

第一原理GW+Bethe-Salpeter法を用いた 光吸収スペクトル計算

野口良史

東京大学物性研究所

光吸収スペクトルの計算において計算精度や信頼性は励起子効果（ホール-電子間のクーロン相互作用）の取り扱いで決まる。現在最もよく用いられる時間依存密度汎関数理論（TDDFT）は手頃な計算コストでスペクトルを求めることができる一方で、計算精度の面では問題があり、通常はハイブリッド汎関数などの（半）経験的な手法に頼らざるを得ないのが現状である。DFTの枠組みを超えて多体摂動論に基づきBethe-Salpeter方程式（BSE）をGW近似（GWA）の範囲で解くGW+Bethe-Salpeter法では、より現実的な励起子効果を計算に取り入れることができる為高精度・高信頼性の光吸収スペクトルを（経験的パラメータなしで）第一原理から求めることができるとともに解析を行うことが可能である[1,2]。我々は第一原理GW+Bethe-Salpeterプログラムを開発してきた[3]。近年ではプログラムを積極的に並列化することで100原子を超えるような系に対して本手法を適用することが可能になり、実験家との共同研究もスタートしている。

本講演では、近年本手法を用いて行った応用計算として(1)有機太陽電池のアクセプター分子として応用が期待されているLi⁺@C₆₀分子の幾何学構造安定性・光学特性[4]、(2)新たな炭素系材料である欠陥を持ったうねったナノグラフェンの光学特性[5]、(3) X線吸収スペクトル計算の検証[6]、を紹介する予定である。

- [1] [Y. Noguchi](#) and K. Ohno, Phys. Rev. A, **81**, 045201 (2010).
- [2] [Y. Noguchi](#), O. Sugino, M. Nagaoka, and K. Ohno, J. Chem. Phys., **137**, 024306 (2012).
- [3] [Y. Noguchi](#), M. Hiyama, H. Akiyama, and N. Koga, J. Chem. Phys., **141**, 044309 (2014).
- [4] [Y. Noguchi](#), O. Sugino, H. Okada, and Y. Matsuo, J. Phys. Chem. C, **117**, 15362 (2013).
- [5] [Y. Noguchi](#), and O. Sugino, J. Chem. Phys., **142**, 064313 (2015).
- [6] [Y. Noguchi](#), M. Hiyama, H. Akiyama, Y. Harada, and N. Koga, J. Chem. Theor. Compt., **11**, 1668 (2015).