

平成 25 年 2 月 28 日







豊橋技術科学大学長 殿

審査委員長 角田 範義



論文審査及び最終試験の結果報告書

このことについて、下記の結果を得ましたので報告いたします。

学位申請者	加藤哲也	学籍番号	第 053708 号
申請学位	博士 (工学)	専攻名	機能材料工学
論文題目	多重解像度多重ウェーブレット基底の量子化学計算への応用		
公開審査会の日	平成 25 年 2 月 12 日		
論文審査の期間	平成 25 年 1 月 24 日～平成 25 年 2 月 28 日	論文審査の結果	合格
最終試験の日	平成 25 年 2 月 12 日	最終試験の結果	合格
論文内容の要旨	<p>伝統的な Linear Combination of Atomic Orbital (LCAO)型の基底では、光物性の定量的な評価などには困難があることが知られている。MADNESS は、離散ウェーブレット変換を基礎にした 3 次元直交空間上の完全局在関数である多重解像度多重ウェーブレット Multi-Resolution Multi-Wavelet (MRMW)基底の技術をベースに、超並列計算を前提に設計された科学計算ライブラリプログラムシステムである。本研究では、既存の量子化学計算に利用される技術を MADNESS に適用し実装することにより、LCAO 法をしのぐパフォーマンスや効率を得られることをしめした。第 1 章で MRMW 基底関数について、第 2 章は分子分極率について、第 3 章で量子化学における基底関数についての解説があり、第 4 章では Coupled Perturbed Hartree-Fock/Kohn-Sham (PHF/KS)法を基にした周波数依存動的な分極率計算の実装と LCAO 基底との比較をとおした結果の解析がされている。水素分子のような最も単純な分子であっても、LCAO では精度を上げるために恣意的な基底選択を行う必要があるが、MRMW 基底では自動的に高精度の計算がなされることが分かった。第 5 章では 内殻電子群を局所ポテンシャルと非局所ポテンシャルで近似し、計算の効率をあげる手法である擬ポテンシャル法の一つである Model Core Potential の実装について述べている。MRMW に即した新たなパラメータフィッティング手法を提案し、その精度を確かめた。</p>		
審査結果の要旨	<p>本研究は数十年来量子化学の主流であるガウシアン LCAO 法に対し新しい MRMW 基底をもちいた量子化学プログラムシステム開発の一端を担う研究である。</p> <p>第一に擬ポテンシャル法を MRMW に適用するには新しい理論的枠組みが必要であるが、パラメータ・フィッティングの新しい手法を開発実装することにより、擬ポテンシャルを MRMW 基底で使えるようにしたことは重元素を含む分子の理論化学の発展に貢献すると思われる。</p> <p>第二に、応答理論を MRMW に適用し、共鳴領域での周波数依存分極率厳密算定を可能にしたが、経験的要素が多かった光物性の定量算定に自動的に精度の保障がなされる方法を導入した功績は大きい。また科学的独創性のみならず、次世代計算環境対応の新しい量子化学プログラム開発への貢献という点からも評価に値する。本研究成果は学術論文 3 編として掲載されており、学術的に高い評価を得ている。以上により、本論文は博士 (工学) の学位論文に相当するものと判定した。</p>		
審査委員	角田範義 	栗田典之 	後藤仁志 
	関野秀男 		

(注) 論文審査の結果及び最終試験の結果は「合格」又は「不合格」の評語で記入すること。