

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 6 月 12 日現在

機関番号：12601

研究種目：新学術領域研究（研究領域提案型）

研究期間：2010～2014

課題番号：22104010

研究課題名（和文）第一原理有効模型と相関科学のフロンティア

研究課題名（英文）Frontiers of an ab initio effective model and correlation science

研究代表者

今田 正俊（Imada, Masatoshi）

東京大学・工学（系）研究科（研究院）・教授

研究者番号：70143542

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 75,600,000円

研究成果の概要（和文）：強相関電子系とよばれる物質群は基礎物理学の新概念や自然のしくみを解明する研究の最前線にあり、高温超伝導、トポロジカル伝導などの応用も期待される新奇現象のゆりかごである。しかし現実の強相関電子系の第一原理的、定量的解明は何十年もの基礎科学的難問であった。

これに対して、本研究では強相関電子系の電子状態を高精度で解明する方法を、この系特有のマルチスケール階層構造を利用して確立した。それだけでなく、鉄系超伝導体やフラーレン化合物の高温超伝導機構を解明し、スピン軌道相互作用の大きなイリジウム化合物での新たなトポロジカル相を予言するなど、手法を活用して多くの基礎物理的な難問解明に貢献した。

研究成果の概要（英文）： Strongly correlated electron systems are at the frontier of fundamental and basic science research and have been contributing in fostering new concepts and novel phenomena in nature. However, understanding properties accurately and revealing mechanisms of real strongly correlated systems based on first principles have long remained a grand challenge, because of theoretical difficulties.

In this project, we have established multi-scale ab initio scheme for correlated electrons (MACE) by utilizing a hierarchical structure of the correlated electrons and applied them successfully. We have elucidated mechanisms of high-temperature superconductivity, and predicted the existence of novel topological phases in iridium compounds with strong spin-orbit interaction, thereby have contributed in understanding challenging basic physics.

研究分野：数物系科学

キーワード：第一原理計算 強相関電子系 有効模型 光電子分光 スピン軌道相互作用 鉄系超伝導体 有機導体
非従来型伝導

1. 研究開始当初の背景

電子相関の効果の強いいわゆる強相関電子系は今世紀に多くの基礎科学および産業応用上の革新的な進展が予想されているにもかかわらず、第一原理的な電子状態の計算には多くの困難が伴い、従来半導体などで威力を発揮してきた密度汎関数法が定性的も謝った結果を出すなどのことが知られてきた。

この中であって、強相関電子系に対し、物質中の電子の持つ階層性を利用して低エネルギー有効モデルを非経験的に導出する方法を、我々は最近提案した。また有効モデルを、低エネルギーソルバーを用いて解き、密度汎関数法(DFT)だけでは理解困難な強相関電子系を高精度、低負荷で取り扱える、第一原理的な手法の適用可能性の吟味が始まっていた。

DFT と強相関モデル解法を融合したこの手法をさらに発展させ、さらに時間分解光電子分光法など、進展しつつある実験を解析する手法と組み合わせ、強相関物性解明に必要な方法論を確立し応用することが強相関電子系研究の重要な課題となり、本プロジェクトの推進が待ち望まれていた。

2. 研究の目的

強相関物質の金属絶縁体転移や競合する秩序とゆらぎを第一原理的な手法で非経験的に理解した上で、光電子分光、電気伝導とスピン伝導を含む輸送現象、光学スペクトル、スピンドイナミクスなどの動的性質、励起構造に現れる強相関効果を解明し、実験結果との比較検証を行なう。とりわけ誘電応答、スピン伝導、交差相関に関する第一原理からの知見を得て、スピン軌道相互作用と強い電子相関効果の競合と絡み合いが生む物理を解明する。さらに強相関非平衡現象の解明に挑戦し、電子の相転移が生み出す超高速現象、なかでも光誘起金属絶縁体転移や一次転移の過渡現象、巨大応答のダイナミクスの解明を進めるとともに、進展の著しいフェムト秒時間分解光電子分光など非平衡実験手法の結果を理解する理論構築をめざす。

3. 研究の方法

本申請者たちは多体電子の階層構造を利用した「マルチスケール第一原理強相関電子状態計算法」(MACE)を提案し、いくつもの現実の強相関物質に応用し電子状態を解明してきた。

これをさらに発展させ非平衡状態やダイナミクスへと応用できる手法や、ゆらぎや競合の複雑な系、交差相関現象を取り扱えるような、強相関系に対する第一原理手法を開発する。

平成 22-23 年度にダイナミクスへの応用のための基礎理論と基本手法を検討する。平成 23 年度以降順次この手法を組み込み実装していく。さらに国際協力も行いながら、平成

22 年度にスピン軌道相互作用を扱える方法へと MACE を拡張し、平成 23 年度以降、スピン伝導系、トポロジ絶縁体、反転対称性のない界面などにおける電子相関効果を取り扱えるように基礎手法開発を進める。

第一原理計算のエキスパートである三宅、中村、石橋、小口とダウンフォールディングおよび低エネルギーソルバーの開発を進めてきた今田、三宅、有田の間で日常的な議論、協力、プログラムの受け渡しを行なえる体制をとり、共同研究を進める。実験との連携は重要である。特に高分解能光電子分光を中心に、中性子散乱、走査型トンネル分光、核磁気共鳴、光学測定などの実験グループとは絶えず緊密な議論を積み重ねる。さらに、他のグループとの連携を重視し、計算機科学者との連携による効率的アルゴリズムの整備を行い、また非平衡ダイナミクスの方法、電子相関効果を精緻に取り扱う手法に関して緊密に議論し他班と可能な限り連携協力する。

4. 研究成果

(1) 階層的な第一原理強相関電子状態計算法の開発・適用と手法の確立

強相関電子系の第一原理的で高精度な解明とその方法の確立という挑戦的な課題に対して、我々は強相関電子系がフェルミエネルギー付近に階層的なエネルギー構造を持つ特徴を利用して、階層的な第一原理強相関電子状態計算法(ab initio downfolding scheme called multi-scale ab initio scheme for correlated electrons (MACE))を発展させてきた。本プロジェクトにおいても、この手法の適用範囲を拡大するとともに、計算精度を向上させた。また、低次元第一原理有効モデルの導出を可能にし、有機導体に適用した。特に電子格子相互作用の扱い、スピン軌道相互作用の扱いなど従来適用範囲外であった課題についても取り扱いができるように手法を拡張し、またこの手法で導出される低エネルギー有効モデルを解くためのソルバーもこれに対応して、電子格子相互作用とスピン軌道相互作用を扱える枠組みに拡張した。この拡張はイリジウム酸化物でのトポロジカルな物質相の解析や予言、後に述べるアルカリドープしたフラーレンの超伝導機構解明などに活用された。これによって MACE が汎用性の高い標準的で高精度な強相関電子系の電子状態計算法として確立した。

(2) 鉄系超伝導の磁性・超伝導の機構

鉄系超伝導体においては、電子相関と軌道自由度が高温超伝導の発現機構を理解する上での鍵であると信じられているが、その実際の役割は十分な理解には至っていなかった。鉄系超伝導体における超伝導の微視的な機構を明らかにするためには有効相互作用の大きさを第一原理的に評価し、電子相関の寄与を高精度で計算しなければならないがそのような試みはなかった。この問題に対して

我々は階層的第一原理強相関電子状態計算法(MACE)と呼ばれる我々が開発してきた方法を採用し、鉄系超伝導体に適用した。その結果超伝導になる前の母物質での磁気秩序の物質依存性を定量的に再現することに成功した。さらに電子をドーピングすることによって、反強磁性秩序が消えて1次転移を起こし、超伝導が生じるという実験結果を正しく再現することに成功した。超伝導を特徴付けるクーパ対は多くの実験が示唆する s_{\pm} と呼ばれる対称性を持つことを明らかにし、実験ではまだ十分に理解されていないが、特定の鉄の 3d 軌道のうちの特定の軌道が磁性と超伝導の両方の発現に主要に寄与していること、磁性、超伝導ともこの軌道の持つモット物理の性格に支配されていることを明らかにした。さらにさまざまにパラメータを動かすという実験では困難な手法で超伝導が電子密度のゆらぎの増大と一対一対応して生じることを示し、超伝導機構を特定することに成功した。モット物理に特徴的なドーピングによる電子の運動エネルギーの急激な低下に伴って起きる1次転移とその周辺で必然的に生じる電子密度の不安定性が電子間の引力を増大させ、高い超伝導転移温度が可能になるというのがこの機構の本質である。モット転移周辺の1次転移に伴って必然的に生じる相分離と電子密度の不安定性が超伝導を引き起こすという点で、我々は銅酸化物の理論モデルでも同じ機構を発見しており、現在知られている常圧で 50K 以上の転移温度を持つ高温超伝導の普遍的な機構が明らかとなった。

(3) 希土類磁石化合物の物性予測

強力磁石には大きな磁化と高い保磁力が要求され、後者は結晶磁気異方性と強い正の相関を持つ。この条件を満たす磁石化合物の探索のため、第一原理コード QMAS を用いて NdFe₁₁TiN を調べた。その結果、窒化により Nd と N の間の電子密度が増加することがわかった。そのクーロン反発を感じ、Nd-f 電子が ab 方向に伸び、一軸異方性が誘起される。このことは結晶場係数 A₂₀ の計算により半定量的に確かめられる。窒化により磁化も増加する。一方、Ti 置換により磁化が顕著に減少するが、A₂₀ の変化は小さい。これらの結果は、NdFe₁₂N が NdFe₁₁TiN よりもよい磁気特性をもつことを示唆する。(われわれの計算ののち、MgO 基盤上の W 下地層の上に NdFe₁₂N 膜が合成され、室温からキュリー温度にいたる広い温度領域で Nd₂Fe₁₄B を超えることが報告された。)

(4) C₆₀ の超伝導

アルカリ金属をドーピングしたフラーレン (A₃C₆₀) の超伝導は、分子性導体の中でもっとも高い超伝導転移温度をもつ興味深い系である。その相図において、超伝導相はモット絶縁相に隣接して存在する。超伝導ギャップ関数は s 波の対称性をもつが、通常モット転移を誘起するオンサイトの斥力はオンサイ

トのペアを抑制することが期待されるので、その超伝導発現機構はきわめて非自明なものである。

この問題を MACE のフォーマリズムによって解析した。まず、フォノンの自由度を含む低エネルギー有効モデルを第一原理的に導出する方法として、制限密度汎関数摂動論の方法を開発した。ついで得られたモデルを拡張動的平均場近似によって解析した。動的平均場近似においては、系は有効不純物モデルにマップされるが、その不純物モデルにおける相互作用パラメータを解析すると、フント結合の値が実効的に負になっており、低スピン状態が好まれる状況になっていることがわかった。このとき、電子は異なる軌道を占めるよりは同一の軌道を占める確率が高くなり、これが超伝導発現の種になっていることがわかった。

温度と体積に関して相図を書くと、超伝導状態と正常状態の相境界、モット絶縁相と金属相の相境界ともに実験を高い精度再現することがわかった。

(5) 有機導体 (TMTSF)₂PF₆ の第一原理 GW 計算

近年、角度分解光電子分光技術の進展に伴い、様々な物質の低エネルギー電子構造の詳細が測定可能となっている。特にこの物質では、低エネルギー領域 (1eV 以下) において、プラズモン励起 (集団電荷励起) が低エネルギー素励起過程として出現することが実験的に知られている。第一原理 GW 自己エネルギー評価プログラムを用いて、(TMTSF)₂PF₆ の反射率を計算したところ、電場偏光を a 軸に取った場合のプラズマ周波数は 1eV、ab 面内であつ a 軸に垂直な場合は 0.2 eV であり、実験を再現することが分かった。実験スペクトルは、低エネルギー素励起に起因する自己エネルギー補正を含む準粒子スペクトルであるが、慣習的密度汎関数バンド計算は、静的近似に基づくので、動的効果を考慮できていない。ここでは動的効果を考慮した第一原理 GW 計算コードの開発を行い、(TMTSF)₂PF₆ の計算に適用した。上で述べたように、この物質では、低エネルギープラズモン励起が存在するが、これの電子構造への効果を調べたところ、(i) 占有/非占有バンドの約 0.5 eV 下/上に、プラズモン励起に由来する新たな状態 (低エネルギープラズマロン状態) が出現すること、(ii) X-M 線に沿った電子占有領域において特に大きな電子散乱が生じていることが分かった。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 220 件)

1. First-Principles Study of Structural and Magnetic Properties of R(Fe,Ti)₁₂ and R(Fe,Ti)₁₂N (R=Nd, Sm, Y), Y. Harashima,

- K. Terakura, H. Kino, S. Ishibashi and T. Miyake, JPS Conf. Proc., 査読有, 5, 011021 (1-8) (2015).
DOI: 10.7566/JSPC.5.011021
2. Superconductivity and its mechanism in an ab initio model for electron-doped LaFeAsO, T. Misawa, M. Imada, Nature Commun., 査読有, 5, 5738 (1-11) (2014).
DOI: 10.1038/ncomms6738
 3. Metallic Interface Emerging at Magnetic Domain Wall of Antiferromagnetic Insulator: Fate of Extinct Weyl Electrons, Y. Yamaji, M. Imada, Phys. Rev., 査読有, X 4, 021035 (1-27) (2014).
DOI: 10.1103/PhysRevX.4.021035
 4. First-Principles Study of the Honeycomb-Lattice Iridates Na₂IrO₃ in the Presence of Strong Spin-Orbit Interaction and Electron Correlations, Y. Yamaji, Y. Nomura, M. Kurita, R. Arita, M. Imada, Phys. Rev. Lett., 査読有, 113, 107201 (1-5) (2014).
DOI: 10.1103/PhysRevLett.113.107201
 5. First-principles study of Magnetocrystalline Anisotropy and Magnetization in NdFe₁₂, NdFe₁₁Ti and NdFe₁₁TiN, T. Miyake, K. Terakura, Y. Harashima, H. Kino and S. Ishibashi, J. Phys. Soc. Jpn., 査読有, 83, 043702(1-4) (2014).
DOI: 10.7566/JPSJ.83.043702
 6. Effect of electron-phonon interactions on orbital fluctuations in iron-based superconductors, Y. Nomura, K. Nakamura and R. Arita, Phys. Rev. Lett., 査読有, 112, 027002 (1-5) (2014).
DOI: 10.1103/PhysRevLett.112.027002
 7. GW calculation of plasmon excitations in the quasi-one-dimensional organic compound (TMTSF)₂PF₆, K. Nakamura, S. Sakai, R. Arita and K. Kuroki, Phys. Rev. B, 査読有, 88, 125128(1-5) (2013).
DOI: 10.1103/PhysRevB.88.125128
 8. Ab Initio Evidence for Strong Correlation Associated with Mott Proximity in Iron-Based Superconductors, T. Misawa, K. Nakamura and M. Imada, Phys. Rev. Lett., 査読有, 108, 177007(1-5) (2012).
DOI:10.1103/PhysRevLett.108.177007
 9. Ab initio Studies on the Interplay between Spin-Orbit Interaction and Coulomb Correlation in Sr₂IrO₄ and Ba₂IrO₄, R. Arita, J. Kuneš, A.V. Kozhevnikov, A.G. Eguiluz, M. Imada, Phys. Rev. Lett., 査読有, 108, 086403(1-5) (2012).
DOI:10.1103/PhysRevLett.108.086403
 10. Ab initio two-dimensional multiband low-energy models of EtMe₃Sb[Pd(dmit)₂]₂ and κ-(BEDTTTF) 2Cu(NCS)₂ with comparisons to single-band models, K. Nakamura, Y. Yoshimoto, M. Imada, Phys. Rev. B, 査読有, 86, 205117(1-9) (2012).
DOI: 10.1103/PhysRevB.86.205117
 11. Mott Transition and Phase Diagram of κ-(BEDT-TTF)₂Cu(NCS)₂ Studied by Two-Dimensional Model Derived from Ab initio Method, H. Shinaoka, T. Misawa, K. Nakamura, M. Imada, J. Phys. Soc. Jpn., 査読有, 81, 034701 (1-15) (2012).
DOI: 10.1143/JPSJ.81.034701
 12. Ab initio derivation of electronic low-energy models for C₆₀ and aromatic compounds, Y. Nomura, K. Nakamura, R. Arita, Phys. Rev. B, 査読有, 85, 155452(1-12) (2012).
DOI: 10.1103/PhysRevB.85.155452
 13. Magnetic Properties of Ab initio Model for Iron-Based Superconductors LaFeAsO, T. Misawa, K. Nakamura, M. Imada, J. Phys. Soc. Jpn., 査読有, 80, 023704 (1-4) (2011).
DOI: 10.1143/JPSJ.80.023704
 14. Ab initio Low-Dimensional Physics Opened Up by Dimensional Downfolding: Application to LaFeAsO, *K. Nakamura, Y. Yoshimoto, Y. Nohara and M. Imada, J. Phys. Soc. Jpn., 査読有, 79, 123708 (1-4) (2010).
DOI: 10.1143/JPSJ.79.123708
- [学会発表] (計 102 件)
1. M. Imada, Two Families of Superconductors, Cuprates and Iron-Based Superconductors, International Workshop on “Properties of high temperature superconductors”, Munchen, Germany, 2010/04/13 ~ 15
 2. T. Misawa, Ab initio low-energy models in iron-based superconductors 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, 2011/4/21-25
 3. M. Imada, Electron-correlation physics of iron-based superconductors, International Workshop on Electronic Correlations in Models and Materials, Augsburg, Germany, 2011/09/15
 4. T. Miyake, Electronic structure and correlation effects in iron-based superconductors, The 14th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations, Univ. Tokyo, 2011/11/01
 5. T. Misawa, Ab initio study of iron-based superconductors -Roles of electron correlations and large Mott proximity- International Conference on Heavy Electrons and Novel Quantum Phases (ICHN 2012), Gyeongju, Korea, 2012/07/05
 6. M. Imada, Ab initio studies of strongly correlated electron systems, The 19th International Conference on Magnetism with Strongly Correlated Electron Systems

- (ICM2012), Busan, Korea, 2012/07/11
7. M. Imada, Quantum Monte Carlo for strongly correlated systems, Conference on Computational Physics (CCP2012), Nichii Gakkan, Hyogo, 2012/10/15
 8. K. Nakamura, Ab initio low-energy model for organic materials; About spin liquid on $\text{EtMe}_3\text{Sb}[\text{Pd}(\text{dmit})_2]_2$, International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design (ISC-QSD), Osaka University Hall, Osaka, 2012/10/11 ~ 13
 9. 三宅 隆, 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, 千葉, 2012/10/23
 10. M. Imada, Iron-based Superconductors, Workshop on Novel Materials: Adding material-specific reality in physicists' models, Natal, Brazil, 2012/12/11
 11. 中村 和麿, 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, 和歌山, 2012/12/13 ~ 15
 12. R. Arita, Superconductivity in alkali-doped fullerenes: Insights from density functional theory for superconductors, Workshop on Superconductivity and Magnetism associated with Geometry and Dimensionality from Organics to Inorganics, Sendai, Japan, 2013/05/16 ~ 17
 13. R. Arita, Superconducting transition temperatures of alkali-doped fullerenes: Insights from density functional theory for superconductors, Superstripes2013: Quantum in complex matter, Ischia, Italy, 2013/05/27 ~ 06/01
 14. R. Arita, Density functional theory for plasmon assisted superconductivity, 7th ISSP international workshop and symposium: Emergent Quantum Phases in Condensed Matter, Kashiwa, Japan, 2013/06/12 ~ 14
 15. T. Miyake, Electron theory of permanent magnets, 7th ISSP International Workshop and Symposium, Emergent Quantum Phases in Condensed Matter from topological to first-principles Approaches, Kashiwa, Japan, 2013/06/19
 16. M. Imada, Electron Correlation Effects on Topological Phases, The International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (SCES) 2013, Tokyo, Japan, 2013/08/05 ~ 09
 17. R. Arita, Development of density functional theory for plasmon assisted superconductivity, The international conference on strongly correlated electron systems, Tokyo, Japan, 2013/08/05 ~ 09
 18. M. Imada, Iridates as playgrounds of topological physics, International Workshop on Electronic Properties of Spin-Orbit Driven Oxides, Dresden, Germany, 2013/09/04 ~ 07
 19. M. Imada, Novel Quantum Phases and Nonequilibrium Dynamics in Strongly Correlated Quantum Systems, CMSI International Symposium 2013 -Extending the power of computational materials sciences with K-computer-, Tokyo, Japan, 2013/10/21 ~ 22
 20. 中村 和麿, 低エネルギープラズマロン状態のGW解析, 第3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-(招待講演), 勝浦観光ホテル, 那智勝浦町, 和歌山 2013/12/16 ~ 18
 21. R. Arita, First-principles study of the Mott transition and superconductivity in A_3C_60 , RIKEN-APW joint workshop "Highlights in condensed matter physics", Saitama, Japan, 2014/01/23 ~ 25
 22. 中村 和麿, 低エネルギープラズモン状態のGW解析:有機導体および遷移金属酸化物への応用, フロンティア物理講演会 in 山形, 山形大学, 山形, 2014/01/30
 23. 三宅 隆, 第一原理計算に基づいた希土類磁石の電子論, 金属学会 2014年春期講演大会, 東京工業大学, 東京 2014/03/21
 24. M. Imada, Ab initio Studies on Mechanism for Iron-based Superconductors, International Symposium on "Novel states in correlated condensed matter - from model systems to real materials", Frankfurt am Main, Germany, 2014/04/08 ~ 10
 25. M. Imada, Ab initio Studies on Mechanism for Iron-based Superconductors, New Horizon of Strongly Correlated Physics, ISSP, Kashiwa, Japan, 2014/06/16 ~ 07/04
 26. M. Imada, Superconducting mechanisms of iron-based and cuprate superconductors, Novel Quantum States in Condensed Matter 2014, Kyoto, Japan, 2014/11/04 ~ 12/05
 27. K. Nakamura, Ab initio GW analysis for low-energy plasmaron states, The 2nd International Symposium on Computics: Quantum Simulation and Design, Koshiba Hall in The University of Tokyo, Japan. 2014/12/01 ~ 03
 28. M. Imada, Superconducting mechanisms of iron-based and cuprate superconductors, Frontiers in Condensed Matter Physics, KIAS, Seoul, Korea, 2014/12/09 ~ 12
 29. M. Imada, Superconducting mechanisms of iron-based and cuprate superconductors, The 9th International Conference on Computational Physics, National University of Singapore, Singapore, 2015/01/07 ~ 11
 30. K. Nakamura, Recent progress in ab initio many-body perturbation theory for correlated materials, International

Workshop on New Frontier of Numerical
Methods for Many-Body Correlations,
TOKYO, 2015/2/18 ~ 21

〔図書〕(計 1 件)

今田正俊 他、岩波書店、岩波講座 計算
科学3 計算と物質、2012、296

〔その他〕

ホームページ等

<http://www.solis.t.u-tokyo.ac.jp/>

6. 研究組織

(1)研究代表者

今田 正俊(IMADA, Masatoshi)
東京大学・大学院工学系研究科・教授
研究者番号：7 0 1 4 3 5 4 2

(2)研究分担者

三宅 隆(MIYAKE, Takashi)
産業技術総合研究所・計算科学研究部門・主
任研究員
研究者番号：3 0 3 3 2 6 3 8

中村 和磨(NAKAMURA, Kazuma)
東京大学・大学院工学系研究科・助教
研究者番号：6 0 5 2 5 2 3 6

佐久間 怜(SAKUMA, Rei)
千葉大学・大学院融合科学研究科・助教
研究者番号：1 0 5 1 2 2 0 4

(3)連携研究者

小口 多美夫(OGUCHI, Tamio)
大阪大学・産業科学研究所・教授
研究者番号：9 0 2 5 3 0 5 4

石橋 章司(ISHIBASHI, Shoji)
産業技術総合研究所・計算科学研究部門・研
究グループ長
研究者番号：3 0 3 5 6 4 4 8

有田 亮太郎(ARITA, Ryotaro)
国立研究開発法人理化学研究所・計算物質科
学研究チーム・チームリーダー
研究者番号：8 0 3 3 2 5 9 2

藤森 淳(FUJIMORI, Atsushi)
東京大学・大学院理学系研究科・教授
研究者番号：1 0 2 0 9 1 0 8

辛 埴(SHIN, Shik)
東京大学・物性研究所・教授
研究者番号：0 0 1 6 2 7 8 5