

出来る限り、以下の様式に沿った議事録を作成下さいますようお願いいたします。

(様式2)

議事録番号

提出 平成28年 9月2日

会合議事録

研究会名：理論研究会

日時：平成28年8月29日(月) 10:00～12:00

場所：関西学院大学三田キャンパス

出席者：坂井徹(兵庫県立大)、筒井健二(量研機構)、野村拓司(量研機構)、
遠山貴己(東京理科大)、長尾辰哉(群馬大)、高橋学(群馬大)

計6名

議題：放射光と計算物質科学の連携を目指して

議事内容：

坂井：放射光技術の進歩に伴って、放射光実験を解析するための理論計算も複雑化しており、実験グループと理論グループの連携はもとより、京コンピューターなどを中心とする大規模計算物質科学との連携が望まれる状況となっている。とくに、最近になってポスト京コンピューターを利用するための重点課題は萌芽課題のプロジェクトが始まっており、放射光実験の解析と連携して新しい研究領域を開拓するいい機会となっている。そのような放射光実験及び計算物質科学の連携につながるような理論解析の紹介をしていただくとともに、今後の連携への展望について、各講演者から提案していただきたい。

この後、以下のプログラムに沿って、各講演者から放射光実験を解析する最新の理論計算について紹介していただき、今後の連携及び新しい研究領域の開拓について討論した。講演要旨は資料として最後につける。

プログラム

10:00-10:10 坂井徹(兵庫県立大)

放射光と計算物質科学の連携

- 10:10-10:30 筒井健二 (量研機構)
クラスター計算に基づく銅酸化物高温超伝導体の銅L端
共鳴非弾性X線散乱スペクトル
- 10:30-10:50 野村拓司 (量研機構)
共鳴非弾性X線散乱で見る鉄系高温超伝導体の軌道励起
- 10:50-11:10 遠山貴巳 (東理大理)
鉄系高温超伝導体の反強磁性相における非弾性X線散乱
- 11:10-11:30 長尾辰哉 (群馬大)
イリジウム系における共鳴非弾性X線散乱の理論
- 11:30-11:50 高橋学 (群馬大)
硬X線内殻励起ラマン散乱の磁気円二色性

討論の議事録を以下に示す。

遠山：京コンピューターを利用した我々の鉄系高温超伝導の共鳴あるいは非共鳴非弾性X線散乱の解析は、解析的な野村氏の計算と相補的であり、うまく実験グループと連携すれば、国際的にも競争力の高い研究領域形成につながる可能性がある。

野村：異なる理論模型に立脚した複雑な計算なので、お互いにスペクトルの詳細な比較をすることにより、超伝導発現機構解明に向けて、より深い理解が可能となる。

筒井：銅酸化物高温超伝導体を中心として、L端の共鳴非弾性X線散乱によるスピンの励起の観測は、現在の世界的なトレンドであるので、計算物質科学の技術を利用して、最大規模の数値解析をすれば、非常に重要な成果が期待できる。

長尾：最近注目されているイリジウム系の理論解析の結果、スピンギャップの存在を理論予測したが、まだ観測には至っていない。そこで、より大規模な精度の高い数値解析をするとともに、分解能の高い実験技術を有するグループとの連携が望まれる。

高橋：これまであまり理論模型による計算がなかったXMCDに対し、ファースト

ステップとしての簡単な近似計算を導入した。今後、強相関効果を取り入れた複雑な計算を、大規模計算物質科学の手法により実現し、具体的な実験と詳細な比較解析ができるようにしたい。

遠山：今回の理論研究会は、SPring-8 シンポジウムのサテライトミーティングとして開催したが、このやり方だと、他の研究会と時間が重複するため、実験グループとのコミュニケーションが取れない。例えば、東大物性研の短期研究会などのアクティビティを利用して、多くの放射光実験のグループにも参加していただき、今後の連携を図る必要がある。

坂井：次回は、SPring-8 シンポジウムのサテライトではなく、理論研究会のメンバーをSPring-8 に招聘して、多くの実験研究者に参加していただく形で研究会を開催したいので、協力をお願いする。

*A4 縦

*会合で使用した 資料（差し支えないもの）を添付してください。

講演要旨（アブストラクト）

「クラスター計算に基づく銅酸化物高温超伝導体の銅L端共鳴非弾性X線散乱スペクトル」

筒井健二（量研機構）

本研究ではハバード模型のクラスター計算に基づいて、銅酸化物高温超伝導物質の銅L端共鳴非弾性 X 線散乱（RIXS）における入射エネルギー依存性を議論する[3]。散乱過程において、内殻 2p ホールのスピン・軌道相互作用は十分強いと仮定し、そのコアホールによるクーロンポテンシャルを取り入れた中間状態を数値的に取り扱った。このコアホールポテンシャルの強度をホール・ドープの場合の X 線吸収スペクトルと形状が合うように決めると、RIXS のスピン非反転励起の成分が蛍光的な振る舞いとなることが分かった。本研究は遠山貴己教授（東京理科大学）との共同研究である。

「共鳴非弾性 X 線散乱で見る鉄系高温超伝導体の軌道励起」

野村拓司（量研機構）

最近、共鳴非弾性 X 線散乱 (RIXS) を用いた遷移金属化合物における軌道励起の研究が盛んに行われている。本講演では、鉄系高温超伝導関連物質である $K_0.83Fe_{1.53}Se_2$ と $PrFeAsO_{1-y}$ に対して最近なされた実験（それぞれ鉄 K 吸収端、鉄 L 吸収端 X 線の RIXS 実験）とその理論解析結果について報告する。具体的には、第一原理バンド計算から導かれた精密な電子構造を有するハバード型モデルに基づいて、観測されたスペクトルピークが微視的にどのような鉄 d 軌道の励起過程に対応するのか明らかにする。 $PrFeAsO_{1-y}$ における L 吸収端 RIXS では低エネルギーのスピンの反転励起は今回実験観測できなかったが、将来の高解像度実験へ向けて示唆を与えるべく、どのような励起エネルギーを有すべきか理論計算に基づいて示す。

「鉄系高温超伝導体の反強磁性相における非弾性 X 線散乱」

遠山貴巳（東理大理）

非弾性 X 線散乱 (NIXS) は電子系の電荷励起を探る有力な手法である。さらに硬 X 線を用いることで大きな運動量領域での多極子励起を見ることができるので、多軌道 3d 遍歴電子系の軌道励起を探る手法としても有望である。その一例として、鉄系高温超伝導体の反強磁性金属相を取り上げる [1]。適当な運動量変化を設定できれば、軌道を選択した電荷励起が観測可能であることを、5 軌道ハバードモデルの平均場近似と乱雑位相近似を用いた計算によって示す。共鳴時弾性 X 線散乱 (RIXS) の計算結果との対比から、NIXS と RIXS は多軌道 3d 遍歴電子系の軌道励起を理解するため相補的な役割を果たすことがわかる。

[1] K. Tsutsui, E. Kaneshita, and T. Tohyama, Phys. Rev. B 92, 195103 (2015).

「イリジウム系における共鳴非弾性 X 線散乱の理論」

長尾辰哉（群馬大学）

中性子の強い吸収体である Ir を含む酸化物においては、共鳴 X 線非弾性散乱 (RIXS) が磁気励起を調べる際に強力な手段となる。本研究では、素過程として

は最近接格子間の相互作用だけを元に、弱結合の理論の立場から遍歴電子描像により多軌道模型を解析し、系の密度密度相関関数を見積もり、RIXS スペクトルの解析を行った。計算結果と典型的な Ir 酸化物の実験結果との比較から、この手法は、マグノン、エキシトンなど低エネルギー励起を統一的に記述するのに有効であることがわかった。また、磁気分散の複数バンドへの分裂など、新しい知見も得られた。本研究は五十嵐潤一氏(茨城大学)との共同研究である。

硬 X 線内殻励起ラマン散乱の磁気円二色性

高橋学 (群馬大理工)

鉄の L 吸収端に対応する硬 X 線 ($h\nu=10\text{keV}$) ラマン散乱スペクトルにおいて観測されている磁気円二色性の発現機構および二色性スペクトルと電子状態の関連について議論する。弾性磁気散乱の理論を非弾性散乱に拡張した理論を構築し、双極近似の範囲で、実験スペクトルを整合的に再現・説明できることを示す。磁気弾性散乱の主要散乱である軌道磁気(OM1) 散乱およびスピン磁気(SM1) 散乱に加えて、非弾性散乱では、電気双極子(E1) 散乱も重要な役割を果たす。これらの散乱振幅と、電荷(C1) 散乱振幅との干渉により二色性が発現する。また、X 線の入射方向と磁化方向の間の角 α を調節することで OM1、SM1、E1 散乱の寄与を変えることができる。特に、 $\alpha=135$ 度では、SM1 散乱が主要になり二色性スペクトルを単純に積分して得られる値が 3d スピンモーメントに比例する。未だ技術的な困難はあるものの、硬 X 線を用いること、photon-in-photon-out の測定であることなどから、この実験手法は、将来、軟 X 線では実験が困難な極限条件での測定に強みを発揮すると期待される。