

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 5 月 30 日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2011～2013

課題番号：23540408

研究課題名(和文) 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

研究課題名(英文) Electronic state calculation of transition-metal oxides by the density functional variational method

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) 3,900,000円、(間接経費) 1,170,000円

研究成果の概要(和文)：我々が開発した電子の相関運動を表現可能とする新しい密度汎関数法によって、遷移金属酸化物など強い電子相関を示す物質の電子状態計算を行った。新手法の特許取得を行って情報公開を進めた。高温超伝導を示す銅酸化物において電子状態の評価を進め、未知の物質相を複数理論的に発見した。既存のHg系やTI系の置換系として見出したものであってこれらと同等の超伝導性を示しうるという理論結果を得た。さらに、相MNX物質、アルカリドーパされたピセンなどの超伝導物質、La₂CuO₄などの磁性体の電子状態計算を進め、グラフェン中の欠陥起源による強相関電子状態では実験グループとの共同で新構造の発見から決定までを行った。

研究成果の概要(英文)：Based on our newly developed density functional theory giving a representation of quantum correlated motion of the electron system, we performed electronic structure calculations of strongly-correlated electron systems including the transition-metal oxides. Evaluating electronic states of cuprate superconductors with high transition temperatures, we found several unknown material structures theoretically. They are designed as systems by substitution of elements in Hg- or TI-compounds, where we have theoretical results showing evidences strongly suggesting similar superconducting behavior. We further performed electronic structure calculations of superconductors including MNX compounds in the α -phase and alkali-metal-doped picene, and magnetic materials including La₂CuO₄. We showed that the analysis collaborated with experimental groups allows us to find and to identify novel materials structures, e.g. correlated electron systems realized in hydrogenated atomic defects of graphene.

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・物性II

キーワード：密度汎関数法 遷移金属酸化物 電子状態計算 強相関電子系 変分法 銅酸化物高温超伝導体

1. 研究開始当初の背景

(1) 強相関電子系の構造決定法の必要性

銅酸化物高温超伝導体の発見以後、強相関電子相決定と物質構造決定を統一的に与える理論解析方法の発見が望まれてきた。

我々は 2001 年に開始した一連の多配置参照密度汎関数法(MR-DFT)の開発で、この課題を原理的に解決しており、具体的なプログラムの作成と適用事例の導出段階にあった。特に MR-DFT の収束判定手続きを確定し、それを 2010 年に知財出願したことで、本研究の準備は整っていた。

(2) 新型銅酸化物高温超伝導体の設計

強相関電子系としての銅酸化物高温超伝導体の理論研究は、フェルミ準位近傍の低エネルギー有効ヒルベルト空間を表現した解析が鍵である。そこで、原子構造・電子構造の統一決定法により物質探索を進めることが求められていた。

(3) ナノ電子相の自己無撞着計算

我々の強相関電子系評価方法を、ナノ物質系の電子相決定に用いて、自己無撞着計算法として構造同定にまで適用した事例を増やすことが求められていた。

2. 研究の目的

(1) MR-DFT による電子相関効果評価

局所密度近似(LDA)や一般化勾配近似(GGA)を初期データとして、量子揺らぎ効果を順次無矛盾に取り入れたモデルの系列を、各種遷移金属酸化物等の強相関物質に対して発生させる。収束した電子状態は、密度と多体相関効果を表現し、厳密解に漸近する。DFTの構造最適化計算を応用し、バンド構造、フェルミ面構造の特徴を生かした MR-DFT モデルを用いて電子相関効果を評価する。エンタングルド状態としての多体状態を構成して、任意の電子相関効果を「表現」する。

(2) 銅酸化物高温超伝導体の最高転位温度発生メカニズム

2010 年に発表された榊原らによる 2 バンドモデルに基づく軌道純化効果を解析すると、多層系超伝導体である水銀系銅酸化物超伝導体では、 CuO_2 層数に関する最高転位温度の変化が必ずしも直接的に説明されていない。MR-DFT が与えるペア・ホッピングメカニズムでは、この問題に対して、酸化水銀層を起源とするバンドのフェルミ準位に対する相対位置というもう一つのパラメータがある。

そこで、 $\text{HgBa}_2\text{Ca}_{n-1}\text{Cu}_n\text{O}_{2n+6}$ 系を標準系として転移温度の物質依存性を説明する。さらに、未知の銅酸化物高温超伝導体の予測例を得て、最高転移温度を示す物質の探索を進める。

(3) ナノ機能性材料の評価

MR-DFT 法を、軌道秩序やスピン秩序が電荷秩序と多重に相関した系に適用して、多体相

相互作用効果からくる電子相関効果を具体的に評価する。従来法では決定できない、物質構造安定性と直結して決定される秩序状態を、我々の密度汎関数変分法(DFVT)に基づいて定め、実験データとの直接比較を実施する。DFVT とは、電子模型が作る表現空間内での最安定探索に用いる量子力学的変分原理である。

ナノメータスケールでの電子相を解析して、結晶中に発生する埋め込まれた金属性構造がナノメータスケールで相関効果を発生して機能を与えるという基本的なメカニズムが、電子相関効果であることを確定する。そして、新型ペロブスカイト触媒などの機能性物質設計を実施する。

(4) 未知の強相関効果の導出

我々の方法では、未知の強相関電子系物質構造とその電子相評価、機能性導出が可能になる。この戦略を、注目が集まるナノ物質：グラフェンに適用して、i) 未知の局所強相関効果の発現の確認と、ii) 高精度計測による評価結果との直接比較、を実施する。

3. 研究の方法

(1) 数理解析手法の展開

量子多体問題を解明する最強の方法は、関数解析論に基づく表現構成法である。我々は、A 空間(表現空間)とその直交補空間が構成上不可避な多体電子系の表現論において、求めるクーロン多体系からのずれに着目して、収束判定条件を備えた方法を提供していく。

(2) 数値評価方法の開発

表現の具体的構成には、数値的解法の適用が不可避である。コンパクト化されたヒルベルト空間中の多体量子系の表現構成法を、最高の精度にまで高める評価方法を複数開発していくことで、前項の数理解析手法と組み合わせた表現論を形成する。

(3) 精密測定実験研究との連携

現実の量子多体系である多電子系と、構成している多体表現とのずれは、精密測定実験との直接比較を行って検証することが必要である。そこで、高精度 STM/STS 観測との直接比較が可能な水素化原子欠損をもつグラフェンに我々の方法を適用する。これらの知見から、遷移金属酸化物を含む一般の強相関電子系での理論の精度評価を進めていく。

4. 研究成果

(1) 多配置参照密度汎関数法の新定理証明

MR-DFT 模型における一般化 HK 定理

ポアソン方程式の解の一意接続定理を用いて、量子固有状態の集合と外部スカラーポテンシャル $v(r)$ の一対一対応を証明して、従来型 DFT の基盤をなす Hohenberg-Kohn の定理を、我々は数学的に完全証明している。この証明方法を $v(r)$ 中に定義される一般の

多体電子模型に適用して、MR-DFT のモデル空間に適用できる一般化された HK 定理を得た。

アップコンバージョンにおける収束判定前項の一般化 HK 定理を用いて、クーロン電子系に対する 2011 年の草部・丸山定理(J. Math. A: Math. Theor. 44, 135305)を一般化した。その結果、LDA や GGA 等の適切な出発点を与えるフェルミ準位近傍の軌道集団から順次電子相関効果を Multi-reference Superposition State(多電子状態の重ね合わせ状態)の決定を通して取り込む模型列を構成する。このモデル空間中の点列に対して、次の完全収束列の形成に関する収束判定手続きの定式化に成功した。

各模型間の距離を定める電子密度を用いて、実用計算手続きの範囲内で、距離の収束に関するコーシー列形成を確認することが出来る。このとき、アップコンバージョン第一過程を、扱っている有効多電子系(多軌道ハバード型模型等)から、「クーロン電子系から正定値演算子のみの差をもつ模型」までの変形プロセスとして定める。後者の模型で再び距離に関してコーシー列形成を判定する。

すると、次のアップコンバージョン第二過程が自動的に定義される。第二過程では、秩序変数である電子密度が変化しない状態ベクトル集合が、数値解近傍で量子相転移の発生しない開近傍として定義される。密度の収束が保障された模型列においては、この開近傍中に、クーロン電子系の変分状態ベクトルが、密度固定した制限付き探索過程で導かれるベクトルとして存在するようになる。

この模型列が与える密度列上の点ごとに定義される変分状態から作られる集合では、厳密解からの量子相転移発生が無い近傍の存在が示される。そこで、第二過程を解析的に証明したことによって、第一過程が与える収束模型系列の数値的発見が、厳密解と同一量子相をなす模型構築となっていることを保障できるのである。

超過程を示す電子系標準模型の発見

前項の第二過程を与える直前の模型には、数学的な収束保障のために作られた以上に、物理的価値が複数見出される。特に、超過程の発生と、ヒルベルト空間構成の点から、次の各発見があった。

任意の多電子系の数値解法は、連続自由度系のヒルベルト空間構成の観点から、補空間を必ず備えることになる表現空間内で定義されている。すると、アップコンバージョン第二過程で現れる散乱過程は、この表現空間(A 空間)とその補空間の間での有効散乱過程として発生する。

アップコンバージョン模型は、上記正定値演算子の差こそが補空間内での多体散乱過程を表現することから分かるように、補空間内に始状態・終状態をもつ多重散乱が発生しない模型になっている。これにより、A 空間

内及び A 空間と補空間の間での多重散乱過程を全て取り込む解法を数値的厳密解構成法として与えても、導かれるダイソン方程式系が粒子数保存則によって有限次元連立方程式系として閉じる。そこで、収束模型列は、有限の数値計算資源において期待できる方法として、必ず最善の模型構築法となっている。即ち、アップコンバージョン第一過程から定められ数値解として見出された表現模型は、「多電子系の標準模型」として位置付けることが出来る。

このアップコンバージョン模型は、多体相関効果を明瞭に考慮する模型のうち、物理的に不可避かつ十分な範囲の遮蔽効果を取り込んだ模型としても位置付けることが出来る。密度自己無撞着決定を通じた静的遮蔽効果、超過程評価による有効遮蔽相互作用を通じた動的遮蔽効果、超過程項中のレゾルベントに現れる終状態多体効果を通じた相関効果による遮蔽、そして表現構成上導入した平均場項を補正して除くという全ての評価手続きにより遮蔽が評価される。

超過程のより重要な価値は、有効模型に次の物理的な項を明示的に取り込むことになっている点である。磁性を表現する超交換相互作用、超伝導ペア散乱を与える超ペアホッピング項、そして分散力評価そのものを与える原子間力への寄与である。これらの効果は、磁性に関して La214 系、Sr₂CuO₃ 系で、超伝導に関連しては FeSe、K_xTiNCI など複数の層状超伝導体に対して、評価を行っている。さらに、この超過程の与える物理は、平成 26 年度から始まった基盤研究(C)「超過程から発生する強相関量子物性の理論計算」(代表: 草部浩一)で継続的に研究されている。

(2) 新型量子多体計算技法の構築

NA-DMRG とスケーリング解析の併用法

多配置参照型表現を求めるため、高速・高精度数値評価方法の開発を平行して行った。対称性を最大限利用した非アーベル型密度行列繰り込み群法(NA-DMRG)を、整数スピン鎖模型に適用して、ハルデンギャップの評価を行った。低エネルギー有効系を参照した有限サイズ・スケーリング解析を実行し、S=2 の系で世界最高精度を得ることに成功した。低次元超伝導体の超伝導ギャップにも類似の困難が起こると予想されており、数値評価法確立の意義は大きい。

行列積型多体状態の表現理論

密度行列繰り込み群法(DMRG)を契機として解明が進んでいる行列積状態を活用した計算理論の構築を進めた。射影演算子を用いて行列積状態、テンソル積状態のエンタングルメント・エントロピーが最適となる解を構築し、量子ハイゼンベルグ・スピン模型においてその効果を確認した。この量子変分法の高精度化から、フェルミオン系の表現論構築に重要な知見を得た。

時間依存配置間相互作用法

時間依存問題への展開は、多配置参照型表現においてなお、実用計算法として実現する上で開発途上の問題を抱えている。草部は、早稲田大での時間依存配置間相互作用法開発研究にも参加して、この困難を回避する方法論の検討を行った。

有効多体散乱振幅評価法

有効二体相互作用の表現について、ワニエ表現とプロッホ表現の双方で、散乱振幅評価を行うためのプログラム整備を行った。特に、プロッホ表現で保存量、保存則を利用した散乱過程決定を行う有効多体散乱振幅評価プログラムを作成した。また、表現相互の変換を行うツールも整備した。

アルゴリズム特許の取得

アップコンバージョン法は、従来の表現空間を繰り込む方法で表現されない、構造決定計算に活用可能な連続自由度系の表現を与えるものである。このアルゴリズムを特徴付ける、アップコンバージョンプロセス、有効散乱過程表現演算子定義、収束判定手続き等について、実用計算の基盤を定めた手続き（アルゴリズム）明細を、PCT 出願した。日本国特許としてこの内容が成立し、今後の開発に向けた基盤が得られた。

(3) 現実物質の未知の電子機能評価

La₂14 の多体散乱過程

プロッホ表現による多体散乱過程評価を具体的に実施した。運動量空間表現を厳密対角化法で扱い、得られた運動量分布関数から密度を再構成すると自己無撞着解が得られることを確認した。

ペロブスカイト触媒の未知表面反応

バルク LaFeO₃ では、結晶構造の再現によって単一配置参照計算 (SR-DFT) でも絶縁体基底状態が再現できるが、最近の実験から LaFeO₃ を用いたペロブスカイト触媒表面で電場印加効果による固体触媒効果の増強が明らかになっている一方で、SR-DFT を用いた表面計算を行うと安定な LaO 表面を形成しても表面状態発生による金属化が起こることが分かった。この解析に基づいて、従来から提唱している隠れた三元触媒反応プロセスについて、具体的に反応性を再評価し、反応進行があることを理論的に確認した。

層状高温超伝導体の層間ペア散乱振幅

電子格子相互作用起源超伝導機構では説明困難な各種の層状超伝導物質に適用して、電子相関起源超伝導による層間ペアホッピングのエネルギースケールが数十～数百 meV の大きさを持ちうることを示した。

py-TiNCI のドーピング機構

未解明なピリジン化 TiNCI の電子ドーブ機

構が水の存在下で発生するピリジニウムイオンの形成によることを突き止めた。これにより、py-TiNCI の超伝導も他の相 MNX に類似した、層間ペアホッピング機構が効く電子ドーブされた状態である可能性が出てきた。

K_x-picene の電子状態

アルカリドーブされた picene の電子状態に関連して、実験で同定された結晶構造解析結果である AB 積層構造を出発点にして系統的に理解が出来ることを指摘した。この構造では、K 原子の濃度によって狭いバンド幅をもつ準位に連続的に電子ドーブがなされていく系を与えていることを示した。

(4) 未知物質構造の予言と検証

新型多層系銅酸化物超伝導体候補物質

電通大榊原らとの共同研究から、彼らが提唱した 2 バンドモデルが与える軌道純化効果の確認、特に $d_{3z^2-r^2}$ 成分と $d_{x^2-y^2}$ 成分のエネルギー軸上での分離 ΔE とフェルミ面形状因子 $r_{x^2-y^2}$ から判断されるネスティング効果が、広範な銅酸化物高温超伝導体において転移温度に決定的な因子となっていることが分かってきた。これは、最適正孔ドーブ率における T_c と正に相関し、 $\Delta E > 2\text{eV}$ が 100K 級では常時成立している。そこで、軌道純化効果を確認した超伝導体設計を推進した。

この条件を満たす Hg 系、TI 系を標準系として採用した場合に、元素置換効果を追跡した。TiBa₂Cu₂O₉ のアルカリ土類元素を希土類元素及びアルカリ元素に置換した系 (Y, Na 置換等) において $\Delta E > 2\text{eV}$ かつ母物質より $r_{x^2-y^2}$ がより適切となる例を見出した。

さらに 130K 超の T_c が見出される HgBa₂Ca₂Cu₃O₈ 系を出発物質として Hg を Cd 置換した系を考察し、 $\Delta E > 2\text{eV}$ の条件を満たすことを確認した。Hg, TI, Cd の 3 つの系の比較から、 $r_{x^2-y^2}$ がより適切なのは実測で T_c が 120K 級となる TI 系であること、Cd 完全置換系はパラメータ空間上では TI と Hg の間にくることが分かった。Hg 系の特徴として、層間ペアホッピング機構に有利な HgO 層起源のフェルミ準位直上の状態の存在を指摘することが出来る。すると、現実系で我々の層間ペアホッピング機構が効いている可能性を指摘できるだけでなく、Cd100%置換系というまだ合成報告が無い物質で、全ての計算データが高 T_c の特徴が見出されることが分かった。

グラフェン上水素化原子欠損

最近 Ar⁺照射で形成されたグラフェンの原子欠損を原子状水素または水素分子ガスによって処理することで、高い再現性で同一の構造を形成できる可能性が東工大によって指摘された。この実験グループとの共同研究によって、グラフェン上水素化原子欠損には、ゼロモードを起源とする磁気モーメント発生を期待できることが分かってきた。バイアスコントロールでディラック電子系の濃

度コントロールが可能であり、新規な近藤状態形成が期待されている。さらに、原子状水素処理は、水素化ナノホールの形成と、ナノホールエッジにおけるエッジ状態の存在を示した。このナノホールエッジにおいて、初めて Z1 端の磁化したエッジ状態発生の確認と、Z211 端、V2 端の同定がなされた。

5 . 主な発表論文等

[雑誌論文](計15件)

H. Ueda and K. Kusakabe, “Determination of boundary scattering, magnon-magnon scattering, and the Haldane gap in Heisenberg spin chains”, Phys. Rev. B, 査読有, Vol. 84, 2011, 054446-1-5.

引原俊哉、桂法弥、丸山勲、西野友年 エネルギー・スケール変調による量子系の境界条件・トポロジーの制御”, 日本物理学会誌, 査読有, Vol. 67, 2012, 394-398

H. Kizaki and K. Kusakabe, “DFT-GGA Study of NO Adsorption on the LaO (001) Surface of LaFeO₃”, Surf. Sci., 査読有, Vol. 606, 2012, 337-343.

M. Orii, H. Ueda, and I. Maruyama, “Quantum Entanglement of Tensor Networks with Symmetry Projections”, J. Phys. Soc. Jpn. Suppl., 査読有, Vol. 81, 2012, Suppl. B, SB052-1-4.

H. Ueda, and I. Maruyama, “Application of Uniform Matrix Product State to Quantum Phase Transition with a Periodicity Change”, J. Phys. Soc. Jpn. Suppl., 査読有, Vol. 81, 2012, Suppl. B, SB065-1-4

K. Kusakabe, I. Maruyama, and K. Yamada, “A Theoretical Study Showing K₂picene as a Parent Semiconductor for Organic Superconductivity”, J. Phys. Soc. Jpn. Suppl., 査読有, Vol. 81, 2012, Suppl. B, SB071-1-4.

K. Kusakabe, “Pair-hopping mechanism of superconductivity activated by the nano-space layered structure”, J. Phys. Chem. Solids, 査読有, Vol. 73, 2012, 1546-1549.

K. Kusakabe, “Simulation of nanoscale etching for nanotube and grapheme devices”, MRS symp. proc. 2012 MRS Spr. meet., 査読有, Vol. 1451, 2012, 21-24.

M. Ishizuki, H. Takemiya, T. Okunishi, K. Takeda, and K. Kusakabe, “Shape of polygonal quantum dots and ground-state instability in the spin polarization”, Phys. Rev. B, 査読有, Vol. 85, 2012, 155316-1-12.

H. Ueda and I. Maruyama, “Incommensurate Matrix Product

State for Quantum Spin Systems”, Phys. Rev. B, 査読有, Vol. 86, 2012, 064438-1-6.

T. Okunishi, R. Clark, K. Takeda, K. Kusakabe, and N. Tomita, “Time-Dependent Configuration Interaction Approach for Multi-electron System Confined in Two-Dimensional Quantum Dot”, Jap. J. Appl. Phys., 査読有, Vol. 52, 2013, 022801-1-11.

M. Ziatdinov, S. Fujii, K. Kusakabe, M. Kiguchi, T. Mori, and T. Enoki “Visualization of electronic states on atomically smooth graphitic edges with different types of hydrogen termination”, Phys. Rev. B, 査読有, Vol. 87, 2013, 115427-1-7.

M. Ziatdinov, S. Fujii, K. Kusakabe, M. Kiguchi, T. Mori, and T. Enoki, “Direct imaging of monovacancy-hydrogen complexes in a single graphitic layer”, Phys. Rev. B, 査読有, Vol. 89, 2014, 115405-1-15.

S. Miyao, H. Sakakibara, I. Maruyama, K. Kuroki, and K. Kusakabe, “Fermi surface shape controlling by element substitution in TI-based cuprates”, J. Phys. Soc. Jpn. Suppl., 査読有, Vol. 83, 2014, in press.

H. Sakakibara, K. Suzuki, H. Usui, S. Miyao, I. Maruyama, K. Kusakabe, R. Arita, H. Aoki, and K. Kuroki, “Orbital mixture effect on the Fermi surface-T_c correlation in the cuprate superconductors - bilayer vs single layer”, Phys. Rev. B, 査読有, in press.

[学会発表](計19件)

K. Kusakabe, “Pair-hopping mechanism of superconductors activated by nano space of layered materials”, ISIC 16, Czech Republic, 2011年5月23日.

草部浩一, “アルカリドーブされた α -MNCl (M=Ti, Zr, Hf)における層間ペアホッピング機構の理論”, 日本物理学会 2011年秋季大会, 富山, 2011年9月21日.

K. Kusakabe, “Estimation of inter-layer pair hopping amplitudes in layered MNX superconductors”, Int. Conf. New Science Created by Materials with Nano Spaces: from Fundamentals to Applications, Sendai, 2011年11月24日.

K. Kusakabe, “The Third Generation of the Dirac Cone as a Proof of Stacked 2D Electron Systems in Iron Pnictides”, 2011 MRS fall meeting, Boston, USA, 2011年11月29日.

木崎栄年, 草部浩一, “LaFeO_{3-d} 表面における NO 解離吸着の第一原理シミュレーション”, 第 59 回 応用物理学関係連合講演会, 東京, 2012 年 3 月 17 日.

草部浩一, “ペロブスカイト三元ナノ触媒上の酸素揺動反応過程探索”, ナノ学会第 10 回大会, 大阪, 2012 年 6 月 14 日.

丸山勲, “サイン二乗変形を用いた系の分割におけるエンタングルメントのダイナミクス”, 日本物理学会 2012 年秋季大会, 神奈川, 2012 年 9 月 18 日.

草部浩一, “K_{0.5}TiNCl の電子格子相互作用と層間ペアホッピング機構”, 日本物理学会 2012 年秋季大会, 神奈川, 2012 年 9 月 21 日.

丸山勲, “テンソルを用いた量子スピン系の厳密解と数値計算法”, 第 1 回 CMS I 人材育成シンポジウム「応用数理と計算科学の連携 I」, 大阪, 2012 年 11 月 30 日.

S. Miyao, I. Maruyama, K. Kuroki, and K. Kusakabe, “Materials Design of Multilayered Cuprate Superconductors”, 8th Handai Nanosci. Nanotech. Int. Symp., 大阪, 2012 年 12 月 11 日.

I. Maruyama, “Multipartition of Spatially Entangled Systems with Sine Square Deformation”, APS March meeting, Baltimore, USA, 2013 年 3 月 20 日.

宮尾哲亮, 丸山勲, 黒木和彦, 草部浩一, “物質探索による銅酸化物のバンド変形効果の研究”, 日本物理学会第 68 回年次大会, 広島, 2013 年 3 月 27 日.

草部浩一, “基礎 分散力の表現論から”, 日本物理学会第 68 回年次大会, 広島, 2013 年 3 月 28 日.

S. Miyao, H. Sakakibara, I. Maruyama, K. Kuroki, and K. Kusakabe, “Fermi surface shape controlling by element substitution in Tl-based Cuprates”, SCES 2013, Tokyo, 2013 年 8 月 7 日.

I. Maruyama, K. Yamada, K. Kusakabe, “Density functional calculations of crystal structure and electronic states for K_{2+x}picene”, SCES 2013, Tokyo, 2013 年 8 月 7 日.

草部浩一, 廣瀬敬治, 戸部義人, “pyridine-TiNCl のドーピング機構”, 日本物理学会 2013 年秋季大会, 徳島, 2013 年 9 月 25 日.

草部浩一, “多配置参照密度汎関数理論による遷移金属酸化物における磁氣的超過程の解析”, 日本物理学会 2013 年秋季大会, 徳島, 2013 年 9 月 26 日.

草部浩一, “La214 における多体散乱振幅評価とモット転移”, 日本物理学会第 69 回年次大会, 神奈川, 2014 年 3 月 28 日.

宮尾哲亮, 岩谷佳祐, 榊原寛史, 丸山勲, 黒木和彦, 草部浩一, “計算機シミュレ

ションによる多層系銅酸化物の物質構造と電子状態パラメータの相関”, 神奈川, 2014 年 3 月 28 日.

〔産業財産権〕
出願状況 (計 1 件)

名称: 電子状態計算方法、電子状態計算装置及びコンピュータプログラム
発明者: 草部浩一、丸山勲
権利者: 大阪大学
種類: PCT 出願
番号: PCT/JP2011/068589
出願年月日: 平成 23 年 8 月 18 日
国内外の別: 国内

取得状況 (計 3 件)

名称: Electronic state calculation method, electronic state calculation device, computer program, 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. 8,082,131
取得年月日: 平成 23 年 12 月 20 日
国内外の別: 国外

名称: 電子状態計算方法、電子状態計算装置、コンピュータプログラム、及び記録媒体
発明者: 草部浩一
権利者: 大阪大学
種類: 特許
番号: 特許第 4918683 号
取得年月日: 平成 24 年 2 月 10 日
国内外の別: 国内

名称: 電子状態計算方法、電子状態計算装置及びコンピュータプログラム
発明者: 草部浩一、丸山勲
権利者: 大阪大学
種類: 特許
番号: 特許第 5447674 号
取得年月日: 平成 26 年 1 月 10 日
国内外の別: 国内

〔その他〕
ホームページ等
<http://www.artemis-mp.jp>

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: 10262164

(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: 20422339