


ディビジョン番号	3
ディビジョン名	理論化学・情報化学・計算化学

大項目	1. 理論化学
中項目	1-1. 電子状態
小項目	1-1-1. 高精度計算

<p>概要（200字以内）</p> <p>シュレーディンガー方程式を正確に解く一般的な解法が開発された。近い将来この方法による様々な化学現象の解明と理論予測が実現することが期待できる。また、巨大系の電子状態を高精度で計算するための新たな理論、Giant SAC-CI法が開発され、分子工学に新しい道が拓かれた。SAC-CI法の進展により、精密な理論分光や生体系・光機能性分子の光化学の研究が可能になった。学会・産業界における活用が期待される。</p> <div style="border: 1px solid black; padding: 5px; width: fit-content; margin: 10px auto;"> <ul style="list-style-type: none"> ・シュレーディンガー方程式の正確な解の一般的な解法 ・巨大系の電子状態理論 ・理論精密分光 </div> <div style="text-align: center; margin: 10px auto;">  <p>化学現象の解明、理論予測、分子設計 の新展開</p> </div>	
<p>現状と最前線</p> <p>理論化学の最先端の研究のなかで、以下の3つについて報告する。</p> <p><u>シュレーディンガー方程式の正確な解の一般的な解法</u>： 中辻は2000年より正確な波動関数の構造に関する研究を開始した。当初は基底関数展開の完全解を解くという観点で、世界的に多くの研究者がこれに続いた。その後、中辻はこの従来型の方法を越え、シュレーディンガー方程式(SE)を正確に解く一般的な解法を開発した。具体的には、Scaled SEに基づくFree ICI法を開発し、原子・分子系の電子状態について正確な解を求めることに成功した。さらに、複雑な多重積分を克服するために、Local SE法を提案し、より大きな分子系にこの理論を展開する方法を開発している。</p> <p><u>巨大系の電子状態理論</u>： ナノ材料や生体系等の巨大系を取り扱う様々な理論が開発されているが、電子相関理論に基づくものはLocal correlationの方法があり、それらは主に基底状態を対象とする方法である。最近、中辻は、巨大な分子性結晶・分子集合体・ポリマー・生体系の電子状態を、精度よく計算するための新たな理論、Giant SAC-CI法を開発した。この方法を応用し、光・磁場応答スイッチの提案がなされている。</p>	

理論精密分光： 励起状態を精密に記述する理論である SAC-CI 法は、プログラムの改良や新規のアルゴリズムの開発が行われ、極めて精密な理論分光や生体系・光機能性分子の光化学の研究が可能になった。一つの例として、有機 EL 分子や生体化学センサー分子の光電子過程について精密な研究を展開した。また、最先端の実験研究と協力し、様々な内殻電子過程における励起ダイナミクスを解明した。近年、この分野では TDDFT 法が広く応用されてきているが、定量性に問題がありやはり精密な理論が必要である。また、金属表面における分子の吸着状態やそのスペクトルについても精密に研究できることが示されている。

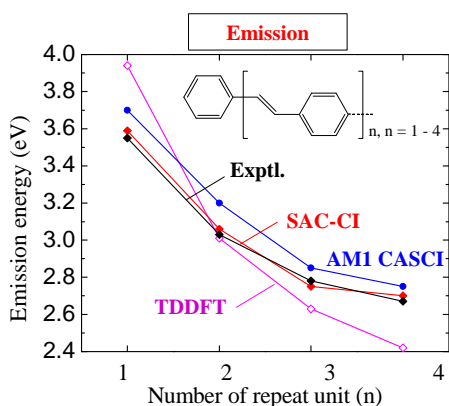


図. 有機 EL 分子の発光エネルギーの鎖長依存性

将来予測と方向性

- ・ 5年後までに解決・実現が望まれる課題
 - ・ 大きな多電子分子系のシュレーディンガー方程式の厳密な解法の確立
 - ・ 巨大系の電子状態理論の活用と分子設計
 - ・ 光機能性分子やその集積系・ポリマーの光学特性の精密な理論予測
 - ・ 表面-分子相互作用系における光学特性や光化学の理論的解明
- ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題
 - ・ シュレーディンガー方程式の厳密な解法による様々な化学現象の解明と理論予測、分子設計

キーワード

シュレーディンガー方程式の厳密解、巨大系、励起分子、光機能性分子、内殻電子過程

(執筆： 江原 正博、中辻 博)