

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係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、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。擬低次元磁性体や、メタ転移へのスピンゆらぎの影響についても関心をもっている。

II グラフェン、有機導体での
トポロジカル相転移、量子ホール効果の理論Theory of Topological Phase Transitions and Quantum Hall Effect
in Graphene and Organic Conductors

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。また、有機超伝導体 α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ でも、質量ゼロのディラック粒子が実現していることが発

見され、活発に研究されている。これらの系では、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。

磁場中のエネルギー準位を磁場対エネルギーの図にしたものは、Hofstadter butterfly diagram といわれる複雑で美しい構造を持つことが以前より知られている。エネルギーギャップは、Diophantine 方程式の解で指定される指標を与えることができ、その値が量子ホール効果の値に対応している。しかしながら、グラフェンで Hofstadter butterfly diagram の複雑な構造を直接観測するには、現在のところ実現不可能な強磁場 (数万テスラ) が必要であるため、実験的に直接観測されていない。一方、ツイストした2層グラフェンでは、長い周期を持つようになり、実現可能な磁場で Hofstadter butterfly diagram の複雑な構造を観察することが可能になると考えられる。従来は、単位胞あたりに多くのサイトを持つ系での磁場中のエネルギーを計算する場合には、非常に大きなサイズの行列の固有値を求めなければならないため、近似的な方法でのみ計算が行われていた。われわれは、新たなゲージの取り方を提案し、それによってツイストしたグラフェンのように多くのサイトを含む場合にも、エネルギー固有値を得ることができ、エネルギーギャップの指標を計算することができることを示した。その結果、非常に興味深いエネルギー対磁場の図が得られた。

III フェルミ面がない場合のも生じる磁化振動の理論

Theory of Magnetization Oscillations in the System without Fermi Surface

長谷川泰正

Hasegawa, Y.

磁場を変化させた場合に、磁化が磁場の逆数の関数として周期的に振動する現象はドハース-ファンアルフェン効果としてよく知られており、フェルミ面の形状を測定する手段として用いられている。ドハース-ファンアルフェン効果で磁化が振動する周期は、フェルミ面を磁場に垂直な面で切った断面積に比例する。グラフェンのように質量のないディラック粒子が実現している系で、フェルミエネルギーがディラック点でのエネルギーに等しい場合には、フェルミ面の面積がゼロになり、ドハース-ファンアルフェン効果による磁化の振動は期待できない。われわれは、グラフェンでフェルミ面の面積がゼロの場合にも磁化が磁場の関数として振動することを、理論的に示した。われわれが示した振動は、従来より知られているドハース-ファンアルフェン効果のようにフェルミ面での状態がランダウ準位に量子化されることによるのではなく、磁場中のエネルギー固有値が有限の幅を持ちそれが磁場によって複雑に変化していることによるのが原因である。

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る。2013年度は、「京」コンピュータを活用して、 $S = 1/2$ スピン系で世界で初めて42サイト系の磁化過程の計算に成功した。この計算結果に基づいて、カゴメ格子反強磁性体の磁場中量子異常現象について検討した。また、通常のカゴメ格子とは異なる形状を有する正方カゴメ格子上のハイゼンベルク反強磁性体の磁化過程に、通常のカゴメ格子反強磁性体において対応する磁化の高さに現れる現象とは明らかに異なる磁化ジャンプの振る舞いを見出し、スピントロップ現象との関連を指摘した。

発表論文 List of Publications

- I-1 高橋慶紀: 遍歴磁性 — 未だ少し気になる磁性体遍歴電子系研究会「金属磁性の新たな展開に向けて」(名古屋大学理学部南館、2014年1月25日)、世話人 高橋慶紀(兵県大)、吉村一良(京大理)、佐藤憲昭(名大理)、中村裕之(京大工)
- I-2 N. Hatayama(近大高専), R. Konno(近大高専), and Y. Takahashi: The Behavior of the Staggered Magnetization in Weak Antiferromagnetic Metals, JPS Conf. Proc., 1 012102(1-4) (2014)
- I-3 R. Konno(近大高専), N. Hatayama(近大高専), T. Itoh(近大高専), and Y. Takahashi: Critical Crossover Behavior of Itinerant Weak Antiferromagnets around Quantum

Critical Point, GSTF Journal of the Physical and Applications (JPA), Vol. 1, No.2. (2014) DOI: 10.5176/2335-69011.2.8

- II-1** Y. Hasegawa and M. Kohmoto(東京大学物性研究所): Periodic Landau gauge and quantum Hall effect in twisted bilayer graphene, Phys. Rev. B. **88**, 125426(1-8) (2013)
- II-2** 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層グラフェンの量子ホール効果、日本物理学会 2013 年秋季大会、(徳島大学、2013 年 9 月)
- II-3** 長谷川泰正・甲元真人(東京大学物性研究所): グラフェンアンチドット格子の Hofstadter butterfly diagram と量子ホール効果、日本物理学会 第 69 回年次大会、(東海大学、2014 年 3 月)
- III-1** 岸木敬太(熊本大学教育学部)・長谷川泰正: フェルミ面がないグラフェンの量子ホール効果、日本物理学会 第 69 回年次大会、(東海大学、2014 年 3 月)
- IV-1** T. Sakai(原子力機構 SPring-8) and H. Nakano: Quantum critical magnetization behaviors of kagome- and triangular-lattice antiferromagnets, Physica Status Solidi B **250** 579-582 (2013)
- IV-2** T. Shimokawa(神戸大連携創造本部) and H. Nakano: Nontrivial ferrimagnetism of the Heisenberg model on the Union Jack strip lattice, J. Kor. Phys. Soc. **63** 591-595 (2013)
- IV-3** T. Sakai(原子力機構 SPring-8) and H. Nakano: Novel Field-Induced Quantum Phase Transition of the Kagome-Lattice Antiferromagnet, J. Kor. Phys. Soc. **63** 601-604 (2013)
- IV-4** 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-5** 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(阪府大院理), Y. Hosokoshi(阪府大院理), T. Shimokawa(神戸大連携創造本部), 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(阪大理): Crystal structure and magnetic properties of honeycomb-like lattice antiferromagnet p-BIP-V2, Phys. Rev. B **87** 125120(1-8) (2013)
- IV-6** H. Yamaguchi(阪府大院理), K. Iwase(阪府大院理), T. Ono(阪府大院理), T. Shimokawa(神戸大連携創造本部), H. Nakano, Y. Shimura(東大物性研), N. Kase(東大物性研), S. Kittaka(東大物性研), T. Sakakibara(東大物性研), T. Kawakami(阪大理), 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-7 K. Iwase(阪府大院理), H. Yamaguchi(阪府大院理), T. Ono(阪府大院理), T. Shimokawa(神戸大連携創造本部), H. Nakano, A. Matsuo(東大物性研), K. Kindo(東大物性研), H. Nojiri(東北大金研), and Y. Hosokoshi(阪府大院理): Crystal Structure and Magnetic Properties of the Verdazyl Biradical m-Ph-V2 Forming a Ferromagnetic Alternating Double Chain, J. Phys. Soc. Jpn. **82** 074719 (1-6) (2013)
- IV-8 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-9 H. Nakano and T. Sakai(原子力機構 SPring-8): Anomalous Quantum Magnetization Behaviors of the Kagome and Triangular Lattice Antiferromagnets, The International Conference on Strongly Correlated Electron Systems, (Univ. of Tokyo, 2013 年 8 月)
- IV-10 中野博生・坂井徹(原子力機構 SPring8)・長谷川泰正: スピン空間に異方性のない系でのスピントロップ現象、日本物理学会第 68 回年次大会(東海大学、2014 年 3 月)
- IV-11 川村光(阪大理)・渡辺健(阪大理)・中野博生・坂井徹(原子力機構 SPring-8): ランダム量子三角格子ハイゼンベルグモデルの量子スピン液体相と有機反強磁性体、日本物理学会第 68 回年次大会(東海大学、2014 年 3 月)
- IV-12 渡辺健(阪大理)・川村光(阪大理)・坂井徹(原子力機構 SPring-8)・中野博生: $S=1/2$ 三角格子反強磁性ランダム・ハイゼンベルグモデルにおける $1/T_1$ の温度依存性、日本物理学会第 68 回年次大会(東海大学、2014 年 3 月)
- IV-13 富永紘基(阪府大院理)・小野俊雄(阪府大院理)・岩瀬賢治(阪府大院理)・山口博則(阪府大院理)・石橋広記(阪府大院理)・栗田伸之(東工大院理工)・田中秀数(東工大院理工)・中野博生・野尻浩之(東北大金研)・細越裕子(阪府大院理): ボンドランダムネスのある三角格子反強磁性体の基底状態と熱力学特性、日本物理学会第 68 回年次大会(東海大学、2014 年 3 月)
- IV-14 轟木義一(千葉工大)・中野博生: 古典シュリケン格子反強磁性体の磁場中相図、日本物理学会第 68 回年次大会(東海大学、2014 年 3 月)
- IV-15 磯田誠(香川大教育)・中野博生・坂井徹(原子力機構 SPring-8): カイロペンタゴン格子のスピン $1/2$ ハイゼンベルグ反強磁性体におけるフェリ 無秩序相転移、日本物理学会第 68 回年次大会(東海大学、2014 年 3 月)
- IV-16 坂井徹(原子力機構 SPring8)・中野博生: 大規模数値対角化によるカゴメ格子反強磁性体の磁化過程の研究、日本物理学会第 68 回年次大会(東海大学、2014 年 3 月)
- IV-17 中野博生・坂井徹(原子力機構 SPring8): 手裏剣格子ハイゼンベルグ反強磁性体の磁化過程、日本物理学会 2013 年秋季大会(徳島大学、2013 年 9 月)

IV-18 富永紘基 (阪府大院理)・小野俊雄 (阪府大院理)・岩瀬賢治 (阪府大院理)・山口博則 (阪府大院理)・石橋広記 (阪府大院理)・田中秀数 (東工大院理)・中野博生・野尻浩之 (東北大金研)・細越裕子 (阪府大院理) : $S = 1/2$ 三角格子反強磁性体混晶系 $\text{Cs}_2\text{CuCl}_{4-x}\text{Br}_x$ の磁場中相転移、日本物理学会 2013 年秋季大会 (徳島大学、2013 年 9 月)

IV-19 渡辺健 (阪大理)・川村光 (阪大理)・坂井徹 (原子力機構 SPring-8)・中野博生・大久保毅 (東大物性研) : 三角格子上の $S=1/2$ 反強磁性ランダム・ハイゼンベルグモデルの低温量子磁気状態、日本物理学会 2013 年秋季大会 (徳島大学、2013 年 9 月)

IV-20 轟木義一 (千葉工大教育セ)・中野博生 : シュリケン格子上的イジング模型の解析、日本物理学会 2013 年秋季大会 (徳島大学、2013 年 9 月)

IV-21 中野博生 : フラストレート磁性体の計算科学研究 – スピン空間に異方性のない系でのスピントロップ現象 –、物性研スパコン共同利用・CMSI 合同研究会 – 計算物質科学の課題と展望 – (東京大学、2013 年 12 月)

大学院物質理学研究科

博士前期課程

北原秀一郎 : 量子臨界点近傍の遍歴電子反強磁性体の磁化率の温度依存性

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 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