



標題：理論セミナー：Spin singlet order in breathing pyrochlore

日時：2015年5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：常次 宏一

所属：東京大学物性研究所

要旨：

Pyrochlore antiferromagnets are a typical example of frustrated magnets in three dimensions. I studied the  $S=1/2$  Heisenberg model on this lattice and found a dimer/tetramer order with a hierarchical structure. I used an approach that the spin exchange  $J'$  connecting tetrahedron building blocks varies from the intra-block coupling  $J$  and the ratio  $J'/J$  was a “small” control parameter in my theory. Okamoto et al. in Hiroi group reported a material with this exchange pattern realized, and that is an  $S=3/2$  antiferromagnet  $\text{Li}(\text{Ga},\text{In})\text{Cr}_4\text{O}_8$  named breathing pyrochlores [PRL 110, 097203, 2013]. In the end member  $\text{LiInCr}_4\text{O}_8$ , the ratio  $J'/J$  is small and a magnetic order appears with lowering temperature preceded by a structure transition. I have generalized my previous theory and applied to the  $S=3/2$  case, and discuss this transition.

標題：放射光セミナー：NSRRCにおける強相関電子系物質の共鳴 X 線非弾性散乱研究 –  $\text{Sr}_3\text{NiIrO}_6$  と  $\text{Bi2212}$  –

日時：2015年5月7日(木) 午前10時30分～午前11時30分

場所：スプリング8中央管理棟テレビ会議室 (TV 会議 物性研第一会議室)

講師：岡本 淳

所属：台湾放射光研究センター

要旨：

共鳴 X 線非弾性散乱(Resonant Inelastic X-ray Scattering = RIXS)は、入射 X 線のエネルギーを特定の元素の吸収端に合わせることで、対象とした軌道状態が関係する励起スペクトルを測定する手法である。格子や電子自由度の素励起や、中間状態での軌道間電子励起を観測できるため、強相関電子系物質の電子構造解析で重要な成果をあげている。近年の放射光技術の進歩に伴い軟 X 線領域でのエネルギー分解能が Cu L3 端で 130 meV まで向上したことで、3d 遷移金属化合物を対象とした研究が着目されている。

我々のグループは、軟 X 線領域と硬 X 線領域を対象とした高エネルギー分解能 RIXS 研究を、各々 Taiwan Light Source(TLS)BL05A1 と SPring-8 BL12XU を利用して行っている。

本講演では、擬一次元構造を持つ反強磁性 Ir 酸化物  $\text{Sr}_3\text{NiIrO}_6$  の、Ir L3 端 RIXS を用いた Ir 5d 電子構造と磁気励起の研究について述べる。

軟 X 線 RIXS については、最近行った  $\text{Bi2212}$  の Cu L3 端 RIXS での入射エネルギー依存性を用いた低エネルギー励起スペクトルの研究について述べる。

最後に、現在第一期建設が進められている 1.3 GeV 放射光施設 Taiwan Photon Source(TPS)での軟 X 線 RIXS ステーションと研究展開について紹介する予定である。



標題：理論セミナー：New molecular dynamics simulation methods to enhance conformational sampling for biomolecules

日時：2015年5月8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：伊藤 暁

所属：分子科学研究所

要旨：

There are difficulties when conventional canonical-ensemble simulations are carried out for biomolecular systems. This is because the canonical simulations tend to get trapped in a local-minimum free-energy state of the biomolecular system, and sufficient sampling in the conformational space of the system is not able to be obtained. To overcome such difficulties, I had recently proposed the replica-permutation method (RPM) [1]. In RPM, replicas (or copies) of a target system are prepared, and different temperatures are assigned to the replicas. Canonical simulations at the assigned temperatures are performed individually and simultaneously. During the simulations, the temperatures are permuted among the replicas. Here, the Suwa-Todo algorithm [2] is employed for replica-permutation trials to minimize its rejection ratio. In my talk, I will show efficiency of RPM for small biomolecules. I will also show applications of the Hamiltonian RPM, which is a generalization of RPM, to amyloid  $\beta$ -peptides (A $\beta$ ) [3,4]. A $\beta$ s form oligomers and then amyloid fibrils which are associated with Alzheimer's disease. I will discuss the oligomerization process of A $\beta$ s.

Reference:

[1] S. G. Itoh and H. Okumura, *J. Chem. Theory Comput.* 9, 570 (2013).

[2] H. Suwa and S. Todo, *Phys. Rev. Lett.* 105, 120603 (2010).

[3] S. G. Itoh and H. Okumura, *J. Comput. Chem.* 34, 2493 (2013).

[4] S. G. Itoh and H. Okumura, *J. Phys. Chem. B* 118, 11428 (2014).

標題：放射光セミナー：光電子顕微鏡と Momentum-microscope と 2次元イメージング型スピン検出器による超高感度スピン偏極2次元同時角度分解光電子分光

日時：2015年5月11日(月) 午後1時30分～

場所：物性研究所本館6階 第1会議室 (A636) TV会議 Spring-8 会議室

講師：菅 滋正

所属：マックスプランク微細構造物理学研究所, 大阪大学産業科学研究所

要旨：

トポロジカル絶縁体に見られるように多数の興味ある固体電子状態の研究にはスピン分解できる角度分解光電子分光 (ARPES)が最も有効であると考えられる。

放射光の利用開始以来数十年にわたり ARPES の手法は着実に発展してきた。2次元検出器を用いることで検出効率も飛躍的に向上してきた。しかしながら光電子のスピン検出に現在でも用いられる Mott 検出器やスピン LEED 検出器の figure of merit と呼ばれるスピン検出効率  $f_0=(I/I_0)Seff^2$  は  $10^{-4}$  程度と依然として極めて低い。ここで  $I_0$  は検出器 target に入る電子数、 $I$  は検出器からの反射電子数、 $Seff$  は 100%偏極した電子が target に当たったときの反射電子のスピン依存強度の非対称性でシャーマン関数とよばれる。我が国で近年高寿命化に成功した Fe-O VLEED スピン検出器では  $f_0$  が  $10^{-2}$  程度に向上したことで、これまでより格段に効率の高いスピン偏極角度分解光電子分光(SP-ARPES)が可能となった。それでも $(k_x, k_y)$ の1点ずつのスピン偏極を測定しなければならない(つまりシングルチャンネル検出)ためにエネルギー分解能あるいは波数分解能を犠牲にしたうえで、さらにかかなり狭い波数領域の測定を行う他なかった。

ここ数年ドイツのマックスプランク微細構造物理学研究所で、S字配置の2台の静電半球型電子エネルギー分析器(HDAs)で収差を補正をしたうえで同時2次元角度分解光電子分光のできる Momentum microscope(M.M.)の開発が進みに、さらに一昨年 Au/Ir(001) 2次元イメージング型スピン検出器を付けることで、スピン偏極同時2次元角度分解光電子分光(SP-2D-ARPES)が可能となった。

1万点にも及ぶ(kx,ky)点でのスピン偏極の同時測定ができるため VLEED 検出器の更に千倍から1万倍のスピン検出感度での実験が可能となった。入射側には光電子顕微鏡(PEEM)レンズを用いているため  $2\pi$ ステラジアン全てに放出された電子を検出器に導くことができる。このため極めて広い2次元波数空間での測定が He ランプを用いてさえエネルギー分解能 12meV、波数分解能  $0.005\text{\AA}^{-1}$  の高分解能で可能となった。また PEEM を用いているために実空間の  $\mu\text{m}$  あるいは数百 nm 域を選んだミクロナノ測定も可能である。Laser あるいは放射光を用いた研究は更に強力と考えられるので、現在その方向で装置改良を進めている。この高性能装置はまだ世界で1台しかないが、光電子分光の新しい時代がまさに始まろうとしている。全波数空間の隅々までの高精度のスピン情報は、理論への feedback や共同研究により固体物理学全体の推進にも大きく役立つものと思われる。

#### References

- 1.S.Suga and A.Sekiyama, Photoelectron Spectroscopy: Bulk and Surface Electronic Structures, Springer Series in Optical Sciences 176,1-378 (2014).
- 2.S.Suga and C.Tusche, Photoelectron spectroscopy in a wide  $h \cdot$  region from 6 eV to 8 keV with full momentum and spin resolution, J.Electron Spectrosc. Rel. Phenom. (2015), in press.

標題：理論インフォーマルセミナー：Fate of Majorana fermions after a quantum quench

日時：2015年5月15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：Prof. Pedro D. Sacramento

所属：CeFEMA, Instituto Superior Tecnico, Lisboa

要旨：

The stability of Majorana fermions at the edges of a two-dimensional topological superconductor after a quantum quench is studied. Both instantaneous and slow quenches are considered. In the case of instantaneous quenches, the Majorana modes generally decay, but for a finite system there is a revival time that scales to infinity as the system size grows. Exceptions to this decaying behavior are found in some cases such as due to the presence of edge states with the same momentum in the final state. It is shown that the Chern number remains invariant after the quench, until the propagation of the mode along the transverse direction reaches the middle point.

A periodic driving is also considered. In this work we consider triplet and singlet superconductors subject to periodic variations of the chemical potential, spin-orbit coupling and magnetization in both topologically trivial and nontrivial phases, and study their influence on the charge and spin currents that propagate along the edges of the two-dimensional system.





標題：理論セミナー：Optimized effective potential method in static RPA and its applications

日時：2015年5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：赤井 久純

所属：東京大学物性研究所

要旨：

The optimized effective potential (OEP) method combined with many-body perturbation schemes is one of promising approaches to go beyond the local density approximation of the density functional theory. Although the method is very powerful, it has not been widely used so far. One of the reasons is that some ambiguity inherent to the OEP prevents us to apply it to spin-polarized cases [1]. Another more practical reason is that its computational cost is rather high. In order to overcome these points, first, we reformulated the OEP method to render it applicable to general correlation functionals including the RPA correlation functional [2]. The following points are emphasized: i) Level-crossing at the Fermi surface is taken into account; ii) eigenvalue variations in a Kohn-Sham functional are correctly treated; and iii) the resultant OEP equation is different from those reported to date.

Second, we have introduced a method that accelerates the OEP scheme in a static RPA-level correlation functional in the framework of KKR. Further to improve the computational speed, the Krieger-Li-Iafrate (KLI) approximation is exploited for solving the OEP equation. It is likely that KLI approximation does not deteriorate the description of the magnetic transition metals (Fe, Co, and Ni) examined here, despite the fact that their magnetic properties are rather sensitive to the treatment of correlation energy.

標題：単分子量子磁石を用いた単分子量子スピントロニクス最前線

日時：2015年5月29日(金) 午前11時～午後0時

場所：物性研究所本館6階 第1会議室 (A636)

講師：山下 正廣

所属：東北大学大学院理学研究科化学専攻

要旨：

スピントロニクスは21世紀のキーテクノロジーとして基礎と応用の両面から研究されている。記録素子として古典磁石を用いた巨大磁気抵抗(GMR)やトンネル磁気抵抗(GMR)が日常的に使われている。しかし、ムーアの限界を超えるためには古典磁石をナノサイズにしなければならないが、古典磁石はナノサイズでは磁石としては働かない。そこで、我々は21世紀のナノ分子磁石である単分子量子磁石を用いてムーアの限界を超えるために、量子分子スピントロニクスに関する研究を行っている。本講演では、単分子量子磁石を用いた、単分子メモリー、近藤効果、巨大磁気抵抗(GMR)、トンネル磁気抵抗(TMR)、電界トランジスター(FET)、などについて紹介する。

[1] T. Komeda, M. Yamashita, *et al.*, *Nature Commun.*, 2, 217(2011)

[2] K. Katoh, M. Yamashita, *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.*, 131, 9967(2009)

[3] Z. Wei-Xiong, M. Yamashita, *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.*, 134, 6908(2012)

[4] T. Komeda, K. Kaoth, M. Yamashita, *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.*, 135, 651(2013)



標題：ナノサイエンスセミナー：Measurement of resistance induced by a single potassium atom on chiral-angle known nanotubes

日時：2015年6月1日(月) 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：Prof. Masa Ishigami

所属：Department of Physics, University of Central Florida

要旨：

Impurity-induced carrier scattering is expected to be dependent on the chirality of nanotubes and the nature of scattering potentials induced by impurities. Such scattering is still poorly understood because it has been impossible to measure the impact of impurities on resistance of carbon nanotubes with known chirality.

We have measured the scattering strength of charged impurities on semiconducting single-walled carbon nanotubes with known chirality. The resistivity of nanotubes is measured as a function of the density of adsorbed potassium atoms, enabling the determination of the resistance added by an individual potassium atom. Holes are scattered 26 times more efficiently than electrons by an adsorbed potassium atom. The determined scattering strength is used to reveal the spatial extent and depth of the scattering potential for potassium, a model Coulomb adsorbate, paving way for rational design of nanotube-based sensors.

標題：ミニワークショップ：Spins at Surfaces

日時：2015年6月9日(火) 午前10時30分～午後4時45分

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

要旨：

Program

10:30 Roland Wiesendanger (University of Hamburg)

"Exploring spins at surfaces by spin-polarized STM" (Lecture in NPSMP2015)

Lunch break

13:30 Hidemi Shigekawa (Tsukuba University)

"Probing spin dynamics by laser-combined scanning tunneling microscopy"

14:00 Tadahiro Komeda (Tohoku University)

"Spins of adsorbed molecules"

14:30 Toyokazu Yamada (Chiba University)

"Quantitative STM spin-polarization measurements of single molecules on magnetic domains"

Coffee break

15:15 Noriyuki Tsukahara (University of Tokyo)

"Controlling orbital-selective Kondo effects in a single molecule"

15:45 Yasuo Yoshida (University of Tokyo)

"Real-space observations of superconducting and magnetic properties of the heavy fermion superconductor CeCoIn<sub>5</sub>"

16:15 Toshio Miyamachi (University of Tokyo)

"Orbital selectivity in STM: distant-dependent tunneling process observed in iron nitride"





標題：ナノサイエンスセミナー：Theory of Dirac and Topological States on Conventional Semiconductor Surfaces

日時：2015年6月29日(月) 午前11時～午後0時30分

場所：物性研究所本館6階 第5セミナー室 (A615)

講師：Prof. Feng Liu

所属：Department of Materials Science and Engineering, University of Utah

要旨：

Since the discovery of graphene, two-dimensional (2D) materials have drawn much recent interest. Two outstanding properties unique to 2D materials are Dirac and topological states, which span a wide range of novel electronic and quantum transport phenomena. When a freestanding 2D atomic layer is transferred to a substrate, however, its intrinsic properties will be altered, let alone the difficulty of the transfer process. This poses also a formidable technical challenge for potential applications of 2D materials. In this talk, I will present our recent efforts in computational design of Dirac and topological states on conventional semiconductor surfaces [1-4]. By constructing overlayer structures that are atomically bonded but electronically isolated from the underlying substrates, various “virtual” 2D materials can be made on top of semiconductor substrates, where the electronic bands of the virtual 2D materials lie completely inside the band gap of substrates. A substrate orbital filtering effect is shown to play a key role in the design process. We envision that our findings will not only greatly broaden the scientific scope of 2D materials but also significantly impact on their applications in real devices.

[1] M. Zhou, W. Ming, Z. Liu, Z. Wang, P. Li, F. Liu, “Epitaxial growth of large-gap quantum spin Hall insulator on semiconductor surface”, Proc. Natl. Acad. Sci., 111, 14378 (2014).

[2] M. Zhou, Z. Liu, W. Ming, Z. Wang, F. Liu, “sd2 Graphene: Kagome Band in Hexagonal lattice”, Phys. Rev. Lett. 113, 236802 (2014).

[3] M. Zhou, W. Ming, Z. Liu, Z. Wang, Y. Yao, F. Liu, “Formation of quantum spin Hall state on Si surface and energy gap scaling with strength of spin orbit coupling”, Sci. Rep. 4, 7102 (2014).

[4] Z. F. Wang, F. Liu, “Self-Assembled Si Surface Dirac States and THz Plasmonics”, Phys. Rev. Lett. (in press, 2015).

標題：理論セミナー：全電子第一原理  $GW+Bethe-Salpeter$  法

日時：2015年7月3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：野口 良史

所属：東京大学物性研究所

要旨：

Bethe-Salpeter 方程式 (BSE) を  $GW$  近似( $GWA$ )の範囲で解くいわゆる  $GW+Bethe-Salpeter$  法は現実物質の光吸収スペクトルを計算することのできる最も高精度な第一原理手法の一つである。しかしこれまでのところ、計算コストや基底関数などの問題からその応用例はあまり多くなく、少数原子系に対して価電子帯の電子励起が対象となる UV-vis 吸収スペクトルの計算が行われているだけである。

本研究では全電子混合基底法[1]と第一原理  $GW+Bethe-Salpeter$  法を組み合わせることで、X線吸収スペクトル(XAS)の第一原理計算に成功した[2]。また本プログラムをハイブリッド( $OpenMP+MPI$ )並列向けに再設計・開発することにより、約1500CPUコア程度を用いた並列計算が可能になった。その結果、計算の信頼性や計算精度を一切損なうことなく、100原子以上からなる系に対する UV-vis 吸収スペクトルの高精度計算にも成功した[3]。本講演では、最近行った XAS の計算例を示し、実験のスペクトルや他の計算手法との比較を行い、本手法の妥当性を検証する予定である。また全

電子混合基底法プログラムの開発の現状やベンチマークテストの結果などを紹介しつつ、本プログラムを用いた今後の応用計算の可能性を示す予定である。

[1] Y. Noguchi, M. Hiyama, H. Akiyama, and N. Koga, J. Chem. Phys., 141, 044309 (2014).

[2] Y. Noguchi, M. Hiyama, H. Akiyama, Y. Harada, and N. Koga, J. Chem. Theory Comput., 11, 1668 (2015).

[3] Y. Noguchi and O. Sugino, J. Chem. Phys., 142, 064313 (2015).

**標題：理論セミナー：モット転移近傍の電子状態**

**日時：2015年7月17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：河野 昌仙**

**所属：物質・材料研究機構**

**要旨：**

典型的な金属の物性は自由電子の性質として理解することができる。一方、モット絶縁体は、電荷励起に大きなギャップがあり、低エネルギーの性質はスピン自由度だけで説明することができる。モット転移の問題は、自由電子のように振舞っていた電子がモット転移に向けてどのようにスピンと電荷の自由度が分離した状態へと変化するのかという問題である。本講演では、この問題に関して、1次元ハバードモデルの厳密解の解析[1]、2次元ハバードモデル[2]および  $t$ - $J$  モデルの数値計算、無限小ドーピング極限の1電子励起状態とモット絶縁体の磁気励起状態との波動関数の重なりや量子数の選択則などの解析を行った結果を示し、モット転移は電子の動きをスピン自由度に保ったまま、電荷自由度が凍結する転移として特徴づけられることを述べる。また、2次元ハバードモデルおよび  $t$ - $J$  モデルの数値計算結果と1次元系からの摂動論によって、高温超伝導体で観測されている様々な異常な振る舞い（ドーピング誘起状態、フェルミアーク、擬ギャップ、平坦バンド、スピノンのモード、ホロンのモード、キルク、ウォーターフォールなど）を2次元系のモット転移近傍の性質として統一的に説明する[2,3]。

[1] M. Kohno, Phys. Rev. Lett. **105**, 106402 (2010).

[2] M. Kohno, Phys. Rev. Lett. **108**, 076401 (2012).

[3] M. Kohno, Phys. Rev. B **90**, 035111 (2014).

