

Theoretical Physics I

数理解析学

I 低次元磁性体の新奇量子現象

Novel Phenomena of Low-Dimensional Magnets

坂井 徹・中野博生
Sakai, T., Nakano, H.

量子効果の強い低次元磁性体においては、いくら温度を下げても、従来の長距離秩序が生じずに、さまざまな新奇量子現象が起きることが知られている。高温超伝導の起源として提唱された量子スピン液体、従来の長距離秩序と量子スピン液体の間とも言えるべきスピネマティック相、対称性に守られたトポロジカル相などがあげられる。本研究グループでは、いくつかの磁気異方性やスピントラステーションのある低次元磁性体の磁化過程における、新しいメカニズムによるスピネマティック相や、磁場誘起スピンギャップ（磁化プラトー）相などについて、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 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。2023年度も、「富岳」の継続利用で大規模並列計算を実施し、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実現した。特に「富岳」における全系計算で実施した高プロセス並列ジョブの限界的状況を的確に捉え、また、量子スピン系の対角化計算が200万を超えるプロセス並列数でも並列化により加速させることができることを実証した。この成果は、「富岳」のようなスーパーコンピュータシステムで大規模並列シミュレーションを発展させていく上で基盤となる知見となった。

III 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 Toru Sakai, Kiyomi Okamoto, Kouichi Okunishi, Masaru Hashimoto, Tomoki Houda, Rito Furuchi, Hiroki Nakano: Translational symmetry broken magnetization plateau of the $S=1$ antiferromagnetic Heisenberg chain with competing anisotropies, *Physical Review B* 108, 174435 (2023).
- I-2 Hironori Yamaguchi, Hiroki Takahashi, Takashi Kawakami, Kiyomi Okamoto, Toru Sakai, Takeshi Yajima, and Yoshiki Iwasaki: Spin-Peierls transition to a Haldane phase, *Physical Review B* 107, L161111 (2023).
- I-3 T. Sakai, H. Nakano, R. Fruchi and K. Okamoto: Spin Nematic Liquid of the $S=1/2$ Distorted Diamond Spin Chain in Magnetic Field, *AIP Advances* 13 (2023) 015313.
- I-4 Toru Sakai, Rito Furuchi, Hiroki Nakano, Kiyomi Okamoto: Quantum spin nematic liquid in the low-dimensional anisotropic magnets $-S=1/2$

- delta spin chain with the anisotropic ferromagnetic interaction in magnetic field-, SciPost Physics Proceedings 11, 011 (2023).
- I-5 Toru Sakai, Rito Furuchi, and Hiroki Nakano: Quantum Phase Transition of the Shastry – Sutherland System and ESR Forbidden Transition, Proceedings of the 29th International Conference on Low Temperature Physics (LT29), JPS Conf. Proc. **38**, 011155 [6 pages] (2023).
- I-6 Ryosuke Nakanishi, Takaharu Yamada, Rito Furuchi, Hiroki Nakano, Hirono Kaneyasu, Kiyomi Okamoto, Takashi Tonegawa, Toru Sakai: Field-Induced Spin Nematic Liquid of the $S = 1/2$ Bond-Alternating Chain with the Anisotropy, Proceedings of the 29th International Conference on Low Temperature Physics (LT29), JPS Conf. Proc. **38**, 011156 [6 pages] (2023).
- I-7 Takaharu Yamada, Ryosuke Nakanishi, Rito Furuchi, Hiroki Nakano, Hirono Kaneyasu, Kiyomi Okamoto, Takashi Tonegawa, Toru Sakai: Translational Symmetry Broken Magnetization Plateau of the $S=2$ Antiferromagnetic Chain with Anisotropies, Proceedings of the 29th International Conference on Low Temperature Physics (LT29), JPS Conf. Proc. **38**, 011163 [6 pages] (2023).
- I-8 Takashi Tonegawa, Kiyomi Okamoto, Kiyohide Nomura, Toru Sakai: Nematic Tomonaga-Luttinger Liquid Phase in an $S = 1/2$ Ferromagnetic-Antiferromagnetic Bond-Alternating Chain, Proceedings of the 29th International Conference on Low Temperature Physics (LT29), JPS Conf. Proc. **38**, 011154 [6 pages] (2023).
- I-9 Masaru Hashimoto, Tomoki Houda, Rito Furuchi, Hiroki Nakano, Kiyomi Okamoto, Toru Sakai: Field-Induced Spin Liquids in the $S=1/2$ Distorted Diamond Spin Chain with Anisotropic Ferromagnetic Interaction, New Physics: Sae Mulli. 73, 1127 (2023).
- I-10 Toru Sakai, Masaru Hashimoto, Tomoki Houda, Rito Furuchi, Hiroki Nakano, Kiyomi Okamoto, Kouichi Okunishi: Translational Symmetry Broken Magnetization Plateau of the Spin-1/2 Ferromagnetic and Antiferromagnetic Bond-Alternating Spin Chain with Competing Anisotropies, New Physics: Sae Mulli. 73, 1131 (2023).
- I-11 Toru Sakai: Magnetization process of antiferromagnetic quantum spin chains with the biquadratic exchange interaction, AIP Advances 14, 015332-1-4 (2024).
- I-12 Toru Sakai: Field-Induced Spin Nematic Phase of a Magnet on the Shastry-Sutherland Lattice with the Anisotropic Ferromagnetic Interaction, IEEE INTERMAG 2023 (仙台、2023年5月)

- I-13 坂井徹：ジャロシンスキー守谷相互作用と ESR 禁制遷移、学術変革領域研究 (A)アシンメトリ量子キックオフミーティング (岡山大学、2023 年 6 月)
- I-14 Masaru Hashimoto, Tomoki Houda, Rito Furuchi, Hiroki Nakano, Kiyomi Okamoto, Toru Sakai: Field-Induced Spin Liquids in the $S=1/2$ Distorted Diamond Spin Chain with Anisotropic Ferromagnetic Interaction, International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (SCES2023)(Incheon, 2023 年 7 月)
- I-15 Toru Sakai, Masaru Hashimoto, Tomoki Houda, Rito Furuchi, Hiroki Nakano, Kiyomi Okamoto, Kouichi Okunishi : Translational Symmetry Broken Magnetization Plateau of the Spin-1/2 Ferromagnetic and Antiferromagnetic Bond-Alternating Spin Chain with Competing Anisotropies, Interaction, International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (SCES2023)(Incheon, 2023 年 7 月)
- I-16 利根川孝、坂井徹：異方的 $S=1/2$ 三本脚格子系の基底状態相図：トリアティック TLL 相とネマティック TLL 相、日本物理学会第 78 回年次大会 (2023 年) (東北大学、2023 年 9 月)
- I-17 橋本理、古内理人、中野博生、岡本清美、坂井徹：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における磁場誘起スピンネマティック液体、日本物理学会第 78 回年次大会(2023 年)(東北大学、2023 年 9 月)
- I-18 岡本清美、坂井徹、奥西巧一：異方的 $S=1$ 鎖における $1/2$ 飽和磁化プラトー II、日本物理学会第 78 回年次大会 (2023 年) (東北大学、2023 年 9 月)
- I-19 坂井徹、岡本清美、奥西巧一、古内理人、中野博生：競合する異方性のある $S=1/2$ ボンド交代鎖の磁化プラトー、日本物理学会第 78 回年次大会 (2023 年) (東北大学、2023 年 9 月)
- I-20 Toru Sakai: Magnetization process of antiferromagnetic quantum spin chains with the biquadratic exchange interaction, 68th Annual Conference on Magnetism and Magnetic Materials (MMM2023)(Dallas, USA, 2023 年 10~11 月)
- I-21 坂井徹：歪んだダイヤモンドスピン鎖の $3/4$ 磁化プラトーにおけるスピギャップの ESR 直接観測、第 62 回電子スピンサイエンス学会年会 (神戸大学、2023 年 11 月)
- I-22 T. Sakai, M. Hashimoto, T. Houda, R. Furuchi, H. Nakano, K. Okamoto : Spin Nematic Liquid of Low-Dimensional Quantum Spin Systems in Magnetic Field、Asia-Pacific Conference on Condensed Matter Physics 2023 (花蓮、台湾、2023 年 11 月)
- I-23 坂井徹：新しい磁化プラトーの理論的・計算科学的研究、強磁場科学研究会「強磁場研究における次世代ネットワーク形成とサイエンスの新展開」 (東北大学、2023 年 12 月)
- I-24 T. Sakai, M. Hashimoto, T. Houda, R. Furuchi, H. Nakano, K. Okamoto, Quantum Spin Nematic Liquid of Low-Dimensional Spin

Systems in Magnetic Field, 新学術領域研究「量子液晶の物性科学」令和5年度領域研究会(東京大学物性研究所、2023年12月)

- I-25 岡本清美、坂井徹、奥西巧一、橋本理、法田朋久、古内理人、中野博生：競合する異方性のある反強磁性 $S=1$ 鎖における並進対称性破れプラトーと磁気相図、第19回量子スピン系研究会(福井大学、2024年2月)
- I-26 利根川孝、古谷峻介、岡本清美、坂井徹：強磁性桁対における四次のオンサイト異方性をもつ $S=1$ 梯子系の基底状態相図：数値計算、第19回量子スピン系研究会(福井大学、2024年2月)
- I-27 古谷峻介、利根川孝、岡本清美、坂井徹：強磁性桁対における四次のオンサイト異方性をもつ $S=1$ 梯子系の基底状態相図：有効場理論、第19回量子スピン系研究会(福井大学、2024年2月)
- I-28 坂井徹、橋本理、法田朋久、古内理人、中野博生、岡本清美、利根川孝：低次元量子スピン系の磁場誘起スピンネマティック相、第19回量子スピン系研究会(福井大学、2024年2月)
- I-29 古内理人、坂井徹、中野博生：五角形格子上ハイゼンベルク反強磁性体におけるフェリ磁性の崩壊に関する数値的研究、第19回量子スピン系研究会(福井大学、2024年2月)
- I-30 利根川孝、古谷峻介、岡本清美、坂井徹：強磁性桁対における四次のオンサイト異方性をもつ $S=1$ 梯子系の基底状態相図：数値計算、日本物理学会2024年春季大会(オンライン、2024年3月)
- I-31 古谷峻介、利根川孝、岡本清美、坂井徹：強磁性桁対における四次のオンサイト異方性をもつ $S=1$ 梯子系の基底状態相図：有効場理論、日本物理学会2024年春季大会(オンライン、2024年3月)
- I-32 岡本清美、坂井徹、奥西巧一、橋本理、法田朋久、古内理人、中野博生：競合する異方性のある反強磁性 $S=1$ 鎖における並進対称性破れプラトーと磁気相図、日本物理学会2024年春季大会(オンライン、2024年3月)
- I-33 坂井徹、岡本清美、奥西巧一、橋本理、法田朋久、古内理人、中野博生：競合する異方性のあるスピンラダー系の並進対称性の破れた磁化プラトー、日本物理学会2024年春季大会(オンライン、2024年3月)
- I-34 橋本理、法田朋久、古内理人、中野博生、岡本清美、坂井徹：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2024年春季大会(オンライン、2024年3月)
- I-35 Toru Sakai: Translational Symmetry Broken Magnetization Plateau of the One-Dimensional Quantum Spin Systems with Competing Anisotropies, アメリカ物理学会マーチミーティング(Minneapolis, USA, 2024年3月)
- II-1 中野博生、轟木義一(千葉工業大学)、多田野寛人(筑波大学)：富岳における高プロセス並列ジョブのメモリ消費について、日本シミュレーション学会論文誌 **15**, 56-63 (2023)
- II-2 Hiroki Nakano, Tôru Sakai: Large-Scale Numerical-Diagonalization

- Study of the Shastry-Sutherland Model, Proceedings of the 29th International Conference on Low Temperature Physics (LT29), JPS Conf. Proc. **38**, 011166 [6 pages] (2023)
- II-3 Rito Furuchi, Hiroki Nakano, Tôru Sakai: Numerical Study of $S=1/2$ Heisenberg Antiferromagnet on the Floret Pentagonal Lattice, Proceedings of the 29th International Conference on Low Temperature Physics (LT29), JPS Conf. Proc. **38**, 011167 [6 pages] (2023)
- II-4 中野博生: (招待講演) 富岳における高プロセス並列シミュレーションと数値対角化計算, TNスキームに基づく異分野融合型計算科学研究ワークショップ, (大阪大学, 2024年3月)
- II-5 中野博生: 巨大疎行列に対する固有値問題の大規模並列シミュレーションの新展開, 第10回 HPCIシステム利用研究課題成果報告会 (品川グランドホール, 2023年10月)
- II-6 中野博生, 轟木義一 (千葉工業大学), 多田野寛人 (筑波大学), 坂井徹: 富岳における大規模並列化による量子スピン系シミュレーション, 日本物理学会第78回年次大会 (2023年) (東北大学, 2023年9月)
- II-7 古内理人, 中野博生, 轟木義一 (千葉工業大学), 坂井徹: 五角形格子ハイゼンベルク反強磁性体のフェリ磁性基底状態の崩壊, 日本物理学会第78回年次大会 (2023年) (東北大学, 2023年9月)
- II-8 Hiroki Nakano: Parallel calculations of the extremely large number of MPI processes in Fugaku, The 42nd JSST Annual International Conference on Simulation Technology (新潟大学, 2023年8月)
- III-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2023 (大阪大学, 2023年9月)
- III-2 坂井徹: (出前授業) 量子力学の世界-粒子の波動性から高温超伝導まで- (兵庫県立御影高校, 2023年9月)

物質科学専攻

博士後期課程

古内理人: 五角形格子上のフラストレート磁性体に関する理論的研究

博士前期課程

春名信吾: UTe_2 における電子相関に起因したs波超伝導とポイントノード的なギャップ構造

法田朋久: フラストレート磁性体の異常量子現象の理論的研究

岩本睦生: Ginzburg-Landau方程式による2成分秩序変数状態と超伝導電流の磁場温度依存性の解析

土井 洸輝 : Ginzburg-Landau理論によるchiral状態の磁場による履歴過程
の解析、及びEliashberg理論に基づいた超伝導状態の解析手法
橋本 理 : 歪んだダイヤモンドスピン鎖のスピンネマティック相の数値的
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)(令和5~令和8年度) 基盤研究(C) 課題番号:23K11125
研究課題 巨大次元行列の固有値計算の高並列・高精度シミュレーションの挑戦
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5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 令和5年度HPCIシステム利用研究課題(2023年度A期) 課題番号:hp230114
研究課題 固有値問題のシミュレーションにおける超高並列化の限界への挑戦
研究代表者 中野博生
- 4 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