

多成分分子軌道法によるH₂分子のエネルギー計算○石元孝佳^{1,2}、立川仁典³、稲富雄一⁴、梅田宏明^{1,2}、渡邊寿雄^{1,2}、長嶋雲兵^{1,2}¹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)²科学技術振興機構(〒332-0012 埼玉県川口市本町 4-1-8)³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)⁴九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]。この MC_MO 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、完全変分型分子軌道(FVMO)法[2]によって最良な軌道指数・軌道中心の決定を行ってきた。これまでに最適化された原子核の GTF 中に含まれる軌道指数の値が核の量子的な振る舞いを化学的・物理的に理解するうえで重要な役割を果たしていることを明らかにしてきた。一方、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[3]。そこで本研究では、MC_MO 法と FVMO 法を用いて原子核からの並進・回転エネルギーの分離がプロトン・デュートロンに対する 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、H₂, D₂分子を取り上げ、電子・核ともに量子的に取り扱った。全てのプロトン・デュートロンの基底関数には[1s], [1s1p], [1s1pd]GTFを設定し、軌道指数(α)、軌道中心(R)を最適化した。

【結果】

Figure 1 にはH₂分子に対して並進、並進・回転エネルギーを取り除き、軌道指数を最適化した際のMC_MO-HF法の計算結果を示した。並進・回転エネルギーを取り除くことで約 0.05 [hartree]の安定化が見られた。軌道指数、構造パラメータについての詳細はD₂分子と合わせて当日報告する。

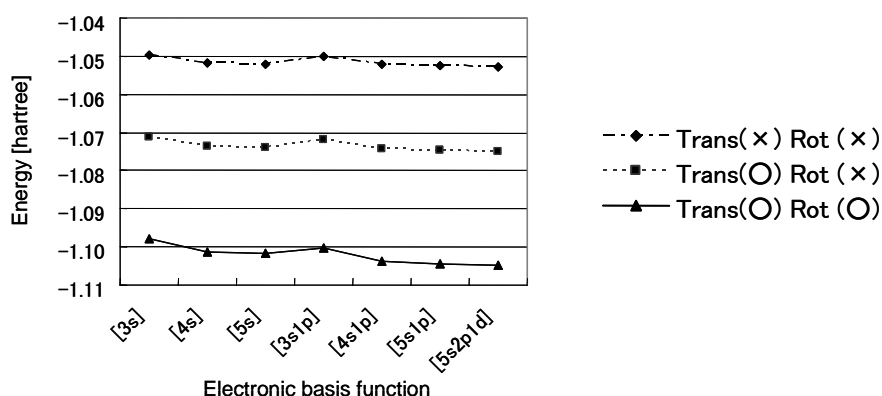


Table 1 Total energies obtained by MC_MO-HF method using protonic [1s1pd] GTFs with various electronic basis functions.

参考文献

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