

多体系量子状態計算手法の開発

A Study of Correlation Energy Calculation Method for Coulombic Many-Body Systems

後藤英和

Hidekazu Goto

大阪大学 大学院工学研究科

Graduate School of Engineering, Osaka University, Suita Osaka 565-0871

非直交スレーター行列式(SD)による基底セットを作成しつつ、初期波動関数を基底解に収束させる方法の開発を行っている。[1-6]。非直交基底を用いることで、配置間相互作用(FCI)法よりも劇的に少ない数のSDで基底状態を表現できることがわかっている [7-9]。これまでに、1電子波動関数に複数の修正関数を加え、その重みを変分原理に基づいて決定する方法を提案し(図1)コードの作成と改良を行ってきた。少数電子系においては、滑らかに厳密解に収束すること、系の大きさに対するスレーター行列式数の増加率が緩やかであることがわかっている。簡単な分子については、相関エネルギーの99%以上を100個以下のスレーター行列式で計算することが可能であった(図2)。今回、計算コストの大きいハミルトニアン行列要素の更新方法などに改良を加え、収束特性や計算時間の評価を行った。

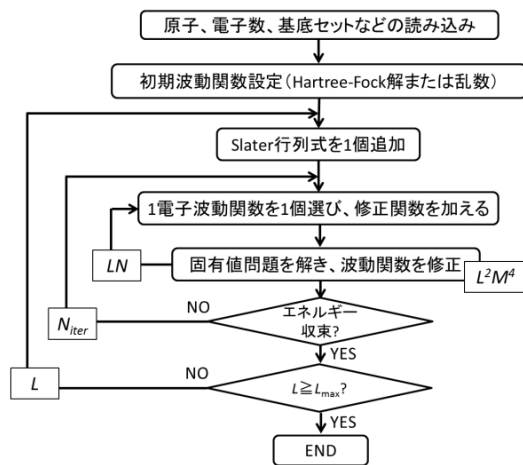


図1 計算の流れと主な計算コスト

$N$ : 電子数  $L$ : SD の数  $M$ : 基底関数の数  
 $N_{iter}$ : 更新数

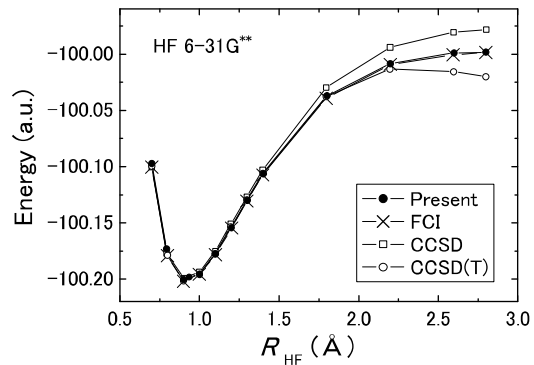


図2 HF 分子のポテンシャル曲線  
 修正関数の数:  $N_c=6$  基底関数:  
 6-31G\*\*

[1] H. Goto and K. Hirose, J. Phys.: Condens. Matter 21, 064231 (2009)  
 [2] H. Goto, T. Yamashiki, S. Saito and K. Hirose, J. Comput. Theor. Nanosci. 6, 2576 (2009)  
 [3] H. Goto and K. Hirose, J. Nanosci. Nanotechnol. 11, 2997 (2011)  
 [4] A. Sasaki, M. Kojo, K. Hirose and H. Goto, J. Phys.: Condens. Matter 23, 434001 (2011)  
 [5] A. Sasaki, K. Hirose and H. Goto, Curr. Appl. Phys., 12, S96-S99 (2012)  
 [6] H. Goto, M. Kojo, A. Sasaki and K. Hirose, Nanoscale Research Letters, 8:200 (2013)  
 [7] H. Fukutome, Prog. Theor. Phys. 80, 417 (1988)  
 [8] Y. Noda and M. Imada, Phys. Rev. Lett., 89, 176803 (2002)  
 [9] T. Kashima and M. Imada, J. Phys. Soc. Jpn. 70, 2287 (2001)