

令和元年6月9日現在

機関番号：32660

研究種目：挑戦的研究(萌芽)

研究期間：2017～2018

課題番号：17K18764

研究課題名(和文) 準結晶および近似結晶における特異な磁性

研究課題名(英文) Anomalous Magnetism in Quasicrystals and Approximants

研究代表者

遠山 貴巳 (Tohyama, Takami)

東京理科大学・理学部第一部応用物理学科・教授

研究者番号：70237056

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 5,000,000円

研究成果の概要(和文)：本研究は希土類イオンを含む準結晶に近い近似結晶の磁気秩序に由来した新規物性とその性質を明らかにする。20面体頂点に位置する希土類イオンが点共有した8面体格子を構成しており、8面体スピナイス状態を取りうる可能性がある。第一に、局在スピンの向きの方角性と itinerant の磁性と結びついた磁性を含むモデルの特徴が実験とよく一致していることを発見した。第二に、スピン軌道相互作用に由来する項と強磁性的相互作用を考慮したとき、スピナイスによるモノポール励起が伝搬することを見出した。第三にスピングラス・強磁性・反強磁性相の間の相転移、ゆらぎや欠陥に対して堅牢な量子臨界性に関する理論的な成果を得た。

研究成果の学術的意義や社会的意義

近似結晶の実験で得られている基底状態の格子定数依存性を理論計算によって再現できたのは、この物質系を支配している重要な相互作用を明らかにしたことに対応しており、今後のこの系の基底状態の研究の指針となる成果といえる。また、この系にスピナイスの特徴が出現する条件を明らかにしたことは、今後の実験に対する指針を与えたことになり、今後のこの系の研究の発展に大きく寄与しているといえる。

研究成果の概要(英文)：This study reveals novel physical properties and their characteristics derived from the magnetic order in the approximant of quasicrystals containing rare earth ions. The approximant forms an octahedral lattice where rare earth ions located at the apex position of the icosahedron are shared, and there is a possibility that an octahedral spin-ice state can be obtained. First, we found that the characteristics of the model that includes the anisotropy of the direction of localized spin together with itinerant the magnetism agree well with the existing experiment. Secondly, we found that monopole excitation by spin ice propagates, considering the terms derived from spin-orbit interaction and ferromagnetic interaction. Thirdly, we obtained theoretical results on the quantum criticality of the phase transition among spin glass, ferromagnetic, and antiferromagnetic phases, as well as magnetic fluctuation and defects.

研究分野：物性理論

キーワード：準結晶 近似結晶 スピナイス 磁気モノポール

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

1. 研究開始当初の背景

準結晶は古典結晶学では許されない 5 回回転対称性を持つため、結晶(単位胞)を基本とした物質科学の枠組みには収まらない。磁気秩序や超伝導といった物性は、通常、結晶における周期性を仮定して理論が組立てられているので、準結晶でもこれらの物性が生じうるか否かすら現状では明らかではない。実際、研究申請当時は準結晶では磁気秩序や超伝導が見つかっていなかった。一方、近似結晶は、無限周期を有する準結晶を周期近似した結晶を指し、局所的には準結晶と同じ正 20 面体クラスターからなる。近年、Au-X-RE 系(X=Ge,Si,Al 等、RE=希土類元素)合金において Tsai 型正 20 面体準結晶とその近似結晶が発見されたが、その近似結晶において様々な物性(量子臨界現象や磁気秩序、さらには超伝導)の発現が報告された [1]。準結晶と結晶をつなぐ近似結晶における磁気秩序や超伝導の発現は、準結晶において長距離秩序が存在するか否かという未解決の基本問題に当時一石を投じた。研究代表者と分担者は、この Au-X-RE 系近似結晶における磁気秩序を発見した研究協力者の田村氏と協力しながら理論研究を行い、磁気秩序発現の機構を明らかにしてきた [2]。さらに、同グループによる中性子散乱実験と理論的な結晶場解析を比較した結果、この磁気秩序発現に準結晶固有の 5 回軸が有効的に働いていることを指摘した。この効果は、パイロクロア物質におけるスピナイス発現の起源と同様に、まず磁気モーメントに対する局所的な異方性として現れる。一方、準結晶およびその近似結晶では、これらの異方的磁気モーメントが 20 面体クラスターのネットワークを介して、はるかに複雑に相互作用する。その結果として、パイロクロア物質とは異なったスピナイス状態、および磁気モノポール励起が存在し、これが準結晶特有の磁気状態となっている可能性がある。

2. 研究の目的

希土類元素を含む近似結晶で最近発見された磁気秩序は、新たな磁性研究の可能性を示唆している。近似結晶の構成単位である 20 面体を結晶全体で眺めると 8 面体はそのコーナーを共有してつながっている。8 面体ではフラストレーション効果が期待されるので、6 個の頂点の希土類局在スピンのうち半分が 8 面体内部を向き、残りの半分が外側を向くスピナイスとなりうる。そこからの励起は磁気モノポールを生むであろう。本研究は、まず準結晶とその近似結晶で起こりうるスピナイスと磁気モノポールの可能性を理論的に明らかにして、従来とは異なる視点からの新しい準結晶の物理を創出する。また、このスピナイス模型による磁性の解析を通して、準結晶における二つの未解決問題である『擬ギャップの存在』と『長距離秩序の不在』の起源を解明することを目的とする。

3. 研究の方法

上記の 8 面体スピナイス状態が安定になる条件を探するため、磁気異方性と RKKY 磁性に注目して、近似結晶における様々な基底状態の可能性を古典スピンに対するモンテカルロ計算を用いて調べた。それに加えて、希土類イオンが担う磁気モーメントに 1 イオン異方性やジャロシンスキー・守谷相互作用を加え、スピナイス状態が安定化する条件を探索した。古典モンテカルロ計算に加え、磁気モーメントの時間発展を調べる手法として、ランダウ・リフシッツ・ギルバート方程式の数値シミュレーションを行なった。この手法は、無料のコードが配布されているが限定的であり、本模型には適用できなかったため、ソースコードを一から自作した。

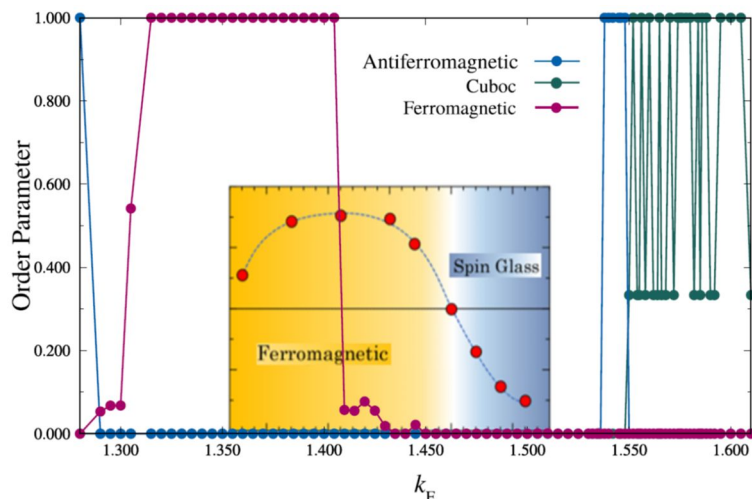
4. 研究成果

(1) 本研究開始前までの研究から、軌道磁気モーメントが有限な Tb などの希土類元素を含む近似結晶では、RKKY 相互作用に比べ 1 イオン異方性が支配的であることが分かっていた。8 面体スピナイス状態を構成するためには、この 1 イオン異方性の向きが重要となるが、この向きにはまだ議論が残っている。そこで、まず異方性軸を 5 回軸の方向、及びそれと垂直な方向に固定して、基底状態のフェルミ波数依存性を調べた(図参照)。8 面体スピナイス構造に近い傾斜強磁性状態に加え、実験的に観測されているスピンガラスや反強磁性状態に対応する状態を見つけることができた。また、これらの状態が実験的に観測される磁化過程をよく再現することも確認した。以上の結果から、近似結晶における 8 面体スピナイス基底状態は、3 副格子の強い 1 イオン異方性と最近接で RKKY 相互作用が強磁性的になるフェルミ波数で再現できることが分かった。この成果は、日本物理学会で発表しており、現在、実験結果との比較を含め論文投稿の準備を進めている。

(2) 最近接にジャロシンスキー・守谷相互作用、次近接に強磁性的相互作用が働くような環境下では、スピナイスの素励起であるモノポール励起が 3 次元方向に伝搬することがランダウ・リフシッツ・ギルバート方程式の数値シミュレーションにより確かめられた。また同時に、このようなモノポールが、最近接相互作用により散乱・拡散する様子も確認できた。本内容は、本研究期間内に完了できなかったゲージ平均場理論による解析や実験で観測可能な物理量との比較を含め、今後、日本物理学会などの学会や国際会議のほか、原著論文にて報告する予定である。

(3) 準結晶やその近似結晶における磁気的性質に関する研究を進める中で、実験的に確認されているスピンガラス・強磁性・反強磁性相をまたぐ多段相転移や、ゆらぎや欠陥に対して堅牢な量子臨界性に関する理論的なアイデアを得た。さらに、このアイデアを元に、単純化された模型

で、これら準結晶特有の性質を再現することにも成功した。これらは本研究で狙っていた副次的成果であると言える。この成果の一部はすでに「量子スピン・コントロール格子における基底状態と臨界的振る舞い」というタイトルで日本物理学会において発表しており、現在、論文投稿の準備を進めている。



図：磁気異方性と RKKY 磁性を含む古典スピン模型に対する古典モンテカルロ法で得られた基底状態の秩序変数。横軸はフェルミ波数である。図中の記号は傾斜強磁性状態 (Ferromagnetic)、反強磁性状態 (Antiferromagnetic)、キューボック状態 (Cuboc) の秩序変数を示す。どの秩序変数も有限とならないところは非整合な状態と考えられる。挿入図は実験結果 [3] で、横軸は計算結果と対応するように表示している。実験のスピンガラス状態は計算の非整合な状態に対応する可能性がある。

<引用文献>

- [1] T Hiroto, R Tamura *et al.*, J. Phys.: Condens. Matter **25**, 426004 (2013).
- [2] T. Sugimoto, T. Tohyama, T. Hiroto, and R. Tamura, J. Phys. Soc. Jpn. **85**, 053701 (2016).
- [3] A. Ishikawa, et al., Phys. Rev. B **93**, 024416 (2016); Phys. Rev. B **95**, 104201 (2017).

5 . 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計 0 件)

〔学会発表〕(計 5 件)

杉本貴則, 遠山貴巳

「量子スピン・コントロール格子における基底状態と臨界的振る舞い」

日本物理学会第 74 回年次大会

2019 年

杉本貴則, 遠山貴巳

「量子スピン・コントロール格子における臨界的振る舞い」

第 23 回準結晶研究会

2018 年

宮崎遥, 森田克洋, 杉本貴則, 遠山貴巳

「Tsai 型近似結晶 Au-Al-Gd における RKKY 相互作用による磁気秩序構造」

2018 年度日本物理学会秋季大会

2018 年

森田克洋, 杉本貴則, 遠山貴巳, 田村隆治

「Tsai 型近似結晶における磁場誘起相転移の数値解析」

日本物理学会第 73 回年次大会

2018 年

宮崎遥, 森田克洋, 杉本貴則, 遠山貴巳

「Tsai 型近似結晶 Au-Al-Gd における RKKY 磁性の数値解析」

日本物理学会第 73 回年次大会

2018 年

〔図書〕(計0件)

〔産業財産権〕

出願状況(計0件)

取得状況(計0件)

〔その他〕

特になし

6. 研究組織

(1)研究分担者

研究分担者氏名：杉本貴則

ローマ字氏名：Takanori Sugimoto

所属研究機関名：東京理科大学

部局名：理学部第一部応用物理学科

職名：助教

研究者番号(8桁): 70735662

(2)研究協力者

研究協力者氏名：田村隆治

ローマ字氏名：Ryuji Tamura

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。