

## 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、実用的な応用面で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が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て来た。その結果、現在では SCR 理論の困難がすべて解消し、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得られている。また、その多くは実験結果によって確かめられている。現在では、層状化合物磁性体の磁化曲線に及ぼす次元性の効果や、遍歴磁性体の磁気異方性などに関心をもち、研究を行っている。

以前から関心を持ち研究してきた FeSi 化合物について、Ge をドーブした Fe(Si,Ge) 系の電子状態や  $\text{YMn}_2$  の電子状態についての x 線光電子分光を用いた研究にも、理論的な立場から研究協力を行っている。

## II 超伝導の理論

Theory of Superconductivity

長谷川泰正

Hasegawa, Y.

空間反転対称性を持たない結晶構造を持つ  $\text{CePt}_3\text{Si}$  で発見された超伝導が、最近多くの関心を集めている。その発見に続いて、多くの空間反転対称性を持たない系で超伝導が発見された。ほとんどの超伝導体では2つずつの電子がスピン一重項のペアを組むことによって超伝導状態になる。 $\text{CePt}_3\text{Si}$  で実現している超伝導は同じ向きを向いたスピンがペアを組むことで生じるスピン三重項超伝導であると考えられる。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。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。それによると、アニールされた試料では、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た。さらに、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することができた。

### III 擬 1 次元電子系での磁場誘起スピン密度波の理論

Theory of Field-Induced Spin Density Wave  
in Quasi-One-Dimensional Electron Systems

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、超伝導、磁場誘起スピン密度波、量子ホール効果など興味深い多様な物性を示す。その中でも、 $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$  は、陰イオン  $\text{ClO}_4^-$  が低温で整列して周期ポテンシャルを作り出すため、偶数に量子化された量子ホール効果が抑制されるなど、磁場誘起スピン密度波と量子ホール効果に興味深い効果を及ぼす。実験的には、冷却速度を変えることにより陰イオン整列の度合いが変わり、周期ポテンシャルの大きさが変化する。我々は、周期ポテンシャルの大きさをパラメータとして、磁場誘起スピン密度波への転移を理論的に調べた。フェルミ面の曲がり具合が微妙に変わること量子ホール効果の出現が大きく変わることを示し、実験との比較を行ってパラメータを決定した。

### IV 蜂巢格子での電子状態の理論

Theory of Electron States in Honeycomb Lattice

長谷川泰正  
Hasegawa, Y.

2次元蜂巣構造のグラフェン(単層グラファイト)では、質量ゼロのディラック粒子と同じエネルギー分散を持つことにより、量子ホール効果や電気伝導に興味深い現象がみられる。最近多くの実験や理論研究がなされ、注目を集めている。また、有機超伝導体  $\alpha$ -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ でも、圧力下でグラフェンと同様のエネルギー分散を持つことがわかってきている。一般に、空間反転対称性が破れるとエネルギーギャップがゼロではなくなると思われていた。我々は、空間反転対称性が破れている場合でも、我々が定義した「平均化された空間反転対称性」が満たされていればエネルギーギャップがゼロのままであることを示した。

## V 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、 $S = 1$ のスピンの系に対しては世界最大となるスピン数  $N = 24$ の系の計算を実現し、 $S = 1$ 反強磁性ハイゼンベルク鎖のハルデンギャップの大きさを非常に高精度に見積もることに成功している。さらに、 $S = 5/2$ のボンド交替鎖の基底状態と励起状態の間のエネルギーギャップを調べ、その交替比依存性を初めて明らかにした。交替比を0から1まで変化させる間に現れる逐次相転移の転移点を精度良く求め、一般の  $S$ における転移点を推定した。また、 $S = 1$ スピンの1次元鎖が次近接相互作用を持つ場合の  $1/2$ プラトーを数値的に調べ、異方性がない場合でも次近接相互作用の強さによっては  $1/2$ プラトーがわずかに残ることを明らかにした。

## VI 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。我々は、まず、1次元系のハルデン状態の異方性による相転移を調べた。等方的な交換相互作用によって結合している整数スピンの1次元鎖を形成する場合、基底状態の上にハルデンギャップと呼ばれるエネルギーギャップが現れ、その基底状態は、非自明な量子状態として多くの研究が進められた結果、 $S = 1$ の場合の基底状態を特徴付ける秩序変数としてストリング秩序が提案されている。系が異方性を持つ場合、このハルデンギャップの大きさは変化し、遂には消滅して、基底状態は定性的に異なる状態への相転移を示す。異方性として、相互作用が  $XXZ$  型となるパラメータとシングルイオン型の異方性のパラメータを同時に考慮した場合の相図は、エネルギーの励起ギャップのパラメータ依存性に着目して調べられてきた。しかしながら、基底状態だけで決まるストリング秩序の振る舞いから、対応する相図を得ることはできていなかった。我々は、このストリング秩序を  $S = 1$  の場合に、密度繰り込み群法の計算から評価し、そのデータを解析する手段として有限サイズスケーリングの考え方に基づく基底状態現象論繰り込み群の方法を提案した。また、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  $S$  で調べた結果、同じ格子形状でも、 $S = 1/2$  や  $S = 1$  の場合の臨界指数と  $S = 3/2$  の臨界指数が異なっていることを見出した。

#### 発表論文 List of Publications

- I-1 H. Yamaoka(播磨理研), M. Matsunami(物性研), R. Eguchi(物性研), Y. Ishida(播磨理研), N. Tsujii(物材機構), Y. Takahashi, Y. Senba(JASRI), H. Ohashi(JASRI), and S. Shin(物性研): Electronic structure of  $\text{FeSi}_{1-x}\text{Ge}_x$  and  $\text{FeGa}_3$  investigated by soft x-ray photoelectron spectroscopy complementary to x-ray emission spectroscopy, *Phys. Rev. B*, **78**, 045125 (2008)
- I-2 T. Koyama, H. Yamashita, K. Ueda, T. Mito, T. Kohara, Y. Takahashi, I. Watanabe(理研和光), Y. Tabata(京大院工), and H. Nakamura(京大院工): Frustration-induced valence bond crystal and its melting in  $\text{Mo}_3\text{Sb}_7$ , *Phys. Rev. Lett.*, **101**, 126404 (2008)

- I-3** 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 (2009)
- I-4** 高橋慶紀: 磁気測定による金属磁性理論の検証、セミナー講演 (龍谷大学 2008 年 11 月 5 日)
- I-5** 高橋慶紀: 遍歴電子磁性体の磁気異方性のスピンゆらぎ理論、日本物理学会 第 64 回年次大会 (立教大学 2009 年 3 月)
- II-1** 谷口広敏・長谷川泰正: 空間反転対称性のない結晶  $\text{CePt}_3\text{Si}$  での空間的に不均一な超伝導の理論、日本物理学会 2008 年秋季大会 (岩手大学 2008 年 9 月)
- II-2** 谷口広敏・長谷川泰正: 空間反転対称性のない結晶  $\text{CePt}_3\text{Si}$  でのトリプレット超伝導とスピン軌道相互作用、日本物理学会 第 64 回年次大会 (立教大学 2009 年 3 月)
- III-1** Y. Hasegawa and K. Kishigi(熊本大学教育学部): Generalized susceptibility of a quasi-one-dimensional system with periodic potential: A model for the organic superconductor  $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$ , *Phys. Rev. B*, **78**, 045117 (2008)
- III-2** K. Kishigi(熊本大学教育学部) and Y. Hasegawa: Susceptibility of the quasi-one-dimensional electrons in a periodic potential, *Solid State Science*, **10**, 1449 (2008)
- III-3** 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 (2009)
- III-4** 岸木敬太 (熊本大学教育学部)・長谷川泰正:  $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$  の磁場誘起スピン密度波での量子ホール効果の陰イオン整列効果、日本物理学会 2008 年秋季大会 (岩手大学 2008 年 9 月)
- III-5** 岸木敬太 (熊本大学教育学部)・長谷川泰正:  $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$  の磁場誘起スピン密度波と陰イオン整列、日本物理学会 第 64 回年次大会 (立教大学 2009 年 3 月)
- IV-1** K. Kishigi(熊本大学教育学部), H. Hanada(熊本大学教育学部), and Y. Hasegawa: Energy Gap and Averaged Inversion Symmetry of Tight-Binding Electrons on Generalized Honeycomb Lattice, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **77**, 074707 (2008)
- IV-1** K. Kishigi(熊本大学教育学部), R. Takeda(熊本大学教育学部), and Y. Hasegawa: Energy Gap of Tight-Binding Electrons on Generalized Honeycomb Lattice, *J. Phys.: Conf. Ser.*, **132**, 012005 (2008)
- V-1** H. Nakano and A. Terai(大阪市大工): Reexamination of Finite-Lattice Extrapolation of Haldane Gaps, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **78**, 014003 (2009)
- V-2** 中野博生・坂井 徹 (原子力機構):  $S = 5/2$  ボンド交替鎖のエネルギーギャップ、日本物理学会 2008 年秋季大会 (岩手大学 2008 年 9 月)

- V-3 中野博生・坂井 徹 (原子力機構):  $S = 5/2$  ボンド交替鎖の相転移、日本物理学会 2009 年年次大会 (立教大学 2009 年 3 月)
- V-4 利根川孝 (福井工大)・中野博生・坂井 徹 (原子力機構)・岡本清美 (東工大理): 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、日本物理学会 2009 年年次大会 (立教大学 2009 年 3 月)
- VI-1 H. Ueda(阪大基礎工), H. Nakano, and K. Kusakabe(阪大基礎工): Finite-size scaling of string order parameters characterizing the Haldane phase, Phys. Rev. B, **78**, 224402 (2008)
- VI-2 H. Ueda(阪大基礎工), H. Nakano, and K. Kusakabe(阪大基礎工): Finite-size scaling of string order parameters characterizing the Haldane phase, APS March meeting, March 2009, Pittsburgh, USA
- VI-3 下川統久朗・中野博生: 擬一次元量子スピン系における鎖間相互作用の効果、日本物理学会 2008 年秋季大会 (岩手大学 2008 年 9 月)
- VI-4 上田 宏 (阪大基礎工)・中野博生・草部浩一 (阪大基礎工):  $S = 1$  反強磁性 2 本鎖における周期的鎖間相互作用の効果、日本物理学会 2008 年秋季大会 (岩手大学 2008 年 9 月)
- VI-5 下川統久朗・中野博生: 量子スピン梯子に付加する梯子間相互作用の効果、日本物理学会 2009 年年次大会 (立教大学 2009 年 3 月)
- VI-6 上田 宏 (阪大基礎工)・中野博生・草部浩一 (阪大基礎工): 基底状態現象論的繰り込み群の拡張と 1 次元スピン鎖への応用、日本物理学会 2009 年年次大会 (立教大学 2009 年 3 月)
- VI-7 十河真司 (阪大基礎工)・清家睦史 (阪大基礎工)・丸山 勲 (阪大基礎工)・中野博生・草部浩一 (阪大基礎工): 密度汎関数変分法計算による  $\text{Sr}_2\text{CuO}_3$  の電子状態計算、日本物理学会 2009 年年次大会 (立教大学 2009 年 3 月)

## 大学院物質理学研究科

### 博士前期課程

- 下川統久朗 : 低次元量子スピン系における基底状態相転移の数値的研究  
 谷口広敏 : 空間反転対称性のない結晶  $\text{CePt}_3\text{Si}$  におけるトリプレット超伝導とスピン軌道相互作用

## 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 20 年 ~ 23 年) 基盤研究 (B) 課題番号 20340096  
 研究課題 スピンナノチューブの異常量子現象の理論的・計算科学的研究  
 研究分担者 中野博生

2 平成 20 年度兵庫県立大学特別教育研究助成金（奨励研究）

研究課題 量子スピン系の基底状態相転移に関する計算科学的研究

研究代表者 中野博生