

# 【基盤研究(S)】

## 理工系(数物系科学)



### 研究課題名 強相関物質設計と機能開拓 —非平衡系・非周期系への挑戦—

東京大学・大学院工学系研究科・教授 **いまだ まさとし**  
**今田 正俊**

研究課題番号: 16H06345 研究者番号: 70143542

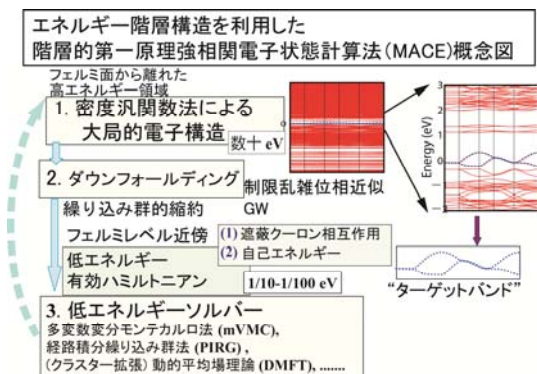
研究分野: 数物系科学

キーワード: 強相関系、非平衡、界面表面、第一原理計算、物質設計

#### 【研究の背景・目的】

電子相関の大きな物質群(強相関物質)は基礎科学の革新と新概念の揺りかごととして、また21世紀の産業創成を担う新物質相の有力候補として世界的な研究競争が展開されている。20世紀産業革命を担った半導体に比べ、強相関物質は多くの理論的困難を抱えていた。しかしここ10年で強相関物質の持つ特有の階層構造を利用して、電子状態を第一原理的に解明する手法が確立し(下図)、応用が広がってきた。

本研究はこれを拡張し1.非平衡と2.非周期性(表面・界面・準結晶)が顕著な強相関物質の原理解明と機能発現というフロンティアを開拓し、強相関物質の学理究明を推進する(右図)。特に新手法展開に適するa.非平衡高温超伝導、b.高効率太陽電池、c.非平衡時間分解実験手法の理論解析、d.界面・薄膜高温超伝導、e.磁壁等の可動・制御性の高いトポロジカル物質界面、f.準結晶の特異熱・電気伝導、g.永久磁石開発のための粒界面磁性を、電荷・スピン・格子系究明により機構解明・機能開拓し、遷移金属化合物を軸に強相関物質物性を第一原理的に解明し「強相関物質の理論設計」をめざす。

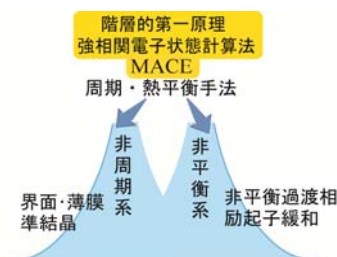


#### 【研究の方法】

【手法の拡張】階層的強相関第一原理手法(MACE)の適用範囲を拡張し(1)非平衡・励起計算手法を組込む:変分モンテカルロ(VMC)法、動的平均場(DMFT)法の拡張と直接時間発展法の開発、バーテックス補正を含む第一原理多体摂動論を整備する。(2)非周期系(界面・薄膜・準結晶)を構造緩和も含めて扱い拡張する。(3)電子格子相互作用、スピン軌道相互作用、多軌道複雑系のためにVMC,DMFTを拡張し、既知集団励起、創発集団励起を組込む。汎用性を達成したコードの公開普及も進める。

#### 【物質設計・機能開拓】

非平衡手法を非平衡超伝導機構解明、高効率太陽電池の基本原理解設計などに応用し、非周期系拡張手法と電子格子一体での強相関系構造緩和手法を薄膜・界面高温超伝導機構解明と物質設計、新原理トポロジカル界面設計、準結晶熱伝導解明と設計などに応用する。



	非周期系	非平衡系
電荷	(d) 界面・薄膜超伝導体 (f) 準結晶伝導	(a) 非平衡超伝導体 (b) 高効率太陽電池 (c) 時間分解光電子分光解析
スピン	(e) トポロジカル相・スピン軌道系高制御界面 (可動金属磁壁) (g) 粒界面磁性	トポロジカル界面ダイナミクス
格子	(f) 準結晶熱伝導・熱電強相関第一原理による構造緩和・表面界面構造	

#### 【期待される成果と意義】

強相関電子物質の基礎学理解明と物質設計による機能開拓を第一原理的に実現するという長年の課題解決に資する。直接予想される成果には界面や非平衡での超伝導臨界温度が決まる機構の解明と物質設計への応用、太陽電池候補物質の物性解明と高効率な基本原理解設計、スピン軌道相互作用の強い物質のトポロジカルな界面/表面機能設計、強相関準結晶の解明などがある。

#### 【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- F. Aryasetiawan, M. Imada *et al.*, "Frequency-Dependent Local Interactions and Low-Energy Effective Models from Electronic Structure Calculations" *Phys. Rev. B* **70** (2004) 195104.
- M. Imada and T. Miyake, "Electronic Structure Calculation by First Principles for Strongly Correlated Electron Systems" *J. Phys. Soc. Jpn.* **79** (2010) 112001.

#### 【研究期間と研究経費】

平成28年度-32年度  
85,400千円

#### 【ホームページ等】

<http://www.solis.t.u-tokyo.ac.jp/index.html>  
[imada@ap.t.u-tokyo.ac.jp](mailto:imada@ap.t.u-tokyo.ac.jp)