

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伝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伝導の

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）にクーパー対を形成する従来の超伝導と異なり、スピンが平行（スピン三重項）にクーパー対を形成する超伝導体が存在する。その代表的なものが Sr_2RuO_4 というルテニウム酸化物である。スピン三重項超伝導体ではスピン一重項超伝導体と異なり、超伝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、エキゾチックな超伝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模型から出発して、場の理論的方法などの解析的手法を用い、どのようなクーパー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る。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、符号反転のない s 波超伝導の可能性もある。電子格子相互作用等を含めた研究を進展させる必要がある。

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 Strongly Correlated Electron Systems

野村拓司
Nomura, T.

SPring-8 などの大型放射光施設を利用して、遷移金属化合物など強相関電子系に対して共鳴非弾性 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。現在は、実験グループとも連携を図りながら、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解析を進めている。

発表論文 List of Publications

- I-1 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) 022052-1-4.
- 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, M. Sato, K. Okamoto, K. Okunishi and C. Itoi, Quantum Spin Nanotubes ---frustration, competing orders and criticalities, J. Phys.: Condens. Matter 22 (2010) 403201-1-13. (Topical review, invited).
- I-5 坂井 徹: スピンナノチューブの異常量子現象、北海道大学工学部材料科学談話会 (札幌、2010年6月)
- I-6 T. Sakai: Quantum Phase Transitions of the Spin Nanotubes, International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals(ICSM)(Kyoto, 2010年7月)
- I-7 T. Sakai: Exotic Quantum Phase Transitions in the $S=1/2$ Three-Leg Spin Tube, International Conference on Statistical Physics (Cairns Convention Center, Cairns, Australia, 2010年7月)
- I-8 安部祥平・岡本清美 (東工大院理工)・筒井健二(JAEA)・坂井 徹: 3本鎖スピラダマーの基底状態、JAEA量子ビーム応用研究部門研究交流会、(高崎シティギャラリー、2010年7月)
- I-9 坂井 徹: フラストレーション系における新しい量子現象の理論的研究、JAEA量子ビーム応用研究部門研究交流会、(高崎シティギャラリー、2010年7月)
- I-10 坂井 徹・佐藤正寛 (青山学院大理工)・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): 3本鎖スピナチューブの新しい磁場誘起量子相、日本物理学会2010年秋季大会 (大阪府立大、2010年9月)
- I-11 安部祥平・岡本清美 (東工大院理工)・筒井健二(JAEA)・坂井 徹: フラストレートした3本鎖スピラダマーの基底状態、日本物理学会2010年秋季大会 (大阪府立大、2010年9月)
- I-12 T. Sakai, M. Sato (青山学院大), K. Okunishi (新潟大理), K. Okamoto (東工大院理工), C. Itoi (日大理工): Exotic Quantum Phenomena of the Spin Nanotubes, Opening Symposium of QSSC Theory Forum (理研、和光、2010年9月)
- I-13 T. Sakai: Topological Aspects of the Quantum Spin Nanotube, International and Interdisciplinary Workshop on Novel Phenomena in Integrated Complex Sciences: from Non-living to Living Systems (Kyoto, 2010年10月)
- I-14 T. Sakai: Density Matrix Renormalization Group and Numerical Diagonalization

- Study on the Quantum Spin Nanotube in Magnetic Field, Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo (Tokyo, 2010 年 10 月)
- I-15 S. Abe, K. Okamoto, K. Tsutsui, T. Sakai: Numerical Diagonalization Study on the $S=1/2$ Frustrated Three-Leg Quantum Spin Ladder Systems, Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo (Tokyo, 2010 年 10 月)
- I-16 S. Abe, K. Okamoto (東工大院理工), K. Tsutsui(JAEA), T. Sakai: Numerical diagonalization study on the $S=1/2$ frustrated three-leg quantum spin ladder systems, International Conference on Frustration in Condensed Matter (Sendai, 2011 年 1 月)
- 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
- I-18 坂井 徹: スピンナノチューブの量子現象、東北大学理学部 GCOE 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と生物物性の連携新領域創成をめざして –」(仙台、2010 年 12 月)
- I-19 T. Sakai: Exotic Quantum Phenomena in the Quantum Spin Nanotubes, International Symposium "Nanoscience and Quantum Physics 2011" (Roppongi, 2011 年 1 月)
- I-20 T. Sakai: Exotic Quantum Critical Phenomena of the of the Spin Nanotubes -- Possible Chirality-Induced Superconductivity --, International Workshop on Novel Superconductors and Super Materials (Tokyo, 2011 年 3 月)
- II-1 坂井 徹: カゴメ格子反強磁性体の新奇な量子現象、東北大金研セミナー (仙台、2010 年 12 月)
- II-2 T. Sakai: Quantum critical phenomena in magnetization process of the Kagome and triangular lattice antiferromagnets, International Conference on Frustration in Condensed Matter (Sendai, 2011 年 1 月)
- II-3 H. Nakano and T. Sakai: Magnetization Process of the Kagome Lattice Antiferromagnet, *J. Phys. Soc. Jpn. (Letter)* 79 (2010) 053707-1-4.
- 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 坂井 徹・中野博生・磯田 誠 (香川大教育)・奥西巧一 (新潟大理) : カゴメ格子反強磁性体の異常量子現象の理論的・数値的研究、特定領域科研費「フラストレーションが創る新しい物性」立ち上げ全体会議、理研 (和光、2010年5月)
- II-11 T. Sakai and H. Nakano: Magnetization Process of Kagome Lattice Antiferromagnet, Magnetism and Superconductivity Meeting (Institut Laue Langevin, Grenoble, 2010年5月)
- II-12 T. Sakai and H. Nakano: Anomalous Magnetization Process of Kagome Lattice Antiferromagnet, New Trend in Quantum Magnetism (パリ南大、2010年5月)
- II-13 坂井 徹: カゴメ格子反強磁性体の磁気ダイナミクス、東大物性研短期研究会「外部場の時間操作と実時間物理現」(柏、2010年6月)
- II-14 坂井 徹: Anomalous Magnetization Process of Kagome Lattice Antiferromagnet、北海道大学理学部物性理論セミナー (札幌、2010年6月)
- II-15 坂井 徹: 擬二次元フラストレーション系の新奇な量子現象, JAEA 量子ビーム応用研究部門研究交流会・分科会「鉄系超伝導とフラストレーションの物性研究」分科会 (JAEA 高崎研、2010年6月)
- II-16 坂井 徹・中野博生: カゴメ格子反強磁性体の磁化ランプと XXZ 異方性、日本物理学会 2010 年秋季大会 (大阪府立大、2010年9月)
- II-17 中野博生・坂井 徹: 数値対角化大規模並列化計算によるカゴメ格子反強磁性体の磁化過程の研究、東大物性研・CMSI・次世代ナノ情報 合同研究会「計算物質科学の課題と展望」(柏、2010年11月)
- II-18 坂井 徹: 低次元量子スピン・フラストレーション系の新奇な現象、大阪大学理学部物理学科セミナー (大阪、2010年10月)
- II-19 T. Sakai and H. Nakano: Magnetization Ramp of the Kagome Lattice -An Application of Parallelized Lanczos Algorithm-, New Development of Numerical Simulations in Low-Dimensional Quantum Systems: From Density Matrix Renormalization Group to Tensor Network Formulations(Kyoto, 2010年11月)
- II-20 坂井 徹・中野博生: カゴメ格子反強磁性体の磁化ランプ、領域横断研究会 (東大武田ホ

- ール、2010年11月)
- II-21 坂井 徹: フラストレーション系の新奇な量子相転移、量子スピン系研究会 (福井大学、2010年12月)
- II-22 坂井 徹: カゴメ格子反強磁性体の奇妙な磁化過程、スプリングセミナー「物性物理の現状と展望」(自然学習村源じいの森、福岡、2011年2月)
- II-23 T. Sakai, H. Nakano, M. Isoda: Quantum Spin Dynamics of the Kagome Lattice Antiferromagnets, Dynamics and Manipulation of Quantum Systems (Tokyo, 2011年2月)
- II-24 T. Sakai and H. Nakano: Numerical study on the spin dynamics of the Kagome lattice antiferromagnet, International Workshop on Neutron Applications on Strongly Correlated Electron Systems (Tokai, 2011年2月)
- II-25 T. Sakai and H. Nakano: Magnetization Ramp of the Kagome Lattice Antiferromagnets, APS March Meeting (Dallas, 2011年3月)
- II-26 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-27 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-28 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, Physica C 470 (2010) S80-81.
- III-2 坂井 徹・馬越健次: 理論研究会の活動、SPring-8 合同コンファレンス (東京ステーションコンファレンス、2010年11月)
- IV-1 野村拓司: Sr₂RuO₄におけるスピン三重項超伝導の摂動論による研究: 超伝導機構、超伝導ギャップ、諸物理量の解析、名古屋大学工学部マテリアル理工学講座応用物理セミナー、(名古屋大学、2010年10月)
- V-1 T. Nomura: Perturbation Theory of Iron-Pnictide Superconductivity, Physica C 470 (2010) S365.
- VI-1 野村拓司: 鉄砒化物高温超伝導体における共鳴非弾性 X 線散乱の理論的研究、原子力機構量子ビーム応用研究部門交流会、(高崎、2010年7月)
- VI-2 T. Nomura: Effect of Electron Correlation on Resonant Inelastic X-Ray Scattering in Iron-Arsenide Superconductors, Opening Symposium of QS2C Theory Forum, (RIKEN, Saitama, September, 2010).

- VI-3 野村拓司：遷移金属化合物における共鳴非弾性 X 線散乱の理論、
第 5 回磁性分光研究会（京都大学化学研究所、2010 年 11 月）（招待講演）
- VI-4 野村拓司：鉄砒素系超伝導体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 3 月)

科学研究費補助金等

- 1 科学研究費補助金（平成 20～22 年度）基盤研究(B) 課題番号：20340096
研究課題 スピ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 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