

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。このうち最も単純であり、しかも量子効果が強い 3 本鎖スピナノチューブに着目し、この低次元性とチューブという特殊なトポロジーに起因した新現象を、理論的・計算科学的に探索している。この 3 本鎖スピナノチューブは、3 本鎖スピラダーと異なり、フラストレーションに起因したスピニングギャップを持つことが知られているが、断面の三角形を正三角形からずらす格子ひずりにみ対し、スピニングギャップが急激に消失する量子相転移が起きることが判明した。また、磁場をかけることにより、カイラル対称性が自発的に破れる量子相転移が起きることもわかってきた。

II 分子性導体のモデル化と多様な電子状態の理論

Theory on Modeling and Various Electronic States of Molecular Conductors

妹尾仁嗣

Seo, H.

分子性導体は金属絶縁体転移、電荷秩序化、磁気転移、超伝導転移と非常に多様な相転移現象を見せる。これらの系は一見複雑であるが、低エネルギーの物理現象を理解するのに比較的簡単な有効モデル、すなわちハバード型の 1 軌道モデルを用いればよいことがわかってきた。本研究では、このようなモデルにサイト間電子間相互作用や電子格子相互作用が加わった時に見せる電子状態を理論的に調べ、実験で見られている現象を説明することを目指している。また、有機化学者によって次々と従来の枠組みを超えた新物質が発見されているが、これらに対して上と同様なモデル化ができるのか、その結果新しい物理現象が現れるのか、第一原理計算によるバンド構造を元に低エネルギー有効モデルを導出し解析することも行っている。

Ⅲ ナノワイヤーマグネットのダイナミクス

Dynamics of Nanowire Magnets

坂井 徹
Sakai, T.

金属錯体が構成する量子スピンを一次元的に結合した系をナノワイヤーマグネットと呼び、自発磁化は持たないものの、一次元特有の長い緩和時間に起因したスローダイナミクスのため、一度磁化をそろえると長時間この磁化を保持する性質があり、ナノ磁石への応用面から注目されている。ナノワイヤーマグネットのひとつである、Ni と Mn の錯体が交互に並んだ擬一次元化合物は、スピン量子数 1 と 2 が交互に結合したフェリ磁性鎖である。この系の自発磁化のメカニズムを調べるため、数値シミュレーションにより理論的に解析した結果、異方性エネルギーの大きさに依存して、複数の自発磁化形成のメカニズムが考えられ、パラメータを変化させることにより、メカニズムの異なる自発磁化（あるいは磁化曲線のプラトー）間の量子相転移が起きることがわかった。現在、量子ゆらぎによって自発磁化が安定化する、言わば量子フェリマグネットが実現するかどうかについて検討している。

Ⅳ 擬一次元量子スピン系の磁場誘起スーパーソリッド

相・スピネマティック相

Field-Induced Supersolid and Spin Nematic Phases in Quasi-1D Quantum Spin Systems

坂井 徹
Sakai, T.

フラストレーションを持つ擬一次元反強磁性体に磁場をかけた場合、従来の磁化過程においてよく知られている磁場に垂直なネール秩序相とは別に、磁場に平行な非整合秩序が誘起される可能性があることが、我々の理論的解析から判明した。この非整合秩序が、従来のネール秩序と共存すれば、固体ヘリウムで観測されて注目されるスーパーソリッド相と等価になることから、この共存の可能性について現在検討している。

V 高温超伝導の理論的・数値的研究

Theoretical and Numerical Study on High-Tc Superconductivity

坂井 徹・野村拓司
Sakai, T., Nomura, T.

銅酸化物高温超伝導体や最近発見されて注目されている鉄ニクタイト高温超伝導体の性質について、強相関電子系の理論模型であるハバード・モデルや t - J モデルに基づく理論解析と数値解析により研究している。

発表論文 List of Publications

- I-1 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): Quantum phase transitions of the asymmetric three-leg spin tube, *Phys. Rev. B* 78 (2008) 184415-1-11.
- I-2 坂井徹: スピンナノチューブの異常量子物性、東北大学 G-COE 「分子系高次構造体化学国際教育研究拠点」第 2 回研究会「金属錯体の固体物性科学最前線 - 錯体化学と固体物性物理の新奇融合領域創成をめざして - 」(東北大学理学部、2008 年 12 月)
- I-3 T. Sakai: Quantum Phase Transitions of Spin Nanotubes, International Symposium on Anomalous Quantum Materials (Yasuda Auditorium, University of Tokyo, November 2008)
- I-4 坂井 徹: スピンチューブの量子相転移、科研費特定領域「異常量子物質の創製 - 新しい物理を生む新物質 -」成果報告会 (東京大学生産技術研究所、2009 年 1 月)
- I-5 坂井 徹: スピンナノチューブの量子相転移、特定領域研究「フラストレーションが創る新しい物性」成果報告会 (東大物性研、2009 年 1 月)
- I-6 T. Sakai: Quantum Phase Transition of Spin Nanotube, 1st International Conference of the Grand Challenge to Next-Generation Integrated Nanoscience (Odaiba, Tokyo, June 2008)
- I-7 T. Sakai: Quantum Phase Transitions in Three-Leg Spin Tube, Condensed Matter Seminar (ETH Zurich, June 2008)
- I-8 T. Sakai: Quantum Phase Transitions in Three-Leg Spin Tube, Theoretical Physics Seminar(University of Paris VI, July 2008)
- I-9 T. Sakai: Quantum Phase Transitions in Three-Leg Spin Tube, Theory Group Seminar(CNRS, Grenoble, July 2008)
- I-10 坂井 徹: スピンナノチューブ: 最近の理論的発展、日本物理学会第 64 回年会、領域 3、8、11 合同シンポジウム「スピンナノチューブとその周辺の異常量子物性」(立教大学、2009 年 3 月)

- I-11 T. Sakai: Quantum Phase Transition in the Spin Nanotube, Supercomputing in Solid State Physics (Kashiwa, February 2009)
- I-12 T. Sakai: Quantum Phase Transition of the Asymmetric Spin Tube, American Physical Society March Meeting (Pittsburgh, March 2009)
- I-13 坂井 徹: スピンチューブのカイラリティ誘起超伝導、東京理科大学理学部応用物理学科セミナー (東京理科大学理学部、2008年10月)
- I-14 坂井 徹・佐藤正寛 (理研)・奥西巧一 (新潟大理)・大塚雄一 (理研)・岡本清美 (東工大大院理工)・糸井千岳 (日大理工): 3本鎖スピンチューブの量子相転移、日本物理学会2008年秋季大会 (岩手大学、2008年9月)
- II-1 H. Seo, S. Ishibashi (産総研), Y. Okano, H. Kobayashi, A. Kobayshi (日大文理), H. Fukuyama (東理大理), and K. Terakura (北陸先端大) : Single-Component Molecular Metals as Multi-Band π -d Systems, J. Phys. Soc. Jpn. 77 (2008) No. 2, art. no. 023714 (4 pages).
- II-2 H. Seo, H. Yoshioka (奈良女子大), and Y. Otsuka (理研) : Mott insulating state in incommensurate molecular conductors, J. Phys.: Conf. Ser. 132 (2008) 012018 (6 pages).
- II-3 石橋章司 (産総研)・寺倉清之 (北陸先端大)・妹尾仁嗣・小林昭子 (日大文理): 単一分子性伝導体の構造と電子状態、固体物理第43巻12月号(2008年12月)、特集号「生物物質科学—金属を含む分子系を中心に」pp. 785-794.
- II-4 妹尾仁嗣・吉岡英生 (奈良女子大): $1/2$ -filled からずれた κ -ET₄Hg₃-xX₈ (X=Br,Cl) における不整合反強磁性状態、日本物理学会2008年秋季大会 (岩手大学、2008年9月)
- II-5 妹尾仁嗣・石橋章司 (産総研)・大塚雄一 (理研): beta-A₁/3V₂O₅ の有効モデルと金属絶縁体転移、日本物理学会第63回年次大会 (立教大学、2009年3月)
- II-6 H. Seo and Y. Motome (東大工) (invited talk) : Charge frustration and novel electron-lattice phase transition in molecular conductor DCNQI₂Ag, 5th International Workshop on Electronic Crystals (ECRYS-2008), Cargese France, August 2008
- II-7 H. Seo: Charge order, spin order and spin gap in coupled ladder system, International Symposium on Anomalous Quantum Materials (Yasuda Auditorium, University of Tokyo, November 2008)
- II-8 H. Seo: Incommensurate Mott Insulators in Molecular Conductors with nonintegral Stoichiometry, International Symposium on Molecular Conductors (July 2008)
- II-9 大塚雄一 (理研)・妹尾仁嗣: Ising スピンと結合した $1/4$ -filled ハバード鎖の電荷秩序 相関、日本物理学会第63回年次大会 (立教大学、2009年3月)
- II-10 大塚雄一 (理研)・妹尾仁嗣・吉岡英生 (奈良女子大): 1次元不整合モット絶縁体の量子モンテカルロ法による解析、日本物理学会2008年秋季大会 (岩手大学、2008年9月)

- II-11 吉岡英生 (奈良女子大)・妹尾仁嗣：充填率 1/4 からずれた 2 次元分子性導体の金属絶縁体転移—平均場近似による考察—、日本物理学会 2008 年秋季大会 (岩手大学、2008 年 9 月)
- II-12 Y. Otsuka (理研), H. Seo, Y. Motome (東大工), and T. Kato (東大物性研) : Phase competitions and coexistences in quasi-one-dimensional molecular conductors: exact diagonalization study, *Physica B* 404 (2009) 479 (3 pages).
- II-13 妹尾仁嗣：電荷秩序と電荷フラストレーション, ISSP ワークショップ「分子性導体の電荷揺らぎと非線形伝導」、東大物性研, 2008 年 5 月.
- II-14 妹尾仁嗣・求 幸年 (東大工)：分子性導体における電荷フラストレーションと新奇電子格子結合現象, 特定領域研究「フラストレーションが創る新しい物性」第二回トピカルミーティング「フラストレーションとマルチフェロイクス」、京都大学宇治地区、2008 年 6 月.
- II-15 妹尾仁嗣・吉岡英生 (奈良女子大)・大塚雄一 (理研)：分子性導体における非整合モット絶縁体、SPRING-8 シンポジウム「利用者懇談会理論研究会」、科学未来館, 2008 年 10 月.
- II-16 妹尾仁嗣・石橋章司 (産総研)・大塚雄一 (理研)：結合ラダー系 β バナジウムブロンズの金属絶縁体転移メカニズム、新しい物理を生む新物質若手の会第四回会議「新しい物質と新しい物理：若い世代からの提案」、箱根パークス吉野、2008 年 11 月.
- II-17 妹尾仁嗣：分子性導体におけるフラストレーションと「自己組織化」、有機固体若手の会「冬の学校 2008」、伊東温泉山喜旅館、2008 年 12 月.
- II-18 妹尾仁嗣：分子性導体におけるフラストレーション効果、「金属錯体の固体物性科学最前線 -錯体化学と固体物性物理の連携新領域創成をめざして-」、東北大学, 2008 年 12 月.
- II-19 妹尾仁嗣：電荷フラストレーション、 $t-d$ 系、光誘起相転移、新学術領域研究「分子自由度が拓く新物質科学」キックオフミーティング, 東大本郷キャンパス工学部 6 号館、2009 年 1 月.
- II-20 妹尾仁嗣：電荷秩序系の展開の方向性、新学術領域研究「分子自由度が拓く新物質科学」A03 班会議, 熱海温泉志ほみや旅館, 2009 年 2 月
- III-1 T. Tonegawa (福井工大工), K. Okamoto (東工大院理工), T. Sakai, 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, *Highly Frustrated Magnetism* (Braunschweig, September 2008)
- III-2 T. Sakai: Elementary Excitations and Dynamics of Nanowire Magnets, *Dynamics and Manipulation of Quantum Systems* (Koshiba Hall, University of Tokyo, October, 2008)
- III-3 利根川孝 (福井工大工)・岡本清美 (東工大院理工)・坂井徹・鏑木誠 (神戸大国際文化) : 一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 III、日本物理学会 2008 年秋季大会 (岩手大学、2008 年 9 月)

- IV-1 坂井 徹：擬一次元量子スピン系の磁場誘起量子相転移、特定領域「新しい環境下における分子性導体の特異な機能の探索」強相関電子物性・理論研究会（湯河原、2008）
- IV-2 坂井 徹：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、特定領域研究「スパークリーン物質で実現する新しい量子相の物理」A01&A05 班合同研究戦略会議（東大理・小柴ホール、2008年5月）
- IV-3 坂井 徹：異方的スピンラダー系の磁場誘起スピネマティック相、物性科学領域横断研究会「スピンの拓く物性科学の最前線」（東大・武田ホール、2008年11月）
- IV-4 T. Sakai: Field-induced spin nematic phase in anisotropic spin ladder with ring exchange, 特定領域研究「スパークリーン物質で実現する新しい量子相の物理」研究成果報告会（奈良県新公会堂、2008年12月）
- IV-5 坂井 徹：歪んだダイヤモンド鎖の磁場誘起非整合秩序、特定領域研究「フラストレーションが創る新しい物性」第3回トピカルミーティング（神戸大学百年記念会館六甲ホール、2008年12月）
- IV-6 T. Sakai and K. Okamoto（東工大院理工）：Ring Exchange Induced Magnetic Phenomena in Spin Ladder Systems, International Workshop on Quantum Critical Phenomena and Novel Phases in Superclean Materials (Honolulu, January 2009)
- IV-7 坂井 徹：新奇な量子スピントップ転移の観測を目指す理論的研究、特定領域研究「100テスラ領域の強磁場スピン科学」スタートアップ研究会（東大物性研、2008年5月）
- IV-8 T. Sakai: Field-induced quantum phase transitions in low-dimensional spin systems, JAEA Synchrotron Radiation Research Symposium: X-Ray and High Magnetic Field (SPring-8, Harima, March 2009)
- IV-9 T. Sakai, K. Okamoto（東工大院理工）, T. Tonegawa（福井工大工）：Two-Step Quantum Spin Flop Transition in Spin Ladders, International Conference on Low Temperature Physics (Amsterdam, August 2008)
- IV-10 T. Sakai, K. Okamoto（東工大院理工）, T. Tonegawa（福井工大工）：Field-Induced Incommensurate Order and Possible Supersolid in the $S=1/2$ Frustrated Diamond Chain, Highly Frustrated Magnetism (Braunschweig, September 2008)
- IV-11 T. Sakai: Anomalous spin flop transitions in 1D quantum spin systems, Theory Group Seminar (Institute Laue Langevin, Grenoble, September 2008)
- IV-12 T. Sakai: Topics of Low-Dimensional Quantum Spin Systems, 57th Fujihara Seminar, International Conference on New Prospects on Molecular Magnetism (Tomakomai, 2008年7月)
- IV-13 坂井 徹：擬一次元量子スピン系の異常量子現象、JAEA 量子ビーム応用研究部門交流会（SPring-8, August 2008）
- IV-14 坂井 徹・利根川孝・岡本清美：容易軸異方性を持つスピンラダー系の量子スピントップ転移、日本物理学会2008年秋季大会（岩手大学、2008年9月）
- IV-15 坂井 徹：異方的擬一次元量子スピン系の磁場誘起スピネマティック相、第5回強

- 磁場スピン科学シンポジウム(岡山大、2008年12月)
- IV-16 坂井 徹：歪んだダイヤモンド鎖の磁場誘起非整合秩序、量子スピン研究会（福井大学工学部、2009年2月）
- IV-17 坂井 徹・利根川孝（福井工大工）・岡本清美（東工大院理工）：歪んだダイヤモンド鎖の磁場誘起非整合秩序、日本物理学会第63回年次大会（立教大学、2009年3月）
- IV-18 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、日本物理学会第63回年次大会（立教大学、2009年3月）
- IV-19 中野博生・坂井 徹：量子スピンボンド交替鎖の相転移、日本物理学会第63回年次大会（立教大学、2009年3月）
- IV-20 中野博生・坂井 徹： $S=5/2$ ボンド交替鎖のエネルギーギャップ、日本物理学会2008年秋季大会（岩手大学、2008年9月）
- V-1 T. Sakai, Numerical Diagonalization Study on a Phonon-assisted Hole Pairing Mechanism of an Extended t-J Holstein Model, J. Phys.: Conf. Series. 108 (2008) 012026-1-4.
- V-2 坂井 徹：SPRING-8 周辺の理論研究、第12回SPRING-8シンポジウム（お台場、2008年11月）
- V-3 T. Sakai : Numerical diagonalization study on a phonon-assisted hole pairing mechanism of an extended t-J Holstein model, Novel Aspects of Phase Transitions with Long-range (Koshiba Hall, University of Tokyo, October 2008)
- V-4 野村拓司・池田浩章（京大理）： Sr_2RuO_4 における d ベクトルの異方性について、日本物理学会第63回年次大会（立教大学、2009年3月）
- V-5 野村拓司：鉄系オキシニクタイト超伝導の摂動理論による解析、日本物理学会2008年秋季大会（岩手大学、2008年9月）
- V-6 野村拓司：鉄ニクタイト超伝導の摂動論による研究、研究会「鉄ニクタイト物質系における超伝導ペア対称性と超伝導状態」、（東京、2009年1月）
- V-7 野村拓司：鉄系ニクタイト高温超伝導に関する話題、JAEA コロキウム、（SPRING-8、2008年7月）
- V-8 野村拓司：鉄系ニクタイト高温超伝導の理論的研究、JAEA 利用報告会（SPRING-8、2008年9月）
- V-9 野村拓司：鉄ニクタイト高温超伝導の摂動論による研究、京都大学凝縮系物理学セミナー、（2008年11月）
- V-10 野村拓司：鉄ニクタイト高温超伝導の摂動論による研究、兵庫県立大学合同セミナー、（2008年11月）

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 19～20 年度）特定領域研究 課題番号：19014019
研究課題 キャリア・ドーピングしたスピントロポロジーにおけるカイラリティ誘起超伝導の理論的研究
研究代表者 坂井 徹
- 5 科学研究費補助金（平成 20～24 年度）特定領域研究
研究課題 スピン自由度を利用した電子相制御
研究分担者 妹尾仁嗣
- 6 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・妹尾仁嗣・野村拓司
- 7 科学技術振興機構 戦略的創造推進事業（平成 20～25 年度）
研究課題 先端超短パルス光源による光誘起相転移現象の素過程の解明
研究分担者 妹尾仁嗣