

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。

遍歴電子磁性体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、対象が臨界温度より高温の温度依存性に限られ、磁場による影響を無視するなど、多くの問題が含まれていた。我々は、ゼロ点ゆらぎと磁場による影響を積極的に取り入れることにより、新たなスピンゆらぎ理論の構築に成功した。その理論を、磁化曲線、比熱、磁気体積効果などに適用し、低温極限から高温の常磁性相を含む広い温度領域における磁氣的性質の温度や磁場依存性に関する性質が導出できている。その多くは、実験的に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における遍歴電子強磁性と反強磁性の磁氣的性質や、擬低次元で大きなゆらぎの発生が期待される磁性体や、メタ転移の問題など、依然として残された問題の解決に向けた研究に取り組んでいる。

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 Effects
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、多くの関心を集めている。また、有機超伝導体 α -(BEDT-TTF)₂I₃ 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。

磁場中のエネルギー準位を磁場強さの関数として図にしたものは、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強磁場 (数万テスラ) が必要であるため、実験的に直接観測するのは困難である。一方、ツイストした2層グラフェンやグラフェンに周期的に穴を開けたもの (グラフェンアンチドット系) では長い周期を持ち、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。最近、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。

有機超伝導体 α -(BEDT-TTF)₂I₃ では、電子間の相互作用や電子格子相互作用により、金属絶縁体転移や超伝導転移を起こす。電子間の有効相互作用により、この系でトポロジカル絶縁体への転移が可能であるかを、理論的に考察した。近接サイト間のクーロン斥力によって、エネルギーギャップがゼロであったディラック点が有限のギャップを持つ量子ホール状態になる場合があることが示された。

III フェルミ面がない場合に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.

磁場の強さ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いる。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。このことを利用して、ドハース-ファンアルフェン効果は、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。従来の理論では、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であるため、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。このプログラムを「京」コンピュータで実行し、我々は、 $S = 1/2$ 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ている。この計算により、我々は、カゴメ格子ハイゼンベルク反強磁性体の磁化過程において、飽和の 3 分の 1 の高さの磁化に現れる、傾きが非常に小さい磁場領域の両端で、通常の 2 次元系で見られるような磁化プラトートの両端の臨界現象とは明らかに異なる臨界指数となる磁化過程の振舞を明らかにした。

V フラストレーションのある反強磁性体における 磁化ジャンプとスピnflop現象

Magnetization jumps and Spin-Flop Phenomenon
in Frustrated Antiferromagnets

中野博生・長谷川泰正
Nakano, H., Hasegawa, Y

磁性体の磁化過程には、その系の特徴が様々な形で現れる。特定の量子状態がエネルギー的に安定な形で形成される場合に発現する磁化プラトーがその一つである。この磁化プラトーは、磁化過程における、磁場方向の不連続性である。これに対し、磁化過程の中で、磁化方向に不連続性が発生する場合があります、磁化ジャンプと呼ばれている。その発現機構の一つがスピフロップ現象である。この現象では、系がスピン空間に関して異方的な場合に発現することが広く知られていた。我々は、正方カゴメ格子と呼ばれる格子系のハイゼンベルク反強磁性体において、スピン空間に異方性がない場合に起こる磁化ジャンプを発見し、その様子が、スピフロップ現象として知られていたものと共通であることを2013年度に報告していた。2014年度には、さらに、カゴメ格子に歪みを加えた場合の磁化過程の変化を調べ、歪みのないときには発現しない、磁化ジャンプを見出した。この現象は、正方カゴメ格子系における振舞と共通なものである。同じ振舞は、手裏剣結合型蜂の巣格子やカイロペンタゴン格子の系でも同じ現象が見出され、特定の格子系だけ発現する、特異な現象ではなく、広く現れる一般的なものであることが明らかとなった。

発表論文 List of Publications

- I-1 高橋慶紀： 遍歴電子メタ磁性の現象論的アプローチ、遍歴電子系研究会（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））、（なんばカルチャービル貸し会議室、2014年12月13日）
- II-1 長谷川泰正・岸木敬太（熊本大教育）・甲元真人（東大物性研）： グラフェンアンチドットでの磁化振動、日本物理学会 2014年秋季大会（中部大学、2014年9月）
- II-2 梨本和樹・長谷川泰正： 有機導体 α -(BEDT-TTF)₂I₃ でのトポロジカル絶縁体の可能性、日本物理学会 第70回年次大会（2015年）、（早稲田大学、2015年3月）
- III-1 岸木敬太（熊本大教育）・長谷川泰正： 八子の巣格子の強束縛モデルの磁化、日本物理学会 第70回年次大会（2015年）、（早稲田大学、2015年3月）
- III-2 K. Kishigi(熊本大教育) and Y. Hasegawa: Quantum oscillations of magnetization in tight-binding electrons on a honeycomb lattice, Phys. Rev. B **90**, 085427(1-5) (2014)
- IV-1 K. Watanabe(阪大理), H. Kawamura(阪大理), H. Nakano, and T. Sakai(原子力機構 SPring-8): Quantum Spin-Liquid Behavior in the Spin-1/2 Random Heisenberg Antiferromagnet on the Triangular Lattice, J. Phys. Soc. Jpn. **83** 034714 (1-6) (2014)

- IV-2** H. Nakano and T. Sakai(原子力機構 SPring-8): Anomalous Quantum Magnetization Behaviors of the Kagome and Triangular Lattice Antiferromagnets, JPS Conference Proceedings **3** 014003 (1-4) (2014)
- IV-3** H. Nakano and T. Sakai(原子力機構 SPring-8): Anomalous Behavior of the Magnetization Process of the $S = 1/2$ Kagome-Lattice Heisenberg Antiferromagnet at One-Third Height of the Saturation, J. Phys. Soc. Jpn. **83** 104710 (1-7) (2014)
- IV-4** T. Sakai(原子力機構 SPring-8), H. Nakano and K. Okunishi(新潟大理): Exotic Quantum Phase Transition of the Spin Nanotube, J. Phys.: Conf. Series **568** 042024 (1-6) (2014)
- IV-5** 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. Series **568** 042025 (1-6) (2014)
- IV-6** 中野博生・坂井徹 (原子力機構 SPring8) : かごめ格子反強磁性体の磁化過程の再検討、日本物理学会 2014 年秋季大会 (中部大学、2014 年 9 月)
- IV-7** 小野俊雄 (阪府大院理)・遠藤耀司 (阪府大院理)・富永紘基 (阪府大院理)・岩瀬賢治 (阪府大院理)・石橋広記 (阪府大院理)・山口博則 (阪府大院理)・細越裕子 (阪府大院理)・中野博生・栗田伸之 (東工大院理)・田中秀数 (東工大院理)・野尻浩之 (東北大金研) 三角格子反強磁性体 $\text{Cs}_2\text{CuCl}_{4-x}\text{Br}_x$ における基底状態と臨界挙動、日本物理学会 2014 年秋季大会 (中部大学、2014 年 9 月)
- IV-8** 坂井徹 (原子力機構 SPring8), 中野博生, 奥西巧一 (新潟大理) : $S=1/2$ 三本鎖スピントューブの量子相転移、日本物理学会 2014 年秋季大会 (中部大学、2014 年 9 月)
- IV-9** 中野博生・坂井徹 (原子力機構 SPring8) : カゴメ格子ハイゼンベルク反強磁性体の磁場中量子状態、日本物理学会第 70 回年次大会 (2015 年) (早稲田大学、2015 年 3 月)
- IV-10** 坂井徹 (原子力機構 SPring8), 笠原稔弘 (兵庫県立大物質理), 中野博生, 肘井敬吾 (神戸大理), 奥西巧一 (新潟大理), 岡本清美 (芝浦工大) : $S=1/2$ 三本鎖スピントューブの量子相転移、日本物理学会第 70 回年次大会 (2015 年) (早稲田大学、2015 年 3 月)
- IV-11** 中野博生: フラストレート磁性体の異常量子現象の計算科学的研究、第 1 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題 成果報告会 (コクヨホール、2014 年 10 月)
- IV-12** 中野博生: フラストレート磁性体の計算科学的研究-カゴメ格子反強磁性体の磁場中異常量子現象-, 第 5 回 CMSI 研究会 (東北大学片平キャンパス、2014 年 12 月)
- V-1** H. Nakano, M. Isoda(香川大教育), and T. Sakai(原子力機構 SPring-8): Magnetization Process of the $S = 1/2$ Heisenberg Antiferromagnet on the Cairo Pentagon Lattice, J. Phys. Soc. Jpn. **83** 053702 (1-4) (2014)

- V-2 H. Nakano, Y. Hasegawa, and T. Sakai(原子力機構 SPring-8): Spin-Flop Phenomenon of Two-Dimensional Frustrated Antiferromagnets without Anisotropy in Spin Space, J. Phys. Soc. Jpn. **83** 084709 (1-7) (2014)
- V-3 M. Isoda(香川大教育), H. Nakano, and T. Sakai(原子力機構 SPring-8): Frustration-induced Magnetic Properties of the Spin-1/2 Heisenberg Antiferromagnet on the Cairo Pentagon Lattice, J. Phys. Soc. Jpn. **83** 084710 (1-7) (2014)
- V-4 轟木義一 (千葉工大)・中野博生：フラストレート磁性体におけるエントロピー誘起スピントロップ転移、日本物理学会 2014 年秋季大会 (中部大学、2014 年 9 月)
- V-5 轟木義一 (千葉工大), 中野博生：積層籠目格子ハイゼンベルグ模型におけるエントロピー誘起スピントロップ転移、日本物理学会第 70 回年次大会 (2015 年) (早稲田大学、2015 年 3 月)
- V-6 中野博生：【シンポジウム講演】 フラストレーション系の新奇スピントロップの理論、日本物理学会第 70 回年次大会 (2015 年) (早稲田大学、2015 年 3 月)

大学院物質理学研究科

博士前期課程

梨本和樹 : クーロン相互作用を取り入れた α -(BEDT-TTF)₂I₃ のトポロジ

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