

Na クラスターの全電子  $GW$ + Bethe-Salpeter 計算  
All-electron  $GW$ + Bethe-Salpeter calculation of sodium clusters

桑原理一<sup>1,2</sup>、大野かおる<sup>1</sup>、  
Riichi Kuwahara<sup>1,2</sup> and Kaoru Ohno<sup>1</sup>

<sup>1</sup>横浜国立大学大学院工学府物理情報工学専攻理工学コース  
<sup>2</sup>アクセルリス株式会社

<sup>1</sup> Department of Physics, Graduate School of Engineering,  
Yokohama National University, 79-5 Tokiwadai, Hodogaya, Yokohama 240-8501  
<sup>2</sup> Accelrys K.K. Kasumigaseki Tokyu Building 17F,  
3-7-1 Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-0013

$GW$ 近似をベースに2粒子グリーン関数に対する Bethe-Salpeter 方程式を解いて光吸収スペクトルを求める第一原理計算技術があるが、研究代表者らは我が国で初めてこの計算コードを開発し、2電子イオン化エネルギースペクトル、on-site Coulomb energy  $U$ 、Auger スペクトルの計算にも世界で初めて応用した実績をもつ。我々の開発しているプログラム TOMBO は平面波基底と局在基底の両方を用いる全電子混合基底法に基づいており、高い汎用性と計算精度を誇る。プログラムは MPI+OpenMP ハイブリッド並列化されている。既に我々は、 $GW$ の自己無撞着計算ができるようにし、自己エネルギーの  $\omega$  積分を回避するために、Hybertsen-Louie の GPP モデルだけでなく、von der Linden-Horsch のプラズモンポールモデル (PPM)、Engel-Farid の PPM もインストールした。さらに、分極関数および自己エネルギーの評価において多数の空状態の和を評価するのを回避するために、射影演算子の方法を取り入れ、このようにしても計算結果が変わらないことを確かめた。これにより、格段の計算スピードの高速化を図ることができた。今回は、さらに自己エネルギー部分と分極部分の両方に1次のバーテックス補正を取り入れるプログラムの改良を行った。Na クラスターに対して、この本格的な  $GW$ 計算を行った結果を Bethe-Salpeter 方程式につなげて、光吸収スペクトルを計算した結果(点線)を下図に示す。実線は実験データである。特に  $Na_2$  と  $Na_3$  は one-shot  $GW$ 近似に比べて格段に良い結果となっている。

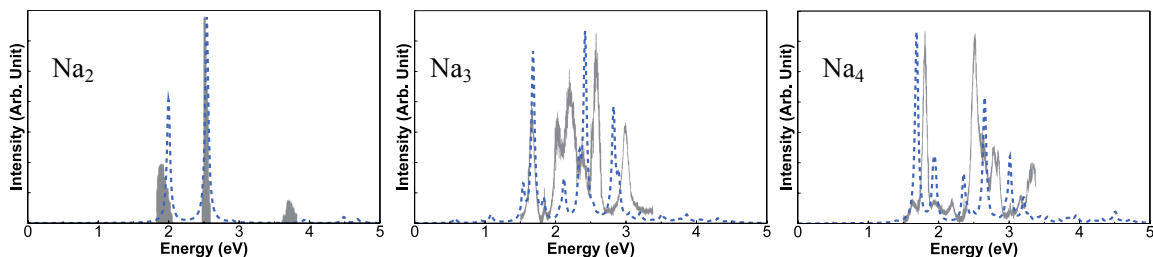


図.  $GW$ + Bethe-Salpeter計算によるNaクラスターの光吸収スペクトル. 点線が計算値で実線が実験値[W.R.Fredickson et al., PR **30**, 429 (1927); C.R.C.Wang et al., JCP **96**, 7931 (1992).]