

## プロトン・デュートロンの基底関数に対する相関効果の影響

○石元孝佳<sup>1,2</sup>、立川仁典<sup>3</sup>、稲富雄一<sup>4</sup>、梅田宏明<sup>1,2</sup>、渡邊寿雄<sup>1,2</sup>、長嶋雲兵<sup>1,2</sup><sup>1</sup>産業技術総合研究所計算化学研究部門(〒305-8568 茨城県つくば市梅園 1-1-1)<sup>2</sup>科学技術振興機構(〒332-0012 埼玉県川口市本町 4-1-8)<sup>3</sup>横浜市立大学大学院総合理学研究科(〒236-0027 神奈川県横浜市金沢区瀬戸 22-2)<sup>4</sup>九州大学情報基盤センター(〒814-0001 福岡市早良区百道浜 3-8-33)

【緒言】水素結合系やプロトン(水素)移動反応など、多くの実験結果から原子核の量子力学的取り扱いの重要性が指摘されている。そこで我々は、一粒子波動関数の概念を電子だけでなく、質量の軽いプロトンやデューtronなどの多成分系に拡張した多成分分子軌道(MC\_MO)法を開発している[1]。このMC\_MO手法では、原子核の基底関数として、ガウス型関数(GTF)が用いられているため、我々はプロトンやデューtronに対するGTF中に含まれる軌道指数、軌道中心の解析から原子核に対する基底関数決定した[2]。しかしながら、原子核の量子性、さらには水素結合などの柔軟な描写のためには、電子-電子、電子-核相関が原子核の基底関数に与える影響を解析することが重要である。そこで本研究では、相関効果がプロトン・デューtronに対するGTF中の軌道指数に与える影響を解析した。

【方法】本研究では、BH<sub>3</sub>, CH<sub>4</sub>, NH<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>O, HF、およびこれらの重水素置換体を取り上げた。分子中に含まれる全てのプロトン・デューtronの基底関数には[1s], [1s1p]GTFを設定し、軌道指数( $\alpha$ )、軌道中心(R)を最適化した。電子の基底関数には、3-21G, 6-31G, 6-31G(d,p), 6-31++G(d,p)を使用し、すべての計算はMC\_MO-MP2 レベルで実行した。

【結果】Table 1 には MC\_MO-MP2 レベルで最適化した[1s]および[1s1p]GTF中の $\alpha$ の値を示した。MC\_MO-HFの計算結果に比べて、[1s]GTFでは大きな変化は見られないものの、[1s1p]GTF中の $\alpha$ 値は電子-核相関の影響で大きく減少した。プロトン・デューtronの基底関数に対する相関効果の詳細な解析は当日報告する。

Table 1 Optimized exponent ( $\alpha_s$  and  $\alpha_p$ ) values in the [1s] and [1s1p] GTFs for the proton and deuteron of various H- and D-compounds using the 6-31G(d,p) electronic basis function.

H-Compounds			BH <sub>3</sub>	CH <sub>4</sub>	NH <sub>3</sub>	H <sub>2</sub> O	HF	$\alpha_{ave}$
HF	[1s]	$\alpha_s$	24.2590	24.6317	24.5875	24.1503	23.2838	24.1825
	[1s1p]	$\alpha_s$	24.2726	24.6270	24.5923	24.1378	23.2906	24.1841
		$\alpha_p$	23.0000	23.5040	23.5015	22.9924	23.0078	23.2011
MP2	[1s]	$\alpha_s$	24.3872	24.5263	24.3331	23.8004	22.9689	24.0032
	[1s1p]	$\alpha_s$	21.0827	21.2506	21.0339	20.2756	19.3130	20.5912
		$\alpha_p$	22.1053	22.1196	21.8066	21.4476	20.8439	21.6646
D-Compounds			BD <sub>3</sub>	CD <sub>4</sub>	ND <sub>3</sub>	D <sub>2</sub> O	DF	$\alpha_{ave}$
HF	[1s]	$\alpha_s$	35.7108	36.2355	36.2366	35.5549	34.3693	35.6214
	[1s1p]	$\alpha_s$	35.6995	36.2244	36.2071	35.5565	34.3518	35.6079
		$\alpha_p$	33.9997	33.9638	34.4786	33.9938	34.0089	34.0890
MP2	[1s]	$\alpha_s$	35.8979	36.0954	35.8342	35.0317	33.9014	35.3521
	[1s1p]	$\alpha_s$	31.0578	31.2537	30.8827	29.7102	28.2628	30.2334
		$\alpha_p$	32.0254	32.1358	31.9922	31.6356	30.6957	31.6969

## 参考文献

[1] M. Tachikawa, *Chem. Phys. Lett.* **360**, 494 (2002).[2] T. Ishimoto, M. Tachikawa, and U. Nagashima, *Int. J. Quantum Chem.*, **106**, 1465 (2006).