



國立交通大學
National Chiao Tung University

①

出國報告（出國類別：☐ A 類、考察訪問
☒ B 類、出國短期研究
☐ C 類、國際會議

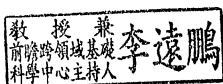
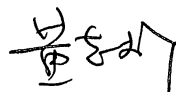
②

Research visit: “Collaborative research work on the exact solution of the Schrödinger equation for few-electron atoms by means of Fock expansion and other related techniques”

研究訪問：“以 Fock 擴張及其他解決 Schroedinger 程式對多電子原子方法的合作研究”

③

服務機關：應用化學系
姓名職稱：魏恆理/副教授
前往國家：澳洲/伯斯/西澳大學
出國期間：2011/3/23~3/28
報告日期：2011/3/30

撰 寫 人	審 核 人	初 閱	複 閱
	  3/10		

備註：出國報告書審核程序如下

- 一、初閱：各學院教師 A、B、C 類及其他行政單位 A 類由單位主管，研究生由指導教授；中心計畫及學群 A、B、C 類由各中心計畫主持人。
- 二、複閱：經費所屬之一級單位；中心計畫及學群 A、B、C 類由頂尖計畫執行長。

一、摘要 Summary

澳洲西澳大學的 Paul Abbott 博士是當今世上解析閉殼層薛丁格方程式研究領域執牛耳的人物，此次應邀前往該校進行訪問研討，除提供一場演講之外，主要係針對雙方在以 Fock 擴張及其他技術解決 Schroedinger 程式對多電子原子或分子方法之合作研究上共同研討未來的合作方向、歸納現存技術及採行其研究成果等。

二、本文

(一) 目的及過程

在 2011 年 3 月 23~28 這段期間，我訪問了位於澳洲珀斯的西澳大利亞大學物理系 Paul Abbott 教授的研究團隊，他的博士研究(和 Edward Maslen and John Gottschalk)是關於氦原子由古典原理開始進行低次方係數 Folk 展開式的研究。在最近 25 年來 Abbott 博士關於這項研究所發表的結果尚無人能及，而這項研究的重要性也不言可喻。在過去量子化學計算總是存在些許的誤差，通常隨著系統的擴大和近似法而急遽增加，不幸的是在許多例子中，計算的誤差得到的結果往往無法做出任何結論。在過去十年裡有許多出色的科學家開發出了幾種精確解薛丁格方程式的方法，Horoshi Nakatsuji 教授就是其中一個很好的例子。我們了解，當我們的擴展到大的系統時，需要太過龐大的擴張函數去模擬這些在 three-particle coalescences 附近的非解析特性波函數。如果能知道在這些點附近的解析特性波函數的話，則可以簡化巨大尺度的擴張基底函數並且同時將 Nakatsuji 方法拓展到大尺寸系統上。

這次訪問 Abbott 博士的團隊使我能在這塊領域得到許多幫助，主要是討論有關於拓展氦原子波函數的 Folk 方程式和運用現有的技術在大分子系統上。他同時也展示他目前這項題目上所研究的物質，讓我自己在這項研究上有機會取得重大突破。我們目前關於解精確薛丁格方程式的工作無法控制誤差線，這是自由量子化學研究的夢魘，藉由引進 Abbott 博士的研究，可以將這項工作帶回真正的科學研究而不是模糊的猜測。

(二) 心得及建議 What has learned/suggestion

在珀斯的這段期間，在 2011 年 3 月 24 日我得到在該校的理论物理學家和量子化學家們面前發表我研究成果的機會，我的演講主題是“量子化學精確度的極限”，主要內容是在找出量子計算誤差的主要來源，闡述當我們致力於深入探討奈米和生物分子的奧秘時，通常投注的規模遠超過其原子系統大小，並持續運用新的研究方法來增加其複雜性，但我們很少會停下來回顧量子化學的根源，在基本近似的假設下，你將會對這些被誤差控制的結果感到驚訝。

三、附錄 Appendix

攜回資料名稱及內容：

1. Paul Abbott、John Gottschalk 和 Christopher Davis 博士在 Edward Maslen 教授指導下的博士論文和相關議題的精確薛丁格方程式解。
2. 許多關於精確解薛丁格方程式解的科學文章和材料(包括已發表及未發表的)。