

2023 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	2023 年 4 月 1 日～2024 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を用いて、正確な第一原理計算手法の開発を目指すものである。2023 年度は、まず固体結晶構造の最適化のための理論手法の開発および計算コードへの実装を行なった。具体的には、Hellmann-Feynman 力の計算を我々の計算コード TC++ に実装し、幅広い物質についてその安定構造の精度を議論することが可能となった。現状では簡単な固体電子系についてのみ、その機能をテストしている。従来手法と比較しての精度向上は確かめられたものの、電子の局在性の比較的強いイオン性固体では精度が不十分であるなどの課題も見出された。

次に、そうした課題を克服するために、ジャストロウ相関因子の一般化を行なった。これまでは一様電子ガスで近似的に用いられる RPA 型の関数を用いていたが、それに加えてより一般性の高い多項式項を導入した。ここで多項式項の係数は変分量子モンテカルロ (VMC) 計算によって決定する。ここで、本研究で用いる波動関数理論と VMC を接続するのは必ずしも単純ではなく、例えば、VMC において波動関数最適化の指導原理として何を選ぶか、どのような波動関数の自由度を取り込むか、どの程度の統計サンプリングが必要か、といった点を適切に考慮しなければ、安定かつ正確な計算は実行できない。第一年次の原子系における計算で得た知見を用いてはいるものの、固体の電子状態計算においては異なる点も多く、次年度以降も継続して数値的検証を行う。