

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。2024 年（1 月～12 月）の成果は以下である。

(1) 多項式ジャストロウ因子の最適化と金属計算

昨年、TC 法において多項式ジャストロウ因子を用いた固体の第一原理計算ができるように計算コードを拡張した。今年はそれを用いて、固体 Na を計算した。金属系では $1/r$ 減衰する長距離ジャストロウ因子が用いられることがしばしばある一方で、十分にカットオフ半径を長くとした上で多項式ジャストロウ因子を用いることも多い。両者を比較し、さらにスーパーセルの大きさを変えながら最適化計算を行うことでその計算精度を検証した。

(2) 長距離ジャストロウ相関因子と外挿計算

(1)において、量子モンテカルロ法による計算では（短距離）多項式ジャストロウ相関因子の最適化が主になされ、長距離ジャストロウ因子の最適化はセルサイズの関係もあり困難である。そのため、多項式ジャストロウ相関因子をもとに、それを $1/r$ 外挿することで長距離ジャストロウ相関因子を得る機能を開発し、実装した。十分にカットオフ半径を長くともより正確な値が得られやすくなる一方で、外挿時のパラメータによる任意性が生じる困難も見出した。

(3) 様々な物性に対する第一原理計算の適用

波動関数理論の開発とは直接の関係はないが、第一原理計算を用いて種々の物性研究を遂行した。梯子型銅酸化物超伝導体のホッピング起源の解明、実験家と連携した物質のトポロジカル相の同定、スカーミオン磁性体の第一原理計算などに取り組んだ。特に、近年発見された二層系ニッケル酸化物超伝導体 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ について、その超伝導メカニズムの解明、三層系における超伝導の予言と実証、類縁物質における超伝導の理論提案などに取り組んだ。

研究業績リスト

I 査読論文

Theoretical analysis of the origin of the double-well band dispersion in the CuO double chains of $\text{Pr}_2\text{Ba}_4\text{Cu}_7\text{O}_{15-\delta}$ and its impact on superconductivity

T. Yagi, M. Ochi, and K. Kuroki,

Phys. Rev. B **110** (2024), 184516–(1–9).

DOI: 10.1103/PhysRevB.110.184516

Robust Weak Topological Insulator in the Bismuth Halide $\text{Bi}_4\text{Br}_2\text{I}_2$

R. Noguchi, M. Kobayashi, K. Kawaguchi, W. Yamamori, K. Aido, C. Lin, H. Tanaka, K. Kuroda, A. Harasawa, V. Kandyba, M. Cattelan, A. Barinov, M. Hashimoto, D. Lu, M. Ochi, T. Sasagawa, and T. Kondo,

Phys. Rev. Lett. **133** (2024), 086602–(1–7).

DOI: 10.1103/PhysRevLett.133.086602

Theoretical study of spin-fluctuation-mediated superconductivity in two-dimensional Hubbard models with an incipient flat band

T. Aida, K. Matsumoto, D. Ogura, M. Ochi, and K. Kuroki,

Phys. Rev. B **110** (2024), 054516–(1–8).

DOI: 10.1103/PhysRevB.110.054516

Unconventional anomalous Hall effect in a triangular lattice antiferromagnet

M. Watanabe, T. Higashihara, R. Asama, M. Tokuda, S. Suzuki, N. Jiang, M. Ochi, H. Ishizuka, H. K. Yoshida, and Y. Niimi,

Phys. Rev. B **110** (2024), 024431–(1–7).

DOI: 10.1103/PhysRevB.110.024431

Fermi Surface Nesting Driving the RKKY Interaction in the Centrosymmetric Skyrmion Magnet Gd_2PdSi_3

Y. Dong, Y. Arai, K. Kuroda, M. Ochi, N. Tanaka, Y. Wan, M. D. Watson, T. K. Kim, C. Cacho, M. Hashimoto, D. Lu, Y. Aoki, T. D. Matsuda, and T. Kondo,

Phys. Rev. Lett. **133** (2024), 016401–(1–6).

DOI: 10.1103/PhysRevLett.133.016401

Spin-polarized saddle points in the topological surface states of elemental bismuth revealed by pump-probe spin- and angle-resolved photoemission spectroscopy

Y. Fukushima, K. Kawaguchi, K. Kuroda, M. Ochi, M. Hirayama, R. Mori, H. Tanaka, A. Harasawa, T. Iimori, Z. Zhao, S. Tani, K. Yaji, S. Shin, F. Komori, Y. Kobayashi, and T. Kondo,

Phys. Rev. B **110** (2024), L041401–(1–7).

DOI: 10.1103/PhysRevB.110.L041401

Anomalous Fermi pockets on the Hund's metal surface of Sr_2RuO_4 induced by correlation-enhanced spin-orbit coupling

T. Kondo, M. Ochi, S. Akebi, Y. Dong, H. Taniguchi, Y. Maeno, and S. Shin,

Phys. Rev. B **109** (2024), L241107–(1–7) (2024).

DOI: 10.1103/PhysRevB.109.L241107

Pair correlations of the hybridized orbitals in a ladder model for the bilayer nickelate $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$

M. Kakoi, T. Kaneko, H. Sakakibara, M. Ochi, and K. Kuroki,

Phys. Rev. B **109** (2024), L201124–(1–6).

DOI: 10.1103/PhysRevB.109.L201124

Theoretical analysis on the possibility of superconductivity in the trilayer Ruddlesden-Popper nickelate $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$ under pressure and its experimental examination: Comparison with $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$

H. Sakakibara, M. Ochi, H. Nagata, Y. Ueki, H. Sakurai, R. Matsumoto, K. Terashima, K. Hirose, H. Ohta, M. Kato, Y. Takano, and K. Kuroki,

Phys. Rev. B **109** (2024), 144511–(1–10).

DOI: 10.1103/PhysRevB.109.144511

Possible High T_c Superconductivity in $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ under High Pressure through Manifestation of a Nearly Half-Filled Bilayer Hubbard Model

H. Sakakibara, N. Kitamine, M. Ochi, and K. Kuroki,

Phys. Rev. Lett. **132** (2024), 106002–(1–6).

DOI: 10.1103/PhysRevLett.132.106002

Pair correlations in the two-orbital Hubbard ladder: Implications for superconductivity

in the bilayer nickelate $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$

T. Kaneko, H. Sakakibara, M. Ochi, and K. Kuroki,

Phys. Rev. B **109** (2024), 045154–(1–5).

DOI: 10.1103/PhysRevB.109.045154

II 国際会議等における発表

Analysis on unconventional superconductivity in $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ and $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$ under high pressure: theory vs. experiment (contributed talk)

Kazuhiko Kuroki, Hirofumi Sakakibara, Masayuki Ochi

APS March Meeting 2024

2024 年 3 月 3 日 - 8 日

Minneapolis Convention Center, USA

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

APS March Meeting 2024

2024 年 3 月 3 日 - 8 日

Minneapolis Convention Center, USA

An efficient impurity solver in DMFT for multi-band systems (contributed talk)

Ryota Mizuno, Masayuki Ochi, Kazuhiko Kuroki

APS March Meeting 2024

2024 年 3 月 3 日 - 8 日

Minneapolis Convention Center, USA

III 国内会議等における発表

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（招待講演）

越智正之

研究会「熱電材料研究の最前線と新展開」

2024 年 4 月 26 日

大阪大学豊中キャンパス

ワイドバンド・平坦バンド共存系におけるスピン揺らぎ媒介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 2024 年春季大会

2024 年 3 月 18 日 - 21 日

Zoom (online)

$\text{Sr}_3\text{Ni}_2\text{O}_5\text{Cl}_2$ の電子状態および構造安定性に関する理論研究 (口頭)

越智正之

Superconductivity Summer Seminar 2024

2024 年 6 月 14 日 - 16 日

山岸園、静岡県伊東市

$\text{Pr}_2\text{Ba}_4\text{Cu}_7\text{O}_{15}$ の CuO 二重鎖における二重井戸型バンドの起源と超伝導機構の理論的研究 (口頭)

八木俊輝, 越智正之, 黒木和彦

日本物理学会第 79 回年次大会 (2024 年)

2024 年 9 月 16 日 - 19 日

北海道大学札幌キャンパス

非線形フォノンクスによる 2 層ニッケル酸化物超伝導体 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ の光制御に関する理論的研究 (口頭)

神山周, 金子竜也, 黒木和彦, 越智正之

日本物理学会第 79 回年次大会 (2024 年)

2024 年 9 月 16 日 - 19 日

北海道大学札幌キャンパス

DMFT における局所フルバーテックスの簡略化法の改良 (口頭)

水野竜太, 越智正之, 黒木和彦

日本物理学会第 79 回年次大会 (2024 年)

2024 年 9 月 16 日 - 19 日

北海道大学札幌キャンパス

BC_3 層間化合物の電子状態と熱電性能の理論研究 (口頭)

榎並龍太郎, 黒木和彦, 越智正之

日本物理学会第 79 回年次大会 (2024 年)

2024 年 9 月 16 日 - 19 日

北海道大学札幌キャンパス

モデル化された黒リンの電子バンドを用いた高次高調波発生 of 理論的研究（口頭）

宮本英雄, 越智正之, 黒木和彦, 金子竜也

日本物理学会第 79 回年次大会（2024 年）

2024 年 9 月 16 日 - 19 日

北海道大学札幌キャンパス

二層型ニッケル酸塩化合物 $\text{Sr}_3\text{Ni}_2\text{O}_5\text{Cl}_2$ における常圧下での正方晶の実現と超伝導の可能性に関する理論的研究（口頭）

越智正之, 榊原寛史, 臼井秀知, 黒木和彦

超伝導研究の新潮流

2024 年 12 月 18 日 - 20 日

京都大学基礎物理学研究所

IV 著書

Theoretical Calculation of Mixed-Anion Compounds from “Mixed-anion Compounds”

Akihide Kuwabara, Masayuki Ochi, Kazuki Shitara, Kenta Hongo, Ryo Maezono

Royal Society of Chemistry (Mar. 28, 2024, Chapter 5 pp.211–231)

Hardback ISBN: 978-1-83916-512-2

DOI: 10.1039/9781839166372

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