

令和 2 年 7 月 6 日現在

機関番号：13101

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2017～2019

課題番号：17K05539

研究課題名(和文)多バンド系の励起子相におけるFFLO状態と新奇超伝導の理論

研究課題名(英文)Theory of FFLO state in the excitonic phase and novel superconductivity

研究代表者

大野 義章 (Yoshiaki, Ono)

新潟大学・自然科学系・教授

研究者番号：40221832

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,400,000円

研究成果の概要(和文)：現実的な擬1次元3鎖ハバード模型に基づいて、Ta₂NiSe₅の高圧下の半金属状態における励起子状態を調べた。フェルミ面のネスティングに対応して、励起子がそれぞれ異なる有限の重心運動量をもつ3種類のFulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov (FFLO) 状態が実現することを示した。また、励起子相近傍で大きく増大した励起子揺らぎを媒介として、クーバー対がそれぞれ異なる有限の重心運動量をもつ2種類のFFLO超伝導が実現することがわかった。さらに、電子相関効果を動的平均場理論により調べた結果、強相関領域において準粒子の有効質量が無限大に近い励起子状態が実現することがわかった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

Ta₂NiSe₅は伝導バンドと価電子バンドが2:1の異なる縮重度をもつことに着目し、FFLO励起子相が圧力下の半金属で必然的に生じる電子-正孔のインバランスにより導かれる機構とその特異物性を初めて解明するとともに、その励起子揺らぎを媒介とする超伝導も含めて励起子相の物理を統一的に理解したことが、本研究の学術的意義である。また、励起子相の示す異常物性の解明は、今後の新たな材料やデバイス開発にも繋がると期待され、社会的意義があると考えられる。

研究成果の概要(英文)：Excitonic states in the semimetallic Ta₂NiSe₅ under high pressure have been investigated on the basis of the realistic quasi one-dimensional three-chain Hubbard model. It has been shown that the system shows three types of Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov (FFLO) excitonic orders characterized by the condensation of excitons with finite center-of-mass momentum corresponding to the three types of nesting vectors of Fermi surfaces. It has also been found that, near the FFLO excitonic phase, the largely enhanced excitonic fluctuations mediate the Cooper pairs with finite center-of-mass momentum resulting in the FFLO superconductivity. In addition, we have studied the electron correlation effects by using the dynamical mean-field theory and have found that the excitonic state with a huge effective mass of the quasi-particles is realized in the strong correlation regime.

研究分野：数物系科学

キーワード：励起子相 FFLO状態 励起子揺らぎ 超伝導 多バンドハバード模型 第一原理計算 乱雑位相近似 動的平均場理論

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

最近、励起子絶縁体の有力な候補物質が次々と発見され、大きな注目を集めている。励起子絶縁体とは、ナローギャップ半導体やバンドの重なり小さな半金属において、電子-正孔対(励起子)が低温で量子凝縮した秩序状態で、1960年代初めに Mott や Knox らによって理論的に予言されて以来、探索が続けられてきた。この状態は、クーパー対が量子凝縮した超伝導状態と相似であり、例えば超伝導における BCS-BEC (ボース・アインシュタイン凝縮) クロスオーバーは、励起子絶縁体ではバンドギャップが正の半導体領域から負の半金属領域へのクロスオーバーとして議論されている。遷移金属カルコゲナイド Ta_2NiSe_5 は、 Ta_2Ni 鎖の擬一次元構造をもつナローギャップ半導体で、常圧では $T_s = 328\text{K}$ において斜方晶から単斜晶への構造相転移を示す。角度分解光電子分光 (ARPES) により、 T_s 以下で価電子バンド上端の平坦化が観測され、励起子絶縁体の可能性が提案された。理論的にも、第一原理計算から導出された Ta_2Ni 鎖の 3 鎖八バード模型に対する励起子絶縁体の BCS 型平均場理論に基づいて、実験が良く説明されている。

Ta_2NiSe_5 は、圧力を印加すると半金属的になり、構造相転移は抑制されて約 8GPa で消失するが、その近傍で超伝導が発見され、励起子相との関連からも大きな注目を集めている。この系は、 Ta - $5d$ 軌道由来の 2 重縮退した伝導バンドと、 Ni - $3d$ 軌道と Se - $4p$ 軌道の混成軌道由来の非縮退の価電子バンドからなり、半金属状態では縮重度の違いにより必然的に両バンド間でフェルミ波数の差が生じる。外部磁場下の超伝導では、上下スピンのフェルミ波数の差に起因する重心運動量が有限のクーパー対が凝縮した Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov (FFLO) 状態の可能性が議論されており、圧力下の半金属 Ta_2NiSe_5 でも、有限の重心運動量 q をもつ励起子が凝縮した FFLO 状態の可能性がある。そこで本研究代表者は、 Ta_2Ni 鎖の 3 鎖八バード模型を半導体から半金属にわたる幅広いパラメータ領域で調べた結果、加圧に対応するバンドギャップの減少により、従来の励起子絶縁体に対応する Uniform 励起子相から、半金属の FFLO 励起子相に相転移する相図を得た。

2. 研究の目的

FFLO 励起子相では、凝縮する励起子の重心運動量 q とそれに伴う非自明な位相 q に起因して、非対称なバンド分散が現れる。常圧の Ta_2NiSe_5 では、ARPES で観測された価電子バンド上端の平坦化が励起子絶縁体の証拠となったが、高圧での ARPES は現状では困難であるため、バンド分散以外の実験的証拠が重要となる。そこで、圧力下の実験との詳細な比較を行うため、従来の 3 鎖八バード模型を拡張し、第一原理計算に基づき鎖間結合や格子との結合効果を考慮したより現実的な有効模型を導出し、輸送特性などに顕われる FFLO 相の特異物性を明らかにする。励起子秩序に起因する構造相転移は 2 次相転移であり、転移点に向けて励起子揺らぎは発散的に増大する。研究代表者は、鉄系超伝導体などの多バンド系において、軌道秩序に起因する 2 次の構造相転移点の近傍における軌道揺らぎによる超伝導機構を議論してきたが、これを複数の伝導・価電子バンドをもつ Ta_2NiSe_5 に発展させ、励起子揺らぎが導く超伝導機構を議論する。特に、FFLO 励起子揺らぎの顕著な波数依存性に起因してゼロ磁場で実現する新しい FFLO 超伝導や、3 重臨界点近傍の強い揺らぎから期待される高温超伝導の可能性を明らかにする。さらに、 Ta_2NiSe_5 の研究を通して構築された計算手法を用いて、様々な励起子相の候補物質 (1T-TiSe₂ や Pr_{0.5}Ca_{0.5}CoO₃ など) の研究を進める。各物質で実現する多様な励起子相を系統的に調べ、バンド縮重度や結合の強さ、次元性などの違いによる励起子相図を統一的に理解するとともに、構築された手法を物質設計へと応用し、新たな励起子相や High- T_c を含む新奇超伝導の候補物質を探索する。

3. 研究の方法

研究代表者が鉄系超伝導体の研究に用いてきた計算手法、即ち「第一原理計算 (WIEN2k など) 現実的多バンド有効模型の構築 (最局在ワニエ関数) 電子間クーロンと電子フォノン相互作用による揺らぎ増強とペアリング相互作用 (RPA, DMFT) 超伝導の対称性と転移温度 (Eliashberg 方程式)」を、複数の伝導・価電子バンドをもつ Ta_2NiSe_5 に応用し、FFLO 状態を含む励起子相や励起子揺らぎによる超伝導を調べる。具体的には、以下のように研究を進める。

これまでに行った Ta_2NiSe_5 の研究では、常圧の第一原理計算から導出された 3 鎖八バード模型に基づき、加圧の効果をバンドギャップの変化として考慮した。しかし、FFLO 励起子状態の発現機構は、フェルミ準位近傍のバンド構造やフェルミ面の詳細に大きく依存するため、圧力下の正確なバンド構造を決めることが重要となる。そこで、鉄系超伝導体の研究で行ってきたように、第一原理計算と最局在ワニエ関数を用いて、各圧力に対する現実的な低エネルギーの多バンド有効模型を導出する。

導出された各圧力に対する現実的な有効模型に基づいて、 Ta_2NiSe_5 の励起子相の温度-圧力相図を求める。その際、伝導バンドと価電子バンドのバンド間クーロン斥力 V (即ち電子-正孔間の引力) 相互作用と、斜方晶から単斜晶への構造相転移に関与する局所フォノンと電子との相互作用の効果を、これまでの弱結合 BCS 型平均場近似に加えて、空間次元無限大で厳密となり強結合領域も記述可能な動的平均場理論 (DMFT) を用いて考慮する。これにより、半金属の弱結合 BCS 領域から半導体の強結合 BEC 領域にわたる全パラメータ領域で定量的に信頼性のあ

る相図を完成させる。また、DMFT で得られた自己エネルギー補正に基づいて、特に BEC 領域で重要となる励起子相の転移温度以上の正常相における電子-正孔対形成の前駆現象の効果(擬ギャップなど)についても調べる。

4. 研究成果

本研究では、現実的な鎖間トランスファーを考慮することにより模型を2次元に拡張した擬1次元3鎖ハバード模型を導入し、 Ta_2NiSe_5 の半金属状態において実現するFFLO励起子状態が、従来の1次元模型でも得られていた比較的低下領域での $q=(q_x, 0)$ のFFLO1状態に加えて、高圧下での $q=(q_x, \pi)$ のFFLO2状態、さらに、低圧、低温領域における $q=(0, \pi)$ のFFLO3状態の3状態となることを示した。さらに、この擬1次元3鎖ハバード模型に対して励起子揺らぎの効果をRPAの範囲で調べ、励起子揺らぎを媒介とする超伝導が、FFLO1励起子相の近傍ではクーパー対が $Q=(Q_x, \pi)$ の重心運動量をもつFFLO超伝導、FFLO2励起子相の近傍では $Q=(Q_x, 0)$ の重心運動量をもつFFLO超伝導が実現することがわかった。

Ta_2NiSe_5 の常圧や低圧の半導体的状況においては、励起子対のpreformed-pairやBCS-BECクロスオーバーが示唆され、強結合状態の重要性が認識されている。そこで、本年度は強相関・強結合効果の記述に有効な動的平均場理論(DMFT)を上記の3バンドハバード模型に適用し、これまでの平均場近似やRPAで得られた結果と比較・検討した。その結果、平均場近似やRPAでは、オンサイトクーロン相互作用 U を考慮すると、サイト(バンド)間クーロン相互作用 V の効果による励起子状態よりも電荷密度波状態(CDW)が安定化されたのに対して、DMFTでは現実的な U と V の値に対して、励起子状態がCDWよりも安定化されることが分かった。また、励起子相への転移領域では、擬ギャップ的な1粒子スペクトル関数が得られることも分かった。

実験との比較を念頭に置いて現実の物性について言及するためには、結晶構造を反映させた、より現実的な模型から出発する必要がある。そこで、高圧下の半金属 Ta_2NiSe_5 の結晶パラメータを用いて第一原理バンド計算を行い、最局在Wannier関数を用いて、Taの5d軌道、Niの3d軌道、Seの4p軌道からなる60軌道 $d-d-p$ 模型を構築し、高圧下の Ta_2NiSe_5 の励起子秩序を調べ、実験との比較検討を行った。

最近のフェムト秒レーザー時間・角度分解光電子分光(TrARPES)実験で、常圧の構造相転移温度以下における光照射前のTrARPESスペクトルは励起子相に特徴的なフラットバンドを示しているのに対して、照射後のスペクトルはホールと電子バンドの縮重度が1:1の半金属的になることが報告され、構造相転移温度より高温における熱平衡状態での半導体状態とは異なることが示された。このことは、励起子秩序に対する従来の平均場近似では無視されている電子相関効果が重要であることを示唆している。そこで、電子相関効果が十分に考慮できる動的平均場理論(DMFT)に基づき、励起子相およびその近傍の正常状態を調べた。その結果、バンド間相互作用が大きな領域における励起子相の周辺において、準粒子繰り込み因子 Z が非常に小さく(即ち、有効質量 $1/Z$ が非常に大きく)、絶縁体に近い強相関励起子状態が実現することが分かった。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計7件（うち査読付論文 7件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Yuto Iizuka, Takemi Yamada, Katsuro Hanzawa and Yoshiaki Ono	4. 巻 30
2. 論文標題 RKKY Interaction and Quadrupole Order in PrT ₂ Al ₂₀ (T=Ti, V) Based on Effective 196 Orbital Model Extracted from First-Principles Calculation	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 JPS Conference Proceedings	6. 最初と最後の頁 011152-1--6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSCP.30.011152	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 Kento Sasaki, Takemi Yamada, Kaoru Domon and Yoshiaki Ono	4. 巻 30
2. 論文標題 Dynamical Mean-Field Study of Excitonic Phase in the Spinless Two-Band Hubbard Model for Electron-Hole System	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 JPS Conference Proceedings	6. 最初と最後の頁 01107-1--4
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSCP.30.011070	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 Takuya Sekikawa, Rai Watabe, Jun Ishizuka, Yoshihiro Nitta, Kazuhiro Sano and Yoshiaki Ono	4. 巻 30
2. 論文標題 First-Principles Study and Orbital-Fluctuation Effect on the Superconductivity in Tungsten Bronze AxW ₃	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 JPS Conference Proceedings	6. 最初と最後の頁 011043-1--5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSCP.30.011043	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 Takemi Yamada, Kaoru Domon, and Yoshiaki Ono	4. 巻 88
2. 論文標題 FFLO Superconductivity Mediated by Excitonic Fluctuation in Semimetallic Ta ₂ NiSe ₅	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 064701/1-11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.88.064701	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 Jun Ishizuka, Takemi Yamada, Yuk Yanagi and Yoshiaki Ono	4. 巻 87
2. 論文標題 Fermi Surface, Pressure-Induced Antiferromagnetic Order, and Superconductivity in FeSe	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 014705-1--9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.87.014705	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 Kaoru Domon, Takemi Yamada and Yoshiaki Ono	4. 巻 87
2. 論文標題 Excitonic Phase Diagram of the Three-Chain Hubbard Model for Semiconducting and Semimetallic Ta ₂ NiSe ₅	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 054701-1--8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.87.054701	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 Kazuhiro Sano, Takahiro Hattori and Kohji Nakamura	4. 巻 96
2. 論文標題 Role of surface-bound hole states in electric-field-driven superconductivity at the (110)-surface of diamond	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 155144-1--7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.96.155144	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57件 (うち招待講演 0件 / うち国際学会 11件)

1. 発表者名 齋藤雅樹, 関川卓也, 大野義章
2. 発表標題 第一原理計算によるAl-Zn-Mg準結晶および近似結晶の電子状態II
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 佐々木健人, 山田武見, 土門薫, 大野義章
2. 発表標題 動的平均場理論による電子-孔スピンレス2バンドハバード模型の励起子状態と金属絶縁体転移
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 飯塚優人, 山田武見, 半澤克郎, 大野義章
2. 発表標題 Pr1-2-20系の四極子秩序と超伝導: 第一原理計算に基づく196軌道有効模型による解析II
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 猪熊祐輔, 山田武見, 大野義章
2. 発表標題 動的平均場理論による多バンド・ハバード模型の超伝導感受率
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 今野元, 土門薫, 山田武見, 大野義章
2. 発表標題 FeSeにおける励起子秩序の可能性とフェルミ面
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 関川卓也, 川井弘之, 大野義章
2. 発表標題 第一原理計算と朝永ラッティンジャー液体論によるDNAのエネルギーバンドの塩基配列依存性と超伝導
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 関川卓也, 長島一樹, Guozhu Zhang, 広瀬雄介, 摂待力生, 柳田剛, 大野義章
2. 発表標題 第一原理計算によるW03ナノワイヤの電子状態と電気伝導
3. 学会等名 第67回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Kaoru Domon, Takemi Yamada, and Yoshiaki Ono
2. 発表標題 Theory of excitonic order and superconductivity in Ta ₂ NiSe ₅ under pressure as a candidate material of excitonic phase
3. 学会等名 International Conference on Strongly Correlated Electron Systems 2019 (SCES '19) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Takuya Sekikawa, Rai Watabe, Jun Ishizuka, Hiroyuki Kawai, Yoshihiro Nitta, Kazuhiro Sano, and Yoshiaki Ono
2. 発表標題 First-Principles Study and Orbital-Fluctuation Effect on the Superconductivity in Tungsten Bronze AxW03
3. 学会等名 International Conference on Strongly Correlated Electron Systems 2019 (SCES '19) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yuto Iizuka, Takemi Yamada, Katsuro Hanzawa, and Yoshiaki Ono
2. 発表標題 RKKY Interaction and Quadrupole Order in PrT ₂ Al ₂₀ (T=Ti, V) Based on Effective 196 Orbital Model Extracted from First-Principles Calculation
3. 学会等名 International Conference on Strongly Correlated Electron Systems 2019 (SCES ' 19) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kento Sasaki, Takemi Yamada, Kaoru Domon, Yoshiaki Ono
2. 発表標題 Dynamical Mean-Field Study of Excitonic Phases in the Multi-Band Hubbard Models for Electron-Hole Systems
3. 学会等名 International Conference on Strongly Correlated Electron Systems 2019 (SCES ' 19) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masaki Saito, Takuya Sekikawa, Yoshiaki Ono
2. 発表標題 First-principles Study of Superconducting Al-Zn-Mg Quasi-crystals: Comparison between 1/1 and 2/1 Approximants
3. 学会等名 The 22nd Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN-22) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Takuya Sekikawa, Hiroyuki Kawai and Yoshiaki Ono
2. 発表標題 First-Principles Calculation of DNA Energy Band Responsible for Superconductivity
3. 学会等名 The 22nd Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN-22) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Takuya Sekikawa, Hiroyuki Kawai, Yoshiaki Ono
2. 発表標題 Superconductivity in DNA and its sequence dependence based on first principles calculations and Tomonaga-Luttinger theory
3. 学会等名 11th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masaki Saito, Takuya Sekikawa, Yoshiaki Ono
2. 発表標題 First-principles calculations for electronic states of Al-Zn-Mg quasicrystal and its approximant
3. 学会等名 11th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masaki Saito, Takuya Sekikawa, Yoshiaki Ono
2. 発表標題 Electronic states of Al-Mg-Zn quasicrystal and its approximant based on the first-principles calculations
3. 学会等名 14th International Conference on the Structure of Non-Crystalline Materials (NCM14) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 齋藤雅樹, 関川卓也, 大野義章
2. 発表標題 第一原理計算によるAl-Zn-Mg準結晶および近似結晶の電子状態
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 関川卓也, 川井弘之, 大野義章
2. 発表標題 第一原理計算によるDNAのエネルギーバンドの塩基配列依存性と超伝導
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 今野元, 関川卓也, 飯塚優人, 山田武見, 大野義章
2. 発表標題 Modified Becke-Johnson交換ポテンシャルを用いたFeSeの第一原理バンド計算
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 関川卓也, 渡部来, 石塚淳, 新田祥大, 佐野和博, 大野義章
2. 発表標題 第一原理計算に基づくAxW03の有効多バンドモデルにおける軌道揺らぎと超伝導
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 土門薫, 山田武見A, 大野義章
2. 発表標題 第一原理計算に基づくTa ₂ NiSe ₅ の圧力下における電子状態と励起子秩序
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 佐々木健人, 山田武見, 土門薫, 大野義章
2. 発表標題 動的平均場理論による電子 - 正孔2バンドハバード模型の励起子状態III
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 飯塚優人, 山田武見, 半澤克郎, 大野義章
2. 発表標題 Pr1-2-20系の四極子秩序と超伝導：第一原理計算に基づく196軌道有効模型による解析
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 土門薫, 山田武見, 大野義章
2. 発表標題 励起子相候補物質Ta ₂ NiSe ₅ の圧力下における電子状態の理論II
3. 学会等名 日本物理学会第74回年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 佐々木健人, 山田武見, 土門薫, 大野義章
2. 発表標題 動的平均場理論による電子-正孔2バンドハバード模型の励起子状態II
3. 学会等名 日本物理学会第74回年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 大野義章, 渡部来, 関川卓也, 石塚淳, 川井弘之, 新田祥大, 佐野和博
2. 発表標題 第一原理計算と軌道揺らぎ理論によるタングステンブロンズ $AxWO_3$ のバルクと表面における超伝導
3. 学会等名 日本物理学会第74回年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 広瀬雄介, 平原琢也, 摺待力生, 大野義章
2. 発表標題 Ta_2NiSe_5 の不純物効果の研究
3. 学会等名 日本物理学会第74回年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 飯塚優人, 山田武見, 半澤克郎, 大野義章
2. 発表標題 第一原理計算によるPr1-2-20系のRKKY相互作用と四極子秩序II
3. 学会等名 日本物理学会第74回年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 関川 卓也, 白石 賢二, 佐々木 進, 大野 義章
2. 発表標題 GaN自発分極の第一原理計算による検討
3. 学会等名 第66回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 齋藤 雅樹、関川 卓也、佐々木 進、大野 義章
2. 発表標題 第一原理計算によるGaN表面の電子状態と電界効果
3. 学会等名 第66回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kaoru Domon, Takemi Yamada and Yoshiaki Ono
2. 発表標題 Theory of electronic states in Ta ₂ NiSe ₅ under pressure as a candidate material of excitonic phase
3. 学会等名 12th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Takuya Sekikawa, Hiroyuki Kawai, Yoshiaki Ono
2. 発表標題 First-principles study of electronic structure and superconductivity in AxWO ₃ with bulk and surface geometries
3. 学会等名 10th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 関川卓也, 白石賢二, 草薙亮, 鈴木康平, 大野義章, 佐々木進
2. 発表標題 GaNの内部分極の第一原理計算
3. 学会等名 日本物理学会2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 関川卓也, 川井弘之, 大野義章
2. 発表標題 第一原理計算によるDNAのエネルギーギャップの塩基配列依存性
3. 学会等名 日本物理学会2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 渡部来, 石塚淳, 大野義章
2. 発表標題 タングステンブロンズ $AxW03$ の3軌道ホルスタイン模型における軌道揺らぎと超伝導の理論
3. 学会等名 日本物理学会2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 広瀬雄介, 平原琢也, 摺待力生, 竹内徹也, 大野義章
2. 発表標題 Ta_2NiSe_5 のNi サイト置換効果
3. 学会等名 日本物理学会2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 関川卓也, 川井弘之, 新田祥大, 佐野和博, 大野義章
2. 発表標題 第一原理計算による $AxW03$ のバルクと表面における電子状態と超伝導
3. 学会等名 日本物理学会2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 谷口晴香, 高橋陸, 村上真俊, 熊谷凌, 中山敦子, 松川倫明, 中野智志, 萩原亮, 佐々木孝彦, 大野義章, 佐野和博
2. 発表標題 金属二重鎖系Pr ₂ Ba ₄ Cu ₇ O _{15-d} の超伝導と結晶構造への圧力効果
3. 学会等名 日本物理学会2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 飯塚優人, 山田武見, 半澤克郎, 大野義章
2. 発表標題 第一原理計算によるPr ₁₋₂ -20系のRKKY相互作用と四極子秩序
3. 学会等名 日本物理学会2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 山田武見, 大野義章
2. 発表標題 動的平均場理論によるTa ₂ NiSe ₅ の励起子秩序と揺らぎに対する強相関効果
3. 学会等名 日本物理学会2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 土門薫, 山田武見, 大野義章
2. 発表標題 励起子相候補物質Ta ₂ NiSe ₅ の圧力下における電子状態の理論
3. 学会等名 日本物理学会2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 佐々木健人, 山田武見, 土門薫, 大野義章
2. 発表標題 動的平均場理論による電子 - 正孔2バンドハバード模型の励起子状態
3. 学会等名 日本物理学会2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 広瀬雄介, 平原琢也, 摺待力生, 竹内徹也, 大野義章
2. 発表標題 Ta ₂ NiSe ₅ のNi サイト置換効果
3. 学会等名 日本物理学会2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 土門薫, 山田武見, 大野義章
2. 発表標題 Ta ₂ NiSe ₅ の3鎖ハバード模型における励起子秩序のFF状態とL0状態II
3. 学会等名 日本物理学会第73回年次大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 山田武見, 大野義章
2. 発表標題 Ta ₂ NiSe ₅ の3鎖ハバード模型に対する動的平均場理論II
3. 学会等名 日本物理学会第73回年次大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 関川卓也, 川井弘之, 大野義章
2. 発表標題 第一原理計算によるW03表面の電子構造と超伝導
3. 学会等名 日本物理学会第73回年次大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 中六角有矢, 熊谷凌, 松川倫明, 谷口晴香, 萩原亮, 佐々木孝彦, 大野義章, 佐野和博
2. 発表標題 金属二鎖重系Pr ₂ Ba ₄ Cu ₇ O ₁₅ - 超伝導体の圧力下の磁気輸送特性
3. 学会等名 日本物理学会第73回年次大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 飯塚優人, 山田武見, 半澤克郎, 大野義章
2. 発表標題 1-2-20系の第一原理バンド計算と四極子秩序II
3. 学会等名 日本物理学会第73回年次大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 渡部来, 原向日葵, 石塚淳A 大野義章B 新田祥大, 佐野和博
2. 発表標題 タングステンブロンズAxW03の超伝導に対する第一原理計算と軌道揺らぎ理論II
3. 学会等名 日本物理学会第73回年次大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 土門薫, 山田武見, 大野義章
2. 発表標題 Ta ₂ NiSe ₅ の3鎖ハバード模型における励起子秩序のFF状態とL0状態
3. 学会等名 日本物理学会2017年秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 飯塚優人, 山田武見, 大野義章
2. 発表標題 1-2-20系の第一原理バンド計算と四極子秩序
3. 学会等名 日本物理学会2017年秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 中六角有矢, 桑原成彬, 熊谷凌, 松川倫明, 谷口晴香, 萩原亮, 佐々木孝彦, 大野義章, 佐野和博
2. 発表標題 金属二鎖重系Pr ₂ Ba ₄ Cu ₇ O ₁₅ - 超伝導体の輸送特性の圧力効果
3. 学会等名 日本物理学会2017年秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 山田武見, 大野義章
2. 発表標題 Ta ₂ NiSe ₅ の3鎖ハバード模型に対する動的平均場理論
3. 学会等名 日本物理学会2017年秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 渡部来, 原向日葵, 石塚淳, 大野義章, 新田祥大, 佐野和博
2. 発表標題 タングステンブロンズ $AxW03$ の超伝導に対する第一原理計算と軌道揺らぎ理論
3. 学会等名 日本物理学会2017年秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 原向日葵, 石塚淳, 山田武見, 大野義章
2. 発表標題 タングステンブロンズ $AxW03$ の構造相転移と軌道秩序の理論
3. 学会等名 日本物理学会2017年秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 水谷元春, 瀬尾洗貴, 佐野和博
2. 発表標題 不純物をドーピングした半導体の超伝導転移温度
3. 学会等名 日本物理学会2017年秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 佐野和博, 中村浩次
2. 発表標題 ダイヤモンドにおける電場誘起超伝導の電子状態
3. 学会等名 日本物理学会2017年秋季大会
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計0件

〔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	佐野 和博 (Kazuhiro Sano) (40201537)	三重大学・工学研究科・教授 (14101)	