

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.

結晶中の電子の持つエネルギーはバンド構造といわれる波数依存性を持つが、グラフェンや擬2次元分子性導体では、質量ゼロのディラック粒子の場合と同じように、二つのバンドが波数空間の一点でのみ交差し、その点のまわりのエネルギーが波数の1次の依存性を示すことが最近実験的に明らかになり、非常に興味をもたれている。また、トポロジカル絶縁体やトポロジカル超伝導体を考える場合の良いモデルとなることから多くの関心を集めている。擬2次元分子性導体 α -(BEDT-TTF)₂I₃ では、圧力によって電子状態が大きく変えられることも知られている。 α -(BEDT-TTF)₂I₃ に約 3kbar 以上の一軸性圧力を加えた場合、線形のエネルギー分散を示すディラックコーンが大きく傾いた質量ゼロのディラックコーンが実現していることが知られている。我々は、それ以下の圧力ではディラックコーンの傾きが臨界値を越えてしまい、ちょうど臨界圧力の時には、ディラックコーンが傾いた方向 ($+k_x$ 方向とする) に対してはエネルギーの波数依存性の1次の項が消え、2次の項が重要になることを示した。その場合にも、 $-k_x$, $+k_y$, $-k_y$ の3方向については、質量ゼロのディラック点の場合と同じく、エネルギーは波数の1次依存性を示す。我々は、このような点を $3/4$ ディラック点と名づけた。その場合に、磁場によるエネルギーの量子化、量子ホール効果、磁化の磁場依存振動現象 (de Haas - van Alphen 振動) などを理論的に調べた。

II 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。特に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きた。「京」や Oakforest-PACS などのスーパーコンピュータでこのプログラムを実行することで、 $S = 1/2$ スピン系 45 サイト系の磁化過程の全域描画に世界で唯一成功した研究グループとして他の事例についても様々な成果を挙げている。2018 年度の主な成果は、Shastry-Sutherland 模型とも呼ばれる直交ダイマー格子上的 $S = 1/2$ ハイゼンベルク反強磁性体の研究である。この系の基底状態の変化を数値的厳密対角化法によって調べた。この系は、2 種類の相互作用（直交ダイマーのボンドと正方格子を形成するボンド）で構成され、系の性質はその比で決まる。この系では、これまでに 32 サイト系までの研究報告しかなかった。そこで、この系の 36 サイト及び 40 サイト系の計算結果を新たに得て、ダイマー相とネール秩序相の間を慎重に調べた。その結果、直交ダイマー相互作用が強い場合のダイマー相の端と正方格子の相互作用が強い場合のネール秩序相の端を捉えた上で、その間に両者とは異なる、別の相互作用比で挙動の変化が現れている様子を初めて捉えた。

発表論文 List of Publications

- I-1 Y. Hasegawa, K. Kishigi(熊本大学教育学部): Energy quantization at the three-quarter Dirac point in a magnetic field, Phys. Rev. B **99** 045409(1-10) (2019)
- I-2 岸木敬太 (熊本大学教育学部)・長谷川泰正: α -(BEDT-TTF)₂I₃ の量子振動、日本物理学会 2018 年秋季大会 (同志社大学、2018 年 9 月)
- I-3 長谷川泰正・岸木敬太 (熊本大学教育学部)・綾部真知 (熊本大学教育学部)・今福晴仁 (熊本大学教育学部): 蜂の巣格子強束縛モデルでの 3/4 ディラックコーンと倒れたディラックコーンの磁場効果、日本物理学会 2018 年秋季大会 (同志社大学、2018 年 9 月)
- I-4 岸木敬太 (熊本大学教育学部)・長谷川泰正: 2 次元有機導体の補償金属相の量子振動、日本物理学会 第 74 回年次大会 (2019 年) (九州大学、2019 年 3 月)
- II-1 H. Nakano, T. Sakai: Precise Estimation of the $S = 2$ Haldane Gap by Numerical Diagonalization, J. Phys. Soc. Jpn. **87** 105002(1-2) (2018)

- II-2** T. Sakai, H. Nakano: Ground state with nonzero spontaneous magnetization of the two-dimensional spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet with frustration, *AIP Advances* **8** 101408(1-5) (2018)
- II-3** H. Nakano, T. Sakai: Third Boundary of the Shastry-Sutherland Model by Numerical Diagonalization, *J. Phys. Soc. Jpn.* **87** 123702(1-5) (2018)
- II-4** Y. Fukumoto (東京理科大学理工), Y. Yokoyama (東京理科大学理工), H. Nakano: Impact of Dzyaloshinskii-Moriya Interactions and Tilts of g Tensors on the Magnetization of a Spherical Kagomé Cluster in $W_{72}V_{30}$, *J. Phys. Soc. Jpn.* **87** 124710(1-6) (2018)
- II-5** H. O. Jeschke (岡山大異分野基礎), H. Nakano, T. Sakai: From kagome strip to kagome lattice: Realizations of frustrated $S=1/2$ antiferromagnets in Ti(III) fluorides, *Phys. Rev. B* **99** 140410(R)(1-6) (2019)
- II-6** K. Inoue, Y. Maeda, H. Nakano, Y. Fukumoto : Canonical ensemble calculations of the magnetic susceptibility for a spin-1/2 spherical kagome cluster with Dyzloshinskii-Moriya interactions by using microcanonical thermal pure quantum states, 21th International Conference on Magnetism (San Francisco, 2018年7月)
- II-7** T. Sakai, H. Nakano : Ground state with nonzero spontaneous magnetization of the two-dimensional spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet with frustration, 21th International Conference on Magnetism (San Francisco, 2018年7月)
- II-8** 坂井徹・中野博生・野尻浩之 (東北大学金研): 直交ダイマー系の量子相転移と ESR 禁制遷移、日本物理学会 2018 年秋季大会 (同志社大学、2018 年 9 月)
- II-9** 中野博生・坂井徹 : 2 次元 $S=1/2$ フラストレート磁性体の磁化過程の数値対角化による研究、日本物理学会 2018 年秋季大会 (同志社大学、2018 年 9 月)
- II-10** 中野博生 : 【招待講演】カゴメ格子反強磁性体の数値対角化による研究、基研研究会・スピン系物理の最前線 (京都大学、2018 年 10 月)
- II-11** 中野博生・坂井徹 : 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、第 5 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、2018 年 11 月)
- II-12** 長谷川泰正・中野博生・坂井徹 : 磁化ジャンプを示す正方籠目格子反強磁性体の理論的研究、第 5 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、2018 年 11 月)
- II-13** 坂井徹・中野博生 : 低次元量子スピン系における対称性に守られたトポロジカル相の数値的研究、第 5 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、2018 年 11 月)

- II-14 中野博生・多田野寛人（筑波大学システム情報系）：大規模疎行列の厳密対角化計算プログラムの Oakforest-PACS への効果的展開、第 5 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、2018 年 11 月）
- II-15 中野博生：数値対角化法による直交ダイマー系の研究、第 13 回量子スピン系研究会（東海村産業・情報プラザ、2019 年 1 月）
- II-16 中野博生：Shastry-Sutherland 模型の数値対角化法による研究、神戸大学分子フォトサイエンス研究センター第 2 回スピン系物理研究会（神戸大学、2019 年 1 月）
- II-17 中野博生・坂井徹：Shastry-Sutherland 模型の大規模数値対角化による研究、日本物理学会 第 74 回年次大会（2019 年）（九州大学、2019 年 3 月）
- II-18 坂井徹・山本亮太・善田知佑・中野博生・岡本清美（芝浦工業大学工）：S=2 反強磁性鎖の磁化プラトー、日本物理学会 第 74 回年次大会（2019 年）（九州大学、2019 年 3 月）
- II-19 轟木義一（千葉工業大学創造工）中野博生：シャストリー・サザーランド格子反強磁性体の有効ハミルトニアンを用いた解析、日本物理学会 第 74 回年次大会（2019 年）（九州大学、2019 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
- 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 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