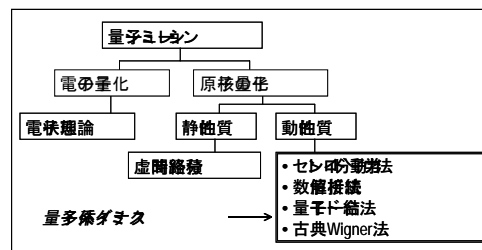


ディビジョン番号	3
ディビジョン名	理論化学・情報化学・計算化学ディビジョン

大項目	1. 理論化学
中項目	1-4. シミュレーション
小項目	1-4-2. 量子多体系ダイナミクス

概要（200字以内）

古典力学に基づく計算機シミュレーション手法は大きな発展を遂げ、現在では数十万原子系の大規模な計算も可能となってきている。しかしながら、水素など軽い原子を扱う場合や分子振動を議論する場合には量子力学に基づいた手法が必要となる。溶液内や表面上で起こる複雑な化学プロセスは本質的に多自由度量子系である場合が少なくなく、化学における多様性を記述する事が出来る量子多体系の方法論の開発が求められている。



量子シミュレーション

現状と最前線

興味ある化学プロセスの多くは環境との相互作用が無視できないなど本質的に多自由度量子系である場合が少なくなく、溶液内や表面上で起こる複雑な化学プロセスを簡単な数自由度のモデルで置き換えることには限界がある。化学における多様性を記述する事が出来る量子多体系の方法論の開発が望まれている。

静的な性質に関しては、虚時間経路積分モンテカルロ法により数百原子系でも数値的に厳密な解を得る事が可能であり、方法論として既に確立されている。しかし、動力学に関しては時間発展演算子の取り扱いが極めて困難であるため、数値的に厳密な解は数自由度の系までしか得ることができず、多自由度系の計算ではある種の近似に頼らざるを得ない。

ここ数年、量子多体系ダイナミクスの実用的な計算手法として様々な方法が提案された。具体的には、セントロイド分子動力学法、最大エントロピー法による数値解析接続法、量子系へ拡張されたモード結合法、古典 Winger 法などである。どの手法も実用性を重視しており、様々な系に適用され、活発な研究が進められている。しかし、これらの手法は近似における仮定も様々であり、標準的、一般的と呼ぶには程遠く、実験値との比較により精度を議論しているのが現状である。提唱された様々な方法論の相互関連性に関する理論的研究、さらに精度が高く汎用性のある新しい方法論の開発が強く望まれている。

他の課題としては、電子状態理論との融合が挙げられる。これまで量子ダイナミクスの研究は経験的なポテンシャルを用いて行われてきており、化学結合の解離・生成や分極等の効果を記述することができなかった。電子状態計算は負荷が重いため、効率的なアルゴリズム等の開発が必要となるであろう。

#### 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
  - ・ 電子状態理論との融合
  - ・ 様々な量子ダイナミクス手法の関連性の理論的研究
  
- ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題
  - ・ これまで無視されてきた量子コヒーレンスを取り入れた量子ダイナミクスの実用的方法論の開発
  - ・ 実在系への応用

#### キーワード

量子ダイナミクス、量子多体系、量子シミュレーション、半古典論、経路積分法

(執筆者： 中山 哲 )