

令和 6 年 6 月 21 日現在

機関番号：13101

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2021～2023

課題番号：21K03399

研究課題名（和文）第一原理計算と量子多体計算による励起子相およびその近傍における強相関・強結合効果

研究課題名（英文）Strong correlation and strong coupling effects in the excitonic phase and its vicinity region based on the first-principles calculations and the quantum many-body calculations

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） 3,200,000円

研究成果の概要（和文）：銅酸化物高温超伝導体の基本模型である2バンド・ハバード模型を、電子相関効果を非摂動的に考慮できる動的平均場理論を用いて調べた。ベーテ・サルピータ方程式から導出した超伝導感受率の解析表式に基づいて、厳密対角化法を用いて数値的に精度良く計算し、その発散により超伝導転移温度 T_c を決定した。その結果、この模型の詳細な超伝導相図を初めて得た。また、励起子相の基本模型である電子-正孔2バンド・ハバード模型に対して、同様の計算手法を用いて励起子感受率を精度良く計算し、その発散により励起子転移温度 T_c を決定した。その結果、クーロン相互作用とバンドの分裂の関数として、この模型の詳細な励起子相図を初めて得た。

研究成果の学術的意義や社会的意義

オンサイトの斥力相互作用のみを含む2バンド・ハバード模型や電子-正孔2バンド・ハバード模型で、詳細な超伝導相図や励起子相図を得た初めての研究であり、強相関効果による超伝導や励起子相の発現機構解明という観点で意義がある。また、計算手法として、vertex関数の3振動数依存性により従来は計算が困難であった超伝導感受率を、高振動数領域におけるvertex関数の解析表式を併用することにより克服した点でも意義がある。さらに、得られた結果は Ta_2NiSe_5 の実験をよく説明している。このような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）：The two-band Hubbard model, which is the basic model for high- T_c cuprate superconductors, is investigated using dynamical mean-field theory, which allows non-perturbative consideration of electron correlation effects. Based on the analytical expression of the superconductivity susceptibility derived from the Bethe-Salpeter equation, the superconducting transition temperature T_c is numerically calculated with high accuracy using the exact diagonalization method. As a result, a detailed superconducting phase diagram of this model is obtained for the first time. For the electron-hole two-band Hubbard model, which is the basic model of the excitonic phase, the excitonic susceptibility is calculated with good accuracy using the same calculation method, and the exciton transition temperature T_c is determined by its divergence. As a result, a detailed exciton phase diagram for this model as functions of Coulomb interaction and band splitting is obtained for the first time.

研究分野：数物系科学

キーワード：励起子相 超伝導 2バンド・ハバード模型 動的平均場理論 励起子感受率 超伝導感受率

1. 研究開始当初の背景

最近、励起子絶縁体 (Excitonic Insulator (EI)) が相次いで発見され、注目を集めている。EI とは、ギャップの小さな半導体やバンドの重なりが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、クーパー対が量子凝縮した超伝導状態と相似の状態である。以下に示すように、金属の励起子凝縮相も実現し得るため、それらを総称して励起子相と呼ばれる。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 (半導体) から単斜晶 (絶縁体) への構造相転移を示す。角度分解光電子分光 (ARPES) により価電子バンド上端の平坦化が観測され、EI の証拠とされた。理論的には、 Ta_2Ni 鎖を記述する 3 鎖ハバード模型に基づいて、BCS 型平均場近似により、半導体から EI への 2 次相転移として実験結果が良く説明された。圧力を印加すると Ta_2NiSe_5 は金属化し、半金属から金属励起子相への 2 次相転移が観測された。さらに、励起子相が消失する 8GPa 付近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。そこで研究代表者らは、3 鎖ハバード模型に基づく BCS 型平均場近似により、励起子相の温度-圧力相図を求めた。 Ta_2Ni 鎖は、Ta 由来の伝導バンド (2 本) と Ni 由来の価電子バンド (1 本) の本数が異なる特徴を持つ。半導体と同様に、伝導バンドと価電子バンドが 1 本ずつフェルミレベルを切る低圧の半金属でも従来型の Uniform 励起子相 (EI) が実現するが、伝導バンド 2 本がフェルミレベルを切る高圧の半金属の場合は、有限の重心運動量を持つ励起子が凝縮した Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov (FFLO) 型の金属励起子相が実現することが分かった。さらに、この FFLO 励起子相の近傍で、励起子揺らぎを乱雑位相近似 (RPA) により考慮した結果、励起子揺らぎを媒介として有限の重心運動量を持つクーパー対が凝縮した FFLO 超伝導が実現することを示した。ごく最近、置換効果によりキャリアがドーピングされた Ta_2NiSe_5 で FFLO 励起子相を示唆する実験も得られており、超伝導も含めた新奇な FFLO 状態の観測への期待が高まっている。

EI が実現する T_s より高温の正常相では、電気抵抗は半導体的で、ARPES ではエネルギーギャップをもつバンド分散が観測されていたため、これまで高温正常相は通常の半導体と考えられてきた。ところが、最近の時間分解 ARPES 実験により、常圧・低温の EI の状態にポンプ光を照射すると半金属になることが観測された。これは、光励起された電子によって電子-正孔間引力相互作用が遮蔽され励起子対が壊された状態は、エネルギーギャップのある半導体ではなく、伝導バンドと価電子バンドが 1 本ずつフェルミレベルを切る半金属であることを示している。そこで、高温正常相は単純な半導体ではなく、電子-正孔対の強結合効果により転移温度以上で preformed 励起子対が形成された擬ギャップ状態である可能性が議論されつつある。この強結合領域では、励起子ギャップの大きさがバンドの重なり (即ちフェルミエネルギー) に近い値をもち、超伝導との対応関係では BCS から BEC (ボース・アインシュタイン凝縮) へのクロスオーバー領域にあたるため、従来の平均場近似や RPA を超えて強結合効果を考慮する必要がある。このように、励起子相やその近傍の電子状態における強結合効果を明らかにすることは、 Ta_2NiSe_5 を理解する上でも必須であることが明らかとなっている。

2. 研究の目的

本研究の目的は、励起子相やその近傍の電子状態において、従来の平均場近似や RPA では説明できない強結合効果を調べ、 Ta_2NiSe_5 における EI 転移温度より高温の擬ギャップ状態と、低温の時間分解 ARPES 実験で観測された半金属状態を矛盾なく説明することである。そこで本研究では、強結合効果を十分に考慮できる動的平均場理論を用いて、励起子相を記述する基本模型である電子-正孔 2 バンド・ハバード模型を詳細に調べた。その際、従来は計算が困難であった低温における励起子感受率を精度良く計算する手法の開発を行う。

また、斥力相互作用をもつ電子-正孔 2 バンド・ハバード模型における励起子秩序は、荷電子バンドを particle-hole 変換して得られる、引力相互作用をもつ通常の 2 バンド・ハバード模型における超伝導と数学的に等価であることが知られている。2 バンド・ハバード模型における超伝導は、銅酸化物高温超伝導体の基本模型として活発に研究されてきており、斥力相互作用が強い場合に、動的平均場理論に基づいてスピナー重項と三重項の超伝導が実現することは示されていたが、低温における超伝導感受率の計算の困難さから、正確な超伝導転移温度 T_c や超伝導相図は得られていなかった。そこで、電子-正孔 2 バンド・ハバード模型における励起子感受率と数学的に等価な、通常の 2 バンド・ハバード模型における超伝導感受率を精度良く計算する手法の開発を行い、この模型の超伝導転移温度 T_c や超伝導相図を求める。

3. 研究の方法

局所的な電子相関効果を正確に考慮できる動的平均場理論は、空間次元無限大では厳密となり、3 次元系に対しても良い近似になることが知られており、ハバード模型の磁性やモット転移、超伝導に関して、数多くの研究で用いられてきた。単一バンドのハバード模型では超伝導感受率が抑制され、超伝導は実現しないことや、2 バンド・ハバード模型では、スピナー重項の even-frequency pairing に加えて、スピン三重項の odd-frequency pairing の可能性も議論されてきたが、数値計算の困難さから超伝導転移温度 T_c の計算や、クーロン相互作用やドーピング依存性を含む超伝導相図は得られていなかった。

そこで本論文では、ペーテ・サルピータ方程式に基づいて超伝導感受率の解析的表式を導出し、

厳密対角化法を用いて超伝導感受率を数値的に精度良く計算し、その発散により超伝導転移温度 T_c を、オンサイトクーロン相互作用 U 、2 軌道間の電荷移動エネルギー、および、ドーピングの関数として求めた。その際、3 つの振動数依存性をもつ既約 vertex 関数の計算が必要となり、その計算の困難さが従来の理論研究においてネックとなっていた。本研究では、最近発見された高振動数領域における近似的な解析表式を、低振動数における数値的に正確な計算と相補的に用いることにより、その問題を克服した。

斥力相互作用を持つ電子 - 正孔 2 バンド・ハバード模型において、ギャップの小さな半導体やバンドの重なりが小さな半金属状態は、上述した荷電しバンドの particle-hole 変換により、引力相互作用を持つ通常の 2 バンド・ハバード模型において、化学ポテンシャルがバンドの底にギリギリかかった、あるいは、バンドの底の少し下にある状態と等価である。そこで、上記の超伝導感受率の計算方法を利用して、電子 - 正孔 2 バンド・ハバード模型の低温における励起子感受率を精度良く求め、この模型の強結合領域を含む励起子相図を決定した。

4. 研究成果

通常の 2 バンド・ハバード模型において、ノンドープのハーフフィリングでは準粒子繰り込み因子 Z がゼロ ($Z=0$) のモット絶縁体となる強相関領域では、アンダードープ領域でスピン三重項超伝導が実現し、オーバードープ領域ではスピン一重項超伝導が実現することが分かった。また、どちらの場合も、モット・ハバード型領域 ($U < \Delta$) と電荷移動型領域 ($U > \Delta$) の間のクロスオーバー領域で T_c が極大となることが示された。さらに、三重項超伝導において、ドーピングが比較的に大きな領域では通常の BCS 理論に基づいて超伝導に転移する BCS 型の超伝導となる一方、ドーピングが非常に小さい領域では T_c より高温で前駆的に形成されたクーパー対がボース・アインシュタイン凝縮する BEC 型の超伝導となり、両者間で顕著なクロスオーバーを示すことが見いだされた。

また、励起子相の基本模型である電子-正孔 2 バンド・ハバード模型に対して、同様の計算手法を用いて励起子感受率を精度良く計算し、その発散により励起子転移温度 T_c を決定した。その結果、伝導電子-荷電子間クーロン相互作用 V 、伝導バンド-荷電子バンド間のバンドの分裂 Δ の関数として、この模型における詳細な励起子相図 (図 1) を初めて得た。特に、 $V = \Delta$ のとき、励起子転移温度 T_c より高温では繰り込み因子が $Z \sim 0$ となり、強結合効果によって化学ポテンシャルにおける状態密度がほぼゼロとなる擬ギャップをもつ状態が実現する。この際、 T_c より低温において、 T_c を固定して V を小さくすると、通常の半金属状態となる。これにより、1. 研究開始当初の背景で述べた Ta_2NiSe_5 の常圧における実験結果、すなわち、 $T > T_c$ において電気抵抗や ARPES 実験で観測された半導体 (擬ギャップ) 状態と、 $T < T_c$ において時間分解 ARPES 実験で観測された半金属状態を、矛盾なく説明することができた。

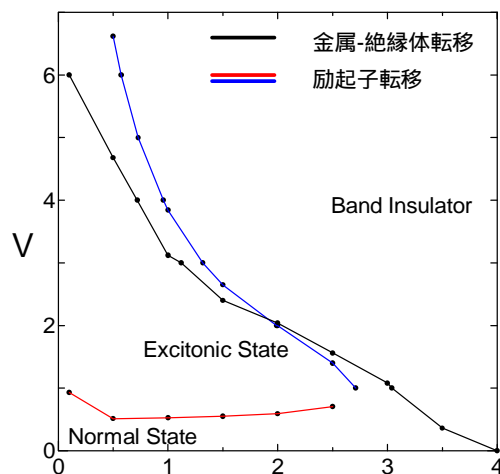


図 1 電子 - 正孔 2 バンドハバード模型の有限温度における励起子相図

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計11件（うち査読付論文 11件 / うち国際共著 2件 / うちオープンアクセス 8件）

1. 著者名 Inokuma Yusuke, Ono Yoshiaki	4. 巻 93
2. 論文標題 Singlet Even-Frequency and Triplet Odd-Frequency Superconductivity in the Two-Band Hubbard Model Based on the Dynamical Mean-Field Theory	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 043701-1 ~ 4
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.93.043701	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 Hagawa Masahide, Matsukawa Michiaki, Niinuma Kota, Kudo Reiya, Mizushima Yuto, Kwarada Naohisa, Yamamoto Hajime, Sano Kazuhiro, Ono Yoshiaki, Sasaki Takahiko	4. 巻 93
2. 論文標題 Crystal Structures and Superconducting Properties of Metallic Double-Chain Based Cuprate Pr ₂ Ba ₄ Cu ₇ O ₁₅ -	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 044705-1 ~ 7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.93.044705	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 Sekikawa Takuya, Matsuya Yusuke, Hwang Beomju, Ishizaka Masato, Kawai Hiroyuki, Ono Yoshiaki, Sato Tatsuhiko, Kai Takeshi	4. 巻 548
2. 論文標題 Changes in molecular conformation and electronic structure of DNA under 12C ions based on first-principles calculations	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms	6. 最初と最後の頁 165231 ~ 165231
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.nimb.2023.165231	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 Inokuma Yusuke, Ono Yoshiaki	4. 巻 73
2. 論文標題 Temperature and Doping Dependence of the Singlet and Triplet Pair Susceptibilities in the Two-Band Hubbard Model Based on the Dynamical Mean-Field Theory	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 New Physics: Sae Mulli	6. 最初と最後の頁 1119 ~ 1122
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3938/NPSM.73.1119	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 Sekikawa Takuya, Tallon Jeffery L., Chong Shen V., Ono Yoshiaki	4. 巻 92
2. 論文標題 Electronic Structure of a Layered Organic-Inorganic Hybrid Material (WO ₃) ₂ (4,4'-bipyridyl) Based on the First-principles Calculation	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 023702-1~4
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.92.023702	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 Sekikawa Takuya, Kawai Hiroyuki, Ono Yoshiaki	4. 巻 2323
2. 論文標題 Surface electronic structure of possible high-T _c surface superconductor WO ₃ based on the first-principles calculation	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Conference Series	6. 最初と最後の頁 012006 ~ 012006
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1742-6596/2323/1/012006	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 Iizuka Yuto, Yamada Takemi, Hanzawa Katsuro, Ono Yoshiaki	4. 巻 91
2. 論文標題 First-Principles Study of the RKKY Interaction and the Quadrupole Order in the Pr 1-2-20 Systems PrT ₂ Al ₂₀ (T=Ti, V)	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 074708-1~6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.91.074708	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 Sekikawa Takuya, Kawai Hiroyuki, Ono Yoshiaki	4. 巻 2323
2. 論文標題 Surface electronic structure of possible high-T _c surface superconductor WO ₃ based on the first- principles calculation	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Conference Series	6. 最初と最後の頁 012006 ~ 012006
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1742-6596/2323/1/012006	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 Teramura Takehiro, Matsukawa Michiaki, Senzaki Tatsuya, Taniguchi Haruka, Sano Kazuhiro, Ono Yoshiaki, Hagiwara Makoto	4. 巻 646
2. 論文標題 Structure, electric transport, and magneto-transport properties of metallic double-chain based Pr _{1-x} Ca _x Ba ₂ Cu ₄ O ₈ with low Ca substitution	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physica B: Condensed Matter	6. 最初と最後の頁 414226 ~ 414226
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.physb.2022.414226	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 Sekikawa Takuya, Ono Yoshiaki	4. 巻 2164
2. 論文標題 Phase diagram of the three-orbital Hubbard-Holstein model simulating Superconducting Tungsten Bronze A _x W ₃	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Conference Series	6. 最初と最後の頁 012012 ~ 012012
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1742-6596/2164/1/012012	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 Inokuma Yusuke, Ono Yoshiaki	4. 巻 2164
2. 論文標題 Temperature and doping dependence of the singlet and triplet pair susceptibilities in the one-band Hubbard model based on the dynamical mean-field theory	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Conference Series	6. 最初と最後の頁 012017 ~ 012017
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1742-6596/2164/1/012017	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 -

〔学会発表〕 計55件 (うち招待講演 2件 / うち国際学会 15件)

1. 発表者名 Riku Ikaida, Kazuhiro Sano, Yoshimi Masuda, Takuya Sekikawa and Yoshiaki Ono
2. 発表標題 Doping dependence of superconducting transition temperature T _c of SrTiO ₃ in the over-doped regime based on the first principles calculations
3. 学会等名 34th IUPAP Conference on Computational Physics (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Wang Yu, Takuya Sekikawa, Kazuhiro Sano and Yoshiaki Ono
2. 発表標題 First-principles study of superconducting 2M and 3R-WS2 under pressure
3. 学会等名 34th IUPAP Conference on Computational Physics (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Hiroyuki Kawai, Kazuhiro Sano and Yoshiaki Ono
2. 発表標題 First-principles study of a new superconductor LaCoSi with the same structure as 111 family of iron-based superconductors
3. 学会等名 34th IUPAP Conference on Computational Physics (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Takuya Sekikawa, Yusuke Matsuya, Takeshi Kai, Hiroyuki Kawai, Beomju Hwang, Masato Ishizaka, Yoshiaki Ono and Tatsuhiko Sato
2. 発表標題 Detailed molecular conformational changes and electronic structure of DNA irradiated with low-energy radiation based on first-principles calculations
3. 学会等名 21st International Conference on Radiation Effects in Insulators (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Takuya Sekikawa, Yusuke Matsuya, Beomju Hwang, Masato Ishizaka, Hiroyuki Kawai, Yoshiaki Ono, Tatsuhiko Sato and Takeshi Kai
2. 発表標題 First-principles calculations of DNA irradiated with a proton and a carbon ion beam
3. 学会等名 The International Symposium on Quantum Science, Technology and Innovation (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 関川卓也, ファン・ボンジュ, 石坂優人, 松谷悠佑, 川井弘之, 大野義章, 佐藤達彦, 甲斐健師
2. 発表標題 放射線誘起正孔がもたらすDNAの分子構造と電子状態変化の第一原理計算
3. 学会等名 日本物理学会第78回年次大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 伊海田陸, 関川卓也, 大野義章, 佐野和博, 栢田佳美
2. 発表標題 第一原理計算による電子ドーパされたSrTiO ₃ の強誘電量子臨界点近傍におけるフォノンのソフト化と超伝導転移温度
3. 学会等名 日本物理学会第78回年次大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 森田経介, 川井弘之, 伊海田陸, 大野義章, 佐野和博
2. 発表標題 第一原理計算に基づくHgTeの圧力下における電子・フォノン状態と超伝導
3. 学会等名 日本物理学会第78回年次大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 王宇, 米山拓希, 川井弘之, 石塚淳, 大野義章
2. 発表標題 第一原理ハイブリッド汎関数法および動的平均場理論に基づくFeSeの電子状態
3. 学会等名 日本物理学会第78回年次大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 米山拓希, 川井弘之, 大野義章
2. 発表標題 第一原理計算によるV3Siの電子・フォノン状態と超伝導転移温度の圧力依存性
3. 学会等名 日本物理学会第78回年次大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 増澤翔大, 佐々木健人, 猪熊祐輔, 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感受率と励起子相関
3. 学会等名 日本物理学会第78回年次大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 土田駿, 広瀬雄介, 関川卓也, 大野義章, 摂待力生
2. 発表標題 励起子絶縁体候補物質Ta ₂ NiSe ₅ のキャリアドープ効果の研究 IV
3. 学会等名 日本物理学会第78回年次大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 猪熊祐輔, 大野義章
2. 発表標題 動的平均場理論による2バンド・ハバード模型のスピン一重項と三重項の超伝導感受率II
3. 学会等名 日本物理学会第78回年次大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 川井弘之, 関川卓也, 尾崎泰助, 古家真之介, 大野義章
2. 発表標題 第一原理電子状態計算ソフトOpenMXのGPUによる高速化とmodified-DNAへの応用
3. 学会等名 日本物理学会第78回年次大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 関川卓也, Hwang Beomju, 石坂優人, 松谷悠佑, 川井弘之, 大野義章, 佐藤達彦, 甲斐健師
2. 発表標題 放射線誘起正孔がもたらすDNAの分子構造と電子状態変化の第一原理計算II
3. 学会等名 日本物理学会2024年春季大会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 土田駿, 広瀬雄介, 関川卓也, 大野義章, 摂待力生
2. 発表標題 励起子絶縁体候補物質Ta ₂ NiSe ₅ のキャリアドープ効果の研究 V
3. 学会等名 日本物理学会2024年春季大会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 猪熊祐輔, 大野義章
2. 発表標題 動的平均場理論による2バンド・ハバード模型のスピン一重項と三重項の超伝導感受率III
3. 学会等名 日本物理学会2024年春季大会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 Takuya Sekikawa, Hiroyuki Kawai, Beomju Hwang, Masato Ishizaka, Yoshiaki Ono
2. 発表標題 Possible metallization of Mn-DNA based on the first-principles calculation
3. 学会等名 International Conference on Carbon Chemistry and Materials (CCM-2022) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Takuya Sekikawa, Jeffery L. Tallon, Shen V. Chong, Yoshiaki Ono
2. 発表標題 Electronic structure of layered organic-inorganic hybrid material $W_3(4,4'$ -bipyridyl) $_0.5$ based on the first-principles calculation
3. 学会等名 29th International Conference on Low Temperature Physics (LT29) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Takuya Sekikawa, Hiroyuki Kawai, Beomju Hwang, Yoshiaki Ono
2. 発表標題 Narrow Band across the Fermi level in modified-DNA based on the first-principles calculation
3. 学会等名 The 15th Asia Pacific Physics Conference (APPC15) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Riku Ikaida, Kazuhiro Sano, Yoshimi Masuda, Takuya Sekikawa, Yoshiaki Ono
2. 発表標題 Doping dependence of the superconducting transition temperature in electron-doped $SrTi_3O_7$ based on the first-principles calculations
3. 学会等名 The 15th Asia Pacific Physics Conference (APPC15) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Wang Yu, Takuya Sekikawa, Yoshiaki Ono, Kazuhiro Sano
2. 発表標題 Pressure dependence of the superconducting transition temperature in 2M-WS ₂ and 3R-WS ₂ based on the first-principles calculations
3. 学会等名 The 15th Asia Pacific Physics Conference (APPC15) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Takuya Sekikawa, Kazuki Takada, Yoshiaki Ono
2. 発表標題 Electronic structure analysis of a novel magnetic tunnel junction device Fe/LiF/MgO interface based on the first-principles calculations
3. 学会等名 7th edition of Global Energy Meet (GEM-2023) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 猪熊祐輔, 大野義章
2. 発表標題 動的平均場理論によるドーブされたハバード模型のスピン-重項と三重項の超伝導感受率
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 関川卓也, Jeffery L. Tallon, Shen V. Chong, 大野義章
2. 発表標題 第一原理計算による有機分子-金属ハイブリッド系W03-bipyridylの電子状態
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 森田経介, 川井弘之, 大野義章
2. 発表標題 第一原理計算による超伝導体La ₃ T ₄ Sn ₁₃ (T=Co, Rh, Ir, Ru)の電子状態
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 伊海田陸, 関川卓也, 大野義章, 佐野和博, 栢田佳美
2. 発表標題 第一原理計算を用いたSrTiO ₃ の電子状態と超伝導II
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 川井弘之, 大野義章, 佐野和博
2. 発表標題 第一原理計算による鉄系超伝導体111系と同じ構造をもつLaCoX (X=Si, Ge)の電子状態と超伝導
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 王宇, 関川卓也, 大野義章, 佐野和博
2. 発表標題 第一原理計算による遷移金属硫化物WS ₂ の超伝導転移温度の圧力依存性
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 関川卓也, 川井弘之, Beomju Hwang, 大野義章
2. 発表標題 第一原理計算によるModified-DNAの電子状態と金属化の可能性
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 関川卓也, 高田和樹, 大野義章
2. 発表標題 第一原理計算に基づく磁気トンネル接合素子Fe-LiF-MgOの電子状態
3. 学会等名 第70回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 川井弘之, 大野義章
2. 発表標題 Heyd-Scuseria-Ernzerhof交換相関汎関数を用いたFeSeの第一原理バンド計算
3. 学会等名 第70回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 関川卓也, 松谷悠佑, 甲斐健師, 川井弘之, 佐藤達彦, 大野義章
2. 発表標題 第一原理計算に基づく低エネルギー放射線を照射されたDNAの分子構造と電子状態
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 猪熊祐輔, 大野義章
2. 発表標題 動的平均場理論による2バンド・ハバード模型のスピン-重項と三重項の超伝導感受率
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 土田駿, 広瀬雄介, 関川卓也, 大野義章, 摂待力生
2. 発表標題 励起子絶縁体候補物質Ta ₂ NiSe ₅ のキャリアドーピング効果の研究
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 伊海田陸, 関川卓也, 大野義章, 佐野和博, 榎田佳美
2. 発表標題 第一原理計算を用いたSrTiO ₃ の電子状態と超伝導
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 川井弘之, 佐野和博, 尾崎泰助, 大野義章
2. 発表標題 第一原理計算による鉄系超伝導体111系と同じ構造のLaCoX (X=C, Si, Ge, Sn, Pb)の電子・フォノン状態と超伝導
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 森田経介, 川井弘之, 大野義章
2. 発表標題 第一原理計算に基づくHgTeの圧力下における電子・フォノン状態と超伝導
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 Gen Imano, Yoshiaki Ono
2. 発表標題 Effect of carrier doping on the uniform and FFLO excitonic phases in the three-chain Hubbard model for Ta ₂ NiSe ₅
3. 学会等名 The International Conference in Strongly Correlated Electrons systems (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Takuya Sekikawa, Yoshiaki Ono
2. 発表標題 Phase diagram of the three-orbital Hubbard-Holstein model simulating Superconducting Tungsten Bronze AxWO ₃
3. 学会等名 The International Conference in Strongly Correlated Electrons systems (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yusuke Inokuma, Yoshiaki Ono
2. 発表標題 Temperature and doping dependence of the singlet and triplet pair susceptibilities in the one band Hubbard model based on the dynamical mean-field theory
3. 学会等名 The International Conference in Strongly Correlated Electrons systems (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Takuya Sekikawa, Hiroyuki Kawai, Yoshiaki Ono
2. 発表標題 Surface electronic structure of possible high-Tc surface superconductor W03 based on the first-principles calculation
3. 学会等名 The 34th International Symposium on Superconductivity (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 王宇, 関川卓也, 大野義章, 佐野和博
2. 発表標題 第一原理計算に基づく遷移金属硫化物WS2の電子状態と超伝導性研究
3. 学会等名 日本物理学会2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 伊海田陸, 関川卓也, 大野義章, 佐野和博, 栢田佳美
2. 発表標題 第一原理計算を用いたSrTiO3の電子状態と超伝導
3. 学会等名 日本物理学会2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 長谷川巧, 関川卓也, 中村康晴, 大野義章
2. 発表標題 第一原理計算に基づく単層1T'-WTe2の電子状態
3. 学会等名 日本物理学会2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 高野真一, 飯塚優人, 関川卓也, 大野義章
2. 発表標題 SmSにおける励起子秩序と強誘電転移の理論模型
3. 学会等名 日本物理学会2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 猪熊祐輔, 大野義章
2. 発表標題 動的平均場理論によるドーブされたハバード模型のスピン-重項と三重項の超伝導感受率
3. 学会等名 日本物理学会2021年秋季大会
4. 発表年 2021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近似結晶の電子状態と輸送係数II
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 飯塚優人, 山田武見A, 半澤克郎, 大野義章
2. 発表標題 有効196軌道模型に基づくPrT ₂ Al ₂₀ (T=Ti, V)の多極子揺らぎと超伝導II
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 川井弘之, 飯塚優人, 大野義章, 佐野和博
2. 発表標題 鉄系超伝導体111系と同じ構造をもつ新規超伝導体LaCoSiの第一原理計算
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 長谷川巧, 関川卓也, 飯塚優人, 中村康晴, 大野義章
2. 発表標題 22バンドd-p模型に基づく単層1T'-WTe ₂ の電子状態と励起子秩序
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 関川卓也, 大野義章
2. 発表標題 タングステンブロンズAxW03に対する3軌道ハバード・ホルスタイン模型の超伝導相図
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 王宇, 関川卓也, 大野義章, 佐野和博
2. 発表標題 22バンドd-p模型に基づく遷移金属硫化物WS ₂ の電子状態と超伝導
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 高野真一, 関川卓也, 飯塚優人, 大野義章
2. 発表標題 13バンドf-d-s模型に基づくSmSの励起子秩序と強誘電転移
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 関川卓也, 川井弘之, 大野義章
2. 発表標題 第一原理計算に基づく表面高温超伝導の候補物質AxWO3表面の電子状態
3. 学会等名 第69回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2022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

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		
ニュージーランド	Victoria University of Wellington		