

論文審査の結果の要旨

氏名 植村 渉

本論文は5章からなる。第1章は序論であり、本研究の背景と目的が述べられている。第2章では本論文で提案する新しい計算手法のもとになった密度行列繰り込み群法とその発展が詳しく紹介されている。第3章では、申請者が提案したフェルミ粒子系の新しい計算手法である対称テンソル分解配置間相互作用法 (Symmetric Tensor Decomposition-Configuration Interaction, 以下 STD-CI 法) が定式化され、いくつかの応用例が示されている。第4章ではそれをさらに発展させた拡張対象テンソル分解法 (Extended STD, 以下 ESTD 法) の提案がなされている。第5章では本論文の結論が述べられている。

第一原理に基づく電子状態計算は様々な物質の物性研究に用いられ、ますます応用範囲が広がりつつある。その中で、現状の計算手法の問題点も明らかとなり、より信頼性の高い計算手法の開発が求められている。第2章で述べられているように、1992年に S.R. White が提案した密度行列繰り込み群法は、強相関電子系の1次元モデルハミルトニアン基底状態をきわめて系統的かつ高精度に計算できる画期的な手法として広く使われ、その後テンソルネットワークと呼ばれる新たな観点での定式化へと発展し、近年では実在分子の第一原理電子状態計算にも応用され始めている。

本学位論文の第3章では、この密度行列繰り込み群法およびテンソルネットワークのアイデアに基づき、対称テンソル分解によって波動関数の反対称性を取り入れた変分法である STD-CI 法を提案した。スレーター行列式の線形結合を用いる通常の配置換相互作用 (CI) 法は、多体波動関数の記述にきわめて多数の項を必要とすることが知られており、大きな分子や凝縮系には応用が困難である。これに対して STD-CI 法は、反対称性をあらわに取り入れることでコンパクトかつ扱いやすい展開列となり、計算量が低減されて適用範囲が広がることを期待される。実際、本論文で示された水素分子エネルギーの核間距離依存性やヘリウム原子間のファンデルワールス相互作用、ハバード模型での実証計算では、通常の CI 法に比べて少ない項数で、用いた基底関数の範囲内での厳密解である完全 CI の計算精度が実現されている。STD-CI 法の計算量は電子数 N に対して高々オーダー N^6 でしか増加せず、これは量子化学分野でスタンダードな計算手法となっている結合クラスター展開法と同等であることから、STD-CI 法の実用性は高いと考えられる。

第4章では STD-CI 法を拡張し、反対称化ジェミナル積を使って波動関数の変分自由度を増やすことで展開項数に対するエネルギーの収束性をさらに高めた

ESTD 法を提案した。またこの手法により、STD-CI 法では収束性の悪かった水分子やきわめて電子相関の強いハバードモデルの基底状態エネルギーがより効率的に計算できることを実証した。ESTD 法の計算量は現時点の定式化で電子数 N に対してオーダー N^5 でしか増大せず、さらに HF 法と同等の N^4 まで削減できる可能性もあることから、将来的には周期系への応用も視野に入るなど、STD-CI 法よりもさらに適用範囲が広がると期待される。

以上のように本論文では、フェルミオン系の基底状態をきわめて精度よく、かつ高効率に計算できる新たな手法を提案した。この成果は量子多体系の研究を大きく進展させるものである。なお本論文は指導教員である杉野修氏との共同研究の成果を含んでいるが、論文提出者が主体となって手法開発と実証計算を行ったもので、論文提出者の寄与が十分であると判断する。

したがって、審査員全員の一致により、博士（理学）の学位を授与できると認める。