

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 6 月 8 日現在

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2013～2016

課題番号：25400391

研究課題名(和文) 格子自由度による実効的長距離力による新奇秩序形態の研究

研究課題名(英文) New type of ordered phases due to effective longrange interaction of lattice deformation

研究代表者

宮下 精二 (Miyashita, Seiji)

東京大学・大学院理学系研究科(理学部)・教授

研究者番号：10143372

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,800,000円

研究成果の概要(和文)：スピントロニクス系における相転移現象における弾性相互作用の効果に関して、研究を行った。さまざまな格子形態における弾性相互作用あるいはそれに起因する長距離力の効果を調べた。特に、短距離力が反強磁性である場合の温度、磁場相図において特異な相構造を発見した。また、格子構造にフラストレーションがある三角格子反強磁性体に相当する系における相転移において特異な準安定状態を示すことを発見した。さらに、光照射による体積膨張に関して、熱膨張に先駆けて起こる弾性力によるelastic expansionに関するミクロな研究を進め、その機構に関する研究を進めた。さらに、関連する協力現象に関する研究を進めた。

研究成果の概要(英文)：We have studied the effect of elastic interaction on the phase transitions of spin-crossover systems. The effect causes an effective long-range interaction among the spin states. In particular, when the short-range interaction is antiferromagnetic, we discovered a peculiar phase structure due to the metastable state of ferromagnetic phase. We also studied cases of frustrated lattices, e.g., the antiferromagnets on the triangular lattice. There we found new types of order states, and also an anomalous size-dependence of metastable state. Moreover, we studied the dynamics after photo-irradiation which converts the low-spin state to high-spin state, and found the so-called elastic expansion which appears before the expansion due to the thermal effect. We have also studied several related topics on the cooperative phenomena.

研究分野：統計力学、物性基礎論、磁性

キーワード：相転移 スピントロニクス系 弾性相互作用 長距離力 準安定状態

1. 研究開始当初の背景

スピントロニクス系はハイ спин(HS)、ロー спин(LS)の双安定な電子状態をとる系が温度、圧力、磁場などのパラメータによって多様な相転移を起こし、さまざまな機能材料のひな形として研究が進められてきている系であり、双安定を反映してイジング模型によってモデル化される。我々のグループでは、この系の特徴として双安定な2つの状態が異なる体積をもち、スピン系の相転移に伴って格子変形が起こりそのため弾性エネルギーによるスピン間の長距離相互作用が生じることを指摘し、それに伴うさまざまな相転移を明らかにして来た。特に、上述の長距離相互作用と物質を構成する分子間の短距離相互作用の競合によって生じる新奇な秩序化過程を明らかにして来た。

2. 研究の目的

今回の研究では、格子変形による弾性相互作用のもとでの秩序逆転過程の動的振る舞いについても研究をすすめる。分子間の相互作用自身がフラストレートした系における長距離相互作用の効果や、長距離相互作用と短距離相互作用が互いに拮抗する場合などでの新奇な相転移現象を明らかにすることを目的とした。

3. 研究の方法

研究方法は、我々が開発した分子動力学法による格子運動とモンテカルロ法によるスピン状態更新をハイブリッドした方法を主に用いた。研究はルーマニア、イアシ大学のエナシエスク博士、米国、フロリダ州立大学のリクポルト博士、フランス、ベルサイユ大学のブケダデン博士、フランス、レンヌ大学のコレ博士などと共同して進めた。

4. 研究成果

スピントロニクス系の相転移現象における弾性相互作用の効果に関して、次の研究を行った。まず、格子変形による弾性相互作用

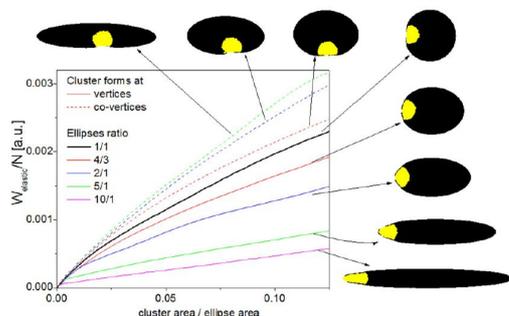


図1 核形成形状によるエネルギー依存性用のもとでの秩序逆転過程の動的振る舞いに関しては、物質の形状に応じた反転核の形成過程を明らかにした(文献 14)。

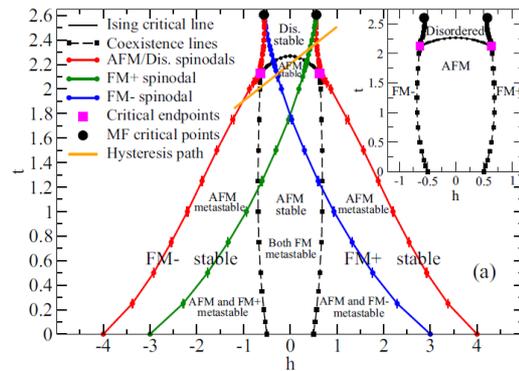


図2 拮抗する反強磁性的な短距離力と実効的な長距離相互作用を持つ系での温度・磁場相図。特徴的な角構造が現れる。

また、弾性相互作用による実効的な長距離相互作用によって、短距離相互作用系では双対のコスタリッツ・サウレス相転移をするフラストレート系での相転移のユニバーサリティクラスが変更を受けることを明らかにした(文献 11)。また、実験的に明らかにされた3次元フラストレーション系であるANNNI模型の秩序化過程に生じる中間温度相のダイナミクスの解析を行い、その特徴を明らかにした(文献 10)。また、反強磁性的な短距離力と実効的な長距離力が拮抗する場合に、角をもつ特異な相図が現れることを発見し、そこでの相の特徴づけ、相転移のタイプなどを明らかにした(文献 8)。

さらに、フラストレート系の典型模型である三角格子反強磁性イジング模型において次近接相互作用のために現れるいわゆる部分無秩序相が現れる際の秩序化において長距離相互作用のため生じる巨大なゆらぎを発見し、その機構を明らかにした(文献 3)。さらに、光照射による体積膨張に関して、熱膨張に先駆けて起こる弾性力による elastic expansion に関するミクロな研究を進め、その機構に関する研究を進めた。さらに、関連する協力現象についても研究を進めた。

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 17 件)

Masamichi Nishino, Yuta Toga, Seiji Miyashita, 他 3 名, Atomistic-model study of temperature-dependent domain walls in the neodymium permanent Nd₂Fe₁₄B, 査読あり, Phys. Rev. B 95, 2017,1-7, DOI:10.1103/PhysRevB.95

.094429

Hiroki Ikeuchi, Hans De Raedt, Sylvain Bertaina and Seiji Miyashita, Size and temperature dependence of the line shape of ESR spectra of the XXZ antiferromagnetic chain, 査読あり, Phys. Rev. B 95, 2017, 1-10, DOI:10.1103/PhysRevB.95.0244

Masamichi Nishino and Seiji Miyashita, Anomalous finite-size effect due to quasidegenerate phases in triangular antiferromagnets with long-range interactions and mapping to generalized six-state clock model, 査読あり, Phys. Rev. B 94, 2016, 1-13, DOI:10.1103/PhysRevB.94.184434

Sasmita Mohakud, Sergio Andraus, Masamichi Nishino, Akimasa Sakuma and Seiji Miyashita, Temperature dependence of the threshold magnetic field for nucleation and domain wall propagation in an inhomogeneous structure with grain boundary, 査読あり, Phys. Rev. B 94, 2016, 1-13, DOI: 10.1103/PhysRevB.94.054430.

P. Zhao, H. De Raedt, Seiji Miyashita, F. Jin and K. Michielsen, Dynamics of open quantum spin systems: An assessment of the quantum master equation approach, 査読あり, Phys. Rev. E 94, 2016, 1-19, DOI:10.1103/PhysRevE94.022126 .

Tatsuhiko Shirai, Juzar Thingna, Takashi Mori, Sergey Denisov, Peter Hanggi and Seiji Miyashita, Effective Floquet-Gibbs states for dissipative quantum systems, 査読あり, New J. Phys. 18, 2016, 1-13, DOI:10.1088/1367-2630/18/5/053008.

M. A. Novotny, F. Jin, Seiji Miyashita, H. De Raedt and K. Michielsen, Quantum decoherence and thermalization at finite temperature within the canonical-thermal-state ensemble. 査読あり, Phys. Rev. A 93, 2016, 1-45, DOI: 10.1103/Phys. Rev A 93.032110.

Per Arne Rikvold, Gregory Brown, Seiji Miyashita, Conor Omand and Masamichi Nishino, Equilibrium, metastability, and hysteresis in a model spin-crossover material with nearest-neighbor antiferromagnetic-like and

long-range ferromagnetic-like interactions, 査読あり, Phys. Rev. B 93, 2016, 1-13, DOI:10.1103/PhysRevB.93.064109.

Takuya Hatomura, Bernard Barbara and Seiji Miyashita, Quantum Stoner-Wohlfarth Model, 査読あり, Phys. Rev. Lett., 116, 2016, 1-5, DOI:10.1103/PhysRevLett.116.037203.

H. Watanabe, K. Tanaka, N. Brefuel, H. Cailleau, Seiji Miyashita 他 5 名, Ordering phenomena of high-spin/low-spin states in stepwise spin-crossover materials described by the ANNNI model. 査読あり, Phys. Rev. B 93, 2016, 1-12, DOI:10.1103/PhysRevB.93.014419.

H. Ikeuchi, H. De Raedt, S. Bertaina, Seiji Miyashita, Computation of ESR spectra from the time evolution of the magnetization: Comparison of autocorrelation and Wiener-Khinchin -relation-based methods. 査読あり, Phys. Rev. B ,92, 2015, 1-15, DOI:10.1103/Phys.RevB.92.214431.

Masamichi Nishino, Seiji Miyashita, Termination of the Berezinskii-Kosterlitz-Thouless phase with a new critical universality in spin-crossover systems. 査読あり, Phys. Rev. B. 92, 2015, 1-7, DOI:10.1103/PhysRevB.92.184404.

T. Shirai, Takashi Mori, Seiji Miyashita, Condition for emergence of the Floquet-Gibbs state in periodically driven open systems. 査読あり, Phys. Rev. E, 91, 2015, 1-5, DOI:10:1103/PhysRevE.91.030101.

C. Enachescu, Masamichi Nishino, Seiji Miyashita, 他 3 名, Shape effects on the cluster spreading process of spin-crossover compounds analyzed within an elastic model with Eden and Kawasaki dynamics, 査読あり, Phys. Rev. B 91, 2015, 1-9, DOI:10.1103/PhysRevB.91.104102.

M. Marthens, Seiji Miyashita, 他 7 名, Anisotropy of the molecular magnet V-15 spin Hamiltonian detected by high-field electron spin resonance, 査読あり, Phys. Rev. B, 89, 2014, 1-5, DOI:10.1103/PhysRevB.89.195439.

H. Onishi, Seiji Miyashita, Doping control of realization of an extended Nagaoka ferromagnetic state from

the Mott state,
査読あり, Phys. Rev. B. 90, 2014,
1-11, DOI:10.1103/PhysRevB90.2244
26.
T. Shirai, Takashi Mori, Seiji
Miyashita, Novel symmetry-broken
phase in a driven cavity system in
the thermodynamic limit, 査読あり,
J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 47,
2014, 1-9,
DOI:10.1088/0953-4075/47/2/02550
1.

[学会発表](計 21 件)

1. S. Miyashita, Elastic effect on spin-crossover transition, PDSTM2016, Valencia, Spain, 2016.11.28.
2. S. Miyashita, Direct numerical approach to ESR spectrum, ENS-UT work-shop, Paris, France, 2016.11.17.
3. S. Miyashita, Distribution of eigenstates and response of systems under time-dependent external field, 那須研究会, 栃木県那須郡那須町, 2016.09.22.
4. S. Miyashita, Peculiar additional phase transitions due to the elastic interaction in spin crossover materials with two-step ordering, (ICMM 2016 Satellite Meeting) New Magnetic Functionalities on Molecular Based Magnets, Koshiba Hall The University of Tokyo, Bunkyo-ku Tokyo Japan, 2016.09.09-10.
5. 宮下精二, 量子応答の直接数値解析法「フロンティア機能性物質創製センター」オープンセミナー(第 19 回), 兵庫県立大学理学部, 兵庫県赤穂郡上郡町, 2016.08.22.
6. S. Miyashita, Quantum and classical dynamics of metastable magnetization reversal under magnetic field in the opposite direction, Coma-ruga-2016.12th International Workshop on Magnetism and Superconductivity at the nanoscale, Barcelona, Spain, 2016.07.03-07.
7. 宮下精二, スピントロニクスクロスオーバー系での相転移, 兵庫県立大学大学院物理学研究科フロンティア機能性物質創製センター第 2 回シンポジウム「機能性物質の最前線 - 物質科学の新展開を目指して -」, 兵庫県立先端科学技術支援センター (C A S T) セミナー室 1, 兵庫県赤穂郡上郡町, 2016.03.05.
8. S. Miyashita, Collapse of metastable state in a quantum system, LMU-UT Cooperation in Physics Workshop, Koshiba Hall, The University of Tokyo, Bunkyo-ku Tokyo Japan, 2016.02.29-03.02.
9. S. Miyashita, Competition between short and long range interactions, ENS-UT Workshop on Physics 2015, The Phys.4th Building of The University of Tokyo, Bunkyo-ku Tokyo Japan, 2015.11.18-19.
10. S. Miyashita, Effects of antiferromagnetic short interaction in elastic spin-crossover systems, France-Japan workshop on Impacting materials with light and electric fields and watching real time dynamics (IM-LED 2015), Chemistry Department, The University of Tokyo, Bunkyo-ku Tokyo Japan, 2015.11.16.
11. 宮下精二, 時間発展法による ESR スペクトルの計算法の開発: 関連関数法と Wiener-Khinchin 法, 第 54 回電子スピンスイエンズ学会年会 (SEST2015), 朱鷺メッセ: 新潟コンベンションセンター, 新潟市中央区, 2015.11.02-04.
12. 宮下精二, Numerical methods for quantum magnets, 研究会: 日本磁気学会, 名古屋大学東山キャンパス工学部, 愛知県名古屋市千種区, 2015.09.11.
13. S. Miyashita, Various ordering processes of spin-crossover type systems and effects of elastic interaction on them, 10th International symposium on hysteresis modeling and Micromagnetics (HMM2015), (Unirea Hotel), Iasi Romania, 2015.05.18-20.
14. S. Miyashita, Phase transition in spin dynamics under time-dependent fields. Many-body dynamics out of equilibrium, International Focus Workshop, Max Planck Institute for the Physics of Complex Systems, Dresden Germany, 2015.03.10-14.
15. S. Miyashita, Phase transitions spin-crossover materials, LMU-UT Workshop, Ecole normale superieure - Paris France, 2014.12.08-10.
16. S. Miyashita, Effect of elastic interaction on phase transition of

antiferromagnets on the triangular lattice, ENS-UT Workshop, Ecole normale superieure-Paris France, 2014.12.08-10.

17. S. Miyashita, Successive phase transitions of spin-crossover ordering due to HS-LS spatial structure due to competing of short-range interactions, [POSTEM201] international conference Phase transition and Dynamical properties of Spin Transition Materials, Sanjo Conference Hall, Hongo Campus, The University of Tokyo, Bunkyo-ku Hongo Tokyo Japan, 2014.11.19-22.
18. S. Miyashita, Collapse of metastable states in quantum systems with time dependent fields, Fujihara Seminar: Real-time Dynamics of Physical Phenomena and Manipulation by External Fields, Grand Hotel New Oji, Tomakomai, Hokkaido, Japan, 2014.09.23-27.
19. S. Miyashita, Control of Mott and Ferromagnetic states in an extended Nagaoka system, 10th International Workshop on Nanomagnetism and Superconductivity, Comaruga, Tarragona, Spain, 2014.06.30-07.04.
20. S. Miyashita, Phase transitions in a strongly driven cavity system, ENS-UT Workshop Program, Seminar Room Komaba Faculty House Tokyo, The University of Tokyo, Meguro-ku Komaba Tokyo Japan, 2013.12.03.
21. S. Miyashita, Phase transitions in a cavity system under strong driving field, International Workshop on Classical/Quantum Decoherence and Foundations of Quantum Mechanics Neel Institute, Grenoble France, 2013.06.22-23.

〔図書〕(計5件)

1.宮下精二、「相転移ことはじめ」No.1~12, パリテイ: Vol.31, No.04,丸善, (pp. 58- 63) (2016), Vol.31, No. 05 (pp. 62-65) (2016), Vol.31, No. 06 (pp. 60-63) (2016), Vol.31, No. 07 (pp. 62-65) (2016), Vol.31, No. 08 (pp. 51-55) (2016), Vol.31, No. 09 (pp. 50-54) (2016), Vol.31, No. 10 (pp. 53-57)

(2016), Vol.31, No. 11 (pp.60-65) (2016), Vol.31, No. 12 (pp. 62-67) (2016), Vol.32, No. 01 (pp.98-103) (2017), Vol.32, No. 02 (pp. 52-58) (2017), Vol.32, No. 03 (pp.46-51) (2017).

2. 宮下精二, 久保公式の直接数値評価による ESR スペクトルの研究, 電子スピンスイエンス, 14, (pp.90-95)(2016).
3. 宮下精二, 「相転移現象と数理モデル」, 数理科学, サイエンス社, (pp.14-19) (2016).
4. 宮下精二, 西野正理, 「統計物理学による磁気モーメント反転に対する核生成理論の構築」, 省/脱 Dy ネオジウム磁石と新規永久磁石の開発, シーエムシー出版 (pp.165-171)(2015).
5. C. Enachescu, M. Nishino, S. Miyashita, Theoretical Descriptions of Spin-Transitions in Bulk Lattices, in “Spin Crossover Materials, Properties and Applications”, Ed. M. Halcrow, John Wiley & Sons, Ltd. Published, (pp.455-474), (2013) ISBN: 9781119998679.

〔産業財産権〕

出願状況(計 0 件)

名称:
発明者:
権利者:
種類:
番号:
出願年月日:
国内外の別:

取得状況(計 0 件)

名称:
発明者:
権利者:
種類:
番号:
取得年月日:
国内外の別:

〔その他〕
ホームページ等

6. 研究組織

- (1)研究代表者
宮下 精二(MIYASHITA, Seiji)
東京大学・大学院理学系研究科・教授
研究者番号:10143372
- (2)研究分担者
森 貴司 (MORI Takashi)
東京大学・大学院理学系研究科・助教
研究者番号:00647761

(2)研究分担者

西野正理(NISHINO Masamichi)

国立研究開発法人物質・材料研究機構・理論
計算科学ユニット・主幹研究員

研究者番号:80391217

(3)研究協力者

Cristian ENACHESCU,

Faculty of Physics-“Alexandru Ioan Cuza”

University, Iasi, Romania,

Associate professor.

(3)研究協力者

Per ARNE RIKVOLD,

Department of Physics, Florida State

University,

Distinguished Research Professor and the

James G. Skofronick Professor of Physics.

(3)研究協力者

Kamel BOUKHEDDADEN,

University of Versailles Saint-Quentin,

Professor.

(3)研究協力者

Eric COLLET,

University of Rennes1,

Professor.

.