

## MC\_MO-full-CI 法による水素分子のエネルギー計算

○石元孝佳<sup>1,2</sup>、立川仁典<sup>2,3</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トロン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]。また最近では、精度よく系のエネルギーを記述するために、量子論的に取り扱った原子核の運動エネルギー項から並進と回転を取り除く手法が提案されている[2]。我々はすでに Hartree-Fock (HF) レベルの MC\_MO 法における運動エネルギー項から並進・回転運動を取り除くことに成功した。さらに完全変分型分子軌道(FVMO)法[3]を用いて、原子核のガウス型関数(GTF)中に含まれる最良な軌道指数を決定した[4]。そこで本研究では、本手法を configuration interaction (CI) レベルの MC\_MO 法に拡張した。また、電子-電子、電子-核相関の影響を検討した。

## 【方法】

本研究では、H<sub>2</sub>, D<sub>2</sub>, HD分子を取り上げ、電子・核ともに量子論的に取り扱った。全てのプロトン・デュートロンの基底関数には[1s], [1s1p], [1s1p1d]GTFを設定し、軌道指数( $\alpha$ )、軌道中心(R)を最適化した。

## 【結果】

Figure 1 には、H<sub>2</sub>分子に対して並進、並進・回転運動を取り除き、軌道指数、軌道中心を最適化した際のMC\_MO-HFおよびMC\_MO-full-CI計算のエネルギーを示した。このときのプロトンには[1s1p1d]GTFを設定した。MC\_MO-HFの結果とは異なり、MC\_MO-full-CI計算では、電子の基底関数が大きくなるとエネルギーが大きくなり安定化した。

軌道指数、構造パラメータについての詳細はD<sub>2</sub>およびHD分子についての計算結果と合わせて当日報告する。

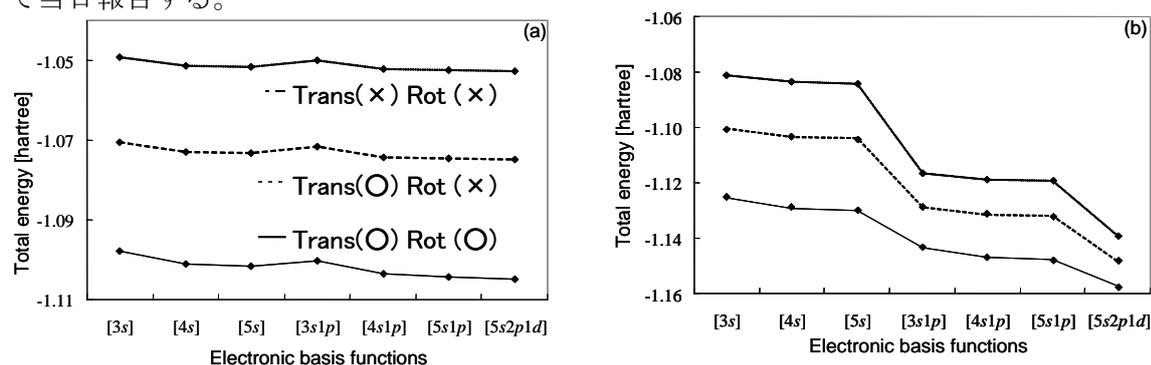


Figure 1 Total energy of H<sub>2</sub> molecule obtained by MC\_MO-HF (a) and MC\_MO-full-CI (b) methods using protonic [1s1p1d] GTF with various electronic basis functions

## 参考文献

- [1] M. Tachikawa, *Chem. Phys. Lett.* **360**, 494 (2002).
- [2] H. Nakai, M. Hoshino, K. Miyamoto, and S. Hyodo, *J. Chem. Phys.*, **122**, 164101 (2005).
- [3] M. Tachikawa, K. Taneda, and K. Mori, *Int. J. Quantum Chem.*, **75**, 497 (1999).
- [4] T. Ishimoto, M. Tachikawa, and U. Nagashima, *Int. J. Quantum Chem.*, accepted.