

正確な量子化学理論の実践と応用: 化学研究への実用化を目指して

Application of exact quantum chemistry for chemical study

中嶋 浩之 (量子化学研究協会研究所)
h.nakashima@qcri.or.jp

シュレーディンガー方程式は、電子と原子核の運動を司る運動方程式として、化学・物理・生物のあらゆる物質科学現象を支配する量子力学の基礎方程式である。我々は、中辻により提案されたシュレーディンガー方程式の正確な解法: 自由完員関数理論(Free Complement (FC) theory) [1]を展開し、様々な原子・分子に応用してきた。

本講演では、FC理論に基づく正確な量子化学理論の化学研究への実用化に向け、我々が取り組んできた幾つかの実践と応用例を紹介する。

- ① 簡単な原子・分子の精密計算
 - ・ シュレーディンガー方程式の超精密解[2-4]
 - ・ Born-Oppenheimer (BO) 近似の量子化学を超える non-BO 計算科学[5,6]
- ② 化学フォーミュラ理論と FC s_{ij} 変分理論による化学研究の実践的計算[7,8]
 - ・ C₂分子のポテンシャルカーブと化学結合論
- ③ FC-LSE exact 理論の最近の成果[9-14]
 - ・ 化学反応研究の基礎: ポテンシャルカーブの完全な理論的実現

【参考文献】

- [1] H. Nakatsuji, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 030403 (2004).
- [2] H. Nakashima and H. Nakatsuji, *J. Chem. Phys.* **127**, 224104 (2007).
- [3] H. Nakashima and H. Nakatsuji, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 240406 (2008).
- [4] H. Nakatsuji and H. Nakashima, *J. Chem. Phys.* **150**, 044105 (2019).
- [5] H. Nakashima, Y. Hijikata, and H. Nakatsuji, *Astrophys. J.* **770**, 144 (2013).
- [6] H. Nakashima and H. Nakatsuji, *J. Chem. Phys.* **139**, 074105 (2013).
- [7] H. Nakatsuji, H. Nakashima, and Y. I. Kurokawa, *J. Chem. Phys.* **149**, 114105 (2018).
- [8] H. Nakatsuji, H. Nakashima, and Y. I. Kurokawa, *Phys. Rev. A* **101**, 062508 (2020).
- [9] H. Nakatsuji, H. Nakashima, Y. Kurokawa, and A. Ishikawa, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 240402 (2007).
- [10] H. Nakatsuji and H. Nakashima, *J. Chem. Phys.* **142**, 084117 (2015).
- [11] H. Nakatsuji, H. Nakashima, and Y. I. Kurokawa, *J. Chem. Phys.* **149**, 114106 (2018).
- [12] H. Nakatsuji and H. Nakashima, *J. Chem. Phys.* **157**, 094109 (2022).
- [13] H. Nakatsuji, H. Nakashima, *Chem. Phys. Lett.* **806**, 140002 (2022).
- [14] H. Nakashima and H. Nakatsuji, *J. Chem. Theory Comput.* in press.