

2023 年度年次報告書

物質探索空間の拡大による未来材料の創製

2023 年度採択研究代表者

浦谷 浩輝

京都大学 大学院工学研究科／科学技術振興機構

特定助教／さきがけ研究者

量子ダイナミクスを理解と制御に立脚した機能材料設計の実現

## 研究成果の概要

量子ダイナミクスに基づく物質機能設計や反応制御を実現するには、複雑な化学構造を有する系に適用可能な量子ダイナミクスシミュレーション手法(計算機を用いて時間依存シュレーディンガー方程式を解き、系の時間変化を追跡する手法)が必要である。本年度は、この目的を達するための手法定式化およびプログラム開発を進めた。具体的には、単一の電子配置を用いて励起状態を近似的に表すことにより、(従来多くの計算時間を要していた)固有値方程式を解く計算を不要とし、計算コストの大幅な低減を図った量子ダイナミクスシミュレーションアルゴリズムを定式化した。また、開発したアルゴリズムをプログラムとして実装し、実際に動作させた。アセトアルデヒド分子の一重項最低励起状態を対象として数値検証を行ったところ、励起状態の性質から予想される通り、C=O 二重結合の伸長およびそれに続く伸縮運動が観察された。また、この挙動は従来法(固有値方程式を解く手法)の結果とも定性的に一致するものであった。さらに、保存量である系の電子数がシミュレーション全体を通して一定に保たれたことから、時間依存シュレーディンガー方程式を数値的に正しく解けていることが確かめられた。本成果により、複雑な化学構造を扱える量子ダイナミクスシミュレーション手法の完成に向けた技術的課題のうち、特に重要かつ困難なものを解決できたと考えられる。その他、理論計算に基づき各種の領域内共同研究を実施した。具体的には、ワイヤ状多核錯体における光励起状態に関する量子化学計算を行い、励起子の空間的分布やユニット間相互作用の大きさを定量的に見積もり、実験データを裏付けることに成功した。また、同じく量子化学計算を用い、ナノカーボン及びゼオライトにおける昇温脱離分析結果の解析に着手した。さらに、電子顕微鏡により観察される特異な結晶相の安定性解析に着手した。