

## I 強相関電子系における磁性と超伝導の理論的研究

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

野村拓司  
Nomura, T.

銅酸化物高温超伝導体や鉄系高温超伝導体に代表される強相関電子系では、しばしば非自明な磁気秩序や新奇な超伝導状態が実現している。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、どのような磁性状態、超伝導状態が実現するのか理論的に研究している。具体的に、磁性に関しては、種々の遷移金属化合物を対象としてスパイラル秩序やストライプ秩序などの特殊な電荷-スピン配列を理論計算に基づいて説明し、さらにスピン波などの磁気励起スペクトルの計算も行っている。超伝導に関しては、従来の電子格子相互作用による機構とは定性的に異なる電子相関効果に由来する超伝導機構に基づいて、新奇な超伝導状態が実現することを説明する。さらにその特殊な超伝導状態における諸物性の理論研究も行っている。

## II 強相関電子系の X 線分光における電子励起の理論的研究

### Theoretical Study of Electron Excitations in X-ray Spectroscopies of Strongly Correlated Electron Systems

野村拓司  
Nomura, T.

遷移金属化合物などの強相関電子系における電子状態や電子励起ダイナミクスを明らかにする目的で、X線吸収 (XAS)、X線磁気円二色性 (XMCD)、共鳴非弾性 X線散乱 (RIXS)、X線磁気円偏光発光 (XMCPe) などのさまざまな X線分光実験が 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線を用いた固体 X線内殻分光では、それぞれの分光法に応じて特徴的な固体電子の励起スペクトルが観測される。我々は場の量子論に基づく独自の理論と計算方法を開発して、遷移金属化合物に対する上記の X線分光学スペクトルを解析してきた。最近では、バンド計算に基づく精緻な電子構造を用いてスペクトルを精密に解析し、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。

## 発表論文 List of Publications

- II-1 Akihiro Koide, Takuji Nomura, Toshiya Inami: Effects of conduction electron excitation on x-ray magnetic circularly polarized emission in itinerant ferromagnets, *Phys. Rev. B* 102, 224425 (2020). (Editors' Suggestion)
- II-2 小出 明広、野村 拓司、稲見 俊哉: X線磁気円偏光発光における発光 X 線の角度依存性、日本物理学会 2020 年秋季大会、2020/9/8、オンライン開催。
- II-3 Takuji Nomura: Theoretical Analysis of Resonant Inelastic X-ray Scattering in Iron-Based Superconductor FeSe, 4th QST International Symposium-Innovation from Quantum Materials Science-, National Institutes for Quantum and Radiological Science and Technology (QST), 2020/11/4, Online.
- II-4 Akihiro Koide, Takuji Nomura, Toshiya Inami: Theoretical investigation of x-ray magnetic circularly polarized emission in metallic iron, 4th QST International Symposium-Innovation from Quantum Materials Science-, National Institutes for Quantum and Radiological Science and Technology (QST), 2020/11/4, Online.