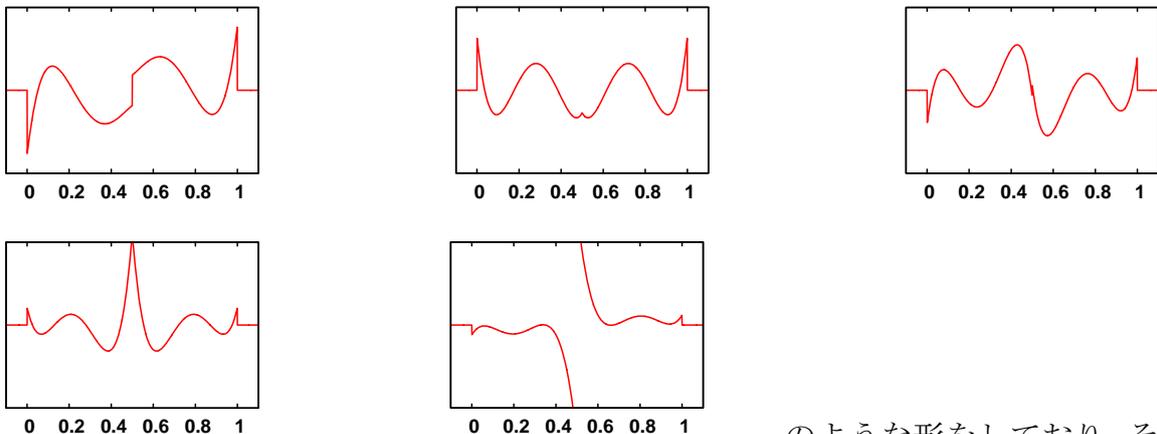


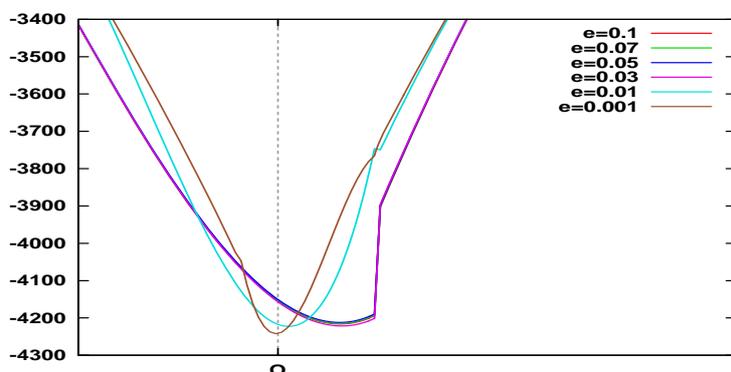
緒言

分子系の電子状態波動関数は主に技術的な理由から電導的にガウシアン基底関数(GTO)を用いたLCAO (Linear Combination of Atomic Orbital) によってあらわされてきた。これは電子の波動関数を定在化させる分子の核引力場が任意の形であり、フレキシブルですらあるためであり、原子物理や固体物理と異なった空間表現の自由度が必要とされるからである。然し当然ながらLCAO/GTOは万能ではなくその厳密性においても効率性においても再考を必要とする問題点がある。たとえば空間表現の完全性(用いる基底関数の L_2 ノルム空間としての)がクリティカルになるような場合には注意を要し、原子核付近、波動関数の特異点近傍や遠距離での振る舞いやはかなり不正確であることが知られている。また電子系が定常的(static)であるときと動的(dynamic)である時ではその物理的表現が大きくことなり、それに伴ってその物性を表現する関数空間(ヒルベルト空間)への要求が大きくことなることが多い。我々はLegendre多項式をスケールリング関数とした、多重ウェーブレット基底による量子化学計算法を開発し、分極率[1,2]やOptical Rotationなどの分子の静的物性量や波長依存分極率[3]などの動的物性量の算定へ応用してきた。本発表では多項式局在基底を使って波動関数を表現する時の利点と問題点についての考察をする。disjointサポートに多項式をアサインする本multiwaveletのアルゴリズムではsingularityのような高い空間変異情報を高次の多項式で表現するが、分割点ではより効率よくsingularity表現ができることがわかっている。然しウェーブレット圧縮が強すぎると波動関数の最小値が核位置からずれるなどのLCAOには現れない新たな問題点も出現する。例えば4次のmultiwaveletは



のような形をしており、その

分割点で disjoint になっている。然し singular な空間変異を表現するには更に高次の多項式が必要であり、その convergence property は計算法の近似を導入するために重要である。下図は CO 分子の酸素核付近の波動関数である。



近似があらわい場合からある時点で非連続的に改善されていることが分かる。講演では、本方法論内でのこうした問題点への対応や新たな多重解像度ウェーブレットの可能性について議論する。

更に、多重解像度多重ウェーブレットを使った量子波束時間発展シミュレーションの研究[4]について発表もする。 量子的時間発展シミュレーションでは波束のユニタリ性保存への考慮が必要であるが、時間発展演算子の exponential 表現によりその問題が解決されることを数値的に確認した。また開放系での波動関数の時間発展では、境界上でのウェーブレットやその微分表現に起因する問題も無視できないが、外場下での擬似的周期境界条件を課すことによりその状況に対応した。これらの技術的問題克服の後には高次元空間や外場下でのシミュレーションに対しても本方法論が有効であることが分かった。更に具体的な内容はポスターにて発表する(2P063)。

謝辞 本研究は部分的に JST-CREST のサポートによって実現した。

References

- [1] 分子構造総合討論会 2005 年 (東京)
- [2] International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering 2005 (Greece), H.Sekino, Y.Maeda and S.Hamada
- [3] International Congress of Quantum Chemistry 2006 (Kyoto), Y.Maeda et al.
- [4] ICQC Satellite Conference 2006 (Sendai), S.Hamada and H.Sekino