

## 波動関数理論に基づく高精度な第一原理計算手法の開発

越智正之

挑戦的個人研究部門 波動関数理論に基づく高精度な第一原理計算手法の開発

物質の示す多種多様な性質を理解するために、複雑に相互作用する多電子系がどのような状態をとるかを明らかにする必要がある。特に、そうした多電子系の基礎方程式を虚心坦懐に解く手法を第一原理計算とよび、今日の物質科学において非常に広く用いられる強力な理論体系である。その一方で、現在の第一原理手法では計算精度が不十分であることが様々な点から指摘されており、信頼性の高い新しい計算手法を開発することが重要である。

本プロジェクトは、波動関数理論という枠組みに基づき、高精度な第一原理計算手法の開発を目指すものである。フォアフロント研究センターの発足（2022年4月）から2022年12月末までの成果は以下である。

### (1) 閉殻原子系の計算

波動関数理論の一種である Transcorrelated (TC) 法を閉殻原子系に適用した。以前は He 原子に適用したのみであったが、Be や Ne にも適用して、波動関数に対する近似レベルと計算精度の関係を調べた。また、複数の最適化手法を試したところ、TC 法と第一原理変分量子モンテカルロ法 (variational Monte Carlo (VMC)) を組み合わせた計算を実行する場合、VMC でエネルギー最小化を使うと計算が不安定になりうることがわかった。これは TC 法が非エルミートなハミルトニアンを扱うことと関係している可能性がある。一方、分散最小化を用いた場合は安定して TC+VMC の自己無撞着解にたどり着くことができた。TC 法による軌道最適化と、VMC による相関因子最適化を組み合わせ、高精度な多体波動関数が得られることを確かめた。現在、研究成果を論文投稿中である。

### (2) 固体電子系の計算コード開発

固体電子系に用いている計算コード TC++ を整備し、オープンソースコードとして github に公開した [1]。TC 法の計算は独特の有効ハミルトニアンを用いるため、その取り扱いには技術的な工夫が必要である。これまでは自分の開発したコードを個人的に用いていたが、計算手法のさらなる発展のために、執筆したマニュアルとあわせて計算コードの公開をした。公開にあわせて、広く用いられている第一原理計算ソフト Quantum Espresso と接続できるように計算コードを拡張した。本計算コードの開発に関連した技術的手法の論文について、現在、論文投稿中である。

参考文献：

[1] <https://github.com/masaochi/TC>

# 研究業績リスト

## I 査読論文

“Impact of mixed anion ordered state on the magnetic ground states of  $S=1/2$  square-lattice quantum spin antiferromagnets,  $Sr_2NiO_3Cl$  and  $Sr_2NiO_3F$ ”

Y. Tsujimoto, J. Sugiyama, M. Ochi, K. Kuroki, P. Manuel, D. D. Khalyavin, I. Umegaki, M. Månsson, D. Andreica, S. Hara, T. Sakurai, S. Okubo, H. Ohta, A. Boothroyd, and K. Yamaura  
Physical Review Materials **6** (2022), 114404.

DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.6.114404

“Crystal and electronic structures of  $BiS_2$ -based compounds  $Sr_{0.5}X_{0.5}FBiS_2$  ( $X =$  rare earth) under pressure: Correlation with the change in the superconductivity from unconventional to conventional”

H. Yamaoka, A. Yamashita, Y. Nakahira, M. Ochi, K. Kuroki, H. Arima, K. Matsubayashi, H. Ishii, N. Hiraoka, and Y. Mizuguchi

Physical Review B **106** (2022), 205122.

DOI: 10.1103/PhysRevB.106.205122

“In-plane anisotropic charge dynamics in the layered polar Dirac semimetal  $BaMnSb_2$ ”

H. Yoshizawa, H. Sakai, M. Kondo, M. Ochi, K. Kuroki, N. Hanasaki, and J. Fujioka

Physical Review B **105** (2022), L241110.

DOI: 10.1103/PhysRevB.105.L241110

“Chemical Pressure Effect on Structural and Physical Properties of  $15R-SrVO_{2.2}N_{0.6}$  with Anion-Vacancy Order”

K. Murayama, H. Takatsu, M. Ochi, M. Namba, K. Kuroki, and H. Kageyama

Journal of the Physical Society of Japan **91** (2022), 064805.

DOI: 10.7566/JPSJ.91.064805

## II 国際会議等における発表

該当なし

## III 国内会議等における発表

該当なし

#### **IV 著書**

該当なし

#### **V 受賞と知的財産**

該当なし

#### **VI その他研究業績、発表文献**

該当なし