

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成 25 年 6 月 17 日現在

機関番号： 12601

研究種目： 基盤研究(C)

研究期間： 2009 ~ 2012

課題番号： 21540381

研究課題名（和文） 量子スピン系と古典ダイナミクス

研究課題名（英文） Quantum Spin Systems and Classical Dynamics

研究代表者

押川 正毅 (OSHIKAWA MASAKI)

東京大学・物性研究所・教授

研究者番号： 50262043

研究成果の概要（和文）：

量子スピン系の時間変化が古典的な場の理論で記述されるような温度領域について、古典的な運動方程式を用いて、他の方法では求めることが困難な電子スピン共鳴のスペクトルの形状を決定した。交替磁場が加えられたハイゼンベルグ反強磁性鎖については、常磁性共鳴から反強磁性共鳴へのクロスオーバーとそれに伴うスペクトルの変化を示した。古典的運動方程式に基づくアプローチは、量子スピン系のダイナミクスについて他の方法と相補的な情報を与える。

研究成果の概要（英文）：

For the temperature regime where time evolution of a quantum spin system is described by a classical field theory, spectral shape of the Electron Spin Resonance is determined using classical equation of motion. It is difficult to obtain the spectral shape with other methods. On Heisenberg antiferromagnetic chain under a staggered field, a crossover between paramagnetic and antiferromagnetic resonances, and accompanying change in the spectral shape are demonstrated. Our approach based on the classical equation motion provides insights complimentary to those obtained in other approaches.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2009 年度	900,000	270,000	910,000
2010 年度	700,000	210,000	910,000
2011 年度	900,000	270,000	1,170,000
2012 年度	700,000	210,000	910,000
年度			
総計	3,200,000	960,000	4,160,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：数理物理・物性基礎

キーワード：物性基礎論 磁性 統計力学 量子ダイナミクス 量子古典対応 電子スピン共鳴

1. 研究開始当初の背景

量子多体系の研究はここ数十年で大きく進展したが、動的な性質の解明には多くの課題が残されている。言うまでもなく、動的な性質を論じる上で量子系と古典系は様々な点で大きく異なる。

一方で、古典系は量子系の古典極限に相当す

るとも考えられるため、量子系のダイナミクスと古典系のダイナミクスについても対応関係が期待できる。たとえば、古典系におけるカオスが対応する量子系にどのように反映されるかに関する研究は量子カオスと呼ばれる一つの研究分野を形成している。

しかし、物性物理学上興味がある多くの量子

多体系や場の量子論について、対応する古典力学系と量子力学的なダイナミクスとの関係は良くわかっていない。このことは、量子ダイナミクスの理解の困難とも密接に関係している。

たとえば、量子ダイナミクスを実験的に調べる有用な手段として電子スピン共鳴(ESR)があるが、豊富な実験結果に比べ理論的な理解は進んでいない。 $S=1/2$ ハイゼンベルグ反強磁性鎖の低温における ESR は、研究代表者らによって場の理論に基づく理論が定式化され、実験結果の理解や予言に成功しているが、スピンの1より大きい場合の理解は限定的である。1次元スピンギャップ系の代表例として、ハルデンギャップを持つ整数スピン鎖がある。低温極限では、素励起であるマグノンの密度が低いためマグノン間の相互作用が無視でき、マグノンの量子力学的遷移として ESR を記述することができる。しかし、ギャップに比べて高い温度では、マグノンの密度が高く相互作用の効果が大きく、量子力学的遷移に基づくアプローチは困難になる。また、 $S=1/2$ ハイゼンベルグ反強磁性鎖における ESR については、上述のように場の理論が大きな成功を収めていたが、有効交替磁場を持つ $KCuGaF_6$ などの系で場の理論から予見されない複数の共鳴が実験的に見出され、理論に対しても大きな課題となっていた。

2. 研究の目的

本研究では、物性物理学上興味のある量子多体系について、そのダイナミクスを古典論との対応も含めて理解することを目的とする。

3. 研究の方法

まず、少数スピン系について、量子ダイナミクスと古典極限での運動方程式の関係を調べた。次に、1次元量子反強磁性鎖について、非線形シグマ模型への写像に基づき、ESR スペクトルが古典的なダイナミクスによって記述される条件を調べた。該当する領域について、古典的な運動方程式の数値解法とモンテカルロシミュレーションを組み合わせた計算を行った。量子ダイナミクスに対するこのようなアプローチは、Tyc, Halperin, Nelson らによって試みられていたが、異方性に関して鋭敏な ESR の記述にあたってはより一層高精度の計算が求められる。そこで本研究では、シンプレクティック法を古典非線形シグマ模型のダイナミクスに適用することによりエネルギーを保存した精度の高い計算を行い、ESR スペクトルの変化を調べた。

4. 研究成果

(1) 一般のスピンを持つ1次元量子ハイゼンベルグ反強磁性鎖に対して、異方的摂動として交替磁場を導入し、ダイナミクスが古典的非線形シグマ模型で記述される領域 ESR スペクトルの変化を調べた。その結果、常磁性共鳴の線幅が温度の低下とともに大きくな

り、またさらに低温では別の共鳴ピークが現れることがわかった。この新たな共鳴ピークは、交替磁場によって誘起された反強磁性な秩序状態のまわりのスピン波動的な励起に対応することを、理論と数値結果の比較によって明確にした。この2つの領域の間のクロスオーバーは、交替磁場下の $S=1/2$ 反強磁性スピン鎖において見られるものと定性的に似ているが、系の古典性を反映した差異があることも示した。また、スピンの大きさなどによるゆらぎの大きさを反映して、スペクトルの形状に違いが出ることもわかった。(図1、図2参照) 一般に、ESR スペクトルの詳細な形状を求めることは非常に困難であるが、本研究では古典ダイナミクスを活用してスペクトルの形を求めた点で、成果の意義は大きい。

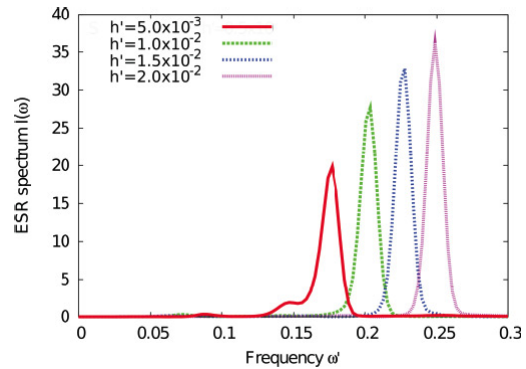


図1 $S=10$ の反強磁性ハイゼンベルグ鎖に交替磁場を加えたときの ESR スペクトルの変化。交替磁場を加えるとネール秩序が誘起され、これに伴い常磁性共鳴から反強磁性共鳴に対応するスピン波励起に急激に移行する。

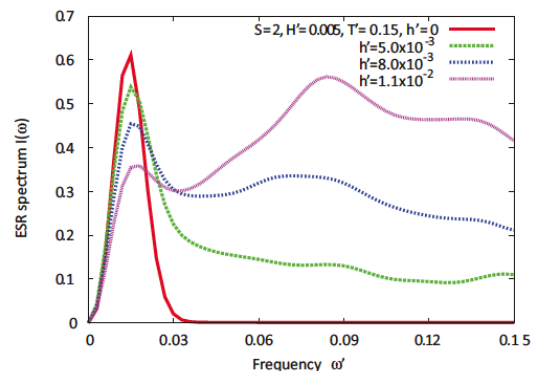


図2: $S=2$ の場合の交替磁場による ESR スペクトルの変化。大きなゆらぎを反映して、反強磁性(スピン波)共鳴が大きな幅を持つ。

(2) $S=1$ 量子スピン鎖における単一イオン異方性の効果を摂動論で扱ったとき、マグノンの相互作用を無視する近似は低温・低エネルギー極限においても不適切であることを明確に示した。マグノンの相互作用を非線形シグマ模型の厳密なフォームファクターによって扱い、これが異方性項の相関関数の漸近系を正確に記述することを数値計算との比較で確認した。これにより、さまざまな物理量の、単一イオン異方性の1次の範囲で厳密な表式を得ることに成功した。これを単一イオン異方性を持つ $S=1$ 量子スピン鎖の動的構造因子やESRシフトなど実験で観測可能な量に適用し、数値シミュレーションや実験データと良い一致を確認した。これは、非線形シグマ模型における異方性項の厳密なフォームファクターの、実験的に観測可能な量に対する応用としては初めてのものである。

(3) 解析的な摂動論と有限温度密度行列くりこみ群の組み合わせによって、 $S=1/2$ ラダー系のESRシフトを全温度範囲で定量的に求め、BPCBにおける異方性パラメータの同定に成功した。

(4) 有効交替磁場を持つ $S=1/2$ 反強磁性量子スピン鎖のESRにおける鎖端の効果を、量子サイン・ゴルドン場の理論に基づいて考察した。その結果、素励起の端における束縛状態が生じること、及び端の存在によって選択則が変化しバルクでは禁制となっている遷移が可能となること、の2つの要因による新たな共鳴を見出した。これらは $KCuGaF_6$ や $Cu-PM$ におけるESR実験で見出されたものと良く一致する。

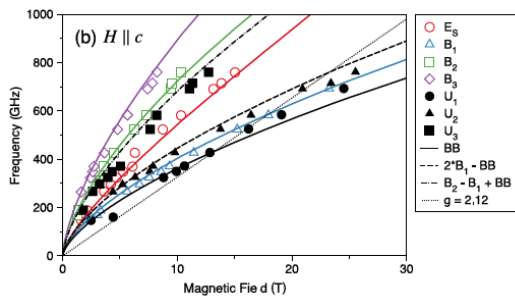


図 3: 量子サイン・ゴルドン理論の鎖端効果から導かれるESRの共鳴と、 $Cu-PM$ (PM:ピリミジン) についての実験データ [S. A. Zvyagin *et al.*, Phys. Rev. Lett. 93, 027201 (2004) による]の比較。これまで未解明だった共鳴が鎖端の効果として理解できる。

このように、量子効果と端の効果の相乗による新たな現象を明らかにした。上述の研究成果とあわせて、現実物質における一見複雑に見えるESRスペクトルも、精密な理論的解析によって定量的に解明できることを示した。

(5) ボンド交替と次近接相互作用を有する $S=1/2$ および $S=1$ 反強磁性鎖量子スピン鎖も、やはり量子サイン・ゴルドン場の理論によって有効的に記述される。モデルがスピン空間の回転について等方的である場合、素励起であるソリトン・反ソリトン・第1ブリーザーと、第2ブリーザーの質量(励起ギャップ)の比は $\sqrt{3}$ になるはずだが、実際の系ではかなり異なっている。これはマージナリー・イレバントな摂動に起因するが、我々はくりこみ群方程式からスケーリング則を求め、 $S=1/2$ と $S=1$ における数値的な結果を良く説明することに成功した。

(6) トポロジカル絶縁体に磁化イオンをドープした系など、磁気電気効果を持つ磁性体の電場下における挙動を解析した。このような系は、素粒子理論で提案されたアクシオン場の理論と数学的に同じ理論で記述することができる。素粒子理論の近年の研究で、アクシオン場は電場のもとで不安定性を有することが示されていたが、その物理的意味や最終的な帰結は明らかではなかった。そこで、磁気電気効果を持つ磁性体について強い電場下での挙動を調べたところ、臨界電場で相転移が起きて自発的に磁場が生成されることがわかった。

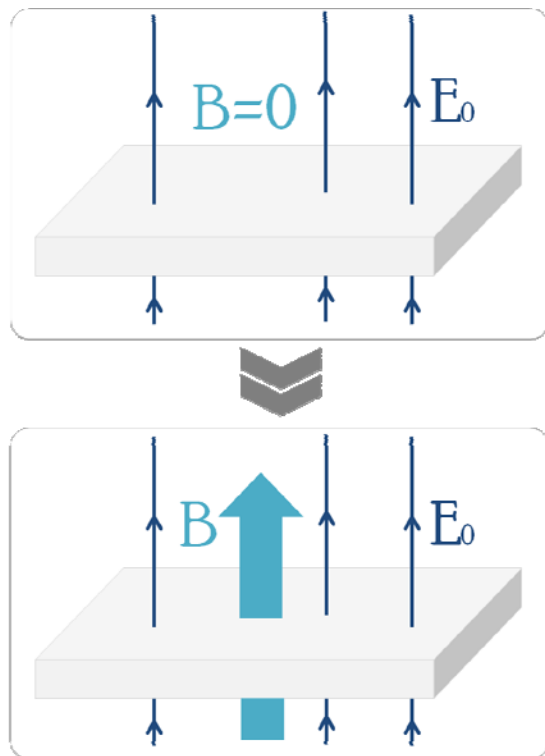


図 4: 磁気電気効果を持つ磁性体の強電場下での不安定性。臨界電場以上で、磁場を自発的に生成することにより電場を遮蔽する。この不安定性は、アクシオン場の理論の解析によって見出された。(Today Research より転)

載、図は南崎梓・ユアンマッカイによる。)

電気磁気効果は場の理論におけるトポロジカル項に対応する。トポロジカル項は一般に量子効果を記述するとされるが、上述の相転移自体は基本的に古典的な枠組みで理解できる。この点で、量子系と古典系の対応に関して興味深い例にもなっている。

この成果を発表した論文は Physical Review Letters 誌の Editor's Suggestion に選ばれている。また、本成果について Kavli IPMU および物性研究所よりプレスリリースが行われ、全学の重要な研究を紹介する Todai Research Editor's Choice や科学新聞記事に取り上げられた。また、一般向けの雑誌である岩波書店「科学」に関連する対談が掲載された。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 10 件)

①S. C. Furuya, Y. Maeda, and M. Oshikawa, *Electron spin resonance shifts in $S=1$ antiferromagnetic chains*, Phys. Rev. B 87, 125122 (2013). (査読有)

DOI: 10.1103/PhysRevB.87.125122

②S. Takayoshi and M. Oshikawa, *Mass ratio of elementary excitations in frustrated antiferromagnetic chains with dimerization*, Phys. Rev. B 86, 144408 (2012) [6 pages]. (査読有)

DOI: 10.1103/PhysRevB.86.144408

③S. C. Furuya and M. Oshikawa, *Boundary Resonances in $S=1/2$ Antiferromagnetic Chains Under a Staggered Field*, Phys. Rev. Lett. 109, 247603 (2012). (査読有)

DOI: 10.1103/PhysRevLett.109.247603

④A. Rahmani, C.-Y. Hou, A. Feiguin, M. Oshikawa, C. Chamon, and I. Affleck, *General method for calculating the universal conductance of strongly correlated junctions of multiple quantum wires*, Phys. Rev. B 85, 045120 (2012). (査読有)

DOI: 10.1103/PhysRevB.85.045120

⑤J. Tamaki and M. Oshikawa, *Field theory analysis of $S=1$ antiferromagnetic bond-alternating chains in the dimer phase*, Phys. Rev. B 85, 134431 (2012) [10 pages]. (査読有)

DOI: 10.1103/PhysRevB.85.134431

⑥H. Ooguri and M. Oshikawa, *Instability in Magnetic Materials with a Dynamical Axion Field*, Phys. Rev. Lett. 108, 161803 (2012) [5 pages]. (査読有)

DOI: 10.1103/PhysRevLett.108.161803

⑦S. C. Furuya, P. Bouillot, C. Kollath, M. Oshikawa, and T. Giamarchi, *Electron Spin Resonance Shift in Spin Ladder Compound*, Phys. Rev. Lett. 108, 037204 (2012) [5 pages]. (査読有)

DOI: 10.1103/PhysRevLett.108.037204

⑧大栗博司、押川正毅、[対談] 素粒子論と物性論の出会い：アクシオンとトポロジカル絶縁体がもたらす夢、科学 (岩波書店)、82 巻 747~755 頁 (2012) (査読無)

⑨S. C. Furuya, T. Suzuki, S. Takayoshi, Y. Maeda, and M. Oshikawa, *Single-ion anisotropy in Haldane chains and the form factor of the $O(3)$ nonlinear sigma model*, Phys. Rev. B 84, 180410(R) (2011) [5 pages]. (査読有)

(査読有)

DOI: 10.1103/PhysRevB.84.180410

⑩S. C. Furuya, M. Oshikawa, and I. Affleck, *Semiclassical approach to electron spin resonance in quantum spin systems*, Phys. Rev. B 83, 224417 (2011) [14 pages]. (査読有)

(査読有)

DOI: 10.1103/PhysRevB.83.224417

[学会発表] (計 11 件)

①大栗博司、押川正毅、動的なアクシオン場を持つ磁性体における電場誘起相転移、日本物理学会 2012 年秋季大会、横浜国立大学、2012.09.20

②M. Oshikawa, *Boundary resonances in $S=1/2$ antiferromagnetic chains under staggered field*, QCMD VI Joint Meeting New States of Matter and their Excitations, Oak Ridge National Laboratory (USA), 2012.09.13

③M. Oshikawa, *Instability in magnetic materials with dynamical axion field*, Topological States of Matter: Insulators, Superconductors, and Quantum Hall Liquids, NORDITA, Stockholm (Sweden), 2012.08.06

④M. Oshikawa, *Dynamical Theory of Superfluidity in One Dimension*, New quantum states of matter in and out of equilibrium: Conference, Galileo Galilei Institute, Florence (Italy), 2012.5.23

⑤M. Oshikawa, *Boundary Bound States in $S=1/2$ Antiferromagnetic Chains and Electron Spin Resonance*, International Conference on Superconductivity and Magnetism, Kumburgaz (Turkey), 2012.4.30

⑥古谷峻介、押川正毅、1次元量子 sine-Gordon系の電子スピン共鳴における非磁性不純物効果、日本物理学会第67回年会、関西学院大学、2012.3.24

⑦M. Oshikawa, *Axionic Instability in Topological Magnetic Insulators*,

Topological Insulators and Superconductors, KITP, UC Santa Barbara (USA), 2011.10.14

⑧M. Oshikawa, *Frequency Shift of Electron Spin Resonance*, Highlights in Quantum Condensed Matter Physics, DIPC, San Sebastian (Spain), 2011.6.18

⑨S. C. Furuya, Y. Maeda, and M. Oshikawa, *Perturbation theory of ESR shifts in Haldane chains with uniaxial anisotropies and its application to NDMP*, Asia-Pacific EPR/ESR Symposium, Jeju (Korea), 2010.10.12

⑩M. Oshikawa, S. C. Furuya, Y. Maeda, and K. Sakai, *Perturbation Theory of the ESR frequency shift*, Magnetic Resonance in Highly Frustrated Magnetic Systems (HFMR 2010), Kranjska Gora (Slovenia), 2010.2.4

⑪S. C. Furuya, M. Oshikawa, and I. Affleck, *ESR of quantum spin chain in the classical limit*, Magnetic Resonance in Highly Frustrated Magnetic Systems (HFMR 2010), Kranjska Gora (Slovenia), 2010.2.3

[その他]

ホームページ等

研究室ホームページ

<http://oshikawa.issp.u-tokyo.ac.jp/>

Today Research Editor's Choice

「未発見の素粒子がトポロジカル絶縁体で活躍」

<http://www.u-tokyo.ac.jp/ja/today-research/editors-choice/theory-of-undiscovered-elementary-particle-applied-to-topological-insulator/>

科学新聞 2012.4.13 記事

「未発見の素粒子アクシオン 強い電場下の新相転移予言」

6. 研究組織

(1) 研究代表者

押川 正毅 (OSHIKAWA MASAKI)

東京大学・物性研究所・教授

研究者番号：50262043