

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。2025 年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絶縁体の計算

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、いくつかの絶縁体を計算した。昨年、長距離減衰するジャストロウ因子を計算に用いることを試みたが、外挿時のパラメータによる任意性が生じる困難が見出された。そこで今年は、短距離型のジャストロウ因子を用いることとした。正確な格子定数が得られることは確かめられたが、TC 法で格子定数を得るためには、ジャストロウ因子を決める際の変分モンテカルロ計算で、統計誤差をかなり減らさないといけないことも明らかになった。

(2) さまざまな物性に対する第一原理計算の適用

第一原理計算を用いて種々の物性研究を遂行した。実験研究者とも連携しつつ、電流誘起のネマティック電子状態の実現、 WTe_2 におけるランダウ量子化の観測の検証、近年発見された二層系ニッケル酸化物超伝導体 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ について光による構造制御の研究・類縁物質の理論開拓、熱電候補物質 BC_3 の電子状態の研究、ファンデルワールス積層系の理論計算、ディラック電子系における非相反伝導の研究、水素イオンドーピングによる酸化物へのドーピング効果の研究などに取り組んだ。

研究業績リスト

I 査読論文

Transport evidence of current-induced nematic Dirac valleys in a parity-time-symmetric antiferromagnet

H. Sakai, Y. Miyamoto, M. Kimata, H. Watanabe, Y. Yanase, M. Ochi, M. Kondo, H. Murakawa, and N. Hanasaki,

Nat. Commun. 16 (2025), 11112–(1–8).

DOI: 10.1038/s41467-025-67229-y

Electronic band structure from quasiparticle interference and Landau quantization in WTe_2

R. Sánchez-Barquilla, F. Martín Vega, A. M. Ruiz, N. Hyun Jo, E. Herrera, J. J. Baldoví, M. Ochi, R. Arita, S. L. Bud'ko, P. C. Canfield, I. Guillamón, and H. Suderow,

Phys. Rev. B 112 (2025), 165401–(1–16).

DOI: 10.1103/7xnv-8wvt

Optical control of the crystal structure in the bilayer nickelate superconductor $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ via nonlinear phononics

S. Kamiyama, T. Kaneko, K. Kuroki, and M. Ochi,

Phys. Rev. B 112 (2025), 094115–(1–13).

DOI: 10.1103/h6vj-fd4n

Possible high thermoelectric power factor in alkali-metal-intercalated BC_3 : Anisotropic multiple valleys originating from the van Hove singularity of graphene

R. Enami, K. Kuroki, and M. Ochi,

Phys. Rev. Mater. 9 (2025), 084001–(1–9).

DOI: 10.1103/rqrv-7hqt

Theoretical study on the possibility of high T_c $s_{\pm}$ -wave superconductivity in heavily hole-doped infinite layer nickelates

H. Sakakibara, R. Mizuno, M. Ochi, H. Usui, and K. Kuroki,

Phys. Rev. B 111 (2025), 224511–(1–7).

DOI: 10.1103/nl4m-n5dx

Engineered substrates for domain control in CrSe thin-film growth: single-domain formation on a lattice-matched YSZ(111) substrate

Y. Tajima, J. Shiogai, M. Ochi, K. Kudo and J. Matsuno,

Jpn. J. Appl. Phys. 64 (2025), 065502–(1–6).

DOI: 10.35848/1347-4065/addb1b

Improvement of the simplification method for the local two-particle full vertex towards precise frequency behavior

R. Mizuno, K. Kuroki, and M. Ochi,

Phys. Rev. B 111 (2025), 205136–(1–13).

DOI: 10.1103/PhysRevB.111.205136

Pseudogap and Fermi arc induced by Fermi surface nesting in a centrosymmetric skyrmion magnet

Y. Dong, Y. Kinoshita, M. Ochi, R. Nakachi, R. Higashinaka, S. Hayami, Y. Wan, Y. Arai, S. Huh, M. Hashimoto, D. Lu, M. Tokunaga, Y. Aoki, T. D. Matsuda, and T. Kondo,

Science 388 (2025), 624–630.

DOI: 10.1126/science.adj7710

Mass enhancement and metal-nonmetal transition driven by d-f hybridization in perovskite $\text{La}_{1-x}\text{Pr}_x\text{CuO}_3$

H. Takahashi, M. Ito, J. Fujioka, M. Ochi, S. Sakai, R. Arita, H. Sagayama, Y. Yamasaki, and S. Ishiwata,

Phys. Rev. B 111 (2025), 085153–(1–6).

DOI: 10.1103/PhysRevB.111.085153

Efficient electron doping into KTaO_3 by hydrogen ion beam

S. Hirata, G. Lim, T. Ozawa, M. Wilde, K. Fukutani, M. Ochi, Y. Takagi, H. Kitagawa, and M. Maesato,

Phys. Rev. Materials 9 (2025), 025002–(1–9).

DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.9.025002

Theoretical study of the crystal structure of the bilayer nickel oxychloride $\text{Sr}_3\text{Ni}_2\text{O}_5\text{Cl}_2$ and analysis of possible unconventional superconductivity

M. Ochi, H. Sakakibara, H. Usui, and K. Kuroki,

Phys. Rev. B 111 (2025), 064511–(1–11).

DOI: 10.1103/PhysRevB.111.064511

First-principles Study of Metallic-atom Diffusion in Thermoelectric Material Mg_3Sb_2

M. Ochi, K. Nishiguchi, C. H. Lee, and K. Kuroki,

J. Phys. Soc. Jpn. 94 (2025), 024704–(1–5).

DOI: 10.7566/JPSJ.94.024704

Nonreciprocal charge transport in polar Dirac metals with tunable spin-valley coupling

M. Kondo, M. Kimata, M. Ochi, T. Kaneko, K. Kuroki, K. Sudo, S. Sakaguchi, H. Murakawa, N. Hanasaki, and H. Sakai,

Phys. Rev. Res. 7 (2025), 013041–(1–9).

DOI: 10.1103/PhysRevResearch.7.013041

II 国際会議等における発表

Optical control of the crystal structure in the bilayer nickelate superconductor $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ via nonlinear phononics: a first-principles study (poster)

Shu Kamiyama, Tatsuya Kaneko, Kazuhiko Kuroki, Masayuki Ochi

30th International Conference on low temperature physics (LT30)

2025 年 8 月 7 日 - 13 日

Bilbao Exhibition Centre, Bizkaia, Spain

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 (oral)

Masayuki Ochi

ICT/ACT 2025

2025 年 6 月 15 日 - 19 日

June 15–19, 2025 (talk: June 16)

Sendai International Center, Sendai, Japan

Pair correlations in the two-orbital t-J ladder model for the bilayer nickelates
(poster)

Masataka Kakoi, Tatsuya Kaneko, Hirofumi Sakakibara, Masayuki Ochi, Kazuhiko Kuroki
Joint March Meeting and April Meeting: Global Physics Summit 2025

2025 年 3 月 16 日 - 21 日

Anaheim Convention Center, Anaheim, USA

Ⅲ 国内会議等における発表

第一原理計算に基づく二層ニッケル酸化物の理論設計: $\text{Sr}_3\text{Ni}_2\text{O}_5\text{Cl}_2$ および類縁物質について
(招待講演)

越智正之

新規超伝導体を舞台とする超伝導科学のフロンティア

2025 年 12 月 22 日 - 24 日

京都大学基礎物理学研究所

鉄系超伝導体の非線形フォノンクスを用いた結晶制御と超伝導性増強に向けた理論的研究
(口頭)

神山周, 金子竜也, 黒木和彦, 越智正之

新規超伝導体を舞台とする超伝導科学のフロンティア

2025 年 12 月 22 日 - 24 日

京都大学基礎物理学研究所

熱電半金属 Ta_2PdSe_6 における電子ホール非対称なキャリア寿命の起源: 第一原理計算による電子フォノン散乱の解析 (口頭)

越智正之, 森仁志, 中埜彰俊

日本物理学会第 80 回年次大会 (2025 年)

2025 年 9 月 16 日 - 19 日

広島大学東広島キャンパス

非線形フォノンクスによるニッケル系超伝導体 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ の光構造制御に向けた理論予測

神山周, 金子竜也, 黒木和彦, 越智正之

第 86 回応用物理学会秋季学術講演会 (口頭)

2025 年 9 月 7 日 - 10 日

名城大学天白キャンパス

二層型ニッケル酸塩化物 $\text{Sr}_3\text{Ni}_2\text{O}_5\text{Cl}_2$ 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（招待講演）

越智正之

超伝導会合 SCF2025

2025 年 7 月 11 日 - 13 日

湯梨浜中央公民館

$\text{Pr}_2\text{Ba}_4\text{Cu}_7\text{O}_{15}$ 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

Superconductivity Interdisciplinary Seminar (SIS) 2025

2025 年 5 月 16 日 - 18 日

山岸園

GdGaI における d-f スピン結合と電子相関効果（口頭）

金子竜也, 宮本英雄, 神山周, 水野竜太, 越智正之

日本物理学会 2025 年春季大会

2025 年 3 月 18 日 - 21 日

オンライン

非線形フォノンクスを用いたニッケル系超伝導体 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ の頂点酸素位置の制御と超伝導の関係（口頭）

神山周, 牛尾賢生, 金子竜也, 越智正之, 榊原寛史, 黒木和彦

日本物理学会 2025 年春季大会

2025 年 3 月 18 日 - 21 日

オンライン

二層型ニッケル酸塩化物 $\text{Sr}_3\text{Ni}_2\text{O}_5\text{Cl}_2$ 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

日本物理学会 2025 年春季大会

2025 年 3 月 18 日 - 21 日

オンライン

超伝導候補物質 $\text{Sr}_3\text{Mo}_2\text{O}_7$ における隠れた梯子系の多軌道効果に関する理論研究（ポスター）

工藤大輝, 越智正之, 黒木和彦

日本物理学会第 80 回年次大会（2025 年）

2025 年 9 月 16 日 - 19 日

広島大学東広島キャンパス

三層型および三本鎖梯子型模型における非従来型超伝導に関する理論的研究（ポスター）

山田雄士, 植田涼太, 梶昌孝, 金子竜也, 越智正之, 黒木和彦

日本物理学会第 80 回年次大会（2025 年）

2025 年 9 月 16 日 - 19 日

広島大学東広島キャンパス

非線形フォノンクスによる 1111 鉄系超伝導体の光構造制御に関する理論的研究（ポスター）

神山周, 金子竜也, 黒木和彦, 越智正之

日本物理学会第 80 回年次大会（2025 年）

2025 年 9 月 16 日 - 19 日

広島大学東広島キャンパス

軌道揺らぎ効果に着目した IPT+parquet 法の精度検証（ポスター）

山田愛蘭, 水野竜太, 越智正之, 黒木和彦, 大橋琢磨

日本物理学会第 80 回年次大会（2025 年）

2025 年 9 月 16 日 - 19 日

広島大学東広島キャンパス

IV 著書

多層型ニッケル酸化物超伝導体 $\text{La}_3\text{Ni}_2\text{O}_7$ および $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{O}_{10}$ に関する理論的研究

黒木 和彦, 越智 正之, 金子 竜也, 榊原 寛史

アグネ技術センター（2025 年 1 月発行、page 11-31）

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