

I 有機導体でのエネルギーの磁場依存性と 量子ホール効果の理論

Theory of magnetic-field-dependence of the energy
and quantum Hall effects in organic conductors

長谷川泰正
Hasegawa, Y.

結晶中の電子の持つエネルギーはバンド構造といわれる波数依存性を持つが、グラフェンや擬2次元分子性導体では、二つのバンドが波数空間の一点でのみ交差し、その点のまわりのエネルギーが波数の1次の依存性を示すことが最近実験的に明らかになり、非常に興味をもたれている。このエネルギーの波数依存性は、質量ゼロのディラック粒子の場合と同じであり、質量ゼロのディラック粒子が物質中で実現できたと注目されている。また、トポロジカル絶縁体やトポロジカル超伝導体を考える場合の良いモデルとなることから多くの関心を集めている。擬2次元分子性導体 α -(BEDT-TTF)₂I₃ では、圧力によって電子状態が大きく変えられることも知られている。 α -(BEDT-TTF)₂I₃ に約 3kbar 以上の一軸性圧力を加えた場合、線形のエネルギー分散を示すディラックコーンが大きく傾いた質量ゼロのディラックコーンが実現していることが知られている。我々は、それ以下の圧力ではディラックコーンの傾きが臨界値を越えてしまい、ちょうど臨界圧力の時には、ディラックコーンが傾いた方向 ($+k_x$ 方向とする) に対してはエネルギーの波数依存性の1次の項が消え、2次の項が重要になることを示した。その場合にも、 $-k_x, +k_y, -k_y$ の3方向については、質量ゼロのディラック点の場合と同じく、エネルギーは波数の1次依存性を示す。我々は、このような点を $3/4$ ディラック点と名づけ、磁場によるエネルギーの量子化、量子ホール効果、磁化の磁場依存振動現象 (de Haas - van Alphen 振動) などを理論的に調べた。

II フラストレーションのある反強磁性体での 磁化ジャンプ現象

Magnetization jump in frustrated antiferromagnets

長谷川泰正・中野博生
Hasegawa, Y, Nakano, H.

物質の持つ磁性は電子のスピンに由来し、量子力学の持つ演算子の非可換性や重ね合わせの原理のため、エネルギーの固有状態が複雑で興味深い性質を持つ。理論的には、ハイゼンベルク反強磁性モデルで記述することができる。三角形の構造を持ちフラストレーションのある場合には、外部磁場が加えられたときに、磁化プラトーや磁化ジャンプなど、興味深い性質が見られる。正方カゴメ格子(正方形と二等辺三角形の手裏剣構造を持つ結晶格子)上の反強磁性ハイゼンベルクモデルの磁化過程における磁化ジャンプを、数値的厳密対角化および近似的固有関数を用いて理論的に調べた。

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。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る。このプログラムを「京」や Oakforest-PACS などのスーパーコンピュータで実行し、我々は、 $S = 1/2$ スピン系 42 サイト系の磁化過程の計算に世界で唯一成功している研究グループである。2017 年度は、 $S = 1/2$ カゴメ格子ハイゼンベルク反強磁性体の磁化過程を数値的厳密対角化法により 45 サイト系について全領域で求めることに世界で初めて成功した。この系は、飽和磁化の 9 分の 1 の高さに磁化プラトーが発現する可能性が指摘されていた。我々は数値的厳密対角化法で得た 45 サイトまでの磁化過程を慎重に検討し、この高さに関する知見としてプラトーが開いているとは言えない、という結論を得た。

発表論文 List of Publications

- I-1** K. Kishigi(熊本大学教育学部), Y. Hasegawa: Three-quarter Dirac points, Landau levels, and magnetization in α -(BEDT-TTF)₂I₃, Phys. Rev. B **96** 085430(1-23) (2017)
- I-2** 岸木敬太 (熊本大学教育学部)・綾部真知 (熊本大学教育学部)・長谷川泰正 : 3/4 ディラックコーンとランダウ準位、日本物理学会 2017 年秋季大会 (岩手大学、2017 年 9 月)
- I-3** 岸木敬太 (熊本大学教育学部)・長谷川泰正 : α -(BEDT-TTF)₂I₃ の電荷秩序下における 3/4 ディラックとランダウ準位、日本物理学会 第 73 回年次大会 (2018 年) (東京理科大学、2018 年 3 月)
- I-4** 長谷川泰正・岸木敬太 (熊本大学教育学部) : 3/4 ディラック点近くでの磁場効果、日本物理学会 第 73 回年次大会 (2018 年) (東京理科大学、2018 年 3 月)
- II-1** Y. Hasegawa, H. Nakano, T. Sakai: Metamagnetic jump in the spin- $\frac{1}{2}$ antiferromagnetic Heisenberg model on the square kagome lattice, Phys. Rev. B **98** 014404(1-9) (2018)
- III-1** H. Nakano, T. Sakai: Ferrimagnetism in the Spin-1/2 Heisenberg Antiferromagnet on a Distorted Triangular Lattice, J. Phys. Soc. Jpn. **86** 063702(1-5) (2017)
- III-2** H. Nakano, T. Sakai: Magnetization Process of the Spin-1/2 Triangular-Lattice Heisenberg Antiferromagnet with Next-Nearest-Neighbor Interactions – Plateau or Nonplateau –, J. Phys. Soc. Jpn. **86** 114705(1-6) (2017)
- III-3** A. Shimada (京都大学理), H. Nakano, T. Sakai, K. Yoshimura (京都大学理) : Spin-1/2 Triangular-Lattice Heisenberg Antiferromagnet with $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Type Distortion – Behavior around the Boundaries of the Intermediate Phase, J. Phys. Soc. Jpn. **87** 034706(1-7) (2018)
- III-4** H. Nakano, T. Sakai: Numerical-Diagonalization Study of Magnetization Process of Frustrated Spin-1/2 Heisenberg Antiferromagnets in Two Dimensions: – Triangular- and Kagome-Lattice Antiferromagnets –, J. Phys. Soc. Jpn. **87** 063706(1-5) (2018)
- III-5** 嶋田ありさ (京都大学理)・中野博生・坂井徹・吉村一良 (京都大学理) : $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 型の歪みを持つ三角格子上的 $S = 1/2$ ハイゼンベルク反強磁性体– 磁化過程と磁化率 –, 粉体および粉末冶金 65 巻 3-9 (2018)
- III-6** H. Nakano, T. Sakai: Quantum Spin Liquid in the Kagome-Lattice Antiferromagnet and Related Systems, J. Phys.: Conf. Series **868** 012006(1-11) (2017)

- III-7 A. Shimada (京都大学理) , T. Sakai, H. Nakano, K. Yoshimura (京都大学理) : Spontaneous Magnetization of the Spin-1/2 Heisenberg Antiferromagnet on the Triangular Lattice with a Distortion, J. Phys.: Conf. Series **969** 012126(1-6) (2018)
- III-8 T. Sakai, H. Nakano: Quantum Spin Fluid Behaviors of the Kagome- and Triangular-Lattice Antiferromagnets, J. Phys.: Conf. Series **969** 012127(1-6) (2018)
- III-9 T. Sakai, H. Nakano: Gapless spin excitations in the S=1/2 Kagome- and triangular-lattice Heisenberg antiferromagnets, Physica B **536** 85-88 (2018)
- III-10 中野博生・坂井徹：数値対角化による 2 次元フラストレート反強磁性体の量子相転移の研究、日本物理学会 2017 年秋季大会 (岩手大学、2017 年 9 月)
- III-11 嶋田ありさ (京都大学理)・坂井徹・中野博生・吉村一良 (京都大学理) : 歪んだ三角格子ハイゼンベルク反強磁性体の比熱、日本物理学会 2017 年秋季大会 (岩手大学、2017 年 9 月)
- III-12 坂井徹・中野博生・野尻浩之 (東北大学金研) : 直行ダイマー系の量子相転移における ESR 禁制遷移、日本物理学会 2017 年秋季大会 (岩手大学、2017 年 9 月)
- III-13 福元好志 (東京理科大学理工)・横山祐人 (東京理科大学理工)・中野博生：球体カゴメ系 W72V30 の磁化過程の厳密対角化計算：ステップ構造消失の起源について、日本物理学会 2017 年秋季大会 (岩手大学、2017 年 9 月)
- III-14 轟木義一 (千葉工業大学)・中野博生：反強磁性次近接相互作用のある積層三角格子反強磁性体の磁場中相図、日本物理学会 2017 年秋季大会 (岩手大学、2017 年 9 月)
- III-15 嶋田ありさ (京都大学理)・中野博生・坂井徹・吉村一良 (京都大学理) : 歪みを持つ三角格子上の S=1/2 ハイゼンベルク反強磁性体の相転移と磁化率、日本物理学会 第 73 回年次大会 (2018 年) (東京理科大学、2018 年 3 月)
- III-16 坂井徹・中野博生：磁化率解析法による量子系のスピギャップ有無の判定、日本物理学会 第 73 回年次大会 (2018 年) (東京理科大学、2018 年 3 月)
- III-17 中野博生：【招待講演】大規模数値対角化計算で見たカゴメ格子反強磁性体とその周辺、日本物理学会 第 73 回年次大会 (2018 年) (東京理科大学、2018 年 3 月)
- III-18 前田悠登 (東京理科大学理工)・井上晃来 (東京理科大学理工)・福元好志 (東京理科大学理工)・中野博生：ミクロカノニカル熱的量子純粋状態を用いた球体カゴメ系のカノニカルアンサンブル計算、日本物理学会 第 73 回年次大会 (2018 年) (東京理科大学、2018 年 3 月)
- III-19 嶋田ありさ (京都大学理)・中野博生・坂井徹・吉村一良 (京都大学理) : 歪みを持つ三角格子反強磁性体の相転移、粉体粉末冶金協会平成 29 年度春季大会 (早稲田大学、2017 年 5 月)

III-20 嶋田ありさ (京都大学理)・中野博生・坂井徹・吉村一良 (京都大学理): 歪みをもつ三角格子反強磁性体の量子相転移、粉体粉末冶金協会平成 29 年度秋季大会 (京都大学、2017 年 11 月)

III-21 H. Nakano:【invited talk】The destabilization of the ferrimagnetic ground state of a spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet owing to frustrations, JSPMIC2017 - 60th Anniversary - (京都大学、2017 年 11 月), J. Jpn. Soc. Powder Powder Metallurgy **65** 243-248 (2018)

III-22 A. Shimada (京都大学理), T. Sakai, H. Nakano, K. Yoshimura (京都大学理): Phase Transitions of the Heisenberg Antiferromagnet on a Distorted Triangular Lattice, JSPMIC2017 - 60th Anniversary - (京都大学、2017 年 11 月)

III-23 H. Nakano : An eigenvalue problem for sparse matrices with a large dimension – huge-scale parallel calculations in K computer and Oakforest-PACS –, JSST2017 (東京電機大学、2017 年 10 月)

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) (平成 28 ~ 31 年度)
基盤研究 (C) 課題番号:16K05418
研究課題 大規模並列計算によるフラストレーションが誘起する磁性体の異常量子物性の新展開
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) (平成 28 ~ 30 年度)
基盤研究 (C) 課題番号:16K05419
研究課題 カゴメ格子反強磁性体の ESR 禁制遷移を利用したスピンギャップ観測の理論的研究
研究代表者 坂井 徹
研究分担者 中野博生