

I 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、 Sr_2RuO_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に興味を持っている。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、どのような超伝導状態が実現するのか理論的に研究している。

II 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 SPring-8 等の大型放射光施設を利用して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

計算方法を開発して、銅酸化物、鉄ニクタイト高温超伝導体など、これまでいくつかの遷移金属化合物での散乱スペクトルを解析してきた。最近、第一原理バンド計算に基づく電子構造を用いて散乱スペクトルをより精密に解析し、その背後に隠された新奇な電子励起を探索している。実験グループとの連携も図りながら理論研究を実施している。

III 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。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ギャップ・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。

IV 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。

V 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ん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。

発表論文 List of Publications

- II-1 T. Nomura : Microscopic Analysis of Resonant Inelastic X-Ray Scattering in Orbital-Ordered KCuF₃, J. Phys. Soc. Jpn. 83, 064707 (2014) 064707
- II-2 野村拓司 : 共鳴非弾性 X 線散乱における偏光方向依存性の微視的理論研究、量子ビーム応用研究センター交流会 (姫路、2014 年 8 月)
- II-3 野村拓司 : 鉄ニクタイト高温超伝導系における共鳴非弾性 X 線散乱、量子ビーム応用研究センター交流会分科会 (SPring-8、2014 年 8 月)
- II-4 野村拓司 : 電荷-軌道秩序系における (K 端) 共鳴非弾性 X 線散乱、SPRUC 理論研究会 (東京、2014 年 9 月)
- II-5 野村拓司 : 層状銅酸化物における銅 L 吸収端共鳴非弾性 X 線散乱の 理論的研究、JAEA 放射光科学シンポジウム 2015 (SPring-8、2015 年 3 月)
- II-6 野村拓司 : 擬 2 次元銅酸化物における銅 L 吸収端共鳴非弾性 X 線散乱の解析、日本物理学会 (東京、2015 年 3 月)
- III-1 T. Sakai and K. Okamoto: Exotic Quantum Phenomena in the Spin Nanotubes, JPS Conf. Proc. 1 (2014) 012025-1-4
- III-2 T. Sakai and K. Okamoto: Exotic Magnetism of the Quantum Spin Nanotube, JPS Conf. Proc. 2 (2014) 010208-1-4
- III-3 T. Sakai, H. Nakano and K. Okunishi: Exotic Quantum Phase Transition of the Nanotube, J. Phys.: Conf. Ser. 568 (2014) 042024-1-5

- III-4 T. Sakai, H. Nakano and K. Okunishi: Novel Field Induced Quantum Phase Transition of Kagome Lattice Antiferromagnet, International Conference on Low Temperature Physics (ブエノスアイレス、アルゼンチン、2014年8月)
- III-5 坂井徹・中野博生・奥西巧一: $S=1/2$ 三本鎖スピントューブの量子相転移、日本物理学会秋季大会(中部大学、2014年9月)
- III-6 笠原稔弘・坂井徹・肘井敬吾: リング交換相互作用のあるスピントューブの数値シミュレーション研究、日本物理学会秋季大会(中部大学、2014年9月)
- III-7 利根川孝・岡本清美・引原俊哉・坂井徹・森重順平・野村清英: 桁相互作用が交代した異方的 $S=1/2$ スピラダの基底状態 IV、日本物理学会秋季大会(中部大学、2014年9月)
- III-8 岡本清美・利根川孝・坂井徹・森重順平・野村清英: ボンド反転対称性のない場合のレベルスペクトロスコピー、日本物理学会秋季大会(中部大学、2014年9月)
- III-9 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についての数値的研究、日本物理学会秋季大会(中部大学、2014年9月)
- III-10 坂井徹・笠原稔弘・中野博生・肘井敬吾・奥西巧一・岡本清美: $S=1/2$ 三本鎖スピントューブの量子相転移、日本物理学会(早稲田大、2015年3月)
- III-11 利根川孝・引原俊哉・岡本清美・坂井徹: 桁相互作用が交代した異方的 $S=1/2$ スピラダのゼロ磁場及び有限磁場基底状態、日本物理学会(早稲田大、2015年3月)
- III-12 肘井敬吾・坂井徹・宮下精二・太田仁: $S=1/2$ 三量体量子スピン鎖における動的感受率の数値的研究、日本物理学会(早稲田大、2015年3月)
- III-13 坂井徹、スピントューブ、東北大学物性コロキウム(東北大学理学部、2014年7月)
- III-14 T. Sakai: Spin Nanotubes, International Meeting on Spin in Organic Semiconductors (イーグレ姫路、2014年10月)
- IV-1 中野博生・坂井徹: かごめ格子反強磁性体の磁化過程の再検討、日本物理学会秋季大会(中部大学、2014年9月)
- IV-2 カゴメ格子ハイゼンベルグ反強磁性体の磁場中量子状態、日本物理学会(早稲田大、2015年3月)
- IV-3 坂井徹: シンポジウム講演「はじめに」、日本物理学会(早稲田大、2015年3月)
- IV-4 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
- IV-5 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
- IV-6 H. Nakano, T. Sakai and Y. Hasegawa: A Spin Flop Phenomena in the Magnetization Process of Two-Dimensional Antiferromagnets without Anisotropy in Spin Space, J. Phys. Soc. Jpn. 83 (2014) 084709-1-7

- IV-7 M. Isoda, H. Nakano and T. Sakai: Orthogonal Dimer, Disordered, and Ferrimagnetic States in the Spin-1/2 Heisenberg Antiferromagnet on the Cairo Pentagon Lattice, J. Phys. Soc. Jpn. 83 (2014) 084710-1-7.
- IV-8 H. Nakano and T. Sakai: Anomalous Behavior of the Magnetization Process of the S=1/2 Kagome-Lattice Heisenberg Antiferromagnet at One-Third Height of the Saturation, J. Phys. Soc. Jpn. 83 (2014) 104710-1-7.
- IV-9 H. Nakano and T. Sakai: Anomalous Behavior of the Magnetization Process of the S=1/2 Kagome-Lattice Heisenberg Antiferromagnet at One-Third Height of the Saturation, J. Phys. Soc. Jpn. 83 (2014) 104710-1-7.
- IV-10 H. Nakano and T. Sakai: Instability of a ferromagnetic state of a frustrated S=1/2 Heisenberg antiferromagnet in two dimensions, Jpn. J. Appl. Phys. (Rapid Communication) 54 (2015) 030305-1-4
- IV-11 H. Nakano and T. Sakai: Magnetization Process of the Spin-S Kagome-Lattice Heisenberg Antiferromagnet, J. Phys. Soc. Jpn. 84 (2015) 063705-1-4.
- IV-12 坂井徹：磁気フラストレーション系の量子スピン液体、JAEA コロキウム (SPring-8、2014年5月)
- IV-13 坂井徹：はじめに、シンポジウム「量子スピン系の物理」(中央大学後楽園キャンパス、2014年5月)
- IV-14 T. Sakai: Novel Field-Induced Quantum Phase Transitions in the Kagome-Lattice Antiferromagnet and Related Systems, 東大物性研国際ワークショップ(柏、2014年6月)
- IV-15 T. Sakai and H. Nakano: Field-Induced Quantum Critical phenomena in Kagome-Lattice Antiferromagnet, Highly Frustrated Magnetism(HFM)(Cambridge UK, 2014年7月)
- IV-16 T. Sakai and H. Nakano: Novel Field Induced Quantum Phase Transition of Kagome Lattice Antiferromagnet, International Conference on Low Temperature Physics(LT)(アルゼンチン、ブエノスアイレス、2014年8月)
- IV-17 T. Sakai: Magnetization Process of the S=1/2 Kagome-Lattice Antiferromagnet and Related Systems, ラプラタ大学セミナー (アルゼンチン、ラプラタ、2014年8月)
- IV-18 坂井徹：SPring-8 と計算科学の連携、SPring-8 理論研究会 (SPRUC) (東京大学理学部、2014年9月)
- IV-19 坂井徹：量子スピン液体、物性科学シンポジウム (西播磨しばさんセンター、姫路、2014年10月)
- IV-20 T. Sakai: Singlet-Triplet Transition of ESR in Gapped Spin Systems, Asia-Pacific EPR/ESR Society、International EPR(ESR) Society 合同シンポジウム(東大寺文化センター、奈良、2014年11月)
- IV-21 A Quantum Phase Transition of the Distorted Kagome Lattice Antiferromagnet

in Magnetic Field, Novel Quantum States in Condensed Matter 2014 (京都大学基礎物理学研究所、2014年11~12月)

IV-22 坂井徹：フラストレート磁性体の計算科学的研究、第5回CMSI研究会(仙台、2014年12月)

IV-23 坂井徹：スピンプラストレーション系の磁場誘起量子現象、東北大学リーディング大学院研究会(東北大学理学部、2015年2月)

V-1 坂井徹：計算物理学(共立出版、2014年10月刊行)

大学院物質理学研究科

博士前期課程

笠原稔弘：スピンプラストレーションの数値シミュレーション研究

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 スピンプラストレーションにおけるスピン・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