

I 強相関電子系における遍歴電子磁性の理論

Theory of Itinerant Magnetism in Strongly Correlated Electron Systems

高橋慶紀

Takahashi, Y.

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もち、自発磁化の温度依存性、磁場効果、磁気比熱の温度依存性に関する研究を行っている。以前から関心のあるメタ磁性転移に関する研究を継続している。この他、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 グラフェンの電子状態の理論

Theory of Electron systems in Graphene

長谷川泰正

Hasegawa, Y.

グラフェンでは、炭素原子が2次元的に蜂の巣構造をつくっている。この系では、質量ゼロの相対論的ディラック粒子が物質中で実現できていると考えられ、関心を集めている。量子ホール効果、エッジ状態、量子化された電気伝導度など、非常に興味深い現象が観測されており、さらに、量子スピンホール効果、トポロジカル絶縁体などが実現可能な最も

簡単なモデルとして、多くの研究がなされている。2層のグラフェンも実験的につくることができている。2層グラフェンは単層グラフェンとは大きく性質が異なり、どちらも興味を持たれている。我々は、単層グラフェンと2層グラフェンの境界で、新しいエッジ状態が現われることを理論的に示した。面に垂直に電場をかけることによりエッジ状態の浸みだし量を制御することができることが解り、応用に期待できる。

III 新しいタイプの超伝導の理論

Theory of Unconventional Superconductivity

長谷川泰正

Hasegawa, Y.

銅酸化物高温超伝導体、鉄系高温超伝導体、有機超伝導体、ヘビーフェルミオン系超伝導体など、新しい超伝導体が多く発見されている。それらの多くは、従来から知られていた超伝導体とは、多くの点で性質が異なる。従来の超伝導は、BCS(Bardeen-Cooper-Schrieffer)理論で説明されていた。この理論では、電子格子相互作用を介して電子間に有効引力相互作用が働き、s波スピンシングレットのクーパーペアが形成されることによって、超伝導状態になると考えられていた。それに対し、最近発見された多くの超伝導体では、エネルギーギャップに異方性がありギャップがゼロになる方向がある、スピンシングレットではなくスピントリプレットのクーパーペアが形成されている、幾つかのバンドが存在しバンド毎にエネルギーギャップの大きさやオーダーパラメータの符号が異なる、など、従来の超伝導とは異なる新たな超伝導状態が実現していると考えられている。我々は、異方的超伝導、スピントリプレット超伝導について理論的研究を行ってきた。従来型とは異なる超伝導については、理論的に未解決な問題が多く残されており、研究を続けている。

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って、過去に報告されているシステムサイズの計算を実現して、カゴメ格子や三角格子といったフラストレート・ハイゼンベルク反強磁性体などの様々な系の性質を数値的に調べている。

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.

量子スピン模型は相転移を起こし、様々な特徴を持つスピン状態を示す。その一つにフェリ磁性がある。このフェリ磁性は、強磁性と反強磁性の特徴を併せ持ち、実用的にも重要な現象である。低次元量子スピン模型に現われるフェリ磁性について、我々は、フラストレーションを起源として現われる相転移現象を、二つの視点から数値的に調べた。フェリ磁性を起こす機構としてよく知られているものにマーシャル・リーブ・マティスの定理に基づく機構があり、この機構によって発現するフェリ磁性はリーブ・マティス型フェリ磁性と呼ばれる。系にフラストレーションがあると、このリーブ・マティス型のものとは異なる非リーブ・マティス型フェリ磁性が現われるが、その現象はこれまで1次元系でのみ報告されていた。我々は、この非リーブ・マティス型フェリ磁性が空間異方的な相互作用を持つカゴメ格子模型の中で見出した。この事例は非リーブ・マティス型フェリ磁性の2次元系における最初のものであり、非リーブ・マティス型フェリ磁性の発現が1次元系に限らない現象であることを意味する。さらに、2次元フラストレート系から切り出した疑1次元系の振舞を密度行列繰り込み群の方法を用いて調べ、切り出し方の幅によらない、非リーブ・マティス型フェリ磁性の中間相が現れることを明らかにしている。

発表論文 List of Publications

- I-1 T. Waki(京大院), S. Terazawa(京大院), T. Yamazaki(京大院), Y. Tabata(京大院), K. Sato(東大物性研), A. Kondo(東大物性研), K. Kindo(東大物性研), M. Yokoyama(茨城大理), Y. Takahashi, and H. Nakamura(京大院): Interplay between quantum criticality and geometrical frustration in $\text{Fe}_3\text{Mo}_3\text{N}$ with stella quadrangula lattice, EPL, **94** 37004(1-6) (2011)

- I-2** Y. Takahashi: Magnetic isotherm of itinerant electron magnets – A new approach to itinerant electron metamagnetism, *J. Phys.: Conf. Ser.* **344** 012002(1-10) (2012)
- I-3** N. Hatayama(近大高専), R. Konno(近大高専), and Y. Takahashi: Effect of dimensionality crossover on magnetovolume properties of quasi one-dimensional weakly antiferromagnetic metals, *J. Phys.: Conf. Ser.* **344** 012015(1-7) (2012)
- I-4** 高橋慶紀: 異方的スピンゆらぎの遍歴磁性への影響 (領域 8、領域 3 合同シンポジウム: 遍歴磁性と超伝導 – 両者の統合的な理解に向けて) 日本物理学会 2011 年秋季大会 (富山大学、2011 年 9 月)
- I-5** 高橋慶紀: 臨界点近傍の遍歴電子強磁性とスピンゆらぎ、日本物理学会第 61 回年次大会 (関西学院大学、2012 年 3 月)
- I-6** 高橋慶紀: 臨界点近傍の遍歴磁性とスピンゆらぎ、遍歴電子系研究会「金属磁性体の構造とスピンの揺らぎ」(姫路市じばさんびる、2011 年 12 月 17 日)
- I-7** 高橋慶紀・吉村一良(京大院) 共著: 「遍歴磁性とスピンゆらぎ」内田老鶴圃出版 2012, pp.272、ISBN 978-4-7536-2081-4
- II-1** Y. Hasegawa and M. Kohmoto(東大物性研): Electric-field-induced penetration of edge states at the interface between monolayer and bilayer graphene, *Phys. Rev. B.* **85**, 125430(1-9) (2012)
- II-2** 長谷川泰正・甲元真人(東大物性研): 単層、2 層グラフェンでのエッジ状態の理論、日本物理学会 2011 年秋季大会 (富山大学、2011 年 9 月)
- IV-1** T. Tonegawa(神戸大), K. Okamoto(東工大理工), H. Nakano, T. Sakai(原子力機構 SPring-8), K. Nomura(九州大理), and M. Kaburagi(神戸大): Haldane, Large-D and Intermediate-D States in an S=2 Quantum Spin Chain with On-Site and XXZ Anisotropies, *J. Phys. Soc. Jpn.* **80** 043001(1-4) (2011)
- IV-2** T. Sakai(原子力機構 SPring-8) and H. Nakano: Critical magnetization behavior of the triangular- and kagome-lattice quantum antiferromagnets, *Phys. Rev. B* **83** 100405(r) (2011)
- IV-3** M. Isoda(香川大教育), H. Nakano, and T. Sakai(原子力機構 SPring-8): Thermodynamic Properties of Spin-1/2 Ising-like Heisenberg Model on Triangle-based Lattices, *Mod. Phys. Lett. B* **25** 909-915 (2011)
- IV-4** H. Nakano and T. Sakai(原子力機構 SPring-8): Numerical-Diagonalization Study of Spin Gap Issue of the Kagome Lattice Heisenberg Antiferromagnet, *J. Phys. Soc. Jpn.* **80** 053704(1-4) (2011)
- IV-5** T. Sakai(原子力機構 SPring-8) and H. Nakano: Quantum critical phenomena in magnetization process of the Kagome and triangular lattice antiferromagnets, *J. Phys.: Conf. Ser.* **320** 012016(1-6) (2011)

- IV-6** M. Isoda(香川大教育), H. Nakano, and T. Sakai(原子力機構 SPring-8): Numerical exact diagonalization study of triangulated kagome Heisenberg spin system, *J. Phys.: Conf. Ser.* **320** 012010(1-6) (2011)
- IV-7** H. Nakano and T. Sakai(原子力機構 SPring-8): Magnetization ramp of the kagome lattice antiferromagnet, *J. Phys.: Conf. Ser.* **320** 012017(1-6) (2011)
- IV-8** K. Okamoto(東工大理工), T. Tonegawa(神戸大), H. Nakano, T. Sakai(原子力機構 SPring-8), K. Nomura(九州大理) and M. Kaburagi(神戸大),: Ground-state phase diagram of $S = 2$ quantum spin chain with the XXZ and on-site anisotropies, *J. Phys.: Conf. Ser.* **302** 012014(1-4) (2011)
- IV-9** M. Isoda(香川大教育), H. Nakano and T. Sakai(原子力機構 SPring-8): Specific Heat and Magnetic Susceptibility of Ising-like Anisotropic Heisenberg Model on Kagome Lattice, *J. Phys. Soc. Jpn.* **80** 084704(1-6) (2011)
- IV-10** H. Ueda(阪大基礎工), H. Nakano, K. Kusakabe(阪大基礎工), and T. Nishino(神戸大理): Hyperbolic Deformation Applied to $S = 1$ Spin Chains — Scaling Relation in Excitation Energy —, *J. Phys. Soc. Jpn.* **80** 094001(1-5) (2011)
- IV-11** Y. Shirata(東工大理工), H. Tanaka(東工大理工), T. Ono(東工大理工), A. Matsuo(東大物性研), K. Kindo(東大物性研), and H. Nakano: Quantum Magnetization Plateau in Spin-1 Triangular-Lattice Antiferromagnet $\text{Ba}_3\text{NiSb}_2\text{O}_9$, *J. Phys. Soc. Jpn.* **80** 093702(1-4) (2011)
- IV-12** T. Ono(東工大理工), H. Tanaka(東工大理工), Y. Shirata(東工大理工), A. Matsuo(東大物性研), K. Kindo(東大物性研), F. Ishikawa(東大物性研), O. Kolomiyets(東大物性研), H. Mitamura(東大物性研), T. Goto(東大物性研), H. Nakano, N. A. Fortune(Smith College), S. T Hannahs(National High Magnetic Field Laboratory), Y. Yoshida(National High Magnetic Field Laboratory) and Y. Takano(University of Florida),: Magnetic-Field Induced Quantum Phase Transitions in Triangular-Lattice Antiferromagnets, *J. Phys.: Conf. Ser.* **302** 012003(1-6) (2011)
- IV-13** K. Okamoto(東工大理工), T. Tonegawa(神戸大), H. Nakano, T. Sakai(原子力機構 SPring-8), K. Nomura(九州大理) and M. Kaburagi(神戸大): How to distinguish the Haldane/Large-D state and the intermediate-D state in an $S = 2$ quantum spin chain with the XXZ and on-site anisotropies, *J. Phys.: Conf. Ser.* **320** 012018(1-6) (2011)
- IV-14** H. Yamaguchi(阪府大院理), M. Tada(阪府大院理), S. Nagata(阪府大院理), K. Iwase(阪府大院理), T. Shimokawa, H. Nakano, H. Nojiri(東北大金研), A. Matsuo(東大物性研), K. Kindo(東大物性研), and Y. Hosokoshi(阪府大院理),: Magnetic Phase Transition in the Verdazyl Biradical Crystal p-BIP- V_2 , to be published in *J. Phys.: Conf. Ser.*

- IV-15 T. Sakai(原子力機構 SPring-8) and H. Nakano: Novel Field-Induced Quantum Phase Transition of the Kagome-Lattice Antiferromagnet, to be published in J. Phys.: Conf. Ser.
- IV-16 T. Sakai(原子力機構 SPring-8) and H. Nakano: Numerical Study on the Spin Gap of the Kagome Lattice Antiferromagnet, J. Phys. Soc. Jpn. **80** Supplement B SB014(1-3) (2011)
- IV-17 M. Isoda(香川大教育), H. Nakano, and T. Sakai(原子力機構 SPring-8): A Consistent Description of Magnetic Properties of the Triangulated-Kagome System $\text{Cu}_9\text{X}_2(\text{cpa})_6\text{nH}_2\text{O}$, J. Phys. Soc. Jpn. **81** 053703 (1-4) (2012)
- IV-18 磯田 誠(香川大教育)・中野博生・坂井 徹(原子力機構 SPring-8) : 三角形内包カゴメ格子系 $\text{Cu}_9\text{X}_2(\text{cpa})_6$ の低エネルギー状態、日本物理学会 2012 年年次大会 (関西学院大学、2012 年 3 月)
- IV-19 中野博生・坂井 徹(原子力機構 SPring-8) : 2次元フラストレート反強磁性体の磁化プラトーと磁化ランプ、日本物理学会 2012 年年次大会 (関西学院大学、2012 年 3 月)
- IV-20 坂井 徹(原子力機構 SPring-8)・中野博生(兵庫県立大物質理) : カゴメ格子・三角格子反強磁性体の磁化過程における量子臨界現象、日本物理学会 2012 年年次大会 (関西学院大学、2012 年 3 月)
- IV-21 中野博生 : 【招待講演】カゴメ格子反強磁性体の新しい量子現象‘磁化ランプ’とスピギャップ問題、日本物理学会 2011 年秋季大会 (富山大学、2011 年 9 月)
- IV-22 金子隆威(東大院工)・中野博生・山地洋平(Rutgers Univ.)・三澤貴宏(東大院工)・今田正俊(東大院工) : 相互作用異方性のあるカゴメ格子上の量子反強磁性ハイゼンベルグ模型における磁化過程、日本物理学会 2011 年秋季大会 (富山大学、2011 年 9 月)
- IV-23 磯田 誠(香川大教育)・中野博生・坂井 徹(原子力機構 SPring-8) : 三角形内包カゴメ格子ハイゼンベルグスピン系の帯磁率と磁化プラトー、日本物理学会 2011 年秋季大会 (富山大学、2011 年 9 月)
- IV-24 利根川 孝(神戸大)・岡本清美(東工大理工)・中野博生・坂井 徹(原子力機構 SPring-8)・野村清英(九州大理)・鎗木 誠(神戸大) : 異方的 $S=2$ 反強磁性量子スピン鎖の基底状態相図 –Intermediate-D 相の存在– II、日本物理学会 2011 年秋季大会 (富山大学、2011 年 9 月)
- IV-25 岡本清美(東工大理工)・利根川 孝(神戸大)・中野博生・坂井 徹(原子力機構 SPring-8)・野村清英(九州大理)・鎗木 誠(神戸大) : 異方的 $S=2$ 反強磁性量子スピン鎖の基底状態相図 –Intermediate-D 相の存在– I、日本物理学会 2011 年秋季大会 (富山大学、2011 年 9 月)

- IV-26 利根川 孝(神戸大)・岡本清美(東工大院理工)・中野博生・坂井 徹(原子力機構 SPring-8)・野村清英(九大院理)・鍋木 誠(神戸大):異方的 $S=2$ XXZ 反強磁性鎖の基底状態相図:四次の一軸性オンサイト異方性の効果、日本物理学会 2012 年年次大会(関西学院大学、2012 年 3 月)
- IV-27 白田雄高(東工大理工)・田中秀数(東工大理工)・小野俊雄(東工大理工)・松尾 晶(東大物性研)・金道浩一(東大物性研)・中野博生:三角格子反強磁性体における強磁場磁化過程と理論的な $1/3$ 磁化プラトーとの比較、日本物理学会 2011 年秋季大会(富山大学、2011 年 9 月)
- IV-28 坂井 徹(原子力機構 SPring-8)・中野博生:カゴメ格子反強磁性体の磁化ランプと三角格子反強磁性体の磁化プラトーの量子臨界現象、日本物理学会 2011 年秋季大会(富山大学、2011 年 9 月)
- IV-29 中野博生・坂井 徹(原子力機構 SPring-8):量子スピンカゴメ格子反強磁性体の大規模並列数値対角化計算、日本物理学会 2011 年秋季大会(富山大学、2011 年 9 月)
- IV-30 中野博生:【招待講演】”量子スピン系の大規模並列数値対角化計算-カゴメ格子反強磁性体の物性解明-”、分野 2 × 分野 5 異分野交流研究会「量子系の固有値問題と大規模計算」(筑波大学計算科学研究センター、2011 年 7 月)
- IV-31 中野博生:【招待講演】”カゴメ格子反強磁性体のスピギャップ”、物性研・CMSI・次世代ナノ情報合同研究会「計算物質科学の課題と展望」(東大物性研究所、2011 年 1 月)
- IV-32 中野博生・坂井 徹(原子力機構 SPring-8):”籠目格子反強磁性体の磁化過程 - 「磁化ランプ」という異常臨界現象”、日本物理学会誌、第 66 巻 11 月号、832-836 (2011 年)
- IV-33 中野博生・下川統久朗・坂井 徹(原子力機構 SPring-8):異方的カゴメ格子反強磁性体のフェリ磁性、物性科学領域横断研究会(東北大学金属材料研究所、2011 年 11 月)
- IV-34 中野博生・坂井 徹(原子力機構 SPring-8):数値対角化法による 2 次元フラストレート系の研究 - カゴメ格子反強磁性体と三角格子反強磁性体 -、物性研究所共同利用スパコン成果報告会・東大物性研短期研究会「計算科学の課題と展望」(東大物性研究所、2012 年 2 月)
- IV-35 中野博生・坂井 徹(原子力機構 SPring-8):2 次元フラストレート系の磁化ランプと磁化プラトー、第 2 回 CMSI 研究会(東北大学金属材料研究所、2012 年 1 月)
- IV-36 中野博生:カゴメ格子反強磁性体の磁化過程に現れる異常現象、「フロンティア機能物質創製センター」シンポジウム(じばさんビル、2011 年 12 月)
- IV-37 中野博生・坂井 徹(原子力機構 SPring-8):2 次元フラストレート系の磁化過程に関する数値対角化法による研究、量子スピン系研究会(福井大学、2012 年 2 月)

- V-1 H. Nakano, T. Shimokawa and T. Sakai(原子力機構 SPring-8): Collapse of Ferrimagnetism in Two-Dimensional Heisenberg Antiferromagnet due to Frustration, J. Phys. Soc. Jpn. **80** 033709(1-4) (2011)
- V-2 T. Shimokawa and H. Nakano: Frustration Induced Ferrimagnetism in $S=1/2$ Heisenberg Spin Chain, J. Phys. Soc. Jpn. **80** 043703(1-4) (2011)
- V-3 T. Shimokawa and H. Nakano: Ferrimagnetism of the Heisenberg model on the Kagome strip lattice, J. Phys.: Conf. Ser. **320** 012007(1-6) (2011)
- V-4 T. Shimokawa and H. Nakano: Frustration Induced Ferrimagnetism in Heisenberg Spin Chains, J. Phys. Soc. Jpn. **80** 125003(1-2) (2011)
- V-5 T. Shimokawa and H. Nakano: Ferrimagnetism of the Heisenberg models on the quasi-one-dimensional kagome strip lattices, to be published in J. Phys. Soc. Jpn.
- V-6 永田慎太郎 (阪府大院理)・多田晶美 (阪府大院理)・山口博則 (阪府大院理)・小野俊雄 (阪府大院理)・細越裕子 (阪府大院理)・下川統久朗・中野博生・吉居俊輔 (東北大 CINTS)・野尻浩之 (東北大金研)・松尾 晶 (東大物性研)・金道浩一 (東大物性研) : ビスフェルダジルビフェニルの低温磁性、日本物理学会 2012 年年次大会 (関西学院大学、2012 年 3 月)
- V-7 山口博則 (阪府大院理)・岩瀬賢治 (阪府大院理)・小野俊雄 (阪府大院理)・中野博生・下川統久朗・細越裕子 (阪府大院理) : フェルダジルラジカルを用いた新規梯子格子磁性体の低温磁気状態、日本物理学会 2012 年年次大会 (関西学院大学、2012 年 3 月)
- V-8 下川統久朗・中野博生 : 空間異方性があるカゴメ格子ハイゼンベルグ模型の非自明なフェリ磁性、日本物理学会 2012 年年次大会 (関西学院大学、2012 年 3 月)
- V-9 下川統久朗・中野博生 : カゴメ型擬一次元格子ハイゼンベルグ模型における非自明なフェリ磁性状態の数値的研究、日本物理学会 2011 年秋季大会 (富山大学、2011 年 9 月)
- V-10 下川統久朗・中野博生 : 一次元量子フラストレート鎖における非自明なフェリ磁性状態の数値的研究 2、日本物理学会 2011 年秋季大会 (富山大学、2011 年 9 月)
- V-11 岩瀬賢治 (大阪府立大)・山口博則 (大阪府立大)・小野俊雄・野尻浩之 (東北大金研)・松尾 晶 (東大物性研)・金道浩一 (東大物性研)・下川統久朗・中野博生・坂井 徹 (原子力機構 SPring-8)・細越裕子 (大阪府立大) : フェルダジル系有機ピラジカル m -Ph- V_2 の構造と磁氣的性質、日本物理学会 2011 年秋季大会 (富山大学、2011 年 9 月)

大学院物質理学研究科

博士後期課程

下川統久朗 : フラストレートした量子ハイゼンベルグスピン系における
新奇的なフェリ磁性

博士前期課程

森崎慧介

: 格子模型の相転移に関するサイズ外挿法のモンテカルロシミュレーションに対する有効性の検証

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 スピナ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
- 3 文部科学省科学研究費補助金(平成 22～23 年度)特定領域研究 課題番号:22014012
研究課題 カゴメ格子反強磁性体における新奇な異常量子現象の理論的・数値的研究
研究代表者 坂井 徹
研究分担者 中野博生
- 4 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 23～25 年度)
基盤研究(C) 課題番号:23540388
研究課題 量子スピン鎖における新奇相の精密探索とレベルスペクトロスコピー
研究代表者 岡本清美
研究分担者 中野博生