

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 不均一な超伝導状態の磁場誘起 chiral 現象

Field-induced Chiral Phenomena in Inhomogeneous Superconductivity

兼安 洋乃
Kaneyasu, H.

不均一系の磁場誘起 chiral 現象について、Ginzburg-Landau 理論に基づいた研究を行った。chiral 状態を表す 2 成分の超伝導秩序変数をもつ Ginzburg-Landau 方程式を数値的に解いて、磁場中の秩序変数成分と超伝導電流の温度・磁場依存性を解析した。超伝導体端からの距離により変化する超伝導臨界温度をもつ不均一モデルを設定して、chiral 磁化軸に平行な磁場を印加した場合を調べた。この系で点群 D_{4h} の E_u 既約における chiral 状態について、不均一状態での磁場誘起 chiral 転移とそれに伴う常磁性 chiral 電流、スクリーニング電流の温度・磁場依存性を解析した。これらの磁場誘起 chiral 現象は、結晶構造が点群 D_{4h} に属する Sr_2RuO_4 や D_{2h} の UTe_2 などにおいて、超伝導が不均一な場合に可能性があることを考察した。

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。2021年度は、以前から取り組んできた五角形構造を含む格子系の数値的研究を更に推進すると共に、2021年度に正式運用を開始した「富岳」を大規模に用いて量子ハイゼンベルク模型の諸現象の解明に資する数値計算を行った。

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、中西亮介、山田尊生、古内理人、中野博生、岡本清美：Biquadratic 相互作用のある反強磁性鎖における磁場誘起スピン液体、日本物理学会 2021 年秋季大会（オンライン開催、2021 年 9 月）
- I-2 中西亮介、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）、坂井徹：異方的ボンド交代鎖の磁化過程、日本物理学会 2021 年秋季大会（オンライン開催、2021 年 9 月）
- I-3 山田尊生、中西亮介、古内理人、中野博生、兼安洋乃、岡本清美、利根川孝（神戸大）、坂井徹：Biquadratic 相互作用のある $S=2$ 反強磁性鎖の磁化プラトー、日本物理学会 2021 年秋季大会（オンライン開催、2021 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：脚相互作用が互い違いに交代した $S=1/2$ 梯子模型におけるネマティック TLL 相、日本物理学会 2021 年秋季大会（オンライン開催、2021 年 9 月）
- I-5 T. Sakai: Field induced spin nematic liquid in the 1D anisotropic quantum spin systems, アメリカ物理学会 マーチミーティング（シカゴ・ハイブリッド開催、2022 年 3 月）
- I-6 H. Ohta(神戸大) and T. Sakai: The Editorial Preface: Applied Magnetic Resonance 52 (2021) 263-265.
- I-7 利根川孝（神戸大）、坂井徹：次近接相互作用をもつ $S=1/2$ 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、日本物理学会第 77 回年次大会（2022 年）（オンライン開催、2022 年 3 月）
- I-8 T. Sakai, H. Nakano, R. Furuchi and K. Okamoto: Field-Induced Quantum Spin Nematic Liquid Phase in the $S=1$ Antiferromagnetic Heisenberg Chain with Additional Interactions, Journal of Physics: Conference Series 2164 (2022) 012030-1-4.
- I-9 T. Sakai, K. Okamoto, H. Nakano and R. Furuchi: Magnetization plateau of the distorted diamond spin chain with anisotropic ferromagnetic interaction, AIP Advances 12 (2022) 035030-1-4.
- I-10 R. Furuchi, H. Nakano and T. Sakai: A numerical study of the $S=1/2$ Heisenberg antiferromagnet on the Lieb lattice with frustrating interactions, Asia-Pacific Conference on Condensed Matter Physics 2021 (AC2MP2021)(韓国・オンライン開催、2021 年 12 月)
- I-11 T. Sakai: Magnetization Plateau of the Distorted Diamond Spin Chain with the Anisotropic Ferromagnetic Interaction、Joint MMM-Intermag Conference（ニューオーリンズ・ハイブリッド開催、2021 年 11 月）
- I-12 T. Sakai: Quantum Phase Transition of the Shastry-Sutherland System and ESR Forbidden Transition, 国際会議 ISMAR APNMR NMRST SEST 2021（オンライン開催、2021 年 8 月）
- I-13 T. Sakai, R. Furuchi and H. Nakano : Numerical Study on Frustrated Quantum Spin Systems on Two-Dimensional Lattices Including

- Pentagonal Structure, Material Research Meeting 2021 (MRM2021) (Yokohama ・ハイブリッド開催、2021年12月)
- I-14 中西亮介、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)、坂井徹：異方的ボンド交代鎖の磁場誘起スピネマティック液体、日本物理学会第77回年次大会(2022年)(オンライン開催、2022年3月)
- I-15 山田尊生、中西亮介、古内理人、中野博生、兼安洋乃、岡本清美、利根川孝 (神戸大)、坂井徹：異方性 S=2 反強磁性鎖の磁化プラトー、日本物理学会第77回年次大会(2022年)(オンライン開催、2022年3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：異方的一次元量子スピン系の磁場誘起スピネマティック液体、第16回量子スピン系研究会(オンライン開催、2021年12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、中西亮介、山田尊生、古内理人、中野博生、岡本清美：異方的強磁性相互作用のある歪んだダイヤモンドスピン鎖の磁化プラトー、日本物理学会第77回年次大会(2022年)(オンライン開催、2022年3月)
- I-21 T. Sakai: EPR Theories for Selection Rules to Observe the Spin Gap, Applied Magnetic Resonance 52 (2021) 507-521.
- I-22 T. Sakai: Field-Induced Quantum Spin Nematic Liquid Phase in the S=1 Antiferromagnetic Heisenberg Chain with Additional Interactions, International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (SCES) 2021 (ブラジル・オンライン開催、2021年9月)
- II-1 H. Kaneyasu, K. Otuka, S. Haruna, S. Yoshida (大阪大), S. Date(大阪大): “Simulation of Field-induced Chiral Phenomena in Inhomogeneous Superconductivity”, Sustained Simulation Performance 2021; Proceedings of the Joint Workshop on Sustained Simulation Performance, 31th and 32nd, Springer (印刷中)【招待】.
- II-2 S. Yoshida(大阪大), A. Endo(奈良先端大), H. Kaneyasu, S. Date(大阪大): “First Experience of Accelerating a Field-Induced Chiral Transition Simulation Using the SX-Aurora TSUBASA”, Supercomputing Frontiers and Innovations 8(2) 43-58 (2021).
- II-3 兼安洋乃, 春名信吾, 大塚剛生: “Ginzburg-Landau理論に基づいた数値シミュレーションによる超伝導の磁場依存性の研究”, 大阪大学サイバーメディアセンター HPCジャーナル No.12, (印刷中).
- 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 News (High-Performance-Scientific-Computing News), vol.10 (2021), 研究紹介映像.
- II-5 大塚剛生, 春名信吾, 兼安洋乃: “Ginzburg-Landau 理論に基づいた数値シミュレーションによる超伝導の磁場依存性の研究”, 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, 2022年3月10日 大阪大学サイバーメディアセンター [口頭講演].
- II-6 兼安洋乃: “不均一な超伝導状態における磁場誘起 chiral 転移と常磁性電流”, 京都大学基礎物理学研究所研究会「非自明な電子状態が生み出す超伝導現象の最前線: 新たな挑戦と展望」, 2021年12月23日 京都大学基礎物理学研究所 [口頭講演].
- II-7 K. Otsuka, S. Haruna, H. Kaneyasu: “Spin susceptibility and field-induced chiral stability in non-unitary superconductivity”, Oxide Superspin2021(OSS2021), JSPS-EPSRC-CNR/SPIN-IBS CORE-TO-CORE WORKSHOP 2021年12月15日 [ポスター講演].
- II-8 兼安洋乃: “ UTe_2 を対象とした自発磁化超伝導の磁場依存性と電流 (「富岳」試行的利用課題)”, 第8回 HPCI システム利用研究課題 成果報告会 2021年10月29日 [ポスター講演].
- II-9 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13回 シンポジウム 2021年7月9日 [口頭講演].
- III-1 Rito Furuchi, Hiroki Nakano, Norikazu Todoroki, T. Sakai: Magnetization process of the $S = 1/2$ Heisenberg antiferromagnet on the floret pentagonal lattice, Journal of Physics Communications 5 (2021) 125008-1-10.
- III-2 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, 日本物理学会第77回年次大会 (2022年) (オンライン開催, 2022年3月)
- III-3 古内理人, 中野博生, 坂井徹: リープ格子ハイゼンベルク反強磁性体のフェリ磁性状態に対するフラストレーション効果の数値的研究, 日本物理学会第77回年次大会 (2022年) (オンライン開催, 2022年3月)
- III-4 本橋樹生 (東京理科大理工), 森田克洋 (東京理科大理工), 福元好志 (東京理科大理工), 中野博生: 球体カゴメ系 $\{W72V30\}$ の低温磁気帯磁率のジャロシンスキー・守谷相互作用およびボンドランダムネスの効果, 日本物理学会 2021年秋季大会 (オンライン開催, 2021年9月)
- III-5 古内理人, 中野博生, 坂井徹: フローレット五角形格子ハイゼンベルク反強磁性体の磁場中相図に関する数値的研究, 日本物理学会 2021年秋季大会 (オンライン開催, 2021年9月)
- III-6 中野博生: 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, 第8回 HPCI システム利用研究課題 (オンライン開催, 2021年

10月)

- III-7 中野博生: 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の研究, 第8回 HPCI システム利用研究課題(オンライン開催, 2021年10月)
- III-8 中野博生: 【招待講演】富岳で実現する量子多体系の数値対角化の大規模並列シミュレーション、オンライン研究会: 量子多体計算のフロンティア(オンライン開催、2022年3月)
- IV-1 坂井徹: 兵庫県立大学公開講座: ときめくサイエンス「電子スピンと超伝導」(2021年8月)
- IV-2 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、2021年9月)

大学院物質理学研究科

博士後期課程

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

博士前期課程

大塚剛生: 超伝導における時間反転対称性の破れた状態の磁場誘起現象

中西亮介: 量子スピン系におけるスピンネマティック液体の理論的・計算学的研究

山田尊生: 低次元磁性体における対称性に守られたトポロジカル相の理論的・計算科学的研究

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)(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
- 2 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
- 3 令和3年度 HPCI システム利用研究課題(2021年度A期) 課題番号:hp210068
研究課題 巨大次元疎行列の数値対角化の並列シミュレーションへの挑戦
研究代表者 中野博生

- 4 令和3年度 HPCI システム利用研究課題(2021年度 A期) 課題番号:hp210127
研究課題 フラストレート磁性体に現れる量子相転移の計算科学的研究
研究代表者 坂井 徹
研究副代表者 中野博生

- 5 令和3年度 HPCI システム利用研究課題(2021年度 B期) 課題番号:hp210201
研究課題 大規模並列シミュレーションによる非周期性フラストレート磁性体の理論的研究
研究代表者 中野博生

- 6 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 (JHPCN) 2021年度 学際大規模情報 基盤共同利用・共同研究拠点 (JHPCN) 萌芽型共同研究課題 2021年6月-2022年3月
研究課題 Ginzburg-Landau 理論に基づいた数値シミュレーションによる超伝導の磁場依存性の研究
研究代表者 兼安 洋乃

- 7 大阪大学サイバーメディアセンター 2021年度 大規模計算機システム公募型利用制度 2021年6月 - 2022年3月
研究課題 Ginzburg-Landau 理論に基づいた数値シミュレーションによる超伝導の磁場依存性の研究
研究代表者 兼安 洋乃

- 8 日本学術振興会 研究拠点形成事業 2017年10月 - 2022年3月, 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 兼安洋乃

- 9 FOCUS [兵庫県・神戸市] 計算科学分野研究教育拠点 (COE) 形成推進事業
課題 4「テンソルネットワーク(TN)スキームに基づく異分野融合型計算科学研究」
研究分担者 坂井 徹