

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、遍歴磁性体の示す磁気異方性、自発磁化や磁気比熱の温度依存性と磁場効果に関心をもっている。また、相転移温度がゼロとなる極限に対応する量子臨界点近傍の遍歴電子強磁性と反強磁性について、温度や磁場の影響による古典-量子臨界領間、及び臨界-低温領域間の磁氣的性質の移り変わりに関心をもって研究を行っている。

II グラフェンの電子状態とトポロジカル相転移の理論

Theory of Electron Systems in Graphene

長谷川泰正

Hasegawa, Y.

炭素原子が2次元的に蜂の巣構造をなすグラフェンでは、質量ゼロの相対論的ディラック粒子と同じエネルギー分散を持つ励起が実現されており、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、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、ゼロエネルギーの励起が起きるディラック点は、一軸性圧力により波数空間での位置が移動し、様々なトポロジカル相転移を引き起こす可能性があることと、状態密度の変化として実験で観測可能なことを理論的に示した。また、ツイストした2層グラフェンでは、単位胞が大きくなるため、実現可能な磁場で非常に興味深い量子ホール効果の値が得られることを理論的に示した。

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、最近、多く発見されている。従来から知られていた超伝導体は、BCS(Bardeen-Cooper-Schrieffer)理論でよく説明することができる。すなわち、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。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 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。我々は、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て、2012年度は、 $S = 1$ スピン系で世界で初めて27サイト系の計算に成功した。この計算に基づいて、空間異方性をもつ $S = 1$ ハイゼンベルク三角格子反強磁性体の基底状態の長距離秩序について調べた。

発表論文 List of Publications

- I-1 高橋慶紀: 遍歴磁性の残された課題と今後の展望 遍歴電子系研究会「金属磁性の将来展望」(明石商工会議所、2012年12月1日)、世話人 高橋慶紀(兵庫県大)、吉村一良(京大理)、中村裕之(京大工)
- I-2 Y. Takahashi: Spin Fluctuation Theory of Itinerant Electron Magnetism, Springer Tracts in Modern Physics, Vol. 253, pp.194, Springer Heidelberg 2013, ISBN: 978-3-642-36665-9 (Print) 978-3-642-36666-6 (Online)
- II-1 Y. Hasegawa and K. Kishigi(熊本大学教育学部): Merging Dirac points and topological phase transitions in the tight-binding model on the generalized honeycomb lattice, Phys. Rev. B **86** 165430(1-18) (2012).
- II-2 岸木敬太(熊本大学教育学部)・長谷川泰正: ハチの巣格子の強束縛モデルにおけるディラック点とトポロジカル相転移、日本物理学会 第68回年次大会、(広島大学、2013年3月)
- II-3 長谷川泰正・甲元真人(東京大学物性研究所): ツイストした2層グラフェンのランダウ準位と量子ホール効果、日本物理学会 第68回年次大会、(広島大学、2013年3月)
- IV-1 T. Sakai(原子力機構 SPring-8) and H. Nakano: Quantum Critical Magnetization Behaviors of the Kagome- and Triangular-Lattice Antiferromagnets, J. Low Temp. Phys. **170** 255-260 (2012)
- IV-2 T. Shimokawa(神戸大連携創造) and H. Nakano: Magnetization curve of the kagome-strip-lattice antiferromagnet, J. Low Temp. Phys. **170** 328-333 (2012)
- IV-3 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(神戸大連携創造), 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 , J. Phys.: Conf. Ser. **400** 032118 (2012)
- IV-4** T. Sakai(原子力機構 SPring-8) and H. Nakano: Novel Field-Induced Quantum Phase Transition of the Kagome-Lattice Antiferromagnet, J. Phys.: Conf. Ser. **400** 032076 (2012)
- IV-5** S. Okubo(神戸大分子フォトセ), T. Ueda(神戸大院理), H. Ohta(神戸大分子フォトセ), W. Zhang(神戸大分子フォトセ), T. Sakurai(神戸大研究基盤セ), N. Onishi(京大化研), M. Azuma(京大化研), Y. Shimakawa(京大化研), H. Nakano, and T. Sakai(原子力機構 SPring-8): Dzyaloshinsky-Moriya Interaction and Field Induced Magnetic Order Phase in an Antiferromagnetic Honeycomb Lattice Compound $\text{Bi}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$ Studied by High-Field ESR, Phys. Rev. B **86** 140401(R)(1-4) (2012)
- IV-6** T. Shimokawa(神戸大連携創造) and H. Nakano: Ferrimagnetism of the Heisenberg models on the quasi-one-dimensional kagome strip lattices, J. Phys. Soc. Jpn. **81** 084710(1-8) (2012)
- IV-7** 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-8** T. Sakai(原子力機構 SPring-8) and H. Nakano: Quantum critical magnetization behaviors of kagome- and triangular-lattice antiferromagnets, Phys. Status Solidi B **250** 579-582 (2013)
- IV-9** H. Yamaguchi(阪府大院理), K. Iwase(阪府大院理), T. Ono(阪府大院理), T. Shimokawa(神戸大連携創造), H. Nakano, Y. Shimura(東大物性研), N. Kase(東大物性研), S. Kitataka(東大物性研), T. Sakakibara(東大物性研), T. Kawakami(阪大院理), and Y. Hosokoshi(阪府大院理): Unconventional Magnetic and Thermodynamic Properties of $S = 1/2$ Spin Ladder with Ferromagnetic Legs, Phys. Rev. Lett. **110** 157205(1-5) (2013)
- IV-10** H. Nakano, S. Todo(東大物性研), and T. Sakai(原子力機構 SPring-8): Long-Range Order of the Three-Sublattice Structure in the $S = 1$ Heisenberg Antiferromagnet on a Spatially Anisotropic Triangular Lattice, J. Phys. Soc. Jpn. **82** 043715(1-5) (2013)
- IV-11** H. Yamaguchi(阪府大院理), S. Nagata(阪府大院理), M. Tada(阪府大院理), K. Iwase(阪府大院理), T. Ono(阪府大院理), S. Nishihara(広島大理), Y. Hosokoshi(阪府大院理), T. Shimokawa(神戸大連携創造), H. Nakano, H. Nojiri(東北大金研), A. Matsuo(東大物性研) and K. Kindo(東大物性研), and T. Kawakami(阪大院理): Crystal structure and magnetic properties of honeycomb-like lattice antiferromagnet p -BIP- V_2 , Phys. Rev. B **87** 125120(1-8) (2013)

- IV-12** 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. Kor. Phys. Soc.
- IV-13** T. Shimokawa(神戸大連携創造) and H. Nakano: Nontrivial ferrimagnetism of the Heisenberg model on the Union Jack strip lattice, to be published in J. Kor. Phys. Soc.
- IV-14** H. Nakano and T. Sakai(原子力機構 SPring-8): The Two-Dimensional $S = 1/2$ Heisenberg Antiferromagnet on the *Shuriken* Lattice – a Lattice Composed of Vertex-Sharing Triangles – ” J. Phys. Soc. Jpn. **82** 083709(1-5) (2013)
- IV-15** 中野博生・藤堂眞治(東大物性研)・坂井徹(原子力機構 SPring-8), “ 2次元フラストレート系の計算科学的研究 ”スーパーコンピューティングニュース第15 pp.33-45 (2013年2月)
- IV-16** Hiroki Nakano: (invited) “Two-Dimensional Frustrated Antiferromagnets by Large-Scale Parallel Calculations of Numerical Diagonalizations” JAEA Synchrotron Radiation Research Symposium “Magnetism in Quantum Beam Science”, (SPring8, 2013年3月)
- IV-17** Hiroki Nakano: (invited) “Numerical-Diagonalization Study of Two-Dimensional Frustrated Magnets by Huge-Scale Parallelization” GCOE interdisciplinary workshop on numerical methods for manybody correlations, (Univ. of Tokyo, 2013年2月)
- IV-18** 下川統久朗(神戸大連携創造)・中野博生・太田仁(神戸大分子フォトセンター): Non-Lieb-Mattis 型フェリ磁性における不整合な長周期構造についての数値的研究、日本物理学会第68回年次大会(広島大学、2013年3月)
- IV-19** 中野博生・坂井徹(原子力機構 SPring8)・藤堂眞治(東大物性研): 空間異方性を持つ三角格子 $S = 1$ ハイゼンベルグ反強磁性体、日本物理学会第68回年次大会(広島大学、2013年3月)
- IV-20** 渡辺健(阪大理)・川村光(阪大理)・坂井徹(原子力機構 SPring8)・中野博生・大久保毅(東大物性研): 三角格子上の $S = 1/2$ ランダム・ハイゼンベルグ反強磁性体の磁気秩序化、日本物理学会第68回年次大会(広島大学、2013年3月)
- IV-21** 坂井徹(原子力機構 SPring8)・中野博生: カゴメ格子反強磁性体の磁化過程についての数値対角化による研究、日本物理学会第68回年次大会(広島大学、2013年3月)
- IV-22** 永田慎太郎(阪府大院理)・山口博則(阪府大院理)・小野俊雄・(阪府大院理) 下川統久朗(神戸大連携創造本部)・中野博生・吉居俊輔(東北大 CINTS)・野尻浩之(東北大金研)・細越裕子(阪府大院理): フェルダジルピラジカル m -BIP- V_2 の構造及び磁性、日本物理学会 2012 年秋季大会(横浜国立大学、2012年9月)

- IV-23 岩瀬賢治 (阪府大院理)・山口博則 (阪府大院理)・小野俊雄 (阪府大院理)・下川統久朗 (神戸大連携創造本部)・中野博生・松尾晶 (東大物性研)・金道浩一 (東大物性研)・細越裕子 (阪府大院理) : フェルダジル系純有機磁性体 $m\text{-Ph-V}_2$ の構造と低温物性、日本物理学会 2012 年秋季大会 (横浜国立大学、2012 年 9 月)
- IV-24 中野博生・坂井徹 (原子力機構 SPring8) : 三角格子反強磁性体のスピン励起、日本物理学会 2012 年秋季大会 (横浜国立大学、2012 年 9 月)
- IV-25 大久保晋 (神戸大分子フォトセ)・植田友成 (神戸大院理)・太田仁 (神戸大分子フォトセ)・張衛民 (神戸大分子フォトセ)・櫻井敬博 (神戸大研究基盤セ)・大西希 (京大化研)・東正樹 (京大化研)・島川祐一 (京大化研)・中野博生・坂井徹 (原子力機構 SPring8) : 強磁場 ESR 測定による $S = 3/2$ ハニカム格子反強磁性体 $\text{Bi}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$ の DM 相互作用の研究、日本物理学会 2012 年秋季大会 (横浜国立大学、2012 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 SPring8)・野村清英 (九大院理)・籾木誠 (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 II、日本物理学会 2012 年秋季大会 (横浜国立大学、2012 年 9 月)
- IV-27 下川統久朗 (神戸大連携創造本部)・中野博生 : Union Jack 型格子模型において現れる非自明なフェリ磁性の数値的研究、日本物理学会 2012 年秋季大会 (横浜国立大学、2012 年 9 月)
- IV-28 坂井徹 (原子力機構 SPring8)・中野博生 : $S = 1/2$ 歪んだ三角格子反強磁性体におけるランダムネスの効果、日本物理学会 2012 年秋季大会 (横浜国立大学、2012 年 9 月)
- IV-29 中野博生 : フラストレート磁性体の計算科学的研究- 空間異方性を持つ三角格子 $S=1$ ハイゼンベルク反強磁性体- CMSI 研究会 (岡崎カンファレンスセンター、2012 年 12 月)
- IV-30 中野博生 : 空間異方性を持つ三角格子 $S=1$ ハイゼンベルク反強磁性体量子スピン系研究会 (新潟大学、2013 年 3 月)

大学院物質理学研究科

博士前期課程

肖広義 : 量子臨界点近傍の遍歴電子常磁性体の磁気比熱の温度、磁場依存性

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 23～26 年度)基盤研究(B) 課題番号:23340109
研究課題 スピナノチューブにおけるスピン・電荷・カイラリティが創る新しい量子現象の理論
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
- 3 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 24～26 年度)
基盤研究(C) 課題番号:24540348
研究課題 フラストレート磁性体の磁場中異常量子現象に関する大規模並列計算による理論的研究
研究代表者 中野博生