

物理工学コース談話会

GW+BSE法によるX線発光スペクトルの第一原理計算

17SD203 青木 翼（博士後期課程2年(→3年)）

物質の電子状態を分析するX線発光分光法(XES)は始状態が内殻準位に正孔を持つ励起状態であるため、基底状態を始状態とする既存の各種第一原理手法の適用には困難が存在した。この問題解決として、任意の電子励起状態を始状態として扱える拡張準粒子法に基づいたGW + Bethe-Salpeter equation(GW+BSE)法を提案する。

本提案手法の計算結果ではX線発光過程の発光エネルギーやスペクトル形状について、実験結果の高精度再現に成功した。また、発光スペクトルにおける励起子状態を意味するBSE波動関数と準粒子波動関数の対応関係を示し、発光スペクトルに対応した価電子状態の判定に成功した。

関連論文

[1] [T. Aoki](#) and K. Ohno, J. Phys.: Condens. Matter 30, 21LT01 (2018). [2] [T. Aoki](#) and K. Ohno, Phys. Rev. B 100, 075149 (2019).

日時 9月30日(月) 16:00~17:00

会場 総合研究棟W701

世話人 大野かおる

どなたでもお気軽にご参加ください

