



文部科学省科学研究費補助金「新学術領域研究」平成22年度～26年度
コンピューティクスによる物質デザイン：
複合相関と非平衡ダイナミクス

A03

第一原理有効モデルと相関科学のフロンティア

March 04, 2011

代表：
今田 正俊
東京大学工学系研究科

メンバーの顔ぶれ



研究分担者

三宅 隆
中村 和磨
佐久間 怜



産業技術総合研究所
東京大学大学院工学系研究科
千葉大学大学院融合科学研究科

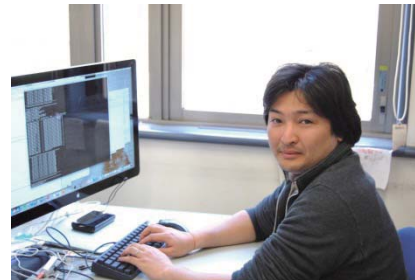
連携研究

小口 多美夫 大阪大学産業科学研究所
石橋 章司 産業技術総合研究所
有田 亮太郎 東京大学大学院工学系研究科
藤森 淳 東京大学大学院理学系研究科
辛 埴 東京大学物性研究所



研究協力

三澤貴宏
酒井志朗
品岡寛



本プロジェクトのねらい

階層性を利用して自由度を縮減するダウンフォールディング法
少数自由度のみの有効模型を非経験的に導出
有効模型を精緻な低エネルギーソルバーで解く

強相関第一原理・3段階融合手法のさらなる展開:

◆現実の物質群への**広範な実証研究**:

★強相関物質の金属絶縁体転移や競合秩序・ゆらぎを第一原理的に理解

★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、
スピンダイナミクスなどの動的性質、励起構造に現れる

特異な強相関効果の解明、実験結果との比較検証

★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、

★**スピン軌道相互作用と強相関効果の絡み合い**が生み出す物理の解明
反転対称性の破れている系; 界面、表面

◆**強相関非平衡現象**の解明への挑戦

★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

★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

進行中のプロジェクト

実証研究＋方法論開発

(三宅、有田、中村、三澤、佐久間、酒井、品岡)

大学院生(平山、明石、金子、伊藤、栗田)

有機伝導体

鉄系超伝導体

トポロジカル絶縁体

スピン軌道相互作用の重要な物質、5d遷移金属化合物

界面(遷移金属化合物)

銅酸化物

そのほか遷移金属酸化物

MNX

フラレン

cRPAの精度検証

低エネルギーソルバーの高速化

MVMC 今村コードの活用

逆行列の並列化？

CDMFT

実験研究との連携(辛、藤森)

光電子分光

M. IMADA