

非直交基底による実質的に厳密な多体系量子状態計算手法
Electron-electron correlation energy calculations by superposition of
nonorthogonal Slater determinants

後藤英和、佐々木晃、広瀬喜久治

H. Goto, A. Sasaki and K. Hirose

大阪大学 大学院工学研究科 精密科学・応用物理学専攻
Department of Precision Science & Technology, Osaka University

非直交基底を用いて多体系の量子状態を高精度かつ高効率に求める手法のコード作成を行い、少数電子系に適用し性能を評価した[1-4]。多体波動関数を非直交 Slater 行列式の線形結合で表わす本手法は、共鳴ハートリーフォック (res-HF: Resonating Hartree Fock) 法 [5] の考え方に基いており、直交基底による全ての励起配置を用いる配置間相互作用 (FCI: Full Configuration Interaction) 法よりも少ない数の Slater 行列式で基底状態を表現できる [6-10]。今回、1 電子波動関数に線形独立な複数の修正関数を加え、その重み係数を変分原理により最適化することで非直交な 1 電子波動関数系を生成する方法を提案し、収束性などの評価を行った。図 1 は、HF 分子における Slater 行列式の数と相関エネルギー取込率との関係であり、修正関数の数 N_c の増加により収束性が向上していることがわかる。また図 2 では、100 個以下の Slater 行列式で実質的に厳密な HF 分子のポテンシャルエネルギー曲線が得られることを示している。今後、プロトンやミュオンを含む多体システムの量子状態計算に適用してゆく。

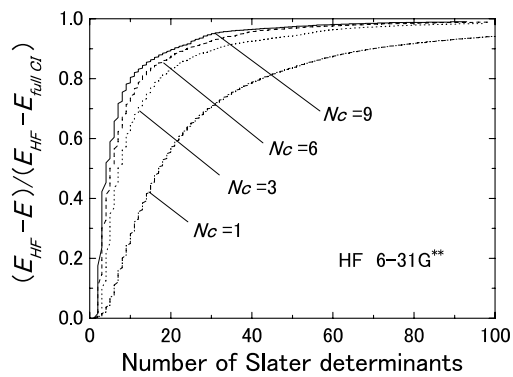


図 1. HF 分子における Slater 行列式の数と相関エネルギー取込率との関係

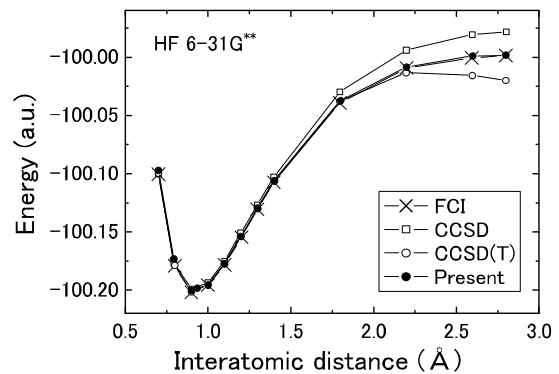


図 2. HF 分子のポテンシャルエネルギー曲線

- [1] A. Sasaki, M. Kojo, K. Hirose and H. Goto, J. Phys.: Condens. Matter **23** (2011) 434001.
- [2] H. Goto and K. Hirose, J. Nanosci. Nanotechnol. **11**, 2997 (2011)
- [3] H. Goto and K. Hirose, J. Phys.: Condens. Matter **21**, 064231 (2009)
- [4] H. Goto, T. Yamashiki, S. Saito and K. Hirose, J. Comput. Theor. Nanosci. **6**, 2576 (2009)
- [5] H. Fukutome, Prog. Theor. Phys. **80**, 417 (1988)
- [6] T. Kashima and M. Imada, J. Phys. Soc. Jpn. **70**, 2287 (2001)
- [7] Y. Noda and M. Imada, Phys. Rev. Lett., **89**, 176803 (2002)
- [8] 渡辺真仁、水崎高浩、今田正俊、固体物理、**39**, 1 (2004)
- [9] M. Kojo and K. Hirose, Surf. Interface Anal. **40** (2008) 1071.
- [10] M. Kojo and K. Hirose, Phys. Rev. A **80** (2009) 042515.