

論文審査の結果の要旨

氏名 渡辺 尚貴

本学位論文は、固体物理学において電子状態の時間発展を第一原理的に計算機で求めるために開発された数値計算手法に関するものである。全6章からなり、第1章は序、第2章は一体問題に対する定式化、第3章は多体問題に対する定式化、第4章は一体問題に対する応用、第5章は多体問題に対する応用、そして第6章は結論である。

量子力学の建設以来、固体物理学は目覚ましい発展をみてきたが、理論的に主に扱われてきたのは、時間とともに変動しない静的な問題である。一方、量子力学的な系が外場などに駆動されたときにどのような時間発展をするか、という量子力学の動的現象は、基本的な課題であるにもかかわらず、意外にも今まではあまり系統的な研究は行われてこなかった。この主たる原因は、解くべき基礎方程式は時間依存 Schrödinger 方程式という明白に分かっているものであるが、この偏微分方程式は一般には数値的に解く必要があり、その際に微分方程式の通常の数値的解法（例えば Runge-Kutta の差分法）を用いると、数値誤差が蓄積することにより波動関数のノルムが発散する、という困難が起きるためであった。1990年代中頃から、多くの計算物理学者によってこの困難を回避した数値計算法がいくつか開発されてきた。

しかしながら、現在の固体物理学に要求されている様な大規模計算に対しては、特に本論文の主テーマである多体問題に対しては、さらなる改良が望ましい。そこで、本学位論文の前半では、効率的で汎用な新たな数値計算法が構築された。時間依存の偏微分方程式を数値積分する際に、波動関数のノルムを厳密に保存する計算法としては、厳密にユニタリである Cayley 演算子を用いる Crank-Nicholson 法が良く用いられてきた。これに対して、本学位請求者の開発した技法は2点ある。第一点は以下のようなものである。電子状態を求める通常の第一原理計算では、波動関数は平面波基底で展開されるが、これはフーリエ変換を多用する必要があるため計算量は多く、時間発展の計算ではネックとなる。そこで本論文では、波動関数を実空間の格子点で表して、計算の全てを実空間で行うことが提案されている。これは、フーリエ変換が不要という利点に加え、周期系も非周期系も同様に扱える。

改良の第二点は、時間発展演算子に対する指数積展開法である。指数積展開法は統計力学の分野では常用されるが、波動関数に対するラプラシアンなどの空間に関する2階偏微分に関しては従来、3次元系への適用は面倒であり高次差分法も必要と思われていた。前者の点については、 x, y, z の各方向への演算は交換するので困難はなく、後者の点については、上記の実空間法を用いれば有限要素法を（Cayley 形式と共に）採用することができ、こうすれば低次差分法で高次に匹敵する精度を、計算量を増やすことなく達成できることが示された。これは、一般に偏微分方程式の数値計算では陰的解法の方が優れているが3次元系での陰的解法は困難である、と信じられてきたことへの反証を与えたことにもなる。

具体的に、静電場、静磁場、あるいは時間変動する電場、磁場などの下でのメゾスコピック系や原子の波動関数の時間発展の計算例も与えられ、実際に精度が期待とおり良いことが実証された。

本論文の主要部分である後半では、多体相互作用する電子系の時間発展をどのように計算するか、という問題が論じられる。一般に、静的な多電子系に対しては、電子間相互作用を電子密度汎関数で表す、という Kohn-Sham の理論が確立している。この理論を時間依存の問題に拡張した「時間依存 Kohn-Sham 方程式」と呼ばれる方法は、従来 Gross 等により試みられている。そこで本論文では、この時間依存 Kohn-Sham 方程式をいかに効率よく数値積分するか、という観点から研究された。電子間の相互作用を表す電子密度汎関数ポテンシャルは、時間依存問題では時間と共に変動する。この形式解は再び指数演算子を用いて表されるが、これを精度良く計算するにはポテンシャルの時間依存性に十分注意を払う必要がある。従来は、この波動関数の時間発展とポテンシャルの時間発展をコンシステントにするために複雑な反復計算が必要と思われていた。

本論文では、この相互作用ポテンシャルが、時間に陽に依存して変動しているわけではないため、波動関数の時間微分を Liouville 演算子と呼ばれるものを導入して表現すると、形式解は普通の指数演算として表すことができることを見出した。この Liouville 演算子とその構成要素で指数展開すると、セルフコンシステントな反復計算が不要となるので、計算は効率化される。

本論文の最後では、この計算法を用いた時間依存 Kohn-Sham 方程式の具体例として、先ず、分子にパルス的な電場をかけ、その後の電子系の振動を観察して光吸収スペクトルを求めた。さらに結晶中の電子のプラズマ振動、時間とともに増加する磁場の中で炭素ナノチューブに渦電流が流れる様子、そしてパルス的な電場をかけたフラレンの電子の振舞いが計算された。これらのシミュレーションを通じて、この計算法が、少なくとも 60 個程度の原子をもつ系でも十分安定に作動することが確認された。

以上のように、本学位論文は、電子状態計算の効率化を実現したことにより、固体物理学の中心的なテーマの一つである多体系の第一原理的な電子状態と、固体物理学において端緒に付いたばかりである量子力学的な時間発展の問題を融合させる路を拓いたものであり、量子系の動的シミュレーションとして学位に十分な価値をもつ仕事といえる。

なお、本論文の一部は塚田捷氏との共同研究であるが、論文提出者が主体となって研究したものであり、論文提出者の寄与が十分であると判断する。したがって、審査員全員により、博士（理学）を授与できると認める。