

## 学位論文及び審査結果の要旨

氏名 中嶋 武

学位の種類 博士(理学)

学位記番号 理工博甲第45号

学位授与年月日 令和4年3月24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 The fundamental studies for the exact excitation calculation; spin-orbit coupling in the all-electron mixed basis approach and normalization in quasiparticle theory by the Ward identity

論文審査委員 主査 横浜国立大学 准教授 Raebiger Hannes  
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 教授 佐藤 丈  
鳥取大学 教授 小谷 岳生  
横浜国立大学 名誉教授 大野 かおる

## 論文及び審査結果の要旨

第一原理計算手法の中で Kohn-Sham 密度汎関数理論は簡便で優れた計算理論であるが、バンドギャップを過小評価し、励起状態には適用できないなどの問題がある。本研究では相対論的補正の一種であるスピン軌道相互作用(SOC)を正確に扱う手法の開発と、準粒子波動関数の規格化の問題を解決することを目的としている。初めに、各原子核近傍に球領域を設定し、その領域内では原子軌道と平面波を用いて表現し、その領域外では平面波のみで表現する全電子混合基底法を用いて SOC を扱うプログラムを開発した。原子軌道に対しては  $S \cdot L$  形式を、平面波には正確な形式を適用した。具体的には Ne, Ar, Kr, Na, Mg, Al, Si, P, S, Cl 原子, HBr, BrCN, HCl, HI, I<sub>2</sub> 分子, Si 結晶のエネルギー準位の分裂を計算し、実験値と良く一致する SOC 分裂を得ることに成功した。次に、準粒子波動関数(QPWF)の規格化の問題では、QPWF のノルムは 1 未満であることが知られており、電子数が有限個でも無限個の占有準位の QPWF が必要となる。本論文では、(逆)光電子分光で作られる終状態には単純に 1 個の電子が始状態から抜けた(あるいは始状態に加わった)状態だけではなく、無数の多重

励起状態が存在することに着目し、このような多重励起はエネルギー・運動量移行  $q \rightarrow 0$  の極限では現れず、Ward 高橋恒等式で  $q \rightarrow 0$  極限をとった Ward 恒等式により、 $q \rightarrow 0$  極限のパーテックス関数が純粋に 1 個の電子が始状態から抜けた（あるいは始状態に加わった）状態だけを 1 に規格化するという役割を担うことを見出した。さらに Baym-Kadanoff の保存則により、QPWF はエルミート化された自己エネルギーを伴う固有値問題の解になっていることを証明した。これにより、互いに直交しない 1 に規格化された波動関数で電子密度を表すことが可能となり、それが準粒子方程式の解であることを見出した。この一電子波動関数は電子間相互作用のために互いに相関した波動関数になっているという点で相互作用のない従来の Kohn-Sham 軌道の概念を拡張したものになっている。本論文は、SOC の球対称化の問題と QPWF の規格化の問題を取り上げ、それらを解決する道筋を与えたという点で評価できる。それぞれが、Ann. Phys. 誌と Phys. Rev. B (Lett.) 誌に本人第一著者論文が掲載されており、内容も博士論文として十分な価値があると判定した。