#### 柚木計算物性物理研究室

Computational Condensed Matter Physics Laboratory

准主任研究員 柚木 清司(工博) YUNOKI, Seiji (D.Eng)

### キーセンテンス:

- 1. 数値計算シミュレーションによる固体物質の電子状態研究
- 2. 量子多体系の基底状態および低エネルギー励起
- 3. 新しい計算物理的手法の開発

#### キーワード:

計算物性物理、理論物性物理、計算物理学的手法開発、量子多体系、遷移金属酸化物、ナノ物質科学、生物物質科学、酸化物へテロ接合体、界面・表面電子状態、スピントロニクス、物質設計、 強相関電子系、

## 研究概要

当研究室では、物質中で起こる多彩な量子現象を、電子状態をもとに理論的に解明するために、様々な数値計算シミュレーションを行っている。特に、我々は、遷移金属酸化物や低次元有機物質などの電子間クーロン相互作用の強い系(強相関電子系)を中心として、そこで現れる新奇な電子状態、集団現象として起こる量子多体現象、および量子輸送現象に興味をもっている。量子多体効果を正しく理解するために、既存の数値計算手法を用いた様々なシミュレーションを行うだけでなく、量子多体系一般に対する新しい計算物理学的手法開発にも積極的に取り組んでいる。最近は、遷移金属酸化物を中心とした様々な酸化物を用いて作られたヘテロ構造体で起こる量子現象、特に、酸化物ヘテロ構造体界面での電子状態・量子輸送現象の研究も行っている。この研究では、新しい機能を備えた遷移金属酸化物スピントロニクスデバイスの数値計算シミュレーションによる物質設計を目指している。

### 1. 酸化物ヘテロ構造体界面電子状態の量子シミュレーション(担当研究者名:柚木 清司)

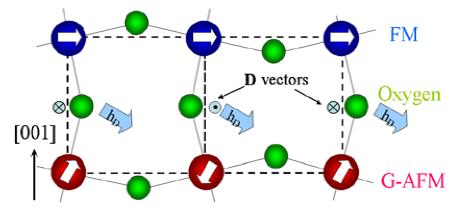
近年の酸化物薄幕技術の進歩により、原子層スケールの制度でヘテロ構造の設計・操作が可能になった。特に、最近では、様々な遷移金属元素を基にしたペロブスカイト型酸化物へテロ構造化合物が作成され、それらが示す興味深い物性が観測され始めた。一般に、遷移金属酸化物では、絶縁体、金属、磁性、超伝導、誘電性などの様々な異なった相が競合し、キャリア濃度や外部磁場・電場などのわずかな変化で全く異なった相(つまり、全く異なった物性)が出現する。それは、電子の電荷のみならずスピンと軌道の自由度を含めた三つの自由度が、格子の自由度も含めて、お互いに相互作用し合った結果現れる多体現象であると考えられている。遷移金属酸化物へテロ構造体の研究は、このような遷移金属酸化物の特徴を利用した、従来の半導体エレクトロニクスを超える、新しい機能を備えたデバイス開発を目指している。

EB効果とは、磁化曲線ヒステリシスループの中心がゼロ磁場からずれる現象で、以前よりAFM/FM接合界面を持つ磁性物質で観測されていた。また、EB効果は MR ヘッドなど様々な応用面でも現在利用されている。EBの起源としては様々なものが提案されているが、それらはいずれも完全に打ち消されていないAFM側の界面磁化に起因するものである。

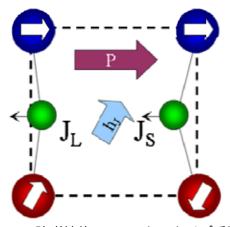
このEBが、最近、遷移金属酸化物を用いたペロブスカイト型へテロ構造体で観測された。ここでは、 AFMとして BiFeO3 や SrMnO3 などのGタイプAFMを用いており、界面磁化が完全に打ち消されている。 つまり、ここで観測されたEBは、従来の枠組みを超えた新たな起源によるものであることを示唆してい る。そこで、我々は、ペロブスカイト型へテロ構造体で本質的な酸素の格子歪に着目し、そのために有効 な(i)ジャロシンスキー・守谷交換相互作用、および(ii)強誘電分極による二つのEBの起源を提案した。G



タイプAFMのスタガード磁化とスタガードな(i) Dベクトルあるいは(ii)格子歪との相互作用により、接合界面に実効的に一様磁場が誘起され(図1と図2参照) そのためにEBが観測されるのである。我々は、この提案をモデルシミュレーションおよび第一原理バンド計算により確かめた。



**Fig.**1. 強磁性体(FM)とGタイプ反強磁性体(G-AFM)の[001]接合面。酸素の歪、スタガードな $\mathbf{D}$ ベクトルおよび実効的に誘起された一様磁場( $\mathbf{h}_D$ )も示してある。

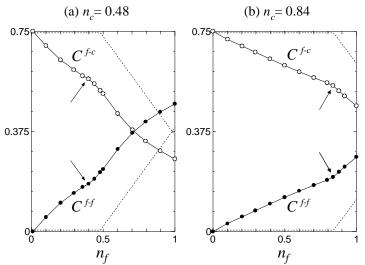


 ${
m Fig.2.}$  強磁性体( ${
m FM}$ )と ${
m G977}$  反強磁性体( ${
m G-AFM}$ )の ${
m [001]}$  接合面。酸素の歪、強誘電分極( ${
m P}$ ) 接合界面間のスピン交換相互作用( ${
m J_L}$ と ${
m J_S}$ ) および実効的に誘起された一様磁場( ${
m h_J}$ )も示してある。

# 2. 希薄近藤系から重い電子系へのクロスオーバー (担当研究者名:渡部 洋)

希土類・アクチナイド元素を構成要素とする重い電子系物質では、超伝導・磁気秩序・価数揺動といった興味深い現象が見られ、現在、さかんに研究が行われている。この系では結晶格子上に強く局在した f 電子が伝導電子と結合して有効質量の大きな (重い)準粒子を形成している。ここで、元素置換によって f 電子密度  $n_f$ を減らしていくと、 $n_f$ が小さい極限では一不純物近藤効果が見られる希薄近藤系となる。近年、希薄近藤系は量子ドットなど、応用面でも大きな注目を集めている。ただし  $n_f$ の変化によって希薄近藤系から重い電子系に移行していく様子は物質によって大きく異なり、詳細はいまだ明らかになっていない。我々は、f 電子をランダムにドープした近藤格子模型に対して、変分モンテカルロシミュレーションを行うことにより、この問題に取り組んだ。その結果、伝導電子密度  $n_c$ と  $n_f$ が同程度になると、伝導電子を通じた f 電子間の相関が増強され(図3)、希薄近藤系から重い電子系へのクロスオーバーが起こることを見出

した。これは伝導電子によるf電子スピンのスクリーニングが「個別的」から「集団的」になった結果であり、重い電子系における大きな有効質量と深く関わっていることを明らかにした。



**Fig.**3. c-f, f-f 電子間のスピン相関の変化。矢印で示された f 電子密度  $n_f$ で f-f 相関が大きく増強されている。

3. 動的密度行列繰り込み群法を用いた変分クラスター近似の開発とその応用(担当研究者名:白川 知功) 自己エネルギー汎関数法を用いた変分クラスター近似は、強相関電子系に対する理論的計算手法として 現在注目を集めている。しかしながら、現時点では、クラスターを解く際に厳密対角化法が用いられてい るためクラスターのサイズに制限があり、その適用範囲が限られている。そこで、我々は動的密度行列繰 り込み群法(DDMRG)を用いてこの問題を克服することを試みた。

DDMRGでは縮小されたヒルベルト空間を扱うため、変分原理を用いた補正ベクトル法が用いられる。補正ベクトルの振動数実軸方向依存性は非常に強く、有効的なヒルベルト空間を作るためには各振動数に応じて補正ベクトルの変分問題を解かなければ十分な精度が得られない。そこで我々はグリーン関数の振動数虚軸方向依存性を用いたグランドポテンシャルの自己エネルギー汎関数を用いることで、DDMRGで行う変分問題を解く回数を大幅に減らし、計算コストの向上に成功した。

次に、この方法を準一次元八バード模型に適用し、空間次元クロスオーバーによる 1 粒子励起スペクトルの変化を明らかにした。一次元八バード鎖が弱い鎖間ホッピングで結びついた二次元模型(準一次元八バード模型)は、弱結合繰り込み群理論から、系の電子密度がハーフフィリングの時、無限小の鎖間ホッピングが導入されれば、反強磁性相関が長距離秩序となることが予想されている。我々の計算結果は弱結合理論とコンシステントであり、図 4 にこのとき得られたスペクトル形状の変化の様子を示す。鎖間ホッピングが無い場合には、一次元特有のスピン電荷自由度の分離のため、それぞれの自由度に対応するブランチ(低エネルギー側がスピノンブランチ、高エネルギー側がホロンブランチ)が  $(k_x,k_y)$  =  $(\Box/2,0)$  ~  $(\Box,0)$  付近に見られる。鎖間ホッピングを導入すると、元々ホロンブランチがあった部分が強く抑制され、元々スピノンブランチがあった部分が強調されている。その結果、スペクトルは準粒子的描像へと変化していることなどが分かる。

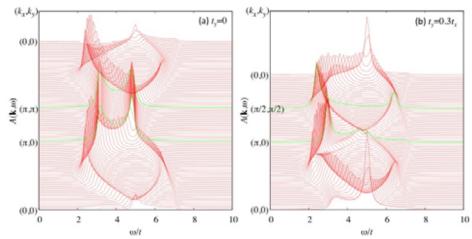


Fig. 4 . (a) 鎖間ホッピングがない場合 ( $t_y = 0$ ) および(b) 鎖間ホッピングがある場合 ( $t_y = 0.3 t_x$ ) の 1 粒子励起スペクトル。オン・サイトクーロン相互作用の大きさは  $U = 8t_x$ ( $t_x$ : 鎖内ホッピングの大きさ)。

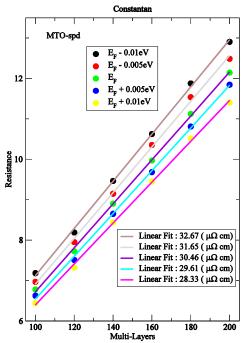
## 4. 金属接合体の熱起電力に対する第一原理シミュレーション (担当研究者名: Qinfan Zhang)

最近、福島らは、CuNi/Au 接合体において、最大 1mW の冷却能を持つ巨大なペルティエ冷却効果を観測した。この実験結果を動機として、我々は金属接合体に対する熱電効果の理論的研究を行っている。金属接合体のペルティエ係数を定量的に調べるために、バルクおよび接合界面での熱電パラメータを、密度汎関数法を基にした第一原理シミュレーションにより計算し、さらに、Landauer-Büttiker 理論を用いて量子輸送係数を計算している。

まず、テストケースとしてバルク CuNi(コンスタンタン)の熱起電力の計算を行った。ここでは、はじめに電気抵抗をフェルミ準位  $E_F$  近傍で CuNi 層の層数の関数として計算する(図 5 参照 )。図 5 より明らかなように、電気抵抗はオームの法則で期待されたように層数に比例して増加していることが分かる。したがって、電気抵抗率は電気抵抗の層数に対する傾きとして与えられ、フェルミエネルギー近傍で約 30.46  $\mu\Omega cm$  と見積もられた。ゼーベック係数をモット則より求め、最終的に、室温での熱起電力は約 171.75  $nV/K^2$  と見積もられる。これは実験結果とよく一致している。

次に、上述したバルクに対する計算方法を用いて、CuNi/Au 接合体におけ輸送特性を調べた。散乱領域として10層の CuNi と10層の Au を考慮し、それぞれ CuNi リードと Au リードにつながった系を取り扱った。CuNi リードには virtual crystal 近似を、散乱領域ではコヒーレントポテンシャル近似を適用した。また、CuNi と Au の格子定数の違いによる格子緩和を考慮した場合と考慮していない場合の二つのケースを取り扱った。シミュレーションの結果、接合界面による熱起電力は両ケースとも約 100 nV/K² となった。この値は、バルクの値と比べて非常に大きいことが分かる。つまり、この計算結果は、CuNi/Au などの金属接合体対して、接合界面による熱伝導の寄与は一般に大きく、実験結果との定量的な比較を行う場合は、接合界面の寄与を理論計算において正しく考慮する必要があることを意味している。

#### Residual Resistivity



**Fig.**5. CuNi におけるフェルミ準位 E<sub>F</sub> 近傍での電気抵抗対 CuNi 層数。オームの法則より傾きが電気抵抗率。

## 5. 低次元量子多体系に対するエンタングルメント摂動理論 (担当研究者名:Lihua Wang)

近年開発されたエンタングルメント摂動理論(EPT)を用いて、様々な低次元量子多体系の基底状態および低エネルギー励起状態の性質を調べた。EPTは、量子多体系の基底状態に対して行列積アンザツを仮定し、行列積表示された波動関数を変分原理より数値的に最適化する方法である。この方法は、原理的には、一次元のみならず二次元ボーズ系およびフェルミオン系にも適用できる。

まず、EPTを(外部磁場中の)一次元スピン 1/2およびスピン 1ハイゼンベルグ模型に適用し、EPTの有用性を調べた。その結果、無限系に対して、2体および4体スピン相関関数を、これまでに数値的手法で得られた精度をはるかに超える精度で、しかもこれまでと同程度の計算時間で得ることに成功した。次に、この方法を不均一な系に拡張し、一次元レーザー格子中にトラップされたボーズ原子に対する模型(一次元ボーズハバード模型)に適用し基底状態の相図を調べた。さらに、元々は一次元スピンあるいはボーズ系に対して開発されたEPTを、二次元フェルミオン系に拡張した。フェルミオンの反交換関係を行列積表示された状態に対して注意深く扱うことによって、二次元正方格子ハバード模型の基底状態の性質を、モデレイトな系の大きさ( $\sim 10 \times 10$  サイト)に対して計算することができる。今後、この方法を用いた大規模数値シミュレーションを行うことにより、二次元正方格子ハバード模型の基底状態の相図(電子濃度  $\vee$  s クーロン力)を確立し、d 波超伝導体相の有無を明らかにする。さらに、この方法を、二次元三角格子ハバード模型に適用し、最近、有機物質  $\kappa$ -(ET) $_2$ Cu $_2$ (ET) $_3$  で観測された、スピン液体モット絶縁体の可能性およびその物理的性質を明らかにする予定である。最後に、ここで開発される新しい数値的手法では、行列積表示された波動関数の個々の行列を別々のノードで独立に最適化することによって、高い並列化効率が得られる。つまり、この方法は大規模並列計算に非常に適している。

# -----

#### Key Sentence:

- 1. Numerical simulations for electronic structure of solid state materials.
- 2. Ground state and low-lying excitations of quantum many-body systems
- 3. Development of new numerical methods

### Key Word:

computational condensed matter physics, theoretical condensed matter physics, new numerical methods, quantum many body system, transition metal oxides, nano materials science, biomaterials science, oxide hetero junction, surface • interface electronic structure, spintronics, materials design, strongly correlated electronic systems,

#### Outline

Our main aim is to theoretically understand various novel quantum phases and phenomena in a wide range of materials by microscopically studying electronic structures. Our main interests include strongly interacting electronic systems such as different kinds of transition metal oxides (cuprates, manganites, etc) and low-dimensional organic compounds, where novel ground states, low-lying collective quantum excitations, and quantum transport properties are studied using various state-of-the-art numerical methods. Oxide heterostructures, mainly based on transition metal oxides, are one of our recent focused projects to theoretically propose a new functionality for strongly correlated electronic devises. We are also devoted to develop new numerical methods for quantum many-body systems in general.

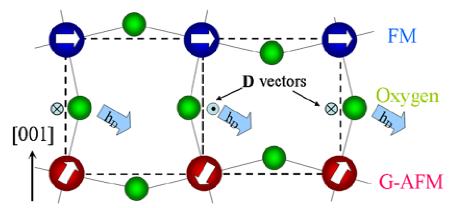
# 1. Quantum simulations on interface electronic structure in oxide heterojunctions (Researcher: Seiji Yunoki)

Owning to recent technological progress in fabricating oxide thin films, one can now fabricate various kinds of oxide heterostructures (OHS) with atomic scale control. Specially, different transition metal oxides in perovskite form have been used for OHS, and their intriguing properties have begun to be reported. Transition metal oxides, in general, exhibit a wide range of phases including insulating, metallic, magnetic, and superconducting states, with completely different physical properties. Moreover, these phases can be turned by a small amount of change of system's parameters such as carrier concentrations and external fields. One of the main aims for research of OHS is to seek a possibility to develop a new class of strongly correlated electronic devices with new functionalities, which go beyond the current semiconductor-based devices.

Using various kinds of numerical simulations, we have been studying electronic structures and quantum transport phenomena in the interfaces and surfaces of transition metal OHS. In this academic year, we have proposed (1) new mechanisms for exchange bias (EB) in G-type antiferromagnetic (AFM)/ferromagnetic (FM) heterojunction, and (2) three different possible electronic states appearing at the interface of two different AFM insulators LaMnO<sub>3</sub>/SrMnO<sub>3</sub>. Below only item (1) shall be explained.

The EB effect, characterized by a shift of the magnetic hysteresis loops away from the center of symmetry at a zero magnetic field, has been widely reported to exist in magnetic systems where there is an interface between AFM and FM (or ferrimagnetic) materials. Several mechanisms for EB have already been proposed, which are all based essentially on the presence of uncompensated magnetic moment at the AFM interface.

Recently, the EB effect has been observed in the perovskite-based transition metal OHS where a G-type AFM is used such as  $BiFeO_3$  and  $SrMnO_3$  with completely compensated interface magnetic moment. Therefore, the observed EB cannot be explained by the already existing theory, and thus requires a new mechanism. In this study, based on the fact that there exist intrinsic oxygen distortions in the perovskite-based heterostructires, we have proposed two mechanisms of EB driven by (i) Dzyaloshinskii-Moriya interaction and (ii) ferroelectric polarization. The coupling between staggered G-type magnetic moment and (i) **D** vectors or (ii) lattice distortions induces an effective uniform field at the interface (see in fig.1 and fig.2), which naturally causes the EB. We have confirmed this new idea by numerical model simulations and first principle band structure calculations.



**Fig.**1. Interface between ferromagnetic (FM) and G-type antiferromagnetic (G-AFM) perovskites, including oxygen octahedral tilting. The staggered directions of the **D** vectors at the interface are marked as in- and out-arrows, while the uniform **h**D vectors are shown near the oxygens.

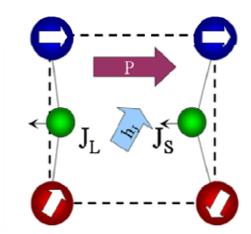
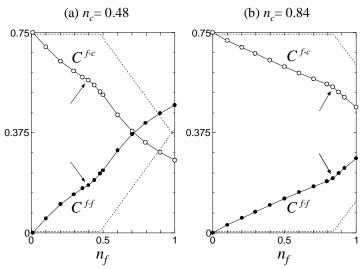


Fig.2. Ferroelectronic polarization (P) driven asymmetric bond angles and modulated spin exchange interactions (J<sub>L</sub> and J<sub>S</sub>) at the interface, which induces an effective uniform field (h<sub>J</sub>).

#### 2. Crossover from dilute-Kondo system to heavy-fermion system (Researcher: Watanabe Hiroshi)

Heavy-fermion systems containing rare-earth or actinide atoms show various interesting phenomena such as superconductivity, magnetic ordering, valence fluctuation, and their properties have been intensively studied. In this class of systems, strongly localized f electrons hybridize with conduction (c) electrons, and participate in a formation of quasiparticles with large effective mass. When the f-electron density,  $n_{\ell}$ , is diluted by substitution, the system becomes dilute-Kondo system in a small  $n_{\ell}$  limit, where the single-impurity Kondo effect is observed. In recent years, the dilute-Kondo system has attracted much attention in applied physics such as a quantum dot. However, the crossover from dilute-Kondo system to heavy-fermion system by changing  $n_{\ell}$  is quite different for each material, and

the details have not been clarified. We have studied this problem using a Kondo lattice model with randomly doped f electrons using variational Monte Carlo simulations. We have found that when the c-electron density,  $n_c$ , becomes comparable to  $n_b$ , the correlations between f electrons is enhanced (see in Fig.3) and the crossover from dilute-Kondo system to heavy-fermion system occurs. This is because the screening of f-electron spins changes from "individual" to "collective" characteristic across the crossover, which is closely related to the large effective mass in heavy-fermion system.



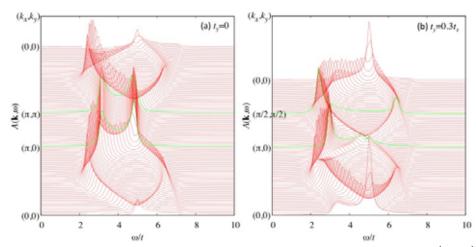
**Fig.**3. Spin correlations between c-f and f-f electrons. Arrows indicate the f electron concentrations  $n_f$  where the f-f spin correlations abruptly increase.

# 3. Development of the variational cluster approximation using dynamical density-matrix renormalization group method and its application (Researcher: Tomonari Shirakawa)

The variational cluster approximation (VCA) based on the self-energy functional theory (SFT) provides a promising scheme to study strongly correlated electron systems in condensed matter physics. However, because of the serious limitation of cluster sizes that can be treated by currently available numerical methods such as Lanczos exact diagonalization, the use of VCA-SFT is still very much limited to particular systems. Therefore, it is highly desirable to develop an improved method for solving Green's functions for larger clusters. This is precisely one of our main purposes of this study, and here we have overcome this difficulty by dynamical density-matrix renormalization group (DDMRG) method properly used as a solver of the variational clusters.

In DDMRG calculations, the correction vector method is used with variational principle to treat the reduced Hilbert space for the DMRG procedure. In this method, one must solve the variational problem for each frequency because the dependence of the correction vector is very strong along the real-axis of frequency. We have successfully reduced the computational cost by utilizing the self-energy functional of the grand potential using the imaginary-axis dependence of frequency of Green's functions, reducing the number of times to solve the variational problem for the DDMRG.

Next, we apply this method to the weakly coupled Hubbard chains on the square lattice to study the dimensional crossover in one-particle excitations. Our calculations show that at half-filling the staggered magnetic moment becomes finite as soon as a finite inter-chain hopping  $t_y$  is introduced, which is in good agreement with the renormalization group analysis in weak-coupling limit. The calculated one-particle excitation spectra for  $t_y = 0$  and 0.3 are shown in Fig. 4. In the absence of the inter-chain hopping, there exist spinon- and holon-blanches around  $(k_x, k_y) = (\Box/2, 0) \sim (\Box, 0)$ , which is the spin-charge separation of the one-dimensional systems. Introducing a finite inter-chain hopping  $t_y$ , the holon blanch is suppressed whereas the spinon blanch is enhanced. This observation indicates that the quasi-particle description is valid even in the quasi-one dimensional limit.



**Fig.** 4. One-particle excitation spectra as a function of momentum  $(k_x, k_y)$  and frequency  $\omega$  for (a)  $t_y = 0$  and (b)  $t_y = 0.3$ . On-site Coulomb repulsion  $Ut_x = 8$  is used where  $t_x$  is the intra-chain hoping.

## 4. First-principles calculations of thermopower on metallic junctions (Researcher: Qinfang Zhang)

Motivated by recent experimental discovery of a huge Peltier cooling effect on CuNi/Au junctions with the maximum cooling power of 1mW reported by Fukushima *et al.*, we have been studying thermopower on metallic junctions. For a quantitative analysis on Peltier cooling effect on metallic junctions, the thermoelectric parameters for bulk as well as interfaces are estimated by first principles calculations based on the framework of density functional theory with a tight-binding muffin-tin orbitals basis. The Landauer-Büttiker formalism is used to study quantum transport coefficients, and the energy dependence of quantum scattering is determined based on the well-known Mott's law.

As a test case, first, we have studied the thermopower of bulk CuNi (constantan) alloy, and found it in good agreement with the corresponding experimental data. Here, the resistivity is estimated by numerically calculating resistance for different energy levels around the Fermi energy  $E_F$  (Fig. 5), which is essentially linear to the thickness of CuNi, as expected from Ohm's law. The resistivity is thus given by the slope of the total resistance as a function of the thickness, which is estimated about 30.46  $\mu\Omega$ cm (at Fermi level), consistent with the experiments. The Seebeck coefficient (S) being determined by Mott's law, the thermopower (=–S/T) at room temperature (T) is estimated about 171.75 nV/K².

Encouraged by the success of the bulk calculations, next, we have studied the transport properties for CuNi/Au junction. We took gold as one lead and CuNi as another lead, with 10 layers of CuNi and 10 layers of gold in scattering region. For electronic structure calculation, we use virtual crystal approximation to treat an alloy of CuNi in the lead, and coherent potential approximation in the scattering region. We have studied two case with and without lattice relaxation due to the lattice mismatch of CuNi and gold. We found that the estimated interface thermopower for both cases is around 100 nV/K², which is significantly large compared to the bulk value. Therefore, we conclude that the interface contribution to the thermal transport in metallic junctions is much more important than one might have expected, and it needs to be considered for any quantitative comparisons with theoretical calculations and experimental observations.

# Residual Resistivity MTO-spd E<sub>v</sub> - 0.01eV $\mathbf{E}_{\mathbf{F}}$ - 0.005eV 12 + 0.005eV + 0.01eV Resistance 01 Linear Fit: 32.67 (μΩ cm) Linear Fit : 31.65 ( $\mu\Omega$ cm) Linear Fit : 30.46 ( μΩ cm) Linear Fit : 29.61 ( $\mu\Omega$ cm) Linear Fit : 28.33 ( $\mu\Omega$ cm) 160 180 Multi-Layers

**Fig.**5. Resistance for CuNi as a function of thickness of CuNi for different energy levels close to Fermi energy E<sub>F</sub> indicated in the figure.

# 5. Entanglement perturbation theory for low-dimensional quantum many-body systems (Researcher: Lihua Wang)

Recently developed entanglement perturbation theory (EPT) is used to study a wide range of low-dimensional quantum many-body systems. The EPT is a variational method to solve numerically a matrix product ansatz for the ground state of a many-body quantum system. The method can in principle be applied for both boson and fermion systems in higher spatial dimensions than one-dimension (1D).

First, the 1D spin-1/2 and spin-1 antiferromagnetic Heisenberg models with and without an external magnetic field are studied. For example, 2-spin and 4-spin correlation functions are calculated with unprecedented precision for spin-1/2 chains, and the fine structures in the 4-spin correlation functions, depending on the strength of the external magnetic field, are clearly observed. The lowest excited dispersion is also calculated for the spin-1 chains, which agrees well with the existing other numerical results.

Second, we have recently generalized the EPT algorithm to handle fully inhomogeneous quantum systems to study the 1D Bose Hubbard model for ultra-cold atoms in optical lattices. We have identified a phase transition from the superfluid to the Mott insulator with the Kosterlitz-Thouless transition. A possible Bose glass phase is also studied when the inhomogeneous potential is present.

Third, we have extended the EPT framework, originally established in 1D, to two dimensional (2D) fermion systems. Treating the anti-commutation relation of fermions carefully, this generalization allows us to study the 2D Hubbard model on the square lattice with moderate lattice sizes ( $\sim 10 \times 10$  sites). The ground state phase diagram of electron concentrations versus on-site Coulomb interaction shall be established to conclude whether or not the 2D Hubbard model alone is capable for explaining high-Tc cuprate superconductivity. This method is also used for the 2D Hubbard model on the triangular lattice to see if there exists a novel spin liquid Mott insulator, which has been observed experimentally in an organic material  $\kappa$ -(ET)<sub>2</sub>Cu<sub>2</sub>(CN)<sub>3</sub>. It should be emphasized that the numerical

algorithm developed here is highly suitable for large scale parallel computations.

# Principal Investigator

柚木 清司 Seiji Yunoki

# Research Staff

渡部 洋 Hiroshi Watanabe 張 勤芳 Qinfang Zhang

王 利華 Lihua Wang

白川 知功 Tomonari Shirakawa

# Assistant and Part-timer

網代 雅代 Masayo Ajiro

# Visiting Members

前川 禎通 Sadamichi Maekawa

大西 弘明 Hiroaki Oonishi