

# 物理工学談話会

## 自己無撞着LGW $\Gamma$ 法による高精度第一原理計算の研究

18QC202 磯部 智遥 (博士課程後期3年)

日時：令和2年6月8日(月) PM 2:00 ~

会場：ZOOM会議 (ミーティングID: 987-4860-7192)

※パスワードについては世話人もしくは物理工学ユニット教員にお問い合わせください

多体摂動論に基づいたGreen関数法であるGW近似による計算は、局所密度近似や一般化勾配近似におけるバンドギャップの過小評価をある程度改善する手法として用いられるようになってきた。近年、準粒子方程式を線形化したLGW法や、バーテックス補正を取り込んだGW $\Gamma$ 法等を用いることにより、計算の更なる高精度化も可能になってきた。しかし、それらを実際に取り入れたことによる効果についての研究はこれまで殆ど行われていない。本研究では、通常のGW計算から、自己無撞着GW, LGW, LGW $\Gamma$ と段階的に高精度化した計算を行い、線形化及びバーテックス補正が計算精度を向上させるメカニズムについて研究を行なった。

どなたでもお気軽にご参加ください

世話人：大野かおる(内4254)



Initiative for Global Arts & Sciences

YOKOHAMA National University