

【研究課題名】

感応性化学種が持つ中間的な電子構造とその反応に関する理論的研究

【各研究項目の連携状況】

領域内の他の研究グループとの連携状況（予定を含む）について、①簡略化した共同研究内容②連携研究代表者姓（研究項目班）③共著論文の有無（件数）を研究内容毎に記載

①新しいジラジカルの量子化学計算法の開発、②中野雅由(A01)、③無

【研究費の使用状況（設備の有効活用、研究費の効果的使用）】

原子数が比較的多い感応性化学種の高精度量子化学計算を行うために、計算サーバー式（2ノード）を購入した。1ノードの性能は、計算機センターのスーパーコンピュータのものと同等、またはそれ以上であり、研究の進展に大いに役立っている。

【原著論文】

1. H. Nishizawa, Y. Nishimura, M. Kobayashi, S. Irle, *H. Nakai, “Three Pillars for Realizing Quantum Mechanical Molecular Dynamics Simulations of Huge Systems: Divide-and-Conquer, Density Functional Tight-Binding, and Massively Parallel Computation”, *J. Comput. Chem.* **37**, 1983-1992 (2016).
2. *M. Kobayashi, T. Taketsugu, “Divide-and-Conquer Hartree–Fock–Bogoliubov Method and Its Application to Conjugated Diradical Systems”, *Chem. Lett.* **45**, 1268-1270 (2016).

【総説・解説】

1. 小林 正人, 「分割統治(DC)法による $O(N)$ 電子状態計算と MD シミュレーション」, 分子シミュレーション研究会会誌「アンサンブル」 **18** (2), 90-94 (2016).

【著書】

1. 小林 正人, 「大規模量子化学計算」, 計算科学のための HPC 技術 2, 大阪大学出版会, 第7章 (2017).