

# 論文審査の結果の要旨

氏名 山田 俊介

密度汎関数理論に基づく第一原理計算は、物質科学の標準的手法として整備が進んでいる。しかし今後さらにナノスケール物質への適用を促進するためには、1000 原子以上の系における計算量の低減が不可欠である。その方法として分割統治法が最近注目されている。本博士論文（以下、本論文と記す）では、分割統治法を用いた波動関数の計算手法の構築のための研究が述べられている。

分割統治法は全系を領域に分割して計算する方法であり、これまでは主に全エネルギーを計算するための手法として開発が行われてきた。これに対して分割統治法に基づき波動関数を計算するための手法は未開拓である。手法開発の先行例はあるが、原子間の結合中心を切断するタイプの領域分割に対してのみ行われたにすぎず、共有結合を持たない一般の凝縮系に適用できる手法の確立には至っていない。そこで本論文では領域分割を任意の空間で区切って行えるようにアルゴリズムを拡張し、半導体不純物や超格子の系でその有効性を示した。本研究では、分割された領域の大きさが系特有の相関長を超えると十分な精度に到達することを実際に示し、本手法が広範な物質群に適用できると結論付けている。今後の物性物理学に大きな影響を与えることが十分に期待される研究であると評価することができる。

本論文は英語で書かれており、6つの章より構成されている。第1章から第2章までは導入部である。まず計算量の電子数依存性を一次にまで落とすための  $O(N)$  法の一つとして分割統治法が紹介され、それに引き続き波動関数を計算するための汎用的手法が確立していない現状が述べられている。さらに、この問題を解決するためには *nearsightedness* という概念を積極的に利用することが有効であることが議論されている。*Nearsightedness* とは凝縮系では密度応答が及ぶ範囲が有限であるという Kohn らが示した概念であり  $O(N)$  法の基礎となっているが、これを波動関数の計算にも適用できることが述べられている。また波動関数計算のための手法の設計指針が記載されている。

本論文の主要な結果は、第3章から第5章にまとめられている。

第3章は本論文の主要部であり、*nearsightedness* の考えに基づく計算手法（以下、新手法とよぶ）が具体的に示されている。新手法では全系を空間分割する際に、分割された領域が少し重なりを持つようにとる技法が用いられている。重なり部分があるためにそこから生じる重複を差し引く手間が生じるが、領域毎に張る基底の数を低減させるメリットがそれを上回る。重複を差し引くためには、基底関数を重なり部分に射影する

演算子  $Q$  や重ならない部分に射影する演算子  $P$  を用いて Hamiltonian 行列を構築する必要があるが、そのアルゴリズムが巧妙に開発されている。実際の計算では、計算精度や効率が最適化されるように重なりが大きさを決定することができる。なお基底の数の低減は複数の段階を経て行われる。まず、overcomplete を避けるために重なり積分の零固有値成分が除外され、次に領域内だけで構築される部分的な Hamiltonian 行列を対角化して結果に貢献しないと予想される固有状態が除外される。第一段階を行うだけでは膨大な数の零エネルギー状態が現れて計算精度が低下してしまうため、第二段階は単に計算効率の向上をもたらす以上の効果があることがわかっている。

第 4 章では新手法の有効性が示されている。そのためにまず 512 原子からなる炭化ケイ素の結晶と非晶質の模型を用い、全系を 64 の領域に分割した計算を行っている。本論文では領域の重なりが大きさを既定の数の制限の仕方によってどのように計算結果が変化するかを詳細に調べることにより、計算効率と計算精度に関するチェックを行っている。波動関数の空間的分布や占有軌道に対するエネルギー固有値 (Kohn-Sham eigenvalue) を比較する限り効率と精度が制御された形で有効に計算が行えることが判明している。

第 5 章では新手法の有効性を示すような計算をいくつか行っている。最初の例は 512 原子を用いたリンをドーピングしたケイ素やゲルマニウム結晶の系である。浅い不純物状態がどのような空間分布を持っているのか、バンドギャップ中のどこにレベルを形成するのかを計算し、他の方法で求めた結果と比較検討を行っている。さらに 768 原子からなる InGaN と GaN が積層した superlattice の計算であり、LDOS を計算することによりバンド曲がりの様子が示されている。

最後の第 6 章では得られた結果がまとめられ、さらに本研究の意義と将来の展望について述べられている。

以上、各章の紹介と共に本論文で得られた知見を解説した。本論文は、分割統治法とよばれる有力な  $O(N)$  法に基づき全エネルギーだけでなく波動関数に関しても汎用的に計算するための手法を確立した重要な論文である。全系を空間で分割するという領域分割に伴う数値的困難を克服するための独自のアルゴリズムを考案し、実際の第一原理計算を行える段階にまで完成させた点で優れた研究であると評価することができる。今後、様々な系に適用されて物性物理学の発展に貢献するものと考えられる。以上の評価により、審査員全員が学位論文として十分なレベルにあり、博士 (理学) の学位を授与できると判断した。

なお、本論文の第 3 章から第 5 章までの内容は、共同研究者との共同研究を含むが、それは Physical Review B 誌に掲載されている。本博士論文提出者が主体となって計算および結果の解釈を行ったものであり、本博士論文提出者の寄与が十分であると判断される。またこの件に関して、共同研究者の常行真司氏、明石遼介氏、下條冬樹氏から同

意承諾書が提出されている。