

戦略的創造研究推進事業 CREST
研究領域「マルチスケール・マルチフィジックス現象
の統合シミュレーション」
研究課題「高精度多体多階層物質シミュレーション」

研究終了報告書

研究期間 平成19年10月～平成25年3月

研究代表者: 今田 正俊
(東京大学大学院工学系研究科、教授)

§ 1. 研究実施の概要

(1) 実施概要

本プロジェクトでは、クーロン相互作用の効果の大きな現実物質の物性を予測し、現象のメカニズムを解明する上で、汎用性が高い高精度計算手法を開発し応用を展開することを目標とした。応用対象として遷移金属化合物、有機化合物を中心とし、物理的に興味ある物質群に対する電子状態計算法の開発実装を目指した。このためにマルチエネルギー階層構造を意識した上で、低エネルギー側と高エネルギーでの物理の橋渡しを行い、低エネルギー側に要求される高精度と高エネルギー側全体の計算効率とを両方実現する手法(Multi-scale *Ab initio* scheme for Correlated Electrons (MACE))を開発、改良し、実用に供するところまで研究を進めた。

この手法は3段階から構成されている。第一段階は大局的な電子構造を密度汎関数法に基づいて求める。この部分は主として産総研と東大が分担して受け持った。産総研はLMTOによる基底、東大は平面波基底を採用し、相補的に相互のチェックも必要に応じて行った。第二段階はダウンフォールディングと呼ばれ、大局構造から最局在ワニエ軌道の構成を行ったうえで、このワニエ基底に対する低エネルギー有効モデルを導出するステップである。このステップでは我々は制限RPA法を従来より提唱しており、この手法は実際このプロジェクトの研究期間中に世界的な標準手法として確立した。この基本手法に対してさらにバンドもつれをほどこく方法や次元縮約法、周期性のない界面系でのダウンフォールディング法などを東大、産総研グループが連携して確立した。またGW+DMFT法も産総研、パリグループにより開発実装が進んだ。これらの改良手法は実際に鉄系超伝導体や有機導体、遷移金属酸化物に適用され有用性が立証された。また制限RPA法は京の重点課題の対象として東大グループで高度化、並列化を進め、現在約25000ノードで実行ピーク性能比20%程度に達している。有効モデルを導出した応用は多数にのぼり、GaAsなど数種の半導体、6種の鉄系超伝導体、3種5通りの有機導体モデル、数種の遷移金属酸化物、銅酸化物、ゼオライト、界面系などである。第三段階は低エネルギーソルバーによる有効モデルを解く段階で、東大グループを中心にガウス基底モンテカルロ法、多変数変分モンテカルロ法の改良などを進め、高精度であることの立証ならびに京に対する高度並列化も進めた。またクラスタ拡張した動的平均場近似の改良実装もパリグループを中心に東大も協力して推進した。

この手法をこのプロジェクト期間中に新たに発見された鉄系超伝導体に機動的に応用し、世界に先駆けて有効モデルを導出したうえで、これを多変数変分モンテカルロ法と動的平均場近似で東大、産総研、パリのすべての協力で分担して解き、この物質群で電子相関が重要な役割を果たしていることを初めて第一原理的に立証した。さらに謎であったこの物質群の磁気秩序の大きさが第一原理モデルで定量的に再現されることを示した。またこの物質群が巨大なモット絶縁体の辺縁部に位置していることを発見し、ここで理論的に予言したより大きな大局構造を全貌解明のために実験的に追究するべきであることを提案した。

有機導体の第一原理モデルを解くことにも取り組み、実験で見いだされるモット転移(金属絶縁体転移)をほぼ定量的に再現し、小さなずれの原因についての考察も行った。またこの手法は周期性のない界面系である $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ に対しても適用され、第一原理有効モデルを導出した。この研究期間中に発見された芳香族超伝導体に対しても第一原理モデルを導出している。さらにスピン軌道相互作用の大きな系の研究が物性物理学において大きな進展を見せており、これに対応してMACEもスピン軌道相互作用を実装し、 Sr_2IrO_4 などにおいて絶縁相の性格解明、物性解明に貢献した。

このようにして、MACEは総合的に強相関電子系を第一原理的に解き明かせる、現状では唯一の手法として、その地歩を固めた。さらに、重要ないくつかの物質群の物性を解明することに成功し、今後の実験研究の指針を与えて、強相関電子系の物性の計算物理学的な解明に貢献した。

(2) 顕著な成果

1. MACE(階層的な第一原理強相関電子状態計算法)の確立

概要: 電子相関の強い電子系に対する第一原理的な電子状態計算手法(MACE (Multi-scale *Ab initio* scheme for Correlated Electrons))を多様な工夫とともに包括的に開発、整備し、汎用的に使えるようにした。強相関電子系の持つ階層構造を利用し、部分状態和を取った後の

低エネルギー有効モデルを解く、この手法は世界的にも標準手法の一つとして確立しつつある。

2. 鉄系超伝導体の物性解明

概要:鉄系超伝導体の物性解明のためにMACEを適用し、鉄系超伝導体が中程度に電子相関の強い系であることを第一原理的に立証し、鉄系超伝導体の電子相関の役割についての論争に決着をつけた。化合物によって電子相関が相当程度系統的に増減することを発見し、これが磁気秩序モーメントの増減や準粒子のコヒーレンスの変化を定量的に説明することを示すとともに、この物質群が巨大なモット絶縁体の辺縁部に位置するという大局構造を初めて解明した。

3. MACE の広範な物質群への応用

概要:本プロジェクトで確立した手法を、鉄系超伝導体のみならず、有機導体である κ -ET 塩および dmit 塩、(ペロブスカイト型を含む)遷移金属酸化物、界面系、スピン軌道相互作用の大きな系、ゼオライト、芳香族超伝導体など、広範に応用し高精度の計算手法であることを立証し、物性解明を行った。

§ 2. 研究構想

(1) 当初の研究構想

新物質探索や次世代のエレクトロニクス開発の展望を切り開くために、多様な物質の示す物性を第一原理から理解するためのシミュレーション手法開発の需要は大きい。このためには、物質中の電子の示す挙動をマイクロなレベルから解明するための信頼性の高い計算が不可欠である。物質の性質を決定する要因の中でも、電子間のクーロン相互作用の効果をより深く理解し利用する道筋を明らかにすることが、基礎物質科学の進展のみならず、21 世紀における新たなタイプの機能素子、センサー開発などを通じたエレクトロニクス産業進展の鍵を握っていることもしばしば指摘されている。特に遷移金属化合物、希土類化合物、有機化合物およびナノ構造物質は、原子間距離に比べて電子の波動関数の広がりが小さく、電子のもつ運動エネルギー(バンド幅)が電子間クーロン相互作用のスケールに比べて相対的に小さいため、強相関電子系と呼ばれる。これらの物質群に対する信頼性の高い電子状態計算法の開発は基礎と応用の両面から重要性が高い。

現実の強相関物質では数十 eV(温度にして数十万度)に及ぶ電子の運動エネルギーからバンド構造が作られ、同程度のクーロン相互作用が競合する。このような高エネルギーから始まる競合が多階層を生み、僅かなエネルギーの差が大きな差異を生みながら、果てに温度にして百度あるいはそれ以下のエネルギースケールで日常の物性が決定されることに、問題の困難さがある。このようにマルチエネルギースケールの物理が競合の中から生み出され、時間、空間階層構造が生じ、磁性や超伝導などの多様な物性が決定されるが、このプロセス解明に対して決定的で有効な手法は確立されていない。特に電子間クーロン相互作用による多体効果の高精度での取り扱いには達成すべき最も重要な課題であり、世界的にも集中的な研究が展開されている。

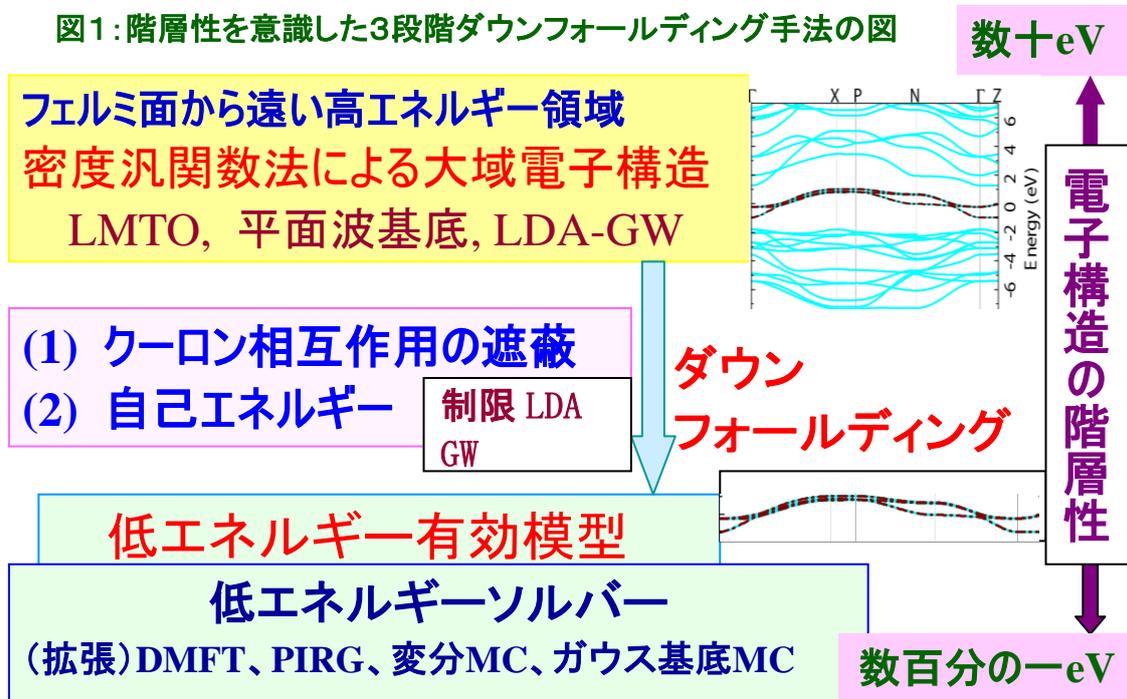
本研究プロジェクトでは、実際にはクーロン相互作用の効果の大きな現実物質の物性を予測し、現象のメカニズムを解明する上で、汎用性が高く実用に耐える高精度計算手法を開発することをめざす。特に遷移金属化合物、有機化合物、炭素系物質に対する汎用的かつ高精度の電子状態計算法を開発実装する。このために私達の蓄積された研究実績とノウハウを結集した協力の中から、複合的シナジー効果による成果をねらう。異なる研究実績と相補的な手法を背景として世界をリードする研究者による協力体制を築きながら、電子相関による物理学の解明と現実物質の電子状態計算のための計算法を提供する。さらに実験研究と連携しながら、物性解明に貢献する。

マルチスケールのエネルギー、時間、空間階層構造を解明する鍵となる手法として、私達のプロジェクトでは図1にあるような、3段階のスキームを用いる。

- (1) 高エネルギーの電子構造を密度汎関数理論(局所密度近似(LDA)や一般化勾配近似(GGA)あるいはGW近似)に基づいて求めながら、高エネルギー短時間の自由度のふるまいを求める。

- (2) 続いて繰り込みという操作を用い、ダウンフォールディングという手法で低エネルギー、長時間スケールを扱う有効モデルを導出する。
- (3) この有効モデルを信頼性の高い低エネルギーソルバーによって数値的に解く。

図1: 階層性を意識した3段階ダウンフォールディング手法の図



この3段階手法は、強相関電子系と呼ばれる物質群の電子状態の高精度での解明に対して今のところ世界的、歴史的に見てほぼ唯一の攻略法であり、私達のグループはこの手法の提唱と開発に大きな役割を果たしてきた。

以上、それぞれの手法の特長を生かしながら、最先端の手法を相補的に組み合わせる中で、3段階スキームでの手法開発を進め、強相関エレクトロニクス of 理論的基礎の解明に資することのできる汎用手法を開発実装し応用することがこのプロジェクトの目標であった。

具体的に各研究グループの年度ごとの当初計画を下記に記す。

東京大学グループ

平成19年度～平成20年度:

励起状態を解明するためにダウンフォールディングによる3段階手法の有効性を吟味検討する。

平成19年度～平成22年度:

ガウス基底モンテカルロ法と拡張変分モンテカルロ法を低エネルギーソルバー候補として新たに吟味する。Georgesグループと低エネルギーソルバー開発の議論を重ねる。

平成19年度～平成21年度:

有機化合物のためのウルトラソフト擬ポテンシャルによる平面波基底計算を開始し、典型的な有機化合物について有効モデルパラメタを定める。

平成21年度～平成23年度:

遷移金属酸化物、有機化合物について、物質群に応じた3段階手法のノウハウを整備する。

平成22年度:

銅酸化物を含む遷移金属酸化物のための低エネルギーソルバーの候補を定め、有効モデルを用いた計算を開始する。有効モデルは産総研グループの結果を用いる。独自に有機化合物の、典型物質についての計算を開始する。

平成 23 年度以降:

炭素化合物へ適用に着手する。有機化合物、遷移金属酸化物の適用を広げ、標準手法を確立する。実験グループと連携し、新奇現象の機構解明に適用する。

エコールポリテクニクグループ

平成 19 年度～平成 20 年度:

動的平均場近似の効率的解法を整備する。特に連続虚時間法の確立など新しいアルゴリズムの開発を進める。

平成 19 年度～平成 22 年度:

動的平均場近似に空間相関を取り入れるための効率的拡張法を開発、吟味する。東京大学グループと低エネルギーソルバー開発の議論を重ねる。

平成 19 年度、平成 21 年度以降:

産総研グループとの協力で、遷移金属酸化物の動的平均場近似計算を進める。GW+DMFT 法に基づくダイナミクス、特に 1 粒子スペクトルの光電子分光実験との比較、輸送係数計算を進め、磁気的光学的性質の解明を進める。また、空間相関を取り入れる手法の実装を進める。

平成 20 年度～平成 22 年度:

ダウンフォールディング法を確立整備する。GW+DMFT法で用いる低エネルギー有効模型の導出に際して最適化したワニエ軌道を求め、模型パラメタの決定法を確立する。

平成 22 年度以降:

銅酸化物を含む遷移金属酸化物のエネルギー階層構造、ダイナミクスを 3 段階手法に基づいて解明する。有機化合物(特に Bechgard 塩)、f 電子系の物性解明を東京大学グループとの連携で進める。特にダイナミクスの解明に重点を置く。

産業技術総合研究所グループ

平成 19 年度～平成 21 年度:

ダウンフォールディング法の汎用的手法を実装し、有効模型パラメタを計算する手法を確立する。平成 21 年度末までに大域的電子状態計算から遷移金属酸化物の有効模型を提供する道を確認し、平成 21 年度から順次種々の遷移金属酸化物の低エネルギー有効模型を他の 2 グループへ提供する。

平成 19 年度～平成 22 年度:

大規模 GW 計算手法を整備する。単位胞あたり 20 原子程度の遷移金属化合物の GW 計算を実現する。

平成 19 年度～平成 24 年度:

GW 法と DMFT 法を融合するプログラムを完成させて遷移金属など計算量の小さな物質へ適用する。GW+DMFT 法の遷移金属酸化物への適用を実現する。銅酸化物など困難な遷移金属酸化物についてもダウンフォールディングを完成する。

平成 20 年度以降:

GW+DMFT 法を多くの物質に適用して物性解明に努めると共に方法の有効性と限界を検討する。

平成 21 年度～平成 24 年度:

ダウンフォールドされた有効模型を提供したうえで、東京大学グループ、エコールポリテクニクグループと協力して様々な低エネルギーソルバーとの融合を吟味し、物質群ごとの 3 段階手法の最適な組み合わせを明らかにする。

特に平成 22 年度以降は全グループで標準手法の確立のための集中的議論を進める。

(2) 新たに追加・修正など変更した研究構想

中間評価においては、「非常に優れた研究であり高く評価できる。今後、一層の進展が望まれる。」との評価をいただき、さらに「21世紀の計算科学は予言学であるべきで、実験結果の解釈にとどまっている限り計算科学の本来の役割を発揮したとは言えない。新しい高温超電導物質を予言

することができれば、計算科学として一流であるといえる。」という大きな目標をいただいた。

また、「マルチスケールの視点からすると、より大規模な計算にも期待したく、マルチフィジックスの観点はさらに強化されることを期待したい。また、研究期間の後半で望まれることとして、

- ① 結果の精度の更なる検証
- ② 大規模系への適用。必要となる計算資源が膨大となると予想されるので、超大規模並列計算システムに向けた手法の改良とチューニングが必要と考える。
- ③ 本研究で開発されたシミュレーションシステムを他の研究者にも使えるよう汎用化と一般化を図り、広くこの分野の研究者が利用できるような環境を整えることが望まれる。

が挙げられる。」という点の指摘を受けた。①の精度の検証についてはその後、最近大きな注目を浴びているスピン軌道相互作用の大きな物質群および単位格子あたりの原子数の非常に大きな有機導体などへの適用と精度検証を進めた。また低エネルギーソルバーの精度検証のために1次元系での厳密な結果との比較を行い高い精度を実証した。またダウンフォールディングで得られる相互作用を低エネルギーソルバーで解く手法に応じてテーラーメードなものを用意する方法や、低次元系においては低次元模型用のダウンフォールディングの方法を開発した。さらに低エネルギー側の自由度を表わすバンドが高エネルギー側のバンドと絡み合っているときにこの絡み合いを解く方法を開発するなど、手法の一層の精緻化を計画し実行した。精度の高さは後述するように鉄系超伝導体の磁気秩序モーメントの実験結果との一致や、スピン軌道相互作用の大きいイリジウム化合物の物性の一致などにおいて、幅広く実証された。②の大規模系への適用は京の利用のための戦略機関第2分野の重点課題として、並列化、高効率化を計画し、現在 24576 ノード(ほぼ 20 万コア)での並列計算実証を終え、実行効率が 20%に近い高い値をダウンフォールディング部分および低エネルギーソルバー部分の両方について得ている。また大規模計算となる 2 種類の有機導体の計算を計画実行した。③についてはまずは京での高並列化、高効率化を進めており、これが完成を見る段階で、共同研究なども通してより広く利用してもらうことを計画している。

§ 3 研究実施体制

(1)「東京大学」グループ

① 研究参加者

| 氏名 | 所属 | 役職 | 参加時期 |
|-------|---|--|--------------|
| 今田正俊 | 東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 | 教授 | H19.10～H25.3 |
| 有田亮太郎 | 東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 | 准教授 | H20.4～H25.3 |
| 三澤貴宏 | 東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 | 助教 (H21.10 まで PD、H20.9 まで D3) | H19.10～H25.3 |
| 中村和磨 | 東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻／九州工業大学大学院工学研究院基礎科学研究系 | 准教授 (H20.6 まで PD、H24.10.15 まで助教、H24.10.16 付で九工大に異動) | H19.10～H25.3 |
| 山地洋平 | 東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 | 特任助教(H23.9 まで PD、H22.3 まで D3) | H19.10～H23.9 |
| 堀井真実子 | 東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 | 学術支援専門職員 | H22.10～H25.3 |
| 酒井志朗 | 東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 | 特任研究員 (H24.3 まで PD) | H19.10～H25.3 |
| 山田康博 | 東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 | 特任研究員 | H23.4～H25.3 |
| 平山元昭 | 東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 | D3 | H21.4～H24.3 |

| | | | |
|------|---------------------|------------------------|---------------|
| 渡辺真仁 | 東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 | 助教 | H19.10～H21.10 |
| 品岡寛 | 東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 | 博士研究員 (H21.8 まで D3) | H19.10～H22.3 |
| 渡辺良太 | 東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 | D1、リサーチアシスタント | H21.4～H22.3 |
| 田原大資 | 東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 | D1 | H20.4～H21.3 |

② 研究項目

1. ダウンフォールディング法の開発、確立
2. 格子低エネルギーソルバーの整備
3. 新奇超伝導体、有機導体および界面に対する3段階法応用の展開

(2)「Ecole Polytechnique」グループ

① 研究参加者

| 氏名 | 所属 | 役職 | 参加時期 |
|--------------------|---|---------------------|--------------|
| Antoine GEORGES | Centre de Physique Théorique, Ecole Polytechnique and CNRS (年度途中で Ecole Polytechnique and College de France に変更) | Professor | H19.10～H25.3 |
| Silke BIERMANN | Centre de Physique Théorique, Ecole Polytechnique | Associate Professor | H19.10～H25.3 |
| Cyril MARTINS | Centre de Physique Théorique, Ecole Polytechnique | PD (H22.12 まで D2) | H19.10～H25.3 |
| Loig VAUGIER | Centre de Physique Théorique, Ecole Polytechnique | D3 | H20.10～H23.9 |
| Michele CASULA | Centre de Physique Théorique, Ecole Polytechnique | PD | H20.9～H22.9 |
| Veronica VILDOSOLA | Centre de Physique Théorique, Ecole Polytechnique | PD | H20.4～H21.8 |
| Donat ADAMS | Centre de Physique Théorique, Ecole Polytechnique | PD | H21.1～H22.11 |
| Jan M. TOMCZAK | Centre de Physique Théorique, Ecole Polytechnique | D3 | H19.10～H20.3 |
| Samuel Oliveira | Centre de Physique Théorique, Ecole Polytechnique | M2 | H22.4～H25.3 |
| Xiaoyu Deng | Centre de Physique Théorique, Ecole Polytechnique | PD | H22.9～H25.3 |
| Leonid Pourovskii | Centre de Physique Théorique, Ecole Polytechnique | Researcher | H22.11～H25.3 |

② 研究項目

1. 連続時間アルゴリズムによる不純物ソルバーの改良
2. GW+DMFT 法の開発

(3)「産業技術総合研究所」グループ

① 研究参加者

| 氏名 | 所属 | 役職 | 参加時期 |
|-----------------------|--|-------|--------------|
| 三宅隆 | 独立行政法人産業技術総合研究所 ナノシステム研究部門 (H22.3 まで計 算科学研究部門) | 主任研究員 | H19.10～H25.3 |
| Ferdi ARYASETIAWAN | 独立行政法人産業技術総合研究所 ナノシステム研究部門 (H22.3 まで計 算科学研究部門) | 客員研究員 | H19.10～H25.3 |
| Jan M. TOMCZAK | 独立行政法人産業技術総合研究所 計算科学研究部門 | 特別研究員 | H20.4～H.21.4 |
| 品岡寛 | 独立行政法人産業技術総合研究所 ナノシステム研究部門 | 特別研究員 | H22.4～H25.3 |

② 研究項目

1. 遷移金属酸化物のGW計算
2. GW+DMFT法の開発
3. ダウンフォールディング法の精密化と応用

§ 4 研究実施内容及び成果

(1) 研究実施内容及び成果

グループ間の連携、共同研究が錯綜しているので、研究実施内容及び成果については、グループごとに記載するのではなく、テーマごとに記述する。

[4.1] 方法論的成果

以下の標準的な MACE(Multi-scale Ab initio scheme for Correlated Elctrons)を開発整備し、さらにさまざまな改良、適用範囲の拡張を行った。

4.1.1 大域的電子構造

大域的電子構造計算(第1段階)には密度汎関数法(DFT)と局所密度近似(LDA)を組み合わせた標準的なバンド計算法を用いるが、必要に応じて GW 近似と呼ばれる方法で多電子効果(自己エネルギー効果)を摂動論的に補正する。標準的なバンド計算の手法では量子力学的な電子の波動関数の基底関数を何にとるのかということで多様なやり方がある。その中からこの研究課題では、基底関数の構成が単純な平面波による基底と、原子に束縛された原子軌道基底を併用して、基底関数の数を少なくしようとする LMTO 法と呼ばれる基底関数構成法の2種類を採用し、2つの基底関数によるバンド構造が一致した結果を与えるかどうかを検証しながら、計算精度をチェックしてきた。また本プロジェクトでは Full-Potential LMTO 基底を用いて GW 近似計算を並列化するという工夫によって、単位胞に 20-30 原子を含む *d* 電子系を扱えるようにした。これによりペロフスカイト型遷移金属化合物や銅酸化物高温超伝導などの GW 近似による研究が可能になった。いずれにせよ大域的電子状態の計算は以下の多段階手法の第一段階を構成し、基本的にはすでに良く確立された密度汎関数法に基づく電子状態計算法を利用する。

4.1.2 有効模型の第一原理的導出

3 段階手法の第2段階における最大の問題は、低エネルギー有効模型のパラメタ、特に電子間相互作用パラメタを大域的電子構造計算から決定する方法の確立である。

「ターゲットバンド」以外の自由度(高エネルギー自由度)について先に状態和を取って消去し、ターゲットバンド(すなわち低エネルギー自由度)内の電子の自由度だけで記述される有効模型を導くということは、直観的にはターゲットバンド以外の電子が関与する分極による遮蔽などによって、ターゲットバンドの電子が衣を着る効果を求めるということと等価である。高エネルギー自由度の分極との相互作用は、低エネルギー電子間のクーロン相互作用を遮蔽し、裸の相互作用を減少させる(遮蔽クーロン相互作用)。また低エネルギー電子の有効質量は高エネルギー電子分極の衣を

着て増大するが、これはより一般的には低エネルギー電子の自己エネルギー効果として現れ、運動エネルギー項(バンド分散項)を変える。

有効格子模型のパラメタを求めるためにはまず実空間表示の基底を導入する必要がある。この基底波動関数はできる限り空間局在しているほうが望ましく、この目的のために我々は最局在ワニエ軌道による基底をSouza, Vanderbiltらの処方箋に従って求める。

遮蔽クーロン相互作用を求める方法として、本研究課題の研究により、制限乱雑位相近似(cRPA)を標準的な手法として確立した。ターゲットバンドの分極の効果を取り除いて乱雑位相近似を行うことによって、ターゲットバンドの相互作用がターゲットバンド以外の電子によって遮蔽される効果を高い精度で求めることができることを我々は示した。

この方法では、まず部分的に遮蔽した電子間相互作用 $W_I(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega)$ を次式から求める。

$$W_I = v / (1 - P_I v)$$

ここで v は裸のクーロン相互作用 $v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 1/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ である。 P_I は分極率であるが、有効模型を構成する低エネルギー状態間の分極(P_d)を排除する。すなわち、分極率を P としたとき $P_I = P - P_d$ と表される。上記の W_I は次の恒等式を満たすことが示される。

$$W = W_I / (1 - P_d W_I)$$

ここで、 W は完全に遮蔽したクーロン相互作用である。 W_I を低エネルギー模型の分極 P_d で遮蔽すると W が得られることから、 W_I を低エネルギー模型に対する有効相互作用と見なすことができる。 W_I は \mathbf{r}, \mathbf{r}' と ω の関数で基底関数によらない。有効模型のパラメタは、局在基底に関する行列要素で定義する。この方法では、オンサイト遮蔽クーロン相互作用パラメタ U のみならず交換相互作用 J や異なるサイト間のクーロン相互作用も簡単に求めることができる。

この手法ではターゲットバンドとそれ以外のバンドが絡み合う(entangleする)ときには、二つへの切り分けが難しくなるが、その場合にもヒルベルト空間で互いを直交化する方法が開発され、うまくもつれをほどく方法(disentangle法)が開発された。

こうやって求められるターゲットバンドの有効模型は3次元空間での電子の離散格子上でモデルである。しかし近年興味深い現象は低次元的な異方性の強い物質で見つかっており、理論解析も1次元や2次元系の模型による解析が新たな概念の発見や予測に導くことも多い。この場合、空間低次元の有効模型を導出して解析する意義は大きい。このプロジェクトでは低次元の有効模型を第一原理的に導く方法についても、新たな定式化を行い、層間や鎖間の遮蔽の効果などを取り込む方法を確立した。次元縮約と呼ばれるこの手法は、後に述べる有機導体や鉄系の超伝導体に応用されている。

cRPAを含む有効模型導出のコードは高度に並列化され、スーパーコンピュータ京での重点課題としてチューニングが進められている。

求められたターゲットバンドの有効模型を次ステップの低エネルギーソルバーで解くことになる。以下により詳細に成果を述べる。

最局在ワニエ基底を用いた制限 RPA 法(産総研)

産総研グループは、大域的電子構造計算から出発して第一原理有効模型を導出することを主な役割とする。この過程での最大の問題は電子間相互作用パラメタを大域的電子構造計算から決定する方法の確立である。その一般的な方法として、私たちは制限 RPA 法をプロジェクト開始前に提案していたが、応用は進んでおらず、その有効性の検証は手が付いていなかった。

制限RPA法の局在基底の選択には原子軌道や LMTO-ASA などいくつかの可能性が考えられるが、私たちは最局在ワニエ関数を用いることにした。最局在ワニエ関数は、低エネルギー状態の基底の一つの表現であり、電子構造計算の基底関数に依存しない一般性を有している。まず平成19年度に Full-Potential LMTO 法の LDA-GW プログラムに制限 RPA 法を実装し、一連の 3d 遷移金属に適用した(図2)。また、最局在ワニエ関数以外の基底として、最局在ワニエ関数をユニタリ変換して U が最大になるようにワニエ関数を再構成する方法を考案し、同じく 3d 遷移金属に適用

した。その結果、 U を最大にするワニエ関数と最局在ワニエ関数の差は極めて小さく、 U の値にして 1meV 以下であることがわかった。これらの結果から最局在ワニエ関数と制限 RPA 法を組み合わせる方法が有効であることが確かめられた[9]。

遷移金属化合物への応用例として SrVO₃ に対する計算結果を示す(図3)。有効クーロン相互作用は、周波数が大きいときに裸のクーロン相互作用の値に近づく。周波数が小さくなるにつれ、16 eV 付近で急激に減少する。これはプラズマ振動数に対応し、その低エネルギー側で遮蔽が有効になる。低エネルギー領域では緩やかな周波数依存性を示し、静的極限で $U=3.5$ eV となる。一方、交換相互作用 J は周波数に対して弱い依存性を示し、プラズマ周波数での急激な変化も見られない。以上の結果は、この系において、数 eV 程度以下の低エネルギー領域で電子間相互作用の周波数依存性を無視できることを示唆する。

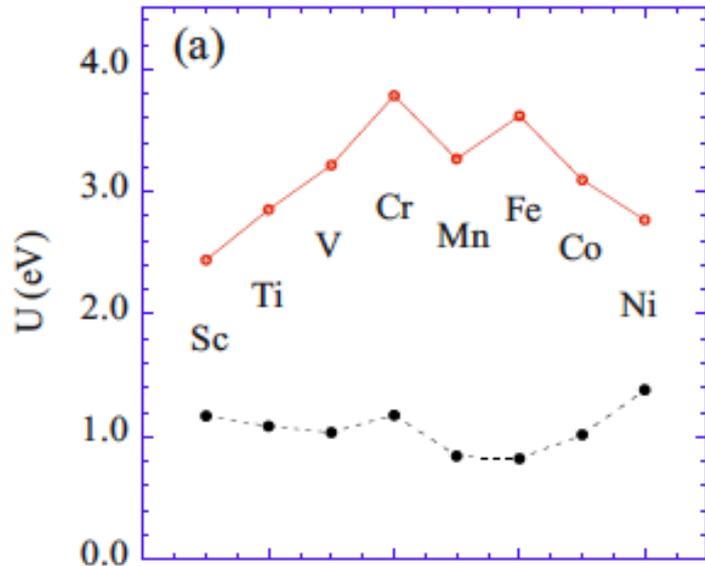


図2:最局在ワニエ関数と制限 RPA 法による 3d 遷移金属の有効クーロン相互作用(ハバード U) [9]

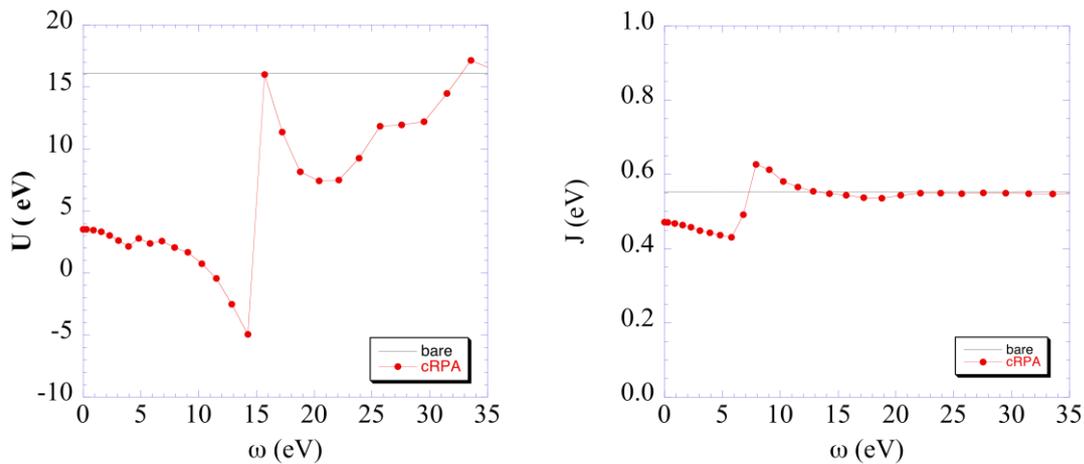


図3: 制限 RPA 法による SrVO₃ の有効クーロン相互作用 (U) と有効交換相互作用 (J) のエネルギー依存性。

次元縮約法の確立(東大)

第2段階で低次元的な異方性の大きな系の低次元的な有効模型を導く方法を確立した[18, 43]。これは通常のダウンフォールディング法がバンドの縮約を行うのに対して、次元縮約とよぶべき方法である。次元縮約によって、理論模型として広範に研究されている低次元理論模型を第一原理的に導出する道が開け、第一原理的な「低次元物理学」の分野を切り開くことになる。実際にこの手法は鉄系超伝導体[43]および有機導体の 2 次元有効模型の導出に応用され、後述のように低エネルギーソルバーでの解へとつながった。ターゲットとする 2 次元層以外の層からのスクリーニング効果のために、有効相互作用は一定程度小さくして考える必要があることが示されている。また

これと同じ考え方で動的平均場近似の不純物モデルソルバーに適した有効モデルパラメタの導出法も後述するように開発した。

バンドもつれ解消法(東大、産総研)

低エネルギーモデルに含めるバンドと繰り込んで消去すべきバンドが一部絡み合っている場合には低エネルギー空間と高エネルギー空間の分離に任意性が残る。このような場合に有効模型を安定して構成する方法を開発した。まず最局在ワニエ関数の方法にしたがって低エネルギーバンドを抽出する。この空間(d 空間)の補空間を r 空間とする。次にコーン・シャムハミルトニアンを行列表示し、d 空間と r 空間にまたがる行列要素を無視して対角化する。この処方箋により、図4のようにバンドのもつれを近似的に解くことができ、任意性なく制限RPAを実行することが可能になる。遷移金属に対する系統的な応用の結果、数値的に安定であることも確認された[33]。

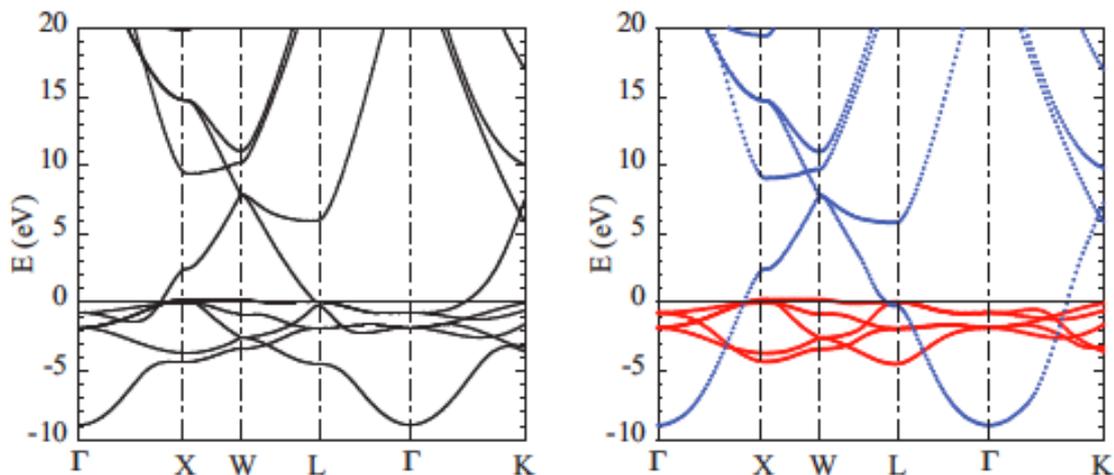


図4: Ni の電子バンド構造。(左)LDA の結果。(右)バンドもつれ解消法により絡み合いを解いたもの[33]。

4.1.3 GW 近似(産総研)

ダウンフォールディングの出発点となる大域的電子構造は LDA や GGA などの密度汎関数法を採用することが多いが、将来的には GW 近似などによる自己エネルギー補正の影響を検討する必要がある。そのため、本プロジェクトではGW 計算プログラムを並列化し、大規模系を扱えるようにした。MPIを用いたk 点に関する2重の並列化を初年度に完了し、20-30 原子を含む d 電子系を PC クラスタで扱えるようにし、バナジウム酸化物への応用に成功した[12]。この物質は実験では低温相が絶縁体であるが、LDA 計算では金属になる。GW 近似の自己エネルギー補正を考慮することにより、バンドの絡まりが解けることがわかった(図5)。また数値的にも 0.1eV の精度で準粒子エネルギーが安定に収束することを確認した。

その一方で、慣用的な GW 法の限界も明らかになった。LDA を出発点とした非自己無撞着な GW 計算ではギャップを再現できず、自己エネルギー効果を反映して波動関数を更新する必要があることがわかった。問題になる

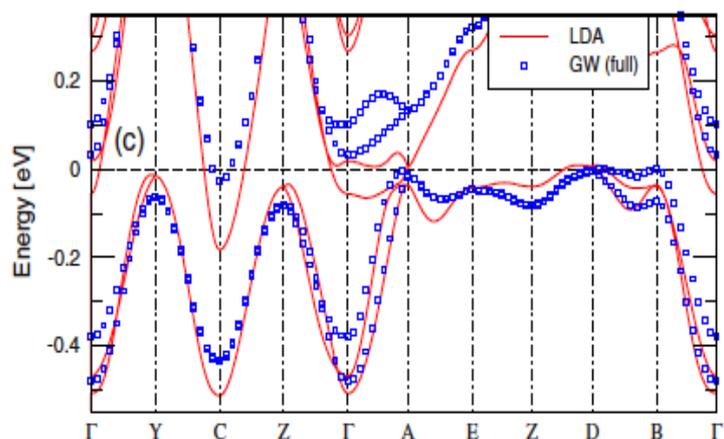


図5:VO₂ に対する GW 計算によってバンドの絡み合いがほどける様子

のは自己エネルギーのエネルギー依存性である。動的効果のために準粒子波動関数が互いに直交せず、自己無撞着計算に困難をもたらす。私たちは、準粒子波動関数と近い直交基底を Lowdin の直交化により構成して自己無撞着に GW 計算を行う方法(QPM 法)を考案した。この方法は、自己エネルギーの周波数依存性を無視して(非局所な)有効ポテンシャルを構成する方法の一種である。NiO や Gd に対する応用の結果、Quasi-particle Self-consistent GW 法(QSGW 法)と同等の結果が得られた(図6)。

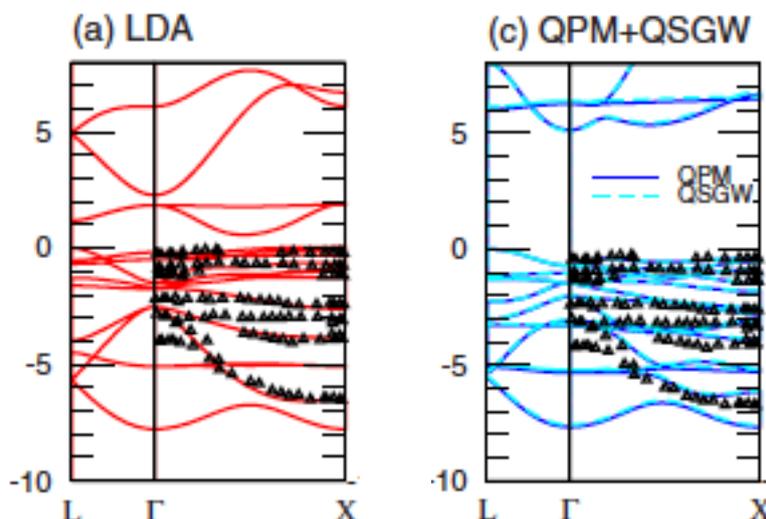


図6: (左)LDA による NiO の電子バンド構造と(右)2種類の self-consistent GW 法(QPM 法と QSGW 法)計算による準粒子バンド構造。△は実験(角度分解光電子分光)の結果。

スピンに依存した相互作用する系の Hedin 方程式と GW 近似 (Ecole Polytechnique、産総研)

d 電子系や f 電子系では、スピン軌道相互作用が低エネルギーの電子物性に重要な役割を担うことが多い。例えば、Ir 酸化物では $J=L+S$ をよい量子数とするモット絶縁体を実現していると考えられており、スピン軌道相互作用と電子間相互作用の協奏効果に注目が集まっている。このようにスピンに依存した相互作用をもつ問題を扱うため Hedin の方程式を拡張し、スピン依存 GW 近似を提案した[10]。この方法を FLAPW ベースの第一原理 GW プログラムに実装し、水銀化合物(HgS, HgSe, HgTe)に適用した。GW 自己エネルギー補正により Γ_6 状態が 0.7eV 上昇するとともに、スピン軌道分裂が 0.1eV 増加することがわかった[69]。

表1:スピン軌道相互作用を考慮した GW 計算による水銀化合物の電子準位[69]。

| | HgS | | HgSe | | HgTe | |
|----------------------|--------|---|-----------------------------|--------------------------|-------------------|---|
| | LDA | GW | LDA | GW | LDA | GW |
| Γ | | | | | | |
| This work | -0.66 | -0.02 (-0.01) | -1.27 | -0.58 (-0.57) | -1.20 | -0.60 (-0.58) |
| Ref. 24 | | | -1.27 | -0.51 | | |
| Ref. 25 | -0.62 | +0.06 | -1.23 | -0.60 | -1.17 | -0.57 |
| Ref. 38 ^a | -0.573 | | -1.18 | | -1.025 | |
| | -0.58 | | -1.26 | | -1.15 | |
| Expt. | | -0.15 ^b , -0.11 ^c | | -0.274 ^d | | -0.29 ± 0.02 ^e -0.30 ^f |
| L | | | | | | |
| This work | +2.37 | +3.28 (+3.29) | +1.81 | +2.67 (+2.69) +2.9 | +1.28 | +1.95 (+1.97) |
| Ref. 24 | | | | | | |
| Expt. | | | +2.949, +2.971 ^g | | 2.25 ^f | |
| X | | | | | | |
| This work | +5.40 | +6.25 (+6.26) | +5.00 | +5.79 (+5.80) | +4.03 | +4.62 (+4.65) |
| Expt. | | | +5.7 ^h | | +5.0 ^b | |

4.1.4 低エネルギーソルバー

E_F 近傍の有効模型が求められた後、最後の課題はこの有効模型をどうやって信頼できる方法で解くかに帰着される。強相関電子系は伝統的には理論模型を用いた研究が中心であった。理論模型とはハバード模型やアンダーソン模型など、限られた数のバンドの自由度を扱い、相互作用を短距離に限る模型である。この単純化によって、密度汎関数法が採用する平均場的な取り扱いを超えて、低エネルギーのゆらぎや秩序化を高精度で計算し、新概念を導入できる道も開ける。実際超交換相互作用による反強磁性や、近藤効果、モット転移などは理論模型によって機構解明が進められた。ただしハバード模型の相互作用 U のようなパラメータは当初、物理的直観や実験結果をもとに手で与えられてきた。しかし、銅酸化物など遷移金属化合物や種々の希土類化合物(金属相での電子の有効質量が大きい重い電子系と呼ばれる)での爆発的な研究の展開や物質探索の進展に伴い、より現実物質に立脚する理論模型の導出が必要となった。例えば理論模型の近似解が実験結果を再現しないとき、不一致の原因が近似のせいなのか、模型が現実の物質に不適切なのか不明では、研究の進めようがない。MACE は、これに第一原理的な基礎を与える道を開いた。現在用いられている低エネルギーソルバーには大きく分けて、格子模型を量子多体問題として格子上で忠実に解く手法と動的平均場近似に基づく手法の2通りがある。

格子模型の解法

格子模型の手法としては補助場量子モンテカルロ法、経路積分繰り込み群法などが高精度で有力な方法として知られているが、このプロジェクトでは以下の 3 つの手法について開発、応用を進めた。

ガウス基底モンテカルロ法の開発(東大)

本プロジェクトの研究で、低エネルギーソルバーの候補として、ガウス基底型の演算子で密度演算子を展開する手法に基づく量子モンテカルロ法の定式化と改良に取り組んだ。この手法ははじめ量子光学における手法として発展してきたが、凝縮系の特にフェルミ粒子系の手法としてその後注目された。ガウス基底のモンテカルロ法を低エネルギーソルバーの一つとして吟味し、相互作用が非常に大きくなる場合でなければ、格子模型の物理量を高い精度で求められることを検証した。これをもとにハバード模型の基底状態を吟味し、超伝導相の可能性を検討し、否定的な結果を得た。さらにサイト間クーロン相互作用を持つ有効模型に対しても、この手法が使えるよう開発と実装が行われた[1]。

変分モンテカルロ法の改良(東大)

変分モンテカルロ法はハミルトニアン基底状態に変分パラメータを持つ波動関数を仮定し、この変分パラメータを最適化して、期待値エネルギーの最も低くなる変分波動関数を求める方法である。従来の手法ははじめに仮定した変分波動関数の形に強く依存するため、バイアスのかかった結果が得られてしまう危険が大きかった。

しかしここ数年で我々が開発してきた手法は、数千という非常に多くの変分パラメータを数値的に同時に最適化することにより、このバイアスをほとんどなくすことに成功している[3, 5]。例えば、ゆらぎの非常に大きな状態と考えられている 1 次元朝永ラッティンジャー液体の様相を定量的にも再現しうる。

今回開発した手法では、変分波動関数は 3 つの要素からなっている。第一は一体波動関数部分であり、この部分に系のサイズあるいはその二乗に比例する変分パラメータが導入され、通常の金属状態、磁性秩序、超伝導秩序およびそのゆらぎ状態を柔軟に表せる。二番目の要素は相関因子であり、グッツヴィラー因子やジャストロ因子と呼ばれる因子を一体波動関数に乗じて、電荷相関を直接にコントロールし、一体波動関数だけで表現できない、電子相関効果を取り入れる。さらに三番目の要素として、波動関数全体が満たすべき対称性を保つ。例えば全運動量や全スピンなどの特定の量子数に量子数射影することによって、厳密な基底状態が満たすべき条件を満たすようにする。以上の三要素によって高い精度とバイアスの影響を抑えることができる。

変分モンテカルロ法の研究は、今までもスレータ行列にグッツヴィラー因子やジャストロ因子のよ

うな相関因子を作用させた変分波動関数を用いて計算する手法が、強相関模型に対して試みられ、一定の成功を収めてきた。しかしバイアスのかからない経路積分繰り込み群法やガウス基底モンテカルロの結果との食い違いが問題となっていた。我々は以上の3要素、特に系のサイズにスケールして増大するような非常に多くの変分パラメタを一体波動関数部分と相関因子の両方に対して導入して、他の方法とよく一致する結果を得ている。変分モンテカルロ法は他の方法では扱いにくい、相互作用の非常に大きな領域にも適用可能で、強相関計算の計算可能領域を拡大した。この多変数変分モンテカルロ計算のコードはスーパーコンピュータ京の重点課題として、高度な並列化と効率化がすすめられている。変分モンテカルロ法は比較的大きな系が扱えること、波動関数の形がより直接的に求められ、物理的考察を行いやすいなどの特徴がある。

動的平均場法の改良(東大)

動的平均場法(DMFT)は電子相関によって生まれる局所的で動的なゆらぎを厳密に取り込むことに適しており、動的相関の計算が容易な手法である。着目するサイトの量子力学的で動的なゆらぎはすべて取り込むが、その周りのサイトの影響は平均場としてのみ取り入れる。その結果非局所的な相関が無視されるという欠点があったが、1サイトからクラスタへと拡張するクラスタ DMFT によってある程度のサイト間相関が取り入れられるようになってきている。なるべく小さなクラスタで計算負荷を小さく保ちながら、求めたい熱力学極限(サイズ無限大)のふるまいに早く近づけるために、クラスタ計算の手法を吟味し、「キュムラント周期化」と呼ばれる方法が、最も小さなクラスタで大きなサイズのふるまいをよく予測できることが示された[17, 39, 74]。今後低エネルギーソルバーの一つとして、実用化できる。

動的平均場近似との融合による手法開発

LDA+DMFT 法の開発 (Ecole Polytechnique、産総研)

プロジェクト開始後、まず第3段階(低エネルギーソルバー)の改良に着手し、動的平均場理論(DMFT)の数値解法として連続時間モンテカルロ法を用いたimpurity solverを開発した。これを第一原理計算パッケージWIEN2kに組み込み、第一原理LDA+DMFT法のプログラムを開発した。このプログラムでは、LDA計算から出発してワニエ関数を基底とする低エネルギーハミルトニアン $H_{\nu}(\mathbf{k})$ の1体部分を導出する。次いで、制限RPA法で求まる電子間反発項 U と交換相互作用項 V を加えて多体ハミルトニアンを構成する。この第一原理有効模型を、連続時間モンテカルロ法を用いたDMFTで解く。得られた1体グリーン関数から電荷密度を計算してLDAの有効ポテンシャルを更新して次のサイクルにつなげる。計算は電荷密度が自己無撞着になるまで続ける(図7参照)。プログラムの特長としては、(i) LDA部分はFLAPW法による高精度な手法を用いており、異方性の強い物質を含んだ広い物質群に適用可能であること、(ii) ダウンフォールディングにはワニエ関数と制限RPA

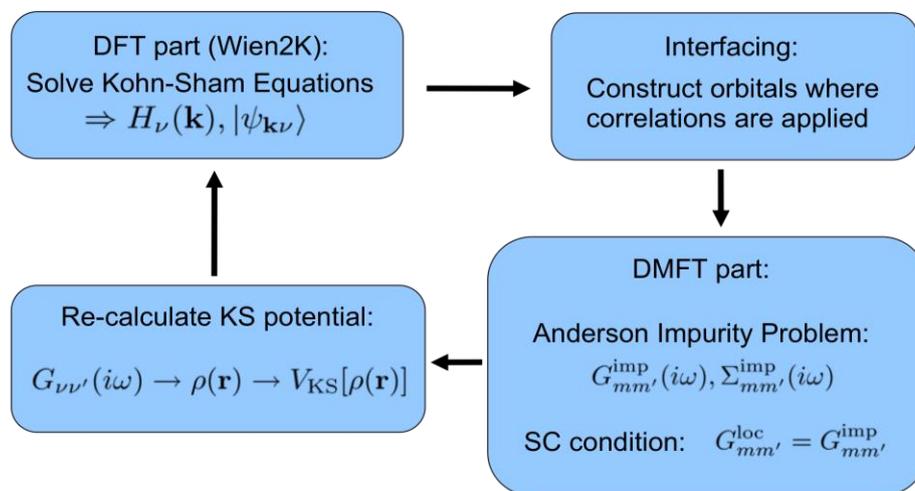


図7: 開発したLDA+DMFT計算のフローチャート。

法を用いていること、(iii)DMFT計算の結果を受けて電荷密度を更新すること、などが挙げられる。開発した手法をまずペロフスカイト酸化物SrVO₃に適用した。SrVO₃はフェルミ準位にV-3dのt_{2g}を主成分とする3つの状態が孤立バンドを形成する。DMFTによる自己エネルギー効果を考慮すると、LDAバンドに比べてt_{2g}のバンド幅が狭くなると同時に準粒子ピークの高エネルギー側にサテライト構造が出現することが確認された。これは従来のLDA+DMFT計算の結果を再現する。以上のベンチマークを経て、鉄系超伝導の基本物質であるLaFeAsOの計算を行った(鉄系超伝導については後述)。

制限 RPA 法と DMFT の融合 (Ecole Polytechnique、産総研)

制限 RPA で得られる有効パラメタは低エネルギー模型に含める状態数(ヒルベルト空間の広さ)に依存する。低エネルギー空間を広くとると、制限 RPA で取り除く分極(P_d)が大きくなるため有効相互作用 W_r は強くなる。また広い自由度から最局在ワニエ関数を構成するため基底の空間的な広がり小さくなる。この2つの効果のためにハバード U は大きく、飛び移り積分 t は小さくなり、電子相関の強さ U/t は大きくなる。したがって有効パラメタは実験で観測可能な量ではなく、近似の妥当性を評価するには得られた有効模型を解いて観測可能な物理量を実験と比較しなければならない。そこで、Ecole Polytechnique グループと共同で、制限 RPA によるダウンフォールディングで得られた第一原理有効模型を DMFT で解いて1電子励起スペクトルや有効質量を実験と比較した。ペロフスカイト酸化物 SrVO₃ や鉄系超伝導の母物質 LaFeAsO への応用の結果、制限 RPA が妥当な結果を与えることがわかった。ただし、有効質量やハバードバンドのピーク位置は実験より相関効果が若干弱く出る。この原因としては、制限 RPA の限界の他に、相互作用の長距離(オフサイト)成分を無視したこと、周波数依存性を無視したこと、低エネルギーソルバーに DMFT を用いたこと、などが考えられるが、解析は今後の課題である。

DMFTに適したダウンフォールディング法の開発(東大)

DMFTで用いられるべき有効相互作用の第一原理計算に基づいた導出・解析を行った[79]。DMFTは局所的な動的量子ゆらぎを正確に記述できる一方、非局所的な遮蔽やゆらぎの効果を無視している。これらの非局所的な効果は模型が解析される前の段階、すなわち有効模型を導出する段階で考慮されるべきである。そこで乱雑位相近似を用い、非局所的な遮蔽の効果をDMFTにより解析される不純物模型の有効相互作用パラメタ(U^{DMFT})を繰り込むという形で取り込む手法を提案した。計算の結果、非局所的な分極には有効相互作用の値を増大させる“反遮蔽”の効果があることがわかった。二次元ハバード模型を用いた反遮蔽の単純解析及び物理的考察を行い(図8左図)、次に強相関物質であるSrVO₃にこの手法を適用し、有効相互作用パラメタの挙動を得ることに成功した(図8右図)。

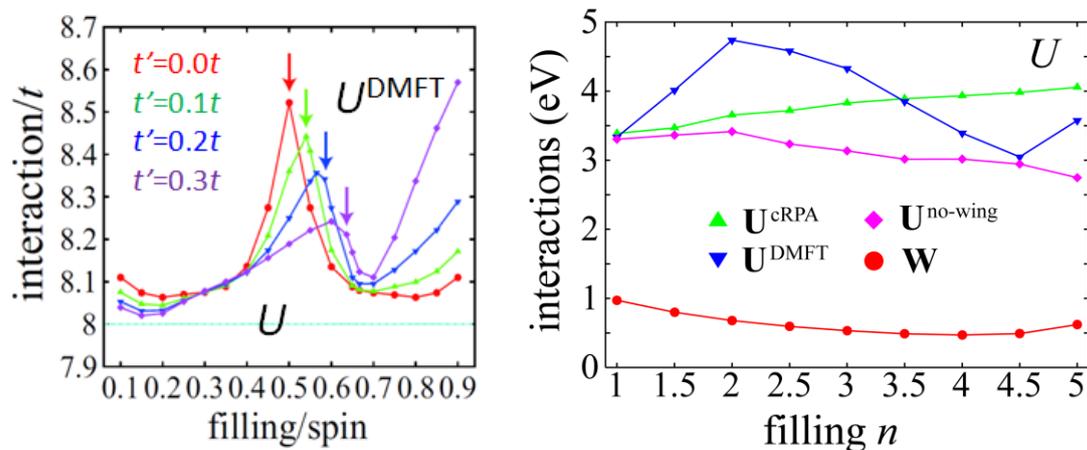


図8:(左)二次元ハバード模型における U^{DMFT} のフィリング依存性 (右)SrVO₃における有効相互作用のフィリング依存性

周波数に依存したハバードUの問題 (Ecole Polytechnique、産総研)

GW+DMFT法はEcole Polytechniqueのプロジェクトの主要課題の一つであり、産総研グループと共同で研究を進めた。最局在ワニエ軌道と制限RPA法を用いて第一原理有効多体ハミルトニアンを導出した。またGW自己エネルギーと、有効ハミルトニアンに対するDMFTの自己エネルギーを計算し、1粒子グリーン関数を次式から求める。

$$G^{-1}(\mathbf{k}, \omega) = \omega - H^{\text{LDA}}(\mathbf{k}) - \{ \Sigma^{\text{GW}}(\mathbf{k}, \omega) + \Sigma^{\text{DMFT}}(\omega) - V_{\text{xc}}(\mathbf{k}) - \Sigma^{\text{DC}} \}$$

ここで V_{xc} はLDAの交換相関ポテンシャルで、 H^{LDA} に含まれているLDAの交換相関効果を差し引く。 Σ^{DC} はGWとDMFTの両方に含まれている自己エネルギーの二重勘定を補正する項である。この定式化ではDMFTの自己エネルギーで局所的な強相関効果を取り込み、GW近似で自己エネルギーの非局所部分(\mathbf{k} 依存性)を補正する。LDA+DMFT計算で発生する V_{xc} の二重勘定の不定性を回避できる長所も備えている。得られたグリーン関数の虚部から1電子励起スペクトルが求まる。実際の計算では、GW自己エネルギーはLDAからの1 shot計算で行った。また制限RPAで得られる有効相互作用は周波数に依存するが、有効ハミルトニアンには $\omega=0$ の値を用いた。プロジェクトの前期に最局在ワニエ基底を用いた実装を完了して SrVO_3 への適用計算を実行したが、期待される結果が得られず、 Σ^{DC} の選択により結果が大きく変わることがわかった。 Σ^{DC} として第一原理GW自己エネルギーの局所部分を用いた場合、フェルミ準位が大きくシフトする。一方、有効不純物問題のGW自己エネルギーを Σ^{DC} とすると、DMFTの効果がほとんど消失してしまう。解析の結果、この違いは二つの自己エネルギーのエネルギースケールが異なることに起因することがわかった。前者が裸の相互作用で特徴づけられるのに対して、後者は遮蔽クーロン相互作用のエネルギースケールをもつ。そのため、二重勘定補正で打ち消し合うべき二つの寄与がゼロにならず、予想外のスペクトルが得られる。この結果をうけて、動的なハバードUに対する低エネルギーソルバーの開発にとりかかった。

動的なハバードUに対しては、P.Werner(ETH Zurich(当時))らによる連続時間モンテカルロ法による解法が開発されたところであった。私たちはWernerの方法に注目してLDA+DMFT計算の低エネルギーソルバーに採用することにした。しかし、この方法では解析接続の数値的限界から励起スペクトルの高いエネルギー領域を取り扱うことができない。そこで、もう一つの方法としてボーズ因子仮説法を開発した[84]。この仮説では1粒子グリーン関数 $G(\tau)$ を次式で表す。

$$G(\tau) = G_0(\tau)F(\tau)$$

ここで、有効静的模型、すなわち相互作用を時間軸に対して $U(\tau)=U\delta(\tau) + \Delta U(\tau)$ としたとき右辺第1項に対するグリーン関数が $G_0(\tau)$ である。第2項の効果は $F(\tau)$ に含まれる。 $F(\tau)$ に対する動的原子極限(Dynamic Atomic Limit; DLA)での近似形を提案した。ボーズ因子仮説法をアンダーソン模型に適用し、連続時間モンテカルロ法による(動的効果に対する)厳密な方法と比較して近似の妥当性を検証した。また、現実物質へのベンチマークとして SrVO_3 のLDA+DMFT計算を実行した。その結果、ハバードUの周波数依存性を考慮することにより、電子相関効果が強くなり準粒子バンドが狭くなることがわかった。自己エネルギーのエネルギー依存性から繰り込み定数Zを見積ると、静的模型で $Z=0.7$ であるのに対して動的模型では $Z=0.5$ まで減少する。

続けて、この方法を鉄系超伝導へも適用して BaFe_2As_2 における電子相関効果のドーピング依存性、温度依存性を議論した(後述)。

また、Uの動的効果を繰り込んで有効静的模型を構築する方法も開発した[87]。この方法では、Uの動的成分(裸のクーロン相互作用に対する遮蔽部分)を、電子と結合するボゾン(プラズマ振動)の和で書き直す。次にボゾン自由度の励起状態が無視できるとして部分和をとると、その効果を電子の飛び移り積分に繰り込むことができる。この方法を種々の現実物質へ適用して繰り込みの強さを見積もった。また、 BaFe_2As_2 のドーブ系に適用して波数分解1電子励起スペクトルを計算し

た。その結果、静的模型は動的模型と比べて準粒子ピークが際立っているのに対し、有効静的模型は動的模型に近い結果を与えることが確認された(図9)。

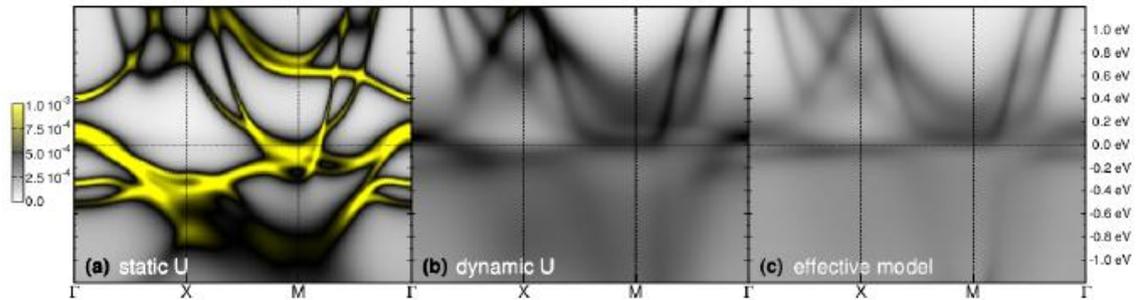


図9: LDA+DMFTによるホールドーピングされたBaFe₂As₂の波数分解1電子連記スペクトル。(a)ハバードUの動的効果を見無視した場合、(b)動的効果を考慮した場合、(c)動的効果を繰り込んだ有効静的模型に対する結果。

GW+DMFT法 (Ecole Polytechnique、産総研)

上述のとおりGW+DMFT法については当初の計画から遅れが生じた。周波数依存ハバードUに対する低エネルギーソルバーの開発を経て、プロジェクト後期にこの問題に再び取り組んだ。最局在ワニエ関数によるダウンフォールディング、制限RPAによる有効相互作用パラメタ、GW近似による自己エネルギーをそれぞれ計算し、有効模型をDMFTで解いたうえで、GW+DMFTによる1粒子グリーン関数を求め、SrVO₃に適用した。(J.M.Tomczak, M.Casula, T.Miyake, F.Aryasetiawan and S.Biermann, 論文投稿中)。図10のように、波数分解1電子励起スペクトルを見ると、GW近似のものに比べて、高エネルギー側にサテライト構造が見られる。実験と比較すると、占有状態では角度分解光電子分光の結果とよく一致しており、非占有状態に対する逆光電子分解の精密な実験が期待される。また、 Γ 点では準粒子ピークの下側のサテライトが大きいのに対してX点では準粒子ピークより上のサテライトが大きい。これは、占有数の違いを反映し、t_{2g}状態がほぼ占有されている Γ 点では準粒子ピークより下のサテライトが強くなると理解できる。この計算はハバードUの動的効果を考慮した世界で初めてのGW+DMFT計算である。

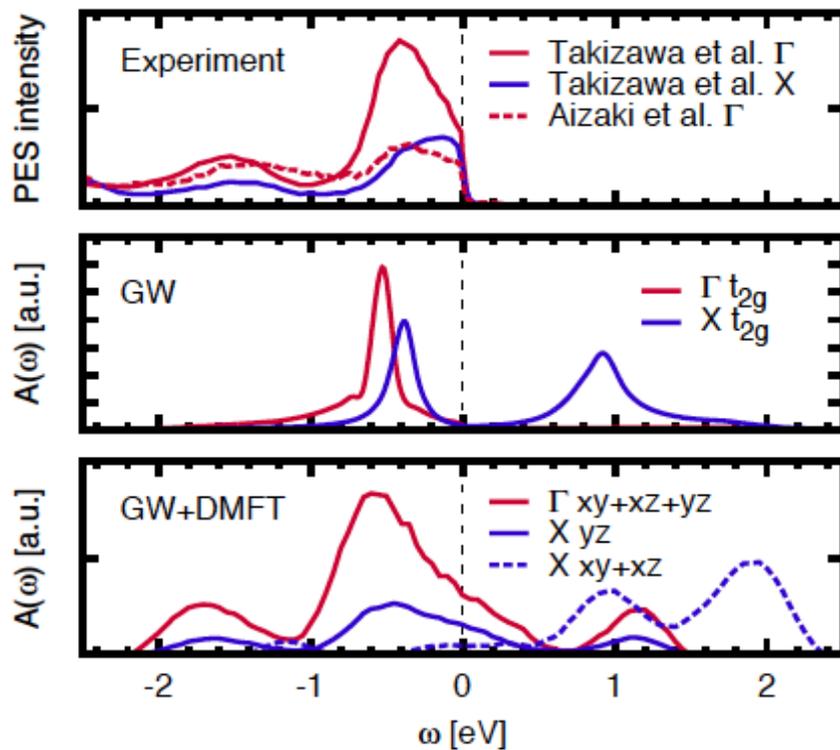


図10: SrVO₃の波数分解1電子励起スペクトル。(上)実験、(中)GW計算、(下)GW+DMFT計算による結果。

[4.2] 応用の展開

4.2.1 鉄系超伝導 (東大、Ecole Polytechnique、産総研)

2008年2月に日本で発見され、臨界温度が50度を超える鉄系超伝導体は発見から数か月のうちに、この系列に属する多くの化合物がそれぞれ独自の超伝導と多様な臨界温度を示すことが明らかとなった。この化合物群は鉄元素を含み、LaFeAsOをはじめとして、LaFePO、BaFe₂As₂のようなニクタイト型化合物とFeSeやFeTeのようなカルコゲナイト型化合物がある。発見後3年以上経つが、超伝導のメカニズムは解明されていない。その上、我々の研究開始時にこれら一群の化合物で電子相関効果がどの程度重要なのかについての合意も形成されていなかった。

[ダウンフォールディング -鉄系超伝導体の有効パラメタの導出-] (東大、産総研)

世界的に集中的な研究が展開されている鉄系新超伝導体の母物質に対して3段階手法の重要ステップであるダウンフォールディング法を適用し、有効パラメタ計算を行った。まず東大グループがLaFeAsOとLaFePOに対する定量的な低エネルギー有効モデルを世界に先駆けて導出して中程度の相関の強さを持つ物質系であることを報告した[4]。引き続いて、東大と産総研グループは共同でこれらを含む6種類の物質の有効パラメタを算出し、定量的な低エネルギー有効モデルをこれまた世界に先駆けて導出した[37]。いずれの物質もフェルミ準位近傍に鉄の3d軌道を主成分とする状態が存在するので、それらを低エネルギー空間とするモデル(dモデル)を導出している。

図11はこのダウンフォールディングの手続きによって得られる、LaFeAsOの低エネルギー部分のバンド構造(図11左図の青い曲線)と得られた最局在ワニエ軌道の一例(図11右図)を示す。フェルミ準位近傍の鉄3d軌道からなるモデルを構築する場合、ハバードUと呼ばれる同一軌道電子間相互作用の平均値は2.5eV程度だが、軌道に依存して値が1eV以上の差があることがわかった。

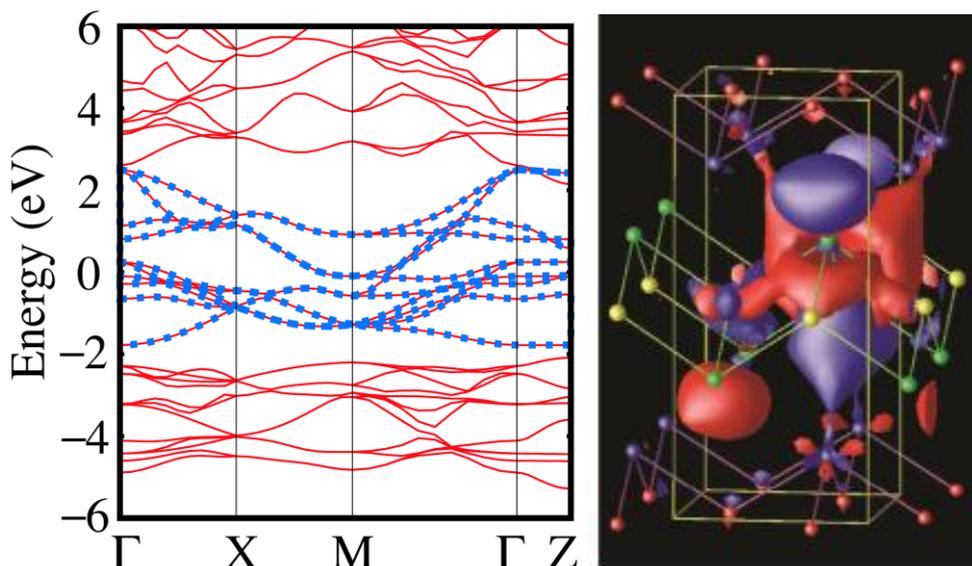


図 11: 鉄系新超伝導体 LaFeAsO のバンド構造(左図)と上図の青線の低エネルギーバンドの一つに対して構成されたワニエ軌道の一例(右図)[4], [37]

図12に各物質の U/t の値を陰イオン(ニクトゲン、もしくはカルコゲン)と鉄面の距離に対して図示する。まず相関の強さに強い物質依存性があることがわかった。LaFeAsO や LaFePO などの1111系に比べてFeSe、FeTeなどの11系では相関が強い。相関の強さは陰イオンと鉄面の距離 h との間に相関があり、 h が大きくなるにつれて U/t が増加する。この傾向は次のように理解することができる。(i) h が大きくなるとFe-3dと陰イオンのp軌道の混成が弱くなる。そのために電子の遍歴性が弱まり t が減少する。(ii)これと同時に混成が弱いため、p-d間の遮蔽効果が弱まり U が増大する。(iii)1111系に比べて11系は状態密度が小さく、遮蔽効果が弱い(U が大きい)。別の言い方を

すると、鉄系超伝導体に属する異なる物質群では、物質によって鉄とアニオン層の間の距離が異なり、距離の増加とともに LaFeAsO や LaFePO のように共有結合性の強い化合物から FeSe のようなイオン結合性の強い化合物へと変化することによって、図12のように有効電子間相互作用が大きく変化することを、我々は示した。 U の大きさは LaFePO と FeSe では5割以上も異なり、FeSe は6種類の中でも U/t が最大であり、相当に電子相関の強い系であることを示唆する。このことについてはまた後に触れる。

U と典型的な電子のサイト間トランスファー(運動エネルギーの指標)の比は10程度もあり、電子相関が決して無視できないことがわかる。バンドの数が多いことも考え合わせて、この物質群が中程度に電子相関の強い系と分類できることを示している。

LaFeAsO の d 模型では U の値は2.5 eV 程度であるが、砒素と酸素の p 軌道まで含めた模型では、ワニエ関数の局在化と遮蔽効果の減少のため U の値が4.3 eV 程度に大きく増加することもわかり、低エネルギーソルバーでどういった自由度を扱うかで、それに応じて異なる有効模型が必要であり、 U もそれに合わせて変える必要があるが、この違いが大きいことを示している[11]。

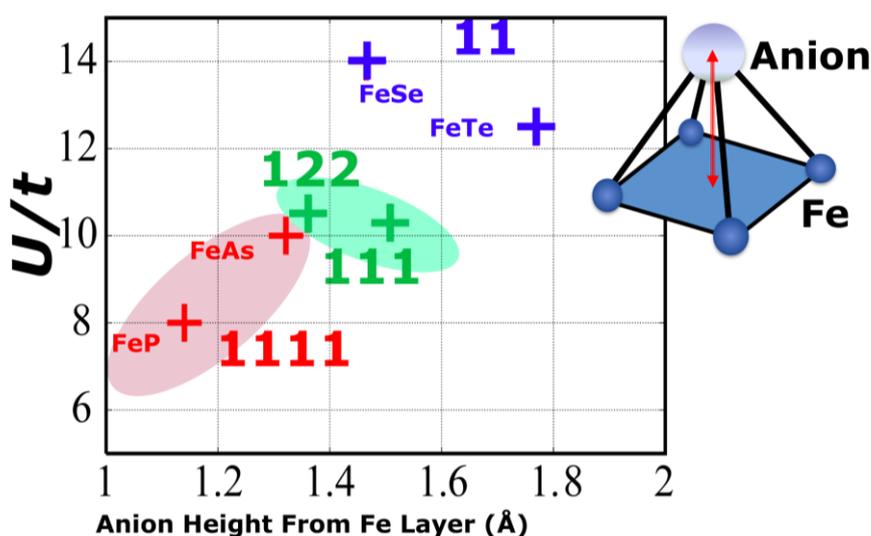


図12: 制限 RPA による鉄系超伝導の6種類の母物質の有効パラメタ

[物質による違いの詳細な追究](東大、産総研、Ecole Polytechnique)

LaFeAsO と LaFePO の電子構造の違い

まずフランスグループを中心に LaFeAsO と LaFePO の電子構造の違いを詳細に明らかにした[8]。さらに REFeAsO において 4f 希土類元素 RE を Ce, Pr, Nd と置換したときの 4f 電子の電子相関が物性に与える影響を解明した。得られた有効パラメタを用いた LDA+DMFT 計算も行った。

実験的には LaFeAsO が電子ドーピングにより 26K の超伝導体になるのに対して LaFePO の超伝導転移温度は 4K と大きく異なる。計算の結果、フェルミ面の形状がニクトゲンの鉄面からの高さ(h)に敏感であることがわかった。LaFeAsO では Γ -Z ラインの周りに hole-like なフェルミ面が存在する。このバンドは xy 軌道を主成分とするが、 h が小さくなるとエネルギー準位を下げ、フェルミ準位の下に隠れる。一方、フェルミ準位より低い $3z^2-r^2$ を主成分とするバンドが上昇して、3次元的なフェルミ面を形成する。その結果、 h の大きな LaFeAsO と h の小さな LaFePO ではフェルミ面の形状や成分が質的に異なる(図13)。実験でも多くの物質に対して Pn -Fe- Pn の結合角(Pn はニクトゲン)やニクトゲンの高さ h と超伝導転移温度に強い相関があることが指摘され、現在では局所幾何構造が超伝導の重要なパラメタと認識されている。このことは上述したように、 h が電子相関の強さを制御するパラメタであることがわかったことで、 h の持つ物理的意味が解明された。

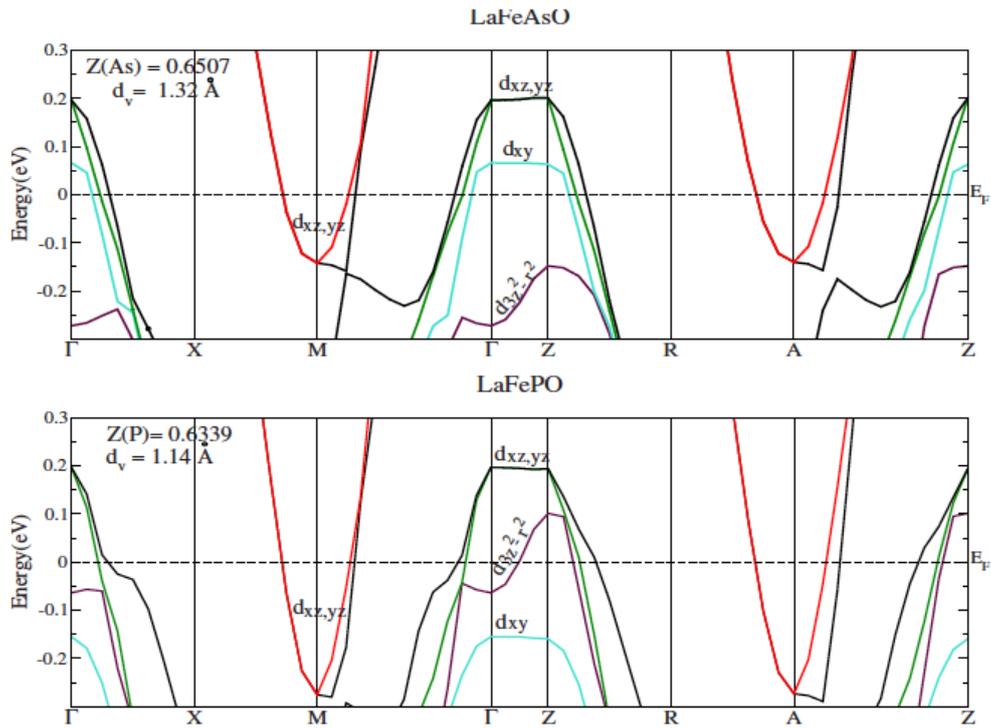


図13: LaFeAsOとLaFePOのLDAによるバンド構造。 Γ -Zにおいて xy バンドと z^2 バンドが入れ替わり、フェルミ面の形状が変化する[8]。

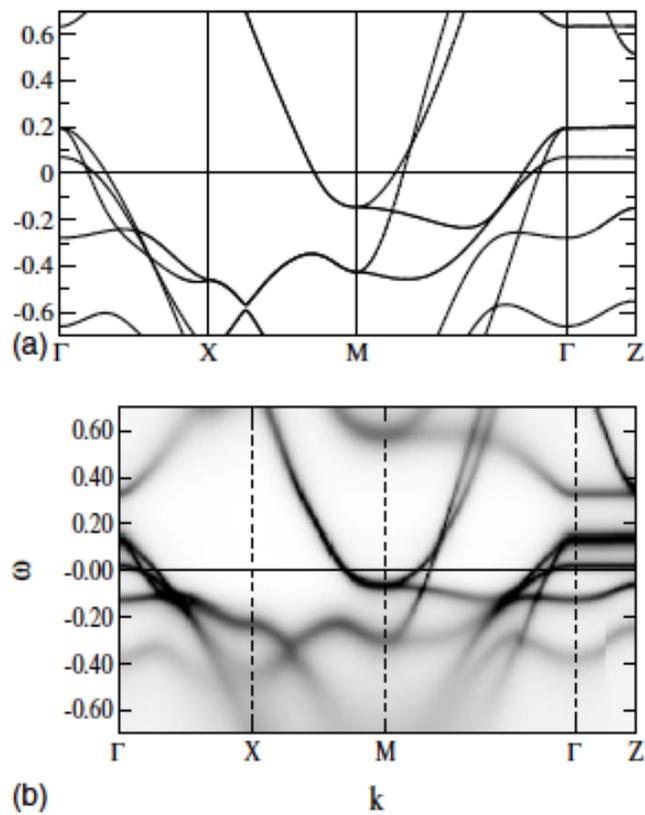


図14: (上)LaFeAsOのLDAバンド。(下)LDA+DMFTによる波数分解電子励起スペクトル[31]。

Ca₄Al₂O₆Fe₂As₂ の電子構造 (東大、Ecole Polytechnique、産総研)

実験で見つかった興味深い物質の電子状態解明にも力を入れ、密度汎関数法による電子構造計算や最局在ワニエ関数を用いた有効パラメータ計算を行った。

鉄系超伝導では、砒素-鉄-砒素のなす結合角 α と超伝導転移温度 T_c の相関が研究の初期段階から指摘されてきた。様々な物質の T_c を α に対して図示すると、ユニバーサル曲線が描け(Lee plot)、正四面体に対応する $\alpha = 109^\circ$ 付近で T_c が最高になる。新たな高温超伝導体に向ける新物質開発が続いているが、なかでも鉄砒素層の間にペロフスカイトのブロック層が挟まった物質群は、ペロフスカイトの構成元素とブロック層の厚さに応じて構造パラメータが系統的に変化することから注目を集めている。2010年に産総研の実験グループにより合成された Ca₄Al₂O₆Fe₂As₂ は、鉄砒素超伝導の中で最小の $\alpha = 102^\circ$ を持つ。転移温度は 28 K と鉄系超伝導体の中で特別高い訳ではないが、Lee plot において LaFeAsO と逆サイド ($\alpha < 109^\circ$) に位置するために興味もたれた。私たちは密度汎関数法によるバンド計算を行った結果、LaFeAsO に比べて Γ 点周りの hole-like なフェルミ面が1枚少ないことを見つけた。 α を人為的に変えた一連の計算の結果、フェルミ面の数が α に敏感であることがわかった。特に $\alpha = 109^\circ$ 付近でバンドの組み替えが起こり、フェルミ面の数と軌道成分が大きく変化する。最局在ワニエ関数を用いた解析の結果、この変化は xy 軌道の準位と飛び移り積分の変化に起因することがわかった[56]。

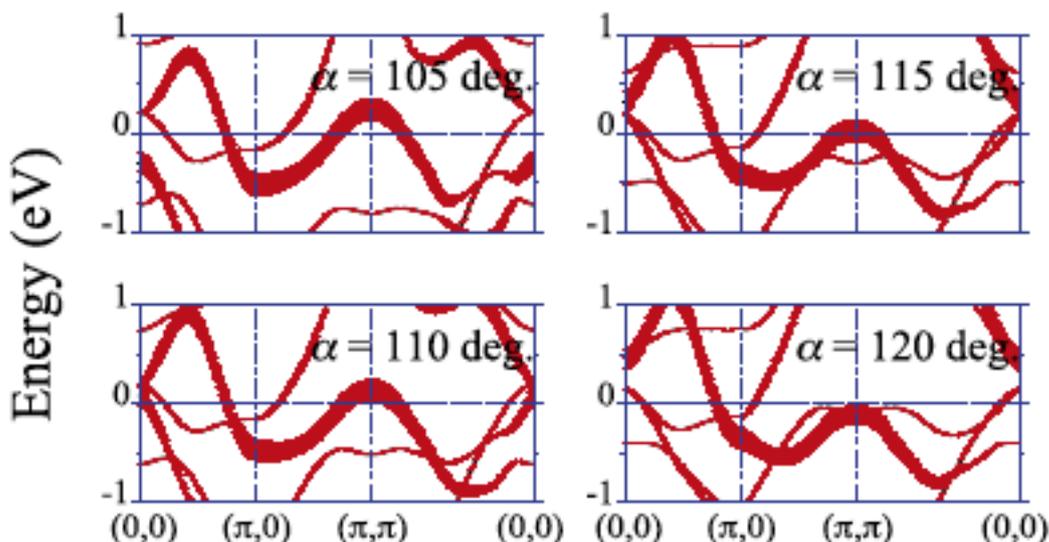


図15:LDA による Ca₄Al₂O₆Fe₂As₂ の電子バンド構造。As-Fe-As の結合角を人為的に変えると Γ 点周りのフェルミ面の数が変化する。線の太さは xy 軌道成分の重みを表す[56]。

[低エネルギーソルバーの解による物性の解明] (東大、産総研、Ecole Polytechnique)

電子相関の効果がかなり大きそうであることは、第一原理有効モデルパラメータから推定できたが、実際の物性がどのように電子相関によって決まってくるかは、有効モデルを低エネルギーソルバーで解いてみなければわからない。動的平均場法、多変数変分モンテカルロ法など目的に適した多様な低エネルギーソルバーを用いながら、LaFePO、LaFeAsO、BaFeAs₂、FeSe、FeTeなどの異なるファミリーに属する鉄系超伝導体の物性が解明され、それぞれの個性と、ファミリーをまたがる普遍的な性質が解明された。

LaFeAsOとLaFePOのスペクトル密度 (産総研、Ecole Polytechnique)

鉄系超伝導研究の初期より強相関効果の研究が複数のグループから報告されていたが、LDA+DMFT計算に限っても、強相関から弱相関まで様々な主張が混在していた。この差異の最大の原因は、有効電子間相互作用の算出法にあり、一部の計算では根拠のない値を用いたことが混乱に拍車をかけていた。本プロジェクトの東大グループが世界に先駆けて制限RPA計算を行い、LaFeAsOとLaFePOは中程度の相関を持つことを予言していた。この結果をうけて、Ecole

Polytechnique、産総研グループが共同してLaFeAsOのダウンフォールディングを行い、LDA+DMFT計算を実行した[31]。

その結果、波数分解1電子励起スペクトルはフェルミ準位近傍ではLDAのバンド構造と形状が似ていることがわかった(図14)。ただしバンド幅は相関効果により狭くなる。有効質量は1.5-1.7(軌道により異なる)で、実験値(1.8)とよく一致する。以上の結果は、この物質が中程度の相関を持つことを支持する。

FeSeのスペクトル密度(東大、産総研、Ecole Polytechnique)

引き続き、電子相関効果が大きいと予言されたFeSeに対して動的平均場近似による計算を3グループ共同で実行した。制限RPAの結果、この物質はLaFeAsOより電子相関が強いことがわかっており、励起スペクトルへの影響に興味を持たれていた。LaFeAsOと同じ手法でLDA+DMFT計算を実行したところ、次のような顕著な電子相関の効果が実証された(図16参照)[38]。(i)1電子励起スペクトルにはフェルミ準位の1.2eV下にサテライト構造が見られる。 U の値を人為的に増加させたところサテライトの位置が高エネルギー側にシフトすることから、サテライトは準粒子ピークではなく下部ハバードバンドであることがわかった。光電子分光では-2eV付近にサテライトが確認され、これが下部ハバードバンドであると期待されるが、ピーク位置に若干ずれがあり、今後の検証が必要である。(ii)Fe-3dの準粒子バンドは強い繰り込みを受けてバンド幅が減少する。繰り込みの強さは軌道に強く依存する。自己エネルギーの周波数依存性の解析から、この物質は金属であるが、軌道によって非フェルミ液体となる、軌道選択型非フェルミ液体が実現しているという興味深い結果が得られ、実験検証を促している。(iii)準粒子バンドを見ると、 Γ -Xライン上で xy 軌道と yz/zx 軌道を主成分とする2つの状態がほぼ縮退しているが、電子相関効果により擬縮退が解ける。

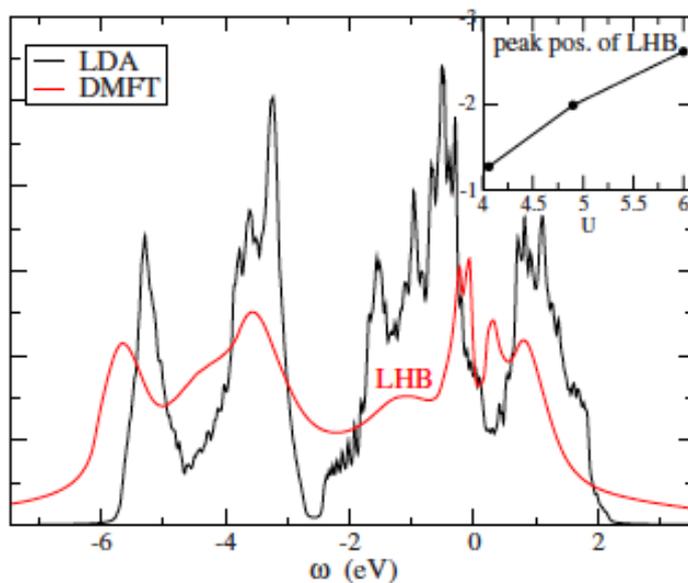


図16:(赤線)LDA+DMFTによるFeSeの1電子励起スペクトル。(黒線)LDAの状態密度。LDA+DMFTではフェルミ準位近傍のFe-3dバンドが強い繰り込みを受けて幅が狭くなる。-1.2eV付近に見られるサテライトは下部ハバードバンド[38]。

磁性とコヒーレンスの解明(東大)

導出された一連の有効模型を、さらにもう一つのソルバーである多変数変分モンテカルロ法によって解いて、第一原理的に物性を解明した。鉄系超伝導体は超伝導相の近傍の母物質が反強磁性秩序を示すことが多い。しかしこの秩序の磁気秩序モーメントは物質群によって大きく異なり、磁気秩序のない化合物(LaFePO)から、モーメントが $2\mu_B$ 以上に亘るもの(FeTe)まで多様であり、その原因が謎となっていた。

多変数変分モンテカルロ法でそれぞれの有効模型を解いた結果、図18のように、この多様さが有効電子間相互作用の大きさの違いによって定量的にも10%以内の精度で説明できること、LaFeAsOでは実際に今までの第一原理計算で説明のできなかった小さな磁気モーメントが説明できることを明らかにした[75]。

有効模型を多変数変分モンテカルロ法で解くことによって、磁気秩序パラメタが化合物によって大きく変わる多様性の原因が、電子間相互作用の化合物に依存した違い(もとをたどると共有結合性とイオン性の違い)に由来することを第一原理的に明らかにしたわけである。

さらに、電子濃度 n の関数として磁気秩序パラメタの大きさをプロットしてみると、図19のように鉄系超伝導体の位置する $n \approx 1.2$, $\lambda = 1$ 付近の状態が $n=1$ を中心とするモット絶縁体の巨大な影響下にあることが明らかとなった[75]。これは電子相関とモット絶縁体の物理が重要であることを示す決定的な証拠であり、今後の超伝導機構解明にとって鍵となる。

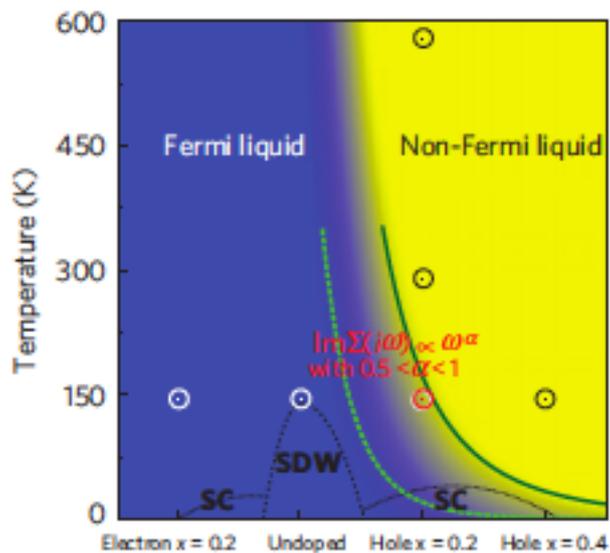


図17: 動的なUに対するLDA+DMFT計算から得られたBaFe₂As₂の相図[81]。

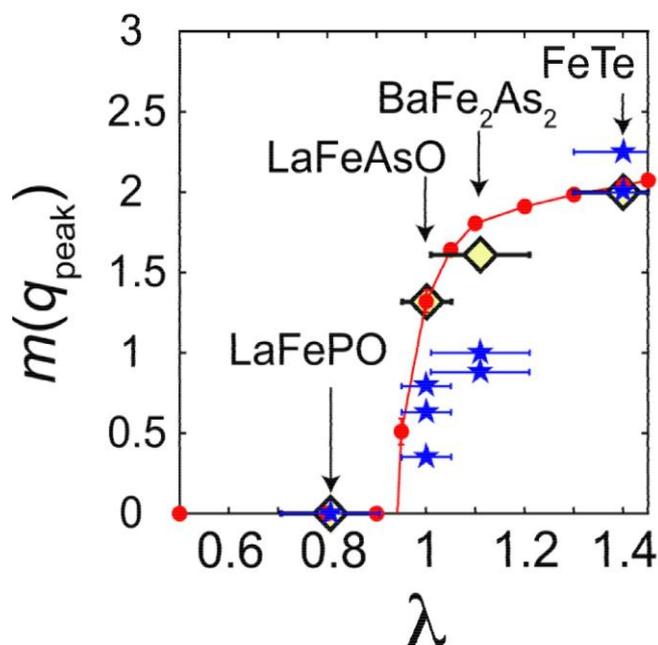


図18: 種々の鉄系超伝導体の秩序磁気モーメント(秩序パラメタの大きさ)(星印)が多変数変分モンテカルロ計算の結果によってほぼ再現され、磁性の量子臨界点の近傍にあることを示している[75]。 λ は電子相関の相対的な強さの比をスケールするパラメタ($\lambda = 1$ がLaFeAsOの第一原理模型)

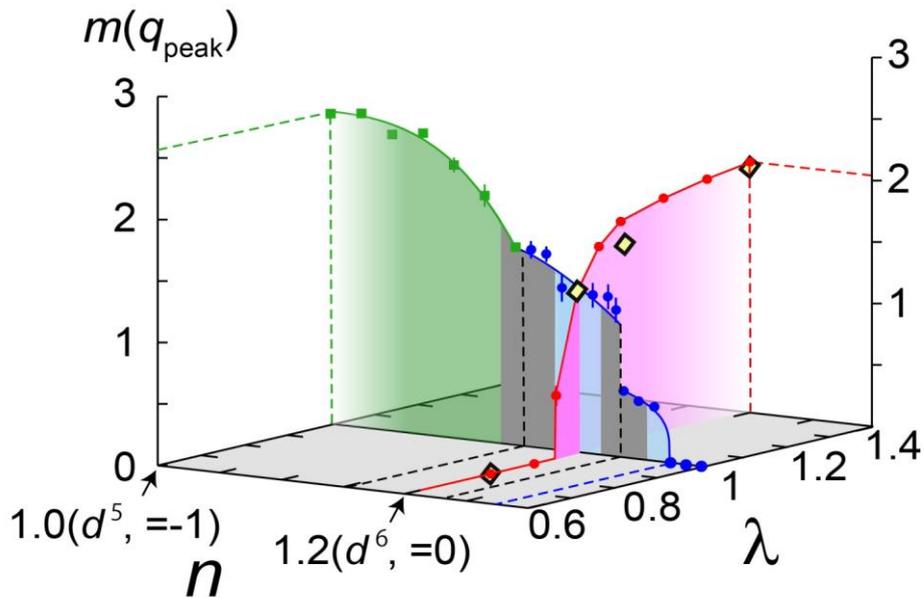


図19:磁気秩序パラメタを電子濃度 n と相互作用の強さ λ の関数としてプロットすると、 $n=1.2$ 付近に位置する鉄系超伝導体は $n=1$ に位置する強大なモット絶縁体の裾野に位置することがわかる[75]。電子相関効果はこのモット絶縁体の浸み出し効果として捉えられることがわかる。

4.2.2 有機導体(dmit 塩、 κ -ET 塩) (東大)

複雑な単位格子を持ち、かつ電子相関も強いために第一原理計算が困難だが、応用上も基礎物理上も広く注目されている物質群に有機導体がある。BEDT-TTF 型の有機導体は 2 次元的な異方性を持ち、未解明の相や金属絶縁体転移など興味深い物性を示す。この系は非従来型の金属絶縁体転移や量子スピン液体という未解明の新量子相をもつことから世界的な注目を集めている。この BEDT-TTF 型有機伝導体は単位胞に原子が 100 以上もある複雑な系であるが、これに対しても、MACE を適用し、有効理論模型を導出した[18]。この化合物は κ 型と θ 型の構造を持ち、異なる物性を示すが、以下より興味深い物性を示す κ 型に注目して述べる。得られた有効模型は従来信じられてきた、改良ヒュッケル近似に基づく有効模型とはかなり異なる結果を与えた。図20 左図に大局的バンド構造とターゲットバンド(青色)を示し、右図にこのターゲットバンドのワニエ軌

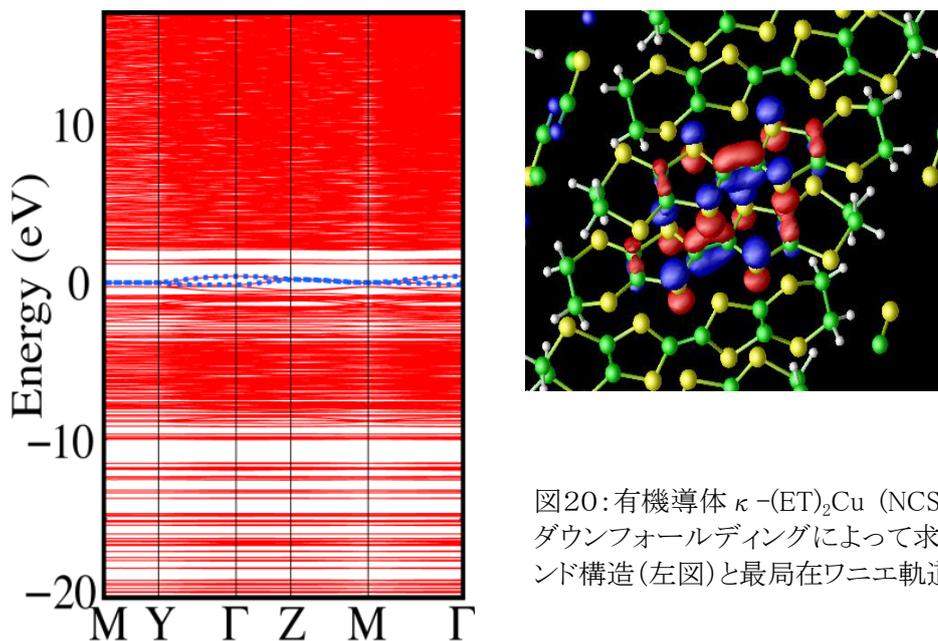


図20:有機導体 κ -(ET)₂Cu (NCS)₂ に対するダウンフォールディングによって求められたバンド構造(左図)と最局在ワニエ軌道(右図)

道関数の様子を示す。

この有効模型を多変数変分モンテカルロ法で解くことによって、モット転移(金属絶縁体転移)と金属および反強磁性絶縁体相の相図を求め、現実物質がモット転移のごく近くにあることを正しく再現した。

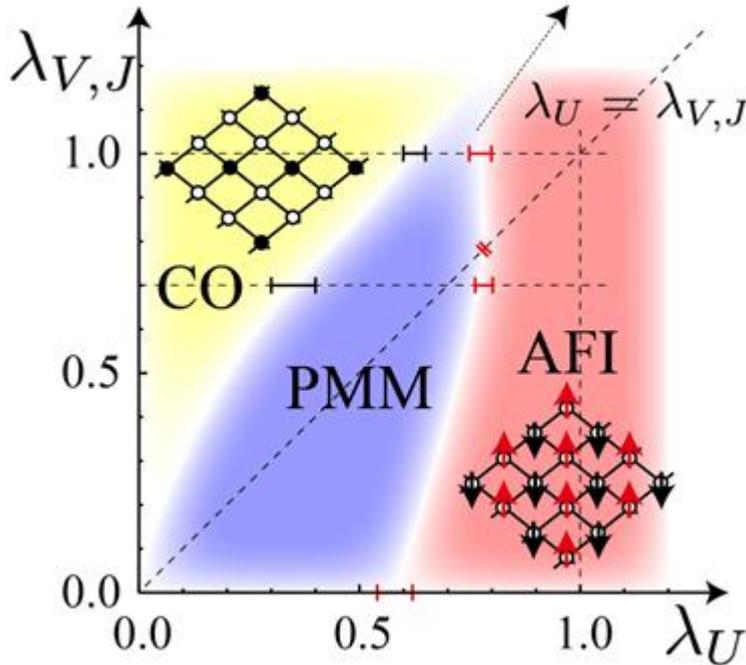


図21:

κ -(BED-TTF)₂Cu(NCS)₂ の第一原理模型をもとにしたモット転移相図。 $\lambda_U, \lambda_{V,J} = 1$ が第一原理模型を表わし、オンサイト相互作用 U とサイト間相互作用や交換相互作用 J を一様にスケールしたパラメタ空間での相図。PMM が常磁性の金属相を表わし、AFI は反強磁性秩序を持った絶縁体相、CO は電荷秩序を持つ相である。現実物質は AFI と PMM の境界(金属絶縁体転移境界)に近いことがわかり、実験結果と対応する[72]。

4.2.3 スピン軌道相互作用系への拡張

トポジカル絶縁体やスピンホール効果などスピン軌道相互作用に起因した物理現象が広く注目を集めている。このうち Sr₂IrO₄ と Ba₂IrO₄ は電子相関効果の効果は大きいものの、強いスピン軌道相互作用が絡み合っ初めて、モット絶縁体になる物質として注目されていた。この物質に MACE を適用した結果、強いスピン軌道相互作用によって確かに有効模型がモット絶縁体を引き起こしやすい単バンド系に帰着されることが分かった。しかし、DMFT を低エネルギーソルバーとして採用した得られた結果は図22のように反強磁性秩序がなければ絶縁体化しない、スレータ絶縁体と呼ばれるものであり、モット絶縁体とは異なることを示した。さらに但し単純なスレータ絶縁体ではなく、電子相関効果が反強磁性秩序と相乗効果を起こしていることも示した。この研究によって MACE に初めて電子物性解明にとって重要なスピン軌道相互作用の効果が組み込まれ、MACE の適用範囲をさらに広げるものとなった[71]。

また密度汎関数法プログラムを整備して金(111)表面のラッシュバ効果の計算を実行し、膜厚依存性を調べた。磁性の問題への展開を見据えてスピンの方向を制御する機能を開発し、結晶磁気異方性を計算する準備をすすめている。また、多体効果を議論するため、スピン軌道相互作用を考慮した GW 計算のプログラムを開発し、III-V 属半導体へ適用した。

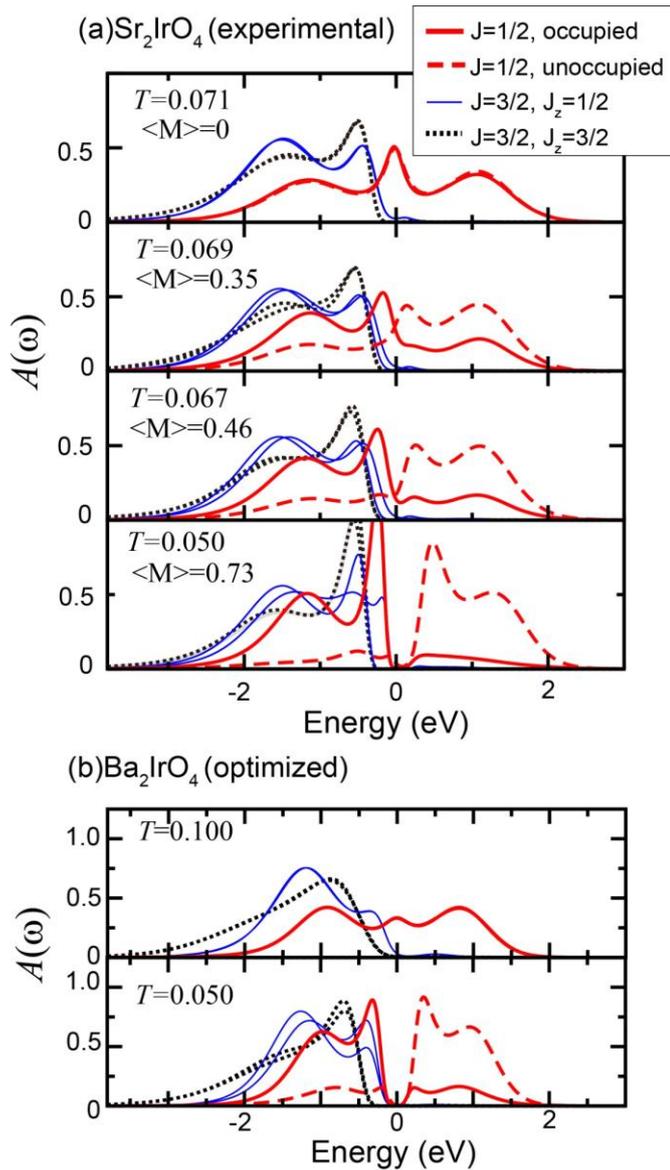


図22: 動的平均場法を低エネルギーソルバーとして採用し、MACE で求めた Sr_2IrO_4 (上図 a)と Ba_2IrO_4 (下図 b)の状態密度[71]。フェルミレベル (Energy=0)でのギャップが磁気秩序の生じる温度 $T=0.067$ (Sr_2IrO_4) 0.5 (Ba_2IrO_4) 以下で初めて生じ、それ以上の温度では金属に留まるスレータ絶縁体であることがわかる。

4.2.4 芳香族超伝導 (東大、産総研)

ピセン結晶にカリウムをドーピングすると超伝導になることが発見された。初の芳香族超伝導である。芳香族分子というありふれた物質であることと、転移温度が 19K と有機物質としては最高の T_c を持つことから注目を集めている。私たちは密度汎関数法によるバンド計算と最局在ワニエ関数を用いた解析を行い、次のことを解明した[34]。(i)母物質の伝導帯は4本の軌道から構成され、それらはピセン分子の LUMO と LUMO+1 を主成分とする。(ii)カリウムのドーピング位置は層間よりも層内の方が安定である。(iii)カリウムドーピングの影響は、リジッドバンド描像は妥当ではなく、フェルミ面の形状も大きく変化する。

その後、コロネンやフェナンスレンでもカリウムドーピング下で超伝導が発見され、研究に広がりを見せている。私たちはコロネン分子結晶の電子構造計算もを行い、ピセンと同様に伝導帯が4本の軌道からなりコロネンの2重縮退した LUMO 軌道が主成分であることを見つけた[64]。

これらの物質群に対しては、その後、東大グループが制限 RPA 法による電子間相互作用パラメータ計算を行った。今後の超伝導解明に期待がかかる。

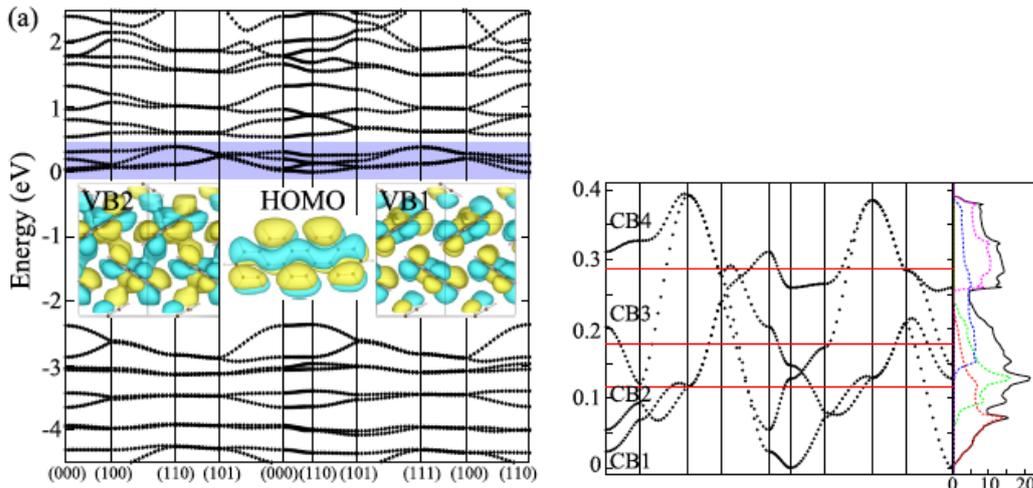


図23: LDAによるピセン結晶の電子構造[34]。

4.2.5 界面系(東大、産総研)

ペロブスカイト構造を持つ2種の絶縁体の界面が金属的になることが最近実験で発見され、高い電子濃度をもつ2次元電子系として新機能の可能性が注目されている。系が3次元的なバルク系ではなく並進対称性のない界面であることから、この系の第一原理計算は困難が大きく、3段階手法においても新たなダウンフォールディングの枠組みと従来法の拡張が求められていた。私たちはエネルギー階層構造を利用した従来のダウンフォールディングに加えて、界面からの距離による階層構造を利用したアルゴリズムも併用した、実空間-エネルギー空間併用のダウンフォールディング法を開発して、この困難に対処し、界面系でMACEに従って、ダウンフォールディングを行い、界面系 $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ のための低エネルギー有効モデルを得ることに成功した[76]。

4.2.6 制限RPAのその他の応用(東大、産総研)

その他の応用としては、概念的に単純な水素固体[30]や典型的なモット絶縁体である MnO の有効モデル[51]を導出し、圧力効果を議論した。

(2)研究成果の今後期待される展開

東大グループ

手法がほぼ確立したので、興味ある様々な物質群に適用して未知の物理を解明し、新しい量子相や新しい量子相転移を、第一原理的かつ系統的に探索解明することが可能となった。まず鉄系超伝導体や銅酸化物超伝導体の超伝導機構解明に取り組むとともに、新たな高温超伝導機構の探索と高い転移温度を可能にする物質探索に寄与する研究へと展開する。また量子スピン液体の生成機構を有機導体の第一原理モデルを中心にして解明する。またスピン軌道相互作用と電子相関の絡み合いが生み出す新しい量子現象、量子相についてもこの手法を適用して第一原理的に解明する準備は整っており、現在研究を進めつつある。このプロジェクトで開発した手法は主に熱平衡状態のための手法であったが、今後これを、非平衡ダイナミクスを扱える方法へと拡張していく。また真に第一原理的に扱うために、格子振動、フォノンの自由度をダイナミカルに取り入れるとともに、格子構造の最適化も行える手法へと発展させることは大きな課題である。

Ecole Polytechnique グループ

プロジェクト最終年にGW+DMFT法の計算が可能になり、 SrVO_3 に対する結果が得られたところである。今後さらなる応用計算を積み重ねて方法の検証・改良するとともに強相関物質の物性解明が進むと期待できる。GW+DMFT法はプロジェクト開始時に想定していたよりも開発に時間を要した。これは周波数に依存した U の取り扱いが必須であることが判明し、その低エネルギーソルバ

一の開発に2-3年を要したからである。しかし、結果として周波数に依存した U の物理は、相関電子系の研究に新たな潮流を生み出しつつある。課題名「高精度多体多階層物質シミュレーション」のとおり、本プロジェクトの理念はフェルミ準位近傍の低エネルギー状態と、それ以外の高エネルギー状態を異なる精度で扱うことにある。理想的な場合には2つのエネルギースケールを分離することが可能であるが、現実系ではこの分離が妥当ではないこともあり、そのような場合に有効相互作用 U の周波数依存性が重要になる。 U の動的効果を考慮した現実物質への適用計算を続けることにより、多階層物理への理解と、新たな近似手法の開発が期待される。

プログラム開発においては、Ecole Polytechnique グループは WIEN2k を基本ソフトとし、量子モンテカルロ法、ワニエ関数を用いたダウンフォールディングを開発し、制限 RPA 法の実装もほぼ完了した。また、KITP (サンタバーバラ)、CECAM (ローザンヌ) などの理論物理、計算科学の世界的拠点の組織委員や psi-k、アメリカ物理学会 March meeting など代表的な研究集会の招待講演を行った。これらの活動により、プロジェクト外の研究者が MACE 研究に参入し、コミュニティが広がりつつある。日本のアクティビティを高めるためには、若手研究者の数ヶ月単位の滞在など国際的な人材交流が有効と考えられる。

産総研グループ

最局在ワニエ関数と制限 RPA による第一原理有効模型導出と、低エネルギーソルバーによる解析は、東大、Ecole Polytechnique グループとの共同研究により順調に進み、当初の目標はほぼ達成したと言える。プロジェクト外の複数の欧米の研究グループがこの方法を採用して手法開発に参入していることは特筆に値する。引き続き興味ある物質群への応用と、方法の改良を続け、世界を先導する研究のアクティビティを保つことを目標とする。Ecole Polytechnique グループとは GW+DMFT 法の応用、ハーバード U の周波数依存性の解析に近い将来の最重要課題である。東大グループとは、銅酸化物など対象を広げる共同研究を計画している。有効模型に含まない高エネルギー状態からの自己エネルギー効果の検討も重要な課題として残っており、グループ間で議論を進めている。

§ 5 成果発表等

(1) 原著論文発表 (国内(和文)誌 0 件、国際(欧文)誌 105 件)
(国際(欧文)誌)

1. T. Aimi and M. Imada, "Does Simple Two-Dimensional Hubbard Model Account for High-Tc Superconductivity in Copper Oxides?", J. Phys. Soc. Jpn., 78, 113708 (2007).
2. L.V. Pourovskii, B. Amadon, S. Biermann, and A. Georges, "Self-Consistency Over the Charge Density in Dynamical Mean-Field Theory: A Linear Muffin-Tin Implementation and Some Physical Implications", Phys. Rev. B, 76, 235101 (2007).
3. D. Tahara and M. Imada, "Variational Monte Carlo Study of Electron Differentiation around Mott Transition", J. Phys. Soc. Jpn., 77, 093703 (2008).
4. K. Nakamura, R. Arita, and M. Imada, "*Ab initio* Derivation of Low-Energy Model for Iron-Based Superconductors LFeAsO and LaFePO", J. Phys. Soc. Jpn., 77, 093711 (2008).
5. D. Tahara and M. Imada, "Variational Monte Carlo Method Combined with Quantum-Number Projection and Multi-Variable Optimization", J. Phys. Soc. Jpn., 77, 114701 (2008).
6. K. Nakamura, Y. Yoshimoto, R. Arita, S. Tsuneyuki, and M. Imada, "Optical Absorption Study by *ab initio* Downfolding Approach: Application to GaAs", Phys. Rev. B, 77, 195126 (2008).
7. L. Pourovskii, V. Vildosola, S. Biermann, and A. Georges, "Local Moment Behavior versus Kondo Behavior of the 4f-Electrons in Rare-Earth Iron Oxypnictides", Europhys. Lett., 84, 37006 (2008).
8. V. Vildosola, L. Pourovskii, R. Arita, S. Biermann, and A. Georges, "Bandwidth

- and Fermi Surface of Iron-Oxypnictides: Covalency and Sensitivity to Structural Changes”, *Phys. Rev. B*, **78**, 064518 (2008).
9. T. Miyake and F. Aryasetiawan, “Screened Coulomb Interaction in the Maximally Localized Wannier Basis”, *Phys. Rev. B*, **77**, 085122 (2008).
 10. F. Aryasetiawan and S. Biermann, “Generalized Hedin's Equations for Quantum Many-Body Systems with Spin-Dependent Interactions”, *Phys. Rev. Lett.*, **100**, 116402 (2008).
 11. T. Miyake, L. Pourovskii, V. Vildosola, S. Biermann and A. Georges, “d- and f-Orbital Correlations in the REFeAsO Compounds”, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **77**, Suppl. C 99-102 (2008).
 12. R. Sakuma, T. Miyake and F. Aryasetiawan, “First-principles Study of Correlation Effects in VO₂”, *Phys. Rev. B*, **78**, 075106 (2008).
 13. Y. Fujimoto, T. Koretsune, S. Saito, T. Miyake and A. Oshiyama, “A New Crystalline Phase of Four-Fold Coordinated Silicon and Germanium”, *New J. Phys.*, **10**, 083001 (2008).
 14. J. M. Tomczak, F. Aryasetiawan, and S. Biermann, “Effective Bandstructure in the Insulating Phase Versus Strong Dynamical Correlations in Metallic VO₂”, *Phys. Rev. B*, **78**, 115103 (2008).
 15. H.C. Choi, S. K. Kwon, B. I. Min, and F. Aryasetiawan, “GW Studies of Core-Valence Correlation Effects on Quasiparticle Electronic Structure: GaAs and CdTe”, *J. the Korean Phys. Soc.*, **53**, 967 (2008).
 16. H. Shinaoka and M. Imada, “Soft Hubbard Gaps in Disordered Itinerant Models with Short-Range Interaction”, *Phys. Rev. Lett.*, **102**, 016404 (2009).
 17. S. Sakai, Y. Motome and M. Imada, “Evolution of Electronic Structure of Doped Mott Insulators: Reconstruction of Poles and Zeros of Green's Function”, *Phys. Rev. Lett.*, **102**, 056404 (2009).
 18. K. Nakamura, Y. Yoshimoto, T. Kosugi, R. Arita, and M. Imada, “*Ab initio* Derivation of Low-Energy Model for κ -ET Type Organic Conductors”, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **78**, 083710 (2009).
 19. T. Misawa, Y. Yamaji and M. Imada, “Spin Fluctuation Theory for Quantum Tricritical Point Arrising in Proximity to First-Order Phase Transitions: Applications to Heavy-Fermion Systems, YbRh₂Si₂, CeRu₂Si₂, and β -YbAlB₄”, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **78**, 084707 (2009).
 20. H. Shinaoka and M. Imada, “Single-Particle Excitations under Coexisting Electron Correlation and Disorder: A numerical Study of the Anderson-Hubbard Model”, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **78**, 094708 (2009).
 21. K. Kuroki, H. Usui, S. Onari, R. Arita, H. Aoki, “Pnictogen Height as a Possible Switch between High-T_c Nodeless and Low-T_c Nodal Pairings in the Iron Based superconductors”, *Phys. Rev. B*, **79**, 224511 (2009).
 22. R. Arita and H. Ikeda, “Is Fermi-Surface Nesting the Origin of Superconductivity in Iron Pnictides? : A Fluctuation- Exchange-Approximation Study”, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **79**, 113707 (2009).
 23. J. M. Tomczak and S. Biermann, “Multi-orbital Effects in Optical Properties of Vanadium Sesquioxide”, *J. Phys.: Cond. Matter*, **21**, 064209 (2009).
 24. J. M. Tomczak and S. Biermann, “Optical Properties of Correlated Materials -- or Why Intelligent Windows May Look Dirty”, *Phys. Status Solidi B*, **246**, 1996 (2009).
 25. J. M. Tomczak and S. Biermann, “Optical Properties of Correlated Materials -- Generalized Peierls Approach and Its Application to VO₂”, *Phys. Rev. B*, **80**, 085117 (2009).
 26. J.M. Tomczak and S. Biermann, “Materials Design using Correlated Oxides: Optical Properties of Vanadium Dioxide”, *Europhys. Lett.*, **86**, 37004 (2009).
 27. R. Sakuma, T. Miyake and F. Aryasetiawan, “Quasiparticle Band Structure of

- Vanadium Dioxide”, *J. Phys.: Cond. Matter*, 21, 064226 (2009).
28. F. Aryasetiawan, J.M. Tomczak, T. Miyake and R. Sakuma, “Downfolded Self-Energy of Many-Electron Systems”, *Phys. Rev. Lett.*, 102, 176402 (2009).
 29. F. Aryasetiawan, and S. Biermann, “Generalized Hedin's equations and GW Approximation for Quantum Many-Body Systems with Spin-Dependent Interactions”, *J. Phys.: Cond. Matter*, 21, 064232 (2009).
 30. J.M. Tomczak, T. Miyake, R. Sakuma and F. Aryasetiawan, “Effective Coulomb Interactions of Solids under Pressure”, *Phys. Rev. B*, 79, 235133 (2009).
 31. M. Aichhorn, L. Pourovskii, V. Vildosola, M. Ferrero, O. Parcollet, T. Miyake, A. Georges and S. Biermann, “Dynamical Mean-Field Theory within Augmented Plane-Wave Framework: Assessing Electronic Correlations in LaFeAsO”, *Phys. Rev. B*, 80, 085101 (2009).
 32. P. Mahadevan, F. Aryasetiawan, A. Janotti, and T. Sasaki, “Evolution of the electronic structure of a ferromagnetic metal: Case of SrRuO₃”, *Phys. Rev. B*, 80, 035106 (2009).
 33. T. Miyake, F. Aryasetiawan and M. Imada, “Ab-Initio Procedure for Effective Models of Correlated Materials with Entangled Band Structure”, *Phys. Rev. B*, 80, 155134 (2009).
 34. T. Kosugi, T. Miyake, S. Ishibashi, R. Arita and H. Aoki, “First-principles electronic structure of solid picene”, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 78, 113704 (2009).
 35. R. Sakuma, T. Miyake and F. Aryasetiawan, “Effective quiparticle Hamiltonian based on Lowdin’s orthogonalization”, *Phys. Rev. B*, 80, 235128 (2009).
 36. M. Imada, T. Misawa, and Y. Yamaji, “Unconventional quantum criticality emerging as a new common language of transition-metal compounds, heavy-fermion systems, and organic conductors”, *J. Phys.: Cond. Matter*, 22, 164206 (2010).
 37. T. Miyake, K.Nakamura, R. Arita and M. Imada, “Comparison of Ab initio Low-Energy Models for Iron-Based Superconductors LaFePO, LaFeAsO, BaFe₂As₂, LiFeAs, FeSe and FeTe”, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 79, 044705 (2010).
 38. M. Aichhorn, S. Biermann, T. Miyake, A. Georges, M. Imada, “Theoretical evidence for strong correlations and incoherent metallic state in FeSe”, *Phys. Rev. B*, 82, 064504 (2010).
 39. S. Sakai, Y. Motome, M. Imada, “Doped high-Tc cuprate superconductors elucidated in the light of zeros and poles of electronic Green's function”, *Phys. Rev. B*, 82, 134505 (2010).
 40. M. Hirayama, and M. Imada, “Systematic Control of Doped Carrier Density without Disorder at Interface of Oxide Heterostructures”, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 79, 034704 (2010).
 41. H. Shinaoka and M. Imada, “Electronic and Magnetic Properties of Metallic Phases under Coexisting Short-Range Interaction and Diagonal Disorder”, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 79, 094711 (2010).
 42. H. Shinaoka, M. Imada, “Theory of Electron Transport near Anderson-Mott Transitions”, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 79, 113703 (2010).
 43. K. Nakamura, Y. Yoshimoto, Y. Nohara, M. Imada, “Ab initio Low-Dimensional Physics Opened Up by Dimensional Downfolding: Application to LaFeAsO”, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 79, 123708 (2010).
 44. Jan Kunes, Ryotaro Arita, Philipp Wissgott, Alessandro Toschi, Hiroaki Ikeda and Karsten Held, “Wien2wannier: from linearized augmented plane waves to maximally localized Wannier functions”, *Comp. Phys. Commun.*, 181, 1888-1895 (2010).
 45. Philipp Hansmann, Ryotaro Arita, Alessandro Toschi, Shiro Sakai, Giorgio Sangiovanni and Karsten Held, “Dichotomy between large local and small ordered magnetic moment in Iron-based superconductors”, *Phys. Rev. Lett.*,

- 104, 197002 (2010).
46. Hirofumi Sakakibara, Hidetomo Usui, Kazuhiko Kuroki, Ryotaro Arita and Hideo Aoki, "Two orbital model explains why the single-layer Hg cuprate have higher superconducting transition temperature than the La cuprate", *Phys. Rev. Lett.*, 105, 057003 (2010).
 47. Hiroaki Ikeda, Ryotaro Arita, and Jan Kunes, "Phase diagram and Gap anisotropy in iron-pnictide superconductors", *Phys. Rev. B*, 81, 054502 (2010).
 48. Despina Louca, Kazumasa Horigane, Anna Llobet, Ryotaro Arita, Sungdae Ji, Naoyuki Katayama, Shun Konbu, Kazuma Nakamura, Tae-Yeong Koo, Peng Tong, and Kazuyoshi Yamada, "Local atomic structure of superconducting $\text{FeSe}_{1-x}\text{Te}_x$ ", *Phys. Rev. B*, 81, 134524 (2010).
 49. Hiroaki Ikeda, Ryotaro Arita and Jan Kunes, "Doping dependence of spin fluctuations and electron correlations in iron pnictides", *Phys. Rev. B*, 82, 024508, (2010).
 50. V. Brouet, F. Rullier-Albenque, M. Marsi, B. Mansart, M. Aichhorn, S. Biermann, J. Faure, L. Perfetti, A. Taleb-Ibrahimi, P. Le Fevre, F. Bertran, A. Forget, D. Colson, "Significant reduction of electronic correlations upon isovalent Ru substitution of BaFe_2As_2 ", *Phys. Rev. Lett.*, 105, 087001 (2010).
 51. Jan M. Tomczak, T. Miyake and F. Aryasetiawan, "Realistic many-body models for manganese monoxide under pressure", *Phys. Rev. B*, 81, 115116 (2010).
 52. Jan M. Tomczak, K. Haule, T. Miyake, A. Georges and G. Kotliar, "Thermopower of correlated semiconductors: application to FeAs_2 and FeSb_2 ", *Phys. Rev. B*, 82, 085104 (2010).
 53. K. Umemoto, R.M. Wentzcovitch, S. Saito and T. Miyake, "Body-centered tetragonal C4: A viable sp^3 carbon allotrope", *Phys. Rev. Lett.*, 104, 125504 (2010).
 54. Jernej Mravlje, Markus Aichhorn, Takashi Miyake, Kristjan Haule, Gabriel Kotliar, Antoine Georges, "The coherence-incoherence crossover and the mass-renormalization puzzles in Sr_2RuO_4 ", *Phys. Rev. Lett.*, 106, 096401 (2010).
 55. K. Karlsson, F. Aryasetiawan, O. Jepsen, "Method for calculating the electronic structure of correlated materials from a truly first-principles LDA plus U scheme", *Phys. Rev. B*, 81, 245113 (2010).
 56. Takashi Miyake, Taichi Kosugi, Shoji Ishibashi and Kiyoyuki Terakura, "Electronic Structure of Novel Superconductor $\text{Ca}_4\text{Al}_2\text{O}_6\text{Fe}_2\text{As}_2$ ", *J. Phys. Soc. Jpn.*, 79, 123713 (2010).
 57. Y. Yamaji and M. Imada, "Composite-Fermion Theory for Pseudogap, Fermi Arc, Hole Pocket, and Non-Fermi Liquid of Underdoped Cuprate Superconductors", *Phys. Rev. Lett.*, 106, 016404 (2011).
 58. T. Misawa, K. Nakamura, and M. Imada, "Magnetic Properties of *Ab initio* Model for Iron-Based Superconductors LaFeAsO ", *J. Phys. Soc. Jpn.*, 80, 023704 (2011).
 59. Youhei Yamaji and Masatoshi Imada, "Mott physics on helical edges of two-dimensional topological insulators", *Phys. Rev. B*, 83, 205122 (2011).
 60. Youhei Yamaji and Masatoshi Imada, "Composite fermion theory for pseudogap phenomena and superconductivity in underdoped cuprate superconductors", *Phys. Rev. B*, 83, 214522 (2011).
 61. Moyuru Kurita, Youhei Yamaji, and Masatoshi Imada, "Topological Insulators from Spontaneous Symmetry Breaking Induced by Electron Correlation on Pyrochlore Lattices", *J. Phys. Soc. Jpn.*, 80, 044708 (2011).
 62. Yuto Ito, Youhei Yamaji, and Masatoshi Imada, "Stability of Unconventional Superconductivity on Surfaces of Topological Insulators", *J. Phys. Soc. Jpn.*, 80, 063704 (2011).

63. Kazuma Nakamura, Ryotaro Arita, and Hiroaki Ikeda, "First-principles calculation of transition-metal impurities in LaFeAsO", *Phys. Rev. B*, **83**, 144512 (2011).
64. Taichi Kosugi, Takashi Miyake, Shoji Ishibashi, Ryotaro Arita, and Hideo Aoki, "Ab initio electronic structure of solid coronene: Differences from and commonalities to picene", *Phys. Rev. B*, **84**, 020507 (R) (2011).
65. Taichi Kosugi, Takashi Miyake, Shoji Ishibashi, Ryotaro Arita, and Hideo Aoki, "First-principles structural optimization and electronic structure of the superconductor picene for various potassium doping levels", *Phys. Rev. B*, **84**, 214506 (2011).
66. Shun Konbu, Kazuma Nakamura, Hiroaki Ikeda, and Ryotaro Arita, "Fermi-Surface Evolution by Transition-Metal Substitution in the Iron-based Superconductor LaFeAsO", *J. Phys. Soc. Jpn.*, **80**, 123701 (2011).
67. Luciano Ortenzi, Silke Biermann, Ole Krogh Andersen, I. I. Mazin, and Lilia Boeri, "Competition between electron-phonon coupling and spin fluctuations in superconducting hole-doped CuBiSO", *Phys. Rev. B*, **83**, 100505 (2011).
68. C. Martins, L. Vaugier, M. Aichhorn, S. Biermann, "Reduced effective spin-orbital degeneracy and spin-orbital ordering in paramagnetic transition metal oxides: Sr₂IrO₄ versus Sr₂RhO₄", *Phys. Rev. Lett.*, **107**, 266404 (2011).
69. R. Sakuma, C. Friedrich, T. Miyake, S. Blugel and F. Aryasetiasan, "GW calculations with spin-orbit coupling: application to Hg chalcogenides", *Phys. Rev. B*, **84**, 085144 (2011).
70. Taichi Kosugi, Takashi Miyake and Shoji Ishibashi, "Slab Thickness Dependence of Rashba Splitting on Au (111) surface: First-principles and Model Analyses", *J. Phys. Soc. Jpn.*, **80**, 074713 (2011).
71. R. Arita, J. Kuneš, A.V. Kozhevnikov, A.G. Eguiluz, M. Imada, "Ab initio Studies on the Interplay between Spin-Orbit Interaction and Coulomb Correlation in Sr₂IrO₄ and Ba₂IrO₄", *Phys. Rev. Lett.*, **108**, 086403 (2012).
72. Hiroshi Shinaoka, Takahiro Misawa, Kazuma Nakamura, Masatoshi Imada, "Mott Transition and Phase Diagram of κ -(BEDT-TTF)₂Cu(NCS)₂ Studied by Two-Dimensional Model Derived from Ab initio Method", *J. Phys. Soc. Jpn.*, **81**, 034701 (2012).
73. Yuto Ito, Youhei Yamaji, and Masatoshi Imada, "Impurity Effects on Superconductivity on Surfaces of Topological Insulators", *J. Phys. Soc. Jpn.*, **81**, 084707 (2012).
74. Shiro Sakai, Giorgio Sangiovanni, Marcello Civelli, Yukitoshi Motome, Karsten Held, Masatoshi Imada, "Cluster-size dependence in cellular dynamical mean-field theory", *Phys. Rev. B*, **85**, 035102 (2012).
75. Takahiro Misawa, Kazuma Nakamura, and Masatoshi Imada, "Ab initio Evidence for Strong Correlation Associated with Mott Proximity in Iron-based Superconductors", *Phys. Rev. Lett.*, **108**, 177007 (2012).
76. Motoaki Hirayama, Takashi Miyake and Masatoshi Imada, "Ab-initio Low-Energy Model of Transition-Metal-Oxide Heterostructure LaAlO₃/SrTiO₃", *J. Phys. Soc. Jpn.*, **81**, 084708 (2012).
77. Kazuma Nakamura, Yoshihide Yoshimoto, Masatoshi Imada, "Ab initio two-dimensional multiband low-energy models of EtMe₃Sb[Pd(dmit)₂]₂ and κ -(BEDT-TTF)₂Cu(NCS)₂ with comparisons to single-band models", *Phys. Rev. B* **86**, 205117(1-9) (2012).
78. Ryosuke Akashi, Kazuma Nakamura, Ryotaro Arita, Ryotaro and Masatoshi Imada, "High-temperature superconductivity in layered nitrides β -Li_xMNCl (M = Ti, Zr, Hf): Insights from density functional theory for superconductors", *Phys. Rev. B* **86**, 054513(1-16) (2012).
79. Yusuke Nomura, Merzuk Kaltak, Kazuma Nakamura, Ciro Taranto, Shiro

- Sakai, Alessandro Toschi, Ryotaro Arita, Karsten Held, Georg Kresse, and Masatoshi Imada, "Effective on-site interaction for dynamical mean-field theory", *Phys. Rev. B* 86, 085117 (1-8) (2012).
80. Shun Konbu, Kazuma Nakamura, Hiroaki Ikeda, and Ryotaro Arita, "Effects of transition-metal substitution in the iron-based superconductor LaFeAsO: Momentum- and real-space analysis from first principles", *Solid State Communications*, 152, 728-734 (2012).
 81. Y. Nomura, K. Nakamura, and R. Arita, "Ab initio derivation of electronic low-energy models for C60 and aromatic compounds", *Phys. Rev. B*, 85, 155452 (2012).
 82. Xiaoyu Deng, Michel Ferrero, Jernej Mravlje, Markus Aichhorn, Antoine Georges, "Hallmark of strong electronic correlations in LaNiO₃: photoemission kink and broadening of fully occupied bands", *Phys. Rev. B*, 85, 125137 (2012).
 83. J. Mravlje, M. Aichhorn, A. Georges, "Origin of the high Neel temperature in SrTcO₃", *Phys. Rev. Lett.* 108, 197202 (2012).
 84. M. Casula, A. Rubtsov, S. Biermann, "Dynamical screening effects in correlated materials: plasmon satellites and spectral weight transfers from a Green's function ansatz to extended dynamical mean field theory", *Phys. Rev. B*, 85, 035115 (2012).
 85. Philipp Werner, Michele Casula, Takashi Miyake, Ferdi Aryasetiawan, Andrew J. Millis, and Silke Biermann, "Satellites and large doping and temperature dependence of electronic properties in hole-doped BaFe₂As₂", *Nature Phys.* 8, 331-337 (2012).
 86. Jan M. Tomczak, Michele Casula, Takashi Miyake, F. Aryasetiawan and S. Biermann, "Combined GW and dynamical mean field theory: Dynamical screening effects in transition metal oxides", *Euro. Phys. Lett.* 100, 67001 (2012).
 87. M. Casula, Ph. Werner, L. Vaugier, F. Aryasetiawan, T. Miyake, A. Millis, and S. Biermann, "Low-energy models for correlated materials: bandwidth renormalization from Coulombic screening", *Phys. Rev. Lett.* 109, 126408 (2012).
 88. Thomas Ayrar, Philipp Werner, Silke Biermann, "Spectral Properties of Correlated Materials: Local Vertex and Non-Local Two-Particle Correlations from Combined *GW* and Dynamical Mean Field Theory", *Phys. Rev. Lett.* 109, 226401 (2012).
 89. Loig Vaugier, Hong Jiang, Silke Biermann, "Hubbard *U* and Hund's Exchange *J* in Transition Metal Oxides: Screening vs. Localization Trends from Constrained Random Phase Approximation", *Phys. Rev. B* 86, 165105 (2012).
 90. F. Aryasetiawan, R. Sakuma, and K. Karlsson, "GW approximation with self-screening correction", *Phys. Rev. B*, 85, 035106 (2012).
 91. Taichi Kosugi, Takashi Miyake, and Shoji Ishibashi, "First-principles Electronic Structure of Superconductor Ca₄Al₂O₆Fe₂P₂: Comparison with LaFePO and Ca₄Al₂O₆Fe₂As₂", *J. Phys. Soc. Jpn.*, 81, 014701 (2012).
 92. Hiromasa Ohnishi, Taichi Kosugi, Takashi Miyake, Shoji Ishibashi and Kiyoyuki Terakura, "Spin-canting in lightly electron-doped CaMnO₃", *Phys. Rev. B*, 85, 165128 (2012).
 93. Hiroshi Shinaoka, Takashi Miyake and Shoji Ishibashi, "Noncollinear magnetism and spin-orbit coupling in 5d pyrochlore oxide Cd₂Os₂O₇", *Phys. Rev. Lett.*, 108, 247204 (2012).
 94. R. Sakuma, T. Miyake and F. Aryasetiawan, "Self-energy and spectral function of Ce within the GW approximation", *Phys. Rev. B* 86, 245126 (2012).
 95. A. Georges, L. de Medici, J. Mravlje, "Strong electronic correlations from Hund's coupling", *Annu. Rev. Cond. Matt. Phys.* 4, 137 (2013).

96. X. Deng, J. Mravlje, R. Zitko, M. Ferrero, G. Kotliar, A. Georges, “How bad metals turn good: spectroscopic signatures of resilient quasiparticles”, *Phys. Rev. Lett.* 110 086401 (2013).
97. Philipp Hansmann, Loig Vaugier, Hong Jiang, Silke Biermann, “What about U on surfaces? -- Extended Hubbard Models for Adatom Systems from First Principles”, accepted for publication in *J. Phys.: Cond. Matt.* 25, 094005 (2013).
98. Jan M. Tomczak, L. Poyurovskii, L. Vaugier, A. Georges, S. Biermann, “Colours from First Principles: Heavy-Metal vs. Rare-Earth Pigments”, *Proc. Nat. Ac. Sc. USA* (2013).
99. N. Xu, P. Richard, A. van Roekeghem, P. Zhang, H. Miao, W. - L. Zhang, T. Qian, A. Sefat, M. Ferrero, S. Biermann, and H. Ding, “Electronic band structure of BaCo₂As₂: a fully-doped ferropnictide with reduced electronic correlations”, *Phys. Rev. X* 3, 011006 (2013).
100. T. Ayrál, S. Biermann, Ph. Werner, “Screening and Non-local Correlations in the Extended Hubbard Model from Self-Consistent Combined GW and Dynamical Mean Field Theory”, *Phys. Rev. B* 87, 125149 (2013).
101. T. Miyake, C. Martins, R. Sakuma and F. Aryasetiawan, "Effects of k-dependent self-energy in the electronic structure of correlated materials", *Phys. Rev. B* 87, 115110 (2013).
102. Masatoshi Imada, Shiro Sakai, Youhei Yamaji, and Yukitoshi Motome, “Theory of Pseudogap in Underdoped Cuprates”, submitted to *J. Phys.: Conf. Ser.*
103. S. Sakai, S. Blanc, M. Civelli, Y. Gallais, M. Cazayous, M.-A. Measson, J. S. Wen, Z. J. Xu, G. D. Gu, G. Sangiovanni, Y. Motome, K. Held, A. Sacuto, A. Georges, and M. Imada, “Exploring the dark side of cuprate superconductors: s-wave symmetry of the pseudogap”, submitted to *Phys. Rev. Lett.* (arXiv: 1207.5070)
104. P. Hansmann, T. Ayrál, L. Vaugier, P. Werner, S. Biermann, “Long-range Coulomb interactions in surface systems: A first-principles description within self-consistently combined GW and dynamical mean-field theory”, *Phys. Rev. Lett.* in press.
105. V. Brouet, Ping-Hui Lin, Y. Texier, J. Bobroff, A. Taleb-Ibrahimi, P. Le Fevre, F. Bertran, M. Casula, P. Werner, S. Biermann, F. Rullier-Albenque, A. Forget, D. Colson, “Large temperature dependence of the number of carriers in Co-doped BaFe₂As₂”, *Phys. Rev. Lett.* in press.

(2)その他の著作物(総説、書籍など)

1. 今田正俊, 常行真司, 「電子相関の精緻な取り扱い」, 日本物理学会誌, 64, No.4, pp.283-290, 2009.
2. 三宅 隆, アリアセティアワン フェルディ, 「電子励起の定量的記述:GW 近似とベーター・サルピータ方程式」, 日本物理学会誌 64, No.4, pp.276-282, 2009.
3. J. M. Tomczak, A. I. Poteryaev, and S. Biermann, “Momentum-resolved Spectroscopy of Correlated Metals: A View from Dynamical Mean Field Theory”, *Comptes rendus Physique*, 10, 537-547 (2009).
4. M. Imada and T. Miyake, “Electronic structure calculation by first principles for strongly correlated electron systems”, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **79**, 112001 (2010).
5. 今田正俊, 「誌上セミナー 第一原理計算手法による強相関電子系の電子状態の解明(その1)概観」, 『固体物理』, Vol.46, pp.351-356, 2011.
6. 三宅隆, 今田正俊, 「誌上セミナー 第一原理計算手法による強相関電子系の電子状態の解明(その2)相関の強い電子系のための第一原理計算手法とその展開」, 『固体物理』, Vol.46, pp.499-506, 2011.
7. 今田正俊, 三宅隆, 「誌上セミナー 第一原理計算手法による強相関電子の電子状態の

- 解明(その3)有効模型へ」,『固体物理』,Vol.47, pp. 113 - 119, 2012.
8. U. Bovensiepen, S. Biermann, L. Perfetti, “The electronic structure of solids, in Spectroscopies of surfaces”, edited by M. Wolf, U. Bovensiepen et al., *Dynamics at Solid State Surfaces and Interfaces, vol. 2: Fundamentals*, Wiley-VCH, Berlin, 2012, pp. 1-25.
 9. 今田正俊, 三宅隆, 「誌上セミナー 第一原理計算手法による強相関電子の電子状態の解明(その4) ダウンフォールディングの吟味とその精緻化」,『固体物理』, Vol.47, pp.469-474, 2012.
 10. 今田正俊他,『岩波科学計算科学3 計算と物質』, 岩波書店, 2012 (共著).

(3)国際学会発表及び主要な国内学会発表

① 招待講演 (国内会議 15 件、国際会議 125 件)

(国内会議)

1. 三宅隆(産総研), 「強相関電子系の第一原理電子状態計算」, 2009 年日本物理学会秋季大会シンポジウム, 熊本大学, 熊本, 2009 年 9 月 26 日.
2. 今田正俊(東京大学), 「量子多体系と計算物性物理学」, 次世代スーパーコンピュータ・物質と宇宙の起源と構造 素核宇宙分野融合にむけて, 小柴ホール, 東京, 2010 年 3 月 16 日.
3. 今田正俊(東京大学), 「擬ギャップを生む複合フェルミオンと非フェルミ液体/超伝導」, 日本物理学会 2011 年秋季大会, 富山大学五福キャンパス, 2011 年 9 月 21 日-24 日.
4. 三澤貴宏(東京大学), 「強相関電子系に対する第一原理有効模型の解析」, CMSI 若手技術交流会, 理化学研究所計算科学研究機構(神戸), 2011 年 7 月 7 日-8 日.
5. 三澤貴宏(東京大学), 「有機導体における電子相関効果 -モット転移とその臨界性-」, 有機固体若手の会 冬の学校 2011, 北海道 定山溪, 2011 年 12 月 16 日-17 日.
6. 三澤貴宏(東京大学), “Electronic correlations around commensurate filling other than half-filling - 鉄系超伝導体、近藤格子系を例にして -”, 強相関電子系理論の最前線 - 若手によるオープン・イノベーション -, 紀伊勝浦, 2011 年 12 月 21 日-23 日.
7. 中村和磨(東京大学), 「第一原理計算に基づく有効模型導出と高精度模型解析-鉄系超伝導体の低エネルギー物性に対する強相関アプローチからの考察」, 鉄系高温超電導の物理, 京都大学基礎物理学研究所, 2011 年 6 月 17 日.
8. 中村和磨(東京大学), 「第一原理からの物質の低エネルギー有効模型構築」, 山形大学物性セミナー, 山形大学, 2011 年 7 月 1 日.
9. 中村和磨(東京大学), 「第一原理有効模型導出のための RPA コードの大規模並列化」, CMSI 若手技術交流会, 理化学研究所計算科学研究機構, 2011 年 7 月 7 日.
10. 中村和磨(東京大学), 「物質の有効模型」, 強相関電子系理論の最前線-若手によるオープン・イノベーション-, 勝浦観光ホテル, 2011 年 12 月 21 日.
11. 三宅隆(産総研), 「多体摂動論に基づいた物質の電子構造計算」, 次世代スパコン「HPCI 戦略プログラム分野2x5異分野交流研究会」, 筑波大学, 2011 年 7 月 26 日.
12. 三宅隆(産総研), 「第一原理計算による相関物質科学のフロンティア」, 物性研究所計算物質科学研究センター第1回シンポジウム-「京」と大型実験施設の連携に向けて-, 東京大学物性研究所, 2011 年 9 月 13 日.
13. 中村和磨(九州工業大学), “金属系の第一原理GW計算”, 第2回 強相関電子系理論の最前線 -若手によるオープン・イノベーション-, 勝浦観光ホテル, 2012 年 12 月 13 日-15 日.
14. 三宅隆(産総研), “第一原理計算による磁石材料の物性解明”, 物性研究所 計算物質科学研究センター 第2回シンポジウム ~実験・計測・計算連携の新展開~, 東京大学物性研究所, 2012 年 10 月 23 日.
15. 三宅隆(産総研), “QMAS を用いた先進事例紹介:スピン軌道相互作用の実装と応用”, 第一原理計算コード OpenMX, QMAS, TOMBO セミナー, 産業技術総合研究所関西セ

ンター, 大阪府池田市, 2013年3月15日.

(国際会議)

1. M.Imada (東京大学), “When Landau and Lifshitz Meet -Unconventional Quantum Criticality-”, Yukawa International Seminar on ‘Interaction and Nanostructural Effects in Low-Dimensional Systems’, Kyoto, Jpan, November 21, 2007
2. A. Georges (Ecole Polytechnique), “Momentum-Space Differentiation and Nodal / Antinodal Dichotomy in Cuprates”, Gordon Conference on Superconductivity, September, 2007.
3. A. Georges (Ecole Polytechnique), “Electronic Structure of Strongly Correlated Materials with Dynamical Mean-Field Theory: Overview and Challenges”, Conference on Computational Physics (CCP2007), Bruxelles, Belgium, September 5-8, 2007.
4. T. Miyake (産総研), “Wannier Function Approach to Many-Body Problems”, the 10th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN10), Higashi-Hiroshima, October 29, 2007.
5. M. Imada (東京大学), “Two-Dimensional Hubbard Model and High-Tc Superconductivity”, at the March Meeting of the American Physical Society, New Orleans, March 12, 2008.
6. M. Imada (東京大学), “Computational Methods in Strongly Correlated Electron Systems –Challenges in Condensed Matter Physics –”, 1st International Conference on the Grand Challenge to Next-Generation Integrated Nanoscience, on ‘Development & Application of Advanced High-Performance Supercomputer’ Project, Tokyo, Japan, June 5-7, 2008.
7. M. Imada (東京大学), “Mott Transitions”, at the workshop ‘Frontiers in Correlated Electron Physics’, Aspen Institute of Physics, Aspen, Colorado, USA, August-September 2008.
8. M. Imada (東京大学), “Low-Energy Excitations near Quantum Phase Transitions”, at the 10th German-Japanese Symposium, Ringberg Castle, Germany, September 30, 2008.
9. M. Imada (東京大学), “Electron-Hole Pockets, Fermi Arc, Unusual Metal and Mott Transition”, at the 2nd International Symposium on ‘Anomalous Quantum Materials and the 7th Asia-Pacific Workshop’, Univ. of Tokyo, Tokyo, November 10, 2008.
10. R. Arita (東京大学), “First-Principles Study of the Electronic Structure of the Iron-Based Pnictides”, Miniworkshop on ‘Strong Correlations in Materials and Atom Traps’, Trieste, Italy, August 4-15, 2008.
11. R. Arita (東京大学), “Possible Unconventional Pairing Originating from Disconnected Fermi Surfaces in Iron-Pnictide Superconductors”, Beijing International Workshop on ‘Iron (Nickel)-Based Superconductors’, Beijing, China, October 17-19, 2008
12. R. Arita (東京大学), “Unconventional Superconductivity in Iron Pnictides: A Study Based on ab initio Downfolding”, The 11th Asian Workshop on ‘First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN11)’, Kaohsiung, Taiwan, November 2-5, 2008.
13. R. Arita (東京大学), “Unconventional Pairing Originating from Disconnected Fermi Surfaces in Iron-Pnictide Superconductors”, on ‘FeAs High Tc Superconducting Multilayers and Related Phenomena’, Rome Italy, December 9 -12, 2008.
14. A. Georges (Ecole Polytechnique), “Two Energy Scales and the Nodal-Antinodal Dichotomy in Underdoped Superconducting Cuprates”, the

- March Meeting of the American Physical Society, New Orleans, March 12, 2008.
15. A. Georges (Ecole Polytechnique), “Electronic Structure of Iron Pnictides: sensitivity to Structural Changes”, First International Conference on Iron Pnictide Superconductors, Tokyo, Japan, June, 2008.
 16. A. Georges (Ecole Polytechnique), “Momentum-Space Differentiation and Nodal / Antinodal Dichotomy in Cuprates”, Conference in Honor of P.Lederer, Orsay, France, June, 2008.
 17. A. Georges (Ecole Polytechnique), Workshop on Electronic Structure of Correlated Materials, Weihai, China, July, 2008.
 18. A. Georges (Ecole Polytechnique), “Quantum Theory of Condensed Matter” 24th Solvay Conference, Brussels, Belgium, September, 2008.
 19. A. Georges (Ecole Polytechnique), “Materials with Strong Correlations and the Mott Transition”, Photo Induced Phase Transitions (PIPT2008), Osaka, Japan, October, 2008.
 20. S. Biermann (Ecole Polytechnique), “Materials Design using Correlated Oxides -- or Why Intelligent Windows may look Dirty”, at the International Conference on Quantum Simulators and Design 2008, Tokyo, June, 2008.
 21. S. Biermann (Ecole Polytechnique), “Materials Design using Correlated Oxides -- or Why Intelligent Windows may look Dirty”, the Workshop on ‘Correlations and Electronic Structure Calculations’, Weihai, China, July, 2008.
 22. S. Biermann (Ecole Polytechnique), “Dynamical Mean Field Theory -- Current Status and Future Directions”, Hartree Centre Workshop, Manchester, UK, July, 2008.
 23. S. Biermann (Ecole Polytechnique), “Introduction to GW+DMFT”, the workshop ‘Frontiers in Correlated Electron Physics’, Aspen Institute of Physics, Aspen, Colorado, USA, August-September, 2008.
 24. S. Biermann (Ecole Polytechnique), “Electronic Correlations Solids beyond the local density approximation”, the Summer School on Nanomagnetism and Spintronics, Charles University, Prag, Czech Republic, September, 2008.
 25. S. Biermann (Ecole Polytechnique), “Materials Design using Correlated Oxides -- or Why Intelligent Windows may look Dirty”, the SFB Workshop on ‘Ordering Phenomena in Transition Metal Oxydes’, Augsburg, Germany, October, 2008.
 26. F. Aryasetiawan (産総研), “Calculating the Hubbard U from First-Principles: Constrained RPA”, International Workshop on Computational Physics and Materials Science, Bonn, Germany, January 11, 2008.
 27. F. Aryasetiawan (産総研), “Bridging the Gap between First-Principles and Model Approaches”, 1st International Conference of the Grand Challenge to Next-Generation Integrated Nanoscience, Odaiba, Tokyo, June 5-7, 2008.
 28. F. Aryasetiawan (産総研), “Constrained RPA Calculations of the Hubbard U”, International Workshop on Recent Developments in Electronic Structure, University of Illinois at Urbana-Champaign, USA, June 18-20, 2008.
 29. F. Aryasetiawan (産総研), “First-Principles Methods in Materials Science”, MP2 Summer School 2008, Univ. of Gothenburg, Sweden, August 18-23, 2008.
 30. M. Imada (東京大学), “Electronic Structure Calculation of Strongly Correlated Electron Systems”, at the International Workshop on ‘Supercomputing in Solid State Physics 2009’, Kashiwa, Japan, February 16-19, 2009.
 31. M. Imada (東京大学), “Fermi Arc, Hole Pocket and Pseudogap”, at ‘CORPES09’, Zurich, Switzerland, July 23, 2009.
 32. M. Imada (東京大学), “Unconventional Quantum Criticality Emerging as a

- New Common Language of Transition-Metal Oxides, Heavy-Fermion Compounds, and Organic Conductors” at ‘The 18th International Conference on Magnetism’, Karlsruhe, Germany, July 28, 2009.
33. M. Imada (東京大学), “Electronic Structure Calculation of Real Strongly Correlated Materials”, The 12th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations, Beijing, China, Oct. 26-28, 2009.
 34. R. Arita (東京大学), “Magnets Comprising Non-Magnetic Elements”, on ‘Psi-k Workshop on Magnetism in Complex Systems’, Vienna, Oesterreich, April 16-18, 2009.
 35. R. Arita (東京大学), “Unconventional Superconductivity in Iron Pnictides : LDA+RPA Study”, KITPC Program ‘Iron-Based High Tc Superconductors’, Beijing, China, May 18-Jun 5, 2009.
 36. R. Arita (東京大学), “Does Fermi Surface Nesting Favor an $s\pm$ Wave Pairing in Iron-Based Superconductors?: An LDA+RPA/FLEX Study” on ‘Physics on Transition Metal Based Superconductors’, Sendai, Jun 24- 26, 2009.
 37. R. Arita (東京大学), “Unconventional Superconductivity in Iron Pnictides: A Study Based on *ab initio* Downfolding with Maximally Localized Wannier Functions” on ‘Frontiers in Density Functional Theory’, New York, September 13-17, 2009.
 38. Antoine Georges (Ecole Polytechnique), “Dynamical mean-field theory”, school on “Modern theories of correlated electron systems”, Les Houches, France, May 25, 2009.
 39. Antoine Georges (Ecole Polytechnique), “Nodal/antinodal dichotomy in cuprate superconductors: a valence-bond dynamical mean-field approach”, ‘Emergence of Inhomogeneous Phases in Strongly Correlated Electron Systems (Glassy ‘09)’, Paris, France, July, 2009.
 40. Antoine Georges (Ecole Polytechnique), “Key Puzzled from HTS CUPRATES: A View from Theory”, at the ICMR summer school on ‘Novel Superconductors’, UCSB, Santa Barbara (USA), August 13, 2009.
 41. Antoine Georges (Ecole Polytechnique), “Nodal/antinodal Dichotomy in Cuprate Superconductors: A Valence-Bond Dynamical Mean-Field Approach”, KITP Program: ‘HigherTc09’, UCSB, Santa Barbara, August 20, 2009.
 42. S. Biermann (Ecole Polytechnique), “Hedin's Equations and Spin-Dependent Interactions”, at the Mini-Symposium ‘Advances in Magnetism and Strong Correlations’, Uppsala, Sweden, February, 2009.
 43. S. Biermann (Ecole Polytechnique), “Materials Design using Correlated Oxides – or Why Intelligent Windows May Look Dirty”, at the Mini-Symposium ‘Electronic Structure’, Uppsala, Sweden, March, 2009.
 44. S. Biermann (Ecole Polytechnique), “Electronic Structure of Correlated Materials --a Dynamical Mean Field Perspective”, at the Workshop ‘Statistical Physics and Low Dimensional Physics (SPLD 2009)’, Nancy, France, May, 2009.
 45. S. Biermann (Ecole Polytechnique), “On f-Electrons in Oxypnictides, Dirty Windows and on U”, at the Workshop ‘QTS 5: Quantum Theory of Solids’, University of Aarhus, Danmark, May, 2009.
 46. S. Biermann (Ecole Polytechnique), “Electronic Structure of Correlated Materials --a Dynamical Mean Field Perspective”, at the ‘Functional Oxide Platform Workshop’, University of Leuven, Belgium, June, 2009.
 47. S. Biermann (Ecole Polytechnique), “Developments of LDA+DMFT”, at the Conference ‘ES09: Recent Developments in Electronic Structure’, Univ. of California at Davis, USA, June, 2009.

48. S. Biermann (Ecole Polytechnique), "Realistic DMFT calculations for transition metal oxides and pnictides", at the Workshop 'Recent Developments in Dynamical Mean Field Theory' at ETH Zuerich, September, 2009.
49. S. Biermann (Ecole Polytechnique), 'From Basic Concepts to Real Materials', Kavli Institute for Theoretical Physics, UCSB Santa Barbara, USA, November, 2009.
50. F. Aryasetiawan (産総研), "Effective Coulomb interaction and downfolded self-energy of many-electron systems", in 'From basic concepts to real materials', Kavli Institute, University of California, Santa Barbara, USA, November 2-6, 2009.
51. F. Aryasetiawan (産総研), "Constrained RPA method for calculating the Hubbard U", in 'Conference on Computational Physics', Kaohsiung, Taiwan, December 15-19, 2009.
52. M. Imada (東京大学), "Electronic structure of correlated electron systems revealed by first principles method: Fe-based superconductors and organic conductors", International Symposium on 'Novel states in correlated condensed matter – from model systems to real materials', Berlin, March 2, 2010.
53. M. Imada (東京大学), "Two Families of Superconductors, Cuprates and Iron-Based Superconductors", International Workshop on "Properties of high temperature superconductors", Munchen, Germany, April 13-15, 2010.
54. M. Imada (東京大学), "Low-energy excitations around novel quantum phase transitions and novel quantum phases", International Workshop on Statistical Physics of Quantum Systems, Tokyo, Japan, August 2-4, 2010.
55. M. Imada (東京大学), "Emergent Mott Physics", Opening Symposium of QS2C Theory Forum, RIKEN, Saitama, Sep. 27-30, 2010.
56. R. Arita (東京大学), "Toward tailor-made correlation in Zeolites", Towards Material Design using Strongly Correlated Electron Systems, Kavli Institute for Theoretical Physics, Santa Barbara, Jan. 5-March 12, 2010.
57. R. Arita (東京大学), "LDA+FLEX study of Fe-based superconductors based on ab-initio downfolding", European Workshop on Electronic structure of Fe-based superconductors, Max Planck Institute for Solid State Research, Stuttgart, May. 10-12, 2010.
58. S. Biermann (Ecole Polytechnique), "Materials Design using Correlated Systems -- where do we stand?" -- at the APS March meeting 2010, Portland, March 17, 2010.
59. T. Miyake (産総研), "Constructing low-energy models of correlated materials from first-principles", KITP workshop 'Towards Material Design Using Strongly Correlated Electron Systems', Santa Barbara, January 13, 2010.
60. T. Miyake (産総研), "Ab-initio low-energy model and quasiparticle band structure based on the GW-RPA", Topical Meeting of RIKEN-ASI Theory Forum "Advanced First-Principles Calculations and Many-Body Effects in Correlated Electrons", Riken, Wako, Saitama, September 2, 2010.
61. F. Aryasetiawan (産総研), "Downfolding the many-electron problem into a low energy model", in 'Materials by Design', Kavli Institute, University of California, Santa Barbara, USA, February 8-12, 2010.
62. F. Aryasetiawan (産総研), "Downfolded self-energy of many-electron systems and the Hubbard U", in 'Theoretical Spectroscopy: density functional theory and beyond for real materials', Regensburg, Germany, March 22-26, 2010.
63. F. Aryasetiawan (産総研), "Downfolding the many-electron problem to a low-energy model", in "Realistic Theories of Correlated Electrons in Condensed Matter", Moscow, Russia, August 1-8, 2010.
64. F. Aryasetiawan (産総研), "Constructing a first-principles scheme for

- calculating the electronic structure of correlated materials”, in “2010 Topical Meeting of QS2C Theory Forum”, RIKEN, Wako, Saitama, Japan, September 2, 2010.
65. F. Aryasetiawan (産総研), “Systematic construction of low-energy models”, in Psik conference, Berlin, Germany, September 12-17, 2010.
 66. M. Imada (東京大学), “Renewed Understanding on Mott Transitions”, APS March meeting, Dallas, U.S.A, March 21-25, 2011.
 67. Masatoshi Imada (東京大学), “Topological transitions and topological insulators”, Tokyo-Cologne Workshop on Strongly Correlated Transition-Metal Compounds, The University of Cologne, September 7-10, 2011
 68. Masatoshi Imada (東京大学), “Electron-correlation physics of iron-based superconductors”, International Workshop on Electronic Correlations in Models and Materials, Augsburg, Germany, September 15, 2011.
 69. Masatoshi Imada (東京大学), “Topological transitions and topological insulators”, The 26th Nishinomiya-Yukawa Memorial International Workshop "Novel Quantum States in Condensed Matter 2011 (NQS2011)", Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto Univeristy, November 22, 2011.
 70. Masatoshi Imada (東京大学), “Topological Transitions and Topological Insulators”, The 16th International Conference on Recent Progress in Many Body Theories (RPMBT16), Bariloche, Argentina, November 28-December 2, 2011.
 71. Masatoshi Imada (東京大学), “Topological Insulators and Topological Transitions”, The FIRST-QS²C Workshop on "Emergent Phenomena of Correlated Materials", Okinawa, December 12-15, 2011.
 72. Takahiro Misawa (東京大学), “Ab initio low-energy models in iron-based supeconductors studied by variational Monte Carlo method: Role of electron correlation and origin of small magnetic ordered moment in LaFeAsO”, Villa Conference on Iron Pnictide Superconductors, Las Vegas, USA, April 21-25, 2011.
 73. Takahiro Misawa (東京大学), “Variational Monte Carlo study of strongly correlated electron systems”, Japan-Swiss Workshop, New Electronic Properties through Structure and Correlation, Swiss ETH, September 16-18, 2011.
 74. Ryotaro Arita (東京大学), "Design of d1, d7, and J=1/2 analogs of cuprates from first principles", KIAS workshop on Frontiers in Condensed matter physics, Korea institute for advanced study, Korea, May 9-12, 2011.
 75. Ryotaro Arita (東京大学), "Impurity effects in iron-based superconductors", Ringberg Symposium on High Temperature Superconductivity, Schloss Ringberg, Germany, May 16-19, 2011.
 76. Ryotaro Arita (東京大学), "Mechanism of high Tc superconductivity in layered nitride superconductors: Insights from DFT for superconductors", Tokyo-Cologne Workshop on Strongly Correlated Transition-Metal Compounds, Cologne, Germany, September 7-9, 2011.
 77. Ryotaro Arita (東京大学), "Alkali-metal loaded zeolites: Relativistic and correlated s electron systems", Zurich Theoretical Physics Colloquium, Zurich, Switzerland, October 31, 2011.
 78. Ryotaro Arita (東京大学), "Mechanism of high Tc superconductivity in layered nitride superconductors: Insights from DFT for superconductors", Novel Quantum States in Condensed Matter 2011 (NQS2011), Kyoto, Japan, December 5-9, 2011.
 79. Kazuma Nakamura (東京大学), Ryotaro Arita, Yoshiro Nohara, Takehito Nakano, Yasuo Nozue, “Ab initio Derivation of Correlated Superatom Model

- for Potassium Loaded Zeolite A”, 16th International Symposium on Intercalation Compounds, Czech Republic, May 23, 2011.
80. S. Biermann (Ecole Polytechnique), “Strong correlations from First Principles ? – A Dynamical Mean Field Viewpoint”, Invited talk at the Vienna Computational Materials (ViCom) workshop, Wien, Austria, April, 2011.
 81. S. Biermann (Ecole Polytechnique), “Local moment behavior versus Kondo screening of the 4f-electrons in rare-earth iron oxypnictides”, Invited talk at the ESF Pnictide Workshop, Bad Schandau, Germany, May, 2011.
 82. S. Biermann (Ecole Polytechnique), “Electronic Correlation in Solids – what is it and how to tackle it”, Invited lecture at the “Electronic Structure Summer School”, FHI Berlin, Germany, July, 2011.
 83. S. Biermann (Ecole Polytechnique), “Effective Orbital Degeneracy” (and Reduction thereof) in Correlated Materials”, Invited lecture at the Summer School Multiorb 2011-- Multiband and Multiorbital Effects in Novel Materials, Cargèse, Corsica Island, August, 2011.
 84. S. Biermann (Ecole Polytechnique), “Dynamical Mean Field Theory and its Extensions: First Principles Calculations for Correlated Materials”, Invited talk at the CECAM Workshop “Perspectives and Challenges of Many-Particle Methods: Efficient Strategies and Tools for the Description of Complex Systems”, Bremen University, Germany, September, 2011.
 85. T. Miyake (産総研), “Electronic structure and correlation effects in iron-based superconductors”, The 14th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations, Univ. Tokyo, November 1, 2011.
 86. F. Aryasetiawan (産総研), "The 6th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-6)", Singapore, September 6-9, 2011. Org. Feng Yuan-Ping.
 87. F. Aryasetiawan (産総研), "Electronic structure of novel materials", Ringberg castle, Germany, September 11-14, 2011. Org. Olle Gunnarsson.
 88. F. Aryasetiawan (産総研), "Juelich Autumn School on Hands-on DMFT", Juelich, Germany, October 4-7, 2011. Org. Eva Pavarini.
 89. Masatoshi Imada (東京大学), “Ab initio studies of strongly correlated electron systems”, The 19th International Conference on Magnetism with Strongly Correlated Electron Systems, Busan, Korea, July 11, 2012.
 90. Masatoshi Imada (東京大学), “Spin-orbit interactions, topological insulators and topological transitions”, The 12th Japanese-German Symposium, Emergent Phenomena in Novel Quantum Phases of Condensed Matter, Izu, Japan, July 15, 2012.
 91. Masatoshi Imada (東京大学), “Correlation Effects and Spin-Orbit Interaction”, the 2012 Summer Program of the Aspen Center for Physics, Spin-Orbit Physics in Correlated Electron Systems, Aspen, U.S.A., July 20, 2012.
 92. Masatoshi Imada (東京大学), “Theory of pseudogap in underdoped cuprates”, The 12th International Conference on Materials & Mechanisms of Superconductivity, Washington D.C., August 2, 2012.
 93. Masatoshi Imada (東京大学), “Dynamical mean-field approach on doped Mott insulators and cuprate superconductors”, Dynamical Mean-Field Approach for Strongly Correlated Materials, Dresden, Germany, September 27, 2012.
 94. Masatoshi Imada (東京大学), “Quantum Monte Carlo for strongly correlated systems”, Conference on Computational Physics (CCP2012), Kobe, Japan, October 15, 2012.
 95. Masatoshi Imada (東京大学), “Iron-based Superconductors”, Workshop on Novel Materials: Adding material-specific reality in physicists' models, Natal, Brazil,

December 11, 2012.

96. Takahiro Misawa (東京大学), "Ab initio study of iron-based superconductors -Roles of electron correlation and large Mott proximity-", International Conference on Heavy Electrons and Novel Quantum Phases, Gyeongju KyoYuk MunHwa HoeKwan, Gyeongju, July 5, 2012.
97. Ryotaro Arita (東京大学), "Interplay between Spin-Orbit Interaction and Coulomb Correlation in Sr₂IrO₄ and Ba₂IrO₄", RIKEN-APW-joint workshop Recent trends in condensed matter physics, Wako, Japan, January 14-16, 2012.
98. Ryotaro Arita (東京大学), "From large short-time to small long-time magnetic moments in Fe-based superconductors: A LDA+DMFT study", Workshop on superconductivity in iron-based compounds (funded by the DFG Priority Program SPP 1458), Munich, Germany, March 21-23, 2012.
99. Ryotaro Arita (東京大学), "LDA+DMFT study on dynamical screening of the local magnetic moment in LaFeAsO", 2012 Villa Conference on iron-based superconductors, Florida, USA, April 16-20, 2012.
100. Ryotaro Arita (東京大学), "High-temperature Superconductivity in Layered Nitrides: Insights from Density-functional Theory for Superconductors", ISSP-CMSI international symposium on Material Simulation in Petaflops era (MASP2012), Kashiwa, Japan, July 2, 2012.
101. R. Arita (東京大学), "Density functional theory for superconductors and its application to layered nitride superconductors", Innovations in strongly correlated electronic systems: School and Workshop, Trieste, Italy, August 6-17, 2012.
102. R. Arita (東京大学), "LDA+DMFT study on the interplay between spin-orbit interaction and Coulomb correlation in Sr₂IrO₄ and Ba₂IrO₄", International workshop on Dynamical Mean-Field Approach for Strongly Correlated Materials, Dresden, Germany, September 25-28, 2012.
103. R. Arita (東京大学), "SCDFT study of high T_c nitride superconductors", 25th International Symposium on Superconductivity, Tokyo, Japan, December 3-5, 2012.
104. Kazuma Nakamura (東京大学), "Effective model from first principles", PGI-1 Seminar, Jülich, Germany, February 9, 2012.
105. Kazuma Nakamura (東京大学), "The G₀ dependence of low-energy model: GGA, Hartree, Hartree-Fock starting points", JST-CREST program "High-accuracy hierarchical and many-body schemes for materials simulations", Paris, France, June 25-26, 2012.
106. Kazuma Nakamura (東京大学), "Ab initio low-energy model for organic materials; About spin liquid on EtMe₃Sb[Pd(dmit)₂]₂", International Symposium on CompuTics: Quantum Simulation and Design (ISC-QSD), Osaka University Hall, Japan, Oct, 11-13, 2012.
107. A. Georges (Ecole Polytechnique), "Not only U, also J: Hund's correlated materials", CECAM Workshop "What about U? -- Corrective approaches to DFT for strongly correlated systems", Lausanne, Switzerland, June 2012.
108. A. Georges (Ecole Polytechnique), "Transport in correlated materials", International Workshop Dynamical Mean Field Approach for Strongly Correlated Materials, Dresden, Sept. 2012.
109. S. Biermann (Ecole Polytechnique), "Electronic Structure Calculations for Correlated Materials: Towards an ab initio View on Correlated Surface Systems", invited talk at the Workshop "Novel topics in Surfaces and Interfaces", Synchrotron SOLEIL, Saint Aubin, January 12-13, 2012.
110. S. Biermann (Ecole Polytechnique), "Electronic Structure of Correlated Materials: a Dynamical Mean Field Perspective", Joint SFP-NTU workshop,

- Singapore, January 2012.
111. S. Biermann (Ecole Polytechnique), "Materials Design using Correlated materials -- where do we stand?" Minisymposium New Challenges in Electronic Structure Theory, Stuttgart, January 2012.
 112. S. Biermann (Ecole Polytechnique), "First principles calculations for iron pnictide related compounds: Towards a description of bosonic excitations and electron-boson coupling", invited talk at the APS March Meeting, Boston, February 27 - March 2, 2012.
 113. S. Biermann (Ecole Polytechnique), "Dynamical mean field theory and electronic structure calculations", ATHENA summer school, Bose Institute, Kolkata, India, April 2012.
 114. S. Biermann (Ecole Polytechnique), "Electronic structure calculations for correlated materials: Dynamical screening effects in iron pnictide compounds", "Statistical Physics and Low Dimensional Systems 2012", Pont a Mousson, France, May 2012.
 115. S. Biermann (Ecole Polytechnique), "Electronic Structure Calculations for Correlated Materials -- from 3d to 4d to 5d", Psik Research Workshop on Computational Oxide Spintronics, Cranage Hall, Cheshire, UK, May 2012.
 116. S. Biermann (Ecole Polytechnique), "Dynamical mean field theory and extensions: First principles calculations for correlated materials", CECAM Workshop Efficient localised orbitals for large systems, strong correlations and excitations, Cambridge, July 2012.
 117. S. Biermann (Ecole Polytechnique), "Dynamical screening effects in correlated materials", International Workshop Dynamical Mean Field Approach for Strongly Correlated Materials, Dresden, Sept. 2012.
 118. S. Biermann (Ecole Polytechnique), "The combined GW+DMFT method", School Bandstructure meets many-body theory, Vienna, Austria, Sept. 2012.
 119. S. Biermann (Ecole Polytechnique), "Electronic Structure Calculations for Correlated Materials: where do we stand?", CCP2012, Kobe, Japan, October 2012.
 120. S. Biermann (Ecole Polytechnique), "What about U? -- First principles calculations for correlated materials", International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design (ISC-QSD), Osaka, Japan, October 2012.
 121. T. Miyake (産総研), "Dynamically screened Coulomb interaction and GW self-energy in transition metal compounds", "Frontiers of Electronic Structure Theory: Strong Correlations from First Principles" in the spring meeting of the German Physical Society, Berlin, March 30, 2012.
 122. T. Miyake (産総研), "Dynamic screening and nonlocal self-energy effects in 3d compounds", The CECAM workshop: "What about U? – Corrective approaches to DFT for strongly correlated systems", Lausanne, Switzerland, June 19, 2012.
 123. F. Aryasetiawan (産総研), "Effective Coulomb interaction of Many-Electron Systems", The CECAM workshop: "What about U? – Corrective approaches to DFT for strongly correlated systems", Lausanne, Switzerland, June 18-21, 2012.
 124. Youhei Yamaji (東京大学), "Mott Physics on Edge Transports of Topological Insulators Induced by Strong Spin-orbit Couplings", International Symposium on Computational Science 2013, Kanazawa University, Kanazawa, Japan, February 19, 2013.
 125. R. Arita (東京大学), "Magneto-Orbital Effect Without Spin-Orbit Interactions in a Noncentrosymmetric Zeolite-templated Carbon Structure", The 3rd

② 口頭発表 (国内会議 58 件、国際会議 29 件)

(国内会議)

1. 三宅 隆 (産総研), 「材料の光吸収、バンドギャップを正確に計算する」, 計算科学シンポジウム—計算科学はイノベーションに寄与できるか—, 丸の内, 東京, 2007 年 12 月 12 日.
2. 田原大資, 今田正俊 (東京大学), 「多変数変分波動関数を用いた二次元ハバード模型の数値的研究」, 日本物理学会第 63 回年次大会, 近畿大学, 大阪, 2008 年 3 月 23 日.
3. 田原大資, 今田正俊 (東京大学), 「多変数変分波動関数を用いた三角格子上の拡張ハバード模型の研究」, 日本物理学会 2008 年秋季大会, 岩手大学, 岩手, 2008 年 9 月 22 日.
4. 中村和磨 (東京大学), 小杉太一, 吉本芳英, 有田亮太郎 (東京大学), 今田正俊 (東京大学), 「強相関電子系に対する第一原理計算: GW-based ab initio downfolding 法の開発と実装」, 日本物理学会年会, 近畿大学, 大阪, 2008 年 3 月 23 日.
5. 中村和磨 (東京大学), 「第一原理計算に基づく新超伝導体 LaFeAsO の低エネルギー有効模型の導出」, 日本物理学会秋季大会, 岩手大学, 岩手, 2008 年 9 月 20–23 日.
6. 藤本義隆, 是常隆, 三宅隆 (産総研), 斎藤晋, 押山淳, 「シリコンとゲルマニウムの四配位新物質」, 日本物理学会 2008 年秋季大会, 岩手大学, 岩手, 2008 年 9 月 23 日.
7. 中本光則, 今田正俊 (東京大学), 「ガウス基底モンテカルロ法によるフラストレートした 2 次元ハバード模型の解析」, 日本物理学会第 64 回年次大会, 立教大学, 東京, 2009 年 3 月 27 日.
8. 中村和磨 (東京大学), 吉本芳英, 小杉太一, 有田亮太郎 (東京大学), 今田正俊 (東京大学), 「 κ -(BEDT-TTF)₂Cu(NCS)₂ および κ -(BEDT-TTF)₂Cu₂(CN)₃ の第一原理有効模型」, 日本物理学会第 64 回年次大会, 立教大学, 2009 年 3 月 28 日.
9. 有田亮太郎 (東京大学), 中村和磨 (東京大学), A. Toschi, P. Hansmann, G. Sangiovanni, K. Held, 「鉄砒素系超伝導体母物質の反強磁性状態について」, 日本物理学会年会第 64 回年次大会, 立教大学, 東京, 2009 年 3 月 27 日–30 日.
10. 三澤貴宏 (東京大学), 中村和磨 (東京大学), 今田正俊 (東京大学), 「多変数変分波動関数を用いた鉄砒素系超伝導体に対する有効模型の解析」, 日本物理学会 2009 年秋季大会, 熊本大学, 熊本, 2009 年 9 月 26 日.
11. 品岡寛 (東京大学), 中村和磨 (東京大学), 今田正俊 (東京大学), 「 κ -(BEDT-TTF)₂X の第一原理有効模型の数値解析」, 日本物理学会 2009 年秋季大会, 熊本大学, 熊本, 2009 年 9 月 26 日.
12. 明石遼介, 今田正俊 (東京大学), 「多体相関変数の導入によるガウス基底モンテカルロ法の改良」, 日本物理学会 2009 年秋季大会, 熊本大学, 熊本, 2009 年 9 月 28 日.
13. 三宅 隆 (産総研), 有田亮太郎 (東京大学), 「第一原理 GW 法に基づいた LaFeAsO の電子構造」, 日本物理学会第 64 回年次大会, 立教大学, 東京, 2009 年 3 月 28 日.
14. 酒井志朗 (東京大学), 中村和磨 (東京大学), 有田亮太郎 (東京大学), 三宅 隆 (産総研), 今田正俊 (東京大学), 「動的遮蔽の評価と低エネルギー有効模型の妥当性について」, 日本物理学会, 第 65 回年次大会, 岡山大学, 2010 年 3 月 20 日.
15. 平山元昭 (東京大学), 三宅 隆 (産総研), 今田正俊 (東京大学), 「第一原理ダウンフォールディング法による LaAlO₃/SrTiO₃ 界面低エネルギー有効模型の LaAlO₃ 層数依存性の研究」, 日本物理学会, 第 65 回年次大会, 岡山大学, 2010 年 3 月 21 日.
16. 三宅 隆 (産総研), 中村和磨 (東京大学), 有田亮太郎 (東京大学), 今田正俊 (東京大学), 「鉄系超伝導体の第一原理有効模型の導出とファミリー依存性」, 日本物理学会, 第 65 回年次大会, 岡山大学, 2010 年 3 月 21 日.
17. 山地洋平, 今田正俊 (東京大学), 「トポロジカル絶縁体における電子相関効果」, 日本物理学会秋季大会, 大阪府立大学, 2010 年 9 月 23 日.

18. 山地洋平, 今田正俊(東京大学), 「モット絶縁相近傍における擬ギャップの複合フェルミオン描像」, 日本物理学会秋季大会, 大阪府立大学, 2010年9月26日.
19. 中村和磨(東京大学), 吉本芳英, 野原善郎, 今田正俊(東京大学), 「空間次元を縮約するための第一原理 downfolding 法の開発: LaFeAsO および κ -(BEDT-TTF)₂X への応用」, 日本物理学会 秋季大会, 大阪府立大学, 2010年9月23-27日.
20. 品岡寛(産総研), 三澤貴宏(東京大学), 中村和磨(東京大学), 今田正俊(東京大学), 「層間スクリーニング効果を含めた κ -(BEDT-TTF)₂X の第一原理有効モデルの数値解析」, 日本物理学会 秋季大会, 大阪府立大学, 2010年9月23-27日.
21. 品岡寛(産総研), 今田正俊(東京大学), 「Mott-Anderson 転移近傍における電気伝導の理論的研究: κ 型ET塩FETに対する実験結果との比較」 日本物理学会 2010年秋季大会, 大阪府立大学, 2010年9月24日.
22. 中村和磨(東京大学), 有田亮太郎(東京大学), 池田浩章, 「鉄系超伝導体の不純物ポテンシャルの第一原理計算」, 日本物理学会 秋季大会, 大阪府立大学, 2010年9月23-27日.
23. 三澤貴宏(東京大学), 中村和磨(東京大学), 今田正俊(東京大学), 「多変数量子数射影変分モンテカルロ法を用いた強相関電子系の有効モデルの解析」, CMSI第一部会物性グループ研究会, 東京大学, 2010年11月1日.
24. 三宅隆(産総研), Markus Aichhorn, Silke Biermann, Angoigne Georges(Ecole Polytechnique), 今田正俊(東京大学), 「LDA+DMFT法によるFeSeにおける電子相関効果の解析」, 日本物理学会 2010年秋期大会, 大阪府立大学, 2010年9月25日.
25. 佐久間怜, 三宅隆(産総研), C. Friedrich, S. Bügel, F. Aryasetiawan(産総研), 「4d,5d電子系の第一原理グリーン関数計算」, 日本物理学会2010年秋季大会, 大阪府立大学, 2010年9月25日.
26. 小杉太一, 三宅隆(産総研), 石橋章司, 有田亮太郎(東京大学), 青木秀夫, 「K ドープピセンの電子状態の第一原理計算」, 日本物理学会 2010年秋季大会, 大阪府立大学, 2010年9月26日.
27. 三澤貴宏(東京大学), 中村和磨(東京大学), 今田正俊(東京大学), 「次元縮約第一原理ダウン フォールディング法を用いて導出された鉄砒素系超伝導体の有効モデルの数値解析」, 日本物理学会 第66回年次大会(新潟大学五十嵐キャンパス, 2011年3月25日).
28. 三澤貴宏(東京大学), 中村和磨(東京大学), 今田正俊(東京大学), 「鉄系超伝導体の第一原理有効モデルの解析 -磁気秩序モーメントの物質依存性の解明-」, 鉄系高温超伝導の物理, 京都大学基礎物理学研究所, 2011年6月16日-17日.
29. 三澤貴宏(東京大学), 中村和磨(東京大学), 今田正俊(東京大学), 「次元縮約第一原理ダウンフォールディング法を用いて導出された鉄砒素系超伝導体の有効モデルの数値解析(2)」, 日本物理学会 2011年秋季大会, 富山大学五福キャンパス, 2011年9月21日-24日.
30. 有田亮太郎(東京大学), 「鉄系超伝導体のフェルミ面に対する電子相関の影響: LDA+DMFTによる解析」, 日本物理学会 2011年秋季大会, 富山大学五福キャンパス, 2011年9月21日-24日.
31. 明石遼介, 中村和磨(東京大学), 有田亮太郎(東京大学), 今田正俊(東京大学), 「超伝導密度汎関数理論による層状超伝導体 MNCl(M=Ti, Zr, Hf)の転移温度評価」, 日本物理学会 2011年秋季大会, 富山大学五福キャンパス, 2011年9月21日-24日.
32. 野村悠祐, 中村和磨(東京大学), 有田亮太郎(東京大学), 「芳香族超伝導体とフラウン超伝導体の有効モデルの比較」, 日本物理学会 2011年秋季大会, 富山大学五福キャンパス, 2011年9月21日-24日.
33. 中村和磨(東京大学), 吉本芳英, 今田正俊(東京大学), 「スピン液体 EtMe₃Sb[Pd(dmit)₂]₂ の第一原理有効モデル導出: 単一および二軌道モデルの比較」, 日本物理学会 2011年秋季大会, 富山大学五福キャンパス, 2011年9月21日-24日.
34. 小杉太一, 三宅隆(産総研), 石橋章司, 有田亮太郎(東京大学), 青木秀夫, 「様々な濃

- 度のKドーピングの第一原理的電子状態と構造最適化」, 日本物理学会 第66回年次大会, 新潟大学, 2011年3月26日.
35. 品岡寛(産総研), 小杉太一, 三宅隆(産総研), 石橋 章司, 「ワニエ関数表現に基づいたトポロジカル絶縁体の第一原理計算」, 日本物理学会 第66回年次大会, 新潟大学, 2011年3月28日.
 36. 今田正俊(東京大学), 「電子相関の強い現実物質の新機構解明と制御法開拓」, 第2回計算物質科学イニシアティブ (CMSI) 研究会, 東北大学 金属材料研究所, 2012年1月30-31日.
 37. 三澤貴宏(東京大学), 中村和磨(東京大学), 今田正俊(東京大学), 「多変数変分モンテカルロ法の応用 -鉄系超伝導体-, 強相関系に対する計算科学手法とその応用, 東京大学, 2012年1月27日-28日.
 38. 三澤貴宏(東京大学), 中村和磨(東京大学), 今田正俊(東京大学), 「鉄砒素系超伝導体におけるドーピングによる電子状態の変化」, 日本物理学会 第67回年次大会, 関西学院大学, 2012年3月24日-27日.
 39. 平山元昭, 三宅隆(産総研), 今田正俊(東京大学), 「第一原理ダウンフォールディング法による二重勘定項のない静的な有効モデルの導出」, 日本物理学会 2012年秋季大会, 2012年9月18-21日.
 40. 三澤貴宏(東京大学), 今田正俊(東京大学), 「第一原理電子状態計算法をもとにした高温超伝導体にたいする電子状態計算」, 第3回 CMSI 研究会~超並列計算が拓く新しい計算物質科学~, 自然科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター, 2012年12月3日.
 41. 三澤貴宏(東京大学), 山地洋平(東京大学), 「トポロジカル絶縁体におけるグリーン関数の零点」, 第6回物性科学領域横断研究会, 東京大学武田先端知センター, 2012年11月27日.
 42. 明石遼介, 中村和磨(東京大学), 有田亮太郎(東京大学), 「電子・ホール非対称系のための超伝導密度汎関数理論」, 日本物理学会 2012年秋季大会, 2012年9月18-21日.
 43. 野村悠祐, Merzuk Kaltaka, 中村和磨(東京大学), Ciro Taranto, 酒井志朗(東京大学), Alessandro Toschi, 有田亮太郎(東京大学), Karsten Held, Georg Kresse, 今田正俊, 「動的平均場理論に対する有効相互作用の第一原理的評価」, 日本物理学会 2012年秋季大会, 2012年9月18-21日.
 44. 宮原英之, 有田亮太郎(東京大学), 池田浩章, 「鉄系超伝導体の2体自己無撞着法による解析」, 日本物理学会 2012年秋季大会, 2012年9月18-21日.
 45. 中村和磨(東京大学), 野原善郎, 吉本芳英, 「第一原理有効モデルの G0 依存性」, 日本物理学会 2012年秋季大会, 横浜国立大学, 2012年9月18日.
 46. 小杉太一, 三宅隆(産総研), 石橋章司, 「Au(111)表面におけるラッシュバ分裂の膜厚依存性: 第一原理計算とモデルによる解析」, 日本物理学会 第67回年次大会, 関西学院大学, 2012年3月24日.
 47. 品岡寛(産総研), 三宅隆(産総研), 石橋章司, 「パイロクロア酸化物 $Cd_2Os_2O_7$ におけるノンコリニア磁性とスピン軌道相互作用の効果」, 日本物理学会 第67回年次大会, 関西学院大学, 2012年3月26日.
 48. 品岡寛(産総研), 三宅隆(産総研), 石橋章司, 「最局在ワニエ関数を用いたパイロクロア酸化物 $Cd_2Os_2O_7$ の電子構造の解析」, 日本物理学会 2012年秋季大会, 2012年9月18-21日.
 49. 木野日織, 石橋章司, 品岡寛(産総研), 三宅隆(産総研), 圓谷貴夫, 宮崎剛, 「圧力下の α -(BEDT-TTF) $2I_3$, α -(BETS) $2I_3$ の第一原理計算による Dirac cone の変化」, 日本物理学会 2012年秋季大会, 2012年9月18-21日.
 50. 栗田萌, 山地洋平(東京大学), 今田正俊(東京大学), 「ゼロギャップ半導体における電子相関がもたらす相転移と臨界現象の研究」, 日本物理学会 第68回年次大会, 広島大学, 2013年3月27日.

51. 山地洋平(東京大学), 今田正俊(東京大学), 「パイロクロア格子におけるゼロギャップ半導体と磁性」, 日本物理学会 第 68 回年次大会, 広島大学, 2013 年 3 月 27 日.
52. 三澤 貴宏(東京大学), 「第一原理電子状態計算法を用いた高温超伝導の機構解明」, 平成 24 年度「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題中間報告会, イノカンファレンスセンター, 東京, 2013 年 3 月 15 日.
53. 三澤貴宏(東京大学), 山地洋平(東京大学), 「トポロジカル絶縁体におけるグリーン関数の零点」, 日本物理学会 第 68 回年次大会, 広島大学, 2013 年 3 月 26 日.
54. 野村悠祐, 中村和磨(九州工業大学), 有田亮太郎(東京大学), 「電子格子相互作用項を含む低エネルギー模型の第一原理導出」, 日本物理学会第 68 回年次大会, 広島大学, 2013 年 3 月 26-29 日.
55. 明石遼介, 中村和磨(九州工業大学), 有田亮太郎(東京大学), 「動的電子遮蔽効果を考慮した超伝導密度汎関数理論」, 日本物理学会第 68 回年次大会, 広島大学, 2013 年 3 月 26-29 日.
56. 明石遼介, 有田亮太郎(東京大学), 「超伝導密度汎関数理論によるフラーレン超伝導体の転移温度計算」, 日本物理学会第 68 回年次大会, 広島大学, 2013 年 3 月 26-29 日.
57. 小杉太一, 三宅隆(産総研), 石橋章司, 「L10 型合金の磁気異方性の第一原理計算」, 日本物理学会第 68 回年次大会, 広島大学, 2013 年 3 月 26-29 日.
58. 大西宏昌, 三宅隆(産総研), 石橋章司, 寺倉清之, 「CaMnO₃/YAlO₃ 超格子の電子相関についての第一原理計算による研究」, 日本物理学会第 68 回年次大会, 広島大学, 2013 年 3 月 26-29 日.

(国際会議)

1. K. Nakamura (東京大学), T. Kosugi, Y. Yoshimoto, R. Arita (東京大学), and M. Imada (東京大学), “GW-based ab initio downfolding aiming at strongly correlated electron system”, the March Meeting of the American Physical Society, New Orleans, March 10, 2008.
2. K. Nakamura (東京大学), “*Ab initio* Low Energy Model of BEDT-TTF System: θ - and κ -BEDT-TTF”, International Conference on ‘Quantum Simulators and Design’, Tokyo, Japan, May 31-June 3, 2008.
3. K. Nakamura (東京大学), T. Kosugi, Y. Yoshimoto, R. Arita (東京大学), and M. Imada (東京大学), “*Ab initio* Derivation of Low-Energy Models for Organic Molecular Solids: Application to θ -(BEDT-TTF)₂CsZn(SCN)₄ and κ -(BEDT-TTF)₂Cu(SCN)₂” International Conference on Quantum Simulators and Design, Tokyo Japan May 31-June 3, 2008.
4. V. Vildosola (Ecole Polytechnique), “Electronic Structure of Iron Oxypnictides”, MPI Dresden, November 2008.
5. R. Sakuma, T. Miyake (産総研) and F. Aryasetiawan (産総研), “All-Electron GW Calculation of Vanadium Dioxide”, the March Meeting of the American Physical Society, New Orleans, March 13, 2008.
6. K. Nakamura (東京大学), R. Arita (東京大学), and M. Imada (東京大学), “Ab initio Effective Low-Energy Model of Iron-Based Superconductors: LaFeAsO and LaFePO” International Symposium on Intercalation Compounds, Beijing, China, May 10-14, 2009.
7. Y. Nohara, K. Nakamura (東京大学), and R. Arita (東京大学), “Ab initio spin density functional calculation for potassium loaded Zeolite A” 15th International Symposium on Intercalation Compounds, Beijing, China, May 10-14, 2009.
8. K. Nakamura (東京大学), T. Kosugi, Y. Yoshimoto, R. Arita (東京大学), and M. Imada (東京大学), “Ab initio Derivation of Low-Energy Model for κ -(BEDT-TTF)₂X [X=Cu(NCS)₂ and Cu₂(CN)₃]” International Symposium on

- Crystalline Organic Metals, Superconductors and Ferromagnets, Hokkaido-Niseko, September 9-17, 2009.
9. M. Casula (Ecole Polytechnique), "Screening and Hubbard interactions in strongly correlated materials", Second scientific meeting of the GDR MICO "Materiaux et Interactions en Competition", Aspet, France, October 2009.
 10. R. Sakuma, T. Miyake (産総研) and F.Aryasetiawan (産総研), "Self-consistent GW Approach Based on Loewdin's Orthogonalization", International Symposium of 'Electronic Structure Calculations – Theory, Correlated and Large Scale Systems and Numerical Methods' -, Tokyo, December 7, 2009.
 11. Y. Yamaji, and M. Imada (東京大学), "Strongly Correlated Models for Suprate Systems", APS Meeting, Portland, March 16, 2010.
 12. T. Misawa and M. Imada (東京大学), "Magnetic Properties of Low-Energy Effective Model for Iron-Based Superconductor LaFeAsO", APS Meeting, Portland, March 16, 2010.
 13. K. Nakamura (東京大学), T.Miyake (産総研), R. Arita and M. Imada (東京大学), "Comparison of *Ab initio* Low-Energy Models for LaFePO, LaFeAsO, BaFe₂As₂, LiFeAs, FeSe, and FeTe", American Physical Society March Meeting, Portland, March 17, 2010.
 14. R. Arita (東京大学), "Toward taylor-made correlation in Zeolites", Opening Symposium of QS2C Theory Forum, RIKEN, Saitama, September 27-30, 2010.
 15. Takashi Miyake (産総研), Kazuma Nakamura (東京大学), Ryotaro Arita (東京大学), and Masatoshi Imada (東京大学), "Comparison of *Ab initio* Low-Energy Model for LaFePO, LaFeAsO, BaFe₂As₂, LiFeAs, FeSe, and FeTe", American Physical Society, March Meeting, Portland, Oregon, USA, March 15-19, 2010.
 16. Kazuma Nakamura (東京大学), Yoshihide Yoshimoto, Yoshiro Nohara, and Masatoshi Imada (東京大学), "Ab initio Low-Dimensional Physics Opened Up by Constrained RPA for Energy and Space: Applications to LaFeAsO and κ-(BEDT-TTF)₂X", American Physical Society, March Meeting, Dallas, Texas, USA, March 21-25, 2011.
 17. M. Casula (Ecole Polytechnique), "Satellites and large doping- and temperature-dependence of electronic properties in hole-doped BaFe₂As₂", International Conference on Strong correlation from first principles, Monastery Seon, Germany, September 2011.
 18. T. Kosugi, T. Miyake (産総研), S. Ishibashi, R. Arita (東京大学) and H. Aoki, "First-principles electronic structure of aromatic superconductors: solid picene and coronene", International Conference of New Science Created by Materials with Nano Spaces: From Fundamentals to Applications, Sendai, November 24, 2011.
 19. Shiro Sakai (東京大学), "The dark side of cuprate superconductors: an s-wave pseudogap", 13th Journées de la Matière Condensée (JMC13), Montpellier, France, August, 27-31, 2012.
 20. Kazuma Nakamura (東京大学), "Effective model from first principles", PGI-1 Seminar, Juelich FORSCHUNGSZENTRUM, Germany, February 9, 2012.
 21. S. Biermann (Ecole Polytechnique), "Dynamical screening effects in correlated materials", Spring meeting of the Germany physical society (DPG), Berlin, Germany, March 2012.
 22. P. Hansmann (Ecole Polytechnique), "Adatom systems on the silicon 111-surface: Mott or not?", Spring Meeting of the German physical society, Berlin, Germany, March 2012.
 23. P. Hansmann (Ecole Polytechnique), "Correlation effects on group IV adatom systems on the Si(111)-surface: Mott or not?", CECAM Workshop "What about U? -- Corrective approaches to DFT for strongly correlated systems", Lausanne,

Switzerland, June 2012.

24. L. Vaugier (Ecole Polytechnique), "Hubbard U and Hund's J from the constrained Random Phase Approximation within a full-potential linearized augmented plane wave approach: trends for 3d and 4d transition metal perovskites", Spring Meeting of the German physical society, Berlin, Germany, March 2012.
25. T. Ayrat (Ecole Polytechnique), "GW+DMFT simulation of the UV-Hubbard model", Spring Meeting of the German physical society, Berlin, Germany, March 2012.
26. C. Martins (Ecole Polytechnique), "Reduced effective degeneracy and spin-orbital ordering in paramagnetic transition metal oxides", Spring Meeting of the German physical society, Berlin, Germany, March 2012.
27. H. Shinaoka (産総研), T. Miyake (産総研), S. Ishibashi, "First-principles study on electronic properties of the pyrochlore oxide $Cd_2Os_2O_7$ ", American Physical Society March Meeting, Boston, March 1, 2012.
28. Takahiro Misawa (東京大学) and Masatoshi Imada (東京大学), "Analyses of High-Temperature Superconductivity in Doped Hubbard Model --High-Precision Variational Monte Carlo Study--", APS March meeting 2013, Baltimore, USA, March 18, 2013.
29. M. Casula (Ecole Polytechnique), "Dynamical screening effects from first principles: implications for low-energy models and application to the iron pnictides", International Conference "Total Energy", Trieste, Italy, January 2013.

③ ポスター発表 (国内会議 7 件、国際会議 38 件)
(国内会議)

1. 佐久間怜, 三宅隆(産総研), F. Aryasetiawan(産総研), 「VO₂の第一原理計算」, 日本物理学会 第63回年次大会, 近畿大学, 2008年3月24日.
2. 三澤貴宏(東京大学), 中村和磨(東京大学), 今田正俊(東京大学), 「多変数量子数射影変分モンテカルロ法を用いた第一原理有効模型の解析 -鉄系新超伝導体への適用-」, CMSI 研究会: 第1部会「新量子相・新物質の基礎科学」, 岡崎コンファレンスセンター, 2010年11月12日.
3. 三澤貴宏(東京大学), 中村和磨(東京大学), 今田正俊(東京大学), 「第一原理ダウンフォールディング法を用いた鉄系新超伝導体の磁氣的性質の解明」, 第4回 物性科学領域横断研究会, 東京大学武田ホール, 2010年11月15日.
4. 三澤貴宏(東京大学), 中村和磨(東京大学), 今田正俊(東京大学), 「多変数変分モンテカルロ法を用いた鉄系超伝導体の有効模型の解析」, 物性研・CMSI・次世代ナノ情報合同研究会「計算物質科学の課題と展望」, 東京大学物性研究所, 2011年1月5日.
5. 三澤貴宏(東京大学), 品岡寛(産総研), 中村和磨(東京大学), 今田正俊(東京大学), 「強相関電子系の第一原理計算 -鉄系超伝導体と有機伝導体への適用-」, 第2回計算物質科学イニシアティブ(CMSI)研究会, 東北大学金属材料研究所, 2012年1月30日-31日.
6. 小杉太一, 三宅隆(産総研), 石橋章司, 有田亮太郎(東京大学), 青木秀夫, 「超伝導体ピセンの第一原理構造最適化と電子状態」, 第2回計算物質科学イニシアティブ研究会, 東北大学金属材料研究所, 2012年1月30日.
7. 小杉太一, 三宅隆(産総研), 石橋章司, 「ペロフスカイト型ブロック層を持つ新超伝導体 $Ca_4Al_2O_6Fe_2Pn_2$ ($Pn=As, P$) についての第一原理電子状態計算」, 第2回計算物質科学イニシアティブ研究会, 東北大学金属材料研究所, 2012年1月30日.

(国際会議)

1. K. Nakamura (東京大学), R. Arita (東京大学), and M. Imada (東京大学),

- “Low-energy Models for Superconductors: LaFeAsO and LaFePO”, The 2nd International Symposium on Anomalous Quantum Materials, (ISAQM2008) and the 7th Asia-Pacific Workshop, Tokyo, Japan, November 7-10, 2008.
2. R. Arita (東京大学), “Pudding-mold type band as the origin of large thermopower in transition metal oxides”, International Conference on Quantum Simulators and Design, Tokyo, Japan, May 31 - June 3, 2008.
 3. K. Nakamura (東京大学), “Ab initio derivation of low-energy models for iron-based superconductors LaOFeAs and LaOFeP”, International Conference on Quantum Simulators and Design, Tokyo, Japan, May 31 - June 3, 2008.
 4. J. M. Tomczak and S. Biermann (Ecole Polytechnique), “Multi-orbital effects in the optical properties of V2O3”, the International Conference on Quantum Simulators and Design 2008, Tokyo, June, 2008.
 5. C. Martins (Ecole Polytechnique) and S. Biermann (Ecole Polytechnique), “Band structure trends in CaFeO3 and SrFeO3”, the International Conference on Quantum Simulators and Design 2008, Tokyo, June, 2008.
 6. F. Aryasetiawan (産総研), and S. Biermann (Ecole Polytechnique), “Spin-dependent Hedin's equations”, Poster at the International Conference on ‘Quantum Simulators and Design 2008’, Tokyo, June, 2008.
 7. K. Nakamura (東京大学), “*Ab initio* Low-Energy Models: Alkali-Metals-Loaded-In-Sodalite and BEDT-TTF Systems”, Supercomputing in Solid State Physics 2009, Kashiwa, Japan, February 16-19, 2009.
 8. K. Nakamura (東京大学), R. Arita (東京大学), and T. Koretsune, “*Ab initio* Effective Low-Energy Model of Alkali-Cluster-Loaded Sodalites”, 15th International Symposium on Intercalation Compounds, Beijing, China, May 10-14, 2009.
 9. K. Nakamura (東京大学), T. Miyake (産総研), R. Arita (東京大学), and M. Imada (東京大学), “Ab initio Derivation of Low-Energy Model for Iron-Based Superconductors: LaFePO, LaFeAsO, BaFe2Se2, LiFeAs, FeSe, and FeTe”, 9th International conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity, Sinjuku, Tokyo, September 7-11, 2009.
 10. K. Nakamura (東京大学), T. Kosugi, Y. Yoshimoto, R. Arita (東京大学), and M. Imada (東京大学), “Ab initio Derivation of Low-Energy Model for κ -(BEDT-TTF)2X [X=Cu(NCS)2 and Cu2(CN)3]” International workshop on ‘Theories on Strongly Correlated Molecular Conductors’, Narita, Chiba, September 17-19, 2009.
 11. J. M. Tomczak, T. Miyake (産総研), and F. Aryasetiawan (産総研), “Effective Coulomb Interactions under pressure –Realistic many-body models for MnO”, AIST-Riken Joint Workshop on “Emergent Phenomena of Correlated Materials”, Okinawa, March 4-7, 2009.
 12. Takahiro Misawa (東京大学), Kazuma Nakamura (東京大学), and Masatoshi Imada (東京大学), “Magnetic Properties of /Ab initio/ Model for Iron-Based Superconductors LaFeAsO”, Opening Symposium of QS2C Theory Forum, RIKEN, Wako, Saitama, September 28, 2010.
 13. Yoshiro Nohara, Kazuma Nakamura (東京大学), and Ryotaro Arita (東京大学), “Magnetic phase diagram of potassium loaded zeolite A: An ab initio downfolding study”, Ψ k Conference 2010, Berlin, Germany, September 12-16, 2010.
 14. T. Kosugi, T. Miyake (産総研), S. Ishibashi, R. Arita (東京大学) and H. Aoki, “First-principles Calculation of Electronic Structure of Doped Solid Picene”, International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals 2010, Kyoto, July 4-9, 2010.
 15. Taichi Kosugi, Takashi Miyake (産総研), Shoji Ishibashi, Ryotaro Arita (東京大

- 学) and Hideo Aoki, "First-principles calculation of the electronic structure of doped solid picene superconductor", psi-k conference 2010, Berlin, September 12-16, 2010.
16. Rei Sakuma, Christoph Friedrich, Takashi Miyake (産総研), Stefan Blügel and Ferdi Aryasetiawan (産総研), "Spin-dependent GW approximation: GW calculation with spin-orbit coupling", psi-k conference 2010, Berlin, September 12-16, 2010.
 17. X. Deng (Ecole Polytechnique), "Hallmarks of strong electronic correlations in LaNiO₃: Photoemission kink and broadening of fully occupied bands", Summer school Multiorb2011 -- Multiband and Multiorbital Effects in Novel Materials, Cargese, August 1-13, 2011.
 18. T. Miyake (産総研) and T. Kosugi, S. Isibashi and K. Terakura, "First-principles Electronic Structure of Ca₄Al₂O₆Fe₂As₂ ", International Workshop on Novel Superconductors and Super Materials (NS2-2011), Tokyo, March 7, 2011.
 19. Taichi Kosugi, Takashi Miyake (産総研), Shoji Ishibashi, Ryotaro Arita (東京大学) and Hideo Aoki, "First-principles electronic structure of potassium-doped solid picene", 16th International Conference on Intercalation Compounds (ISIC16), Seč-Ústupy, Czech Republic, May 22-27, 2011.
 20. T. Miyake (産総研) and T. Kosugi, S. Isibashi and K. Terakura, "Electronic Structure of Ferronpnictide Superconductor Ca₄Al₂O₆Fe₂As₂ ", E-MRS 2011 Fall Meeting, Warsaw, September 19-23, 2011.
 21. T. Kosugi, T. Miyake (産総研), and S. Ishibashi, "Slab Thickness Dependence of Rashba Splitting on Au (111) surface: First-principles and Model Analyses", The 14th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations, Univ. of Tokyo, October 31-November 2, 2011.
 22. H. Shinaoka (産総研), T. Miyake (産総研) and S. Ishibashi, "First-principles study on the magnetism and metal-insulator transition in pyrochlore oxide Cd₂Os₂O₇", Novel Quantum States in Condensed Matter: Correlation, Frustration and Topology, Kyoto, November 7, 2011.
 23. Takahiro Misawa (東京大学), Kazuma Nakamura (東京大学), and Masatoshi Imada (東京大学), "Ab initio Evidence of Strong Correlation and Large Mott Proximity in Iron-based Superconductors", International conference of magnetism 2012, Busan, Korea, July 8-13, 2012.
 24. M. Hirayama, T. Miyake (産総研) and M. Imada (東京大学), "Derivation of Static Low-energy Effective Models by ab initio Downfolding Method without Double Counting of Coulomb Correlations", International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design (ISC-QSD, Osaka University Hall, Oct, 11-13, 2012.
 25. Shiro Sakai (東京大学), "s-wave pseudogap in high-Tc cuprates", International Workshop on Dynamical Mean-Field Approach for Strongly Correlated Materials (DMFT2012), Max Planck Institute for Chemical Physics of Solids, Dresden, September 25 - 28, 2012.
 26. Kazuma Nakamura (東京大学), Yoshiro Nohara, Yoshihide Yoshimoto, "Ab initio derivation of low-energy effective model based on Constrained many-body perturbation theory", International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design (ISC-QSD, Osaka University Hall, Oct, 11-13, 2012.
 27. Kazuma Nakamura (東京大学) and Masatoshi Imada (東京大学), "Massive parallelization of ab initio constrained RPA and GW codes", Conference on Computational Physics (CCP2012), Kobe, Japan, October 14-18, 2012.
 28. Kazuma Nakamura (九州工業大学), Yoshihide Yoshimoto, Masatoshi Imada (東京大学), "Ab initio low-energy models for organic materials", International

- Symposium on Material Science Opened by Molecular Degree of Freedom (MDF2012), Phoenix Seagaia Resort, Miyazaki, Japan, Dec. 1-4, 2012.
29. T. Ayral (Ecole Polytechnique), "Self-consistency, local vertex and satellite structures from a combined GW and dynamical mean field perspective", CECAM Workshop "What about U? -- Corrective approaches to DFT for strongly correlated systems", Lausanne, Switzerland, June 2012.
 30. J. Mralvje (Ecole Polytechnique), "Magnetism in Tc-perovskites", Spring Meeting of the German physical society, Berlin, Germany, March 2012.
 31. Taichi Kosugi, Takashi Miyake (産総研), and Shoji Ishibashi, "First-principles Electronic Structures of $\text{Ca}_4\text{Al}_2\text{O}_6\text{Fe}_2\text{P}_2$ and $\text{Ca}_4\text{Al}_2\text{O}_6\text{Fe}_2\text{As}_2$: Comparison of Fermi surfaces", International Conference on Superconductivity and Magnetism (ICSM2012), Istanbul, April 29- May 4, 2012.
 32. Hiromasa Ohnishi, Taichi Kosugi, Takashi Miyake (産総研), Shoji Ishibashi, and Kiyoyuki Terakura, "Metallic State Induced by Spin-Canting in Lightly Electron-Doped CaMnO_3 ", Frontiers in Electronic Materials: Correlation Effects and Memristive Phenomena, Aachen, Germany, June 17-20, 2012.
 33. Hiroshi Shinaoka (産総研), Takashi Miyake (産総研), and Shoji Ishibashi, "First-principles study on noncollinear magnetism and effects of spin-orbit coupling in 5d pyrochlore oxide $\text{Cd}_2\text{Os}_2\text{O}_7$ ", The international conference on Highly Frustrated Magnetism 2012, McMaster, June 4-8, 2012.
 34. Hiroshi Shinaoka (産総研), Takashi Miyake (産総研), and Shoji Ishibashi, "First-principles study on noncollinear magnetism and effects of spin-orbit coupling in 5d pyrochlore oxide $\text{Cd}_2\text{Os}_2\text{O}_7$ ", The 19th International Conference on Magnetism with Strongly Correlated Electron Systems, Busan, Korea, July 8-13, 2012.
 35. Hiroshi Shinaoka (産総研), Takashi Miyake (産総研), Shoji Ishibashi, "First-principles study on noncollinear magnetism and effects of spin-orbit coupling in 5d pyrochlore oxide $\text{Cd}_2\text{Os}_2\text{O}_7$ ", International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design (ISC-QSD, Osaka University Hall, Oct, 11-13, 2012.
 36. T. Kosugi, T. Miyake (産総研), S. Ishibashi, "First-principles electronic structures of iron-based superconductors $\text{Ca}_4\text{Al}_2\text{O}_6\text{Fe}_2\text{P}_2$ and $\text{Ca}_4\text{Al}_2\text{O}_6\text{Fe}_2\text{As}_2$ ", International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design (ISC-QSD, Osaka University Hall, Oct, 11-13, 2012.
 37. Hiroshi Shinaoka (産総研), "First-principles study on noncollinear magnetism and effects of spin-orbit coupling in 5d pyrochlore oxide $\text{Cd}_2\text{Os}_2\text{O}_7$ ", Conference on Computational Physics (CCP2012), Kobe, Japan, October 14-18, 2012.
 38. Hiroshi Shinaoka (産総研), "Unconventional spin-glass behaviors in pyrochlore Heisenberg antiferromagnets coupled with lattice distortions", Conference on Computational Physics (CCP2012), Kobe, Japan, October 14-18, 2012.

(4)知財出願

- ①国内出願 (0 件)
- ②海外出願 (0 件)
- ③その他の知的財産権
なし

(5)受賞・報道等

- ①受賞

| | |
|------------|--------------------------|
| 2011 年 1 月 | 三澤貴宏 CMSI ポスター賞、最優秀ポスター賞 |
| 2011 年 3 月 | 有田亮太郎 第 5 回日本物理学会若手奨励賞 |

2012年4月 有田亮太郎 文部科学大臣表彰 若手科学者賞
 2012年12月 森田悟史 CMSI 若手奨励賞
 2012年12月 金子隆威 CMSI ポスター賞

②マスコミ(新聞・TV等)報道

なし

③その他

なし

(6)成果展開事例

①実用化に向けての展開

なし

②社会還元的な展開活動

なし

§6 研究期間中の活動

| 年月日 | 名称 | 場所 | 参加人数 | 概要 |
|--------------------|---|----------------------------|------|---|
| 2008年1月 | JST-CREST program “High-accuracy hierarchical and many-body schemes for materials simulations” 1st collaborative general meeting - Tokyo, January 17-19, 2008 - | 東京 | 30名 | 本プロジェクトの国際キックオフミーティングであり、研究対象を絞り込んでいくために多数の実験家も招待し、興味ある実験研究についてもアドバイスを求めた。 |
| 2009年6月 | JST-CREST program “High-accuracy hierarchical and many-body schemes for materials simulations” 2 nd collaborative general meeting - Paris June 15-17, 2009 - | Ecole Polytechnique, Paris | 30名 | 本プロジェクトの国際ミーティングであり、日本と、フランスでの研究の進捗状況、共同研究の進め方を突っ込んで討論した。我々の手法の応用対象を開拓するため、キックオフのときと同様、多数の実験家を招待し、講演をもとに討論した。 |
| 2011年 3月9-11日 | International Meeting on high-accuracy hierarchical and many-body schemes for materials simulations sponsored by JST-CREST | 東京大学 | 30名 | 本プロジェクトの国際ミーティングであり、日本と、フランスでの研究の進捗状況、共同研究の進め方を突っ込んで討論した。我々の手法の応用対象を開拓するため、キックオフのときと同様、多数の実験家を招待し、講演をもとに討論した。 |
| 2012年 1月27日、28日 | 「強相関係に対する計算科学手法とその応用」に関する研究会 | 東京大学 | 60名 | 研究進捗報告のためのミーティング |
| 2012年 6月25-26日 | “High-accuracy hierarchical and many-body schemes for materials simulations”, | Ecole Polytechnique, Paris | 30名 | 本プロジェクトの国際ミーティングであり、日本と、フランスでの研究の進捗状況、共同研究の進め方を突っ込んで討論した。 |

| | | | | |
|--|-----------------------------------|--|--|--|
| | 4th collaborative general meeting | | | 我々の手法の応用対象を開拓するため、キックオフのときと同様、多数の実験家を招待し、講演をもとに討論した。 |
|--|-----------------------------------|--|--|--|