

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 自発磁化超伝導の磁化率と磁場誘起chiral転移

Spin susceptibility and field-induced chiral phenomena in chiral superconductor

兼安 洋乃
Kaneyasu, H.

D_{4h} 対称における E_u 既約の non-unitary な chiral 状態について、超伝導ギャップの水平ライン極小と磁化率温度変化における減少を計算で示した、又、不均一超伝導での磁場誘起 chiral 転移とそれに伴う常磁性電流、スクリーニング電流を Ginzburg-Landau 方程式から解析した。これらの理論結果を Sr_2RuO_4 の比熱の磁場角度依存性と NMR Knight-shift の温度依存性、及び Sr_2RuO_4 -Ru 共晶の $\text{Sr}_2\text{RuO}_4/\text{Ru}$ のトンネル微分コンダクタンスに現れるゼロバイアス異常の磁場依存性と比較した。考察として、non-unitary な chiral 状態は比熱の磁場角度依存性と矛盾せず、ゼロバイアス異常の磁場依存性を説明出来る。一方、磁化率の温度変化は減少を示すものの、実験で示されている低温での最小の値には下がりが足りない。これに対して E_g の chiral 状態では磁化率は充分減少し、超伝導ギャップの水平ラインノードは比熱の磁場角度依存性と矛盾せず、磁場誘起 chiral 転移も起こるためゼロバイアス異常の磁場依存性とも整合する。しかし、この chiral E_g の超伝導状態について Hubbard 模型を用いた Eliashberg 方程式の解析を行うと、 RuO_4 面間結合が弱い電子状態のため安定にならないという結果を得た。

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。2020年度は主に、五角形構造を含む格子系の数値的研究を推進した。また、2020年度は、この年度に運用を開始した「富岳」へのプログラムの移植も進め、2021年度以降の本格利用に向けて道を開いた。

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 坂井徹、岡本清美、利根川孝（神戸大）、野村清英（九州大）：リング交換相互作用のある三本鎖スピントチューブのスピネマティック液体、日本物理学会2020年秋季大会（オンライン開催、2020年9月）
- I-2 岡本清美、利根川孝（神戸大）、野村清英（九州大）、坂井徹：異方的 $S=1/2$ 梯子系におけるネマティックTLL相と周辺相間の相転移：摂動論、日本物理学会2020年秋季大会（オンライン開催、2020年9月）
- I-3 野村清英（九州大）、利根川孝（神戸大）、岡本清美、坂井徹：異方的 $S=1/2$ 梯子系におけるネマティックTLL相と周辺相間の相転移：ユニバーサリティ、日本物理学会2020年秋季大会（オンライン開催、2020年9月）
- I-4 利根川孝（神戸大）、岡本清美、野村清英（九州大）、坂井徹：異方的 $S=1/2$ 梯子系におけるネマティックTLL相と周辺相間の相転移：数値計算、日本物理学会2020年秋季大会（オンライン開催、2020年9月）
- I-5 T. Sakai: Spin Nematic Phase of the Quantum Spin Nanotube, JPS Conference Proceedings 29 (2020) 014004-1-5.
- I-6 T. Sakai and K. Okamoto: Spin Nematic Liquids of the $S = 1$ Spin Ladder in Magnetic Field, JPS Conference Proceedings 30 (2020) 011083-1-6.
- I-7 K. Okamoto, T. Tonegawa, M. Kaburagi and T. Sakai: Ground-State Phase Diagram of an Anisotropic $S = 1$ Ferromagnetic-Antiferromagnetic Bond-Alternating Chain, JPS Conference Proceedings 30 (2020) 011024-1-6.
- I-8 Y. Tachibana, Y. Ueno, T. Zenda, K. Okamoto and T. Sakai: Quantum Phase Transition of the Twisted Spin Tube, JPS Conference Proceedings 30 (2020) 011082-1-5.
- I-9 T. Zenda, Y. Tachibana, Y. Ueno, K. Okamoto and T. Sakai: Quantum Phase Transitions of the Distorted Diamond Spin Chain, JPS Conference Proceedings 30 (2020) 011084-1-5.
- I-10 Y. Ueno, T. Zenda, Y. Tachibana, K. Okamoto and T. Sakai: Magnetization Plateau of the Distorted Diamond Spin Chain, JPS Conference Proceedings 30 (2020) 011085-1-5.
- I-11 T. Sakai: Quantum Spin Nematic Liquid of the $S=1$ Antiferromagnetic Chain with the Biquadratic Interaction, 65th Annual Conference on Magnetism and Magnetic Materials (USA、オンライン開催、2020年11月)
- I-12 T. Sakai: Symmetry protected topological phase of the $S=2$ quantum spin chain in magnetic field, 第4回QST国際シンポジウム（オンライン開催、2020年11月）
- I-13 坂井徹：Theoretical and computational research to search for novel quantum spin phases realized by hypermaterials, 新学術領域ハイパーマテリアル 第3回領域WEB会議（オンライン開催、2020年5月）
- I-14 坂井徹：Shastry-Sutherland Model の新しい量子相転移, 新学術領域ハイパーマテリアル 第4回領域WEB会議（オンライン開催、2020年7月）

- I-15 坂井徹：直交ダイマー系の量子相転移，神戸大学分子フォトサイエンスセンター研究会「第4回スピン系物理研究会 スピン系研究の開拓前線」（オンライン開催、2020年11月）
- I-16 T. Sakai: Quantum spin nematic liquid in the $S=1$ antiferromagnetic chain with the biquadratic interaction, *AIP Advance* 11 (2021) 015306-1-4.
- I-17 坂井徹：直交ダイマー系の量子相転移，第15回量子スピン系研究会（オンライン開催、2021年1月）
- I-18 T. Sakai, K. Okamoto, T. Tonegawa (神戸大) : Magnetization plateau of the $S=2$ Antiferromagnetic Heisenberg chain with anisotropies, *American Physical Society: March Meeting* (オンライン開催、2021年3月)
- I-19 H. Ohta (神戸大) and T. Sakai ed. : *Applied Magnetic Resonance* 誌 Vol. 52 issue 4 (特集号) “Terahertz Spectroscopy”
- I-20 坂井徹、寺村まどか、仁山倫太郎、古内理人：bi-quadratic相互作用のある反強磁性鎖の磁化過程，日本物理学会第76回年次大会（2021年）（オンライン開催，2021年3月）
- I-21 岡本清美、利根川孝（神戸大）、野村清英（九州大）、坂井徹： $S=1/2$ 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：摂動論，日本物理学会第76回年次大会（2021年）（オンライン開催，2021年3月）
- I-22 利根川孝（神戸大）、岡本清美、野村清英（九州大）、坂井徹： $S=1/2$ 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，日本物理学会第76回年次大会（2021年）（オンライン開催，2021年3月）
- I-23 T. Sakai: EPR Theories for Selection Rules to Observe the Spin Gap, *Applied Magnetic Resonance* 52 (2021) 507-521.
- I-24 T. Sakai: 【招待講演】 Quantum Spin Nematic Phase of Low-Dimensional Magnets, *The 1st Asian Conference on Molecular Magnetism* (オンライン開催、2021年3月)
- II-1 H. Kaneyasu, Y. Enokida, T. Nomura(QST,SPring-8), Y. Hasegawa, T. Sakai, and M. Sigrist(ETH Zurich): “Features of chirality generated by paramagnetic coupling to magnetic fields in the 3K-phase of Sr_2RuO_4 ”, *JPS Conference Proceedings, JPS Conf. Proc.* 30, 011039-1-6 (2020).
- II-2 S. Yohisda(大阪大), A. Endo(大阪大), H. Kaneyasu, and S. Date(大阪大): “First experience of accelerating a field-induced chiral transition simulation using the SX-Aurora TSUBASA”, *Supercomputing Frontiers and Innovations Vol.8 No.2; Special Issue on Advance Methods and Technologies on Vector Computing and Data-Processing Using NEC SX-Aurora TSUBASA Architecture.* 8 (2) 27-42 (2021).
- II-3 H. Kaneyasu, K. Otsuka, and Y. Hasegawa: “Spin susceptibility and field-induced chiral stability in non-unitary superconductivity of E_u for Sr_2RuO_4 ”. 査読中.
- II-4 兼安洋乃：「超伝導の磁場誘起chiral転移と常磁性電流 ～軌道変化と磁場との結合が織りなす現象～」，大阪大学サイバーメディアセンター

- HPSC(High-Performance-Scientific-Computing)-News, vol.10, (2021) [依頼, 研究紹介動画]. <http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/hpsc-news/vol10/>
- II-5 H. Kaneyasu: “Computational simulation of chiral transition and paramagnetic current induced by paramagnetic coupling in chiral superconductor”, Workshop on Sustained Simulation Performance (WSSP 31), 17 Mar. 2021, HLRS, University of Stuttgart, Germany, ONLINE [招待講演, 口頭].
- II-6 H. Kaneyasu, K. Otsuka, S. Date(大阪大), and Y. Hasegawa: “Spin susceptibility and field-induced chiral stability in non-unitary chiral superconductivity”, American Physical Society (APS) March Meeting 2021, 2021年3月19日, ONLINE [ポスター].
- II-7 兼安洋乃:「自発磁化軸に垂直な磁場下における自発磁化スピン三重項超伝導と電流」, JHPCN 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 第12回 シンポジウム, 2020年7月9日, ONLINE [依頼, ポスター].
- II-8 兼安洋乃, 大塚剛生, 長谷川泰正:「non-unitary な自発磁化超伝導と電流」日本物理学会 2020年秋季大会, 2020年9月8日, ONLINE [ポスター].
- II-9 大塚剛生, 長谷川泰正, 伊達進(大阪大), 兼安洋乃:「Non-unitary な自発磁化超伝導における磁化率と電流」: 基研研究会「高温超伝導・非従来型超伝導研究の最前線:多様性と普遍性」, 2020年9月27日, ONLINE [ポスター].
- II-10 大塚剛生, 長谷川泰正, 兼安洋乃:「Non-unitary 超伝導における磁化率と磁場誘起 chiral 安定化」, 日本物理学会 第76回年次大会, 2021年3月12日, ONLINE [ポスター].
- II-11 兼安洋乃:「自発磁化超伝導と磁場依存性」, 兵庫県立大物性合同セミナー(物質科学科 物性グループ合同), 2021年1月29日, ONLINE [口頭].
- II-12 兼安洋乃: 研究紹介「超伝導の理論研究」, 第2回太田学長と女性研究者の集い～女性研究者の研究活動を知る～, 2020年12月22日, 兵庫県立大学本部(神戸学園都市キャンパス)[口頭].
- III-1 中野博生, 坂井徹: 直交ダイマー格子反強磁性体の大規模数値対角化による研究, 日本物理学会第76回年次大会 (2021年) (オンライン開催, 2021年3月)
- III-2 山田尊生, 古内理人, 中野博生, 兼安洋乃, 岡本清美, 利根川孝(神戸大), 中野博生, 坂井徹: biquadratic interactionのあるS=2反強磁性鎖の対称性に守られたトポロジカル相, 日本物理学会第76回年次大会 (2021年) (オンライン開催, 2021年3月)
- III-3 中西亮介, 古内理人, 長谷川泰正, 中野博生, 兼安洋乃, 岡本清美, 利根川孝(神戸大), 坂井徹: 異方的ボンド交代鎖のスピンネマティック相, 日本物理学会第76回年次大会 (2021年) (オンライン開催, 2021年3月)
- III-4 古内理人, 中野博生, 坂井徹: フローレット五角形格子上のハイゼンベルク反強磁性体の磁化過程に関する理論的研究, 日本物理学会第76回年次大会 (2021年) (オンライン開催, 2021年3月)
- III-5 古内理人, 中野博生, 坂井徹: 五角形格子上のハイゼンベルク反強磁性体の数値的研究, 日本物理学会 2020年秋季大会 (オンライン開催, 2020年9月)

- III-6 本橋樹生（東京理科大学理工），井上晃来（東京理科大学理工），福元好志（東京理科大学理工），中野博生：球体カゴメ系{W72V30}の低温比熱へのランダムネス，およびジャロシンスキー・守谷相互作用の影響，日本物理学会 2020 年秋季大会（オンライン開催，2020 年 9 月）
- III-7 中野博生：Oakforest-PACS における厳密対角化大規模並列計算で拓く量子磁性の新奇量子状態の発現機構の解明，第 7 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会(オンライン開催，2020 年 10 月)
- III-8 中野博生：五角形構造を有する磁性体の異常量子現象解明の新展開，第 7 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会(オンライン開催，2020 年 10 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 2020(オンライン開催、2020 年 9 月)

大学院物質理学研究科

博士前期課程

善田知佑：歪んだダイヤモンド型スピン鎖の量子相転移

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

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）（平成 28～令和 2 年度）
基盤研究(C) 課題番号:16K05418
研究課題 大規模並列計算によるフラストレーションが誘起する磁性体の異常量子物性の新展開
研究代表者 中野博生
- 2 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チック励起の理論的・数値的研究
研究代表者 坂井徹
研究分担者 中野博生
- 3 文部科学省科学研究費補助金 新学術領域研究「ハイパーマテリアル」公募研究
課題番号:20H05274
研究課題 ハイパーマテリアルで実現する新奇な量子スピン相を探索する理論的・計算科学的研究
研究代表者 坂井徹
- 4 兵庫県立大学令和 2 年度特別研究助成金研究
研究課題 幾何学的フラストレーションを有する量子磁性体の異常現象の計

算科学的手法による解明

研究代表者 中野博生

- 5 HPCI「富岳」試行的利用課題（早期利用課題）（2020年度） 課題番号:hp200173

研究課題 量子格子模型を表す疎行列の数値対角化における大規模並列計算の
挑戦

研究代表者 中野博生

- 6 令和2年度 HPCI システム利用研究課題(2020年度) 課題番号:hp200023

研究課題 Oakforest-PACSを活用した大規模並列シミュレーションで解明する
量子多体系の新奇量子現象

研究代表者 中野博生

- 7 HPCI「富岳」試行的利用課題（2020年度） 課題番号:hp200216

研究課題 UTe_2 を対象とした自発磁化超伝導の磁場依存性と電流

研究代表者 兼安洋乃

- 8 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 学際大規模情報基盤共同利用・共同研
究拠点(JHPCN) 公募型共同研究一般課題（2020年度） 課題番号 jh200032-NAH

研究課題 自発磁化軸に垂直な磁場下における自発磁化スピン三重項超伝導と
電流

研究代表者 兼安洋乃

- 9 兵庫県立大学海外研究員助成（2020年度）

研究課題 スピン三重項超伝導-強磁性接合における近接効果と電流特性

研究代表者 兼安洋乃

- 10 日本学術振興会 研究拠点形成事業「酸化物超伝導体・強磁性体界面と微細構造素
子での新奇超伝導開拓の国際ネットワーク」

参加研究者(平成29年10月～令和3年度) 兼安洋乃