

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 5 年 6 月 6 日現在

機関番号：34315

研究種目：基盤研究(B)（一般）

研究期間：2019～2022

課題番号：19H01842

研究課題名（和文）重い電子系化合物に対する第一原理計算手法の開発と応用

研究課題名（英文）Improvement and application of First-Principles Calculations for Heavy Fermion Systems

研究代表者

池田 浩章（Ikeda, Hiroaki）

立命館大学・理工学部・教授

研究者番号：90311737

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 13,300,000円

研究成果の概要（和文）：重い電子系化合物のような強相関電子系に見られる多彩な多極子秩序および非従来型超伝導の出現機構を解明するため、第一原理計算の改良に取り組み、以下の4つの研究に携わった。

(1) LDA+DMFTおよびLDA+FLEXのオリジナル汎用コードの開発。(2) 厳密な交換相関相互作用によるLDA+U法の開発。(3) 第一原理計算に基づいた銅酸化物の変分計算。(4) 特異な局所自由度 $L \times S$ の解析とカイラリティ密度の導出および電気トロイダル多極子との関係。

研究成果の学術的意義や社会的意義

物質の基礎的物性データを第一原理的に正しく与えることは、磁性材料・超伝導材料など新物質探索や物質に現れる多彩で奇妙な秩序状態を理解するうえで非常に重要である。しかし、現状、第一原理計算の計算能力はまだまだ発展途上であり、特に、重い電子系化合物のような強相関物質における計算では実験と整合しないことも多い。ここでは、このような強相関物質を対象としてLDA+DMFTやLDA+FLEXのオリジナル汎用コードの作成を行った。その発展は当該分野の未解決問題への切り口を与えるとともに、物性予測という工学的な観点からも意義が大きい。

研究成果の概要（英文）：In order to elucidate the mechanism of appearance of various multipole orders and unconventional superconductivity in strongly correlated electron systems such as heavy-fermion compounds, we have worked on the improvement of first-principles calculations and engaged in the following four studies.

(1) Development of original codes for LDA+DMFT and LDA+FLEX. (2) Development of the LDA+U method with exact exchange-correlation interaction. (3) Variational calculations of copper oxides based on the first-principles calculations. (4) Analysis of peculiar local degrees of freedom $L \times S$ and derivation of chirality density and its relation to electro-toroidal multipoles.

研究分野：物性理論

キーワード：物性理論 第一原理計算 重い電子系 超伝導

1. 研究開始当初の背景

研究対象とする重い電子系化合物は、スピンと軌道が絡み合った多自由度系であり、多極子秩序や非従来型超伝導、奇妙な臨界現象など数多くの興味深い研究テーマが存在する。例えば、 UTe_2 のトポロジカル超伝導や UPt_3 のスピン三重項超伝導、 URu_2Si_2 の隠れた秩序とカイラル超伝導、 $UCoGe$ の強磁性超伝導、 $CeCoIn_5$ の FFLO 状態など、枚挙に暇がない。これらの多彩な物理現象は、f 軌道の自由度の多さとその局在性から来る大きなスピン軌道相互作用や強い電子相関によって生じていると考えられる。しかし、これらの要因は電子状態を複雑にし、これまで微視的理論の進展を妨げてきた。

このような中、鉄系超伝導体の研究を中心として発展した、ワニエ軌道に基づいた微視的モデルの構築によって、物質に即した半定量的な解析が可能となり、研究代表者らを中心として重い電子系化合物の先駆的な解析が実施された。 URu_2Si_2 の隠れた秩序や $CeCu_2Si_2$ の s 波超伝導、 UPt_3 のスピン三重項超伝導など、いくつかの重い電子系化合物の微視的な解析が行われ、第一原理計算で得られた電子状態が内包する多極子ゆらぎに関する有益な情報が初めて引き出され、重い電子系化合物に対する理解が深まった。しかし一方で、これらの物質における電子相関の効果の重要性もより浮き彫りになった。

通常、重い電子系化合物では、第一原理計算で得られるバンド構造が実際の観測と食い違うことが多く、フェルミ面の構造を説明できないこともしばしばである。そのため、重い電子系化合物を完全に理解するには、電子相関の効果を考慮する必要がある。この点、海外を中心として、動的平均場理論(DMFT)を第一原理計算に組み合わせるような方法論(LDA+DMFT 法)の開発が進んでおり、将来の発展を見据えて、同様の方法にスピン軌道相互作用を考慮することは急務であると考えられた。それは、重い電子系化合物の基礎物性データを与え、重い電子状態の形成過程や重い電子状態において発達する様々な多極子揺らぎ、さらには、なぜ多彩な超伝導ペア状態が出現するのか等を明らかにすると考えられる。

2. 研究の目的

現在の第一原理計算が苦手とする強相関物質を取り上げ、その基礎物性データを正しく記述するように、第一原理計算の改良に取り組んだ。本研究ではこれまでの研究成果に基づいて、典型的な重い電子化合物の第一原理計算を改良すべく、LDA+DMFT 法のオリジナル汎用コードを開発・改良することを主な目的とした。さらに、磁気臨界点付近にある物質の電子状態を記述するため、LDA+FLEX のコードも合わせて開発し、物質の多彩な電荷・軌道・磁気ゆらぎに対応する多極子相関関数を汎用的に計算することも目的の一つとした。

3. 研究の方法

第一原理計算は KANSAI コードに基づくフルポテンシャル LAPW 法をベースとし、DMFT のソルバーとしては連続時間モンテカルロ法(CTQMC)を用いて、まずは海外で進んでいる LDA+DMFT 法に比肩するコードの開発を急いだ。典型的な重い電子系化合物として、 $CeRu_2Si_2$ や $CeCu_2Si_2$ を取り上げ、まずは結晶場基底状態を正しく記述することを目指した。特に、この手の研究において重要となる double counting の問題に取り組み、hybrid functional と同様の方法を取り入れた。また、LDA+FLEX コードの開発も実施し、特に、鉄系超伝導体を対象として、自己エネルギーの第一原理計算、多様な多極子相関関数の計算を実施した。加えて、銅酸化物を記述する有効モデルを構築し、変分モンテカルロによる計算と組み合わせることで、銅酸化物の相関を第一原理計算的に演繹することにも取り組んだ。

また、研究過程で大きく進展した特異な局所自由度 $L \times S$ の解析を行い、カイラリティ密度の重要性とその空間表示について研究を進展させた。

4. 研究成果

(1) LDA+DMFT および LDA+FLEX のオリジナル汎用コードの開発

本プロジェクトの中心課題である LDA+DMFT のオリジナル汎用コードの開発に関しては、電荷密度の自己無撞着計算を含め、海外勢と肩を並べる程度までコード開発を進めた。いくつかのセリウム系化合物においてテストランを行ったところ、計算結果がフント結合の大きさに敏感で非常に不安定な振る舞いを示したため、主にその原因の究明を行った。結果、この手の計算で常に問題となる double counting の問題、つまり、局所密度近似(LDA)に含まれる電子間相互作用の効果をうまく差し引く方法が明確でないという問題に集約されることが明らかとなった。この点を改善するためには避けて通れない問題である。ここでは、LDA の交換ポテンシャルを正しい交換項にすげ替え、hybrid functional のような方法論を取り入れることで大きく改善できることを明らかにした。また、LDA+FLEX についても主なコーディングは終了し、鉄系を中心にテスト計算を実施した。

(2) 厳密な交換相関相互作用による LDA+U 法の開発

これまでの LDA+U 法では、LDA 計算における double counting 項は正しく取り扱われて来なかった。ここでは、LDA+U 計算において double counting 項を評価し、それを差し引くことでオンサイトの交換項を正しく取り込むことに成功した。これはオンサイトの hybrid functional に対応する計算であり、本質的にパラメータフリーである。これまでの LDA+U 法と違い、バンド中心がより正しい位置にシフトする傾向を持つということが分かった。この計算は上述の LDA+DMFT 計算に比べると動的な効果が入っておらず粗い近似であるが、計算速度も早く実用的である。

(3) 第一原理計算に基づいた銅酸化物の変分計算

上述のような新規のコード開発と平行して、銅酸化物高温超伝導体に対するワニエ関数を用いた有効モデルの構築と変分モンテカルロを用いた基底状態の相図についての研究を実施した。その結果、Cu- e_g 軌道および O- p_x 、O- p_y の計 4 軌道の拡張ハバードモデルによって、銅酸化物高温超伝導体に共通して観測されるストライプ構造や超伝導、過剰ドーブ領域に見られる磁性の振る舞いが La 系および Hg 系等の物質群による違いを含め、包括的に説明できることが明らかとなった。このような多彩な相図に加え、母物質がモット絶縁体であることと超伝導相関が強いこと、つまり転移温度が高いことが強く相関していることも明らかになった。

(4) 特異な局所自由度 $L \times S$ の解析とカイラリティおよび電気トロイダル多極子との関係

以上のような数値計算に加えて、オンサイトの多極子自由度の理論的な分類を行い、その際に明らかとなった特異な局所自由度 $L \times S$ について詳細に研究した。この自由度は通常考えられる電荷分布や磁気分布、電流分布では表現できず、スピン流由来の電気分極の環状分布に対応することを示唆する。さらにこのとき、スピン流の対角和に対応するカイラリティも有限であり、カイラリティ双極子とでも言うような状態に対応するものであること、また、このカイラリティ双極子が電気トロイダル双極子に対応することが明らかになった。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計24件（うち査読付論文 24件/うち国際共著 2件/うちオープンアクセス 5件）

1. 著者名 Shintaro Hoshino, Michi-To Suzuki, Hiroaki Ikeda	4. 巻 -
2. 論文標題 Spin current and chirality degrees of freedom inherent in localized electron orbitals	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Phys. Rev. Lett.	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Watanabe Hiroshi, Shirakawa Tomonori, Seki Kazuhiro, Sakakibara Hirofumi, Kotani Takao, Ikeda Hiroaki, Yunoki Seiji	4. 巻 4
2. 論文標題 Erratum: Unified description of cuprate superconductors using a four-band d-p model [Phys. Rev. Research 3, 033157 (2021)]	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 029002/1-2
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevResearch.4.029002	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Ikeda Hiroaki	4. 巻 19
2. 論文標題 Controlling the Superconducting Gap Structure	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 JPSJ News and Comments	6. 最初と最後の頁 1-2
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.7566/JPSJNC.19.15	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Terashima Taichi, Hirose Hishiro T., Matsushita Yoshitaka, Uji Shinya, Ikeda Hiroaki, Fuseya Yuki, Wang Teng, Mu Gang	4. 巻 106
2. 論文標題 In-plane electronic anisotropy revealed by interlayer resistivity measurements on the iron-based superconductor parent compound CaFeAsF	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 184503/1-11
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.106.184503	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Watanabe Hiroshi, Shirakawa Tomonori, Seki Kazuhiro, Sakakibara Hirofumi, Kotani Takao, Ikeda Hiroaki, Yunoki Seiji	4. 巻 35
2. 論文標題 Monte Carlo study of cuprate superconductors in a four-band d-p model: role of orbital degrees of freedom	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Condensed Matter	6. 最初と最後の頁 195601/1-15
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-648x/acc0bf	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yanagi Yuki, Kusunose Hiroaki, Nomoto Takuya, Arita Ryotaro, Suzuki Michi-To	4. 巻 107
2. 論文標題 Generation of modulated magnetic structures based on cluster multipole expansion: Application to -Mn and CoM3S6	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 014407/1-15
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.107.014407	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kaga Yoshikuni, Werner Philipp, Hoshino Shintaro	4. 巻 105
2. 論文標題 Eliashberg theory of the Jahn-Teller-Hubbard model	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 214516/1-14
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.105.214516	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Watanabe Hiroshi, Shirakawa Tomonori, Seki Kazuhiro, Sakakibara Hirofumi, Kotani Takao, Ikeda Hiroaki, Yunoki Seiji	4. 巻 3
2. 論文標題 Unified description of cuprate superconductors using four-band d-p model	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 033157 (1-12)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.3.033157	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Huyen Vu Thi Ngoc, Yanagi Yuki, Suzuki Michi-To	4. 巻 104
2. 論文標題 Spin and anomalous Hall effects emerging from topological degeneracy in the Dirac fermion system CuMnAs	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 035110 (1-12)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.104.035110	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yanagi Yuki, Ikeda Junya, Fujiwara Kohei, Nomura Kentaro, Tsukazaki Atsushi, Suzuki Michi-To	4. 巻 103
2. 論文標題 First-principles investigation of magnetic and transport properties in hole-doped shandite compounds Co ₃ In _x Sn _{2-x} S ₂	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 205112 (1-8)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.103.205112	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Miki Tatsuya, Tamura Shun-Ta, Iimura Shoma, Hoshino Shintaro	4. 巻 104
2. 論文標題 Odd-frequency pairing inherent in a Bogoliubov Fermi liquid	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 094518 (1-14)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.104.094518	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Chikano Naoya, Hoshino Shintaro, Shinaoka Hiroshi	4. 巻 104
2. 論文標題 Multipolar ordering in the three-orbital Hubbard model	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 235125 (1-11)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.104.235125	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Iimura Shoma, Hirayama Motoaki, Hoshino Shintaro	4. 巻 104
2. 論文標題 Multipole representation for anisotropic Coulomb interactions	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 L081108 (1-6)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.104.L081108	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Iwazaki Ryuta, Hoshino Shintaro	4. 巻 103
2. 論文標題 Spin-orbital model for fullerenes	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 235145 (1-16)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.103.235145	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 M.-T. Huebsch, T. Nomoto, M.-T. Suzuki, R. Arita	4. 巻 11
2. 論文標題 Benchmark for Ab Initio Prediction of Magnetic Structures based on Cluster Multipole Theory	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Phys. Rev. X	6. 最初と最後の頁 011031(1-25)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevX.11.011031	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 S. Iimura, M. Hirayama, S. Hoshino	4. 巻 102
2. 論文標題 Vortex bound state of a Kondo lattice coupled to a compensated metal	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Phys. Rev. B	6. 最初と最後の頁 064505 (1-14)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.102.064505	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 S.-T. Tamura, S. Imura, S. Hoshino	4. 巻 102
2. 論文標題 Electronic multipoles and multiplet pairs induced by Pomeranchuk and Cooper instabilities of Bogoliubov Fermi surfaces	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Phys. Rev. B	6. 最初と最後の頁 024505 (1-12)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.102.024505	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Onuki Yoshichika, Kakihana Masashi, Iha Wataru, Nakaima Kenri, Aoki Dai, Nakamura Ai, Honda Fuminori, Nakashima Miho, Amako Yasushi, Gouchi Jun, Uwatoko Yoshiya, Nakamura Shota, Sakakibara Toshiro, Takeuchi Tetsuya, Haga Yoshinori, Ikeda Hiroaki, Harima Hisatomo, Hedo Masato, Nakama Takao	4. 巻 29
2. 論文標題 Single Crystal Growth and Unique Electronic States of Cubic Chiral EuPtSi and Related Compounds	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 JPS Conf. Proc.	6. 最初と最後の頁 012001 (1-9)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSCP.29.012001	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Huyen Vu Thi Ngoc, Suzuki Michi-To, Yamauchi Kunihiko, Oguchi Tamio	4. 巻 100
2. 論文標題 Topology analysis for anomalous Hall effect in the noncollinear antiferromagnetic states of Mn3AN (A=Ni,Cu,Zn,Ga,Ge,Pd,In,Sn,Ir,Pt)	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 94426 (1-9)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.100.094426	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Suzuki M.-T., Nomoto T., Arita R., Yanagi Y., Hayami S., Kusunose H.	4. 巻 99
2. 論文標題 Multipole expansion for magnetic structures: A generation scheme for a symmetry-adapted orthonormal basis set in the crystallographic point group	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 174407 (1-10)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.99.174407	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Iimura Shoma, Hirayama Motoaki, Hoshino Shintaro	4. 巻 30
2. 論文標題 Magnetic Field Induced Phase Transition in Superconducting State of Non-Kramers Doublet Kondo Lattice Systems with Semi-Metallic Conduction Bands	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 JPS Conf. Proc.	6. 最初と最後の頁 011048 (1-6)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSCP.30.011048	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Iimura Shoma, Hirayama Motoaki, Hoshino Shintaro	4. 巻 29
2. 論文標題 Fermi-surface Anisotropy Effects on Full-gap Superconductivity in Non-Kramers Doublets Coupled to Compensated Metals	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 JPS Conf. Proc.	6. 最初と最後の頁 011003 (1-7)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSCP.29.011003	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Iimura Shoma, Hirayama Motoaki, Hoshino Shintaro	4. 巻 100
2. 論文標題 Unconventional full-gap superconductivity in Kondo lattice with semimetallic conduction bands	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 094532 (1-10)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.100.094532	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Hoshino Shintaro, Werner Philipp, Arita Ryotaro	4. 巻 99
2. 論文標題 Unconventional orbital ordering and emergent dimensional reduction in fulleride superconductors	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 235133 (1-11)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.99.235133	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計62件（うち招待講演 10件 / うち国際学会 16件）

1. 発表者名 Michi-To Suzuki
2. 発表標題 Partial spectrum descriptors of local magnetic environments
3. 学会等名 GIMRT, REIMEI, IRN Aperiodic joint international workshop (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Michi-To Suzuki, E.V.Morooka, Y.Yanagi, T.Nomoto, H.Kusunose
2. 発表標題 Partial spectrum descriptors of local magnetic environments
3. 学会等名 10th International Conference on Aperiodic Crystals (Aperiodic 2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 鈴木通人
2. 発表標題 磁気対称性の破れとバンド縮退の分裂が生み出す輸送現象
3. 学会等名 日本原子力研究開発機構 先端基礎研究センター(ASRC)セミナー
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 鈴木通人, 星野晋太郎, 池田浩章
2. 発表標題 強相関電子系の第一原理計算における一電子ポテンシャルと軌道異方性の研究
3. 学会等名 日本物理学会2022年秋季大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 鈴木通人
2. 発表標題 準結晶における対称性適合磁気構造の研究
3. 学会等名 新学術領域ハイパーマテリアル 第8回領域Web会議
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 星野晋太郎
2. 発表標題 局在 f 電子系における多極子感受率
3. 学会等名 日本物理学会2022年秋季大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 星野晋太郎、岩崎龍太、品岡寛
2. 発表標題 局在多軌道電子系におけるモンテカルロ解析
3. 学会等名 日本物理学会2022年秋季大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Shintaro Hoshino
2. 発表標題 Spin-orbital dynamics of localized electrons
3. 学会等名 Trends in the Theory of Quantum Materials 2022 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Shintaro Hoshino
2. 発表標題 Microscopic theory of fulleride superconductors
3. 学会等名 International workshop on Physics and Chemistry (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Shintaro Hoshino
2. 発表標題 Spin-derived electric polarization and chirality density inherent in localized electron orbitals
3. 学会等名 物性研究所, 理論セミナー
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Hiroshi Watanabe, Tomonori Shirakawa, Kazuhiro Seki, Hirofumi Sakakibara, Takao Kotani, Hiroaki Ikeda, Seiji Yunoki
2. 発表標題 Unified Description of Cuprate Superconductors Using a 4-band d-p Model
3. 学会等名 M2S conference (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Tatsuaki Mori, Hiroaki Ikeda
2. 発表標題 Possibility of field-induced Bogoliubov Fermi surfaces in FeSe _{1-x} S _x
3. 学会等名 M2S conference (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Tatsuaki Mori, Hiroshi Watanabe, Hiroaki Ikeda
2. 発表標題 Bogoliubov Fermi surfaces under the magnetic field
3. 学会等名 LT29 Conference (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Hiroshi Watanabe, Tomonori Shirakawa, Kazuhiro Seki, Hirofumi Sakakibara, Takao Kotani, Hiroaki Ikeda, Seiji Yunoki
2. 発表標題 Mutiorbital Effects in Cuprate Superconductors Studied with a Four-band d-p Model
3. 学会等名 LT29 Conference (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Ibuki Terada, Hiroshi Watanabe, Hiroaki Ikeda
2. 発表標題 Nonadiabatic effect of transport properties in 1D zigzag chain with electronic order
3. 学会等名 LT29 Conference
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 寺田伊吹, 北村想太, 渡部洋, 池田浩章
2. 発表標題 1次元ジグザグ鎖における輸送特性の非断熱効果
3. 学会等名 日本物理学会2022年秋季大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 兼本正倫, 池田浩章, 渡部洋, 森達明, 寺田伊吹
2. 発表標題 鉄系超伝導体におけるバンド構造---hybrid functionalによる考察
3. 学会等名 日本物理学会2022年秋季大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 渡部洋, 池田浩章
2. 発表標題 -ET系有機超伝導体におけるBCS-BECクロスオーバーの理論
3. 学会等名 日本物理学会2023年春季大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 森達明, 渡部洋, 池田浩章
2. 発表標題 Bogoliubov Fermi surfaceの現れる $j=3/2$ モデルの磁場下での振る舞い
3. 学会等名 日本物理学会2023年春季大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 寺嶋太一, 廣瀬陽代, 松下能孝, 宇治進也, 池田浩章, 伏屋雄紀, 他
2. 発表標題 磁場中層間抵抗測定で見る鉄系母物質CaFeAsFの面内異方性
3. 学会等名 日本物理学会2023年春季大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 鈴木 通人
2. 発表標題 Magnetic materials design by representation theory & first-principles calculation
3. 学会等名 東京大学物性研究所理論セミナー Web会議
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 鈴木 通人
2. 発表標題 準結晶における対称性適な磁気構造の生成に向けた研究
3. 学会等名 新学術領域ハイパーマテリアル 第6回領域Web会議
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 星野 晋太郎
2. 発表標題 Interaction and disorder effects on Bogoliubov Fermi surfaces
3. 学会等名 New Trends in Quantum Condensed Matter Theory 2021, Web会議 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 星野 晋太郎
2. 発表標題 ボゴリウボフ・フェルミ面に対する相互作用の効果
3. 学会等名 日本物理学会2021年度秋季大会, Web会議, シンポジウム「鉄系超伝導研究の新展開---ネマティシティと新規超伝導相---」(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 星野 晋太郎
2. 発表標題 Interaction and disorder effects on Bogoliubov Fermi surfaces
3. 学会等名 The 34th International Simposium on Superconductivity, Web会議 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 池田 浩章
2. 発表標題 はじめに
3. 学会等名 日本物理学会 2021年度秋季大会, Web会議, シンポジウム「鉄系超伝導研究の新展開---ネマティシティと新規超伝導相---」
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 渡部洋, 白川知功, 関和弘, 榊原寛史, 小谷岳生, 池田浩章, 柚木清司
2. 発表標題 4バンドd-p模型による銅酸化物高温超伝導体の統一的記述
3. 学会等名 日本物理学会 2021年度秋季大会, Web会議
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 六本木雅生, 石原滉大, 水上雄太, 星和久, 水口佳一, 池田浩章, 橋本顕一郎, 芝内孝禎
2. 発表標題 La _{01-x} FxBiSSeにおける超伝導ギャップ構造
3. 学会等名 日本物理学会 2021年度秋季大会, Web会議
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 寺田伊吹, 池田浩章
2. 発表標題 磁場中の1次元ジグザグ構造における非線形電気伝導
3. 学会等名 日本物理学会 2021年度秋季大会, Web会議
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 森達明, 池田浩章
2. 発表標題 FeSe系超伝導体に見られる新規超伝導相---Bogoliubov Fermi surfaceの可能性について
3. 学会等名 日本物理学会 2021年度秋季大会, Web会議
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 三木健矢, 池田浩章, 星野晋太郎
2. 発表標題 FeSeに基づいたBogoliubov Fermi面に対する不純物効果
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会(2022年), Web会議
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 渡部洋, 白川知功, 関和弘, 榊原寛史, 小谷岳生, 池田浩章, 柚木清司
2. 発表標題 銅酸化物高温超伝導体におけるdz ² 軌道の重要性: 4バンドd-p模型による解析
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会(2022年), Web会議
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 森達明, 池田浩章
2. 発表標題 FeSe系超伝導の低温高磁場領域におけるBogoliubov Fermi surfaceの存在可能性
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会(2022年), Web会議
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 渡部洋, 白川知功, 関和弘, 榊原寛史, 柚木清司, 池田浩章
2. 発表標題 4バンドd-p模型を用いた銅酸化物高温超伝導体の磁性・ストライプ・超伝導の解析
3. 学会等名 日本物理学会2020年秋季大会(オンライン開催)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 寺田伊吹, 池田浩章
2. 発表標題 ジグザグ模型における電流誘起磁性およびその非線形効果
3. 学会等名 日本物理学会2021年第76回年次大会(オンライン開催)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 森達明, 池田浩章
2. 発表標題 鉄系超伝導体の磁場中相図---Bogoliubov Fermi surfaceの安定性について
3. 学会等名 日本物理学会2021年第76回年次大会(オンライン開催)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 星野晋太郎
2. 発表標題 多軌道自由度をもつ強相関電子系の電子秩序に関する理論的研究
3. 学会等名 日本物理学会 2021年第76回年次大会（オンライン開催）（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 星野晋太郎
2. 発表標題 Bogoliubovフェルミ面の不安定性と超伝導の多極子状態
3. 学会等名 京都大学基礎物理学研究所研究会（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 鈴木通人
2. 発表標題 磁気対称性の破れとトポロジジーが生み出す巨大輸送現象の研究
3. 学会等名 スピントロニクス学術研究基盤と連携ネットワーク拠点 2020年度（令和2年度）年次報告会（オンライン開催）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 鈴木通人
2. 発表標題 Local environment representation of magnetic structure by multipole expansion
3. 学会等名 新学術領域ハイパーマテリアル 第5回領域Web会議（オンライン開催）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 鈴木通人
2. 発表標題 Magnetic structure analysis for approximants based on cluster multipole theory
3. 学会等名 新学術領域ハイパーマテリアル 第4回領域Web会議（オンライン開催）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 鈴木通人
2. 発表標題 多極子理論とデータ科学の融合による物質設計
3. 学会等名 さきがけ研究領域「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズインフォマティクスのための基盤技術の構築」第10回領域会議（オンライン開催）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 鈴木通人
2. 発表標題 クラスター多極子法による準結晶の磁気構造と物性現象の研究
3. 学会等名 新学術領域ハイパーマテリアル 第3回領域Web会議（オンライン開催）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 池田浩章
2. 発表標題 遍歴多極子と多極子超伝導体の発展
3. 学会等名 J-Physics 令和元年度領域全体会議
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 川邊翔吾, 大野裕太, 高橋直也, 鈴木雄大, 池田浩章
2. 発表標題 BiS2系超伝導体における超伝導ギャップ構造と表面状態
3. 学会等名 日本物理学会 2019年秋季大会(岐阜大学)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 大野裕太, 川邊翔吾, 高橋直也, 鈴木雄大, 池田浩章
2. 発表標題 BiS2系超伝導体におけるNon-symmorphic超伝導
3. 学会等名 日本物理学会 2019年秋季大会(岐阜大学)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 星野晋太郎, 鈴木通人, 池田浩章
2. 発表標題 重い電子系のメタ磁性に対するLDA+DMFT法によるアプローチ
3. 学会等名 日本物理学会 2019年秋季大会(岐阜大学)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 高橋直也, 大野裕太, 川邊翔吾, 鈴木雄大, 池田浩章
2. 発表標題 ジグザグ鎖ハバードモデルの変分モンテカルロによる解析
3. 学会等名 日本物理学会 2019年秋季大会(岐阜大学)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Michi-To Suzuki
2. 発表標題 First-principles prediction of magnetic structures in crystal
3. 学会等名 Materials Research Meeting 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Michi-To Suzuki
2. 発表標題 Order parameter and Topological features for Large Anomalous Hall Effect
3. 学会等名 International Conference on Topological Materials Science 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 鈴木通人
2. 発表標題 多極子理論とデータ科学の融合による物質設計
3. 学会等名 さきがけ研究領域「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズインフォマティクスのための基盤技術の構築」第9回領域会議
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 鈴木通人
2. 発表標題 磁気構造に対する多極子展開と物性現象の研究
3. 学会等名 ハイパーマテリアル新学術キックオフミーティング
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Michi-To Suzuki
2. 発表標題 Multipole expansion for magnetic structures and its application to the study of anomalous Hall effect in antiferromagnets
3. 学会等名 International Conference on Strongly Correlated Electron Systems 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 鈴木通人
2. 発表標題 第一原理計算によるアンチペロブスカイトMn化合物の反強磁性秩序相における異常ホール効果の研究
3. 学会等名 第11回トポロジー連携研究会「トポロジカル半金属」(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 鈴木通人
2. 発表標題 局在多極子系の第一原理計算による研究
3. 学会等名 J-Physics 地域研究会 - 仙台 -
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 鈴木通人
2. 発表標題 磁気構造の多極子展開とその応用
3. 学会等名 J-Physics 地域研究会 - 仙台 -
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 星野晋太郎
2. 発表標題 半金属的伝導バンドを持つ近藤格子の非従来型超伝導
3. 学会等名 J-Physics 地域研究会 - 本郷 -
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Shintaro Hoshino
2. 発表標題 Unconventional full-gap superconductivity in Kondo lattice with semi-metallic conduction bands
3. 学会等名 J-Physics 国際会議 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Shintaro Hoshino
2. 発表標題 Unconventional orbital ordering in fulleride superconductors
3. 学会等名 International Conference on Strongly Correlated Electron Systems 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Shintaro Hoshino
2. 発表標題 Spectral bulk-boundary correspondence in chiral-symmetric superconductors
3. 学会等名 Swiss-Japan bilateral workshop Trends in Theory of Correlated Materials 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 星野晋太郎
2. 発表標題 電子面とホール面を持つ相関電子系の近藤効果と超伝導
3. 学会等名 J-Physics 令和元年度領域全体会議
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 星野晋太郎
2. 発表標題 クーバー対の拡張
3. 学会等名 第九回「凝縮系理論の最前線」
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 パリティ編集委員会、大槻 義彦	4. 発行年 2020年
2. 出版社 丸善出版	5. 総ページ数 166
3. 書名 物理学, この1年 2020 (「多軌道・多自由度系超伝導体の進展」の節)	

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分担者	鈴木 通人 (Suzuki Michi-To) (10596547)	東北大学・金属材料研究所・准教授 (11301)	

6. 研究組織（つづき）

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分 担 者	星野 晋太郎 (Hoshino Shintaro) (90748394)	埼玉大学・理工学研究科・助教 (12401)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関