

令和 2 年 6 月 7 日現在

機関番号：82401

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2016～2019

課題番号：16K05425

研究課題名(和文) フラストレーションが生む新奇量子磁性状態と強誘電性

研究課題名(英文) Novel quantum magnetism and ferroelectricity induced by geometrical frustration

研究代表者

桃井 勉 (Momoi, Tsutomu)

国立研究開発法人理化学研究所・開拓研究本部・専任研究員

研究者番号：80292499

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,600,000円

研究成果の概要(和文)：(1)隠れた秩序相であるスピンネマティック相における電子スピン共鳴の振る舞いを理論的に調べた。磁気異方性を介しネマティック相固有の2マグノン励起が検出可能であることが分かった。また、スピンネマティック相探査のために、2層系フラストレート磁性体を調べた。スピン2体の相互作用のみからなる模型において零磁場下でのスピンネマティック相の出現とその出現機構を解明した。(2)様々なフラストレート磁性体を理論的に調べ、多様な磁性相、熱ホール効果及び異常なダイナミクスを明らかにした。(3)幾何学的フラストレーションのある軌道縮退系においてスピンと軌道自由度の相関効果が誘起する強誘電性を明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

新しい量子相であるスピンネマティック相の出現が理論模型において確かめられ、その出現機構が明らかになった。この相が持つ新奇なふるまいの研究が今後さらに進み新たな研究分野が開拓されるであろう。また、この相の実験による検出方法の提案を行ったことにより、近い将来、実験でこの相の存在が検証されることが期待される。この様に理論と実験の双方における研究の進展が期待される。

研究成果の概要(英文)：(1) We theoretically investigated the electron spin resonance (ESR) in a spin nematic phase. Two-magnon excitations inherent in the spin nematic phase can be detected in ESR spectrum via magnetic anisotropy. We also investigated a bi-layer frustrated magnet searching for a spin nematic phase. In a model consisting of two-body interaction only, we have clarified the appearance of the spin nematic phase at zero magnetic field and the mechanism of its appearance. (2) We investigated various frustrated magnetic materials theoretically, clarifying the appearance of various magnetic phases, thermal Hall effect, and anomalous dynamics. (3) We clarified the ferro-electricity induced by the correlation effect between spin and orbital degrees of freedom in an orbital degenerate electron system with geometrical frustration.

研究分野：物性理論

キーワード：スピンネマティック フラストレート磁性体 量子相 量子液晶 強誘電性 カゴメ格子 超固体

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

(1) 新しい量子相を見出しその特性を解明することは、凝縮系の物理における新しい分野開拓につながる。フラストレート磁性体では、低温において複合スピン自由度が形成され、状態の構築に重要な役割を担うことが多い。以前から知られるカイラリティーの自由度のみならず、近年、スピンの四極子あるいは八極子等の多極子自由度が複数のスピンから形成され秩序化を起こすことが明らかになってきた。この様なスピン複合自由度から作られる自由度が隠れた秩序を形成するエキゾチックなスピン状態の出現可能性に興味をもたれている。フラストレート磁性体におけるスピンネマティック相(あるいは高次のスピン多極子相)の熱力学量をはじめとする低温における特徴的物性は未解明の興味深い問題である。

(2) フラストレート磁性体におけるスピン複合自由度が絡むもう一つの面白い問題として、三角格子反強磁性体において磁気秩序化と強誘電性の出現が同時におこる問題がある。スピンの自由度(カイラリティー)がどのように電子の誘電率と結合するかが議論されている。これらの物質の磁場中相図は、三角格子ハイゼンベルグ模型で理論的に示された磁場中相図と良く合っており、三副格子構造の UUD (1/3 プラトール) 相や Y 相、V 相と言われる磁性相から成る。低磁場相(Y 相、物質によっては UUD 相でも)において磁性転移に伴い強誘電性が観測されている。磁性が誘起する強誘電性の理論は、桂らによるスパイラル磁性が逆 DM 相互作用を介して強誘電性を誘起するものや、Khomskii らによる電荷揺らぎを介してスピンのカイラリティーと誘電性が関係する理論などがあるが、いずれも等方様な三角格子磁性体における強誘電性を説明出来ない。

2. 研究の目的

(1) 幾何学的フラストレーションを持つ磁性体および電子系において、複合スピンから成る隠れた自由度が作る新奇な量子磁性状態の出現可能性を探索し、複合スピン自由度が引き起こす物理を明らかにする。特に、スピンネマティック相(あるいは高次のスピン多極子相)がどのような系において出現するかを明らかにする。また、スピンネマティック相は検出が難しい隠れた秩序相であるため、この秩序の検出のための方法開発を行う。スピンネマティック相の熱力学量をはじめとする低温における特徴的物性、特徴的な励起構造を理論的に解明することにより、実験でこの量子状態の出現を検証する方法を提唱する。更に、スピンネマティック相の出現におけるスピン 格子結合の効果を解明する。

(2) 三角格子反強磁性体における、カイラリティーなど複合自由度の磁性秩序形成と同時に強誘電性が出現する現象を統一的に理解することを目指す。微視的な電子モデルからスタートして、電気分極とスピン自由度の一般的関係を導出する。幾何学的フラストレーションが強い場合、スピン自由度のフラストレーションを回避するために、スピン 格子結合により格子がひずむ自由度やスピン・軌道結合の自由度が誘電性にどのように影響するか検討する。微視的なモデルからの理論的な説明を行う。

3. 研究の方法

(1) スピン S が 1 以上のスピン系における量子磁性相を、分子場近似及びスピン波(flavor wave)展開で解析し、多極子状態の安定性、励起状態のふるまいを調べる。このモデルの解析から、熱力学的振る舞いや各種の応答を明らかにする。さらに、 $S = 1/2$ 磁性体におけるスピンネマティック相の相図を、分子場近似、量子変分モンテカルロ法、対称性を用いた解析計算により基底状態を調べ、相図を得る。

(2) フラストレート磁性体と強誘電性の関係について、まず、電気分極とスピン自由度の関係の一般式を電子の微視的モデルからの摂動論で導出する。次に、スピンモデルを解析し、フラストレーションが低温でエントロピーを放出し、この関係式を介し強誘電性を出す様子をシミュレーションする。

4. 研究成果

(1) スピンネマティック相の検出のための方法開発をめざして、電子スピン共鳴実験において現れるスピンネマティック相固有の励起を理論的に調べた。電子スピン共鳴では、磁気異方性を介しスピン四極子自由度固有の 2 マグノン励起が現れることを示した。この吸収ピークは、磁場依存性、試料回転角度依存性から識別可能であることが分かった。

(2) スピンネマティック相探査のために、ダイマーにより構成される 2 層系フラストレート磁性体を調べた。相互作用の競合が作る磁気フラストレーションの効果によりスピン 2 体の相互作用だけからなる模型において零磁場下でスピンネマティック相が有限のパラメータ領域に安定に出現することを示し、その出現機構を解明した。このスピンネマティック相は、モデルの相互作用のパラメータ空間内に存在する $SU(4)$ 対称点から湧き出ており、この高い対称性がスピンネマティック秩序の新しい発現機構になっていることを明らかにした。

(3) 幾何学的フラストレーションのある軌道縮退系におけるスピンと軌道自由度の相関効果が誘起する強誘電性を調べた。格子が三角ユニットに分割される場合に、スピンと軌道の相関と電気分極の関係を明らかにした。

(4) フラストレート磁性体の理論：銅鉍物ボルボサイト、光学格子上冷却原子、2次元固体ヘリウム3等で実現されるフラストレート磁性体を理論的に調べ、様々な磁性相の磁気的特性、熱ホール効果及びダイナミクスの振る舞いを明らかにした。以下に列挙する。

銅鉍物ボルボサイトは層状のカゴメ格子から成る、多彩な磁性と熱ホール効果を持つ物質である。格子形状から来る相互作用の競合（いわゆる幾何学的フラストレーション）が強く、これら磁性および熱ホール効果の起源の理解が難しかった。この系には格子のひずみがあり、空間対称性の低下から弱いジャロシンスキー 守谷相互作用が存在する。格子のひずみによりスピンの三つ組構造をとることに着目し、低温における磁性を記述する有効モデルを構築した。特に、ジャロシンスキー 守谷相互作用が及ぼす効果を調べた。有効理論の解析から、零温度における磁場中の相図を求めた。系に内存する擬1次元性と幾何学的フラストレーションの効果により、ごく弱いジャロシンスキー 守谷相互作用が多彩な磁性を決定することが分かった。また、このジャロシンスキー 守谷相互作用が、磁気励起（マグノン）にトポロジカルな特性を与え、有限温度の常磁性状態における熱ホール効果を起こすことを示し、実験のふるまいを再現した。

磁場中のカゴメ格子 Heisenberg モデルは、磁化 $1/3$ 、 $5/9$ および $7/9$ で磁化プラトーを有する。これらプラトー相のスピン状態はこれまでの研究から、全て磁気的結晶構造を有することが知られている。しかし、それらの相の間の領域についてはあまり解明されていない。最近の数値的研究では、超固体相がプラトーの下の磁化領域に存在する可能性を示唆する。この領域を摂動的に調べ、超固体相が出現するシナリオを提案した。まず、プラトー相の不安定化を引き起こすマグノン励起を明らかにした。不安定性は固体の秩序は保存しつつ、同時に超流動成分を誘起し、その結果、超固体相がプラトー相に隣接して現れる。マグノン相互作用を含む有効なモデルを摂動計算により導出し、平均場解析を適用することにより、超固体相において出現するスピン構造を明らかにした。

光学格子上にトラップされたフェルミ粒子とスピン1を持つボゾン粒子の混合冷却原子系で、幾何学的なフラストレーションを持つスピン系が実現することを示した。ボゾン自由度が作るスピン系は、エネルギー減衰があるフラストレートスピン系になる。この系におけるスピンダイナミクスを数値的に調べ、幾何学的フラストレーションと秩序変数の点欠陥が粗視化ダイナミクスに与える影響を調べた。フラストレーション効果により、粗視化が異常に遅くなるふるまいが観測された。

磁場中の三角格子反強磁性体における磁気状態は、2成分のボゾン系の凝縮状態と本質的に同じである。2成分の凝縮体間の位相差が磁性状態を決めるものの、この位相差を理論的に決めることは難しく、これまでスピン波展開を用いた解析しかなされていなかった未解決の問題である。今回、厳密対角化とクラスター平均場近似を用いて、スピンのXY異方性が強い時に実現する磁気相図を調べ、新しい共面磁性相の出現を確かなものとした。

(5) $SU(n)$ 対称性を持つ1次元のフェルミ冷却原子系のモット絶縁相において出現することが期待される対称性に守られたトポロジカル相を持つトポロジカルな性質を調べた。密度行列繰り込み法を用いた数値計算と行列積状態を用いた解析を行った。また、 $Z_n \times Z_n$ 対称性に守られた複数のトポロジカル状態の内、トポロジカル指数の異なる状態が複数出現する相図を得た。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計9件（うち査読付論文 9件/うち国際共著 2件/うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Hikihara Toshiya, Misawa Takahiro, Momoi Tsutomu	4. 巻 100
2. 論文標題 Spin nematics in frustrated spin-dimer systems with bilayer structure	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 214414-1 ~ 20
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.1103/PhysRevB.100.214414	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 Furukawa Shunsuke, Momoi Tsutomu	4. 巻 89
2. 論文標題 Effects of Dzyaloshinskii-Moriya Interactions in Volborthite: Magnetic Orders and Thermal Hall Effect	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 034711 ~ 034711
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.7566/JPSJ.89.034711	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 Taira Shogo, Yasuda Chitoshi, Momoi Tsutomu, Kubo Kenn	4. 巻 88
2. 論文標題 Spin-Wave Theory for the Scalar Chiral Phase in the Multiple-Spin Exchange Model on a Triangular Lattice	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 014701 ~ 014701
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) doi.org/10.7566/JPSJ.88.014701	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 Ueda Hiroshi, Morimoto Takahiro, Momoi Tsutomu	4. 巻 98
2. 論文標題 Symmetry protected topological phases in two-orbital SU(4) fermionic atoms	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 045128-1-11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) doi.org/10.1103/PhysRevB.98.045128	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 Plat Xavier, Momoi Tsutomu, Hotta Chisa	4. 巻 98
2. 論文標題 Kinetic frustration induced supersolid in the $S=1/2$ kagome lattice antiferromagnet in a magnetic field	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 014415-1-15
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.98.014415	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 Daisuke Yamamoto, Hiroshi Ueda, Ippei Danshita, Giacomo Marmorini, Tsutomu Momoi, and Tokuro Shimokawa	4. 巻 96
2. 論文標題 Exact diagonalization and cluster mean-field study of triangular-lattice XXZ antiferromagnets near saturation	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 014431-1-12
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) doi.org/10.1103/PhysRevB.96.014431	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 該当する

1. 著者名 Shunsuke C. Furuya and Tsutomu Momoi	4. 巻 97
2. 論文標題 Electron spin resonance for the detection of long-range spin nematic order	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 104411-1-18
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) doi.org/10.1103/PhysRevB.97.104411	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 O. Janson, S. Furukawa, T. Momoi, P. Sindzingre, J. Richter, K. Held	4. 巻 117
2. 論文標題 Magnetic behavior of volborthite $\text{Cu}_3\text{V}_2\text{O}_7(\text{OH})_2(\text{H}_2\text{O})_2$ determined by coupled trimers rather than frustrated chains	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Phys. Rev. Lett.	6. 最初と最後の頁 037206-1--6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.117.037206	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 該当する

1. 著者名 N. T. Phuc, T. Momoi, S. Furukawa, Y. Kawaguchi, T. Fukuhara, M. Ueda	4. 巻 95
2. 論文標題 Geometrically frustrated coarsening dynamics in spinor Bose-Fermi mixtures	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Phys. Rev. A	6. 最初と最後の頁 013620-1--12
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.1103/PhysRevA.95.013620	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21件 (うち招待講演 4件 / うち国際学会 6件)

1. 発表者名 Tsutomu Momoi
2. 発表標題 Supersolid in the kagome antiferromagnet in a magnetic field
3. 学会等名 The 2nd Asia Pacific Workshop on Quantum Magnetism (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 桃井 勉
2. 発表標題 スピンネマティックの物理
3. 学会等名 日本物理学会第74回年次大会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 古谷峻介、桃井 勉
2. 発表標題 Shastry-Sutherland模型物質SrCu ₂ (BO ₃) ₂ の電子スピン共鳴の選択則と磁場依存性
3. 学会等名 2018年日本物理学会秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Xavier Plat, Tsutomu Momoi, Chisa Hotta
2. 発表標題 Kinetic frustration induced supersolid in the $S = 1/2$ kagome lattice antiferromagnet in a magnetic field
3. 学会等名 Highly frustrated magnetism 2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 田中克大、桃井 勉、堀田知佐
2. 発表標題 幾何学的フラストレーションを持つ $SU(4)$ 対称 Mott 絶縁体における電気分極の理論
3. 学会等名 2018年日本物理学会秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 桃井 勉、Xavier Plat、堀田知佐
2. 発表標題 カゴメ反強磁性体の磁場中スピン構造 - 超固体 -
3. 学会等名 基研研究会 スピン系物理の最前線
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Daisuke Yamamoto, Hiroshi Ueda, Ippei Danshita, Giacomo Marmorini, Tsutomu Momoi, and Tokuro Shimokawa
2. 発表標題 Quantum phases of triangular-lattice spin- S XXZ antiferromagnets near saturation
3. 学会等名 International Conference on Low Temperature Physics (LT28) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Tsutomu Momi
2. 発表標題 Spin nematics in frustrated magnets and their electron spin resonance
3. 学会等名 Junjiro Kanamori Memorial International Symposium - New Horizon of Magnetism - (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 引原俊哉、桃井勉
2. 発表標題 強磁性ダイマーからなる2次元フラストレート量子スピン系におけるスピンネマティック秩序状態
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 平良翔吾、安田千寿、桃井勉
2. 発表標題 次々近接相互作用まで含めた多スピン交換模型における四面体構造の安定性
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 桃井勉
2. 発表標題 スピンネマティック相の出現とマグノン対励起
3. 学会等名 強磁場フォーラム主催研究会「強磁場コラボラトリーが拓く未踏計測領域への挑戦と物質・材料科学の最先端」(招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 古川俊輔、桃井勉
2. 発表標題 ボルボサイトにおけるDzyaloshinskii-Moriya相互作用の効果
3. 学会等名 日本物理学会 第73回年次大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 平良翔吾、安田千寿、桃井勉
2. 発表標題 六体交換まで含めた三角格子多スピン交換模型のスピン波理論による解析
3. 学会等名 日本物理学会 第73回年次大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Xavier Plat、桃井勉、堀田知佐
2. 発表標題 Magnetization plateau and supersolidity in the Heisenberg Kagome model
3. 学会等名 日本物理学会 第73回年次大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 T. Momoi, O. Janson, S. Furukawa, P. Sindzingre, J. Richter, K. Held
2. 発表標題 Modeling Volborthite with Coupled Magnetic Trimers
3. 学会等名 8th International Conference on Highly Frustrated Magnetism (HFM2016) (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Daisuke Yamamoto, Hiroshi Ueda, Ippei Danshita, Giacomo Marmorini, Tsutomu Momoi, Tokuro Shimokawa
2. 発表標題 On the 0- transition of coplanar states in quantum triangular XXZ antiferromagnets near saturation
3. 学会等名 8th International Conference on Highly Frustrated Magnetism (HFM2016) (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Nguyen Thanh Phuc, Tsutomu Momoi, Shunsuke Furukawa, Yuki Kawaguchi, Takeshi Fukuhara, Masahito Ueda
2. 発表標題 Frustrated Spin Dynamics in Spinor Bose-Fermi Mixtures
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 古谷峻介, 桃井勉
2. 発表標題 電子スピン共鳴によるferroquadrupolar秩序変数の検出の理論
3. 学会等名 日本物理学会 第72回年次大会 (2017年)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 上田宏, 森本高裕, 桃井勉
2. 発表標題 2軌道SU(4)フェルミ原子系に現れる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72回年次大会 (2017年)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 田中克大, 桃井勉, 堀田知佐
2. 発表標題 多軌道系におけるスピンと電気分極の相関
3. 学会等名 日本物理学会 第72回年次大会(2017年)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 山本大輔, 上田宏, 段下一平, Giacomo Marmorini, 桃井勉, 下川統久朗
2. 発表標題 三角格子反強磁性体における希薄マグノンのBose凝縮と磁気秩序
3. 学会等名 日本物理学会 第72回年次大会(2017年)
4. 発表年 2017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
---------------------------	-----------------------	----