

令和 3 年 6 月 4 日現在

機関番号：24506
研究種目：基盤研究(C)（一般）
研究期間：2016～2020
課題番号：16K05418
研究課題名（和文）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

研究課題名（英文）New Developments of Anomalous Quantum Behavior in Frustrated Magnets by Large-Scale Parallel Calculations

研究代表者
中野 博生（Hiroki, Nakano）

兵庫県立大学・物質理学研究科・准教授

研究者番号：00343418
交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,500,000円

研究成果の概要（和文）：本研究ではフラストレート磁性体の磁場中異常量子現象を数値対角化法で調べた。量子ハイゼンベルク反強磁性体の交換相互作用がカゴメ格子や三角格子、直交ダイマー格子などの格子を形成する場合の磁性体が広く関心を持たれている。しかしながら、これらの系は解析が困難な多体問題であることから、特に系がフラストレーションを含む場合、性質解明が不十分な状況に留まっていた。我々は、我が国のフラッグシップスーパーコンピュータである京を含む様々なスパコン上で行った大規模並列計算によって量子ハイゼンベルク反強磁性体の系が示す非自明な挙動を捉えることに成功し、その性質解明に貢献した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究によって得られた偏りのない直接数値シミュレーションによる結果は、今後に行われる関連事例に対する研究のための足掛かりとなる基礎的データとなるもので、更なる理解の深化に貢献していくことが学術的意義として期待される。京コンピュータでの実績が、令和3年に本格運用を開始した富岳における大規模並列シミュレーションとして計算科学的な分野にとっても更なる発展につながることを期待される。京コンピュータでも実現できなかった規模の大規模計算が富岳で実現できれば、物性研究の新たな研究ステージを開く成果につながることを期待される。

研究成果の概要（英文）：In this project, we study anomalous quantum behavior of frustrated magnets under magnetic field by means of numerical diagonalization method. Much attention is widely attracted by quantum Heisenberg antiferromagnetic models on various lattices including the kagome lattice, the triangular lattice, and the orthogonal-dimer lattice. However, physical properties are still unclear, especially when these systems include frustrations, because these systems are typical many-body problems that are difficult to be analyzed. We successfully perform a lot of large-scale parallel calculations of numerical diagonalizations in various supercomputers including K computer; our calculations capture nontrivial behavior of quantum Heisenberg antiferromagnet and contribute much for our understanding of this systems.

研究分野：物性理論

キーワード：フラストレート磁性体 ハイゼンベルク反強磁性体 数値対角化 大規模並列計算 磁性 物性理論
量子スピン系 計算物理

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

磁性体では系が有する性質に起因して特徴的な振舞が様々な形で現れる。特に、フラストレーションを有する量子スピン系では、そのフラストレーションによって量子揺らぎが増大し、それが原因となって、非自明な振舞がしばしば現れる。たとえば、フラストレート磁性体の典型事例であるカゴメ格子上的 $S=1/2$ ハイゼンベルク反強磁性体では、その磁化過程の挙動が取り沙汰されていた。飽和磁化の $3/10$ の高さを始めとして複数の高さで磁化プラトーが発現すると考えられている。その中で、飽和磁化の $9/10$ の高さの挙動として、密度行列繰り込み群の方法と SSD と呼ばれる手法を組み合わせた研究が磁化プラトーの発現を報告しているものの、他の方法でその発現の是非を検討することができない状況であった。とりわけ、偏りのない方法として信頼性の高い数値対角化の計算では、ごく小さいサイズしか取り扱うことができないことが強い制約となり、この系の理解の進展に十分に寄与できない状況となっていた。

2. 研究の目的

本研究では、そのような量子スピン系の理論模型が様々な格子系を形成するときに示す非自明な挙動とその発現機構を、偏りのない直接数値シミュレーション方法である数値対角化法を用いて解明することを目的としている。特に、上述のカゴメ格子ハイゼンベルク反強磁性体の磁化過程について 45 サイト系の計算を実現し、高解像度の結果を得て、この系の真の振る舞いを捉えることは本研究の中心的な目標である。カゴメ格子ハイゼンベルク反強磁性体の磁化過程については、研究代表者が報告した 42 サイト系の研究報告が本研究開始時点までの世界記録であり、45 サイト系は前人未踏の規模であった。その計算を日本のフラッグシップスーパーコンピュータとして知られる「京」コンピュータで実現しようという試みである。

この計算が実現できることは、様々な格子系の計算に関して過去に取り組みられたことのないシステムサイズで研究が可能となることを意味する。そういった事例に対象を広げて本研究の計算を進めたところ、複数の系で新たな挙動の解明につながった。

3. 研究の方法

(1) 大規模並列計算による数値対角化法

数値対角化法は、量子スピン系に対する直接数値シミュレーションの中で最も古くから採用されてきた手法であり、偏りのない方法として高い信頼性がある。しかしながら、取り扱える系の大きさが極めて小さいものに限られるという大きな短所があり、その対処を克服すべく、量子モンテカルロ法や密度行列繰り込み群の方法が開発され、発展してきた。とはいえ、それぞれの方法には一長一短がある。量子モンテカルロ法ではフラストレーションを含む系に対して(特別な事例を除いて)一般には適用できず、密度行列繰り込み群の方法はフラストレーションの有無に関係なく計算は可能であるが、格子形状として 1 次元的事例には強力であるが、2 次元以上の系に対する処方箋は発展途上の段階と言える。先述の SSD の手法もその一つであり、有効性の検討には他の方法による知見が必要となる。そのため、本研究では、オーソドックスともいえる数値対角化法の計算を大規模並列計算として実現し、これまで実現したことのない大きさの系を取り扱うことを目指した。

この手法を大規模並列計算として実行するため、研究代表者は、計算の中で現れる巨大ベクトルのデータを分散メモリ型のコンピュータで取り扱えるように分割して格納し、計算途中で必要となるデータ転送の際の通信コストの増大を抑える工夫を施した並列プログラムを開発して活用した実績がある。このプログラムを「京」コンピュータ上の大規模計算として実行することで目標とした計算を成功させた。

(2) 数値対角化データの解析方法

ランチョス法に基づく数値対角化の計算では、磁化ごとに最低エネルギーが得られる。この結果から磁化過程を得るには、通常、隣り合う磁化に対するエネルギー差を考える。このエネルギー差に対応する磁場で状態が入れ替わって磁化が増加することで磁化過程が階段状に得られることになる。この階段形状は有限サイズ効果の影響の一つであるが、階段状の磁化過程データには有限サイズ効果の現れ方に強弱があり、その効果がほとんど出ていないと考えられるデータ点を抽出し、そのデータ点からの外挿によって磁化プラトーの端を捉える解析を行った。この方法が、三角格子反強磁性体における飽和磁化の $3/10$ の高さの磁化プラトーに有効である様子を確認し、同じ方法によって、カゴメ格子反強磁性体における飽和磁化の $9/10$ の高さの挙動を検討した。

4. 研究成果

(1) カゴメ格子ハイゼンベルク反強磁性体

カゴメ格子上的 $S=1/2$ ハイゼンベルク反強磁性体は、本研究の中心的課題である。この系はフラストレート磁性体の典型事例として多くの研究が行われてきたものの、様々な点で微妙な挙

動に研究手法ごとの違いが現れ、なかなか真の姿を知ることが困難となっていた。そのようなカゴメ格子系の 45 サイト・クラスターに対して、数値対角化法の計算を実施し、この系の磁化過程を描画した。計算実施には京コンピュータにおける大規模並列計算も含まれ、45 サイト系の磁化過程を無磁場から飽和磁化までの全領域で描画に成功した事例としては世界初の成果となった。この計算結果により、挙動解明が困難となっていた、近似を伴わない方法によって得られた計算結果を基に、とりわけ、飽和磁化の 9 分の 1 の高さの挙動について詳しく調べた。有限サイズ系の結果として得られる磁化過程のうち、有限サイズ効果が小さいデータ点を抽出し、それを基に、関心のある高さの磁化過程を解析する手法を採用し、飽和磁化の 9 分の 1 の高さについてはプラトーが開いていないという結論を得た。この成果は、世界最大サイズの偏りのない計算結果が示す知見として重要なものとなった。

カゴメ格子系については、歪みを含む場合についても調べた。一連のチタン化合物がそのような格子系を構成し、その挙動の解明を進めた。この物質の磁性に対する実験に対し、密度汎関数法の計算から導いたハイゼンベルクハミルトニアンを代表者の数値対角化プログラムで取り扱い、磁化過程の挙動を解明した。実験で測定された範囲の磁場領域で良い合致を示した上で、実験で観測されていない高磁場領域で挙動が明らかとなった。実験的に得られる現実の物質の性質に関して理論と実験が合致する結果を得て理解を深めることに成功した本研究の成果は、典型的な量子スピン系の基礎的知見として、今後のこの系の研究に寄与することが期待される。

(2) 三角格子ハイゼンベルク反強磁性体

三角格子上の $S=1/2$ ハイゼンベルク反強磁性体は、カゴメ格子反強磁性体よりは理解が進んでいる事例であると考えられているが、系が何からの付加的要素を持つ場合の挙動は自明でない。そのような付加的要素として、次近接相互作用を持つ場合と、歪みを持つ場合の二つの方向性で三角格子反強磁性体の挙動を調べた。一つ目の次近接相互作用を持つ $S=1/2$ 三角格子ハイゼンベルク反強磁性体については、その絶対零度の磁化過程を調べた。三角格子系は次近接相互作用を持たない場合、飽和の 3 分の 1 の高さに磁化プラトーの発現が知られている。とりわけ、この 3 分の 1 プラトーは、古典系では現れないにも関わらず量子系で発現することで特に関心を持たれている現象として知られている。一方、最近接相互作用 (J_1) に対して次近接相互作用 (J_2) が強い極限の系は、次近接相互作用が構成する、独立な三角格子系 3 個から成る集合体としての系であるため、この極限でもやはり飽和の 3 分の 1 の高さでは磁化プラトーが現れる。両極限での磁化プラトー状態は、up-up-down 状態と呼ばれる共線形的なスピン状態となっていると考えられている。次近接相互作用を持つ三角格子反強磁性体では J_2 を制御することで、この両極限を連続的につなぐことができる。そうすると、両極限で発現している 3 分の 1 磁化プラトーが、 J_1 に対して J_2 が中庸な場合にどのような挙動を示すか、という非自明な問題に直面する。この問題に対し、本研究による計算は、 $J_2/J_1 \sim 0.17$ 付近でプラトーが一旦消失し、それより大きな J_2/J_1 ではしばらくプラトーが現れないものの、さらに大きな J_2/J_1 で再びプラトーが現れる様子を捉えた。

もう一つの方向性である歪みを持つ場合については、三角格子の相互作用に 3×3 型の歪みを加える場合を考えた。2 種類となる相互作用 (J_2 と J_1) のうち、一方 (J_2) を連続的に強くしていく極限はダイス格子と呼ばれる格子に至る。三角格子反強磁性体の基底状態は、いわゆる 120 度構造と呼ばれるスピン構造の状態が実現すると考えられていて、磁性としては非磁性状態が実現している。一方、ダイス格子では、リーブ・マティスの定理が成り立ち、フェリ磁性という自発磁化を持つ基底状態が実現している。このフェリ磁性状態は、飽和磁化の 3 分の 1 の高さの磁化を持つ状態 ($m=1/3$ 状態) である。我々は、 J_2/J_1 を連続的に変化させる相互作用制御を行い、これらの異なる基底状態の間の相転移を数値対角化法の計算で調べた。ダイス格子はフラストレーションがない事例に当たるため、この相互作用制御は、フラストレーションの強さを制御していることに相当する。我々の数値計算結果では、このフラストレーション制御によって、三角格子の非磁性状態から、 $m=1/3$ 状態に至る途中に、飽和の 3 分の 1 よりも小さい磁化を持つ、非自明な中間状態が発現していることを見出した。類似の中間状態は、カゴメ格子反強磁性体が歪みを持つ場合にも報告されているが、局所磁化でスピン状態の様子を見る限り、少し違う様子を持っている。系のフラストレーションに起因して発現するこの中間状態は、新たなフラストレーション効果として興味深い成果である。

(3) 直交ダイマー格子ハイゼンベルク反強磁性体

直交ダイマー格子上の $S=1/2$ ハイゼンベルク反強磁性体は、直交ダイマーボンドの反強磁性相互作用 (J_1) と正方格子を形成する反強磁性相互作用 (J_2) で構成されていて、 J_1 が強い領域ではその基底状態がダイマー状態と呼ばれる波動関数として数学的に厳密な形で書き下せる。 J_2 が非零であっても小さいうちは、このダイマー状態が基底状態として現れ続け、その相ではスピン励起にギャップが開いている。一方、 J_2 が強い極限では正方格子系となるため、ネール秩序を持つ基底状態が実現し、スピン励起にエネルギーギャップがないことが分かっている。この状況で、ギャップが開いているダイマー相からギャップのないネール秩序相への変化の様子をギャップの挙動という視点から調べた。これまでに、両方の相の間にはブラケット・シングレット相という単一の中間状態の存在が指摘されていたが、境目の様子の詳細は十分に理解されていなかった。我々は、この直交ダイマー系の 36 サイト系と 40 サイト系というこれまでに報告事例の

ない数値対角化の計算結果をもとに、ダイマー相とネール秩序相の端を捉えた上で、それらの中に、別の境目が現れている様子を見出した。この新たな境目を挟む領域では、明らかに挙動の異なる波動関数を実現していることが明らかとなり 2018 年の論文で報告した。その後の研究により、この振る舞いは、44 サイト系でもほぼ同じ挙動となっていることが分かっている。この成果は論文執筆中である。

(4) 大規模並列シミュレーション

大規模並列シミュレーションという視点で、利用可能なコンピュータ・システムの中でどれだけ大きな行列の固有値計算が実現できるか、ということは数値対角化法に基づく研究としては極めて本質的な問題である。この視点に立ち、本研究ではまず、Oakforest-PACS での大規模チャレンジ課題の計算として $S=2$ ハイゼンベルク反強磁性 1 次元鎖の計算を行った。この計算では、過去に取り組みられたことのない 20 サイト系の計算（この事例の行列次元は、5,966,636,799,745 である。）を実現した。その後、京コンピュータの大規模占有利用を実施し、 $S=5$ の場合の 14 サイトの有限系の計算（この事例の行列次元は、12,663,809,507,129 で、現時点での世界記録となる行列次元である。）を実現した。この計算は、京が保有する計算ノードの約 97% を用いることで初めて実現した。併せて $S=6$ の場合の計算も行った。いずれもハルデンギャップの評価を行った。得られた有限系の結果を解析し、無限系におけるハルデンギャップの値として高精度な評価値を得た。 $S=5$ と $S=6$ のギャップの評価値をもとに、ハルデンが非線形シグマ模型の解析で指摘していたギャップの漸近形の検証を行い、非線形シグマ模型の解析で得ることができない定係数の高精度評価を実現した。この成果は、世界最大サイズの偏りのない計算結果が示す知見として重要なものとなった。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計22件（うち査読付論文 22件／うち国際共著 0件／うちオープンアクセス 11件）

1. 著者名 Shirakami Ryu, Ueda Hiroaki, Jeschke Harald O., Nakano Hiroki, Kobayashi Shintaro, Matsuo Akira, Sakai Toru, Katayama Naoyuki, Sawa Hiroshi, Kindo Koichi, Michioka Chishiro, Yoshimura Kazuyoshi	4. 巻 100
2. 論文標題 Two magnetization plateaus in the kagome fluoride Cs ₂ LiTi ₃ F ₁₂	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 1-7
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.100.174401	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Nakano Hiroki, Todoroki Norikazu, Sakai Toru	4. 巻 88
2. 論文標題 Haldane Gaps of Large-S Heisenberg Antiferromagnetic Chains and Asymptotic Behavior	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 1-4
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.7566/JPSJ.88.114702	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Jeschke Harald O., Nakano Hiroki, Sakai Toru	4. 巻 99
2. 論文標題 From kagome strip to kagome lattice: Realizations of frustrated S=12 antiferromagnets in Ti(III) fluorides	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 1-5
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.99.140410	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 NAKANO Hiroki	4. 巻 67
2. 論文標題 Theoretical Study of S= 1/2 Frustrate Magnets by Large-scale Simulation of Numerical Diagonalizations	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of the Japan Society of Powder and Powder Metallurgy	6. 最初と最後の頁 72～77
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.2497/jjspm.67.72	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Nakano Hiroki, Sakai Toru	4. 巻 87
2. 論文標題 Third Boundary of the Shastry-Sutherland Model by Numerical Diagonalization	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 123702(1-5)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.87.123702	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Fukumoto Yoshiyuki, Yokoyama Yuto, Nakano Hiroki	4. 巻 87
2. 論文標題 Impact of Dzyaloshinskii-Moriya Interactions and Tilts of g Tensors on the Magnetization of a Spherical Kagome Cluster in $\{W2V30\}$	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 124710(1-6)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.87.124710	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Nakano Hiroki, Sakai Toru	4. 巻 87
2. 論文標題 Precise Estimation of the $S = 2$ Haldane Gap by Numerical Diagonalization	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 105002(1-2)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.87.105002	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Nakano Hiroki, Sakai Toru	4. 巻 87
2. 論文標題 Numerical-Diagonalization Study of Magnetization Process of Frustrated Spin-1/2 Heisenberg Antiferromagnets in Two Dimensions: --- Triangular- and Kagome-Lattice Antiferromagnets ---	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 063706(1-5)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.87.063706	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Sakai Toru, Nakano Hiroki	4. 巻 8
2. 論文標題 Ground state with nonzero spontaneous magnetization of the two-dimensional spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet with frustration	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 AIP Advances	6. 最初と最後の頁 101408(1-5)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5042780	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Hasegawa Yasumasa, Nakano Hiroki, Sakai Toru	4. 巻 98
2. 論文標題 Metamagnetic jump in the spin-1/2 antiferromagnetic Heisenberg model on the square kagome lattice	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 014404(1-9)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.98.014404	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Sakai Toru, Nakano Hiroki	4. 巻 536
2. 論文標題 Gapless spin excitations in the S=1/2 Kagome- and triangular-lattice Heisenberg antiferromagnets	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physica B: Condensed Matter	6. 最初と最後の頁 85 ~ 88
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.physb.2017.08.058	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Sakai Toru, Nakano Hiroki	4. 巻 969
2. 論文標題 Quantum Spin Fluid Behaviors of the Kagome- and Triangular-Lattice Antiferromagnets	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Conference Series	6. 最初と最後の頁 012127(1-6)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1742-6596/969/1/012127	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Shimada Alisa, Sakai Toru, Nakano Hiroki, Yoshimura Kazuyoshi	4. 巻 969
2. 論文標題 Spontaneous Magnetization of the Spin-1/2 Heisenberg Antiferromagnet on the Triangular Lattice with a Distortion	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Conference Series	6. 最初と最後の頁 012126(1-6)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1742-6596/969/1/012126	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Hiroki Nakano and Toru Sakai	4. 巻 86
2. 論文標題 Ferrimagnetism in the Spin-1/2 Heisenberg Antiferromagnet on a Distorted Triangular Lattice	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 063702(1-5)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.86.063702	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Hiroki Nakano and Toru Sakai	4. 巻 868
2. 論文標題 Quantum Spin Liquid in the Kagome-Lattice Antiferromagnet and Related Systems	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Conference Series	6. 最初と最後の頁 012006 (1-11)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Hiroki Nakano and Toru Sakai	4. 巻 86
2. 論文標題 Magnetization Process of the Spin-1/2 Triangular-Lattice Heisenberg Antiferromagnet with Next-Nearest-Neighbor Interactions --- Plateau or Nonplateau ---	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 114705 (1-6)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.86.114705	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 嶋田ありさ, 中野博生, 坂井徹, 吉村一良	4. 巻 65
2. 論文標題 3×3型の歪みを持つ三角格子上のS=1/2ハイゼンベルク反強磁性体 --- 磁化過程と磁化率 ---	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 粉体および粉末冶金	6. 最初と最後の頁 3-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2497/jjspm.65.3	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Alisa Shimada, Hiroki Nakano, Toru Sakai, and Kazuyoshi Yoshimura	4. 巻 87
2. 論文標題 Spin-1/2 Triangular-Lattice Heisenberg Antiferromagnet with 3×3-Type Distortion --- Behavior around the Boundaries of the Intermediate Phase	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 034706 (1-7)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.87.034706	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Alisa Shimada, Toru Sakai, Hiroki Nakano and Kazuyoshi Yoshimura	4. 巻 969
2. 論文標題 Spontaneous Magnetization of the Spin-1/2 Heisenberg Antiferromagnet on the Triangular Lattice with a Distortion	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Conference Series	6. 最初と最後の頁 012126(1-6)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1742-6596/969/1/012126	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Toru Sakai and Hiroki Nakano	4. 巻 969
2. 論文標題 Quantum Spin Fluid Behaviors of the Kagome- and Triangular-Lattice Antiferromagnets	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Conference Series	6. 最初と最後の頁 012127(1-6)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1742-6596/969/1/012127	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Toru Sakai and Hiroki Nakano	4. 巻 126
2. 論文標題 Gapless quantum spin liquid of the kagome-lattice antiferromagnet	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Polyhedron	6. 最初と最後の頁 42-44
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.poly.2017.01.012	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Hiroki Nakano and Toru Sakai	4. 巻 印刷中
2. 論文標題 Ferrimagnetism in the Spin-1/2 Heisenberg Antiferromagnet on a Distorted Triangular-Lattice	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 印刷中
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計46件 (うち招待講演 3件 / うち国際学会 5件)

1. 発表者名 中野博生
2. 発表標題 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
3. 学会等名 粉体粉末冶金協会2019年春季大会 (第123粉体粉末冶金協会2019年春季大会 (第123回講演大会) 回講演大会) (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 中野博生, 轟木義一, 坂井徹
2. 発表標題 大きいISに対するハルデンギャップの計算科学的研究
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 井上晃来, 福元好志, 中野博生
2. 発表標題 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
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 水口龍之介, 広瀬悠平, 福元好志, 中野博生
2. 発表標題 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
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 轟木義一
2. 発表標題 Z_q 対称性を持つ2次元模型の中間相
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 中野博生, 坂井徹
2. 発表標題 低次元ハイゼンベルグ系の大規模並列シミュレーションによる研究
3. 学会等名 第75回年次大会(2020年)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 江渝, 町田学, 轟木義一
2. 発表標題 スピン系を利用した拡散光トモグラフィ
3. 学会等名 第75回年次大会 (2020年)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 中野博生
2. 発表標題 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
3. 学会等名 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
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 中野博生, 坂井徹
2. 発表標題 Shastry-Sutherland模型の大規模数値対角化による研究
3. 学会等名 日本物理学会第74回年次大会 (2019年)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 轟木義一, 中野博生
2. 発表標題 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
3. 学会等名 日本物理学会第74回年次大会 (2019年)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 坂井徹, 山本亮太, 善田知佑, 中野博生, 岡本清美
2. 発表標題 S=2反強磁性鎖の磁化プラトー
3. 学会等名 日本物理学会第74回年次大会 (2019年)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 坂井徹, 中野博生, 野尻浩之
2. 発表標題 直交ダイマー系の量子相転移とESR禁制遷移
3. 学会等名 日本物理学会2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 中野博生, 坂井徹
2. 発表標題 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
3. 学会等名 日本物理学会2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 K. Inoue, Y. Maeda, H. Nakano, Y. Fukumoto
2. 発表標題 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
3. 学会等名 The 21st International Conference on Magnetism (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 T. Sakai, H. Nakano
2. 発表標題 Ground state with nonzero spontaneous magnetization of the two-dimensional spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet with frustration
3. 学会等名 The 21st International Conference on Magnetism (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 中野博生
2. 発表標題 大規模数値対角化計算で見たカゴメ格子反強磁性体とその周辺
3. 学会等名 日本物理学会 第73回年次大会(2018年) (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 嶋田ありさ, 中野博生, 坂井徹, 吉村一良
2. 発表標題 歪みを持つ三角格子上のS=1/2ハイゼンベルク反強磁性体の相転移と磁化率
3. 学会等名 日本物理学会 第73回年次大会(2018年)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 坂井徹, 中野博生
2. 発表標題 磁化率解析法による量子系のスピギャップ有無の判定
3. 学会等名 日本物理学会 第73回年次大会(2018年)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 前田悠登, 井上晃来, 福元好志, 中野博生
2. 発表標題 ミクロカノニカル熱的量子純粹状態を用いた球体カゴメ系のカノニカルアンサンブル計算
3. 学会等名 日本物理学会 第73回年次大会(2018年)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 中野博生, 坂井徹
2. 発表標題 数値対角化による2次元フラストレート反強磁性体の量子相転移の研究
3. 学会等名 日本物理学会 2017年秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 嶋田ありさ, 坂井徹, 中野博生, 吉村一良
2. 発表標題 歪んだ三角格子ハイゼンベルク反強磁性体の比熱
3. 学会等名 日本物理学会 2017年秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 坂井徹, 中野博生, 野尻浩之
2. 発表標題 直行ダイマー系の量子相転移におけるESR禁制遷移
3. 学会等名 日本物理学会 2017年秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 福元好志, 横山祐人, 中野博生
2. 発表標題 球体カゴメ系{W72V30}の磁化過程の厳密対角化計算: ステップ構造消失の起源について
3. 学会等名 日本物理学会 2017年秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 轟木義一, 中野博生
2. 発表標題 反強磁性次近接相互作用のある積層三角格子反強磁性体の磁場中相図
3. 学会等名 日本物理学会 2017年秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Hiroki Nakano
2. 発表標題 The destabilization of the ferrimagnetic ground state of a spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet owing to frustrations
3. 学会等名 JSPMIC2017 --- 60th Anniversary (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Hiroki Nakano
2. 発表標題 An eigenvalue problem for sparse matrices with a large dimension --- huge-scale parallel calculations in K computer and Oakforest-PACS ---
3. 学会等名 JSST 2017 (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 轟木義一, 中野博生
2. 発表標題 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ントップ転移と秩序相の安定性
3. 学会等名 日本物理学会 2016年秋季大会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 紙屋佳知, Cristian Batista, Christopher Aoyama, 高野安正, 高田晃右, 山口博則, 小野俊雄, 細越裕子, 志村恭通, 榊原俊郎, Minseong Lee, Eun Sang Choi, 中野博生
2. 発表標題 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
3. 学会等名 日本物理学会 2016年秋季大会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 坂井徹, 利根川孝, 岡本清美, 中野博生
2. 発表標題 スピンラダー系における磁場誘起スピンネマティック相
3. 学会等名 日本物理学会 2016年秋季大会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 中野博生, 坂井徹
2. 発表標題 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
3. 学会等名 日本物理学会 2016年秋季大会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 長谷川泰正, 中野博生, 坂井徹
2. 発表標題 正方カゴメ格子ハイゼンベルグ反強磁性体の磁化ジャンプ
3. 学会等名 日本物理学会 2016年秋季大会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 轟木義一, 中野博生
2. 発表標題 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)
3. 学会等名 日本物理学会 2017年年次大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 嶋田ありさ, 坂井徹, 中野博生, 吉村一良
2. 発表標題 3x 3型の歪みを持つ三角格子S=1/2ハイゼンベルグ反強磁性体
3. 学会等名 日本物理学会 2017年年次大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 中野博生, 坂井徹
2. 発表標題 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
3. 学会等名 日本物理学会 2017年年次大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 中野博生
2. 発表標題 巨大次元行列の固有値問題--大規模並列計算による実現--
3. 学会等名 プラズマシミュレーションシンポジウム2016
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Hi roki Nakano
2. 発表標題 Huge-scale parallel calculations of an eigenvalue problem for sparse matrices with a large dimension
3. 学会等名 JSST2016 (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 中野博生
2. 発表標題 フラストレート磁性体の数値対角化法による研究
3. 学会等名 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
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 中野博生
2. 発表標題 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
3. 学会等名 第4回兵庫県立大学計算科学連携セミナー：「実験と理論・シミュレーションとの連携課題」
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 古内理人, 中野博生, 坂井徹
2. 発表標題 五角形格子上のハイゼンベルク反強磁性体の数値的研究
3. 学会等名 日本物理学会2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 本橋樹生, 井上晃来, 福元好志, 中野博生
2. 発表標題 球体カゴメ系{W72V30}の低温比熱へのランダムネス, およびジャロシンスキー・守谷相互作用の影響
3. 学会等名 日本物理学会2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 中野博生, 坂井徹
2. 発表標題 直交ダイマー格子反強磁性体の大規模数値対角化による研究
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会 (2021年)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 古内理人, 中野博生, 坂井徹
2. 発表標題 フローレット五角形格子上のハイゼンベルク反強磁性体の磁化過程に関する理論的研究
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会 (2021年)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 山田尊生, 古内理人, 中野博生, 兼安洋乃, 岡本清美, 利根川孝, 坂井徹
2. 発表標題 biquadratic interactionのあるS=2反強磁性鎖の対称性に守られたトポロジカル相
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会 (2021年)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 中西亮介, 古内理人, 長谷川泰正, 中野博生, 兼安洋乃, 岡本清美, 利根川孝, 坂井徹
2. 発表標題 異方的ボンダ交代鎖のスピルネマティック相
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会 (2021年)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 中野博生
2. 発表標題 Oakforest-PACSIにおける厳密対角化大規模並列計算で拓く量子磁性の新奇量子状態の発現機構の解明
3. 学会等名 第7回「京」を中核とするHPCIシステム利用研究課題成果報告会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 中野博生
2. 発表標題 五角形構造を有する磁性体の異常量子現象解明の新展開
3. 学会等名 第7回「京」を中核とするHPCIシステム利用研究課題成果報告会
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分担 者	轟木 義一 (Norikazu Todoroki) (40409925)	千葉工業大学・創造工学部・教授 (32503)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------