistic calculations of hyperfine coupling constants using ab initio density matrix renormalization group method in combination with third-order Douglas-Kroll-Hess transformation: case studies of 4d transition metals, *J. Chem. Theo. Comp.* **11**, 73-81 (2015) [査読有]. 10.1021/ct5007778

T. Yanai, Y. Kurashige, W. Mizukami, J. Chalupský, T. N. Lan, and M. Saitow Density matrix renormalization group for ab initio Calculations and associated dynamic correlation methods: A review of theory and applications, *Int. J. Quantum Chem.* **115**, 283-299 (2015) [査読有]. 10.1002/qua.24808

Y. Kurashige, J. Chalupský, T. N. Lan, and T. Yanai, Complete active space second-order perturbation theory with cumulant approximation for large entanglement space from density matrix renormalization group, *J. Chem. Phys.* **141**, 174111 (13 pages) (2014) [査読有]. 10.1063/1.4900878

J. Chalupský, T. A. Rokob, Y. Kurashige, T. Yanai, E. I. Solomon, L. Rulíšek, and M. Srnc, Reactivity of Binuclear Non-Heme Iron<sup>9</sup> Desaturase Studied by Large-scale Multireference Ab Initio Calculations, *J. Am. Chem. Soc.* **136**, 15977-15991 (2014) [査読有]. 10.1021/ja506934k

Y. Kurashige and T. Yanai, Theoretical study of the  $\pi^*$  excited states of oligoacenes: a full  $\pi$ -valance DMRG-CASPT2 study, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **87**, 1071-1073, (2014) [査読有]. 10.1246/bcsj.20140180

Y. Kurashige, M. Saitow, J. Chalupský and T. Yanai, Radical O-O coupling reaction in diferrate-mediated water oxidation studied with multireference wave function theory, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **16**, 11988-11999 (2014) [査読有]. 10.1039/c3cp55225j

T. N. Lan, Y. Kurashige, and T. Yanai, Toward reliable prediction of hyperfine coupling constants using ab initio density matrix renormalization group method: diatomic radicals as test cases, *J. Chem. Theo. Comp.* **10**, 1953-1967 (2014) [査読有]. 10.1021/ct400978j

T. V. Harris, Y. Kurashige, T. Yanai, and K. Morokuma, Ab Initio Density Matrix Renormalization Group Study of Magnetic Coupling in Dinuclear Iron and Chromium

- Complexes, *J. Chem. Phys.* **140**, 054303 (10 pages) (2014) [査読有]. 10.1063/1.4863345
- S. Sharma, T. Yanai, G. H. Booth, C. J. Umrigar and G. K.-L. Chan, "Spectroscopic accuracy directly from quantum chemistry: Application to ground and excited states of beryllium dimer, *J. Chem. Phys.* **140**, 104112 (2014) [査読有]. 10.1063/1.4867383
- J. Chalupský and T. Yanai, Flexible nuclear screening approximation to the two-electron spin-orbit coupling based on ab initio parameterization, *J. Chem. Phys.* **139**, 204106 (14 pages) (2013) [査読有]. 10.1063/1.4832737
- F. Liu, Y. Kurashige, T. Yanai, and K. Morokuma, Multireference Ab Initio Density Matrix Renormalization Group (DMRG)-CASCF and -CASPT2 Study on the Photochromic Ring-Opening of Spiropyran, *J. Chem. Theo. Comp.* **9**, 4462-4469 (2013) [査読有]. 10.1021/ct400707k
- M. Saitow, Y. Kurashige, and T. Yanai, Highly scalable multireference configuration interaction theory with internal contraction of density matrix renormalization group wave function, *J. Chem. Phys.* **139**, 044118 (15 pages) (2013) [査読有]. 10.1063/1.4816627
- T. N. Lan and T. Yanai, Correlated one-body potential from second-order Møller-Plesset perturbation theory: Alternative to orbital-optimized MP2 method, *J. Chem. Phys.* **138**, 224108 (12 pages) (2013) [査読有]. 10.1063/1.4809983
- 21 Y. Kurashige, G. K.-L. Chan, and T. Yanai, Entangled quantum electronic wavefunctions of the  $Mn_4CaO_5$  cluster in photosystem II, *Nature Chem.* **5**, 660-666 (2013) [査読有]. 10.1038/nchem.1677
- 22 W. Mizukami, Y. Kurashige, T. Yanai More Electrons Make a Difference: Emergence of Many Radicals on Graphene Nanoribbons Studied by Ab Initio DMRG Theory, *J. Chem. Theo. Comp.* **9**, 401-407 (2013) [査読有]. 10.1021/ct3008974
- [学会発表] (計 16 件)
- T. Yanai, San Diego, USA (Mar 13-17, 2016) The 251th ACS meeting, "Recent progress in multireference dynamic correlation methods based on density matrix renormalization group" (招待講演).
- T. Yanai, BITEC, Bangkok, Thailand (Feb. 9-11, 2016) Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON2016), "Computational quantum chemistry with an efficient many-electron theory: Theory and applications" (招待講演).
- T. Yanai, IMS, Okazaki, Aichi (Jan 11-14, 2016) The 75th Okazaki Conference Tensor Network States: Algorithms and Applications, "Quantum chemistry with density matrix renormalization group" (招待講演).
- T. Yanai, Tarragona, Spain (Nov. 25-27, 2015) ICIQ-FIFC Spain-Japan Joint Symposium on Theoretical and Computational Chemistry of Complex Systems, "Advanced multireference theory based on density matrix renormalization group: theory and applications" (招待講演).
- T. Yanai, Bratislava, Slovakia (Oct 11-14, 2015); The 6th Japan-Czech-Slovak Symposium for Theoretical and Computational Chemistry, "Advanced multireference theory using ab initio density matrix renormalization group" (招待講演).
- T. Yanai, Nanjing, China (Jun 3, 2015); Recent Advances in Electronic Structure Theory, "Advanced multireference theory based on density matrix renormalization group" (招待講演).
- T. Yanai, The University of Tokyo, Bunkyo, Tokyo (Feb 20, 2015) International Workshop on New Frontier of Numerical Methods for Many-Body Correlations - Methodologies and Algorithms for Fermion Many-Body Problems, "Ab initio quantum chemistry using density matrix renormalization group" (招待講演).
- T. Yanai, RIKEN Advanced Institute for Computational Science, Kobe, Hyogo, (Oct 21, 2014); Tensor Network Algorithms in Materials Science, "Ab initio quantum chemistry with density matrix renormalization group" (招待講演).
- 柳井 毅, 広島大学 (広島県東広島市) (2014年9月22日); 第8回分子科学討論会「密度行列繰り込み群を基盤とする多参照電子状態理論の開発と応用」(招待講演).
- 柳井 毅, 東大物性研 (東京都柏市) (2014年9月20日); 平成26年度前期物性研短期研究会 - 真空紫外・軟X線放射光物性研究のパラダイムシフトに向けて - 「密度行列繰り込み群を用いた光合成マンガンクラスタの電子状態計算」(招待講演).
- T. Yanai, Institute of Atomic and Molecular Sciences, Taipei, Taiwan (Feb 24-26, 2014); Asian CORE Winter School on Frontiers of Molecular, Photo-, and Material Sciences, "Quantum chemistry with quantum algorithm: *ab initio* density matrix renormalization group theory" (招待講演).

T. Yanai, 豊橋技術科学大学 (愛知県豊橋市)(2014年2月5日); 第7回ビヨンド・シミュレーション・フォーラム～スーパーコンピューティング～「Big Multireference Calculations with Big Entanglement Space: ab initio DMRG approach」(招待講演).

柳井 毅, 理化学研究所 計算科学研究機構 柚木研究室 (兵庫県神戸市)(2014年1月17日); 理研セミナー「密度行列繰り込み群に基づく量子化学計算」(招待講演).

T. Yanai, Lausanne, Switzerland (Oct 21-25, 2013); CECAM conference: Structure-property relationships of molecular precursors to organic electronics, “Quantum chemistry with density matrix renormalization group: Theory and applications to  $\pi$ -conjugated systems” (招待講演).

T. Yanai, Indianapolis, IN, USA (Sep 8-12, 2013); 246th ACS National Meeting & Exposition, “Entangled quantum electronic wavefunctions of biological systems: Density matrix renormalization group approach” (招待講演).

T. Yanai, Telluride, CO, USA (June 19, 2013); New Frontiers in Electron Correlation, “Some new approaches to electron correlation: orbital optimization; Mn<sub>4</sub>CaO<sub>5</sub>; DMRG-MRCI” (招待講演).

[図書] (計1件)

柳井毅, 倉重佑輝「第1章 1-2 金属錯体系における電子相関理論の進展」金属錯体の量子・計算化学 [錯体化学会選書 10] 23--41 頁、(共立出版 2014年) ISBN978-4-7827-709-8

[その他]

ホームページ等

<http://qcl.ims.ac.jp/>

プレスリリース

[https://www.ims.ac.jp/news/2013/06/10\\_1257.html](https://www.ims.ac.jp/news/2013/06/10_1257.html)

[https://www.ims.ac.jp/news/2014/11/17\\_3047.html](https://www.ims.ac.jp/news/2014/11/17_3047.html)

[https://www.ims.ac.jp/news/2016/02/12\\_3396.html](https://www.ims.ac.jp/news/2016/02/12_3396.html)

6. 研究組織

(1) 研究代表者

柳井 毅 (YANAI, Takeshi)

分子科学研究所・理論・計算分子科学領域・准教授

研究者番号: 00462200

(2) 研究分担者

倉重 佑輝 (KURASHIGE, Yuki)

分子科学研究所・理論・計算分子科学領域・

助教

研究者番号: 30510242

諸熊 奎治 (MOROKUMA, Keiji)

京都大学・福井謙一記念研究センター・シニアリサーチフェロー

研究者番号: 40111083

(4) 研究協力者

CHALPUSKY, Jakub (CHALPUSKY, Jakub)

TRAN, Lan (TRAN, Lan)

齋藤 雅明 (SAITOW, Masaaki)

CHUNG, Lung Wa (CHUNG, Lung Wa)

LIU, Fengyi (LIU, Fengyi)