

JAERI-Data/Code
2000-003



JP0050191



grasp92によるHe原子基底状態
Dirac-Coulombエネルギーの高精度計算手順

2000年2月

内海隆行・佐々木明

日本原子力研究所
Japan Atomic Energy Research Institute

本レポートは、日本原子力研究所が不定期に公刊している研究報告書です。
入手の間合わせは、日本原子力研究所研究情報部研究情報課（〒319-1195 茨城県那珂郡東海村）あて、お申し越してください。なお、このほかに財団法人原子力弘済会資料センター（〒319-1195 茨城県那珂郡東海村日本原子力研究所内）で複写による実費頒布をおこなっております。

This report is issued irregularly.
Inquiries about availability of the reports should be addressed to Research Information Division, Department of Intellectual Resources, Japan Atomic Energy Research Institute, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken, 319-1195, Japan.

© Japan Atomic Energy Research Institute, 2000

編集兼発行 日本原子力研究所

grasp92 による He 原子基底状態 Dirac-Coulomb エネルギーの高精度計算手順

日本原子力研究所関西研究所光量子科学研究センター

内海 隆行・佐々木 明

(2000年1月12日受理)

本報告では、He 原子基底状態の Dirac-Coulomb ハミルトニアンの固有値を grasp92 コードにより高精度 (相対誤差約 10^{-7}) に計算する手順を記述する。grasp92 コードは、多電子配位原子の相対論的波動関数を multi-configuration Dirac-Fock 法で解く公開されたプログラムであり、原子特性計算に広く利用されている。しかし、高精度計算の中心的役割を果たす最適エネルギーレベル(EOL)計算では、計算手順の自由度の高さから明確な手順が存在せず、しばしば数値不安定を伴い高精度計算への障害となっている。このことから、本報告では He 原子基底状態を例にとり数値安定的な EOL 計算の手順の基本指針を示す。この手順は多価電離イオンや重元素の高精度固有関数計算に拡張することができる。

Procedures of grasp92 code to calculate accurate Dirac-Coulomb energy for
the ground state of helium atom

Takayuki UTSUMI and Akira SASAKI

Advanced Photon Research Center
Kansai Research Establishment
Japan Atomic Energy Research Institute
Mimaminami-machi, Neyagawa-shi, Osaka

(Received January 12, 2000)

The procedures of grasp92 code to calculate accurate (relative error $\approx 10^{-7}$) eigenvalue for the ground state of helium atom of the Dirac-Coulomb Hamiltonian are presented. The grasp92 code, based on the multi-configuration Dirac-Fock method, is widely used to calculate the atomic properties. However, the main part of the accurate calculations, extended optimal level calculation (EOL), suffer frequently numerical instabilities due to the lack of the confident procedures. The purpose of this report is to illustrate the guideline for stable EOL calculations by calculating the most fundamental atomic system, i.e. the ground state of helium atom $1s^2 \ ^1S_2$. This procedure could be extended for the high-precise eigenfunction calculation of more complex atomic systems, for example highly ionized atoms and high-Z atoms.

Keywords: Grasp92, EOL, EAL, Dirac-Coulomb Hamiltonian, Helium Atom

目次

1. はじめに	1
2. grasp92 概要	2
3. He 原子基底状態計算	7
4. まとめ	10
謝辞	10
参考文献	11

Contents

1. Introduction	1
2. General Feature of grasp92	2
3. Calculation of the Helium Ground State	7
4. Conclusions	10
Acknowledgements	10
References	11

図表リスト

図 2 - 1 grasp92 コード構成	12
図 2 - 2 grasp92 標準実行手順	13
図 3 - 1 genios 入力	14
図 3 - 2 $n=1$ 実行シェルスクリプト	15
図 3 - 3 $n=1$ シェルスクリプト実行結果	16
図 3 - 4 $n=5$ 実行シェルスクリプト	21
図 3 - 5 $n=5$ シェルスクリプト実行結果	23

List of Figures and Tables

Fig.2-1 Structure of grasp92 Code	12
Fig.2-2 General Procedures of grasp92 Code	13
Fig.3-1 Input Data for Geniso Module	14
Fig.3-2 Shell Scripts for $n=1$ Case Execution	15
Fig.3-3 Printout for $n=1$ Case Execution	16
Fig.3-4 Shell Scripts for $n=5$ Case Execution	21
Fig.3-5 Printout for $n=5$ Case Execution	23

1. はじめに

現在、原研・関西研において先端的な光量子光源の開発とその応用研究が進められており、Ti:Sapphire レーザーによる超短パルス(20 fs:フェムト秒 10^{-15} 秒)・高ピーク出力(100 TW:テラワット 10^{12} ワット)で繰り返し動作(10 Hz)可能なレーザーなどが開発され、短波長・高効率X線レーザーなどのX線源の開発が進められている。X線レーザー発振用プラズマ生成では、常温の固体ターゲットにレーザー照射をして高温・高密度プラズマを生成する過程が含まれ、レーザー生成プラズマの熱力学的特性とレーザー利得の間に重要な関係があり、レーザー生成プラズマ特性を正確に推定することが要求されている。超短秒時での非平衡状態のレーザー生成プラズマの熱力学的特性を正確に推定するためには、原子と光量子、電子との衝突励起、脱励起反応をシミュレートする必要があり、エネルギー準位、振動子強度などの原子構造データや原子と光量子、電子との衝突断面積などの原子過程データを大量かつ高精度に求めることが求められている。

grasp92 コード¹⁾は、多電子配位原子の相対論的波動関数を Hartree-Fock 法の相対論的拡張である multi-configuration Dirac-Fock(MCDF)法で解く公開されたプログラムであり、原子特性計算に広く利用されている。ここでいう grasp92 コードはプログラムの集合体の総称であり、geniso, genosl, genmcp, erwf, rscf92, rci92, osc192 などのモジュールより構成されている。このうち、geniso による原子特性値(ISO)ファイルの生成、genosl によるコンフィギュレーション状態関数(CSF)ファイルの生成、genmcp による角運動量結合係数(MCP)ファイルの生成、erwf による動径成分波動関数(RWF)の初期推定計算、rscf92 による平均エネルギーレベル(EAL)計算、rci92 によるコンフィギュレーション相関(CI)計算、osc192 による振動子強度計算については計算手順も明確であり、数値的に安定な計算を実行することができる。しかし、高精度計算の中心的役割を果たす rscf92 による最適エネルギーレベル(EOL)計算では、計算手順の自由度の高さから明確な手順が存在せず、しばしば数値不安定を伴い高精度計算への障害となっている。このことから、本報告では He 原子基底状態の Dirac-Coulomb ハミルトニアン²⁾の固有値計算を例にとり数値安定的な EOL 計算の手順の基本指針を示す。

2. grasp92 概要

grasp92 コードは相対論的多電子配位原子構造計算コードであり、Grant 等により開発された grasp²⁾や grasp^{2,3,4)}を機能拡張したものである。ここでは以下に、He 原子基底状態の Dirac-Coulomb ハミルトニアン固有値計算に必要な事項に関して簡単に記述する。コード全般の基本機能、使用方法については Parpia *et. al.* [2]を、理論的説明については Grant [5, 6]を、またプログラミングについては Fischer [7]、Grant [8]を参照されたい。

原子核に束縛された多電子系の相対論的ハミルトニアンは座標表現で次式により表わされるとする。

$$H = \sum_i [h^D(i) - \frac{Z}{r_i}] + \sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}} + H_{\text{Breit}} + H_{\text{Lamb}} \quad (2.1)$$

ここで r_i は i 電子の原子核からの距離、 r_{ij} は i 電子と j 電子の距離であり、 $\sum_i h^D(i)$ 、 $\sum_i -\frac{Z}{r_i}$ 、 $\sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}}$ 、 H_{Breit} 、 H_{Lamb} は各々、Dirac 電子の運動エネルギー、原子核-電子相互作用、電子間相互作用、Breit 相互作用、Lamb 相互作用のハミルトニアンである。ただし、 $h_D = c \alpha p + (\beta - 1) c^2$ である。ここで α_i 、 β は Dirac 行列であり、電子の静止エネルギーは右辺の c^2 の項により除いてある。単位系としては、原子単位系 (atomic unit : a.u.) をもちいた。原子単位系は、 \hbar をプランク定数 h を 2π で割ったもの、 m_e を電子の静止質量、 e を素電荷としたとき、 $\hbar = m_e = e = 1$ とした単位系である。この単位系では、微細構造定数 α と真空中の光速 c との関係 ($\alpha = e^2 / \hbar c$) より、 $c = \alpha^{-1} \approx 137.03604$ となる。

原子の状態を表わす相対論的波動関数はこのハミルトニアンの固有関数と固有値を解くことにより求めることができる。すなわち、

$$H \Psi = E \Psi \quad (2.2)$$

を満たす Ψ 、 E を求める。ここで、 Φ_k ($k = 1, 2, \dots$) を完全系をなす正規直交基底 ($\langle \Phi_i | \Phi_j \rangle = \delta_{ij}$) とすると、波動関数は $\Psi = \sum_k a_k \Phi_k$ と展開することができ、固有方程式は、

$$\begin{aligned} \sum_j \langle \Phi_i | H | \Phi_j \rangle \langle \Phi_j | \Psi \rangle &= E \langle \Phi_i | \Psi \rangle \\ \sum_j \langle \Phi_i | H | \Phi_j \rangle a_j &= E a_i \\ H(\Phi) \alpha^k &= E_k \alpha^k \\ \Psi^k &= \sum_i a_i^k \Phi_i \end{aligned} \quad (2.3)$$

となる。ここで、 $H(\Phi)$ 、 α は一般に Φ_i を基底とする無限次元空間での行列、およびベクトルであり、 $H(\Phi)$ の行列要素は $\langle \Phi_i | H | \Phi_j \rangle$ である。完全系をなす正規直交基底の選び方に制約はないが、この固有方程式は基底 Φ_i と同じ数の解をもち、それぞれが固有関数 Ψ_i に近い関数であるように選ぶ程、 $H(\Phi)$ は対角的、 α は単位ベクトル的となり、有限個の波動関数により系の特性の見通しがよくなる。このためには、 Φ_i を $H \equiv H_0$ となる適当な H_0 の固有関数 ($H_0 \Phi = E^0 \Phi$) とするのが都合がよい。MCDF 近似では H_0 として以下に述べる Dirac-Coulomb ハミルトニアンが用いられる。 H_0 の固有関数で $H(\Phi)$ を表現し、式 (2.3) により $H(\Phi)$ の固有関数を求める方法は摂動的解法とは異なることに注意しなくてはなら

ない。この方法による計算精度は式 (2.3) で使用する H_0 の固有関数の数に依存し、無限個の固有関数ならば正確な $H(\Phi)$ の固有関数をもとまることになる。

ハミルトニアン H は空間回転と空間反転に対して不変であるために、全角運動量 $J(J+1)$ 、角運動量の量子化方向成分 M 、パリティ P により原子状態関数 (atomic state function : ASF) は、 $|\Gamma PJM\rangle$ と記述することができる。ただしここで、 Γ は P, J, M 以外の量子数である。また、MCDF 近似では、この ASF は、コンフィギュレーション状態関数 (configuration state function : CSF) $|\Phi_k\rangle = |\gamma_k PJM\rangle$ の重ね合せにより次式で表わされるものと仮定する。

$$|\Gamma PJM\rangle = \sum_i c_i |\gamma_i PJM\rangle \quad (2.4)$$

ここで、 γ_k は CSF の P, J, M 以外の量子数である。さらに CSF は球対称ポテンシャル場における 1 電子波動関数 $|nkm\rangle$ によるスレータ行列により表わされるものとする。ここで、 $|nkm\rangle$ の空間座標、スピン座標での表示は

$$\langle r, \sigma | nkm \rangle = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} P_{nk}(r) \varphi_{kn}(\theta, \phi, \sigma) \\ i Q_{nk}(r) \varphi_{-kn}(\theta, \phi, \sigma) \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

となる。ただし、 $\langle \gamma km | \gamma km \rangle = \int \psi_{\gamma km}^*(r) \psi_{\gamma km}(r) dr = 1$ と規格化されているものとする。

ここで、 $P_{nk}(r), Q_{nk}(r)$ は動径波動関数の large 成分、small 成分、 $\varphi_{kn}(\theta, \phi, \sigma)$ は空間方向依存を表わすスピノル、 n は主量子数である。 k は相対論的角量子数であり、1 電子の軌道角運動量 l 、全角運動量 j との間に、 $k = \pm(j+1), l = j \pm 1/2, j = |k| - 1/2$ という関係がある。

次に MCDF 近似では、Breit 相互作用、Lamb 相互作用は、他の項に比較して効果が小さく、行列要素の計算が複雑であるのでこれらは H_0 に含めない。これにより H_0 として次式により定義する Dirac-Coulomb ハミルトニアンを考える。

$$H_c = H^{DC} = \sum_i [h^D(i) - \frac{Z}{r_i}] + \sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}} \quad (2.6)$$

このハミルトニアンの行列要素は $H_{rs}^{DC} = \langle \Gamma_r PJ | H^{DC} | \Gamma_s PJ \rangle$ である。ただし、 $P_r \neq P_s$ または $J_r \neq J_s$ の場合には行列要素は 0 である。

以上により、MCDF 近似における波動関数とハミルトニアンが定義された、残る問題は $P_{nk}(r), Q_{nk}(r)$ を決定することである。このためにはハミルトニアンの行列要素で定義された次式で定義される汎関数の $P_{nk}(r), Q_{nk}(r)$ による 1 次変分が $\langle \gamma' k' m' | \gamma km \rangle = \delta_{\gamma' \gamma} \delta_{k' k} \delta_{m' m}$ の制約条件のもとで停留値を取ることを要求する。

$$\begin{aligned} E_{opt}(P_{nk}(r), Q_{nk}(r)) &= \sum_{rs} d_{rs} H_{rs}^{DC} \\ &= \sum_{rs} d_{rs} \left(\sum_{ab} T_{rs}(ab) I(ab) + \sum_{abcd} V_{rs}(abcd) R^k(abcd) \right) \end{aligned} \quad (2.7)$$

ここで、 a, b, c, d が 1 電子波動関数を表わし、 d_{rs} は平均エネルギーレベル(EAL)計算や最適エネルギーレベル(EOL)計算に対応して設定される係数、 $I(ab)$ は相対論的運動エネルギーと原子核ポテンシャルエネルギー、 $R^k(abcd)$ はスレータ積分である。また、 $T_{rs}(ab), V_{rs}(abcd)$ は Racah 代数により計算される角運動量結合係数である。これにより次式の 1 次微分方程式の形式の Dirac-Fock 方程式を得ることができる。

$$\frac{dP_A}{dr} + \frac{k_A}{r} P_A + \left(2c - \frac{\epsilon_A}{2c} + \frac{Y_A(r)}{cr} \right) Q_A = X_A^P(r) \quad (2.8a)$$

$$\frac{dQ_A}{dr} - \frac{k_A}{r}Q_A + \left(\frac{\varepsilon_A}{2c} - \frac{Y_A(r)}{cr}\right)P_A = X_A^Q(r) \quad (2.8b)$$

ここで、 A は nk を表わす。また、 $Y_A(r)$ は直接ポテンシャルであり、 $X_A^P(r)$, $X_A^Q(r)$ は交換ポテンシャルの large 成分、small 成分であり、 $P_{nk}(r)$, $Q_{nk}(r)$ 、およびラグランジュ未定係数の関数である。 ε_A はラグランジュ未定係数の対角成分である。

次に grasp92 コードのプログラム構成について簡単に記述する。図 2—1 に計算機上で展開したフォルダを示す。以下に各フォルダの内容を簡単に列記する。

(1) 実行プログラム・フォルダ

実行プログラム (geniso, gencsl, genmcp, erwf, rscf92, rci92, osc192, mrgcsl, xcsl, cndns) を格納するフォルダ。

(2) ソースプログラム・フォルダ

ソースプログラムおよび makefile を格納するフォルダ。ただし、ソースプログラムは raw サブフォルダに、また makefile は src サブフォルダに存在する。raw サブフォルダにあるソースプログラムは後述の prepro によって fortran 形式で src サブフォルダ展開される。各フォルダのプログラムの機能を示す。

geniso フォルダ

原子特性データ iso ファイルを生成する。

gencsl フォルダ

式 (2.4) のコンフィギュレーション状態関数(CSF)ファイル を生成する。

genmcp フォルダ

式 (2.7) の T, V 係数である角運動量結合係数(MCP) ファイルを生成する。

erwf フォルダ

Thomas-Fermi モデルまたは Screened Hydrogen モデルに基づき式 (2.5) で定義された動径成分波動関数 (RWF) を計算する。

rscf92 フォルダ

式 (2.8) の MCDF 方程式を平均エネルギーレベル(EAL)モード、最適エネルギーレベル(EOL)モードで解き、動径成分波動関数 (RWF) および式 (2.4) の係数を求める。

rci92 フォルダ

式 (2.3) により式 (2.1) のハミルトニアンに対する波動関数結合係数 (MIX) を求める。

osc192 フォルダ

Grant[6]の定式化に基づき、遷移エネルギーと振動子強度を計算する。

mrgcsl, xcsl, cndns フォルダ

それぞれ、CSF ファイルにある CSF の併合、消去、圧縮を行う。

(3) ライブラリプログラム・フォルダ

grasp92 コードに共通なプログラムであり、各フォルダの機能を示す。

blas フォルダ

basic linear algebraic subroutine で詳細は文献[9]参照。

lapack フォルダ

linear algebraic package で詳細は文献[10]参照。

njgraf フォルダ

Racha 代数に基づき、式 (2.7) の T, V 係数を計算するプログラム。詳細は文献[11]参照。

dvdson フォルダ

式 (2.3) のハミルトニアン行列の固有値を計算するプログラム。詳細は文献 [12]参照。

block-data フォルダ

grasp92 コードの基礎数値データ。

lib92 フォルダ

grasp92 コード特有のサブルーチン。

(4) ユーティリティプログラム・フォルダ

fmtunf フォルダ

grasp92 の動径波動関数をバイナリーから ASCII に変換するプログラム。

unffmt フォルダ

grasp92 の動径波動関数を ASCII からバイナリーに変換するプログラム。

orbrwf フォルダ

grasp2 の orbout ファイルを grasp92 の動径波動関数に変換するプログラム。

rwforb フォルダ

grasp92 の動径波動関数を grasp2 の orbout ファイルに変換するプログラム。

(5) 説明文・フォルダ

doc フォルダ

参考文献[2]の実行例ファイル。

(6) 変換プログラム・フォルダ

prepro フォルダ

ソースプログラム・フォルダの raw フォルダにあるプログラムを fortran 形式に変換するプログラム。詳細は文献[13]参照。

grasp92 コードは上述したように、bin フォルダに格納されたプログラムの集合体であり、基本的には geniso, genosl, genmcp, erwf, rscf92, rci92, osc192 より構成されている。これらのプログラムの標準的な実行手順を図 2—2 に示す。

- (1) geniso による原子特性値(ISO) ファイルの生成、
- (2) genosl による指定した各運動量 J パリティ P に対する式 (2.4) のコンフィギュレーション状態関数(CSF)ファイルの生成
- (3) genmcp による式 (2.7) T, V 係数である角運動量結合係数(MCP) ファイルの生成
- (4) erwf による Thomas-Fermi モデルまたは Screened Hydrogen モデルに基づく 1 電子動径成分波動関数 (RWF) の計算、
- (5) rscf92 による式 (2.8) の MCDF 方程式に基づく平均エネルギーレベル(EAL)計算および最適エネルギーレベル(EOL)計算
- (6) rci92 による式 (2.3) に基づくコンフィギュレーション相関(CI)計算
- (7) osc192 による振動子強度計算

3. He 原子基底状態計算

rscf92 による平均エネルギー計算 (EAL) では電子は各軌道に平均的に存在すると仮定するとともに、MCDF 方程式 (2.8) の非対角成分のラグランジュ未定係数を無視することにより、各軌道の計算重率を高めて軌道間の相関を小さくして数値安定性を確保している。このため、EAL 計算は基本的にはエネルギーレベルの初期的見積りと最適エネルギーレベル (EOL) 計算への初期軌道作成のために使われる。このため、MCDF 方程式を忠実に解くことにより所望のレベルの波動関数、固有値を求める高精度計算は rscf92 の EOL 計算機能により行われる。ここでは He 原子基底状態の Dirac-Coulomb ハミルトニアン固有値計算を例にとり数値安定的な EOL 計算の手順の基本指針を示す。

He 原子基底状態は $1s^2$ であるが、2 電子間の Coulomb 相互作用によりこの CSF のみで Dirac-Coulomb ハミルトニアンの固有関数すなわち ASF を求めることはできない。このため、 $2p^2$ 、 $3d4d$ のように J 、 P が同じ CSF により ASF を式 (2.4) で展開しなくてはならない。このような CSF の数は主量子数 n の範囲に依存し、範囲を大きくすれば CSF の数は増大する。すなわち、ASF をより高次の球調和関数により展開することとなり、ASF の近似精度は高くなる。一方、式 (2.4) の展開係数は主要なコンフィギュレーションである $1s^2$ の項での値が大きく、高次の項の展開係数は非常に小さなものとなる。このため、最適エネルギーレベル (EOL) 計算での式 (2.7) における評価関数の重率 $d_{i,j}$ も高次項に対して小さくなる。このため、高次項に参与する高主量子数の波動関数に大きな誤差が生じて評価関数としての変化が小さくなり、以降の EOL 計算で正しい値に修正されなくなってしまうこととなる。特に、式 (2.4) の Dirac-Coulomb ハミルトニアンには無限個の固有関数があり、変分原理停留値を要求して導いた式 (2.8) の MCDF 方程式も無限個の解を有し、一旦ある解の近傍からはずれると別の全く異なる解に向かった計算を行ってしまう。これが EOL 計算がしばしば数値不安定を生じさせる主要な原因である。ちなみに、平均エネルギーレベル (EL) 計算では、高次項に対しても低次項と同じ重率を設定するためにこのような問題は生じにくい。

このことから、高精度 EOL 計算のためには、一般的にはまず主要なコンフィギュレーションを含む小さな主量子数の範囲で低次近似の ASF を求め、これに徐々に高次近似の CSF を含めた ASF を計算していくことが必要である。ここでは、He 原子基底状態の場合は、 $n=1$ から $n=7$ までを順次計算していくこととする。(注：現在の grasp92 では $n=7$ がとりうる最大の主量子数である。) まず、図 3—1 に示すように geniso により isotope ファイル *2He.iso* を作成しておく。次に、図 3—2 に $n=1$ の時の UNIX シェルスクリプトを、また図 3—3 にその実行結果を示す。grasp92 コードは対話型入力を基本とし少量の実行には便利であるが、大量の繰り返し計算では対話型入力は繁雑であるために UNIX シェルスクリプトを用いる方がよいので典型的な例としてこれを示した。ただし、図 3—2 の出力結果には対話型での入力と同等なコマンドをイタリック/アンダーラインで示した。(注：実際には出力されない。) 各プログラムの実行概要を以下に記述する。

(1) *gencsl* 実行

概要： $n=1$ で主要コンフィギュレーション $1s^2$ を含む CSF を生成。

入力ファイル：なし

出力ファイル：*2He/He1.csl*

(2) *genmcp* 実行

概要：角運動量結合係数(MCP) ファイルの生成。

入力ファイル：*2He/He1.csl*

出力ファイル：*2He/He1.mcp*

2He/sum/He1.genmcp.sum (サマリ)

(3) *erwf* 実行

概要：動径成分波動関数 (RWF) を Thomas-Fermi 近似で計算。

入力ファイル：*2He/He1.iso*

2He/He1.csl

出力ファイル：*2He/He1.TF.rwf*

2He/sum/He1.erwf.sum (サマリ)

(4) *rscf92* 実行

概要：EAL 計算でより精度の高い動径成分波動関数を計算。この場合、iteration 5 回で self-consistency が 6.0050×10^{-9} まで収束。

入力ファイル：*2He/He1.iso*

2He/He1.csl

2He/He1.mcp

2He/He1.TF.rwf

出力ファイル：*2He/He1.EAL.rwf*

2He/sum/He1.rscf92.sum (サマリ)

(5) *rscf92* 実行

概要：EOL 計算でより高精度の動径成分波動関数を計算。この場合は、CSF が 1 個であるために EAL 計算と同等であり、直ちに収束。

入力ファイル：*2He/He1.iso*

2He/He1.csl

2He/He1.mcp

2He/He1.EAL.rwf

出力ファイル：*2He/He1.EOL.rwf*

2He/He1.EOL.mix

2He/sum/He1.rscf92.sum.EOL (サマリ)

以降の $n=2$ から $n=7$ までの実行手順は基本的に同一であるために、 $n=5$ の UNIX シェルスクリプトと実行結果を各々図 3—4、図 3—5 に示す。また、各プログラムの実行概要を以下に記述する。

(1) gencsl 実行

概要： $n=1-5$ で主要コンフィギュレーション $1s^2$ を含む CSF を生成。2 電子をすべての軌道 ($n^2 = 25$ 個) に配置したもののうち $J=0$ 、 $P=+$ であるコンフィギュレーション (55 個) を選択。

入力ファイル：なし

出力ファイル：*2He/HeI.csl*

(2) genmcp 実行

概要：角運動量結合係数(MCP) ファイルの生成。

入力ファイル：*2He/HeI.csl*

出力ファイル：*2He/HeI.mcp*

2He/sum/HeI.genmcp.sum (サマリ)

(3) erwf 実行

概要：動径成分波動関数 (RWF) を Thomas-Fermi 近似で計算。ただし、 $n=4$ までの軌道 (1s 2s 2p- 2p 3s 3p- 3p 3d- 3d 4s 4p- 4p 4d- 4d 4f- 4f) は以前の結果をファイル入力する。

入力ファイル：*2He/HeI.iso*

2He/HeI.csl

2He/HeI.rwf.n4

出力ファイル：*2He/HeI.TF.rwf*

2He/sum/HeI.erwf.sum (サマリ)

(4) rscf92 実行

概要：EOL 計算でより高精度の動径成分波動関数を計算。但し、順次以下の EOL 計算を行う。

(4-1) $n = 1, 2, 3, 4$ 軌道を固定し、Thomas-Fermi 近似の $n = 5$ 軌道の最適化を行う。但し、 $n=5$ 軌道は相関関数として扱う。

(4-2) $n = 1, 2, 3, 4$ 軌道の最適化を行う。但し、主要コンフィギュレーションを構成する $n = 1$ 軌道以外は相関関数として扱い、完全な収束以前に iteration を打ち切る。

(4-2) (4-2) と同様に $n = 1, 2, 3, 4$ 軌道の最適化を行う。但し、damping factor は固定値 (= 0.9) とし、最適化レベルのエネルギー値が十分収束することを iteration 毎の値から判断する。

入力ファイル：*2He/HeI.iso*

2He/HeI.csl

2He/HeI.mcp

2He/HeI.EOL.rwf

出力ファイル：*2He/HeI.EOL.rwf*

2He/HeI.EOL.mix

2He/sum/HeI.rscf92.sum.EOL (サマリ)

以上の計算手順に基づいて求めた He 原子基底状態の Dirac-Coulomb ハミルトニアン
の固有値を以下に示す。

n	$E_{\text{grasp92}}^{\text{DC}}$	$E_{\text{GRASP2}}^{\text{DC}}$	$E_{\text{grasp92}}^{\text{DC}} - E_{\text{GRASP2}}^{\text{DC}}$
1	-2.861 813 322 49	-2.861 813 340 29	0.000 000 017 80
2	-2.897 808 441 42	-2.897 808 459 81	0.000 000 018 39
3	-2.901 974 447 61	-2.901 974 647 14	0.000 000 199 53
4	-2.903 042 760 45	-2.903 042 972 33	0.000 000 211 88
5	-2.903 433 337 10	-2.903 433 571 78	0.000 000 234 68
6	-2.903 609 040 55	-2.903 609 178 06	0.000 000 137 51
7	-2.903 698 997 69	-2.903 699 587 68	0.000 000 589 99

注 2) $E_{\text{grasp92}}^{\text{DC}}$ は本文手法に基づく Dirac-Coulomb エネルギー。単位 Hartree。

注 3) $E_{\text{GRASP2}}^{\text{DC}}$ は文献[14]より。

この結果は、Parpia and Grant [14]の結果に比べてエネルギーが高いが、これは EOL 計
算において $n = 1$ 軌道以外は相関関数として扱ったことが主要な原因である。ただし、精
度的には十分であり、本報告の grasp92 コード実行手順は妥当と考えることができる。

4. まとめ

本報告では、He 原子基底状態の Dirac-Coulomb ハミルトニアンの固有値を grasp92 コ
ードにより高精度（相対誤差約 10^{-7} ）に計算する手順を記述した。MCDF 法で高精度計
算の中心的役割を果たす最適エネルギーレベル(EOL)計算では、計算手順の自由度の高さ
から明確な手順が存在せず、しばしば数値不安定を伴い計算精度の向上への障害となっ
ている。ここで He 原子基底状態を例に採って高精度な原子構造計算結果を導く数値的に
安定な EOL 計算手順を示した。この手順を拡張することにより、X 線レーザー媒体の Ni
様イオンなどの多価電離イオンやウランなどの重元素の高精度固有関数計算に適用する
ことができる。

謝辞

X 線レーザー開発における高精度原子構造計算の重要性を御教授、本業務遂行を御支
援頂きました、日本原子力研究所関西研究所 宅間宏氏、有沢孝氏、井原均氏に深く感
謝致します。また、シェルスクリプト作成に御協力頂きました日本原子力研究所関西研
究所 荒川拓也氏に感謝致します。

参考文献

- [1] F.A. Parpia, C. F. Fischer, and I.P. Grant: *Comput. Phys. Commun.*, 94, 249(1996).
- [2] K.G. Dyall, I.P. Grant, C.T. Johnson, F.A. Parpia and E.P. Plummer: *Comput. Phys. Commun.*, 55, 425(1989).
- [3] Z. Cai, V. Meiser Umar, and C. F. Fischer: *Phys. Rev. Lett.*, 68, 297(1992).
- [4] F.A. Parpia, I.P. Grant and C. F. Fischer: unpublished.
- [5] I. P. Grant : *Adv. Phys.*, 19, 747 (1970).
- [6] I. P. Grant : *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.*, 7(12), 1458 (1974).
- [7] C. F. Fischer : *Comput. Phys. Rep.*, 3, 273 (1986).
- [8] I. P. Grant : *Comput. Phys. Commun.*, 21, 207(1980).
- [9] C.L. Lawson, R.J. Hanson, D. Kincaid and F.T. Krog : *ACM Trans. Math. Soft.*, 5, 308 (1979).
 J.J. Dongarra : *ACM Trans. Math. Soft.*, 14, 1 (1988).
 J.J. Dongarra, J. Du Croz, S. Hammarling and R.J. Hanson : *ACM Trans. Math. Soft.*, 14, 18 (1988).
 J.J. Dongarra, J. Du Croz, I.S. Duff and S. Hammarling: *ACM Trans. Math. Soft.*, 16, 18 (1990).
- [10] E. Anderson, Z. Bai, C. Bischof, J. DEmmel, J. Dongarra, J. Du Croz, A. Greenbaum, S. Hammarling, A. McKenney, S. Ostrouchov and D. Sorensen : *LAPACK User's Guide* (Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 1992).
- [11] A. Bar-Shalom and M. Klapisch : *Comput. Phys. Commun.*, 50, 375(1988).
- [12] E.R. Davidson : *J. Comput. Phys.*, 17, 87 (1975).
 E.R. Davidson : *Comput. Phys. Commun.*, 53, 49 (1989).
 C.W. Murray, S.C. Racine and E.R. Davidson : *J. Comput. Phys.*, 103, 382 (1992).
- [13] K.G. Dyall : *Comput. Phys. Commun.*, 39, 141 (1986).
- [14] F. A. Parpia and I. P. Grant, : *J. Phys. B*, 23, 211-217(1990)

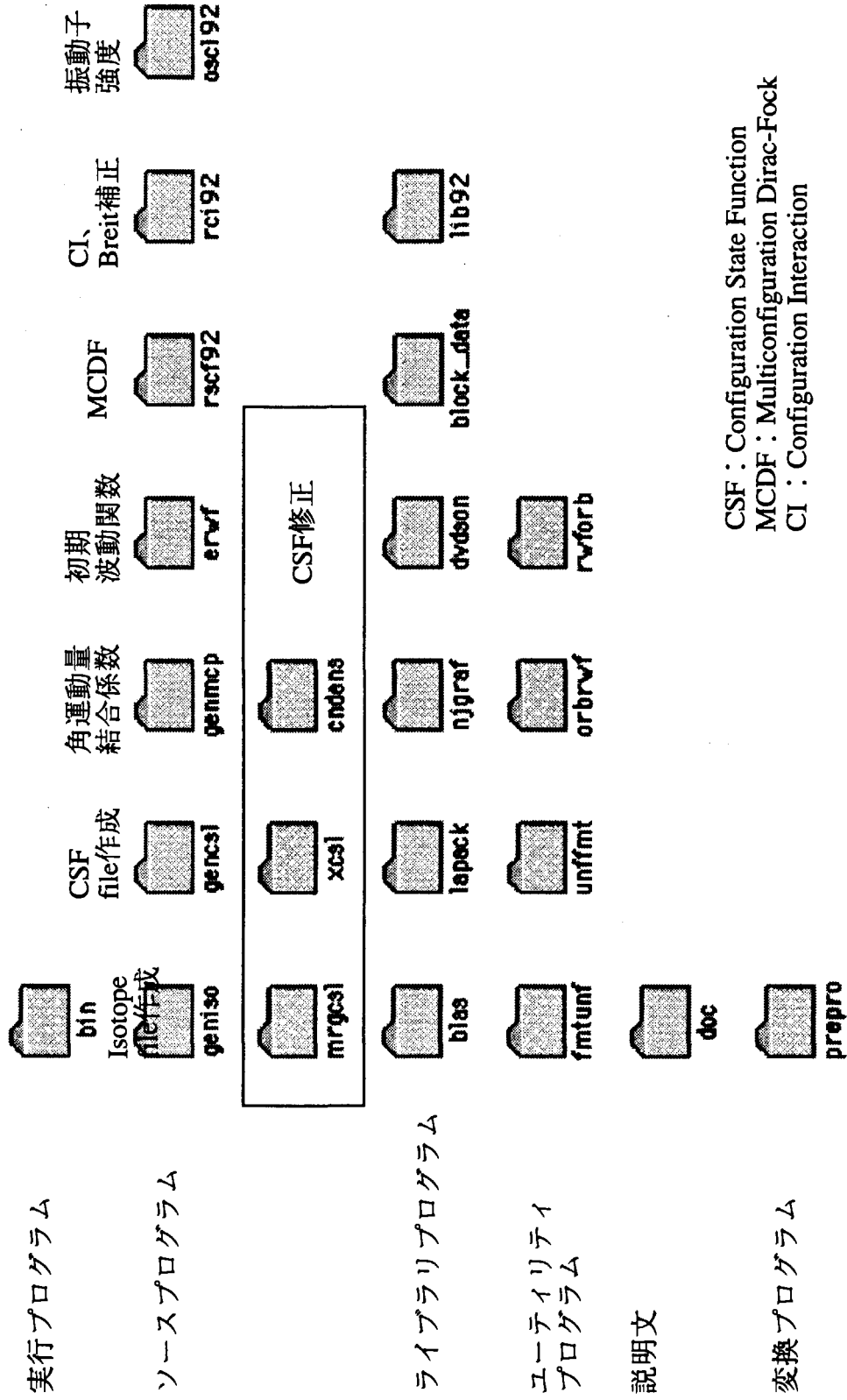


図 2—1 grasp92 コード構成

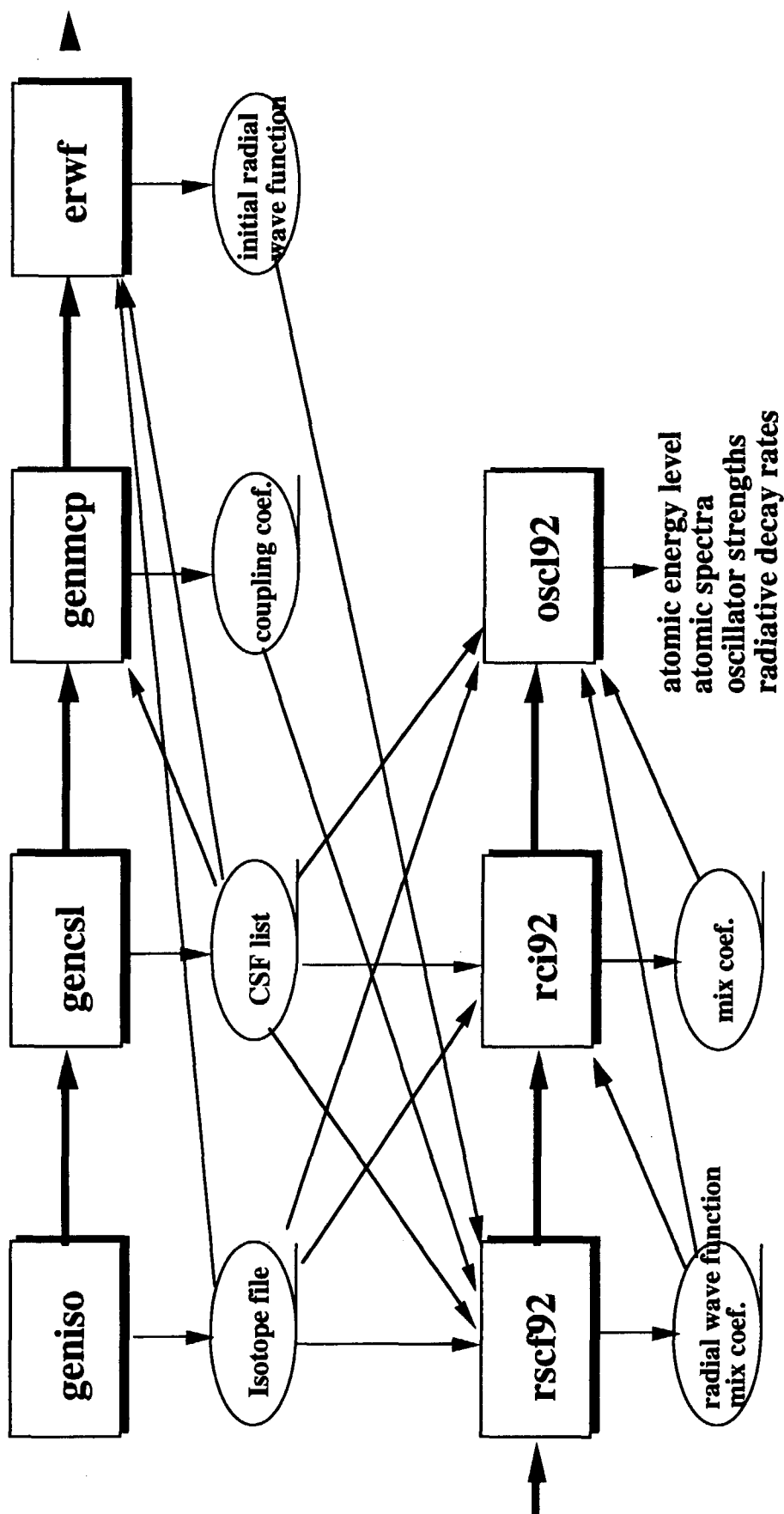


図 2 — 2 grasp92 標準実行手順

```

> geniso
File grasp92.iso will be created as the
ISOtope Data File; enter another filename
if this is not acceptable; <cr> otherwise:
2He.iso
Enter the atomic number:
2
Enter the mass number (0 if the
nucleus is to be modelled as a
point source:
4
The default root mean squared
radius is 3.07742823143709 fm;
the default nuclear skin thickness
is 2.300000000000000 fm;
Revise these values?
n
Enter the mass of the neutral
atom (in amu) (0 if the nucleus
is to be static):
4.002602
Enter your best estimate of
the ground state energy of
the neutral atom (in Hartrees):
4
The number of electrons in the
neutral atom is deduced to be 2;
Revise this?
n
Enter the nuclear spin quantum
number (I) (in units of h / 2 pi):
0
Enter the nuclear dipole moment
(in nuclear magnetons):
0
Enter the nuclear quadrupole
moment (in barns):
0

```

図 3 — 1 *genios* 入力

```

#!/bin/csh
#####
# set global data for this run #
#####
set atom = 2He
set dirname = $atom
if (! -d $dirname) then
    mkdir $dirname
endif
if (! -d $dirname/sum) then
    mkdir $dirname/sum
endif
set fname = He1
echo '#####'
echo '# generate csl file #'
echo '#####'
rm $dirname/$fname.csl
genscl <<CSL
$dirname/$fname.csl
y

1*
n
n
ls(2)
0

n
l
n
CSL
echo '#####'
echo '# generate mcp file #'
echo '#####'
rm $dirname/sum/$fname.genmcp.sum
rm $dirname/$fname.mcp.*
genmcp <<MCP
n
$dirname/sum/$fname.genmcp.sum
$dirname/$fname.csl
n
$dirname/$fname.mcp
n
n
MCP
echo '#####'
echo '# generate erwf file #'
echo '#####'
rm $dirname/sum/$fname.erwf.sum
rm $dirname/$fname.TF.rwf
erwf <<ERWF
n
$dirname/sum/$fname.erwf.sum
$dirname/$fname.csl
$atom.iso
n
n
y
*
n
$dirname/$fname.TF.rwf
ERWF

echo '#####'
echo '# EAL execution (rscf92) #'
echo '#####'
rm $dirname/sum/$fname.rscf92.sum
rm $dirname/$fname.EAL.rwf
rscf92 <<EAL
n
$dirname/sum/$fname.rscf92.sum
$dirname/$fname.csl
$dirname/$fname.mcp
$atom.iso
n
$dirname/$fname.TF.rwf
n
n
n
n
$dirname/$fname.EAL.rwf
EAL
echo '#####'
echo '# EOL execution (rscf92) #'
echo '#####'
set EOLprev = EAL ;@ EOLcnt ++ ; set EOLno = EOL$EOLcnt
echo $EOLno
rm $dirname/sum/$fname.rscf92.sum.$EOLno
rm $dirname/$fname.$EOLno.rwf
rm $dirname/$fname.$EOLno.mix
rscf92 <<EOL$EOLcnt
n
$dirname/sum/$fname.rscf92.sum.$EOLno
$dirname/$fname.csl
$dirname/$fname.mcp
$atom.iso
n
$dirname/$fname.$EOLprev.rwf
n
y
1
n
y
n
n
n
n
n
n
n
0.999
n
n
n
n
n
$dirname/$fname.$EOLno.rwf
$dirname/$fname.$EOLno.mix
EOL$EOLcnt
#####
# end of this run #
#####
#####

```

図 3—2 $n=1$ 実行シェルスクリプト

```

#####
# generate csl file
#####
File grasp92.csl will be created as the
GRASP92 Configuration Symmetry List File;
enter another filename if this is not
acceptable; null otherwise:
2He/HeI.csl
'Nonrelativistic' scheme?
y
Enter the list of nonrelativistic core
subshells:

Enter the list of nonrelativistic peel
subshells:
1*
Redefine default maximum nonrelativistic
peel subshell occupations?
n
Redefine default minimum nonrelativistic
peel subshell occupations?
n
Enter a nonrelativistic reference peel
subshell configuration (null if done):
Parity of configuration is even
1s(2)
Enter the J values for this configuration
(null for all possible J values):
0
Enter a nonrelativistic reference peel
subshell configuration (null if done):

Copy list of equivalent relativistic
reference configurations to screen?
n
Enter the maximum number of substitutions
permitted (0, ..., 9):
1
Copy CSF list to screen?
n
    1 relativistic subshells.
    1 relativistic CSFs generated.
#####
# generate mcp file
#####
GENMCP: Execution begins ...
Generate debug printout?
File genmcp.sum will be created as the
GENMCP SUMMARY File; enter another file
name if this is not acceptable; null
otherwise:
2He/sum/HeI.genmcp.sum
Enter the name of the Configuration
Symmetry List File:
2He/HeI.csl
Loading Configuration Symmetry List File ...
there is 1 relativistic subshell;
there are 1 relativistic CSFs;
... load complete;
Restarting GENMCP ?
n
Files grasp92.mcp will be created as the
GRASP92 MCP Files; enter another root
file name if this is not acceptable;
null otherwise:
2He/HeI.mcp
Generate MCP coefficients only for
diagonal matrix elements? (This is
appropriate to an (E)AL calculation):
n
Treat contributions of some CSFs
as first-order perturbations?
n
Column 1 complete;
Analysing sparse matrix array
definition file ...
... analysis complete: 1 nonzero
elements in H(DC); maximum possible: 1;
Sorting 0 T coefficients ...

```

図 3—3 (1/5) $n=1$ シェルスクリプト実行結果

```

... sort complete; 0 integrals;
Sorting 0 V(k=0) coefficients ...
... sort complete; 0 integrals;
Sorting 0 V(k=1) coefficients ...
... sort complete; 0 integrals;
GENMCP: Execution complete.
#####
# generate erwf file #
#####
ERWF: Execution begins ...
Generate debug printout?
File erwf.sum will be created as the
ERWF SUMMARY File; enter another file
name if this is not acceptable; null
otherwise:
2He/sum/He1.erwf.sum
Enter the name of the Configuration
Symmetry List File:
2He/He1.csl
Loading Configuration Symmetry List File ...
there is 1 relativistic subshell;
there are 1 relativistic CSFs;
... load complete;
Enter the name of the ISOTOPE Data
File:
2He.iso
Loading ISOTOPE Data File ...
... load complete;
Change the default speed of light
or radial grid parameters?
n
The following subshell radial
wavefunctions remain to be
estimated:
1s
Read any subshell radial wavefunctions
from GRASP92 Radial WaveFunction
File(s)?
n
Thomas-Fermi estimates for any subshell
radial wavefunctions?
y
Enter the list of relativistic subshells:
*
-
All required subshell radial wavefunctions have been estimated:
Subshell e p0 gamma P(2) Q(2) MTP
1s 1.251095302684D+00 5.099013353275D+00 1.000000000000D+00 5.228640102438D-07 -1.774280687458D-11 317
Source: Thomas-Fermi estimate
Revise any of these estimates?
n
Enter the name of the GRASP92 Radial
WaveFunction File that is to be created:
2He/He1.TF.rwf
ERWF: Execution complete.
#####
# EAL execution (rscf92) #
#####
RSCF92: Execution begins ...
Generate debug printout?
File rscf92.sum will be created as the
RSCF92 SUMMARY File; enter another file
name if this is not acceptable;
null otherwise:
2He/sum/He1.EAL.sum
Enter the name of the Configuration
Symmetry List File:
2He/He1.csl
Loading Configuration Symmetry List File ...
there is 1 relativistic subshell;
there are 1 relativistic CSFs;
... load complete;
Enter the root name for the GRASP92
MCP Files:
2He/He1.mcp
Enter the name of the ISOTOPE Data
File:
2He.iso
Loading ISOTOPE Data File ...

```

図 3-3 (2 / 5) $n=1$ シェルスクリプト実行結果

```

... load complete;
Change the default speed of light
or radial grid parameters?
n
Enter the name of the Radial WaveFunction
File:
Loading Radial WaveFunction File ...
2He/HeI.TF.rwf
... load complete;
Are any subshell radial wavefunctions
to be held fixed?
n
(E)OL type calculation?
n
(E)AL type calculation; H(DC)
will not be diagonalised;
Standard ASF weights are (2J+1)
values; revise?
n
Modify other defaults?
n
Enter the name of the GRASP92 Radial
WaveFunction File that is to be created:
2He/HeI.EAL.rwf

Lagrange multipliers are not required

Iteration number 1
-----
Subshell      Energy          P0              Norm            Method  Self-  Damping
              Energy          P0              Norm            Method  consistency  factor  JP  MTP  INV  NNP
1s  8.578662366D-01  8.509562438D+00  9.140410621D-06  1  1.1835D-01  0.0000  268  322  0  0
1s  9.113651357D-01  5.426207546D+00  5.508140663D-03  1  6.4092D-02  0.2500  267  323  1  0
1s  9.172420837D-01  4.882585797D+00  5.426138824D-01  1  1.2312D-02  0.1875  267  322  1  0
.....

Iteration number 5
-----
Subshell      Energy          P0              Norm            Method  Self-  Damping
              Energy          P0              Norm            Method  consistency  factor  JP  MTP  INV  NNP
1s  9.179906819D-01  4.757902717D+00  9.999972468D-01  1  6.0053D-09  0.2198  267  320  0  0
RSCF92: Execution complete.
#####
# EOL execution (rscf92) #
#####
EOL1
RSCF92: Execution begins ...
Generate debug printout?
n
File rscf92.sum will be created as the
RSCF92 SUMMARY File; enter another file
name if this is not acceptable;
null otherwise:
2He/sum/HeI.EOL1.sum
Enter the name of the Configuration
Symmetry List File:
2He/HeI.csl
Loading Configuration Symmetry List File ...
there is 1 relativistic subshell;
there are 1 relativistic CSFs;
... load complete;
Enter the root name for the GRASP92
MCP Files:
2He/HeI.mcp
Enter the name of the ISOTOPE Data
File:
2He.iso
Loading ISOTOPE Data File ...
... load complete;
Change the default speed of light
or radial grid parameters?
n

```

図 3-3 (3/5) n=1 シェルスクリプト実行結果


```

Enter the name of the Radial WaveFunction
File:
2He/He1.EAL.rwf
Loading Radial WaveFunction File ...
... load complete;
Are any subshell radial wavefunctions
to be held fixed?
n
(E)OL type calculation?
y
Enter the serial numbers of the ASF(s)
of which the energies are to be
optimised:
1
The following subshell radial functions
will be improved:
1s
Which of these are correlation functions?
Enter the list of relativistic subshells:

Modify other defaults?
y
An oscillation in the large-component of the
radial wavefunction is disregarded for the
purposes of node counting if its amplitude
is less than 1/20 the maximum amplitude.
Revise this?
n
The subshells will be improved in the
order
1s
Revise this order?
n
Method 1 is used for integrating the
radial differential equation for
subshells
1s
Select a different integration method for any
subshell radial wavefunction?
n
The first oscillation of the large component
of all radial wavefunctions will be required
to be positive. Revise this?
n
Set accelerating parameters for subshell radial
wavefunctions?
y
Different accelerating parameters for different
subshell radial wavefunction?
n
Enter the accelerating parameter
(0 < ODAMP < 1 allows ODAMP to be
reduced as convergence is approached;
-1 < ODAMP < 0 implies |ODAMP| is
held constant):
0.999
Set accelerating parameters for the eigenvectors?
n
The maximum number of SCF cycles is 24
Revise this?
n
Following the improvement of each of the subshell
radial wavefunctions in turn, the 4 least self-
consistent functions will be improved at the end
of the first SCF cycle. Revise this setting?
n
The maximum number of cycles in attempting to
solve each radial equation is 3 times the
principal quantum number of the radial wave-
function to be estimated. Revise this setting?
n
Subshell radial wavefunctions will be
Schmidt orthogonalised immediately
following their estimation to all
functions with poorer self-consistency.
Revise this?
n

```

図 3—3 (4 / 5) $n=1$ シェルスクリプト実行結果

```

Enter the name of the GRASP92 Radial
WaveFunction File that is to be created:
2He/HeI.EOL1.rwf
File grasp92.mix will be created as the
GRASP92 MIXing coefficients File: enter
another file name if this is not acceptable;
null otherwise:
2He/HeI.EOL1.mix

Lagrange multipliers are not required

MATRIX ...

Average energy = -2.8618133225D+00 Hartrees

MANEIG ...

Optimise on the following level(s):

Level 1 Energy = -2.861813322493D+00 Weight = 1.000000000000D+00
J P = 0 +: 100.00% of CSF 1

Generalised occupation numbers

2.0000000D+00

Iteration number 1
-----
Subshell Energy PO Norm Method Self- Damping
consistency factor JP MTP INV NNP
1s 9.179906818D-01 4.757901238D+00 9.999971666D-01 1 1.3218D-09 0.7492 267 320 0 0

MATRIX ...

Average energy = -2.8618133225D+00 Hartrees

MANEIG ...

RSCF92: Execution complete.

```

図 3—3 (5 / 5) $n=1$ シェルスクリプト実行結果

```

#!/bin/csh
#####
# set global data for this run #
#####
set atom = 2He
set dirname = $atom
if (! -d $dirname) then
    mkdir $dirname
endif
if (! -d $dirname/sum) then
    mkdir $dirname/sum
endif
set fname = He1
echo '#####'
echo '# generate csl file #'
echo '#####'
rm $dirname/$fname.csl
gensl <<CSL
$dirname/$fname.csl
y
1* 2* 3* 4* 5*
n
n
ls(2)
0
n
2
n
CSL
echo '#####'
echo '# generate mcp file #'
echo '#####'
rm $dirname/sum/$fname.genmcp.sum
rm $dirname/$fname.mcp.*
genmcp <<MCP
n
$dirname/sum/$fname.genmcp.sum
$dirname/$fname.csl
n
$dirname/$fname.mcp
n
n
MCP
echo '#####'
echo '# append erwf file #'
echo '#####'
rm $dirname/sum/$fname.erwf.sum
rm $dirname/$fname.TF.rwf
erwf <<ERWF
n
$dirname/sum/$fname.erwf.sum
$dirname/$fname.csl
$atom.iso
n
y
1* 2* 3* 4*
$dirname/$fname.rwf.n4
y
5*
n
$dirname/$fname.TF.rwf
ERWF
echo '#####'
echo '# preparation for EOL execution #'
echo '#####'
set EOLno = TF; set EOLcnt = 0
rm $dirname/$fname.EOL*.rwf
rm $dirname/$fname.EOL*.mix
echo '#####'
echo '# EOL execution (rscf92) #'

echo '#####'
set EOLprev = $EOLno; @ EOLcnt ++; set EOLno = EOL.$EOLcnt
echo $EOLno
rm $dirname/sum/$fname.rscf92.sum.$EOLno
rm $dirname/$fname.$EOLno.rwf
rm $dirname/$fname.$EOLno.mix
rscf92 <<EOL.$EOLcnt
n
$dirname/sum/$fname.rscf92.sum.$EOLno
$dirname/$fname.csl
$dirname/$fname.mcp
$atom.iso
n
$dirname/$fname.$EOLprev.rwf
y
1
2* 3* 4* 5*
y
n
n
n
n
y
0.9
n
y
15
n
y
30

```

図 3-4 (1/2) $n=5$ 実行シェルスクリプト

```

n                                     2* 3* 4* 5*
$dirname/$fname.$EOLno.rwf          y
$dirname/$fname.$EOLno.mix          n
EOL.$EOLcnt                          n
echo '#####'                       n
echo '# EOL execution (rscf92)      #' n
echo '#####'                       y
set EOLprev = $EOLno ; @ EOLcnt ++ ; set EOLno = EOL.$EOLcnt n
echo $EOLno                          -0.9
rm $dirname/sum/$fname.rscf92.sum.$EOLno n
rm $dirname/$fname.$EOLno.rwf        y
rm $dirname/$fname.$EOLno.mix        100
rscf92 <<EOL.$EOLcnt                 n
n                                     y
$dirname/sum/$fname.rscf92.sum.$EOLno 30
$dirname/$fname.csl                  n
$dirname/$fname.mcp                  $dirname/$fname.$EOLno.rwf
$atom.iso                            $dirname/$fname.$EOLno.mix
n                                     EOL.$EOLcnt
$dirname/$fname.$EOLprev.rwf        #####
y                                     # end of this run #
y                                     #####
1

```

図 3-4 (2/2) $n=5$ 実行シェルスクリプト

```

#####
# generate csl file #
#####
File grasp92.csl will be created as the
CRASP92 Configuration Symmetry List File;
enter another filename if this is not
acceptable; null otherwise:
2He/HeI.csl
'Nonrelativistic' scheme?
Enter the list of nonrelativistic core
subshells:

Enter the list of nonrelativistic peel
subshells:
1* 2* 3* 4* 5*
Redefine default maximum nonrelativistic
peel subshell occupations?
n
Redefine default minimum nonrelativistic
peel subshell occupations?
n
Enter a nonrelativistic reference peel
subshell configuration (null if done):
1s(2)
Parity of configuration is even
Enter the J values for this configuration
(null for all possible J values):
0
Enter a nonrelativistic reference peel
subshell configuration (null if done):

Copy list of equivalent relativistic
reference configurations to screen?
n
Enter the maximum number of substitutions
permitted (0, ..., 9):
2
Copy CSF list to screen?
    25 relativistic subshells.
    55 relativistic CSFs generated.
#####
# generate mcp file #
#####
GENMCP: Execution begins ...
Generate debug printout?
n
File genmcp.sum will be created as the
GENMCP SUMMARY File; enter another file
name if this is not acceptable; null
otherwise:
2He/sum/HeI.genmcp.sum
Enter the name of the Configuration
Symmetry List File:
2He/HeI.csl
Loading Configuration Symmetry List File ...
there are 25 relativistic subshells;
there are 55 relativistic CSFs;
... load complete;
Restarting GENMCP ?
n
Files grasp92.mcp will be created as the
CRASP92 MCP Files; enter another root
file name if this is not acceptable;
null otherwise:
2He/HeI.mcp
Generate MCP coefficients only for
diagonal matrix elements? (This is
appropriate to an (E)AL calculation):
n
Treat contributions of some CSFs
as first-order perturbations?
n
Column 1 complete;
Column 2 complete;
Column 3 complete;
.....
Column 53 complete;
Column 54 complete;

```

図 3-5 (1/8) $n=5$ シェルスクリプト実行結果

```

Column 55 complete;
Analysing sparse matrix array
definition file ...
... analysis complete; 1540 nonzero
elements in H(DC); maximum possible: 1540;
Sorting 120 T coefficients ...
... sort complete; 30 integrals;
Sorting 342 V(k=0) coefficients ...
... sort complete; 231 integrals;
Sorting 726 V(k=1) coefficients ...
... sort complete; 726 integrals;
Sorting 704 V(k=2) coefficients ...
... sort complete; 669 integrals;
Sorting 470 V(k=3) coefficients ...
... sort complete; 470 integrals;
Sorting 261 V(k=4) coefficients ...
... sort complete; 253 integrals;
Sorting 105 V(k=5) coefficients ...
... sort complete; 105 integrals;
Sorting 38 V(k=6) coefficients ...
... sort complete; 37 integrals;
Sorting 9 V(k=7) coefficients ...
... sort complete; 9 integrals;
Sorting 2 V(k=8) coefficients ...
... sort complete; 2 integrals;
Sorting 0 V(k=9) coefficients ...
... sort complete; 0 integrals;
GENMCP: Execution complete.
#####
# append erwf file
#####
ERWF: Execution begins ...
Generate debug printout?

#
File erwf.sum will be created as the
ERWF Summary File; enter another file
name if this is not acceptable; null
otherwise:
2He/sum/HeI.erwf.sum
Enter the name of the Configuration
Symmetry List File:
2He/HeI.csl
Loading Configuration Symmetry List File ...
there are 25 relativistic subshells;
there are 55 relativistic CSPs;
... load complete;
Enter the name of the ISotope Data
File:
2He.iso
Loading ISotope Data File ...
... load complete;
Change the default speed of light
or radial grid parameters?

#
The following subshell radial
wavefunctions remain to be
estimated:
1s 2s 2p- 2p 3s 3p- 3p 3d- 3d 4s 4p- 4p 4d- 4d 4f- 4f 5s 5p- 5p 5d- 5d 5f- 5f
5g- 5g
Read any subshell radial wavefunctions
from GRASP92 Radial WaveFunction
File(s)?

#
Enter the list of relativistic subshells:
1* 2* 3* 4*
Enter the name of the Radial WaveFunction
File:
2He/HeI.rwf.n4
The following subshell radial
wavefunctions remain to be
estimated:
5s 5p- 5p 5d- 5d 5f- 5f 5g- 5g
Thomas-Fermi estimates for any subshell
radial wavefunctions?

#
Enter the list of relativistic subshells:
5*

```

図 3—5 (2/8) $n=5$ シェルスクリプト実行結果

All required subshell radial wavefunctions have been estimated:

Subshell	e	p0	gamma	P(2)	Q(2)	MTP
1s	9.595407981006D-01	5.272098055725D+00	1.000000000000D+00	4.992265224674D-07	-1.155074473717D-11	320
	Source: 2He/HeI.rwf.n4					
2s	2.706852770449D+00	2.719729815177D+01	1.000000000000D+00	7.332494298769D-07	-2.186893310647D-11	320
	Source: 2He/HeI.rwf.n4					
2p-	3.343591383901D+00	6.577170784358D-04	1.000000000000D+00	2.545660552402D-10	9.101456511541D-09	329
	Source: 2He/HeI.rwf.n4					
2p	3.346734924606D+00	-2.817985522326D+05	2.000000000000D+00	-7.241298595514D-11	-1.815879906993D-06	329
	Source: 2He/HeI.rwf.n4					
3s	6.933082106928D+00	-5.915083444653D+01	1.000000000000D+00	-1.377358599728D-06	1.512640876680D-11	320
	Source: 2He/HeI.rwf.n4					
3p-	5.788150646660D+00	-2.134256327289D-03	1.000000000000D+00	-1.683065059350D-09	-2.650717025083D-08	336
	Source: 2He/HeI.rwf.n4					
3p	5.633511376388D+00	3.746430979594D+06	2.000000000000D+00	1.010371031131D-09	2.150001466370D-05	336
	Source: 2He/HeI.rwf.n4					
3d-	6.306023603007D+00	-3.127673668736D-02	2.000000000000D+00	6.234431344251D-10	3.033400239543D-14	336
	Source: 2He/HeI.rwf.n4					
3d	6.310343955575D+00	4.214676242319D+04	3.000000000000D+00	7.934235464674D-16	-2.451364773021D-11	336
	Source: 2He/HeI.rwf.n4					
4s	1.014923354216D+01	-1.813364905854D+02	1.000000000000D+00	1.726948804961D-06	1.375750106999D-10	320
	Source: 2He/HeI.rwf.n4					
4p-	1.097525826047D+01	7.568761938016D-04	1.000000000000D+00	1.156463466585D-09	5.086674041064D-08	339
	Source: 2He/HeI.rwf.n4					
4p	1.117045445790D+01	-9.960000744157D+06	2.000000000000D+00	-2.752545297600D-09	-5.359062963815D-05	338
	Source: 2He/HeI.rwf.n4					
4d-	1.243450592640D+01	1.646553909448D-01	2.000000000000D+00	-2.429570921054D-09	-6.090487897933D-14	338
	Source: 2He/HeI.rwf.n4					
4d	1.233950286471D+01	4.110712726420D+06	3.000000000000D+00	-5.061705816171D-15	1.127478016835D-10	338
	Source: 2He/HeI.rwf.n4					
4f-	1.190386872505D+01	2.819438587768D-03	3.000000000000D+00	6.034694991282D-26	1.249869016646D-21	312
	Source: 2He/HeI.rwf.n4					
4f	1.190355137404D+01	2.328760936849D+01	4.000000000000D+00	-4.920638815446D-27	-3.148705218843D-31	312
	Source: 2He/HeI.rwf.n4					
5s	2.348654403143D-02	2.852904997669D-01	1.000000000000D+00	2.925431342453D-08	-9.927259261777D-13	364
	Source: Thomas-Fermi estimate					
5p-	2.203611285564D-02	1.039061235019D-05	1.000000000000D+00	7.006415186087D-15	1.460085818865D-10	365
	Source: Thomas-Fermi estimate					
5p	2.203577482425D-02	1.300090731892D-01	2.000000000000D+00	1.367032572293D-15	-4.638935388631D-20	365
	Source: Thomas-Fermi estimate					
5d-	2.086855698120D-02	7.256992596660D-07	2.000000000000D+00	1.003561533188D-22	2.091349014739D-18	366
	Source: Thomas-Fermi estimate					
5d	2.086850015419D-02	1.09006577002D-02	3.000000000000D+00	1.175268020223D-23	-3.988195007792D-28	366
	Source: Thomas-Fermi estimate					
5f-	2.036168216682D-02	2.182323442120D-08	3.000000000000D+00	4.641948362188D-31	9.673481669355D-27	366
	Source: Thomas-Fermi estimate					
5f	2.036166249635D-02	3.512257282384D-04	4.000000000000D+00	3.883262261440D-32	-1.317759607602D-36	366
	Source: Thomas-Fermi estimate					
5g-	2.015886143484D-02	3.091917746648D-10	4.000000000000D+00	8.991879050575D-40	1.873841978506D-35	365
	Source: Thomas-Fermi estimate					
5g	2.015885050873D-02	5.159690881806D-06	5.000000000000D+00	5.849741626149D-41	-1.985071501255D-45	365
	Source: Thomas-Fermi estimate					

Revise any of these estimates?

```

d
Enter the name of the GRASP92 Radial
WaveFunction File that is to be created:
2He/HeI.TF.rwf
ERWF: Execution complete.
#####
# preparation for EOL execution      #
#####
# EOL execution (rscf92)            #
#####
EOL1
RSCF92: Execution begins ...
Generate debug printout?

d
File rscf92.sum will be created as the
RSCF92 SUMMARY File; enter another file
name if this is not acceptable;
null otherwise:
2He/sum/HeI.rscf92.sum.EOL1
Enter the name of the Configuration
Symmetry List File:
2He/HeI.csl
Loading Configuration Symmetry List File ...
there are 25 relativistic subshells;
    
```

図 3-5 (3/8) n=5 シェルスクリプト実行結果

```

there are 55 relativistic CSFs:
... load complete;
Enter the root name for the GRASP92
MCP Files:
2He/HeI.mcp
Enter the name of the ISotope Data
File:
2He.iso
Loading ISotope Data File ...
... load complete;
Change the default speed of light
or radial grid parameters?
n
Enter the name of the Radial WaveFunction
File:
2He/HeI.TE.rwf
Loading Radial WaveFunction File ...
... load complete;
Are any subshell radial wavefunctions
to be held fixed?
y
Enter the list of relativistic subshells:

(E)OL type calculation?
y
Enter the serial numbers of the ASF(s)
of which the energies are to be
optimised:
1
The following subshell radial functions
will be improved:
5s 5p- 5p 5d- 5d 5f- 5f 5g- 5g
Which of these are correlation functions?
2* 3* 4* 5*
Enter the list of relativistic subshells:
Modify other defaults?
y
An oscillation in the large-component of the
radial wavefunction is disregarded for the
purposes of node counting if its amplitude
is less than 1/20 the maximum amplitude.
Revise this?
n
The subshells will be improved in the
order
5s 5p- 5p 5d- 5d 5f- 5f 5g- 5g
Revise this order?
n
Method 3 is used for integrating the
radial differential equation for
subshells
5s 5p- 5p 5d- 5d 5f- 5f 5g- 5g
Select a different integration method for any
subshell radial wavefunction?
n
The first oscillation of the large component
of the following radial wavefunctions will
be required to be positive
5s 5p- 5p 5d- 5d 5f- 5f 5g- 5g
Revise this?
n
Subshell accelerating parameters have been
set. Revise these?
y
Different accelerating parameters for different
subshell radial wavefunction?
n
Enter the accelerating parameter
(0< ODAMP < 1 allows ODAMP to be
reduced as convergence is approached;
-1 < ODAMP < 0 implies |ODAMP| is
held constant):
0.9
Set accelerating parameters for the eigenvectors?
n
The maximum number of SCF cycles is 24
Revise this?
y

```

☒ 3—5 (4 / 8) $n=5$ シェルスクリプト実行結果

Enter the maximum number of SCF cycles:

15
Following the improvement of each of the subshell radial wavefunctions in turn, the 0 least self-consistent functions will be improved at the end of the first SCF cycle. Revise this setting?

1
The maximum number of cycles in attempting to solve each radial equation is 3 times the principal quantum number of the radial wavefunction to be estimated. Revise this setting?

1
Enter the factor that multiplies the principal quantum number:

20
Subshell radial wavefunctions will be Schmidt orthogonalised immediately following their estimation to all functions with poorer self-consistency. Revise this?

1
Enter the name of the GRASP92 Radial WaveFunction File that is to be created:
2He/HeI.EOL1.rwf
File grasp92.mix will be created as the GRASP92 MIXing coefficients File; enter another file name if this is not acceptable; null otherwise:
2He/HeI.EOL1.mix

Include Lagrange multipliers between:

```
1s 5s
2s 5s
2p- 5p-
2p 5p
```

Optimise on the following level(s):

Level 1 Energy = -2.903424728742D+00 Weight = 1.00000000000D+00
J P = 0 +: 99.16% of CSF 1 0.38% of CSF 6 0.25% of CSF 14 0.13% of C
SF 10 0.04% of CSF 2

Generalised occupation numbers

```
1.9835563D+00 7.9763307D-03 2.5360453D-03 5.0681078D-03 1.2474613D-04 9.7740279D-05 2.0087596D-04 1.2713026D-04
1.9072010D-04 1.0267764D-05 8.0410077D-06 1.5972867D-05 1.2621642D-05 1.9060751D-05 1.6175660D-05 2.1586397D-05
6.6839953D-07 6.2033608D-07 1.2402913D-06 1.3907791D-06 2.0853911D-06 2.2691368D-06 3.0291664D-06 3.0998965D-06
3.8786871D-06
```

Lagrange multipliers:

```
1s 5s 2.782832360D-05
2s 5s 1.702911361D-06
2p- 5p- 3.807760809D-06
2p 5p 8.457360061D-06
3s 5s -2.990697182D-06
3p- 5p- -3.588114315D-06
3p 5p -7.860844640D-06
3d- 5d- -6.226341932D-06
3d 5d -9.149225509D-06
4s 5s -9.338674308D-06
4p- 5p- -8.098534435D-06
4p 5p -1.628801976D-05
4d- 5d- -1.329352221D-05
4d 5d -2.018575008D-05
4f- 5f- -1.431997343D-05
4f 5f 1.920436975D-05
```

Iteration number 35

Subshell	Energy	P0	Norm	Method	Self-consistency	Damping factor	JP	MTP	INV	NNP
5s	2.634079113D+01	6.554028234D+01	9.999973592D-01	3	3.1883D-09	0.0000	211	320	0	4
5p-	2.623083215D+01	-4.148187501D-03	9.999960789D-01	3	4.8413D-09	0.0000	211	338	0	3

図 3—5 (5/8) n=5 シェルスクリプト実行結果

```

          5p  2.634369874D+01  1.803894690D+07  9.999964307D-01  3  6.5120D-09  0.0000  211  337  0  3
5d-  2.291313105D+01  -3.878989699D-01  9.999948988D-01  3  9.8794D-09  0.0000  214  337  0  2
5d  2.297052605D+01  -8.058644368D+05  9.999949832D-01  3  1.2336D-08  0.0000  214  337  0  2
5f-  2.002971383D+01  -1.205176737D-02  9.999982749D-01  3  4.4736D-09  0.0000  217  312  0  1
5f  2.003111458D+01  -4.212756763D+02  9.999983038D-01  3  5.3007D-09  0.0000  217  312  0  1
5g-  1.825161887D+01  -6.846783564D-03  9.999996732D-01  3  1.2105D-09  0.0000  218  309  0  0
5g  1.825408859D+01  1.103717358D+02  9.999996790D-01  3  1.4055D-09  0.0000  218  309  0  0

MATRIX ...

Average energy = 2.6737629392D+01 Hartrees

MANEIG ...

FNDBLK ...

DVDSO: 24 loops; 24 matrix-vector multiplies.
RSCF92: Execution complete.
#####
# EOL execution (rscf92) #
#####
EOL2
RSCF92: Execution begins ...
Generate debug printout?
.....
.....
Optimise on the following level(s):

Level 1 Energy = -2.903431163291D+00 Weight = 1.0000000000D+00
J P = 0 +: 99.13% of CSF 1 0.38% of CSF 6 0.25% of CSF 14 0.12% of C
SF 10 0.07% of CSF 2

Generalised occupation numbers

1.9833480D+00 8.1706281D-03 2.5214319D-03 5.0417461D-03 1.2102232D-04 1.1159223D-04 2.2647251D-04 1.2869085D-04
1.9291757D-04 1.1263463D-05 1.1298843D-05 2.1571454D-05 1.3453747D-05 2.0414827D-05 1.6980149D-05 2.2657233D-05
6.4593633D-07 7.8270047D-07 1.5533444D-06 1.6472148D-06 2.4758493D-06 2.4584939D-06 3.2826288D-06 3.1047375D-06
3.8841499D-06

Lagrange multipliers:

1s 2s 7.462150201D-03
1s 3s 4.428959395D-04
1s 4s 4.878631738D-04
1s 5s 1.472715302D-04
2s 3s -7.634356315D-04
2s 4s -2.037235408D-05
2s 5s -7.176358348D-06
2p- 3p- 2.486412344D-04
2p- 4p- 2.012587263D-04
2p- 5p- 2.117840314D-05
2p 3p 5.133108994D-04
2p 4p 4.594102703D-04
2p 5p 4.329826629D-05
3s 4s 1.755354219D-05
3s 5s 1.155319191D-05
3p- 4p- -8.943841332D-06
3p- 5p- 5.289163368D-07
3p 4p -4.378533411D-05
3p 5p -8.011009200D-07
3d- 4d- -5.813350106D-05
3d- 5d- -2.534068622D-06
3d 4d -8.223989757D-05
3d 5d -3.336857881D-06
4s 5s -3.063684801D-06
4p- 5p- -7.856040514D-06
4p 5p -1.578230152D-05
4d- 5d- -1.292691384D-05
4d 5d -1.946102323D-05
4f- 5f- -1.370616828D-05
4f 5f 1.831498794D-05

Iteration number 15

```

図3—5 (6 / 8) n=5 シェルスクリプト実行結果

Subshell	Energy	P0	Norm	Method	Self-consistency	Damping factor	JP	MTP	INV	NNP
1s	9.600196961D-01	5.473904742D+00	9.990540926D-01	1	1.6215D-04	0.0120	266	320	0	0
2s	2.631224913D+00	3.081618075D+01	1.001749244D+00	3	1.9170D-04	0.0120	250	321	0	1
2p-	3.360304672D+00	7.384688314D-04	9.959949406D-01	3	2.4153D-04	0.0120	248	316	0	0
2p	3.360921053D+00	2.937379037D+06	9.952634402D-01	3	4.0937D-04	0.0120	247	316	0	0
3s	7.173312163D+00	-8.567108667D+00	9.974203537D-01	3	9.8215D-05	0.0120	234	321	0	2
3p-	5.172236174D+00	-2.708399007D-03	9.951368332D-01	3	8.1657D-05	0.0120	242	317	0	1
3p	5.106397249D+00	3.416282944D+07	9.956187818D-01	3	1.5082D-04	0.0120	242	317	0	1
3d-	6.207295708D+00	7.792492483D-05	1.002508450D+00	3	6.1947D-07	0.0120	238	314	0	0
3d	6.219246427D+00	-9.298999482D+05	1.002482137D+00	3	5.4347D-05	0.0120	238	314	0	0
4s	8.308800019D+00	-8.457007030D+01	1.004740249D+00	3	1.4269D-04	0.0120	233	321	0	3
4p-	7.346762474D+00	2.189829693D-03	1.013660931D+00	3	1.5270D-04	0.0120	235	318	0	2
4p	7.914351342D+00	-2.256436680D+08	1.018186722D+00	3	2.5638D-04	0.0120	234	318	0	2
4d-	1.053536178D+01	2.395965566D-01	1.006779597D+00	3	1.2922D-06	0.0120	229	315	0	1
4d	1.037168009D+01	2.146279772D+07	1.007797123D+00	3	3.6218D-05	0.0120	229	315	0	1
4f-	1.041328995D+01	7.081189017D+01	1.004362384D+00	3	3.1564D-05	0.0120	229	312	0	0
4f	1.041489167D+01	-3.648177224D+12	1.004190900D+00	3	3.5357D-05	0.0120	229	312	0	0
5s	3.442382727D+01	-1.134741382D+03	1.135726201D+00	3	2.6458D-05	0.0120	206	319	0	4
5p-	2.229826859D+01	-6.936951146D-03	1.031033549D+00	3	2.1078D-04	0.0120	214	317	0	3
5p	2.259104727D+01	4.369860628D+08	1.036110207D+00	3	3.3277D-04	0.0120	214	317	0	3
5d-	2.038624759D+01	-5.318140057D-01	1.002470154D+00	3	4.9047D-07	0.0120	216	315	0	2
5d	2.040330904D+01	-6.589885107D+07	1.001340394D+00	3	2.0707D-05	0.0120	216	315	0	2
5f-	1.906139202D+01	6.749124218D+03	1.003881234D+00	3	1.1537D-05	0.0120	218	312	0	1
5f	1.905755267D+01	-1.382769574D+13	1.003605940D+00	3	1.2494D-05	0.0120	218	312	0	1
5g-	1.825943467D+01	6.743964775D-02	1.000364703D+00	3	1.8391D-06	0.0120	218	309	0	0
5g	1.826590946D+01	-1.366974022D+08	1.000297929D+00	3	1.8171D-06	0.0120	218	309	0	0

Maximum iterations in SCF Exceeded.

RSCF92: Execution complete.

#####

EOL execution (rscf92)

#####

EOL3

RSCF92: Execution begins ...

Optimise on the following level(s):

Level 1 Energy = -2.903433337107D+00 Weight = 1.00000000000D+00
 JP = 0 +: 99.11% of CSF 1 0.37% of CSF 6 0.25% of CSF 14 0.12% of C
 SF 10 0.09% of CSF 2

Generalised occupation numbers

1.9831104D+00 8.4080667D-03 2.5076382D-03 4.9968865D-03 1.1956481D-04 1.2222208D-04 2.6435143D-04 1.2879565D-04
 1.9322273D-04 1.2820591D-05 1.4290139D-05 2.8198395D-05 1.3284107D-05 2.0037504D-05 1.7086137D-05 2.2799189D-05
 1.2793138D-06 8.4455289D-07 1.6373923D-06 1.6375843D-06 2.4617567D-06 2.3530947D-06 3.1448917D-06 3.1029117D-06
 3.8824101D-06

Lagrange multipliers:

1s 2s 1.501179275D-03
 1s 3s -9.467556938D-04
 1s 4s 2.971350565D-04
 1s 5s 1.691231344D-04

4d 5d -2.091411709D-05
 4f- 5f- -1.696906783D-05
 4f 5f 2.263788928D-05

Iteration number 100

Subshell	Energy	P0	Norm	Method	Self-consistency	Damping factor	JP	MTP	INV	NNP
1s	9.601523156D-01	5.633492572D+00	9.988144953D-01	1	2.4465D-04	0.9000	266	320	0	0
2s	2.552978337D+00	3.369534134D+01	1.001420649D+00	3	1.8848D-04	0.9000	250	321	0	1
2p-	3.371408553D+00	7.275194520D-04	9.951441529D-01	3	1.4179D-04	0.9000	248	316	0	0
2p	3.378740159D+00	3.818214715D+07	9.941069325D-01	3	5.1165D-04	0.9000	247	316	0	0
3s	7.416963882D+00	5.097384326D+01	9.946408262D-01	3	1.2601D-05	0.9000	233	321	0	2
3p-	4.760077997D+00	-1.924725131D-03	9.965394981D-01	3	9.7023D-05	0.9000	243	317	0	1
3p	4.490845538D+00	3.218807127D+08	9.966869420D-01	3	1.6725D-04	0.9000	244	317	0	1
3d-	6.195615805D+00	-4.149266311D-03	1.001434011D+00	3	4.7870D-05	0.9000	238	314	0	0
3d	6.200469483D+00	-6.494143494D+06	1.001817074D+00	3	6.5890D-05	0.9000	238	314	0	0

図 3—5 (7 / 8) n=5 シェルスクリプト実行結果

	4s	7.432596821D+00	-3.180436056D+01	9.992910812D-01	3	6.1749D-06	0.9000	236	320	0	3
4p-		6.254994378D+00	-2.514414204D-04	1.002887799D+00	3	1.1485D-05	0.9000	238	318	0	2
4p		6.674486641D+00	-1.799013563D+09	1.007541852D+00	3	5.0385D-05	0.9000	237	318	0	2
4d-		1.070717158D+01	1.124034308D-01	1.005126904D+00	3	1.4598D-05	0.9000	228	315	0	1
4d		1.063699251D+01	1.027366510D+08	1.005432785D+00	3	2.1457D-05	0.9000	228	315	0	1
4f-		1.030530555D+01	1.468312100D+02	1.003404808D+00	3	2.6480D-05	0.9000	229	312	0	0
4f		1.030731525D+01	-1.023761701D+13	1.003549514D+00	3	3.1942D-05	0.9000	229	312	0	0
5s		1.531010571D+01	-1.041931356D+03	1.008671960D+00	3	1.4291D-05	0.9000	221	319	0	4
5p-		2.087015782D+01	-5.131554428D-03	1.002135398D+00	3	5.7500D-06	0.9000	216	317	0	3
5p		2.159058614D+01	2.780043170D+09	1.001398644D+00	3	9.7234D-06	0.9000	215	317	0	3
5d-		2.059417348D+01	-3.262318998D-01	1.001756515D+00	3	7.6246D-06	0.9000	216	315	0	2
5d		2.058748709D+01	-2.809475460D+08	1.001813156D+00	3	9.2783D-06	0.9000	216	315	0	2
5f-		2.021664667D+01	5.880117152D+03	1.001770811D+00	3	8.6313D-06	0.9000	216	312	0	1
5f		2.018600319D+01	-3.559717649D+13	1.001935758D+00	3	1.0353D-05	0.9000	216	312	0	1
5g-		1.827849313D+01	6.532932414D-02	9.999856594D-01	3	1.8363D-07	0.9000	218	309	0	0
5g		1.828123536D+01	-2.913956232D+08	1.000045973D+00	3	3.1640D-07	0.9000	218	309	0	0

Maximum iterations in SCF Exceeded.
RSCF92: Execution complete.

図 3-5 (8 / 8) $n=5$ シェルスクリプト実行結果

国際単位系 (SI) と換算表

表1 SI基本単位および補助単位

量	名称	記号
長さ	メートル	m
質量	キログラム	kg
時間	秒	s
電流	アンペア	A
熱力学温度	ケルビン	K
物質質量	モル	mol
光度	カンデラ	cd
平面角	ラジアン	rad
立体角	ステラジアン	sr

表3 固有の名称をもつSI組立単位

量	名称	記号	他のSI単位による表現
周波数	ヘルツ	Hz	s ⁻¹
力	ニュートン	N	m·kg/s ²
圧力, 応力	パスカル	Pa	N/m ²
エネルギー, 仕事, 熱量	ジュール	J	N·m
工率, 放射束	ワット	W	J/s
電気量, 電荷	クーロン	C	A·s
電位, 電圧, 起電力	ボルト	V	W/A
静電容量	ファラド	F	C/V
電気抵抗	オーム	Ω	V/A
コンダクタンス	ジーメンズ	S	A/V
磁束	ウェーバ	Wb	V·s
磁束密度	テスラ	T	Wb/m ²
インダクタンス	ヘンリー	H	Wb/A
セルシウス温度	セルシウス度	°C	
光度	ルーメン	lm	cd·sr
照射度	ルクス	lx	lm/m ²
放射能	ベクレル	Bq	s ⁻¹
吸収線量	グレイ	Gy	J/kg
線量等量	シーベルト	Sv	J/kg

表2 SIと併用される単位

名称	記号
分, 時, 日	min, h, d
度, 分, 秒	°, ', "
リットル	l, L
トン	t
電子ボルト	eV
原子質量単位	u

1 eV=1.60218×10⁻¹⁹J
1 u=1.66054×10⁻²⁷kg

表4 SIと共に暫定的に維持される単位

名称	記号
オングストローム	Å
バーン	b
バール	bar
ガロン	Gal
キュリー	Ci
レントゲン	R
ラド	rad
レム	rem

1 Å=0.1nm=10⁻¹⁰m
1 b=100fm²=10⁻²⁸m²
1 bar=0.1MPa=10⁵Pa
1 Gal=1cm/s²=10⁻²m/s²
1 Ci=3.7×10¹⁰Bq
1 R=2.58×10⁻⁴C/kg
1 rad=1cGy=10⁻²Gy
1 rem=1cSv=10⁻²Sv

表5 SI接頭語

倍数	接頭語	記号
10 ¹⁸	エクサ	E
10 ¹⁵	ペタ	P
10 ¹²	テラ	T
10 ⁹	ギガ	G
10 ⁶	メガ	M
10 ³	キロ	k
10 ²	ヘクト	h
10 ¹	デカ	da
10 ⁻¹	デシ	d
10 ⁻²	センチ	c
10 ⁻³	ミリ	m
10 ⁻⁶	マイクロ	μ
10 ⁻⁹	ナノ	n
10 ⁻¹²	ピコ	p
10 ⁻¹⁵	フェムト	f
10 ⁻¹⁸	アト	a

(注)

- 表1-5は「国際単位系」第5版、国際度量衡局1985年刊行による。ただし、1 eVおよび1 uの値はCODATAの1986年推奨値によった。
- 表4には海里, ノット, アール, ヘクタールも含まれているが日常の単位なのでここでは省略した。
- barは、JISでは流体の圧力を表わす場合に限り表2のカテゴリーに分類されている。
- EC閣僚理事会指令では bar, barnおよび「血圧の単位」mmHgを表2のカテゴリーに入れている。

換算表

力	N(=10 ⁻⁷ dyn)	kgf	lbf
	1	0.101972	0.224809
	9.80665	1	2.20462
	4.44822	0.453592	1

粘度 1Pa·s(N·s/m²)=10P(ポアズ)(g/(cm·s))

動粘度 1m²/s=10⁴St(ストークス)(cm²/s)

圧	MPa(=10bar)	kgf/cm ²	atm	mmHg(Torr)	lbf/in ² (psi)
	1	10.1972	9.86923	7.50062×10 ²	145.038
力	0.0980665	1	0.967841	735.559	14.2233
	0.101325	1.03323	1	760	14.6959
	1.33322×10 ⁻¹	1.35951×10 ⁻²	1.31579×10 ⁻²	1	1.93368×10 ⁻²
	6.89476×10 ⁻²	7.03070×10 ⁻²	6.80460×10 ⁻²	51.7149	1

エネルギー・仕事・熱量	J(=10 ⁷ erg)	kgf·m	kW·h	cal(計量法)	Btu	ft·lbf	eV
	1	0.101972	2.77778×10 ⁻⁷	0.238889	9.47813×10 ⁻¹	0.737562	6.24150×10 ¹⁸
	9.80665	1	2.72407×10 ⁻⁶	2.34270	9.29487×10 ⁻²	7.23301	6.12082×10 ¹⁹
	3.6×10 ⁶	3.67098×10 ⁷	1	8.59999×10 ³	3412.13	2.65522×10 ⁶	2.24694×10 ²⁵
	4.18605	0.426858	1.16279×10 ⁻⁶	1	3.96759×10 ⁻⁷	3.08747	2.61272×10 ¹⁹
	1055.06	107.586	2.93072×10 ⁻⁴	252.042	1	778.172	6.58515×10 ²⁰
	1.35582	0.138255	3.76616×10 ⁻⁷	0.323890	1.28506×10 ⁻³	1	8.46233×10 ¹⁸
	1.60218×10 ¹⁹	1.63377×10 ²⁰	4.45050×10 ²⁶	3.82743×10 ²⁹	1.51857×10 ²²	1.18171×10 ¹⁹	1

1 cal= 4.18605J (計量法)
= 4.184J (熱化学)
= 4.1855J (15℃)
= 4.1868J (国際蒸気表)
仕事率 1 PS(仏馬力)
= 75 kgf·m/s
= 735.499W

放射能	Bq	Ci
	1	2.70270×10 ⁻¹¹
	3.7×10 ¹⁰	1

吸収線量	Gy	rad
	1	100
	0.01	1

照射線量	C/kg	R
	1	3876
	2.58×10 ⁻⁴	1

線量当量	Sv	rem
	1	100
	0.01	1

g r a s p 92 による He 原子基底状態 Dirac-Coulomb エネルギーの高精度計算手順