

量子技術を適用した生命科学基盤の創出
平成29年度採択研究者

2018年度
実績報告書

鬼頭 宏任

科学技術振興機構
さきがけ研究者

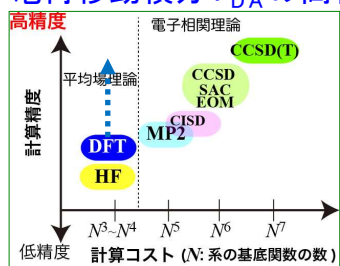
量子シミュレーション技術による未知の生体電子移動/機能発現の探索

§ 1. 研究成果の概要

生体内の電子移動反応速度や有機半導体の電気伝導などを理論的に評価するためには、移動積分やサイトエネルギーなどの主要な電荷移動パラメータを、構成有機分子のモフォロジーや電子状態から決定する必要がある。本研究では、非経験的に距離分割パラメータを最適化した長距離補正密度汎関数法(NET-LC-DFT)を用いて、電荷移動積分(T_{DA})が低計算コストかつ高精度に求めることが可能であることを明らかにした [H. Kitoh-Nishioka and K. Ando, *J. Phys. Chem. C* **2019**, *123*, 11351]。検証には、多参照摂動理論などの計算負荷の非常に大きい高精度電子状態計算法を用いて作成された有機分子二量体に対する移動積分データセット、HAB11(ホール移動積分)と HAB7-(電子移動積分)を用いた。

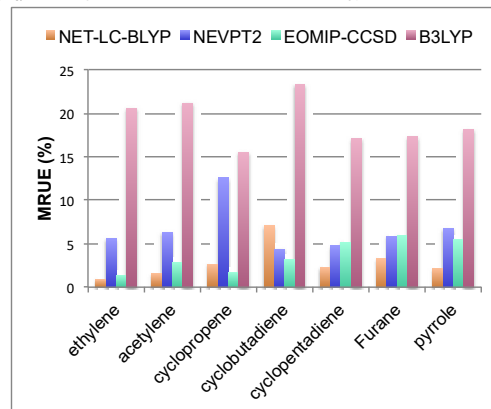
まず、NET-LC-DFT 法からデータセットの有機分子のフロンティア軌道エネルギーを求め、その値がイオン化ポテンシャルエネルギーの実験値や電子親和力の高精度計算値と良く一致することを確かめた。このフロンティア軌道間の相互作用として T_{DA} を計算した結果、参照データからの誤差(mean relative unsigned errors, MRUEs)は、HAB11 に対しては 3.2%、HAB7-に対しては 7.3% となり、他の手法を使ったベンチマーク計算よりも、最も高精度な結果になっている。

電荷移動積分 T_{DA} の高精度DFT計算 (*J. Phys. Chem. C* 2019, 123, 11351)

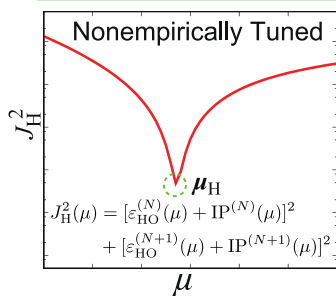


非経験的に距離パラメーターを最適化した
長距離補正密度汎関数理論 (NET-LC-DFT) のベンチマーク計算

移動積分の参照値(MRCI+Q)からの誤差MRUE(%)

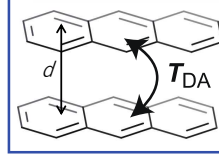


$$MRUE = \left(\sum_{i=1}^n |X_{Calc,i} - X_{Ref,i}| / X_{Ref,i} \right) / n$$



LC-BLYP with μ_H

HAB11 & HAB7-



§ 2. 研究実施体制

①研究者: 鬼頭 宏任 (科学技術振興機構 さきがけ研究者)

②研究項目

- ・プログラム作成
- ・量子化学計算、分子動力学シミュレーションの実行
- ・データ解析