

中間評価（ステージゲート審査）結果

1. 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
2. 研究代表者： 越智 正之（大阪大学 大学院理学研究科 准教授）
3. 中間評価（ステージゲート審査）コメント

本課題は、多体波動関数の自由度を活用することで、従来は記述の難しかった電子相関効果を取り込める、新しい第一原理計算手法を開発し、物性物理学の基礎研究から産業応用にまで活用できる、革新的な基盤理論の構築を目指す研究である。

フェーズ1では、孤立原子の多電子状態において Jastrow 相関因子の最適化に取り組んだ結果、計算精度の改善に成功、また TC 法と VMC 法を組み合わせた多体波動関数の最適化により、原子系で相関エネルギーの 99%を再現する高精度を達成した。固体の第一原理計算ソフトウェアを公開し、構造最適化でも高精度な結果を実現した。

フェーズ2では、TC+VMC 法を固体系へ拡張し、長距離相関因子の整合的な取り扱いの確立を目指す。van der Waals 力や磁性体の高精度記述にチャレンジし、物質科学における新しい基盤理論の創出を目指す意欲的な研究計画の遂行に期待する。

以上