

Quantum Simulation Science

量子シミュレーション科学

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線光電子分光(XPS)、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やNanoTerasu等の最先端の放射光施設において盛んに実施されている。遷移金属の内殻X線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線分光光学スペクトルを解析してきた。最近では、第一原理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

- I-1 Shingo Haruna, Takuji Nomura, Hirono Kaneyasu: Possible Unconventional s-Wave Pairing with Point-Node-Like Gap Structure in UTe_2 , Journal of the Physical Society of Japan (JPSJ) **93**, 063701 (2024).
- I-2 Shingo Haruna, Takuji Nomura, Hirono Kaneyasu: Possibility of s-wave pairing state with point-node-like gap in UTe_2 , The 22nd International Conference on Magnetism (ICM2024), Bologna, Italy, 2024/7/2.
- I-3 春名信吾、土井洸輝、野村拓司、兼安洋乃： UTe_2 における摂動論によるサイト間 s 波ペアリングの可能性、日本物理学会第 79 回年次大会、日本物理学会（札幌、2024 年 9 月）。
- II-1 Toshiaki Ae, Takuji Nomura: Analysis of x-ray magnetic circular dichroism in the half-metallic ferromagnet CrO_2 , Physical Review B **109**, 184414 (2024).
- II-2 Hiroki Kobayashi, Takuji Nomura: Effects of electron-hole pair excitations on $K\alpha$ X-ray emission spectra for the 3d transition metals、第 7 回 QST 国際シンポジウム～量子技術基盤がつなげる未来社会～、量子科学技術研究開発機構（高崎、2024 年 7 月）。
- II-3 Hiroki Kobayashi, Takuji Nomura: Effect of multiple electron-hole pair excitations on x-ray magnetic circularly polarized emission, The 22nd International Conference on Magnetism (ICM2024), Bologna, Italy, 2024/7/3.
- II-4 小林弘樹、野村拓司： 3d 遷移金属の $K\alpha$ 端 X 線発光過程における電子正孔対励起の効果、第 16 回日本放射光学会若手研究会、日本放射光学会（小田原、2024 年 9 月）。
- II-5 小林弘樹、野村拓司： 3d 遷移金属における $K\alpha$ 端 X 線発光スペクトルに対する電子正孔対励起の効果、日本物理学会第 79 年次大会、日本物理学会（札幌、2024 年 9 月）。
- II-6 小林弘樹、野村拓司： 3d 遷移金属における X 線磁気円偏光発光に対する電子正孔対励起の効果、第 38 回日本放射光学会年会放射光科学合同シンポジウム、第 38 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム組織委員会（筑波、2025 年 1 月）。

物質科学専攻

博士後期課程

小林弘樹： 3d 遷移金属の X 線発光過程における電子正孔対励起の効果