

## 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  
Shima, N., Makoshi, K.

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  
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。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 空間依存性をもつ超伝導の磁場によるchiral安定性

#### Chiral Stability of Spatial Dependent Superconductivity in Magnetic Field

兼安 洋乃  
Kaneyasu, H.

バルク状態として秩序変数軌道部分に対称性  $k_x + ik_y$  を含む chiral 超伝導状態を仮定し、金属界面の効果などにより空間依存性が生じて、且つ non-chiral な超伝導状態となる場合の秩序変数の磁場による変化を、Ginzburg-Landau 理論に基づいて調べた。磁場による chiral 安定性、常磁性 chiral 電流、及び chirality の空間変化を、スーパーコンピューターを用いた数値解析から示し、秩序変数の磁場方向による磁場依存性の違いを自由エネルギーの磁場方向による磁場依存性の違いから説明した。数値計算から求めた秩序変数の温度-磁場相図は、共晶系  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4\text{-Ru}$  の実験で示されているトンネル微分コンダクタンスでのゼロバイアスピークが生じる磁場  $H^*$  の、磁場方向による磁場依存性の違いと整合性をもつ。この整合性から、 $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  のバルク相が chiral 超伝導状態である可能性が考えられる。さらに最近の Knight-shift の実験事実を合わせた考察から、 $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  のバルク相は秩序変数が  $k_x + ik_y$  を含む  $d_{xz} + id_{yz}$ ;  $k_z(k_x + ik_y)$  が候補として挙げられる。更に、この共晶系  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4\text{-Ru}$  を対象とした non-chiral から chiral 状態への変化と、一軸圧力による  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  の超伝導変化とを比較して、その類似点の説明を行った。

### 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に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 M.Fujiwara, N.Shima, K.Makoshi and T.Sakai, Analysis of Rashba Effect on Au(111) Model Surface, 2019, J.Phys.Soc.Jpn. 88, 034604
- I-2 藤原聖基 学位論文 固体表面におけるラシュバ効果の解析 (兵庫県立大学、2019年6月)
- III-1 兼安洋乃,「共晶系  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4\text{-Ru}$  の 3-Kelvin 相における界面超伝導の磁場誘起カイラル転移」,JHPCN:学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点,第10回 シンポジウム 2018年7月.
- III-2 榎田裕也,兼安洋乃,野村拓司,長谷川泰正,坂井徹,シグリスト マンフレッド,「共晶系  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4\text{-Ru}$  の 3K 相超伝導に対する磁場の効果」,日本物理学会 2018 年秋季大会(同志社大学、2018年9月)
- III-3 榎田裕也,兼安洋乃,野村拓司,長谷川泰正,坂井徹,シグリスト マンフレッド,

- 「共晶系  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4\text{-Ru}$  の 3-Kelvin 相における界面超伝導の磁場誘起カイラル転移」, 京大基研研究会「スピン系物理の最前線」(京都大学基礎物理学研究所、2018年11月)
- III-4 兼安洋乃, 「共晶系  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4\text{-Ru}$  の 3-Kelvin 相における界面超伝導の磁場誘起カイラル転移」, 大阪大学サイバーメディアセンター公募型利用制度成果報告会 2019年3月.
- III-5 榎田裕也, 兼安洋乃, 野村拓司, 長谷川泰正, 坂井徹, シグリスト マンフレッド, 「共晶系  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4\text{-Ru}$  の 3-Kelvin 超伝導相における磁場誘起 chiral 転移」, 日本物理学会第 74 回年次大会 (九州大学、2019年3月)
- IV-1 T. Tonegawa, T. Hikihara, K. Okamoto, S. C. Furuya and T. Sakai: Ground-State Phase Diagram of an Anisotropic  $S=1/2$  Ladder with Different Interactions, *J. Phys. Soc. Jpn.* 87 (2018) 104002-1-11
- IV-2 R. Yamamokuchi, K. Okamoto and T. Sakai: Field-Induced Spin Nematic Phase in the  $S=1$  Anisotropic Spin Ladder, *Proceedings of 2018 16<sup>th</sup> International Conference on Megagauss Magnetic Field Generation and Related Topics*, 8722674-1-4
- IV-3 橘祐汰, 坂井徹: ツイストした  $S=1/2$  三本鎖スピントラップにおける格子ひずみによる量子相転移, 日本物理学会 2018 年秋季大会(京田辺、2018 年 9 月)
- IV-4 岡本清美、利根川孝、坂井徹:  $S=1$  強磁性・反強磁性ボンダ交代鎖の基底状態相図: 摂動論、日本物理学会 2018 年秋季大会(京田辺、2018 年 9 月)
- IV-5 利根川孝、岡本清美、鍋木誠、坂井徹:  $S=1$  強磁性・反強磁性ボンダ交代鎖の基底状態相図: 数値計算、日本物理学会 2018 年秋季大会(京田辺、2018 年 9 月)
- IV-6 山之口諒、岡本清美、坂井徹: 異方性のある  $S=1$  スピンラダー系における量子相転移、日本物理学会 2018 年秋季大会(京田辺、2018 年 9 月)
- IV-7 上野雄熙, 坂井徹, 岡本清美:  $S=1/2$  歪んだダイヤモンド鎖の  $1/3$  プラトール機構の解析, 日本物理学会 2018 年秋季大会(京田辺、2018 年 9 月)
- IV-8 山之口諒、岡本清美、坂井徹:  $S=1$  スピンラダー系における磁場誘起スピンネマティック相, 物理学会第 74 回年次大会 (九州大学、2019 年 3 月)
- IV-9 利根川孝, 岡本清美, 鍋木誠, 坂井徹:  $S=1$  強磁性・反強磁性ボンダ交代鎖の基底状態相図: 数値計算 II、物理学会第 74 回年次大会 (九州大学、2019 年 3 月)
- IV-10 岡本清美, 利根川孝, 中村統太, 坂井徹: ダイヤモンド型スピン鎖の歪みパターンと磁化プラトール II, 物理学会第 74 回年次大会(九州大学、2019 年 3 月)
- IV-11 上野雄熙, 坂井徹, 岡本清美:  $S=1/2$  歪んだダイヤモンド鎖の  $1/3$  プラトール機構の相図, 物理学会第 74 回年次大会 (九州大学、2019 年 3 月)
- IV-12 橘祐汰, 坂井徹, 岡本清美: リング交換相互作用のある三本鎖スピンラダーの量子相転移、物理学会第 74 回年次大会 (九州大学、2019 年 3 月)
- IV-13 坂井徹, 山本亮太, 善田知佑, 中野博生, 岡本清美:  $S=2$  反強磁性鎖の磁化プラトール, 物理学会第 74 回年次大会 (九州大学、2019 年 3 月)

- IV-14 藤尾和樹, 坂井徹, 岡本清美: 混合スピン鎖の磁化プラトー, 物理学会第74回年次大会 (九州大学, 2019年3月)
- IV-15 坂井徹: フラストレーション系の量子スピンネマティック相、新学術領域科研費 J-Physics: 多極子系伝導系の物理 平成30年度領域全体会議 (東北大学, 2018年5月)
- IV-16 T. Sakai: Field Induced Spin Nematic Phase of Low Dimensional Magnets, The 16<sup>th</sup> International Conference on Megagauss Magnetic Field Generation and Related Topics(Kashiwa, 2018年9月)
- IV-17 坂井徹: 低次元量子スピン系におけるスピンネマティック相、第12回物性科学領域横断研究会 (奈良先端科学技術大学院大学, 2018年11月)
- IV-18 T. Sakai: Field Induced Spin Nematic Phases in Low Dimensional Quantum Antiferromagnets, International Workshop on j-fermion Physics and Materials(ニュージーランド・ダニーデン, 2018年12月)
- IV-19 坂井徹: 低次元量子スピン系におけるスピンネマティック相、東大物性研短期研究会「量子多体効果が生み出す液晶的電子状態」(東京大学物性研究所, 2018年12月)
- IV-20 坂井徹: 低次元量子スピン系の磁場誘起スピンネマティック相、量子スピン系研究会 (東海村産業・情報プラザ, 2019年1月)
- IV-21 利根川孝、岡本清美、鏑木誠、坂井徹:  $S=1$  強磁性・反強磁性ボンダ交代鎖の基底状態相図、京大基研研究会「スピン系物理の最前線」(京都大学基礎物理学研究所, 2018年11月)
- IV-22 岡本清美、利根川孝、坂井徹: 脚相互作用が異なった異方的  $S=1/2$  2本脚梯子の基底状態相図、京大基研研究会「スピン系物理の最前線」(京都大学基礎物理学研究所, 2018年11月)
- IV-23 橋祐汰、坂井徹: ツイストした  $S=1/2$  三本鎖スピントラップにおける格子ひずみによる量子相転移、京大基研研究会「スピン系物理の最前線」(京都大学基礎物理学研究所, 2018年11月)
- IV-24 上野雄熙、岡本清美、坂井徹:  $S=1/2$  ダイヤモンドスピン鎖での  $1/3$  プラトー機構の解析、京大基研研究会「スピン系物理の最前線」(京都大学基礎物理学研究所, 2018年11月)
- IV-25 山之口諒、岡本清美、坂井徹: 異方性のある  $S=1$  スピンラダー系における量子相転移、京大基研研究会「スピン系物理の最前線」(京都大学基礎物理学研究所, 2018年11月)
- V-1 T. Sakai and H. Nakano: Quantum Spin Fluid Behaviors of the Kagome- and Triangular-Lattice Antiferromagnets, J. Phys.: Conf. Ser. 969 (2018) 012127-1-6
- V-2 A. Shimada, T. Sakai, H. Nakano and K. Yoshimurai: Spontaneous Magnetization of the Spin-1/2 Heisenberg Antiferromagnet on the Triangular Lattice with a Distortion, J. Phys.: Conf. Ser. 969 (2018) 012126-1-6

- V-3 H. Nakano and T. Sakai: Numerical Diagonalization Study of Magnetization Process of Frustrated Spin-1/2 Heisenberg Antiferromagnets in Two Dimensions -Triangular- and Kagome-Lattice Antiferromagnets-, J. Phys. Soc. Jpn. 87 (2018) 063706-1-5
- V-4 H. Nakano and T. Sakai: Precise Estimation of the S=2 Haldane Gap by Numerical Diagonalization, J. Phys. Soc. Jpn. 87 (2018) 105002-1-2
- V-5 H. Nakano and T. Sakai: Third Boundary of the Shastry-Sutherland Model by Numerical Diagonalization, J. Phys. Soc. Jpn. 87 (2018), 123702-1-5
- V-6 Y. Hasegawa, H. Nakano and T. Sakai: Metamagnetic jump in the spin-1/2 antiferromagnetic Heisenberg model on the square kagome lattice, Phys. Rev. B 98 (2018) 014404-1-9
- V-7 H. O. Jeschke, H. Nakano and T. Sakai: From kagome strip to kagome lattice: Realizations of frustrated S=1/2 antiferromagnets in Ti(III) fluorides, Phys. Rev. B 99 (2019) 140410(R)-1-6
- V-8 T. Sakai and H. Nakano: Ground state with nonzero spontaneous magnetization of the two-dimensional spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet with frustration, AIP ADVANCES 8 (2018) 101408-1-5
- V-9 坂井徹 : はじめに、領域 3, 8, 11 合同一般シンポジウム : 磁気励起に現れる量子多体効果 - 最近の進展 -, 日本物理学会 2018 年秋季大会(京田辺、2018 年 9 月)
- V-10 坂井徹、中野博生、野尻浩之 : 直交ダイマー系の量子相転移と ESR 禁制遷移、日本物理学会 2018 年秋季大会(京田辺、2018 年 9 月)
- V-11 中野博生、坂井徹 : 2 次元 S=1/2 フラストレート磁性体の磁化過程の数値対角化による研究、日本物理学会 2018 年秋季大会(京田辺、2018 年 9 月)
- V-12 中野博生、坂井徹 : Shastry-Sutherland 模型の大規模数値対角化による研究、日本物理学会 2018 年秋季大会(京田辺、2018 年 9 月)
- V-13 坂井徹、中野博生 : 磁化率解析法によるスピングャップ有無の判定、東大物性研短期研究会・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、2018 年 4 月)
- V-14 A. Shimada, H. Nakano, T. Sakai and K. Yoshimura: The Numerical Study of Quantum Phase Transitions of the Heisenberg Antiferromagnet on a Frustrated Two Dimensional Lattice, International Conference on Magnetism(ICM2018)(San Francisco, 2018 年 7 月)
- V-15 T. Sakai and H. Nakano: Ground state with nonzero spontaneous magnetization of the two-dimensional spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet with frustration, International Conference on Magnetism(ICM2018)(San Francisco, 2018 年 7 月)
- V-16 T. Sakai and H. Nakano: Exotic Quantum Spin Liquid of Kagome Lattice Antiferromagnet, International Conference on Coordination Chemistry (ICCC2018)(仙台、2018 年 8 月)

- V-17 T. Sakai: Numerical Diagonalization Study on the Kagome-Lattice Antiferromagnet and related systems, Institute Laue-Langevin Seminar(Grenoble, 2018年10月)
- V-18 T. Sakai: Numerical Diagonalization Study on Frustrated Quantum Spin Systems, Seminar of Field Theory and Condensed Matter(スイス連邦工科大ローザンヌ校、2018年10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 坂井徹、中野博生、野尻浩之:直交ダイマー系の量子相転移と ESR 禁制遷移、第 57 回電子スピンスイエンズ学会年会 (北海道大学、2018 年 11 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 T. Sakai and H. Nakano: Magnetization Process of the Triangular- and Kagome-Lattice Antiferromagnets, アメリカ物理学会マーチミーティング (ボストン、2019 年 3 月)
- V-23 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:兵庫県立大学理学部と SPring-8 の紹介、出前授業 (兵庫県立東播磨高等学校、2018 年 7 月)
- VI-2 坂井徹:放射光と計算物質科学、SPring-8 シンポジウム (姫路、2018 年 8 月)

## 大学院物質理学研究科

博士前期課程

榎田裕也:共晶系  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4\text{-Ru}$  の 3-Kelvin 超伝導相における磁場誘起カイラル転移

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の量子スピンネマティック相と新奇伝導の理論的・計算科学的研究

研究代表者 坂井 徹

- 3 兵庫県立大学平成30年度特別研究助成金（先導研究 B（異分野融合））  
研究課題 京コンピュータと SPring-8 による新しい高温超伝導体の物質設計  
研究代表者 坂井 徹
- 4 兵庫県立大学平成30年度特別研究助成金（若手）  
研究課題 スピン三重項超伝導－強磁性体接合系における近接効果による自発的電流現象  
研究代表者 兼安洋乃
- 5 大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム公募利用制度  
研究課題 共晶系  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4\text{-Ru}$  の 3-Kelvin 相における界面超伝導の磁場誘起カイラル転移  
研究代表者 兼安洋乃

## 受賞

Journal of the Physical Society of Japan 誌の「2018 Highly Cited Article 賞」  
(受賞論文) 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  
著者：中野博生・坂井徹