物性研究所セミナー

標題:理論セミナー:Many-variable variational Monte Carlo calculations of the J1-J2 Heisenberg model 日時:2013年12月20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:森田 悟史 所属:東京大学物性研究所 要旨:

In the presence of strong geometrical frustration and quantum fluctuations, the quantum spin liquid states, insulators without any long range order, may appear even at zero temperature. One of the simplest models to realize the quantum spin liquid state is a spin-1/2 antiferromagnetic J1-J2 Heisenberg model on the square lattice.

To investigate the nature of the quantum spin liquid state, we perform variational Monte Carlo (VMC) simulations combining with quantum-number projection technique [1]. Our variational wave function is constructed from three parts; the fermionic singlet-pairing wave function, the Gutzwiller projector, and the quantum-number projections for the total spin, the total momentum, and the lattice symmetry (π /2rotation and reflection). This wave function is able to describe the exact ground states of the 4×4 system and provides higher accuracy than the conventional VMC method in 6×6 systems [2]. We can also obtain excited states with quantum numbers different from the ground state by considering the quantum-number projections. Our direct calculations up to 16×16 sites support that the phase between the staggered and striped antiferromagnetic phases is characterized as a spin-gapped spin liquid without long-range magnetic order. We discuss the relation to a recent result obtained by density matrix renormalization group method [3].

[1] D. Tahara and M. Imada: J. Phys. Soc. Jpn. 77 (2008) 114701

[2] L. Capriotti, et al.: Phys. Rev. Lett. 87 (2001) 097201

[3] H.-C. Jiang, H. Yao, and L. Balents: Phys. Rev. B 86 (2012) 024424

標題:ディラック電子系における量子ホール状態(新量子相 Lecture Series 第 2 回) 日時:2013 年 12 月 24 日(火) 午後 2 時~午後 3 時

場所:物性研究所本館6階第5セミナー室(A615)

講師:長田 俊人

所属:極限環境物性研究部門

要旨:

グラフェンや層状有機導体 a-(BEDT-TTF)2I3 の電子系は、質量ゼロの 2 次元ディラック粒子系と見なすことができる。 この系を特徴づける物性の1つとして半整数量子ホール効果があるが、さらにゼロエネルギーのランダウ準位のスピン・ バレー縮退が解けると、スピン偏極/非偏極したチャーン数ゼロの状態が現れる。セミナーでは、グラフェン、ディラッ ク電子、量子ホール効果、量子スピンホール効果などの簡単な導入を行った後、対称性破れによる単層および2層グラフェ ンの量子ホール絶縁相、有機導体の量子ホール強磁性相とヘリカル表面状態などを紹介する。

```
標題:理論セミナー:MateriApps: Portal Site for Materials Science Simulation
日時:2014年1月10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:五十嵐 亮
所属:東京大学物性研究所
```

要旨:

MateriApps [1] is aimed at a portal site for computer simulation on materials science. We are working to promote the developers as well as various simulation software applications through MateriApps. We also enable users to perform multidimensional searches for things that they are interested in doing or learning about, such as calculation methods, target materials, interested phenomena, and physical quantities. We also have forums in order to encourage communication between users and developers and to enable information sharing, exchanges of views and so on.

We are also developing MateriApps LIVE! [2], an open source live Linux distribution based on Debian GNU/Linux to help users on trying to use various software applications which are introduced in MateriApps easily. We distribute an open source hybrid USB live image which contains ready-to-use open source software applications developed in Japan, such as ALPS, ERmod, feram, OpenMX, xTAPP, as well as various standard open source software such as ABINIT, CP2K, Gromacs, Quantum Espresso. We also plan to hold hands-on tutorial sessions in ISSP.

In this seminar, we present a current status of MateriApps site itself and demonstrate how to use various software applications using MateriApps LIVE!

標題:理論セミナー: Dirac cone and spin-orbit effects in the electronic structure of tellurium and selenium under pressure

日時:2014年1月24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:三宅 隆

```
所属:產業技術総合研究所,東京大学物性研究所
```

要旨:

We study electronic structure of crystalline Te and Se from first-principles. The materials undergo an insulator-to-metal transition under pressure. At a certain pressure, two conducting states at around the H-point cross each other near the Fermi level. If the spin-orbit interaction is neglected, the states have linear dispersion in the vicinity of the crossing point, forming a Dirac cone. The band crossing is protected even in the presence of the spin-orbit interaction by helical structure with the threefold symmetry. The orbital character and spin structure will be discussed in detail.

```
標題:理論セミナー:Numerical renormalization group studies of the Kondo effect at surface systems
日時:2014年1月31日(金) 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:南谷 英美
所属:東京大学大学院工学系研究科 マテリアル工学専攻
要旨:
```

The Kondo effect is one of well-known and extensively investigated phenomena in condensed matter physics. The Kondo effect has emerged in various systems from dilute magnetic alloys to quantum dots connected to electronic reservoirs. Among them, magnetic atoms and molecules adsorbed on surface have become intriguing systems with the recent progress of scanning tunneling microscopy/spectroscopy (STM/STS) technique.

In particular, the formation of the Kondo singlet resulting from the Kondo effect appears as a characteristic peak or dip structure in the STS spectrum, which enables us to observe the Kondo effect with high spatial and energy resolution. However, the experimentally obtained STS spectrum is not simply same as single-particle excitation spectrum; the theoretical studies including both the accurate treatment of the Kondo effect and the characteristic effect at surface are required.

In this talk, I introduce our recent researches about the two-impurity Kondo effect and spin+orbital Kondo effect in magnetic atoms and molecules adsorbed on metal surface [1,2] utilizing the combination of Keldysh Green's function formalism of the STM current, numerical renormalization group method, and ab-initio density functional theory calculations.

- 標題:理論セミナー: Theoretical Proposal of Topological Insulator for a Kondo Insulator SmB₆ and Recent Experimental Measurements
- 日時:2014年2月6日(木) 午後4時~午後5時
- 場所:物性研究所本館6階第2セミナー室(A612)
- 講師:瀧本 哲也
- 所属:漢陽大学

要旨:

44

In heavy electron systems, there is a class of insulators, whose resistivity increases exponentially below the temperature of resistivity minimum, i.e., Kondo insulators. The resistivity increases in the low temperature region due to opening a hybridization gap around the Fermi level. An actual example is a cubic compound SmB₆. In SmB₆, below the resistivity minimum around a room temperature, the common logarithm of resistivity increases by four down to 5 K, below which the resistivity is almost temperature independent. In order to explain such a metallic behavior below 5 K observed by various measurements, the so-called in-gap state has been introduced. The origin of in-gap state is still controversial.

Recently, a new quantum state, i.e. topological insulators, attracts much attention in the field of condensed matter physics. The characteristic feature of the topological insulator is metallic surface states protected by the time reversal symmetry, though the bulk state is an insulator. The topological insulator is identified primarily by a topological index $v_0=1$, while the another class with $v_0=0$ includes the trivial insulator without the surface state. The transition between different topological classes is prohibited, unless the gap of bulk insulator state closes. Now, considering the realistic band structure of SmB₆, we examine the possibility of topological Kondo insulator for the compound. As the result, SmB₆ belongs to the class of strong topological insulator with $v_0=1$. In the seminar, we will discuss recent experimental data to compare with our result.

.....

標題:理論セミナー:Description of Fermionic Wavefunctions by Symmetric Tensor Decomposition 日時:2014年2月14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:植村 渉 所属:東京大学物性研究所 要旨:

Numerical calculation of the ground state energy of many electron systems is a very important problem of the computational physics. There exists the exact diagonalization (ED) method to exactly calculate the energy, but ED method requires exponential computational cost as the system size increases. One recipe for this problem is to decompose the wavefunction into smaller pieces of low rank tensors. When we decompose the wavefunction of electrons, it is important to explicitly consider the antisymmetry of the wavefunction. In this regard, we propose Symmetric Tensor Decomposition CI (STD-CI)[1]. In STD-CI, Symmetric Tensor Decomposition technique is applied on the symmetric part of the wavefunction, and we can operate all the calculation with $O(N^6)$ calculation steps, where N is the number of electrons. We will report on several numerical results of STD-CI for small molecules. We lately found that STD-CI is not very much suited for some highly correlated systems, such as H₂O. Therefore we constructed an extended formalism of STD-CI. Therefore we can obtain better energy in ESTD, compared with STD-CI. Also, the calculation cost is reduced to $O(N^5)$ in ESTD. This immediately means that we can calculate much larger systems in ESTD than in original STD-CI. In ESTD, we found more simple formalisms to express the wavefunction norm and the energy. We will report on several numerical results of ESTD.

[1] W. Uemura and O. Sugino, Phys. Rev. Lett. 109, 253001 (2012).

標題:放射光セミナー:多成分磁気構造を持つマルチフェロイックオリビン型酸化物 Mn₂GeO₄ に対するマルチプローブ 研究

日時: 2014年2月18日(火) 午後1時30分~

場所:物性研究所本館6階第4セミナー室(A614)

講師:本田 孝志

所属:大阪大学大学院 基礎工学研究科

要旨:

近年、オリビン型マンガン酸化物 Mn2GeO4において、5.5K以下でマルチフェロイック特性が観測された[1,2]。このマルチフェロイック特性の起源解明のため中性子線回折実験を行った結果、磁気構造がらせん成分及び強磁性成分を包含した多成分磁気構造であることがわかり、同物質におけるマルチフェロイック特性の起源に関係していることが示唆されている。さらに本特性の発現機構を調べるため、電場・磁場・圧力といった種々の摂動下でマクロ測定手法(磁化測定・比熱測定・誘電測定)とミクロ測定手法(中性子回折・放射光 X 線回折)を組み合わせ、同物質の構造及び電気的・磁気的物性の詳細を観測した。

本セミナーでは、これらのマクロ及びミクロ測定の結果をもとに Mn₂GeO₄ におけるマルチフェロイック特性の発現起 源に関して議論する。

[1] J. S. White, T. Honda et al., Phys. Rev. Lett. 108, 077204 (2012).

[2] T. Honda et al., J. Phys. Soc. Jpn. 81, 103703 (2012).

物性研だより第 54 巻第 1 号 45

標題:東京大学放射光アウトステーション報告会「SPring-8 BL07LSUの現状と第Ⅱ期への展望」

日時: 2014年2月19日(水) 午前10時~

場所:物性研究所本館6階大講義室(A632)

要旨:

東京大学放射光連携機構が SPring-8 に建設したアウトステーション BL07LSU は、建設開始から5年が経過し、ビームラインとエンドステーションが整備されてきた。現在、世界最高レベルの放射光を利用した分光実験から、最先端の研究成果が公表されている。

本研究会では、これまでに行われた5年間の研究成果とビームライン・エンドステーションの現状を報告するとともに、 今後の5年間に行うビームライン・エンドステーションの整備計画及び研究課題について議論する。

世話人:小森文夫、辛 埴、松田巌、原田慈久、和達大樹(内線: 63310)

e-mail: komori :at: issp.u-tokyo.ac.jp, shin@issp.u-tokyo.ac.jp

詳細ページ:東京大学放射光アウトステーション報告会詳細

http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/labs/sor/isspwork2014_2.html

標題:物性理論研究部門 学位論文発表会

日時: 2014年2月21日(金) 前10時30分~午後5時30分

場所:物性研究所本館6階 第5セミナー	-室	(A615)
---------------------	----	--------

要旨:

10:30-10:45	岡田 大(修士論文,上田研究室)
	磁場中角度分解電子ラマン散乱による超伝導ギャップの異方性の解析
10:45-11:00	曽弘博(修士論文, 加藤研究室)
	双安定進化ゲームの確率的ダイナミクスに対する空間自由度の影響
11:00-11:15	鈴木 貴文(修士論文, 加藤研究室)
	振動外場下における量子ドットの非平衡輸送現象に関する理論的研究
11:15 - 11:30	押川公成(修士論文, 川島研究室)
	Zq 異方性のある XY モデルのスケーリング関係式
11:30-11:45	桐井 智弘(修士論文, 川島研究室)
	ドロプレット描像にもとづく階層的モデルの臨界現象
11:45 - 15:00	(休憩)
15:00-15:15	堀田 俊樹(修士論文, 藤堂研究室)
	長距離相互作用のあるイジング模型の臨界指数とユニバーサリティクラス
15:15-15:40	本山 裕一(博士論文, 藤堂研究室)
	量子モンテカルロ法によるベリー位相の計算と低次元磁性体の量子相転移の研究
15:40 - 15:55	毛利宗一朗(修士論文,押川研究室)
	J1-J3-J4 モデルの量子相転移のユニバーサリティークラス
15:55 - 16:20	Wenxing Nie(博士論文, 押川研究室)
	粒子統計とフラストレーションの基底状態エネルギーに対する影響
16:20 - 16:35	(休憩)
16:35 - 16:50	田中 将太(修士論文, 杉野研究室)
	密度汎関数理論による vdW-DF を用いた三体分散力エネルギーの研究
16:50-17:05	弘瀬 大地(修士論文, 杉野研究室)
	全電子第一原理 GW+Bethe-Salpeter 計算
17:05-17:30	植村渉(博士論文, 杉野研究室)
	対称テンソル分解によるフェルミ粒子系の波動関数の記述

第1回 柏キャンパス技術発表会

これまで物性研究所では技術職員の情報や技術を研究所全体で共有し、技術職員の職務の効率化や能力の向上すること を目的として、2年に一度の頻度で技術発表会を開催してきました。前回の発表会では、ゲストとして宇宙線研究所、大 気海洋研究所の技術職員の方にも発表をしていただきました。本年度は新しい試みとして、両研究所も主体的に関わって いただき、柏キャンパスの3研究所に所属する技術職員が合同で発表会を開催する運びとなりました。

技術職員は研究をサポートする役割を担っており、最前線の研究を支えるためには技術的な開発や事務的な職務までこ なして、その中で様々な試行錯誤がなされていますが、(失敗も含めて)その多くは、隣の研究室でも知られていないこと が多いと思われます。本年度は東京大学に総合技術本部が立ち上げられ、東大全体においても技術職員の経験や技術、能 力を有効に活用する試みがなされ始めようとしています。技術職員一人一人の能力が活用されるためにも、技術職員自身 から情報を発信していく場としてもこの発表会を考えています。本発表会はどなたでも自由聴講できますので、より多く の方の参加をお待ちしています。

主催:第1回東京大学柏キャンパス技術発表会 実行委員会 参加部局:東京大学物性研究所、東京大学大気海洋研究所、東京大学宇宙線研究所 第1回 東京大学柏キャンパス技術発表会実行委員 実行委員長 飯盛 拓嗣(東京大学物性研究所) 実行委員 東谷 千比呂(東京大学宇宙線研究所) 森山 彰久(東京大学大気海洋研究所) 田村 千織(東京大学大気海洋研究所) 野澤 清和(東京大学物性研究所) 礒部 正彦(東京大学物性研究所) 矢田 裕行(東京大学物性研究所)

標題:理論インフォーマルセミナー:Energy transport driven by athermal non-Gaussian fluctuations 日時:2014年2月24日(月) 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. Kiyoshi KANAZAWA

所属: Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University

要旨:

Due to recent experimental development, manipulation for small system is a topic of wide interest. For example, we can manipulate small systems in micrometer order, such as colloidal and biomolecule systems, using optical tweezers. One formalism to discuss limitation of manipulation is "stochastic thermodynamics." In stochastic thermodynamics, systems are modeled as stochastic processes, and thermodynamic quantities (i.e. work and heat) are discussed not only on the level of average, but also on the level of a single trajectory. In particular, systems attached on thermal environments are modeled with the Gaussian Langevin equations, which are consistent with experimental results (including the Fourier law and the fluctuation theorem). However, few of previous studies have addressed systems attached on athermal environments although athermal non-Gaussian fluctuations are experimentally known to appear in electrical and biological systems. For example, what kind of modification is necessary for the Fourier law and the fluctuation theorem to understand energy transport between athermal environments?

In this seminar, we report our study of energy transport driven by athermal non-Gaussian fluctuations. In the first part, we extend the formulation of stochastic thermodynamics toward athermal non-Gaussian systems [1]. We define thermodynamic quantities such as work and heat. We remark that the stochastic integral, which is a mathematical tool, is an important issue to define thermodynamic quantities because differential rules in stochastic processes are different from the ordinary calculus. We discuss an appropriate stochastic multiplication for heat in the case with non-Gaussian noises. In the next part, we discuss energy transport between athermal environments [2]. We consider two athermal environments and attach a conducting wire between them. We model this setup as rotational Langevin equations driven by non-Gaussian noises, and we obtain the following results: (1) we obtain a generalized Fourier law, which describes the average of energy current. (2) We obtain a generalized heat fluctuation relation to reveal the fluctuating property of athermal systems. (3) We show that the direction of energy current can be changed by choosing appropriate conducting devices, which implies violation of the zeroth law of thermodynamics.

K. Kanazawa, T. Sagawa, and H. Hayakawa, Phys. Rev. Lett. 108, 210601 (2012).
 K. Kanazawa, T. Sagawa, and H. Hayakawa, Phys. Rev. E 87, 052124 (2013).

標題:放射光セミナー:LaNiO。極薄膜における次元性制御金属絶縁体転移と界面ダイポール形成

日時: 2014年2月25日(火) 午後3時30分~

場所:物性研究所本館6階第4セミナー室(A614)

講師:坂井 延寿

所属:高エネルギー加速器研究機構 物質構造研究所

要旨:

近年の酸化物薄膜作製技術の発展により、強相関酸化物においても原子レベルで平坦な表面および界面を持つ薄膜や超格子の作製が可能になっている。これに伴い、界面における電気的・磁気的相互作用や量子井戸構造における量子化を利用して、バルクでは発現しない物性を探索する試みが精力的に行われている。典型的な常磁性金属である LaNiO₃においても、数原子層程度の薄膜や超格子構造では、磁気秩序を伴った新奇な絶縁体状態が発現することが報告されている [1, 2]。

本講演ではこの LaNiO₃ に対して放射光光電子分光法を用いた研究として、LaNiO₃ における膜厚依存金属絶縁体転移の起源の解明[3]と LaNiO₃ 薄膜と SrTiO3 基板間における界面ダイポールの形成について報告する。また、観測された界面ダイポールを用いた新たな物性制御の可能性についても議論したい。

[1] R. Scherwitzl, et al., Phys. Rev. Lett. 106, 246403 (2011).

[2] A. V. Boris, et al., Science 332, 937 (2011).

[3] E. Sakai, et al., Phys. Rev. B 87, 075132 (2013).

標題:新物質セミナー:水素系の量子化学-量子多成分系分子理論の開発-日時:2014年3月4日(火) 午後1時30分~ 場所:物性研究所本館6階第5セミナー室(A615) 講師: 立川 仁典 所属:横浜市立大学 大学院生命ナノシステム科学研究科 要旨:

水素結合系やプロトン(水素)移動反応など、多くの過程において水素原子核の量子力学的性質が重要であることが見出 されている。また H/D 同位体効果に伴う、例えば水素結合型強誘電体における大きな相転移温度や構造変化など、従来の 第一原理手法だけでは直接評価することのできない同位体置換による物性変化も多く報告されている。そこで我々は、こ のような問題に対して理論的にアプローチすべく、核・電子混合系を量子力学的に取り扱うための量子多成分系分子理論 を開発してきた。具体的には、波動関数レベルでの(I)多成分系分子軌道(MC_MO)法[1]、(II)多成分系量子モンテカルロ (MC QMC)法[2]、(III)多成分系密度汎関数(MC DFT)法[3]、さらには温度効果をも考慮できる(IV)第一原理経路積分分子 動力学(ab initio PIMD)法[4]、である。

本発表では、このような量子多成分系分子理論の概観を述べたのち、いくつかの具体的計算例を紹介したい。まず初め に多成分系分子軌道(MC_MO)法を用いた水素結合型強誘電体における大きなH/D同位体効果へのアプローチ[5]を述べる。 その後、経路積分法を用いた低障壁水素結合系の理論解析を取り上げ、H₃O₂-イオン[6]における幾何学的同位体効果や その温度依存性を報告したい。



Figure 1. Schematic illustration of path integral approach.

References:

- [1] M. Tachikawa, Chem. Phys. Lett., 360, 494-500 (2002). T. Ishimoto, M. Tachikawa, and U. Nagashima, J. Chem. Phys., 128, 164118 (9pages) (2008). K. Koyanagi, Y. Takeda, T. Oyamada, Y. Kita, and M. Tachikawa, Phys. Chem. Chem. Phys., 15, 16208-16213 (2013).
- [2] Y. Kita, R. Maezono, M. Tachikawa, M. Towler, and R. J. Needs, J. Chem. Phys., 131, 134310 (6pages) (2009), 135, 054108 (5pages) (2011).
- [3] T. Udagawa and M. Tachikawa, J. Chem. Phys., 125, 244105 (9pages) (2006).
- [4] M. Shiga, M. Tachikawa, and S. Miura, Chem. Phys. Lett., 332, 396-402 (2000). K. Suzuki, M. Tachikawa, and M. Shiga, J. Chem. Phys., 132, 144108 (7pages) (2010). M. Daido, Y. Kawashima and M. Tachikawa, J. Comput. Chem., 34, 2403-2411 (2013). Y. Kawashima and M. Tachikawa, J. Chem. Theor. Comput., (2014) in press.
- [5] M. Tachikawa, Integrated Ferroelectrics, 100, 72-78 (2008). T. Ishimoto and M. Tachikawa, Prog. Theor. Chem. Phys., B27, 303-329 (2013).
- [6] M. Tachikawa and M. Shiga, J. Am. Chem. Soc. (Commnication), 127, 11908 (2005). K. Suzuki, M. Shiga, and M. Tachikawa, J. Chem. Phys., 129, 144310 (8pages) (2008).

```
標題:理論セミナー:Variational Gutzwiller projection approach to SU(N) symmetric Heisenberg-models
日時:2014年3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:Miklós Lajkó

所属:東京大学 物性研究所

要旨:

SU(N) symmetric models arise in different contexts in correlated insulators. In these models spins with N possible states or colors are present at each site, and the Hamiltonian is the exchange of the color states of neighboring sites. The simplest example is the usual SU(2) Heisenberg-model of a magnetic Mott-insulating state. When in addition, orbital degrees of freedom are also present, the relevant effective model is the spin-orbital Kugel-Khomskii model, which in its most symmetric form is identical to SU(4) symmetric Heisenberg-model. The S = 1 spin systems with bilinear $S \cdot S$ and biquadratic $(S \cdot S)^2$ interactions are SU(3) symmetric for special values of the coupling constants. For ultra-cold alkaline earth atoms trapped in optical lattices the nuclear spin F is the only relevant degree of freedom, with N=2F+1 possible states, which can lead to an SU(N) symmetric model as well.

We studied the SU(3), SU(4) and SU(6) symmetric Heisenberg-model on the honeycomb lattice by variational Monte Carlo calculations on Gutzwiller projected free-fermionic Fermi-sea states. This method is really effective in calculating bond energies and spin-spin or dimer-dimer correlations for larger systems. It also enables us to compare the energies of different scenarios found by other methods (bond-meanfield approximation, iPEPS, exact diagonalization, flavor-wave theory).

In my talk I will introduce the basics of the Gutzwiller projection and the Monte Carlo method used in the calculations. I will discuss our results, especially the case of the SU(4) symmetric Heisenberg-model on the honeycomb lattice, and compare our findings with other numerical methods.

[I] P. Corboz, M. Lajkó, A. M. Läuchli, K. Penc, F. Mila: Phys. Rev. X 2, 041013 (2012).
[II] P. Corboz, M. Lajkó, K. Penc, F. Mila, A. Läuchli, Phys. Rev. B 87, 195113 (2013).

[III] M. Lajkó, K. Penc, Phys. Rev. B 87, 224428 (2013).

標題:量子揺らぎ内包スピンアイス Pr₂Zr₂O₇における磁性と誘電性

日時:2014年3月10日(月) 午後1時30分~午後3時30分

場所:物性研究所本館6階 第5セミナー室(A615)

講師:木村 健太

所属:大阪大学 基礎工学研究科

要旨:

我々は、量子揺らぎを内包する幾何学的フラストレート磁性体に注目し、新奇な磁気状態の発見と解明を目指している。 本セミナーでは、最近我々が見出した、パイロクロア磁性体 Pr₂Zr₂O₇における"量子揺らぎを内包するスピンアイス状態" について紹介したい[1]。

スピンアイスは、パイロクロア格子上のイジングスピンが作る古典的なスピン液体であり[2]、氷と同様に"2-in, 2-out" 相関に起因する巨視的縮退が基底状態に残ること[3]、さらには、スピンフリップによる励起があたかも磁気モノポールと して振る舞うことから[4]、大きな注目を集めてきた。最近では、この非自明な古典スピン液体に量子揺らぎを導入するこ とで如何なる量子状態が実現するかに大変興味が持たれている[5-7]。今回我々は、単結晶を用いた磁気的・熱的測定によ り、Pr₂Zr₂O₇がスピンアイスで期待される 2-in, 2-out"相関を持ち、なおかつ、強い量子揺らぎを内包することを突き止 めた。これらの結果は、Pr₂Zr₂O₇における磁気モノポールが量子力学的運動を行っている可能性を示唆する。また、最近 の理論研究により、このような Pr 系スピンアイスにおける量子揺らぎの起源として、四重極を介した相互作用の重要性 が指摘されている[7]。そこで、Pr 系スピンアイス研究の新たな切り口として、電荷分布に対する高い応答性が期待され る誘電率測定を行った。発表では、以上の実験結果を踏まえて、Pr₂Zr₂O₇における磁気状態と量子揺らぎの起源について 議論する。

[1] K. Kimura et al., Nat. Commun. 4 1934 (2013).

[2] S. T. Bramwell et al., Science 294, 1495 (2001).

[3] A. P. Ramirez, et al., Nature 399, 333 (1999).

[4] C. Castelnovo et al., Nature 451, 42 (2008).

[5] K. A. Ross et al., PRX 1, 021002 (2011).

[6] Y. Machida et al., Nature 463, 210 (2010).

[7] S. Onoda et al., PRL 105, 047201 (2010).

標題:LASOR セミナー:Multiprobe characterization of AF/SC phase boundary of Ba(Fe,Ni)2As2

日時:2014年3月12日(水) 午後2時~

場所:物性研究所本館6階第1会議室(A636)

講師:Dr.Yasutomo Uemura

所属: Physics Department, Columbia University, New York, USA

要旨:

To elucidate coexistance of antiferromagnetic (AF) and superconducting (SC) phases in Ba(Fe,Ni)2As2, MuSR (Uemura, Luke), Moessbauer (Saitovitch), neutron (Dai), Specific Heat (Ronning), optical conductivity (Tajima/Uchida) and STM (Pasupathy) measurements have been performed using the same single crystal specimens (Dai). For the (Fe1.915Ni0.085) sample at near AF/SC boundary, MuSR found static magnetic order in the entire volume fraction with half/half volumes of strong/weak magnetism, and Moessbauer detected the half volume of the strong magnetic region alone.

These local probes found static magnetism much more robust than does the neutron Bragg peak, indicating highly random spatial spin correlations. Specific heat, optical and STM revealed superconducting gap in nearly full volume fraction developing below superconducting Tc in the same specimen. These results provide decisive evidence for nearly full overlap of the AF and SC orders in real space, which is consistent with the s+- pairing but putting constraints in possible role of quantum criticality. In systems with higher dopings, the static magnetic order disappears as the results of dimishing volume fraction of the magnetically ordered region, suggesting phase separation and first-order quantum evolution.

This observation further gives caution to the popular view of stressing 2-nd order quantum criticality in unconventional superconductors.

Collaborative work performed by the groups shown in () above.

標題:トポロジカル絶縁体における表面量子異常ホール電流と電気磁気効果(新量子相 Lecture Series 第3回)

日時:2014年3月17日(月) 午前10時~午後0時

場所:物性研究所本館6階大講義室(A632)

講師:野村 健太郎

所属:東北大金研

要旨:

近年注目を集めているトポロジカル絶縁体と呼ばれる系では、バルクには有限のエネルギーギャップが存在するが試料 表面にはスピンと運動量が直交する、新奇なギャップレス表面状態が実現する。この表面状態は時間反転対称性を有する 乱れの下でアンダーソン局在を起こさない強固な金属状態であるが、磁性不純物などの磁気的相互作用がある場合には量 子化された異常ホール効果が実現することが知られている。講演ではトポロジカル絶縁体の表面輸送現象における伝導特 性の理論をレビューする。表面量子異常ホール効果に起因する現象として電気的性質と磁気的性質が非自明に結合する電 気磁気効果がある。トポロジカル絶縁体に電場を印加する事によって磁気モーメントを発生させたり、磁場を印加する事 で電気分極を発生させることができる。 微視的な格子模型を用いた電気磁気効果の研究を紹介する。

標題:中性子セミナー

日時:2014年3月27日(木) 午後3時~午後5時

場所:物性研究所本館6階 第2セミナー室 (A612)

講師:Dr. Micheal Erich Ohl

所属: Outstation at the Spallation Neutron Source, USA

要旨:

The principle of Neutron Spin Echo (NSE) to encode and decode the energy transfer of Neutrons in the spin of the scattered Neutrons is well known since 1971. About 8 years later IN11, the first NSE spectrometer worldwide, at the Institute Laue-Langevin in Grenoble, France was built and went into operation with first results. This was the start of many more NSE spectrometer to come later and up to now NSE spectrometer still possess the highest energy resolution in the field of Neutron scattering. As of today worldwide about 7 NSE spectrometer of the generic IN11 type are operated in Europe and the USA. The newest instrument is the NSE at the Spallation Neutron Source in Oak Ridge, USA, which shows, those kind of spectrometer can be adapted for the first time at spallation sources. Other new developments have been adapted as well e.g. fully magnetic shielding chamber. In this talk we would like to talk about current and newest achievements of the generic IN11 type Spin Echo spectrometer both in the field of instrumentation and science.

標題:放射光セミナー:共鳴軟 X 線散乱により観測した IrTe₂ストライプ相の Te-Ir 共有ボンドの電荷変調

日時:2014年4月4日(金) 午後1時30分~

場所:播磨中央管理棟3F会議室(TV会議物性研究所本館6階第一会議室)

講師:田久保 耕

所属:ブリティッシュコロンビア大学

要旨:

IrTe2は、280K で Q=(1/5,0,-1/5)の長周期歪みを伴う構造相転移を起こす物質である[1,2]。特に Pt, Pd ドープによって 超伝導相が出現するため、銅酸化物や鉄 砒素系高温超伝導体との関連も興味を持たれ、精力的に研究されている。また最 近の単結晶構造解析の結果、低温相は Ir サイトと Te サイトのストライプ状の周期構造を持っていることも発見された[3]。 彼らの研究では、一部の Ir サイト間に二量体化が起こっているため、Ir 5d-Ir 5d の軌道整列がこの相転移の起源である とされている。しかし一方で、光電子分光やバンド計算を含むいくつかの研究においては、フェルミ面上の状態密度に Te 5p ホールの存在が示唆され、この相転移は Te 5p ホールのネスティング(Van Hove singularity)によるものであるという 主張もされていて、議論がつきない[4]。

そこで今回、我々は Te 3d(M4,5)吸収端を用いた X 線吸収分光(XAS)、共鳴軟 X 線散乱(RSXS)測定を行い、IrTe₂スト ライプ相の Te サイトの電荷変調を観察した。その結果、Te 3d XAS には比較的大きな pre-edge 構造が観察された。この ことは Te 5p-Ir 5d の共有原子価状態(Te 5p ホール)の存在を直接的に示唆する。また、この pre-edge に関する Q=(1/5,0,-1/5)の RSXS のエネルギースペクトルの解析から、この低温相の変調は、上述の Ir 5d-Ir 5d 二量体化と結合し た Te 5p-Ir 5d 共有ボンドの電荷変調を起源とするものであることが明らかになった。

8.....

[1] S. Pyon et al., J. Phys. Soc. Jpn. 81, 053701 (2012).

- [2] J. J. Yang et al., Phys. Rev. Lett. 108, 116402 (2012).
- [3] G. L. Pascut et al., arXiv:1309.3548.

[4] T. Qian *et al.*,arXiv:1311.4946v1.