

1P108

モデル系及び分子系における線形応答関数を用いた  
Nearsightedness of electronic matterの研究

阪大院理

○丸山 智大, 大成 仁太, 満田 祐樹, 山中 秀介, 川上 貴資, 奥村 光隆

**Theoretical study of nearsightedness of electronic matter  
based on linear response function for finite model systems**

○Tomohiro Maruyama, Jinta Oonari, Yuki Mitsuta, Shusuke Yamanaka,  
Takashi Kawakami, Mitsutaka Okumura  
*Department of Chemistry, Osaka University, Japan*

**【Abstract】**

In many contemporary approximations for large molecular systems such as quantum mechanical/molecular mechanical (QM/MM) and divide-and-conquer calculations, we assume that the system can be divided into several subsystems. This assumption relies on a concept called nearsightedness of electronic matter (NEM) proposed by Kohn and Prodan [1,2]. They examined NEM of infinite periodic systems, but not of finite systems on the basis of linear response functions (LRF). In this study, we examined whether NEM holds for finite systems. For this purpose, we calculated LRFs of finite model systems not only with constant  $N$  (the number of electrons) but also with constant  $\mu$  (the chemical potential). Our calculations revealed that, as the (average) number of electrons increase, the LRF gradually becomes localized (i.e. NEM holds) for both cases. In addition, the difference between the two cases (constant  $N$  and constant  $\mu$ ) becomes negligible.

**【序】**

今日、巨大分子系に対する多くの量子化学計算では、分割統治法、局所密度近似、QM/MM 法など、巨大系の部分系への分割可能性を仮定している。この仮定は、Kohn らの NEM という概念に立脚している[1,2]。実際、彼らは周期ポテンシャルを持った無相関多電子系において NEM が成立することを示した [2]。ただ有限系での NEM の成立の可否は自明ではなく、実際に Kohn らは数電子系では NEM が成立しない事を指摘している[2]。そこで我々はこれまでに、有限系において粒子数一定の条件下の線形応答関数を計算することによって NEM の成立の可否を吟味して来た[3,4]。本研究では、さらに本来の NEM の条件である化学ポテンシャル一定での線形応答関数に基づいて NEM の成立を吟味し、粒子数一定の系の場合との比較を行った。

**【方法 (実験・理論)】**

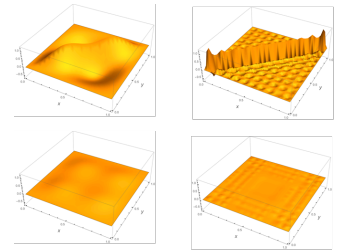
系としては、井戸型ポテンシャル、調和振動子型ポテンシャル、中心力場ポテンシ

ヤルの多電子系を扱い、Kohn らの系と同様電子間反発は無視した。線形応答関数  $\delta\rho(x)/\delta v(y)$  ( $y$  に仮想摂動を加えた場合の  $x$  での密度応答) 計算は Mathematica で行った。

### 【結果・考察】

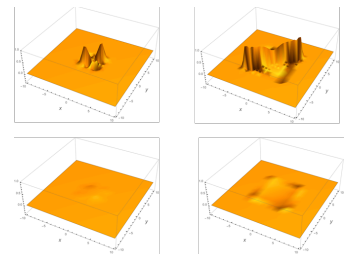
Fig.1 に井戸型ポテンシャルの線形応答関数の計算結果を、Fig.2 に調和振動子の線形応答関数の計算結果を示す。それぞれの図で上段は粒子数(N)一定の条件下での線形応答関数、下段は各化学ポテンシャル( $\mu$ )一定の場合と N 一定との差をプロットしている(下段の括弧内は平均粒子数である)。いずれの場合にも補正項は N 一定の条件下の線形応答関数に比べて小さいことがわかる。また、粒子数一定の条件下での線形応答関数は粒子数が増えるにしたがって応答が局在化するのに対して、補正項は局在化していないが、これらを合わせた結果  $\mu$  一定下の線形応答関数は前者の効果が支配的であり、平均粒子数が大きくなるにつれて局在化する(NEM が成立する)事がわかる。

Fig.3 は主量子数  $n=5$  の場合の中心力場の線形応答関数の値を、摂動を加える場所と観測する場所の距離  $x$ 、経度を同じものとし、 $x$  と摂動を加えた場所と応答を観測した場所の緯度の差  $t$  に対してプロットしたものである。この図から、摂動を加えた場所と応答を観測する場所が異なっても(緯度の差  $t$  が 0 でない) 応答が見られる部分がある。これは p 軌道や d 軌道などの原子軌道を通じて摂動が応答を加えた場所から離れた場所に伝わっているからであると考えられる。つまり、粒子数があまり大きくない系に対する線形応答関数では軌道依存、すなわち系の構造に依存した非局所応答が見られた。ただ、この非局所応答も、粒子数が大きくなるにつれて小さくなり、このことから中心力場においても粒子数が大きくなると NEM が成立することが分かった。



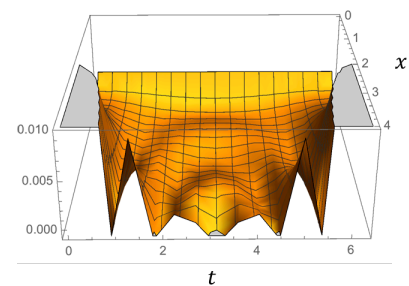
$$\mu = \frac{5\pi^2}{2} (N=2) \quad \mu = \frac{221\pi^2}{2} (N=20)$$

**Fig. 1.** Linear response functions of square-well potential systems.



$$\mu = 4 (N=2) \quad \mu = 22 (N=20)$$

**Fig. 2.** Linear response functions of harmonic oscillator systems



**Fig. 3.** Linear response functions of Central force field systems.

### 【参考文献】

- [1] W.Kohn, Phys. Rev. Lett. 76, 3168 (1996).
- [2] E.Prodan and W.Kohn, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 102, 11635 (2005).
- [3] Y.Mitsuta, S.Yamanaka, K.Yamaguchi, M.Okumura, and H.Nakamura, Molecules 19, 13358 (2014).
- [4] Y.Mitsuta, S.Yamanaka, T.Saito, T.Kawakami, K.Yamaguchi, M.Okumura, and H.Nakamura, Mol. Phys. 114, 380 (2016).