

# コバルト酸化物における多元要素の量子多体効果が 導く異常物性と新奇超伝導機構の理論

(課題番号 17540317)

平成 17 年度～平成 19 年度科学研究費補助金(基盤研究(C))

研究成果報告書

平成 20 年 3 月

新潟大学附属図書館



1080033823

研究代表者 大野 義章

(新潟大学自然科学系教授)

## はしがき

この報告書は、平成17年度から平成19年度に至る3年間にわたり、科学研究費補助金(基盤研究(C))の交付を受けて行われた「コバルト酸化物における多元要素の量子多体効果が導く異常物性と新奇超伝導機構の理論」の研究成果を収録したものである。

コバルト酸化物では、コバルトのd軌道と酸素のp軌道間の電荷移動エネルギー( $\Delta$ )とコバルトd電子間のクーロン相互作用( $U$ )が拮抗するため、銅酸化物などの電荷移動型( $\Delta < U$ )とバナジウム酸化物などのモットーハバード型( $\Delta > U$ )の中間に位置する物質として注目されてきた。さらに最近、コバルト酸化物において以下に示す新奇超伝導や異常物性が発見され、この系に対する研究の重要性はさらに一層増しつつある。

層状コバルト酸化物 $\text{Na}_x\text{CoO}_2$ は巨大な熱起電力を示すことから熱電材料として注目されてきたが、最近、水をインターカレートした $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$ で超伝導が発見され、さらに注目を浴びている。この物質は $\text{CoO}_2$ 面が2次元三角格子を形成して幾何学的にフラストレートしており、またフェルミ面を切る複数のバンドが複数のd軌道から構成され、多軌道、多バンドの特徴を持つ。

3次元ペロブスカイト型コバルト酸化物 $\text{LaCoO}_3$ は、フント則結合と結晶場分裂が拮抗するため、低スピン状態( $S=0$ )、中間スピン状態( $S=1$ )、高スピン状態( $S=2$ )の異なるスピン状態間の転移を示す特異な物質であるが、さらに最近、ドーピングされた $\text{R}_{1-x}\text{A}_x\text{CoO}_3$ ( $\text{R}=\text{La}, \text{Pr}, \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Eu}, \text{Gd}$ ;  $\text{A}=\text{Sr}, \text{Ca}, \text{Ba}$ など)で様々な磁気、輸送特性の異常が観測され、注目を集めている。

本研究では、このようなコバルト酸化物の特徴である2次元性、フラストレーション、多軌道、多バンド、フント則結合と結晶場分裂の拮抗、電荷移動エネルギーとクーロン相互作用の拮抗などの多元要素を含む複雑な量子多体効果が、どのような異常物性や新奇超伝導機構を導くかを、物質の構造を出来るだけ正確に記述する現実的なモデルに基づき、様々な理論的アプローチを相補的に用いて調べた。本研究により明らかにされたことを以下に示す。

1. 層状コバルト酸化物 $\text{Na}_x\text{CoO}_2$ における $\text{CO}_2$ 面の電子状態を、Coのd軌道5個とCo面の上下の酸素面にあるp軌道それぞれ3個の合計11個の軌道を含む2次元三角格子11バンドd-pモデルに基づいて調べた。d電子間のクーロン相互作用として、軌道内、軌道間の直接項 $U$ 、 $U'$ 、交換項(フント則結合) $J$ を考え、フント則結合 $J$ の効果を検討できるように改良された $U$ 有限スレーブボソン法を用いて電子相関効果を調べた。LDAのバンド計算によるフェルミ面は、 $\Gamma$ 点を中心とする大きなフェルミ面

( $a_{1g}$ ) と 6 個の小さなホールポケット ( $e'_g$ ) からなるが、ARPES の実験で観測されたバンドは、LDA のバンドに比べてかなり狭くなると同時に、 $e'_g$  バンドがフェルミレベルよりも下にありホールポケットは現れない。本研究では、d 電子の強相関効果により準粒子バンドが狭くなると同時に、 $e'_g$  バンドがフェルミレベルよりも下に押し下げられホールポケットが消失する事がわかった。さらに、 $a_{1g}$  バンドがバンド端近傍でフラットになるために、 $x$  の増大とともに強磁性相関が増大し、 $0.75 < x < 0.95$  では  $\text{CO}_2$  面内の金属強磁性が実現するという実験とコンシステントな結果を得た。

2. 水をインターカレートした層状コバルト酸化物  $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$  における超伝導の発見以来、その対称性については様々な可能性が特に理論的に議論されてきたが、ナイトシフトや不純物効果の実験によれば一重項 s 波の可能性が高いと考えられる。この系の超伝導を、2次元三角格子 11 バンド d-p 模型に基づいて  $U$  有限スレーブボソン法を用いて調べた。電子相関効果によって押し下げられていた  $e'_g$  バンドは、水が挿入されると Co 面と酸素面の間隔が縮まり trigonal 歪みが増大することにより押し上げられ、6 個のホールポケットが出現することを示した。さらに、クーロン相互作用の軌道間ペアトランスファー項  $J'$  を考慮に入れ、超伝導のギャップ方程式を導いた。 $a_{1g}$  バンドのつくる大きなフェルミ面に加えて  $e'_g$  バンドのホールポケットが現れるとき、 $a_{1g}$  と  $e'_g$  のギャップ関数が逆符号となる一重項 s 波の超伝導が実現する。これは、電子-格子相互作用により導いた一重項 s 波超伝導とは、軌道間のギャップ関数の符号が異なる。
3.  $x > 0.75$  のとき層状コバルト酸化物  $\text{Na}_x\text{CoO}_2$  は面内強磁性・面間反強磁性転移 ( $T_c = 22\text{K}$ ) を示すことに注目して、熱起電力や電子比熱係数  $\gamma$  に対する強磁性スピン揺らぎの効果を議論した。相互作用としてコバルトの  $t_{2g}$  軌道における軌道内クーロ相互作用  $U$ 、軌道間クーロン相互作用  $U'$ 、フント則結合  $J$ 、ペアトランスファー  $J'$  を考慮し、スピン揺らぎや軌道揺らぎを取り入れるために、軌道自由度がある場合の乱雑位相近似 (RPA) を用いた。その結果、電子比熱係数  $\gamma$  は  $x \sim 0.75$  に向けて急激に増加することや、 $x \sim 0.75$  で観測される巨大な熱起電力の温度依存性など、実験を説明する結果が得られた。
4.  $x = 0.5$  のとき層状コバルト酸化物  $\text{Na}_{0.5}\text{CoO}_2$  は、室温以下で実現する Na の 1 次元整列のもとで、面内反強磁性 ( $T_{c1} = 87\text{K}$ ) と金属絶縁体転移 ( $T_{c2} = 53\text{K}$ ) の興味ある 2 段転移を示すが、特に後者の起源については未だ明らかにされていない。そこで本研究では、上記の現実的な模型に対して Na イオンの 1 次元整列の効果を Co の原子準位の変化として考慮し、Hartree-Fock 近似の範囲内でこの相転移を議論した。そ

の結果、Na 整列の効果によってフェルミ面のネスティングが増加し、フラストレーションにより抑えられていた反強磁性が  $T_{c1}$  で実現すること、また  $T_{c2}$  において反強磁性秩序に加えてさらに軌道秩序と電荷秩序が重ねて起こり、絶縁体に転移することが分かった。

5. 3次元ペロブスカイト型コバルト酸化物の  $\text{LaCoO}_3$  は、温度の上昇とともに約 90K で低温の低スピン状態 ( $t_{2g}^6, e_g^0; S = 0$ ) から高温の中間スピン状態 ( $t_{2g}^5, e_g^1; S = 1$ ) に転移することが知られている。さらに温度を上げると、約 600K で絶縁体（低温）から金属（高温）的振る舞いに変化する温度誘起の絶縁体-金属転移を示す。Co 酸化物では、強い電子相関の下でのフント則結合と結晶場分裂との競合が重要な役割を果たしていると考えられているので、その効果を記述できる単純化した模型として 2 軌道ハバード模型を考え、空間次元無限大で厳密となる動的平均場理論を用いて調べた。原子当たりの電子数が 2 のハーフフィールドにおいて、モット絶縁体とバンド絶縁体を含む金属絶縁体転移の相図を求めた。特に、 $\text{LaCoO}_3$  に対応するパラメータは、モット絶縁体、バンド絶縁体、金属の 3 つの相境界付近に存在し、スピン状態転移や絶縁体-金属転移が実現することが理解された。
6. 銅と酸素の 2 重鎖構造を持つ Pr 系銅酸化物  $\text{Pr}_2\text{Ba}_4\text{Cu}_7\text{O}_{15-\delta}$  で最近発見された新しい超伝導の機構を、1 次元 2 重鎖 d-p 模型や t-J 模型を用いて朝永-ラッティンジャー液体論に基づいて調べた。その結果、この系がスピンギャップをもつ C1S0 相にあり、現実的なクーロン相互作用の大きさで超伝導になることを明らかにし、ドーピング依存性や圧力依存性の実験とコンシステントな相図を得た。

なお、上記の研究 6 は三重大学工学部の佐野和博氏、新潟大学理学部の山田裕氏との協力によって成し遂げられたものである。ここに記して感謝したい。また、本研究の推進にあたって、新潟大学大学院自然科学研究科大学院生の三本啓輔さん、山川洋一さん、渡邊直浩さん、柳有紀さん、布施貴裕さん、幅口達朗さん、山田武見さん、川村知生さんの協力に感謝する。

平成 20 年 3 月

大野義章

**研究種目**

科学研究費補助金 基盤研究 (C)

**研究期間**

平成17年度～平成19年度

**研究課題**

コバルト酸化物における多元要素の量子多体効果が導く異常物性と新奇超伝導機構の理論

**課題番号**

17540317

**研究組織**

研究代表者： 大野 義章（新潟大学自然科学系教授）

研究分担者： 奥西 巧一（新潟大学自然科学系助教）

**交付決定額（配分額）**

（金額単位：千円）

	直接経費	間接経費	合計
平成17年度	1,600	0	1,600
平成18年度	1,000	0	1,000
平成19年度	900	270	1,170
総計	3,500	270	3,770

## 研究発表

### (1) 雑誌論文

1. Phase diagram and dynamic response functions of the Holstein-Hubbard model  
W. Koller, D. Meyer, A. C. Hewson and Y. Ōno  
Physica B **359-361** (2005) 795-797
2. Phonon softening and double-well potential formation due to electron-phonon interaction in heavy-fermion systems  
Keisuke Mitsumoto and Yoshiaki Ōno  
Physica C **426-431** (2005) 330-334
3. Superconductivity in the CuO double chain of  $\text{Pr}_2\text{Ba}_4\text{Cu}_7\text{O}_{15-\delta}$  on the basis of Tomonaga-Luttinger liquid theory  
Kazuhiro Sano, Yoshiaki Ōno and Yuh Yamada  
Journal of the Physical Society of Japan: Vol.74 No.11 (2005) 2885-2888
4. Heavy Fermions and Rattling Motions in the Periodic Anderson-Holstein Model  
Keisuke Mitsumoto and Yoshiaki Ōno  
Physica B **378-380** (2006) 265-266
5. Heavy Fermions in the Periodic Anderson Model with Singlet-Triplet Crystal-Field Levels  
Yoshiaki Ōno and Keisuke Mitsumoto  
Physica B **378-380** (2006) 694-695
6. Heavy fermion state in the periodic Anderson-Holstein model away from half filling  
Keisuke Mitsumoto and Yoshiaki Ōno  
Journal of Magnetism and Magnetic Materials **310** (2007) 419-421
7. Nonadiabatic interaction between electrons and Jahn-Teller distortions in a silicon vacancy  
Youichi Yamakawa, Keisuke Mitsumoto and Yoshiaki Ōno  
Journal of Magnetism and Magnetic Materials **310** (2007) 993-995
8. Ferromagnetism and superconductivity in the one-dimensional multi-orbital Hubbard model  
Kazuhiro Sano and Yoshiaki Ōno  
Journal of Magnetism and Magnetic Materials **310** (2007) e319-e321
9. Electronic state of  $\text{Na}_x\text{CoO}_2$  based on the two dimensional triangular lattice d-p model  
Youichi Yamakawa and Yoshiaki Ōno

- Journal of Physics: Condensed Matter **19** No.14 (2007) 145289/1-5
10. Superconductivity in the One-Dimensional Two-Orbital Hubbard Model with Finite Band Splitting  
Kazuhiro Sano and Yoshiaki Ōno  
Journal of Physics: Condensed Matter **19** No.14 (2007) 145284/1-6
  11. Charge gap in the one-dimensional extended Hubbard model at quarter filling  
Kazuhiro Sano and Yoshiaki Ōno  
Phys. Rev. B **75** (2007) 113103/1-4
  12. Electronic states and metal-insulator transition in the triangular lattice  $d$ - $p$  model for layered cobaltates  
Yoshiaki Ōno  
Physica C **460-462** (2007) 1047-1048
  13. Superconductivity and Spin gap in the zigzag chain  $t$ - $J$  model simulating a CuO double chain in  $\text{Pr}_2\text{Ba}_4\text{Cu}_7\text{O}_{15-\delta}$   
Kazuhiro Sano and Yoshiaki Ōno  
Journal of the Physical Society of Japan **76** No.11 (2007) 113701/1-4
  14. Dynamical mean-field study of the heavy-fermion state in the multi-orbital Anderson lattice model coupled with Jahn-Teller phonons  
Keisuke Mitsumoto and Yoshiaki Ōno  
Physica B **403** (2008) 859-861
  15. Effects of Electron Correlation and Electron-phonon Coupling on the quantum state of a Silicon Vacancy  
Youichi Yamakawa, Keisuke Mitsumoto and Yoshiaki Ōno  
J. Phys. Soc. Jpn. **77** (2008) Supplement A, 266-268.
  16. Effect of ferromagnetic spin fluctuations on the electronic states in  $\text{Na}_x\text{CoO}_2$  based on two-dimensional triangular lattice 11-band  $d$ - $p$  model  
Yuki Yanagi and Yoshiaki Ōno  
Journal of Physics and Chemistry of Solids, in press
  17. Antiferromagnetic, Charge and Orbital Ordered States of  $\text{Na}_{0.5}\text{CoO}_2$  Based on the Two-Dimensional Triangular Lattice  $d$ - $p$  Model  
Youichi Yamakawa and Yoshiaki Ōno  
Journal of Physics and Chemistry of Solids, in press
  18. Real-Space Renormalization Group Approach for the Corner Hamiltonian  
Kouichi Okunishi  
J. Phys. Soc. Jpn. **74** (2005) 3186-3192.

19. Field-induced Berezinskii-Kosterlitz-Thouless transition and string-density plateau in the anisotropic triangular antiferromagnetic Ising model  
Hiromi Otsuka, Yutaka Okabe and Kouichi Okunishi  
Phys. Rev. E **73** (2006) 035105(R)/1-4
20. Possibility of field-induced incommensurate order in a quasi-one-dimensional frustrated spin system  
N. Maeshima, K. Okunishi, K. Okamoto, T. Sakai and K. Yonemitsu  
Journal of Physics: Condensed Matter **18** (2006) 4819-4826
21. Filling dependence of the zigzag Hubbard ladder for the quasi-one-dimensional superconductor  $\text{Pr}_2\text{Ba}_4\text{Cu}_7\text{O}_{15-\delta}$   
Kouichi Okunishi  
Phys. Rev. B **75** (2007) 174514/1-5
22. Wilson-like real-space renormalization group and low-energy effective spectrum of the XXZ chain in the critical regime  
Kouichi Okunishi  
J. Phys. Soc. Jpn. **76** (2007) 063001/1-4
23. Field induced order-disorder transition driven by a softening of spinon excitation  
S. Kimura, H. Yashiro, K. Okunishi, M. Hagiwara, Z. He, K. Kindo, T. Taniyama and M. Itoh  
Phys. Rev. Lett. **99** (2007) 087602/1-4
24. Novel ordering of an  $S = 1/2$  quasi one-dimensional Ising-like antiferromagnet in magnetic field  
S. Kimura, T. Takeuchi, K. Okunishi, M. Hagiwara, Z. He, K. Kindo, T. Taniyama and M. Itoh  
Phys. Rev. Lett. **100** (2008) 057202/1-4
25. Field-induced incommensurate order for the quasi-one-dimensional XXZ model in a magnetic field  
Kouichi Okunishi and Takahumi Suzuki  
Phys. Rev. B **76** (2007) 224411/1-5
26. Exotic Finite-Temperature Phase Diagram for Weakly Coupled  $S = 1/2$  XXZ Chain in a Magnetic Field  
Takahumi Suzuki, Naoki Kawashima and Kouichi Okunishi  
J. Phys. Soc. Jpn. **76** (2007) 123707/1-4



## (2) 国際会議発表

1. Heavy Fermions in the Periodic Anderson Model with Singlet-Triplet Crystal-Field Levels  
Yoshiaki Ōno and Keisuke Mitsumoto  
*The International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (SCES 2005)*  
(Vienna, Austria, July 26-30, 2005)
2. Heavy Fermions and Rattling Motions in the Periodic Anderson-Holstein Model  
Keisuke Mitsumoto and Yoshiaki Ōno  
*The International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (SCES 2005)*  
(Vienna, Austria, July 26-30, 2005)
3. Rattling and heavy-fermions in the electron-phonon systems with 2nd-order coupling and anharmonic potential  
Keisuke Mitsumoto and Yoshiaki Ōno  
*Joint Workshop on NQP-skutterudites and NPM in multi-approach*  
(Tokyo, Japan, November 21-24, 2005)
4. Correlation effects on Fermi surface and magnetism of  $\text{Na}_x\text{CoO}_2$   
Yoshiaki Ōno, Naohiro Watanabe and Youichi Yamakawa  
*The International Symposium on Anomalous Quantum Materials 2006 and The 5-th Asia-Pacific Workshop (ISAQM2006 and The 5th APW)*  
(Okinawa, Japan, June 23-27, 2006)
5. Doping-dependence of the electronic state in the periodic Anderson-Holstein model  
Keisuke Mitsumoto and Yoshiaki Ōno  
*The International Symposium on Anomalous Quantum Materials 2006 and The 5-th Asia-Pacific Workshop (ISAQM2006 and The 5th APW)*  
(Okinawa, Japan, June 23-27, 2006)
6. Electronic state of  $\text{Na}_x\text{CoO}_2$  based on the two dimensional triangular lattice d-p model  
Youichi Yamakawa and Yoshiaki Ōno  
*Highly Frustrated Magnetism 2006 (HFM2006)*  
(Osaka, Japan, August 15-19, 2006)
7. Superconductivity in the One-Dimensional Two-Orbital Hubbard Model with Finite Band Splitting  
Kazuhiro Sano and Yoshiaki Ōno  
*Highly Frustrated Magnetism 2006 (HFM2006)*  
(Osaka, Japan, August 15-19, 2006)

8. Correlation Effects on Fermi Surface and Magnetism in the Triangular Lattice  $d$ - $p$  Model for Layered Cobaltates  
Yoshiaki Ōno, Naohiro Watanabe and Youichi Yamakawa  
*Highly Frustrated Magnetism 2006 (HFM2006)*  
(Osaka, Japan, August 15-19, 2006)
9. Heavy fermion state in the periodic Anderson-Holstein model away from half filling  
Keisuke Mitsumoto and Yoshiaki Ōno  
*The 17th International Conference on Magnetism (ICM2006)*  
(Kyoto, Japan, August 20-25, 2006)
10. Nonadiabatic interaction between electrons and Jahn-Teller distortions in a silicon vacancy  
Youichi Yamakawa, Keisuke Mitsumoto and Yoshiaki Ōno  
*The 17th International Conference on Magnetism (ICM2006)*  
(Kyoto, Japan, August 20-25, 2006)
11. Ferromagnetism and superconductivity in the one-dimensional multi-orbital Hubbard model  
Kazuhiro Sano and Yoshiaki Ōno  
*The 17th International Conference on Magnetism (ICM2006)*  
(Kyoto, Japan, August 20-25, 2006)
12. Metal insulator transition and spin state transition in the two-orbital Hubbard model  
Yoshiaki Ōno  
*The 17th International Conference on Magnetism (ICM2006)*  
(Kyoto, Japan, August 20-25, 2006)
13. Electronic states and metal-insulator transition in the triangular lattice  $d$ - $p$  model for layered cobaltates  
Yoshiaki Ōno  
*The 8th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity and High Temperature Superconductors (M2S-HTSC-VIII)*  
(Dresden, Germany, July 9-14, 2006)
14. Dynamical mean-field study of the heavy-fermion state in the multi-orbital Anderson lattice model coupled with Jahn-Teller phonons  
Keisuke Mitsumoto and Yoshiaki Ōno  
*The International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (SCES'07)*  
(Houston, USA, May 13-18, 2007)
15. Rattling motion and heavy-fermion behavior in the strongly coupled electron-phonon

system

Keisuke Mitsumoto and Yoshiaki Ōno

*Coherence and Incoherence in Strongly Correlated Systems*

(Rome, Italy, July 3-8, 2007)

16. Rattling motion and on+off-center potential formation in a strongly coupled electron-phonon system  
Yoshiaki Ōno, Takahiro Fuse and Keisuke Mitsumoto  
*12th International Conference on Phonon Scattering in Condensed Matter (PHONONS 2007)*  
(Paris, France, July 15-20, 2007)
17. Antiferromagnetic, Charge and Orbital Ordered States of  $\text{Na}_{0.5}\text{CoO}_2$  Based on the Two-Dimensional Triangular Lattice d-p Model  
Youichi Yamakawa and Yoshiaki Ōno  
*The 8th International Conference on Spectroscopies in Novel Superconductors (SNS2007)*  
(Sendai, Japan, August 20-24, 2007)
18. Effect of ferromagnetic spin fluctuations on the electronic states in  $\text{Na}_x\text{CoO}_2$  based on the two-dimensional triangular lattice 11-band d-p Model  
Yuki Yanagi and Yoshiaki Ōno  
*The 8th International Conference on Spectroscopies in Novel Superconductors (SNS2007)*  
(Sendai, Japan, August 20-24, 2007)
19. Rattling motion of guest ions under anharmonic potentials realized in a strongly coupled electron-phonon system  
Y. Ōno, T. Fuse and K. Mitsumoto  
*International Conference on "New Quantum Phenomena in Skutterudite and Related Systems" (Skutterudite2007)*  
(Kobe, Japan, September 26-30, 2007)
20. Heavy-fermion state in the extended two-orbital Anderson lattice model coupled with two degenerated Jahn-Teller phonons  
K. Mitsumoto and Y. Ōno  
*International Conference on "New Quantum Phenomena in Skutterudite and Related Systems" (Skutterudite2007)*  
(Kobe, Japan, September 26-30, 2007)
21. Dynamical mean-field study of valence fluctuations and heavy fermions in the periodic Anderson model  
T. Fuse, K. Mitsumoto and Y. Ōno  
*International Conference on "New Quantum Phenomena in Skutterudite and Related*

- Systems" (Skutterudite2007)*  
(Kobe, Japan, September 26-30, 2007)
22. Effects of Electron Correlation and Electron-phonon Coupling on the quantum state of a Silicon Vacancy  
Y. Yamakawa, K. Mitsumoto and Y. Ōno  
*International Conference on "New Quantum Phenomena in Skutterudite and Related Systems" (Skutterudite2007)*  
(Kobe, Japan, September 26-30, 2007)
23. A quantum Phase Transition in Spin Nanotube  
T. Sakai, K. Okunishi, K. Okamoto, M. Sato and M. Matsumoto  
*The 17th International Conference on Magnetism (ICM2006)*  
(Kyoto, Japan, August 20-25, 2006)
24. A quantum Phase Transition in Spin Nanotube  
T. Sakai, K. Okunishi, K. Okamoto, M. Sato and M. Matsumoto  
*The 17th International Conference on Magnetism (ICM2006)*  
(Kyoto, Japan, August 20-25, 2006)
25. Finite-Field Ground State of an  $S = 1$  Zigzag Ladder  
T. Tonegawa, K. Okamoto, K. Okunishi and T. Sakai  
*The 17th International Conference on Magnetism (ICM2006)*  
(Kyoto, Japan, August 20-25, 2006)
26. Chemical Potential-Electron Density Curve of the Zigzag Hubbard Ladder for Pr<sub>2</sub>7  
K. Okunishi  
*The 17th International Conference on Magnetism (ICM2006)*  
(Kyoto, Japan, August 20-25, 2006)

### (3) 国内学会発表

1. 渡邊直浩, 三本啓輔, 大野義章  
スレーブボソン法による層状コバルト酸化物の電子状態  
日本物理学会 2005年秋季大会 同志社大学 2005年9月20日
2. 三本啓輔, 大野義章  
2次の結合と非調和項をもつ電子フォノン系におけるラットリングと重い電子状態の理論  
日本物理学会 2005年秋季大会 同志社大学 2005年9月20日
3. 三本啓輔, 大野義章  
強結合電子フォノン系におけるラットリングと音響フォノンの結合の効果  
日本物理学会 2005年秋季大会 同志社大学 2005年9月20日
4. 佐野和博, 大野義章, 高野健一, 松浦民房  
一次元U-Vモデルの電荷ギャップ一線り込み群と数値対角化の組み合わせによる解析  
日本物理学会 2005年秋季大会 同志社大学 2005年9月22日
5. 山川洋一, 三本啓輔, 大野義章  
半導体の点欠陥におけるヤーンテラー歪みと動的に結合した電子系の強結合状態  
日本物理学会 2005年秋季大会 同志社大学 2005年9月22日
6. 大野義章, 佐野和博, 山田裕, 石川文洋  
 $\text{Pr}_2\text{Ba}_4\text{Cu}_7\text{O}_{15-\delta}$ における1次元超伝導の圧力効果  
日本高圧学会 第46回高圧討論会 室蘭工業大学 2005年10月30日
7. 布施貴裕, 山川洋一, 三本啓輔, 大野義章  
Off-Center型非調和ポテンシャルにおける量子状態  
日本物理学会新潟支部 第34回例会 上越教育大学 2005年12月3日
8. 三本啓輔, 大野義章  
動的平均場理論によるBドーパダイヤモンドの電子状態  
日本物理学会 第61回年次大会 愛媛大学 2006年3月28日
9. 大野義章, 渡邊直浩  
11バンドd-pモデルによる $\text{Na}_x\text{CoO}_2$ の電子相関とフェルミ面  
日本物理学会 第61回年次大会 愛媛大学 2006年3月28日
10. 山川洋一, 大野義章  
2次元三角格子d-pモデルによる $\text{Na}_x\text{CoO}_2$ の電子状態  
日本物理学会 第61回年次大会 愛媛大学 2006年3月28日
11. 山川洋一, 大野義章

- 2次元三角格子 d-p 模型による  $\text{Na}_{0.5}\text{CoO}_2$  の反強磁性と 2 段転移  
日本物理学会 2006 年秋季大会 千葉大学 2006 年 9 月 23 日
12. 山川洋一, 三本啓輔, 大野義章  
シリコン結晶中の原子空孔における強相関-強結合量子状態  
日本物理学会 2006 年秋季大会 千葉大学 2006 年 9 月 23 日
13. 布施貴裕, 三本啓輔, 山川洋一, 大野義章  
充填スクッテルダイト化合物におけるラットリングと伝導電子の結合の理論  
日本物理学会 2006 年秋季大会 千葉大学 2006 年 9 月 23 日
14. 幅口達朗, 大野義章, 佐野和博, 山田裕  
擬一次元超伝導体  $\text{Pr}_2\text{Ba}_4\text{Cu}_7\text{O}_{15-\delta}$  の電子状態と超伝導機構  
日本物理学会 2006 年秋季大会 千葉大学 2006 年 9 月 24 日
15. 柳有起, 大野義章  
 $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$  におけるペアトランスファー機構による s 波超伝導  
日本物理学会 2006 年秋季大会 千葉大学 2006 年 9 月 24 日
16. 渡邊直浩, 大野義章  
スレーブボソン法によるペロブスカイト型コバルト酸化物の電子状態  
日本物理学会 2006 年秋季大会 千葉大学 2006 年 9 月 24 日
17. 三本啓輔, 大野義章  
動的平均場理論による B ドープダイヤモンドの電子状態と超伝導  
日本物理学会 2006 年秋季大会 千葉大学 2006 年 9 月 24 日
18. 佐野和博, 大野義章  
ダブルチェーン t-J モデルによる  $\text{Pr}_2\text{Ba}_4\text{Cu}_7\text{O}_{15-\delta}$  の超伝導  
日本物理学会 2006 年秋季大会 千葉大学 2006 年 9 月 24 日
19. 山川洋一, 三本啓輔, 大野義章  
シリコンの原子空孔における電子と格子の強結合状態  
日本物理学会新潟支部 第 35 回例会 長岡科学技術大学 2006 年 12 月 2 日
20. 布施貴裕, 三本啓輔, 山川洋一, 大野義章  
cf 混成と局所フォノンが結合した周期アンダーソン模型における重い電子状態  
日本物理学会新潟支部 第 35 回例会 長岡科学技術大学 2006 年 12 月 2 日
21. 柳有起, 大野義章  
層状コバルト酸化物におけるペアホッピングによる S 波超伝導  
日本物理学会新潟支部 第 35 回例会 長岡科学技術大学 2006 年 12 月 2 日
22. 幅口達朗, 大野義章  
擬一次元超伝導体  $\text{Pr}_2\text{Ba}_4\text{Cu}_7\text{O}_{15-\delta}$  のバンド計算と超伝導機構

日本物理学会新潟支部 第35回例会 長岡科学技術大学 2006年12月2日

23. 三本啓輔, 大野義章

2軌道ハバード模型におけるランダムネスの効果を含んだ電子状態

日本物理学会新潟支部 第35回例会 長岡科学技術大学 2006年12月2日

24. 布施貴裕, 山川洋一, 大野義章

Off-Center型非調和ポテンシャルにおける量子状態と異常物性

日本物理学会 2007年春季大会 鹿児島大学 2007年3月18日

25. 布施貴裕, 三本啓輔, 大野義章

動的平均場理論による周期的アンダーソン模型の価数揺らぎと電子状態

日本物理学会 2007年春季大会 鹿児島大学 2007年3月18日

26. 幅口達朗, 大野義章, 佐野和博, 山田裕

擬一次元超伝導体  $\text{Pr}_2\text{Ba}_4\text{Cu}_7\text{O}_{15-\delta}$  の電子状態と超伝導機構 II

日本物理学会 2007年春季大会 鹿児島大学 2007年3月18日

27. 渡邊直浩, 大野義章

複数のスピン状態を含む拡張スレーブボソン法によるコバルト酸化物の電子状態

日本物理学会 2007年春季大会 鹿児島大学 2007年3月19日

28. 山川洋一, 三本啓輔, 大野義章

シリコン結晶中の原子空孔における強相関-強結合量子状態 II

日本物理学会 2007年春季大会 鹿児島大学 2007年3月19日

29. 山川洋一, 大野義章

2次元三角格子 d-p 模型による  $\text{Na}_{0.5}\text{CoO}_2$  の磁気秩序と電荷秩序

日本物理学会 2007年春季大会 鹿児島大学 2007年3月19日

30. 柳有起, 大野義章

$\text{Na}_x\text{CoO}_2$  の電子状態における強磁性スピン揺らぎの効果

日本物理学会 2007年春季大会 鹿児島大学 2007年3月19日

31. 三本啓輔, 大野義章

動的平均場理論による多軌道アンダーソン格子模型の電子状態

日本物理学会 2007年春季大会 鹿児島大学 2007年3月19日

32. 幅口達朗, 大野義章, 三浦陽子, 佐藤正俊

ハニカム格子系  $\text{Li}_2\text{RuO}_3$  の電子状態と金属絶縁体転移

日本物理学会 第62回年次大会 北海道大学 2007年9月21日

33. 山田武見, 山川洋一, 大野義章

シリコン原子空孔における局所電子状態と磁場依存性

日本物理学会 第62回年次大会 北海道大学 2007年9月21日

34. 佐野和博, 大野義章  
ダブルチェーンモデルのスピンギャップ  
日本物理学会 第 62 回年次大会 北海道大学 2007 年 9 月 21 日
35. 川村知生, 三本啓輔, 大野義章  
周期的アンダーソン・ホルスタイン模型における非調和フォノンの効果  
日本物理学会 第 62 回年次大会 北海道大学 2007 年 9 月 21 日
36. 柳有起, 大野義章  
 $\text{Na}_x\text{CoO}_2$  の電子状態における強磁性スピン揺らぎの効果 II  
日本物理学会 第 62 回年次大会 北海道大学 2007 年 9 月 21 日
37. 山川洋一, 大野義章  
2 次元三角格子 d-p 模型による  $\text{Na}_{0.5}\text{CoO}_2$  の磁気・電荷・軌道秩序  
日本物理学会 第 62 回年次大会 北海道大学 2007 年 9 月 21 日
38. 大野義章, 山川洋一, 山田武見  
シリコンの原子空孔における電子状態  
日本物理学会 第 62 回年次大会 北海道大学 2007 年 9 月 22 日
39. 三本啓輔, 大野義章  
動的平均場理論による多軌道アンダーソン格子模型の電子状態 II  
日本物理学会 第 62 回年次大会 北海道大学 2007 年 9 月 23 日
40. 布施貴裕, 三本啓輔, 大野義章  
動的平均場理論による周期的アンダーソン模型の価数揺らぎと電子状態 II  
日本物理学会 第 62 回年次大会 北海道大学 2007 年 9 月 23 日
41. 三本啓輔, 大野義章  
拡張ホルスタイン模型における重い電子状態  
日本物理学会 第 63 回年次大会 近畿大学 2008 年 3 月 23 日
42. 布施貴裕, 三本啓輔, 大野義章  
拡張周期的アンダーソン模型の価数揺らぎと重い電子状態  
日本物理学会 第 63 回年次大会 近畿大学 2008 年 3 月 23 日
43. 幅口達朗, 大野義章, 三浦陽子, 佐藤正俊  
ハニカム格子系  $\text{Li}_2\text{RuO}_3$  の電子状態と金属絶縁体転移  
日本物理学会 第 63 回年次大会 近畿大学 2008 年 3 月 24 日
44. 柳有起, 大野義章  
3 軌道ハバード模型による  $\text{Na}_x\text{CoO}_2$  の電子状態  
日本物理学会 第 63 回年次大会 近畿大学 2008 年 3 月 24 日
45. 渡邊直浩, 大野義章



- 複数のスピン状態を含む拡張スレーブボソン法によるコバルト酸化物の電子状態  
日本物理学会 第 63 回年次大会 近畿大学 2008 年 3 月 24 日
46. 山川洋一, 三本啓輔, 大野義章  
シリコン結晶中の原子空孔における強相関-強結合量子状態 III  
日本物理学会 第 63 回年次大会 近畿大学 2008 年 3 月 24 日
47. 山田武見, 山川洋一, 大野義章  
グリーン関数を用いたシリコン原子空孔における局所電子状態  
日本物理学会 第 63 回年次大会 近畿大学 2008 年 3 月 24 日
48. 川村知生, 三本啓輔, 大野義章  
ホルスタイン模型における非調和フォノンの効果  
日本物理学会 第 63 回年次大会 近畿大学 2008 年 3 月 25 日
49. 利根川孝, 岡本清美, 奥西巧一, 坂井徹, 鑄木誠  
容易軸型 1 イオンエネルギーをもつ  $S=1$  反強磁性梯子系の有限磁場基底状態  
日本物理学会 2005 年秋季大会 同志社大学 2005 年 9 月 19 日
50. 大塚博巳, 岡部豊, 奥西巧一  
三角格子上反強磁性 Ising 模型の基底状態に見られる磁場誘起相転移と string-density  
プラトーについて  
日本物理学会 2005 年秋季大会 同志社大学 2005 年 9 月 19 日
51. 奥西巧一  
corner Hamiltonian の実空間線り込み群  
日本物理学会 2005 年秋季大会 同志社大学 2005 年 9 月 21 日
52. 坂井徹, 佐藤正寛, 奥西巧一, 松本宗久, 岡本清美  
3-Leg スピンチューブの量子相転移  
日本物理学会 2005 年秋季大会 同志社大学 2005 年 9 月 21 日
53. 奥西巧一  
ジグザグ梯子ハバード模型のフィリング依存性  
日本物理学会 第 61 回年次大会 愛媛大学 2006 年 3 月 28 日
54. 利根川孝, 岡本清美, 奥西巧一, 坂井徹  
ボンド交代最近接相互作用と一様な次近接相互作用をもつ  $S=1$  反強磁性鎖の基底状態磁化曲線  
日本物理学会 第 61 回年次大会 愛媛大学 2006 年 3 月 30 日
55. 吉田靖雄, 河江達也, 竹田和義, 細越裕子, 井上克也, 前島展也, 奥西巧一, 岡本清美, 坂井徹  
純有機磁性体  $F_5PNN$  の磁場誘起秩序相

- 日本物理学会 第 61 回年次大会 愛媛大学 2006 年 3 月 30 日
56. 大塚雄一, 奥西巧一, 岡本清美, 松本宗久, 佐藤正寛, 坂井徹  
三本鎖スピントチューブ系における量子相転移の数値的研究  
日本物理学会 2006 年秋季大会 千葉大学 2006 年 9 月 23 日
57. 奥西巧一  
ジグザグハバード模型のフィリング依存性 II  
日本物理学会 2006 年秋季大会 千葉大学 2006 年 9 月 24 日
58. 奥西巧一  
Wilson 型実空間くりこみ群と XXZ スピン鎖の低エネルギー励起スペクトル  
日本物理学会 2007 年春季大会 鹿児島大学 2007 年 3 月 18 日
59. 鈴木隆史, 川島直輝, 奥西巧一  
擬一次元量子スピン  $S=1/2$  XXZ モデルの磁場中秩序状態  
日本物理学会 第 62 回年次大会 北海道大学 2007 年 9 月 21 日
60. 奥西巧一, 佐藤正寛, 坂井徹  
三角形量子スピントチューブにおける 1 次量子相転移  
日本物理学会 第 62 回年次大会 北海道大学 2007 年 9 月 21 日
61. 坂井徹, 大塚雄一, 佐藤正寛, 奥西巧一, 岡本清美  
3 本鎖スピントチューブの磁化過程  
日本物理学会 第 62 回年次大会 北海道大学 2007 年 9 月 21 日
62. 田辺孝行, 奥西巧一  
Wang-Landau シミュレーションによる擬一次元系古典スピン模型の解析  
日本物理学会 第 63 回年次大会 近畿大学 2008 年 3 月 25 日
63. 奥西巧一, 鈴木隆史  
擬 1 次元 XXZ 模型における磁場誘起非整合秩序  
日本物理学会 第 63 回年次大会 近畿大学 2008 年 3 月 25 日
64. 鈴木隆史, 川島直輝, 奥西巧一  
弱い鎖間相互作用を持つ  $S=1/2$  反強磁性 XXZ スピン鎖の磁場中非整合スピン密度波  
状態と有限温度転移  
日本物理学会 第 63 回年次大会 近畿大学 2008 年 3 月 25 日