

## Basis Quantum Monte Carlo 法を用いた調和振動子内 Fermion の計算

○八木 徹<sup>1</sup>、長嶋 雲兵<sup>2</sup><sup>1</sup>江戸川大学メディアコミュニケーション学部情報文化学科 〒270-0198 流山市駒木 474<sup>2</sup>産業技術総合研究所計算科学研究部門 〒305-8562 つくば市梅園 1-1-1

【緒言】現在一般に用いられる拡散量子 Monte Carlo 法では、反対称性の問題を含む多電子系に対して Fixed-node 近似などの手法を用いて計算を行う。しかしながら、事前に節面の情報を与えるためのガイド関数が必要であるため、準備段階の計算コストが高くなる。

ガイド関数を使うことなしに、多電子系の反対称性問題を取り扱うことが可能な量子 Monte Carlo 法として、Öksüz により Basis Quantum Monte Carlo (BQMC) 法が提唱されている[1-3]。BQMC 法では、反対称化された基底関数で構築された波動関数を導入することで、フェルミ粒子の拡散過程の式にパウリの排他原理を表わす項が含まれることになる。また、2 粒子の座標の交換により電子状態の符号の変化を表わしている。

本研究では、BQMC 法に対して、Umrigar らの拡散量子 Monte Carlo 法の手法[4](重みつき配置の扱い、エネルギーの計算、分岐過程の扱いなど)を組み合わせた手法を展開した。これを用い、1 次元及び3次元の調和振動子内におけるフェルミ粒子に対する Monte Carlo シミュレーションを行った。

【方法】相互作用をせず、並行スピンの関係にある 2 個のフェルミ粒子が、調和振動子ポテンシャル内に存在する系に対して、重みつき配置を用いた BQMC 計算を行った。シミュレーションの各ステップは、大きく分けて拡散と分岐の 2 つの過程からなる。拡散過程では BQMC 法の定式化により、パウリの排他原理を表わす項を含む遷移確率に従い粒子を拡散させた。また、状態の符号が変化した場合にはその配置を消滅させた。分岐過程においては、配置全体の重みが一定付近を保つように、配置の生成・消滅を行った。

粒子の初期座標はランダムに作成し、十分な平衡化の後に  $10^6$  ステップのシミュレーションを行った。平衡後の 100 ステップごとの配置に対して各種エネルギーの平均量を求めた。

【結果】計算の結果得られたエネルギーを Table 1 に示す。1 次元 3 次元ともに、系のエネルギーは文献[1,2]の結果より高い精度で得られた。

BQMC 法を用いた計算により、並行スピン

Table.1 調和振動子ポテンシャル内の 2 フェルミ粒子のエネルギー(a.u.)

	Energy	$\sigma$	Energy([1,2])	$\sigma$ ([1,2])	Exact
1 次元	2.000353	0.000488	2.00566	0.0077	2.0
3 次元	3.50053	0.00122	3.498	0.015	3.5

のフェルミ粒子からなる系の状態を効率よく求めることが可能である。

## 【参考文献】

[1] Öksüz I., *Arab. J. Sci. Eng.*, Vol. 9, No. 2, pp. 145-152 (1984)[2] Öksüz I., *Arab. J. Sci. Eng.*, Vol. 9, No. 3, pp. 239-249 (1984)[3] Öksüz I., *J. Chem. Phys.*, Vol. 81, No. 11, pp. 5005-5012 (1984)[4] Umrigar C. J., Nightingale M. P., and Runge K. J., *J. Chem. Phys.*, Vol. 99, No. 4, pp. 2865-2890 (1993)