

## 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 銅酸化物高温超伝導体の理論的研究

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

坂井 徹  
Sakai, T.

銅酸化物高温超伝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、銅酸化物高温超伝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伝導の理論的研究

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

野村拓司  
Nomura, T.

銅酸化物高温超伝導や鉄系高温超伝導に代表される強相関電子系超伝導では、従来の電子格子相互作用による超伝導とは定性的に異なる新奇な超伝導機構がはたらき、特異な超伝導状態が実現している。これらの新奇な超伝導の発現機構とその特異な超伝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伝導、鉄ニクタイトにおける高温超伝導、有機物超伝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伝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モデルから出発して、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 K. Hijii and T. Sakai, Ground-state phase diagram of an  $S=1/2$  two-leg Heisenberg spin ladder system with negative four-spin interaction, *Phys. Rev. B* 88 (2013) 104403-1-8.
- I-2 K. Okunishi, M. Sato, T. Sakai, K. Okamoto and C. Itoi, Quantum Phase Transitions in  $1/3$  Plateau of the Quantum Spin Tube, *J. Korean Phys. Soc.* 63 (2013) 596-600.
- 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.* B250 (2013) 575-578.
- I-4 T. Sakai and K. Okamoto: Exotic Quantum Phenomena in the Spin Nanotubes, *JPS Conf. Proc.* 1 (2014) 012025-1-4.
- I-5 T. Sakai and K. Okamoto: Exotic Magnetism of the Quantum Spin Nanotube, *JPS Conf. Proc.* 2 (2014) 010208-1-4.
- I-6 T. Sakai: (招待レクチャー) Topological Aspects of the Quantum Spin Nanotubes, *ISSP International Workshop "Emergent Quantum Phases in Condensed Matter"* (柏、2013年6月)
- I-7 T. Sakai: Exotic Quantum Phenomena in the Spin Nanotubes、アジア太平洋物理学会

(APPC12) (幕張、2013年7月)

- I-8 T. Sakai: Quantum Spin Nanotubes, International Symposium on Science Explored by Ultra Slow Muon(Matsue, 2013年8月)
- I-9 坂井徹 : (招待講演) スピンナノチューブの物理、日本物理学会 2013年秋季大会 (徳島、2013年9月)
- I-10 肘井敬吾・坂井徹 : 4体相互作用を持つ  $S=1/2$  量子スピン梯子系における基底状態相図、日本物理学会 2013年秋季大会 (徳島、2013年9月)
- I-11 T. Sakai: Quantum Spin Nanotubes, FIRST-QS2C Workshop on Emergent Phenomena of Correlated Materials(Shinagawa, 2013年11月)
- I-12 T. Sakai: Exotic Quantum Phenomena of the Spin Nanotubes, ミュンヘン大学・理論ナノ物理学部・物性理論セミナー(ミュンヘン、2013年11月)
- I-13 T. Sakai: Spin Nanotubes, 14th REIMEI Workshop on Spin Current and Related Phenomena (Institut Laue-Langevin, Grenoble, 2014年2月)
- II-1 T. Sakai and H. Nakano: Novel Field-Induced Quantum Phase Transition of the Kagome-Lattice Antiferromagnet, J. Korean Phys. Soc. 63 (2013) 601-604.
- II-2 T. Sakai and H. Nakano: Quantum Critical Magnetization Behaviors of the Kagome- and Triangular-Lattice Antiferromagnets, J. Low. Temperature Phys. 170 (2013) 255-260.
- 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 H. Nakano and T. Sakai: The Two-Dimensional  $S=1/2$  Heisenberg Antiferromagnet on the Shuriken Lattice -a Lattice Composed of Vertex-Sharing Triangles-, J.Phys. Soc. Jpn. (Letters) 82 (2013) 083709-1-4.
- II-7 K. Watanabe, H. Kawamura, H. Nakano and T. Sakai: Quantum Spin-Liquid Behavior in the Spin-1/2 Random Heisenberg Antiferromagnet on the Triangular Lattice, J. Phys. Soc. Jpn. 83 (2014) 034714-1-6.
- II-8 H. Nakano, M. Isoda and T. Sakai: The Magnetization Process of the  $S=1/2$  Heisenberg Antiferromagnet on the Cairo Pentagon Lattice with Distortion, J. Phys. Soc. Jpn. 83 (2014) 053702-1-4.
- II-9 坂井徹 : Magnetism of Frustrated Quantum Spin Systems、北海道大学理学部物理学科セミナー (札幌、2013年6月)

- II-10 T. Sakai and H. Nakano: Anomalous Quantum Magnetization Behaviors of the Kagome and Triangular Lattice Antiferromagnets, International Conference on Strongly Correlated Electron Systems(Tokyo, 2013 年 8 月)
- II-11 坂井徹 : フラストレーション系の磁化過程に見られる新奇な量子相の理論、研究会「強磁場 X 線・中性子実験の進展」(徳島、2013 年 9 月)
- II-12 T. Sakai: Magnetic Properties of Two-Dimensional Frustrated Quantum Systems, パリ第 6 大学凝縮系理論研究所セミナー(Paris, 2013 年 10 月)
- II-13 T. Sakai: Magnetic properties of 2D frustrated quantum spin systems, トゥールーズ大学理論物理研究所セミナー(Toulouse, 2013 年 10 月)
- II-14 T. Sakai: Magnetization process of the kagome- and triangular-lattice antiferromagnets, ハノーバー大学・理論物理学研究所・理論物理学セミナー(Hannover, 2013 年 11 月)
- II-15 T. Sakai: Magnetization process of the kagome- and triangular-lattice antiferromagnets, ドルトムント工科大学・物理学部・理論物理学セミナー(Dortmund, 2013 年 11 月)
- II-16 T. Sakai: Magnetic Properties of two-dimensional frustrated quantum spin systems ゲッティンゲン大学・理論物理学研究所・物性理論セミナー(Goettingen,, 2013 年 12 月)
- II-17 T. Sakai: (招待講演) Magnetization process of the kagome- and triangular-lattice antiferromagnets, Nanomagnet Symposium(Bielefeld, 2013 年 12 月)
- II-18 T. Sakai: Anomalous magnetization behaviors of kagome-lattice antiferromagnet, International Workshop on Frustration and Topology in Condensed Matter Physics (台南、2014 年 2 月)
- II-19 坂井徹 : 二次元フラストレーション系の磁性、先端基礎研究センター・物性セミナー (東海、2014 年 2 月)
- II-20 T. Sakai and H. Nakano: Novel Spin Flop Transition in S=1/2 Square-Kagome-Lattice Antiferromagnet, アメリカ物理学会マーチ・ミーティング (Denver, 2014 年 3 月)
- II-21 坂井徹 : スピン 1/2 籠目格子反強磁性体の理論、日本物理学会第 69 回年次大会・領域 3, 8, 11 合同シンポジウム (東海大学、2014 年 3 月)
- III-1 坂井 徹 : 量子ビームと計算物性科学、SPRING-8 シンポジウム (京都、2013 年 9 月)
- III-2 坂井徹 : 量子ビーム計測と物質設計、JST ナノテクノロジー・材料分野俯瞰ワークショップ (JST 市ヶ谷本部、2014 年 2 月)
- IV-1 野村拓司 : 微視的理論から見た  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  の超伝導対称性 (含 Review)、第 12 回集中連携研究会「 $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  の超伝導対称性とトポロジカル超伝導」(新学術領域研究「対称性の破れた凝縮系におけるトポロジカル量子現象」主催) (京都、2013 年 6 月)

- IV-2 野村拓司、池田浩章： 第一原理計算で求めた電子構造に基づく  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  の超伝導対称性について、日本物理学会（徳島、2013年9月）
- IV-3 河田勝利・野村拓司： カゴメ格子ハバード模型における超伝導対称性、日本物理学会（徳島、2013年9月）
- IV-4 野村拓司： 第一原理計算で求めた電子構造に基づくルテニウム酸化物超伝導の理論的研究、JAEA コロキウム (SPRING-8、2013年11月)
- V-1 野村拓司： 第一原理電子構造計算に基づく共鳴非弾性 X 線散乱の理論研究、量子ビーム応用研究部門部門交流会（東海、2013年7月）
- V-2 野村拓司：  $\text{KCuF}_3$  の Cu-K 吸収端における共鳴非弾性 X 線散乱の解析、日本物理学会（徳島、2013年9月）
- V-3. 野村拓司： 新型高温超伝導体の電子励起の解明－鉄系高温超伝導体における共鳴非弾性 X 線散乱スペクトルの観測－（日本語版）、Elucidation of Electronic Excitation in Novel High-Tc Superconductor－Resonant Inelastic X-ray Scattering Study of Iron-Pnictide Superconductor（英語版）、JAEA 成果普及情報誌 2013（JAEA R&D Review）、5-10 (p. 71).
- V-4 I. Jarrige, T. Nomura et al. : Resonant inelastic x-ray scattering study of charge excitations in an archetypical iron-pnictide high-Tc superconductor, Research Highlight, ANNUAL REPORT JAEA QuBS 2013.

## 科学研究費補助金等

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 スピン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