

学位論文及び審査結果の要旨

氏名 磯部 智遥

学位の種類 博士(理学)

学位記番号 理工博甲第16号

学位授与年月日 令和3年3月25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 理工学府・数物・電子情報系理工学専攻

学位論文題目 多体摂動論Green関数法に基づくGW近似の拡張及び評価

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 武田 淳
横浜国立大学 教授 関谷 隆夫
横浜国立大学 准教授 白崎 良演
横浜国立大学 准教授 Hannes Raebiger

論文及び審査結果の要旨

近年、第一原理計算の重要性が増す中で、多体摂動論の Green 関数法は光電子スペクトルを直接計算できる手法として注目されている。中でも (one-shot) G_0W_0 近似がよく用いられるようになってきた。しかし、光吸収スペクトルを計算するためには、 G_0W_0 近似に加えて Bethe-Salpeter 方程式 (BSE) を解く必要がある上、この $G_0W_0 + BSE$ 法を小さな分子に適用すると実験値を 1 eV 程度過小評価することが指摘されていた。また、自己無撞着 GW 法はエネルギーギャップを過大評価することが知られている。論文の前半部分では、中性ではなく 1 価陽イオンの基底状態を扱うことで、BSE を解かずに、 G_0W_0 近似のみで光吸収エネルギーの計算が出来ることを提案しており、幾つかの原子や分子に対する計算結果は従来の $G_0W_0 + BSE$ 法の結果を大きく改善し、実験値との差を 0.3 eV 程度まで縮めることに成功している。さらに、1 次までのバーテックスを取り入れた自己無撞着 LGW Γ 法の計算では、実験値との差が 0.1 eV 以下になっている。論文の後半部分では、 G_0W_0 近似における自己エネルギーのエネルギー依存性の繰り込みの効果、自己無撞着 GW 近似における自己エネルギーのエネルギー依存性の線形化 (LGW 法) の効果、さらにバーテックス補正 (LGW Γ 法) の効果などを議論しており、これらの効果がいずれもエネルギーギャップを

縮める傾向にあることを計算から明らかにし、多くの場合に、線形化の手法（LGW法）の結果はGoW₀近似を改善できることを示したものとなっている。本研究は、計算手法を複雑化するのではなく、より単純化することで、同等以上の計算精度を得ることが出来ることを示した点で評価できる。発表や質問への受け答えも良好で、内容も博士論文として十分な価値があると認められる。論文の内容は、前半部分について本人の第一著者論文として査読付き英文学術論文誌（Physical Review A, Rapid Communication）に掲載されており、後半部分についても論文投稿予定である。よって、本論文は博士（理学）の学位論文として価値のあるものと判定した。