

## I フラストレーション系の新現象

### Novel Phenomena of Frustrated Systems

坂井 徹・中野博生  
Sakai, T., Nakano, H.

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量子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。

## II 不均一な chiral 超伝導の磁場中現象

### Field-induced Phenomena in Inhomogeneous Chiral Superconductivity

兼安 洋乃  
Kaneyasu, H.

不均一な chiral 状態の磁場依存性について、Ginzburg-Landau 理論に基づいた解析を行った。chiral 状態を表す 2 成分秩序変数の Ginzburg-Landau 方程式を数値的に解いて、磁場中の秩序変数成分と超伝導電流の磁場依存性を調べた。chiral 軸方向の磁場を正から負へ変化させた際の、chiral 状態のヒステリシスの温度変化を調べた。ヒステリシスにおける chiral 磁気モーメントの保持機構を、秩序変数成分と Ginzburg-Landau 自由エネルギー、及び常磁性 chiral 電流とスクリーニング電流の磁場依存性から説明した。また、chiral 状態の磁化率の温度依存性と、磁場誘起 chiral 転移の研究を行った。

## III 大規模数値シミュレーションに基づく

## 量子スピン模型の理論的研究

### Theoretical study of quantum spin models based on the large-scale numerical simulations

中野 博生  
Nakano, H.

量子スピン模型は絶縁体磁性を記述する模型として、これまでに多くの研究が行われている。しかしながら、この系は相互作用の効果が本質的であるために、数学的な厳密解が得られるのはごく限られた場合だけで、一般には依然として最も難しい多体問題の一つである。そこで、相互作用を近似しない直接数値計算によって、近似に依らない知見を得ることは非常に重要である。そのような直接数値計算の一つとして、ランチョス法に基づく数値的厳密対角化法が知られている。その計算の規模は、原子数に関して指数関数的に増大するため、使用する計算機の資源量に応じた小さい系しか取り扱えない。この欠点を克服して出来る限り大きなシステムサイズを取り扱う方法の一つとして、単一計算ノードを超えて並列計算を可能な限り大規模に実行することが考えられる。そのような計算プログラムで、高速な実行速度が実現できるものを開発することは一般に困難であるが、我々は量子スピン模型についてそのような並列プログラムを開発し、その物性解明に活用している。特に様々なフラストレーションを有する格子形の上のハイゼンベルク反強磁性体の性質を数値的に調べてきた。その年度に利用できるスーパーコンピュータのうち最適なものを選び、このプログラムをそのようなスパコンで実行することにより、様々な成果をあげている。2022年度も、「富岳」の継続利用で大規模並列計算を実施し、量子ハイゼンベルク模型の諸現象の解明に資する数値計算を実現した。 $S=1$  ハイゼンベルク鎖模型のハルデンギャップの高精度な評価や、 $S=1/2$  直交ダイマー格子系(いわゆるシャストリー・サザーランド模型)に現れるダイマー相の境界の精密評価に成功した。

## IV 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、スピン間に働く反強磁性交換相互作用に起因した量子スピン液体が重要な役割を果たすことが知られている。このスピン間の相互作用を取り入れた電子系の理論模型に対する数値シミュレーションを用いて、擬ギャップ現象・電荷ストライプ現象等のエキゾチックな現象のメカニズムを理論的に研究している。

## 発表論文 List of Publications

- I-1 T. Sakai, R. Nakanishi, T. Yamada, R. Furuchi, H. Nakano, H. Kaneyasu, K. Okamoto and T. Tonegawa: Field-induced spin nematic Tomonaga-Luttinger liquid of the  $S=1/2$  spin ladder system with anisotropic ferromagnetic rung interaction, *Phys. Rev. B* 106 (2022) 064433.
- I-2 T. Sakai, T. Yamada, R. Nakanishi, R. Furuchi, H. Nakano, H. Kaneyasu, K. Okamoto and T. Tonegawa:  $S=2$  Quantum Spin Chain with the Biquadratic Exchange Interaction, *J. Phys. Soc. Jpn.* 91 (2022) 074702.
- I-3 T. Sakai, H. Nakano, R. Fruchi and K. Okamoto: Spin Nematic Liquid of the  $S=1/2$  Distorted Diamond Spin Chain in Magnetic Field, *AIP Advances* 13 (2023) 015313.
- I-4 T. Sakai, H. Nakano, R. Furuchi and K. Okamoto: Field-Induced Quantum Spin Nematic Liquid Phase in the  $S=1$  Antiferromagnetic Heisenberg Chain with Additional Interactions, *Journal of Physics: Conference Series* 2164 (2022) 012030-1-4.
- I-5 T. Sakai, K. Okamoto, H. Nakano and R. Furuchi: Magnetization plateau of the distorted diamond spin chain with anisotropic ferromagnetic interaction, *AIP Advances* 12 (2022) 035030-1-4.
- I-6 T. Sakai, H. Nakano, R. Furuchi, K. Okamoto: Spin Nematic Liquid of the  $S=1/2$  Distorted Diamond Spin Chain in Magnetic Field, *The 67<sup>th</sup> Annual Conference on Magnetism and Magnetic Materials (MMM2022)* (ミネアポリス・ハイブリッド開催、2022年11月)
- I-7 T. Sakai: Spin nematic liquid of one-dimensional quantum spin systems in magnetic field, *アメリカ物理学会マーチミーティング (ラスベガス・ハイブリッド開催、2023年3月)*
- I-8 T. Sakai, R. Furuchi and H. Nakano: Quantum Phase Transition of the Shastry-Sutherland System and ESR Forbidden Transition, *The 29th International Conference on Low Temperature Physics (LT29, Sapporo convention center, 2022年8月)*
- I-9 R. Nakanishi, T. Yamada, R. Furuchi, H. Nakano, H. Kaneyasu, K. Okamoto, T. Tonegawa and T. Sakai: Field-Induced Spin Nematic Liquid of the  $S=1/2$  Bond-Alternating Chain with the Anisotropy, *The 29th International Conference on Low Temperature Physics (LT29, Sapporo convention center, 2022年8月)*
- I-10 T. Yamada, R. Nakanishi, R. Furuchi, H. Nakano, H. Kaneyasu, K. Okamoto, T. Tonegawa and T. Sakai: Translational Symmetry Broken Magnetization Plateau of the  $S=2$  Antiferromagnetic Chain with

- Anisotropies, The 29th International Conference on Low Temperature Physics (LT29, Sapporo convention center, 2022 年 8 月)
- I-11 T. Tonegawa, K. Okamoto, K. Nomura and T. Sakai: Nematic Tomonaga-Luttinger Liquid Phase in an  $S=1/2$  Ferromagnetic-Antiferromagnetic Bond-Alternating Chain, The 29th International Conference on Low Temperature Physics (LT29, Sapporo convention center, 2022 年 8 月)
- I-12 T. Sakai: Quantum spin nematic liquid in the low-dimensional anisotropic magnets, International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (アムステルダム、2022 年 7 月)
- I-13 坂井徹、古内理人、中野博生、岡本清美：強磁性相互作用のある異方的デルタ鎖の磁場誘起スピネマティック液体，日本物理学会 2022 年秋季大会（東工大，2022 年 9 月）
- I-14 利根川孝（神戸大）、岡本清美、野村清英（九州大）、坂井徹：次近接相互作用をもつ  $S=1/2$  強磁性-反強磁性ボンド交代鎖におけるネマティック TLL 相：数値計算，日本物理学会 2022 年秋季大会（東工大，2022 年 9 月）
- I-15 岡本清美、利根川孝（神戸大）、野村清英（九州大）、坂井徹：次近接相互作用をもつ  $S=1/2$  強磁性-反強磁性ボンド交代鎖におけるネマティック TLL 相：解析的考察，日本物理学会 2022 年秋季大会（東工大，2022 年 9 月）
- I-16 中西亮介、古内理人、中野博生、兼安洋乃、岡本清美、利根川孝（神戸大）、坂井徹：異方性のある強磁性桁相互作用を持つスピンラダー系の量子相転移，日本物理学会 2022 年秋季大会（東工大，2022 年 9 月）
- I-17 山田尊生、坂井徹、中西亮介、古内理人、中野博生、兼安洋乃、岡本清美、利根川孝（神戸大）：異方的  $S=3/2$  反強磁性鎖の磁化プラトー，日本物理学会 2022 年秋季大会（東工大，2022 年 9 月）
- I-18 坂井徹：歪んだダイヤモンドスピン鎖の磁場誘起スピネマティック液体，第 18 回量子スピン系研究会（浜坂・ハイブリッド開催、2022 年 12 月）
- I-19 T. Sakai: Field-Induced Spin Nematic Liquid of Low-Dimensional Quantum Pin Systems, 第 6 回 QST 国際シンポジウム（東京・ハイブリッド開催、2022 年 11 月）
- I-20 坂井徹：低次元量子スピン系の磁場誘起スピネマティック液体，強磁場科学研究会 — マルチプローブ強磁場測定が解き明かす強相関物性（東北大金研、東大物性研、阪大南部陽一郎ホール・ハイブリッド開催、2022 年 11 月）
- I-21 坂井徹、古内理人、中野博生：五角形を含む二次元格子ハイゼンベルグ反強磁性体の数値的研究，新学術領域研究「ハイパーマテリアル」第 8 回領域会議（オンライン開催、2022 年 4 月）
- I-22 坂井徹、中西亮介、山田尊生、古内理人、中野博生、兼安洋乃、岡本清美、利根川孝：異方的強磁性相互作用のある一次元量子スピン系の磁場誘起ネ

- マティック液体, 日本物理学会 2023 年春季大会 (オンライン開催, 2023 年 3 月)
- I-23 岡本清美、坂井徹、奥西巧一 (新潟大) : 異方的  $S=1$  鎖における  $1/2$  飽和磁化プラトー, 日本物理学会 2023 年春季大会 (オンライン開催, 2023 年 3 月)
- I-24 利根川孝 (神戸大)、引原俊哉 (群馬大)、坂井徹 : 異方的  $S=3/2$  鎖の基底状態相図 : トリアティック TLL 相とネマティック TLL 相, 日本物理学会 2023 年春季大会 (オンライン開催, 2023 年 3 月)
- I-25 T. Sakai, R. Furuchi and H. Nakano: Quantum Phase Transition of the Shastry-Sutherland System and ESR Forbidden Transition, JPS Conf. Proc. **38** (2023) 011155.
- I-26 R. Nakanishi, T. Yamada, R. Furuchi, H. Nakano, H. Kaneyasu, K. Okamoto, T. Tonegawa and T. Sakai: Field-Induced Spin Nematic Liquid of the  $S=1/2$  Bond-Alternating Chain with the Anisotropy, JPS Conf. Proc. **38** (2023) 011156.
- I-27 T. Yamada, R. Nakanishi, R. Furuchi, H. Nakano, H. Kaneyasu, K. Okamoto, T. Tonegawa and T. Sakai: Translational Symmetry Broken Magnetization Plateau of the  $S=2$  Antiferromagnetic Chain with Anisotropies, JPS Conf. Proc. **38** (2023) 011163.
- I-28 T. Tonegawa, K. Okamoto, K. Nomura and T. Sakai: Nematic Tomonaga-Luttinger Liquid Phase in an  $S=1/2$  Ferromagnetic-Antiferromagnetic Bond-Alternating Chain, JPS Conf. Proc. **38** (2023) 011154.
- I-29 坂井徹 : 異方的一次元量子スピン系の磁場誘起スピンネマティック液体, 第 17 回量子スピン系研究会 (那覇・ハイブリッド開催、2022 年 4 月)
- I-30 T. Sakai: Quantum Spin Nematic Liquid of Low-Dimensional Anisotropic Magnets in Magnetic Field, International Workshop: Trends in Quantum Magnetism (スイス連邦工科大チューリッヒ校・ハイブリッド開催、2022 年 4 月)
- I-31 T. Sakai, R. Furuchi, H. Nakano, K. Okamoto: Quantum spin nematic liquid in the low-dimensional anisotropic magnets  $-S=1/2$  delta spin chain with the anisotropic ferromagnetic interaction in magnetic field-, SciPost Physics Proceedings 11 (2023) 001.
- II-1 H. Kaneyasu, K. Otuka, S. Haruna, S. Yoshida, S. Date: Spin Susceptibility and Field-Induced Chiral Stability in Non-unitary Superconductivity, Sustained Simulation Performance 2021; Proceedings of the Joint Workshop on Sustained Simulation Performance, 31th and 32nd, Springer, 37-52 (2023).
- II-2 K. Otuka, S. Haruna, Y. Hasegawa, H. Kaneyasu, JPS Conf. Proc.: Simulation of Field-induced Chiral Phenomena in Inhomogeneous Superconductivity, Proceedings of the 29th International Conference

- on Low Temperature Physics (LT29), 38, 011058-1-6 (2023).
- II-3 兼安洋乃, 春名信吾, 大塚剛生: Ginzburg-Landau 理論に基づいた数値シミュレーションによる超伝導の磁場依存性の研究, サイバーメディア HPC ジャーナル ; CYBERMEDIA HPC JOURNAL, 12, 25-28 (2022).
- II-4 春名信吾, 大塚剛生, 兼安洋乃: 不均一な超伝導中での時間反転対称性の破れとその安定化, 京都大学基研研究会「非自明な電子状態で発現する超伝導現象の新しい潮流」, 2022年12月22日, 京都大学.
- II-5 K. Otsuka, S. Haruna, H. Kaneyasu: Stability of Time-Reversal Symmetry Breaking State by applying Magnetic Field in Inhomogeneous Superconductivity, 29th International Conference on Low Temperature Physics, 2022年8月19日, 札幌コンベンションセンター.
- III-1 Rito Furuchi, Hiroki Nakano, Toru Sakai: Numerical Study of S=1/2 Heisenberg Antiferromagnet on the Floret Pentagonal Lattice, The 29th International Conference on Low Temperature Physics (LT29, Sapporo convention center, 2022年8月)
- III-2 Hiroki Nakano and Toru Sakai: Large-Scale Numerical-Diagonalization Study of the Shastry-Sutherland Model, The 29th International Conference on Low Temperature Physics (LT29, Sapporo convention center, 2022年8月)
- III-3 Hiroki Nakano, Hiroto Tadano (筑波大学), Norikazu Todoroki (千葉工業大学), and Toru Sakai: The Haldane Gap of the S = 1 Heisenberg Antiferromagnetic Chain, J. Phys. Soc. Jpn. **91** (2022) 074701.
- III-4 Mikio Motohashi (東京理科大理工), Kouki Inoue (東京理科大理工), Katsuhiko Morita (東京理科大理工), Yoshiyuki Fukumoto (東京理科大理工), Hiroki Nakano: Effects of bond-randomness and Dzyaloshinskii-Moriya interactions on the specific heat at low temperatures of a spherical kagome cluster in {W72V30}, Progress of Theoretical and Experimental Physics **11** (2022) 20221126.
- III-5 古内理人, 中野博生, 坂井徹, 轟木義一 (千葉工業大学): フローレット五角形格子ハイゼンベルク反強磁性体を示すフェリ磁性の崩壊に関する数値的研究, 日本物理学会 2023年春季大会 (オンライン開催, 2023年3月)
- III-6 中野博生, 轟木義一 (千葉工業大学), 多田野寛人, 坂井徹: 富岳を用いた量子スピン系の大規模並列数値対角化計算の現状, 日本物理学会 2022年秋季大会 (東工大, 2022年9月)
- III-7 古内理人, 中野博生, 坂井徹, 轟木義一 (千葉工業大学): フローレット五角形格子ハイゼンベルク反強磁性体を示す磁化ジャンプの理論的研究, 日本物理学会 2022年秋季大会 (東工大, 2022年9月)
- III-8 本橋樹生 (東京理科大理工), 井上晃来 (東京理科大理工), 森田克洋 (東京理科大理工), 福元好志 (東京理科大理工), 中野博生: 球体カゴメ系

- {W72V30}の低温比熱の磁場依存性に対するボンドランダムネスの影響,  
日本物理学会 2022 年秋季大会 (東工大, 2022 年 9 月)
- III-9 中野博生: 巨大次元疎行列の数値対角化の並列シミュレーションへの挑戦,  
第 9 回 HPCI システム利用研究課題成果報告会 (オンライン開催, 2022  
年 10 月)
- III-10 中野博生: フラストレート磁性体に現れる量子相転移の計算科学的研究,  
第 9 回 HPCI システム利用研究課題成果報告会 (オンライン開催, 2022  
年 10 月)
- III-11 Rito Furuchi, Hiroki Nakano, Toru Sakai: Numerical Study of  $S=1/2$   
Heisenberg Antiferromagnet on the Floret Pentagonal Lattice, JPS  
Conf. Proc. **38** (2023) 011167.
- III-12 Hiroki Nakano and Toru Sakai: Large-Scale  
Numerical-Diagonalization Study of the Shastry-Sutherland Model,  
JPS Conf. Proc. **38** (2023) 011166.
- III-13 古内理人: フローレットペンタゴン格子ハイゼンベルグ反強磁性体の数値  
対角化による研究, 第 17 回量子スピン系研究会(那覇・ハイブリッド開催、  
2022 年 4 月)
- IV-1 坂井徹、遠山貴己(東京理科大)、筒井健二(量研 SPring-8)、中野博生:  
量子ビームと計算物質科学、SPring-8 シンポジウム 2022(オンライン開催、  
2022 年 9 月)

## 物質科学専攻

### 博士後期課程

古内理人 : フローレットペンタゴン格子ハイゼンベルグ反強磁性体の磁化過  
程に関する数値的研究

### 博士前期課程

大塚剛生 : 2成分秩序変数で表されたカイラル超伝導状態の磁場応答

中西亮介 : 量子スピン系におけるスピンネマティック液体の理論的・計算学  
的研究

山田尊生 : 低次元磁性体における対称性に守られたトポロジカル相の理論  
的・計算科学的研究

春名信吾 : Ginzburg-Landau理論とEliashberg理論による超伝導の研究

法田朋久 : フラストレート磁性体の磁場中異常量子現象の理論的研究

## 科学研究費補助金等

- 1 文部科学省科学研究費助成事業(学術研究助成基金助成金)(令和 2~令和 4 年  
度) 基盤研究(C) 課題番号:20K03866

研究課題 カゴメ格子反強磁性体の量子スピン液体とエキゾティック励  
起の理論的・数値的研究

研究代表者 坂井徹 研究分担者 中野博生

- 2 令和3年度 HPCI システム利用研究課題(2022年度 A期) 課題番号:hp220043  
研究課題 巨大疎行列に対する固有値問題の大規模並列シミュレーションの新展開  
研究代表者 中野博生
  
- 3 FOCUS [兵庫県・神戸市] 計算科学分野研究教育拠点 (COE) 形成推進事業  
課題 4「テンソルネットワーク(TN)スキームに基づく異分野融合型計算科学研究」  
研究分担者 坂井 徹
  
- 4 兵庫県立大学 令和4年度女性研究者研究活動助成金  
研究課題 超伝導における時間反転対称性の破れた状態の理論研究  
研究代表者 兼安洋乃