

論文審査の結果の要旨

氏名 川崎 愛理

本論文は 5 章からなる。第 1 章では波動関数、原子価軌道、そして強相関量子多体問題のジェミナル理論について一般的なイントロダクションが与えられている。次に、第 2 章ではジェミナル理論の一般的な歴史と様々なバージョンの開発について紹介されている。第 3 章では、この論文で導かれたものを含む重要な公式が紹介されている。第 4 章では、オリジナルの数値計算結果とその議論が展開されている。最後に、第 5 章では要旨と結論が与えられている。

一般的に言えば、強相関量子多体問題は、物性物理、量子化学、原子核物理など、多くの科学の分野で最も基礎的で重要なトピックのひとつである。これらの系の様々な微視的理論を通じて、ペア型の強相関系に対する変分法で広く用いられている試行波動関数の一つにジェミナル理論が対応している。その典型的なバージョン 2 つは、反対称ジェミナル指数 (AGP) 法とジェミナルの反対称積 (APG) 法である。AGP 法では、すべてのペアは同一の試行波動関数で記述される一方で、APG 法では、異なるペアの試行波動関数は全く異なることが許されている。その結果、AGP 法では数値計算精度だけでなく計算コストも低い。その一方で、APG 法は計算精度が非常に高く、その分計算コストもかなり多く要求する。

この論文では、オリジナルの AGP 法と APG 法に基づき、

- 1) テンソル分解を用いて、APG 法の計算の難しさを克服
- 2) 本来の APG 法を超えた、APG の多項式展開 (多項式 APG 法) の開発
- 3) 強相関した点欠陥系のため、4 点相関を考慮した拡張 AGP (AGP4) 法の開発などの異なる方向性で本質的な進展を与えた。

1 次元のハバード模型、アンダーソン模型を例として、計算コードを著者自身で開発し、いくつかのオリジナルの結果を第 4 章に紹介している。例えば、1 次元ハバード模型では、APG 法での 1 粒子あたりの全エネルギーの誤差は Hartree-Fock 法や AGP で計算されたものの 3 倍ほど小さいことがわかった。新しく開発された多項式 APG 法を用いることによって、更に数桁改善することができた。また、一つの不純物サイトを持つ 1 次元アンダーソン模型では、AGP4 法は基底状態のエネルギー、1 次密度行列、ペア相関関数の性質が、本来の AGP 法よりも非常によく記述することができた。一部の結果は、既に原著論文として出版されている (J. Chem. Phys. **145**, 244110 (2016), arXiv:1805.06138 (2018))。

なお、本論文の第 4 章は、杉野修氏との共同研究であるが、論文提出者が主体となって解析及び検証を行ったものであり、論文著者の寄与が十分であると判断する。

したがって、博士 (理学) の学位を授与できると認める。