

令和 4 年 6 月 22 日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2018～2020

課題番号：18H01860

研究課題名(和文) ワイドバンド・ナローバンド共存電子系の精密制御による新規高温超伝導体の設計と実証

研究課題名(英文) Designing and synthesis of high temperature superconductors based on coexisting wide and narrow-band theory

研究代表者

黒木 和彦 (Kuroki, Kazuhiko)

大阪大学・理学研究科・教授

研究者番号：10242091

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)：高圧合成法を用いて、 $\text{Sr}_3\text{Mo}_2\text{O}_7$ -dの純良多結晶試料の合成法を確立した。本研究により、 $\text{Sr}_3\text{Mo}_2\text{O}_7$ -dが理論の予想に反して超伝導にならないのは、酸素欠損が超伝導にならない理由ではないことがわかり、理論と実験が整合しない理由については引き続き、検討していく必要がある。新しいタイプの銅酸化物高温超伝導体 Ba_2CuO_3 +dが、ワイドバンド・ナローバンド共存系とみなせることを見出したのは、予想していなかった展開であり、大きな成果である。この研究に触発されて、複合アニオン・ニッケル化合物を新しい超伝導体として理論的に提案した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究の動機は、我々が、 $\text{Sr}_3\text{Mo}_2\text{O}_7$ -dにおいて高温超伝導の可能性を理論的に提案したことであった。現在までにその超伝導は実験的に実現していないが、その純良な試料の作成法を確立することができた。このことにより、今後、実験と理論が整合しない原因をさらに突き詰めることができると期待される。また、研究期間中に新しいタイプの銅酸化物超伝導体(中国)やニッケル酸化物超伝導体(米国)が発見されたが、我々の理論の視点から、意外にも、両者につながりがある可能性があることがわかった。さらに、この観点から、あらたにニッケル化合物の超伝導体を理論的に提案した。これは今後の新しい展開につながることを期待される。

研究成果の概要(英文)：We have established a method to synthesize good quality samples of $\text{Sr}_3\text{Mo}_2\text{O}_7$ -d under high pressure. This will enable us to pin down the reason why the material does not become superconducting, in contradiction to the theoretical prediction. We have found that the new-type high T_c cuprate Ba_2CuO_3 +d can be considered as a system with coexisting wide and narrow bands, in which superconductivity can be strongly enhanced when the narrow band becomes incipient. Motivated by this finding, we have also theoretically designed mixed anion nickelate superconductors.

研究分野：物性理論

キーワード：高温超伝導 バンド構造 スピン揺らぎ

1. 研究開始当初の背景

本申請の代表者である黒木は、ワイドバンド・ナローバンド共存系における高温超伝導を提唱してきた。一般に、2バンド系においては、二つのバンド間をクーパー対が行き来(ペア散乱)することで超伝導が発現、または T_c が増大する。ペア散乱に寄与し得る電子状態の数を増やせばペアリング相互作用は増大するが、そのためにフェルミ準位(E_F)における状態密度を高くすると、電子相関効果が強められることで電子の質量が重くなってしまう。黒木の提案は、バンド幅の広いバンド(ワイドバンド)と狭いバンド(ナローバンド)からなる2バンド系を考え、 E_F をナローバンドの直近におく、すなわち、ナローバンドを”incipient band”にすると、 E_F を切るワイドバンド上の軽い電子が、ナローバンド上にある多くの状態をペア散乱に使って強力なペアリング相互作用を得ることができ、高温超伝導が実現される、というものである(図1)。

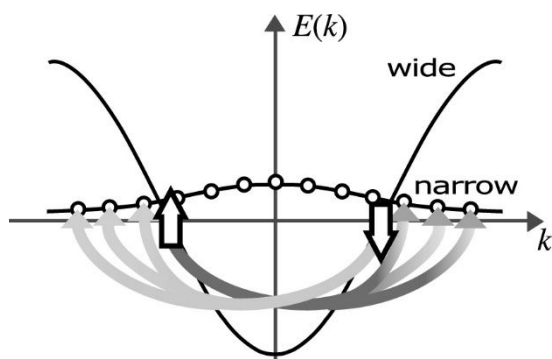


図1 ワイドバンドと incipient なナローバンド共存系。矢印は、クーパー対のバンド間散乱を表している。

黒木らは、Ruddlesden-Popper 型の二層系酸化物がワイドバンド・ナローバンド共存系であることを理論的に見出した。この物質群は一見すると通常の層状化合物であるが、 d_{xz} と d_{yz} 軌道に着目すると、その異方性に起因して、それぞれの軌道が梯子型の電子状態を持つことがわかる。特に、 $\text{Sr}_3\text{Mo}_2\text{O}_7$ と $\text{Sr}_3\text{Cr}_2\text{O}_7$ では、元素置換されていない母物質において既に E_F が理想的な位置に近い。これらの物質はこれまでに合成報告はあるものの、超伝導発現は報告されていない。

2. 研究の目的

- ・ $\text{Sr}_3\text{Mo}_2\text{O}_7$ において、超伝導が発現するための条件をより精密に議論する。また、作製された試料の酸素量の精密評価手法および制御手法を確立し、現実の物質において超伝導の実現を目指す。

- ・ $(\text{Sr},\text{La})_3\text{V}_2\text{O}_7$ と $\text{Sr}_3\text{V}_2(\text{O},\text{H})_7$ に着目し、超伝導の発現条件を理論的に調べ、その実現のための実験的取組みとして、特に、高圧法や、結晶構造の基本骨格を保ちながら一部原子の置換・挿入等を行うトポケミカル反応法を用いた水素置換手法を確立する。

- ・ 梯子型電子状態に限定せず、より高次元の電子状態を持つ物質も含めて、ワイドバンド・ナローバンド共存系による高温超伝導の可能性を探究する。特にモデルベースの研究と、物質に即した研究を並行して行うことにより、どのようなパラメーター領域が超伝導発現に有利であるかを探究しつつ、それに近づくための物質探索を行う。

3. 研究の方法

[理論的研究]

モデルに対する研究と現実の物質に即した研究に大別される。モデルに対する研究は、梯子型格子や二層型格子上のハバード模型を考え、超伝導が最適化されるための条件を探究した。手法としては、乱雑位相近似、揺らぎ交換近似、変分モンテカルロ法を用いた。梯子型格子ではrung方向とleg方向の電子のホッピングの比、また、二層型格子では、層間と層内ホッピングの比を重要なパラメーターと位置づけ、ナローバンドがincipientになる前後における動的スピン揺らぎや超伝導になりやすさを詳細に調べた。

現実の物質に即した研究においては、梯子型銅酸化物、新しいタイプの銅酸化物高温超伝導体、ニッケル酸化物超伝導体、複合アニオン・ニッケル化合物を取り扱った。それぞれの物質に対して、第一原理バンド計算を行い、ワニエ軌道を構築することで、有効的強束縛近似模型を構築した。得られた模型に対して揺らぎ交換近似を適用し、超伝導のやりやすさを調べた。有効模型のパラメーターは第一原理計算から定まるが、物理的な考察を行う必要がある場合は、パラメーターを手動で動かして、スピン揺らぎや超伝導への影響を調べた。

[実験的研究]

Caフリー銅酸化物は、各種酸化物原料、および酸化剤としてAg₂Oを用い、高酸素雰囲気下での高圧合成（約3.5 GPa, 900–1000 °C）で多結晶試料を作製した。Hg系およびTI系については、得られた試料の過剰酸素を還元するため、約450 °Cでポストアニール処理を行った。頂点F系試料においては、フッ化剤CuF₂を用いる場合（トポケミカル反応）と用いない場合の低温アニールが構造と超伝導に与える影響を検証した。結晶構造解析は、リートベルト法で粉末X線回折データを精密化した。トポケミカル反応によるフッ素挿入位置の同定には、第一原理計算による構造最適化と分子動力学シミュレーションを併用し、構造モデルの動的安定性を検証した上でリートベルト解析を行った。各試料のT_cは、帯磁率測定により決定した。

バルク体の(Nd,Sr)NiO₂の合成にあたり、まず、高圧合成を用いてNi³⁺の価数を有する母物質(Nd,Sr)NiO₃の多結晶体を作製した。この試料の酸素を脱離してNi¹⁺の(Nd,Sr)NiO₂を得るため、(Nd,Sr)NiO₃とおおむね同モル質量の還元剤CaH₂またはNaHを混合し、真空封止された石英管内でトポケミカル反応を施した。得られた試料はX線回折によって相同定を行い、SEM/EDXを用いて組成分析を行った。

Sr₃Mo₂O_{7.8}およびSr₃V₂O_{7.8}は、酸化物を原料とする高圧合成法において合成を行った。酸素量は出発原料酸化物の混合比を調整することで調節し、粉末X線レベルで目的物質の単相試料を得ることに成功を収めた。

4. 研究成果

[理論的研究]

(1) ワイドバンドとナローバンド共存系において超伝導に有利になる条件を、従来までの擬1次元系から2次元系、さらに3次元系にまで拡張して、広範囲のパラメーター領域にわたって調べた。その結果、バンド端の状態密度が大きい2次元系においても、擬1次元系と同様に、超伝導が強く増強されることを見出した。これにより、ワイドバンドとナローバンド共存による高温超伝導を探索する領域が拡大されたことになる。これは、ナローバンドがフェルミ準位近傍にあるincipient band状態にあるとき、ゼロ・エネルギー近傍のスピン揺らぎが抑制され、有限エネルギーのスピン揺らぎが増強されることによって、超伝導が著しく増強されることによるものである。

(2) Sr₃V₂O₇については、バンド計算と模型構築を行い、現在、超伝導の可能性を理論的に探究する研究は続行中である。

(3) 10Pのグループにより発見された新しいタイプの銅酸化物Ba₂CuO_{3+δ}の研究においては、異なる軌道成分を持つバンド間においてもワイドバンド・ナローバンド共存によるincipient band超伝導機構が働くことを見出した。この起源についても検討し、二軌道系は、軌道内・軌道間相互作用が全て等しいとき、二層系にマップされることで説明がつくことを示した。

(4) 2本鎖梯子型銅酸化物において電子をドーブしたときに、ナローバンドをincipientな状態にして超伝導に有利にするためには、直観的には、横木方向に一軸圧力を加えることがよさそうに思える。我々はこれを理論的に調べ、直観に反して、梯子の脚方向に圧力をかけることによって、電子の横木方向のホッピングが増し、超伝導を増強し得ることを示した。

(5) Ba₂CuO_{3+δ}の研究に触発され、d⁸電子配置を持つ複合アニオン型ニッケル化合物(図2)にお

いて、多軌道型のincipient band機構による高温超伝導がおこる可能性があることを提唱した。さらに我々のこの理論と、2019年に新しく発見されたニッケル酸化物超伝導の発現機構が関係している可能性があることを指摘した。

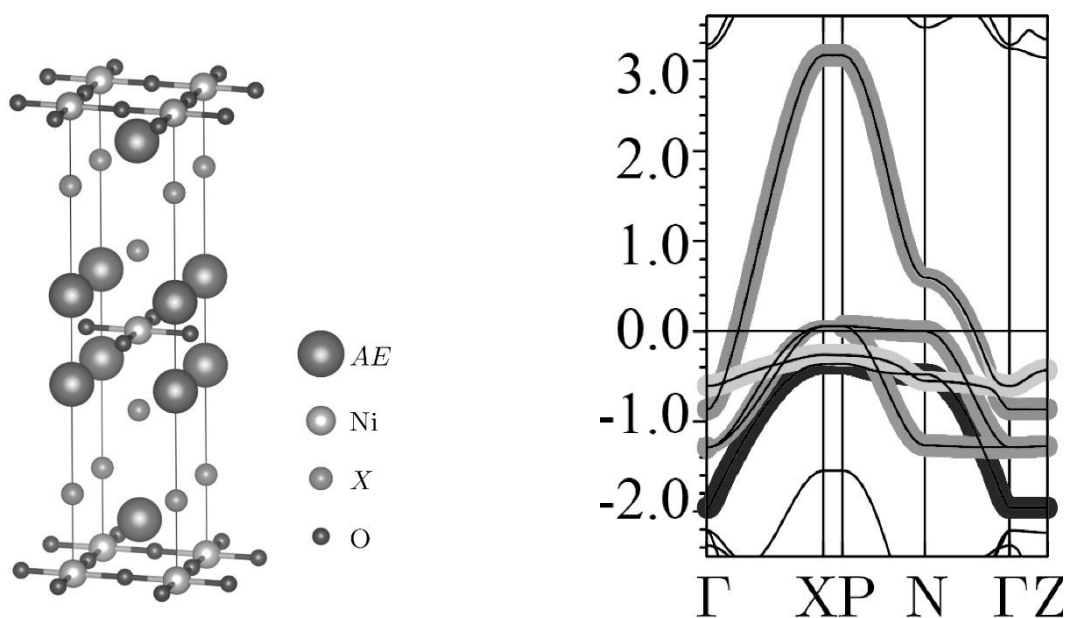


図2 左：新しい超伝導体として理論的に提案した $AE_2NiO_2X_2$ ($AE=Ca$ 等、 $X=Cl, F$ 等)。右、 $Ca_2NiO_2Cl_2$ のバンド構造。一番上に分散の強いワイドバンドがあり、その他のナローバンドが E_F 直下に存在している。

[実験的研究]

(1) 高圧合成法を用いて、 $Sr_3Mo_2O_{7.8}$ の純良多結晶試料の合成法を確立した。層状Mo酸化物の超伝導探索： $Sr_3Mo_2O_{7.8}$ の中性子線回折により、結晶構造の精密解析を行った。特に、酸素量の見積もりを行った結果、同物質には酸素欠損がほとんど存在しないことを見いだした。これにより、超伝導が出現していない理由が、酸素欠損によるものではないことが示された。

(2) $Sr_3V_2O_{7.8}$ 系については、Vの価数が3.5価になると報告がなされている $Eu_3V_2O_7$ の作成を試みたが、文献通りの結果は再現されなかった。Lieb格子物質については、銅酸化物高温超伝導体類縁化合物において候補物質が発見され、同物質の構造・組成の同定に向けた研究を行った。

(3) 新規銅酸化物、ニッケル酸化物の物質合成と超伝導探索：米国スタンフォード大学で発見された新超伝導体(Nd, Sr) NiO_2 の多結晶試料を、高圧合成法とトポケミカル反応を組み合わせで作成した。超伝導が出現すると報告されている試料の合成には成功を収めたものの、現時点で超伝導は出現していない。

(4) 中国IOPグループによる $Ba_2CuO_{3+\delta}$ の発見を受け、従来にない長いCuOバンド長を有する銅酸化物高温超伝導体の物質開発を行った結果、2枚の CuO_2 面間にSr層が挟まれた構造ユニットが合成可能であることを見だし、一連の超伝導体 $Sr_3Cu_2O_4F_2$ ($T_c = 110K$)、 $TlSr_3Cu_2O_7$ ($T_c = 75 K$)、 $(C_{1-x}B_x)Sr_3Cu_2O_7$ ($T_c = 80 K$)、 $(Hg, Re)Sr_3Cu_2O_7$ ($T_c = 110 K$)を発見した。

(5) CuO_2 面がSrで仕切られる新規Caフリー二層型銅酸化物の結晶構造を同定・解析し、従来のCa含有系と同じ構造をもつことを明らかにした。高圧合成で作製した試料に還元アニールを施すことで、例えば $(Hg, Re)Sr_2SrCu_2O_y$ で $T_c = 110 K$ を達成した。

(6) 頂点フッ素系 $Sr_2SrCu_2O_{4+y}F_{2-y}$ に関しては、 CuF_2 を用いてトポケミカル反応を施すことで、その構造が直方晶に変化し、 T_c が大きく増大することが分かった。さらに、 $Sr_2SrCu_2O_{4+y}F_{2-y}$ の T_c 向上と構造変化の詳細を調べ、トポケミカル反応によって過剰酸素の除去とFの挿入が生じることが分かった。計算科学を併用した構造解析を行い、Fは岩塩型ブロック層の格子間位置にインターカレートされることが分かった。さらに、 CuF_2 を用いない低温アニールにより、頂点Fのない平面四配位構造が実現するなど、 $Sr_2SrCu_2O_{4+y}F_{2-y}$ で生じる3種の構造と超伝導の関係を明らかにした。

[総括]

本研究課題の直接の動機となった $\text{Sr}_3\text{Mo}_2\text{O}_{7-\delta}$ の超伝導については、依然として実現できていないものの、高圧合成法を用いて、 $\text{Sr}_3\text{Mo}_2\text{O}_{7-\delta}$ の純良多結晶試料の合成法を確立したことは大きな成果といえる。本研究により、酸素欠損が超伝導にならない理由ではないことがわかり、理論と実験が整合しない理由については引き続き、検討していく必要がある。

新しいタイプの銅酸化物高温超伝導体である $\text{Ba}_2\text{CuO}_{3+\delta}$ が、少なくとも理論研究上は、ワイドバンド・ナローバンド共存系とみなせて、incipient band 超伝導機構が効きうることを見出したのは、まったく予想していなかった展開であり、最大の成果のひとつであった。これに触発されて、複合アニオン・ニッケル系における新たな超伝導体の理論的提案をすることができた。本研究課題の期間中、米国のグループによりニッケル酸化物 $(\text{La}, \text{Nd}, \text{Sr})\text{NiO}_2$ における超伝導が発見されたが、我々の理論的提案は、 $\text{Ba}_2\text{CuO}_{3+\delta}$ と $(\text{La}, \text{Nd}, \text{Sr})\text{NiO}_2$ という、一見すると関係がない物質間を、ワイドバンド・ナローバンド共存系という観点から橋渡しする可能性があり、今後のあらたな展開に結びつけることができたといえる。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計15件（うち査読付論文 14件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 6件）

1. 著者名 Daichi Kato and Kazuhiko Kuroki	4. 巻 2
2. 論文標題 Many-variable variational Monte Carlo study of superconductivity in two band Hubbard models with an incipient band	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 023156-(1-9)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/physrevresearch.2.023156	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 Hikaru Sakamoto and Kazuhiko Kuroki	4. 巻 2
2. 論文標題 Possible enhancement of superconductivity in ladder-type cuprates by longitudinal compression	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 022055(R)-(1-6)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/physrevresearch.2.022055	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 H. Sakakibara, H. Usui, K. Suzuki, T. Kotani, H. Aoki, K. Kuroki	4. 巻 125
2. 論文標題 Model Construction and a Possibility of Cupratelike Pairing in a New d9 Nickelate Superconductor (Nd,Sr)NiO ₂	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 077003-(1-6)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/physrevlett.125.077003	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 K. Yamazaki, M. Ochi, D. Ogura, K. Kuroki, H. Eisaki, S. Uchida, H. Aoki	4. 巻 2
2. 論文標題 Superconducting mechanism for the cuprate Ba ₂ CuO _{3+d} based on a multiorbital Lieb lattice model	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 033356-(1-19)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/physrevresearch.2.033356	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 Naoya Kitamine, Masayuki Ochi, Kazuhiko Kuroki	4. 巻 2
2. 論文標題 Designing nickelate superconductors with d8 configuration exploiting mixedanion strategy	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 042032(R)-(1-5)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/physrevresearch.2.042032	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 Ryota Mizuno, Masayuki Ochi, Kazuhiko Kuroki	4. 巻 104
2. 論文標題 Development of an efficient impurity solver in dynamical mean field theory for multiband systems: Iterative perturbation theory combined with parquet equations	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 035160-(1-15)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.104.035160	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 Ryota Mizuno, Masayuki Ochi, Kazuhiko Kuroki	4. 巻 91
2. 論文標題 Simplification of the local full vertex in the impurity Problem in DMFT and its applications for the nonlocal correlation	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 J. Phys. Soc. Jpn.	6. 最初と最後の頁 034002-(1-16)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.91.034002	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 Hiroki Ninomiya, Kenji Kawashima, Akira Iyo, Hiroshi Fujihisa, Shigeyuki Ishida, Hiraku Ogino, Yoshiyuki Yoshida, Yoshito Gotoh, and Hiroshi Eisaki	4. 巻 2
2. 論文標題 Calcium-free double-layered cuprate superconductors with critical temperature above 100K	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Commun. Mater.	6. 最初と最後の頁 13-1-13-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s43246-020-00116-9	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 Hiroki Ninomiya, Kenji Kawashima, Hiroshi Fujihisa, Shigeyuki Ishida, Hiraku Ogino, Yoshiyuki Yoshida, Hiroshi Eisaki, Yoshito Gotoh, and Akira Iyo	4. 巻 33
2. 論文標題 Posttreatment Effects on Crystal Structure and Superconductivity of Ca-free Double-Layered Cuprate $\text{Sr}_2\text{SrCu}_2\text{O}_{4+y}\text{F}_{2-y}$	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chem. Mater	6. 最初と最後の頁 9690-9697
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.chemmater.1c03343	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 山崎公裕, 越智正之, 小倉大典, 黒木和彦, 青木秀夫	4. 巻 6
2. 論文標題 新銅酸化物高温超伝導体 $\text{Ba}_2\text{CuO}_3+d$ の多軌道模型に基づく理論	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 固体物理	6. 最初と最後の頁 315-325
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 Masayuki Ochi and Kazuhiko Kuroki	4. 巻 99
2. 論文標題 Effective interaction for vanadium oxyhydrides $\text{Sr}_{n+1}\text{VnO}_{2n+1}\text{H}_n$ ($n = 1$ and $n \rightarrow \infty$)	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 155143 1-19
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.99.155143	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 Hidetomo Usui and Kazuhiko Kuroki	4. 巻 1
2. 論文標題 Hidden robust presence of a hole Fermi surface in a heavily electron doped iron based superconductor LaFe_2As_2	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 033025 1-7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.1.033025	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 Karin Matsumoto, Daisuke Ogura, and Kazuhiko Kuroki	4. 巻 89
2. 論文標題 Strongly enhanced superconductivity due to finite energy spin fluctuations induced by an incipient band : a FLEX study on the bilayer Hubbard model with vertical and diagonal interlayer hoppings	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 044709 1-10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.044709	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 Ochi Masayuki, Koshino Mikito, Kuroki Kazuhiko	4. 巻 98
2. 論文標題 Possible correlated insulating states in magic-angle twisted bilayer graphene under strongly competing interactions	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 081102(R) 1-6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.98.081102	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 小倉大典, 青木秀夫, 黒木和彦	4. 巻 159
2. 論文標題 Ruddlesden-Popper 化合物における高温超伝導の理論的提案	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 FSST NEWS	6. 最初と最後の頁 2-6
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 無
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27件 (うち招待講演 6件 / うち国際学会 15件)

1. 発表者名 Kazuhiko Kuroki
2. 発表標題 Possibility of unconventional high Tc superconductivity originating from coexisting wide and incipient narrow bands
3. 学会等名 Materials Research Meeting 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hikaru Sakamoto and Kazuhiko Kuroki
2. 発表標題 Theoretical study of the possible lattice deformation effect on the superconductivity in two-leg ladder-type cuprates
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 Daichi Kato and Kazuhiko Kuroki
2. 発表標題 Many-variable variational Monte-Carlo studies of superconductivity with incipient bands in two-band Hubbard models
3. 学会等名 The 32nd International Symposium on Superconductivity (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 K. Yamazaki, M. Ochi, K. Kuroki, H. Eisaki, S. Shinichi, and H. Aoki
2. 発表標題 Model Construction and Fluctuation Exchange Study of a New Cuprate Superconductor $Ba_2CuO_{3+\delta}$
3. 学会等名 The 32nd International Symposium on Superconductivity (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masayuki Ochi and Kazuhiko Kuroki
2. 発表標題 Effective interaction for vanadium oxyhydrides $Sr_{n+1}V_nO_{2n+1}H_n$
3. 学会等名 Materials Research Meeting 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hikaru Sakamoto and Kazuhiko Kuroki
2. 発表標題 Theoretical study of the uniaxial compression and tension effects on the superconductivity in two-leg ladder-type cuprates
3. 学会等名 Materials Research Meeting 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masayuki Ochi and Kazuhiko Kuroki
2. 発表標題 Effective Coulomb interaction in strontium vanadium oxyhydrides evaluated by the constrained random-phase approximation
3. 学会等名 1st International Symposium "Hydrogenomics" combined with 14th International Symposium Hydrogen & Energy (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 加藤大智、黒木和彦
2. 発表標題 多変数変分モンテカルロ法を用いた二層ハバード模型における超伝導の研究
3. 学会等名 京都大学基礎物理学研究所研究会 “電子相関が生み出す超伝導現象の未解決問題と新しい潮流”
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 坂本ひかる、黒木和彦
2. 発表標題 一軸性格子変形下における二本鎖梯子型銅酸化物の超伝導に関する理論研究
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 加藤大智、黒木和彦
2. 発表標題 多変数変分モンテカルロ法を用いた二バンド・ハバード模型における超伝導機構の研究
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 山崎公裕, 越智正之, 小倉大典, 黒木和彦, 永崎洋, 内田慎一, 青木秀夫
2. 発表標題 新型銅酸化物Ba ₂ CuO ₃₊ の多軌道Lieb 格子模型に基づく超伝導機構の解析
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 北峯尚也, 越智正之, 黒木和彦
2. 発表標題 2 層Ruddlesden-Popper 型酸水素化物における非従来型超伝導の発現可能性に関する 理論的探究
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 Kazuhiko Kuroki
2. 発表標題 Possible high-T _c superconductivity in Ruddlesden-Popper compounds due to coexisting wide and incipient-narrow bands originating from “hidden ladders”
3. 学会等名 12th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity and High Temperature Superconductors (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Kazuhiko Kuroki
2. 発表標題 Possible high Tc superconductivity in Ruddlesden-Popper compounds : incipient narrow-bands originating from “hidden-ladders”
3. 学会等名 Korea Physical Society meeting (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Kazuhiko Kuroki
2. 発表標題 Possible high-Tc superconductivity in Ruddlesden-Popper compounds due to coexisting wide and incipient-narrow bands originating from “hidden ladders”
3. 学会等名 International Workshop on Recent Progress in Superconductivity (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Daisuke Ogura, Hideo Aoki, and Kazuhiko Kuroki
2. 発表標題 Possibility of High-Tc Superconductivity in Ruddlesden-Popper Type Materials: Incipient Narrow Bands Originating from “Hidden Ladder” Electronic Structure
3. 学会等名 12th International Conference Materials and Mechanisms of Superconductivity (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Kazun Matsumoto, Daisuke Ogura, and Kazuhiko Kuroki
2. 発表標題 Possible High-Tc Superconductivity Originating from Wide- and Narrow bands; Study on 1D and 2D lattices
3. 学会等名 12th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity and High Temperature Superconductors (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Daichi Kato and Kazuhiko Kuroki
2. 発表標題 Variational Monte-Carlo Study of the Bilayer Hubbard Model
3. 学会等名 12th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity and High Temperature Superconductors (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Daisuke Ogura and Kazuhiko Kuroki
2. 発表標題 FLEX+DMFT method for multi-band systems: A study on superconductivity in bilayer Hubbard model
3. 学会等名 The International Symposium for Materials Scientists "Inspiration for Innovation by Interaction" (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Daichi Kato and Kazuhiko Kuroki
2. 発表標題 Variational Monte-Carlo study of the superconductivity in the bilayer Hubbard model
3. 学会等名 The International Symposium for Materials Scientists "Inspiration for Innovation by Interaction" (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 黒木和彦
2. 発表標題 物質に即した有効モデルに基づく非従来型超伝導に関する研究～多バンド効果に焦点をあてて～
3. 学会等名 「スパコンプロフェッショナル」(招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 越智正之, 越野幹人, 黒木和彦
2. 発表標題 モアレ2層グラフェンにおける拡張ハバードモデルの厳密対角化による解析
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 黒木和彦
2. 発表標題 Incipient band が誘起する非従来型超伝導:一般性と応用可能性(領域8シンポジウム: 非従来型超伝導の未解決問題と将来展望)
3. 学会等名 日本物理学会2018 年秋季大会(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 越智正之, 黒木和彦
2. 発表標題 $\text{Sr}_{n+1}\text{VnO}_{3n+1}$ および $\text{Sr}_{n+1}\text{VnO}_{2n+1}\text{Hn}$ ($n = 1, \dots$) における有効電子間相互作用のcRPAによる第一原理的評価
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 加藤大智, 黒木和彦
2. 発表標題 多変数変分モンテカルロ法を用いた二層型ハバードモデルの解析
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 小倉大典, 青木秀夫, 黒木和彦
2. 発表標題 Ruddlesden-Popper 型化合物における高温超伝導の可能性: 隠れた梯子状電子状態に起因する incipient narrow band
3. 学会等名 鉄系高温超伝導体発見10周年記念合同シンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 松本花梨, 小倉大典, 黒木和彦
2. 発表標題 Wide & incipient narrow band 共存系による超伝導増強: 一次元格子と二次元格子の比較
3. 学会等名 鉄系高温超伝導体発見10周年記念合同シンポジウム
4. 発表年 2018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	永崎 洋 (Eisaki Hiroshi) (20242018)	国立研究開発法人産業技術総合研究所・エレクトロニクス・製造領域・首席研究員 (82626)	

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
---------	---------