

令和4年度高性能汎用計算機高度利用事業

「富岳」成果創出加速プログラム

「量子物質の創発と機能のための基礎科学—「富岳」と最先  
端実験の密連携による革新的強相関電子科学」

成果報告書

令和5年5月30日

早稲田大学理工学術院総合研究所

今田 正俊

## 補助事業の名称

「富岳」成果創出加速プログラム

「量子物質の創発と機能のための基礎科学—「富岳」と最先端実験の密連携による革新的強相関電子科学」

### 1. 補助事業の目的

物理学の根元的な問いである、量子流体の本性は何か？という問いと、高温超伝導はどうやって生み出されるのか？という2つの未解決で深く関連しあう基礎科学の根本課題に、現代最高のスーパーコンピュータ「富岳」がどこまで答えられるか真っ向から挑戦する。「富岳」を用いて初めて可能となる強相関高温超伝導体およびトポロジカル物質の網羅的強相関第一原理計算と、本格実施課題(ポスト「京」重点課題7サブ課題C)で追究し成果の出ている機械学習法とを、大規模な分光実験データを含む世界最高精度を実現してきた実験研究者との密な連携によって融合し、実験で直接測定できない隠れた物理量の解明を軸として、基礎物質科学の根元的な問いを革新してきた未来開拓課題である「強相関電子が生み出す量子流体と高温超伝導の機構と機能の解明」を目指す。

## 2. 令和4年度(報告年度)の実施内容

### 2-1. 当該年度(令和4年度)の事業実施計画

(1) [高温超伝導体の第一原理電子状態解析] 各種の分光実験データが蓄積している多層型銅酸化物超伝導体であるBi化合物を含む一連の銅酸化物の網羅研究を推進し、第一原理有効ハミルトニアン<sup>2</sup>の改良、およびmVMC(多変数変分モンテカルロ計算)を用いて「富岳」による大規模解析を完成させる。特に既に完了しているHg系に対して、CaCuO<sub>2</sub>、1層型化合物(Bi2201)と2層型化合物(Bi2212)の物性の差、中でも超伝導転移温度の大きな差を生む原因の第一原理的な解明を達成する。以上について「富岳」を用いて初めて実行可能となる網羅的な大規模計算によって高精度かつ高信頼性の計算を継続して解析を進め、また1バンドによる記述と3バンドによる記述の差異を解明し、第一原理手法の標準化を確立する。さらに令和3年度に引き続き、スペクトル関数、X線散乱スペクトル、走査型トンネル分光(特に準粒子干渉)、スピン相関などの分光データの統合解析を進め、進行中の実験結果との比較を行い物質設計に対する洞察を得る。さらに水素ドーピングした鉄系超伝導体の謎となっている水素ドーピングによって生じる超伝導相の相図のメカニズムを令和3年度に引き続き進め完成させる。

(2) [トポロジカル物質の第一原理電子状態解析] 新マヨラナ物質候補RuBr<sub>3</sub>およびRuI<sub>3</sub>、ならびにスピノン物質候補R<sub>2</sub>Ir<sub>2</sub>O<sub>7</sub>(R=Pr, Y, Eu)について、「富岳」が不可欠となる大規模計算によってそれらの有効ハミルトニアン<sup>2</sup>の高精度な解析を令和3年度に引き続き進め、量子スピン液体と分数化の様相を解明する。第一原理ハミルトニアンとパラメタ解析を組み合わせ、マヨラナ物質およびスピノン物質候補から、X線散乱などの励起スペクトルを用いたトポロジカル相の構造的特徴を実験データから抽出する方法を確立する。また令和3年度に、量子スピン液体の形成が示唆されているdmit型分子性結晶の第一原理有効ハミルトニアン<sup>2</sup>を用いて、反強磁性相からスピン液体相までの4つの化合物の異なるパラメタを用いた網羅的な解析を行ない、スピン液体の性格を明らかにしたが、令和4年度に励起スペクトルを実際に求めてスピンの分数化の特質を明らかにする。

(3) [強相関係実験データの機械学習解析] 本格実施課題(ポスト「京」重点課題7サブ課題C)および令和3年度までに本課題で角度分解光電子分光の実験データから隠れた物理量を抽出する手法が極めて堅牢で有効なものであることが実証された。またこの成果からX線散乱実験で起きるべきことを現象論に基づいて予言し、実験立証が進んだ。この成果を踏まえ、分光実験データから隠れた物理量を抽出する機械学習手法をX線散乱、トンネル分光にも拡張し、統合解析を通じて電子の分数化とダークフェルミオンの存在の有無の検証を確実なものにする。2種類の異なる分数化機構の関係の考察を通じて量子流体と強結合超伝導の統一的視点についても検討し、独立に成果を挙げてきた(1)と(2)を発展的に止揚していく道筋も探る。

(4) [計算結果の国際的なクロスチェック] プロジェクト全体の密な連携と円滑な運営のために国外の研究協力機関の協力研究者と、高温超伝導体、トポロジカル物質モデル系について、各種の数値手法での計算結果による国際的な批判的クロスチェックを完成させる。特に銅酸化物第一原理ハミルトニアンとハバード模型ハミルトニアンの精度検証を完了して、公開を進める。

(5) [アウトリーチ・人材育成] 本プロジェクトで得られた成果はオープンアクセス論文の発表、シンポジウムや研究会の開催と支援、プレスリリースやホームページ、研究活動を通じて積極的に公表していく。若手研究員(ポスドク等)とともに、実験研究とも連携できる計算科学の担い手の育成を継続して行なっていく。

## 2-2. 実施内容(成果)

### (1) [高温超伝導体の第一原理電子状態解析]

銅酸化物高温超伝導体では化合物によって超伝導転移温度がさまざまに異なる。この中から  $\text{CaCuO}_2$ 、 $\text{Hg}_2\text{BaCuO}_4$  (Hg1201 と略記)、Bi 系の 3 種の化合物 (1 層型化合物である  $\text{Bi2201}$ 、2 層型化合物である  $\text{Bi2212}$ 、3 層型化合物である  $\text{Bi2223}$  と略記される化合物群) という超伝導転移温度  $T_c$  が様々に異なる物質に対して、それらの個性や違いを第一原理的に理解できるかどうかを検証するために、我々の開発してきた MACE という手法に基づいて、実験的な結晶構造だけから出発して、令和2年度以来任意パラメタを含まない第一原理有効ハミルトニアンを導出してきて令和4年度に1バンドと3バンドでの有効ハミルトニアンのパラメタを求めて分析し、論文出版した[1]。この際、3バンドハミルトニアンを用いる必要がなく、1バンドハミルトニアンを扱えばよいことを明らかにした。令和4年度はそれらのハミルトニアンを、我々の開発した多変数変分モンテカルロ法を用いて解き、物質ごとの個性を再現するとともに、それらに共通する普遍性を抽出することにも成功した[2]。より具体的に述べると、(1)それぞれの物質が共通して  $d$  波超伝導状態を幅広いキャリア濃度領域で基底状態に持つこと (2)一方で超伝導状態は反強磁性状態や、電荷が不均一になるストライプ状態と 50K から 100K 程度のエネルギー差ですべてのキャリア濃度で激しく競合していること (3)熱力学極限に外挿した超伝導秩序パラメタ  $F_{SC}$  のキャリア濃度依存性がドーム構造を持ち、濃度 10%以上ではキャリア濃度の増大とともに単調減少するさまが、トンネル顕微鏡 (STM) や角度分解光電子分光 (ARPES) の結果とよく一致すること (4) 最適キャリア濃度での  $F_{SC}$  の大きさ  $F_{SC}$  が  $\mu$  SR で測定された磁場侵入長を用いて求めた超流動密度から見積もられる  $F_{SC}$  の大きさ 0.1

と定量的にも一致する、という点で実験結果を定量的に再現した。

さらに有効ハミルトニアンの中の局所相互作用  $U$  と最近接サイトへのホッピング  $t_1$  の比から決められる無次元のパラメタ  $U/|t_1|$  は 5 つの物質ですべて 7 から 9 の間に位置していて、大きくは変わらないにもかかわらず、計算で得られた  $F_{SC}$  の大きさは  $U/|t_1|$  に系統的かつ敏感に依存して  $U/|t_1|$  の増大とともに急激に増大しており、多数のパラメタの中で  $U/|t_1|$  が超伝導の強さを決める主要パラメタであることを見出した。これは現実物質で超伝導を制御している主要パラメタを初めて抽出した成果と位置付けられる。

また最適キャリア濃度での  $T_c$  が  $T_c = 0.16 |t_1| F_{SC}$  というスケーリング則で普遍的にあらわされ、転移温度の多様性を説明できることを見出した。特に 1 層型化合物である Bi2201 では実験的に銅原子の直上にある頂点酸素の位置が揺らいでおり、この見積りへの不定性に連動して  $U$  の値が敏感に変わるため、上記のスケーリング則から予測される  $T_c$  の見積りに広い幅が生じるものの、現実の物質では低い  $T_c$  を与える頂点酸素の位置を持つ領域が全体の  $T_c$  を決めてボトルネックになるという妥当な物理的描像に従えば、Bi2201 での実験的な低い  $T_c$  がよく説明できることも明らかにした。一方 2 層型については第一原理パラメタが  $U$  依存性の最適値付近にあり、頂点酸素の位置の不定性の影響をあまり受けず、高い転移温度が安定に保たれることを示した。

さらに第一原理ハミルトニアンを離れて物質設計指針を得るために、相互作用の大きさを自在にパラメタサーチしたところ、局所相互作用を現実物質の 1.2 倍程度に増やすことで  $F_{SC}$  が 30% 程度増幅し、サイト間相互作用をさらに弱められれば、現実物質の超伝導を最大 2 倍程度まで増大可能であるという結果が得られた。現実はどういう処方箋があるかはこれからの課題であるが、どの方向に努力すればいいのかという物質設計指針が得られた。

また、 $U$  に比例する局所相互作用のキャリア濃度依存性を計算すると、キャリア間に有効引力が働いていることが示され、クーパ対形成の駆動力が明らかとなった。同時にこれまでに提唱してきている電子分数化のミクロな原因が明らかとなった。また分数化を支持している分光実験データの解析結果のミクロな基礎付けともなった。

一方、Bi 系銅酸化物の強相関第一原理計算に加えて、多層型高温超伝導体における超伝導転移温度の層数依存性を解明するため、2 層型拡張ハバード系を多変数変分モンテカルロ法によって解析した[3]。結果、超伝導を引き起こす主要パラメタである原子内クーロン相互作用が同じ場合、超伝導相関関数の最大値は 1 層系と 2 層系において変化がない事が判明した。運動量分布関数から超伝導ギャップおよび有効引力の推定を実行し、これらも層数に依存しないことを明らかにした。

水素ドーピングした鉄系超伝導体について、反強磁性相および超伝導相の安定性などが解明された。

## (2) [トポロジカル物質の第一原理電子状態解析]

本研究の課題である量子スピン液体は 20 世紀後半からの基礎科学の難問の一つであり、また量子計算や量子通信を実現するために必要な、量子纏れの基礎学理を解明するための主戦場でもあるという背景を持つ。

令和 3 年度までに、分子性導体（分子性結晶）の 5 種類のカチオンの異なる dmit 塩に対して、第一原理計算によって導かれた有効ハミルトニアンに高精度量子多体ソルバー mVMC を適用し、「富岳」を活用した大規模計算で解いた。実験で見られる量子スピン液体を再現し、スピン液体のメカニズムが電子スピ

ンの分数化によるスピノンの創発に帰着することを見出し、この結果は令和4年度に論文出版し[4]、プレスリリースを行なった。令和4年度は励起スペクトルの計算も進め、デュアルな1D-2Dスピン液体としての性格を励起スペクトルでも確認することができた。具体的には有機固体DMIT塩を有効的に表現できる異方性を持った三角格子上的量子スピンモデルでの励起状態を解析した。一次元的な異方性を持つ場合には $qx=\pi$ での波数ラインでギャップレスな振る舞いが見える一方、DMIT塩のような異方性の場合には低い励起エネルギーを有する弓形になるポイントギャップレス構造が現れることを明らかにした。またこのスピノンによる分数化は令和2年度に得た成果であるJ1J2モデルと呼ばれる理論モデルの量子スピン液体でも見られる共通の特徴であった[5]。

令和4年度は $R_2Ir_2O_7$ を表すと考えられる3次元構造を持つパイロクロア格子のハイゼンベルク模型においても、量子スピン液体が見いだされ、さらにこのスピン液体もスピンが分数化したスピノンで表わされること、および中性子散乱で観測できる動的構造因子に分数化の特徴が現れることが示され、2次元構造が自発的に生じると共に冪乗則に従う長距離相関の証拠となるカスプ異常が現れることが示され、量子スピン液体の本性とその普遍性がよりはっきり確認された。

加えて、スピノンの対形成によってマヨラナ粒子が生じるマヨラナ物質の候補について、プロトタイプとなる磁性モット絶縁体 $Na_2IrO_3$ を起点に、 $RuBr_3$ 、 $RuI_3$ 、 $RuCl_3$ 等の有効ハミルトニアン の主要項であるクーロン相互作用とスピン軌道相互作用を仮想的に制御してmVMCによる解析を行い、量子相図が得られた。実験と整合する磁気秩序と電荷ギャップが得られた一方、スピノンは閉じ込められていることが判明した。

以上の超伝導体と量子スピン液体での実験結果との一致は、我々が採用している階層的 first-principles 強相関電子状態計算法、MACE という手法の信頼性をも示している。「富岳」での計算ももとに、(1)と(2)で一見全く異なる分数化がいくつもの例で確立したが、実は量子流体と高温超伝導で見られる分数化の底流の普遍性や、統一理解が、励起子の量子纏れとスピンの量子纏れの統一的な枠組みで理解できる可能性を指摘した[6]。

### (3) [強相関係実験データの機械学習解析]

銅酸化物超伝導体で電子分数化がある場合に、励起子ダイナミクスを測定できる共鳴非弾性 X 線散乱 (RIXS) 実験をおこなうと励起子ピークが超伝導相で増大することを令和3年度に予測した[7]。本課題参加者の藤森 (早稲田大学) と台湾の実験グループにより、台湾の RIXS 装置で実験が行われ、予測通りに超伝導相での増幅が観測された。この実験検証をさらに詳細な温度依存性の測定で補強し、令和4年度に論文として出版された[8]。RIXS での予測は角度分解光電子分光 (ARPES) のスペクトル関数をもとにした機械学習解析[9]から抽出された分数化模型を使って解析しており、2つの分光実験手段と機械学習を組み合わせた統合解析であるといえる。これは電子の分数化とダークフェルミオン存在の検証の一つとなった。

また銅酸化物高温超伝導体  $Bi_2Sr_2CaCu_2O_8$  のノード準粒子に起因するトンネル分光から得られる準粒子干渉信号の解析を進めた。その結果、この信号の線幅は、いわゆるオクテットモデルで記述される d 波超伝導ギャップの分散を反映した準粒子干渉信号よりも有意に狭く、ノード準粒子とオフノード準粒子が異なる特徴を持つことがわかった。

さらに多層型銅酸化物高温超伝導体や反強磁性トポロジカル物質における角度分解光電子分光測定を

行い、詳細な電子構造を解明した。前者では、モット絶縁体近傍の特徴である小さなフェルミ面においても他の典型的な銅酸化物高温超伝導体と同程度の超伝導ギャップを見出した。また後者では、3d 電子に由来する小さな電子ポケットが異常ホール効果の起源であることを示した。

#### (4) [計算結果の国際的なクロスチェック]

令和2年の国際ミーティングももとに、量子多体ソルバーの精度の国際検証のプロジェクトが、GitHub上で進み、我々からハバード模型、スピン模型に関してベンチマーク結果を示し、他グループのベンチマークとも合わせて、困難な量子多体問題に関する共通理解が得られるとともに将来の量子計算機開発に際して、量子超越の規準としても役に立つ。この解析にあたっては本課題代表者が20年以上前に量子多体計算の精度がエネルギー分散で測れるという指標を提唱していたが、この指標がすべてのソルバーの解析の基礎として役立った。8か国33名の国際共同研究によるこの成果は論文投稿されている[10]。

#### (5) [アウトリーチ・人材育成]

本プロジェクトで得られた成果は論文の公表、国際会議招待講演、シンポジウムや研究会の開催と支援、プレスリリースやホームページ、研究活動を通じて積極的に情報発信した。若手研究員（ポスドク等）を雇用し、実験研究とも連携できる計算科学の担い手の育成を行った。具体的には2-3(4)を参照。

#### (6) [特記事項：コードの高度化、富岳へのチューニング]

3週間から1か月程度の間隔で、定期的にコードの高度化や富岳へのチューニングのミーティングを開催し、情報交換と高度化のために役立てた（2-3(5)を参照）。またmVMCの中核部分を占めるパフィアン計算について、パフィアンの持つ対称性に注目するとともに行列のブロック化を進めて、高速化効率化に成功し、その成果を論文出版した[11]。

関連電子系に対するマルチスケール第一原理計算手法(MACE)を行う計算手法を実装したソフトウェアの整備を行うとともに、有機化合物 dmit 塩への網羅的適用を行いこの物質群で発現している量子スピン液体の性質の解析を行った。

[1] J. B. Morée, M. Hirayama, M. T. Schmid, Y. Yamaji, M. Imada, Phys. Rev. B 106, 235150(1-22) (2022).

[2] M. T. Schmid, J. B. Morée, Y. Yamaji, M. Imada, arXiv:2303.06672

[3] A. Iwano, Youhei Yamaji, J. Phys. Soc. Jpn. 91, 094702(1-16) (2022).

[4] K. Ido, K. Yoshimi, T. Misawa and M. Imada, npj Quantum Mater. 7, 48 (1-10) (2022).

[5] Y. Nomura, M. Imada, Phys. Rev. X 11, 031034 (2021).

[6] M. Imada, International Superstripes Conference 2022 (Rome, Italy, June, 20-24, 2022); M. Imada, J. Phys. Soc. Jpn. 90, 111009 (2021).

[7] M. Imada, J. Phys. Soc. Jpn. 90, 074702 (2021).

[8] A. Singh, H. Y. Huang, J. D. Xie, J. Okamoto, C. T. Chen, T. Watanabe, A. Fujimori, M. Imada, D. J. Huang, Nat. Commun. 13, 7906(1-9) (2022).

[9] Y. Yamaji, T. Yoshida, A. Fujimori, and M. Imada, Phys. Rev. Research 3, 043099 (2021).

[10] D. Wu, et al., arXiv:2302.04919.

[11] R. Z. Xu, T. Okubo, S. Todo and M. Imada Compt. Phys. Commun. 277, 108375 (2022).

### 2-3. 活動（研究会の活動等）

#### (1) [高温超伝導体の第一原理電子状態解析]のためのミーティング

・銅酸化物ミーティング；令和 4/4/7、4/28、5/25、6/16、7/12、8/2、8/26、9/29、10/20、11/24、12/19、令和 5/1/19、3/2 計 13 回開催

・Bi2201 meeting；令和 4/4/5、4/12、4/12、4/19、4/28、5/12、5/24、6/1、6/9、6/16、6/23、6/30、7/12、7/20、7/26、8/2、8/16、8/24、8/31、9/6、9/13、9/27、10/6、10/14 計 24 回開催

#### (2) [トポロジカル物質の第一原理電子状態解析]のためのミーティング

・dmit meeting；令和 4/4/14、5/6、6/1、6/22、7/11、7/27、8/17、9/6、10/4、10/25、11/16、12/12、令和 5/1/13、2/20、3/20 計 15 回開催

#### (3) [計算結果の国際的なクロスチェック]

量子多体ソルバーの精度の国際検証のプロジェクトが、Github 上で進み、我々からハバード模型、スピン模型に関してベンチマーク結果を示し、他グループのベンチマークとも合わせ公表の準備を進めた。

#### (4) [アウトリーチ・人材育成]

・アウトリーチ

プレスリリース；令和 4.4.22 「有機固体で実現する量子スピン液体の特異な性質を解明 人工ニューラルネットワーク第一原理計算による量子物質設計へ」 井戸 康太（東京大学）、吉見 一慶（東京大学）、三澤 貴宏（北京量子信息科学研究院）、今田 正俊（早稲田大学）

CCMS Web ハンズオン H $\Phi$  講習会；令和 4.11.21（オンライン開催、共催）

<https://ccms.issp.u-tokyo.ac.jp/event/5659>

・人材育成

早稲田大学にて 2 名、物質・材料研究機構にて 1 名の PD を雇用し、若手育成につとめた。

#### (5) その他①

計算手法高度化および量子流体と高温超伝導の課題整理と課題参加者、協力者の成果を情報交換するミーティングを実施

・コードの高度化、富岳へのチューニングのためのミーティング；令和 4/4/27、5/26、6/29、7/26、8/25、9/29、10/24、11/28、1/11、令和 5/2/28 計 10 回開催

・QPI のデータ解析のためのミーティング；令和 4/4/6、4/11、4/14、4/21、5/2、5/12、5/18、5/30、6/6、6/15、6/27、7/14、7/20、7/29、8/5、8/12、8/25、8/31、9/8、9/23、10/4、10/13、10/19、10/27、11/7、11/14、11/22、11/29、12/12、12/19、12/26、令和 5/1/5、1/11、1/18、1/24、1/30、2/8、2/17、3/3、3/10、3/15、3/23、3/30 計 43 回開催

・QPI データの実験密連携、統合分光のためのミーティング；令和 4/4/25、5/24、6/9、7/29、8/16、9/7、9/28、10/20、11/10、11/21、12/27、令和 5/1/13、2/3、3/6 計 14 回開催

・3種の分光実験と富岳計算の密連携のための統合分光ミーティング；令和4/4/25、5/31、7/12、8/26、10/7、11/15、令和5/1/10、3/2 計8回開催

(6) その他②

国際ワークショップ「Integrated Spectroscopy for Strong Electron Correlation -Theory, Computation and Experiment」を共同開催（令和4.12.5-8）

4日間に渡り、13か国116名（内、オンライン：34名）が参加し、理論、計算および実験物理学の国際的な協創を促進するため、高温超伝導の発現機構解明と量子流体の典型としての量子スピン液体の本性解明を目指した我々のプロジェクトの紹介を行なった。また富岳の他のプロジェクトとの共通課題について意見交換した。

2-4. 実施体制

業務項目	担当機関	担当責任者
(1) 高温超伝導体の第一原理電子状態解析	早稲田大学（東京都新宿区大久保3-4-1）、物質・材料研究機構（茨城県つくば市並木1-1）	今田正俊（早稲田大学・上級研究員）、山地洋平（物質・材料研究機構・主任研究員）
(2) トポロジカル物質の第一原理電子状態解析	物質・材料研究機構（茨城県つくば市並木1-1） 東京大学（千葉県柏市柏の葉5-1-5）	山地洋平（物質・材料研究機構・主任研究員） 井戸康太（東京大学・助教）
(3) 強相関系実験データの機械学習解析	早稲田大学（東京都新宿区大久保3-4-1）	今田正俊（早稲田大学・上級研究員）
(4) 計算結果の国際的なクロスチェック	早稲田大学（東京都新宿区大久保3-4-1）、慶應義塾大学（横浜市港北区日吉3-14-1）、Flatiron Institute 他（162 Fifth Avenue New York, New York 10010）、国際連携10機関	今田正俊（早稲田大学・上級研究員） 野村悠祐（慶応大学・准教授）

(5) アウトリーチ・人材育成	物質・材料研究機構（茨城県つくば市並木 1-1）、早稲田大学（東京都新宿区大久保 3-4-1）	山地洋平（物質・材料研究機構・主任研究員）、今田正俊（早稲田大学・上級研究員）
(6) コードの高度化、「富岳」へのチューニング	東京大学（東京都文京区本郷 7-3-1、千葉県柏市柏の葉 5-1-5）、物質・材料研究機構（茨城県つくば市並木 1-1）、早稲田大学（東京都新宿区大久保 3-4-1）	RuQing Xu（東京大学・博士課程 2 年）、井戸康太（東京大学・助教）、山地洋平（物質・材料研究機構・主任研究員）、今田正俊（早稲田大学・上級研究員）

## 別添1 学会等発表実績

<雑誌論文> (総計 23 件すべて査読付き) 当該プロジェクト成果内容に関連するものに「#」を付す。

- (1) # “Unconventional exciton evolution from the pseudogap to superconducting phases in cuprates”, A. Singh, H. Y. Huang, J. D. Xie, J. Okamoto, C. T. Chen, T. Watanabe, A. Fujimori, M. Imada, D. J. Huang, Nat. Commun. 13, 7906(1-9) (2022).
- (2) # “Ab initio low-energy effective Hamiltonians for the high-temperature superconducting cuprates Bi<sub>2</sub>Sr<sub>2</sub>CuO<sub>6</sub>, Bi<sub>2</sub>Sr<sub>2</sub>CaCu<sub>2</sub>O<sub>8</sub>, HgBa<sub>2</sub>CuO<sub>4</sub>, and CaCuO<sub>2</sub>”, Jean Baptiste Morée, Motoaki Hirayama, Michael Thobias Schmid, Youhei Yamaji, Masatoshi Imada, Phys. Rev. B 106, 235150(1-22) (2022).
- (3) # “Optimized implementation for calculation and fast-update of Pfaffians installed to the open-source fermionic variational solver mVMC”, RuQing G. Xu, Tsuyoshi Okubo, Syngge Todo, Masatoshi Imada, Comput. Phys. Commun. 277, 108375 (2022).
- (4) # “Unconventional dual 1D-2D quantum spin liquid revealed by ab initio studies on organic solids family”, Kota Ido, Kazuyoshi Yoshimi, Takahiro Misawa and Masatoshi Imada, npj Quantum Materials volume 7, 48 (1-10) (2022).
- (5) # “Ab initio materials design of superconductivity in d<sub>9</sub> nickelates”, Motoharu Kitatani, Yusuke Nomura, Motoaki Hirayama, and Ryotaro Arita, APL Materials 11, 030701(1-7) (2023).
- (6) # “Fermi Surface Expansion above Critical Temperature in a Hund Ferromagnet”, Yusuke Nomura, Shiro Sakai, and Ryotaro Arita, Phys. Rev. Lett. 128, 206401(1-6) (2022).
- (7) # “Investigating Network Parameters in Neural-Network Quantum States”, Yusuke Nomura, J. Phys. Soc. Jpn. 91, 054709(1-5) (2022).
- (8) # “Importance of self-consistency in first-principles Eliashberg calculation for superconducting transition temperature”, T. Wang, T. Nomoto, T. Koretsune, and R. Arita, J. Phys. Chem. Solids 173 111348(1-5) (2023).
- (9) # “Superconductivity in infinite-layer nickelates”, Y. Nomura and R. Arita, Rep. Prog. Phys. 85 052501(1-20) (2022).
- (10) # “Optimal alloying in hydrides: Reaching room-temperature superconductivity in LaH<sub>10</sub>”, T. Wang, J.A. Flores-Livas, T. Nomoto, Y. Ma, T. Koretsune, and R. Arita, Phys. Rev. B 105, 174516(1-12) (2022).
- (11) # “Quantum and temperature effects on the crystal structure of superhydride LaH<sub>10</sub>: A path integral molecular dynamics study”, Y. Watanabe, T. Nomoto, and R. Arita, Phys. Rev. B 105, 174111(1-6) (2022).
- (12) # “Electronic configurations and magnetic properties of Mn ions in the diluted magnetic semiconductor Ba<sub>1-x</sub>K<sub>x</sub>(Zn<sub>1-y</sub>Mn<sub>y</sub>)<sub>2</sub>As<sub>2</sub> studied by x-ray magnetic circular dichroism and resonant inelastic x-ray scattering”, H. Suzuki, G. Q. Zhao, J. Okamoto, S. Sakamoto, Z.-Y. Chen, Y. Nonaka, G. Shibata, K. Zhao, B. J. Chen, W.-B. Wu, F.-H. Chang, H.-J.

- Lin, C.-T. Chen, A. Tanaka, M. Kobayashi, Bo Gu, S. Maekawa, Y. J. Uemura, C. Q. Jin, D. J. Huang, and A. Fujimori, J. Phys. Soc. Jpn. 91, 064710(1-5) (2022).
- (13)# “Acoustic plasmons and conducting carriers in hole-doped cuprate superconductors”, A. Singh, H. Y. Huang, C. Lane, J. H. Li, J. Okamoto, S. Komiya, R. S. Markiewicz, A. Bansil, A. Fujimori, C. T. Chen, and D. J. Huang, Phys. Rev. B 105, 235105(1-9) (2022).
- (14)# “Exciton dynamics uncovering electron fractionalization in superconducting cuprates”, A. Singh, H. Y. Huang, J. D. Xie, J. Okamoto, C. T. Chen, T. Watanabe, A. Fujimori, M. Imada, and D. J. Huang, Nat. Commun. 13, 7906(1-9) (2022).
- (15)# “Connecting the one-band and three-band Hubbard models of cuprates via spectroscopy and scattering experiments”, K. Sheshadri, D. Malterre, A. Fujimori, and A. Chainani, Phys. Rev. B 107, 085125(1-9) (2023).
- (16)# “一軸性圧力下での高温超伝導体”, 藤森淳, 中田勝, 固体物理 57, 297-306 (2022).
- (17)# “Direct Observation of the Topological Surface State in the Topological Superconductor 2M-WS<sub>2</sub>.” S. Cho, S. Huh, Y. Fang, C. Hua, H. Bai, Z. Jiang, Z. Liu, J. Liu, Z. Chen, Y. Fukushima, A. Harasawa, K. Kawaguchi, S. Shin, T. Kondo, Y. Lu, G. Mu, F. Huang, and D. Shen, Nano Letters 22, 8827-8834 (2022).
- (18)# “Coexistence of Strong and Weak Topological Orders in a Quasi-One-Dimensional Material”, D.-Y. Wang, Q. Jiang, K. Kuroda, K. Kawaguchi, A. Harasawa, K. Yaji, A. Ernst, H.-J. Qian, W.-J. Liu, H.-M. Zha, Z.-C. Jiang, N. Ma, H.-P. Mei, A. Li, T. Kondo, S. Qiao, and M. Ye, Physical Review Letters 129, 146401(1-6) (2022).
- (19)# “Angle-resolved photoemission spectroscopy”, H. Zhang, T. Pincelli, C. Jozwiak, T. Kondo, R. Ernstorfer, T. Sato, and S. Zhou, Nature Reviews Methods Primers 2, 54(1-22) (2022).
- (20)# “Visualization of optical polarization transfer to photoelectron spin vector emitted from a spin-orbit coupled surface state”, K. Kuroda, K. Yaji, R. Noguchi, A. Harasawa, S. Shin, T. Kondo, and F. Komori, Physical Review B 105, L121106(1-6) (2022).
- (21)# “Large anomalous Hall effect induced by weak ferromagnetism in the noncentrosymmetric antiferromagnet CoNb<sub>3</sub>S<sub>6</sub>”, H. Tanaka, S. Okazaki, K. Kuroda, R. Noguchi, Y. Arai, S. Minami, S. Ideta, K. Tanaka, D. Lu, M. Hashimoto, V. Kandyba, M. Cattelan, A. Barinov, T. Muro, T. Sasagawa, and T. Kondo, Physical Review B 105, L121102(1-7) (2022).
- (22)# “Selective observation of surface and bulk bands in polar WTe<sub>2</sub> by laser-based spin- and angle-resolved photoemission spectroscopy”, Y. Wan, L. Wang, K. Kuroda, P. Zhang, K. Koshiishi, M. Suzuki, J. Kim, R. Noguchi, C. Bareille, K. Yaji, A. Harasawa, S. Shin, S.-W. Cheong, A. Fujimori, and T. Kondo, Physical Review B 105, 085421(1-7) (2022).
- (23)# “Superconductivity in Bilayer  $t-t'$  Hubbard Models”, Akito Iwano, Youhei Yamaji, J. Phys. Soc. Jpn. 91, 094702(1-16) (2022).

<学会発表> (以下の大規模会議での代表例を含めて主な国際会議招待講演だけで計 26 件)

- (1) “Electron fractionalization and cuprate superconductivity” , M. Imada, International Superstripes Conference 2022 (Rome, Italy, June, 20-24, 2022).
- (2) “Variational studies on classical simulation of quantum many-body problem and integrated analyses of spectroscopic experimental data — How can they describe complex real world well ?” , M. Imada, Variational Learning for Quantum Matter Bernoulli Workshop - EPFL (Lausanne, Switzerland, July 4-8, 2022).
- (3) “Variational Quantum Monte Carlo and Beyond” , M. Imada, QMC in the Next Decade Flatiron Institute Center for Computational Quantum Physics (New York, USA, Sept. 20-23 2022).
- (4) “Artificial neural networks for exploring quantum many-body physics” , Yusuke Nomura, Variational Learning for Quantum Matter (Lausanne, Switzerland, July 4, 2022).
- (5) “Symmetry-adapted Wannier functions” , Yusuke Nomura, Wannier 2022 Summer School (online May 20, 2022).
- (6) “Ab initio magnetic structure prediction for topological magnets “ , R. Arita, APS March Meeting 2023, (Las Vegas, US, March 5-10 2023).
- (7) “First-principles study of superconductivity in superhydrides under high pressure “ , R. Arita, Spectroscopies of Novel Superconductors (SNS) 2022 (Bangalore, India, December 12-16 2022).
- (8) “Recent advances in DFT calculations of topological magnetic materials “ , R. Arita, Topology in Magnetic Materials (Herzberg, Switzerland November 22-24 2022).
- (9) “First-principles calculation of Tc for conventional and unconventional superconductors “ , R. Arita, JLU global lectures, ICCMS (Jilin University, China, August 16 2022).
- (10) “First-principles study on superconductivity in d9 correlated electron systems “ , R. Arita, International Workshop on Recent Progress in Superconductivity (Yongpyong, Korea, August 9-11 2022).
- (11) “Ab initio study on superconductivity in hydrides “ , R. Arita, IUPAP Conference on Computational Physics (Online (Zoom Meeting) August 1-4 2022).
- (12) “Quantum and temperature effects on crystal structure of LaH10 “ , R. Arita, Challenges in designing room temperature superconductors (L’Aquila, Italy, July 26-29 2022).
- (13) “Path integral molecular dynamics study on the P-T phase diagram of LaH10 “ , R. Arita, Superstripes 2022 (Rome, Italy, June 20-24 2022).
- (14) “Electron fractionalization in the pseudogap state of cuprates revealed by resonant inelastic x-ray scattering” , A. Fujimori, International Conference on Quantum Materials and Technologies (ICQMT2022) (Milas-Bodrum, Turkey-online, October 17, 2022).
- (15) “Spectroscopic manifestations of electron fractionalization in the pseudogap state of cuprates” , A. Fujimori, A. Singh, M. Horio, S. Sakai, M. Imada, and D.-J. Huang, 2nd Global Summit on Condensed Matter Physics (CONMAT2022) (Dubai-online, October 18, 2022).

- (16) “Spectroscopic manifestations of electron fractionalization in the pseudogap state of cuprates”, A. Fujimori, A. Singh, M. Horio, S. Sakai, M. Imada, D.-J. Huang, Spectroscopies in Novel Superconductors (SNS2022) (Bangalore, December 12, 2022).
- (17) “Design and Control of Topological Phases in Quasi-1D Stacked Materials Visualized by ARPES”, T. Kondo, Workshop: Quasi-One-Dimensional Topological Quantum Materials - Designing Materials to Revolutionize and Engineer our Future (Richardson, USA, January 5, 2023).
- (18) “Unveiling doped Mott states of high-Tc cuprate superconductors”, T. Kondo, 2nd International Symposium on Trans-Scale Quantum Science (Tokyo, Japan, November 9, 2022).
- (19) “Unveiling doped Mott states of high-Tc cuprate superconductors with disorder removed”, T. Kondo, 2022 RCQM Workshop on Strange Metals and Emergent Phases in Materials and Structures (Houston, USA, November 2, 2022).
- (20) “Material design with the van der Waals stacking of bismuth- halide chains realizing a higher-order topological insulator”, T. Kondo, IBS-CALDES Science Meeting (Pohang, Korea, October 5, 2022).
- (21) “APREP studies unveiling doped Mott states of high-Tc cuprate superconductors with disorder removed”, T. Kondo, International workshop on Microscopic Properties of Quantum Materials (Sapporo, Japan, August 1, 2022).
- (22) “Doped Mott states in clean CuO<sub>2</sub> planes of high-Tc cuprates”, T. Kondo, 13th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity (Vancouver, Canada, July 20, 2022).
- (23) “Topological phase and Devil’s staircase transition of the electronic structures in cerium monpnictides”, T. Kondo, International Workshop on Correlations and Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy (New York, USA, July 13, 2022).
- (24) “Small Fermi pockets emerging in clean CuO<sub>2</sub> planes of high-Tc cuprates”, T. Kondo, CIFAR program (Toronto, Canada, May 4, 2022).
- (25) “Formation of small Fermi pockets in extremely clean CuO<sub>2</sub> layers of high-Tc cuprates”, T. Kondo, OPTICS and PHOTONICS International Congress (Yokohama, Japan, April 21, 2022).
- (26) “Neural-network and numerical analysis of self-energy and superconductivity in copper oxides”, Y. Yamaji, International Workshop on Correlations and Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy (CORPES22) (Online, July 15, 2022).

<その他>

- (1) 第17回凝縮系科学賞  
野村悠祐

<https://cmsp.phys.s.u-tokyo.ac.jp/award-recipients/award2022/>

- (2) 日本物理学会第23回論文賞 日本物理学会 (2023年)

金子隆威、森田悟志、今田正俊

<https://www.jps.or.jp/activities/awards/ronbunsyo/ronbun28-2023.php>

- (3) 第1回 HPCI ソフトウェア賞開発部門賞最優秀賞 HPCI コンソーシアム(2023)  
mVMC 開発者チーム (井戸康太、森田悟史、吉見一慶、本山裕一、加藤岳生、RuQing Xu、河村光晶、今田正俊、三澤貴宏) (2023)
  
- (4) 第1回 HPCI ソフトウェア賞開発部門賞優秀賞 HPCI コンソーシアム(2023)  
HΦ開発者チーム (河村光晶、吉見一慶、三澤貴宏、井戸康太、本山裕一、山地洋平)