

物性研究所セミナー

標題：LASOR セミナー：理論セミナー：Multistep nonradiative decay pathways of biomolecules

日時：2018年11月6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：山崎 馨

所属：東北大学金属材料研究所

要旨：

Nonradiative decay (NRD) processes such as internal conversion (IC) and intersystem crossing (ISC) govern photo-functionality of living systems such as the photostability of the DNA, phototaxis, visual perception etc. Understanding this complex NRD pathways of biomolecules should help us develop bio-inspired photo-functional materials. In this talk, we will share our recent theoretical works on the multistep NRD pathways of biomolecules in gas phase with the aids of pump-probe experiments:

(1) Structure dependent photoisomerization routes of cinnamate based sunscreens^{1,2}

We found that the structural isomers of cinnamate based sunscreens undergo *trans* → *cis* photo-isomerization under UV irradiation but differ in the isomerization pathway (ISC or IC) ^{1,2}. These results suggest that controlling the substitution position is essential to design the cinnamate based photo-functional materials.

(2) Ultrafast nonadiabatic cascade of XUV excited caffeine molecule³

We also found the XUV excited caffeine molecule undergoes a nonadiabatic cascade via ~100 highly correlated mono-cationic states. These results show that both nonadiabatic coupling and electron correlation are the keys for ultrafast reaction dynamics in the highly-correlated electronic excited states.

References :

[1] K. Yamazaki, S. Maeda*, M. Ehara*, T. Ebata* et al., *J. Phys. Chem. Lett.* 7, 4001 (2016).

[2] S. Kinoshita, K. Yamazaki*, M. Ehara*, T. Ebata* et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.* 20, 17583 (2018).

[3] A. Marciniak, K. Yamazaki*, F. Lépine* et al., *J. Phys. Chem. Lett.*, submitted (2018).

*Corresponding authors

標題：理論セミナー：Augmented multipoles and their applications

日時：2018年11月9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：Hiroaki KUSUNOSE

所属：Meiji University

要旨：

Magnetic dipole is a source of magnetism, and an electric charge and quadrupole are responsible for charge and orbital orderings, respectively. Such fundamental degrees of freedoms, described by electronic multipoles in general, play important roles in phase transitions and emergent responses under their orderings with broken symmetry. So far,

multipoles are mainly discussed within single species of orbital at single site, in which only even-parity multipoles can be activated [1].

Recently, we generalize a concept of electronic multipoles in two ways: (i) a cluster multipole, which is defined in sublattice systems [2]; a particular alignment of magnetic/electric dipoles in a cluster can be regarded as an inter-atomic multipole, and (ii) a hybrid multipole, which is defined in multi-orbital systems. These extensions allow us to consider odd-parity multipoles, and electric/magnetic toroidal type of multipoles in addition to ordinary electric/magnetic multipoles, which are essential for cross-correlated phenomena such as magneto-electric, magneto-elastic responses, current-induced magnetization (Edelstein effect) and so on [3].

I will talk about the concept of augmented multipole, and peculiar electromagnetic responses under their spontaneous orderings [4].

A series of works has been done in collaboration with S. Hayami, Y. Yanagi, Y. Motome, M.-T. Suzuki, R. Arita, T. Nomoto, M. Yatsushiro, M. Naka, and H. Seo. These works were supported by JSPJ KAKENHI Grants Numbers 15K05176, 15H05885 (J-Physics), and 16H06590.

References:

- [1] Y. Kuramoto, H. Kusunose, and A. Kiss, J. Phys. Soc. Jpn. 78, 072001 (2009), and references therein.
- [2] S. Hayami, H. Kusunose, and Y. Motome, J. Phys.: Condens. Matter 28, 395601 (2016), and references therein.
- [3] S. Hayami and H. Kusunose, J. Phys. Soc. Jpn. 87, 033709 (2018).
- [4] S. Hayami, M. Yatsushiro, Y. Yanagi, and H. Kusunose, Phys. Rev. B (in press), and references therein.

標題：理論セミナー：量子異常による輸送現象の準古典極限における一般論

日時：2018年11月12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：石塚 大晃

所属：東京大学 工学系研究科 物理工学専攻

要旨：

ワイル半金属の提案・発見はワイル粒子の物理の実験的検証を可能とするとともに、ワイル電子系に特有の新しい機能が実現できる可能性がある。こうしたワイル電子に特有な現象の代表例として、ワイル粒子の電磁応答におけるカイラル量子異常がある[1,2]。カイラル量子異常は、実験的には磁気抵抗を生じることが予想されており[2,3]、実際に近年、ワイル/ディラック半金属の候補物質において理論の予想と矛盾しない磁気抵抗が観られている。一方で、こうした物質の多くはワイル・コーンに傾きやワーピングがあるなど、理想的なワイル電子とは異なる。中でも Cd3As2 はフェルミ面がディラック・ノードから大きく離れ、全てのディラック・ノードが一つのフェルミ面に含まれている。にも拘らず、これまでの予想に反して、量子異常と矛盾しない負の縦磁気抵抗が観測されている[4]。

こうした実験の進展もあり、量子異常と関連した磁気抵抗の理論研究が近年盛んに行われているが、量子異常と関連した磁気抵抗の計算式は複雑で、その一般的性質を理解するには至っていない。我々は最近、Son らによって提案された準古典論を一般化・再定式化することで、準古典極限においては量子異常と関連した磁気抵抗が Berry 曲率 $\Omega \mathbf{k}$ を用いて定義されるベクトル $\mathbf{W} \mathbf{k} \equiv \Omega \mathbf{k} \times (\mathbf{v} \mathbf{k} \times \mathbf{B})$ を観ることで直観的に理解できることを見出した[5]。本セミナーでは、この $\mathbf{W} \mathbf{k}$ に基づく定式化を紹介し、この形式を用いることで上述の CdAs の磁気抵抗の頑健性[6]や type-II ワイル半金属における磁気抵抗の一般的性質[5]が直感的に観てとれることを議論する。

- [1] A. Vilenkin, Phys. Rev. D 22, 3080 (1980).
- [2] M. Nielsen and M. Ninomiya, Phys. Lett. B 130, 390 (1982).
- [3] D.-T. Son and B. Z. Spivak, Phys. Rev. B 88, 104412 (2013).

- [4] S. Nishihaya et al., Phys. Rev. B 97, 245103 (2018).
[5] H. Ishizuka and N. Nagaosa, preprint (arXiv: 1807. 08147).
[6] H. Ishizuka and N. Nagaosa, preprint (arXiv: 1808. 09093).

標題：国際強磁場科学セミナー：2018 年度 第 2 回：Calorimetric measurements in extreme conditions of magnetic field

日時：2018 年 11 月 12 日(月) 午後 2 時～

場所：物性研究所本館 6 階 第 2 セミナー室(A612)

講師：Prof. Christophe Marcenat

所属：CEA-Grenoble (France)

要旨：

I will present recent improvements of modulation calorimetry technique. Such improvements leads to both a very high relative sensitivity (typically $1:10^4$) and a very good absolute accuracy ~ 1 to 3%. I will illustrate the new possibilities of these instrumental innovations using recent results on superconducting cuprates, on graphite in the ultra quantique limit and on Lifschitz transitions in UCoGe.

標題：理論インフォーマルセミナー：Modelling finite temperature effects in rare-earth/transition-metal magnets from first principles

日時：2018 年 11 月 13 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. Christopher E. Patrick

所属：University of Warwick, UK

要旨：

The unrivalled hard magnetic properties of rare-earth/transition-metal (RE-TM) compounds have inspired decades of research aimed at understanding the physics underlying their excellent performance. From the theoretical point of view these materials present a number of challenges, particularly to first-principles methods based on density-functional theory [1], due to (a) the complicated interplay of the itinerant d-band and highly-localized 4f electrons, (b) the ferrimagnetic nature of most RE-TM compounds and (c) the importance of temperature in realistic operating conditions. Here I will present some of our work modelling these compounds, including use of the self-interaction correction to model the RE-4f electrons [2], the importance of including ferrimagnetic effects when comparing to experimental measurements of magnetic properties [3], and our attempts to capture the competition between RE and TM magnetic anisotropy at high temperature which can lead to spin reorientation transitions.

[1] B. L. Gyorffy et al., J.Phys. F 15, 1337, (1985).

[2] C. E. Patrick and J. B. Staunton, Phys. Rev. B 97, 224415 (2018).

[3] C. E. Patrick et al., Phys. Rev. Lett. 120, 097202 (2018); C. E. Patrick et al., J. Phys.: Condensed Matter 30, 32LT01 (2018).

*This work was performed as part of the PRETAMAG project, led by Professor J. B. Staunton. PRETAMAG is funded by the United Kingdom Engineering and Physical Sciences Research Council, grant number EP/M028941/1.

標題 : LASOR セミナー : Nanomagnetism using polarised soft X-rays

日時 : 2018 年 11 月 14 日(水) 午後 4 時~

場所 : 物性研究所本館 6 階 第一会議室(A636)

講師 : Sarnjeet S. Dhese

所属 : Diamond Light Source

要旨 :

Nanomagnetism and spintronics are ubiquitous in our everyday lives so that manipulating magnetic order on ever smaller and faster scales has been a huge endeavour over the past few decades. With the advent of low-emittance third generation synchrotron sources, producing brilliant polarised x-rays, unprecedented site and element-selective insights have been gained into nanomagnetism. At the Diamond Light Source synchrotron, electron microscopy combined with polarised x-ray spectroscopies allows high-resolution imaging of strain and electrical effects on nanomagnetism. In this talk, recent results using PhotoEmission Electron Microscopy (PEEM) combined with X-Ray Absorption Spectroscopy (XAS), X-Ray Magnetic Linear Dichroism (XMLD) and X-Ray Magnetic Circular Dichroism (XMCD) will be presented.

Antiferromagnetic spintronics aims to exploit zero net magnetic moment materials as efficient generators, detectors and transmitters of spin current. PEEM, with magnetic contrast arising from XMLD, has been employed to directly image changes in the antiferromagnetic domain structure of CuMnAs [1] after electrical rotation of the magnetic moments. The XMLD-PEEM images are correlated with in situ Anisotropic Magnetoresistance transport measurements [2,3].

XMLD-PEEM imaging has also been used to directly visualise the antiferromagnetic domain structure of epitaxial (111)-oriented BiFeO₃ (BFO) films. Angle-dependent XMLD-PEEM images are combined to reveal a sub-micron network of antiferromagnetic domains (see Figure 1) that are coherently coupled to monoclinic domains. The magnetoelastic coupling is found to stabilise the antiferromagnetic domain structure, providing a possible pathway towards strain-engineering multiferroic domains in (111)-oriented BFO films [4].

Finally, I will explore electrical switching of perpendicular magnetism in Ni films grown on BaTiO₃ ferroelectric substrates. XMCD-PEEM maps of the in-plane and out-of-plane magnetization reveal a reversible transformation of the out-of-plane magnetization in the Ni films under voltage control [5].

[1] P. Wadley et al., Nat. Nanotechnol. 13, 362 (2018).

[2] M. J. Grzybowski et al., Phys. Rev. Lett. 118, 057701 (2017).

[3] P. Wadley et al., Science 351, 587 (2016).

[4] N. Waterfield-Price et al., Phys. Rev. Lett. 117, 117601 (2016).

[5] M. Ghidini et al., Adv. Mater. 27, 1460 (2015).



標題：ナノサイエンスセミナー：ダイヤモンドの NV 中心を用いた単一スピンレベルでの ESR 法

日時：2018 年 11 月 16 日(金) 午後 1 時 30 分～午後 3 時

場所：物性研究所本館 6 階 第 2 セミナー室(A612)

講師：高橋 晋

所属：Department of Chemistry and Department of Physics & Astronomy University of Southern California, Los Angeles, California, USA

要旨：

Nuclear Magnetic Resonance (NMR)や Electron Spin Resonance (ESR)法などの磁気共鳴法は、固体、溶液等の試料の形状を問わず非接触、非破壊測定ができ、原子レベルでの構造決定や原子・分子を取り巻く微視的環境を理解できることから、生体分子の立体構造や固体の磁性研究などに幅広く利用されている。しかし、RF 波やマイクロ波を検出することによって行われる従来の MR 法は、信号検出感度が低く、例えば、通常常温下で ESR の観測を行うには 1010 以上のスピンが必要である。しかし、信号検出感度を大幅に向上することができれば、生体細胞内等生体条件下における磁気共鳴法を用いた分子構造解析や構造変化の観測などを単一分子レベルで行うことが可能になるなど多くの応用が考えられる。

Nitrogen-vacancy (NV)中心は、窒素原子と隣合った空孔から成るダイヤモンド格子の中に存在する常磁性不純物であり、高感度かつ常温動作可能な磁気センサーとしての応用が期待されている。本発表では NV 中心のユニークな物性やスピン感度を大幅に向上させる NV 中心を用いた ESR (NV-ESR) 法の手法及び最近の我々の実験について議論する。

標題：極限コヒーレント光科学セミナー：フェムト秒レーザーで開拓する(したい)インフレーション仮説の検証

日時：2018 年 11 月 19 日(月) 午前 10 時～午前 11 時 30 分

場所：物性研究所本館 6 階 第一会議室(A636)

講師：松村 知岳

所属：東京大学 Kavli IPMU

要旨：

宇宙マイクロ背景放射(Cosmic Microwave Background = CMB)の観測は、標準宇宙論を確立する上で大きな役割を果たしてきた。一方で、標準宇宙論の枠内で説明できない問題として宇宙の構造の種、地平線問題、平坦問題などが残っている。インフレーション仮説はこれらの問題を一挙に解決する理論として提唱されている。この理論はこれまでの観測と矛盾はないが直接の検証には至っていない。インフレーションは宇宙が始まって 10^{-38} 秒後の事象であるが、インフレーション由来による原始重力波により CMB 偏光に対して特殊な空間パターン(B モード)を残すため、宇宙観測により実験的に検証が可能である。この観測の実現に向けて観測機器の開発を行なっている。特に IPMU では観測の鍵となる偏光変調器の開発を進めている。本講演では、インフレーションを含む初期宇宙論、また CMB 偏光観測を光学の観点を含めて紹介する。また、その中でも特にレーザーを用いたサファイア波長板の広帯域反射防止モスアイ加工を紹介する。

標題：理論セミナー：密度汎関数理論と溶液理論を用いた電極電位と電荷移動反応の研究

日時：2018 年 11 月 20 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：春山 潤

所属：東京大学 物性研究所

要旨：

エネルギー問題の解決に向けて燃料電池や Li イオン電池など電気化学反応を利用したデバイスの開発が盛んに行われている。電極電位は電気化学反応を理解するために導入された概念であり、電気化学の実験結果を解釈するためには電極

電位をもとに考える。しかし、電極電位をうまく現すために本質的に Grand canonical な系を扱わなくてはならないため、物質計算科学的に困難を伴うことが知られていた。

我々は密度汎関数法の計算に溶液理論を組み合わせた方法(ESM-RISM 法)を用いることで、電極電位と電子化学ポテンシャルを対応させることが可能であることを示した。[1] セミナーでは ESM-RISM 法 [2] の内容を簡単に説明し、時間があれ応用事例として Li イオン電池のグラファイト界面の電荷移動反応 [3] の解析結果を紹介する。

[1] J. Haruyama, T. Ikeshoji, and M. Otani, *Phys. Rev. Mater.* 2, 095801 (2018).

[2] M. Otani and O. Sugino, *Phys. Rev. B* 73, 115407 (2006); S. Nishihara and M. Otani, *Phys. Rev. B* 96, 115429 (2017).

[3] J. Haruyama, T. Ikeshoji, and M. Otani, *J. Phys. Chem. C* 122, 9804 (2018).

標題：理論インフォーマルセミナー：第一原理計算と遺伝アルゴリズムを用いた構造探索法による新物質探索；新奇電子化合物（エレクトライド）への応用

日時：2018年11月21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：多田 朋史

所属：東京工業大学元素戦略研究センター

要旨：

本発表では、遺伝アルゴリズムを用いた結晶構造探索アプローチのうち、VASP 等の第一原理計算を電子状態計算ソルバーとして用いることのできる USPEX を利用した新物質探索について紹介する。本手法はすでに多くの適用事例が報告されており、中でも実験的に困難とされる超高压条件下での新物質の発見や同定等は、この手法の適用範囲の広さを物語っている。本発表は、常圧または標準的高圧下における新物質探索に絞った内容となっているが、近年さまざまな方面で注目されはじめている電子化合物(エレクトライド)の新規探索について紹介する。本手法により新たにリン化合物系エレクトライドが見出され、後に合成、結晶構造解析、物性計測を経てその存在が実験的にも確認された。なお、物性に関しては上記計算と計測とで異なる電子状態を示したが、この差異により(無機系)エレクトライドが強相関化合物群としても出現しうる最初の報告例となった。この結果に関する USPEX の構造探索の妥当性であるが、結晶構造変化に由来するエネルギースケールは、強相関性発現のエネルギースケールに比べると大きいから、標準的第一原理計算から予測された結晶構造から、新しい強相関物質の発見へとつながる可能性は十分にあり、本研究はその一例を示した結果としても十分に意味のある成果であろう。

標題：量子物質セミナー：Collinear Anomalous Hall Antiferromagnets

日時：2018年12月5日(水) 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：Dr. Hua Chen

所属：Department of Physics, Colorado State University

要旨：

It is now well established both theoretically and experimentally that the anomalous Hall effect (AHE) can exist in certain noncollinear antiferromagnets with vanishing total magnetization. Using similar symmetry arguments, we propose that the AHE and many related properties such as magneto-optical Kerr effect, anomalous Nernst effect, orbital magnetization, etc., can also exist in many collinear antiferromagnets with symmetry-allowed spin canting. Similar to the noncollinear case, these AHE-related effects will still be finite when the net spin magnetization vanishes. We give two classic examples, NiF₂ and α -Fe₂O₃, corresponding to different mechanisms for spin canting, i.e.



single-ion anisotropy and Dzyaloshinskii-Moriya interaction. Although these two materials are good insulators and may not be easily doped in order to measure the AHE, the discussion is general and can be applied to many other canted antiferromagnets. We construct minimal models with spin-orbit coupling terms compatible with these canting mechanisms and discuss the similarities and differences between the collinear and the noncollinear cases.

標題：量子物質セミナー：Kitaev量子スピン液体における熱輸送特性と磁場効果

日時：2018年12月10日(月) 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：那須 謙治

所属：横浜国立大学 大学院工学研究院

要旨：

極低温まで磁気秩序を示さない量子スピン液体は P. W. Anderson による理論提案以降、およそ半世紀にわたって磁性物理学の主要な研究テーマのひとつである。その中でも近年、厳密に量子スピン液体を基底状態にもつ Kitaev 模型[1] が注目を集めており、さらに、スピン軌道相互作用の強い絶縁磁性体はその候補物質となり得ることから[2]、実験理論共に精力的な研究が行われている。量子スピン液体の顕著な特徴として分数励起の存在を挙げることができ、Kitaev 量子スピン液体においては、量子スピンがマヨラナ準粒子と Z₂ ゲージ場へと分数化することが知られている。これらの分数準粒子がどのように熱力学量や励起構造に現れるかを明らかにすることは、量子スピン液体の存在を実験的に示す重要な証拠になりうる。

本研究では、Kitaev 量子スピン液体に内在する分数準粒子が生み出す輸送特性及びごく最近活発に研究がなされている磁場効果を明らかにするために、可解な Kitaev 模型を出発点として熱伝導度を計算し、さらにその磁場依存性を調べた。まず、磁場が小さいときの摂動的なアプローチを用いて有限温度の熱伝導度を計算した。その結果、有効磁場によって生じるマヨラナ準粒子系のトポロジカルな変化と Z₂ ゲージ場の揺らぎが、特異な熱ホール伝導度の温度変化を生み出すことを示し[3]、この計算と実験結果との比較を行った[4,5]。さらに摂動的な扱いを超えて磁場を強くしたときに、非自明なトポロジカル転移が生じることも明らかにした[6]。

[1] A. Kitaev, Ann. Phys. (N. Y.) 321, 2 (2006).

[2] G. Jackeli and G. Khaliullin, Phys. Rev. Lett. 102, 017205 (2009).

[3] J. Nasu, J. Yoshitake, and Y. Motome, Phys. Rev. Lett. 119, 127204 (2017).

[4] Y. Kasahara et al., Phys. Rev. Lett. 120, 217205 (2018).

[5] Y. Kasahara et al., Nature 559, 227 (2018).

[6] J. Nasu, Y. Kato, Y. Kamiya, and Y. Motome, Phys. Rev. B 98, 060416(R) (2018).

標題：量子物質セミナー：Theory of Multipolar Kondo Materials

日時：2018年12月12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：Yong-Baek Kim

所属：Department of Physics, University of Toronto

要旨：

The standard Doniach phase diagram of Kondo materials or heavy fermion systems often assumes Kramers-doublet local moments coupled to conduction electrons. On the other hand, there exist a class of materials, where the local moments carry multipolar moments due to their non-Kramers nature. In this talk, I will describe a theory of Kondo

materials with multipolar local moments using the example of PrTi₂Al₂₀ and PrV₂Al₂₀ systems. Here the local moments at Pr sites carry quadrupolar and octupolar moments. I will present a general Landau theory for the multipolar ordering in such systems. Further, I will explain how magnetostriction, the length change of the system upon the application of external magnetic field, can be used as a power tool to detect multipolar ordering.

If time permits, I will also describe recent theoretical progress in understanding the multipolar Kondo problem, where new renormalization group fixed points may be found.

標題：ナノサイエンスセミナー：Structural reconstructions and emerging interface spin textures at (111)-oriented epitaxial perovskite interfaces

日時：2018年12月17日(月) 午後1時～午後2時

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室(A615)

講師：Prof. Thomas Tybell

所属：Norwegian University of Science and Technology, Trondheim, 7491, Norway

要旨：

Perovskite oxides are technologically interesting because of their strong structure–property coupling, with interesting functional properties ranging from ferromagnetism, ferroelectricity to high-temperature superconductivity. Here I will give an overview of our work on synthesis of atomically smooth (111)-oriented oxides and discuss the effect of crystalline facets on their physical properties. Of special interest are structural effects at epitaxial interfaces promoting novel functional properties. To address this question (111)-oriented epitaxial heterostructures of antiferromagnetic (AF) LaFeO₃ and ferromagnetic La_{0.7}Sr_{0.3}MnO₃ are used as a model system. To probe the interface spin texture, we rely on a combination of soft x-ray spectroscopy, neutron reflectometry, magnetometry, TEM, and DFT investigations. By increasing the LaFeO₃ thickness, a change from out-of-plane to in-plane AF spin axis takes place above 16 d111-layers, below which a magnetic interface reconstruction with a net switchable Fe moment of LaFeO₃ is observed when deposited on SrTiO₃. By using orthorhombic substrates, the magnetic anisotropy of the reconstructed interface can be controlled, from 6-fold when deposited on cubic SrTiO₃ to 2-fold. In the presentation I will especially focus on the importance of the interplay between local AF order and concurrent structural reconstructions at interfaces to establish a magnetic reconstruction, opening for tuning the AF-spin texture by interface engineering.

References:

Phys. Rev. Materials 2, 014404 (2018).

J. Phys.: Cond. Matter 30, 255702 (2018).

J. of Appl. Phys 124, 185301 (2018).

Phys. Rev. B 96, 094109 (2017).

APL Materials 5, 086107 (2017).

Phys. Rev. B. 95, 064109 (2017).

Phys. Rev. B 94, 201115 (2016).

Crystal Growth and Design 16, 2357 (2016).

APL Materials 3, 062501 (2015).

J. of Appl. Phys. 113, 183512 (2013).



標題：理論インフォーマルセミナー：Emergent O(4) Symmetry and Signatures of Deconfined Quantum Critical Point in Shastry-Sutherland Lattice Material SrCu₂(BO₃)₂

日時：2018年12月18日(火) 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：Jong Yeon LEE

所属：Harvard University

要旨：

We study the possibility of a deconfined quantum phase transition in the two dimensional Shastry-Sutherland spin model, using both numerical and field theoretic techniques. We argue that the quantum phase transition between a two fold degenerate plaquette valence bond solid (pVBS) order and Neel order may be described by a deconfined quantum critical point (DQCP) with emergent O(4) symmetry.

Further, using the infinite density matrix renormalization group (iDMRG) numerical technique, we verify the emergence of an intermediate pVBS order, between the dimer and Neel ordered phases. By analyzing the correlation length spectrum for different orders, we provide evidence for deconfinement and emergent O(4) symmetry at the phase transition between the pVBS and Neel orders. Such a phase transition has been reported in the recent pressure tuned experiments in the Shastry-Sutherland lattice material SrCu₂(BO₃)₂. The non-symmorphic lattice structure of the Shastry-Sutherland compound leads to extinction points in the scattering, at which we predict sharp signatures for DQCP in both phonon and magnon spectra associated to the spinon continua. Our result would guide the experimental search for DQCP in quantum magnets.

標題：中性子セミナー：Solid Transformation and Post-synthetic Modification on Metal-Organic Frameworks

日時：2018年12月19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：Prof. Ming-Hua Zeng

所属：Hubei University

要旨：

The chemistry of metal-organic frameworks has experienced an almost unparalleled growth in the past two decades driven by their rich functions cover a wide range and potential industry applications as high-capacity adsorbents. The talk will introduce different ways to rationally modify the structure and function of a MOF with established structure through three main parts: (1) Some interesting MOFs exhibits good stability, high loading and quick uptake of iodine. After iodine inclusion, the resulting guest changed MOFs process fascinating properties in conductivity and nonlinear optical properties. (2) Tandem post-synthetic reactions were applied to well modify the structure of precursor MOFs, leading either entirety or surface modification as well as great changes in sorption and magnetic behaviors. (3) A sequential perturbative approach to unrestraint metal coordinative environment in MOF crystals was built and thus enabling the glass formation under mild condition and reticular tuning of glass properties. The new strategies would provide useful guidelines for screening functional glass from the abundant databases of MOFs, which may open an area of research with fundamental and applied importance.

標題：極限コヒーレント光科学セミナー：マイクロ・ナノバブルの観測と結晶化促進効果

日時：2018年12月19日(水) 午後2時10分～午後3時40分

場所：物性研究所本館6階 第一会議室(A636)

講師：内田 努

所属：北海道大学 大学院工学研究院 応用物理学部門

要旨：

マイクロ・ナノバブル(MNB)は、1mm以下の径を持つ微細気泡の総称である。このMNBを水溶液中で発生させて、動植物の生育を促進したり殺菌したりする技術が近年開発されている。水中に浮遊するMNB(Bulk MNB)は一般に浮力が小さく、数十mVの負の表面電荷(とポテンシャル)を持つことから、気泡同士が反発して合着しづらく、液相中に長期間滞留することができると考えられている。しかしラプラス圧が高く気液界面が大きいため、気体を液相中に高効率に溶解させることができると同時に消滅速度が速いとも考えられている。そのため、Bulk MNBが安定に存在できるか否か自身が研究対象となっている。そこで、Bulk MNBを観測することを目的に、凍結切断レプリカ法を開発した1)2)。この手法は通常の光散乱法と異なり、不純物を含む系での測定も可能である1)3)。またMNB含有水が、ガスハイドレートの結晶化促進効果があることを見出した4)5)。

Reference

- 1) T. Uchida et al., Transmission electron microscopic observations of nanobubbles and their capture of impurities in wastewater, *Nanoscale Res. Lett.* 6 (2011) 295.
- 2) T. Uchida et al., Effect of NaCl on the Lifetime of Micro- and Nanobubbles, *Nanomaterials* 6 (2016) 31.
- 3) T. Uchida et al., Ultra-Fine Bubble Distributions in a Plant Factory Observed by Transmission Electron Microscope with a Freeze-Fracture Replica Technique, *Nanomaterials* 8 (2018) 152.
- 4) T. Uchida, K. Yamazaki, and K. Gohara, Generation of micro- and nano-bubbles in water by dissociation of gas hydrates, *Korean J. Chem. Eng.* 33 (2016) 1749.
- 5) T. Uchida et al., Gas Nanobubbles as Nucleation Acceleration in the Gas-Hydrate Memory Effect, *J. Phys. Chem. C* 120 (2016) 26620.

標題：理論インフォーマルセミナー：IPMU 共催・理論インフォーマルセミナー：Symmetric gauge theories and Lieb-Schultz-Mattis-type constraints

日時：2018年12月27日(木) 午前11時～午後0時

場所：IPMU セミナー室 B

講師：Xu YANG

所属：Boston College

要旨：

It is known that certain symmetric gauge theories can only exist on the surface of a higher dimensional symmetry protected topological (SPT) state, in which case the symmetric gauge theory is termed anomalous. The anomaly class of such a gauge theory is represented by the bulk SPT index. Given an anomaly class, what kinds of symmetric gauge theories are allowed? Based on physical arguments and tensor-network constructions, we point out a sharp mathematical relationship between the symmetry properties of Abelian gauge theories and the anomaly class: the cup product. When the physical system hosts Lieb-Schultz-Mattis-type constraints, which is a specific type of anomaly class, our result sharply determines the physically allowed symmetric gauge theories as the preimage of the cup product. Various examples are given as an application, including the computation of physically allowed skyrmion

quantum numbers in various Neel states in 2+1D, and gauge charge/monopole projective representations in U(1) quantum spin liquids in 3+1D.

標題：量子物質セミナー：結晶点群の下での多極子の分類と交差相関物性

日時：2018年12月28日(金) 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：速水 賢

所属：北海道大学大学院理学研究院物理学部門

要旨：

固体中の電子は結晶場やスピン軌道相互作用といった様々な要因により、異方的な電荷分布や磁荷分布を示す。このような異方性は電気多極子や磁気多極子といったミクロな多極子自由度によって特徴づけられ、それらの秩序状態が示す電氣的・磁氣的性質や集団現象に関する研究が長年にわたって精力的に行われてきた[1-3]。こうした多極子は空間・時間反転対称性の有無に応じて電気・磁気・磁気トロイダル・電気トロイダルという、4種類の多極子に分類することができる。一方で近年、こうした多極子の概念は、クラスター空間、混成軌道空間、波数空間といった部分空間において拡張されており、電気磁気効果や異常量子ホール効果などの様々な物性を理解するのに用いられている[4,5]。しかし、磁気トロイダル多極子や電気トロイダル多極子の微視的な表式は最近になってようやく得られたばかりであり[6]、微視的な立場からの系統的な解析はほとんど行われていないのが現状である。

本研究において我々は、32の結晶点群の元で活性化する多極子自由度とそれらがもたらす物性を網羅的に調べた[7]。まず、実空間および波数空間における多極子の微視的枠組みを求めることにより、4種類の多極子がどのような結晶点群や基底関数において存在するかを明らかにした。さらに、電気磁気効果やスピンホール効果における応答テンソルの性質を多極子の視点からまとめた。講演では4種類の多極子がどのような結晶点群の下で活性化するかを示すとともに、これらの多極子がもたらす電子状態や交差相関物性を具体例を挙げながら議論する。

[1] P. Santini, S. Carretta, G. Amoretti, R. Caciuffo, N. Magnani, and G. H. Lander, Rev. Mod. Phys. 81, 807 (2009).

[2] Y. Kuramoto, H. Kusunose, and A. Kiss, J. Phys. Soc. Jpn. 78, 072001 (2009).

[3] H. Kusunose, J. Phys. Soc. Jpn. 77, 064710 (2008).

[4] S. Nakatsuji, N. Kiyohara, and T. Higo, Nature (London) 527, 212 (2015).

[5] M.-T. Suzuki, T. Koretsune, M. Ochi, and R. Arita, Phys. Rev. B 95, 094406 (2017).

[6] S. Hayami and H. Kusunose, J. Phys. Soc. Jpn. 87, 033709 (2018).

[7] S. Hayami, M. Yatsushiro, Y. Yanagi, and H. Kusunose, Phys. Rev. B 98, 165110 (2018).