

## 学位論文及び審査結果の要旨

氏 名 桑原 理一

学位の種類 博士（工学）

学位記番号 工府博甲第437号

学位授与年月日 平成26年9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 工学府 物理情報工学 専攻

学位論文題目 Development of the total energy calculation program within the self-consistent GW $\Gamma$  approach based on the all-electron mixed basis approach （全電子混合基底法に基づく自己無撞着GW $\Gamma$ 法による全エネルギー計算プログラムの開発）

論文審査委員 主査 横浜国立大学 教授 大野かおる  
副査 横浜国立大学 教授 関谷 隆夫  
副査 横浜国立大学 准教授 蔵本 哲治  
副査 横浜国立大学 准教授 白崎 良演  
副査 横浜国立大学 名誉教授 佐々木 賢

## 論文及び審査結果の要旨

第一原理計算は分子や結晶などのさまざまな物質の特性を予測するための非常に重要な研究手法となりつつある。その上で、物質の励起状態を高精度に計算できる手法の更なる発展が望まれている。本論文は、第1章（Introduction）で述べられているように、多体摂動論の準粒子の概念に基づく Green 関数法を用いて、1 電子励起を精密に取り扱うことのできる自己無撞着 GW $\Gamma$  法のプログラムを開発し、当該研究室で開発している全電子混合基底法の計算コードである TOMBO に実装し、原子や分子などの比較的簡単な系に応用することを目的としている。第2章では、自己無撞着 GW 計算プログラムを自らインプリメントして、孤立原子や低分子の全エネルギーやイオン化ポテンシャル、電子親和力の計算を行い、局所密度近似 (LDA)や Hartree-Fock 近似 (HFA)などの計算手法や実験データとの比較を行っている。特に、孤立原子のベリアル比の計算をそれぞれの計算手法で行い、計算精度の検証を行った。また、B<sub>2</sub>, Al<sub>2</sub>, Si<sub>2</sub>分子の singlet と triplet の全エネルギーを比較し、いずれも triplet の方が安定であることを示している。次に第3章では、自己無撞着 GW 法が抱えているハミルトニアンが非エルミートとなる問題や Ward 恒等式を満たさないという問題を解消するために、自己エネルギーを線形化するという全く新しい方法論の提案

を行い、その方法 (LGW 法) を自らインプリメントし、原子・分子のイオン化ポテンシャルや電子親和力の結果が GW 法に比べて改善されることを述べている。最後に第 4 章では、GW 法の自己エネルギーおよび分極関数に 1 次のバーテックス補正を取り入れた自己無撞着 GW 法のプログラムを自ら完成させて、この手法による計算を行っている。この方法は電子間クーロン相互作用について 1 次の近似の範囲で Ward 高橋恒等式を満たすもので、イオン化ポテンシャルと電子親和力の計算結果が著しく改善し、実験値に近い結果が得られることを明らかにした。また、得られた準粒子波動関数および準粒子エネルギーを用いて Bethe-Salpeter 方程式を解くことにより、低分子の光吸収スペクトルの計算を行い、実験データとの比較も行っている。

以上のように、本論文は多体摂動論の Green 関数法に基づく自己無撞着 GW 法を全電子混合基底法に基づく第一原理計算プログラムに自ら導入することから始まり、LGW 法や GW 法などの新しい方法論の提案を行うと同時に、自らそれらをインプリメントし、具体的に原子・分子の準粒子スペクトルや全エネルギーの計算を行うことでそ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。論文の内容は最近 3 報の査読付き英文学術論文誌 (Mod. Phys. Lett. B, J. Chem. Phys., Phys. Rev. A) 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。