物性研究所セミナー

標題：中性子セミナー：Magnetic Higgs phase in quantum spin ice $Yb_2Ti_2O_7$：experimental studies
日時：2014 年 4 月 2 日(水)　午後 2 時～午後 3 時
場所：物性研究所本館 6 階 第 4 セミナー室（A614）
講師：Lieh-Jeng Chang
所属：National Cheng Kung University、台湾
要旨：

The pyrochlore magnet $Yb_2Ti_2O_7$ has attracted great interest as the first candidate to be a magnetic analogue of the Higgs phase or a U(1) quantum spin liquid, depending on different crystals used for the experiments. Via comprehensive polarized diffuse neutron scattering experiments on a high quality single-crystal $Yb_2Ti_2O_7$ sample, we had observed the first-order phase transition occurred at Tc ～ 0.21 K, separating a high-temperature magnetic Coulomb phase, that is characterized by pinch-point features, and a low-temperature magnetically ordered phase, that exhibits finite planar components of pseudospins [1]. Since this planar component can be described as the Bose condensation of spinons, carrying emergent magnetic monopoles, coupled to the U(1) gauge field within the framework of a quantum spin ice model, and the transition temperature is low enough for a quantum Coulomb liquid behavior to appear, this first-order phase transition has been regarded as a magnetic analogue of a Higgs transition. In this talk, we will present our new muon spin relaxation (μSR) and specific-heat measurements on polycrystalline and single-crystal samples of $Yb_2Ti_2O_7$. The specific heat exhibits a sharp peak at Tc between 0.21 and 0.26 K. The magnetic entropy released between 50 mK and 30 K amounts to Rln 2 per Yb. Observations of a steep drop in the asymmetry of zero-field μSR time spectra at short time scales, as well as a decoupling of the muon spins from the internal field in longitudinal magnetic fields of $\leq$ 0.25 T, below Tc demonstrate the formation of static magnetic moments. These evidences strongly support the scenario of the magnetic Higgs phase.

標題：理論セミナー：Exotic phases in spin-orbit coupled correlated electron systems
日時：2014 年 4 月 8 日(火)　午前 11 時～午後 0 時
場所：物性研究所本館 6 階 第 5 セミナー室（A615）
講師：Eun-Gook Moon
所属：University of California, Santa Barbara
要旨：

Correlated electron systems with strong spin-orbit coupling are one of the cutting edge areas in modern condensed matter physics. Interplay between spin-orbit coupling and Coulomb interaction provides a new route to access novel phases, which generates active research in recent theory and experiment. In this seminar, we discuss attainable exotic phases in three dimensional spin-orbit coupled correlated electron systems. We show that quantum critical phases and topological phases may be realized in systems with proper symmetries using standard renormalization group methods. One of the important implications of our finding is to provide a concrete counter example to the common belief that electron correlation effect is relatively weak in three spatial dimensions. Application to pyrochlore iridates and relation with recent experiments are also discussed.

標題：中性子セミナー：スピン状態制御によって 2 つの非磁性相の間に現れる $LaCo_{1-x}Rh_xO_3$ の弱強磁性

日時：2014 年 4 月 9 日(水) 午後 2 時 30 分～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：浅井 晋一郎

所属：名古屋大学理学系研究科

要旨：

遷移金属酸化物では、フント結合エネルギーと結晶場分裂の大小関係によって遷移金属イオンは様々な電子状態（スピン状態）をとることができ、前者が強い場合には高スピン状態、後者が強い場合には低スピン状態と呼ばれる状態が実現する。特に、2 つのエネルギーのスケールが同程度の場合には外部から磁場、圧力、温度変化などの摂動を加えただけで大きく遷移金属イオンのスピン状態が変化する、これはスピン状態クロスオーバーとして知られている。ペロブスカイト型酸化物 $LaCoO_3$ は Co^{3+} ($3d^6$)がスピン状態クロスオーバーを示す物質として 50 年近く研究されている。この物質は温度上昇を伴い 100 K 付近のスピン状態クロスオーバーを通して非磁性の低スピン状態から磁性をもつ励起状態へ大きく変化するが、その励起状態の詳しい電子状態については未だに統一解が得られていない。一方で、$LaRhO_3$ における Rh^{3+} ($4d^6$) は広がりの大きい $4d$ 軌道をもつために結晶場分裂が大きく、非磁性の低スピン状態を高温まで安定に保つ。さらに、これら 2 つの酸化物は低温ではともに非磁性にも関わらず、その混晶系である $LaCo_{1-x}Rh_xO_3$ では低温まで磁性を安定に保つことが報告されている[1]。

我々は $LaCoO_3$ における Co サイトに対する元素置換効果を通して Co^{3+}のスピン状態を制御することを目的に、Rh 置換による Co^{3+}のスピン状態の変化を議論した。格子体積と磁化の温度変化の振る舞いから $LaCo_{1-x}Rh_xO_3$ において 100 K 付近のスピン状態クロスオーバーが抑えられ、低温まで励起状態が安定化されることが分かった。さらに、$0.1 \leq x \leq 0.4$ では最大 15K の強磁性磁気秩序が実現することを見出した。この強磁性はよく知られた $La_{1-x}Sr_xCoO_3$ の金属強磁性とは異なり、Co^{3+}のみで誘起される強磁性である。さらに、詳細な磁化測定と中性子散乱実験から、この系で実現する磁気秩序は Rh 置換によって強く乱された弱強磁性であることが分かった。また、我々は置換する元素として 2 種類の非磁性イオン(Rh^{3+}、Ga^{3+})を選び、スピン状態の変化に伴って大きく変化することが期待される構造物性と磁性の変化について研究を行い、元素置換効果による Co^{3+}のスピン状態の変化をより詳細に議論した。これら 2 つの置換効果は大きく異なり、Rh を置換しても室温付近の磁化の大きさはほとんど変化しない一方で、Ga の置換は磁化を大きく減少させることが分かった。このような振る舞いは Co^{3+}のスピン状態が 1 種類で表せるような均一な状態では説明することができず、Co^{3+}のスピン状態が非磁性の低スピン状態と磁性をもつ高スピン状態が混ざり合った不均一な状態であることを支持する。さらにこの置換効果は置換された Rh と Ga はそれぞれ低スピン状態と高スピン状態の Co^{3+}を優先的に減少させると考えることで説明できる。本講演ではさらに詳細な解析によって格子体積と磁化の実験結果から Co^{3+}のスピン状態についてより定量的な解析を行った結果についても報告する。

[1]. T. Kyomen *et al*., Phys. Rev. B 67 (2003) 144424.

標題：新物質セミナー：三角格子有機系 κ-H_3(Cat-EDT-TTF)$_2$ における ^{13}C-NMR で見た量子スピン液体状態と電荷秩序相
日時：2014 年 4 月 18 日(金) 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：伊藤 哲明
所属：東京理科大学理学部応用物理学科
要旨：

近年合成された単一ユニット有機系 κ-H_3(Cat-EDT-TTF)$_2$ [1]は、三角格子を有する Mott 絶縁体であると考えられている。磁化率測定では磁気秩序が確認されず、κ-(BEDT-TTF)$_2$Cu$_2$(CN)$_3$、EtMe$_3$Sb[Pd(dmit)$_2$]$_2$（以下 ET、dmit と略称）に続く、3 例目の三角格子スピン液体候補物質である。我々はこの物質の 1.6K までの ^{13}C-NMR 測定を行い、確かに磁気秩序が生じず、又、スピンギャップも生じていないことを確定させたので、まずこの点について解説する。

また、三角格子においては、通常の隣接ハイゼンベルグ相互作用を持つ 1/2 スピン系ではスピン液体が実現しないことはほぼ確実視されており、スピン液体実現には、隣接ハイゼンベルグ相互作用以外の「別の相互作用要素」が必要であると認識されている。ET、dmit においては、常圧のすぐ近傍に金属-Mott 転移があり、この弱い Mott 絶縁性が「別の相互作用要素」を生み出し、これがスピン液体実現に重要な役割を果たしている可能性が議論されている。一方、κ-H_3(Cat-EDT-TTF)$_2$ では ^{13}C-NMR スピン-格子緩和率より、Mott 絶縁性は比較的強く、金属-Mott 転移不安定性からは遠いであろうことが示された。しかしながら今回測定した ^{13}C-置換体においては、Mott 絶縁体相と並び、水素原子移動を伴う電荷秩序相の共存が観測され、この電荷秩序相が Mott 絶縁体相にエネルギー的に非常に拮抗していることが強く示唆された。この結果についても紹介し、κ-H_3(Cat-EDT-TTF)$_2$ におけるスピン液体状態と ET、dmit におけるスピン液体状態の類似点・相違点について議論する予定である。

[1] T. Isono *et al.*, Nature Commun. 4, 1344(1-6) (2013).

標題：理論インフォーマルセミナー：Charged quantum entanglement and its application to SPT phase
日時：2014 年 4 月 22 日(火) 午後 3 時～午後 4 時
場所：物性研究所本館 6 階 第 4 セミナー室（A614）
講師：松浦 俊司
所属：McGill University
要旨：

Quantum entanglement has emerged as a very useful probe in physics and quantum information.

In this talk, we will introduce a new class of entropies, called charged entanglement (Renyi) entropies, that measures the degree of quantum entanglement in different charge sectors.By using the new entropies, we characterize symmetry protected topological phases.

We will also consider phase transitions in (charged) Renyi entropies.

標題：理論セミナー：1/5 周期欠損正方格子ハバード模型におけるモット転移

日時：2014 年 4 月 25 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：柳　有起

所属：東京理科大学理工学部物理学科

要旨：

モット転移は強相関電子系における基本問題の一つであり、実験・理論の両面から盛んに研究されている。モット転移の性質は connectivity や幾何学的フラストレーションといった格子構造に強く依存することが知られているが、特に、非ブラベー格子におけるモット転移は興味深い。非ブラベー格子では、ユニットセル内に非等価な原子が 2 つ以上存在するため、電子構造は多バンドとなり、様々な金属絶縁体転移の可能性が考えられる[1-3]。

最近、我々は非ブラベー格子の一種である 1/5 周期欠損正方格子上のハバード模型[4,5]をセル型動的平均場理論を用いて調べた。その結果、模型が有する 2 種類の　非等価な遷移積分 t1，t2 の比によってモット転移の性質が大きく異なることが分かった。プラケット内遷移積分 t1 がダイマー内遷移積分 t2 より大きい場合には、モット転移が 1 次転移で生ずる一方、t1<t2 の領域においては、1 次転移の兆候なしに、フェルミ準位上の状態密度が消失する。これは、t1<t2 における金属絶縁体転移がクーロン相互作用 U によって誘起されるリフシッツ転移であることを意味している。また、その物理的起源は、非局所相関効果によるダイマー化の促進であることが分かった。

[1] S. Sorella, Y. Otsuka and S. Yunoki, Sci. Rep. **2** , 992 (2012).
[2] S. S. Kancharla and E. Dagotto, Phys. Rev. Lett. **98** , 016402 (2007).
[3] S. S. Kancharla and S. Okamoto, Phys. Rev. B **75** , 193103 (2007).
[4] Y. Yamashita, M. Tomura, Y. Yanagi and K. Ueda, Phys. Rev. B **88** ,195104 (2013).
[5] Y. Yanagi and K. Ueda, arXiv:1403.1743.

標題：放射光セミナー：全反射高速陽電子回折(TRHEPD)法による表面構造解析

日時：2014 年 4 月 25 日(金)　午後 1 時～

場所：物性研究所本館 6 階 第 1 会議室（A636）(TV 会議播磨中央管理棟 3Ｆ会議室)

講師：望月 出海

所属：高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所

要旨：

反射高速陽電子回折(RHEPD)は、反射高速電子線回折(RHEED)の陽電子版である。RHEPD は、通常の実験の視射角の範囲で全反射する(Si に 10keV の陽電子を入射する場合の臨界角は 2°)という、RHEED にはない際立った特徴をもっている。

RHEPD は、一宮によって 1992 年に提唱され[1]、1998 年に、放射性同位元素 22Na を陽電子源とするビームを用いて、河裾・岡田によって実証された[2]。最近、原子力機構の装置を 22Na ビームから切り離し、 KEK 低速陽電子実験施設の専用リニアックで生成した高輝度・高強度陽電子ビーム[4]に接続した。その結果、ビームの質が向上し、たとえば Si(111)-(7×7)再構成表面の多くの分数次スポットが見えるようになった。

我々は、このように大幅に質が向上した今、RHEPD を全反射高速陽電子回折（Total Reflection High-Energy Positron Diffraction, TRHEPD）と呼ぶことにした。TRHEPD は、全反射条件で最表面のみの原子配置の情報を得て、次に次第に視射角を増加させながら測定することにより、上から順に表面に隠された部分の原子配置の詳細を知ることができるユニークな手法である。そのために、バルクの結晶の構造解析に X 線回折が果たしている役割を表面構造解析について担うようになる可能性をもっている。

ここでは、TRHEPD の基本的特徴、および Pt/Ge(001)表面、TiO2(110)-(1×2)表面、Ag(111)表面上のシリセン構造の TRHEPD による構造決定の結果を紹介する。

文献

[1] A. Ichimiya, Solid State Phenom. 28/29, 143 (1992).

[2] A. Kawasuso, S. Okada, Phys. Rev. Lett. 81, 2695 (1998).

[3] Y. Fukaya, *et al.*, J. Phys.: Conf. Ser. 443 012068 (2013).

[4] K. Wada, *et a*l., Eur. Phys. J. D 66, 37 (2012).

[5] Y. Fukaya *et a*l., accepted to APEX (2014).

[6] I. Mochizuki, *et al.*, Phys. Rev. B 85, 245438 (2012).

[7] I. Mochizuki, *et al.*, in preparation.

[8] Y. Fukaya *et al.*, Phys. Rev. B 88, 205413 (2013).

標題：理論セミナー：Field theories for polymer containing vesicles

日時：2014 年 5 月 2 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：大矢 豊大

所属：東北大学大学院理学研究科

要旨：

Vesicle is a closed form of a bilayer composed of amphiphilic molecules. It is a simple model of bio-membrane and can enclose some materials inside it. For example, a vesicle can enclose a polymer solution, whose structure is frequently found in biological systems such as endocytosis and exocytosis, and is expected to be applicable to industrial science, such as the drug-delivery system. We studied this system by simulations based on field theories. We adopt a coupled theory between phase field theory(PFT) for deformation of the vesicle and self-consistent field theory(SCFT) for the polymer conformations. Contrary to the preceding studies of hard confinement for polymer solutions where the vesicle does not deform, the combined PFT-SCFT method enables us to realize the soft confinement that has been difficult to simulate only by SCFT. Using such a combined PFT-SCFT method, we obtained equilibrium shapes and dynamical behaviors of the vesicle deformations that are induced by the phase-separated structures of the enclosed polymer solution. As a result, we obtained a rich variety of vesicle shapes, for example symmetric dumbbell and asymmetric pear shapes that can not be obtained by minimizing the free energy of the vesicle without the polymers[2].

Reference

[1] Y.Oya, K. Sato, T. Kawakatsu, Europhys. Lett., 94 (2011) 68004.

[2] Y.Oya and T.Kawakatsu, in preparation.

標題：理論インフォーマルセミナー：Complex rheology of simple soft particles: Role of inertia for shear thickening

日時：2014 年 5 月 8 日(木) 午後 1 時～午後 2 時

場所：物性研究所本館 6 階 第 3 セミナー室（A613）

講師：川崎 猛史

所属：Laboratoire Charles Coulomb, Université Montpellier II

要旨：

We numerically study the rheology of a simple model of soft repulsive particles, and show that nonlinear flow curves reminiscent of experiments on real suspensions can be obtained. By using dimensional analysis and basic elements of kinetic theory, we rationalize these multiple rheological regimes and disentangle the relative impact of thermal fluctuations, glass and jamming transitions, inertia and particle softness on the flow curves.

We characterize more specifically the shear-thickening regime and show that both particle softness and the emergence of a yield stress at the jamming transition compete with the inertial effects responsible for the observed thickening behaviour. This allows us to construct a dynamic state diagram, which can be used to analyze experiments.

Ref.

Takeshi Kawasaki, Atsushi Ikeda, and Ludovic Berthier, arXiv:1404.4778.

標題：Topological Phases in Quantum Materials（新量子相 Lecture Series 第 4 回）

日時：2014 年 5 月 20 日(火) 午前 10 時～午後 0 時

場所：物性研究所本館 6 階 第 5 セミナー室（A615）

講師：Yong-Baek Kim

所属：University of Toronto

備考：

We discuss recent theoretical and experimental attempts to understand possible topological phases of correlated electrons in quantum materials. After introducing key ideas of topological phases, we focus on two main examples. Firstly, we consider quantum spin liquid phases in frustrated magnets and materials near a metal-insulator transition. Secondly, we discuss topological insulator and other related phases in interacting electron systems with strong spin-orbit coupling. More recent theoretical ideas for generalized topological phases of interacting electron systems will also be discussed.

標題：理論セミナー：Response functions in Spintronics calculated by means of the Kubo formalism

日時：2014 年 5 月 30 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：Hubert Ebert

所属：Department Chemie, Ludwig-Maximilians-Universität München, Germany

要旨：

Kubo's linear response formalism allows to determine the response of a property of a solid to a perturbation in a very general way. A prominent example of application is the evaluation of charge, spin and heat transport coefficients of solid state systems. The scheme of Kleiner [1] to investigate the symmetry of conventional transport coefficients has been extended to describe the symmetry of conductivity tensors appearing in spin- and thermo-magneto-galvanic

transport. Implications for the appearance of interesting effects described by non-zero elements of the respective conductivity tensors are outlined. In recent years several first-principles approaches have been established to treat transverse electron transport phenomena as e.g. the anomalous Hall effect and spin Hall effect. Most of them treat only particular contributions to the full conductivity tensor. In contrast to this, a first-principle approach is presented that is based on the Kubo-Bastin equation [2] and implemented within the fully relativistic KKR (Korringa-Kohn-Rostoker) formalism [3]. This approach is able to treat intrinsic and extrinsic contributions on equal footing. Both contributions from states below (Fermi sea) and at the Fermi level (Fermi surface) are treated and can be analyzed in detail. The approach is applicable to pure systems as well as metallic and semiconductor alloy systems. Several examples (anomalous Hall and anomalous Nernst as well as spin Hall and spin Nernst conductivities) are given to illustrate this analysis in combination with numerical results obtained using the spin-polarized KKR electronic structure method. In addition, corresponding results for the Gilbert damping parameter [4] and the spin-orbit torque [5,6] are presented. Special emphasis will be placed on the role of the so-called vertex corrections that allow to build a bridge to the semi-classical Boltzmann transport formalism.

[1] Kleiner, Phys. Rev. 142, 318 (1966).
[2] Bastin et al., J. Phys. Chem. Solids 32, 1811 (1971).
[3] Ebert, Ködderitzsch, and Minár, Rep. Prog. Phys. 74,096501 (2011).
[4] Gilbert, IEEE Trans. Magn. 40, 3443 (2004).
[5] Manchon and Zhang, Phys. Rev. B 78, 212405 (2008).
[6] Gambardella and Miron, Phil. Trans. R. Soc 369, 3175 (2013).

標題：理論セミナー：Worm Algorithm on Parallel Computer (**ワームアルゴリズムの並列化**)
日時：2014 年 6 月 6 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：川島 直輝
所属：東京大学物性研究所
要旨：

The quantum Monte Carlo with worm update is one of the standard techniques in computational condensed matter physics. For lattice Bose systems and quantum spin systems with magnetic field, it is arguably the best method to explore large systems (provided, as usual, that negative signs do not intervene). To our great regret, the computational task can hardly be split into pieces and assigned to many processors. This is because the worm update of configurations is achieved via a motion of a single point, in contrast to its cousin, the loop update. Recently we proposed a general quantum Monte Carlo algorithm suitable for parallelizing on a distributed-memory computer by domain decomposition. [1] The trick is to introduce a large number of worms and to control its population by a fictitious transverse field. For a benchmark, we study the size dependence of the Bose-condensation order parameter of the hard-core Bose-Hubbard model with L x L x(1/T) = 10,240 x 10,240 x 16, using 3,200 computing cores, which shows good parallelization efficiency.

[1] A. Masaki-Kato, T. Suzuki, K. Harada, S. Todo and NK: Phys. Rev. Lett. 112, 140603 (2014).

標題：理論セミナー：電子ガス中の 1 原子(主に陽子)問題：近藤問題の第 1 原理からの探求とよりよい交換相関エネルギー汎関数の構築

日時：2014 年 6 月 13 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：高田 康民

所属：東京大学物性研究所

要旨：

電子ガス中の 1 原子系に関する研究は 40 年以上の歴史を持つ。それは、この系が金属中の 1 不純物問題の典型であるからで、この研究によって非線形遮蔽や合金形成上有用な原子の埋め込みエネルギーの基本情報が与えられる。また、この系の基底状態エネルギーE0 や基底電子密度 n(r)が高精度で分かれば、密度汎関数理論の中核である交換相関エネルギーExc[n(r)]の汎関数形が、局所密度近似(LDA)を超えて、より正確に決定される可能性があるからである。

さて、この問題は座標原点に置かれた埋め込み原子の原子価 Z とホストになる電子ガス系の平均密度径数 rs の 2 つで完全に記述される。そして、その原子近傍の n(r)はカスプ定理によって n(r) = n(0)exp(-2Zr)と正確に書けるので、Z と rs の関数としての n(0)を求めることが埋め込みエネルギーの決定と共に重要問題になる。

ところで､この系では(原点のごく近傍を除けば) n(r)の変動(フリーデル振動) 自体が平均密度 n0 よりもずっと小さく、かつ、余り急激ではないので、LDA が適用されるものと考えられてきた。しかしながら、得られる n(r)やコーンシャム準位の様相が物理的な直感にそぐわない場合がある。そこで、我々はこの第 1 原理系を(通常、不純物アンダーソン模型によって議論される)近藤問題という観点から見直すことにして、陽子(Z=1)埋め込み系を中心に広い密度範囲(1<RS<rs11.5)、水素陰イオンが電子ガスに閉じ込められている状態。

セミナーでは、この他に、DMC で得られた n(r)を再現する Exc[n(r)]の構築の試みを議論すると共に、(1s ではなく)2p 等の軌道縮重のある原子を挿入したときに出現する局在スピン分極状態(Nazarov, Kim & YT, PRB72, 233205 (2005))を多軌道近藤問題におけるフント則の役割という観点から説明する。

標題：時間分解 2 光子光電子分光を用いたフェルミ縮退形成ダイナミクスの理論と強相関電子系 ARPES におけるコヒーレント成分の消失

日時：2014 年 6 月 18 日(水) 午後 3 時～

場所：物性研究所本館 6 階 第 1 会議室（A636）

講師：富田 憲一

所属：山形大学

要旨：

1. 時間分解 2 光子光電子分光の理論

～伝導帯に光励起された電子のフェルミ縮退形成に向けた緩和ダイナミクス～

近年レーザーの性能が高まり、半導体を光励起することで巨視的な数の電子を伝導帯へ励起させることが可能になっている。金属中の電子がごく少数個励起された時には、クーロン相互作用に起因する電子緩和が重要な役割を果たし、主な緩和過程はきわめて急速に完了する。一方、半導体において、巨視的な数の電子が伝導帯に励起された場合、クーロン相互作用を介した電子緩和は、エネルギー散逸を伴わず有効な熱浴として機能しない。したがって伝導帯電子は、電子-格子相互作用を介してフォノンを放出しながらフェルミ縮退形成へと時間発展する。フェルミ縮退に近づくと低エネルギーフォノンしか緩和に寄与できなくなるため、緩和速度は著しく遅くなることが予想される。これまでに、大阪大学の谷村－金崎両氏らによって、GaAs や InP に対して時間分解 2 光子光電子分光による電子緩和の観測が行われている。本講演では、光励起された巨視的な数の電子が、光学及び音響フォノンとの相互作用を介して伝導帯内で緩和していく過程を理論的に考察する。実験で観測されているサブピコ秒までの急速な緩和とその後の遅い緩和を、スペクトル形状の時間発展まで含めて再現できたので、その詳細について報告する。

2.強相関電子系の角度光電子分光（ARPES）理論

ARPES は言わずと知れた、固体のバンド構造を直接測定できる貴重な実験手段であるが、電子間相互作用や電子格子相互作用に起因する、所謂インコヒーレント成分がスペクトル形状に如何に影響するかは物質依存があり慎重に議論する必要がある。私たちは、経路積分を量子モンテカルロ法で見積もることで、電子間相互作用を近似なしに取り込み光学スペクトルを計算する手法を開発した。この手法を用いて、ARPES における電子間相互作用の効果を調べた結果、中間相関領域よりも相互作用が強いときには、光電子スペクトルはインコヒーレント成分によって支配されており、バンド成分はほとんど含まれていないことが明らかになった。このことは、強相関電子系において、ARPES のピークをトレースしても正確なバンド分散は得られないことを意味している。

標題：理論セミナー：Flat band physics with strongly correlated photons
日時：2014 年 6 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：Sebastian Schmidt
所属：ETH Zurich, Switzerland
要旨：

It is well known that certain types of tight-binding lattice geometries in quasi-1D (e.g., sawtooth chain) and 2D (e.g., Kagome lattice) exhibit localized eigenstates due to frustrated hopping and quantum interference. Localization manifests itself as a completely dispersionless flat band in the entire Brillouin zone. The macroscopic degeneracy of the localized states may lead to a strong enhancement of interaction effects resulting in highly correlated, topological and exotic states of matter typically discussed in the context of spin chains, fermions or ultra-cold bosonic atoms.

In this talk I discuss a novel architecture for realizing flat bands with strongly interacting photons. A one-dimensional chain of cavities with embedded qubits in every other cavity exhibits such a non-trivial flat band peculiar of polaritonic systems. The proposed setup is realisable with state of the art circuit QED, where the lattice dispersion can be switched in-situ between flat and dispersive (for a recent review see [1]).

We have calculated the steady state of this system including drive and dissipation using open system TEBD as well as analytic projective methods. Based on our results we identify signatures of photon localization and predict the formation of finite-range crystalline order in the non-equilibrium steady state, which can be understood in analogy to the formation of a charge density wave state for flat band systems in equilibrium [2].

References

[1] S. Schmidt and J. Koch, Annalen der Physik 525, 395-412 (2013).
[2] M. Biondi, E. v. Nieuwenburg, G. Blatter, S. Huber and S. Schmidt, in preparation (2014).

標題：第 3 回柏キャンパス in 駒場　智の先端　柏キャンパストップサイエンスフォーラム
日時：2014 年 6 月 21 日（土）
場所：東大駒場 I キャンパス　数理科学研究科棟大講義室
講師(所属)：瀧川 仁(東大物性研)、武田 展雄(東大新領域)、新野 宏(東大大気海洋研)、梶田 隆章(東大宇宙線研)、村山 斉（東大 Kavli IPMU）
要旨：

「素粒子、物質から地球、宇宙」柏キャンパスに広がる科学の回廊

東大・柏キャンパスを知っていますか？大学院新領域創成科学研究科と世界トップレベルの 4 つの研究所があります。「柏キャンパス in 駒場」はこれら研究機関のトップ 5 人が講師。ノーベル賞候補や超人気講師が最前線で研究する臨場感を伝えます。

標題：理論セミナー：Understanding the mechanisms of proton transport in hydrogen bonded media from first-principle molecular dynamics

日時：2014 年 7 月 1 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：Mark E. Tuckerman

所属：New York University

要旨：

Proton transport in aqueous and non-aqueous hydrogen-bonded media has long been an area of intense study due to its fundamental importance in emerging energy technologies such as hydrogen fuel cells and in biological problems such as proton pumping. Our understanding of proton transport phenomena is based on the concept structural diffusion of a topological defect in the hydrogen bond network generally attributed to C. J. T. von Grotthuss. Within this picture, long-range proton transport is driven by specific structural rearrangements in the local hydrogen bonding environment, however, pinning down the specific microscopic mechanisms in different media remains an immense challenge that has an immediate impact on the problem of designing novel materials for enhancing the proton transport process. In this talk, I will show how first-principles molecular dynamics has contributed to our understanding of proton transport phenomena in a variety of systems including aqueous acidic and basic solutions, acid hydrate crystals, and phosphate based materials including pure phosphoric acid and its mixtures with heterocycles. It will be shown that proton transport in aqueous systems relies largely on local fluctuations in the hydrogen bond network while phosphate systems, by contrast, transport protons along extended, polarized chains in a manner much closer to the original picture suggested by von Grotthuss. Such mechanistic studies can help inform the process of membrane design for electrochemical devices such as fuel cells. I will also discuss the role autodissociation and proton conduction play in the high observed dielectric constant of phosphoric acid.