

令和2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3年12月24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つ向から挑戦する。「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、基礎物質科学の根源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2年度(報告年度)の実施内容

2-1. 当該年度(令和2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] 典型的でありながら常伝導相の電子状態すら未解明な鉄系超伝導体 FeSe(及び Te ドープによる派生物質)、超伝導転移温度上昇の鍵を握る現在の常圧下最高の転移温度を誇る多層型銅酸化物高温超伝導体等について、高速高並列計算が可能な「富岳」による最高精度の第一原理有効ハミルトニアンを網羅的に導出を行う。さらに FeSe 及び一層と二層銅酸化物の有効ハミルトニアンについて、「富岳」を用いて初めて実行可能となる「京」での計算限界の数倍から十倍のサイズの(数千電子を超える)大規模計算によって高精度かつ高信頼性の解を得る。そして、解から計算されるスピン構造因子と凝縮エネルギー、超伝導ギャップ構造と、直接対応する熱力学測定、X線散乱や光電子分光法測定データとの比較を行い、超伝導転移温度とこれら物理量との相関に代表される超伝導の特徴抽出を行う。実験データとの比較には「富岳」で初めて達成できる高精度と高信頼性の計算結果が必要不可欠となる。
- (2)[トポロジカル物質の第一原理電子状態解析] マヨラナ物質候補 Na_2IrO_3 、 RuCl_3 、及び Ru 新物質の最高精度の第一原理有効ハミルトニアンを「富岳」を用いて網羅的に導出し、「富岳」を用いて初めて実行可能となる数千電子を超える第一原理大規模計算によってそれらの有効ハミルトニアンを高精度に解析し、非弾性中性子散乱や X線散乱におけるトポロジカル相と磁性相との差から特徴の抽出を行う。
- (3)[強相関系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とを踏まえ、令和4年度は X線散乱実験と角度分解光電子分光を現象論に頼らず同時解析したり、X線散乱実験の詳細な実験データが新たに出てくることを期待してその詳細解析を行ったり、また準粒子干渉実験との統合解析にまで踏み込んで、実験密連携による3つの分光

データと計算科学手法を組み合わせた統合解析を行って、自己エネルギーの顕著な構造などの確からしさを疑いのないレベルへと引き上げ、従来の実験手法では抽出が不可能であった隠れた物理量の抽出を実現する。これにより高温超伝導や量子流体の普遍的様相の解明を進める。実空間・実時間自由度を網羅する1セットが数 GB におよぶ分光実験データを複数同時に扱いながら機械学習を行うため、「富岳」による AI 手法の高速化と大規模並列計算が必要不可欠である。この成果をもとに量子流体と超伝導の分数化機構について統一的に考察する。これは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こととなる。

(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との国際ワークショップを開催し、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体制を構築する。また国際ワークショップ及び個々の研究機関との協働を通じて国際連携方針と計算データの比較・共有方法の策定を行う。

(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）については、有能な人材を国内外から確保し、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]

「京」でのプロジェクトの成果として、銅酸化物の典型化合物 $\text{HgBa}_2\text{CuO}_{4+\delta}$ の第一原理計算で、反強磁性、ストライプ相（電荷不均一領域）、d 波超伝導相が実験と整合して定量的に再現された成果を受けて、研究を展開した。超伝導転移温度上昇の鍵を握る現在の常圧下最高の転移温度が報告されている多層型銅酸化物高温超伝導体、すなわち層の数の違いだけで超伝導転移温度が3倍以上も異なる、Bi 系銅酸化物の第一原理計算で、各

化合物の持つ個性、普遍性から超伝導転移温度を制御する因子を抽出するという、30 年以上解決していない難問への挑戦を開始した。Bi 系の3種の化合物に加えて CaCuO_2 も含めて、我々が令和元年までに開発した第一原理有効ハミルトニアンを導出するための手法を適用して、複数の有効ハミルトニアンを導くことで、令和3年度予定であった「富岳」本格運用に合わせて有効ハミルトニアンを量子多体計算ソルバーで解く大規模計算のための準備を行なった。また動的変分モンテカルロ法のアルゴリズム開発を進

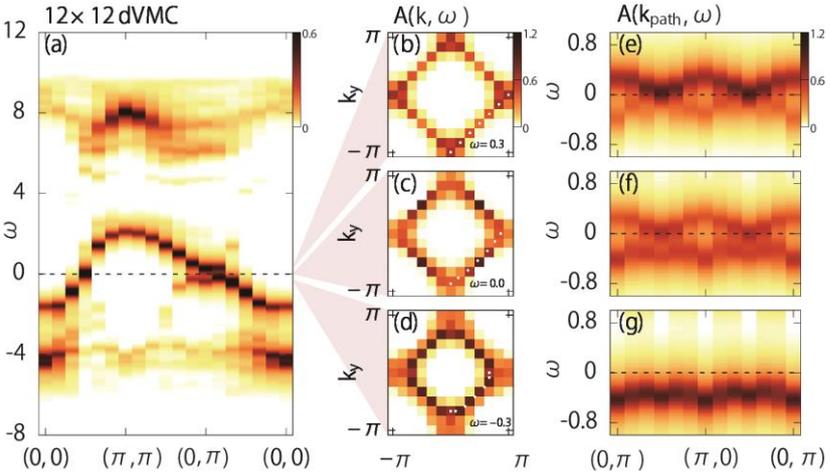


図 1: 量子ダイナミクスを表す物理量の一つである電子のスペクトル関数のエネルギー・運動量依存性(左図および中図) (角度分解光電子分光で測定できる物理量) を、独自に開発した動的変分モンテカルロ法を用いて計算した例。初めて 2 次元模型で(e,f)のように d 波超伝導ギャップ($\omega=0$ 付近の構造)を同定する解像度に達することにも成功した(右図)。(Charlebois and Imada [1])

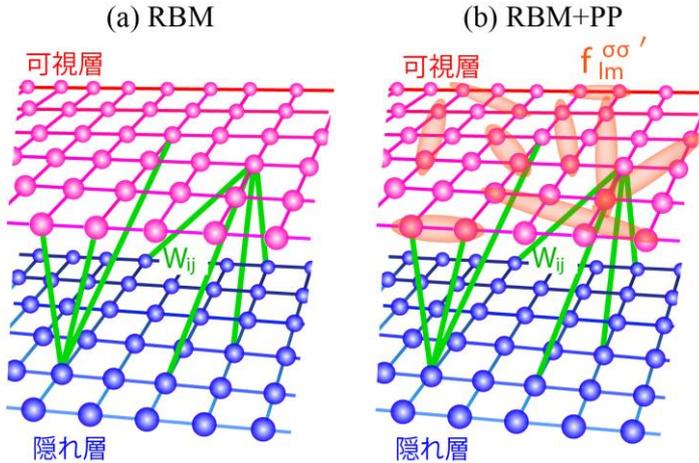


図 2: J_1 - J_2 模型を始め本プロジェクトの量子多体計算の高精度化のために変分モンテカルロ計算に実装されたニューラルネットワークの構造を示す模式図。(a)に対し、(b)の工夫で量子もつれをより効率的に取り込み、精度の飛躍的向上を果たしている。

(2) [トポロジカル物質の第一原理電子状態解析]

当初の計画に従いマヨラナ物質 α - RuCl_3 、 α - RuBr_3 および α - RuI_3 の第一原理有効ハミルトニアン挙動から金属絶縁体転移と電子状態の関係を解析して論文として公表し、ハロゲンの置換によるトポロジカル半金属-絶縁体転移を予測し実験グループに検証を提案した[2]。さらに絶縁体相で期待される量子スピン液体相の特徴抽出のために、第一原理電子状態解析を進めようとする過程で、令和3年度以降に重点的に

取り組む予定であった量子流体の解明のプロジェクトの重要な一翼を占めるパイロクロア構造のスピ液体物質候補 $\text{R}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ の有効ハミルトニアンの予備的解析においてトポロジカル量子スピン液体相実現の兆候が捕えられた。そこで進展が大きい研究をさらに進めるべく、令和2年度と3年度の研究配分を組み直し、 $\text{R}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ の有効ハミルトニアン解析に富岳の計算資源を集中的に投入することで、①長距離に及ぶ量子もつれ、②基底状態の20におよぶ縮退数、そして③創発粒子の励起スペクトルを発見し、これがこの物質の3次元量子流体としての特徴であることを明らかにし、翌年度(令和3年度)の本格研究を可能にした。

一方いくつかの分子性導体に量子スピン液体が見られるという実験報告があり、これを検証すべく一群の dmit 塩化合物(図3参照)について、我々の開発した手法に

め、実験結果との比較に有用な動的相関関数の計算手法の開発を行ない、成果を2編の論文として公表した。これにより角度分解光電子分光(ARPES)で測定されるスペクトル関数(図1参照)や、電荷相関関数の計算を高精度で行う準備が整った[1]。例えば d 波ギャップの同定にも成功した。さらに精度向上のため図2に示すようなニューラルネットワークを mVMC を使った電子系計算に実装した。同時に「富岳」への量子多体ソルバー mVMC のチューニング、コードの高度化を富士通との協力で行なった。ニューラルネットワークの変分モンテカルロ法への組み込みの部分で数十倍の高速化を達成した。

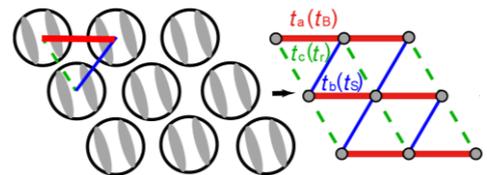


図3:量子スピン液体解明のために進めている dmit 塩の網羅計算に使われる化合物の結晶構造の模式図。(Ido, Yoshimi, Misawa, Imada)

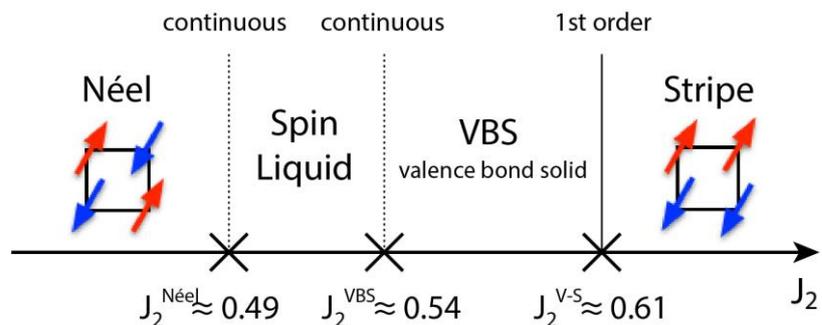


図4: $J_2/J_1 \sim 0.5$ 付近で確認された量子スピン液体相を含む J_1 - J_2 模型の相図。(Nomura, Imada [3])

基づいて導出された 5 種の化合物の第一原理有効ハミルトニアンを予備的に解析し、スピン液体を示す化合物を含めて、反強磁性相とスピン液体相を含む実験結果を全て再現できる見通しがつき、令和 3 年度の解析に備えた。

また J1-J2 模型と呼ばれる 2 次元的な量子ハイゼンベルク模型で上記の機械学習法（ニューラルネットワーク）の組み込みを活用し、また最新のサイズ依存性の少ない 2 つの方法を併用して、量子スピン液体相の領域があることを高い信頼度で確立した(図 4) [3]。まずソルバーの精度が先行研究のどれよりも高く、世界最高精度であることを示した。さらにサイズ依存性を減らせるレベルスペクトロスコピー法と相関比法を採用し、さらにこの 2 つの独立な方法が定量的に同じ結果を熱力学極限で示すことから、得られた相図の信頼性が確立した。このスピン液体において電子のスピンの分数化して、2 つのスピノンから構成されていることを説明しつつある(図 5)。また量子流体である量子スピン液体の性格が上記の 2 種類のスピン液体 ($R_2Ir_2O_7$ および dmit 塩化合物) のどれとも異なる、2 次元的な液体の性格を持つことを示した[3]。この成果は翌年度の論文公表につながりプレスリリースも行なわれた。またいくつかの国際会議招待講演で成果を発信した。

以上、1 次元、2 次元、3 次元と 3 種類の全く異なるスピン液体を次々に見出しつつあり、その性格の個別性の説明が進むとともに、分数化という共通の特徴が明らかとなった。このように、(1) – (2) を通じて当初の令和 2 年度本格研究計画になかった dmit 塩や $R_2Ir_2O_7$ などについても成果があった。

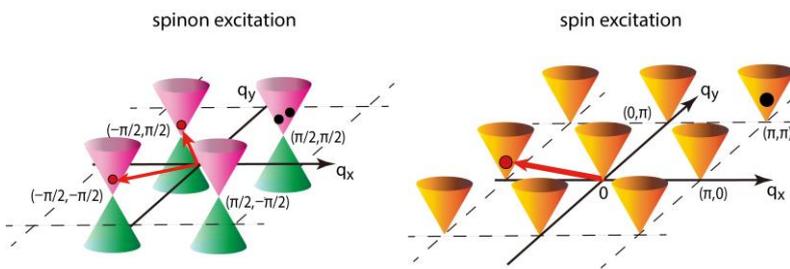


図 5: J1-J2 模型で実現される量子スピン液体においてスピンの 2 つのスピノンに分裂し、スピノンの励起がギャップのないディラック型の励起で表されることを示す模式図。(Nomura, Imada[3])

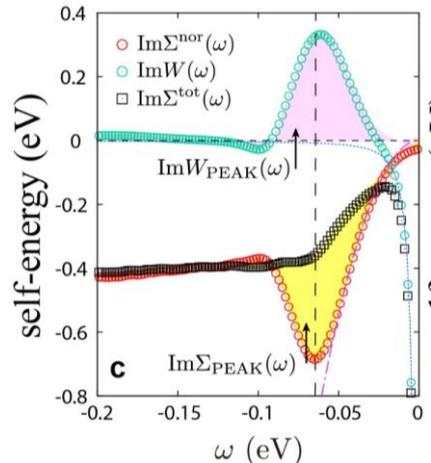


図 6: 銅酸化物高温超伝導体の角度分解光電子分光データから機械学習を用いて求めた自己エネルギーの正常部 (下) と異常部 (上) の寄与。超伝導を引き起こす主因である顕著なピークが見出され、その寄与がスペクトル関数で相殺される (黒シンボル) ことがわかる。(Y. Yamaji, T. Yoshida, A. Fujiimori, M. Imada [4])

(3) [強相関係験データの機械学習解析]

研究協力者である近藤（東京大学物性研究所（以下東大物性研と略記））が得た ARPES 測定から得られるスペクトル関数を機械学習解析して一体の電子の自己エネルギーを正常部分と異常部分の寄与に分けて抽出してみると、a) それぞれに顕著なピーク構造があるが、b) 角度分解光電子分光ではその寄与が完全に相殺して隠れてしまうこと、c) またそれにもかかわらず異常部分の寄与が超伝導を引き起こす主因になっていることを「京」のプロジェクトから引き続き令和 2 年度の本プロジェクトでも明らかにしてきた (図 6)。この a) から c) の結果の信頼性を批判的に検証するために、このような顕著な構造とその相殺を得ることのできなかつた先行研究の欠陥を詳細な比較検討により明らかにし、公表論文に加えた(図 7) [4]。また実験データの持つノイズや外的な要因の影響についても実験デ

ータの提供を受けて詳細に検討し、結論の信頼性を高める成果として公表論文に加えた[4]。この一連の成果は数件の国際会議招待講演で成果発信した。さらに公表された論文に関するプレスリリースを行い、数件のメディアによる紹介があった。

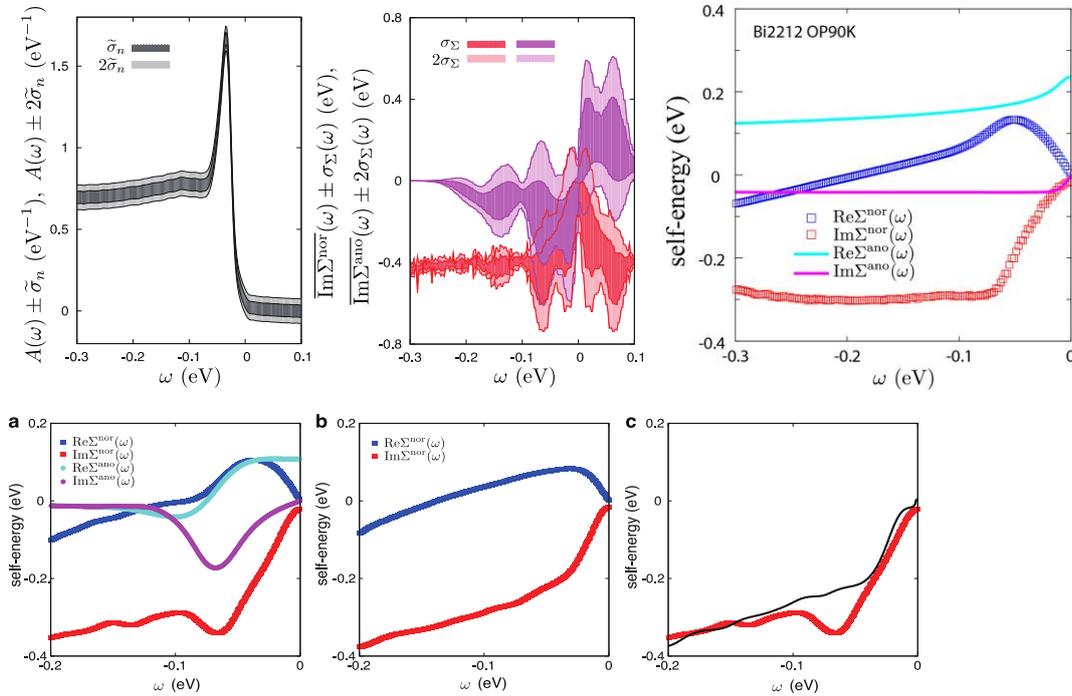


図 7: 今回の機械学習解析での自己エネルギー構造の堅牢性を示す例。上左; 実験のノイズに対する堅牢性、上中: 極端なノイズによる効果の検証、上右: 必ずしも物理的に保証されない仮定を置いた先行研究で自己エネルギーのピークが同定されない例。この解析が真である確率は 4%以下と見積もられる。下: 別の先行研究での仮定が下右の正しい構造(赤)と異なりピークを見落とすようす(黒実線)。(Yamaji, Yoshida, Fujimori, Imada [4])

また自己エネルギーのこのような顕著な構造と相殺という予想しなかった結果を説明する仮説として電子が分数化しているという仮説を我々は平成 28 年以来提唱し、また令和 2 年度にも分数化に関する論文をプレプリントとして公表し、令和 3 年度に出版されている。この分数化の帰結を吟味し、仮説の妥当性を検証すべく、分数化を表現する 2 成分フェルミオン模型が予測する分光実験データを求めた。その中でも電荷の動的な相関や励起子のダイナミクスを測定できる共鳴非弾性 X 線散乱の散乱スペクトル強度が電子の分数化が起きたときにある実験領域で超伝導相になったときに顕著な増幅を示し、これが分数化したときにのみ生じる現象であることを明らかにし、論文としてこの予言を公表した[5, 6]。研究協力者藤森（早稲田大学）の指導のもと、現在台湾の世界最高精度の実験装置でこの予言の妥当性の検証が行われている。

さらに研究協力者花栗（理化学研究所）のトンネル分光を用いた準粒子干渉の実験データの提供を受け、これと近藤（東大物性研）の角度分解光電子分光データを機械学習を用いて統合解析（複数の独立な実験手段によるデータと理論、計算を組み合わせた解析をこう呼ぶ）することによって、電子の分数化の妥当性をより深く検証する研究が進んでおり、まずは分数化が起きているという仮定を置いた実験データの解析が行われ、令和 3 年度の研究につながっている。以上、本プロジェクトの重要な柱である世界最先端実験との密連携が順調に進んだ。

(1)-(3)の分数化の発見とその原因の解明に関する成果をもとに高温超伝導体と量子流体に共通する性格として、2つの特徴が浮かび上がってきている。第一に電荷不均一や反強磁性のような古典的な自発的対称性の破れと、強く量子もつれした量子流体や超伝導が激しく競合する様相が明らかになってきた。また第二に今まで基本粒子（励起）であると思われていた電子や量子スピンの分数化して、もとの電子や量子スピンは分数化した粒子の複合粒子であることが明らかになってきており、強結合超伝導と量子流体を底流で結びつける学理の兆候が見えてきた。これを「富岳」本格運用に合わせて令和3年度もさらに追究する。

(4) [計算結果の国際的なクロスチェック]

プロジェクトを進める視野を広げ、この分野のコミュニティの情報交換のために、国内外の研究協力者との国際ワークショップを令和2年9月から10月にかけて開催し、量子多体ソルバーの精度検証の道筋や取り組む意義のある課題についての意見交換を行ない、その後の研究展開に活かした。また共同でクロスチェックするテーマを絞り込んで、その後の共同研究の展開につなげた。

(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、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(5)を参照。

(6) [コードの高度化、富岳へのチューニング]

申請時にはコロナ禍は予測できなかったが、結果としてコロナ禍でPDの採用が遅れ、執行できなかった予算を繰り越して、「富岳」へのチューニングや計算コードの高度化、高速化を進めることになり、これについても成果があった。コロナ禍による海外からの入国制限によって、「富岳」における量子多体ソルバーmVMCの効率的な成果創出に向けたチューニングおよび高機能化に影響が及んだため、これらの事業を令和3年度に繰り越して実施した。科学計算総合研究所とともに、A64FXにおける実行効率の1割以上の向上ならびに計算時間の3割ほどの削減、さらにA64FXのメモリ容量の小ささを補うための分散メモリ化を実施し、mVMCにおける最適化問題に用いられる共役勾配法のメモリ使用量の削減を達成した。

[1] M. Charlebois and M. Imada, Phys. Rev. X 10, 041023 (2020).

[2] K. Nawa, Y. Imai, Y. Yamaji et al., J. Phys. Soc. Jpn. 90, 123703 (2021).

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

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

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

[6] M. Imada, J. Phys. Soc. Jpn. 90, 111009 (2021).

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

令和2/4/17、5/15、6/5、6/25、7/20、8/13、9/1、10/22、11/17、12/7、2021/1/12、2/4、2/17、2/26、

3/2、3/4、3/11、3/29 計 18 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

令和 2/6/11、6/30、7/22、8/17、9/7、9/28、10/29、11/25、12/15、12/17、2021/1/14、2/3、2/22、3/8、3/31 計 15 回開催

(3) [強相関係数実験データの機械学習解析] および mVMC コード高度化の「科学計算研究所 (RICOS)」への外部委託に伴う RICOS との打合せ

令和 2/7/3、/7/20、10/28、/11/19、/12/7、令和 3/1/4、1/25、2/19、3/2、3/17、3/29、4/15、5/10、5/27、6/28、7/16、9/2、9/9、9/16、12/1、12/3、12/7、12/10、12/16 計 24 回開催

(4) [計算結果の国際的なクロスチェック]

国際ミーティングで、プロジェクト協力の国際メンバーとともに、数値手法の精度等について情報を交換し、クロスチェック対象を議論した。(下記項目(7)を参照)

(5) [アウトリーチ・人材育成]

・アウトリーチ

令和 2. 10. 16 第 10 回材料系ワークショップ ～「富岳」時代の物質科学シミュレーションの新展開～

「実験・理論・計算を統合する新たな分光手法で迫る高温超伝導の起源」山地 洋平 (東京大学)

令和 3. 2. 10 第 11 回材料系ワークショップ ～マテリアル DX を加速する「富岳」を活用した成果の創出に向けて～「機械学習を用いた量子多体波動関数表現：物理の難問であるフラストレーションのある量子スピン系への適用」野村 悠祐 (理化学研究所)

令和 3. 2. 16 計算物質科学人材育成コンソーシアム (PCoMS) シンポジウム&計算物質科学スーパーコンピュータ共用事業報告会「3D Quantum Spin Liquid on the Pyrochlore lattice - a large-scale variational Monte Carlo study」Rico Pohle (早稲田大学)

令和 3. 8. 13 プレスリリース 「機械学習手法により物理の難問「量子スピン液体」を解明 -スーパーコンピュータ「富岳」も用いた最先端の計算により実現-」野村 悠祐 (理化学研究所)、今田 正俊 (早稲田大学)

令和 3. 11. 9 プレスリリース 「人工ニューラルネットワークで明らかになった高温超伝導の隠れた起源」山地 洋平 (物質・材料研究機構)、藤森 淳 (早稲田大学)、今田 正俊 (早稲田大学)

上記プレスリリースは令和 3. 11. 9 鉄鋼新聞(4 面)、令和 3. 11. 10 日刊工業新聞(23 面)、令和 3. 12. 3 科学新聞(1 面)の 3 紙に掲載された。

・人材育成

早稲田大学にて 4 名、東京大学・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。

(6) 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

令和 2/7/27、7/28、11/2、11/6、2021/3/23、3/26 計 6 日開催

(7) その他② オンライン国際ミーティング「EFQM2020」を実施

9 カ国より 52 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実現を目指す各国の主導的な研究者が集結しオンラインで緊密な議論と今後の共同研究に向けて意見交換を行った。さらに国際的な高精度計算科学手法のクロスチェックのために、銅酸化物高温超伝導体の有効ハミルトニアンを計算対象として策定した。

Workshop : 令和 2/9/29、9/30、10/1、10/2

Webinar : 令和 2/10/5、10/6、10/13、10/19、10/20

計 9 日開催

2-4. 実施体制

実施項目	実施場所	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、東京大学	今田正俊 (早稲田大学)、三澤貴宏 (東京大学)、井戸康太 (東京大学)
(2) トポロジカル物質の第一原理電子状態解析	東京大学・物質・材料研究機構	山地洋平
(3) 強相関係数実験データの機械学習解析	理研、東京大学、物質・材料研究機構、早稲田大学	花栗哲郎 (理化学研究所)、近藤猛、山地洋平 (東京大学)、藤森淳、今田正俊 (早稲田大学)
(4) 計算結果の国際的なクロスチェック	東京大学・物質・材料研究機構、早稲田大学、Flatiron Institute 他、国際連携 8 機関	山地洋平 (東京大学・物質・材料研究機構)、今田正俊 (早稲田大学)
(5) アウトリーチ・人材育成	東京大学・物質・材料研究機構、早稲田大学	山地洋平 (東京大学・物質・材料研究機構)、今田正俊 (早稲田大学)

別添 1 学会等発表実績

- ・学会等発表（国際会議招待講演のみ）

Masatoshi Imada, International Conference on Quantum Complex Matter 2020, June 9 2020, Rome (online) "Ab initio and machine learning studies on cuprate superconductors"

A. Fujimori, Summer School of the IMPRS & MPI-UBC-UTokyo Center: Design and Synthesis of Quantum Materials, September 30 2020, Stuttgart (online) "Material trends in the chemical bonding and electronic structure of quantum materials"

T. Kondo, OPTICS and PHOTONICS International Congress 2020, Yokohama, Japan (online) "Various topological states of quasi-one-dimensional bismuth halides revealed by angle-resolved photoemission spectroscopy"

Tsuyoshi Okubo, Recent progress in theoretical physics based on quantum information theory, March 5 2021, YITP, Kyoto (Online), "Tensor Network study of honeycomb lattice Kitaev model"

Tsuyoshi Okubo, The International Workshop on Quantum Magnets in Extreme Conditions, March 26 2021, ISSP, Chiba (Online), "Large spin fluctuation in the magnetization process of frustrated square lattice Heisenberg magnets"

Youhei Yamaji, 33rd International Symposium on Superconductivity, December 2, 2020, AIST Tsukuba, Japan, "Hidden self-energies as origin of high-temperature superconductivity revealed by Boltzmann machine"

- ・論文

Takahiro Misawa, Kazuyoshi Yoshimi, and Takao Tsumuraya, "Electronic correlation and geometrical frustration in molecular solids: A systematic ab initio study of beta'-X[Pd(dmit)(2)](2)", Phys. Rev. Research 2, (2020).

Maxime Charlebois and Masatoshi Imada, "Single-Particle Spectral Function Formulated and Calculated by Variational Monte Carlo Method with Application to d-Wave Superconducting State", Phys. Rev. X 10, 041023 (2020).

Ryo Noguchi, Masaru Kobayashi, Zhanzhi Jiang, Kenta Kuroda, Takanari Takahashi, Zifan Xu, Daehun Lee, Motoaki Hirayama, Masayuki Ochi, Tetsuroh Shirasawa, Peng Zhang, Chun Lin, Cédric Bareille, Shunsuke Sakuragi, Hiroaki Tanaka, So Kunisada,

Kifu Kurokawa, Koichiro Yaji, Ayumi Harasawa, Viktor Kandyba, Alessio Giampietri, Alexei Barinov, Timur K. Kim, Cephise Cacho, Makoto Hashimoto, Donghui Lu, Shik Shin, Ryotaro Arita, Keji Lai, Takao Sasagawa, Takeshi Kondo, "Evidence for a higher-order topological insulator in a three-dimensional material built from van der Waals stacking of bismuth-halide chains", *Nat. Mater.* 20 (2021).

Peng Zhang, Ryo Noguchi, Kenta Kuroda, Chun Lin, Kaishu Kawaguchi, Koichiro Yaji, Ayumi Harasawa, Mikk Lippmaa, Simin Nie, Hongming Weng, V. Kandyba, A. Giampietri, A. Barinov, Qiang Li, G. D. Gu, Shik Shin, Takeshi Kondo, "Observation and control of the weak topological insulator state in ZrTe₅", *Nat. Commun.* 12 (2021).

Yuhki Kohsaka, "Removing background and estimating a unit height of atomic steps from a scanning probe microscopy image using a statistical model", *Rev. Sci. Instrum.* 92 (2021).

Marcin Raczkowski, Fakhre F. Assaad, Masatoshi Imada, "Local moments versus itinerant antiferromagnetism: Magnetic phase diagram and spectral properties of the anisotropic square lattice Hubbard model", *Phys. Rev. B* 103, 125137 (2021).

Chun Lin, Masayuki Ochi, Ryo Noguchi, Kenta Kuroda, Masahito Sakoda, Atsushi Nomura, Masakatsu Tsubota, Peng Zhang, Cedric Bareille, Kifu Kurokawa, Yosuke Arai, Kaishu Kawaguchi, Hiroaki Tanaka, Koichiro Yaji, Ayumi Harasawa, Makoto Hashimoto, Donghui Lu, Shik Shin, Ryotaro Arita, Satoshi Tanda, Takeshi Kondo, "Visualization of the strain-induced topological phase transition in a quasi-one-dimensional superconductor TaSe₃", *Nat. Mater.* 20 (2021).

Masatoshi Imada, "Resonant Inelastic X-Ray Scattering Spectra of Cuprate Superconductors Predicted by Model of Fractionalized Fermions", *J. Phys. Soc. Jpn.* 90, 074702 (2021).

Masatoshi Imada, "Charge Order and Superconductivity as Competing Brothers in Cuprate High-T_c Superconductors", *J. Phys. Soc. Jpn.* 90, 111009 (2021).

Yusuke Nomura, Nobuyuki Yoshioka, and Franco Nori, "Purifying Deep Boltzmann Machines for Thermal Quantum States", *Phys. Rev. Lett.* 127, 060601 (2021).

Yusuke Nomura and Masatoshi Imada, "Dirac-type nodal spin liquid revealed by refined quantum many-body solver using neural-network wave function, correlation ratio, and level spectroscopy", *Phys. Rev. X* 11, 031034 (2021).

Maxime Charlebois, Jean-Baptiste Morée, Kazuma Nakamura, Yusuke Nomura, Terumasa Tadano, Yoshihide Yoshimoto, Youhei Yamaji, Takumi Hasegawa, Kazuyuki Matsuhira, and Masatoshi Imada, "Ab initio derivation of low-energy Hamiltonians for systems with strong spin-orbit interaction: Application to Ca₅Ir₃O₁₂", *Phys. Rev. B* 104, 075153 (2021).

Fumihiro Imoto, Masatoshi Imada, and Atsushi Oshiyama, "Order-N orbital-free density-functional calculations with machine learning of functional derivatives for semiconductors and metals", *Phys. Rev. Research* 3, 033198 (2021).

Suguru Nakata, Masafumi Horio, Keisuke Koshiishi, Hagiwara, K, Chun Lin, Suzuki, M, Ideta, S, Kiyohisa TANAKA, Song, D, Yoshida, Y, Hiroshi Eisaki, Atsushi Fujimori, "Nematicity in a cuprate superconductor revealed by angle-resolved photoemission spectroscopy under uniaxial strain", *npj Quantum Mater.* 6, 86 (2021).

Youhei Yamaji, Teppei Yoshida, Atsushi Fujimori, and Masatoshi Imada, "Hidden self-energies as origin of cuprate superconductivity revealed by machine learning", *Phys. Rev. Research* 3, 043099 (2021).

Kazuhiro Nawa, Yoshinori Imai, Youhei Yamaji, Hideyuki Fujihara, Wakana Yamada, Ryotaro Takahashi, Takumi Hiraoka, Masato Hagihara, Shuki Torii, Takuya Aoyama, Takamasa Ohashi, Yasuhiro Shimizu, Hirotada Gotou, Masayuki Itoh, Kenya Ohgushi, and Taku J. Sato, "Strongly Electron-Correlated Semimetal RuI₃ with a Layered Honeycomb Structure", *J. Phys. Soc. Jpn.* 90, 123703 (2021).

S. Ideta, S. Johnston, T. Yoshida, K. Tanaka, M. Mori, H. Anzai, A. Ino, M. Arita, H. Namatame, M. Taniguchi, S. Ishida, K. Takashima, K. M. Kojima, T. P. Devereaux, S. Uchida, and A. Fujimori, "Hybridization of Bogoliubov Quasiparticles between Adjacent CuO₂ Layers in the Triple-Layer Cuprate Bi₂Sr₂Ca₂Cu₃O_{10+ δ} Studied by Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy", *Phys. Rev. Lett.* 127, 217004 (2021).