

令和 4 年 6 月 3 日現在

機関番号：82110

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2019～2021

課題番号：19K03678

研究課題名(和文) スピン多極子由来のマグノンクラスターによるスピン伝導・熱伝導

研究課題名(英文) Spin and thermal transport mediated by magnon cluster of spin multipole origin

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・研究主幹

研究者番号：10354903

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,300,000円

研究成果の概要(和文)：量子磁性体のスピン多極子状態においてマグノンクラスターが流れる効果に着目して、マグノンクラスターによるスピン伝導と熱伝導の輸送特性、および多極子励起スペクトルの磁気特性について、計算物理的手法を駆使して調べた。高次の多極子まで含めた系統的な解析により、輸送特性と磁気特性の関係を明らかにした。特に、スピン流の流れやすさは、まとまって流れるマグノン数で単純には決まらず、多極子励起の分散構造などの磁気特性と深く関係していることが分かった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

スピン多極子状態では複数のマグノンが束縛されたマグノンクラスターが角運動量を運ぶため、磁気秩序系でマグノンが角運動量1を運ぶよりも、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、量子磁性体の新奇な磁気励起子であるマグノンクラスターが関与するスピン伝導・熱伝導の特徴を明らかにしており、新奇量子相を探索する量子スピン系分野と、高効率なスピン・熱輸送特性を持つ磁性体の開発を行うスピントロニクス分野の融合的研究の発展に寄与している。

研究成果の概要(英文)：To understand the effect of the flow of a magnon cluster in a spin multipole state in a quantum magnet, we study spin and thermal transport properties and multipole excitation spectra by exploiting numerical methods. By performing systematic analyses for higher multipoles, we find out the relation between transport and magnetic properties. In particular, the flow of spin current is not simply determined by the number of magnons in a magnon cluster but closely related to magnetic properties such as the dispersion of multipole excitations.

研究分野：物性理論

キーワード：スピン多極子 多極子励起スペクトル カレント相関関数 共鳴非弾性X線散乱 密度行列繰り込み群 数値対角化 熱的純粋量子状態

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、研究者個人に帰属します。

### 1. 研究開始当初の背景

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は、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。磁気秩序系では、マグノンが伝播することでスピン流や熱流が生じる。一方、一次元鎖  $\text{Sr}_2\text{CuO}_3$  や二本足梯子  $\text{Sr}_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$  で、スピンによる巨大な熱伝導が観測されたことを契機として、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。量子スピン系では、絶対零度までスピンが秩序化しない量子スピン液体が精力的に探索されており、スピンが分数化したスピノンなど、磁気秩序系のマグノンとは質的に異なる素励起によってスピン流や熱流が生じる可能性がある。このように、磁性体のスピン伝導・熱伝導の研究は、スピントロニクスと量子スピン系の分野で個別に発展してきた背景がある。

本研究では、スピントロニクスと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。本研究に先立って、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 (四極子) 状態に着目して、輸送特性の研究に取り組んできた。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予想して研究に着手した。そして実際、マグノン対の流れがスピン伝導・熱伝導に寄与する効果を見出すに至っていた。これを高次の多極子 (八極子、十六極子など) に拡張すると、多数のマグノンが束縛された「マグノンクラスター」の流れがスピン伝導・熱伝導現象をもたらすと考えられる。本研究では、これまでのスピンネマティクスに焦点を当てた研究を高次のスピン多極子にまで発展させて、マグノンクラスターが関与するスピン伝導・熱伝導現象を究明する。

### 2. 研究の目的

スピン多極子状態のマグノンクラスターがスピン流と熱流にどう寄与するのかを明らかにする。磁気秩序系のマグノンや、朝永-ラッティンジャー液体のスピノンなどの磁気励起子と比較して、類似点と相違点を明確にする。量子効果の下でのスピン伝導・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

スピン多極子液体が実現する典型モデルとして、強磁性の最近接交換相互作用  $J_1$  と反強磁性の次近接交換相互作用  $J_2$  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フラストレート強磁性鎖を取り扱う。これまでに培ってきた密度行列繰り込み群 (density-matrix renormalization group, DMRG) の数値計算技術を駆使して、基底状態、磁気励起、実時間ダイナミクス、輸送特性について、計算物理的枠組みで統一的に解析を行う。また、有限温度特性を解析するための技術開発にも取り組む。

数値計算の遂行にあたっては、本科研費により購入した計算機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) 輸送特性：カレント相関関数

スピン伝導・熱伝導を特徴付ける物理量として、絶対零度でのスピン流とエネルギー流の相関関数と動的相関関数を調べた。図1にカレント相関関数を示す。スピン四極子液体で  $J_1$  を強くしていくと ( $J_1=-2, -2.4$ )、カレント相関が増大している。 $J_1$  でマグノン対がより強く束縛され、マグノン対がコヒーレンスを保って伝播することでスピン流・エネルギー流が増大すると解釈できる。一方、スピン四極子液体 ( $J_1=-2, -2.4$ ) からスピン八極子液体 ( $J_1=-3, -3.4$ ) に変化すると、まとまって流れる角運動量が2から3に増えるため、スピン伝導が増大すると素朴に期待されるが、それに反して、転移点をまたいでスピン流相関関数が急激に減少することを見出した。この振る舞いは、励起スペクトルの分散構造の傾きで決まる速度の違いとして理解できる。

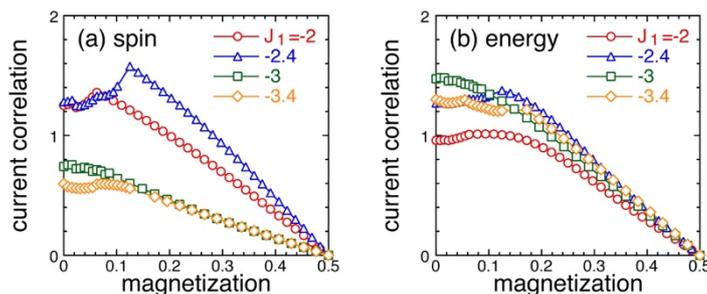


図1: フラストレート強磁性鎖の (a) スピン流, (b) エネルギー流のカレント相関関数.  $N=128$  サイトの計算結果.  $J_2=1$  をエネルギーの単位とする.

## (2) 磁気特性：多極子励起スペクトル

スピン多極子液体の磁気特性を励起ダイナミクスの観点から特徴付ける物理量として、スピン、スピン四極子、スピン八極子の励起スペクトルを系統的に解析した。図2はスピン四極子液体 ( $J_1=-2$ ) での励起スペクトルの計算結果で、(運動量  $q$ , エネルギー  $\omega$ ) 空間でのスペクトル強度をカラープロットで示している。反強四極子準長距離秩序を反映して、スピン四極子励起が  $q=\pi$  にギャップレス構造を持つものに対して、スピン励起とスピン八極子励起はギャップ構造を持つことが分かる。一方、図3に示すように、スピン八極子液体 ( $J_1=-3$ ) では、反強八極子準長距離秩序を反映して、スピン八極子励起スペクトルが  $q=\pi$  にギャップレス構造を持ち、スピン励起とスピン四極子励起はギャップ構造を持つ。また、バンド幅が狭まり、分散構造がより平坦になっていることが見て取れる。つまり、分散構造の傾きで与えられる伝播速度が小さくなっていることが分かる。

上述(1)の輸送特性は、3 マグノンクラスターの方が2 マグノンクラスターより多くの角運動量を運ぶものの、伝播速度が小さく、全体として流れる角運動量が減少すると解釈できる。このように、スピン流の流れやすさは、まとまって流れるマグノン数で単純には決まらず、多極子励起の分散構造などの磁気特性と深く関係している。

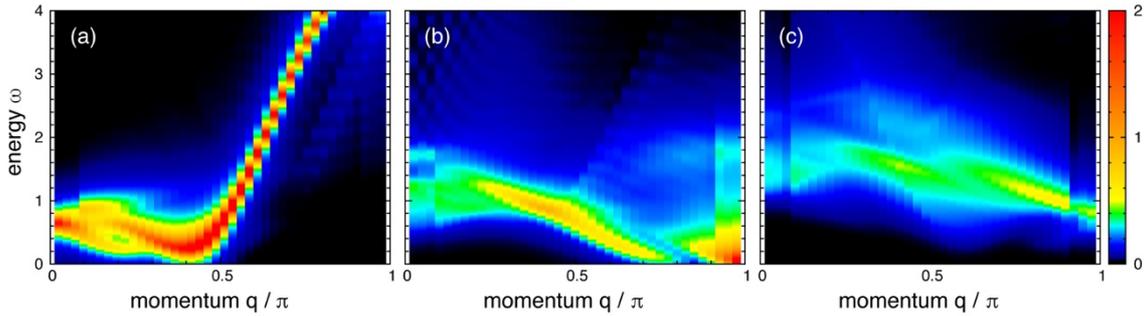


図 2: フラストレート強磁性鎖のスピン四極子液体での (a) スピン, (b) スピン四極子, (c) スピン八極子の励起スペクトル.  $N=40$  サイト,  $J_1=-2$  の計算結果.

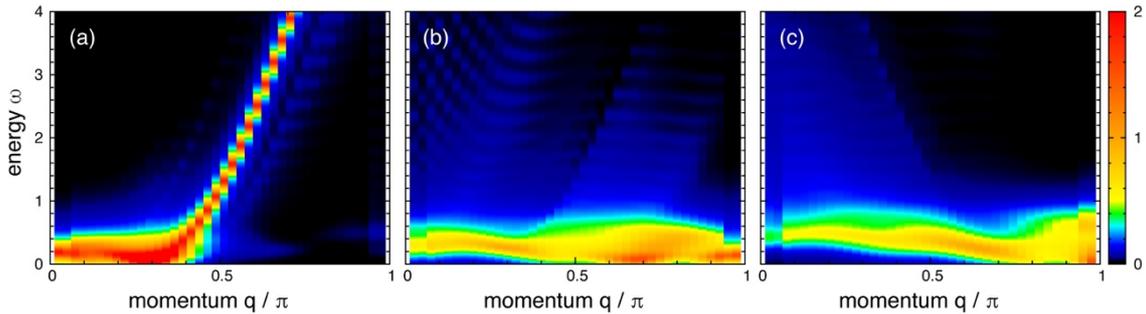


図 3: フラストレート強磁性鎖のスピン八極子液体での (a) スピン, (b) スピン四極子, (c) スピン八極子の励起スペクトル.  $N=40$  サイト,  $J_1=-3$  の計算結果.

## (3) 共鳴非弾性 X 線散乱 (resonant inelastic x-ray scattering, RIXS) によるスピン四極子励起の観測理論

スピン四極子の励起を観測できる有力な実験手法として RIXS に着目した研究に取り組んだ。RIXS では、入射光と反射光の分極をうまく制御することでスピン四極子の光学遷移を観測できることが、対称性に基づく現象論で予言されている。しかし、現象論では具体的な散乱過程の寄与が検討されておらず、実験との対応は明らかでない。そこで、これまで遂行してきたスピン四極子励起スペクトルの研究を RIXS スペクトルの研究に発展させる。スピン四極子励起スペクトルと RIXS スペクトルを比較して、RIXS スペクトルにおいてスピン四極子励起が支配的になる条件を解明し、スピン四極子の励起を RIXS で直接検出するための処方箋を与えることを目指す。フラストレート強磁性鎖の典型物質  $\text{LiCuVO}_4$  の RIXS 実験を共同研究として開始して、その実験結果と比較するためにスピン四極子励起スペクトルの低磁場での振る舞いを DMRG による数値計算で調べた。スピン四極子の独立な 5 成分 ( $xy, yz, zx, x^2-y^2, 3z^2-r^2$ ) について解析を行い、磁場方向に応じて各成分がどう変化するか、実際の RIXS 過程でどの成分が支配的になるかについて検討を進めている。また、磁場方向や、入射光・反射光の偏光に対する依存性を総合的に理解するために、RIXS スペクトルをランチョス法で調べる計算コードを開発した。

(4) スピン流と熱流の結合効果であるスピンゼーベック効果を研究するために、有限温度特性を熱的純粋量子状態の方法で調べる計算コードを開発した。これにより、従来の数値対角化では扱えない大きなサイズの系の解析が可能となった。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計4件（うち査読付論文 4件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 H. Onishi	4. 巻 2207
2. 論文標題 Excitation and transport of bound magnon clusters in frustrated ferromagnetic chain	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 J. Phys.: Conf. Ser.	6. 最初と最後の頁 12045
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1088/1742-6596/2207/1/012045	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 S. Kimura, H. Onishi, A. Okutani, M. Akaki, Y. Narumi, M. Hagiwara, K. Okunishi, K. Kindo, Z. He, T. Taniyama, M. Itoh	4. 巻 105
2. 論文標題 Optical selection rules of the magnetic excitation in the S=1/2 one-dimensional Ising-like antiferromagnet BaCo <sub>2</sub> V <sub>2</sub> O <sub>8</sub>	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Phys. Rev. B	6. 最初と最後の頁 14417
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.105.014417	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 A. Okutani, H. Onishi, S. Kimura, T. Takeuchi, T. Kida, M. Mori, A. Miyake, M. Tokunaga, K. Kindo, M. Hagiwara	4. 巻 90
2. 論文標題 Spin Excitations of the S=1/2 One-Dimensional Ising-Like Antiferromagnet BaCo <sub>2</sub> V <sub>2</sub> O <sub>8</sub> in Transverse Magnetic Fields	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 J. Phys. Soc. Jpn.	6. 最初と最後の頁 44704
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.7566/JPSJ.90.044704	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 H. Onishi	4. 巻 479
2. 論文標題 Magnetic excitations and transport properties in frustrated ferromagnetic chain	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 J. Magn. Magn. Mater.	6. 最初と最後の頁 88-90
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.jmmm.2019.02.006	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 -

[学会発表] 計13件(うち招待講演 1件/うち国際学会 5件)

1. 発表者名 木村尚次郎, 大西弘明, 奥谷顕, 赤木暢, 鳴海康雄, 萩原政幸, 奥西巧一, 金道浩一, 何長振, 谷山智康, 伊藤満
2. 発表標題 擬一次元Ising型反強磁性体BaCo <sub>2</sub> V <sub>2</sub> O <sub>8</sub> における磁気励起の光学選択則II
3. 学会等名 日本物理学会2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 大西弘明, 宮下精二
2. 発表標題 拡張長岡強磁性の有限温度の性質
3. 学会等名 日本物理学会2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 A. Okutani, H. Onishi, S. Kimura, T. Takeuchi, T. Kida, M. Mori, A. Miyake, M. Tokunaga, K. Kindo, M. Hagiwara
2. 発表標題 Magnetic Excitations of the Spin-1/2 Quasi-One-Dimensional Ising-Like Antiferromagnet BaCo <sub>2</sub> V <sub>2</sub> O <sub>8</sub> in a Transverse Magnetic Field
3. 学会等名 22nd International Society of Magnetic Resonance Conference, 9th Asia- Pacific NMR Symposium (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 H. Onishi
2. 発表標題 Excitation and transport of bound magnon clusters in frustrated ferromagnetic chain
3. 学会等名 Conference on Computational Physics (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 大西弘明, 森道康, 奥谷顕, 木村尚次郎, 萩原政幸
2. 発表標題 擬一次元イジング型反強磁性体BaCo <sub>2</sub> V <sub>2</sub> O <sub>8</sub> の横磁場中磁気励起のDMRGによる解析
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会(2021年)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 萩原政幸, 奥谷顕, 大西弘明, 木村尚次郎, 竹内徹也, 木田孝則, 森道康, 三宅厚志, 徳永将史, 金道浩一
2. 発表標題 スピン1/2擬一次元イジング型反強磁性体BaCo <sub>2</sub> V <sub>2</sub> O <sub>8</sub> の横磁場中のスピン励起
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会(2021年)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 大西弘明, 宮下精二
2. 発表標題 粒子浴のあるハバード模型の拡張長岡強磁性
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会(2020年)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 H. Onishi
2. 発表標題 Spin quadrupole excitations in spin nematics
3. 学会等名 New excitations for spintronics seen with quantum beams (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 大西弘明
2. 発表標題 斜方晶型の単一イオン異方性を持つハルデン鎖の基底状態
3. 学会等名 量子スピン系研究会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 大西弘明
2. 発表標題 フラストレート強磁性鎖の動的な多極子構造因子
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 H. Onishi
2. 発表標題 Dynamical octupole structure factor of frustrated ferromagnetic chain
3. 学会等名 Joint European Magnetic Symposia (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 H. Onishi
2. 発表標題 Magnon-pair excitation and transport in spin nematics
3. 学会等名 Frontiers of Statistical Physics (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 大西弘明
2. 発表標題 フラストレート量子スピン鎖の磁気励起とスピン伝導
3. 学会等名 物性研究所スパコン共同利用・CCMS合同研究会「計算物質科学の新展開」
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>ホームページ情報  <a href="http://www11.plala.or.jp/sces/onishi/index.html">http://www11.plala.or.jp/sces/onishi/index.html</a>  <a href="https://researchmap.jp/Hiroaki_Onishi">https://researchmap.jp/Hiroaki_Onishi</a></p>
---

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

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関		
米国	Brookhaven National Laboratory		
中国	Chinese Academy of Sciences		