

## I スピナノチューブの異常量子現象

### Anomalous Quantum Phenomena in Spin Nanotubes

坂井 徹

Sakai, T.

量子スピン反強磁性鎖が鎖間方向に複数結合した系をスピラダー系と呼ぶのに対し、このスピラダー系の両端の鎖を結合して筒状にした系をスピナノチューブと呼ぶ。スピンの自由度、すなわち磁性を持つナノチューブとして、次世代の多機能材料開発を目指し、理論的・計算科学的手法を用いて、この物質が示す新しい量子現象を探索している。とくにユニットセルが正三角形のスピナノチューブでは、右巻き・左巻きというカイラリティの自由度も現れ、新しい超伝導機構にもつながるスピギャップ・カイラリティギャップなどの量子現象が予測されている。これらの新現象を SPring-8 の放射光や中性子散乱で観測する方法も検討している。

## II フラストレーション系の新現象

### Magnetism of Frustrated Systems

坂井 徹

Sakai, T.

隣接する量子スピンを反平行にそろえようとする反強磁性交換相互作用が三角格子・カゴメ格子・ジグザグ鎖格子などにはたらくとき、スピンの安定構造が一意的には決まらないフラストレーションが生じる。このようなフラストレーション系では、いくら低温にしても磁気秩序を伴う相転移が起こらず、絶対零度ですら量子ゆらぎのために秩序が融解したスピン液体が実現する。また、外部磁場をかけることにより、スピンの対角成分と非対角成分が同時に凝縮するスーパーソリッド相や、隠れた秩序とも呼ばれるスピン・ネマティック相などのエキゾチックな現象が起きることもわかってきた。これらのフラストレーション系の新現象を、大規模数値シミュレーションにより理論予測し、量子ビームによる観測法を検討している。

### III 銅酸化物高温超電導体の理論的研究

#### Theoretical Study on the High-Tc Cuprates

坂井 徹

Sakai, T.

銅酸化物高温超電導体の超電導発現機構においては、強相関電子系特有のスピンゆらぎが有力とされているが、最近の SPring-8 の放射光を用いた実験により、フォノンも重要な役割を果たしている可能性が示唆されている。そこでフォノン効果もとり入れた強相関電子系の理論模型に対する数値的厳密対角化により、銅酸化物高温超電導体におけるフォノン効果の役割について理論的に研究している。

### IV ルテニウム酸化物におけるスピン三重項超電導の

#### 理論的研究

#### Theoretical Study of Spin-Triplet Superconductivity in Ruthenates

野村拓司

Nomura, T.

2 電子のスピンが反平行（スピン一重項）にクーパ対を形成する従来の超電導と異なり、スピンが平行（スピン三重項）にクーパ対を形成する超電導が存在する。その代表的なものが  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  というルテニウム酸化物である。スピン三重項超電導体ではスピン一重項超電導体と異なり、超電導状態においてもスピンの状態に大きな自由度が残るため、エキゾチックな超電導状態が実現すると考えられている。以前の実験研究からは時間反転対称性が破れた対状態が実現していると考えられていたが、最近の実験研究によるとそれが破れていない状態が示唆されている。我々の研究では、実際の電子構造を再現した微視的なモデルから出発して、場の理論的方法などの解析的手法を用い、どのようなクーパ対状態が実現しているのかを理論的に解明する。

## V 鉄系高温超伝導のメカニズムに関する理論的研究

### Theoretical Study of Iron-Based Superconductivity

野村拓司  
Nomura, T.

最近、鉄を含んだ超伝導体（鉄ニクタイト高温超伝導）の研究が、世界的に盛んに行われている。この物質の超伝導メカニズムとクーパー対状態を微視的に解明する研究を行っている。超伝導メカニズムに関しては、場の理論的方法を用いてクーパー対を形成するための引力源を微視的に導き、超伝導オーダーパラメタに符号反転のある s 波対状態を得ており、多くの実験結果とコンシステントな結果となった。しかしながら、現実の物質では不純物に対して超伝導が破壊されにくいなど、まだまだ説明できない実験結果が存在する。この点を明らかにするべく今後研究を進める。

## VI 遷移金属化合物における共鳴非弾性 X 線散乱の

### 理論的研究

### Theoretical Study of Resonant Inelastic X-Ray Scattering in Transition-Metal Compounds

野村拓司  
Nomura, T.

SPring-8 などの大型放射光施設を利用して、遷移金属化合物の共鳴非弾性 X 線散乱(RIXS)の実験が盛んに行われている。遷移金属の K 吸収端に対応する高エネルギーの X 線を用いることで、散乱光子の波数変化に依存した励起スペクトルが観測されている。我々は独自の計算方法を用いて、銅酸化物、ニッケル酸化物、マンガン酸化物など、これまでいくつかの遷移金属化合物での散乱スペクトルの波数依存性を説明することに成功してきた。現在は、鉄系高温超伝導体や電荷秩序を示す遷移金属酸化物における散乱スペクトルの解析を進めている。

#### 発表論文 List of Publications

- I-1 T. Sakai: Quantum Phase Transitions of the Three-Leg Spin Tube, Joint European Japanese Conference: Frustration in Condensed Matter (Lyon, May 2009)
- I-2 坂井 徹: スピンチューブの磁化過程、強磁場スピン科学 2009 スタートアップ会議 (柏、

2009年5月)

- I-3 三本鎖スピントューブのカイラリティ、特定領域研究「フラストレーションが創る新しい物性」第4回トピカルミーティング(有馬、2009年7月)
- I-4 T. Sakai, K. Okunishi (新潟大理), K. Okamoto (東工大院理工), C. Itoi (日大理工) and M. Sato (理研) : Field Induced Exotic Phenomena of the  $S=1/2$  Three-Leg Quantum Spin Nanotube, International Symposium on Research in High Magnetic Field (RHMF)(Dresden, July 2009)
- I-5 T. Sakai: Quantum Phase Transition of the 3-Leg Spin Tube, International Workshop on Dynamics and Manipulation of Quantum Systems (Tokyo, October 2009)
- I-6 坂井 徹: スピントューブの量子相転移、九州大学理学部物性基礎論コロキウム(九州大学、2009年10月)
- I-7 坂井 徹: スピントューブの量子相転移、JAEA コロキウム (Spring-8、2009年12月)
- I-8 坂井 徹: スピントューブの異常量子物性、日本物理学会・中国四国支部講演会(香川大、2009年12月)
- I-9 坂井 徹: スピントューブのカイラリティ、CMRC 研究会「相関電子と構造物性」(高エネルギー加速器機構、2010年2月)
- I-10 T. Sakai, M. Sato (理研), K. Okunishi (新潟大理), Y. Otsuka (理研), K. Okamoto (東工大院理工), C. Itoi (日大理工) : Field-induced quantum phase transitions of the asymmetric three-leg spin tube, American Physical Society March Meetin (Portland, March 2010)
- I-11 坂井 徹: スピントューブの量子相転移、次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発・第4回公開シンポジウム(分子研、2010年3月)
- I-12 K. Okamoto (東工大院理工), T. Sakai, M. Sato (理研), K. Okunishi (新潟大理), C. Itoi (日大理工) : Magnetization process of the  $S=1/2$  three-leg spin nanotube, International Symposium on Physics of New Quantum Phases in Superclean Materials (Yokohama, February 2010)
- I-13 坂井 徹・奥西巧一(新潟大理)・岡本清美(東工大院理工)・糸井千岳(日大理工)・佐藤正寛(理研) : 三本鎖スピントューブの3分の1磁化プラトー、日本物理学会秋季大会(熊本、2009年9月)
- I-14 坂井 徹・佐藤正寛(理研)・奥西巧一(新潟大理)・岡本清美(東工大院理工)・糸井千岳(日大理工) : スピントューブの磁化プラトーにおけるスタガード磁化、ダイマー及びカイラル秩序の共存、日本物理学会第65回年次大会(岡山、2010年3月)
- I-15 岡本清美・佐藤正寛・奥西巧一・坂井 徹・糸井千岳 : 3本足スピントューブにおける磁化プラトー幅の新奇な振舞い、日本物理学会第65回年次大会(岡山、2010年3月)
- I-16 K. Okunishi (新潟大理), S. Yoshikawa (東大理), T. Sakai and S. Miyashita (東

- 大理) : Quantum Phase Transition of a Triangular Lattice Spin Tube and Edge Spin Effects, *Int. J. Mod. Phys. C* 20 (2009) 1423-1430
- I-17 T. Sakai, K. Okunishi (新潟大理), K. Okamoto (東工大院理工), C. Itoi (日大理工) and M. Sato (理研), Field Induced Exotic Phenomena of the  $S=1/2$  Three-Leg Quantum Spin Nanotube, *J. Low Temperature Phys.* 159 (2010) 55-58
- II-1 T. Sakai: Field-Induced Spin Nematic Phases in Quasi-1D Quantum Spin Systems, Seminar, Institute of Theoretical Physics, Ecole Polytechnique Federale de Lausanne (Lausanne, May 2009)
- II-2 T. Sakai, T. Tonegawa (福井工大工) and K. Okamoto (東工大院理工) : Magnetization Process of the  $S=1/2$  Distorted Diamond Spin Chain with the Dzyaloshinsky-Moriya interaction, International Conference on Magnetism (ICM) (Karlsruhe, July 2009)
- II-3 T. Tonegawa (福井工大工), H. Nakano, T. Sakai, K. Okamoto (東工大院理工), K. Okunishi (新潟大理) and K. Nomura (九州大理) : Half Magnetization Plateau of a Frustrated  $S=1$  Antiferromagnetic Chain, International Conference on Magnetism (ICM), Karlsruhe, 2009
- II-4 T. Sakai, T. Tonegawa (福井工大工) and K. Okamoto (東工大院理工), Field-Induced Nematic Phase in the Spin Ladder System with Easy-Axis Anisotropy, International Conference on Quantum Criticality and Novel Phases (Dresden, August 2009)
- II-5 T. Tonegawa (福井工大工), K. Okamoto (東工大院理工) and T. Sakai : First-Order Phase Transition between One-Third Magnetization Plateau States in an Anisotropic ( $S, S'$ ) Spin Alternating Chain, International Conference on Quantum Criticality and Novel Phases (Dresden, August 2009)
- II-6 T. Sakai: Magnetic field induced phenomena in quasi-one-dimensional organic magnets, International Workshop on "Theories on Strongly Correlated Molecular Conductors" (Narita, September 2009)
- II-7 T. Sakai: (Invited) Selection Rules for ESR Direct Transition of the Spin Gap and their Applications, Electron Magnetic Resonance of Strongly Correlated Spin Systems (Kobe, November 2009)
- II-8 坂井 徹・中野博生 : カゴメ格子反強磁性体の磁化過程、物性科学領域横断研究会「凝縮系科学の最前線」(東京、2009年11月)
- II-9 坂井 徹・中野博生 : カゴメ格子反強磁性体の磁化過程、東大物性研短期研究会「計算物理学」(柏、2009年12月)
- II-10 T. Sakai: Magnetization process of the  $S=1/2$  distorted diamond spin chain, International Symposium: High Magnetic Field Spin Science in 100T ( Sendai , December 2009)

- II-11 坂井 徹・中野博生・磯田 誠 (香川大教育) : カゴメ格子反強磁性体の磁化過程、特定領域研究「フラストレーションが創る新しい物性」平成 21 年度成果報告会 (京都、2010 年 1 月)
- II-12 坂井 徹 : カゴメ格子反強磁性体の磁気ダイナミクス、古典及び量子系のダイナミクス・非平衡統計力学に関するワークショップ (東大弥生講堂アネックス、2010 年 2 月)
- II-13 T. Sakai and H. Nakano: Anomalous magnetization process of the Kagome lattice antiferromagnet, International Symposium on Physics of New Quantum Phases in Superclean Materials (Yokohama, 2010 年 2 月)
- II-14 坂井 徹・利根川 孝・岡本清美 : 異方的スピンラダー系の磁場誘起スピンネマティック相、日本物理学会秋季大会 (熊本、2009 年 9 月)
- II-15 中野博生・坂井 徹 : カゴメ格子反強磁性体の磁化過程、日本物理学会秋季大会 (熊本、2009 年 9 月)
- II-16 利根川 孝 (福井工大工)・岡本清美 (東工大院理工)・坂井 徹 : 1 次元異方的混晶フェリ磁性体における磁化の 3 分の 1 プラトールIV、日本物理学会秋季大会 (熊本、2009 年 9 月)
- II-17 坂井 徹・岡本清美 (東工大院理工)・利根川 孝 (福井工大工) : ジャロシンスキー・守谷相互作用のある歪んだダイヤモンド鎖の磁化過程、日本物理学会秋季大会 (熊本、2009 年 9 月)
- II-18 安部祥平・坂井 徹・岡本清美 (東工大院理工)・筒井健二 (原子力機構) : フラストレートした 3 本鎖スピンラダーのフェリ相とスピン液体相、日本物理学会第 65 回年次大会 (岡山、2010 年 3 月)
- II-19 利根川 孝 (福井工大工)・中野博生・坂井 徹・岡本清美 (東工大院理工) : フラストレートした  $S=1$  反強磁性鎖における磁化の 2 分の 1 プラトールII、日本物理学会第 65 回年次大会 (岡山、2010 年 3 月)
- II-20 中野博生・坂井 徹 : カゴメ格子反強磁性体の磁化過程 2、日本物理学会第 65 回年次大会 (岡山、2010 年 3 月)
- II-21 T. Sakai, K. Okamoto (東工大院理工) and T. Tonegawa (福井工大工) , Field-Induced Incommensurate Order and Possible Supersolid in the  $S=1/2$  Frustrated Diamond Chain, J. Phys.: Conf. Series. 145 (2009) 012065-1-4
- II-22 T. Tonegawa (福井工大工) , T. Sakai, K. Okamoto (東工大院理工) and M. Kaburagi (神戸大国際文化) , Ground-State Phase Diagram of an  $(S, S')=(1, 2)$  Spin-Alternating Chain with Competing Single-Ion Anisotropies, J. Phys.: Conf. Series. 145 (2009) 012066-1-4
- II-23 T. Sakai, T. Tonegawa (福井工大工) and K. Okamoto (東工大院理工) , Two-step quantum spin flop transition in spin ladders, J. Phys.: Conf. Series. 150 (2009) 042169-1-4
- II-24 M. Okumura (原子力機構) , S. Yamada (原子力機構) , M. Machida (原子力機構) and T. Sakai: Polarization Plateau in Atomic Fermi Gas Loaded on Triangular

- Optical Lattice, Phys. Rev. A 79 (2009) 061602(R)-1-4
- II-25 M. Fujisawa (神戸大理), K. Shiraki (神戸大理), S. Okubo (神戸大理), H. Ohta (神戸大理), M. Yoshida (東大物性研), H. Tanaka (東工大院理工) and T. Sakai, Dzyaloshinsky-Moriya Interaction in the  $S=1/2$  Quasi-One-Dimensional Antiferromagnet  $\text{Cu}_2\text{Cl}_4\text{H}_8\text{C}_4\text{SO}_2$  as Determined via High-Frequency ESR, Phys. Rev. B 80 (2009) 012408-1-4
- II-26 Y. Yoshida (フロリダ大), T. Kawae (九州大工), Y. Hosokoshi (大阪府立大理工), K. Inoue (広島大理), N. Maeshima (筑波大), K. Okunishi (新潟大理), K. Okamoto (東工大院理工) and T. Sakai, Magnetic Field versus Temperature Phase Diagram of the Spin-1/2 Alternating-Bond Chain Compound F5PNN, J. Phys. Soc. Jpn. 78 (2009) 074716-1-5
- II-27 T. Sakai, T. Tonegawa (福井工大工) and K. Okamoto (東工大院理工): Elementary excitations and spin dynamics in nanowire quantum magnets, Int. J. Mod. Phys. C 20 (2009) 1467-1476
- II-28 T. Sakai, T. Tonegawa and K. Okamoto, Magnetization Process of the  $S=1/2$  Distorted Diamond Spin Chain with the Dzyaloshinsky-Moriya interaction, J. Phys. Conf. Ser. 200 (2010) 011052-1-4
- II-29 T. Tonegawa, H. Nakano, T. Sakai, K. Okamoto, K. Okunishi and K. Nomura, Half Magnetization Plateau of a Frustrated  $S=1$  Antiferromagnetic Chain, J. Phys. Conf. Ser. 200 (2010) 022065-1-4
- II-30 T. Sakai, T. Tonegawa (福井工大工) and K. Okamoto (東工大院理工), Field-Induced Nematic Phase in the Spin Ladder System with Easy-Axis Anisotropy, Physica Status Solidi B 247 (2010) 583-585
- II-31 T. Tonegawa (福井工大工), K. Okamoto (東工大院理工) and T. Sakai, First-Order Phase Transition between One-Third Magnetization Plateau States in an Anisotropic ( $S, S'$ ) Spin Alternating Chain, Physica Status Solidi 247 (2010) 688-690
- III-1 T. Sakai: Numerical Exact Diagonalization Study on a Phonon-Assisted Hole Paring in the High-Tc Cuprates, 9th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity (Tokyo, September 2009)
- III-2 馬越健次・坂井 徹: 強相関電子系の理論研究、第13回 SPring-8 シンポジウム (東京ステーションコンファレンス、2009年9月)
- IV-1 T. Nomura, H. Ikeda (京都大): Effect of spin-orbit coupling on the d-vector in  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ , 科研費特定領域研究会 (箱根、2009年4月19日)
- IV-2 T. Nomura, H. Ikeda (京都大): Effect of spin-orbit coupling on the d-vector in  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ , Novel Spin Pairing (NSP2009) (Kyoto, 14th September)
- IV-3 T. Nomura, H. Ikeda (京都大): Effects of spin-orbit interaction on magnetism

and spin-triplet superconductivity in  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ , Physics of Super-Clean Materials (PSM2010) (Yokohama, 9th March 2010)

V-1 T. Nomura: Perturbation Theory of Iron-Pnictide Superconductivity, Novel Developments in Theory of Superconductivity (NDTS2009) (Chiba, 9th July, 2009)

V-2 T. Nomura: Perturbation Theory of Iron-Pnictide Superconductivity, Materials and Mechanisms of Superconductivity (M2S) (Tokyo, 9th September)

VI-1 野村拓司・山川洋一（新潟大）・柳 有起（新潟大）・大野義章（新潟大）：鉄ニクタイトにおける共鳴非弾性 X 線散乱の理論的研究、日本物理学会、（熊本、2009 年 9 月 26 日）

### 科学研究費補助金等

- 1 科学研究費補助金（平成 20～23 年度）基盤研究(B) 課題番号:20340096  
研究課題 スピンナノチューブの異常量子現象の理論的・計算科学的研究  
研究代表者 坂井 徹
- 2 科学研究費補助金（平成 20～21 年度）特定領域研究 課題番号:20030008  
研究課題 新奇な量子スピントロポロジー現象の観測を目指す理論的研究  
研究代表者 坂井 徹
- 3 科学研究費補助金（平成 20～21 年度）特定領域研究 課題番号:20029020  
研究課題 強相関電子系のリング交換が引起す新奇な量子凝縮相の理論的・数値的研究  
研究代表者 坂井 徹
- 4 科学研究費補助金（平成 20～21 年度）特定領域研究 課題番号:20029014  
研究課題 磁場下におけるスピン三重項超伝導相の物性  
研究分担者 野村拓司
- 5 科学技術振興機構 研究領域 新規材料による高温超伝導基盤技術(TRIP)  
研究科題 量子ビームによる鉄系高温超伝導の物性研究  
研究分担者 坂井 徹・野村拓司