

(様式 2)

議事録番号

提出 2014 年 9 月 20 日

## 会合議事録

研究会名：理論研究会

日 時：2014 年 9 月 12 日 13:00～17:30

場 所：東京大学理学部 1 号館 206 号室

出席者：坂井徹(原子力機構)，遠山貴己(東京理科大)、筒井健二(原子力機構)、五十嵐潤一(茨城大)、野村拓司(原子力機構)、岡田耕三(岡山大)、石原純夫(東北大)、佐藤正寛(青山学院大)、岸根順一郎(放送大)、森道康(原子力機構)、高橋学(群馬大)、長尾辰哉(群馬大)、那須讓治(東工大)

及び一般聴衆(数名)

計 約 20 名

議題：SPring-8 の実験と理論が連携する研究領域形成について

議事内容：

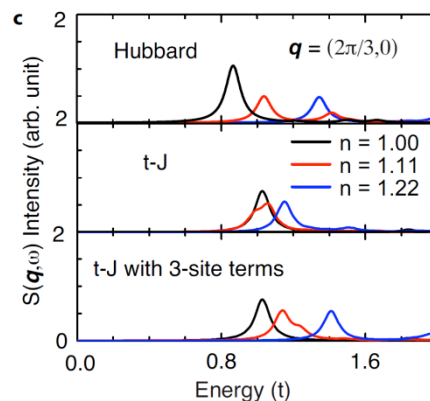
初めに理論研究会代表の坂井により、これまでの理論研究会の活動として、SPRUC 体制に入ってから 1 時期メンバーが激減したこと、その後、ウェブやメールを活用した宣伝活動により、多くのメンバーにユーザ登録してもらって、今回の会合開催に至った活動報告があった。今後の活動目標として、さらにメンバー数を増やすこと、SPring-8 実験の解析をサポートする形で連携したり、「京」コンピューターを利用した大規模計算を導入することにより、大規模施設間連携による新領域の立ち上げを目指していくことが提案された。

これを受けて、8 人の理論研究会メンバーから、これまで SPring-8 の実験と連携してあげてきた成果について、及び今後連携できそうな理論について紹介していただき、今後の展望について議論した。この 8 人の発現については、理論研究会メンバーの増強につなげる宣伝も兼ねて、以下に講演概要資料としてまとめる。

[1] 遠山貴己(東京理科大理学部)

「遷移金属化合物の L 端 RIXS」

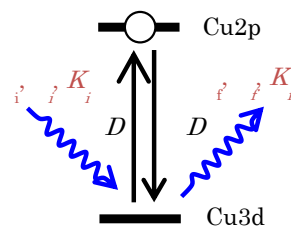
3d 遷移金属化合物の遷移金属 L 吸収端での共鳴非弾性 X 線散乱 (RIXS) では、最近、スピン励起が観測され始めた。キャリアドーピングされたモット絶縁体の高エネルギースピン励起を理解するため、 $t-t'-J$  模型に対して高速衝突近似のもとで計算された RIXS スペクトルと銅酸化物高温超伝導体の実験結果との比較を行った。その結果、キャリア濃度依存性が小さいホールドーピング系の実験結果は、 $t-t'-J$  模型よりも  $t-t'-U$  ハバード模型とよく一致することを見いだした。これは、 $t-t'-J$  模型に 3 サイトが関与するホッピング項 (3 サイト項) を加える必要性を示している。図は、 $t-t'-U$  ハバード模型の動的スピン構造因子と、 $t-t'-J$  模型と  $t-t'-J+3$  サイト項模型の動的スピン構造因子の比較である。さらに、3d 遷移金属化合物の金属状態の RIXS の特徴を明らかにするため、鉄系ニクタイト系超伝導体およびクロムの反強磁性金属状態に注目し、5 バンド・ハバード模型の乱雑位相近似に基づいて、3d 軌道の動的スピン・電荷感受率を計算して L 吸収端 RIXS スペクトルを求めた。スピン波励起の強度は、多軌道性による高エネルギー側の粒子・ホール励起よりかなり小さいことがわかった。



## [2] 筒井健二 (原子力機構)

「銅酸化物高温超伝導物質に対する L 端共鳴非弾性 X 線散乱のクラスター計算」

銅酸化物高温超伝導物質に対する銅 L 吸収端共鳴非弾性 X 線散乱により、母物質のマグノン励起の観測や、ホールドーピング系物質での同様な励起スペクトルの観測が報告され、世界的に注目されている。さらに、電子ドーピング系においてドーピングされたキャリアに起因した電荷励起の観測も報告されている。この散乱プロセスは銅の内殻 2p 軌道と 3d 軌道との間の遷移を伴って X 線の吸収と放出が生じるものであ



銅 L 端共鳴非弾性 X 線散乱プロセス (ホール描像)

る。本研究ではこの散乱スペクトルに対する大規模数値計算を行い、キャリアの違いによるスペクトルの振る舞いの違い等を理論的に議論した。本研究は遠山貴己 (東京理大理) 及び森道康 (原子力機構先端研) (敬称略) との共同研

究である.

[3]五十嵐潤一 (茨城大理学部)

「L吸収端共鳴非弾性X線散乱の理論」

1. 局在電子描像に基づく定式化について。

ドーピングしていない銅酸化物高温超伝導体の母物質においてL吸収端共鳴非弾性X線散乱(RIXS)における、磁気励起スペクトルの理論的解析を行った。Fast-collision 近似をこえることで、one-magnon 励起に加えて two-magnon 励起が現れることを導いた。また、反強磁性状態を反映した特異な項の存在を導き、散乱強度の運動量依存性が特徴的な振る舞いをすることを導いた。(図1)

2. 遍歴電子描像に基づく定式化について。

ハバード模型を用いて、遍歴電子系の RIXS スペクトルの定式化を行った。また、それに基づき、スピン軌道相互作用の大きな Sr2IrO4 における RIXS スペクトルの解析を行い、magnon 励起に加えて exciton 励起を統一的に説明した。(図2)

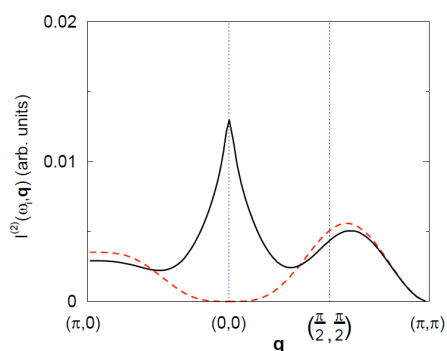


図1 : two-magnon 励起の強度

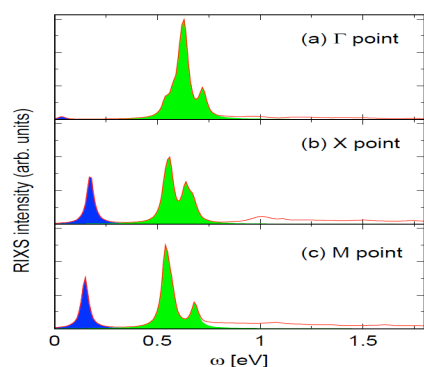
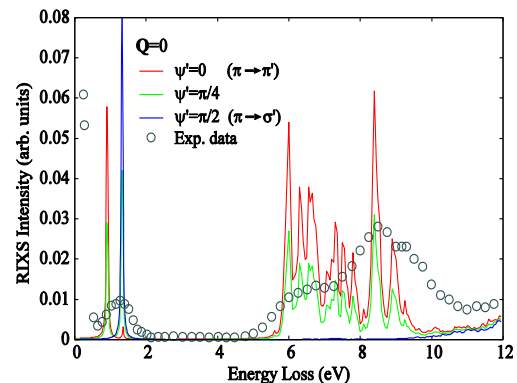
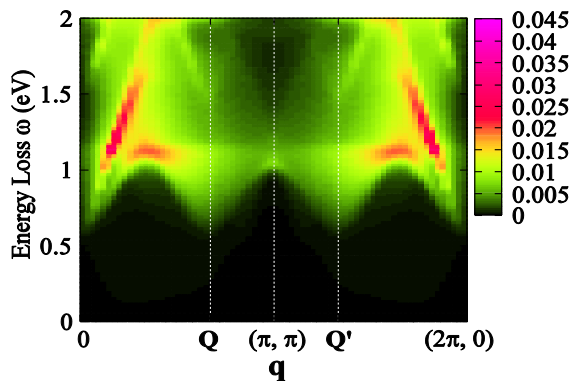


図2 Sr2IrO4 における RIXS スペクトル

[4]野村拓司（原子力機構）

「電荷－軌道秩序系における共鳴非弾性 X 線散乱」

要旨：遷移金属 K 吸収端における共鳴非弾性 X 線散乱 (RIXS) の理論について講演した。具体的には、典型的な電荷（ストライプ）秩序物質であるニッケル酸化物  $\text{La}_{5/3}\text{Sr}_{1/3}\text{NiO}_4$  と、典型的な軌道秩序物質である  $\text{KCuF}_3$  における RIXS の解析結果について発表した。前者では電荷密度の変調を特徴づける運動量（ストライプベクトル）で RIXS スペクトルの低エネルギー領域にスペクトルの特異な増大が観測されるが、これの理論解析結果について発表した（左下図は計算結果）。一方、後者の  $\text{KCuF}_3$  については、特徴的な偏光方向依存性が観測されるが、これの理論解析結果について発表した（下右図は計算結果）。



[5]岡田耕三（岡山大自然科学）

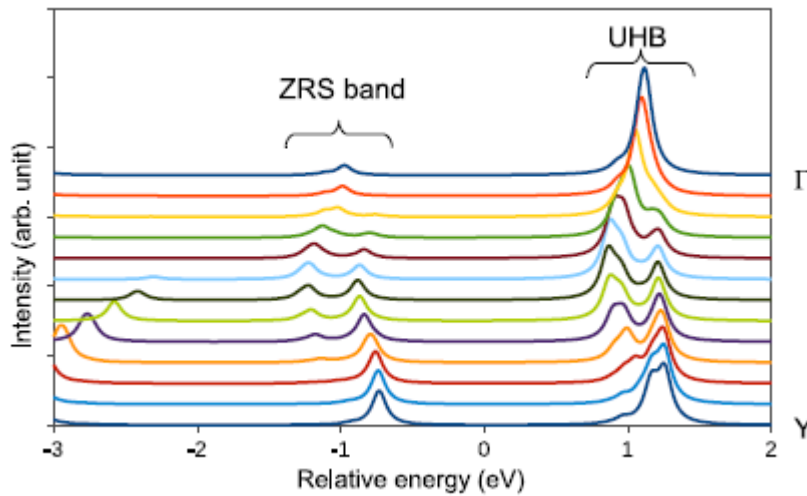
「 $\text{LiCu}_2\text{O}_2$  の ARPES」

共同研究者：岡山大・院・自然科学 上仲寛太

$\text{LiCu}_2\text{O}_2$  は 22K 以下において螺旋磁気構造を呈すると同時に強誘電性を示す multiferroic な系として知られている。この物質の角度分解光電子スペクトル (ARPES) は Papagno らによる実験[1]と Cheng らによる実験[2]の2つがあるが、これらの実験は Zhang-Rice 一重項バンド (ZRSB) の b 軸方向 (1 次元鎖方向) の分散関係に関して相反する結果を与えている。例えば Papagno らは  $\Gamma$  点と Y 点の midpoint で ZRSB が最大エネルギーを示すのに対して Cheng らの結果では Y 点で最大エネルギーを示している。本発表では、いずれの実験の主張が正しいのかを調べるため行った数値的厳密対角化法、およびクラスター摂動法によるバンド計算結果について報告した[3]。

図には、クラスター摂動法による 1 粒子スペクトルの計算例を示す。この計

算例では Y 点で ZRSB が最大エネルギーを示しており、Cheng らの実験と定性的に一致する結果となっている。



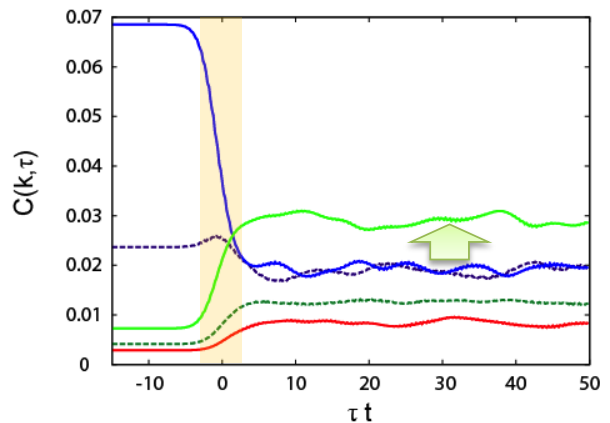
- [1] Papagno et al.: Phys. Rev. B **73**, 115120 (2006)
- [2] C. -M. Cheng et al.: J. Phys. Conf. Series **150**, 042015 (2009)
- [3] Uenaka and Okada: J. Phys. Soc. Jpn. **83**, 075003 (2014)

[6] 石原純夫 (東北大理学部)

「相関電子系における光誘起ダイナミクス」

共同研究者: 東北大理<sup>A</sup>、仙台高専<sup>B</sup>、理研<sup>C</sup>、JST-CREST<sup>D</sup>、橋本博志<sup>A</sup>、松枝宏明<sup>B</sup>、妹尾仁嗣<sup>C,D</sup>

近年、パルス光を用いた非平衡状態の研究が精力的に行われている。電荷秩序状態では電荷秩序の融解による金属転移に代表される多彩な現象が見出されており、この相の非平衡状態に実験理論共に多くの注目がなされている。我々は電荷秩序系の光照射効果について系統的かつ網羅的に調べることを目的として、電荷秩序状態を記述する最も単純なモデルとして相互作用をするスピンレスフェルミオンモデルを厳密対角化により解析し、光照射後の実時間発展について調べた。電荷フラストレーションのある系では平衡状態において二倍周期電荷秩序相の他に三倍周期電荷秩序相が実現する。我々は三倍周期電荷秩序相近傍において光照射後、二倍周期の電荷相関が減少すると共に三倍周期の電荷相関が増加することを見出した(上図参照)。これは非平衡状態



これは非平衡状態

での幾何学的フラストレーション効果の一例であると考えられる。

[7]佐藤正寛

「レーザーによる磁化・スピン流・磁気秩序の制御についての理論」

近年、量子多体系における振動外場(レーザーや超音波)が誘起する非平衡現象の研究が活発に行われている。特にレーザー科学の進展は目覚ましく、多様な凝縮系にレーザーを照射することで多様な非平衡状態が実現可能になりつつある。理論面でも非平衡量子系の研究は進展を続けており、例えば、周期外場中の非平衡量子系がフロケの定理を介して馴染みのある平衡量子系の問題に還元されることが広く認識されつつある。このような状況において、我々は強相関量子多体系でレーザーにより生み出される新しい現象の理論的探索を行っている。その結果、(1)量子磁性体において静磁場なしでレーザーにより磁化過程を実現する方法の提案(図 1)、(2)スピカイラリティと電気分極が結合するマルチフェロイクス系におけるレーザーによるジャロシンスキー・守谷(DM)相互作用の制御方法の提案、(3)キタエフ・ハニカム模型におけるレーザー誘起トポロジカルスピン液体の理論の構築(図 2)、という 3 つの成果を挙げている。講演では、これらの成果について、本質的に重要な部分を抽出し、できるだけ分かりやすく説明する予定である。

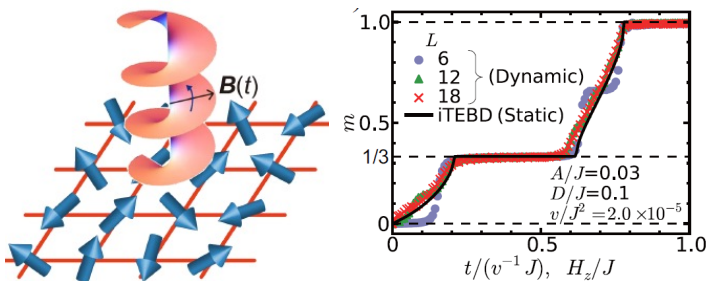


図 1: (左)レーザーを照射された量子磁性体。(右)ある量子スピン模型におけるレーザー誘起磁化曲線：磁化(縦) vs レーザー照射「時間」(横)。

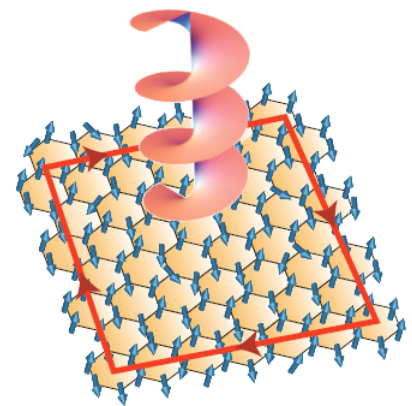


図 2: レーザー中のキタエフ模型。レーザーにより系の端に安定なギャップレス流が流れる。

[8]岸根順一郎 (放送大)

「キラル磁性体におけるソリトン格子の閉じ込めとダイナミクス」

キラル対称性(左右対称性)が破れた結晶構造を持つ磁性体では、電子スピ

ンがスピン軌道相互作用を通して結晶場の非対称分布を見る。その結果現れるのがキララらせん磁気秩序である。この秩序構造に磁場を印加すると、磁場によってらせんの捻じれが周期的にほどけたキララソリトン格子 (CSL) と呼ばれる構造が安定化する。これはスピン配向 (位相角) の空間分布が結晶構造に保護される形で凍結した位相の空間秩序パターンであり、欠陥に対して極めて安定である上に弱磁場によって周期をナノからバルクスケールまで連続制御できる。さらに CSL 特有の非線形・非対称構造に由来する特異なダイナミクスは、伝導電子との結合を通して多値的磁気抵抗効果、磁気情報転送、巨大スピン起電力など際立った物性機能をもたらす。本講演では、有限サイズの系にキララソリトンを閉じ込めた場合に期待される磁化のトポロジカル跳躍現象について報告する。

[1] J. Kishine, I. G. Bostrem, A. S. Ovchinnikov, and Vl. E. Sinitsyn, “Topological magnetization jumps in a confined chiral soliton lattice,” Phys. Rev. B 89, 014419/1-6 (2014)

[2] Y. Togawa, Y. Kousaka, S. Nishihara, K. Inoue, J. Akimitsu, A. S. Ovchinnikov, and J. Kishine, “Interlayer Magnetoresistance due to Chiral Soliton Lattice Formation in Hexagonal Chiral Magnet  $\text{CrNb}_3\text{S}_6$ ,” Phys. Rev. Lett. 111/1-4, 197204 (2013)

[3] J. Kishine, I. G. Bostrem, A. S. Ovchinnikov, and Vl. E. Sinitsyn, “Coherent sliding dynamics and spin motive force driven by crossed magnetic fields in chiral helimagnet,” Phys. Rev. B 86, 214426/1-12 (2012)

[4] Y. Togawa, T. Koyama, K. Takayanagi, S. Mori, Y. Kousaka, J. Akimitsu, S. Nishihara, K. Inoue, A. S. Ovchinnikov, and J. Kishine, “Chiral Magnetic Soliton Lattice on a Chiral Helimagnet,” Phys. Rev. Lett. 108, 107202/1-4 (2012), selected as APS spotlighting exceptional research

上記の成果報告やアイデアの紹介に基づいた議論を以下に記す。

・遠山：前半の共鳴非弾性X線散乱の数値計算、とくに数値対角化に基づく解析は、「京」コンピューターを利用することにより、規模を拡大することで、大規模施設間連携の研究につなげられる。

・坂井：「京」を利用することで、世界最大規模の数値対角化が実現できれば、研究成果の説得力も増すであろう。

・石原：今回紹介した新しい光誘起相転移の理論予測は、SPring-8だけでなく、自由電子レーザーSACLAで検証することにより、さらに明確に実証することができるので、SACLAとの連携に期待したい。

・佐藤：レーザー照射により、磁性体における超強磁場と等価な効果をもたらす可能性を理論的に示したので、SPring-8、SACLAと強磁場コミュニティとの連携の道が開ける可能性がある。

以上、単なるサイエンティフィックな議論は省略した。

最後に、今後もウェブやメーリングリストを活用して、理論研究会を増強するための宣伝活動を続けることを確認した。今回は、ここ数年活動を停止していた理論研究会の再スタートという目的は十分果たしたと思う。ただし、実験との連携という意味では、SPring-8シンポジウムのサテライトの形で開催したため、時間が重なったりして、実験の研究会メンバーに参加していただけなかったのが残念である。近い将来、理論研究会の会合をSPring-8で開催することによって、その場で実験している多くの研究者に参加していただき、理論・実験の連携から新しい研究領域形成を目指したい。