

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 6 月 10 日現在

機関番号：24506  
研究種目：基盤研究(B)  
研究期間：2011～2014  
課題番号：23340109  
研究課題名(和文) スピナノチューブにおけるスピン・電荷・カイラリティが創る新しい量子現象の理論  
  
研究課題名(英文) Theory of Novel Quantum Phenomena Created by Spin, Charge, and Chirality in the Spin Nanotube  
  
研究代表者  
坂井 徹 (SAKAI, TORU)  
  
兵庫県立大学・物質理学研究科・教授  
  
研究者番号：60235116  
交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 12,900,000円

研究成果の概要(和文)：スピナノチューブと呼ばれる系について、大規模数値対角化と密度行列繰り込み群を用いて理論的に研究した。その結果、スピン異方性を変化させるとスピンギャップ相からギャップレス相への新しい量子相転移が起きることが判明した。また、量子効果による多スピン交換相互作用により、別のメカニズムに基づくスピンギャップ相が実現することもわかった。さらに、我々の理論的研究により、外部磁場によって新しいカイラル液体相が実現することが予言された。

研究成果の概要(英文)：The spin nanotube was theoretically investigated using the large-scale numerical diagonalization and density matrix renormalization group analysis. We found a novel quantum phase transition from the spin gap phase to the gapless spin liquid phase with respect to the spin anisotropy. It was also found that the quantum multispin exchange interaction induces another spin gap phase based on a different mechanism. In addition our theoretical study predicted a novel magnetic field induced phase, which is the chiral liquid phase.

研究分野：物性理論、計算物理学

キーワード：量子スピン系 ナノチューブ スピンギャップ フラストレーション 量子相転移 カイラリティ

## 1. 研究開始当初の背景

磁性を持つナノチューブとして将来の応用が期待されるスピナノチューブと呼ばれる物質がいくつか合成され、その量子性とフラストレーションの効果からくる新現象についての研究が始まっていた。とくに理論的研究が先行していたので、これをリードして国際的な主導権をとるためにも、大規模数値シミュレーションによる理論予測が急がれていた。

## 2. 研究の目的

近年、磁性イオンがチューブ状に並んで相互作用する量子スピナノチューブと呼ばれる物質がいくつか合成され、磁性を持つナノチューブとして、低次元性から来る強い量子効果やチューブという特殊なトポロジーからくる新現象の発見が期待されている。このうち、最も単純な構造を持つ3本鎖スピナノチューブについてのこれまでの理論的研究により、断面の三角形の持つカイラル対称性に起因したスピギャップが存在すること、このギャップが格子ひずみに対して異常なほど敏感であること、さらに磁場中でカイラル秩序や不均一磁化秩序が出現する新奇な量子相転移が起きる可能性があることが示唆された。一方、物質合成の技術が進み、3本鎖だけでなく、5本鎖、7本鎖など、鎖数の多いスピナノチューブも合成され、さらにキャリア・ドーピングすることで電導体化することも可能であることが判明した。このような急速な新展開を踏まえ、本研究では、多数本鎖の量子スピナノチューブまで含めて、大規模数値シミュレーションなどの解析により、以下のような新奇量子現象を理論的に予言し、検証実験を提案することを目的とする。

- (i) 新奇な磁場誘起量子相：カイラル秩序・不均一磁化・非整合秩序など
- (ii) 異方性やリング交換相互作用に誘起されるスピギャップ形成・消滅の

## 量子相転移

- (iii) スピンまたは電荷のバリステック伝導、及び新奇超伝導

さらに、実験研究グループと協力して本研究の成果をいち早く検証し、量子スピナノチューブを磁性・電導というマルチ・ファンクションを持つ新材料開発に結びつけ、新しいナノサイエンスの研究分野を開拓するとともに、国際的な主導権を取ることを目標とする。

## 3. 研究の方法

スピナノチューブでは、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た。また、定量的な結論を導くために、(1)数値的厳密対角化・(2)量子モンテカルロシミュレーション・(3)密度行列繰り込み群法という大規模数値計算を用いた。

## 4. 研究成果

(1)  $S=1/2$  の3本鎖スピナノチューブについて、ハイゼンベルグ模型の密度行列繰り込み群と数値的厳密対角化による数値解析により理論的に研究した。その結果、以前のスピン波近似による研究により定性的に予測されていた磁場誘起カイラル秩序相の存在を定量的に示すことに成功した。また、三角ユニット内の反強磁性的交換相互作用と、鎖方向の反強磁性的交換相互作用の比  $J'/J$  を変化させた場合に、飽和磁化の3分の1の磁化付近において、スピギャップによる磁化プラトー相のほかに、カイラル秩序相、さらにカイラル秩序が量子ゆらぎで融解したカイラル液体相が生じる量子相転移が起きることが判明した。カイラル秩序相及びカイラル液体相は、3分の1磁化だけでなく、周

辺の有限の磁化領域にも広がっており、密度行列繰り込み群の数値解析により、相境界となる臨界磁場の値を定量的に求めることが可能となった。この成果により、磁場によるカイラリティの制御が可能であることを理論的に示したことになる。

(2) 以前の密度行列繰り込み群と数値対角化の解析により導かれた、スピギャップ形成・消滅の量子相転移を、量子化されたベリー位相というトポロジカルな秩序パラメータで理論的に記述することに成功した。この成果により、スピギャップ相とギャップレス相の相境界をより明確に決定している手法を確立した。

(3)  $S=1/2$ の3本鎖スピナノチューブについて、ユニットセルは正三角形に固定して、格子の形状を保ったまま、スピン空間に異方性を導入した理論模型について、数値的厳密対角化と有限サイズスケーリングの手法を用いて、その物性を調べた。有限サイズスケーリングの手法の1つである現象論的繰り込みに基づく解析によると、各結合定数における容易面型(XY的)異方性が十分強ければ、スピギャップが消失してギャップレスのスピン液体が実現することが判明した。そこで、この手法を用いて、鎖方向と桁方向の結合定数の比を変化させたときの異方性の量子相転移点を定量的に求め、スピギャップ相とギャップレスのスピン液体相を含む基底状態の相図を示した。その結果、格子歪みの無いユニットセルが正三角形のスピナノチューブでも、現実的な結合定数の異方性があれば、ギャップレスの量子スピン液体が実現することが判明した。この基底状態相図に基づいて、今後のスピナノチューブ実現に向けた新物質設計の指針を示した。

(4) スピナノチューブのなかでも最も量子効果が大きく、フラストレーションが強い $S=1/2$  三本鎖スピナノチューブに着目し、理論的・計算科学的解析を行った。これまでの数値的厳密対角化と密度行列繰り込み群による研究により、鎖間相互作用が十分強い場合には、2つのユニットセルにおいてシングレット・ダイマーを敷き詰めた2倍周期構造が生じて、スピギャップが開くことが示されている。一方、現実の候補物質となる強相関電子系では、最も強い2スピン間のハイゼンベルグ交換相互作用の次に強く効いてくるのは、4スピンのプラケット上におけるリング交換相互作用であることが知られている。そこで、このリング交換相互作用の効果を調べるため、最近接の2スピン交換相互作用からなる理論模型に、リング交換相互作用を加えて、これを次第に強くしたときに、基底状態がどのように変化するかを、数値的厳密対角化と有限サイズスケーリングを適用して研究した。その結果、リング交換相互作用が2スピン交換相互作用の数パーセントくらいの強さになると、量子相転移が起こり、新しいスピギャップ相が実現することが判明した。詳細な有限サイズスケーリングの解析によると、この量子相転移点ではスピギャップが閉じてギャップレスになること、従来のスピギャップ相ではシングレット・ダイマーが同じプラケット上に生じやすいのに対し、新しいスピギャップ相では、シングレット・ダイマーは同じプラケット上に並ばない傾向があることがわかった。

#### 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)

- ① H. Nakano, T. Sakai, Instability of a ferromagnetic state of a frustrated  $S=1/2$  Heisenberg antiferromagnet

- in two dimensions, Japanese Journal of Applied Physics, 査読有、Rapid Communication、Vol. 54 (2015) 030305-1-4、10.7566/JJAP.54.030305
- ② T. Sakai, K. Okamoto, Exotic Quantum Phenomena in the Spin Nanotubes, JPS Conf. Proc.、査読有、1 (2014) 012025-1-4、10.7566/JPSCP.1.012025
- ③ T. Sakai, K. Okamoto, Exotic Magnetism of the Quantum Spin Nanotube, JPS Conf. Proc.、査読有、2 (2014) 010208-1-4、10.7566/JPSCP.2.010208
- ④ K. Okamoto, T. Tonegawa, T. Sakai, M. Kaburagi, Edge Modes in the Intermediate-D and Large-D Phases of the  $S = 2$  Quantum Spin Chain with XXZ and On-Site Anisotropies、JPS Conference Proceedings、査読有、3 (2014) 014002-1-7、10.7566/JPSCP.3.014022
- ⑤ H. Nakano, M. Isoda, T. Sakai, Magnetization Process of the  $S=1/2$  Heisenberg Antiferromagnet on the Cairo Pentagon Lattice, J. Phys. Soc. Jpn.、査読有、83 (2014) 053702-1-4、10.7566/JPSJ.83.053702
- ⑥ H. Nakano, T. Sakai, Anomalous Quantum Magnetization Behaviors of the Kagome and Triangular Lattice Antiferromagnets、JPS Conference Proceedings、査読有、3 (2014) 014003-1-6、10.7566/JPSCP.3.014003
- ⑦ T. Sakai, H. Nakano, K. Okunishi, Exotic Quantum Phase Transition of the Spin Nanotube, Journal of Physics: Conference Series、査読有、568 (2014) 042024-1-5、10.1088/1742-6596/568/4/042024
- ⑧ T. Sakai, H. Nakano, Novel Field Induced Quantum Phase Transition of the Kagome Lattice Antiferromagnet、Journal of Physics: Conference Series、査読有、568 (2014) 042025-1-6、10.1088/1742-6596/568/4/042025
- ⑨ H. Nakano, T. Sakai, Y. Hasegawa, Spin-Flop Phenomenon of Two-Dimensional Frustrated Antiferromagnets without Anisotropy in Spin Space, J. Phys. Soc. Jpn.、査読有、83 (2014), 084709-1-7、10.7566/JPSJ.83.084709
- ⑩ M. Isoda, H. Nakano, T. Sakai, Frustration-Induced Magnetic Properties of the Spin-1/2 Heisenberg Antiferromagnet on the Cairo Pentagon Lattice, J. Phys. Soc. Jpn. 83 (2014), 084710-1-7、10.7566/JPSJ.83.084710
- ⑪ H. Nakano, T. Sakai, Anomalous Behavior of the Magnetization Process of the  $S=1/2$  Kagome-Lattice Heisenberg Antiferromagnet at One-Third Height of the Saturation, J. Phys. Soc. Jpn.、査読有、83 (2014), 104710-1-7、10.7566/JPSJ.83.104710
- ⑫ 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, J. Phys. Soc. Jpn.、査読有、83 (2014) 034714-1-6、10.7566/JPSJ.83.034714
- ⑬ Hironori Yamaguchi, Hirotsugu Miyagai, Tokuro Shimokawa, Kenji Iwase, Toshio Ono, Yohei Kono, Naoki Kase, Koji Araki, Shunichiro Kittaka, Toshiro Sakakibara, Takashi Kawakami, Kouichi Okunishi, Yuko Hosokoshi, Fine-Tuning of Magnetic Interactions in Organic Spin Ladders, J. Phys. Soc. Jpn.、査読有、83 (2014) 033707-1-4、10.7566/JPSJ.83.033707
- ⑭ Hiroshi Ueda, Kouichi Okunishi, Tomotoshi Nishino, Doubling of Entanglement Spectrum in Tensor Renormalization Group, Phys. Rev. B、査読有、89 (2014) 075116-1-10、10.1103/PhysRevB.89.075116
- ⑮ K. Okamoto, Inversion Phenomena of the Anisotropies of the Hamiltonian and the Wave Function in Quantum Spin Chains, JPS Conf. Proc.、査読有、1 (2014) 012031-1-4、10.7566/JPSCP.1.012031
- ⑯ K. Hijii and T. Sakai, Ground state phase diagram of an  $S=1/2$  two-leg Heisenberg spin ladder system with negative four-spin interaction, Phys. Rev. B、査読有、88 (2013) 104403-1-8、10.1103/PhysRevLett.112.068103
- ⑰ T. Sakai and H. Nakano, Novel Field-Induced Quantum Phase Transition of the Kagome-Lattice Antiferromagnet, J. Korean Phys. Soc.、査読有、63 (2013) 601-604.、10.3938/jkps.63.601

- ⑱ H. Nakano and T. Sakai, The Two-Dimensional  $S=1/2$  Heisenberg Antiferromagnet on the Shuriken Lattice - a Lattice Composed of Vertex-Sharing Triangles-, J.Phys. Soc. Jpn., 査読有、 82 (2013) 083709-1-4、 10.7566/JPSJ.82.083709
- ⑲ 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、 110(2013) 157205-1-5、 10.1103/PhysRevLett.110.157205.
- ⑳ 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、 .63 (2013) 591-595、 10.3938/jkps.63.591

[学会発表] (計 12 件)

- ① T. Sakai、 Novel Field Induced Quantum Phase Transition of Kagome Lattice Antiferromagnet, International Conference on Low Temperature Physics (LT)、2014年8月6~2014年8月13日、ブエノスアイレス(アルゼンチン)
- ② T. Sakai、 Exotic Quantum Phase Transition of the Spin Nanotube、 International Conference on Low Temperature Physics (LT)、2014年8月6~2014年8月13日、ブエノスアイレス(アルゼンチン)
- ③ T. Sakai、 Field-Induced Quantum Critical phenomena in Kagome-Lattice Antiferromagnet、 国際会議 Highly Frustrated Magnetism、2014年7月7日~2014年7月11日、ケンブリッジ(英国)
- ④ T. Sakai、 Spin Nanotubes、 International Meeting on Spin in Organic Semiconductors、2014年10月13~17日、イーグレ姫路(兵庫県)
- ⑤ T. Sakai、 Singlet-Triplet Transition of ESR in Gapped Spin Systems、 Asia-Pacific EPR/ESR Society、 International EPR(ESR) Society 合同シンポジウム、2014年11月12日~16日、東大寺文化センター(奈良県)
- ⑥ T. Sakai、 A Quantum Phase Transition of the Distorted Kagome Lattice Antiferromagnet in Magnetic Field、

Novel Quantum States in Condensed Matter 2014、2014年11月4日~12月5日、京都大学基礎物理学研究所 湯川記念館(京都府)

- ⑦ T. Sakai、(招待講演)Topological Aspects of the Quantum Spin Nanotubes、ISSP International Workshop “Emergent Quantum Phases in Condensed Matter”、2013年6月3日~6月21日、東京大学物性研究所(千葉県)
- ⑧ 奥西巧一、(招待講演)数値繰り込み群の発展-密度行列繰り込み群から MERA まで、日本物理学会、2014年3月27日~3月30日、東海大学(神奈川県)
- ⑨ 坂井徹、(招待講演)籠目格子反強磁性体の理論、日本物理学会、2014年3月27日~3月30日、東海大学(神奈川県)
- ⑩ 坂井徹、(招待講演)スピンナノチューブの物理、日本物理学会、2013年9月25日~9月28日、徳島大学(徳島県)
- ⑪ K. Okamoto、Inversion Phenomena of the Hamiltonian and the Wave Function in Quantum Spin Chains、12<sup>th</sup> Asia Pacific Physics Conference、2013年7月14日~7月19日、幕張メッセ(千葉県)
- ⑫ H. Nakano、(招待講演)Two-Dimensional Frustrated Antiferromagnets by Large-Scale Parallel Calculations of Numerical Diagonalizations、JAEA Synchrotron Radiation Research Symposium、SPRING-8(兵庫県)

[図書] (計 1 件)

- ① 坂井徹、共立出版、計算物理学、2014、137

[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：  
出願年月日：  
取得年月日：  
国内外の別：

[その他]

ホームページ等

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

## 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

肘井 敬吾 (HIJII, Keigo)

日本原子力研究開発機構・量子ビーム応用  
研究センター・博士研究員

研究者番号：00444068

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

磯田 誠 (ISODA, Makoto)

香川大学・教育学部・教授

研究者番号：10184590

奥西巧一 (OKUNISHI, Kouichi)

新潟大学・自然科学系・准教授

研究者番号：30332646

利根川 孝 (TONEGAWA, Takashi)

神戸大学・理学研究科・名誉教授

研究者番号：80028167

野村 拓司 (NOMURA, Takuji)

日本原子力研究開発機構・量子ビーム応用  
研究センター・研究員

研究者番号：90373240