

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 6 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

研究成果の概要（和文）： $S=1/2$ 三本鎖スピナノチューブを数値的対角化と密度行列繰り込み群を用いた計算科学的解析により、理論的に研究した。その結果、この系はユニットセルが正三角形から二等辺三角形に歪むような格子ひずみにより、スピギャップによって特徴づけられる量子相転移を示すことがわかった。

研究成果の概要（英文）：The $S=1/2$ three-leg spin nanotube was investigated theoretically using the numerical diagonalization and the density matrix renormalization group calculation. It was found that this system exhibits a quantum phase transition characterized by the spin gap with respect to the lattice distortion of each unit cell from the regular to isosceles triangle.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2008年度	3,300,000	990,000	4,290,000
2009年度	5,100,000	1,530,000	6,630,000
2010年度	4,900,000	1,470,000	6,370,000
年度			
年度			
総計	13,300,000	3,990,000	17,290,000

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、量子スピン系、ナノチューブ、カイラリティ

1. 研究開始当初の背景

カーボンナノチューブが新しい半導体デバイスとして、基礎的にも応用面でも注目されるようになって久しい。それは、ナノスケール性、低次元性に加えて、チューブという特殊なトポロジーが作り出す非常に強い量子効果がさまざまなエキゾチックな現象を引き起こすためである。最近、磁性を担う量子スピンがチューブ状に結合してできた新物質スピナノチューブが合成され、磁化測定等の実験から、一次元と二次元の間での性質を持つ新しい低次元磁性体

となる可能性が示唆された。そこで世界に先駆けて、この新しいスピナノチューブの量子物性を理論的に探るために本研究がスタートした。

2. 研究の目的

三本鎖スピナノチューブに期待される以下のような量子物性の可能性を明らかにすることが本研究の目的であった。

(1) 磁場によって誘起されるカイラル秩序・不均一磁化・非整合秩序などの新奇な

量子相の実現可能性を理論的・数値的に確認し、定量的な磁場中相図を作成する。

(2)フォノンや圧力の効果によって起きるスピンギャップの急激な形成・消失の量子相転移がどのように実現されるか理論的に予測し、そこから引き出される新物性を探る。

3. 研究の方法

スピンナノチューブでは、低次元性・磁気フラストレーション・ナノスケール性などから、非常に強い量子効果が働き、従来の平均場近似・スピン波近似などの解析的手法が破綻する。そこで本研究では、解析的手法の中でも低次元系で信頼度の高い、摂動論とボゾン化を定性的な解析に用いる。また、定量的な結論を導くために、(1)数値的厳密対角化・(2)密度行列繰り込み群法という大規模数値計算を用いる。

4. 研究成果

スピンナノチューブのうち、最も量子効果とフラストレーションの強い3本鎖スピンチューブに焦点を絞り、新しい量子現象を理論的に研究した。従来の研究により、断面が正三角形の3本鎖スピンチューブは大きいスピンギャップを持つと考えられてきたが、我々の提案した新しいハバードモデルに基づく有効理論によると、断面が正三角形であっても鎖間相互作用が弱い場合にはギャップがなくなり、鎖間相互作用を変化させたときには、スピンギャップ相とギャップレス相の間の量子相転移が起きることが判明した。また、この有効理論による定性的な結論を、数値的厳密対角化・密度行列繰り込み群を用いた大規模数値解析と、現象論的繰り込みやレベルスペクトロスコピーと呼ばれる理論解析により、定量的に立証し、相図を得た。

また、有限クラスターの数値的厳密対角化と有限サイズスケリングによる従来の理論解析により、チューブ断面の三角形上の交換相互作用が、鎖方向の相互作用に比べて十分大きい場合には、飽和磁化の3分の1のところ磁場誘起スピンギャップによる磁化プラトーが出現することがわかっているが、本研究により、断面を二等辺三角形に歪ませた場合には、二等辺の結合が強い場合と、残りの1辺の結合が強い場合では、プラトー形成のメカニズムが異なり、その間には量子相転移があることが明らかになった。

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20件)

T. Sakai, M. Sato, K. Okamoto, K. Okunishi and C. Itoi, Quantum Spin Nanotubes

---frustration, competing orders and criticalities, J. Phys.: Condens. Matter 査読有, 22, 2010, 403201-1-13. (Topical review).

T. Sakai : Numerical Exact Diagonalization Study on a Phonon-Assisted Hole Paring in the High-Tc Cuprates, Physica C, 査読有, 470, 2010, S80-81.

H. Nakano and T. Sakai: Magnetization Process of the Kagome Lattice Antiferromagnet, J. Phys. Soc. Jpn. (Letter), 査読有, 79, 2010, 053707-1-4.

T. Tonegawa, K. Okamoto and T. Sakai: First-Order Phase Transition between One-Third Magnetization Plateau States in an Anisotropic (S, S') Spin Alternating Chain, Physica Status Solidi B, 査読有, 247, 2010, 688-690.

T. Sakai, T. Tonegawa and K. Okamoto: Field-Induced Nematic Phase in the Spin Ladder System with Easy-Axis Anisotropy, Physica Status Solidi B, 査読有, 247, 2010, 583-585.

T. Sakai, T. Tonegawa and K. Okamoto: Field-Induced Nematic Phase in the Spin Ladder System with Easy-Axis Anisotropy, Physica Status Solidi B, 査読有, 247, 2010, 583-585.

T. Tonegawa, H. Nakano, T. Sakai, K. Okamoto, K. Okunishi and K. Nomura: Half Magnetization Plateau of a Frustrated S=1 Antiferromagnetic Chain, J. Phys. Conf. Ser., 査読有, 200, 2010, 022065-1-4.

T. Sakai, T. Tonegawa and K. Okamoto: Magnetization Process of the S=1/2 Distorted Diamond Spin Chain with the Dzyaloshinsky-Moriya interaction, J. Phys. Conf. Ser., 査読有, 200, 2010, 022052-1-4.

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, J. Low Temperature Phys., 査読有, 159, 2010, 55-58.

K. Okunishi, S. Yoshikawa, T. Sakai and S. Miyashita: Quantum Phase Transition of a Triangular Lattice Spin Tube and Edge Spin Effects, Int. J. Mod. Phys. C, 査読有, 20, 2009, 1423-1430.

T. Sakai, T. Tonegawa and K.

Okamoto: Elementary excitations and spin dynamics in nanowire quantum magnets, Int. J. Mod. Phys. C, 査読有, 20, 2009, 1467-1476.

Y. Yoshida, T. Kawae, Y. Hosokoshi, K. Inoue, N. Maeshima, K. Okunishi, K. Okamoto and T. Sakai: Magnetic Field versus Temperature Phase Diagram of the Spin-1/2 Alternating-Bond Chain Compound F_5PNN , J. Phys. Soc. Jpn., 査読有, 78, 2009, 074716-1-5.

M. Fujisawa, K. Shiraki, S. Okubo, H. Ohta, M. Yoshida, H. Tanaka and T. Sakai: Dzyaloshinsky-Moriya Interaction in the $S=1/2$ Quasi-One-Dimensional Antiferromagnet $Cu_2Cl_4 \cdot H_8C_4SO_2$ as Determined via High-Frequency ESR, Phys. Rev. B, 査読有, 80, 2009, 012408-1-4.

M. Okumura, S. Yamada, M. Machida and T. Sakai: Polarization Plateau in Atomic Fermi Gas Loaded on Triangular Optical Lattice, Phys. Rev. A, 査読有, 79, 2009, 061602(R)-1-4.

T. Sakai, T. Tonegawa and K. Okamoto: Two-step quantum spin flop transition in spin ladders, J. Phys.: Conf. Series., 査読有 150, 2009, 042169-1-4.

T. Tonegawa, T. Sakai, K. Okamoto and M. Kaburagi: Ground-State Phase Diagram of an $(S, S')=(1, 2)$ Spin-Alternating Chain with Competing Single-Ion Anisotropies, J. Phys.: Conf. Series., 査読有 145, 2009, 012066-1-4.

T. Sakai, K. Okamoto and T. Tonegawa: Field-Induced Incommensurate Order and Possible Supersolid in the $S=1/2$ Frustrated Diamond Chain, J. Phys.: Conf. Series., 査読有, 145, 2009, 012065-1-4.

T. Sakai, M. Sato, K. Okunishi, Y. Otsuka, K. Okamoto and C. Itoi: Quantum phase transitions of the asymmetric three-leg spin tube, Phys. Rev. B, 査読有, 78, 2008, 184415-1-11.

T. Sakai: Numerical Diagonalization Study on a Phonon-assisted Hole Pairing Mechanism of an Extended t -J Holstein Model, J. Phys.: Conf. Series., 査読有, 108, 2008, 012026-1-4.

T. Sakai: Possible Mechanism of Charge Stripe Formation Based on the Ring Exchange Interaction, Physica C, 査読有, 468, 2008, 1163-1165.

[学会発表](計 10 件)

T. Sakai: Magnetization Process of

Kagome Lattice Antiferromagnet, magnetism and superconductivity meeting, 2010年5月27日, Institut Laue Langevin, グルノーブル(フランス)

T. Sakai: Magnetization Ramp of Kagome Lattice Antiferromagnet, 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, (東京都)

T. Sakai: Topological Aspects of the Quantum Spin Nanotube, International and Interdisciplinary Workshop on Novel Phenomena in Integrated Complex Sciences, 2010年10月14日, 京都コープイン(京都府)

T. Sakai: Field-induced quantum phase transitions of the asymmetric three-leg spin tube, American Physical Society March Meeting, 2010年3月16日, Portland(USA)

T. Sakai: Magnetization process of the $S=1/2$ distorted diamond spin chain, International Symposium: High Magnetic Field Spin Science in 100T, 2009年12月8日, 仙台(宮城県)

T. Sakai: Selection Rules for ESR Direct Transition of the Spin Gap and their Applications, Electron Magnetic Resonance of Strongly Correlated Spin Systems, 2009年11月9日, 神戸(兵庫県)

T. Sakai: Quantum Phase Transition of the 3-Leg Spin Tube, International Workshop on Dynamics and Manipulation of Quantum Systems, 文京区(東京都)

T. Sakai: Field-Induced Nematic Phase in the Spin Ladder System with Easy-Axis Anisotropy, International Conference on Quantum Criticality and Novel Phases, 2009年8月3日, Dresden(Germany)

T. Sakai: Magnetization Process of the $S=1/2$ Distorted Diamond Spin Chain with the Dzyaloshinsky-Moriya interaction, International Conference on Magnetism (ICM), 2009年7月30日, Karlsruhe(Germany)

T. Sakai: Quantum Phase Transitions of the Three-Leg Spin Tube, Joint European Japanese Conference: Frustration in Condensed Matter, 2009年5月13日, Lyon (France).

〔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〕

ホームページ等

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

6. 研究組織

(1) 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

(2) 研究分担者

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
野村拓司 (NOMURA TAKUJI)
日本原子力研究開発機構・量子ビーム応用
研究部門・副主任研究員
研究者番号：90373240
妹尾仁嗣 (SEO HITOSHI)
理化学研究所・基幹研究所・専任研究員
研究者番号：30415054
利根川孝 (TONEGAWA TAKASHI)
神戸大学・理学部・名誉教授
研究者番号：80028167
岡本清美 (OKAMOTO KIYOMI)
東京工業大学・大学院理工学研究科・助教
研究者番号：10114860

奥西巧一 (OKUNISHI KOUICHI)
新潟大学・自然科学系・准教授

(3) 連携研究者

佐藤正寛 (SATO MASAHIRO)
青山学院大学・理工学部・助教
研究者番号：90425570