

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.

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、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。そのような場合の磁場によるエネルギー量子化、磁化の磁場依存振動現象 (de Haas - van Alphen 振動) について、理論的に調べ、実験での観測可能性について議論した。

また、圧力下の黒リンでも、ディラック粒子が実現されている可能性が最近議論されており、核磁気共鳴 (NMR) の実験もなされている。実験結果の解析に参加した。

II 超伝導体 Sr₂RuO₄ の理論

Theory of superconductivity in Sr₂RuO₄

長谷川泰正
Hasegawa, Y.

Sr₂RuO₄ は、銅酸化物高温超伝導体 La_{2-x}Sr_xCuO₄ と同じ結晶構造を持つ擬二次元的超伝導体である。銅酸化物高温超伝導体は、多くの実験から、通常の超伝導体と同じよう

に2つの電子がスピンシングレットクーパーペアを作っており、超伝導オーダーパラメータに方向依存性があり符号も変わるスピンシングレットd波超伝導であろうと考えられている。一方、 Sr_2RuO_4 は、発見当初からスピントリプレット超伝導体の可能性が指摘され、超伝導状態での比熱、帯磁率などの温度依存性、超伝導状態での時間反転対称性の破れなどの実験から、スピントリプレットp波超伝導体であると考えられ、多くの研究がなされてきた。ところが、近年、超伝導状態での帯磁率の測定手段であるNMRナイトシフトの実験を一軸圧力下で精密に行う実験がなされ、従来考えられていたスピントリプレットp波超伝導という理論を見直すべきではないかという議論がなされている。我々は、空間依存性と磁場の効果を正確に取り扱える方法であるGinzburg-Landau理論を用いて、 Sr_2RuO_4 とRuの共晶系での Sr_2RuO_4 の超伝導転移を理論的に調べた。 Sr_2RuO_4 が時間反転対称性を破った超伝導であるとして計算した結果、磁場の方向が Sr_2RuO_4 の伝導面に平行か垂直かによって、温度と磁場の強さの相図に特徴的な違いがあるという結果が得られ、実験と良く一致した。

III ツイストした2層グラフェンの電子状態

Electric properties in twisted bilayer graphene

長谷川泰正

Hasegawa, Y.

蜂の巣構造の炭素原子からなるグラフェンでは、2次元ディラック粒子が実現し、量子ホール効果も観測され、実験的にも理論的にも精力的に研究されている。グラフェンを角度をつけて2層重ねたツイスト2層グラフェンで、マジックアングルとよばれる約1度のツイスト角の場合、ディラック点での電子の速度がゼロになることが理論的に示されていた。最近マジックアングルの2層グラフェンが実験で確かめられ、さらに、電子間相互作用の効果が大きくなって絶縁体になったり超伝導状態にもなることが観測された。我々は、強束縛モデルを用いてツイストした2層グラフェンの電子状態を理論的に調べた。2層間の距離を短くすると、マジックアングルが大きくなっていくことを確かめた。大きな回転角の場合でも、層間距離を小さくしていくと、もともとあったディラック点の周りに3つのディラック点が近づいてきて、4つのディラック点が重なったときに、電子の速度がゼロになることが示された。このことがマジックアングルで電子の速度がゼロとなる原因であることがわかった。

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。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、様々な成果を挙げている。2019 年度の主な成果は、整数スピンの構成される 1 次元ハイゼンベルク反強磁性鎖の基底状態のすぐ上のスピン励起へのエネルギー差、いわゆる、ハルデンギャップに関する研究である。スピンの大きさが整数であればギャップ値はゼロではないものの、スピンの大きさが大きくなるにつれてギャップ値が急激に小さくなり、その数値的評価は極めて難しい。そのような状況で、我々はこれまでに見積もられてきた事例のうち最大の $S = 5$ の場合の評価値を、より高精度で求め、さらに $S = 6$ の場合の評価値も新たに求めることに成功した。また、2019 年度は、歪んだカゴメ格子反強磁性体の候補物質 $\text{Cs}_2\text{LiTi}_3\text{F}_{12}$ に関する研究も進め、実験家と理論家の共同研究を行った。

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 K. Kishigi (熊本大学教育学部), Y. Hasegawa: Enhancements of the $\frac{3}{2}$ and $\frac{5}{2}$ frequencies of de Haas-van Alphen oscillations near the Lifshitz transition in a two-dimensional compensated metal with overtilted Dirac cones, Phys. Rev. B **100**, 195433 (1-15) (2019)
- I-3 岸木敬太 (熊本大学教育学部)・今福晴仁 (熊本大学教育学部)・築出啓太 (熊本大学教育学部)・長谷川泰正: α -(BEDT-TTF) $_2\text{I}_3$ の圧力下のバンド構造と電子比熱の理論、日本物理学会 2019 年秋季大会 (岐阜大学、2019 年 9 月)

- I-4** 岸木敬太 (熊本大学教育学部)・長谷川泰正: 2次元ディラック電子系のリフシツツ転移近傍の量子振動、日本物理学会第75回年次大会(2020年)、(名古屋大学(covid-19のため現地開催中止)、2020年3月)
- I-5** 藤井拓斗・中井祐介・上田光一・赤浜裕一・水戸毅・長谷川泰正: 圧力誘起ディラック半金属物質黒リンのNMR測定による研究II、日本物理学会第75回年次大会(2020年)、(名古屋大学(covid-19のため現地開催中止)、2020年3月)
- II-1** H. Kaneyasu, Y. Enokida, T. Nomura, Y. Hasegawa, T. Sakai, M. Sigrist (Institute for Theoretical Physics, ETH Zurich, Switzerland): Properties of the H-T phase diagram of the 3-K phase in eutectic Sr_2RuO_4 -Ru: Evidence for chiral superconductivity, *Phys. Rev. B* **100**, 214501 (1-9) (2019)
- II-2** H. Kaneyasu, Y. Enokida, T. Nomura, Y. Hasegawa, T. Sakai, M. Sigrist (Institute for Theoretical Physics, ETH Zurich, Switzerland): Features of chirality generated by paramagnetic coupling to magnetic fields in the 3K-phase of Sr_2RuO_4 , *JPS Conf. Proc.* **30** 011039 (1-6) (2020). [Proceedings of the International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (SCES2019)].
- II-3** 兼安洋乃・野村拓司・長谷川泰正・坂井徹・M. Sigrist (Institute for Theoretical Physics, ETH Zurich, Switzerland): 磁場中における距離依存性を持つ超伝導の電流と chirality 変化、日本物理学会2019年秋季大会(岐阜大学、2019年9月)
- III-1** 山田彩・長谷川泰正: ツイストした2層グラフェンのエネルギー、日本物理学会2019年秋季大会(岐阜大学、2019年9月)
- III-2** 山田彩・長谷川泰正: ツイストした二層グラフェンでのマジックアングルの面間結合依存性、日本物理学会第75回年次大会(2020年)、(名古屋大学(covid-19のため現地開催中止)、2020年3月)
- IV-1** H. Nakano, N. Todoroki(千葉工業大学創造工), T. Sakai: Haldane Gaps of Large-S Heisenberg Antiferromagnetic Chains and Asymptotic Behavior, *J. Phys. Soc. Jpn.* **88**, 114702(1-4) (2019)
- IV-2** 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)
- IV-3** R. Shirakami(京大理), H. Ueda(京大理), H. O. Jeschke(岡山大異分野基礎), H. Nakano, S. Kobayashi, A. Matsuo, T. Sakai, N. Katayama, H. Sawa, K. Kindo, C. Michioka(京大理), K. Yoshimura(京大理), Two magnetization plateaus in the kagome fluoride $\text{Cs}_2\text{LiTi}_3\text{F}_{12}$, *Phys. Rev. B* **100**, 174401(1-7) (2019)
- IV-4** 中野博生: 大規模数値対角化シミュレーションによる $S=1/2$ フラストレート磁性体の理論的研究、*J. Jpn. Soc. Powder Powder Metallurgy*, **67** 72-77 (2020)

- IV-5** 中野博生：【招待講演】大規模数値対角化シミュレーションによる $S=1/2$ フラストレート磁性体の理論的研究、粉体粉末冶金協会 2019 年度春季大会（第 123 回講演大会）（東京工業大学、2019 年 6 月）
- IV-6** 中野博生・坂井徹：低次元ハイゼンベルク系の大規模並列シミュレーションによる研究、日本物理学会第 75 回年次大会（2020 年）、（名古屋大学 (covid-19 のため現地開催中止)、2020 年 3 月）
- IV-7** 中野博生・轟木義一（千葉工大創造工）・坂井徹：大きい S に対するハルデンギャップの計算科学的研究、日本物理学会 2019 年秋季大会（岐阜大学、2019 年 9 月）
- IV-8** 井上晃来（東京理科大学理工）・福元好志（東京理科大学理工）・中野博生：球体カゴメ系 W72V30 の磁場中比熱に対する DM 相互作用の影響、日本物理学会 2019 年秋季大会（岐阜大学、2019 年 9 月）
- IV-9** 水口龍之介（東京理科大学理工）・広瀬悠平（東京理科大学理工）・福元好志（東京理科大学理工）・中野博生：フラストレーションのあるリーブ格子ハイゼンベルグ反強磁性体における基底状態特性 II、日本物理学会 2019 年秋季大会（岐阜大学、2019 年 9 月）
- IV-10** 中野博生・多田野寛人（筑波大学システム情報系）：Oakforest-PACS で実現する大規模疎行列の厳密対角化計算に基づく科学研究の新展開、第 6 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、2019 年 11 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～令和元年度）
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