

## I 強相関電子系における遍歴電子磁性の理論

Theory of Magnetism in Strongly Correlated Electron Systems

高橋慶紀・中野博生

Takahashi, Y. and Nakano, H.

金属の伝導性を示す磁性体は遍歴電子磁性体とも呼ばれるが、その磁氣的性質に関する種々の興味ある物性が、実用面においても広く役立てられている。我々はこの遍歴電子磁性の基礎分野の研究を行っているが、その進展には学術面にとどまらず、とりわけ磁性材料開発の面でも関心が寄せられている。

遷移金属合金、化合物で発現する遍歴電子磁性の磁氣的性質についての理論として、自己無撞着 (SCR) スピンゆらぎ理論が国内外で有名であるが、その取扱いの主な対象は温度依存性に限られている。一方、磁場効果については種々の困難が含まれていた。我々は、この理論とは少し異なる観点から、スピンゆらぎ理論を発展させることによって SCR 理論の困難をすべて克服することに成功した。その結果、磁化曲線、比熱の温度、磁場依存性、磁気体積効果などに関する多くの興味ある成果がすでに得られ、その多くは実験結果によっても確かめられている。

現在では、遍歴磁性体の磁気異方性などに関心を持ち、その異方的な磁化率や自発磁化の温度依存性、磁場効果に関する研究を行っている。また、幾何学的なフラストレーションの効果で非フェルミ流体的な挙動の発現するとして最近関心をもたれている遍歴磁性体に関する共同研究も行っている。

## II 空間反転対称性の破れた系での超伝導の理論

Theory of Superconductivity in the System with Broken Inversion Symmetry

長谷川泰正

Hasegawa, Y.

最近、空間反転対称性の破れた結晶構造を持つ  $\text{CePt}_3\text{Si}$  で超伝導が発見され関心を集めている。その発見に続いて、同様の系でも多くの超伝導が発見されている。超伝導体では2つずつの電子がペアを組むことによって超伝導状態になることが知られているが、ペアの組み方に、スピンシングレットとスピントリプレットの可能性がある。多くの超伝導体ではスピンシングレットのペアであるが、 $\text{CePt}_3\text{Si}$  で実現している超伝導は同じ向きを向

いたスピンのペアを組むことで生じるスピン三重項超伝導であることを示す実験事実が報告されている。一方、空間反転対称性が破れていると、スピン軌道相互作用によってスピン三重項ペアは一般には破壊されることが知られている。また、 $\text{CePt}_3\text{Si}$  の超伝導状態での核磁気緩和率の温度依存性や磁場侵入長の温度依存性から、超伝導エネルギーギャップにラインノードがあると考えられる。また、この系で、最近、兵庫県立大学物質理学研究科の本山 岳、前多雄大、小田祺景 [G. Motoyama, K. Maeda and Y. Oda, J. Phys. Soc. Jpn. 77 (2008) 044710] が興味深い報告している。彼らによると、アニールすることにより反強磁性転移温度での比熱の飛びが大きくなり試料の純度が上がっていると考えられるが、そのとき、従来の考えとは逆に、超伝導転移温度は低下する。

我々は、アニールする前の試料では空間反転対称性が局所的に回復しておりスピン軌道相互作用が小さいのに対し、アニールすることで空間対称性の破れによるスピン軌道相互作用の効果が大きくなり、超伝導転移温度が低下したと考え、スピン軌道相互作用によるスピントリプレット超伝導の転移温度の低下を、理論的に詳しく調べた。その結果、エネルギーギャップにラインノードを持つスピントリプレット超伝導状態により、ほとんどすべての実験事実を矛盾なく説明できることを示した。

### III 擬 1 次元電子系の理論： フェルミ面の形状による波数依存帯磁率と 磁場誘起スピン密度波の理論

Theory of Quasi-One-Dimensional Electron Systems:  
Effects of the Shape of the Fermi Surface on the Wave-Vector-Dependent  
Susceptibility and Field-Induced Spin Density Wave

長谷川泰正  
Hasegawa, Y.

擬 1 次元有機導体  $(\text{TMTSF})_2\text{X}$  ( $\text{X}=\text{PF}_6, \text{ClO}_4$  など) は、温度、圧力、冷却速度、磁場の強さ・方向などにより、スピン密度波、超伝導、磁場誘起スピン密度波など多様な性質を示す。これらの性質は、この系が擬 1 次元的なフェルミ面を持つことで理解できる。擬 1 次元系では、波数に依存する帯磁率が、フェルミ面の形状に非常に敏感に依存する。このことにより、スピン密度波への相転移温度の圧力依存性や、磁場によるスピン密度波の安定化（磁場誘起スピン密度波）を説明することができる。これらの系の状態を理論的に取り扱う場合、従来は、異方的な飛び移り積分を持つ 2 次元正方格子上的強束縛モデルがよく用いられていた。我々は、擬 1 次元有機導体  $(\text{TMTSF})_2\text{X}$  の結晶構造に即したより現実的なモデルを考察することにより、波数依存帯磁率がフェルミ面の形状によって非常に大きなピークを持つことがあることを見いだした。この結果により、磁場誘起スピン密度波の圧力依存性などが、詳しく理解できることを示した。

## IV 量子スピン模型の大規模数値シミュレーション

Large-Scale Numerical Simulation of Quantum Spin Models

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た。このプログラムを使い、 $S = 1/2$  カゴメ格子ハイゼンベルク反強磁性体の磁化過程を再検討した。飽和磁化の  $1/3$  の高さで磁化プラトーが発現するとこれまで考えられていたが、この  $1/3$  磁化の振舞いは典型的なプラトーとは全く異なる振舞いとなっていることを明らかにし、カゴメ格子磁性体で見られる現象を磁化ランプと名づけた。数値対角化法以外にも非常に高精度な結果を期待できる方法として密度行列繰り込み群法が知られている。開放端を持つ 1 次元系に向いているこの方法で、励起ギャップを評価するのに有効な双曲変形の方法を提案した。

## V 低次元量子スピン模型の相転移

Phase Transition of Low-Dimensional Quantum Spin Models

中野博生

Nakano, H.

量子スピン模型は、様々な相転移を示す。1次元鎖では一般にネール型の反強磁性秩序を示すことはないが、フラストレーションを発生せずに2次元系へと向かう鎖間相互作用を系が持つようになると、基底状態が反強磁性秩序を示す相への相転移を発現する。この相転移の臨界指数は、構成スピンの大きさや、格子形状の詳細には依らないと考えられてきた。我々は量子モンテカルロ法のシミュレーションを行い、様々な  $S$  で調べ、そのデータの解析を注意深く行った結果、同じ格子形状でも、臨界指数が、異なる  $S$  で変化していく様子を明らかにした。また、量子スピン1次元鎖は磁化過程の途中で、次近接相互作用

を持つことにより相転移を発現して磁化プラトーが現れることがある。数値対角化法と密度行列繰り込み群法の計算を相補的に活用することにより、次近接相互作用を持つ  $S = 1$  鎖の磁化過程を調べ、 $1/2$  プラトーが現れる場合があることを明らかにした。

## 発表論文 List of Publications

- I-1 H. Yamaoka(播磨理研), N. Tsujii(物材機構), I. Jarrige(JAEA), Y. Takahashi, J. Chaboy(CSIC-Univ. Zaragoza), H. Oohashi(NIMS), K. Handa(京大化研), J. Ide(京大化研), T. Tochio(神戸大理), Y. Ito(京大化研), T. Uruga(JASRI), and H. Yoshikawa(NIMS): Electronic structure of  $Y\text{Mn}_2$  and  $Y_{0.96}\text{Lu}_{0.04}\text{Mn}_2$  studied by x-ray emission spectroscopy, *Phys. Rev. B*, **80**, 115110(1-6) (2009)
- I-2 R. Konno(近大高専), N. Hatayama(近大高専), Y. Takahashi, and H. Nakano: Thermal expansion of two-dimensional itinerant nearly ferromagnetic metal, *J. Phys.: Conf. Ser.*, **150**, 042100(1-4) (2009)
- I-3 高橋慶紀: 鉄系化合物にみられる弱い遍歴磁性とその理論 (領域 3 シンポジウム: 鉄系化合物の遍歴性と局在性 鉄の磁性はどこまで理解されたか ) 日本物理学会 2009 年秋季大会 (熊本大学 2009 年 9 月)
- I-4 高橋慶紀: 磁性物理学 遷移金属化合物磁性のスピンゆらぎ理論、非常勤講義 (慶応大学大学院理工学研究科, 2009 年度前期)
- I-5 高橋慶紀: 遍歴電子磁性とスピン揺らぎ理論、非常勤集中講義 (京都大学大学院理学研究科, 2009 年 8 月 3 -5 日)
- I-6 高橋慶紀: 遍歴電子磁性理論 70 年の歩み SCR 理論の問題点とその克服、特別講演 (京都大学湯川記念館、2009 年 8 月 5 日)
- I-7 高橋慶紀: スピンゆらぎ理論の現状と今後の展望、研究会「金属磁性研究の新たな展開と物質科学への応用」(京都大学百周年時計台記念館、2010 年 2 月 20 日)
- I-8 奥田祐希・高橋慶紀: 遍歴磁性体の異方的磁化過程の理論, 日本物理学会 第 65 回年次大会 (岡山大学、2010 年 3 月)
- I-9 寺澤慎祐 (京大院工)・和氣 剛 (京大院工)・田畑吉計 (京大院工)・中村裕之 (京大院工)・道岡千城 (京大院理)・吉村一良 (京大院理)・佐藤桂輔 (東大物性研)・金道浩一 (東大物性研)・高橋慶紀:  $\text{Fe}_3\text{Mo}_3\text{N}$  の非フェルミ流体的挙動、日本物理学会 2009 年秋季大会 (熊本大学、2009 年 9 月)
- I-10 高橋慶紀: 異方的遍歴電子磁性体の秩序状態のスピンゆらぎ理論、日本物理学会 第 65 回 年次大会 (岡山大学、2010 年 3 月)
- I-11 Y. Takahashi: "Non-Fermi-Liquid Behavior on an Iron-Based Itinerant Electron Magnets  $\text{Fe}_3\text{Mo}_3\text{N}$ " (*JPSJ*, **79** (2010) 043701) に関する解説記事、*JPSJ Online-News and Comments* [April 12, 2010]

- II-1** Y. Hasegawa and H. Taniguchi: Spin triplet superconductivity and spin-orbit coupling in CePt<sub>3</sub>Si, J. Phys. Soc. Jpn. **78**, 074717(1-7) (2009)
- III-1** K. Kishigi(熊本大学教育学部) and Y. Hasegawa: Sign reversal of the quantum Hall coefficient in the field-induced spin density wave states of quasi-one-dimensional system with periodic potential, J. Phys.: Conf. Ser. **150**, 042093(1-4) (2009)
- III-2** K. Kishigi(熊本大学教育学部) and Y. Hasegawa: Negative quantum Hall effect in field-induced spin-density-wave states: dependence on shape of the quasi-one-dimensional Fermi surface, Phys. Rev. B **80**, 075119(1-8) (2009)
- III-3** K. Kishigi(熊本大学教育学部) and Y. Hasegawa: Generalized susceptibility of the quasi-one-dimensional organic conductors with triclinic lattice symmetry, Physica B **405**, S101-S103 (2010).
- III-4** Y. Hasegawa and K. Kishigi(熊本大学教育学部): Nesting of the Fermi surface and the wave-vector-dependent susceptibility in quasi-one-dimensional electron systems, Phys. Rev. B **81**, 235118(1-12) (2010)
- III-5** 長谷川泰正・岸木敬太(熊本大学教育学部): 擬1次元系でのフェルミ面のネスティングと帯磁率、日本物理学会 第65回 年次大会(岡山大学、2010年3月)
- III-6** 岸木敬太(熊本大学教育学部)・長谷川泰正: 擬1次元系の磁場中の帯磁率とスピンドensity波、日本物理学会 第65回 年次大会(岡山大学、2010年3月)
- IV-1** H. Nakano: Precise estimates by finite-size extrapolations of the  $S = 1$  Haldane-gapped system, J. Phys.: Conf. Ser., **200**, 022037(1-4) (2010)
- IV-2** H. Nakano and T. Sakai(原子力機構播磨): Magnetization Process of Kagome-Lattice Heisenberg Antiferromagnet, J. Phys. Soc. Jpn. **79**, 053707(1-4) (2010)
- IV-3** H. Nakano: Magnetization Plateau of the Haldane-Gapped Spin Chain, 4th JAEA Synchrotron Radiation Research Symposium: X-Ray and High Magnetic Field, (Hyogo, March 6, 2009)
- IV-4** 上田 宏(阪大基礎工)・中野博生・草部浩一(阪大基礎工)・西野友年(神戸大理): 双曲変形による一次元量子スピン鎖の励起ギャップ評価、日本物理学会 2009年秋季大会(熊本大学 2009年9月)
- IV-5** 中野博生・坂井 徹(原子力機構): カゴメ格子反強磁性体の磁化過程、日本物理学会 2009年秋季大会(熊本大学 2009年9月)
- IV-5** 上田 宏(阪大基礎工)・中野博生・草部浩一(阪大基礎工)・西野友年(神戸大理): 一次元量子スピン鎖の励起ギャップ評価: 双曲変形を用いたスケーリング解析、日本物理学会 第65回 年次大会(岡山大学、2010年3月)
- IV-7** 中野博生・坂井 徹(原子力機構): カゴメ格子反強磁性体の磁化過程 2、日本物理学会 第65回 年次大会(岡山大学、2010年3月)

- V-1 T. Tonegawa(福井工大機械), H. Nakano, T. Sakai(原子力機構播磨), K. Okamoto(東工大院理工), K. Okunishi(新潟大), and K. Nomura(九大理): Half Magnetization Plateau of a Frustrated  $S = 1$  Antiferromagnetic Chain J. Phys.: Conf. Ser. **200**, 022065(1-4) (2010)
- V-2 利根川 孝(福井工大機械)・中野博生・坂井 徹(原子力機構播磨)・岡本清美(東工大院理工): フラストレートした  $S=1$  反強磁性鎖における磁化の 2 分の 1 プラトー II、日本物理学会 第 65 回 年次大会(岡山大学、2010 年 3 月)
- V-4 下川統久朗・中野博生: 反強磁性ハイゼンベルグ異方的蜂の巣格子模型の基底状態相転移、日本物理学会 2009 年秋季大会(熊本大学、2009 年 9 月)
- V-5 下川統久朗・中野博生: 反強磁性ハイゼンベルグ異方的蜂の巣格子模型の基底状態相転移 2、日本物理学会 第 65 回 年次大会(岡山大学、2010 年 3 月)

## 科学研究費補助金等

- 1 文部科学省科学研究費補助金(平成 21~23 年度)基盤研究(C) 課題番号:21540341  
研究課題 臨界点近傍の遍歴電子磁性体の磁化曲線に及ぼすゆらぎの効果  
研究代表者 高橋慶紀
- 2 文部科学省科学研究費補助金(平成 20~23 年度)基盤研究(B) 課題番号:20340096  
研究課題 スピннаノチューブの異常量子現象の理論的・計算科学的研究  
研究代表者 坂井 徹  
研究分担者 中野博生