

# 凝縮系物性研究部門

## Division of Condensed Matter Science

酸化物高温超伝導体、有機伝導体、フラーレン、カーボンナノチューブ、グラフフェンなどの例に見られるように、「新物質」の発見はこれまでに何度となく物質科学の新しい局面を開いてきた。また、物質系を超低温、超高圧、強磁場など、「極限環境下」に置くと、通常の状態とは全く異なる性質を示す様になる。新奇な物性現象の発見はまた将来の新しい素材やデバイスの開発にもつながる。凝縮系物性研究部門では、無機・有機結晶に加え、単原子層や薄膜を含む新しい物質系を合成し、高度な技術を用いてその性質を測定することにより、新しい物質観につながる物性現象を発見し解明することを目標としている。

当部門は、6つの研究室から構成されている。各研究室は自由な発想のもとに新物質や高品質試料の合成、単原子層やナノ構造体の作製、精密物性測定、新しい物性測定技術の開発などを行いつつ、物性測定グループと試料作成グループとの部門枠を越えた連携も心がけている。当部門では現在、遷移金属酸化物、重い電子系物質、有機伝導体など強い電子相関を示し、トポロジー、多極子、分子自由度など新たな自由度が加わった物質における多彩な現象の解明を主要なテーマの1つとしている。多様な物質合成や原子層やナノ構造体の作製、構造解析、常温常圧ばかりでなく、極低温、超高圧、強磁場下における輸送測定、精密磁化、熱測定、核磁気共鳴など、高度な実験技術を駆使した研究が進められている。

Discoveries of new materials have often opened new horizons in materials science. High temperature oxide superconductors, carbon clusters, nanotubes, graphene, and organic conductors are good examples. Materials under extreme conditions such as low temperatures, high pressure, and high magnetic field demonstrate unusual electronic states. New materials also lead to the future development of new devices and technologies. The goal of the Division of Condensed Matter Science is to uncover novel phenomena that lead to new concepts of matter, through combined efforts of search, synthesis and characterization of new materials. Currently, our division consists of six groups. Although each group has its own research style and projects, we try to maintain close collaboration between those groups working on production of high quality materials and those working on advanced technology for measuring physical properties.

One of the subjects of our current intensive research is the effects of strong electronic correlation, in particular, novel phenomena related to topological, multipoles, molecular degrees of freedoms in transition metal oxides, heavy electron systems, and organic conductors. Here, various advanced experimental techniques are employed, such as materials syntheses, fabrication of monoatomic layer and nano structures, structural characterization, transport, magnetic and calorimetric measurements, and nuclear magnetic resonance under low temperatures, high pressure, and high magnetic field.

教授 Professor	瀧川 仁 TAKIGAWA, Masashi	助教 Research Associate	上田 顕 UEDA, Akira	特任研究員 Project Researcher	孫 悦 SUN, Yue
教授 Professor	榊原 俊郎 SAKAKIBARA, Toshiro	助教 Research Associate	下澤 雅明 SHIMOZAWA, Masaaki	特任研究員 Project Researcher	武田 晃 TAKEDA, Hikaru
教授 Professor	森 初果 MORI, Hatsumi	助教 Research Associate	田縁 俊光 TAEN, Toshihiro	特任研究員 Project Researcher	東野 寿樹 HIGASHINO, Toshiki
教授 <sup>*1</sup> Professor	中辻 知 NAKATSUJI, Satoru	助教 <sup>*1</sup> Research Associate	松本 洋介 MATSUMOTO, Yousuke	特任研究員 <sup>*2</sup> Project Researcher	大槻 匠 OHTSUKI, Takumi
准教授 Associate Professor	長田 俊人 OSADA, Toshihito	特任助教 <sup>*1</sup> Project Research Associate	酒井 明人 SAKAI, Akito	特任研究員 <sup>*1</sup> Project Researcher	ティアン ザオミン TIAN, Zhaoming
准教授 Associate Professor	山下 穰 YAMASHITA, Minoru	教務職員 Technical Associate	村山 千壽子 MURAYAMA, Chizuko	特任研究員 <sup>*1</sup> Project Researcher	富田 崇弘 TOMITA, Takahiro
教授(客員) Visiting Professor	立川 仁典 TACHIKAWA, Masanori	技術専門職員 Technical Associate	内田 和人 UCHIDA, Kazuhito	特任研究員 <sup>*2</sup> Project Researcher	肥後 友也 HIGO, Tomoya
教授(外国人客員) Visiting Professor	高野 安正 TAKANO, Yasumasa	特任研究員 Project Researcher	酒井 謙一 SAKAI, Kenichi	特任研究員 <sup>*1</sup> Project Researcher	マン フィユアン MAN, Huiyuan
助教 Research Associate	三田村 裕幸 MITAMURA, Hiroyuki	特任研究員 Project Researcher	佐藤 光幸 SATO, Mitsuyuki	学振特別研究員 JSPS Research Fellow	吉田 順哉 YOSHIDA, Junya
助教 Research Associate	橘高 俊一郎 KITAKA, Shunichiro	特任研究員 Project Researcher	杉井 かおり SUGII, Kaori	学振特別研究員 <sup>*1</sup> JSPS Research Fellow	志村 恭通 SHIMURA, Yasuyuki

<sup>\*1</sup> 所内兼務。本務は量子物質研究グループ。 /concurrent with Quantum Materials Group

<sup>\*2</sup> 所内兼務。本務はナノスケール物性研究部門。 /concurrent with Division of Nanoscale Science

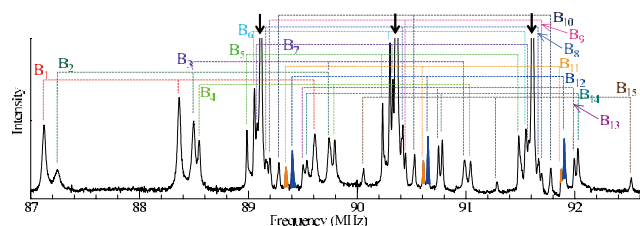
## 瀧川研究室

Takigawa Group



瀧川 仁  
TAKIGAWA, Masashi  
教授  
Professor

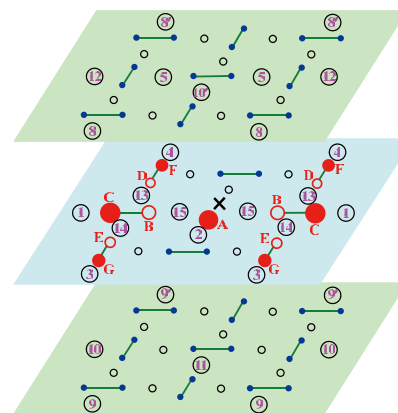
核磁気共鳴法 (NMR) を主な実験手段として、固体内の強い電子間相互作用に起因する現象を研究している。強相関電子系では、超伝導、強 (反強) 磁性、電荷秩序、軌道秩序といった多彩な秩序状態が拮抗しており、磁場・圧力などの外的条件を変えることでこれらの間の量子相転移が起こり得る。原子核は固有の磁気モーメントや電気四重極モーメントを持っており、これらは周囲の電子が作る磁場や電場勾配を感じている。このためNMRは、固体内電子のスピンの、電荷、軌道などの自由度が絡み合って現れる特異な秩序状態や揺らぎの性質を、ミクロに探る有力な実験手段となる。我々は色々な特色を持つパルスNMR測定装置を整備し、低温・強磁場・高圧などの外的環境条件と組み合わせ、遷移金属化合物、希土類化合物や有機固体を対象とした研究を行っている。



隣り合うスピン2量体が平面内で直交配列した量子磁性体  $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$  の、極低温・高磁場におけるホウ素 (B) 原子核のNMRスペクトル。測定に用いた試料は、磁性元素である銅 (Cu) のうち0.5%を非磁性元素である亜鉛 (Zn) で置き換え、意図的に不純物を導入してある。不純物から遠いスピン2量体はシングレットを形成するが、不純物によって孤立した銅スピンの周囲には、局所的な反強磁性磁化パターン (スピン・ポーラロン) が現れる。前者は内部磁場ゼロ付近の強い共鳴線 (図の矢印) として、後者はそれ以外の15種類の共鳴線によって実証される。

The boron NMR spectrum at a very low temperature and a high magnetic field obtained from  $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ , a quantum magnet in which spin-dimers have a planar orthogonal configuration. The sample used in the measurement was intentionally doped with impurities by replacing 0.5 % of magnetic Cu by non-magnetic Zn. The spin-dimers far from impurities form singlet, however, those in the neighborhood of Zn impurity generate local staggered magnetization (spin polaron). While the former corresponds to the intense resonance lines with nearly zero internal field (shown by arrows), additional 15 resonance lines provide a fingerprint of the spin polaron generated by a Zn impurity.

We use nuclear magnetic resonance (NMR) as the major experimental tool to investigate exotic phenomena caused by strong electronic correlation in solids. A remarkable feature of strongly correlated electron systems is the competition among various kinds of ordering such as superconductivity, ferro- or antiferromagnetism, charge and orbital order. Quantum phase transitions between these ground states can be caused by changing the external parameters such as magnetic field or pressure. Nuclei have their own magnetic dipole and electric quadrupole moments, which couple to the magnetic field or electric field gradient produced by surrounding electrons. This makes NMR a powerful local probe for microscopic investigation of the exotic order and fluctuations of multiple degrees of freedom of electrons, i.e., spin, charge and orbital. We use various NMR spectrometers in different environment (low temperature, high magnetic field and high pressures) to investigate transition metal compounds, rare earth compounds, and organic solids.



NMRスペクトルの解析から得られた、亜鉛不純物の周りの銅スピンの分布の様子。×は亜鉛不純物を、赤い丸は銅原子を示す。また塗りつぶした赤丸は磁場と同じ向きのスピン、中抜き赤丸は磁場と反対向きのスピンを表し、丸の大きさはスピンの大きさを表す。黒丸はホウ素の位置を示し、その中の番号は左図のスペクトル線の番号に対応する。NMRスペクトルでは、亜鉛不純物と同じ原子層だけでなく、その上下に隣り合う原子層からの信号も観測されている。

Distribution of Cu-spin moments in the neighborhood of a Zn impurity obtained from analysis of the NMR spectrum. The location of the Zn impurity is indicated by × and red circles show Cu atoms. The solid (open) red circles indicate Cu spins directed along (opposite to) the external magnetic field. The black circles show boron sites, where the numbers show correspondence to the resonance lines in the NMR spectrum. In the NMR spectrum, not only the boron sites on the same layer as the Zn impurity but also the boron sites on the neighboring layers are observed.

## 研究テーマ Research Subjects

1. 低次元、フラストレート・スピン系のダイナミクスと量子相転移  
Dynamics and quantum phase transitions in low dimensional or frustrated spin systems
2. 特異な超伝導体  
Exotic superconductors
3. 強相関電子系における電荷・軌道・多極子の秩序と揺らぎ  
Ordering and fluctuations of charge, orbital, and multipoles in strongly correlated electron systems
4. 磁性有機伝導体におけるスピンと電荷のダイナミクス  
Spin and charge dynamics in magnetic organic conductors

# 榊原研究室

Sakakibara Group



榊原 俊郎  
SAKAKIBARA, Toshiro  
教授  
Professor



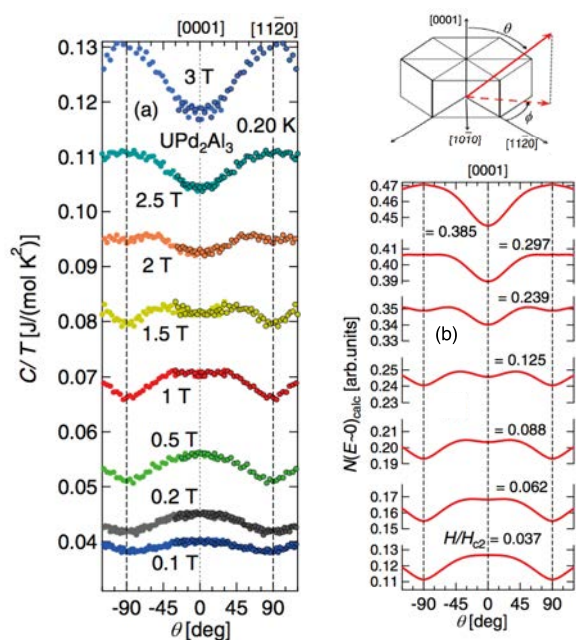
橘高 俊一郎  
KITAKA, Shunichiro  
助教  
Research Associate



三田村 裕幸  
MITAMURA, Hiroyuki  
助教  
Research Associate

物質の示す磁気現象は広い温度範囲にわたっている。その中で重い電子系などある種の物質系では1ケルビンよりも遙かに低い温度領域で興味深い性質を示す場合がある。このような温度領域では通常の磁気測定手段を適用することが困難なため未開拓の課題も多く、新しい物性現象が期待される。当研究室ではこのような低い特性温度を持つ様々な物質系の磁気物性の研究を行っている。具体的にはf電子化合物や重い電子系、量子スピン系およびフラストレートスピン系などが研究対象で、磁化や比熱測定を主な実験手段として研究している。この目的のために、我々は30ミリケルビンの極低温まで磁化測定が可能な高感度の磁力計や、異方的超伝導体のギャップ構造の特定に有効な角度分解の磁場中比熱測定装置など、独自の装置開発も行っている。

Magnetic phenomena in condensed matter can be observed at a wide range of temperatures. In heavy fermions and certain other systems, interesting magnetic behavior often occurs at low temperatures much below 1 K. Because of difficulty in making magnetic measurements at such low temperatures, little work has been done to date. Our interest is to research those magnetic materials having low characteristic temperatures, such as f-electron compounds, heavy fermions, quantum spin systems, and geometrically frustrated spin systems. To study these systems, we also develop necessary equipment. Equipment we have successfully developed includes: high sensitivity magnetometers which are operable even at extremely low temperatures down to the lowest of 30 mK, and equipment to perform angle-resolved specific heat measurements in a rotating magnetic field. The latter is an effective tool for investigating the nodal structures of anisotropic superconductors.



重い電子系超伝導体  $UPd_2Al_3$  ( $T_c = 2.0$  K) の比熱を温度で割った量  $C/T$  について、磁場を六方晶結晶の  $ac$  面内で回転させたときの角度依存性。(a) は温度 0.2 K における実験結果、(b) は水平ラインノードを仮定した場合の、各磁場におけるゼロエネルギー準粒子状態密度の仰角依存性。計算結果は実験結果をよく再現しており、回転磁場下の  $UPd_2Al_3$  の  $C/T$  の仰角依存性は超伝導ギャップの水平ラインノードの存在を強く支持している。

The polar-angle ( $\theta$ ) variation of the heat capacity divided by temperature,  $C/T$ , of the heavy-fermion superconductor  $UPd_2Al_3$  ( $T_c = 2.0$  K) obtained in various magnetic fields rotated in the  $ac$  plane of the hexagonal crystal. (a) The experimental results obtained at  $T = 0.2$  K. (b) Calculated results of the field-angular variation of the zero-energy density of states, assuming a horizontal line node. The calculated results reproduce the experimental data satisfactorily. The angular variation of  $C/T$  of  $UPd_2Al_3$  strongly suggests the existence of a horizontal line node in the superconducting gap.

## 研究テーマ Research Subjects

1. 重い電子化合物の磁性と超伝導  
Magnetism and superconductivity in heavy electron systems
2. f電子化合物の多極子自由度に由来する秩序と揺らぎ  
Multipole orderings and fluctuations in f electron systems
3. フラストレート磁性体の磁化過程  
Magnetization of geometrically frustrated magnets
4. 量子スピン系の基底状態  
Ground state properties of quantum spin systems



## 森研究室

Mori Group



森 初果  
MORI, Hatsumi  
教授  
Professor



上田 顕  
UEDA, Akira  
助教  
Research Associate

物質科学は、新しい概念を与える新物質の発見を契機に大きな発展を遂げている。

本研究室では、内部自由度をもつ分子を基盤とし、それら分子が凝縮した分子性物質において、分子自身の個性と、分子間の相互作用による自由度が相関した、特異な機能性（電子・プロトン伝導性、磁性、誘電性およびその光・電場による外場応答性）の開拓を行っている。

分子性物質の魅力は、1) 多彩な分子内および分子間の自由度が設計・制御可能であること、2) 電子間クーロン相互作用（電子相関）が大きく、電子の波動性（伝導性）と粒子性（磁性）が競合すること、3) 分子が非常に柔らかいため環境および外場応答性が大きく、光および電場による励起状態を経て特異な機能を発現することなどが挙げられる。

森グループでは、新しい有機超伝導体としてモット型  $\kappa\text{-ET}_2\text{Cu}(\text{NCS})_2$  や電荷秩序型  $\beta\text{-(meso-DMBEDT-TTF)}_2\text{PF}_6$  (図1) を発見し、物性研究を行った。さらに最近では、水素結合プロトンと伝導電子が動的に連動して、伝導性と磁性の切り替え現象を示す純有機伝導体 (図2) を開発した。

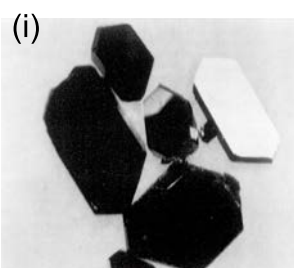
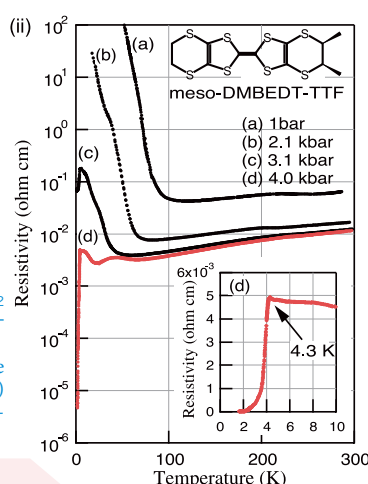


図1. 新規有機超伝導体: (i) モット型  $\kappa\text{-ET}_2\text{Cu}(\text{NCS})_2$  の単結晶と (ii) 電荷秩序型  $\beta\text{-(meso-DMBEDT-TTF)}_2\text{PF}_6$  の電気抵抗の圧力依存性。

Fig.1. Novel organic superconductors: (i) single crystals of Mott-type  $\kappa\text{-ET}_2\text{Cu}(\text{NCS})_2$  and (ii) electrical resistivities under pressures for charge-ordered-type  $\beta\text{-(meso-DMBEDT-TTF)}_2\text{PF}_6$ .



Development of “materials science” is started from discoveries of novel materials with new concepts.

The development of novel functionalities (electron and proton conductivities, magnetism, dielectrics, and responses by external stimuli such as light and electric field) has been aimed based upon molecular materials with utilizing intra- and inter-molecular degrees of freedom.

The attractive points of molecular materials are 1) that a variety of intra- and inter-molecular degrees of freedoms are designable and controllable, 2) that large Coulomb interactions (electron correlation) reflect the magnetism (electron particle) as well as conductivity (electron wave) in molecular materials, and 3) that large responses by external stimuli are observable due to softness of molecules and strong electron-phonon coupling.

In Mori group, novel Mott-type organic superconductor  $\kappa\text{-ET}_2\text{Cu}(\text{NCS})_2$  and charge-ordered-type one  $\beta\text{-(meso-DMBEDT-TTF)}_2\text{PF}_6$  have been developed and characterized (Fig. 1). Moreover, novel electron-proton coupled purely organic conductors, where conductivity and magnetism switching due to coupled deuteron and electron transfers, have been developed and characterized (Fig. 2).

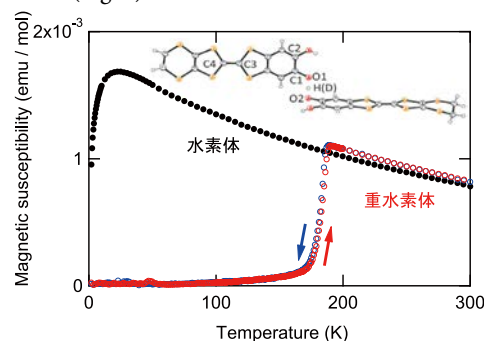


図2. 伝導電子と水素結合プロトンが相関する純有機伝導体  $\kappa\text{-X}_3(\text{Cat-EDT-TTF})_2$  ( $X = \text{H, D}$ ) において、大きな重水素効果により高温で伝導性および磁性が切り替わる。

Fig.2. Switching behavior of electrical resistivity and magnetism due to large deuteron isotope effect in proton-electron correlated purely organic conductors  $\kappa\text{-X}_3(\text{Cat-EDT-TTF})_2$  ( $X = \text{H, D}$ ).

## 研究テーマ Research Subjects

1. 分子の自由度を生かした新規有機（超）導体およびプロトン伝導体の開発と機能性研究  
Development and studies of structural and physical properties for novel organic (super)conductors and proton conductors based upon molecular degree of freedom
2. 固体中で電子がプロトン運動と協奏した有機伝導体、誘電体の開発と機能性研究  
Development and studies of structural and physical properties for electron-proton coupled molecular functional materials
3. 磁性と伝導性が競合する金属錯体の開発と機能性研究  
Development and studies of structural and physical properties for novel metal complexes whose magnetism and conductivity are competitive
4. 分子性物質の外場（光、磁場、電場、温度、圧力）応答の研究  
Studies of responses by external stimuli (light, magnetic and electric fields, temperature, pressure) for molecular materials

## 長田研究室

Osada Group



長田 俊人  
OSADA, Toshihito  
准教授  
Associate Professor



田縁 俊光  
TAEN, Toshihiro  
助教  
Research Associate

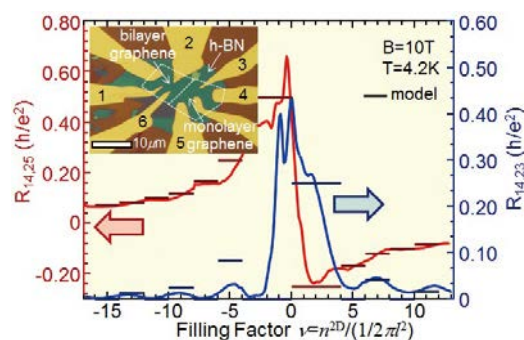
低次元電子系の量子伝導。トポロジカルな性質を持つ電子系や、強磁場やナノ構造により空間的に閉じ込めた電子系が示す新しい電子状態や伝導現象の探索・解明・制御に関する研究を行う。バンド構造のベリー曲率、トポロジカル電子相、擬スピン自由度、電子軌道・磁束配置・系の空間構造の整合性などに関連した量子効果・幾何効果・多体効果に興味がある。研究対象はグラフェンなどの原子層物質、有機導体などの低次元物質、半導体・超伝導体の人工ナノ構造である。複合原子層（ファンデルワールスヘテロ構造）形成、全磁場方位依存性の精密計測、小型パルス磁石による強磁場計測など、微小試料の形成と低温高圧強磁場下の微小試料の電氣的・磁氣的・熱的測定を主な実験手段とする。最近はグラフェン、フォスフォレンなどの原子層物質や、トポロジカル相表面に形成されたヘリカル／カイラル表面電子系の量子伝導に関する研究を集中的に行っている。



原子層転写積層装置。不活性ガス雰囲気中で、バルク結晶から劈開単離した単原子層結晶を、位置調整して積層圧着し、複合原子層（ファンデルワールスヘテロ構造）を作成する。空気中で不安定な原子層物質や複合原子層系の試料作製に威力を発揮する。

Alignment and transfer device installed in a glovebox. This device can precisely align and fix an atomic layer on another atomic layer one by one, to build up atomic layer complexes (van der Waals heterostructures) in inert gas atmosphere. It is useful particularly for atomic layer materials unstable in the air.

Transport study of low-dimensional electron system. To search for new phenomena in topological electron systems and electron systems confined by small spatial structures or strong magnetic fields, to clarify their mechanisms, and to control them for application. We have a great interest in quantum effects, topological effects, and many-body effects, which relate to Berry curvature of band structure, pseudo-spin degrees of freedom, and commensurability among electron orbital motions, vortex (magnetic flux) configuration, and spatial structures. Our targets are atomic layer materials such as graphene, low-dimensional materials such as organic conductors, and artificial semiconductor/superconductor nano-structures. We flexibly explore new transport phenomena and electronic states in small samples by electric, magnetic, and thermal measurements using fabrication techniques for building up atomic layer complexes (van der Waals heterostructures), nano-processing techniques like EB, precise field rotation, miniature pulse magnet, etc. under strong magnetic fields, high pressures, and low temperatures. Recently, we have concentrated our studies on quantum transport in atomic layer materials (graphene, phosphorene, etc.) and helical/chiral electron systems formed at the surface of topological phases.



平坦で不活性な表面を持つ h-BN 少数原子層結晶上に転写積層して高移動度化した単層/2層グラフェン接合素子とその量子ホール伝導。接合をまたぐ縦抵抗とホール抵抗の振舞は、接合に沿ってトポロジカルに保護されたエッジチャネルのみが残ることを表す。占有率 (filling factor) ゼロ近傍の微細構造は基底ランダウ準位の対称性の破れを示唆する。

Quantum Hall transport in monolayer/bilayer graphene junction. The sample was fabricated on the h-BN few atomic layer substrate, of which surface is flat and inactive, to develop the sample mobility. The behaviors of the longitudinal and Hall resistance across the junction indicate that only the topologically protected edge channels remain along junction. The fine structures around zero filling suggests the symmetry breaking of the ground Landau level.

## 研究テーマ Research Subjects

1. 原子層物質（グラフェン、フォスフォレン等）の電子状態と量子伝導  
Electronic structure and quantum transport in atomic layers (graphene, phosphorene, etc.)
2. 有機ディラック電子系の量子ホール強磁性相におけるヘリカル表面状態  
Helical surface state in quantum Hall ferromagnetic phase in an organic Dirac fermion system
3. 多層量子ホール系におけるカイラル表面状態の量子伝導  
Quantum transport of chiral surface state in multilayer quantum Hall systems
4. 層状物質の角度依存磁気伝導と層間コヒーレンス  
Interlayer coherence and angle-dependent magnetotransport in layered conductors
5. 電場磁場中ブロッホ電子系におけるカオスと電気伝導  
Chaos and electron transport in Bloch electron systems under magnetic and electronic fields

## 山下研究室

Yamashita Group



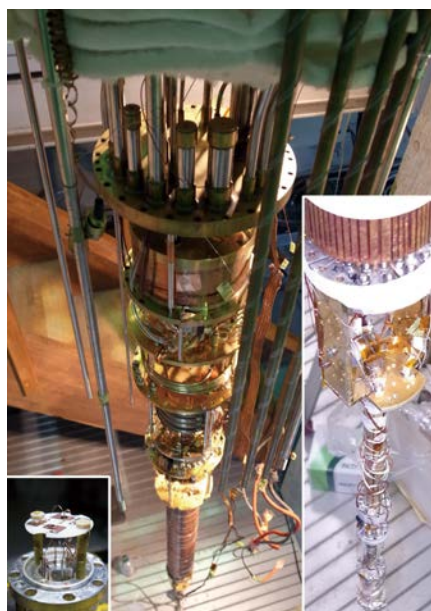
山下 穰  
YAMASHITA, Minoru  
准教授  
Associate Professor



下澤 雅明  
SHIMOZAWA, Masaaki  
助教  
Research Associate

温度の下限である絶対零度では全ての物質は凍りついてしまっ、何も面白い現象は無いように思われる。ところが、1ケルビンという低温領域で金属の電気抵抗が突然0になるという超伝導現象が発見されて以来、液体ヘリウムの超流動転移、希薄アルカリ気体のボース凝縮など様々な量子凝縮相が極低温で発見された。室温では熱揺らぎに隠れてしまっ見え、多彩で不思議な物理現象が低温領域に隠れてたわけである。

当研究室ではこのような量子凝縮現象に興味を持ち、技術的に可能な限り低温まで精密測定する事でその物性を明らかにする研究を行っている。特に、電子系研究が全く行われてこなかった 20 mK 以下の超低温領域における量子臨界現象、超伝導現象の解明に力を入れている。さらに、二次元三角格子やカゴメ格子といった幾何学的フラストレーションをもつ磁性体において近年新しく発見された量子スピン液体状態の熱ホール測定などによってその素励起の解明に力を入れて研究を進めている。

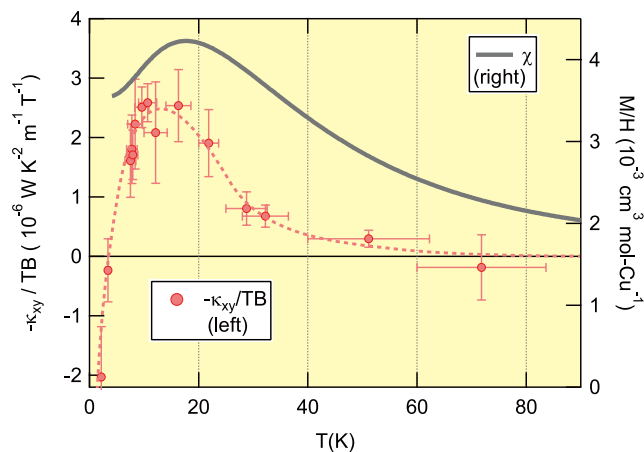


物性研の核断熱消磁冷凍機。超低温 (1 mK)・高磁場 (10 T) の実験が可能。右下挿図が実験空間拡大写真。左下挿図が超低温トルク測定用カンチレバー。

The ultra-low temperature cryostat at ISSP. By nuclear demagnetization cooling, the experiments can be performed down to 1 mK under a magnetic field up to 10 T. The lower right picture is an enlarged-view of the experimental space. The lower left picture shows a cantilever cell for torque measurements.

What happens when materials are cooled down close to absolute zero temperature? It sounds a boring question because everything freezes at  $T = 0$ . It is NOT true, however, because quantum fluctuations persist even at absolute zero temperature. The richness of low-temperature physics was first demonstrated by Heike Kamerlingh Onnes at 1911, who was the first to liquify Helium and reach  $\sim 1$  K. He discovered that the resistance of mercury suddenly vanished at low temperature. Followed by this discovery of the superconducting transition, many amazing quantum phenomena – superfluid transition of Helium, Bose-Einstein condensations of Alkali Bose gases – were found at low temperatures.

We are interested in these quantum condensed states at low temperatures where the thermal fluctuation is negligible. Especially, we are now challenging measurements of correlated electron systems at ultra-low temperature (below 20 mK) where many interesting phenomena have remained unexplored due to technical difficulties. Further, we are studying thermal-transport properties of quantum spin liquids emerged in frustrated magnetic materials.



フラストレート磁性体ボルボサイトで観測された熱ホール伝導率 ( $\kappa_{xy}$ ) と磁化率 ( $M/H$ ) の温度依存性。低温でスピン間相関が強くなるにたがって熱ホール伝導率が上昇していることがわかる。

Temperature dependence of the thermal-Hall conductivity and the magnetic susceptibility of the frustrated antiferromagnet volborthite, showing intimate relation between the thermal-Hall conductivity and the spin correlation.

## 研究テーマ Research Subjects

1. 超低温における強相関電子系の研究  
Study of strongly correlated-electron systems at ultra-low temperatures
2. 超低温における精密測定技術の開発  
Developments of ultra-low temperature cryostats and the precision measurement systems
3. 幾何学的フラストレーションをもつ磁性体における量子スピン液体  
Quantum spin liquid state in geometrically-frustrated magnets



# 立川研究室

Tachikawa Group



立川 仁典  
TACHIKAWA, Masanori  
客員教授  
Visiting Professor

従来の第一原理計算だけでは取扱えない量子水素（水素原子核の量子揺らぎ）に着眼し、(a) 多成分系分子軌道 (MO) 法、(b) 多成分系量子モンテカルロ (QMC) 法、(c) 多成分系密度汎関数 (DFT) 法、(d) 多成分系経路積分 (PI) 法など様々な量子多成分系理論を開発・実装し、世界最高精度の精密計算 (kcal/mol オーダの化学的精度) から、新しい核電子汎関数の開発、量子水素系の計算、そして生体分子の大規模計算に至る、幅広い対象の第一原理計算を実現している。

このように、立川研究室で開拓してきた量子多成分系理論を駆使することにより、森研究室で開発されている「 $\pi$ 電子と水素の相関する有機伝導体」の重水素効果を理論的に解明することを目的とする。特に量子水素と $\pi$ - $\pi$ スタッキングに着目することで、水素と重水素の量子性の違いが、結晶構造や電子状態に及ぼす影響を理解する。またそのための高精度マルチスケール手法（ハイブリッド手法・超並列化）も同時に開発・実装することで、本研究課題にあたる。

In Tachikawa group, the development of accurate and efficient computational methodologies to elucidate a wide variety of molecular phenomena has been performed. For instance, Tachikawa group has been developing new ab initio schemes to multi-component (including electron, proton, and muon) systems for nuclear quantum effects in molecular properties. The novel methodologies are (a) Ab initio multi component molecular orbital (MC\_MO) method, (b) Ab initio multi component quantum Monte Carlo (MC\_QMC) method, (c) Multi component density functional theory (MC\_DFT) method, and (d) Ab initio multi-component path integral (MC-PI) method.

By using these multi-component theories, the mechanism of isotope effect for proton-electron coupled molecular conductors developed in Mori lab. is aimed to be theoretically disclosed. By focusing on quantum hydrogen and  $\pi$ - $\pi$  stacking, the deuterium isotope effects on crystal and electronic structures are elucidated. The highly accurate multiscale calculation methods will be simultaneously developed.

# 高野研究室

Takano Group



高野 安正  
TAKANO, Yasumasa  
外国人客員教授  
Visiting Professor

我々は、スピン間の相互作用がフラストレートした磁性体を主体に研究を行っている。このようなフラストレーションは、スピンの組む格子の幾何学的配列によってもたらされることが多く、そのような例として三角格子やカゴメ格子、パイロクロア格子などがある。これらの物質では特異な磁気秩序が低温で現れる可能性がある。また少数ではあるが注目すべきケースとして、実験で到達する最低温までスピンの無秩序状態に留まる場合もある。そのような無秩序状態の本質の解明は物理学における重要課題の一つであり、しばしば激しい論争的となっている。我々は主に低温強磁場下の比熱測定を通してこれらの物質の研究を行い、それらの基底状態や低エネルギー励起に関する推論を行っている。また我々の多くの研究では、精密磁化測定の世界のエキスパートである榎原教授のグループとの密接な研究協力が役立っている。

Our research is focused on magnetic materials in which interactions between spins are frustrated. Such frustration is often a consequence of the geometry of the lattice on which magnetic ions are located, prime examples being the triangular lattice, kagome lattice, and pyrochlore lattice. In these materials, unusual magnetically ordered states may appear at low temperatures. In a few celebrated cases, spins can even remain disordered down to the lowest temperature of experiment. The true nature of such disordered states is one of the important questions in physics and is often a matter of strong debate. We primarily use calorimetric techniques at low temperatures and in high magnetic fields to investigate these materials and draw inference on their magnetic ground states and low-energy excitations. Many of our investigations benefit from close collaboration with the ISSP group headed by Professor Sakakibara, the world expert on high-precision magnetization measurements.