

2024 年度年次報告書

計測・解析プロセス革新のための基盤の構築

2024 年度採択研究代表者

中野 晃佑

物質・材料研究機構 マテリアル基盤研究センター

独立研究者

第一原理拡散量子モンテカルロ法による原子に働く力の計算確立と応用

研究成果の概要

本研究課題の第一の目標である、拡散量子モンテカルロ法によるバイアスのない力計算、を達成するためのプラットフォームとして、新しいオープンソースの量子モンテカルロ法の計算ソフトの開発を進めている。今年度は、当初予定していた拡散量子モンテカルロ法の実装まで終了し、本さきがけ研究に係る大目標である拡散量子モンテカルロ法による力計算の方法論開発に耐えうる形にまでなった。現在、論文化を進めている段階である¹⁾。また、拡散量子モンテカルロ法に基づく力の計算結果を用いた結果を将来的に応用する方向性として、熱伝導率計算への応用を考え、量子モンテカルロ法のデータを使った場合の機械学習力場の構築方法について検討を進めた。その結果、これまで一般に行われてきた、エネルギーと共にバイアスを有する力をデータとして利用する方法では、生成される機械学習力場にもバイアスが乗ってくること、及び、そのバイアスを解消するためには、研究代表者等が最近開発した手法²⁾が有効であることを示した³⁾。

【代表的な原著論文情報】

- 1) K. Nakano and M. Casula, *in preparation* (2025).
- 2) K. Nakano, M. Casula, Efficient calculation of unbiased atomic forces in ab initio variational Monte Carlo, ***Phys. Rev. B*, 109**, 205151 (2024).
- 3) G. Tenti, K. Nakano, M. Casula, Self-consistency error correction for accurate machine learning potentials from variational Monte Carlo, ***arXiv***, 2504.20481 (2025).