

## 自己評価報告書

平成23年 5月15日現在

機関番号：24506

研究種目：基盤研究 (B)

研究期間：2008～2010

課題番号：20340096

研究課題名 (和文) スピナノチューブの異常量子現象の理論的・計算科学的研究

研究課題名 (英文) Theoretical and Numerical Study on Anomalous Quantum Phenomena in the Spin Nanotubes

研究代表者

坂井 徹 (SAKAI TORU)

兵庫県立大学・大学院物質理学研究科・教授

研究者番号：60235116

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：量子スピン系、ナノチューブ、スピギャップ、カイラリティ、スピン液体

## 1. 研究計画の概要

近年、いくつかの候補物質が合成されてその新機能探索に期待がかかるスピナノチューブと呼ばれる系のうち、最も単純でしかも量子効果・フラストレーションが強い三本鎖スピナノチューブについて、以下のような新しい量子現象の可能性とその機構を明らかにすることを目的として、理論的・計算科学的研究をする。

## (1) スピギャップ現象

高温超伝導の発現機構に関係することから注目されるスピギャップが、どのようなパラメータで形成されるか、格子の自由度も考慮した相図を求めて、物質設計の指針を与える。

## (2) 磁場中で起きる新奇な量子現象

スピン及びカイラリティの自由度に着目し、外部磁場によりどのような量子現象が起きるかを、理論的に予測し、磁場によって制御される新機能を明らかにする。

(1)(2)の問題について、スピナノチューブの理論模型に対して、場の理論・摂動論・数値的厳密対角化・密度行列繰り込み群を適用して理論的・数値的に解析する。

## 2. 研究の進捗状況

研究計画の概要にあげた二つの課題について、それぞれの進捗状況を記す。

## (1) スピギャップ現象

ユニットセルが正三角形のスピナノチューブでは、基底一重項と励起三重項の間にスピギャップが開くことが知られていたが、数値的厳密対角化と現象論的繰り込みを適用することによって、強いフラストレーションのために局所的なシングレット・ペアが形成され、その結果、自発的に並進対称性が

破れてスピギャップが生じるというメカニズムが明らかになった。また、場の理論・摂動論・密度行列繰り込み群による解析により、ユニットセルが二等辺三角形になる格子ひずみが生じると、このスピギャップが急激に消失する新しい量子相転移が起きることが判明した。このような急激なスピギャップの消失は、他に例を見ない現象である。上述の数値解析により、詳細な相図を得た。

## (2) 磁場中で起きる新奇な量子現象

数値的厳密対角化と密度行列繰り込み群による数値的な解析から、飽和磁化の3分の1で磁化が量子化される磁化プラトー現象が起きることがわかった。さらに、場の理論・摂動論による解析的な研究により、この磁化プラトー直上及びその周辺では、カイラル対称性が破れる新しい量子相転移が起きることも明らかになった。数値的厳密対角化・密度行列繰り込み群を用いた数値解析により、磁化プラトー及びカイラル秩序相の詳細な相図を描くことに成功した。

(1)及び(2)の成果により、格子の自由度及び外部磁場によって、スピナノチューブのスピギャップ及びカイラリティの自由度が制御できる可能性を理論的に示した。

## 3. 現在までの達成度

①当初の計画以上に進展している。

(理由)

当初の計画に基づき、スピナノチューブのスピギャップ形成のメカニズムを解明するとともに、格子の自由度を加えたときに、どのように変化するかを明らかにし、基底状態の相図を得ることができた。また、磁場中で起きる新現象としては、磁化の量子化による磁化プラトーの形成メカニズムの解明と、

その相図を得ることを目標としていたが、本研究ではその目標を達成したばかりでなく、カイラル秩序が生じるという、予想していなかった新しい現象の発見にもつながり、当初の計画を上回る成果が得られたと考えている。

#### 4. 今後の研究の推進方策

これまでの研究により、3本鎖スピナノチューブのスピングャップ及び磁化プラトアの形成メカニズムが明らかになるとともに、詳細な相図を導くことに成功した。その過程で、新たにカイラリティの自由度が、格子や外部磁場により制御できることが判明し、スピン・カイラリティ結合系としての発展が期待される。一方最近になって、電荷キャリアがドーピングされたスピナノチューブ合成の可能性が実験的に示された。そこで、より自由度が高く、新機能が期待される、電荷の自由度を持つスピナノチューブに焦点を移し、新しい研究を立ち上げるために、本研究の最終年度前年度の応募課題を申請したところ、その重要性が認められて採択された。これにより、本研究は新しい研究課題として、スピン・電荷・カイラリティの自由度を持つスピナノチューブの研究に変わる。自由度も増すため、より複雑な理論モデルを設定し、より精度の高い数値シミュレーション手法を適用して推進する予定である。とくに、カイラリティにより誘起される新しい超伝導機構の構築を最重要目標とする。

#### 5. 代表的な研究成果

(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5件)

- ① T. Sakai and H. Nakano: Critical magnetization behavior of the triangular- and kagome-lattice quantum antiferromagnets, *Physical Review B*, 83 (2011) 100405(R)-1-4.
- ② T. Sakai, M. Sato, K. Okunishi, K. Okamoto and C. Itoi: Quantum Spin Nanotubes --frustration, competing orders and criticalities, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 22 (2010) 403201-1-13.
- ③ T. Sakai, K. Okunishi, K. Okamoto, C. Itoi and M. Sato: Field Induced Exotic Phenomena of the S=1/2 Three-Leg Quantum Spin Nanotube, *Journal of Low Temperature Physics*, 159 (2010) 55-58.
- ④ K. Okunishi, S. Yoshikawa, T. Sakai and S. Miyashita: Quantum Phase Transition of a Triangular Lattice Spin Tube and Edge Spin Effects, *International*

*Journal of Modern Physics*, C 20 (2009) 1423-1430.

- ⑤ T. Sakai, M. Sato, K. Okunishi, Y. Otsuka, K. Okamoto and C. Itoi: Quantum phase transitions of the asymmetric three-leg spin tube, *Physical Review B* 78 (2008) 184415-1-11.

[学会発表] (計4件)

- ① T. Sakai: Quantum Spin Dynamics of the Kagome Lattice Antiferromagnets, International Symposium on Dynamics and Manipulation of Quantum Systems, 2011年1月28日, 六本木・東京
- ② T. Sakai: Topological Aspects of the Quantum Spin Nanotube, International and Interdisciplinary Workshop on Novel Phenomena in Integrated Complex Sciences: from Non-living to Living System, 2010年10月14日, 京都
- ③ K. Okunishi: Quantum Phase Transitions of Three-Leg Spin Nanotubes, International Workshop on Statistical Physics of Quantum Systems, 2010年8月2日, 東京大学生産技術研究所
- ④ T. Sakai: Exotic Quantum Phase Transitions in the S=1/2 Three-Leg Spin Tube, International Conference on Statistical Physics, 2010年7月23日, Cairns (Australia)

[図書] (計0件)

[産業財産権]

○出願状況 (計0件)

名称:  
発明者:  
権利者:  
種類:  
番号:  
出願年月日:  
国内外の別:

○取得状況 (計0件)

名称:  
発明者:  
権利者:  
種類:  
番号:  
取得年月日:  
国内外の別:

[その他]

ホームページ

<http://cmt.spring8.or.jp>