

「4成分相対論的電子状態理論の開発」

講演者氏名	柳井 毅, 飯倉 永良, 中嶋 隆人, Yasuyuki Ishikawa, 平尾 公彦
所属	東京大学大学院工学系研究科応用化学専攻 平尾研究室
講演タイトル	「4成分相対論的電子状態理論の開発」
講演概略	<p>重原子を含む多原子分子系を厳密に取り扱うための、4成分相対論的電子状態理論の開発に関して発表する。本研究では、Dirac-Coulomb方程式に対して4成分の波動関数を一般短縮 kinetically balanced Gauss型 spinor で基底展開し、4成分計算に必要な積分ルーチンを開発した。特に二電子反発積分は本研究室でこれまでに開発した非相対論的二電子反発積分ルーチンSPHERICAを用いて高速に算出できる。</p> <p>今回開発した積分ルーチンに基づいてDirac-Hartree-Fock法およびDirac-Kohn-Sham法の計算ルーチンを開発した。当日は重原子を含む分子系の計算結果とあわせ理論の詳細について発表する。</p>