

対称テンソル分解による多電子系の電子状態の研究

植村渉、杉野修

物性研究所

ISSP, The University of Tokyo, Kashiwanoha 5-1-5, Kashiwa, 277-8581, Japan

この発表では、われわれは対称テンソル分解(STD)により、多電子系の波動関数がコンパクトに表現され、厳密対角化である完全 CI 計算の結果が少ない項数の STD で表わされることを紹介する。[1] われわれの手法である STD-CI では、われわれは CI 法での各項の係数である反対称テンソルを対称テンソルと置換テンソルの積で表わし、対称テンソルに STD を適用する。このとき波動関数は軌道数と等しい次元のベクトル、および基底関数の上で展開される各軌道を表わす規格直交行列によって与えられる。与えられるハミルトニアンに対して基底エネルギーを求めるために、これら二種類のパラメータは変分法によって決定される。STD-CI の計算コストは軌道数と項数に対して多項式で与えられることが分かっており、これは従来の完全 CI 計算における階乗的な計算コストから大幅に減少している。これにより、極めて小さな系に限られていた完全 CI 計算が、より大きな系へ拡大されることになる。今回の発表では、いくつかの小規模分子とハバードモデルでの結果を紹介する。

[1] W. Uemura and O. Sugino, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 253001 (2012).