

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 $\text{Sr}_2\text{RuO}_4\text{-Ru}$ 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、この相図と既の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 スピン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ンラダー系と呼ぶのに対し、このスピンラダー系の両端の鎖を結合して筒状にした系をスピン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ンナノチューブでは、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こらず、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にれた強相関電子系の理論モデル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：Bi(111)における Γ 点周りのRashba分裂の解析、日本物理学会2017年秋季大会（岩手、2017年9月）
- I-2 藤原聖基・島信幸・馬越健次・坂井徹：DV-LDA法によるBi(111)とBiAg(111)でのラシュバ効果の解析、日本物理学会第73回年次大会（野田、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. Ito, S. Yokoo, K. Okamoto, T. Sakai : Quantum Phase Transition in the Twisted Three-Leg Spin Tube, *POLYHEDRON* 136 (2017) 42-44.
- IV-4 坂井徹：低次元量子磁性体におけるスピンネマティック相の理論的研究, *J-Physics トピカルミーティング「局在多極子と伝導電子の相関による新現象」* (東京大学物性研究所、2017年4月)
- IV-5 坂井徹：はじめに、日本物理学会・領域3・7・8・11合同シンポジウム「Haldane現象とその展開」、日本物理学会2017年秋季大会（岩手、2017年9月）
- IV-6 山之口諒、岡本清美、坂井徹：異方性のある $S=1$ スピンラダー系の量子相転移、日本物理学会2017年秋季大会（岩手、2017年9月）
- IV-7 利根川孝、古谷峻介、岡本清美、引原俊哉、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：数値計算、日本物理学会2017年秋季大会（岩手、2017年9月）

- IV-8 古谷峻介、利根川孝、岡本清美、引原俊哉、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：ボゾン化、日本物理学会 2017 年秋季大会（岩手、2017 年 9 月）
- IV-9 T. Sakai : Spin-Nematic and Spin-Liquid Phases in Low-Dimensional Antiferromagnets. International Workshop on Multipole Physics and Related Phenomena(Hachimantai, Iwate, 2017 年 9 月)
- IV-10 坂井徹：低次元量子反強磁性体のスピンネマティック相、J-Physics 多極子伝導系の物理・平成 29 年度領域全体会議（東京大学物性研究所、2017 年 3 月）
- IV-11 伊藤敬佑、岡本清美、横尾駿、坂井徹：ねじれた三本鎖スピントチューブにおけるスピングャップの数値的研究、日本物理学会第 73 回年次大会（野田、2018 年 3 月）
- IV-12 山之口諒、岡本清美、坂井徹：異方性のある $S=1$ スピンラダー系の量子スピン液体、日本物理学会第 73 回年次大会（野田、2018 年 3 月）
- IV-13 利根川孝、岡本清美、古谷峻介、引原俊哉、坂井徹：脚相互作用が異なった異放的 $S=1/2$ 2本脚ラダーの基底状態 IV、日本物理学会第 73 回年次大会（野田、2018 年 3 月）
- IV-14 岡本清美、利根川孝、古谷俊介、引原俊哉、坂井徹：脚相互作用が異なった異放的 $S=1/2$ 2本脚ラダーの基底状態 V、日本物理学会第 73 回年次大会（野田、2018 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 H. Nakano and T. Sakai: Quantum Spin Liquid in the Kagome-Lattice Antiferromagnet and Related Systems, J. Phys.: Conf. Ser. 868 (2017) 012006-1-10
- V-5 坂井徹、中野博生：磁化率の計算によるスピングャップ解析、東京大学物性研究所短期研究会 物性研究所スパコン共同利用・CCMS 合同研究会「計算物質科学の今と未来」（東京大学物性研究所、2017 年 4 月）
- V-6 T. Sakai and H. Nakano: Gapless Spin Excitations in the Kagome- and Triangular-Lattice Antiferromagnets , International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (プラハ、2017 年 7 月)
- V-7 T. Sakai: Numerical Diagonalization Study on Kagome-Lattice Antiferromagnet and Related Systems, スイス連邦工科大チューリッヒ校セミナー(Zurich, 2017 年 7 月)
- V-8 T. Sakai and H. Nakano (招待講演) :Quantum Spin Fluid Behaviors of the Kagome- and Triangular-Lattice Antiferromagnets, 28th International

- Conference on Low-Temperature Physics (LT28) (スウェーデン・ヨーテボリ、2017年8月)
- V-9 坂井徹、中野博生、野尻浩之：直行ダイマー系の量子相転移における ESR 禁制遷移、日本物理学会 2017 年秋季大会 (岩手、2017 年 9 月)
- V-10 中野博生、坂井徹：数値対角化による 2 次元フラストレート反強磁性体の量子相転移の研究、日本物理学会 2017 年秋季大会 (岩手、2017 年 9 月)
- V-11 嶋田ありさ、中野博生、坂井徹、吉村一良：歪んだ三角格子ハイゼンベルグ反強磁性体の比熱、日本物理学会 2017 年秋季大会 (岩手、2017 年 9 月)
- V-12 T. Sakai and H. Nakano: Gapless Quantum Spin Liquid of Kagome-Lattice Antiferromagnet, Junjiro Kanamori Memorial International Symposium (東京大学・小柴ホール、2017 年 9 月)
- V-13 T. Sakai and H. Nakano: Quantum Spin Liquid of the Kagome- and Triangular-Lattice Antiferromagnets and Related Materials, YIPQS Long-Term and Nishinomiya-Yukawa Memorial Workshop Novel Quantum States in Condensed Matter 2017 (京都大学基礎物理学研究所、2017 年 11 月)
- V-14 T. Sakai and H. Nakano: Quantum Spin Liquid of Kagome-Lattice Antiferromagnet, CEMS (創発物性科学研究センター) Symposium on Trends in Condensed Matter Physics (理化学研究所・和光、2017 年 11 月)
- V-15 坂井徹、中野博生：直行ダイマー系の量子相転移における ESR 禁制遷移、第 56 回電子スピンスイェンス学会年会(東京工業大学・大岡山キャンパス、2017 年 11 月)
- V-16 坂井徹：フラストレーション系における磁場誘起量子現象の大規模数値対角化による研究、強磁場フォーラム研究会「強磁場コラボラトリーが拓く未踏計測領域への挑戦と物質・材料科学の最先端」(物質・材料研究機構・つくば、2017 年 11 月)
- V-17 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、第 12 回量子スピン系研究会 (大阪府箕面市・みのお山荘、2017 年 12 月)
- V-18 T. Sakai: Gapless Spin Excitations in the Kagome- and Triangular-Lattice Antiferromagnets, 岡山大学理学部・物性理論セミナー (岡山大学理学部、2018 年 1 月)
- V-19 A. Shimada, H. Nakano, T. Sakai and K. Yoshimura: $S=1/2$ Triangular-Lattice Heisenberg Antiferromagnet with $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -type Distortion, J. Phys. Soc. Jpn. 87 (2018) 034706-1-7.
- V-20 T. Sakai and H. Nakano: Gapless Quantum Spin Liquid of the Kagome-Lattice Antiferromagnet, アメリカ物理学会マーチミーティング (ロサンゼルス、2018 年 3 月)
- V-21 A. Shimada, H. Nakano, T. Sakai and K. Yoshimura: $S=1/2$ Triangular-Lattice Heisenberg Antiferromagnet with $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -type Distortion-Magnetization Process and Magnetic Susceptibility-, Journal of the Japan Society of Powder and Powder Metallurgy, 65 (2018) 3-9.
- V-22 坂井徹、中野博生：磁化率解析法による量子系のスピギャップ有無の判定、日本物理学会第 73 回年次大会 (野田、2018 年 3 月)

- V-23 嶋田ありさ、中野博生、坂井徹、吉村一良：歪を持つ三角格子上の $S=1/2$ ハイゼンベルグ反強磁性体の相転移と磁化率、日本物理学会第 73 回年次大会（野田、2018 年 3 月）
- V-24 H. Nakano and T. Sakai: Magnetization Process of the Spin-1/2 Triangular-Lattice Heisenberg Antiferromagnet with Next-Nearest-Neighbor Interactions -Plateau or Nonplateau-, J. Phys. Soc. Jpn. 86 (2017) 114705-1-4.
- V-25 T. Sakai and H. Nakano: Gapless Spin Excitation in the $S=1/2$ Kagome and Triangular-Lattice Antiferromagnets, Physica B 536 (2018) 85-88.
- VI-1 坂井徹：量子力学の世界－粒子の波動性から高温超伝導まで－、播磨科学公園都市まちびらき 20 周年事業 やさしいサイエンスセミナー（兵庫県・播磨科学公園都市、2017 年 10 月）
- VI-2 坂井徹：量子力学の世界－粒子の波動性から高温超伝導まで－、出前授業（尼崎市立尼崎高等学校、2017 年 12 月）
- VI-3 坂井徹、遠山貴己：量子ビームと計算物質科学、SPRING-8 シンポジウム 2017（広島大学・東千田未来創生センター、2017 年 9 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ッシュバ効果の解析

博士前期課程

伊藤敬祐：スピンのチューブの数値的研究

榎田裕也：p波超伝導に対する界面と磁場の効果

山之口諒： $S=1$ スピンラダー系の量子相転移

科学研究費補助金等

- 1 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
- 2 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
- 3 平成 29 年度 A 期 HPCI システム利用
研究課題 (京コンピュータ)「低次元量子スピン系における対称性に守られたトポロジカル相の数値的研究」
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