2024 年度

創発的研究支援事業　年次報告書【公開版】

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	2024 年 4 月 1 日～2025 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。2024 年度は、電子相関効果を記述するための波動関数の自由度（ジャストロウ相関因子）の一般化を昨年度に引き続き行った。変分モンテカルロ法（VMC）によって決めた多項式ジャストロウ関数のパラメータを用いて、本研究計画において開発する手法の有効ハミルトニアンを構築し、自己無撞着方程式を解いて一電子軌道の最適化を行った。系統的に計算精度の改善する結果が得られており、VMC コードと我々の開発しているコードとの接続は問題なく実現できている。安定な計算を実現するためのモンテカルロ法のインプットパラメータ（サンプリング数など）や、波動関数の自由度の取り入れ方の検証を行うことができた。また、ジャストロウ相関因子について、長距離の RPA 型漸近形を取り入れることで、バンドギャップの改善は確認できた。その一方、長距離部分と短距離部分の接続パラメータに計算結果が依存しうる問題もあり、その点の解決は次年度以降の課題である。また、長距離部分を取り込まずに多項式型のままでの計算も実行した。バンドギャップは（遮蔽効果が十分に取り込めずに）過大評価してしまうものの、全エネルギーの精度改善を固体シリコンなど簡単な系において確かめることはできた。これまでの研究ではイオン性固体などの記述精度が不十分であることがわかっているので、そうした系への適用も次年度以降の課題である。