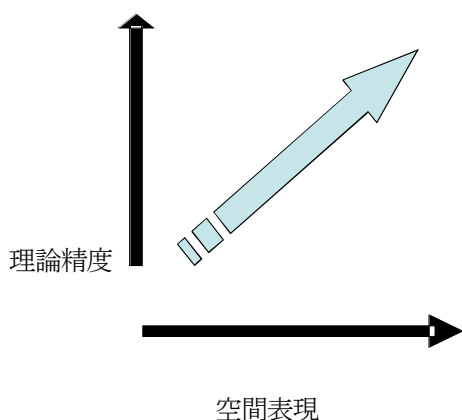


ディビジョン番号	3
ディビジョン名	理論化学・情報化学・計算化学

大項目	1. 理論化学
中項目	1-1. 電子状態
小項目	1-1-16. 分子物性

#### 概要（200字以内）

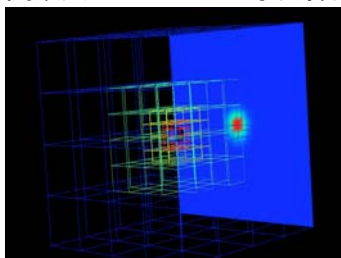
数原子から数十原子分子の電子物性予測は理論精度量子論的アプローチは分子定常状態に対する全エネルギー算定が主な武器であり、時間非依存シュレーディンガー方程式への理論的近似精度とシュレーディンガー方程式の解を求める空間の技術的近似にかかっている。理論（電子相関）面での大きな進歩に対し空間表現の技術的問題解決が必要となっている。現在、多重解像度解析の考え方などを取り入れた新しい空間表現の努力が進行している。



#### 現状と最前線

数原子から数十原子分子の定常電子状態計算の計算に対する理論（主に電子相関）はほぼ確立されてきたと考えても良く、この分野はいわゆる成熟期にはいるといえる。現代化学の要求と関心は然し、定常状態から非平衡、そしてナノ・メゾ領域でのシミュレーションへと移行してきている。数百原子分子以下の定常状態計算で良い指標となっていた全エネルギーがそこではほぼ無力なものとなるのは現在のデジタルコンピューティングのアルゴリズムと実変数精度の限界からも明らかである。当然実測にかかる物性を直接に算定する理論的枠組みが必要であるばかりでなく、物理空間とシミュレーションに使う近似空間の間関係についての数学的関係をより明確にしていく必要がある。隣接する分野である物性論では結晶やポリマーのモデルとして無限系を扱うため、物理空間表現に実空間のみならず運動量空間を使用することが多い。然し生体高分子、ゲル・ゾルといった柔ナノ構造体の運動量表現は有効ではない。量子化学の分野で伝統的に使われてきたガウシアン基底による空間表現は LCAO が良い近似である数百原子分子の定常状態計算に有効であり、電子間相互作用の標識である 2 電子積分計算での有効性も手伝ってここ 30 年来主流の手法となっている。

然し、非局在電子の表現などに限界がある。また比較的小さな分子でも、非定常状態のシミュレーションでは電子が核から離れた状況も記述しなければならないため、必ずしも効率の良い表現ではない。そこで空間のグリッド上で数値的に波動関数を評価する方法が現在増えている。また基底関数による展開においても LCAO の考え方にとらわれず、より数学的にシステムティックに関数空間を構築する方法が現れてきている。例えば有限要素法は局在基底関数で空間表現するため LCAO 法のような over-complete といった問題はない。最近では更に局在関数で構築された wavelet 基底により階層的に空間を構築する多重解像度多重ウェーブレット基底関数法による量子化学計算法も開発応用されている。下にウェーブレット基底の例を示す。



$$\phi_i(x) = \begin{cases} \sqrt{2i+1}P_i(2x-1) & 0 \leq x \leq 1 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

$$\phi_{ii}^n(x) = 2^{n/2}\phi_i(2^n x - l)$$

#### 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

ウェーブレット基底など非ガウシアン基底関数を用いた一般分子についての量子化学計算プログラムが普及する。

- ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題

非ガウシアン基底関数量子化学計算によって信頼に足るナノスケール物性計算及び非平衡物性算定が可能になる。

#### キーワード

非ガウシアン基底関数、ウェーブレット、多重解像度解析、ナノスケール、非平衡物性

(執筆者： 関野秀男 )