

論文の内容の要旨

論文題目 Explicitly Correlated Coupled-Cluster Methods
(露に相関した結合クラスター理論)

氏 名 塩崎 亨

理論化学の最大の課題は、現時点では小さな系でしか行うことのできないプレディクティブな理論計算を、化学反応などのモデルとして通常必要な 100 原子規模で行うための、理論やアルゴリズムの開発である。しかしながらこのような系においてプレディクティブな計算を行うためには、電子相関を取り込むための計算コスト増大と、巨大な基底関数を用いることによるコスト増大に、ともに対処しなければならない。本博士研究はこのうち後者に対するアプローチとして、電子間距離に露に依存する項を導入する“R12 法”と、高レベル電子相関法である結合クラスター法 (CC 法) を融合させた新しい方法 (CC-R12 法) を実現した。電子間距離を含む項は、波動関数の電子-電子カスプを記述するのに有効であり、基底関数のサイズに対する収束を速める。この CC-R12 法の実現には、本研究で開発された自動実装法が本質的な役割を果たした。CC-R12 法による精密計算は、同じ精度を与える従来の CC 法における計算に比して、数桁ほど小さな計算コストで行うことができる。本研究で実現された CCSD-R12, CCSDT-R12, CCSDTQ-R12 法からなるヒエラルキーは、今後の高精度電子相関理論の礎となると期待できる。またそのほか、CC-R12 法に対する新しい近似法の導入、R12 法に特有な特殊二電子積分の評価のための効率的なアルゴリズムの開発、R12 法の周期境界系への拡張、さらには数値グリッド表現による核-電子カスプを適切に表現したハートリーフック法が新たに提案された。本博士研究は、これらの成果を通して、プレディクティブな理論化学計算のドメインを格段に拡大したといえる。