

## 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

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、有機導体などの 2次元電子系での電子状態の理論

Theory of Two-Dimensional Electron Systems  
in Graphene and Organic Conductors

長谷川泰正

Hasegawa, Y.

最近、グラフェンについて、多くの実験的および理論的研究がなされている。グラフェンは、蜂の巣構造をした2次元面からなり、そこを電子が動き回っている。フェルミ面は

ディラックコーンと呼ばれる2つの円錐の交点になり、質量ゼロの相対論的ディラック粒子が物質中で実現されていると考えられ、関心を集めている。この系では、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いる。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。また、有機導体  $\alpha$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>I<sub>3</sub> は3次元結晶であるが、層状構造をしているため、ディラックコーンが実現していると考えられている。我々は、グラフェンで異方性や次近接間の飛び移りなどを考慮した場合のディラックコーンの形状について理論的に調べた。また、有機導体  $\alpha$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>I<sub>3</sub> において出現可能なエッジ状態について理論的研究を行った。 $\alpha$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>I<sub>3</sub> でのエッジ状態はまだ実験的に観測されていないが、我々の研究により存在することが示され、応用が期待できる。

### 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 (TMTSF)<sub>2</sub>X, (X=PF<sub>6</sub>, ClO<sub>4</sub> 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次元正方格子上の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 (TMTSF)<sub>2</sub>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 従来型とは異なる超伝導の理論 Theory of Unconventional Superconductivity

長谷川泰正  
Hasegawa, Y.

最近、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、未解決な問題が多く残されており、研究を続けている。

## 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、 $S = 1/2$  カゴメ格子ハイゼンベルク反強磁性体について数値的に調べた。特に、過去に報告されているシステムサイズより大きな系(最大 42 サイト)の計算結果を得て、スピンギャップ問題として知られていた未解決課題の検討を行った。その結果、多くの理論家の予想を覆して、カゴメ格子反強磁性体にはスピンギャップは存在しないという結論を導いた。

## 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。また、リーブ・マティス型フェリ磁性の発現には、単位胞一つ当たり複数のスピンの含まれている状況が必要であるが、系にフラストレーションがあると、単位胞一つ当たりスピンの唯一つであってもフェリ磁性が発現し、リーブ・マティス型と非リーブ・マティス型の両方が現われる事例を見出し、これを報告した。

#### 発表論文 List of Publications

- I-1 Y. Takahashi: First-Order Magnetic Phase Transitions in Anisotropic Itinerant Electron Ferromagnets, *J. Phys. Soc. Jpn.* **79**, 083707(1-4) (2010)
- I-2 T. Koyama, H. Nakamura(京大院工), T. Kohara, and Y. Takahashi: Magnetization process of a narrow gap semiconductor  $\text{FeSb}_2$ , *J. Phys. Soc. Jpn.* **79**, 093704(1-4) (2010)
- I-3 T. Waki(京大院工), Y. Umemoto(京大院工), S. Terazawa(京大院工), Y. Tabata(京大院工), A. Kondo(東大物性研), K. Sato(東大物性研), K. Kindo(東大物性研), S. Alconchel(Universidad Nacional del Litoral), F. Sapina(Universitat de València), Y. Takahashi, and H. Nakamura: Itinerant Electron Metamagnetism in  $\eta$ -Carbide-Type Compound  $\text{Co}_3\text{Mo}_3\text{C}$ , *J. Phys. Soc. Jpn.* **79**, 093703(1-4) (2010)
- I-4 高橋慶紀: 遍歴電子磁性とスピン揺らぎ理論 (講義ノート)、*物性研究* **94**, 531–648 (2010)

- I-5 T. Waki(京大院工), S. Terazawa(京大院工), T. Yamazaki(京大院工), Y. Tabata(京大院工), 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(京大院工): 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-6 中村裕之(京大院工)・寺澤慎祐(京大院工)・和氣 剛(京大院工)・田畑吉計(京大院工)・高橋慶紀: 星型四面体格子のフラストレーションと  $\text{Fe}_3\text{Mo}_3\text{N}$  のスピン液体状態日本物理学会 2010 年秋季大会 (大阪府立大学、2010 年 9 月)
- I-7 高橋慶紀:  $\text{Fe}_3\text{Mo}_3\text{N}$  化合物磁性の交換相互作用行列の波数依存性日本物理学会 2010 年秋季大会 (大阪府立大学、2010 年 9 月)
- I-8 奥田祐希・高橋慶紀: 異方的遍歴磁性体の自発磁化の温度依存性日本物理学会 2010 年秋季大会 (大阪府立大学、2010 年 9 月)
- I-9 Y. Takahashi: Magnetic isotherm of itinerant electron magnets – New approach to itinerant electron metamagnetism (invited), “International and Interdisciplinary Workshop on Novel Phenomena in Integrated Complex Sciences: from No-living to Living Systems” (Coop-Inn Kyoto, Oct. 11-14, 2010)
- I-10 N. Hatayama(近大高専), R. Konno(近大高専), and Y. Takahashi: Effect of dimensionality crossover on magneto-volume properties of quasi one-dimensional weakly antiferromagnetic metals, “International and Interdisciplinary Workshop on Novel Phenomena in Integrated Complex Sciences: from No-living to Living Systems” (Coop-Inn Kyoto, Oct. 11-14, 2010)
- I-11 高橋慶紀: 遍歴磁性の微妙な磁氣的性質、遍歴電子系研究会「金属磁性と量子臨界現象」(国際奈良学セミナーハウス、2011 年 2 月)
- I-12 高橋慶紀: Ising 的な遍歴強磁性体の磁気比熱、日本物理学会第 66 回年次大会 (新潟大学、2011 年 3 月) 震災のため、web で講演資料を公開
- II-1 Y. Hasegawa and K. Kishigi(熊本大学教育学部): Edge States in the Three-Quarter Filled System,  $\alpha$ -(BEDT-TTF) $_2\text{I}_3$ , J. Phys. Soc. Jpn. **80**, 054707(1-11) (2011)
- II-2 岸木敬太(熊本大学教育学部)・上野 開(熊本大学教育学部)・宮本恵梨子(熊本大学教育学部)・長谷川泰正: グラフェンの傾斜したディラックコーン、日本物理学会 2010 年秋季大会 (大阪府立大学、2010 年 9 月)
- II-3 長谷川泰正・岸木敬太(熊本大学教育学部):  $\alpha$ -(BEDT-TTF) $_2\text{I}_3$ [単位胞に 4 サイトある  $3/4$  充填の 2 次元系] の端状態、日本物理学会 2010 年秋季大会 (大阪府立大学、2010 年 9 月)
- II-4 長谷川泰正・岸木敬太(熊本大学教育学部):  $\alpha$ -(BEDT-TTF) $_2\text{I}_3$  のエッジ状態、日本物理学会第 66 回年次大会 (新潟大学、2011 年 3 月) (東日本大震災のため中止).

- III-1** 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-2** 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)
- V-1** 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)
- V-2** H. Nakano and T. Sakai(原子力機構播磨): Numerical-Diagonalization Study of Spin Gap Issue of the Kagome Lattice Heisenberg Antiferromagnet, *J. Phys. Soc. Jpn.* **80**, 053704(1-4) (2011)
- V-3** T. Sakai(原子力機構播磨) and Hiroki Nakano: Critical magnetization behavior of the triangular- and kagome-lattice quantum antiferromagnets, *Phys. Rev. B* **83**, 100405(r)(1-4) (2011)
- V-4** T. Sakai(原子力機構播磨) and H. Nakano: Magnetization ramp of the Kagome lattice antiferromagnet, APS March meeting, March 2011, Dallas, USA
- V-5** T. Sakai(原子力機構播磨) and H. Nakano: Quantum critical phenomena in magnetization process of the Kagome and triangular lattice antiferromagnets, International Conference on Frustration in Condensed Matter 2011, January 2011, Sendai, Japan
- V-6** M. Isoda(香川大教育), H. Nakano and T. Sakai(原子力機構播磨): Numerical exact diagonalization study of triangulated kagome Heisenberg spin system, International Conference on Frustration in Condensed Matter 2011, January 2011, Sendai, Japan
- V-7** H. Nakano and T. Sakai(原子力機構播磨): Magnetization ramp of the kagome lattice antiferromagnet, International Conference on Frustration in Condensed Matter 2011, January 2011, Sendai, Japan
- V-8** H. Nakano and T. Sakai(原子力機構播磨): Magnetization process of the Heisenberg antiferromagnet on the kagome lattice, Highly Frustrated Magnetism, August 2010, Baltimore, USA
- V-9** 礒田 誠 (香川大教育)・中野博生・坂井 徹 (原子力機構): かごめ格子イジング型異方性ハイゼンベルグモデルの熱力学的性質、日本物理学会 2010 年秋季大会 (大阪府立大学、2010 年 9 月)
- V-10** 坂井 徹 (原子力機構)・中野博生・礒田 誠 (香川大教育)・奥西巧一 (新潟大理): カゴメ格子反強磁性体の磁化ランプと XXZ 異方性、日本物理学会 2010 年秋季大会 (大阪府立大学、2010 年 9 月)

- V-11** 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ランプ、日本物理学会 2010 年秋季大会 (大阪府立大学、2010 年 9 月)
- V-12** 中野博生: カゴメ格子反強磁性体のスピギャップ、東大物性研短期研究会「計算物質科学の課題と展望」(東大物性研、2011 年 1 月)
- VI-1** H. Nakano, T. Shimokawa, and T. Sakai(原子力機構播磨): Collapse of Ferrimagnetism in Two-Dimensional Heisenberg Antiferromagnet due to Frustration, J. Phys. Soc. Jpn. **80**, 033709(1-4) (2011)
- VI-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)
- VI-3** T. Tonegawa(神戸大), K. Okamoto(東工大理工), H. Nakano, T. Sakai(原子力機構播磨), K. Nomura(九大理), 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)
- VI-4** H. Ueda(阪大基礎工), H. Nakano, K. Kusakabe(阪大基礎工), and T. Nishino(神戸大理): Scaling Relation for Excitation Energy under Hyperbolic Deformation, Prog. Theor. Phys. **124**, 389-398 (2010)
- VI-5** T. Shimokawa and H. Nakano: Ferrimagnetism of the Heisenberg model on the Kagome stripe lattice, International Conference on Frustration in Condensed Matter 2011, January 2011, Sendai, Japan
- VI-6** K. Okamoto, T. Tonegawa, H. Nakano, T. Sakai, K. Nomura and M. Kaburagi: 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, International Conference on Frustration in Condensed Matter 2011, January 2011, Sendai, Japan
- VI-7** H. Nakano: Haldane Gap of the  $S = 5$  Heisenberg Antiferromagnetic Chain by Numerical Diagonalization Study, Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2010, October 2010, Tokyo, Japan
- VI-8** T. Shimokawa and H. Nakano: Excitation Gap of Antiferromagnetic Spin Ladder of Half Depleted Rung Bond by Numerical Diagonalization Study, Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2010, October 2010, Tokyo, Japan
- VI-9** 多田晶美 (大阪府立大)・下川統久朗・中野博生・松尾 晶 (東大物性研)・金道浩一 (東大物質理)・野尻浩之 (東北大金材研)・西原禎文 (大阪府立大学)・細越裕子 (大阪府立大学): 有機ピラジカル BIP-V2 の分子内および分子間磁気相互作用、日本物理学会 2010 年秋季大会 (大阪府立大学、2010 年 9 月)

VI-10 中野博生・下川統久朗・坂井 徹 (原子力機構) : 2次元 Lieb-Mattis 型フェリ磁性のフラストレーションによる崩壊、日本物理学会 2010 年秋季大会 (大阪府立大学、2010 年 9 月)

VI-11 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、日本物理学会 2010 年秋季大会 (大阪府立大学、2010 年 9 月)

VI-12 利根川 孝 (神戸大名誉教授)・中野博生・岡本清美 (東工大院理工)・坂井 徹 (原子力機構)・野村清英 (九州大理) : オンサイト異方性をもつボンド交代  $S=2$  反強磁性鎖の基底状態相図、日本物理学会 2010 年秋季大会 (大阪府立大学、2010 年 9 月)

## 大学院物質理学研究科

博士前期課程

奥田祐希 : 一軸磁気異方性を有する遍歴磁性体のスピンゆらぎ理論

## 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