

## 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ナラダー系と呼ぶのに対し、このスピナ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ングャップ・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 強相関電子系における超電導の理論的研究

#### Theoretical Study of Superconductivity in Strongly Correlated Electron Systems

野村拓司  
Nomura, T.

銅酸化物高温超電導や鉄系高温超電導に代表される強相関電子系超電導では、従来の電子格子相互作用による超電導とは定性的に異なる新奇な超電導機構がはたらき、特異な超電導状態が実現している。これらの新奇な超電導の発現機構とその特異な超電導状態を微視的に明らかにすることを目的として理論的研究を行っている。具体的には、 $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  におけるスピン三重項超電導、鉄ニクタイトにおける高温超電導、有機物超電導などを扱ってきた。現在は、フラストレーションのある格子系や重い電子系における超電導の理論にも興味を持っている。実際の電子構造を第一原理バンド計算などで再現した微視的な模型から出発して、場の理論的方法などの解析的手法と大型計算機による数値計算を併用することによって、どのようなクーパー対状態が実現しているのか理論的に研究している。

## V 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 Strongly Correlated Electron Systems

野村拓司  
Nomura, T.

最近、遷移金属化合物などの強相関電子系における電子の励起ダイナミクスを明らかにすることを目的として、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電子の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、ニッケル酸化物など、これまでいくつも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。最近では、実験グループとの連携も図りながら、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理論解析を実施してきた。現在は、軌道秩序系など他の特徴的な基底状態を持つ物質系における電子の励起ダイナミクスに興味を持っている。また、第一原理バンド計算なども駆使しながら、より一層精密な計算を行うことにも興味を持っている。

#### 発表論文 List of Publications

- I-1 T. Sakai: Exotic quantum critical phenomena of the spin nanotubes, 日加ジョイント・フラストレーション・ワークショップ(バンクーバー、カナダ、2011年5月)
- I-2 K. Okamoto, M. Sato, K. Okunishi, T. Sakai and C. Itoi: Magnetization Plateau of the Quantum Spin Nanotube, *Physica E* 43 (2011) 769-772.
- I-3 T. Sakai, M. Sato, K. Okunishi, K. Okamoto and C. Itoi: Exotic Quantum Critical Phenomena of the Spin Nanotubes, *J. Phys.: Conf. Ser.* 302 (2011) 012013-1-4.
- I-4 T. Sakai: Exotic quantum critical phenomena of the S=1/2 three-leg spin nanotube, *Novel Phenomena in Frustrated Systems* (Santa Fe, USA, May 2011).
- I-5 T. Sakai: Exotic Quantum Phase Transitions in the Spin Nanotubes, 低温物理国際会議 (LT26) (北京, 中国, August 2011)
- I-6 Y. Otsuka and T. Sakai: Topological Aspects of the Quantum Spin Nanotube, *J. Phys.: Conf. Ser.* 344 (2012) 012009-1-6.
- I-7 坂井 徹: フラストレートした3本鎖スピ NRAダーのスピ Nマティック相、量子スピ N系研究会 (福井大学、2012年2月)

- I-8 坂井 徹: フラストレートした3本鎖スピンラダー系における新しい量子スピンネマティック相、東大物性研短期研究会「計算科学の課題と展望」(柏、2012年2月)
- I-9 佐藤正寛・奥西巧一・糸井千岳・岡本清美・坂井 徹: スピンチューブの磁化プラトー領域におけるカイラリティ液体と量子相転移、日本物理学会、(富山、2011年9月)
- I-10 奥西巧一・佐藤正寛・糸井千岳・岡本清美・坂井 徹: スピンチューブのプラトー状態での内部対称性と新奇秩序の数値的研究、(富山、2011年9月)
- II-1 T. Sakai and H. Nakano: Exotic critical phenomena in magnetization process of the kagome- and triangular-lattice quantum antiferromagnets, Novel Phenomena in Frustrated Systems (Santa Fe, USA, May 2011).
- II-2 T. Sakai: Critical magnetization behaviors of the triangular and kagome lattice quantum antiferromagnets, 日加ジョイント・フラストレーション・ワークショップ(バンクーバー、カナダ、2011年5月)
- II-3 坂井 徹・中野博生: スピナノチューブにおける磁場誘起スピン・カイラリティ液体、特定領域「フラストレーションが創る新しい物性」研究会(彦根、2011年7月)
- II-4 H. Nakano, T. Shimokawa and T. Sakai, Collapse of Ferrimagnetism in Two-Dimensional Heisenberg Antiferromagnet due to Frustration, J. Phys. Soc. Jpn. (Letters) 80 (2011) 033709-1-4.
- II-5 T. Sakai and H. Nakano, Critical magnetization behavior of the triangular- and kagome-lattice quantum antiferromagnets, Phys. Rev. B 83 (2011) 100405(R)-1-4.
- II-6 T. Tonegawa, K. Okamoto, H. Nakano, T. Sakai, K. Nomura and M. Kaburagi, Haldane, Large-D and Intermediate-D States in an S=2 Quantum Spin Chain with On-Site and XXZ Anisotropies, J. Phys. Soc. Jpn. (Letters) 80 (2011) 043001-1-4.
- II-7 H. Nakano and T. Sakai, Numerical-Diagonalization Study on Spin Gap Issue of the Kagome Lattice Heisenberg Antiferromagnet, J. Phys. Soc. Jpn. (Letters) 80 (2011) 053704-1-4.
- II-8 M. Isoda, H. nakano and T. Sakai: Thermodynamic Properties of S=1/2 Ising-like Heisenberg on Triangle-based Lattices, Mod. Phys. Lett. B 25 (2011) 909-915.
- II-9 K. Okamoto, T. Tonegawa, H. Nakano, T. Sakai, K. Nomura and M. Kaburagi: Ground-State Phase Diagram of S=2 Quantum Spin Chain with the XXZ and On-Site Anisotropies, J. Phys.: Conf. Ser. 302 (2011) 012014-1-4.
- II-10 中野博生・坂井 徹: 籠目格子反強磁性体の磁化過程 - 「磁化ランプ」という異常臨界現象-、日本物理学会誌 66 (2011) 832-836.
- II-11 T. Sakai: Novel Field-Induced Quantum Phase Transition of the Kagome-Lattice Antiferromagnet, 低温物理国際会議 (LT26) (北京, 中国, August 2011)
- II-12 T. Sakai: (招待講演) Quantum critical magnetization behaviors of the kagome- and triangular- lattice antiferromagnets, ICC-IMR Workshop on Development of

Functionalized Molecule-based Magnetic Materials (Sendai, September 2011)

- II-13 T. Sakai and H. Nakano: Quantum Critical Magnetization Behaviors of the Kagome- and Triangular-Lattice Antiferromagnets, 第 26 回西宮・湯川記念国際ワークショップ (京都、2011 年 11 月)
- II-14 T. Sakai: Quantum critical magnetization behavior of the kagome- and triangular-lattice antiferromagnets, Theoretical Physics Seminar (スイス連邦工科大チューリッヒ, 2011 年 10 月)
- II-15 T. Sakai: Quantum critical magnetization behavior of the kagome- and triangular-lattice antiferromagnets, Theoretical Physics Seminar (ラウエ・ランジュヴァン研究所、グルノーブル、2011 年 10 月)
- II-16 坂井 徹・中野博生: カゴメ格子反強磁性体の異常量子現象、物性科学領域横断研究会 (仙台、2011 年 11 月)
- II-17 T. Sakai and H. Nakano: Numerical study on the spin dynamics of the Kagome lattice antiferromagnet, 1 st Asia-Oceania Conference on Neutron Scattering (Tsukuba, November 2011)
- II-18 坂井 徹: 低次元フラストレーション系における量子スピン液体理論、第 5 回東北大学 GCOE 研究会 (仙台、2012 年 1 月)
- II-19 T. Sakai: Quantum Critical Magnetization Behaviors of the Kagome- and Triangular-Lattice Antiferromagnets, 理論物理セミナー(リヨン高等師範学校, 2012 年 1 月)
- II-20 T. Sakai: Quantum Critical Magnetization Behaviors of the Kagome- and Triangular-Lattice Antiferromagnets, 凝縮系物理セミナー (スイス連邦工科大ローザンヌ、2012 年 2 月)
- II-21 T. Sakai: Quantum Critical Magnetization Behaviors of the Kagome- and Triangular-Lattice Antiferromagnets, American Physical Society, March Meeting (Boston, 2012 年、2 月)
- II-22 坂井 徹・中野博生: カゴメ格子・三角格子反強磁性体の磁化過程における量子臨界現象、日本物理学会 (関西学院大学、2012 年 3 月)
- II-23 坂井 徹・中野博生: カゴメ格子反強磁性体の磁化ランプと三角格子反強磁性体の磁化プラトの量子臨界現象、日本物理学会 (富山大学、2011 年 9 月)
- II-24 中野博生・坂井 徹: 量子スピンカゴメ格子反強磁性体の大規模並列数値対角化計算、日本物理学会 (富山大学、2011 年 9 月)
- II-25 磯田 誠・中野博生・坂井 徹: 三角形内包カゴメ格子ハイゼンベルグスピン系の帯磁率と磁化プラト、日本物理学会 (富山大学、2011 年 9 月)
- II-26 岩瀬賢治・山口博則・小野俊雄・野尻浩之・松尾 晶・金道浩一・下川統久朗・中野博生・坂井 徹・細越裕子: フェルダジル系有機ビラジカル  $m\text{-Ph-V}_2$  の構造と磁氣的性質、日本物理学会 (富山大学、2011 年 9 月)

- II-27 安部祥平・坂井 徹・岡本清美・筒井健二・奥西巧一：フラストレートした  $S=1/2$  三本鎖スピンラダーのスピンネマティック相、日本物理学会（富山大学、2011年9月）
- II-28 岡本清美・利根川 孝・中野博生・坂井 徹・野村清英・鎗木 誠：異方的  $S=2$  反強磁性量子スピン鎖の基底状態相図 –Intermediate-D 相の存在–I、日本物理学会（富山大学、2011年9月）
- II-29 利根川 孝・岡本清美・中野博生・坂井 徹・野村清英・鎗木 誠：異方的  $S=2$  反強磁性量子スピン鎖の基底状態相図 –Intermediate-D 相の存在–II、日本物理学会（富山大学、2011年9月）
- II-30 礒田 誠・中野博生・坂井 徹：三角形内包カゴメ格子系  $\text{Cu}_9\text{X}_2(\text{cpa})_6$  の低エネルギー状態、日本物理学会（関西学院大学、2012年3月）
- II-31 中野博生・坂井 徹：2次元フラストレート反強磁性体の磁化プラトーと磁化ランプ、日本物理学会（関西学院大学、2012年3月）
- II-32 肘井敬吾・坂井 徹：フラストレートした  $S=1/2$  四本鎖スピン梯子の基底状態相転移の理論的研究、日本物理学会（関西学院大学、2012年3月）
- II-33 利根川 孝・岡本清美・中野博生・坂井 徹・野村清英・鎗木 誠：異方的  $S=2$  XXZ 反強磁性鎖の基底状態相図：四次の一軸性オンサイト異方性の効果、日本物理学会（関西学院大学、2012年3月）
- III-1 坂井 徹：SPRING-8における超伝導の理論研究、SPRING-8 コンファレンス（東京、2011年11月）
- IV-1 Y. Maeno, S. Kittaka, T. Nomura, S. Yonezawa and K. Ishida: Evaluation of Spin-Triplet Superconductivity in  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ , J. Phys. Soc. Jpn. 81 (2012) 011009. (Special Topics)
- V-1 野村拓司・兼下英司：ニッケル酸化物のストライプ状態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、（富山、2011年9月）
- V-2 野村拓司：ストライプ状態のニッケル酸化物における共鳴非弾性 X線散乱の解析、JAEA コロキウム、（SPRING-8、2011年10月）
- V-3 T. Nomura: Theoretical Study of Resonant Inelastic X-Ray Scattering in Stripe-Ordered Nickelate, RIKEN-APW-APCTP Joint Workshop “Recent trends in condensed matter physics” (RIKEN, Saitama, January, 2012).
- V-4 T. Nomura and E. Kaneshita: Analysis of Resonant Inelastic X-ray Scattering in Stripe-Ordered Nickelate, J. Phys. Soc. Jpn. 81 (2012) 024707.
- V-5 野村拓司：鉄ニクタイトにおける共鳴非弾性 X線散乱の理論解析、JST-TRIP 三機関連携合同研究会「超伝導と磁性とフォノン」、（箱根、2012年1月）
- V-6 T. Nomura: Theoretical Study of Resonant Inelastic X-Ray Scattering in Stripe-Ordered Nickelate, JAEA Symposium on Synchrotron Radiation Research 2012 (SPRING-8, March, 2012).

## 科学研究費補助金等

- 1 科学研究費補助金（平成 23～26 年度）基盤研究(B) 課題番号：23340109  
研究課題 スピナノチューブにおけるスピン・電荷・カイラリティが創る新しい量子現象の理論  
研究代表者 坂井 徹
- 2 科学研究費補助金（平成 22～23 年度）特定領域研究 課題番号：22014012  
研究課題 カゴメ格子反強磁性体における新奇な異常量子現象の理論的・数値的研究  
研究代表者 坂井 徹
- 3 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
- 4 科学研究費補助金（平成 23～24 年度）若手研究 B 課題番号：23740280  
研究課題 スピン三重項超伝導体  $\text{Sr}_2\text{Ru}_4$  における  $d$  ベクトルの異方性と安定性の精密な解析  
研究代表者 野村拓司