

# 物性研究所セミナー

標題：理論インフォーマルセミナー：物性理論研究部門春季学会発表報告会

日時：2013年4月5日(金) 午後1時30分～午後5時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

要旨：13時30分-13時45分 本山 裕一 (藤堂研 D3)

「二次元系における Z2 ベリー位相のモンテカルロ計算」

13:45-14:00 Nie Wenxing (押川研 D3)

“Ground-state Energies of Spinless Free Fermions and Hard-Core Bosons on Infinite Lattice”

14:00-14:15 安田 真也 (藤堂研 D1)

「異方性制御下における量子相転移の精密計算」

14:15-14:30 正木 晶子 (川島研 PD)

「ワームアルゴリズムの並列化」

14:30-14:45 Hao Zhang (常次研 D3)

“Exotic disordered phases in the quantum J1-J2 model on the honeycomb lattice”

14:45-15:00 坂下 あい (野口研 D3)

「球状ベシクルに内包されたベシクルの形状決定機構の解明」

15:00-15:15 Hao Wu (野口研 D3)

“Polymer-induced entropic effects on mechanical properties of biomembranes and microdomain separation”

15:15-15:30 休憩

15:30-15:45 鈴木 貴文 (加藤研 M2)

「周期的に変動するゲート電圧下での量子ドットの非平衡電流とショットノイズ」

15:45-16:00 桐井 智弘 (川島研 M2)

「スピングラスにおけるドロップレット描像のトイモデルの臨界現象」

16:00-16:15 多羅間 充輔 (野口研 D2)

「やわらかな自己推進粒子の自転運動」

16:15-16:30 五十嵐 亮 (CMSI 研究員)

「ALPS/diagonalization の OpenMP/MPI 並列化」

16:30-16:45 藤 陽平 (押川研 D2)

「4本鎖スピンラダーにおける intermediate-D 相」

16:45-17:00 櫻井 誠大 (高田研 研究員)

「カーボンナノチューブに内包された MgB2 ナノチューブ」



標題：理論インフォーマルセミナー：Atom-cavity arrays

日時：2013年4月9日(火) 午後4時～午後5時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Dr. James Quach

所属：The University of Melbourne

要旨：

Quantum simulators to quantum metamaterials Atom-cavity arrays are structures of coupled microcavities that exhibit quantum mechanical behaviour. Recent advances in microcavity technologies has meant that atom-cavity arrays now make viable candidate structures on which to study complex many-body quantum interactions.

In this talk, I will show how atom-cavity arrays can be used to build quantum simulators and quantum metamaterials. As case studies, I will show how atom-cavity arrays can simulate semiconductor properties, and be used to build a cloaking device and quantum superlens.

References

J. Q. Quach, C.-H. Su, and A. D. Greentree, "Transformation optics for cavity array metamaterials". Optics Express 21, 5575 (2013).

J. Q. Quach, C.-H. Su, A. M. Martin, A. D. Greentree, and L. C. L. Hollenberg, "Reconfigurable quantum metamaterials". Optics Express 19, 11018 (2011).

J. Quach, M. I. Makin, C.-H. Su, A. D. Greentree, and L. C. L. Hollenberg, "Band structure, phase transitions, and semiconductor analogs in one-dimensional solid light systems". Physical Review A 80, 063838 (2009).

標題：理論セミナー：Ordered and disordered phases in two-dimensional SU(N) Heisenberg model

日時：2013年4月12日(金) 午後4時～午後5時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Prof. Karlo Penc

所属：Wigner Research Centre for Physics, Hungarian Academy of Sciences, ISSP

要旨：

SU(N) Heisenberg model is the effective model of Mott insulators with N degrees of freedom per site, where the interaction is highly symmetrical.

Such a situation may happen for spin-orbital models and for ultracold alkaline-earth atoms in optical lattices. Using a combination of analytical and numerical methods, we studied a number of such cases.

In the seminar, I will present three interesting cases:

- (i) The quantum fluctuation driven ordering in the SU(3) Heisenberg model on the square lattice;
- (ii) Dimerization and possible ordering in the SU(4) model on the square lattice;
- (iii) The spin-orbital liquid in the SU(4) Heisenberg model on the honeycomb lattice, with algebraic decay of correlations.

標題：理論セミナー：Magnetic vortex crystals in frustrated Mott insulator

日時：2013年4月19日(金) 午後4時～午後5時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Dr. Yoshitomo KAMIYA

所属：Theoretical Division, Los Alamos National Laboratory

要旨：

Materials that exhibit topological spin textures are attracting enormous interest because of their potential for spintronics [1-3]. Competition between Dzyaloshinskii-Moriya and ferromagnetic exchange interactions leads to skyrmion lattices in a class of materials that share a common crystal structure. This includes insulators, like  $\text{Cu}_2\text{OSeO}_3$ , that allow for energetically efficient manipulation of the magnetic textures with electric field gradients [2]. Here we propose a novel mechanism for the stabilization of magnetic vortex crystals in frustrated Mott insulators that enables tunable spin superstructures [4]. By modeling the frustrated quantum magnet  $\text{Ba}_3\text{Mn}_2\text{O}_8$  [5] near its magnetic field-induced quantum critical point, we show that the quantum phase diagram includes novel magnetic vortex crystals, whose lattice parameter is controlled by the ratio between inter and intra-layer exchange. This property opens the attractive possibility of tuning the vortex density by applying pressure.

Reference:

- [1] S. Muhlbauer et al., *Science* 323, 915 (2009); W. Munzer et al., *PRB* 81, 041203 (2010); X. Z. Yu et al., *Nature* 465, 901 (2010); X. Z. Yu et al., *Nat. Mater.* 10, 106 (2011)
- [2] S. Seki et al., *Science* 336, 198 (2012); Y. Onose et al., *PRL* 109, 037603 (2012)
- [3] T. Okubo, S. Chung, and H. Kawamura, *PRL* 108, 017206 (2012)
- [4] YK and C. D. Batista, arXiv:1303.0012 (unpublished)
- [5] M. Uchida et al., *PRB* 66, 054429 (2002)

標題：理論インフォーマルセミナー：Electromagnetic and thermal responses of Z topological insulators and superconductors in odd spatial dimensions

日時：2013年4月22日(月) 午後4時～午後5時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：藤本 聡

所属：京都大学大学院 理学研究科

要旨：

A fundamental and important feature of topological insulators (TIs) and topological superconductors (TSCs) is that topological invariants characterizing the bulk states emerge as physical quantities probed by electromagnetic or thermal responses. For instance, in the quantum Hall effect state, the Chern number appears as the quantized Hall conductivity, and in the case of time-reversal invariant (TRI) TIs in three dimensions, the  $Z_2$  invariant can be detected in axion electromagnetic responses. However, in the case of chiral-symmetric systems in odd spatial dimensions, it has not been well understood how the bulk topological invariants can appear in electromagnetic and thermal responses. These classes include time-reversal symmetry broken (TRB) TIs with sublattice symmetry in one and three dimensions (class AIII), TRI TSCs in three dimension (class DIII, e.g. the B phase of  $^3\text{He}$ ,  $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$ ,  $\text{Li}_2\text{Pt}_3\text{B}$ ), and TRI TIs and TSC of spinless fermions in one dimension (class BDI, e.g. Su-Schrieffer-Heeger model, Kitaev Majorana chain model). For these systems, the bulk topological invariant is the winding number which takes any integer values. However, it has not been clear in what physical quantities the winding number can be detected.



Here, we address this issue. We clarify that the winding number which characterizes the bulk Z non-triviality of these systems can appear in electromagnetic and thermal responses in a certain class of heterostructure systems. Furthermore, we also elucidate that the winding number can be detected as a bulk response function for a novel magnetoelectric effect, i.e. "chiral charge polarization" induced by an applied magnetic field.

**標題：新物質セミナー：Unravelling Emergent Order in Magnetic Oxides by Neutron Spectroscopy**

**日時：2013年4月24日(水) 午前11時～**

**場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)**

**講師：Prof. Andrew Boothroyd**

**所属：University of Oxford**

**要旨：**

A major theme in correlated electron physics is the existence of complex forms of nano-scale order involving several different electronic degrees of freedom. Such phenomena can dramatically influence the physical properties of materials, the most prominent example of which is the occurrence of high temperature superconductivity in the layered copper oxides.

This talk will be concerned with how emergent electronic order influences spin dynamics in complex antiferromagnetic oxides. Advances in neutron spectroscopy have made it possible to measure the complete spectrum of cooperative spin excitations in magnetically ordered systems in great detail. I will illustrate how studies of the spin dynamics can provide key insights into the nature of complex ground states. I will present recent results on a half-doped layered manganite which conclusively distinguish between different models proposed for its ground state [1], and I will show how a striking hour-glass magnetic spectrum found in layered cobalt oxides sheds light on the existence of charge stripe correlations in the copper oxide superconductors [2].

[1] G. E. Johnstone, T. G. Perring, O. Sikora, D. Prabhakaran, and A. T. Boothroyd, Phys. Rev. Lett. 109, 237202 (2012).

[2] A. T. Boothroyd, P. Babkevich, D. Prabhakaran, and P. G. Freeman, Nature 471, 341 (2011).

**標題：放射光セミナー：高分解能共鳴非弾性 X 線散乱による LaAlO<sub>3</sub>/SrTiO<sub>3</sub>酸化物ヘテロ界面の研究**

**日時：2013年5月7日(火) 午後4時15分～**

**場所：物性研究所本館6階 大講義室 (A632)**

**講師：藤原 秀紀**

**所属：大阪大学基礎工学研究科**

**要旨：**

酸化物ヘテロ接合系は、新しい電子状態及び電子デバイス機能を探求する理想的な舞台として近年世界的注目を集めており、とりわけ共に絶縁体である LaAlO<sub>3</sub> と SrTiO<sub>3</sub> との界面で誘起される金属的な伝導[1]、さらには低温での超伝導転移と強磁性の共存[2,3,4]について、その起源解明のため精力的な研究が進められている。我々は SPring-8 BL07LSU における超高分解能共鳴非弾性 X 線散乱(RIXS)により、磁性を担う局在電子と電気伝導及び超伝導を担う遍歴電子の共存状態の直接観測に成功した。この遍歴電子状態は Ti 2p-3d 軟 X 線共鳴角度分解光電子分光によるバンド構造及びフェルミ面の観測事実[5]とも矛盾しない。講演では SPring-8 BL07LSU において4月に測定された、金属絶縁体転移を示す V 酸化物に対する RIXS の測定結果についても報告する予定である。

[1] A. Ohtomo and H. Y. Hwang, Nature 427, 423 (2004).

[2] N. Reyren, J. Mannhart et. al., Science 317, 1196 (2007).

- [3] Lu Li, J. Mannhart, et al., Nature Phys. 7, 762 (2011).  
[4] J. A. Bert, H. Y. Hwang et al. Nature Phys. 7, 767(2011).  
[5] G. Berner, M. Sing, H. Fujiwara, submitted to Physical Review Letters

**標題：**シリーズセミナー：極限コヒーレント光科学 18 回目 「高分解能コヒーレントX線回折イメージングの現状と展望」

**日時：**2013年5月13日(月) 午後1時30分～

**場所：**物性研究所本館6階 第1会議室 (A636)

**講師：**高橋 幸生

**所属：**大阪大学工学研究科精密科学

**要旨：**

X線はオングストローム程の波長を有する電磁波であり、その波長の短さから、ナノメートルまたは原子分解能の顕微鏡を実現する潜在能力を持っている。しかしながら、X線レンズの作製が技術的に難しいため、10nmより優れた空間分解能を達成することは容易でない。コヒーレントX線回折イメージングは、この問題を回避し、X線顕微法の空間分解能を飛躍的に向上させるレンズレズイメージング技術である。本セミナーでは、これまで講演者らが第三世代放射光施設SPring-8で開発してきた高分解能コヒーレントX線回折イメージング技術とその応用について紹介する。また、X線自由電子レーザーや次世代リング型光源を用いたコヒーレントX線回折イメージングの将来展望についても議論したい。

**標題：**理論インフォーマルセミナー：Z2 spin liquid in S=1/2 kagome Heisenberg antiferromagnet

**日時：**2013年5月14日(火) 午後1時30分～午後2時30分

**場所：**物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

**講師：**Mr. Yuan Wan

**所属：**The Johns Hopkins University, Baltimore, USA

**要旨：**

A quantum spin liquid is a hypothesized ground state of a magnet without long-range magnetic order. Similar to a liquid, which is spatially uniform and strongly correlated, a quantum spin liquid preserves all the symmetries and exhibits strong correlations between spins. First proposed by P. W. Anderson in 1973, it has remained a conjecture until recently. In the past couple of years, numerical studies have provided strong evidences for quantum spin liquid in a simple model, the S=1/2 kagome Heisenberg antiferromagnet.

In this talk, I will describe a low-energy effective theory for this magnet in terms of a lattice gauge theory with the simplest possible mathematical structure (a group of two elements, namely Z2). I will show that the theory reproduces many characteristic features observed numerically, thereby providing a missing link between the numerics and the analytics. Furthermore, I will present theoretical predictions which could be tested in future numerical studies.



標題：理論セミナー：Mechanical control of hexagonal cell packing in *Drosophila* wing

日時：2013年5月14日(火) 午後4時～午後5時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：石原 秀至

所属：東京大学大学院総合文化研究科 広域科学専攻

要旨：

How mechanical forces trigger a series of deformations to shape an adult body during morphogenesis? Recent studies have clarified how geometrical changes of cells are coordinated via the activity and/or localization of force-generating molecular machineries within a cell. On the other hand, it remains unclear how the mechanical interaction among cells and the resulting stress field of a tissue are organized to control cellular pattern formation. One of the difficulties to characterize mechanical processes of morphogenesis is the lack of proper experimental methods to directly measure and quantify the forces in the cell population inside the animal body.

Recently, we developed a theoretical framework for estimating the pressure of each cell, the tension of each cell adhesion surface and stress tensor of a group of cells, by adopting Bayesian scheme of inverse problem. Responses to laser cutting and myosin distribution agreed with the estimated tensions. Using our method, we studied mechanical basis of hexagonal packing (the increase of hexagonal cells in the *Drosophila* wing during the pupal stage). Our quantification of developmental changes of the stress distribution within a tissue and of corresponding rearrangements of cells provides a physical mechanism for cell packing; biased external forces acting on the tissue provide the directional information for local orientation of hexagonal cells which underlies the global hexagonalization. Our force estimation method will become a powerful tool in analyzing how information for orchestrating cellular behaviors during morphogenesis is encoded in distributions of forces within a tissue.

標題：MDCL Special Seminar：First Observation of electronic conductivity in mixed valence tellurium oxides

日時：2013年5月15日(水) 午後1時30分～午後2時30分

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Theeranun Siritanon

所属：Suranaree University of Technology

要旨：

Superconductivity has been observed in mixed-valence oxides with heavy post-transition metals. Sleight et al. reported the superconductivity in  $\text{BaBi}_{1-x}\text{Pb}_x\text{O}_3$  perovskites with transition temperatures of 13K.  $\text{BaBiO}_3$  itself is insulating with distorted perovskite structure because charge disproportionation of  $\text{Bi}^{4+}$  splits the Bi 6s conduction band into a completely filled band ( $\text{Bi}^{3+}$ ) and an empty band ( $\text{Bi}^{5+}$ ). Substitution of Pb disrupts charge disproportionation and the resulting cubic perovskite oxide is superconducting. The superconductivity of this compound is related to diffused s orbital in Bi. Although Te has similar diffused s orbital, conducting Te oxides are not known. Most of oxides containing Te are insulating. Moreover, oxides that seem to have  $\text{Te}^{5+}$  in the chemical formula always contain mixture of  $\text{Te}^{4+}$  and  $\text{Te}^{6+}$ . In other word,  $\text{Te}^{5+}$  always disproportionate to  $\text{Te}^{4+}$  with completely filled band and  $\text{Te}^{6+}$  with an empty band.

In my talk, I will present the studies we carried out in attempt to prepare electronically conducting Te oxides. In this work, we have prepared series of pyrochlore-related compounds with general formula  $\text{Cs}(\text{M},\text{Te})_2\text{O}_6$  (M = Al, Ga, Cr, Al, Fe, Co, In, Ho, Lu, Yb, Er, Ge, Rh, Ti, Zn, Ni, and Mg). These compounds have very dark color which is different from most of Te oxides. They can be viewed as type II mixed valence compound according to the

classification of Robin and Day. Electronic conductivity was observed in some phases and could be as high as  $2S/cm$  ( $M=Ge$ ). Seebeck coefficients of conducting samples show negative values which suggests that electrons are the major charge carriers. Based on results from several measurements, the observed conductivity in these compounds is explained based on  $Te^{4+}/Te^{6+}$  mixed valency.

**標題：放射光セミナー：「光電子計測による有機半導体の電子構造分析 ～モデル系から現実のデバイスへ向けて」**

**日時：2013年5月17日(金) 午後1時30分～**

**場所：物性研究所本館6階 大講義室 (A632) TV会議 播磨中央管理棟3F会議室**

**講師：中山 泰生**

**所属：千葉大学大学院融合科学研究科**

**要旨：**

$\pi$ 共役有機物質を「半導体」材料として利用する有機エレクトロニクスは、その代表格である有機 EL ディスプレイが製品化され急速に社会へ浸透していった一連の流れに象徴されるように、この10年で目覚ましく発展してきた。こうした研究・開発の急速な進展の土台には、金属などの表面上に単層の有機分子層を積層した「モデル系」に対する光電子計測を通して、有機材料および電極-有機界面の電子構造に関する理解が進み、これを最適化するような素子設計や材料合成が可能になったことが大きな要因として挙げられる。一方で、光電子計測による研究対象を「モデル系」としての有機分子超薄膜から現実のデバイスへと拡張していくためには、チャージアップ問題など克服すべき課題が多い。本講演では、近紫外光から軟 X 線にわたる波長域を用いた光電子分析手法により、有機単結晶や発光ポリマー、有機多層膜など実デバイスに近い試料の電子構造を解明することに成功した最近の研究例を紹介する。また、現実の有機デバイスにおける動作特性の理解や性能の向上へむけて、電子構造分析の立場で残されている課題についても概観する。

**標題：理論セミナー：Sine-square deformations of one-dimensional critical systems**

**日時：2013年5月31日(金) 午後4時～**

**場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)**

**講師：桂 法称**

**所属：学習院大学理学部・物理学科**

**要旨：**

I will present a class of one-dimensional solvable models that are seemingly unrelated to the models solved by standard methods such as the Bethe ansatz and the Yang-Baxter relation. An example is the XY spin chain with sine-square deformation. The model is defined on an open chain and the local hamiltonians are modified according to the sine-square function. Due to this inhomogeneity, the single-particle eigenstates cannot be obtained in closed form.

However, I will show that the many-body ground state can be obtained exactly and it is identical to the ground state of the homogeneous XY chain. A similar correspondence holds for more general conformal field theories as well as the critical Ising chain. The properties of the low-energy excited states can be analyzed by a variety of techniques such as the Lieb-Schultz-Mattis argument and the functional Bethe ansatz.

[1] H. Katsura, J. Phys. A: Math. Theor. 44, 252001 (2011).

[2] H. Katsura, J. Phys. A: Math. Theor. 45, 115003 (2012).



標題：How to kill a topological insulator

日時：2013年5月31日(金) 午前11時～午後0時30分

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Prof. N. Peter Armitage

所属：Johns Hopkins University, USA

要旨：

Topological insulators (TIs) are states of matter characterized by an inverted band structure driven by strong spin-orbit coupling (SOC). They have a variety of unusual properties including robust surface states (SS) that are protected by topological properties of the bulk wavefunctions. Of particular interest is the quantum phase transition that separates a TI from a conventional insulator. Such a transition between different topological classes can only occur when the bulk band gap closes. In this work, we have utilized time-domain terahertz spectroscopy (TDTS) to investigate the low frequency conductivity in  $(\text{Bi}_{1-x}\text{In}_x)_2\text{Se}_3$  through this transition by tuning SOC through In substitution. Above a thickness dependent doping threshold we observe a sudden collapse in the transport lifetime that indicates the destruction of the topological phase. We associate this with the doping where the states from opposite surfaces hybridize. As a function of thickness this threshold asymptotically approaches the doping  $x = 0.06$  of a maximum in the mid-infrared absorption, which can be identified with the band gap closing and change in topological class. Our work shows the fundamental role that finite size effects play in this transition through the 'bulk-boundary correspondence' of topological systems.

標題：シリーズセミナー：極限コヒーレント光科学 19 回目「X線・中性子線・電子線を用いる原子分解能ホログラフィー」

日時：2013年6月3日(月) 午前10時30分～

場所：物性研究所本館6階 大講義室 (A632) TV会議 播磨：理研物理科学棟113室

講師：林 好一

所属：東北大学金属材料研究所

要旨：

X線や中性子線、電子線などの量子ビームを物質に照射した場合、蛍光X線や即発 $\gamma$ 線などの二次放射線が放出される。照射した物体が結晶の場合、その二次放射線の強度が入射ビームの方位に対し変化する。その二次元分布が原子の配列を記録した原子分解能ホログラムとなる。原子分解能ホログラフィーは、原子からの散乱波の位相を記録することができ、特定元素周辺の三次元原子像を再生することができる。また、半径数 nm の範囲にわたり可視化でき、原子位置の揺らぎに非常に敏感であるという特徴がある。このため、特定元素周辺の局所格子歪みの定量やナノ構造体の発見に非常に有効である。また、中性子線ホログラフィーの場合には、磁気散乱を利用することにより、スピンを可視化することができる。講演では、原子分解能ホログラフィーの原理、装置、応用、そして将来展開について述べる。



標題：理論セミナー：Quantum anomalous Hall states on decorated magnetic surfaces

日時：2013年6月7日(金) 午後4時～午後5時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Prof. David Vanderbilt

所属：Department of Physics and Astronomy, Rutgers University

要旨：

Twenty-five years ago, Haldane [1] pointed out the possibility that a 2D crystalline insulator with broken time-reversal symmetry could exhibit a quantized Hall conductivity in the absence of an external magnetic field, potentially at room temperature. Despite the enormous recent interest in topological insulators of the non-magnetic type, it is only recently that an experimental realization of Haldane's "quantum anomalous Hall" (QAH) or "Chern insulator" state has been claimed. Specifically, the group of Ref. [2] demonstrated the QAH state at low temperature in a thin film of a topological insulator doped with magnetic impurities. I shall report on our recent work [3] in which we propose a different possible route to the QAH state formed by the deposition of a fractional monolayer of heavy atoms (providing strong spin-orbit coupling) onto the surface of an insulating ferromagnet or antiferromagnet (providing broken time-reversal symmetry). We demonstrate the concept by carrying out first-principles calculations of layers of Au, Hg, Pb, Bi, etc. on magnetic substrates such as MnSe, MnTe, and EuO, showing that the QAH state can be attained in this way, with band gaps sometimes extending above 100 meV. While the particular surfaces that we have studied may prove to be thermodynamically unstable, we believe this general strategy may eventually lead to room-temperature QAH systems.

[1] F.D.M. Haldane, Phys. Rev. Lett. 61, 2015 (1988).

[2] C.-Z. Chang et al., Science 340, 167 (2013).

[3] K.F. Garrity and D. Vanderbilt, Phys. Rev. Lett. 110, 116802 (2013).

標題：放射光セミナー：高分解能 ARPES による新型トポロジカル物質の研究

日時：2013年6月11日(火) 午後1時30分～

場所：物性研究所本館6階 第1会議室 (A636) TV 会議 播磨：理研物理科学棟 113 室

講師：中山 耕輔

所属：東北大学大学院理学研究科

要旨：

トポロジカル絶縁体は、バルクはエネルギーギャップが存在する絶縁体であるものの、表面や端では時間反転対称性によって保護された金属状態が生じる物質であり、新型トポロジカル絶縁体の探索や特異物性に関する研究が盛んに行われている。最近我々は角度分解光電子分光 (ARPES) により、トポロジカル絶縁体  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  と通常の絶縁体  $\text{PbSe}$  が交互に積層したヘテロ構造をもつ  $(\text{PbSe})_5(\text{Bi}_2\text{Se}_3)_{3m}$  では、固体内部にもトポロジカルな起源をもつ金属状態 (トポロジカル界面状態) が存在することを見出した [1]。また、IV-VI 族半導体  $\text{SnTe}$  は、鏡映対称性に保護された表面状態を持つ「トポロジカルクリスタル絶縁体」という新たなトポロジカル相に属することを明らかにした。本セミナーでは、これらの結果を中心に我々の最近の ARPES 結果について紹介する。

[1] K. Nakayama et al., Phys. Rev. Lett. 109, 236804 (2012).

[2] Y. Tanaka et al., Nature Phys. 8, 800 (2012).



標題：放射光セミナー：角度分解光電子分光で解き明かす酸化物高温超伝導体における2種類のエネルギーギャップ

日時：2013年6月17日(月) 午後1時30分～

場所：物性研究所本館6階 大講義室 (A632) TV会議 播磨中央管理棟3F会議室

講師：近藤 猛

所属：物性研究所 辛研究室

要旨：

銅酸化物高温超伝導体は1986年に発見されて以来、固体物理の分野で最も注目を受け、盛んに研究がなされてきた。2008年に鉄ヒ素系物質で銅酸化物に次ぐ第2の高温超伝導の発現が確認され、その比較対象が登場したことで、改めて銅酸化物高温超伝導体に注目が集まっている。しかし、膨大な数の研究が行われてきたにもかかわらず、高い超伝導臨界温度が生み出される機構に関しては未だ統一した見解が得られていない。

バーディーン、クーパー、シェリーファーの理論(BCS理論)で説明される超伝導体では、 $T_c$ において全方位に亘り均一な超伝導ギャップが開き、フェルミ面が消失する。一方、銅酸化物高温超伝導体では、 $T_c$ より遥か高温からエネルギーギャップ(擬ギャップ)が開き始める。また、この擬ギャップは特定の方位でのみ発現し、フェルミ面の一部を消失させる。フェルミアークが存在する擬ギャップ状態は、電子の占有準位と非占有準位の境界を定義できない奇妙な状態であると言える。高温超伝導の発現機構を解明する上で、擬ギャップと超伝導ギャップの関係を理解することが重要な鍵を握っている。

我々は、起源の異なる2つのエネルギーギャップが $T_c$ 以上の温度で共存することをBi系銅酸化物を用いた角度分解光電子分光測定により見いだした。一つめのギャップは超伝導相と競合する秩序状態による“擬ギャップ”で、 $T_c$ より遥か高温( $T^*$ )で開き始める。もう一つは、電子対の形成による“電子対形成ギャップ”で、擬ギャップよりも比較的低温( $T_{pair}$ )で生じる。これまで、 $T_c$ 以上で開くギャップの起源をめぐり“超伝導の前駆状態”に起因するか、それとも“競合する秩序状態”に起因するか、二者択一的な主張がなされてきた。これは、 $T_c$ 以上で開くギャップが単一であると信じられてきたことに加え、様々な測定手法に対して敏感なギャップが別個に観測されてきたことが主な要因であると考えられる。本講演では、一つの実験手法で両者を同時に観測することに初めて成功したことを紹介する。

[1] T. Kondo et al., Physical Review Letters 98, 267004 (2007).

[2] T. Kondo et al., Nature 457, 296 (2009).

[3] T. Kondo et al., Nature Physics 7, 21 (2011).

標題：中性子セミナー：Structure, Interactions and Chemistry in Ionic Liquids

日時：2013年6月21日(金) 午後3時～午後4時30分

場所：物性研究所本館6階 第4セミナー室(A614)

講師：Prof. Edward Castner, Jr.

所属：Rutgers, The State University of New Jersey, USA

要旨：

Ionic liquids are becoming increasingly important for use in catalysis, energy storage technologies, and biotechnology. I will discuss how the interplay between ionic liquid structure, transport properties and dynamics affects the outcomes of chemical reactions in these novel solvents. I will present some of our recent results on photo-induced electron-transfer reactions in ionic liquids, as well as structural studies of the bulk fluids using a combination of high energy X-ray scattering and molecular dynamics simulations. To complement these structural studies, we are using 2D nuclear Overhauser effect NMR to study the interactions between ions. We are introducing these 2D NMR methods to study specific interactions with a molecular solute and the surrounding cations and anions.

**標題：理論セミナー：Resolution effects on the current statistics in the resonant level model**

**日時：2013年6月21日(金) 午後4時～午後5時**

**場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)**

**講師：山田 康博**

**所属：東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻**

**要旨：**

Current measurement is a basic technique to investigate the nature of a system. In particular, the variance of the current, i.e. noise, has been extensively studied because it includes useful information about intrinsic temperature in the equilibrium noise, and about the low-energy excitations in the shot noise. It is, however, often observed that the measured noise is larger than the intrinsic one expected from theories. Here, we consider the difference from the view point of the limitation of the resolution of measurement devices.

In this study, we propose a quantum two-point measurement statistics with limited resolution. Our method is equivalent to the ordinary full counting statistics in an ideal condition, but can consider resolution of the device in the other cases. Using this method, we analyze resolution effects on the distribution of current flowing a resonant level coupled to two reservoirs. It is found that the poor resolution gives no influence to the averaged current but gives the excess noise. Since the excess noise is always positive, the measured noise is always larger than the intrinsic one. Furthermore, the thermal noise and the shot noise are investigated in more details. As a result, we find universality in the deviation from the Johnson-Nyquist relation and the linear enhancement of the shot noise caused by limited resolution.

**標題：放射光セミナー：軟 X 線吸収分光法による液体・溶液の局所構造の研究**

**日時：2013年6月21日(金) 午後1時30分～**

**場所：物性研究所本館6階 大講義室 (A632) TV 会議 播磨中央管理棟 3F 会議室**

**講師：長坂 将成**

**所属：自然科学研究機構 分子科学研究所**

**要旨：**

液体・溶液の物性を調べるうえで、その局所構造を理解することが重要である。X 線吸収分光法は溶液中の分子の局所構造を元素選択的に調べることができる有用な手法であり、特に軟 X 線を用いると有機溶媒や水を観測するうえで重要な、炭素、窒素、酸素などの軽元素周りの構造を調べることが可能である。しかし溶液による軟 X 線の吸収が大きいため、透過法で軟 X 線吸収分光法を測定するには、液体層の厚さを 1 マイクロメートル以下にする必要があり、これまで測定が困難であった。

最近、我々は透過法を可能とする液体セルを開発した[1]。実験は分子研 UVSOR-III の軟 X 線ビームライン BL3U で行った。液体層は厚さ 100 nm の 2 枚の窒化シリコン膜で挟むことにより形成して、その周りを満たしたバッファのヘリウムガスの圧力を調整することにより、液体層の厚さを 20 - 2000 nm の範囲で調整可能である。また液体層は常圧のバッファガスで囲まれているため、実環境下での液体の局所構造を調べることができる。

本講演では、この測定システムを用いて行った研究成果である、塩水溶液中の陽イオンの水和構造、メタノール水溶液の局所構造を、酸素、炭素の K 吸収端の軟 X 線吸収分光法で調べた結果を報告する。また電極を備えた液体セルを開発することにより可能となった、溶液中の電気化学反応のオペランド観測への軟 X 線吸収分光法の展開について報告する。

[1] M. Nagasaka et al., J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. 177, 130 (2010).



標題：理論セミナー：薄膜における磁気励起

日時：2013年6月24日(月) 午後4時～午後5時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Arthur Ernst

所属：Max Planck institute of microstructure physics, Halle / University of Leipzig

要旨：

The fundamental interactions between magnetic moments in layered magnetic structures have a very important impact on the properties of these materials. First-principles simulations can provide a deep knowledge about the electronic structure and magnetic excitations in such systems, which is highly desirable for understanding the key properties and a wide range of phenomena in low-dimensional solids. In my talk, I present an ab-initio Green function approach within the multiple-scattering theory, which is designed for calculations of magnetic excitations in bulk materials, thin films, and clusters. The method is based on the linear response approximation within the density functional theory and provides extensive information about the magnons and their life time. To illustrate the efficiency of our method, I present our recent investigations of magnetic excitations in thin films. A part of this work was done in a close cooperation with experimental groups at the MPI Halle and the institute for technology in Karlsruhe. In particular, I shall discuss a direct probing of fundamental exchange interaction at buried interfaces, Landau damping of magnons in thin films, and magnon softening in some thin film interfaces.

標題：シリセン：シリコンで出来た二次元トポロジカル絶縁体 (ナノスケール部門セミナー)

日時：2013年6月25日(火) 午後4時～午後5時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：江澤 雅彦

所属：東京大学工学系研究科物理工学専攻

要旨：

シリセンとはシリコンがハニカム格子を組んだ二次元物質である。2012年に相次いで実験的に合成され、着目を浴びている。グラフェンと同様に低エネルギー励起はディラック方程式で記述される。しかし、シリセンにはスピン軌道相互作用があるので、量子スピンホール効果を示す。また、電場[1]や磁性体[2,3]、光照射[4]などでトポロジカル相転移を起こす事ができ、量子異常ホール効果などの様々なトポロジカル絶縁体を実現する。局所状態密度、伝導度[5]、反磁性[6]、光吸収[7]などの測定に基づき、これらトポロジカル相転移の実験的観測に関する提案を行う。また、電界誘起トポロジカル・トランジスターなどのトポロジカル量子デバイスへの応用なども紹介する[5]。

量子ホール効果もシリセンの様々な相に応じて特徴的な振る舞いをするを紹介する[8,9]。シリセン超構造[10]や二層シリセン[11]、シリコン・ナノチューブなどのシリセン派生物についても紹介する。シリセンはシリコンで出来ているために、従来のシリコン・デバイスとの相性も良く、将来的な応用への期待が大きい。また、現在シリセンは銀盤などの表面に作製されているので表面物理の観点からも大変興味深い。最近のSTMやARPESなどの実験の動向を説明すると共に、今後の展望についても解説したい。可能な限り実験家向けに解説したい。

1. M. Ezawa, New J. Phys. 14, 033003 (2012).
2. M. Ezawa, Phys. Rev. Lett. 109, 055502 (2012)
3. M. Ezawa, Phys. Rev. B 87, 155415 (2013)
4. M. Ezawa, Phys. Rev. Lett. 110, 026603 (2013)
5. M. Ezawa, Appl. Phys. Lett. 102, 172103 (2013)
6. M. Ezawa, Euro. Phys. J. B 85, 363 (2012)

7. M. Ezawa, Phys. Rev. B 86, 161407(R) (2012)
8. M. Ezawa, J. Phys. Jpn. 81, 064705 (2012).
9. M. Ezawa, in preparation
10. M. Ezawa, Euro. Phys. J. B 86, 139 (2013)
11. M. Ezawa, J. Phys. Soc. Jpn. 81, 104713 (2012)
12. M. Ezawa, Europhysics Letters 98, 67001 (2012)

**標題：エネルギー変換応用のための極性結晶**

**日時：2013年6月26日(水) 午後1時～午後6時**

**場所：物性研究所本館6階 大講義室 (A632)**

**要旨：**

酸化物は豊富な機能を持っていて、触媒や電子材料として有望視されている。光触媒などのエネルギー変換材料、抵抗メモリーなどのデバイスへの応用だけでなく、結晶構造を人工的に制御して新しい機能特性の発現を狙う基礎研究も含めた“酸化物エレクトロニクス”がここ20年程で活発になってきた。本ワークショップではエネルギー変換応用に向け、光触媒、固体化学、極性界面の観点から、関連する研究者を会して議論を行い、その現状と課題を明らかにし、今後の研究の展望を議論する。

**標題：理論インフォーマルセミナー：1/(N-1) expansion for an SU(N) impurity Anderson model: a new large-N scheme based on a perturbation theory in U**

**日時：2013年6月27日(木)**

**場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)**

**講師：小栗 章**

**所属：大阪市立大学理学研究科**

**要旨：**

We describe a new large- $N$  approach, which is referred to as  $1/(N-1)$  expansion, to an  $N$ -fold degenerate Anderson impurity model with a finite Coulomb interaction  $U$  [1,2]. This approach is different from the usual  $1/N$  expansion [3], non-crossing approximation [4], and recent developments [5,6] along the conventional large- $N$  theory which is based on a perturbation expansion with respect to the tunneling matrix element  $V$  between the impurity and conduction electrons with a scaling that takes  $NV^2$  as a finite constant independent of  $N$ . In contrast, our formulation starts with the perturbation expansion in  $U$ , and then reorganizes the perturbation series according to the powers of  $1/(N-1)$ , using the scaling that takes  $u=(N-1)U$  as an independent variable. The factor  $N-1$  represents the number of interacting orbitals, excluding the one prohibited by the Pauli principle. Our expansion scheme provides the Hartree-Fock (HF) approximation at zero order, where the limit  $N \rightarrow \infty$  is taken keeping  $u$  finite. Then, to leading order in  $1/(N-1)$  it describes the Hartree-Fock random phase approximation (HF-RPA). The higher-order corrections, starting from order  $1/(N-1)^2$  terms, capture systematically fluctuations beyond the HF-RPA. The results of the renormalized local-Fermi-liquid parameters, obtained up to terms of order  $1/(N-1)^2$ , agree closely with the exact numerical-renormalization-group results at  $N=4$ , where the degeneracy is still not really large as  $N=2$  corresponds to the standard Anderson model with the spin degeneracy. This ensures the reliability of our approach for  $N \geq 4$ . We also apply this approach to nonequilibrium transport through quantum dots in the Kondo regime.



- [1] A. Oguri, R. Sakano, and T. Fujii, Phys. Rev. B **84**, 113301 (2011).
- [2] A. Oguri, Phys. Rev. B **85**, 155404 (2012).
- [3] P. Coleman, Phys. Rev. B **28**, 5255 (1983).
- [4] N. Bickers, Rev. Mod. Phys. **59**, 845 (1987).
- [5] K. Haule, S. Kirchner, J. Kroha, and P. Wolfle, Phys. Rev. B **64**, 155111 (2001).
- [6] J. Otsuki and Y. Kuramoto, J. Phys. Soc. Jpn. **75**, 064707 (2006).

**標題：理論セミナー：第一原理材料シミュレータ QMAS の概要と応用例**

**日時：2013年6月28日(金) 午後4時～午後5時**

**場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)**

**講師：石橋 章司**

**所属：産業技術総合研究所ナノシステム研究部門**

**要旨：**

物質・材料研究に有効な計算ツールの提供とその開発技術の維持・発展のために、我々は、第一原理材料シミュレータ QMAS (Quantum MAterials Simulator) [1] の開発・整備に取り組んできた。QMAS は、平面波基底と Projector Augmented-Wave(PAW)法[2]を用いて、密度汎関数理論により、物質・材料の電子状態および各種物性値を高精度に計算できるツールである。一般的な構造最適化・電子状態計算機能以外に、「静電場下での電子状態」、「エネルギー密度・応力密度」、「クーロン・カットオフ/有効遮蔽体(ESM)法」、「陽電子状態・消滅パラメータ」、「X線コンプトン散乱スペクトル」、「ELNES/XANES スペクトル」、他の特徴的な計算機能を有する。特に、最近では、「2成分相対論形式」により、「スピン軌道作用」や「ノンコリニア磁性」を顕わに取り扱う計算機能の整備と拡張に注力している。さらに、「最局在ワニエ軌道による解析」と組み合わせて、有効モデル構築への橋渡しにも取り組んでいる。今回、幾つかの計算機能の概要、および、適用計算例(パイロクロア型遷移金属酸化物の電子状態研究 [3,4]、磁石材料研究の現状、など)を紹介する。また、今後の開発の展望についても触れる。

[1] <http://qmas.jp>

[2] P.E. Blöchl: Phys. Rev. B **50**, 17953 (1994)

[3] H. Shinaoka, T. Miyake and S. Ishibashi, Phys. Rev. Lett. **108**, 247204 (2012)

[4] H. Shinaoka, Y. Motome, T. Miyake and S. Ishibashi, arXiv:1305.0660

**標題：シリーズセミナー：極限コヒーレント光科学 20回目「In situ 軟 X線発光分光による二次電池電極材料の電子状態解析」**

**日時：2013年7月12日(金) 午前10時30分～**

**場所：物性研究所本館6階 大講義室 (A632) TV会議 播磨：中央管理棟 3F会議室**

**講師：朝倉 大輔**

**所属：産業技術総合研究所 エネルギー技術研究部門 エネルギー界面技術グループ**

**要旨：**

ハイブリッド自動車や電気自動車の普及に伴い、車載用二次電池のさらなる性能向上は喫緊の課題となっている。中でもリチウムイオン電池の研究が精力的に進められているが、その充放電反応には未だ不明な点が多い。特に、既存電極材料の性能改善や新規電極材料の開発を行うために、電子論的観点からの充放電反応、即ち 3d 遷移金属元素の酸化還元反応を解明することが非常に重要となっている。3d 軌道の情報を詳細かつ正確に得るために、本研究では、In situ・オペランド軟 X線発光分光測定の開発を進めている。SPring-8 の BL17SU や BL07LSU で実績のある液体試料用セルを改良

し、測定対象の正極材料、金属リチウム対極、有機電解液からなるリチウムイオン電池用 *In situ* セルを作成した。軟 X 線発光分光実験は、BL07LSU の超高分解能発光分光装置 (HORNET) を用いて実施し、これまでに、充電前および充電時のテスト測定に成功している。

本講演では、*In situ* セルの開発状況と BL07LSU でのテスト測定の結果を中心に、関連する *Ex situ* 軟 X 線吸収 [1,2]・発光分光の結果についても紹介する。

[1] Y. Nanba et al., J. Phys. Chem. 116, 24896 (2012).

[2] D. Asakura et al., Phys. Rev. B 84, 045117 (2011).

**標題：理論セミナー：Transition between itinerant and localized states of heavy electrons**

**日時：2013年7月12日(金) 午後4時～午後5時**

**場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)**

**講師：倉本 義夫**

**所属：東北大学理学研究科**

**要旨：**

We discuss itinerant-localized transition of heavy electrons inside magnetically ordered phase. Taking the Kondo-Heisenberg lattice, the phase diagram and electronic structure are derived by means of the continuous-time quantum Monte Carlo combined with the dynamical mean-field theory. Around the itinerant-localized transition, nearly flat bands appear on the Fermi surface with almost vanishing quasi-particle renormalization factor. At the same time, there emerges a strong local magnetic fluctuation with a minute energy scale. Considering both antiferromagnetic and ferromagnetic Heisenberg interactions, coherent understanding is achieved on rich phase diagrams observed in  $\text{CeRh}_{1-x}\text{Co}_x\text{In}_5$ ,  $\text{CeRu}_2(\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x})_2$ ,  $\text{UGe}_2$  and  $\text{CeT}_2\text{Al}_{10}$  (T=Fe, Ru, Os).

These results have been obtained by cooperation with S. Hoshino at University of Tokyo.

