

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 24 年 5 月 29 日現在

機関番号：32619

研究種目：基盤研究（C）

研究期間：2009 ～ 2011

課題番号：21540343

研究課題名（和文） スピン格子結合系の機能制御と臨界現象

研究課題名（英文） Function control of a spin-lattice system and its critical phenomena

研究代表者

中村 統太 (NAKAMURA TOTA)

芝浦工業大学・工学部・教授

研究者番号：50280871

研究成果の概要（和文）：

新たな磁気・電気デバイスへの応用が期待されている磁気誘電体という物質群があります。本研究では、磁気誘電体に対する理論模型を構築し、磁場や温度による秩序状態の変化を機能制御の観点から計算機シミュレーションにより研究しました。詳細な磁場と温度の相図が得られ、実験未確認の新たな秩序相の予想まで行いました。また、臨界現象を解析する全く新しいスケーリング法の開発も達成することができました。

研究成果の概要（英文）：

We introduced a theoretical model for magneto-electric compounds, which are considered as a new candidate for magnetic and electric devices. By performing large-scale computer simulations, a detailed phase diagram with respect to the temperature and the magnetic field is obtained. A new ordered phase is predicted to occur, which is not identified by experiments yet. We have also developed a new scaling method to investigate the critical phenomena.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2009 年度	1,600,000	480,000	2,080,000
2010 年度	1,000,000	300,000	1,300,000
2011 年度	600,000	180,000	780,000
年度			
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：物理学・物性 II

キーワード：磁性

1. 研究開始当初の背景

いわゆるマルチフェロイクスと呼ばれる磁気的性質と電気的性質を併せ持つ物質群の研究が非常に興味をもたれていました。特に、強磁性・強誘電性を示す物質は電場と磁場による交差的物性制御が容易になるため、新規デバイスへの応用も視野に入れて多くの研究がなされてきました。理論研究では、磁気螺旋構造によって電気分極が生じるメカニズムが提案されていました。

この流れとは全く独立して、わが国では古くから磁気誘電体の研究がおこなわれていました。そこでは、強磁性・強誘電に限らず、様々な磁気誘電秩序状態を持つ物質群の研究の歴史があります。本研究ではこれまでと異なる機構による新たなマルチフェロ的性質をもつ物質探索を目指すという立場で研究を行いました。そして、磁気誘電同時相転移を起こす物質、 RbCoBr_3 に注目しました。これは、反強磁性・フェリ誘電性をもちます。

RbCoBr₃ の磁性イオンはイジング的であり、連続スピンの螺旋構造をとる従来の物質とは異なります。また、強磁性と反強磁性の違い、強誘電とフェリ誘電の違いがあります。しかし、この違いが磁場応答・電気応答にいかなる違いを生じるのか、交差制御の可能性はないのか、などの応用的な研究の興味がここにはあります。また、磁気と電気の二つの自由度の結合する系としての相転移と臨界現象の一般論が構築できないか、という統計力学的な興味もあります。よって、応用的な側面を意識しながらも新しい相転移描像の発見を目指した研究が必要であると考え、本研究を実行するに至りました。

本研究を遂行するに当たり、研究代表者は既に RbCoBr₃ に対する有効モデルの提案と、大規模数値計算に必要な効率的計算アルゴリズムの開発を行っていました。

2. 研究の目的

本研究では、磁気誘電体のような複数の自由度が結合した系における秩序化とその物性制御の一般論を見出すことを大きな目的として研究を行いました。また、現実に即した、実験結果をも定量的に説明するような理論モデルを構築し、大規模数値シミュレーションによる検証を行うという手法をとりました。

ここで重要な概念は**フラストレーション**です。この系は、磁気的にも電気的にもフラストレーションが存在し、フラストレーション緩和を介して両者が結合し新奇な現象を発現する、というシナリオを研究代表者は初めから抱いていました。そこで、このシナリオ検証とフラストレーションによる物性制御の可能性を探ることも研究の目的としました。

具体的な研究課題としては以下のものを取り上げました。

- (1) RbCoBr₃ の磁場中中性子解析実験に対する理論と磁気転移・誘電転移の相関の解明
- (2) 電場中実験のための先行理論解析
- (3) スピンドYNAMIXと構造相転移の関連の解明
- (4) 外場による磁気誘電同時相転移のコントロールの可能性探索
- (5) 詳細な磁場温度相図の決定
- (6) 相転移解析のための新たな手法の開発

3. 研究の方法

まず、スピン格子結合系のモデルについて説明します。図1の結晶格子上で●が磁性イオンを表しています。これと○の陰イオンとが四面体ユニットを形成します。このユニットはマイナスの電荷をもち、しかも上下移動し

ます。(図1(b)) この上下移動によりこの物質は誘電性を示します。格子歪みが磁気的相互作用に影響を及ぼし、それが磁気電気相関の源となります。本研究では物質の電気的性質をこの格子歪みに置き換えて議論します。これが研究課題のスピン格子結合系の所以です。

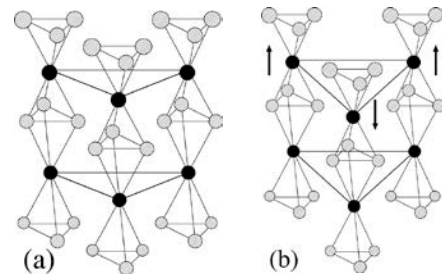


図1

具体的には以下のようにモデル化しました。まず、磁性原子のある●サイトに、

$$\begin{aligned} \text{磁性を表すイジングスピン } S &= \pm 1/2 \\ \text{格子の上下を表す擬スピン } \sigma &= \pm 1/2 \end{aligned}$$

を配置します。磁気系としては通常の交換相互作用、格子系としては排除体積効果を考慮した弾性近似による相互作用を仮定します。磁気系格子系ともに単体ではフラストレーションが存在しますが、「格子歪みによって磁気的相互作用が減少する」との仮定をおくと、格子歪みによってフラストレーションの緩和機構が発現します。このモデルを本研究では取り扱うことにします。

研究手法は、自作並列計算機を用いた大規模モンテカルロシミュレーションです。このモデルのスピン変数 S と格子変数 σ をリアルタイムに動かすシミュレーションです。準備研究において開発したアルゴリズム「Axial cluster flip 法」によって、従来アルゴリズムから 1000 倍以上の高速化を達成し、数億個の磁性イオンの計算ができるようになりました。得られる数値データには有限サイズ効果が存在せず、生データを直接実験結果と比較することを可能としました。これは数値シミュレーションというよりは、**数値エミュレーション**とも呼べるものです。

4. 研究成果

- (1) 磁気誘電体 RbCoBr₃ において、磁場中磁気誘電逐次相転移に関する実験結果を理論的に明らかにすることができました。ここでは、まず数値シミュレーションアルゴリズムの改良を行い、平均場近似を含まない計算を可能としました。これにより、相転移の性質も精密に解析で

きるようになりました。この時点で科研費によって導入したクラスターマシンの規模は、50 ノード・200 コアでした。これを個人で占有して使える環境は特筆すべきものです。得られた結果には、磁場温度相図 (図 2)、磁場による誘電分極の変化 (図 3) などがあります。以下にこの各々について説明してみましょ

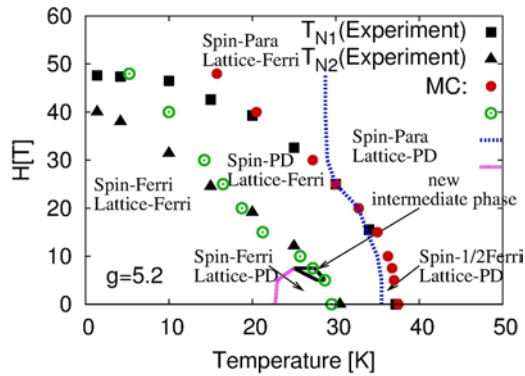


図 2

- ① 図2に示す磁場温度相図はこの本研究のメインの結果です。磁場と温度を変えたときに発現する秩序状態の詳細がこれでわかります。ここに、実験で確認されている磁気相転移の相境界が黒のシンボル、本研究で分かったものが赤と緑の丸印です。これまでは、相境界の間でいかなる秩序状態が実現しているのか、実験的には未確認だったのでした。この結果によりその同定がなされました。また、構造相転移による誘電相転移の相境界のシミュレーション結果が青と紫の太線で示されています。これによって、磁気誘電同時相転移が観測される温度磁場領域が一目でわかります。また、スピン自由度駆動の相転移と格子自由度駆動の相転移の二つのタイプがあることが分かり、前者の相境界 (図の緑○) は磁場とともに急な変化をもたらしますが、後者の相境界 (図の赤●) は緩やかにしか変化しません。この性質が同時相転移が実現することで (赤●と青線の重なる) 役割が入れ替わり、格子自由度駆動からスピン自由度駆動に変化することがわかりました。このように、非常に多彩な相転移現象がおこることが本研究によって明らかになりました。

- ② 図3に示すのは、誘電分極の温度変化を各磁場に対してスキャンしたものです。実験との定量的な一致は

よくありませんが定性的には、磁場によって誘電分極が増大することがわかります。よって、磁場による誘電的性質の制御には16T以上の磁場が必要であることが予言できました。

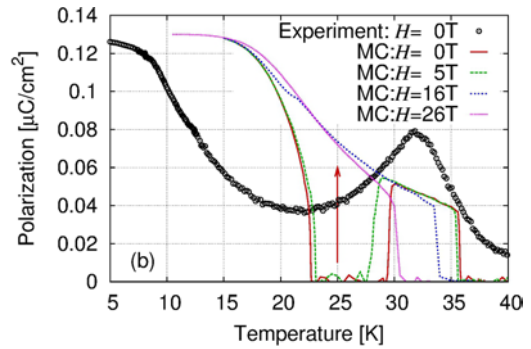


図 3

- ③ 弱磁場領域では1/2フェリ磁性状態と名付けた新たな磁気秩序相が存在することを発見しました。また、格子歪みが存在しない、CsCoCl3などの物質における低温磁気秩序相が平均場近似で予言された対称フェリ状態ではなく、ここで見られるような非対称フェリ状態である可能性をしてきました。

- (2) 相転移と臨界現象の新たな解析手法として、「動的相関長スケール法」を開発しました。これは従来からある平衡シミュレーションの有限サイズスケール法と非平衡シミュレーションの有限時間スケール法の長所を折衷した第3のスケール法です。本研究課題で扱うランダムに歪んだフラストレーション系ではモンテカルロの緩和が非常に遅くなります。そのような系に特に有効に働く解析手法です。このスケール法では、様々な物理量の緩和関数を相関長の緩和関数でスケールします。

- ① 一例を図4に示します。

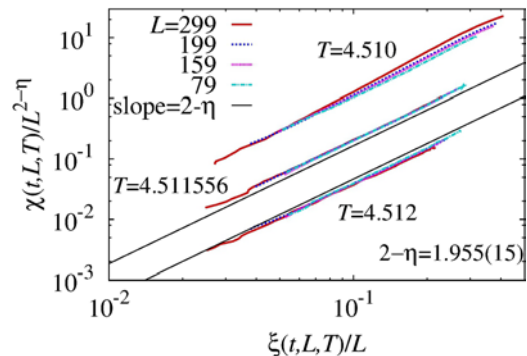


図 4

ここでは、3次元強磁性体イジング模型を例にとっています。相転移温度近傍で帯磁率 χ を縦軸、相関長 ξ を横軸にとり系のリニアサイズ L で適切な規格化を行えば全てのデータが1直線上に乗ることがわかります。相転移温度からずれると乗らなくなります。このプロットをするだけで、臨界温度と臨界指数を簡単に求めることができます。

- ② この解析手法をランダム磁性体の標準模型であるイジングスピングラス模型に適用して効果を実証しました。結果を図5に示します。

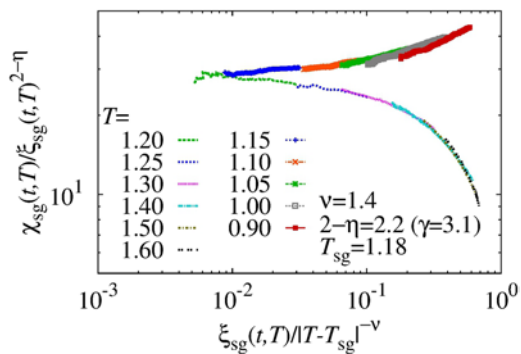


図5

このプロットでは臨界指数と相転移温度を精度よく同時に求めることができます。広い温度領域で帯磁率と相関長のデータが同一の普遍的な曲線の上に乗っています。

この研究成果は、磁気誘電体の研究の枠から大きく広がり、スピングラスの低温相画像の解明に向けた新たな科研費採択課題へと発展しました。

以上が主な出版された主な研究成果です。

本科研費を利用して毎年度末に実験研究者理論研究者合同のトピカルミーティングを行いました。研究者間の交流が促進され、新たな実験テーマの開拓や共同研究の実施などに発展することができました。それらが論文として世に出るのは数年先ですが、このような試みも重要な成果であると思われまます。

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 3件)

- ① Tota Nakamura, “Magnetoelectric transitions of a distorted triangular-lattice antiferromagnet in a magnetic field”, Physical Review

B 84 (2011) 054429-1-054429-8.

DOI: 10.1103/PhysRevB.84.054429

- ② Yoichi Nishiwaki, Masashi Tokunaga, Tota Nakamura, Norikazu Todoroki, and Tetsuya Kato, “High-Field Magnetization of Distorted Triangular Lattice Antiferromagnet RbCoBr₃”, Journal of Physical Society of Japan **79** (2010) 084707-1-084707-4.

DOI: 10.1143/JPSJ.79.084707

- ③ Tota Nakamura, “Nonequilibrium dynamic correlation-length scaling method”, Physical Review B **82** (2010) 014427-1-014427-7.

DOI: 10.1103/PhysRevB.82.014427

[学会発表] (計 3件)

- ① 中村統太、「3次元イジングスピングラス模型の臨界線」、日本物理学会2011秋学会大会、2011年9月21日、富山大学
 ② 中村統太、「3次元イジングスピングラスの動的相関長スケールリング」、日本物理学会第66回年次大会、2011年3月25日、新潟大学
 ③ 中村統太、「RbCoBr₃の磁場中逐次相転移のシミュレーション」、日本物理学会第65回年次大会、2010年3月23日、岡山大学津島キャンパス

[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]

ホームページ等

6. 研究組織

(1) 研究代表者

中村 統太 (NAKAMURA TOTA)
 芝浦工業大学・工学部・教授
 研究者番号：50280871

(2) 研究分担者

()
 研究者番号：

(3) 連携研究者

西脇 洋一 (NISHIWAKI YOICHI)
 芝浦工業大学・工学部・助教
 研究者番号：70439818

