

I 表面におけるスピン-軌道相互作用

Spin-Orbit Interaction at Surfaces

島信幸・馬越健次・三井隆志
Shima, N. Makoshi, K. Mii, T.

固体表面においては、空間反転対称性が破れているため、スピン-軌道相互作用により、エネルギーバンドのスピン縮重が解ける場合（Rashba効果・Rashba分裂と呼ばれる）がある。Bi表面は大きなRashba分裂を示すが、特にAg(111)表面に吸着した場合には更に大きな分裂（巨大Rashba分裂）を示す事が観測されている。巨大Rashba分裂の起源については実験・理論面から研究されているが、完全に解明されているとはいえない状態である。我々はタイトバインディングモデル及び第一原理計算に基づいてRashba分裂をいくつかのプロセスに分けて分類し、Ag(111)、Ag(111)/Bi、Bi(111)、Gray As(111)の各モデル系に適用することで、巨大Rashba分裂の起源を解明し、新しい物質の探索の指針を得る事を目指している。

II ナノ系を通過する非平衡電流, スピン流

Nonequilibrium Electric Current and Spin Current through Nano-Systems

島信幸・馬越健次・三井隆志
Shima, N. Makoshi, K. Mii, T.

近年、走査トンネル顕微鏡法 (STM)・分光法 (STS) 等のトンネル現象を用いて原子レベルでの表面の構造や電子状態を探ることが可能になった。これらの実験を理解する上で、STMにおけるトンネル現象に関連した基礎理論の構築は避けて通れない。我々は有限のバイアス電圧がかかった非平衡定常電流の基礎理論の構築に取り組んでいる。又、これらの理論を、電流における電子間クーロン相互作用の効果や、表面・吸着分子の振動状態を励起して起こる非弾性トンネル過程の問題にも応用している。表面に形成された金属細線でのスピン・軌道相互作用を考慮するとRashba効果により表面に電場を印加するのみでスピン流が生じる場合がある事が理論的に示され、スピントロニクスへの応用が期待される。我々はより具体的な系でこのスピン流を理論的に検証することを目指している。

III 超伝導における界面と磁場の効果

Effect of Interface and Magnetic Field on Triplet Superconductivity

兼安 洋乃
Kaneyasu, H.

母物質 Sr_2RuO_4 に μm サイズのRu結晶が析出した共晶体 Sr_2RuO_4 -Ru系では、スピン三重項p波超伝導である Sr_2RuO_4 のバルク超伝導転移温度より高い温度でRu結晶片の周りに界面超伝導を生じる。この界面超伝導の超伝導秩序変数の軌道部分は高温側ではRu結晶片界面に沿った成分が支配的であるが、この状態に RuO_2 面に垂直な磁場をかけるとRu結晶界面に垂直な成分が誘起される。この様子をGinzburg-Landau理論に基づいて磁場依存エネルギー項と界面の効果の関係から説明した。秩序変数の温度-磁場相図と電流特性を数値的に求めて、この相図と既に実験で示されている臨界磁場 H_{c2} 及びトンネル効果の微分コンダクタンスにおいてゼロバイアスピークが生じる磁場 H^* の温度-磁場相図との対応を考察し、定性的な説明を行った。

IV スピナノチューブの異常量子現象 Anomalous Quantum Phenomena in Spin Nanotubes

坂井 徹
Sakai, T.

量子スピン反強磁性鎖が鎖間方向に複数結合した系をスピナラダー系と呼ぶのに対し、このスピナラダー系の両端の鎖を結合して筒状にした系をスピナノチューブと呼ぶ。スピンの自由度、すなわち磁性を持つナノチューブとして、次世代の多機能材料開発を目指し、理論的・計算科学的手法を用いて、この物質が示す新しい量子現象を探索している。とくにユニットセルが正三角形のスピナノチューブでは、右巻き・左巻きというカイラリティの自由度も現れ、新しい超伝導機構にもつながるスピギャップ・カイラリティギャップなどの量子現象が予測されている。これらの新現象をSPRING-8の放射光や中性子散乱で観測する方法も検討している。

V フラストレーション系の新現象 Magnetism of Frustrated Systems

坂井 徹
Sakai, T.

隣接する量子スピンを反平行にそろえようとする反強磁性交換相互作用が三角格子・カゴメ格子・ジグザグ鎖格子などにはたらくとき、スピンの安定構造が一意的には決まらないフラストレーションが生じる。このようなフラストレーション系では、いくら低温にしても磁気秩序を伴う相転移が起らず、絶対零度ですら量子ゆらぎのために秩序が融解したスピン液体が実現する。また、外部磁場をかけることにより、スピンの対角成分と非対角成分が同時に凝縮するスーパーソリッド相や、隠れた秩序とも呼ばれるスピン・ネマティック相などのエキゾチックな現象が起きることもわかってきた。これらのフラストレーション系の新現象を、大規模数値シミュレーションにより理論予測し、量子ビームによる観測法を検討している。

VI 銅酸化物高温超伝導体の理論的研究

Theoretical Study on the High-Tc Cuprates

坂井 徹
Sakai, T.

銅酸化物高温超伝導体の超伝導発現機構においては、強相関電子系特有のスピンゆらぎが有力とされているが、最近の **SPRING-8** の放射光を用いた実験により、フォノンも重要な役割を果たしている可能性が示唆されている。そこでフォノン効果もとり入れた強相関電子系の理論模型に対する数値的厳密対角化により、銅酸化物高温超伝導体におけるフォノン効果の役割について理論的に研究している。

発表論文 List of Publications

- I-1 藤原聖基・島信幸・馬越健次・坂井徹：強束縛モデルによるRashba効果の解析、日本物理学会2016年秋季大会（金沢、2016年9月）
- I-2 藤原聖基・島信幸・馬越健次・坂井徹：Gray As (111)におけるラッシュバ効果の解析、日本物理学会第72回年次大会（大阪、2017年3月）
- IV-1 T. Hikihara(群馬大), T. Tonegawa (神戸大), K. Okamoto (芝浦工大) and T. Sakai, Exact ground states of frustrated quantum spin systems consisting of spin-dimer units, *J. Phys. Soc. Jpn.* 86 (2017) 054709-1-8.
- IV-2 T. Tonegawa, K. Okamoto, T. Hikihara and T. Sakai, Frustrated S=1/2 Two-Leg Ladder with Different Leg Interactions, *J. Phys.: Conf. Ser.* 828 (2017) 012003-1-8.
- IV-3 K. Okamoto, T. Tonegawa and T. Sakai, Ground State Phase Diagram of the Bond-Alternating S=2 Quantum Spin Chain with the XXZ and On-Site Anisotropies -Symmetry Protected Topological Phase versus Trivial Phase-, *J. Phys. Soc. Jpn. (Letters)* 85 (2016) 063704-1-4
- IV-4 T. Tonegawa, K. Okamoto, T. Hikihara and T. Sakai, Ground-state phase diagram of an anisotropic S=1/2 ladder with alternating rung interactions, *J. Phys.: Conf. Ser.* 683 (2016) 012039-1-7.
- IV-5 K. Okamoto, T. Tonegawa and T. Sakai, Effect of monomer-monomer interactions on the phase diagrams of the S=1/2 distorted diamond type quantum spin chain, *J. Phys.: Conf. Ser.* 683 (2016) 012038-1-6.
- IV-6 坂井徹：スピンナノチューブの新しいカイラリティ誘起超伝導の理論的・計算科学的研究、ひょうご科学技術協会学術研究助成金贈呈式・研究発表会、(神戸ラッセホール、2016年5月)
- IV-7 坂井徹：低次元量子スピン系のスピンネマティック、新学術領域「JPhysics 多極子伝導系の物理」平成28年度領域全体会議（北海道大学、2016年5月）
- IV-8 坂井徹：スピンネマティック相の話題、新学術領域「JPhysics 多極子伝導系の物理」理論討論会（明治大学リバティタワー（東京・神田駿河台）、2016年6月）
- IV-9 T. Sakai : Quantum Critical Properties of the Twisted Quantum Spin Nanotube, International Conference on Science and Technology of Synthetic

- Metals 2016 (ICSM2016) (広州白雲国際会議センター (中国・広州)、2016年6月)
- IV-10 T. Sakai : 招待講演、Quantum Spin Nanotubes、Energy, Materials, Nanotechnology Meeting on Ultrafast (Australia・Melbourne、2016年10月)
- IV-11 坂井徹 : スピンナノチューブにおける新奇なカイラリティ誘起超伝導の数値シミュレーション研究、光・量子ビーム科学合同シンポジウム 2016 (大阪千里ライフサイエンスセンター、2016年11月)
- IV-12 坂井徹 : スピンナノチューブにおける新奇なカイラリティ誘起超伝導の数値シミュレーション研究、量子ビーム科学研究交流会 (高崎量子応用研究所、2016年12月)
- IV-13 坂井徹 : Kosterlitz-Thouless 転移と Haldane 予想、第 2 回 QST 播磨セミナー (SPRING-8、2016年10月)
- IV-14 K. Ito, S. Yokoo, T. Sakai : Quantum Phase Transition in the Twisted Three-Leg Spin Tube, International Conference on Molecule-Based Magnets (ICMM2016) (Sendai, 2016年9月)
- IV-15 K. Ito, S. Yokoo, K. Okamoto, T. Sakai : Quantum Phase Transition in the Twisted Three-Leg Spin Tube, POLYHEDRON, in press.
- IV-16 伊藤敬佑、坂井徹 : 異方的三本鎖スピントューブの量子相転移、日本物理学会 2016 年秋季大会 (金沢大学、2016年9月)
- IV-17 伊藤敬佑 : 異方的三本鎖スピントューブの量子相転移、第 61 回物性若手夏の学校 (志賀高原、2016年7月)
- IV-18 利根川孝、引原俊哉、岡本清美、坂井徹 : 脚相互作用が異なった異方的 $S=1/2$ 2 本脚ラダーの基底状態相図 II、日本物理学会 2016 年秋季大会 (金沢大学、2016年9月)
- IV-19 岡本清美、利根川孝、坂井徹 : ボンド交代のある $S=2$ 異方的量子スピン鎖の基底状態相図 Symmetry Protected Topological Phase と Trivial Phase、日本物理学会 2016 年秋季大会 (金沢大学、2016年9月)
- IV-20 坂井徹、利根川孝、岡本清美、中野博生 : スピンラダー系における磁場誘起スピンネマティック相、日本物理学会 2016 年秋季大会 (金沢大学、2016年9月)
- IV-21 坂井徹 : 趣旨説明、日本物理学会 2016 年秋季大会・領域 3,7,8,11 合同シンポジウム「強磁性相互作用を含むフラストレート量子磁性体の新奇物性」(金沢大学、2016年9月)
- IV-22 岡本清美、利根川孝、坂井徹 : ダイヤモンド型スピン鎖の歪みパターンと磁化プラトー、日本物理学会第 72 回年次大会 (大阪大学豊中キャンパス、2017年3月)
- IV-23 伊藤敬佑、横尾駿、坂井徹 : 異方的三本鎖スピントューブにおける量子相転移の数値的研究、日本物理学会第 72 回年次大会 (大阪大学豊中キャンパス、2017年3月)
- IV-24 利根川孝、引原俊哉、岡本清美、坂井徹 : 脚相互作用が異なった異方的 $S=1/2$ 2 本脚ラダーの基底状態相図 III、日本物理学会第 72 回年次大会 (大阪大学豊中キャンパス、2017年3月)
- V-1 S. Okubo, R. Nakata, S. Idehara, N. Takahashi, T. Sakurai, W. Zhang, H. Ohta, T. Shimokawa, T. Sakai, K. Okuta, S. Hara, and H. Sato, Dzyaloshinsky-Moriya Interaction and the Ground State in $S=3/2$ Perfect Kagome Lattice Antiferromagnet $KCr_3(OH)_6(SO_4)_2$ (Cr-Jarosite) Studied by X-Band and High-Frequency ESR, J. Phys. Soc. Jpn. 86 (2017) 024703-1-6.
- V-2 H. T. Sakai and H. Nakano, Gapless Quantum Spin Liquid of the Kagome-Lattice Antiferromagnet, POLYHEDRON 126 (2017) 42-44.

- V-3 H. Nakano and T. Sakai, Ferrimagnetism in the Spin-1/2 Heisenberg Antiferromagnet on a Distorted Triangular Lattice, *J. Phys. Soc. Jpn.* 86 (2017) 063702-1-4.
- V-4 坂井徹：大規模数値対角化による新奇な磁場誘起量子相転移の研究、東大物性研短期研究会「強磁場コラボラトリー、国際協力と強磁場科学の将来」（東大物性研・柏、2016年6月）
- V-5 T. Sakai and H. Nakano: Quantum Spin Fluid in S=1/2 Kagome-Lattice Antiferromagnet, International Conference on Statistical Physics (STATPHYS2016), (France・Lyon, 2016年7月)
- V-6 T. Sakai and H. Nakano: Quantum Spin Liquid in the Kagome-Lattice Antiferromagnet and Related Systems, *J. Phys.: Conf. Ser.*, in press.
- V-7 T. Sakai: Anomalous Magnetization Process of Two-Dimensional Frustrated Quantum Antiferromagnets, Institute Laue-Langevin Seminar, (France・Grenoble, 2016年7月)
- V-7 T. Sakai and H. Nakano : Quantum Spin Fluid of the S=1/2 Kagome-Lattice Antiferromagnet, International Conference on Highly Frustrated Magnetism (HFM2016) (Taipei, 2016年9月)
- V-8 T. Sakai and H. Nakano: Quantum Spin Fluid of the S=1/2 Kagome-Lattice Antiferromagnet, International Conference on Molecule-Based Magnets (ICMM2016) (Sendai, 2016年9月)
- V-9 坂井徹、中野博生：大規模数値対角化によるフラストレーション系の研究、量子スピ研究会（福井大学文京キャンパス、2016年12月）
- V-10 坂井徹、中野博生：カゴメ格子反強磁性体のギャップレススピ液体、第10回物性科学領域横断研究会（神戸大学百年記念館、2016年12月）
- V-11 坂井徹：招待講演、低次元量子スピン系の新奇な磁場誘起現象、神戸大学物性実験研究室セミナー（神戸大学瀧川記念学術交流会館、2016年12月）
- V-12 T. Sakai：招待講演、Numerical Diagonalization Study on Frustrated Magnets、国際会議「Quantum Dynamics and Response」（主催：ポスト京コンピューター萌芽的課題（CBSM2）サブ課題D）（Tokyo、2017年3月）
- V-13 中野博生、坂井徹：歪んだ三角格子ハイゼンベルク反強磁性体とフェリ磁性、日本物理学会2016年秋季大会（金沢大学、2016年9月）
- V-14 長谷川泰正、中野博生、坂井徹：正方カゴメ格子ハイゼンベルグ反強磁性体の磁化ジャンプ、日本物理学会2016年秋季大会（金沢大学、2016年9月）
- V-15 中野博生、坂井徹：フラストレート反強磁性体の磁場中量子相転移の数値対角化による研究、日本物理学会第72回年次大会（大阪大学豊中キャンパス、2017年3月）
- V-16 嶋田ありさ、坂井徹、中野博生、吉村一良、 $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ 型の歪みを持つ三角格子 S=1/2 ハイゼンベルク反強磁性体、日本物理学会第72回年次大会（大阪大学豊中キャンパス、2017年3月）
- VI-1 坂井徹：量子ビームと計算物質科学、SPRING-8 シンポジウム（関西学院大学・三田キャンパス、2016年8月）
- VI-2 坂井徹：量子ビームと計算科学、SPRING-8 シンポジウム・理論研究会サテライトミーティング（関西学院大学・三田キャンパス、2016年8月）
- VI-3 坂井徹：高大連携授業、磁性と超伝導の物質科学、兵庫県立大学附属高校（兵庫県、2016年11月）

大学院物質理学研究科

博士後期課程

藤原聖基 : タイトバインディング近似によるラシュバ効果の解析

博士前期課程

伊藤敬祐 : スピナノチューブの数値的研究

科学研究費補助金等

文部科学省科学研究費補助金 基盤研究 (C)

研究課題 カゴメ格子反強磁性体の ESR 禁制遷移を利用したスピンギャップ観測の理論的研究

研究代表者 坂井 徹

文部科学省科学研究費補助金 新学術領域研究「J-Physics : 多極子伝導系の物理」公募研究

研究課題 フラストレーション系におけるスピン多極子秩序と新奇伝導の理論的数値的研究

研究代表者 坂井 徹

ひょうご科学技術協会・学術研究助成

研究課題 スピナノチューブの新しいカイラリティ誘起超伝導の理論的・計算科学的研究

研究代表者 坂井 徹

受賞

Journal of the Physical Society of Japan誌の「2016 Highly Cited Article 賞」

(受賞論文) H. Nakano and T. Sakai: Magnetization Process of the Spin-S

Kagome-Lattice Heisenberg Antiferromagnet, J. Phys. Soc. Jpn. 84 (2015) 063705

著者 : 中野博生・坂井徹