

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 6 月 22 日現在

機関番号：24506

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2012～2014

課題番号：24540348

研究課題名(和文) フラストレート磁性体の磁場中異常量子現象に関する大規模並列計算による理論的研究

研究課題名(英文) Theoretical Study of Magnetic-Field-Induced Anomalous Quantum Phenomena of Frustrated Magnets by Large-Scale Parallel Calculations

研究代表者

中野 博生 (Nakano, Hiroki)

兵庫県立大学・物質理学研究科・助教

研究者番号：00343418

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,900,000円

研究成果の概要(和文)：本研究ではフラストレート磁性体の磁場中異常量子現象を厳密対角化法で調べた。カゴメ格子ハイゼンベルク反強磁性体はその典型で、その性質解明は不十分な状況に留まっていた。この系の磁化過程では、飽和の3分の1の高さで傾きの小さい磁場領域が現れるが、よく知られた磁化プラトーとは異なる振舞が問題となっていた。我々は、この高さの量子状態が、系に歪みを導入した時に現れる二つの相の境界直上の場合に相当することを、京を含むスパコン上で行った大規模並列計算によって解明した。この事実が上記異常現象と密接に関係する。更に我々は、歪みで現れた二つのうちの一つの相の場合で、スピントロップを起源とする磁化ジャンプも発見した。

研究成果の概要(英文)：This project studies anomalous quantum phenomena of frustrated magnets appearing in magnetic fields by the numerically exact diagonalization method. As a typical case of such magnets in two dimensions, the Heisenberg antiferromagnet on the kagome lattice has long been studied; however, our understanding of this system is still far from the completeness. An open issue is that, although the systems show a small-gradient region of the magnetic field at one-third height of the saturation in their magnetization processes, the behavior is different from well-known magnetic plateaux. By the large-scale parallel calculations in supercomputers including K computer, we have clarified the fact that the case at this height is just on the boundary between two different phases when the system is distorted. We thus pointed out that the anomalous behavior is related to the fact of the phase boundary. We also found in one of the two phases that a magnetization jump owing to the spin-flop phenomenon.

研究分野：物性理論

キーワード：量子スピン系 ハイゼンベルク反強磁性体 厳密対角化法 大規模並列計算

### 1. 研究開始当初の背景

フラストレーションを有する磁性体では、量子効果が増大して、しばしば非自明な振舞が発現する。そのため、多くの研究者の関心を集めてきた。そのような磁性体の一つに、カゴメ格子反強磁性体が知られている。この格子形状の統計力学的理論モデルは、日本人によって50年以上前に初めて調べられた。それ以降、様々な取り組みが行われてきたものの、この2次元格子上的 $S=1/2$ ハイゼンベルク反強磁性体は、理論的に取り扱うことが難しいことから、長年、難問の一つとして知られていた。理論計算の中で信頼性の高い方法としては、有限サイズクラスターに対する数値的対角化法が有効である。しかしながら、2000年頃に行われた研究で取り扱われた36サイトというシステムサイズの記録は、約10年に亘って更新されることはなかった。この頃の研究結果として知られていたものの一つに、磁化プラトーの発現がある。カゴメ格子反強磁性体の磁化過程の途中で、飽和の3分の1の高さで、磁化増加が非常に小さい磁場領域の存在が見出されたためである。一方、2000年代中ごろ以降、複数の候補物質が報告され、実験と理論の比較検討が急務となっていた。

2000年代後半になると、計算機システムの中で並列計算を大規模に行える環境が整備されるようになってきた。これにより、過去には取り扱うことが出来なかったシステムサイズの計算が可能となってきた。それが可能となると、例えば磁化過程などの物理量は、その解像度が高くなり、粗い解像度ゆえにそれまで見えていなかった振舞があぶりだされてくることがある。その結果、分かってきたことの一つに、先述の磁化プラトーと見られていた現象は、他の系で広く見られる磁化プラトーとは明確に異なる臨界現象を示すという事実がある。しかしながら、そこで報告された臨界現象の発現機構は明らかではなかった。

### 2. 研究の目的

本研究の目的は、上で述べた、通常の磁化プラトーとは異なる臨界現象という異常量子現象の発現機構を解明することである。その目的のため、以下の3つの方向からアプローチした。

(1) 更に大きな系の計算結果を得て、臨界現象を、より高精度に捉える。

(2) カゴメ格子に何らかの変化を加えて、異常量子現象の変化を捉える。

(3) 類似の格子の系、 $S$ が異なる系、あるいは古典系での振舞いを明らかにし、比較する。

### 3. 研究の方法

最も主要な方法は、少数スピンの有限サイズ

クラスターに対する数値的厳密対角化法である。この計算は、計算資源で強く制約を受け、ごく小さな系しか取り扱うことができないが、本研究では、京コンピュータを含む様々なスーパーコンピュータの上で大規模並列計算を実現することにより、他の研究者がすぐには真似の出来ないサイズの計算を行った。相補的な形で、密度行列繰り込み群(DMRG)法を用いて、系の性質解明を進めた。また、本研究で取り扱う量子系に対応・関連する古典系の振舞を調べるために、モンテカルロ法によるシミュレーションも行った。

研究の実施に当たっては、随時、諸氏に協力を戴いた。主な方々は、以下の通りである。

(50音順、敬称略) 磯田誠(香川大学)、大久保晋(神戸大学)、太田仁(神戸大学)、岡本清美(東京工業大学->芝浦工大)、小野俊雄(大阪府立大学)、川村光(大阪大学)、坂井徹(原子力研究機構)、下川統久朗(神戸大学->大阪大学)、長谷川泰正(兵庫県立大学)、細越裕子(大阪府立大学)、山口博則(大阪府立大学)

### 4. 研究成果

(1) カゴメ格子ハイゼンベルク反強磁性体42サイト系の磁化過程を、京コンピュータを用いた大規模並列計算によって求めることに成功した。このシステムサイズは、 $S=1/2$ ハイゼンベルク反強磁性体としては、これまで報告されているものよりも大きい、最大サイズの世界記録である。(図1参照)

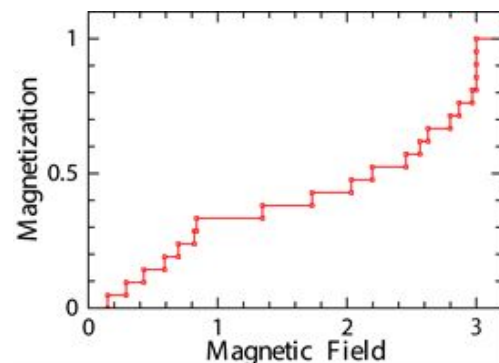


図1. カゴメ格子反強磁性体の有限サイズクラスターの磁化過程。赤線が世界最大サイズ42サイト系の結果。

このデータに基づいて、飽和の3分の1の高さのすぐ外側の臨界指数を評価した。よく知られた通常の磁化プラトーであれば、2次元系の臨界指数は、 $\nu=1$ となるはずであるが、この高さの両側でそれぞれ異なる $\nu$ が見積もられた。(高磁場側  $\nu=0.54 \pm 0.36$ 、低磁場側  $\nu=2.13 \pm 1.10$ )

(2) カゴメ格子に加える変化として、2種類のものを検討した。一つは、相互作用を付加して、連続的に三角格子に至るもので、も

う一つは、カゴメ格子の相互作用に歪みを加えた場合である。前者については、三角格子の場合と同じ高さで、磁化プラトーが発現し、通常の臨界指数が  $\nu=1$  となることが知られていたからである。そこで、両者を連続的につなぐ相互作用の制御で、その間での振舞の変化を捉えることを目標とした。その結果、付加する相互作用が、カゴメ格子の相互作用の1割程度の付加相互作用の辺りで、臨界指数が急激に変化している様子を捉えた。後者における歪みは、 $3 \times 3$ 型と呼ばれる歪みである。この歪みのある程度の強さで持つカゴメ格子反強磁性体は、次の(3)で判明している、スピフロップ現象を起源に磁化ジャンプが現れる事例となっており、その振舞との関係を明らかにすることを目標とした。その結果、飽和の3分の1の高さのspin状態は、歪みのないカゴメ格子の場合を境として、二つの相に分かれていることが分かった。この相のうちの一つでは、スピフロップが起こって磁化ジャンプが発生する。もう一つの相のspin状態はフェリ磁性的な波動関数を実現している。(1)で明らかとなった異常な臨界指数は、カゴメ格子が、この相転移の境界直上であることで発生していることが明らかとなった。

(3)類似の系に関する振舞の解明で、もっとも顕著な成果は、スピフロップが起こることで発生する磁化ジャンプの発見である。スピフロップ現象は、一般に、spin空間に異方性がある場合に発現するものと広く考えられていた現象である。本研究では、正方カゴメ格子(通常のカゴメ格子と少し異なる格子形)と呼ばれる事例で、そのような異方性がなくても、スピフロップ現象が起こっていることを見出した。その後の一連の研究で、同じ現象は、他の様々な系でも発現していることが分かった。その中の一つが、(2)で言及した、 $3 \times 3$ 型の歪みを持つカゴメ格子系である。カイロペンタゴン格子や、手裏剣結合蜂の巣格子でも同じ現象が起こっていることも明らかとなった。また、カゴメ格子が積層した古典ハイゼンベルクモデルでは、エントロピーで誘起されるスピフロップ現象も確認した。

## 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25件)

<sup>1</sup> H. Nakano and T. Sakai, ``Instability of a ferrimagnetic state of a frustrated  $S=1/2$  Heisenberg antiferromagnet in two dimensions'', Japanese Journal of Applied Physics 査読有 Vol.54 pp.030305 (1-4) (2015)

DOI: 10.7567/JJAP.54.030305

<sup>2</sup> T. Sakai and H. Nakano, ``Novel Field Induced Quantum Phase Transition of the Kagome Lattice Antiferromagnet'', Journal of Physics: Conference Series 査読有 Vol.568 pp.042025 (1-6) (2014)

DOI: 10.1088/1742-6596/568/4/042025

<sup>3</sup> T. Sakai, H. Nakano and K. Okunishi, ``Exotic Quantum Phase Transition of the Spin Nanotube'', Journal of Physics: Conference Series 査読有 Vol.568 pp.042024 (1-5) (2014)

DOI: 10.1088/1742-6596/568/4/042024

<sup>4</sup> H. Nakano and T. Sakai, ``Anomalous Behavior of the Magnetization Process of the  $S = 1/2$  Kagome-Lattice Heisenberg Antiferromagnet at One-Third Height of the Saturation'', Journal of the Physical Society of Japan 査読有 Vol.83 pp.104710 (1-7) (2014)

DOI: 10.7566/JPSJ.83.104710

<sup>5</sup> M. Isoda, H. Nakano, and T. Sakai, ``Frustration-induced Magnetic Properties of the Spin-1/2 Heisenberg Antiferromagnet on the Cairo Pentagon Lattice'', Journal of the Physical Society of Japan 査読有 Vol.83 pp.084710 (1-7) (2014)

DOI: 10.7566/JPSJ.83.084710

<sup>6</sup> H. Nakano, Y. Hasegawa, and T. Sakai, ``Spin-Flop Phenomenon of Two-Dimensional Frustrated Antiferromagnets without Anisotropy in Spin Space'', Journal of the Physical Society of Japan 査読有 Vol.83 pp.084709 (1-7) (2014)

DOI: 10.7566/JPSJ.83.084709

<sup>7</sup> H. Nakano, M. Isoda, and T. Sakai, ``Magnetization Process of the  $S = 1/2$  Heisenberg Antiferromagnet on the Cairo Pentagon Lattice'', Journal of the Physical Society of Japan 査読有 Vol.83 pp.053702 (1-4) (2014)

DOI: 10.7566/JPSJ.83.053702

<sup>8</sup> H. Nakano and T. Sakai, ``Anomalous Quantum Magnetization Behaviors of the Kagome and Triangular Lattice Antiferromagnets'', JPS Conference Proceedings 査読有 Vol.3 pp.014003 (1-4) (2014)

DOI: 10.7566/JPSCP.3.014003

<sup>9</sup> K. Watanabe, H. Kawamura, H. Nakano, and T. Sakai, ``Quantum Spin-Liquid Behavior in the Spin-1/2 Random Heisenberg Antiferromagnet on the Triangular

Lattice'', Journal of the Physical Society of Japan 査読有 Vol.83 pp.034714 (1-6) (2014)  
DOI: 10.7566/JPSJ.83.034714

10

H. Nakano and T. Sakai, ``The Two-Dimensional  $S=1/2$  Heisenberg Antiferromagnet on the Shuriken Lattice --- A Lattice Composed of Vertex-Sharing Triangles ---'', Journal of the Physical Society of Japan 査読有 Vol.82 pp.083709 (1-5) (2013)  
DOI: 10.7566/JPSJ.82.083709

11 Kenji Iwase, Hironori Yamaguchi, Toshio Ono, Tokuro Shimokawa, Hiroki Nakano, Akira Matsuo, Koichi Kindo, Hiroyuki Nojiri, and Yuko Hosokoshi, ``Crystal Structure and Magnetic Properties of the Verdazyl Biradical  $m$ -Ph-V2 Forming a Ferromagnetic Alternating Double Chain'', Journal of the Physical Society of Japan 査読有 Vol.82 pp.074719 (1-6) (2013)  
DOI: 10.7566/JPSJ.82.074719

12 H. Yamaguchi, K. Iwase, T. Ono, T. Shimokawa, H. Nakano, Y. Shimura, N. Kase, S. Kittaka, T. Sakakibara, T. Kawakami, and Y. Hosokoshi, ``Unconventional Magnetic and Thermodynamic Properties of  $S=1/2$  Spin Ladder with Ferromagnetic Legs'', Physical Review Letters 査読有 Vol.110 pp.157205 (2013)  
DOI: 10.1103/PhysRevLett.110.157205

13 Hironori Yamaguchi, Shintaro Nagata, Masami Tada, Kenji Iwase, Toshio Ono, Sadafumi Nishihara, Yuko Hosokoshi, Tokuro Shimokawa, Hiroki Nakano, Hiroyuki Nojiri, Akira Matsuo and Koichi Kindo, and Takashi Kawakami, ``Crystal structure and magnetic properties of honeycomb-like lattice antiferromagnet  $p$ -BIP-V2'', Physical Review B 査読有 Vol.87 pp.125120(1-8) (2013)  
DOI: 10.1103/PhysRevB.87.125120

14 Hiroki Nakano, Syngge Todo and Toru Sakai, ``Long-Range Order of the Three-Sublattice Structure in the  $S=1$  Heisenberg Antiferromagnet on a Spatially Anisotropic Triangular Lattice'', Journal of the Physical Society of Japan 査読有 Vol.82 pp.043715 (1-5) (2013)  
DOI: 10.7566/JPSJ.82.043715

15 Toru Sakai and Hiroki Nakano, ``Novel Field-Induced Quantum Phase Transition of the Kagome-Lattice Antiferromagnet'',

Journal of the Korean Physical Society 査読有 Vol.63 pp.601-604 (2013)  
DOI: 10.3938/jkps.64.601

16 Tokuro Shimokawa and Hiroki Nakano, ``Nontrivial ferrimagnetism of the Heisenberg model on the Union Jack strip lattice'', Journal of the Korean Physical Society 査読有 Vol.63 pp.591-595 (2013)  
DOI: 10.3938/jkps.63.591

17 Toru Sakai and Hiroki Nakano, ``Quantum critical magnetization behaviors of kagome- and triangular-lattice antiferromagnets'', Physica Status Solidi B 査読有 Vol.250 (2013) 579-582  
DOI: 10.1002/pspb.201200763

18 Toru Sakai and Hiroki Nakano, ``Quantum Critical Magnetization Behaviors of the Kagome- and Triangular-Lattice Antiferromagnets'', Journal of Low Temperature Physics 査読有 Vol.170 pp.255-260 (2013)  
DOI: 10.1007/s10909-012-0735-z

19 Tokuro Shimokawa and Hiroki Nakano, ``Magnetization curve of the kagome-strip-lattice antiferromagnet'', Journal of Low Temperature Physics 査読有 Vol.170 pp.328-333 (2013)  
DOI: 10.1007/s10909-012-0701-9

20 Y. Nishiwaki, M. Tokunaga, N. Todoroki, and T. Kato, ``High-Field Magnetization of Quasi-One-Dimensional Ising-Like Antiferromagnet  $\text{TlCoCl}_3$ '', Journal of the Physical Society of Japan 査読有 Vol.82 pp.104717(1-5) (2013)  
DOI: 10.7566/JPSJ.82.104717

21 Susumu Okubo, Tomonari Ueda, Hitoshi Ohta, Weimin Zhang, Takahiro Sakurai, Nozomi Onishi, Masaki Azuma, Yuichi Shimakawa, Hiroki Nakano, and Toru Sakai, ``Dzyaloshinsky-Moriya Interaction and Field Induced Magnetic Order Phase in an Antiferromagnetic Honeycomb Lattice Compound  $\text{Bi}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$  Studied by High-Field ESR'', Physical Review B 査読有 Vol.86 pp.140401(R)(1-4) (2012)  
DOI: 10.1103/PhysRevB.86.140401

22 Tokuro Shimokawa and Hiroki Nakano, ``Ferrimagnetism of the Heisenberg Models on the Quasi-One-Dimensional Kagome Strip Lattices'', Journal of the Physical Society of Japan 査読有 Vol.81 pp.084710 (1-8) (2012)  
DOI: 10.1143/JPSJ.81.084710

23 Makoto Isoda, Hiroki Nakano, and Toru Sakai, ``A Consistent Description of Magnetic Properties of the Triangulated-Kagome System Cu<sub>9</sub>X<sub>2</sub>(cpa)6nH<sub>2</sub>O'', Journal of the Physical Society of Japan 査読有 Vol.81 pp.053703 (1-4) (2012)  
DOI: 10.1143/JPSJ.81.053703

24 H. Yamaguchi, M. Tada, S. Nagata, K. Iwase, T. Shimokawa, H. Nakano, H. Nojiri, A. Matsuo, K. Kindo, and Y. Hosokoshi, ``Magnetic Phase Transition in the Verdazyl Biradical Crystal p-BIP-V2'' Journal of Physics: Conference Series 査読有 Vol.400 pp.032118(1-4) (2012)  
DOI: 10.1088/1742-6596/400/3/032118

25 Toru Sakai and Hiroki Nakano, ``Novel Field-Induced Quantum Phase Transition of the Kagome-Lattice Antiferromagnet'', Journal of Physics: Conference Series 査読有 Vol.400 pp.032076(1-4) (2012)  
DOI: 10.1088/1742-6596/400/3/032076

〔学会発表〕(計 14 件)

1 中野博生、(シンポジウム講演)フラストレーション系の新奇スピフロップの理論、日本物理学会第 70 回年次大会、2015 年 3 月 21 日、早稲田大学(東京都新宿区)

2 中野博生、坂井徹、カゴメ格子ハイゼンベルク反強磁性体の磁場中量子状態、日本物理学会第 70 回年次大会、2015 年 3 月 21 日、早稲田大学(東京都新宿区)

3 轟木義一、中野博生、積層籠目格子ハイゼンベルグ模型におけるエントロピー誘起スピフロップ転移、日本物理学会第 70 回年次大会、2015 年 3 月 21 日、早稲田大学(東京都新宿区)

4 中野博生、坂井徹、かごめ格子反強磁性体の磁化過程の再検討、日本物理学会 2014 年秋季大会、2014 年 9 月 10 日、中部大学(愛知県春日井市)

5 轟木義一、中野博生、フラストレート磁性体におけるエントロピー誘起スピフロップ転移、日本物理学会 2014 年秋季大会、2014 年 9 月 10 日、中部大学(愛知県春日井市)

6 中野博生、坂井徹、長谷川泰正、スピン空間に異方性のない系でのスピフロップ現象、日本物理学会第 69 回年次大会、2014 年 3 月 30 日、東海大学(神奈川県平塚市)

7 轟木義一、中野博生、古典シュリケン格子反強磁性体の磁場中相図、日本物理学会第 69

回年次大会、2014 年 3 月 27 日、東海大学(神奈川県平塚市)

8 轟木義一、中野博生、シュリケン格子上のイジング模型の解析、日本物理学会 2013 年秋季大会、2013 年 9 月 28 日、徳島大学(徳島県徳島市)

9 中野博生、坂井徹、手裏剣格子ハイゼンベルク反強磁性体の磁化過程、日本物理学会 2013 年秋季大会、2013 年 9 月 26 日、徳島大学(徳島県徳島市)

10 中野博生、坂井徹、藤堂眞治、空間異方性を持つ三角格子 S=1 ハイゼンベルク反強磁性体、日本物理学会第 68 回年次大会、2013 年 3 月 30 日、広島大学(広島県東広島市)

11 Hiroki Nakano, Two-Dimensional Frustrated Antiferromagnets by Large-Scale Parallel Calculations of Numerical Diagonalizations, JAEA Synchrotron Radiation Research Symposium "Magnetism in Quantum Beam Science" (招待講演) 2013 年 3 月 13 日、Spring8(兵庫県佐用町)

12 Hiroki Nakano, Numerical-diagonalization study of two-dimensional frustrated magnets by huge-scale parallelization, GCOE 分野横断研究会「多体相関の数値解法」(招待講演) 2013 年 2 月 6 日、東京大学(東京都文京区)

13 中野博生、坂井徹、三角格子反強磁性対のスピン励起、日本物理学会 2012 年秋季大会、2012 年 9 月 19 日、横浜国立大学(神奈川県横浜市)

14 轟木義一、西脇洋一、歪んだ積層三角格子反強磁性体 RbCoBr<sub>3</sub> および TlCoCl<sub>3</sub> の磁化過程の理論、日本物理学会 2012 年秋季大会、2012 年 9 月 19 日、横浜国立大学(神奈川県横浜市)

〔図書〕(計 0 件)

〔その他〕

ホームページ等

<http://www.sci.u-hyogo.ac.jp/material/theory2/hnakano/index-j.html>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

中野 博生 (NAKANO, Hiroki)

兵庫県立大学・大学院物質理学研究科・助教

研究者番号：00343418

(2)研究分担者

轟木 義一 (TODOROKI, Norikazu)

千葉工業大学・工学部・准教授

研究者番号： 40409925

(3)連携研究者

なし