

博士論文審査報告書

論文題目

Theoretical Study on Spin-Dependent
Two-Component Relativistic
Wavefunction Method

スピんに依存した2成分相対論的
波動関数法に関する理論的研究

申請者

Masahiko	NAKANO
中野	匡彦

化学・生命化学専攻 電子状態理論研究

2017年6月

本報告書は、申請者（中野匡彦）の博士論文に対して審査員（中井浩巳（主査）、古川行夫（副査）、井村考平（副査））が行った審査について記す。

博士論文審査は、2016年10月20日15時30分より開催の博士学位論文予備審査会（以下、予備審査会）から開始した。予備審査会では、博士論文の概要に関する発表が約20分、審査員らとの質疑応答が約10分それぞれ行われた。その後、博士学位論文受理申請（以下、受理申請）の可否を協議した。その結果、博士論文は博士（理学）の学位を申請するに十分な内容を含むと判断された。

2016年10月27日開催の化学・生命化学専攻教室会議（以下、教室会議）において、申請者が提出した博士論文概要書（以下、概要書）をもとに指導教授の中井から内容の説明がなされた。概要書では、博士論文は英文題目“**Theoretical Study on Spin-Dependent Two-Component Relativistic Wavefunction Method**”のもと全8章でまとめられる方針が示された。また、主要な研究業績は、査読付き学術論文7報（未発表論文6報を含む）とすることが示された。教室会議の審議を経て、受理申請が承認された。同時に博士論文の上記審査員が選出された。

2016年11月17日開催の先進理工学研究科運営委員会において、受理申請が承認された。

博士論文の草稿は、主査による指導に対して、2017年3月5日までに修正がなされた。その後、2017年3月6日に申請者から審査員に提出され、約1ヶ月間審査が行われた。博士論文公聴会（以下、公聴会）は、2017年3月29日16時より開催された。申請者による博士論文の内容に関する発表が約40分、その後、審査員および一般聴講者との質疑応答が約20分行われた。また、審査過程での議論を通して、申請者の学識を確認した。主要な議論と申請者による修正を次にまとめる。

博士論文は、全8章から構成されていた。第1章では、緒言として本論文の意義と構成が説明されていた。第2章では、本論文の主体となるスピンの依存した2成分相対論的波動関数法に関する理論的背景について説明されていた。また、スピン非依存の枠組みにおける高次電子相関理論の実装および分割統治法への拡張について記述されていた。第3章では、一般化Hartree-Fock (GHF) 法に対する収束加速アルゴリズムの実装と数値検証について記述されていた。第4章および第5章ではそれぞれ、時間反転対称性を利用した開殻HF理論であるKramers非制限HF法およびKramers制限開殻HF法の開発について記述されていた。第6章では多電子系における無限次Douglas-Kroll-Hess法に対する一般化Møller-Plesset 2次摂動法の開発について記述されていた。第7章では、第6章までに開発した手法を用いた、スピンプラストレーション系に対する応用計算について記述されていた。第8章では、総括が記述されていた。

審査過程での指導に対して、適切な修正がなされ、審査員全員の承認を経

て、博士論文の最終版は、申請者から 2017 年 4 月 10 日に化学・生命化学専攻連絡事務室に提出された。最終版における主要な研究業績は、既報の査読付き学術論文 4 報となった。

本博士論文の学術的な成果を以下に総括する。本論文において、スピンの依存した 2 成分相対論に基づく、高精度、効率的、かつ汎用的な波動関数法が開発された。これにより、実用に耐えうる相対論的量子化学計算手法が実現した。本論文によって、周期表中のあらゆる元素を含む分子系や非共線スピン系に対する電子状態を精緻に評価・予測できる理論が完成したと言える。

よって、本論文は博士（理学）の学位論文に値すると認められる。

2017 年 4 月

審査員

主査 早稲田大学教授 博士（工学） 京都大学 中井 浩巳
(署名)

早稲田大学教授 理学博士 東京大学 古川 行夫
(署名)

早稲田大学教授 博士（理学） 大阪大学 井村 考平
(署名)
