



HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	Development of Black-Box Static Electron Correlation and Extremely Large-Scale Electronic Structure Methods [an abstract of dissertation and a summary of dissertation review]
Author(s)	西田, 勲倫
Degree Grantor	北海道大学
Degree Name	博士(理学)
Dissertation Number	甲第16370号
Issue Date	2025-03-25
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/95032
Rights(URL)	https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/
Type	doctoral thesis
File Information	NISHIDA_Masatsugu_review.pdf, 審査の要旨



学 位 論 文 審 査 の 要 旨

博士の専攻分野の名称 博士（理学） 氏名 西田 叡倫

	主査	教授	長谷川 淳也
	副査	教授	武次 徹也
審査担当者	副査	教授	前田 理
	副査	准教授	小林 正人
	副査	准教授	佐藤 信一郎

学 位 論 文 題 名

Development of Black-Box Static Electron Correlation and Extremely Large-Scale
Electronic Structure Methods

(ブラックボックスな静的電子相関計算法と超大規模電子状態計算手法の開発)

計算化学において電子状態理論は様々な物質に適用され実験の解釈や予測に利用されるようになってきている。本学位論文は、取り扱いの難しい静的電子相関をブラックボックス的に扱う手法を開発し、さらに超大規模系の電子状態計算を可能にする手法の開発を行って量子化学計算の適用可能性をさらに拡大することを目指している。

第一章は、general introduction であり、高精度電子状態計算に欠かせない電子相関を取り扱う手法と大規模系の電子状態計算を可能とする方法について、研究背景と意義を詳細に述べている。

第二章では、ブラックボックス的に静的電子相関計算を扱う方法として、UHF 法と Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) 法について述べている。これらの手法は、対称性の崩れた波動関数を用いており問題となることがあるが、これを解決する方法として、正しい量子数状態だけを抽出する射影法の概要を述べ、次に、大規模量子化学計算法として、半経験的な DFTB 法や xTB 法と、我々の研究室で開発してきた分割統治 (DC) 法を中心とする線形スケーリング法について詳述している。

第三章では、励起状態計算手法、TDHFB 法の開発について述べている。実時間発展法に基づく TDHFB 法をそのまま実装すると、HFB 法で固有状態となっていない電子数が時間とともに変化してしまうことがわかったが、正準基底を用いることに着目して電子数の期待値を保存することに成功している。

第四章では、UHF 波動関数からスピン量子数の正しい状態を抽出する PUHF 法を扱い、大規模計算手法である DC 法と組み合わせた DC-PUHF 法の開発について述べている。PUHF 法で計算時間のボトルネックとなる部分に DC 法を利用することで高速化を図っており、線形の計算コストで静的電子相関を取り扱う手法が確立できる見込みを示している。

第五章では、半経験的手法である xTB 法と DC 法を組み合わせた超大規模計算手法 DC-xTB 法の開発について述べている。勾配計算プログラムも実装して超大規模量子 MD 計算も可能とし、スパコン富岳を使った超並列計算の効率も確認している。

第六章では、本研究により得られた知見をまとめたうえで、動的電子相関の取り込む複合的手法の開発やタンパク質だけでなくアモルファス材料のような系への適用など今後の展望・課題について記述している。

これを要するに、著者はブラックボックス静的電子相関計算を励起状態や超大規模系に適用するという挑戦的研究の遂行に成功しており、化学分野の発展に貢献するところ大なるものがある。

よって著者は、北海道大学博士（理学）の学位を授与される資格あるものと認める。