

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

多種多様な固体物性は、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によって決定される。多電子系の基礎方程式を解く手法（第一原理計算）は今日の物質科学において不可欠な理論体系である一方で、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いる。そのため、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。特に、波動関数理論の一種である Transcorrelated (TC) 法を開発している。2023 年（1 月～12 月）の成果は以下である。

(1) 昨年（2022 年）成果の論文発表

昨年、TC 法を閉殻原子系に適用してその計算精度を調べた。特に、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の知見を得ることができ、その成果が論文として出版された[1]。また、固体電子系の計算コード開発について、開発に関連した技術的手法の論文が出版された[2]。

(2) 構造最適化計算の実装

第一原理計算の大きな目的のひとつは、結晶構造を最適化する（エネルギーを最小化する原子座標を得る）ことである。そのためにはエネルギーの座標微分を求める必要があり、Hellmann-Feynman 力といわれている。TC 法の固体計算コードに Hellmann-Feynman 力の計算およびその最小化（構造最適化）の機能を実装した。

(3) 多項式ジャストロウ因子の実装

TC 法において電子相関効果は、ジャストロウ相関因子によって記述される。しかしジャストロウ相関因子の自由度を増やすのは容易なことではない。(1)において原子系で TC+VMC を適用したが、固体電子系においてもそれを実行できるように、固体計算コードに対応する機能を実装した。計算精度の検証は現在、実行中である。

参考文献：

[1] M. Ochi, Phys. Rev. A **108**, 032806 (2023).

[2] M. Ochi, Comput. Phys. Commun. **287**, 108687 (2023).

研究業績リスト

I 査読論文

Superconductivity in a magnetic Rashba semimetal EuAuBi

H. Takahashi, K. Akiba, M. Takahashi, A. H. Mayo, M. Ochi, T. C. Kobayashi, and S. Ishiwata
J. Phys. Soc. Jpn. **92** (2023), 013701–(1–5).

DOI: 10.7566/JPSJ.92.013701

TC++: First-principles calculation code for solids using the transcorrelated method

Masayuki Ochi

Comput. Phys. Commun. **287** (2023), 108687–(1–33).

DOI: 10.1016/j.cpc.2023.108687

Field-tunable Weyl points and large anomalous Hall effect in the degenerate magnetic semiconductor EuMg₂Bi₂

M. Kondo, M. Ochi, R. Kurihara, A. Miyake, Y. Yamasaki, M. Tokunaga, H. Nakao, K. Kuroki, T. Kida, M. Hagiwara, H. Murakawa, N. Hanasaki, and H. Sakai

Phys. Rev. B **107** (2023), L121112–(1–7).

DOI: 10.1103/PhysRevB.107.L121112

Controlling of Localization by Elemental-substitution Effect in Layered BiCh₂-based Compounds LaO_{1-x}F_xBiS_{2-y}Se_y

K. Hoshi, H. Arima, N. Kataoka, M. Ochi, A. Yamashita, A. de Visser, T. Yokoya, K. Kuroki, Y. Mizuguchi

J. Phys. Soc. Jpn. **92** (2023), 054704–(1–9).

DOI: 10.7566/JPSJ.92.054704

Fully self-consistent optimization of the Jastrow-Slater-type wave function using a similarity-transformed Hamiltonian

Masayuki Ochi

Phys. Rev. A **108** (2023), 032806–(1–17).

DOI: 10.1103/PhysRevA.108.032806

Large Perpendicular Magnetic Anisotropy Induced by an Intersite Charge Transfer in Strained EuVO₂H Films

Morito Namba, Hiroshi Takatsu, Riho Mikita, Yao Sijia, Kantaro Murayama, Hao-Bo Li, Ryo Terada, Cedric Tassel, Hiroki Ubukata, Masayuki Ochi, Regino Saez-Puche, Elias Palacios Latasa, Naoki Ishimatsu, Daisuke Shiga, Hiroshi Kumigashira, Katsuki Kinjo, Shunsaku Kitagawa, Kenji Ishida, Takahito Terashima, Koji Fujita, Takeaki Mashiko, Keiichi Yanagisawa, Koji Kimoto, and Hiroshi Kageyama
J. Am. Chem. Soc. **145** (2023), 21807–21816.
DOI: 10.1021/jacs.3c04521

Electron-hole dichotomy and enhancement of the thermoelectric power factor by electron-hole-asymmetric relaxation time: A model study on a two-valley system with strong intervalley scattering

Masayuki Ochi

Phys. Rev. B **108** (2023), 195139–(1–9).

DOI: 10.1103/PhysRevB.108.195139

II 国際会議等における発表

Transcorrelated method for periodic systems (invited talk)

Masayuki Ochi

Extra Theoretical Chemistry Seminar, University of Cambridge

2023 年 5 月 18 日

Zoom (online)

An efficient impurity solver in dynamical mean field theory: Iterative perturbation theory combined with the parquet equations (poster)

Ryota Mizuno, Masayuki Ochi, Kazuhiko Kuroki

Computational Approaches to Quantum Many-Body Systems

2023 年 10 月 19 日

Sonic City, Saitama, Japan

Electron-hole dichotomy and enhancement of thermoelectric power factor by electron-hole-asymmetric relaxation time: a model study on a two-valley system with strong intervalley scattering (contributed talk)

Masayuki Ochi

ISSP Regular Workshop: How high can we raise thermoelectric performance?

2023 年 12 月 6 日

ISSP, Univ. of Tokyo, Japan

Ⅲ 国内会議等における発表

TC++: Transcorrelated 法に基づく固体の第一原理計算コードの開発（ポスター）

越智正之

日本物理学会 2023 年春季大会

2023 年 3 月 22 日 - 25 日

Zoom (online)

スピン・バレー結合したバルク極性ディラック半金属 BaMnX_2 ($\text{X}=\text{Sb}, \text{Bi}$) の非相反電気伝導
（口頭）

近藤雅起, 酒井英明, 木俣基, 須藤健太, 越智正之, 金子竜也, 黒木和彦, 阪口駿也, 村川寛, 花咲徳亮

日本物理学会 2023 年春季大会

2023 年 3 月 22 日 - 25 日

Zoom (online)

固体電子状態計算におけるトランスコリレイティッド法の開発（セミナー講演）

越智正之

神戸大学 天能研究室セミナー

2023 年 4 月 6 日

神戸大学六甲台キャンパス

Mg_3Sb_2 における元素拡散効果の理論研究（セミナー講演）

越智正之

大阪大学 棕田研究室セミナー

2023 年 5 月 10 日

大阪大学豊中キャンパス

波動関数理論に基づく固体の第一原理計算手法の開発（招待講演）

越智正之

第 88 回 Online CMT seminars

2023 年 6 月 13 日

Zoom (online)

多体波動関数に基づく次世代第一原理計算手法の確立（ポスター）

越智正之

創発的研究支援事業 第二回「融合の場」

2023 年 7 月 26 日 - 27 日

一橋大学一橋講堂

単層黒リンにおける高次高調波発生モデル化とその解析（ポスター）

宮本英雄, 越智正之, 黒木和彦, 金子竜也

日本物理学会第 78 回年次大会（2023 年）

2023 年 9 月 16 日 - 19 日

東北大学青葉山キャンパス、川内キャンパス

高圧相 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ における面間ペアリング超伝導の可能性に対する理論的考察（口頭）

榊原寛史, 北峯尚也, 越智正之, 黒木和彦

日本物理学会第 78 回年次大会（2023 年）

2023 年 9 月 16 日 - 19 日

東北大学青葉山キャンパス、川内キャンパス

平坦バンドを持つ二次元格子上の Hubbard 模型における超伝導に関する研究（口頭）

相田哲明, 越智正之, 黒木和彦

日本物理学会第 78 回年次大会（2023 年）

2023 年 9 月 16 日 - 19 日

東北大学青葉山キャンパス、川内キャンパス

微細加工した反強磁性金属 EuMnBi_2 における直流電流下での磁気圧電効果の検証（口頭）

宮本雄哉, 酒井英明, 木俣基, 越智正之, 近藤雅起, 村川寛, 花咲徳亮

日本物理学会第 78 回年次大会（2023 年）

2023 年 9 月 16 日 - 19 日

東北大学青葉山キャンパス、川内キャンパス

磁化測定と XMCD 測定で明らかにする新規酸水素化物 EuVO_2H の巨大垂直磁気異方性（口頭）

高津浩, 難波杜人, 村山寛太郎, 寺田凌, 越智正之, 寺嶋孝仁, 陰山洋

日本物理学会第 78 回年次大会（2023 年）

2023 年 9 月 16 日 - 19 日

東北大学青葉山キャンパス、川内キャンパス

実周波数 IPT+parquet 法の定式化（ポスター）

水野竜太, 越智正之, 黒木和彦

日本物理学会第 78 回年次大会（2023 年）

2023 年 9 月 16 日 - 19 日

東北大学青葉山キャンパス、川内キャンパス

強いバレー間散乱による緩和時間の電子・ホール非対称性と熱電輸送（口頭）

越智正之

日本物理学会第 78 回年次大会（2023 年）

2023 年 9 月 16 日 - 19 日

東北大学青葉山キャンパス、川内キャンパス

Transcorrelated 法を用いた固体の第一原理計算ソフトウェア TC++の紹介（招待講演）

越智正之

2023 年度第 5 回物性アプリオープンフォーラム

2023 年 9 月 29 日

東京大学物性研究所

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

越智正之

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

いちょう祭 2023 でポスター発表

豊中市

2023 年 4 月 30 日

越智正之

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

第 2 回 FRC 談話会で講演

豊中市

2023 年 10 月 30 日

越智正之

固体の電子状態計算とその手法開発

大阪大学理学研究科「第 13 回理学研究フォーラム／第 12 回研究交流セミナー」でポスター
発表

豊中市

2023 年 11 月 6 日