

物質デザインへの展開のための量子多成分系分子理論の高度化

Title: Development of Quantum Multi-Component Molecular Theory
for Its Application to Material Design

立川 仁典、北 幸海

Masanori Tachikawa and Yukiumi Kita

横浜市立大学大学院生命ナノシステム科学研究科

Graduate School of Nanobiosystem, Yokohama-city University, Kanazawa-ku
Yokohama 236-0027

これまで我々は、従来の第一原理計算だけでは直接取込むことのできない、水素原子核やミュオン、陽電子の量子揺らぎも含めた量子多成分系分子理論を展開してきた。具体的には、分子軌道(MO)法[1-3]や、量子モンテカルロ(QMC)法[4]、さらには密度汎関数(DFT)法[5]に基づく手法と、経路積分法[6, 7]に基づいた、量子多成分系分子理論手法である。

本研究課題では、物質デザインへの展開のために、計算機科学との融合を含め、量子多成分系分子理論を深化させる。①量子多成分系分子理論の深化として、(1)大規模系への拡張、(2)ダイナミクスへの拡張、(3)効率的な並列化への実装を行う。それにより②物質デザインへの展開として、(1)ミュオン化合物、(2)生体分子クラスター、(2)炭素材料への水素吸着・吸蔵の計算を実行し、特に生体分子中や炭素材料への水素吸着・吸蔵挙動を探る。

当日は低障壁水素結合系の H/D 同位体効果と温度効果、さらにはいくつかの陽電子化合物の計算結果も含めて紹介したい。

- [1] M. Tachikawa, *Chem. Phys. Lett.*, **350**, 269 (2001), **360**, 494 (2002).
- [2] T. Ishimoto, M. Tachikawa, and U. Nagashima, *J. Chem. Phys.*, **124**, 014112 (2006).
- [3] M. Tachikawa, Y. Kita, and R. J. Buenker, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **13**, 2701 (2011), *New J. Phys.*, **14**, 035004 (2012).
- [4] Y. Kita, R. Maezono, M. Tachikawa, M. Towler, and R. J. Needs, *J. Chem. Phys.*, **131**, 134310 (2009), **135**, 054108 (2011).
- [5] T. Udagawa and M. Tachikawa, *J. Chem. Phys.*, **125**, 244105 (2006).
- [6] M. Tachikawa and M. Shiga, *J. Am. Chem. Soc.*, **127**, 11908 (2005).
- [7] K. Suzuki, M. Shiga, and M. Tachikawa, *J. Chem. Phys.*, **129**, 144310 (2008).