

## 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 $\epsilon$ 相の結晶構造に関する問題に取り組んでいる。

### III 共晶系、ドメイン系における界面での超伝導

#### Superconductivity at Interface

兼安洋乃・馬越健次

Kaneyasu, H., Makoshi, K.

界面近くの異方的超伝導について研究を行った。スピン三重項超伝導 $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ -Ru共晶系では、 $\mu\text{m}$ 単位のRu島付近において、 $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ 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。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的に示した。次に、Ruがs波超伝導の時、 $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ -Ru界面でs波と時間反転対称性の破れたp波磁束の位相差により、自発的に渦糸が生じる可能性について研究を行った、この他、重い電子系 $\text{CeIrIn}_5$ 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・島 信幸・馬越健次：フリーデル総和則を満たす位相のずれと金属原子架橋系の電気伝導度」、日本物理学会2009年秋季大会、2009年9月25日～9月28日、熊本大学黒髪キャンパス
- I -2 小谷祐介・島 信幸・馬越健次：架橋系コンダクタンスの距離依存性とフリーデルの総和則、日本物理学会第65回年次大会、2009年3月20日～3月23日、岡山大学津島キャンパス
- I -3 小谷祐介・島 信幸・馬越健次：Theoretical Study of Electric Conductance of Atomic Wire with Friedel Sum Rule, ECOSS26, 2009年8月30日～9月4日、イタリア・パルマ
- II -1 野澤和生・石井 靖・馬越健次：Cd-CaおよびZn-Sc立方晶における圧力誘起構造相転移の理論計算、日本物理学会「分科会秋季大会」日本物理学会2009年秋季大会、9月25日～9月28日、熊本大学黒髪キャンパス
- II -2 野澤和生・石井 靖（中央大学理工学部）馬越健次：First-principles studies for catalytic properties and electronic structures of intermetallic compounds TM-Zn(TM= Pd, Ni, Pt), ECOSS26, 2009年8月30日～9月4日、イタリア・パルマ
- III -1 信國 哲・兼安洋乃・島 信幸・馬越健次：Increase in d-wave Superconducting Transition Temperature near Imperfect Layer in Correlated Electron System, J. Phys. Soc. Jpn. 78 (2009) 113703-1-4
- III -2 兼安洋乃・マンフレッド シグリスト(ETH-Zurich)・馬越健次：Unconventional superconducting states near Interface, ECOSS26, 2009年8月30日～9月4日、イタリア・パルマ

III-3 兼安洋乃 : Interface Superconductivity in Eutectic Ruthenium Oxide  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4\text{-Ru}$ ,  
ILL Seminar, 2009年1月26日、フランス・グルノーブル

## 大学院物質理学研究科

博士前期課程

石川翔悟: 固体表面におけるラッシュバ分裂の理論

信國 哲: ドメイン近くにおける異方的d波超伝導

博士後期課程

小谷祐介: 原子・分子架橋系の位相のずれと静電容量

## 科学研究費補助金等

1 科学研究費補助金 特定領域研究(平成21年度) 課題番号:17069013

研究課題 ナノリンク分子の電気伝導

研究分担者 馬越健次 (代表者: 塚田 捷)

2 受託研究 JST-CREST(平成21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

3 カシオ科学振興財団 海外派遣助成(平成21年度)

研究課題 共晶系及び格子欠陥系における境界面超伝導現象

研究代表者 兼安洋乃

4 日本証券奨学財団 研究調査助成(平成21年度)

研究課題 共晶系及び格子欠陥系における境界面超伝導現象

研究代表者 兼安洋乃

5 林女性自然科学者研究助成基金 国際研究交流助成(平成21年度)

研究課題 超伝導現象における境界面の効果

研究代表者 兼安洋乃