

新学術領域「コンピューティクスによる物質デザイン：複合相関と非平衡ダイナミクス」
計画研究「A02-5：第一原理分子動力学法による構造サンプリングと非平衡ダイナミクス」

ハートリー・フォック擬ポテンシャルの作成とそのトランスコリレイティッド法への適用

Construction of Hartree-Fock pseudopotentials and its applications to the transcorrelated method

山本良幸¹、合田義弘¹、常行真司^{1,2}

Y. Yamamoto¹, Y. Gohda¹, S. Tsuneyuki^{1,2}

¹ 東京大学大学院理学系研究科物理学専攻、² 東京大学物性研究所

¹Department of Physics, The University of Tokyo, Tokyo, 113-0033, Japan

²Institute for Solid State Physics, The University of Tokyo, Chiba, 277-8581, Japan

近年注目を集めている第一原理電子状態計算手法としてトランスコリレイティッド法 (TC 法) が挙げられる。TC 法は波動関数理論の一種であり、ジャストロー・スレーター型の多体波動関数のスレーター行列式の部分を比較的 low cost で最適化できるという特徴を持つ。現在固体の TC 法の計算では密度汎関数理論 (DFT) の局所密度近似 (LDA) に基づいた擬ポテンシャルが用いられており、これは本来 TC 法に基づく擬ポテンシャルを用いるべきである。LDA の擬ポテンシャルを用いた TC 法の計算はバンド構造をよく予言でき成功を収めているが、格子定数を非常に小さく見積もってしまう傾向があり、その原因の一部は擬ポテンシャルにあると考えられる。

そこで本研究では TC 法に向けた擬ポテンシャルとして、TC 法と同じ波動関数理論であるハートリー・フォック法 (HF 法) の擬ポテンシャルを作成し、TC 法に適用した。標準的な方法で作成した HF 法の擬ポテンシャルは遠方で定数項の寄与が残るなどの問題があるため、遠方での振る舞いを修正する手法が必要となる [1]。HF 法の交換相互作用は DFT における Heyd-Scuseria-Ernzerhof 汎関数などの hybrid 汎関数を用いた計算にも出てくるため、HF 法の擬ポテンシャルの作成手法はこれらの方法による擬ポテンシャル作成のひな形としても有用である。TC 法の固体 Si の計算で LDA の擬ポテンシャルの代わりに HF 法の擬ポテンシャルを用いた結果、バンド構造はバンドギャップの実験値からのずれが 0.5eV から 0.4eV になるなど全体的に 0.1eV 程度のずれが見られ、格子定数は実験値からのずれが 0.11 Å から 0.02 Å となり大幅の改善が見られた。

[1] J. R. Trail and R. J. Needs, *J. Chem. Phys.* **122**, 014112 (2005).