

## 量子化学の先進的電子状態モデリングの開拓と分子科学シミュレーション



柳井 毅 (准教授)

1997年東京大学工学部応用化学科卒 1999年同大学院工学系研究科修士、2001年博士(工学) 2001年学術振興会博士研究員 2002年米国 Pacific Northwest 国立研究所、同年 Oak Ridge 国立研究所博士研究員、2005年 Cornell 大学博士研究員を経て2007年1月より現職  
TEL: 0564-55-7301 FAX: 0564-53-4660  
電子メール: yanait@ims.ac.jp

専門領域

機能分子科学専攻

分子科学は、物質とは何だろうか、という人類の知的探究心の延長線上で、物質を構成するユニットとして分子に着目し、物質の物理や化学現象のメカニズムを解明し体系を形成してきた、現代科学の大きな学術的分野です。当研究グループでは、分子の化学反応、物理現象の特徴的振る舞いを決めるものは「分子を構成する電子の状態にある」という観点から、興味ある研究対象は、分子の電子状態を解明することであり、たとえば分子軌道などを科学的尺度として、分子の電子状態を記述する量子化学的理論手法の開発と、分子科学への応用に関して研究を行っています。電子状態の量子論的モデリングが化学反応を解明した例としては、価電子の一電子的描像である分子軌道の量子論的記述に着目し、共役付加反応の立体的選択性のメカニズムを一般論として理論的に解明することに成功し、化学の世界に大きなブレイクスルーをもたらした、故福井謙一教授(ノーベル化学賞1981年)の功績が思い出されます。現代量子化学は、高度に理論的枠組みを拡張し、経験に基づく模型的電子状態理論からリアリスティックな電子状態理論へと発展し、理論的手法の高度な発達と計算機の高性能化により、*ab initio*(非経験的)電子状態法として、リアリスティックな電子状態を記述できる力強いテクノロジーへと成長し、応用範囲もますます広がり、エキサイティングな段階にあります。

当研究グループは、分子の構造や反応性の情報、化学的プロパティ(励起状態、その他物性、応答)を高い精度でプレディクトできる量子化学的電子状

態理論、そのスケーラブルで効率のよい計算手法を開発し、分子科学のサイエンティフィック・シミュレーションを実践します。特に、スタンダードな既存手法で取り扱えない複雑な電子状態に対して、先進的な手法開発にチャレンジし、世界に先駆けてその電子状態を解析することを目指します。当研究グループで開発する正準変換理論<sup>1,2)</sup>は、多重化学結合と解離、ポリマー、ナノチューブ、生体反応中心などの共役分子の光化学、金属化合物の電子状態などに表れる「複雑な電子状態(サイズに対して指数関数的に複雑化する)」を効率よく高精度に扱える強力な手法として開発を行っています。正準変換理論は、密度行列繰り込み群と組み合わせることで、複雑な電子状態問題(励起状態を含め)を対象として、いままでにない大規模でプレディクティブな電子状態計算を実現する可能性を秘めています。また、最近の成果として、分子の電子状態を膨大な数の電子配置を用いて表現できる多電子配置 SCF 法の新しい方法論(DMRG-CASSCF 法<sup>3)</sup>)を開発し、これまで取り扱えなかった大規模な電子状態の量子化学計算を実現しました。本手法を用いて、直鎖ポリエンに類似した生体分子のカロテンの $\pi$ - $\pi^*$ 励起状態の解析に応用し、実験では光検出が難しい状態も含めて、その電子状態を解明しました。以上のように、基礎的な技術開発の成果を統括的に用いて、よりリアルな分子科学の問題に挑戦し、新しい電子状態モデリング法を確立することを目指しています。

## 参考文献

- 1) T. Yanai and G. K.-L. Chan, "Canonical transformation theory for multireference problems," *J. Chem. Phys.* **124**, 194106 (16 pages) (2006).
- 2) T. Yanai and G. K.-L. Chan, "A Canonical Transformation Theory from Extended Normal Ordering," *J. Chem. Phys.* **127**, 104107 (14 pages) (2007).
- 3) D. Ghosh, J. Hachmann, T. Yanai and G. K.-L. Chan, "Orbital Optimization in Density Matrix Renormalization Group, with applications to polyenes and  $\beta$ -carotene," *J. Chem. Phys.* **128**, 144117 (14 pages) (2008).

