

科学研究費助成事業（基盤研究（S））研究進捗評価

| | | | |
|------|------------------------------|-------------------------------|-------------------------------------|
| 課題番号 | 16H06345 | 研究期間 | 平成28(2016)年度～令和2(2020)年度 |
| 研究課題 | 強相関物質設計と機能開拓 一非平衡系・非周期系への挑戦ー | 研究代表者 (所属・職) (令和4年3月現在) | 今田 正俊 (早稲田大学・理工学術院・上級研究員（研究院教授）) |

【令和元(2019)年度 研究進捗評価結果】

| 評価 | 評価基準 |
|----|--|
| ○ | A+ 当初目標を超える研究の進展があり、期待以上の成果が見込まれる |
| | A 当初目標に向けて順調に研究が進展しており、期待どおりの成果が見込まれる |
| | A- 当初目標に向けて概ね順調に研究が進展しており、一定の成果が見込まれるが、一部に遅れ等が認められるため、今後努力が必要である |
| | B 当初目標に対して研究が遅れており、今後一層の努力が必要である |
| | C 当初目標より研究が遅れ、研究成果が見込まれないため、研究経費の減額又は研究の中止が適当である |

(意見等)

本研究は、研究代表者らが以前に提案した強相関電子系の電子状態を第一原理的に解明する手法をより発展させることにより、熱平衡状態のみならず非平衡状態や非周期系までを系統的に解明するとともに、その研究成果を物質設計に応用して新たな機能性の開拓の実現を目指すものである。

これまでに計算手法の高精度化が着実になされており、銅酸化物高温超伝導体などへ適用することによって多くの重要な知見が得られている。さらに、当初計画にはなかった機械学習の手法が高精度計算や実験データの解析に有効であることが明らかになったことにより、今後、当初に期待した以上の成果が見込まれる。

【令和4(2022)年度 検証結果】

| 検証結果 | 当初目標に対し、期待以上の成果があった。 強相関電子系の中で、特に非平衡と非周期（表面、界面、準結晶）の効果が顕著に現れる系における物性発現機構の解明と機能開拓のための新しい計算手法の確立、並びに、それらのパッケージ化による公開と普及が行われた。これらの手法を光励起による非平衡高温超伝導、界面における高温超伝導、準結晶、トポロジカル物質界面などに適用し、超伝導を増強するための新機構の理論的提案などの当初計画に沿った研究成果を得た。また、スピン分類化を伴う量子スピン液体の理論的発見など、当初の計画を超える期待以上の研究成果も得た。 |
|------|--|
| A+ | |