

早稲田大学大学院 先進理工学研究科

博士論文審査報告書

論 文 題 目

Efficient Two-Component Relativistic Method
to Obtain Electronic and Molecular Structures of
Heavy-Element Systems

重元素系の電子状態および分子構造のための
効率的な 2 成分相対論法

申 請 者

Yuya	NAKAJIMA
中嶋	裕也

化学・生命化学専攻 電子状態理論研究

2017 年 2 月

本報告書は、申請者（中嶋裕也）の博士論文に対して審査員（中井浩巳（主査）、古川行夫（副査）、井村考平（副査））が行った審査について記す。

博士論文審査は、2016年10月20日13時より開催の博士学位論文予備審査会（以下、予備審査会）から開始した。予備審査会では、博士論文の概要に関する発表が約20分、審査員らとの質疑応答が約30分それぞれ行われた。その後、博士学位論文受理申請（以下、受理申請）の可否を協議した。その結果、博士論文は博士（理学）の学位を申請するに十分な内容を含むと判断された。

2016年10月27日開催の化学・生命化学専攻教室会議（以下、教室会議）において、申請者が提出した博士論文概要書（以下、概要書）をもとに指導教授の中井から内容の説明がなされた。概要書では、博士論文は英文題目“Efficient Two-Component Relativistic Method to Obtain Electronic and Molecular Structures of Heavy-Element Systems”のもと全8章でまとめられる方針が示された。また、主要な研究業績は、査読付き学術論文5報（未発表論文1報を含む）とすることが示された。教室会議の審議を経て、受理申請が承認された。同時に博士論文の上記審査員が選出された。

2016年11月17日開催の先進理工学研究科運営委員会において、受理申請が承認された。

博士論文の草稿は、主査による指導に対して、2016年12月26日までに修正がなされた。その後、2016年12月27日に申請者から審査員に提出され、約1ヶ月間審査が行われた。博士論文公聴会（以下、公聴会）は、2017年1月24日13時より開催された。申請者による博士論文の内容に関する発表が約40分、その後、審査員および一般聴講者との質疑応答が約20分行われた。また、審査過程での議論を通して、申請者の学識を確認した。主要な議論と申請者による修正を次にまとめる。

博士論文は、全8章から構成されていた。第1章では、緒言として本研究の意義と構成が説明されていた。井村副査が参考文献を記載するよう指示した。第2章では、理論的背景について説明されていた。第3章では、無限次Douglas-Kroll-Hess (IODKH)法、およびIODKH法に対し局所ユニタリー変換(LUT)を適用したLUT-IODKH法に対するエネルギー勾配について記述されていた。第4章では、第3章で開発したエネルギー勾配のspin依存形式への拡張と実装について記述されていた。第5章では、LUT-IODKH法のエネルギーおよびエネルギー勾配計算のGAMESSプログラムへの実装について記述されていた。第6章では、凍結内殻ポテンシャル法を用いた内殻軌道計算法について記述されていた。第7章では、第6章までに開発した手法を用いた、遷移金属錯体の生成エンタルピーにおける相対論効果について記述されていた。古川副査が、計算に用いた分子に関する記述、および結果の図表における記述の不備を修正するよう指示した。第8章では、総括が記述されていた。古川副査が、補遺は可能な限り本文に含める

