

学位論文及び審査結果の要旨

氏名 青木 翼

学位の種類 博士(工学)

学位記番号 工府博甲第633号

学位授与年月日 令和2年9月30日

学位授与の根拠 学位規則(昭和28年4月1日文部省令第9号)第4条第1項及び横浜国立大学学位規則第5条第1項

学府・専攻名 工学府・物理情報工学専攻

学位論文題目 **Green**関数法に基づいたX線分光に関する第一原理計算

論文審査委員	主査	横浜国立大学	教授	大野 かおる
		横浜国立大学	教授	関谷 隆夫
		横浜国立大学	教授	片山 郁文
		横浜国立大学	准教授	Raebiger, Hannes
		横浜国立大学	准教授	那須 譲治

論文及び審査結果の要旨

X線領域の高速分光技術に関する近年の発展により、経験的な要素に依存せずに高精度な再現性を有する予測可能な第一原理計算手法の確立が求められている。本論文は、X線光電子分光法(XPS)とその過程に続くX線発光分光法(XES)にタイアップした計算手法の確立を目指して、多体摂動論の**Green**関数法による新しい計算手法を提案し、それを実際の複数の系に適用した研究成果をまとめたものである。論文の前半部分では、バンドギャップを持ついくつかの半導体結晶に対して、XPS過程の内殻電子束縛エネルギーと緩和エネルギーを多体摂動論の準粒子の概念に基づくGW近似により計算している。GW近似の自己エネルギーを計算する際に ω 積分を数値的に実行して、自己遮蔽効果を補正することで、束縛エネルギーに対する計算結果はパラメータを用いずに1 eV以内で実験値と一致し、この計算方法が高い予測能力があることを示したものとなっている。論文の後半部分では、XPS過程に続いて価電子が内殻に落ちるXES過程に対して、所属研究室で提案された任意の電子励起固有状態に適用可能な拡張準粒子理論に基づいて、GW近似とあわせて、電子・正孔対励起スペクトルを求めるためにBethe-Salpeter方程式を解いて、複数の分子のXES

過程における実験 X 線発光スペクトルのピーク数およびエネルギーを誤差 1 eV 程度で再現することに成功している。これにより、本計算手法は XES スペクトルに関する価電子状態の分析・解釈に有効であることを示したものとなっている。本研究は自身の提案した多体摂動論の Green 関数法による計算手法の有効性を示すことに成功しており、この分野の理論的理解を深めたものとして評価できる。論文の内容は、前半部分と後半部分それぞれについて、本人の第一著者論文として 1 報ずつの査読付き英文学術論文誌 (**J. of Phys.: Condensed Matter, Phys. Rev. B**) に掲載されている。よって、本論文は博士 (工学) の学位論文として価値のあるものと判定した。