

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 6 月 6 日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2014～2016

課題番号：26400357

研究課題名(和文) 超過程から発生する強相関量子物性の理論計算

研究課題名(英文) Theoretical calculations for quantum physics mediated by super processes in strongly correlated systems

研究代表者

草部 浩一 (Kusakabe, Koichi)

大阪大学・基礎工学研究科・准教授

研究者番号：10262164

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,600,000円

研究成果の概要(和文)：量子相転移に付随する超過程の決定計算技術を開発し、幾つかの量子相転移・量子多体効果を見出した。多配置参照密度汎関数法による超過程の理論により、計算有限性をもつ収束電子状態計算理論を与えた。磁氣的相互作用評価プログラムを開発し、アルゴリズム特許の取得と普及を進めた。高温超伝導体の物質依存性評価を進め、フェルミ面形状効果、バッファ層制御による転移温度上昇機構を発見した。多層系銅酸化物高温超伝導体の正孔分布を強相関効果として明らかにした。磁氣的超過程計算と近藤効果の評価を行って、ナノグラフェンにおける擬ギャップ近藤効果を見出した。ナノグラフェンの対称性からくる強相関一重項の保護機構を明らかにした。

研究成果の概要(英文)：We developed calculation methods of super processes appearing inevitably at each quantum phase transition. We found several quantum phase transition and quantum many-body effects. By means of the theory of super processes by the multi-reference density functional theory, we derived electronic structure calculation methods with convergence in finite steps. The program determining the magnetic interactions is given, whose algorithm is patented. Materials dependence of the high-temperature superconductors are verified via the Fermi-surface shape effect, and an enhancement mechanism owing to the buffer layers in cuprate is derived. The hole-doping profile of the multi-layered cuprate is found to be an electron correlation effect. The magnetic super process is evaluated for nano-graphene, where the pseudo-gap Kondo effect is derived. A topological protection effect for the correlated singlet in nano-graphene is derived.

研究分野：物性基礎論

キーワード：強相関電子系 強相関エレクトロニクス 計算物理 超伝導材料・素子 磁性

1. 研究開始当初の背景

(1) 超過程の出現と評価法の発見

我々は基盤研究 (C) 「密度汎関数変分法による遷移金属酸化物の電子状態計算」(平成23-25年度)で、密度汎関数理論を量子多体系の自己無撞着決定法として再定義する新方法に気付いた。有効多体系(モデル)を複数系統的に与えて、電子密度に関する収束列を定めたとき、厳密解と同一の物性を与える量子相がモデル空間で決定される。これは、草部・丸山の定理で保障される。この方法は、CI 基底の不完全性問題も解決する。驚いたことにこの数理解科学的帰結から、凝縮系物性を左右する「超過程」が自然と現れた。

超過程とは「系の表現を構築する際に必須の量子散乱過程」である。量子力学的表現を与える部分位相空間 (A 空間) の拡大に関してモデル列を秩序変数が与える距離について収束させる。このとき、A 空間から補空間の間に生じる量子過程が、『超過程』である。「磁性超交換相互作用」、「強相関超伝導ペア散乱」、「分散力」を超過程が与える。そこで、具体的な事例に適用した超過程の計算理論の構築が、極めて重要な課題となった。

(2) 超過程が生み出す高温超伝導体の機構

銅酸化物高温超伝導体では、超過程は超交換相互作用として、酸素媒介反強磁性超交換相互作用ばかりでなく、様々な軌道を媒介にする過程を与える。そこで、多層系銅酸化物の超伝導特性が解明されると期待できる。

(3) 超過程が生み出すナノ磁性の機構

磁性体の磁氣的超過程から有効遮蔽相互作用、分散力、量子ダイナミクスへと導く展開が得られる。ナノ磁性体に現れる強相関軌道が伝導性軌道群から近藤遮蔽を受ける詳細には、相互作用強度の増強効果、有効遮蔽軌道の発生、などの強電子相関効果が生じる。

(4) 超過程計算法の新規性と進歩性

我々の多配置参照密度汎関数法は、その収束判定条件の特徴に新規性と進歩性を有する。その特許が米国で成立したように (US patent No. 9, 292, 591 (2016)) 我々の方法が他に類を見ない電子状態計算法であることは、様々な形で証明されている。

2. 研究の目的

「量子相転移の最終決定には『超過程』の決定が伴う」という事実に基づき、磁気・超伝導等の量子相転移・量子多体効果を発見し、確定する。超過程を与える強相関電子系の標準模型を確定する。次の課題を解決する。

- (1) 超過程に関わる磁性、超伝導の決定アルゴリズムと高速計算プログラムの提供
- (2) 全エネルギー計算による原子配置決定を用いた強相関電子系物質の解明と予測
- (3) 層状高温超伝導体の超伝導メカニズム
- (4) 平均場近似で表記できない基底状態磁気相転移の決定
- (5) 遍歴及び局在電子状態とその超過程を物質構造から全て決定する計算法の確立

3. 研究の方法

(1) 数理解析・数値計算方法論の開発

超過程を与える強相関電子系の標準模型を導く。厳密な無限次摂動を扱うコヒーレント状態経路積分と連結クラスター展開により有効作用を導出する。この標準模型の理論は、多様な場の理論にも価値を与える。

多配置参照密度汎関数法に基づく多体摂動理論は、超過程を表現するグリーン関数の自己無撞着決定法を与え、さらにクラスター動的な平均場近似法、変分クラスター近似法、バーテックス補正した揺らぎ交換近似など多様な方法を位置づけることが出来る。自己無撞着GW近似、TPSCなども含む任意の多体摂動理論が包含される。プログラムの作成を行うことで、我々の方法の有効性を示す。

(2) 超伝導現象における超過程評価

水銀系銅酸化物高温超伝導体の元素置換による超伝導転移温度上昇機構の解明を行う。物質パラメータを変動させる元素置換効果を調べ、水銀系の近傍で、さらなる転移温度の上昇を見込めるか否かを検証する。

異常に高い転移温度をもつ層状超伝導体に対して、超過程解析を用いた評価を行う。鉄系、MNX 系等の2次元電子系の利用や、有機系超伝導体合成の新たな契機を与えるなど、インパクトが高いものになる。

(3) 磁性現象における超過程評価

低次元磁性系としての、有機系低次元物質や各種の銅酸化物に超過程計算を適用し、相互作用評価を行う。従来法の限界を打破する証明としてインパクトがある。遷移金属化合物、希土類化合物、グラフェン関連物質も取り上げ、近藤効果を導く。平均場近似の適用限界を明瞭にし、我々の収束電子状態計算によれば局在磁性評価が可能であることを示す。スピン・電荷・軌道の複合秩序が形成される低次元磁性体の電子状態解明を進める。

4. 研究成果

(1) 多配置参照密度汎関数法と超過程

① 超過程の理論

超過程を自己無撞着計算理論から導く厳密な理論を構築した。一意接続定理に基づいて逆写像定理を与え、厳密解に接続される有効モデル系列を発生させる。関連する公開特許には、US patent No. 9, 292, 591 (2016) が含まれる。定常状態の表現には、秩序変数の同定に基づく表現関数決定方程式の導入と、量子揺らぎ効果を発生する強相関軌道の同定、その表現を与えるモデル列の収束性の確認が必要である。部分空間を設定した量子系の表現には、二体相互作用項が一体項と非可換であることから不可避に部分空間を跨ぐ量子素過程が現れる。よって、表現列を求める我々の方法論の一般性が見いだされる。

多配置参照基底を張る A 空間と、その補空間の間の量子過程が、超過程である。補空間への遷移は、強い相関を発生する基底 (強相関軌道) から、非相関の直交補基底 (直交補

軌道)へ準粒子を遷移させる。この過程が強相関軌道にある準粒子数の減少を伴うことから、自己無撞着性を要求したレゾルベントの決定において、連立決定方程式(ダイソソ列)が閉じる根拠と、収束性が与えられる。

② グリーン関数論への波及

超過程の表現に現れるダイソソ方程式は、A空間の定義空間サイズと比較して、A空間内の有効ハミルトニアン定義に必要なレゾルベント(多体グリーン関数)にその表現空間サイズの減少を示す。よって、解法手続きに可算有限性がある。表現を与える有限量子多体系用の数値解法は、全て我々のモデル系の決定計算に応用可能である。

GW法相当の遮蔽相互作用評価法と頂点補正導入法、ベーテサルペータ方程式(BSE)による二体有効相互作用を、超過程計算から与える方法を整備し、従来のGW、BSEが我々の方法の近似的解法として与えられることを確認した。これにより、従来量子電磁力学(QED)の効果として計算上の困難が認識されてきた分散力の第一原理的評価を、定常状態に対しては可能とすることが出来た。

③ 超過程を示す電子系標準模型

量子電磁力学における相互作用電子系の表現を、共変光子グリーン関数を電子間相互作用核に導入して定めることが出来る。加えて、既存の制限RPA法やダウンフォールディング法がもつ収束性に関する原理的困難が、我々の方法では存在しないことを示した。我々の方法は、クォーク・グルーオン系など他のゲージ理論にも適用できる。

(2) 新型量子多体計算技法の構築

① 磁氣的相互作用評価用プログラムの開発

従来法が適用困難で本方法が改善法を与える特徴的な物質群は、高温超伝導体から強磁性材料、誘電性マルチフェロイック材料など多岐に渡る。そこで、鉄ヒ素系や希土類化合物等の複数の物質系の検討を進めた。磁性不純物中の局在電子系を典型例として考察した。強相関磁性状態を表す部分空間としてその相関軌道には量子揺らぎを発生する軌道群にとり、スペクトルの上下に現れる直交補軌道を考慮した場合に典型的に表れる磁氣的超過程に着目した。驚くべきことに、この状況はディラック型バンド分散の中央に局在性と強相関性の両者を示すゼロモードや平坦バンドがある系の磁氣的超交換相互作用と同じ形式である。従って、この強相関電子状態特有の磁氣的超過程は、注目されている複数の異なる系に共通した多体相互作用プロセスになっている。鉄セレンに関しては、超過程に加えて電子格子相互作用評価を開始し、良好な結果を得た。また、LaB₆中に希釈されて存在するCeの状態を評価し、相対論的密度汎関数法も援用しながら多重項の評価を行った。

② 量子電磁力学に立脚した相対論的表現

遷移金属磁性体では、多様な磁気秩序発生の起源に相対論効果がある。近年の強相関電

子系での実験成果から、このマイクロなスケールで運動発生する磁性体の光応答には、強い非局所性、強い相関効果が見出されている。一般の磁性体に対応できる形式に相互作用核から見直す方法論整備を図った。QEDに立脚する多配置参照密度汎関数法の整備の結果として、超過程評価法を与えるモデル汎関数の設定にはQEDの正則化法における発散除去相当の効果があることが分かってきた。さらに、物質の定常状態決定法を強相関電子系に対して与えることができる我々の方法は、定常状態をQED真空として与えることにより相互作用場の理論を自然に発生させることが出来る能力もある。

③ 量子ダイナミクス計算手法

強相関絶縁性物質中のエキシトン評価を行った。バイエキシトン評価プログラムと量子ダイナミクスプログラムを作成した。この評価方法を、一般の化合物半導体における最局在ワニエ関数の定義も援用した有効相互作用評価プログラムとして整備した。我々のレゾルベント表記に近似評価を導入すると、ダウンフォールディング法として知られる制限RPA計算に相当する有効相互作用評価を与えることが出来る。我々の方法では、さらに頂点補正、自己無撞着性、などを系統立てて評価に含めることが出来る。

この方法を基に量子ダイナミクス計算用プログラムの開発を進めた。有効相互作用を含む有効ハミルトニアンを整備して、エキシトンダイナミクスの表現法を整備した。

④ アルゴリズム特許の取得と普及

多配置参照密度汎関数法(特許第4918683号、第5447674号)の普及のため、アドバンスソフト株式会社と共同研究を行い、その波及として超過程計算プログラムの高速平面波展開法への移植方法を纏めた。各種技術公開イベントでの講演や実習を行った。

(3) 高温超伝導体の物質依存性評価

① フェルミ面形状効果による転移温度上昇機構と物質設計

水銀系銅酸化物高温超伝導体の元素置換による超伝導転移温度上昇機構の解明を目指し、カドミウム置換系を含む多層系銅酸化物高温超伝導体の理論評価を進めた。元素置換、圧力効果を考察し、フェルミ面形状因子と3d軌道間エネルギー準位差を指標として用いる評価に加えて、クーパーペアの2体クーロン相互作用起源層間ペアホッピング超過程を考慮して解析した。その結果、水銀系からのカドミウム全置換系でも水銀系やタリウム系に匹敵する高い超伝導転移温度が期待できることが分かった。

② バッファ層制御による転移温度上昇機構

超過程を自己無撞着計算理論から導く我々の方法に基づき、銅酸化物高温超伝導体のバッファ層依存性を調査した。3層水銀系に加え、タリウム系、カドミウム系には特に伝導バンドに共通した電子状態特性が見られる一方、結晶形が類似ながら30Kクラスの

金系では定性的な違いがバンド分散にある。

有効磁気交換散乱の評価プログラムを完成し、層状銅酸化物高温超伝導体に適用した。Hg系とTl系の差異がバッファ層起源の交換散乱超過程に起因することを明らかにして、報文に纏めた。(JPSJ 投稿中) 銅、酸素、そしてバッファ層中の金属に起因する3バンド系特有のこの交換散乱過程($J_{KK'}$)には、遮蔽直接散乱項(U)や酸素起源超交換相互作用(J)には現れない物質依存性が明瞭に表れるばかりか、バッファ層の制御による超伝導転移温度の増強が見込まれる。

この有効な超伝導強化機構は、Hg系では最適ドーパ量を与える酸素濃度で最も有効になるが、Tl一層系では強化が効かなく転位温度が半減すると予想される。これは、実験結果と整合する。この効果は、複数の銅酸化物高温超伝導体間での数十Kにおよぶ転移温度の変化を与える効果であると結論できる。

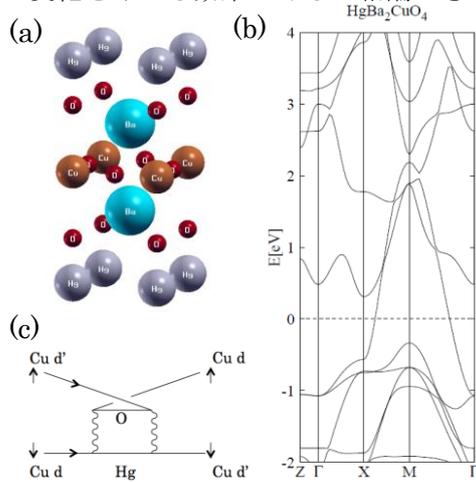


図 1 (a) 水銀一層系の結晶構造。(b) $\text{HgBa}_2\text{CuO}_4$ の電子バンド構造。フェルミ準位($E=0$)を跨ぐ分散が銅 $3d_{x^2-y^2}$ バンド。0.5eV 程度に HgO 由来のバンドがある。(c) HgO 由来のバンドを経由する磁氣的超過程のファインマン図。超伝導を強化する。Tl 系一層系では強い寄与を与えない。

③ 多層系銅酸化物高温超伝導体の正孔分布

3層以上の積層構造をもつ多層系銅酸化物では、バッファ層に隣接する outer plane とその内側にある inner plane をもつが、層ごとのマイクロな電子相が分かれて現れる。実験的には、outer plane と inner plane での正孔濃度が異なり、inner plane がハーフ・フィールドに近づいて強相関性が高まっている。が、従来型の密度汎関数理論計算ではこの電子濃度差が再現されない。我々は、TPSC 計算を適用することで、相関強度に自己無撞着な変化が現れ、結果として実験に対応する層ごとの正孔濃度が現れることを明らかにした。これは、銅酸化物高温超伝導体が強相関電子系であること、基本的な電子濃度の空間分布の再現の点でこの事実が現れていることを証明したものである。

④ 硫化水素超伝導体の電子状態

最近発見された最高転移温度を示す超伝導物質系の超過程評価も開始した。特に、近年発見された硫化水素高温超伝導体 H_3S のトポロジカル起源バンド縮退効果を明らかにして、Suhl-Kondo 機構との関連を日本物理学会で報告した。この SK 機構によるバンド間超伝導ペア散乱には、超過程を通した強い散乱機構が発生しうる。

(4) ナノ磁性体と光応答理論への展開

① 磁氣的超過程計算と近藤効果

永久磁石材料として、希土類系磁石の計算を開始するため、希土類化合物の電子状態計算を開始した。平均場近似では表現がされない磁性現象である近藤効果の評価が重要である。そこで、 LaB_6 中で希積近藤効果を生ずる Ce の電子状態を評価した。特に、f 軌道とフェルミ準位にある伝導系での磁氣的交換相互作用を超過程から定める方法を定義した。この相互作用過程は(3)-②でも用いているが、スピン揺らぎ機構と t-J 模型による強相関系計算理論のどちらに基づく場合にも有効で転移温度向上を齎す。

② 擬ギャップ近藤効果とグラフェン

我々の方法を、擬ギャップ近藤問題に適用し、理論の精度評価を行った。グラフェン中の原子欠損構造での計算結果から、ディラック分散中央にある強相関状態に特有の磁氣的超過程を、強い低エネルギー反強磁性磁気相互作用として発見した。この系では、従来荷電中性条件においては近藤効果がむしろ消失する可能性が言われてきたが、0.1eV に至る強い相互作用強度を見出した。この結果からは、磁気遮蔽発生後のディラック伝導系における繰り込み効果が結論された。

③ ナノグラフェンの対称性と強相関一重項

3バンド系で見られる交換散乱超過程を有効に発生する原子欠損をもつグラフェンを考察し、ゼロモードのトポロジカル起源縮退効果を明らかにした。この系のスピン一重項状態の構造安定性と近藤遮蔽のトポロジカル起源を明らかにして、報文に纏めた。結果は、JPSJ から出版された。合わせて、グラフェン・アームチェア端でのゼロモード発生に関する実験・理論の共同研究を纏めた。

④ グラフェン上水素化原子欠損の化学反応

ゼロモードを持つ原子欠損グラフェンでの化学吸着効果の特徴から水素貯蔵材料への展開を指摘した。特に、水素化原子欠損を活用した水素吸着・脱離過程が重要である。この反応には、ゼロモードの存在が寄与しているものと考えられる。

⑤ 化合物半導体の光応答評価への展開

半導体中のエキシトン系の超過程による遮蔽相互作用評価法と基礎プログラムを完成し、 GaN , GaAs , GaP での評価を行った。これは、超過程計算から有効遮蔽相互作用の決定を行う制限付き RPA 計算に相当する。我々の方法では、この有効遮蔽相互作用を計算全体の自己無撞着性を担保しながら実施することが出来る。

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計12件)

- ① “Self-doping effect arising from electron correlations in multi-layer cuprates”, K. Nishiguchi, S. Teranishi, K. Kusakabe, J. Phys. Soc. Jpn. in press.
- ② “Chemically induced topological zero mode at graphenic armchair edges”, M. Ziatdinov, H. Lim, S. Fujii, K. Kusakabe, M. Kiguchi, T. Enoki, and Y. Kim, Phys. Chem. Chem. Phys. 19, 5145-5154 (2017). DOI: 10.1039/c6cp08352h
- ③ “Structure Deformation and Level Splitting in Vacancy-Centered Hexagonal Armchair Nanographene”, S. Miyao, N. Morishita, G.K. Sunnardianto, K. Kusakabe, J. Phys. Soc. Jpn. 86, 034802-(1-3) (2017). <http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.86.034802>
- ④ “Storing-hydrogen process on graphene activated by atomic-vacancy”, G.K. Sunnardianto, I. Maruyama, K. Kusakabe, Int. J. Hydrogen Energy (2017) in press. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.01.115>
- ⑤ “Theoretical Analysis on Pseudo-Degenerate Zero-Energy Modes in Vacancy-Centered Hexagonal Armchair Nanographene”, N. Morishita, G.K. Sunnardianto, S. Miyao, K. Kusakabe, J. Phys. Soc. Jpn., 85, 084703-(1-7) (2016). <http://doi.org/10.7566/JPSJ.85.084703>
- ⑥ “Systematic study of the effect of H adsorption on the rate of electron transfer in graphene”, G.K. Sunnardianto, I. Maruyama, K. Kusakabe, J. Comput. Theor. Nanosci. 13, 4883-4887 (2016). doi:10.1166/jctn.2016.5361
- ⑦ “Dissociation-chemisorption pathways of H₂ molecule on graphene activated by a hydrogenated mono-vacancy V11”, G.K. Sunnardianto, I. Maruyama, K. Kusakabe, Advanced Science, Engineering and Medicine, 8, 421-426 (2016). doi:10.1166/ase.2016.1875
- ⑧ “Determination of Tomonaga-Luttinger parameters for a two-component liquid”, O.M. Sule, H.J. Changlani, I. Maruyama, S. Ryu, Phys. Rev. B, 92, DOI: 075128-(1-12) (2015). 10.1103/PhysRevB.92.075128
- ⑨ “フラットバンドの構成法—分子の奏でるハーモニー—”, H. Katsura, I. Maruyama, 固体物理, 50, 257-2707 (2015).
- ⑩ “Orbital mixture effect on the Fermi surface-Tc correlation in the cuprate superconductors - bilayer vs single layer”, H. Sakakibara, K. Suzuki, H. Usui, S. Miyao, I. Maruyama, K. Kusakabe, R. Arita, H. Aoki, and K. Kuroki, Phys. Rev. B 89, 224505-(1-6) (2014). DOI: 10.1103/PhysRevB.89.224505
- ⑪ “Role of edge geometry and chemistry in the electronic properties of graphene nanostructures”, S. Fujii, M. Ziatdinov, M. Ohtsuka, K. Kusakabe, M. Kiguchi, and T. Enoki, Faraday Discuss., 2014, 173, 10-(1-27). DOI: 10.1039/c4fd00073k
- ⑫ “Direct imaging of monovacancy-hydrogen complexes in a single graphitic layer”, M. Ziatdinov, S. Fujii, K. Kusakabe, M. Kiguchi, T. Mori, and T. Enoki, Phys. Rev. B 89, 155405-(1-15) (2014). DOI: 10.1103/PhysRevB.89.155405

[学会発表] (計15件)

- ① K. Nishiguchi, S. Teranishi, S. Miyao, G. Matsushita, K. Kusakabe, “An effective 2-band eg model of sulfur hydride H₃S for high-Tc superconductivity”, APS March Meeting 2017, 2017/3/13-3/17, ニューオーリンズ (米国)
- ② G.K. Sunnardianto, I. Maruyama, K. Kusakabe, “Realizing nanographene activated by a vacancy to solve hydrogen storage problem”, APS March Meeting 2017, 2017/3/13-3/17, ニューオーリンズ (米国)
- ③ S. Teranishi, S. Miyao, K. Nishiguchi, K. Kusakabe, “Enhancement mechanism of two-particles exchange scattering processes in single-layer cuprate superconductors”, APS March Meeting 2017, 2017/3/13-3/17, ニューオーリンズ (米国)
- ④ G.K. Sunnardianto, I. Maruyama, K. Kusakabe, “Storing hydrogen process on graphene activated by atomic-vacancy”, AEM2016 the first international conference on Advanced Energy Materials, 2016/9/12-9/14, サリー (英国)
- ⑤ 草部浩二, 「第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE の強相関電子系対応への取り組み」, 第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE 最新動向セミナー (招待)

- 講演), 2016/8/24, トスラブ山王 (東京都・港区)
- ⑥ K. Kusakabe, “Multi-reference DFT modeling of the Kondo system: $\text{La}_{1-x}\text{Ce}_x\text{B}_6$ ”, 9th Int. Conf. Phys. Appl. Spin-Related Phenomena in Solids (PASPS9), 2016/8/8-8/10, 神戸国際会議場 (兵庫県・神戸市)
- ⑦ S. Teranishi, S. Miyao, K. Kusakabe, “Two-particle hopping amplitude in cuprate superconductors”, 9th Int. Conf. Phys. Appl. Spin-Related Phenomena in Solids (PASPS9), 2016/8/8-8/10, 神戸国際会議場 (兵庫県・神戸市)
- ⑧ I. Maruyama, “Entanglement Dynamics in Optical Lattice Systems”, Trends in Theory of Correlated Materials, 2016/5/23, Boettstein (Swiss)
- ⑨ I. Maruyama, “Entanglement Dynamics of Optical Lattice Systems with Sine Square Deformation”, Int. workshop on “Physics of bulk-edge correspondence & its universality from solid state physics to cold atoms”, 2015/9/27-9/29, Univ. of Tsukuba (文京区・東京都)
- ⑩ N. Morishita, G.K. Sunnardianto, K. Kusakabe, “Electron state calculation of the topological zero mode at a graphene point defect”, Int. Symp. Present & Future Mat. Sci., 2015/11/18 Osaka Univ. (豊中市・大阪)
- ⑪ G. Matsushita, K. Kusakabe, “Exciton dynamics producing photon emission in strongly correlated electron systems”, Int. Symp. Present & Future Mat. Sci., 2015/11/18 Osaka Univ. (豊中市・大阪)
- ⑫ K. Kusakabe, “Correlation enhanced localization of the graphene zero mode including the Kondo effect”, Int. Symp. Present & Future Mat. Sci., 2015/11/18 Osaka Univ. (豊中市・大阪)
- ⑬ S. Teranishi, K. Iwatani, S. Miyao, K. Kusakabe, “The comparison of three-layer cuprates in terms of inter layer interaction”, Int. Symp. Present & Future Mat. Sci., 2015/11/18 Osaka Univ. (豊中市・大阪)
- ⑭ K. Kusakabe, “Theoretical Modeling of a Bias-controlled Kondo System in a Hydrogenated Graphene Vacancy”, 6th Int. Conf. Recent Prog. Graphene Res., 2014/9/21-9/25, Taipei (Taiwan)
- ⑮ G.K. Sunnardianto, K. Kusakabe, I. Maruyama, Y. Kudo, K. Takai, and T. Enoki, “Potential Energy Surface for Hydrogen Reaction of a Graphene Vacancy”, 6th Int. Conf. Recent Prog.

Graphene Res., 2014/9/21-9/25, Taipei (Taiwan)

[産業財産権]

○取得状況 (計 1 件)

名称: Electronic state computing method, electronic state computing device, and recording medium
 発明者: 草部浩一
 権利者: 大阪大学
 種類: 特許
 番号: US patent No. 9,262,591
 取得年月日: 平成 26 年 2 月 16 日
 国内外の別: 国外

[その他]

ホームページ等
 草部研究室: <http://www.artemis-mp.jp>
 福岡工業大学。丸山研究室:
<http://www.fit.ac.jp/~i-maruyama/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

草部 浩一 (KUSAKABE, Koichi)
 大阪大学・大学院基礎工学研究科・准教授
 研究者番号: 1 0 2 6 2 1 6 4

(2) 研究分担者

丸山 勲 (MARUYAMA, Isao)
 福岡工業大学・情報工学科・准教授
 研究者番号: 2 0 4 2 2 3 3 9