

2022 年度  
創発的研究支援事業 年次報告書

研究担当者	越智正之
研究機関名	大阪大学
所属部署名	理学研究科附属フォアフロント研究センター
役職名	准教授
研究課題名	多体波動関数に基づく次世代第一原理計算手法の確立
研究実施期間	2022 年 4 月 1 日～2023 年 3 月 31 日

**研究成果の概要**

固体物性は、固体に存在する電子の量子力学的な状態によって定まる。しかし、その支配方程式は、極めて多数の電子間の相互作用を含むものであり、正確に解くことは極めて難しい。第一原理計算はそうした支配方程式を（何らかの近似のもとで）解く理論手法であり、より正確な第一原理計算手法を開発することは、広く理論物性物理学において重要な課題である。

本研究計画は、多体波動関数を用いる波動関数理論の枠組みの中で、正確な第一原理計算手法の開発を目指すものである。2022 年度は、まず孤立原子系において多体波動関数を最適化する手法を複数試し、それらの精度や収束安定性を比較した。たとえば、最適化自由度としてはスレーター行列式と重複しているものの、ジャストロウ因子に 1 体関数も含めることによって、変分モンテカルロ法とスレーター行列の最適化との自己無撞着性に関する収束性が向上することなどを確かめた。

次に、固体電子系におけるプログラムコードを開発した。特に、固体電子系特有の波数空間での発散処理や、当該手法の有効 3 体相互作用の効率的な計算ルーチンなど、理論手法の詳細を論文にまとめて出版した。それに加え、github において当該プログラムコードをオープンソースで公開した。当該コードを利用するためのマニュアルやチュートリアルも整備した。現在も継続的に開発を続けている。これによって、他の研究者も当該手法を用いた電子状態計算が可能となるため、当該手法の開発が促進されることが期待される。