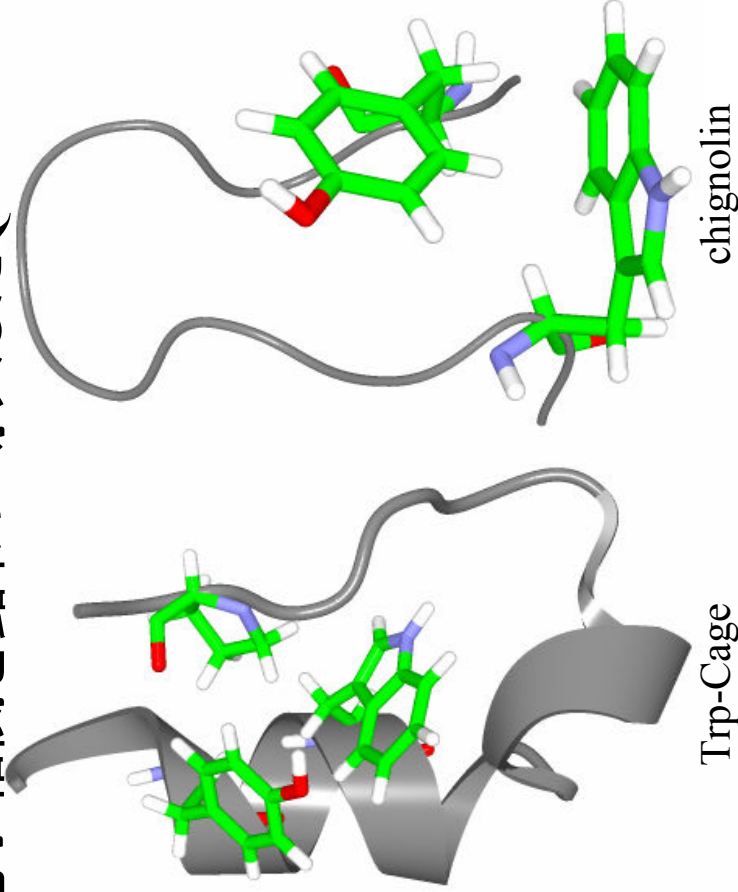


電子相関を露わに導入したQM/MMレプリカ交換・分子動力学計算法の開発



芳香環同士の相互作用 ($\pi-\pi$ 相互作用)
が頻繁にみられる

電子相関が大きく寄与

古典のハミルトニアンには露わに記述されない

Binding Energy (kcal/mol)			
MM	HF	DFT	CCSD
-1.423	-0.062	-0.236	-4.390

電子相関の効果を露わに取り込むことが必須

ALL汎関数 ...

電子密度からvdW相互作用を再現する

$$E_{\text{vdw}}^{\text{ALL}} = -\frac{6}{(4\pi)^{3/2}} \iint d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \frac{\rho^{1/2}(\mathbf{r}_1) \rho^{1/2}(\mathbf{r}_2)}{\rho^{1/2}(\mathbf{r}_1) + \rho^{1/2}(\mathbf{r}_2)} \frac{1}{r_{12}^6}$$

電子密度をガウス関数の重ね合わせで表現

$$\rho(\mathbf{r}) = q_i \pi^{-3/2} a_i^3 \exp(-a_i^2 (\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)^2)$$

エネルギー関数へのALL汎関数の導入

$$\sum_{i < j}^{\text{atoms}} \frac{q_i q_j}{\epsilon R_{ij}} + \sum_{i < j}^{\text{atoms}} \frac{A_{ij}}{R_{ij}^{12}} - \frac{B_{ij}}{R_{ij}^6}$$

$$\sum_{i < j}^{\text{atoms}} \frac{q_i q_j}{\epsilon R_{ij}} + \sum_{i < j}^{\text{atoms}} \frac{A_{ij}}{R_{ij}^{12}} - E_{\text{vdw}}^{\text{ALL}}$$