

I 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。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取り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。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。ツイストした2層グラフェンなど単位胞が大きい場合に、Hofstadter butterfly diagram が実験的にも得られている。有機超伝導体 α -(BEDT-TTF)₂I₃ では、グラフェンと同じように質量ゼロのディラック粒子の励起が現れることが知られている。この系では、グラフェンの場合と異なり、エネルギー分散を表す円錐 (ディラックコーン) が傾いている。我々は、圧力によって傾きの度合いが変化し、ちょうど臨界的に傾いた場合には、エネルギーが $H^{4/5}$ という他では見られない磁場依存性を示すことを見出した。

II フラストレーションのある反強磁性体での 磁化ジャンプ現象

Magnetization Jump in Frustrated Antiferromagnets

中野博生・長谷川泰正
Nakano, H., Hasegawa, Y.

フラストレーションのあるハイゼンベルク反強磁性体に外部磁場を加え磁化させていく過程では、磁化プラトーや磁化ジャンプなど、様々な興味深い性質が見られる。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り、一方、磁化ジャンプは磁化方向の不連続性である。我々は、様々な格子系の反強磁性体の磁化過程を調べ、複数の系で磁化ジャンプが発現する事例を明らかにしてきた。2016年度は、そのような様々な格子系のうち、正方籠目格子上の反強磁性ハイゼンベルクモデルの磁化過程に現れる磁化ジャンプを、数値的厳密対角化および近似的固有関数を用いて理論的に調べた。

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
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 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。2016年度は、特に、三角格子系が歪みをもつ場合に非自明な自発磁化状態が発現することを見出し、これを数値的厳密対角化法で詳しく調べた。

発表論文 List of Publications

- I-1 Keita Kishigi(熊本大学教育学部), Yasumasa Hasegawa: Quantum Hall conductance and de Haas-van Alphen oscillation in a tight-binding model with electron and hole pockets for $(\text{TMTSF})_2\text{NO}_3$, Phys. Rev. B **94** 085405(1-15) (2016)

- I-2 岸木啓太 (熊本大学教育学部)・長谷川泰正： α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ の強束縛モデルにおける磁場中のエネルギー、日本物理学会 2016 年秋季大会 (金沢大学、2016 年 9 月)
- I-3 岸木啓太 (熊本大学教育学部)・長谷川泰正： α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$ の強束縛モデルにおける量子ホール効果と磁化、日本物理学会 第 72 回年次大会 (2017 年) (大阪大学、2017 年 3 月)
- II-1 長谷川泰正・中野博生・坂井徹：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 2016 年秋季大会 (金沢大学、2016 年 9 月)
- II-2 轟木義一 (千葉工大)・中野博生：歪んだ積層三角格子反強磁性体のエントロピー誘起スピフロップ転移と秩序相の安定性、日本物理学会 2016 年秋季大会 (金沢大学、2016 年 9 月)
- II-3 轟木義一 (千葉工大)・中野博生：歪んだ積層三角格子反強磁性体のエントロピー誘起スピフロップ転移と秩序相の安定性 (2)、日本物理学会年次大会 (2017 年) (大阪大学、2017 年 3 月)
- II-4 中野博生・長谷川泰正・坂井徹：新しいタイプのスピフロップ現象に関する理論的研究、第 3 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会 (東京品川、2016 年 10 月)
- III-1 T. Sakai and H. Nakano: Gapless quantum spin liquid of the kagome-lattice antiferromagnet, Polyhedron **126** 42-44 (2017)
- III-2 H. Nakano and T. Sakai: Ferrimagnetism in the Spin-1/2 Heisenberg Antiferromagnet on a Distorted Triangular Lattice, J. Phys. Soc. Jpn. **86** 063702(1-5) (2017)
- III-3 H. Nakano and T. Sakai: Quantum Spin Liquid in the Kagome-Lattice Antiferromagnet and Related Systems, J. Phys.: Conf. Series **868** 012006(1-11) (2017)
- III-4 中野博生：超大規模次元行列の数値対角化、【非線形問題の解法に関する研究会】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、2016 年 8 月)
- III-5 中野博生：巨大次元行列の固有値問題 –大規模並列計算による実現–、プラズマシミュレータシンポジウム 2016 (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、2016 年 9 月)
- III-6 中野博生・坂井徹：歪んだ三角格子ハイゼンベルク反強磁性体とフェリ磁性、日本物理学会 2016 年秋季大会 (金沢大学、2016 年 9 月)
- III-7 坂井徹・利根川孝 (神戸大名誉教授)・岡本清美 (芝浦工大工)・中野博生：スピランダール系における磁場誘起スピンネマティック相、日本物理学会 2016 年秋季大会 (金沢大学、2016 年 9 月)

- III-8 紙屋佳知 (理研)・Cristian Batista(テネシー大ノックスヴィル・オークリッジ国立研)・Christopher Aoyama(フロリダ大)・高野安正 (フロリダ大)・高田晃右 (AGC 旭硝子)・山口博則 (大阪府立大)・小野俊雄 (大阪府立大)・細越裕子 (大阪府立大)・志村恭通 (東大物性研)・榊原俊郎 (東大物性研)・Minseong Lee(国立強磁場研)・Eun Sang Choi(国立強磁場研)・中野博生：フラストレート分子磁性体 TNN によるマルチフェロイクス物質設計、日本物理学会 2016 年秋季大会 (金沢大学、2016 年 9 月)
- III-9 中野博生・坂井徹：フラストレート反強磁性体の磁場中量子相転移の数値対角化による研究、日本物理学会年次大会 (2017 年) (大阪大学、2017 年 3 月)
- III-10 嶋田ありさ (京大化学)・坂井徹・中野博生・吉村一良 (京大化学)： $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 型の歪みを持つ三角格子 $S=1/2$ ハイゼンベルク反強磁性体、日本物理学会年次大会 (2017 年) (大阪大学、2017 年 3 月)
- III-11 Hiroki Nakano: Huge-scale parallel calculations of an eigenvalue problem for sparse matrices with a large dimension, JSST2016, (京都大学、2016 年 10 月)
- III-12 中野博生：フラストレート磁性体の数値対角化法による研究、フロンティア機能物質創製センター第 3 回シンポジウム機能性物質の最前線 — 物質科学の新展開を目指して — (兵庫県立大学理学部、2017 年 1 月)
- III-13 中野博生：大規模並列シミュレーションで見る磁石の中の量子力学、「実験と理論・シミュレーションとの連携課題」(姫路市じばさんびる、2017 年 3 月)

科学研究費補助金等

- 1 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 28 ~ 31 年度)
 基盤研究 (C) 課題番号:16K05418
 研究課題 大規模並列計算によるフラストレーションが誘起する磁性体の異常量子物性の新展開
 研究代表者 中野博生
- 1 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 28 ~ 30 年度)
 基盤研究 (C) 課題番号:16K05419
 研究課題 カゴメ格子反強磁性体の ESR 禁制遷移を利用したスピンギャップ観測の理論的研究
 研究代表者 坂井 徹
 研究分担者 中野博生