



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：産業技術総合研究所, 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：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  $\mathbf{S} \cdot \mathbf{S}$  and biquadratic  $(\mathbf{S} \cdot \mathbf{S})^2$  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  $\text{Pr}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  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  $\text{Pr}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  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]。

スピンアイスとは、パイロクロア格子上的イジングスピンの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NFL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を持たれている[5-7]。今回我々は、単結晶を用いた磁気的・熱的測定により、 $\text{Pr}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  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、 $\text{Pr}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  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、 $\text{Pr}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$ 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  $\text{Ba}(\text{Fe,Ni})_2\text{As}_2$

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 coexistence of antiferromagnetic (AF) and superconducting (SC) phases in  $\text{Ba}(\text{Fe,Ni})_2\text{As}_2$ , 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  $(\text{Fe}_{1.915}\text{Ni}_{0.085})$  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  $T_c$  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 diminishing 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氣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氣的性質と磁氣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 IrTe<sub>2</sub> 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：**

IrTe<sub>2</sub> 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、IrTe<sub>2</sub> 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。

[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.