

令和元年6月18日現在

機関番号：32660

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2016～2018

課題番号：16K17753

研究課題名(和文)スピンの量子的秩序に基づいた磁気熱流制御

研究課題名(英文)Field controlling of thermal conductivity in quantum magnetic ordered states

研究代表者

杉本 貴則 (Sugimoto, Takanori)

東京理科大学・理学部第一部応用物理学科・講師

研究者番号：70735662

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,100,000円

研究成果の概要(和文)：スピンの量子的秩序に基づき磁気熱流制御の機構を理論的に明らかにするため、「印加磁場と磁気励起スペクトラムの関係性の解明」、および「磁気励起スペクトラムとスピン伝導度および熱伝導度の関係性の解明」の、2つの具体的目標を定めた。第一の目標達成のため、スピン梯子やスピン・クラスタ鎖など複数のモデルで、磁化過程と励起スペクトラムを解析した。この結果、磁化プラトー相などの並進対称性が自発的に破れた相では、破れた対称性を反映して、新しい磁気準粒子が発現することを発見した。一方、二つ目の目標達成のため、有限温度ダイナミクスを比較的大きい系で計算する方法を開発し、既存のモデルとスピン伝導度の比較・議論を行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本課題で対象とした、スピンの量子的秩序に基づいた磁気熱流制御は、次世代のICT技術の中核をなす、スピントロニクスやエネルギー制御素子として大きな役割を果たすと期待される。本研究では、まず並進対称性が自発的に破れた磁化プラトーと呼ばれる量子秩序相において、これまで知られていなかった新たな磁気準粒子が発現することを明らかにした。これは基礎物理学的にも重要な発見である。一方、これまで大きな系での計算が困難とされてきたスピン伝導度や熱伝導度を計算するため、行列積状態変分法を改良し、このベンチマークを行った。これも技術的には重要な成果だと言える。

研究成果の概要(英文)：We theoretically study on thermal and spin conductivities in quantum magnetic ordered states, in order to realize controlling of these conductivities by applying magnetic field. For this sake, we firstly investigate magnetization curves, quantum phase transitions, and magnetic excitations with finite magnetization in several models by using variational matrix-product state method. In magnetization plateau phases which emerge with spontaneously-broken translational symmetry, we have found new magnetic quasi-particles induced by the spontaneously-broken translational symmetry. These magnetic quasi-particles will give an anomaly in spin and thermal conductivities. In addition, we have developed numerical algorithm to calculate finite-temperature spin dynamical properties by using variational matrix-product state method. By using this method, we will clarify the relationship between the new magnetic quasi-particles and spin and thermal conductivities.

研究分野：量子磁性、スピントロニクス

キーワード：磁化プラトー スピン液体 スピン伝導度 熱伝導度

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19、CK - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

強い量子揺らぎと幾何学的フラストレーションが引き起こす奇妙な物理の一つとして、反強磁性相互作用に支配された量子スピン系で生じる、スピン液体、トポロジカル秩序、そして、磁化プラトー現象が有名である。これらの現象は、その理論的メカニズムが面白いだけでなく、物性異常として実際に観測される点で有意義である。実際、スピン液体状態は、短距離秩序のみの液体のような乱雑さを持っている反面、その素励起は、質量ゼロの弾道的な準粒子(スピノン)により説明される。一方、磁化プラトーのような量子的秩序状態では、しばしば系の有する対称性が自発的に破れ、ある種のトポロジカル秩序状態が現れる。このような秩序は、特に、素励起の性質に影響を与え、磁気励起スペクトラムの差異として観測される。これら特異な量子スピン状態は、非常に近いパラメータ領域に隣接することが多く、磁場印加によって移り変わることができる。特に、ギャップレスなスピン液体相から、ギャップの開いた(トポロジカル)相への転移は、磁化プラトー転移として知られており、磁化曲線の平坦部分として観測される。この転移においては、ギャップの有無を含め、磁気秩序などの性質が著しく変化する。しかし、これまでの磁気相転移の研究は、基底状態に注目して行われてきたため、磁場下での動的振る舞いや伝導特性がどうなるかは、実はほとんどわかっていない。そこで、本研究では、磁場誘起量子相における動的性質に注目し研究を行い、磁気熱流応答をミクロな視点から明らかにすることを目的とする。

2. 研究の目的

低次元量子スピン系は、スピン液体やトポロジカル秩序、磁化プラトーなどのキーワードに絡んで、近年盛んに研究が行われている。これらの現象は、ただそのメカニズムが理論的に非自明なだけでなく、スピンギャップの有無や輸送特性、熱力学量の異常として、実験的な観測量にも顔を出す点で面白い。本研究では、これらの研究で得られた知識を拡張・応用し、特に、磁場と熱伝導特性の関係に主眼を置いて、量子スピン系における磁気熱流応答の基礎理論の構築を目指す。より具体的には、磁化プラトーと熱流導体・絶縁体転移、およびトポロジカル秩序と熱流 Hall 効果の関係を、ミクロな描像から明らかにすることを目的とする。

3. 研究の方法

磁場相転移における、スピン由来熱伝導度の変化を明らかにするために、(1)「印加磁場と磁気励起スペクトラムの関係性」、(2)「磁気励起スペクトラムとスピン伝導度(および熱伝導度)の関係性」に注目し研究を行う。この際、磁気励起スペクトラムとスピン伝導度を求める手法として、動的(および有限温度)密度行列繰り込み群法などの数値的手法を積極的に活用する。一方で、対応物質の実験を行うグループと議論を行うことで、得られた結果を比較・検証する。この際、具体的に、複数の系を並行して検証することで、その普遍的特徴を明らかにし、磁場による熱流制御の基礎理論を構築する。

4. 研究成果

スピンの量子的秩序に基づき磁気熱流制御の機構を理論的に明らかにするため、「印加磁場と磁気励起スペクトラムの関係性の解明」、および「磁気励起スペクトラムとスピン伝導度および熱伝導度の関係性の解明」の、2つの具体的目標を定めた。第一の目標達成のため、スピン梯子やスピン・クラスタ鎖など複数の模型で、磁化過程と励起スペクトラムを解析した。

(1) スピン梯子

フラストレートしたスピン梯子系では、並進対称性を破って有限磁化領域に3つの磁化プラトーが出現することがわかっている。本研究では、この3つの磁化プラトー領域で、磁気励起スペクトラムを計算した。この計算には、動的密度行列繰り込み群法を用い、大型計算機を用いた大規模並列計算を実行した。この結果、並進対称性の自発的破れに伴い、新しい磁気準粒子が発現することが確認された。この磁気準粒子は、拡張された単位胞内でクラスタ構造を組み、そのクラスタを単位として伝搬する。この磁気準粒子は、スピン伝導度にも異常として観測されると期待される。

(2) スピン・クラスタ鎖

フェドバイトと呼ばれる鉱物の磁性が量子スピン有効模型として記述される可能性が、実験的研究により指摘された。そこで、この実験研究者との共同研究を通して、この物質の有効模型を構築し、磁化過程や磁気励起ダイナミクスと比較による内部パラメータを同定した。また、基底状態相やその素励起の解析を行い、この物質の低温相が、ホールデン状態と呼ばれるトポロジカル秩序状態となることを明らかにした。今後、有限直状態の詳細を含め、トポロジカル秩序状態でのスピン伝導度を解析する予定である。

(3) スピン・カゴメ・ストリップ

2次元カゴメ格子における基底状態は、励起ギャップの有無に関して、近年多くの理論的研究

がなされている。本研究では、この模型の1次元断面であるカゴメ・ストリップ模型を対象にして、その磁化過程と有限磁化状態の解析を行った。その結果、非常に多数の磁化プラトー状態が発現することが分かった。スピン梯子の研究から類推すると、これらの相はそれぞれ異なった長さのクラスタを単位とする磁気準粒子を持つと考えられる。そこで、この磁気励起スペクトラムを計算した結果、非常に多彩な構造を持つことが分かった。

一方、二つ目の目標「磁気励起スペクトラムとスピン伝導度および熱伝導度の関係性の解明」を達成するため、有限温度ダイナミクスを比較的大きい系で計算する方法を開発し、この手法では、低励起状態のエネルギーを、高エネルギー側に蹴り上げた有効ハミルトニアン基底状態を求めることで、任意の準位までの状態を下から順番に求めることができる。この手法を用い、低温での分配関数を低励起状態だけで近似することで、スピン伝導度や熱伝導度を計算した。これをフラストレートしたスピン鎖模型で計算し、ギャップの有無に対する変化を調べた。また、スピン液体相における熱力学量を計算し、既存の厳密解と比較し、定性的に一致することを確かめた。この手法を用い、今後、上記の模型におけるスピン伝導度や熱伝導度の詳細な解析を行う予定である。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計4件)

[1] T. Sugimoto, M. Mori, T. Tohyama, S. Maekawa, “Magnetic Phase Diagram of Frustrated Spin Ladder”, *Phys. Rev. B* **97**, 144424 (2018).

DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.97.144424>

[2] M. Fujihala, T. Sugimoto, T. Tohyama, et al., “Cluster-based Haldane state in edge-shared tetrahedral spin-cluster chain: Fedotovite $K_2Cu_3O(SO_4)_3$ ”, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 077201 (2018).

DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.120.077201>

[3] K. Morita, T. Sugimoto, S. Sota, T. Tohyama, “Magnetization plateaus in the spin-1/2 antiferromagnetic Heisenberg model on a kagome-strip chain”, *Phys. Rev. B* **97**, 014412 (2017).

DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.97.014412>

[4] K. Morita, M. Fujihala, H. Koorikawa, T. Sugimoto, et al., “Static and dynamic magnetic properties of the spin-1/2 inequilateral diamond-chain compounds $A_3Cu_3AlO_2(SO_4)_4$ ($A=K,Rb,Cs$)”, *Phys. Rev. B* **95**, 184412 (2017).

DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.95.184412>

〔学会発表〕(計8件)

[5] 杉本貴則, 森田克洋, 遠山貴己, “量子スピンクラスタ鎖におけるクラスタ単位ハルデン状態”, 第13回量子スピン系研究会, 茨城県東海村 (2019年1月).

[6] 杉本貴則, 森田克洋, 遠山貴己, “スピン・クラスタ鎖におけるクラスタ単位ハルデン状態”, 基研研究会「スピン系物理の最前線」, 京都大学 (2018年10月). (口頭発表)

[7] 杉本貴則, “奇数個スピンで構成されるクラスタ単位ハルデン状態”, 日本物理学会 2018年度秋季大会, 同志社大学 (2018年9月). (口頭発表)

[8] T. Sugimoto, K. Morita, and T. Tohyama, “Cluster-Based Haldane State with Finite Magnetization”, International Conference on Magnetism 2018, San Francisco, USA. (Jul. 2018). (Oral)

[9] 杉本貴則, 森田克洋, 遠山貴己, “スピン・クラスタ鎖におけるハルデン状態”, 日本物理学会 第73回年次大会, 東京理科大学 (2018年3月). (口頭発表)

[10] T. Sugimoto, M. Mori, T. Tohyama, and S. Maekawa, “Symmetry Breaking of Quasi-Spin Inversion in Magnetization-Plateau Phase Diagram of Frustrated Spin Ladder”, International Conference on Low-Temperature Physics 2017, Goteburg, Sweden (Aug. 2017). (Poster)

[11] T. Sugimoto, M. Mori, T. Tohyama, and S. Maekawa, “Magnetic Phase Diagram of Frustrated Spin Ladder”, Highly Frustrated Magnetism 2016, Taipei, Taiwan (Sep. 2016). (Poster)

[12] T. Sugimoto, M. Mori, T. Tohyama, and S. Maekawa, “Magnetic Phase Diagram of Frustrated Spin Ladder”, Strongly Correlated Electron Systems 2016, Hangzhou, China (May. 2016). (Poster)

〔図書〕(計0件)

〔産業財産権〕

出願状況 (計0件)

名称:

発明者:

権利者:

種類:

番号：
出願年：
国内外の別：

取得状況（計0件）

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年：
国内外の別：

〔その他〕
ホームページ等

6．研究組織

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、研究者個人に帰属されます。