

## 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 吸収端や L 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、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研究を行っている。

#### 発表論文 List of Publications

- I-1 T. Sakai, M. Sato, K. Okunishi, K. Okamoto and C. Itoi: Exotic Quantum Phase Transitions in the Spin Nanotubes, *J. Phys.: Conf. Ser.* 400 (2012) 032075-1-4.
- I-2 K. Okunishi, M. Sato, T. Sakai, K. Okamoto and C. Itoi: Spin-Chirality Separation and  $S_3$ -Symmetry Breakings in the Magnetization Plateau of the Quantum Spin Tube, *Phys. Rev. B* 85 (2012) 054416-1-6.
- I-3 T. Tonegawa, K. Okamoto and T. Sakai: Anomalous behavior of the spin gap of a spin-1/2 two-leg antiferromagnetic ladder with Ising-like rung interactions, *Physica Status Solidi. B*250 (2013) 575-578.
- I-4 T. Sakai: (招待講演) Spin Nanotubes, JAEA Synchrotron Radiation Research Symposium -Magnetism in Quantum Beam Science, SPring-8 (Sayo, 2013 年 3 月).
- I-5 坂井徹: 量子スピン系のトピックス、「京」物性セミナー 理化学研究所 計算科学研究機構 (神戸、2012 年 4 月).
- 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 T. Tonegawa and T. Sakai: Ground-State Phase Diagram of an Anisotropic  $S=2$  Antiferromagnetic Quantum Spin Chain: Existence of the Intermediate-D Phase, Seminar at Hungarian Academy of Science (Budapest, 2012 年 8 月)
- I-8 T. Sakai: Topological Aspects of the Quantum Spin Nanotubes, International Conference on Topological Quantum Phenomena (Nagoya, 2012 年 5 月)
- I-9 肘井敬吾・坂井徹: フラストレートした  $S=1/2$  三本鎖スピン梯子系の基底状態相図と中間相の性質、日本物理学会、(横浜国立大学、2012 年 9 月)
- I-10 岡本清美・利根川孝・古谷峻介・坂井 徹: イジング的桁相互作用をもつ  $S=1/2$  2 本脚反強磁性ラダーにおけるスピギャップの異常な振る舞い、日本物理学会、(横浜国立大学、2012 年 9 月)
- I-11 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 II、日本物理学会、(横浜国立大学、2012 年 9 月)
- I-12 岡本清美・利根川孝・坂井 徹・鎗木 誠: 異方的  $S=2$  スピン鎖の Intermediate-D 相における端状態、日本物理学会、(広島大学、2013 年 3 月)
- I-13 利根川孝・岡本清美・古谷峻介・坂井 徹: 異方的な脚および桁相互作用をもつ  $S=1/2$  ラダーにおける量子相転移とスピギャップ、日本物理学会、(広島大学、2013 年 3 月)
- II-1 T. Sakai and H. Nakano: Novel Field-Induced Quantum Phase Transition of the Kagome-Lattice Antiferromagnet, J. Phys.: Conf. Ser. 400 (2012) 032076-1-4.
- II-2 S. Okubo, T. Ueda, H. Ohta, W. Zhang, T. Sakurai, N. Onishi, M. Azuma, Y. Shimakawa, H. Nakano and T. Sakai: Dzyaloshinsky-Moriya interaction and field-induced magnetic order in an antiferromagnetic honeycomb lattice compound  $\text{Bi}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$  studied by high-field electron spin resonance, Phys. Rev. B 86 (2012) 140401(R)-1-4.
- II-3 T. Sakai and H. Nakano: Quantum Critical Magnetization Behaviors of the Kagome- and Triangular-Lattice Antiferromagnets, Physica Status Solidi. B250 (2013) 579-582.
- II-4 H. Nakano, S. Todo and T. Sakai: Long-Range Order of the Three-Sublattice Structure in the  $S=1$  Heisenberg Antiferromagnet on the Spatially Anisotropic Triangular Lattice, J. Phys. Soc. Jpn. (Letters) 82 (2013) 043715-1-5.
- II-5 中野博生・藤堂眞治・坂井 徹: 2次元フラストレート系の計算科学的研究, スーパーコンピューティングニュース 15 Special Issue 1 (2013) 33-45.
- II-6 T. Sakai: (招待講演) Magnetism of Frustrated Quantum Spin Systems, International Workshop on Development of Functional Molecule-Based Magnetic Materials, Institute of Material Research, Tohoku University (Sendai, 2013 年 2 月)
- II-7 H. Nakano and T. Sakai: (招待講演) Numerical Diagonalization Study on the

- Kagome-Lattice Antiferromagnets, JAEA Synchrotron Radiation Research Symposium -Magnetism in Quantum Beam Science, SPring-8 (Sayo, 2013 年 3 月).
- II-8 T. Sakai: Critical magnetization behavior of the kagome- and triangular-lattice quantum antiferromagnets, Seminar at Budapest Institute of Technology (Budapest, 2012 年 8 月).
- II-9 M. Isoda, H. Nakano and T. Sakai: A Consistent Description of Magnetic Properties of the Triangulated-Kagome System  $\text{Cu}_9\text{X}_2(\text{cpa})_6 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ , J. Phys. Soc. Jpn. 81 (2012) 053703-1-4.
- II-10 T. Sakai and H. Nakano: Novel Field-Induced Quantum Phase Transition of the Kagome-Lattice Antiferromagnets, Highly Frustrated Magnetism(Hamilton, Canada, 2012 年 6 月)
- II-11 T. Sakai and H. Nakano: Novel Field-Induced Quantum Phase Transition of the Kagome-Lattice Antiferromagnets(中国・武漢、2012 年 7 月)
- II-12 T. Sakai and H. Nakano: Quantum Critical Magnetization Behaviors of the Kagome-Lattice Antiferromagnets, 磁性国際会議 ICM (韓国・釜山、2012 年 7 月)
- II-13 T. Sakai and H. Nakano: Quantum critical magnetization behaviors of kagome- and triangular-lattice antiferromagnets, 国際会議 Quantum Criticality and Novel Phenomena、ドレスデン三王教会(Dresden, 2012 年 8 月)
- II-14 坂井 徹、中野博生：S=1/2 歪んだ三角格子反強磁性体におけるランダムネスの効果、日本物理学会、(横浜国立大学、2012 年 9 月)
- II-15 坂井 徹：フラストレーション系のスピン液体、東北大学卓越大学院研究会「金属錯体の固体物性最前線 -金属錯体と固体物性物理と生物物性の連携新領域を目指して-」(仙台、2013 年 1 月)
- II-16 T. Sakai and H. Nakano: Randomness effects on the distorted triangular-lattice antiferromagnets、アメリカ物理学会マーチミーティング (Baltimore, 2013 年 3 月)
- II-17 坂井 徹・中野博生:カゴメ格子反強磁性体の磁化過程についての数値対角化による研究、日本物理学会 (広島、2013 年 3 月)
- II-18 肘井敬吾・坂井 徹：4 体相互作用を持つ S=1/2 量子スピン梯子系の基底状態相転移、日本物理学会 (広島、2013 年 3 月)
- II-19 中野博生・坂井 徹：三角格子反強磁性体のスピン波励起、日本物理学会、(横浜国立大学、2012 年 9 月)
- II-20 渡辺 健・川村 光・坂井 徹・中野博生・大久保毅：三角格子上の S=1/2 ランダム・ハイゼンベルグ反強磁性体の磁気秩序化、日本物理学会 (広島、2013 年 3 月)
- II-21 中野博生・藤堂眞治・坂井 徹：空間異方性を持つ三角格子 S=1 ハイゼンベルク反強磁性体、日本物理学会 (広島、2013 年 3 月)
- III-1 坂井 徹：高温超伝導体の共鳴非弾性 X 線散乱の理論、SPring-8 シンポジウム、大阪大学

コンベンションセンター（吹田、2012年8月）

- IV-1 野村拓司・池田浩章：第一原理計算に基づく  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  の有効模型と超伝導状態の解析、  
日本物理学会（横浜、2012年9月）
- IV-2 河田勝利・野村拓司：三角格子ハバード模型における超伝導の対称性、  
日本物理学会（横浜、2012年9月）
- V-1 T. Nomura, Study of Electron Correlations and Orbital Excitations in Iron Pnictide on  
the Basis of RIXS Analysis, Informal Meeting on RIXS (Yukawa Institute for  
Theoretical Physics, Kyoto, June, 2012).
- V-2 I. Jarrige, T. Nomura, K. Ishii, H. Gretarsson, Y.J. Kim, J. Kim, M. Upton, D. Casa, T.  
Gog, M. Ishikado, T. Fukuda, M. Yoshida, J.P. Hill, X. Liu, N. Hiraoka, K.D. Tsuei,  
and S. Shamoto: Resonant inelastic x-ray scattering study of charge excitations in  
superconducting and nonsuperconducting  $\text{PrFeAsO}_{1-y}$ , Phys. Rev. B 86, 115104  
(2012).
- V-3 野村拓司：鉄系高温超伝導体における共鳴非弾性 X 線散乱の理論研究、  
日本原子力研究開発機構、量子ビーム応用研究部門交流会（奈良、2012年7月）
- V-4 野村拓司：鉄系高温超伝導体における共鳴非弾性 X 線散乱の研究、  
日本原子力研究開発機構、量子ビーム応用研究部門成果報告会（東京、2013年3月）

## 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 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