

平成 30 年 5 月 29 日現在

機関番号：12401

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2013～2017

課題番号：25400389

研究課題名(和文) 量子スピン液体から生まれる新奇な磁気秩序の理論的研究

研究課題名(英文) Theoretical Studies of the novel magnetic orders emergent from quantum spin liquids

研究代表者

飛田 和男 (Hida, Kazuo)

埼玉大学・理工学研究科・教授

研究者番号：20133704

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,700,000円

研究成果の概要(和文)：種々のダイヤモンド鎖、フラストレート梯子系、フラストレート強磁性・反強磁性ボンド交替鎖、高スピンハイゼンベルグ鎖などについて、場の理論や厳密解を用いた解析計算に加え、数値対角化、密度行列繰り込み群、熱的量子純粋状態法などの数値的手法を用いて基底状態・有限温度の振るまいを明らかにした。特に、基底状態における、フラストレーションに誘起される部分フェリ磁性相、並進対称性の自発的破れを伴うハルデン相・フェリ磁性相、逐次トポロジカル量子相転移などの特異な量子現象がフラストレーションによりどのように誘起されるか、これらの基底状態の性質が有限温度の振る舞いにどのように反映されるかを明らかにした。

研究成果の概要(英文)：The ground-state and finite-temperature properties of various types of diamond chains, frustrated Heisenberg ladders, frustrated ferromagnetic-antiferromagnetic alternating chains, and high spin Heisenberg chains are investigated by the numerical methods such as exact diagonalization, density matrix renormalization group, and thermal pure quantum state methods, in addition to the analytical methods such as field theoretical analyses and exact solutions. Among them, we have clarified how the exotic quantum phenomena such as the partial ferrimagnetic phase, Haldane and ferrimagnetic phases with spontaneous translational symmetry breakdown, and the successive topological quantum phase transitions are induced by frustration and how the exotic properties of these ground states are reflected in the finite temperature behaviors.

研究分野：物性理論・統計物理学

キーワード：低次元量子磁性体 フラストレーション ハルデン相 フェリ磁性相 量子相転移 トポロジカル相 並進対称性の自発的破れ 密度行列繰り込み群

1. 研究開始当初の背景

低次元量子磁性体の基底状態において、強い量子揺らぎのために実現する量子スピン液体状態は、酸化物高温超伝導の機構との関連から広く注目を浴び、研究代表者を始め世界中の研究者によって最近20年以上にわたって活発に研究されてきた。その結果、これらの状態は単なる没個性の非磁性状態ではなく、量子的な揺らぎとして多様な構造を包含していることが明らかになった。これらの現象は、近年、さらに一般的な概念としての、トポロジカル相や量子エンタングルメントの磁性体における現れとしても再認識されつつあり、これまでの研究の成果が新たな視点から見直されつつある。

さらに、現代の新物質創製技術、微細加工技術により、種々の新奇な物質を現実により出すことができるようになり、低温、強磁場、高圧等の極限環境での実験技術の進歩ともあいまって多様な量子現象が観測できるようになった。また、光学格子中にトラップされた原子系のように、これまでの「物質」の概念を越えた系においては、これまでになく自由にコントロールされた条件下で新規な多体量子現象を観測することが可能になっている。これに伴い、理論的にもこれまでになく幅広い視野を持って多彩な現象を研究の対象とすることができるようになった。

このような状況のもと、研究代表者は、フラストレーションによって引き起こされる、トポロジカルに異なる量子スピン液体相の間の相転移や、自発的に並進対称性の破れたハルデン相などについて研究を進めてきた。さらに、これら量子スピン液体状態を母胎とし、観測可能な巨視的秩序が表に現れる現象の例として、不純物誘起磁気秩序相、異方性の空間変化によるストリング秩序の凍結としての長周期反強磁性相や、異方性の空間変化やフラストレーションによる部分フェリ磁性相などについて研究を進めてきた。

このような系の理論的研究は様々な数値的・解析的手法を組み合わせて進めることが不可欠である。数値的方法に関しては、近年のコンピューターハードウェア、コンパイラおよび計算アルゴリズムのめざましい進歩により、飛躍的に高度な計算が可能となってきた。また、解析的手法に関しては、現代的な場の理論の応用の恰好の舞台でもある。これらの手法を問題に応じて適切に使いこなすことにより、これまで解けなかった種々の問題に解決の道が開かれつつある。

2. 研究の目的

磁性の研究は強磁性をはじめ種々の磁性秩序の研究から始まったといえる。しかし、高温超伝導の母胎としての量子スピン液体状態の重要性が指摘されて以来、量子スピン液体状態の研究が飛躍的に発展した。本研究計画は、ここでさらに翻り、物質合成技術の進歩や新たな理論的概念の登場をふまえ、隠れた秩序を持つ量子スピン液体状態をトポロ

ジカル相として理解し、そこからどのような秩序状態が顕在化するかを新たな視点から理論的に解明する事を目的とした。さらに、それらを実験室で実現する指針を与えることも目指した。また、本研究計画の進行中に合成・発見されるであろう数多くの新奇な量子磁性を示す物質についても、迅速に理論的解明に取り組んだ。

これらの研究は、近年進展が著しい数値的手法に加え、場の理論や厳密解の方法など解析的手法を駆使して進めた。

3. 研究の方法

①. 部分フェリ磁性状態については解析的に低エネルギー有効理論を構築した。

②. 歪みのないダイヤモンド鎖については、解析的に基底状態を構成した。

③. 解析的なアプローチが不可能なモデルについて、大規模数値計算として、Lanczos法による数値対角化、密度行列繰り込み群、熱的量子純粋状態法を用いて基底状態や有限温度の振る舞いを明らかにした。これらの計算のためワークステーションを計4台導入した。

④. 他大学等の研究者を招聘し、意見交換を行った。

⑤. 日本物理学会をはじめする学術的会合において成果発表を行い、意見交換を行った。また、研究結果をJ. Phys. Soc. Jpn.などの学術誌に公表した。

⑥. 研究に協力する卒業研究生や大学院生のパソコンを順次最新のものに更新し、結果の解析や準備計算を行った。

4. 研究成果

(1) ダイヤモンド鎖

① スピン1と1/2からなる異方的反強磁性混合スピンXXZダイヤモンド鎖(論文⑤、講演④、⑩)

スピン1と1/2からなる異方的反強磁性混合スピンXXZダイヤモンド鎖では、等方的な場合やスピン1のみに異方性がある場合と同様、基底状態は強いフラストレーションにかかわらず厳密に求められ、有限長のクラスタとその間にあるスピン1/2ダイマーの基底状態の直積として与えられる。それぞれのクラスタは異方性が交替する長さ奇数長の開放端S=1反強磁性鎖とみなせる。実際に基底状態を与えるクラスタ長は系のパラメータにより異なる。基底状態の主な特徴は以下の通りである。

(a) クラスタの基底状態はクラスタの全スピンのz成分が±1と0の場合があり、前者の場合系全体は常磁性、後者の場合非磁性である。

(b) 一般にクラスタ長があまり大きい相は存在せず、比較的小さいクラスタからなる相から、一挙に全系にわたるクラスタからなる相に転移する。

(c) 全系にわたるクラスタからなる状態は代

表者が以前研究した異方性が交替する無限長 $S=1$ 反強磁性鎖の基底状態と同等であり、Haldane 相、large-D 相、倍周期ネール相、通常のネール相に分けられる。

従って、比較的小さな系の対角化によりクラスタの基底エネルギーを求め、無限サイズ密度行列繰り込み群で異方性が交替する無限長 $S=1$ 反強磁性鎖の単位胞当たりの基底エネルギーを求めることにより基底状態相図を描くことができた。中でも倍周期ネール相は Haldane 相における隠れた秩序が異方性により顕在化した相と見なすことができる。

このモデルは、スピン $1/2$ 桁交替梯子系に異方性を導入したモデルの一つの極限に対応しており、利根川らによる研究結果との対応関係も明らかにした。

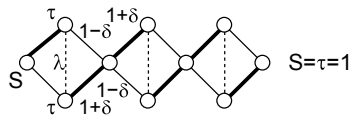
②スピン 1 のダイヤモンド鎖 (論文②、講演②、④、⑤)

福井大学の菊池らにより、スピン 1 の歪んだダイヤモンド鎖の物質の実験的研究が進み始めている。これを機会に、歪みのない場合とある場合について次のような研究を行った。

(a) 歪みのないダイヤモンド鎖

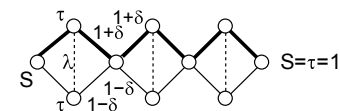
全パラメータ領域での基底状態の相図を厳密解に基づいて完成した。特に、スピン $1/2$ の場合と異なり、自発的に並進対称性の破れたフェリ磁性相が存在することがわかった。また、相境界の厳密な上限・下限を与えることができた。

(b) Type A の歪みがあるダイヤモンド鎖



DMRG とスピン数 18 の数値対角化で基底状態相図を調べた。 $m=1/3$ (m は飽和磁化に対する自発磁化の割合) のフェリ磁性相は歪みが入ることによりやや狭くなるが、存続することが分かった。 $m=1/6$ のフェリ磁性相は歪みが入ると急激に狭くなり、さらに歪みが大きくなると数値的には存在が確認できないほど狭くなる。また、フラストレーションの強い領域ではスピン 1 と $1/2$ の混合スピンドiamond鎖と同様に自発的に並進対称性の破れた Haldane 相が現れる。これらの相はひずみが大きくなると通常の Haldane 相に相転移し、歪みのない時に、中間的なフラストレーションの領域で生じるスピン 1 の Haldane 相につながる。

(c) Type B の歪みがあるダイヤモンド鎖



スピン数 18 の系についての数値対角化

により基底状態相図を調べた。フラストレーションの強い領域では、やはりスピン 1 と $1/2$ の混合スピンドiamond鎖と同様に、 $n+1$ 重に自発的に並進対称性の破れたフェリ磁性相が現れる。これらの相では自発磁化は $m=1/(3(n+1))$ である。歪みのない時の $m=1/3$ のフェリ磁性相は残り、 $m=1/6$ のフェリ磁性相は δ が入ると急激に狭くなり、 δ が 1 に近い領域では数値的には存在が確認できない。歪みのない時に存在するスピン 1 の Haldane 相は $\delta=1$ の場合を除き有限の幅で残る事が分かった。また、狭い部分フェリ磁性相がこれらのフェリ磁性相・Haldane 相の間に存在することをスピン数 72 に対する DMRG 計算によって確認することができた。

(2) スピン $1/2$ 桁交替梯子系 (講演⑫)

数値対角化・DMRG を用い、桁相互作用が強磁性・反強磁性に交替する梯子系についても基底状態相図を求めた。強磁性相・非磁性相以外に量子化フェリ磁性相、部分フェリ磁性相が現れることが分かった。さらに、非磁性相の中には少なくとも rung dimer 相と columnar dimer 相が現れる事が分かった。また、狭いフラストレーション誘起 Haldane 相やフェロネマティック相の存在も示唆された。

(3) 1 サイト異方性が交替するスピン 2 のハイゼンベルグ鎖 (論文⑥)

以前に研究した 1 サイト異方性が交替するスピン 1 のハイゼンベルグ鎖と同様のハルデン相、large-D 相、ネール相、倍周期ネール相に加え、広い範囲でスピン液体相、量子化フェリ磁性相、部分フェリ磁性相が現れる。ハルデン相は異方性の小さな狭い領域に限られることがわかった。スピン液体相から倍周期ネール相への相転移は数値的には直接転移と区別がつかないが、低エネルギー有効理論より、狭いスピンギャップ相を挟むことが示唆される。

(4) 最近接相互作用が強磁性・反強磁性に交替し、次近接相互作用が強磁性で交替する $S=1/2$ ハイゼンベルグ鎖 (論文③、④、⑦)

この系では、次近接相互作用の交替がないときは、非磁性相中の強磁性相に近い領域で、対称性に守られたトポロジカル相とトリヴィアル相が交互に現れる逐次相転移がおきることがわかっている。一方、次近接相互作用の一方が 0 になる場合は強磁性主鎖をもつデルタ鎖になる。この場合も、2008 年の本代表者の研究で複数のスピンギャップ相間の逐次相転移が存在することが分かっていたが、各スピンギャップ相の特徴付けは明らかでなかった。

本研究では iDMRG 法によるエンタングルメントスペクトルの数値計算よりデルタ鎖の場合を含め、対称性に守られたトポロジカル相とトリヴィアル相が交互に現れる逐次相転移がおきことを示した。

また、強磁性相と非磁性相の相境界、およびそこでの厳密解は次近接相互作用の交替の強さによらないことが解析的に分かるが、それだけではなくスピギャップ相間の相境界や各相内部でのエンタングルメントスペクトルも次近接相互作用の交替の強さにほとんど依存しないことがわかった。これは、古谷による非線形シグマ模型を使った解析をこの系に適用した結果とも整合している。

(5) 反強磁性非対称対角相互作用を持つスピン 1/2 強磁性梯子ハイゼンベルグモデル (講演⑧、⑨、⑩)

この系で対角相互作用の一つが 0 になると、(4)のモデルに帰着する。一方、2つの対角相互作用が等しいときはトポロジカル・トリヴィアル相逐次相転移がおきる事はないことが分かっている。そこで、対角相互作用の一つが 0 から増大するにつれ、逐次相転移の様相がどのように変化するかを、エンタングルメントスペクトルを用いて調べた。また、Haldane 相、強磁性相、Rung dimer 相、Columnar dimer 相が現れる事を示した。

(6) 強磁性脚・反強磁性脚・反強磁性桁を持つスピン 1/2 梯子ハイゼンベルグモデル (論文①、講演③)

基底状態において、Lieb-Mattis フェリ磁性相、部分フェリ磁性相、非磁性相が現れることを数値対角化により示した。また、部分フェリ磁性が起きる機構を非線形シグマ模型への変換や強結合極限からの摂動展開を用いて解析的に調べ、相図の大域的な構造や臨界指数について数値計算と整合する結果を得た。基底状態がインコメンシュレートな準長距離スピン相関を持ち、自発磁化のある朝永・ラディンジャー液体と見なせることも示した。

さらに、これらの基底状態の違いが有限温度の性質にどのように反映されるかを熱的量子純粋状態法により調べた。特に、部分フェリ磁性相でも強磁性相と同様、有限温度では、帯磁率が温度の 2 乗に反比例することを示唆する結果が得られ、その物理的機構を考察した。

(7) スピン 1 のフラストレートした強磁性・反強磁性交替鎖 (講演①)

DMRG により基底状態相図を調べた。スピン 1/2 の場合は、この系は強磁性・非磁性相境界において厳密解を持ち、非磁性状態ではトポロジカル・トリヴィアル逐次相転移を繰り返す事が分かっている。古谷らによる非線形シグマ模型を用いた解析では、このような逐次相転移がスピンの大きさによらず実現する事が予測されている。DMRG による数値計算では 1 回目の相転移は同定することができたが、2 回目以降を同定するに至らなかった。これは、スピンが大きい場合はエネルギーギャップが小さいこと、およびインコメンシュレートな短距離相関の存在が数値的な解析を困難にしていると考えられる。これらの解

決は今後の課題として残された。

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 7 件)

① K. Sekiguchi and K. Hida: Partial Ferrimagnetism in $S=1/2$ Heisenberg Ladders with a Ferromagnetic Leg, an Antiferromagnetic Leg, and Antiferromagnetic Rungs, J. Phys. Soc. Jpn. 86, 084706 (2017) 査読有.

DOI:10.7566/JPSJ.86.08470

② K. Hida and K. Takano: Ground State Phase Diagram of $S=1$ Diamond Chains, J. Phys. Soc. Jpn. 86, 033707 (2017) 査読有 DOI:10.7566/JPSJ.86.033707

③ K. Hida: Topological Phases of Spin-1/2 Ferromagnetic-Antiferromagnetic Alternating Heisenberg Chains with Alternating Next-Nearest-Neighbour Interaction, J. Phys. Soc. Jpn. 85, 124712 (2016) 査読有.

DOI:10.7566/JPSJ.85.124712.

④ K. Hida: Characterization of Topological Phases of Spin-1/2 Frustrated Ferromagnetic-Antiferromagnetic Alternating Heisenberg Chains by Entanglement Spectrum: J. Phys. Soc. Jpn. 85, 024705 (2016) 査読有.

DOI:10.7566/JPSJ.85.024705

⑤ K. Hida: Ground-State Phases of Anisotropic Mixed Diamond Chains with Spins 1 and 1/2: J. Phys. Soc. Jpn. 83 (2014) 114711 査読有.

DOI:10.7566/JPSJ.83.114711

⑥ K. Hida: Ground-State Phase Diagram of $S=2$ Heisenberg Chains with Alternating Single-Site Anisotropy: J. Phys. Soc. Jpn. 83 (2014) 034707 査読有.

DOI:10.7566/JPSJ.83.034707

⑦ K. Hida, K. Takano and H. Suzuki: Topological Phases of the Spin-1/2 Ferromagnetic-Antiferromagnetic

Alternating Heisenberg Chain with Frustrated Next-Nearest-Neighbour Interaction: J. Phys. Soc. Jpn. 82 (2013) 064703. 査読有

DOI:10.7566/JPSJ.82.064703

[学会発表] (計 13 件)

① 飛田和男: 次近接相互作用のある $S=1$ 強磁性・反強磁性交替ハイゼンベルグ鎖の基底状態, 日本物理学会第 73 回年次大会 (2018 年), 2018 年 3 月 23 日, 千葉県野田市

② 飛田和男, 高野健一: 歪んだ高スピンダイヤモンド鎖の基底状態, 日本物理学会 2017 年秋季大会, 2017 年 9 月 21 日, 岩手県盛岡市

③ 関口和孝, 飛田和男: 強磁性・反強磁性脚と反強磁性桁を持つスピン 1/2 ハイゼンベル

グ梯子系の部分フェリ磁性, 日本物理学会第 72 回年次大会, 2017 年 3 月 20 日, 大阪府豊中市

④ 飛田和男: 混合スピンドイヤモンド鎖の理論, 日本物理学会第 72 回年次大会, 2017 年 3 月 18 日, 大阪府豊中市 (招待講演)

⑤ 飛田和男, 高野健一: スピン 1 ダイヤモンド鎖の基底状態相図, 日本物理学会 2016 年秋季大会, 2016 年 9 月 13 日, 石川県金沢市]

⑥ 飛田和男: フラストレート量子スピン鎖におけるトポロジカル相間の逐次転移のエンタングルメントスペクトルによる研究, 日本物理学会第 71 回年次大会, 2016 年 3 月 21 日, 宮城県仙台市

⑦ 飛田和男: フラストレート強磁性・反強磁性交替鎖におけるトポロジカル逐次相転移のエンタングルメントスペクトルによる研究, 物性研短期研究会「スピン系物理の深化と最前線」, 2015 年 11 月 17 日, 千葉県柏市

⑧ 飛田和男: スピン 1/2 非対称フラストレート強磁性梯子ハイゼンベルグモデルの基底状態相転移 II, 日本物理学会第 70 回年会, 2015 年 3 月 21 日, 早稲田大学

⑨ 飛田和男: 強磁性梯子ハイゼンベルグモデルにおけるフラストレーション誘起トポロジカル相, 量子多体系研究の新しい潮流-テンソルネットワーク・繰り込み群・エンタングルメント, 2014 年 12 月 16 日, 京都大学基礎物理学研究所

⑩ 飛田和男: スピン 1/2 非対称フラストレート強磁性梯子ハイゼンベルグモデルの基底状態相転移, 日本物理学会 2014 年秋季大会, 2014 年 9 月 9 日, 中部大学

⑪ 飛田和男, 高野健一: 異方性のある混合スピンドイヤモンド鎖の基底状態, 日本物理学会 第 69 回年次大会 2014 年 3 月 28 日, 東海大学湘南キャンパス

⑫ 飛田和男: 桁交替強磁性梯子ハイゼンベルグモデルの基底状態相転移 II, 日本物理学会 2013 年秋季大会 2013 年 9 月 25 日, 徳島大学

⑬ K. Hida, K. Takano, and H. Suzuki : Topological Phases of the Spin-1/2 Ferromagnetic-Antiferromagnetic Alternating Heisenberg Chain with Frustrated Next-Nearest-Neighbour Interaction, EQPCM 2013 Symposium June 14, 2013, ISSP, Kashiwa.

6. 研究組織

(1) 研究代表者

飛田 和男 (HIDA, Kazuo)

埼玉大学・大学院理工学研究科・教授

研究者番号: 20133704