

多成分分子軌道法を用いた水素分子のエネルギー計算
 ○石元孝佳・立川仁典・稲富雄一・梅田宏明・渡邊寿雄・長嶋雲兵
 (産総研・JST-CREST・横浜市大院総合理学・九大基盤センター)
 E-mail: t.ishimoto@aist.go.jp

【緒言】

水素結合系やプロトン(水素)移動反応等においては、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: multi-component molecular orbital)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: Gaussian-type function)が用いられているため、完全変分型分子軌道(FVMO: fully variational MO)法[2]によって最適な軌道指数・軌道中心の決定が可能となる。これまでに原子核のGTFに含まれる最適化された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すことを明らかにしてきた[3]。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、量子力学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[4]。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検討した。

【方法】

本研究では、 H_2 , D_2 分子を取り上げ、電子・核ともに量子力学的に取り扱った。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(α)、軌道中心(R)を最適化した。

【結果】

Figure 1には H_2 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。このときプロトンには[1s1p1d]GTFを設定した。並進エネルギーを取り除くことで約 0.02 [hartree]、さらに回転エネルギーを取り除くことで約 0.03 [hartree]の安定化が見られた。軌道指数および構造パラメータについての詳細は D_2 分子と合わせて当日報告する。

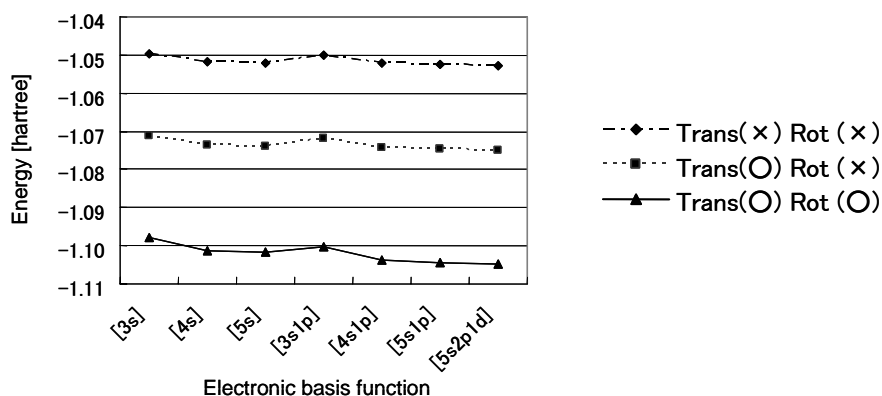


Table 1 Total energies obtained by MC_MO-HF method using protonic [1s1p1d] GTFs with various electronic basis functions.

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] T. Ishimoto, M. Tachikawa, and U. Nagashima, *J. Chem. Phys.*, **125**, 144103 (2006).
 [4] H. Nakai, M. Hoshino, K. Miyamoto, and S. Hyodo, *J. Chem. Phys.*, **122**, 164101 (2005).