

課題名 (タイトル) :

相対論的量子モンテカルロ法の開発

利用者氏名 : 中塚 温

所属 : 計算科学研究機構 量子系分子科学研究チーム

1. 本課題の研究目的

電子状態を精密に考慮することは、様々な物性・物質の解析・設計を行う上で重要である。『京』に代表される超並列計算機を活用して、従来扱えなかったサイズ・精度での触媒設計・反応解析を行うために、高並列かつ低スケールな高精度電子相関手法が求められる。量子モンテカルロ法は、統計的手法に基づく手法で、高並列性・計算コストスケール面での利点を持った高精度電子相関手法である。しかし、現状の量子モンテカルロ法は安定性・適応範囲の点で多くの改良すべき点がある。その一つとして、重原子に対して重要な相対論効果を取り込む手法の欠如がある。これに対し、これまで相対論 Hamiltonian に基づき、相対論的変分モンテカルロ (ZORA-VMC) 法と、対応するカスプ補正法を開発してきた。本課題ではより高精度な拡散モンテカルロ (DMC) 法への拡張と適用を行い、また ZORA-DMC 法を簡便に取り扱えるプログラムの開発を行うことを目的とする。

2. 具体的な利用内容、計算方法

本年度は RICC を利用しなかった。

3. 結果

本年度の利用による成果はない。

4. まとめ

本年度は利用しなかった

5. 今後の計画・展望

次年度以降は別申請課題での RICC 利用申請を検討している。

6. 利用がなかった場合の理由

主として京を利用したアプリケーション開発を行っていたため、並列環境として RICC を利用する必要がなかった。