

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.

金属と同様の伝導性を示す磁性体は、遍歴電子磁性体とも呼ばれている。この遍歴電子磁性体の磁氣的性質についての理論として、1970年初頭に現れた無撞着 (SCR) スピンゆらぎ理論が国内外で有名であった。ただし、その適応範囲は臨界温度より高温の主に温度依存性に限られていた。現在では、この理論によって導かれる臨界温度近傍の磁氣的性質が、相転移現象に関する基本的な性質と矛盾することが知られている。我々は、これらの問題を解決する努力の末、新たな前提に基づく理論の構築に成功した。具体的には、従来無視されていたゼロ点スピンゆらぎの影響を考慮に入れ、従来の熱ゆらぎの振幅との和として定義されるスピンの局所的な全振幅が一定であるという仮定から、多くの磁氣的性質が導かれることを明らかにした。これにより、温度と磁場の影響を同時に取り扱うことが可能となり、この理論を用いて、磁化曲線、比熱、磁気体積効果などの多くの磁性に関する物性の温度、磁場依存性を定量的に導くことに成功した。その多くは実験結果ともよく一致することが確かめられている。

現在では、磁気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磁氣的性質の解明や空間次元の違いによる磁性への影響、メタ磁性転移の問題など、依然として残された問題を解決するための研究に取り組んでいる。

II 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.

有機導体は、TMTSE、BEDT-TTFなどの分子が結晶を作り、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性質を示す。これらの系は、分子軌道から作られるエネルギーバンドの構造が、ヘビーフェルミオン系などに比べて比較的単純であるた

め、理論的扱いも容易である。しかしながら、磁場効果について従来の理論では、フェルミ面近くのエネルギーを持つ状態のみを半古典的に扱うという近似が多く用いられていた。我々は、強束縛モデルで磁場中の電子を量子論的に扱うことで、磁化の振動 (de Haas - van Alphen 効果)、量子ホール効果、トポロジカルな性質などを研究してきた。(TMTSF)₂NO₃ では、陰イオン NO₃ の配向が低温で秩序を起こすことによって、小さな電子ポケットとホールポケットができ、磁化の振動がみられている。我々は、この系において、磁場中の電子を量子論的に扱い、半古典的近似では得られない磁化振動や量子ホール効果が観測できることを示した。

磁場中のエネルギー準位を磁場の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には、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。グラフェンで、Hofstadter butterfly diagram が得られるが、実現のためにはツイストした 2 層グラフェンなどによって単位胞を大きくするなどの必要があることが知られていた。(TMTSF)₂NO₃ では、実現可能な磁場の範囲で、興味深いエネルギーの磁場依存性が得られることが示された。

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・長谷川泰正
Nakano, H., Hasegawa, Y

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 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。2015年度は、このような計算を歪んだ正方カゴメ格子ハイゼンベルク反強磁性体について実施し、その磁化過程で発現する磁化ジャンプ現象の解明に取り組んだ。この系の磁化過程では、飽和磁化の3分の1の高さに磁化プラトーが現れるが、その高磁場側の端で、磁化ジャンプが現れることがわかっていたものの、磁化のとびが δM が2の場合しか得られておらず、無限系でも生き残るマクロな現象であるかどうかの解明が待たれていた。我々は、これまでに行われていなかった42サイト系の磁化過程の計算結果で、正方カゴメ格子がわずかに歪んだ場合に、 $\delta M=3$ となる事例を発見した。磁化ジャンプの周りの状態がこの歪みで定性的な変化が起こらないことを確認し、この系の磁化ジャンプ現象がマクロな現象であることを明らかにした。

IV 量子スピン系におけるフラストレーション効果

Frustration Effect in Quantum Spin Systems

中野博生

Nakano, H.

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。このような磁化プラトーが古典スピン系で現れない量子系で現れる2次元格子系が三角格子やカゴメ格子で、これらの系のフラストレーションがこの非自明現象の起源となっている。比較的解明が進んでいる $S=1/2$ 系では、カゴメ格子で磁化プラトーと見られる振舞で、良く知られている磁化プラトーとは異なる臨界指数が報告されており、この系の、より良い理解のために、様々な視点から調べる必要性が高まっていた。2015年度、我々は、古典スピン系と $S=1/2$ 系の間に対応する、大きなスピンの構成される系のカゴメ格子反強磁性体の磁化過程を調べた。特に、磁化プラトーと見られる振舞が、古典系に近づくにしながらどのように消滅していくのかを数値的に解明した。近年報告された、実空間摂動論の近似法から得られるものと異なる様子を明らかにした。

発表論文 List of Publications

- I-1 Y. Takahashi: Theoretical Development in Itinerant Electron Ferromagnetism, to be published in J. Phys.: Conf. Ser. 2016. 国際ワークショップ ”International Workshop in Itinerant-Electron Magnetism” (世話人 吉村一良 (京大理)) (京都大学、2015年9月26, 27日)
- II-1 岸木敬太 (熊本大教育)・長谷川泰正: 陰イオン配向化の $(\text{TMTSF})_2\text{NO}_3$ の量子ホール伝導度、日本物理学会2015年秋季大会 (関西大学、2015年9月)

- II-2 岸木敬太 (熊本大教育)・長谷川泰正 : (TMTSF)₂NO₃ の強束縛モデルの磁場中のエネルギーと量子ホール伝導度、日本物理学会第 71 回年次大会 (2016 年) (東北学院大学、2016 年 3 月)
- III-1 H. Nakano, Y. Hasegawa, and T. Sakai: Magnetization Jump in the Magnetization Process of the Spin-1/2 Heisenberg Antiferromagnet on a Distorted Square-Kagome Lattice, J. Phys. Soc. Jpn. **84** 114703 (1-6) (2015)
- III-2 T. Sakai and H. Nakano: Exotic Field Induced Quantum Phase Transition of the Kagome Lattice Antiferromagnet, Phys. Proc. **75** 821-828 (2015)
- III-3 中野博生・長谷川泰正・坂井徹 : 数値対角化法による歪んだ正方カゴメ格子ハイゼンベルク反強磁性体の磁化ジャンプ、日本物理学会第 71 回年次大会 (2016 年) (東北学院大学、2016 年 3 月)
- III-4 中野博生 : 数値対角化法の大規模並列計算- 量子スピン系を舞台に -、【プラズマ壁相互作用における非線形現象の理論モデル構築と画像・動画解析手法開発に関する研究会】&【プラズマ工学・電磁界解析とその数値解析手法およびビジュアライゼーションに関する研究会】合同研究会第 1 回非線形・可視化部門研究会 (大学共同利用機関法人自然科学研究機構核融合科学研究所、2015 年 9 月)
- III-5 中野博生・坂井徹・長谷川泰正 : 数値対角化大規模並列計算があぶりだすフラストレート磁性体の磁化ジャンプ、東大物性研短期研究会「スピン系物理の深化と最前線」(東大物性研、2015 年 11 月)
- III-6 中野博生 : フラストレート磁性体の計算科学的研究- 正方カゴメ格子ハイゼンベルク反強磁性体の磁化ジャンプ -、CMSI 研究会 (東大小柴ホール、2015 年 12 月)
- III-7 中野博生 : 巨大次元疎行列の固有値計算 - 量子スピン系を舞台に -、日本応用数学会「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会第 20 回研究会 (東大工学部、2015 年 12 月)
- IV-1 H. Nakano and T. Sakai: Magnetization Process of the Spin-S Kagome-Lattice Heisenberg Antiferromagnet, J. Phys. Soc. Jpn. **84** 063705 (1-5) (2015)
- IV-2 T. Sakai and H. Nakano: Novel Quantum Phase Transition in the Frustrated Spin Nanotube, Phys. Proc. **75** 369-375 (2015)
- IV-3 中野博生・坂井徹 : スピン S フラストレート磁性体の磁化過程、日本物理学会 2015 年秋季大会 (関西大学、2015 年 9 月)
- IV-4 坂井徹, 肘井敬吾 (神戸大分子フォトセンター), 大久保晋 (神戸大分子フォトセンター), 大田仁 (神戸大分子フォトセンター), 中野博生, 宮下精二 (東大理): カゴメ格子反強磁性体におけるスピンギャップの有無の ESR による検証の可能性、日本物理学会 2015 年秋季大会 (関西大学、2015 年 9 月)

IV-5 坂井徹，中野博生：カゴメ格子反強磁性体のスピングャップ問題、日本物理学会第71回年次大会(2016年)(東北学院大学、2016年3月)