

## 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)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 $\text{Sr}_2\text{RuO}_4/\text{Ru}/\text{Pb}$ 接合系における界面超伝導と臨界電流

### Interface Superconductivity and Critical Current in $\text{Sr}_2\text{RuO}_4/\text{Ru}/\text{Pb}$ Junction

兼安洋乃  
Kaneyasu, H.

母物質 $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ に $\mu\text{m}$ サイズのRu結晶が析出した共晶体 $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ -Ru系では、 $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ のバルク超伝導転移温度より高い温度でRu結晶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は高温側ではRu結晶片周りに等方的位相を持ち、低温側ではバルク超伝導と同じ異方的位相を持つ。この系にs波超伝導のPbを接合させると、Ru結晶片に侵入したs波超伝導と $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ 側のp波超伝導の近接効果により界面超伝導の等方的位相から異方的位相への転移温度が下がる。この機構をGinzburg-Landau理論に基づいて近接エネルギー項の効果から説明した。高温側の界面超伝導の異方的位相とs波超伝導の等方的位相の位相差は、位相差で表される近接エネルギー項を通して自由エネルギーを上げる。このため異方的位相への転移温度は下がり、その下がった温度領域に等方的位相の界面超伝導相が現れる様子を、近接効果の強さに対する超伝導相図と秩序変数位相の変化を調べて説明した。又、位相差により転移後に臨界電流が下がる機構をsine-Gordon方程式を用いて説明した。

## 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：ラッシュバ効果が生じる機構と大きくなる条件についての強束縛モデルによる考察、Cat-on-Cat新規表面反応研究センターシンポジウム（姫路、2015年12月）
- I-2 藤原聖基・島信幸・馬越健次・坂井徹：強束縛近似によるラッシュバ係数の一般形、関西薄膜表面物理セミナー（交野、2015年11月）
- III-1 H. Kaneyasu, S. B. Etter(ITP,ETHZ), S. Toru, and M. Sigrist(ITP,ETHZ) : Evolution of the filamentary 3-Kelvin phase in Pb-Ru-Sr<sub>2</sub>RuO<sub>4</sub> Josephson junctions, PHYSICAL REVIEW B **92** 134515 (2015)
- III-2 兼安洋乃：非晶系、ドメイン系における界面での異方的超伝導状態の研究、兼安洋乃、兵庫県立大学「異分野融合若手研究者 Science & Technology クラブ」（姫路、2015年7月）
- III-3 兼安洋乃：共晶系物質における界面超伝導、兵庫県立大学「知の交流シンポジウム 2015」（神戸、2015年9月）
- IV-1 T. Sakai, T. Kasahara, K. Hijii, H. Ohta, H. Nakano: Spin nanotubes with the ring exchange interactions, Synthetic Metals **208** (2015) 26-28
- IV-2 T. Sakai and H. Nakano: Quantum Phase Transition in the Three-Leg Spin Tube, Physics Procedia **75** (2015) 369-375
- 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 T. Sakai and H. Nakano: Novel Quantum Phase Transitions of the Frustrated Spin Nanotube, International Conference on Magnetism (Barcelona, Spain, 2015年7月)
- IV-7 坂井徹：キャリア・ドーブしたスピントューブのカイラリティ誘起超伝導、新学術領域研究「トポロジーが紡ぐ物質科学のフロンティア」第1回領域研究会（京都、2015年12月）

- V-1 H. Nakano and T. Sakai: Instability of a ferromagnetic state of a frustrated  $S=1/2$  Heisenberg antiferromagnet in two dimensions, *Jpn. J. Appl. Phys. (Rapid Communication)* 54 (2015) 030305-1-4
- V-2 H. Nakano and T. Sakai: Magnetization Process of the Spin- $S$  Kagome-Lattice Heisenberg Antiferromagnet, *J. Phys. Soc. Jpn.* 84 (2015) 063705-1-4
- V-3 T. Sakai, K. Hijii, S. Okubo, H. Ohta, H. Nakano, S. Miyashita: Possible Singlet-Triplet Transition of ESR in the Kagome-Lattice Antiferromagnet, *Applied Magnetic Resonance* 46 (2015) 997-1002
- V-4 H. Nakano, Y. Hasegawa and T. Sakai: Magnetization jump in the Magnetization Process of the spin- $1/2$  Heisenberg Antiferromagnet on a Distorted Square-Kagome Lattice, *J. Phys. Soc. Jpn.* 84 (2015) 114703-1-6
- V-5 T. Sakai and H. Nakano: Exotic Field Induced Quantum Phase Transition of the Kagome Lattice Antiferromagnet, *Physics Procedia* 75 (2015) 821-828
- 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 坂井徹: A Quantum Phase Transition of the  $S=1/2$  Distorted Kagome-Lattice Antiferromagnet in Magnetic Field、日本原子力研究開発機構・先端基礎研究センター・セミナー (東海、2015年6月)
- V-8 T. Sakai and H. Nakano: Novel Field Induced Quantum Phase Transition of the Kagome Lattice Antiferromagnet, International Conference on Magnetism (Barcelona, Spain, 2015年7月)
- V-9 T. Sakai: 招待講演、Quantum Spin Liquid in the Kagome-Lattice Antiferromagnet and Related Systems、International Workshop on Itinerant-Electron Magnetism (Kyoto, 2015年9月)
- V-10 坂井徹・中野博生・肘井敬吾・太田仁: カゴメ格子反強磁性体におけるスピギャップの有無の ESR による検証の可能性、日本物理学会 2015 年秋季大会 (関西大学、2015 年 9 月)
- V-11 坂井徹 スピンプラストラレーション系の新奇な量子現象、大阪府立大学・物理談話会 (大阪府立大学、2015 年 10 月)
- V-12 坂井徹・肘井敬吾・大久保晋・太田仁・中野博生・宮下精二: カゴメ格子反強磁性体におけるスピギャップの有無の ESR 禁制遷移による検証の可能性、電子スピサイエンス学会年会 (新潟・朱鷺メッセ、2015 年 11 月)
- V-13 中野博生・坂井徹: スピン  $S$  フラストラート磁性体の磁化過程、日本物理学会 2015 年秋季大会 (関西大学、2015 年 9 月)
- V-14 岡本清美・利根川孝・坂井徹: モノマー間相互作用と強磁性相互作用を含む歪んだダイヤモンド型スピ鎖、日本物理学会 2015 年秋季大会 (関西大学、2015 年 9 月)
- V-15 肘井敬吾・坂井徹・宮下精二・太田仁:  $S=1/2$  二量体量子スピ鎖における動的感受率の数値的研究 II、日本物理学会 2015 年秋季大会 (関西大学、2015 年 9 月)
- V-16 利根川孝・岡本清美・坂井徹: ボンド交代がある異方的  $S=2$  反強磁性鎖の基底状態相図、日本物理学会 2015 年秋季大会 (関西大学、2015 年 9 月)
- V-17 坂井徹・中野博生: カゴメ格子反強磁性体のスピギャップ問題、東京大学物性研短期研究会「スピ系物理の深化と最前線」(柏、2015 年 11 月)
- V-18 T. Sakai: 招待講演、Quantum Spin Liquid in the Kagome-Lattice Antiferromagnet、International Workshop on "Future Directions in Magnetism"、(三亜・中国、2015 年 12 月)
- V-19 T. Sakai and H. Nakano: Quantum Spin Liquid in the Kagome-Lattice Antiferromagnets、International USMM & CMSI Workshop: Frontiers of Materials and Correlated Electron Science —from Bulk to Thin Films and Interfaces (東京、2016 年 1 月)
- V-20 坂井徹: 量子スピ液体の数値的研究、兵庫県立大学物質科学科合同セミナー (兵庫県立大学理学部、2016 年 1 月)

- V-21 T. Sakai and H. Nakano: Quantum Spin Liquid of the Kagome-Lattice Antiferromagnets, Asia-Pacific Workshop (APW)-CEMS Joint Workshop (埼玉県和光市、2016年1月)
- V-22 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、量子スピンの系研究会 (福井、2016年1月)
- V-23 坂井徹: 大規模数値対角化によるスピンのフラストレーション系の研究、第8回東北大学研究会「金属錯体の固体物性最前線 – 金属錯体と固体物性物理と生物物理の連携新領域を目指して –」(仙台、2016年2月)
- V-24 中野博生、長谷川泰正、坂井徹: 数値対角化法による歪んだ正方カゴメ格子ハイゼンベルク反強磁性体の磁化ジャンプ、日本物理学会第71回年次大会 (東北学院大学、2016年3月)
- V-25 岡本清美、利根川孝、坂井徹: 歪んだダイヤモンド型スピンの鎖の歪みパターンと基底状態相図、日本物理学会第71回年次大会 (東北学院大学、2016年3月)
- V-26 引原俊哉、利根川孝、岡本清美、坂井徹、桃井勉: 2つの  $S=1/2$  スピンをユニットとしたフラストレート量子スピンの系厳密基底状態、日本物理学会第71回年次大会 (東北学院大学、2016年3月)
- V-27 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、日本物理学会第71回年次大会 (東北学院大学、2016年3月)
- V-28 坂井徹、中野博生: カゴメ格子反強磁性体のスピンのギャップ問題、日本物理学会第71回年次大会 (東北学院大学、2016年3月)
- VI-1 坂井徹: 量子ビームと計算科学、SPring-8 シンポジウム (九州大学伊都キャンパス、2015年9月)
- VI-2 坂井徹: SPring-8 と京コンピュータを利用した強相関電子系の研究、第1回放射光産業利用支援講座 放射光施設の産業利用 (姫路じばさんセンター、2015年10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: スピンのナノチューブの数値的研究

## 科学研究費補助金等

兵庫県立大学特別研究助成金 (先導的プロジェクト研究) 平成 27 年度

研究課題 低次元磁性体における量子スピン液体の理論的・計算科学的研究

研究代表者 坂井 徹