

# 局所シュレーディンガー方程式法に基づく原子・分子の精密量子化学計算

量子化学研究協会研究所 第四部門 中嶋 浩之

**目的** 本課題は、2021年度HPCI継続課題として、シュレーディンガー方程式の正確な一般解法として提案された自由完員関数理論と局所シュレーディンガー方程式法によって、原子・分子の基底・励起状態のシュレーディンガーレベルの高精度解を記述する新しい量子化学理論の開発と応用を目的とする。

**内容** 化学反応に重要なポテンシャル曲面を精密に計算する方法論とプログラムを開発し、基礎的な分子に応用した。

**結果** 強い静的電子相関を持ち量子化学の理論検証のベンチマークとして用いられる $H_4$ 分子への応用では、シュレーディンガー方程式の絶対解として正確な化学精度を満足するポテンシャル曲面の計算に成功し、従来法よりも遥かに高精度な結果を得ることができた。

利用した計算機: SQUID 汎用CPUノード群

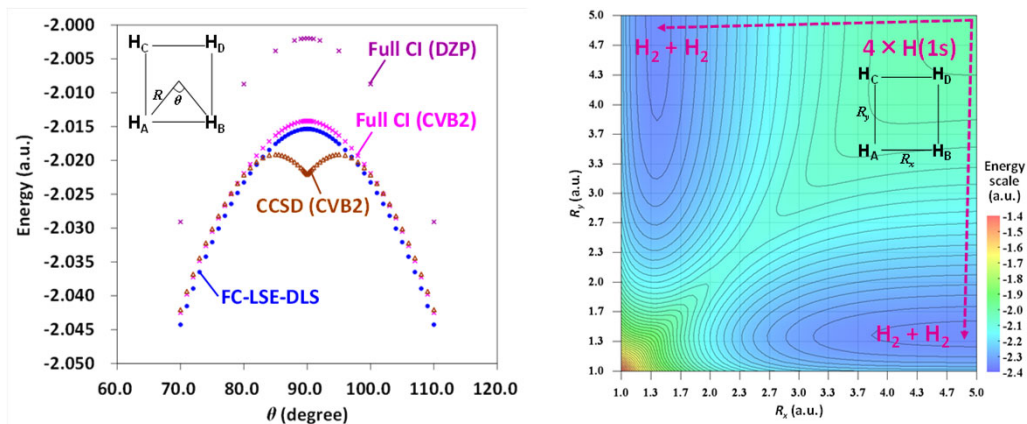
ノード時間: 707,000 時間

利用プログラム: FC-LSE

使用メモリ: 64 GB

ディスク容量: 30 TB

並列化(最大): 64ノード並列



$H_4$ 分子のシュレーディンガーレベルのポテンシャル曲面