

令和元年6月6日現在

機関番号：82110

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2016～2018

課題番号：16K05494

研究課題名(和文) 低次元磁性体のマグノン対が織り成すスピン伝導・熱伝導現象

研究課題名(英文) Spin and thermal transport phenomena mediated by magnon pair in low-dimensional magnet

研究代表者

大西 弘明 (Onishi, Hiroaki)

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構・原子力科学研究部門 原子力科学研究所 先端基礎研究センター・研究副主幹

研究者番号：10354903

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,100,000円

研究成果の概要(和文)：低次元磁性体のスピンネマティック状態においてマグノン対が流れる効果に着目して、マグノン対によるスピン伝導と熱伝導の輸送特性、および輸送特性と磁気特性との関係について研究した。有限温度でのスピン伝導度と熱伝導度、絶対零度でのスピン流と熱流の動的相関関数、四極子励起スペクトル、波束の伝播ダイナミクスについて、多面的な数値的解析を行い、マグノン対が新たなキャリアとしてスピン伝導・熱伝導に寄与することを示唆する結果を得た。

研究成果の学術的意義や社会的意義

スピンネマティック状態ではマグノン対が磁化2を運ぶため、通常の磁気秩序系でマグノンが磁化1を運ぶのと比較して、より効率的にスピン流を生成できる可能性がある。本研究では、マグノン対がスピン伝導・熱伝導に寄与する効果について多面的な数値的解析を行った。低次元量子スピン系のいわゆる隠れた秩序の磁気励起子がスピン伝導や熱伝導に寄与することを示唆する結果が得られており、スピン伝導・熱伝導のメカニズムを考察する上で新しい視点を与えるものである。

研究成果の概要(英文)：To clarify the effect of the flow of a magnon pair in a spin nematic state in a low-dimensional magnet, we study spin and thermal transport property and its relation with magnetic property. We perform many-sided numerical analyses on spin and thermal conductivities at finite temperature, spin and thermal dynamical correlation functions at zero temperature, quadrupole excitation spectrum, and wavepacket propagation dynamics, and find that magnon pairs would contribute to the spin and thermal transport as a new type of carrier.

研究分野：物性理論

キーワード：スピンネマティック状態 スピン伝導度 熱伝導度 四極子励起スペクトル 波束ダイナミクス 密度行列繰り込み群 数値対角化

様式 C-19、F-19-1、Z-19、CK-19（共通）

1. 研究開始当初の背景

磁性体のスピン伝導・熱伝導現象は、スピンの性質を利用して新たなデバイス構築を目指すスピントロニクス分野で、基礎と応用の両面から研究が推進されている。特に、磁性を制御してデバイスに応用するという観点で、磁気秩序を持つ強磁性体や反強磁性体が研究対象となっている。これらの磁気秩序系ではスピン波（マグノン）が主要な磁気励起であり、マグノンが結晶中を伝播することでスピン流や熱流を生じることが実証されてきた。

一方、一次元鎖 Sr_2CuO_3 などの低次元磁性体で、スピンによる巨大な熱伝導が観測されたことを契機に、低次元量子スピン系の磁性という側面での研究が進展している。一次元反強磁性ハイゼンベルグ模型などの可積分模型で、スピン伝導・熱伝導が弾道的（無散逸で抵抗ゼロ）であることが厳密に示されており、一次元鎖物質で観測された熱伝導はこの性質を反映したものと理解されている。これまでの研究で、スピノンやトリプロンといった低次元系特有の磁気励起子が熱伝導に寄与することが分かってきた。

このように、磁性体のスピン伝導・熱伝導現象の研究は、スピントロニクスと低次元量子スピン系の分野で個別に発展を遂げてきた背景がある。本研究では、スピントロニクスと低次元量子スピン系の両分野での見地を融合した研究を展開する。特に、新奇量子相として注目を集めているスピンネマティック状態に着目する。スピンネマティック状態では、2つのマグノンが束縛対を作るため、マグノン対がまとまって伝播すると考えられ、より効率的にスピン流を生成できる可能性がある。しかし、マグノン対がスピン伝導・熱伝導にどう寄与するのかこれまで検討されていない。2倍の量子を持つマグノン対が関与するスピン伝導・熱伝導現象を究明することで、従来のマグノンの描像とは質的に異なる新現象や新機能の開拓につながると期待される。

2. 研究の目的

スピンネマティック状態を含む様々な量子スピン相でのスピン伝導・熱伝導特性の類似性と相違点を明確にして、スピン伝導・熱伝導におけるマグノン対の役割を明らかにする。数値対角化や密度行列繰り込み群（Density Matrix Renormalization Group, DMRG）、動的 DMRG、時間依存 DMRG などの高精度数値計算手法を駆使した理論解析により、低次元磁性体の磁気特性と輸送特性を調べ、スピン伝導・熱伝導を制御する方法や新しい磁気熱効果の発見を目指す。

3. 研究の方法

低次元磁性体の磁気特性と輸送特性について、特にスピンネマティック状態でマグノン対が流れる効果に着目して、数値対角化や DMRG を用いた数値計算によって調べる。スピンネマティック状態が実現する低次元磁性体の典型的な模型として、強磁性の最近接相互作用 J_1 と反強磁性の次近接相互作用 J_2 がフラストレートした一次元 J_1 - J_2 ハイゼンベルグ模型に磁場を印加した系を取り扱う。以下にその具体的な方法を述べる。

(1) 輸送係数と四極子励起の解析

線形応答理論に基づいて、スピン伝導度と熱伝導度の特異部分のドルーデ重み、および正則部分の周波数依存性を数値計算する。スピン伝導度と熱伝導度は、スピン流と熱流の動的相関関数から求められる。ドルーデ重みは伝導が弾道的か否かを判別する量であり、正則部分の周波数依存性は励起構造を反映した強度分布が観測される。スピンネマティック状態の磁気特性に関して、磁化が1変化するスピン励起はエネルギーギャップが生じること、磁化が2変化する四極子励起はギャップレスであることが分かっている。この性質を反映してスピン流・熱流が増大するメカニズムを考察する。

絶対零度での四極子励起スペクトルの分散関係やスペクトル強度分布を詳細に調べ、カレント相関関数の解析結果と比べ合わせて、磁気特性と輸送特性の関係を明らかにする。

動的相関関数を解析する数値計算手法として、絶対零度に対しては動的 DMRG、有限温度に対しては数値対角化を用いる。一般に、動的 DMRG によって幅広い波数・エネルギー領域のフルスペクトルを得るには、波数とエネルギーのメッシュの数だけ独立な計算を実行するのに多くの計算量を要する。また、複数のターゲット状態を取るため、高い計算精度を保つには繰り込みで残す状態数を大きくしなければならず、大容量メモリと長時間実行が必要となる。こうした数値計算上の困難を克服するために、スパコンを活用した大規模並列計算を実行する。

一方、数値対角化では、ハミルトニアン行列の全固有値・全固有ベクトルを求めて、スピン流および熱流の動的相関関数の熱平均を計算する必要がある。行列次元がシステムサイズとともに指数関数的に増大するため少数サイト系に制限されるのが難点だが、できるだけサイト数を増やすための工夫として、磁化と波数の部分空間でブロック対角化して行列次元を抑える。行列次元は磁化ゼロ・波数ゼロの部分空間で最大となり、20サイトでは9,252でワークステーションでも計算可能だが、24サイトでは112,720でスパコンの活用が必須である。こうした巨大行列を効率的に対角化するために ScalAPACK を用いた MPI 並列化を施す。熱平均を計算する際の状態和の部分も MPI 並列化による高速化が有効である。

(2) 波束ダイナミクスの解析

スピン伝導・熱伝導のメカニズムを視覚的に捉えるアプローチとして、マグノン対の波束の実時間ダイナミクスについて数値的解析を行う。まず、通常の DMRG によりスピンネマティック状態が実現するパラメータ領域で基底状態を求める。そして、基底状態にガウシアン型演算子

を作用してマグノン対波束を生成して、そこからの時間発展を時間依存 DMRG で計算する。マグノン対波束の伝播速度と四極子励起スペクトルの関係、マグノン対がいかにコヒーレンスを保って伝播するかの特性を調べる。

数値計算を遂行するにあたっては、本科研費により購入した計算機クラスタを活用するとともに、日本原子力研究開発機構および東京大学物性研究所のスーパーコンピュータを用いた。

4. 研究成果

(1) スピン流と熱流の輸送係数

スピン伝導・熱伝導現象を特徴付ける物理量として、スピン伝導度と熱伝導度のドルーデ重みの温度・磁場依存性を数値対角化により調べた。図 1 は、 $(J_1, J_2) = (-1, 1)$ でのスピンドルーデ重みの各温度での磁場依存性を表している。絶対零度では飽和磁場 $h_{\text{sat}}^{T=0} = 1.25$ 以下の磁場領域でマグノン対が形成されるが、低温ではその磁場領域にスペクトル強度が多く分布している。特に、降温とともにスピンドルーデ重みが増大していることが見て取れる。この低温での振る舞いは、絶対零度でスピンマティック状態が発現する前駆現象として理解でき、スピンマティック状態で形成されるマグノン対がスピン伝導に寄与することを示唆している。

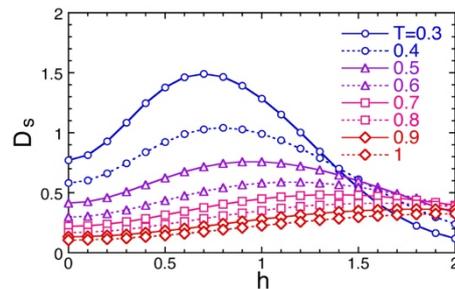


図 1: フラストレート強磁性鎖のスピンドルーデ重み D_s の各温度 T での磁場 h 依存性。 $(J_1, J_2) = (-1, 1)$ 。20 サイト系の数値対角化による結果。

さらに、絶対零度でのスピン流と熱流の動的相関関数を動的 DMRG によって調べた。スピン流と熱流のいずれにおいても、 $|J_1|/J_2$ が小さくなるにつれて低エネルギー領域のスペクトル強度が増大することを見出した。これは、 $|J_1|/J_2$ が小さい領域で低温でのスピンドルーデ重みと熱ドルーデ重みが増大する結果とコンシステントである。一方、 $|J_1|/J_2$ を大きくしていくと、基底状態は四極子状態 (2 マグノン束縛状態) から八極子状態 (3 マグノン束縛状態) へと変化する。素朴には、まとまって運ばれる磁化が 2 から 3 に増えるとスピン伝導・熱伝導の増大が期待されるが、予想に反して、転移点をまたいでスピン流と熱流の静的相関が急激に減少することを見出した。今後の展望として、こうした高次の多極子まで含めた包括的な理解を目指したい。そのために、四極子励起スペクトルと八極子励起スペクトルを比較して、磁気特性と輸送特性の関係性を調べることを検討している。

(2) 四極子励起スペクトル

磁気特性を特徴付ける物理量として、四極子励起スペクトルを動的 DMRG により調べた (図 2)。スピン励起スペクトルで特徴的な波数が磁場に応じて変化するのは対照的に、四極子励起スペクトルは相互作用パラメータや磁場に依らず波数 π がギャップレスであることが分かった。また、磁場が減少するにしたがって、ギャップレスモード近傍の分散が放物線型から線型へと変化し、波数 $\pi/2$ 付近の分散と分離した構造を取る特徴を明らかにした。 $|J_1|/J_2$ の増加に伴ってバンド幅が減少し、飽和磁場近傍でのギャップレスモードが底広のフラット構造が顕著になり、磁気フラストレーションの効果で多くの状態が擬縮退する特徴を見出した。

四極子励起スペクトルを実験で観測する手段は確立していないが、電子スピン共鳴や共鳴非弾性 X 線散乱で観測できるという提案もあり、スピンマティック状態の実証に向けた今後の展開が期待される。

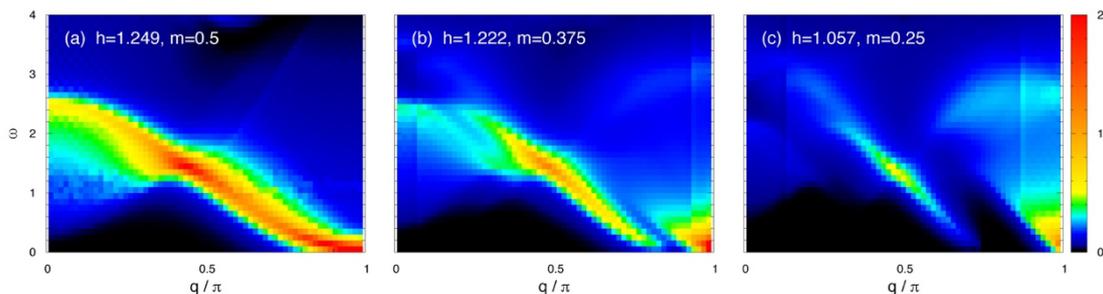


図 2: フラストレート強磁性鎖の四極子励起スペクトル。(a)-(c) は 3 通りの磁場 h 、磁化 m でのスペクトル。 $(J_1, J_2) = (-1, 1)$ 。64 サイト系の動的 DMRG による結果。

(3) 波束の伝播ダイナミクス

図3は、時刻ゼロで生成したマグノン対の波束が時間発展とともに伝播していく様子をカラープロットで表している。マグノン対波束の伝播速度は、四極子励起スペクトルの分散関係で決まる群速度で与えられる。飽和磁場近傍では、ギャップレスモードの底広フラット構造を反映して、マグノン対波束は時間発展しても局在構造を保って初期位置にとどまるが、磁場が小さくなるにつれて、ギャップレスモードは底狭の線型に近い分散構造へと変化するため、伝播速度は次第に速くなることを見出した。これは、マグノン対がコヒーレンスを保って伝播してスピン伝導・熱伝導に寄与することを示唆する重要な結果である。

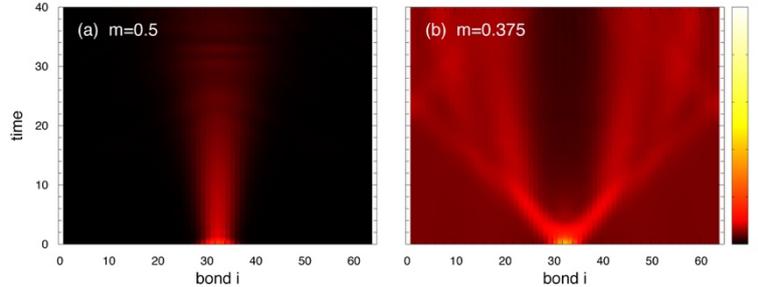


図3: フラストレート強磁性鎖でのマグノン対密度の時間発展. 横軸は位置, 縦軸は時刻. $(J_1, J_2) = (-1, 1)$. 64 サイト系の時間依存 DMRG による結果.

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計6件)

- ① H. Onishi, "Magnetic excitations and transport properties in frustrated ferromagnetic chain", *J. Magn. Magn. Mater.* **479**, 88-90 (2019). 査読有
DOI:10.1016/j.jmmm.2019.02.006
- ② H. Onishi, "Dynamical quadrupole structure factor of frustrated ferromagnetic chain", *Physica B* **536**, 346-349 (2018). 査読有
DOI:10.1016/j.physb.2017.10.056
- ③ S. Shamoto, T. U. Ito, H. Onishi, H. Yamauchi, Y. Inamura, M. Matsuura, M. Akatsu, K. Kodama, A. Nakao, T. Moyoshi, K. Munakata, T. Ohhara, M. Nakamura, S. Ohira-Kawamura, Y. Nemoto, and K. Shibata, "Neutron-scattering study of yttrium iron garnet", *Phys. Rev. B* **97**, 054429(1-9) (2018). 査読有
DOI:10.1103/PhysRevB.97.054429
- ④ Y.-C. Tzeng, H. Onishi, T. Okubo, and Y.-J. Kao, "Quantum phase transitions driven by rhombic-type single-ion anisotropy in the S=1 Haldane chain", *Phys. Rev. B* **96**, 060404(R) (1-7) (2017). 査読有
DOI:10.1103/PhysRevB.96.060404
- ⑤ M. Matsuda, H. Onishi, A. Okutani, J. Ma, H. Agrawal, T. Hong, D. M. Pajerowski, J. R. D. Copley, K. Okunishi, M. Mori, S. Kimura, and M. Hagiwara, "Magnetic structure and dispersion relation of the S=1/2 quasi-one-dimensional Ising-like antiferromagnet $\text{BaCo}_2\text{V}_2\text{O}_8$ in a transverse magnetic field", *Phys. Rev. B* **96**, 024439(1-8) (2017). 査読有
DOI:10.1103/PhysRevB.96.024439
- ⑥ K. Kubo and H. Onishi, "Variational Wavefunction for the Periodic Anderson Model with Onsite Correlation Factors", *J. Phys. Soc. Jpn.* **86**, 013701(1-4) (2017). 査読有
DOI:10.7566/JPSJ.86.013701

[学会発表] (計18件)

- ① H. Onishi, "Magnon-pair excitation and transport in spin nematics", New excitations in Spintronics 2019, Connemara, Ireland (2019年2月)
- ② 大西弘明, "マグノン対輸送の実時間ダイナミクス", 第13回量子スピン系研究会, 東海村産業・情報プラザ (2019年1月)
- ③ H. Onishi, "Magnetic excitations of spin nematic state in frustrated quantum spin system", Universal Physics in Many-Body Quantum Systems, Tokai, Japan (2018年12月)
- ④ 大西弘明, "マグノン対の流れによるスピン伝導・熱伝導", 基研研究会「スピン系物理の最前線」, 京都大学基礎物理学研究所 (2018年10月)
- ⑤ 大西弘明, "マグノン対輸送の実時間ダイナミクス", 日本物理学会2018年秋季大会, 同志社大学 (2018年9月)
- ⑥ H. Onishi, "Magnetic excitations and transport properties in frustrated ferromagnetic chain", Joint European Magnetic Symposia, Mainz, Germany (2018年9月)

- ⑦ 大西弘明, "フラストレート量子スピン鎖の磁気励起とスピン伝導", 物性研究所スパコン共同利用・CCMS 合同研究会「計算物質科学の今と未来」, 東京大学物性研究所 (2018年4月)
- ⑧ 大西弘明, "スピンネマティック状態におけるマグノン対の伝播ダイナミクス", 日本物理学会第73回年次大会, 東京理科大学 (2018年3月)
- ⑨ 社本真一, 伊藤孝, 大西弘明, 松浦直人, 赤津光洋, 中村充孝, 稲村泰弘, 樹神克明, 河村聖子, 根本祐一, 柴田薫, " $Y_3Fe_5O_{12}$ の高エネルギーマグノン分散とそのシミュレーション", 日本物理学会第73回年次大会, 東京理科大学 (2018年3月)
- ⑩ 大西弘明, "スピン多極子相のスピン伝導と熱伝導", 第12回量子スピン系研究会, みのお山荘 (2017年12月)
- ⑪ 大西弘明, "フラストレート強磁性鎖のスピンネマティック状態における磁気熱効果", 日本物理学会2017年秋季大会, 岩手大学 (2017年9月)
- ⑫ H. Onishi, "Dynamical quadrupole structure factor of frustrated ferromagnetic chain", International Conference on Strongly Correlated Electron Systems, Prague, Czech Republic (2017年7月)
- ⑬ 大西弘明, "フラストレート量子スピン鎖の磁気励起とスピン伝導", 物性研究所スパコン共同利用・CCMS 合同研究会「計算物質科学の今と未来」, 東京大学物性研究所 (2017年4月)
- ⑭ 大西弘明, "フラストレート量子スピン鎖のスピン伝導と熱伝導", 第11回量子スピン系研究会, 福井大学 (2016年12月)
- ⑮ 久保勝規, 大西弘明, "周期アンダーソンモデルに対する変分波動関数の改良", 日本物理学会2016年秋季大会, 金沢大学 (2016年9月)
- ⑯ 大西弘明, "フラストレート量子スピン鎖のスピン伝導と熱伝導", 日本物理学会2016年秋季大会, 金沢大学 (2016年9月)
- ⑰ H. Onishi, "Spin and quadrupole excitations in spin nematic state", International Conference on Highly Frustrated Magnetism, Taipei, Taiwan (2016年9月)
- ⑱ 大西弘明, "Magnetic excitations of spin nematic state in frustrated ferromagnetic chain", ポスト「京」重点課題(7)「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」サブ課題G第4回「共通基盤シミュレーション手法」連続研究会, 東京理科大 (2016年5月)

[その他]

ホームページ等

<http://www11.plala.or.jp/sces/onishi/index.html>

https://researchmap.jp/Hiroaki_Onishi

6. 研究組織

(1) 研究分担者

なし

(2) 研究協力者

なし

※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。