

I ナノ系を通過する非平衡電流と非弾性伝導

Nonequilibrium Electric Current and Inelastic Conductance
through Nano-Systems

島 信幸・馬越健次
Shima, N., Makoshi, K.

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。

II 極端条件下における電子状態

Electronic Structures under Extreme Conditions

野沢和生・島 信幸・馬越健次
Nozawa K., Shima, N., Makoshi, K.

表面界面、高圧下等における電子状態を、バンド計算および量子化学的電子状態計算法に基づいて研究している。1電子近似(電子相関とのからみ)や有効質量近似、集団運動的取扱いの定量的限界をキーワードとして、電子密度汎関数法GVBに基づいて電子状態計算の改良を行っている。2次元超格子の電子状態、Si, Al, ダイヤモンドの表面構造や結晶成長、固体酸素 ϵ 相の結晶構造に関する問題に取り組んでいる。

III Mn酸化物、Cu酸化物における電子状態

Electron State in Mn Oxide and Cu Oxide

宮木 智・馬越健次
Miyaki, S., Makoshi, K.

マンガン酸化物、銅酸化物を対象に、強相関係特有の現象を理論的に研究している。マンガン酸化物における巨大磁気抵抗、銅酸化物における疑ギャップ現象と反強磁性相関の関係について量子クラスター計算等を用いた研究を行っている。

IV 共晶系、ドメイン系における界面での超伝導

Superconductivity near Interface

兼安洋乃・馬越健次
Kaneyasu, H., Makoshi, K.

界面近くの異方的超伝導の状態について研究を行った。スピン三重項超伝導 Sr_2RuO_4 -Ru共晶系では、 μm 単位のRu島付近において、 Sr_2RuO_4 のバルク超伝導1.5Kよりも高い転移温度3Kで超伝導が起こる。高温3K相から低温バルク相での超伝導転移の様子を研究した。3K相とバルク相では超伝導状態が異なること、また其の転移の様子を理論から示した。又、臨界磁場の磁場方向による違い及び磁束状態について研究を行った、この他、重い電子系 CeIrIn_5 のスピン一重項d波超伝導がドメイン付近において超伝導転移温度の上昇することについて、反強磁性スピン揺らぎとの関係から研究を行った。

発表論文 List of Publications

- I -1 小谷祐介・馬越健次・島 信幸、「原子架橋系の電気伝導度とフリーデルの総和則」日本物理学会2008年秋季大会20年9月岩手大学
- I -2 小谷祐介・島 信幸・馬越健次、「原子架橋系の電気伝導度とフリーデルの総和則」関西薄膜・表面物理セミナー20年11月グリーンビレッジ交野
- I -3 小谷祐介・馬越健次・島 信幸、「架橋系の電気伝導度とフリーデルの総和則」日本物理学会第64回年次大会21年3月立教大学.
- II -1 Tadashi Hatakeyama (中央大), Kazuki Nozawa and Yasushi Ishii (中央大), "Ab initio Studies on Orientational Ordering in Cubic Zn-Sc", Z. Krist. 223, 830 (2008).
- II -2 Kazuki Nozawa and Yasushi Ishii (中央大), "First-principles studies for structural transitions in ordered phase of cubic approximant CdCa", J. Phys.: Condens. Matter 20, 315206 (2008).
- II -3 Kazuki Nozawa, Nobuyuki Shima and Kenji Makoshi, "Theoretical calculations for solid oxygen under high pressure", J. Phys.: Condens. Matter 20, (2008) 335219.
- II -4 野澤和生・石井 靖 (中央大)・畠山 直 (中央大), 「Tsaiクラスターの配向と第2元素の関係」、日本物理学会第64回年次大会、2009年3月、東京
- II -5 畠山 直 (中央大)・野澤和生・石井 靖 (中央大), 「ZnSc, CdCa立方晶におけるクラスター芯の配向と第2元素の相関」、第13回準結晶研究会、2008年12月、一関
- II -6 野澤和生・石井 靖 (中央大), 「Zn-Sc, Cd-Ca立方晶の低温相転移に対する格子欠陥の影響」、第13回準結晶研究会、2008年12月、一関
- II -7 野澤和生・石井 靖 (中央大), 「Zn₆Sc立方晶の低温相転移におけるCu添加の影響」、日本物理学会2008年秋季大会、2008年9月、盛岡
- II -8 石井 靖 (中央大)・野澤和生, 「Bergman相Al-Liにおける擬ギャップ形成のメカニズム」、日本物理学会2008年秋季大会、2008年9月、盛岡
- II -9 畠山 直 (中央大)・野澤和生・石井 靖 (中央大), 「Zn-Sc立方晶の構造に関する第一原理計算」、日本物理学会2008年秋季大会、2008年9月、盛岡

- II-10 Tadashi Hatakeyama (中央大), Kazuki Nozawa and Yasushi Ishii (中央大), "Ab initio Studies on Orientational Ordering in Cubic Zn-Sc", The 10th International Conference on Quasicrystals, July (2008), Zurich.
- III-1 Satoru Miyaki, Kenji Makoshi and Hiroyasu Koizumi, "Two-copper-atom Units Induce a Pseudo Jahn-Teller Polaron in Hole-doped Cuprate Superconductors", J. Phys. Soc. Jpn. 77 (2008) 034702-034707.
- IV-1 Increase in d-wave Superconducting Transition Temperature near Imperfect Layer in Correlated Electron System
Tetsu Nobukuni, Hirono Kaneyasu, Nobuyuki Shima and Kenji Makoshi
J. Phys. Soc. Jpn. 78 (2009) 113703-1-4

大学院物質理学研究科

博士後期課程

信國 哲：ドメイン近くにおける異方的 d 波超伝導
小谷祐介：原子・分子架橋系の位相のずれと静電容量

博士前期課程

石川翔悟：グラフェンの電子状態

科学研究費補助金等

- 1 科学研究費補助金（平成20年度）特定領域研究 課題番号17069013
研究課題 ナノリンク分子の理論
研究分担者 馬越健次
- 2 科学研究費補助金（平成20年度）基盤研究（C） 課題番号17540301
研究課題 分子吸着系の非弾性電気伝導度と議事選択則
研究代表者 馬越健次
- 3 科学研究費補助金（平成20年度）基盤研究(S) 課題番号16101003
研究課題 量子ドットから量子結晶へ：2次元、3次元ナノ粒子結晶の創生と展開
研究分担者 馬越健次
- 4 受託研究JST-CREST（平成20年度）
研究課題 スピン偏極電流の理論
研究担当者 馬越健次
- 5 スズキ財団研究者海外研修助成（平成20年度）
兼安洋乃
- 6 兵庫県特別教育研究助成金（平成20年度）
兼安洋乃