

物性研究所セミナー

標題：中性子セミナー：Kitaev Quantum Spin Liquid and Its Beyond

日程：2018年4月13日(金) 午後1時30分～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：Dr. Sungdae Ji

所属：Max Planck POSTECH Center

要旨：

The Kitaev quantum spin liquid (QSL) model has fascinated condensed matter physicists for a decade because they are exactly solvable, provide a variety of QSL phases, and are relevant for transition metal compounds such as irridates and ruthenates. This model implements the exchange frustration by bond-dependent Ising-like spin interaction on the ideal two-dimensional honeycomb lattice resulting in an exactly solvable topological QSL ground state and fractional spin excitations represented by noble Majorana fermions. In the past decade, experimental realization of the Kitaev QSL model has been eagerly pursued and now it becomes a challenging to explore exotic quantum phases appearing in real materials due to additional perturbative spin interactions.

In this talk, I will present the experimental evidences of Majorana fermions in a layered van der Waals compound α -RuCl₃. Neutron and x-ray diffraction measurements reveal that the low-temperature crystal structure forms the perfect Ru-honeycomb lattice, which provides an ideal platform for the Kitaev honeycomb quantum spin lattice. Extensive thermodynamic and neutron spectroscopic measurements directly demonstrated Majorana fermionic excitations as a result of thermal fractionalization of $J_{\text{eff}} = \frac{1}{2}$ pseudospins, which is well reproduced by numerical simulations obtained from the Kitaev model. Furthermore, I will present recent progress in pursuit of exotic quantum phases and critical behaviors invoked by an external magnetic field or pressure on this material.

標題：国際強磁場科学セミナー：2018年度第1回：Determining the Fermi Surface of High-Temperature Superconductors and Other Low-Dimensional Materials

日程：2018年4月17日(火) 午後2時～

場所：物性研究所本館6階第4セミナー室(A614)

講師：Assoc. Prof. Paul A. Goddard

所属：Warwick University, UK/Oxford University, UK

要旨：

I will discuss recent magnetotransport data on an underdoped high-temperature superconductor. To assist with the discussion I will first describe how one goes about mapping the Fermi surface of quasi-two-dimensional materials using high magnetic field measurements, focussing particularly on the technique of angle-dependent magnetoresistance.

This will be illustrated using the results of earlier experiments on an organic superconductor, for which a full determination of the Fermi surface was possible.

I will then contrast this with the more challenging measurements performed on YBa₂Cu₃O_{6+x} and explain what conclusions can be drawn in this case.



標題：理論セミナー：Reverse engineering Hamiltonian from spectrum

日程：2018年4月20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：藤田 浩之

所属：東大物性研究所

要旨：

Handling the large number of degrees of freedom with proper approximations, namely the construction of the effective Hamiltonian is at the heart of the condensed matter physics. Here we propose a simple scheme of constructing Hamiltonians from given energy spectrum using the supervised learning technique. Taking the Hubbard model at the half-filling as an example, we show that we can find the reduced description, namely the effective spin model, of the Hubbard model in a way that the estimation bias and error are well controlled. We reproduce the effective model at $(t/U)^6$ obtained previously by arduous perturbative calculations, just by minimizing the error in the spectrum (semi-)automatically using the supervised learning algorithms. We also show that the same approach is useful to construct the entanglement Hamiltonian of a quantum many-body state from its entanglement spectrum, taking the ground states of the $S=1/2$ two-leg Heisenberg ladders, as an example. We find the qualitative difference of the entanglement Hamiltonian in the two different phases of that model which has not been known previously. Compared to the known approach based on the full diagonalization of the reduced density matrix, our approach is computationally much cheaper thus offering a way of studying the entanglement nature of large (sub) systems.

[1] H. Fujita, Y. O. Nakagawa, S. Sugiura, and M. Oshikawa, Phys. Rev. B 97, 075114 (2018).

標題：理論インフォーマルセミナー：物質・材料科学分野におけるデータ駆動型研究 – 機械学習による有効モデル推定、力場推定、ニオイセンシング解析 –

日程：2018年4月25日(水) 午後3時～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：田村 亮

所属：物質・材料研究機構/東京大学

要旨：

現在、物質・材料科学分野ではデータ駆動型研究が注目されている。物質・材料科学には、構造データ、実験測定データ、第一原理計算データといった様々な種類のデータが存在している。これらのデータの取得には長時間測定や長時間シミュレーションが必要な場合が多く、簡単にデータを収集することが困難である。そのため、既知データを機械学習のトレーニングデータとすることで未知データを推定し、物質・材料開発の高速化を目指す研究が、材料科学におけるデータ駆動型研究である。講演者は、物質・材料科学分野の様々な部分の高速化及び、物質・材料開発に重要な情報の抽出を目指し、様々な種類のデータを対象としたデータ駆動型研究を実施している。本講演では、実験測定データを入力としたベイズ統計による有効モデル推定や、第一原理計算結果を入力としたガウシアンプロセス回帰による力場推定、ニオイの特徴を抽出するためのニオイセンシング解析など講演者が携わったいくつかの事例を紹介し、物質・材料科学と機械学習の融合研究の可能性について議論する。

参考文献

[1] T. Suzuki, R. Tamura, and T. Miyazaki, Int. J. Quant. Chem. 117, 33 (2017).

[2] R. Tamura and K. Hukushima, Phys. Rev. B 95, 064407 (2017).

[3] K. Shiba, R. Tamura, G. Imamura, and G. Yoshikawa, Sci. Rep. 7, 3661 (2017).

[4] R. Tamura and K. Hukushima, PLoS ONE 13, e0193785 (2018).

標題：理論インフォーマルセミナー：Numerical Evidence of Emergent Symmetry in Spin-1/2 Heisenberg Chain

日程：2018年4月27日(金) 午後5時～午後6時

場所：物性研究所本館6階第5セミナー室 (A615)

講師：Pranay PATIL

所属：Department of Physics, Boston University

要旨：

The antiferromagnetic Heisenberg chain is expected to have an extended symmetry, $[“SU”(2) \times “SU”(2)] / Z_2$, in the infrared limit, whose physical interpretation is that the spin and dimer order parameters form the components of a common 4-dimensional vector. Here we numerically investigate this emergent symmetry using quantum Monte Carlo simulations of a modified Heisenberg chain (the J-Q model) in which the logarithmic scaling corrections of the conventional Heisenberg chain can be avoided. We show how the two- and three-point spin and dimer correlation functions approach their forms constrained by conformal field theory as the system size increases and numerically confirm the expected effects of the extended symmetry on various correlation functions.

This talk will be based on work presented in arXiv:1803.02041.

標題：理論セミナー：固体における高次高調波の発生機構

日程：2018年4月27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：玉谷 知裕

所属：東京大学物性研究所

要旨：

原子分子気体における高次高調波発生は紫外から X 線領域におけるアト秒パルス光源としての有用性から現在までに盛んに研究されて来た[1]。それに対して近年、高強度 THz 光の発生が可能となり半導体を初めとする凝縮系を用いた高次高調波発生が注目されている[2]。これは THz 光における光子エネルギーが半導体の典型的なバンドギャップエネルギーと比較して非常に小さく、さらに安定した電場波形を形成できることから高次高調波発生に対する高効率な制御が実現できると期待されるためである。しかしながら、このような実験的進歩にも関わらず高強度 THz 光照射下での凝縮系における高次高調波の理論は未だ十分ではない。何故なら、高強度 THz 光照射下のキャリアダイナミクスは非摂動的非線形光学過程であるのみならず、非断熱的過程をも包括する必要があるからである。以上の状況を踏まえ、本講演では、半導体に高強度 THz 光を照射した際のキャリアダイナミクスを非摂動的かつ非断熱的に記述し、それによって生じる高次高調波発生メカニズムを理論的に解明する[3, 4]。さらにそれらを踏まえ、グラフェン[5]や遷移金属ダイカルコゲナイド[6]における高次高調波の特異な性質を説明する。

Reference

- [1] T. Brabec and F. Krausz, Rev. Mod. Phys. **72**, 545 (2000).
- [2] O. Schubert *et al.*, Nature Photon. **8**, 119-123 (2014).
- [3] T. Tamaya, A. Ishikawa, T. Ogawa, and K. Tanaka, Phys. Rev. Lett. **116**, 016601 (2016).
- [4] T. Tamaya, A. Ishikawa, T. Ogawa, and K. Tanaka, Phys. Rev. B **94**, 241107(R) (2016).
- [5] N. Yoshikawa, T. Tamaya, and K. Tanaka, Science **356**, 736 (2017).
- [6] T. Tamaya, S. Konabe, and S. Kawabata, arXiv:1706.00548.



標題：国際強磁場科学セミナー：2018年度 第2回：Quantum tricritical points, quantum wing critical points and more in the phase diagram of metallic quantum ferromagnets

日程：2018年5月8日(火) 午後2時～

場所：物性研究所本館6階第4セミナー室(A614)

講師：Dr. Valentin Taufour

所属：University of California, Davis campus

要旨：

Studies of the temperature-pressure (T-p) phase diagram of metallic quantum ferromagnets have revealed that ferromagnetic quantum criticality is avoided in two ways [1]: either the transition becomes of the first-order at a tricritical point before being suppressed such as in UGe2 [2,3], or a transition to modulated magnetic phases appear such as in LaCrGe3 [4]. We have shown that the addition of a magnetic field (H) can restore quantum criticality at the end of “wings” in the T-p-H phase diagram in both UGe2 and LaCrGe3 [5]. Our careful study of the “wings” near the tricritical point reveal new rules that apply to the T-p-H phase diagram [6]. We discuss our experimental T-p-H phase diagrams of UGe2, LaCrGe3, and CeTiGe3 and how these compounds illustrate different strength of quantum fluctuations based on recent theoretical results [7].

[1] M. Brando et al. Rev. Mod. Phys., 88, 025006 (2016).

[2] V. Taufour et al. Phys. Rev. Lett. 105, 217201 (2010).

[3] H. Kotegawa et al. J. Phys. Soc. Jpn., 80, 8, 083703 (2011).

[4] V. Taufour et al. Phys. Rev. Lett. 117, 037207 (2016).

[5] U. S. Kaluarachchi et al. Nature Communications 8, 546 (2017).

[6] V. Taufour et al. Phys. Rev. B 94 060410 (2016).

[7] Belitz et al. Phys. Rev. Lett. 119, 267202 (2017).

標題：中性子セミナー：中性子散乱を用いたスピン起源の交差相関物性研究

日程：2018年5月15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：中島 多朗

所属：理研創発物性科学研究センター

要旨：

物質中の磁気モーメントが織りなす多彩な秩序構造とそれが生み出す交差相関物性現象が近年注目を集め、盛んに研究されている。例としてはフラストレーション系における強いスピン・格子結合現象や、マルチフェロイック系におけるスピン起源の電気分極の発現、磁気スキルミオンなどの非共面的磁気秩序が誘起する新奇な伝導現象などがあげられる。このような交差相関現象を研究する上で中性子散乱が果たす役割について、以下の3つの視点でまとめ、今後期待される研究についても議論したい。

(1) スピンと非共役な外場下における磁気秩序の変化の検出

交差相関系を中性子散乱を用いて研究する際には、単に基底状態の磁気構造を決めるだけでなく、多彩な外場下での磁気構造の“変化”を精度よく検出することが求められる。本講演では三角格子反強磁性体 CuFeO2 における一軸応力誘起磁気相を中性子三次元偏極解析を用いて探査した結果を紹介する。また、近年注目を集める磁気スキルミオン物質に対する一軸応力効果を J-PARC の中性子散乱装置を用いて研究した例も紹介したい。

(2) 極限環境での励起状態観測への挑戦、光学測定と中性子非弾性散乱の相補性

前述の磁気構造と同様に、磁気励起の研究においても、磁場・電場・圧力などの外場下での中性子散乱に対する期待は今後高まると予想される。これについて、前述の CuFeO2 の磁気励起に対する磁場(及び非磁性不純物)効果を国内外の中

性子非弾性散乱装置 C1-1(JRR-3), CTAX(HFIR), LET(ISIS)を用いて系統的に観測した例を紹介する。また、近年進歩が著しいテラヘルツ分光などの光学測定と中性子非弾性散乱を相補的に用いることで、スピン・格子・分極などが結合した興味深い励起状態に対する多面的な理解を得ることができる。一例として偏極中性子三軸分光器 PTAX(HFIR)を用いて行ったマルチフェロイック・ヘキサフェライトのエレクトロマグノンの研究を紹介する。

(3) 非平衡・過渡現象の観測

定常状態における磁気秩序・励起を中性子散乱で探査する手法は、測定・解析ともに系統的に整備されつつある。しかし過渡現象や非平衡過程については(すでに先駆的な研究はあるものの)まだ多くの開拓の余地があると考えられる。本発表では磁気スキルミオンの代表物質である MnSi について、電流パルスによる試料の急加熱・急冷と J-PARC のパルス中性子を組み合わせた時分割測定によって磁気相転移の kinetics を研究した例を紹介する。

標題：極限コヒーレント光科学セミナー：微生物型ロドプシンの光機能メカニズム研究

日程：2018年5月15日(火) 午前10時～

場所：物性研究所本館6階第一会議室(A636)

講師：井上 圭一

所属：東京大学物性研究所

要旨：

微生物型ロドプシンは細菌や古細菌、一部の真核生物など、主に単細胞の微生物が持つ、光受容型の膜タンパク質である。微生物型ロドプシンは7回膜貫通型の共通構造の内部に発色団である all-trans 型のレチナールを結合しているが、このレチナールが光を吸収すると 13-cis 型へと異性化し、さらにその構造変化をトリガーとして様々な生理機能が光で発現する。その機能は非常に多岐にわたり、光駆動型のイオンポンプや、光開閉式チャネル、走光性センサー、光依存的な遺伝子発現制御などの機能を持つロドプシンが知られている。我々はこれまでに主にレーザー分光を中心とした、物理化学的な解析により、それぞれの微生物型ロドプシンが非常に似通った構造様式を持ちながら、どのように異なった機能を発現するのか、その構造機能相関をもたらし要因について研究を行ってきた。最近では光エネルギーを使って細胞外に Na⁺イオンを輸送する Na⁺ポンプ型ロドプシン[1,2]や、細胞内に H⁺を輸送する内向き H⁺ポンプ型ロドプシン[3]を新たに発見し、さらにその輸送メカニズムや、これらの分子をもとに機能を改変した新規分子ツールについて研究を行った。講演ではこれらの結果について紹介するとともに、近年様々なグループによってレーザー分光を用いて調べられた微生物型ロドプシンの研究例や動向についても概説する。

[1] K. Inoue, et al., *Nature. Commun.* 4, 1678 (2013)

[2] H. E. Kato et al., *Nature* 521, 48 (2015)

[3] K. Inoue et al., *Nature. Commun.* 7, 13415 (2016)

標題：機能物性セミナー・理論セミナー：3D phase field simulation for macropinocytosis of amoeboid cells

日程：2018年5月18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：斉藤 稔

所属：東京大学大学院理学系研究科

要旨：

Macropinocytosis is clathrin-independent endocytosis and allows internalization of large volume of extracellular fluid. Dictyostelium discoideum and tumor cells show constitutive macropinocytosis for uptake of nutrients from extracellular fluid. With help of recent advance of microscopy for 4D observation, macropinocytosis has been considered



to be driven by self-organizing pattern of actin polymerization on the membrane. However, it remains still unknown how crown-like (or macropinositosis cup) structure forms, how it closes and what chemical reactions make it possible. From theoretical perspective, we introduce a mathematical model based on phase-field method for simulating 3D morphodynamics of macropinocytosis. The proposed model with the help of GPU enables reaction-diffusion process of membrane localized proteins and large membrane deformation simultaneously.

Simulation results indicate that simple chemical reactions including actin polymerization lead to drastic membrane deformation, which results in an engulfment of extracellular fluid. In addition, depending on parameters, not only macropinocytosis but also CDR (circular dorsal ruffle) like behaviors appear.

This study provides a new insight for constitutive macropinocytosis as a self-organization phenomenon via feedback between drastic deformation of membrane and reaction-diffusion on it.

標題：極限コヒーレント光科学セミナー：鏡像準位のスピントロニクスと表面スピン流の光制御

日程：2018年5月30日(水) 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：荒船 竜一

所属：物質・材料研究機構国際ナノアーキテクトニクス研究拠点

要旨：

外部磁場を用いずに電子のスピンを制御する—これは近年大きな発展を遂げているスピントロニクス研究におけるチャレンジの一つである。このときスピン軌道相互作用は最も重要な相互作用である。スピン軌道相互作用を通し、さまざまな方法でスピン制御のデモンストレーションが行われている。光によるスピン制御は、高い制御性、高速応答など注目すべき多くの特徴をもち”オプトスピントロニクス”はスピントロニクスの中でも重要なブランチの一つとなっている。

我々は表面科学、表面分光の観点からオプトスピントロニクスに寄与したいと考えて、2光子光電子分光を用いた研究を進めている。本セミナーではがこれまで取り組んできた結果を紹介する[1,2,3]。代表的な非占有表面状態である鏡像準位におけるスピン分裂をどのようにして測るか、そのスピン分裂状態をどのようにスピントロニクスに応用できるか、と言った点について議論したい。

参考文献：

[1] T. Nakazawa, et al., Phys. Rev. B, **94**, 115412 (2016).

[2] R. Arafune et al., Phys. Rev. Lett., **117**, 239701 (2016).

[3] R. Arafune et al. (in preparation)

日時：2018年5月31日（木）午後1時～2時30分

場所：物性研究所本館6階 A615号室

題目：理論インフォーマルセミナー：第一原理計算を用いた点欠陥、粒界などの種々欠陥の原子・電子構造解析

講師：小川 貴史

所属：ファインセラミックスセンター

要旨：

材料に付随する種々様々な欠陥がもたらす物性を制御するには、その原子構造・電子状態を把握し、起こっている現象に潜むメカニズムを理解し、それを元に制御指針を探るステップが必要となる。近年、計算機性能の向上に加え、計算手法についても様々発展してきており、第一原理計算を用いた欠陥解析の有効性は高くなってきているが、「どのような解析が有効か」、「実験とどのように連携するか」という点については注目する現象・対象に依るところも大きく、まだ不確実な部分が多い。本発表では、高温構造材料であるアルミナの粒界イオン拡散に関連する解析や、半導体やイオン伝導体における荷電キャリアの熱平衡欠陥状態に関する解析を中心として、我々の最近の試みと成果を紹介する。

題目：理論インフォーマルセミナー：第一原理計算によるエネルギーデバイスの材料設計

講師：桑原 彰秀

所属：ファインセラミックスセンター

要旨：

近年のエネルギー情勢の変化に伴い、その高効率利用と低環境負荷を実現可能とする革新的なエネルギーデバイスの創出が求められている。第一原理計算は与えられた原子配置のもとで、対象とする物質の電子系のエネルギー状態や諸物性に関する定量的な情報を得ることができる計算手法であり、物性発現メカニズムの解明に有効であり、材料設計の指針を得ることもできる。本講演では、第一原理計算を用いたエネルギーデバイスの研究事例として、プロトン伝導性酸化物燃料電池材料における欠陥形成挙動の解明、リチウムイオン2次電池におけるイオンダイナミクスの第一原理計算等の内容に関して紹介する。

標題：理論セミナー：トポロジカル熱電変換物質デザインへ向けた異常ネルンスト係数の第一原理計算

日程：2018年6月1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：石井 史之

所属：金沢大学大学院 自然科学研究科 数物科学専攻、東京大学物性研究所

要旨：

新たな物性の起源として、電子状態のトポロジーが注目を浴びている。多くの第一原理電子状態計算プログラムに初めて導入された Bloch 波動関数のトポロジーに関連した計算手法は、1993年に提案された電気分極を計算する King-Smith と Vanderbilt によるベリー位相の方法[1]である。我々はこれまで、ベリー位相の方法、それを拡張したベリー曲率、トポロジカル不変量 (Chern 数, Z₂ 数) の計算手法の第一原理電子状態計算プログラムへの実装とその応用[2-5]に取り組んできた。本講演では、それらの熱電変換現象への応用例について紹介する。

我々は、熱電変換材料の高効率化を模索する新たな方向性として、ベリー曲率由来の異常ホール係数のフェルミ準位依存性が重要となる、異常ネルンスト係数の大きな系の物質デザインをめざしている。その取り組みとして、スカーミオン結晶モデル[4]、酸化物薄膜スカーミオン結晶[6]、ハーフホイスラー強磁性体[7]についての我々の最近の研究を紹介し、ベリー曲率が誘起する巨大な熱電変換効果を示す物質、トポロジカル熱電変換物質デザイン指針の構築についての展望を述べる。

[1] R.D. King-Smith and D. Vanderbilt, Phys. Rev. B, **47**, 1651(1993).



- [2] F. Ishii and T. Oguchi, J. Phys. Soc. Jpn., **71**, 336 (2002).
- [3] F. Ishii, N. Nagaosa, Y. Tokura, and K. Terakura, Phys. Rev. B **73**, 212105 (2006).
- [4] Y. P. Mizuta and F. Ishii, Sci. Rep., **6**, 28076(2016).
- [5] H. Sawahata, N. Yamaguchi, H. Kotaka, and F. Ishii, Jpn. J. App. Phys., **57**, 030309 (2018).
- [6] Y.P. Mizuta, H. Sawahata, and F. Ishii, arXiv:1803.08148.
- [7] S. Minami, F. Ishii, Y.P. Mizuta, and M. Saito, arXiv:1804.00297.

標題：量子物質セミナー：Charge density wave order in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.67}$ induced by uniaxial stress.

日程：2018年6月7日(木) 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：Clifford Hicks

所属：Max Planck Institute for Chemical Physics of Solids, Dresden, Germany

要旨：

High-temperature superconductivity requires both strong electronic interactions, and a mechanism by which these interactions are prevented from inducing an alternative, static electronic order. Therefore the study of competing phases is an important part of the study of high-temperature superconductors. In underdoped cuprates, it is well-established that there are strong susceptibilities to both superconductivity and charge density wave order. It is not clear whether these orders are best described as mutually incompatible, different manifestations of the same pairing interaction, or different components of a composite order parameter. In this talk, I will present elastic and inelastic X-ray data on the underdoped cuprate $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.67}$ ($T_c = 65$ K), that show compression along the a axis by $\sim 1\%$ induces static, three-dimensional CDW order. Upon reducing the temperature, the CDW disappears and is replaced by superconductivity, indicating strong competition between these states.

標題：理論インフォーマルセミナー：量子導体における情報量の完全計数統計と最大通信路容量

日程：2018年6月18日(月) 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：内海 裕洋

所属：三重大学 工学部 物理工学科

要旨：

2端子量子ドットを対象に、部分系の自己情報量のゆらぎの分布と、最大通信容量を議論する。前半では、非平衡定常状態における Renyi エンタングルメント・エントロピーを、レプリカ法により計算する方法を丁寧に説明する。まず複製した Keldysh 経路上において、グリーン関数を導入する[1]。レプリカ空間についてフーリエ変換すると、完全計数統計理論[2]における計数場が現れる。その結果、Renyi エンタングルメント・エントロピーは電流キュムラント生成関数を用いて表すことができる[3]。

後半では、量子導体の通信路容量を議論する。部分系の局所的な熱量の測定後の縮約密度行列の対数として、条件付き自己情報量の演算子を導入する。その確率分布のフーリエ変換は Renyi エンタングルメント・エントロピーを解析接続したものとなる。最大通信路容量は0次の Renyi エンタングルメント・エントロピーで表され、それは分割数となることを示す。また定常状態では、縮約密度行列と部分系の局所熱量演算子は可換としてよいことを議論する。

[1] Yu. V. Nazarov, Phys. Rev. B **84**, 205437 (2011).

[2] D. A. Bagrets, Y. Utsumi, D. S. Golubev, G. Schoen, "Full Counting Statistics of Interacting Electrons", ed. by W. P. Schleich and W. Herbert, Wiley-VCH, Berlin (2007).

[3] Y. Utsumi, arXiv:1804.04328, Phys. Rev. B **96**, 085304 (2017), Phys. Rev. B **92**, 165312 (2015).

標題：極限コヒーレント光科学セミナー：時間分解顕微光電子分光による有機ナノ薄膜表面・界面の電子ダイナミクス計測

日程：2018年6月19日(火) 午後4時～午後5時

場所：物性研究所本館6階第一会議室(A636)

講師：渋谷 昌弘

所属：慶應義塾大学理工学研究科慶應義塾基礎科学・基盤工学インスティテュート

要旨：

機能性有機分子薄膜を用いた太陽電池、電界効果トランジスタ等の電子デバイスは、低コスト、軽量、フレキシブルな次世代エレクトロニクス・スピントロニクスの基盤技術として幅広く研究が行われている。有機薄膜あるいは基板-有機薄膜界面において、エネルギー、時間、空間すべての次元で高精度な手法により電子物性を明らかにすることは、機能性の起源である電荷注入、電荷分離、再結合などの素過程を原理から理解し、機能を先鋭化する上で極めて重要な課題である。本研究では、代表的な機能性有機分子であるフラーレン(C60)の蒸着薄膜[1,2]や、簡便な溶液プロセスで機能性秩序膜を構築できる化学修飾アルカンチオール自己組織化単分子膜[3]などを対象とし、キャリア(電子)の通り道となる非占有準位の局所分光と励起電子のダイナミクス計測を自ら開発した時間分解顕微光電子分光を駆使することで達成した。セミナーでは上記の研究成果を紹介するとともに、これまでに得られた知見から、“柔らかい”有機分子を対象にした時間分解顕微光電子分光では、非破壊で分子の電子準位を選択的に光励起することが重要であり、紫外・可視光領域にわたる幅広い波長可変性(200-700 nm)を備えた高繰り返し(>1 MHz)フェムト秒光源の構築が不可欠であることを併せて紹介する。

文献

[1] M. Shibuta, et al., *Sci. Rep.* 6, 35853 (2016).

[2] M. Shibuta, et al., *Appl. Phys. Lett.* 109, 203111 (2016).

[3] M. Shibuta, et al., *ACS Nano* 11, 4307 (2017).

標題：極限コヒーレント光科学セミナー：ネマティック電子状態の超高速光応答

日程：2018年6月21日(木) 午前10時～午前11時

場所：物性研究所本館6階第一会議室(A636)

講師：下志万 貴博

所属：国立研究開発法人理化学研究所

要旨：

自発的に回転対称性が破れた電子状態は、液晶とのアナロジーからネマティック電子状態と呼ばれ、銅酸化物や鉄系超伝導体の高温超伝導相近傍に発現する未知の秩序として注目されている。鉄系超伝導体では、スピンや軌道自由度における異方性の発達が格子変形を伴いながら電子ネマティック秩序を引き起こす機構が提唱されている。特に超伝導転移温度が最高となる最適組成では、ネマティック揺らぎが低温に向けて発達する振る舞いが物質の種類を超えて普遍的に見いだされており、超伝導発現との関連も指摘されている。これまで我々は角度分解光電子分光(ARPES)により、FeSeの電子ネマティック秩序相における二対称なフェルミ面や、バンド構造における軌道分極を明らかにしてきた[1,2]。本講演では、時間分解 ARPES を用いて観測した FeSe におけるネマティック電子状態の超高速光応答を紹介する。フェムト秒レーザー照射によるネマティック秩序の超高速融解と、その後に現れる「ネマティック軌道揺らぎ」を見出した[3]。後者は、レーザー照射強度に対して臨界的挙動を示す減衰の速い振動現象として観測され、固体の新たな励起状態である可能性が示唆される。講演では以上の結果について説明するとともに、最後に現在我々が開発を進めている時間分解電子線回折および時間分解電子顕微鏡について、得られ始めている最新の成果とともに紹介する[4,5]。

[1] T. Shimojima *et al.*, *Phys. Rev. B* **90**, 121111(R) (2014).

[2] Y. Suzuki, T. Shimojima *et al.*, *Phys. Rev. B* **92**, 205117 (2015).

[3] T. Shimojima *et al.*, submitted.



[4] A. Nakamura, T. Shimojima *et al.*, *Structural Dynamics* **3**, 064501 (2016).

[5] S. Ideta, T. Shimojima *et al.*, *Science Advances*, accepted.

標題：理論セミナー：Resummation of diagrammatic series with zero convergence radius for the unitary Fermi gas

日程：2018年6月22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.Takahiro Ohgoe

所属：Department of Applied Physics, the University of Tokyo

要旨：

Feynman diagrams are powerful tools for studying various fields of physics. Still, the analysis usually involves approximations, because only some types of diagrams or low-order diagrams are considered there. However, the Monte Carlo method for unbiased sampling of Feynman diagrams has been recently developed. On the other hand, the diagrammatic series sometimes have zero radius of convergence. The question is whether it is still possible to make accurate predictions by summing up Feynman diagrams.

In this talk, we report high-precision results obtained by the bold-line diagrammatic Monte Carlo method for the unitary Fermi gas with zero convergence radius. We derive the large-order asymptotic behavior of the diagrammatic series, and we give mathematical arguments and numerical evidence for the resummability of the series by a specifically designed conformal-Borel transformation that incorporates the large-order behavior. Combining this new resummation method with diagrammatic Monte Carlo evaluation up to order 9, we obtain new results for the equation of state, which agree with the ultracold-atom experimental data, except for the 4-th virial coefficient for which our data point to the theoretically conjectured value.

Reference:

R.Rossi, T. Ohgoe, K. Van Houcke, and F. Werner, arXiv:1802.07717

標題：理論インフォーマルセミナー：量子基礎論における弱値の解釈と弱測定 of 精密測定への応用

日程：2018年6月28日(木) 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：李 宰河

所属：東京大学生産技術研究所

要旨：

量子論の時間対称形式における可観測量(英: Observable)の値として Aharonov らの提唱になる弱値[1]概念は、その測定手法として提案された弱測定法[2]を応用した精密測定実験の成功報告[3-4]を契機として、近年大きく注目を浴びることとなった。本講演では、非専門家の方々を対象として、弱値概念および弱測定法の導入的な解説を行う。最初に、弱値概念の歴史的な出自を踏まえた上で、これをより標準的な量子論の枠内で理解する方策として、弱値の量子的な条件付期待値としての解釈[5]を紹介する。また、量子論における不確定性関係と弱値との間の関わりについて紹介し、弱値が分散型(Robertson-Kennard 型)と時間・エネルギー型の両不確定性関係を結ぶ役を担うことを見る[6]。次に、弱測定法について、これを広く条件付き量子測定として一般的に捉えることで、これが量子的な条件付期待値の測定手法として理解できることを見る。最後に、精密測定における弱測定法の有用性を論ずる上での誤差評価模型[7]を紹介し、弱測定法が従来の測定法の精度限界を超えることを理論的に実証した上で、併せて実験データの検証結果[8]を見る。

参考文献

- [1] Y. Aharonov, P. G. Bergmann, and L. Lebowitz, Phys. Rev. **134**, B1410 (1964).
- [2] Y. Aharonov, D. Z. Albert and L. Vaidman, Phys. Rev. Lett. **60**, 1351 (1988).
- [3] O. Hosten and P. Kwiat, Science **319**, 787 (2008).
- [4] P. B. Dixon, D. J. Starling, A. N. Jordan, and J. C. Howell, Phys. Rev. Lett. **102**, 173601 (2009).
- [5] J. Lee and I. Tsutsui, Prog. Theor. Exp. Phys. 2017 (5): 052A01 (2017).
- [6] J. Lee and I. Tsutsui, Phys. Lett. A **380**: 2045-2048 (2016).
- [7] J. Lee and I. Tsutsui, Quantum Stud.: Math. Found. **1**, 65 (2014).
- [8] Y. Mori, J. Lee and I. Tsutsui, in preparation.

標題：理論セミナー：平衡および非平衡条件で電子相関により誘起される超伝導と空間不均一性

日程：2018年6月29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：井戸 康太

所属：東京大学物性研究所

要旨：

これまでの常圧下における超伝導への最高転移温度は銅酸化物で実現された約 130K であるが、この最高転移温度はここ数十年でほとんど変化していない。この原因の一つとして、より高い転移温度を生み出すために必要なキャリア間に働く有効引力は、相分離や長周期の電荷秩序などの電荷不均一状態を同時に引き起こしてしまうということが挙げられる。この困難を乗り越えるために、我々は超伝導を制御・増大させるための新しい方法を考える必要がある。

近年、光を用いて物質の格子モードを選択的に励起させることによって、室温領域においてでもギャップ形成などの超伝導的な性質を示すことが実験的に報告された[1]。これらの研究は、非平衡性を利用することによって室温超伝導を実現させるという可能性を切り開いた。

本研究では、格子モードの詳細によらず、相関電子系の特性に基づく機構により、非平衡性を利用した新たな超伝導増大の可能性を提示することを目指した。本目的を達成するために、二次元強相関電子系における空間一様な d 波超伝導状態とストライプや相分離などの電荷不均一状態の競合について着目し、多変数変分モンテカルロ法[2,3]を用いて二次元 Hubbard 模型の数値解析を行った。まず、基底状態におけるそれらの競合について詳しく調べた[4]。その結果、相互作用を大きくすることによって急激に超伝導が強まる空間一様な状態は、強相関領域においては電荷不均一性の発達により不安定になることを明らかにした。続いて非平衡状態の解析を行った[5]。平衡下では実現されない強い超伝導状態は、高強度のレーザーを照射することによって動的に実現できることを示した。本講演では、数値計算手法の詳細や光によって超伝導状態が動的安定化する機構についても説明する。

Reference

- [1] W. Hu et al., Nat. Mater. **13**, 705 (2014), S. Kaiser et al., Phys. Rev. B **89**, 184516 (2014), M. Mitrano et al., Nature **530**, 461 (2016).
- [2] D. Tahara and M. Imada, J. Phys. Soc. Jpn. **77**, 114701(2008).
- [3] K. Ido, T. Ohgoe, and M. Imada, Phys. Rev. B **92**, 245106 (2015). [4] K. Ido, T. Ohgoe and M. Imada, Phys. Rev. B **97**, 045138 (2018). [5] K. Ido, T. Ohgoe, and M. Imada, Sci. Adv. **3**, e1700718 (2017).

