

課題名 (タイトル) :

大規模並列計算機を用いた強相関量子多体数値シミュレーションコードの開発とその応用

利用者氏名 :

白川知功\*\*、柚木清司\*,\*\*,\*\*\*、関和弘\*、正木晶子\*、野田数人\*、Beom Hyun Kim\*、Qing Xie\*、佐藤年裕\*、榊原寛史\*、Qinfang Zhang\*、Robert Peters\*、西本理\*、Ahmad Ranjbar\*\*\*

所属 :

\*柚木計算物性物理研究室

\*\*創発物性科学研究センター 計算量子物性研究チーム

\*\*\*計算科学研究機構 量子系物質科学研究チーム

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

遷移金属酸化物、希土類-アクチノイドを含む f 電子系化合物、および、分子性固体に代表される強相関電子系は、トンネル効果を利用して電子が飛び回る運動項と、電子間同士の斥力に起因する多体相互作用項の両者の拮抗によって、多彩な性質の発現が期待される物質群である。強相関量子系の本質を捉えるためには、運動項と相互作用項の両者を精密に取り扱った多体量子系を取り扱う必要があり、解析的に解ける問題は限られている。したがって、物性の理論的解明には大規模な数値シミュレーションが大きな役割を果たしている。これまでも、第一原理バンド計算、量子モンテカルロ法、数値的繰り込み群法、クラスター近似法などの、様々な多体量子系計算手法が考案され、発展してきた。しかしながら、各々の計算手法には長所・短所があり、すべての問題に有効な万能な計算手法というものは存在しない。

そこで、本課題では、それぞれの量子多体系計算手法を専門とする研究を行ってきたものを集め、メンバーがこれまで培ってきた計算手法をさらに発展させると同時に、一つの計算手法では不十分な点を補い合うことで統一的な物性の解明を目指してきた。

特に、本年度のテーマとして、2次元量子多体系の動的物理量計算を目指した。動的物理量は各実験結果として得られるスペクトルに相当する量であり、物性物理の理論的・実験的研究の両面からみても重要な物理量である。

2. 具体的な利用内容、計算方法

本研究課題では、多体格子模型に対する直接解法である、各種量子モンテカルロ法、厳密対角化法、密度行列繰り込み群法などの各手法を強相関量子系の諸問題に応用した。また、直接解法の他に、自己エネルギー汎関数理論に基づくクラスター近似法の開発も行い、開発した直接解法をさらにクラスターソルバーに用いる等の手法開発も行った。また、現実物質を理論的に議論するために重要な第一原理計算に基づく新しい2体相互作用の計算方法についても提案した。

以下に、それぞれの手法およびその適用例について、問題ごとにまとめる。

■フラストレーションのない反磁性体の動的構造因子

2次元正方格子上で定義されるスピン 1/2 の反強磁性ハイゼンベルグ模型は、銅酸化物高温超伝導体の母物質の有効模型として古くから研究されてきた強相関物質を代表する典型的な模型であり、基底状態では反強磁性秩序を示すことが数値的に検証されている。しかしながら、中性子散乱実験に相当する動的スピン構造因子については、これまで有効な計算手法がなかったため、その詳細については明らかになっていない。特に、これに関連して、ごく最近、スピン 1/2 正方格子反強磁性ハイゼンベルグ模型を再現する結晶構造を持つ  $\text{Cu}(\text{DCOO})_2 \cdot 4\text{D}_2\text{O}$  に対しての詳細な実験が行われ、特定の波数の励起が分数励起なのではないかという示唆がなされ、この問題に対する理論的解明が望まれている。

そこで、本課題では、反強磁性ハイゼンベルグ模型の虚時間相関関数を世界線量子モンテカルロ法(world line)を用いて高精度計算し、得られた虚時間相関関数のデータに対して統計的最適化法 (SOCC) を用いた解析

接続を行い、現段階で得られる最も厳密なスピン 1/2 正方格子反強磁性ハイゼンベルグ模型の動的スピン構造因子の数値解の推定を試みた。SOCC では、ある誤差の範囲で許されるスペクトルすべてを解とみなす方法である。world line で得られる虚時間相関関数の精度に応じて SOCC によって推定される解の範囲が狭まり、より厳密な解が得られる。そこで、HOKUSAI および RICC を用いた長時間の大規模並列モンテカルロシミュレーションを実行した。

### ■厳密対角化法を用いた RIXS スペクトル計算

蜂の巣格子を持つ相対論的スピン軌道相互作用の強い 4d および 5d 遷移金属酸化物は、トポロジカル相やスピン液体などといった新しい相の出現が期待されるため、近年注目を集めている。これらの物質の電子状態を議論する際、鍵となるのは、それらがどのような機構によって絶縁体になっているかということである。とくに、これまでの先行研究で、蜂の巣格子に特有な  $t_{2g}$  軌道間の結合を利用することで局所的な分子軌道を作るという見方と、遷移金属上で相対論的スピン軌道相互作用によって形成される  $j$  軌道上にホールが一つ入り、電子クーロン斥力によって絶縁化するという見方の二つの機構が提案されていた。しかしながら、現実の物質は、ある極限からみた上記二つの見方の中間に位置すると考えられるため、どちらの見方が本質的な絶縁化機構と考えられるかを見極めるのが難しいという問題がある。

これを背景に、我々は、実験可能な動的物理量、すなわち、RIXS スペクトルや光学伝導度といったスペクトルから、これらを識別するために有用な方法がないかを調べるために、少数クラスターの厳密対角化計算を行った。

厳密対角化法では、少数クラスター内で取りうるすべての電子配置についてのヒルベルト空間を用意し、ハミルトニアンに対する固有値問題をランチョス法で解くことで、基底状態の波動関数を求める。RIXS スペクトルの計算では、RIXS による励起を表現する演算子を設定し、基底状態の波動関数にこれを演算し、得られた状態についてハミルトニアンに対する逆行列を計算する。この逆行列の計算には、ランチョス法を用いた連分数展開法を用いた。

### ■スピン軌道相互作用のある $(t_{2g})^4$ 系の動的平均場計算

前年度では、 $(t_{2g})^4$  電子配置を持つスピン軌道相互作用

を含む 3 軌道ハバード模型を取り上げ、有限温度下でのスピン軌道相互作用と電子相関（クーロン相互作用）の競合で実現しうる電子状態について研究を行った。その結果、弱相関領域での金属とバンド絶縁体の間に非磁性励起子絶縁体、強相関領域での局在模型を用いた先行研究で期待される Van Vleck-type 絶縁体に加えて磁性を伴った励起子絶縁体がスピン軌道相互の変化に伴って実現することを発見した。本研究では、前年度に引き続き、スピン軌道相互作用とクーロン相互作用の空間内で実現しうる電子状態を広範囲に調べ、相図の決定を行った。さらに、発見した絶縁体、特に非磁性励起子絶縁体の多重極特性の議論も進めて研究を行った。

計算方法は、 $(t_{2g})^4$  電子配置を持つスピン軌道相互作用を含む 3 軌道ハバード模型に対して多軌道動的平均場理論を適用し、連続時間量子モンテカルロ法を用いて数値計算を実行した。クーロン相互作用一定下でのスピン軌道相互作用の変化に伴う電子状態の解析では、多重極特性を含めた議論をするために、新たに多重極相関関数の計算を行った。

### ■変分クラスター近似による 1 粒子グリーン関数計算

相互作用する電子系は多体問題なので解析が困難だが、興味ある現象の本質が短距離の電子相関効果で捉えられる場合には、有限温度変分クラスター近似を含む一連のクラスター近似法を用いた物理量の計算が、その現象の理解に貢献できる場合がある。本年度は有限温度変分クラスター近似および有限温度クラスター摂動論を用いてグラフェン由来物質や有機モット絶縁体を模した理論模型の解析を行った。本計算手法の主要部分は、少数サイトシステムの強相関格子模型の固有値問題、及び 1 粒子グリーン関数計算である。これらの計算には実対称疎行列またはエルミート疎行列に対するランチョス法またはブロックランチョス法を用いる。計算は必要なメモリに応じて gwmqc と gwacsg で行った。

### ■状態密度発散系の近藤効果

近藤効果と呼ばれる磁性不純物が遍歴電子系と結合した系に見られる量子多体効果は、様々な凝縮系物理学において見られる普遍的な現象である。グラフェンの作成により、状態密度が発散した系における近藤効果に注目が集まっており、精力的な研究がなされている。先行研究では、熱力学量の解明は行われていたが、

輸送量については未解明のままであった。本研究では、数値繰り込み群法と呼ばれる広い温度領域を有効的に記述できる手法を用いて、輸送量、特に電気抵抗率の温度依存性の解析を行った。幅広いパラメタにおける系統的な数値解析を行うことで、この系に特徴的な現象の抽出を目指した。

■近藤効果と超伝導の競合

近藤効果は局在スピンの周りの伝導電子間に働く交換相互作用によって近藤 1 重項が形成されることで局在スピンの消失する強相関系特有の現象である。このとき、1 重項の形成によって不純物の周り伝導電子は束縛されると考えられ、これが超伝導形成にどのような影響を及ぼすかについて調べた。

この状況を可能な限り現実的にシミュレーションするために、近藤不純物がランダムに撒かれた引力ハバード模型について調べた。この模型を解くために、我々は実空間動的平均場理論を用いた。実空間動的平均場理論は有限サイズの格子模型を各々の有効不純物模型にマップする近似方法である。この量子不純物模型へのマップにより、量子的な近藤効果や乱れの効果を精密に取り扱えることができるのがこの手法の利点である。また、このマップの導入により、各サイトの量子不純物問題は独立な問題となるため、HOKUSAI クラスタ上の MPI 並列化によって効率的に計算することができる。

■第一原理計算に基づく局所相互作用の見積もり

物性物理において現実物質を定量的に議論するとき、強相関電子系における低エネルギー模型のパラメタ導出は欠くことはできない操作である。とくに、局所的な相互作用  $U$  の値は、電荷およびスピンの揺らぎに多く影響する。そこで、本課題では、第一原理バンド計算を元にして  $U$  の値を導出する新しい方法として、モデル転写 RPA 法 (mRPA) を提案した。この方法の計算は以下のように行われる。

まず、第一原理バンド計算用コード ecalj (<https://github.com/tkotani/ecalj>) を用いて、密度汎関数理論に基づいた近似手法である局所密度近似 LDA、および、それを初期関数として多体電子理論に基づいた準粒子自己無撞着 GW 近似 (QS GW) を行い、高温超伝導体などの電子状態を計算する。次に、得られた電子状態について、GW 近似より有効相互作用  $W_{GW}$  を求める。他方、最局在ワニエ軌道法を用いて低エネルギー

ギン模型のホッピング積分を導出し、その値を用いて、RPA 近似の範囲内で  $U$  の寄与のみで遮蔽された場合に得られる有効相互作用  $W_{model}(U)$  を求め、 $W_{GW}=W_{model}(U)$  となるように  $U$  の値を決定し、これを低エネルギー模型のパラメタと定義する。

ベンチマークとして、高温超伝導体  $HgBa_2CuO_4$  について単一軌道模型を考え、 $U$  の値を求めた。

■ $HfO_2$  の界面強磁性発現機構

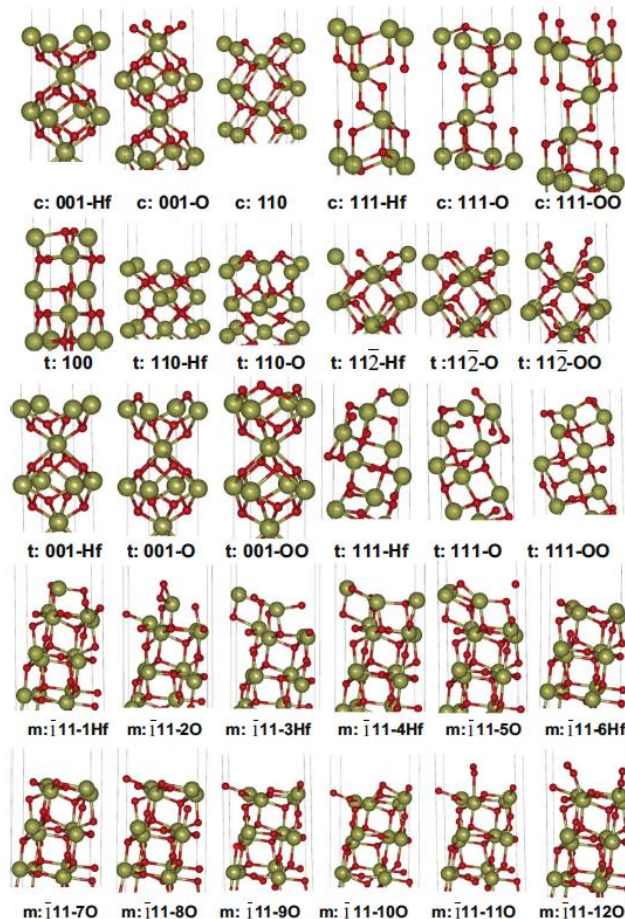


図 1 : 構造最適化を行って得られた 30 種類のスラブ模型の構造。大きい黄色の球は Hf 原子、小さい赤い球は O 原子を表し、c, t, m はそれぞれバルクの異なる温度で実現する cubic, tetragonal, monoclinic な結晶構造に由来する構造の意。

新しい特性を持つ強磁性体の探索は、スピン自由度を利用するナノデバイスなどのスピントロニクス分野を支える重要な課題である。これに関連して、最近  $d^0$  強磁性と呼ばれる、いわゆる磁性元素を含まない物質探索が、その潜在的な応用性と基礎科学的興味両面から注目を集めている。この中で、最近注目を集めている物質が  $HfO_2$  である。当初、 $HfO_2$  の薄膜は室温で透明な強磁性体となることが実験的に報告されたが、その後の報告では、強磁性ではないとする報告もされ

ており、他方では、実験環境によって強磁性が出現するという報告もされており、その強磁性発現機構に注目が集まっている。

そこで、我々は VASP を用いた第一原理バンド計算を行い、この問題の解決に取り組んだ。薄膜を表すスラブモデルとしては、30 種類の異なる  $\text{HfO}_2$  の境界について考え (図 1 参照)、これの構造最適化を行った。構造最適化を行う際には非磁性状態を使い、得られた最適な構造について磁性を仮定した解を試し、強磁性実現の有無について調べた。

### 3. 結果

#### ■ フラストレーションのない反磁性体の動的構造因子

スピン 1/2 正方格子反強磁性ハイゼンベルグモデルの動的スピン構造因子について高精度計算を行った。その結果、波数 $(\pi,0)$ の動的構造因子において、これまでスピン波理論で示唆されていたシングルマグノン励起に相当するデルタピークがなくなっており、すべての励起は連続スペクトルで表される事がわかった。このことは、波数 $(\pi,0)$ においては、マグノンという粒子がよく定義できないことを意味しており、少なくとも、通常のスピン波理論では説明できない多体量子効果である事を十分に示す結果である。他方、同じ反強磁性ゾーン境界でも、波数 $(\pi/2,\pi/2)$ ではシングルマグノンに相当するデルタピークの存在を示唆する結果を得た。興味深い点の一つは、この波数 $(\pi/2,\pi/2)$ では、秩序パラメータと平行な方向の連続スペクトルが低温にするにしたがって温度依存して成長している点であり、この結果はごく最近提案された Higgs 共鳴機構によるものと考えても矛盾はない。また、この成長はマグノンがよく定義できない波数 $(\pi,0)$ では見られない。

#### ■ 厳密対角化法を用いた RIXS スペクトル計算

4d、5d 遷移金属酸化物を示す少数クラスターの蜂の巣格子有効モデルについて、まずはパラメータの広い範囲にわたって相図を調べた。その結果、分子軌道性バンド絶縁体から相対論的モット絶縁体への移り変わりは、スピン軌道相互作用の大きさのみならず、電子間のクーロン斥力が大きくなることによって誘発される事がわかった。また、相図を踏まえた上で、RIXS スペクトルと光学伝導度を計算した結果、これら二つの実験スペクトルは、両者の相境界を境に、全く異なる特徴

を示すことがわかった。とくに、相対論的モット絶縁体相にのみ見られる特徴的な励起構造として、励起子的な励起が RIXS スペクトルに現れることを見出した。

#### ■ スピン軌道相互作用のある $(t_{2g})^4$ 系の動的平均場計算

弱相関領域で発見した励起子絶縁体の多重極特性を調べてみると、 $\Gamma_{3g}$  四重極子の特徴を示すことが明らかになった。さらに、強相関領域で発見した反強磁性絶縁体及び磁性励起子絶縁体は  $\Gamma_{4u}$  双極子の特徴を示すことが明らかになった。以上の議論を進めることで、スピン軌道相互作用とクーロン相互作用のパラメタ空間の相図が明らかになった。

#### ■ 変分クラスター近似による 1 粒子グリーン関数計算

片側水素吸着グラフェンを模したハニカム格子上の半欠損周期的アンダーソンモデルを定義し、変分クラスター近似法を適用して、磁性と特異な 1 粒子励起スペクトルを明らかにした。また、有機モット絶縁体を模した空間異方性のある三角格子ハバードモデルに対し、有限温度クラスター摂動論計算を行った。実験により観測された電気伝導度の異方性とホール係数と、計算によって得られたフェルミ面の形状を比較し、キャリアドーピングにより顕著な電子ホール非対称性が現れていることを論じた。また、一粒子励起を記述する Green 関数の解析的性質を利用し、クラスター摂動論を用いた多体電子系の状態密度計算法を提案した。

#### ■ 状態密度発散系の近藤効果

近藤系の電気抵抗率の温度依存性は、高温から低温にかけてクロスオーバー現象を示すことが知られており、解析を行った発散系においては新奇な構造をもつクロスオーバーが発現することを明らかにした。この現象は、磁性不純物のポテンシャル、電子間相互作用、状態密度の発散の強さを変更した場合にも発現し、発散系において普遍的な現象であることを明らかにした。さらに、解析的な計算により上記のクロスオーバーが生じることを示し、新奇な電気抵抗率の極小温度の不純物濃度依存性が得られた。この結果は、グラフェンの近藤効果の実験において観測可能である。

#### ■ 近藤効果と超伝導の競合

2016 年度の利用では、近藤不純物がランダムに撒かれた引力型ハバードモデルについて、とくに、近藤不純物によって、クーパ対がどれくらい早く壊れるかについて調べた。これは、超伝導ギャップの中に現れる状態 (インギャップ状態) のエネルギーと連動し

ている。ただし、乱れの効果により、インギャップ状態はある特定のエネルギーとはならず、各不純物が別々のエネルギーを示す。このインギャップ状態のエネルギー分布を調べたところ、超伝導が最も壊れやすい  $J$  の大きさの領域は、インギャップ状態の取りうるエネルギーが超伝導ギャップ内で広い範囲に分布することがわかった。反対に、超伝導が最も壊れにくい  $J$  の大きさでは、超伝導ギャップ内のある特定のエネルギー領域にインギャップエネルギーが集中している事がわかった。

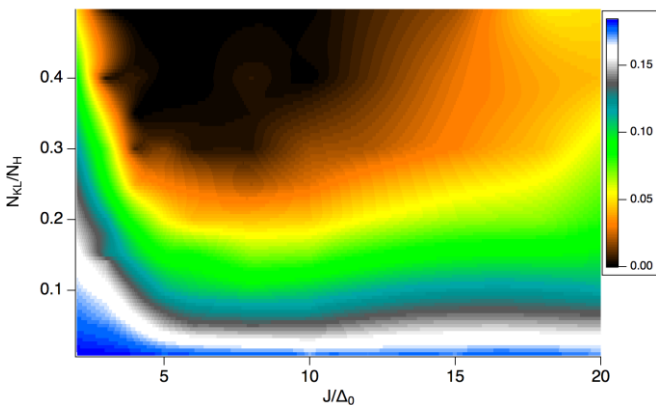


図 2：超伝導秩序パラメタの依存性。縦軸は異なる不純物濃度  $N_{KI}/N_H$ 、横軸は局在スピと伝導電子間の交換相互作用の大きさ  $J$ 。

#### ■第一原理計算に基づく局所相互作用の見積もり

LDA/QSGW 両方において  $U$  の値は従来手法である制限 RPA 法 (cRPA) のものよりも大きい値になった。これは格子系における長距離に渡るクーロン遮蔽の効果を  $U$  に繰り込んだ結果である。 $U$  の値は RPA 計算に非局所相互作用を加えると小さくなり、cRPA 法のものに近づくと推測される。

#### ■HfO<sub>2</sub>の界面強磁性発現機構

計算結果より、(i) stoichiometric 界面および Hf リッチな非 stoichiometric 界面では基底状態は非磁性となること、(ii) 酸素リッチな非 stoichiometric 界面では金属強磁性になる、ということがわかった。また、磁性は界面における酸素 2p 軌道に由来していることも示した。また、非 stoichiometric 界面は熱力学的には準安定であることがわかり、このことが実験環境による違いを説明するものと考えられる。

#### 4. まとめ

フラストレーションのない反磁性体の動的構造因子

の解析においてスペクトル中のデルタピークの有無を判断するためには、通常行う量子モンテカルロ計算の約 100 倍の計算時間を費やすことで初めて議論できた結果が得られた。したがって、HOKUSAI なくしてこの計算結果は得られなかった。デルタピークの消失は、高エネルギー励起においては必ずしもスピン波理論では説明できないということを示唆しており、分数励起の理論の構築等、この分野のさらなる発展が期待される。

スピン軌道相互作用のある系では、多くの状態が低エネルギーで競合しており、一つ一つの計算に時間を費やす必要があった。さらに、4d および 5d 遷移金属酸化物の現実的なパラメタ領域を超え、より広いパラメタ領域のモデルの振る舞いを統一的に理解するのに HOKUSAI が有効活用できた。また、この利用を通し、励起子的な励起が発見できたことで、実験的に相対論的モット絶縁体かどうかを判断する指針を提供することができた。

また、 $(t_{2g})^4$  電子配置を持つスピン軌道相互作用を含む 3 軌道ハバード模型を取り上げ、有限温度下でのスピン軌道相互作用と電子相関の競合で実現しうる電子状態について、多重極特性の議論を進めるとで、実現した絶縁体の特徴をより明らかにした。その結果を踏まえて、スピン軌道相互作用とクーロン相互作用のパラメタ空間で実現しうる電子状態の相図が明らかになった。その特徴は、これまでの実験で実現しているスピン軌道相互作用が強い  $(t_{2g})^4$  電子物質の電子状態の解明に繋がることを期待される。

また、これまでの HOKUSAI 利用を通して開発した有限温度変分クラスター近似計算と有限温度クラスター摂動論計算を用いることで、グラフェン由来物質と有機モット絶縁体それぞれの物質で実現が期待される特異な一粒子励起構造等を明らかにできた。さらに、本年度はクラスター摂動論を用いた多体電子系の状態密度計算法の提案も行った。

また、状態密度が発散している系における近藤効果について、数値繰り込み群法を用いることで、新奇な構造をもつ電気抵抗率のクロスオーバー現象を明らかにすることができた。

実空間動的平均場計算は近藤効果、および乱れの効果を調べることに有用であり、本年度はとくにインギャップ状態の物性を詳しく調べた。また、この方法は

各サイトで独立な量子不純物問題を解く必要があるため、HOKUSAI による並列化が非常に有用であった。

また、本年度は第一原理バンド計算による低エネルギー模型の新しいパラメタ導出手法も提案した。ベンチマークとしては  $\text{HgBa}_2\text{CuO}_4$  について行い、従来の方法 (constrained RPA) との比較も議論した。

$\text{HfO}_2$  の強磁性については、熱力学的に不安定な構造の場合に強磁性が発現するということがわかった。したがって、実験的にはパルスレーザー堆積法などにより作動的に構造を作るなどすれば、強磁性を示す  $\text{HfO}_2$  が人為的に作り出せる可能性が期待できる。

## 5. 今後の計画・展望

フラストレーションのない反磁性体の動的構造因子の解析については、現時点で 2 次元量子スピン系のスペクトルの形状をバイアスなしに議論することができる有効な方法が確立できたので、今後はこの方法に関連する系へと応用していきたい。

発散系の近藤効果については、実験的に観測可能な特徴の定性的振る舞いを示すことができたので、解析結果をグラフェンや冷却原子を用いた近藤効果の観測に向けて、より実験に即した解析を行っていきたい。また、重い電子系を想定した磁性不純物が周期的に並んだ近藤格子系の解析も行いたい。

超伝導と近藤不純物による乱れの効果の研究は温度一定の元で計算を行い相図が明らかとなった。ただし、近藤効果は温度依存性が強く、有限温度においてどのような相図が得られるかは未解明であるので、来年度は温度依存性について調べていきたい。

本年度までの利用を通して開発した有限温度の変分クラスター近似については、ハバード模型における金属絶縁体転移や、スレーター型及びモット型反強磁性絶縁体の有限温度における特徴付けといった基本的な課題に、本計算手法を有効に用いることができるかを検証していきたい。

また、本年度提案した第一原理計算による相互作用の見積もり方法 mRPA については、1 軌道模型で十分とされる  $\text{HgBa}_2\text{CuO}_4$  について研究を行ったが、一般には軌道自由度を複数考える必要がある。そのため、今後は mRPA を多軌道系について適用する方法論を考案し、ベンチマーク計算を行っていきたい。

全体を総括すれば、本年度の目標であった 2 次元強相関量子系の動的物理量計算についても、個々の問題に合わせた手法をそれぞれ開発することで、議論できるようになってきた。来年度は、これらの方法を、より注目の集まっている問題や実際の実験との比較などに適宜応用していくことで、物性物理における動的物理量の理解に貢献していきたい。

## 平成 28 年度 利用研究成果リスト

## 【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】

- [1] K. Seki, T. Shirakawa, Q. Zhang, T. Li, and S. Yunoki, “Emergence of massless Dirac quasiparticles in correlated hydrogenated graphene with broken sublattice symmetry”, *Phys. Rev. B* **93**, 155419 (2016).
- [2] T. Shirakawa and S. Yunoki, “Density matrix renormalization group study in energy space for a single-impurity Anderson model and an impurity quantum phase transition”. *Phys. Rev. B* **93**, 205124 (2016).
- [3] M. Khazaei, A. Ranjbar, M. i Ghorbani-Asl, M. Arai, T. Sasaki, Y. Liang, and S. Yunoki, “Nearly free electron states in MXenes”, *Phys. Rev. B* **93**, 205125 (2016).
- [4] K. Seki and S. Yunoki, “Brillouin-zone integration scheme for many-body density of states: Tetrahedron method combined with cluster perturbation theory”, *Phys. Rev. B* **93**, 245115 (2016).
- [5] Y. Kawasugi, K. Seki, Y. Edagawa, Y. Sato, J. Pu, T. Takenobu, S. Yunoki, H. M. Yamamoto, and R. Kato, “Electron-hole doping asymmetry of Fermi surface reconstructed in a simple Mott insulator”, *Nature Communications* **7**, 12356 (2016).
- [6] A. Yamasaki, H. Fujiwara, S. Tachibana, D. Iwasaki, Y. Higashino, C. Yoshimi, K. Nakagawa, Y. Nakatani, K. Yamagami, H. Aratani, O. Kirilmaz, M. Sing, R. Claessen, H. Watanabe, T. Shirakawa, S. Yunoki, A. Naitoh, K. Takase, J. Matsuno, H. Takagi, A. Sekiyama, and Y. Saitoh, “Three-dimensional electronic structures and the metal-insulator transition in Ruddlesden-Popper iridates”, *Phys. Rev. B* **94**, 115103 (2016).
- [7] M. Khazaei, A. Ranjbar, M. Arai, and S. Yunoki, “Topological insulators in the ordered double transition metals  $M_2M'$   $C_2MXenes$  ( $M'=Mo, W$ ;  $M=Ti, Zr, Hf$ )”, *Phys. Rev. B* **94**, 125152 (2016).
- [8] B. H. Kim, T. Shirakawa, and S. Yunoki, “From a quasimolecular band insulator to a relativistic Mott insulator in  $t_2g_5$  systems with a honeycomb lattice structure”, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 187201 (2016).
- [9] Y. Kawasugi, K. Seki, Y. Edagawa, Y. Sato, J. Pu, T. Takenobu, S. Yunoki, H. M. Yamamoto, and R. Kato, “Simultaneous enhancement of conductivity and Seebeck coefficient in an organic Mott transistor”, *Appl. Phys. Lett.* **109**, 233301 (2016).
- [10] R. Peters, T. Yoshida, H. Sakakibara, and N. Kawakami, “Coexistence of light and heavy surface states in a topological multiband Kondo insulator”, *Phys. Rev. B* **93**, 235159 (2016).
- [11] 川相義高, 関 和弘, 須田理行, 山本浩史 “分子性 2 次元モット絶縁体におけるフィリング制御の新展開” 固体物理, 第 51 巻, 第 12 号, 801-813 (アグネ技術センター, 2016)
- [12] Q. Zhang, G. Chen, and S. Yunoki, “Surface ferromagnetism in  $HfO_2$  induced by excess oxygen”, *Solid State Commun.* **252**, 33 (2017).
- [13] S. W. Jang, H. Sakakibara, H. Kino, T. Kotani, K. Kuroki, M. J. Han, “Direct theoretical evidence for weaker correlations in electron-doped and Hg-based hole-doped cuprates”, *Science Report* **6**, 33397 (2016).
- [14] H. Sakakibara, S. W. Jang, H. Kino, M. J. Han, K. Kuroki, T. Kotani, “A model-mapped RPA for determining the effective Coulomb interaction”, *J. Phys. Soc. Jpn.*, TBA, accepted (2017).

## 【国際会議、学会などでの口頭発表】

- [15] 榎原寛史, 関和弘, 白川知功, 黒木和彦, 柚木清司 “La, Hg, Nd 系銅酸化物超伝導体母物質の第一原理的

有効モデルに基づくクラスター摂動論解析”, 22aBL-10, 日本物理学会第 7 1 回年次大会, 東北学院大学, 2016 年 3 月

[16] 白川知功, “Low-lying excitations in layered perovskite iridates”, ポスト「京」重点課題「次世代の西行を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」サブ課題 G「共通基盤シミュレーション手法」連続研究会、東京理科大学金町キャンパス、2016 年 5 月（招待講演）

[17] R. Peters, “Topological surface states in Samarium hexaboride”, Symposium for numerical methods for strongly correlated electron systems, ゲッティンゲン大学、2016 年 6 月（招待講演）

[18] T. Sato, T. Shirakawa, and S. Yunoki, “Spin-orbital entangled exotic insulators in the  $(t_{2g})^4$  correlated electron system”, The Workshop “Trends in Theory of Correlated Materials (TTCM2016)”, Switzerland, May 22-25, 2016.

[19] 榊原寛史, “第一原理ダウンフォールディング法に基づくスピン揺らぎ超伝導体の理論研究”, Sa-5, 応用物理・物理系学会中国四国支部合同学術講習会シンポジウム「超伝導における新しい対称性と機構」、岡山大学、2016 年 7 月

[20] 関和弘, 柚木清司 “クラスター摂動論とテトラヘドロン法を組み合わせた多体電子系の状態密度計算法”, 16aJD-1, 日本物理学会 2016 年秋季大会, 金沢大学, 2016 年 9 月

[21] 榊原寛史 “銅酸化物高温超伝導体の第一原理バンド計算を基盤とする理論研究”, 講演番号 9、高温超伝導フォーラム、金沢勤労会館プラザ, 2016 年 9 月

[22] 榊原寛史 “第一原理低エネルギーモデル導出のための Model-mapped RPA 法の提案”, 13pAE-7, 日本物理学会 2016 年秋季大会, 金沢大学, 2016 年 9 月

[23] 野田数人, 白川知功, 柚木清司, “べき発散する近藤系における電気抵抗の温度依存性”, 20aL22-1, 日本物理学会第 7 2 回年次大会、大阪大学、2017 年 3 月

[24] K. Noda, T. Shirakawa, S. Yunoki, “Resistivity crossover in the power-law Kondo systems”, E37b.00007, APS March Meeting 2017, New Orleans, Louisiana, USA, March 2017.

**【その他（プレスリリース、学術会議以外の一般向けの講演など）】**

[25] 「両極性動作する有機モット転移トランジスタを実現 -集積化が容易な次世代トランジスタ開発に前進-」理化学研究所 プレスリリース（研究成果）, 2016 年 8 月, [http://www.riken.jp/pr/press/2016/20160805\\_3](http://www.riken.jp/pr/press/2016/20160805_3)

[26] “New system for exploring superconductivity” RIKEN Research, Research Highlight, January 2017, <http://www.riken.jp/en/research/rikenresearch/highlights/8276/>

[27] Beom Hyun Kim, 白川知功, 柚木清司 “分子軌道性バンド絶縁体と相対論的モット絶縁体 -相対論的モット絶縁体の特徴付ける励起状態-” 理化学研究所 プレスリリース（研究成果）、2016 年 11 月, [http://www.riken.jp/pr/press/2016/20161104\\_1/](http://www.riken.jp/pr/press/2016/20161104_1/)