

課題名(タイトル):

動的密度行列繰り込み群法によるフラストレート量子スピン系の磁気励起スペクトルの研究

利用者氏名:

○遠山 貴巳(1)、曾田 繁利(1)、柚木 清司(1,2,3)

理研における所属研究室名:

(1) 計算科学研究センター 量子系物質科学研究チーム

(2) 柚木計算物性物理研究室

(3) 創発物性科学研究センター 計算量子物性研究チーム

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

結晶中で電子が局在したため電子の持つスピン(局在スピン)が磁性を担う絶縁体をスピン系と呼ぶ。局在スピン間には相互作用が働き、磁気的なネットワークが発達する。次元性が低くスピンの大きさ(S)が  $1/2$  の場合は、強い量子ゆらぎが現れる。このような量子スピン系はハイゼンベルグ模型と呼ばれるハミルトニアンで記述される。そこでは、スピンの自由度はもはや矢印のような古典的なベクトルでは記述できなくなり、様々な興味深い量子現象が現れる。特に、低次元性に加えてスピン間相互作用の競合(フラストレーション)のもとでは、スピンをベクトルとして考える古典的な状態は不安定となる。量子ゆらぎの効果が顕著に現れるこのような系を低次元フラストレート量子スピン系と呼ぶ。低次元フラストレート量子スピン系は、スピン液体をはじめとする特異な量子状態の舞台として精力的に研究が行われている。フラストレーションを生じる原因の一つに、スピン間相互作用の幾何学的構造がある。その典型例として、反強磁性的な相互作用を持つ三角格子やカゴメ格子が知られている。本研究では、カゴメ構造を持つ格子系に焦点を当てる。

低次元フラストレート量子スピン系の理論研究は、多くの場合、零磁場や磁場中での基底状態の性質にとどまっている。基底状態だけでなく、励起状態の特徴を探ることはスピン液体のような新奇量子状態の性質を明らかにする上で大変重要である。また、磁気励起構造の詳細を知るため、J-PARC 等の大型量子ビーム施設を用いた非弾性中性子散乱実験や共鳴非弾性 X 線散乱実験が可能となっている現在、実験と連携した磁気励起スペクトルの計算が求められている。

以上のような背景のもと、本研究ではカゴメ格子系の磁場中での動的スピン構造因子を計算することで、低次元フラストレート  $S=1/2$  量子スピン系の磁気励起スペクトルの特

徴を明らかにして新奇量子状態を解明することを目的とする。そのために、本課題グループが開発している動的密度行列繰り込み群(動的 DMRG)法を用いる。

本利用報告書ではカゴメ・ストリップ格子系に対する成果を報告する。この系はカゴメ格子に類似した一次元構造を持つ。最近この格子系の物質  $A_2Cu_5(TeO_3)(SO_4)_3(OH)_4$  ( $A=Na,K$ )が報告されている [1]。本課題メンバーは、全てのボンドが同じ反強磁性的相互作用を持つ場合を出発点として、各ボンドの相互作用をその近傍で変化させた時、12 種類もの磁化プラトー相(磁化曲線での磁化の値が磁場によらず一定となる状態)が出現することを見出してきた [2]。しかし、それぞれの磁化プラトー相でどのような磁気励起が現れるのか未解明のままであった。そこで本課題において動的 DMRG による動的スピン構造因子計算により、本格子系特有の磁気励起について明らかにした。なお、この課題は課題代表者が分担研究者となっているポスト「京」重点課題(7)「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」サブ課題 G と協力している。

2. 具体的な利用内容、計算方法

本課題で用いた動的 DMRG は、量子格子模型に対するスピンや電荷の励起スペクトル(動的構造因子)を計算することができる。動的性質の計算のコア部分である補正ベクトルの計算には、独自開発したルジャンドル関数による多項式展開を使用している [3]。

本研究で用いたカゴメ・ストリップ格子ハイゼンベルグ模型を図 1 に示す。この格子は、5 個の格子点からなるカゴメ構造がユニットとなり、それらが一次的に並んでいる。その格子点上にはスピンの大きさ  $1/2$  の量子スピンがあり、最近接格子点間でハイゼンベルグ型の反強磁性的相互作用をしている。ユニット内の相互作用は  $J_x$  と  $J_1$ 、ユニット間をつなぐのは  $J_2$  である。以後、 $J_x=1$  として、 $J_1$ 、 $J_2$  を正に保ったまま

変化させる。磁場  $h$  は格子に垂直方向(紙面に垂直)にかけるとする。

動的スピン構造因子の計算では 5 格子点ユニットを単位胞として運動量を定義するとともに、スピンの縦成分と横成分の両方の揺らぎを考慮する。ユニットが 12 個並んだ合計 60 格子点の系を周期的境界条件の下で取り扱う。動的 DMRG で必要な縮約密度行列の大きさ  $m$  は  $m = 1000$  としたが、本計算で採用したスペクトルのブロードニング幅 0.05 ではスペクトル強度が十分収束する値となっている。

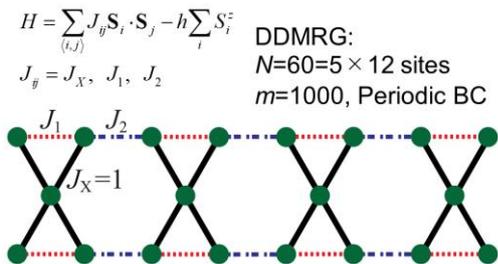


図 1: カゴメ・ストリップ格子ハイゼンベルグ鎖と最近接反強磁性相互作用を持つハミルトニアン。5 個の格子点がユニットとなる形状をしており、ユニット内の相互作用は  $J_x$ ,  $J_1$  を、ユニット間の相互作用は  $J_2$  である。動的 DMRG の計算条件も示している。

### 3. 結果

幾何学的にフラストレートした量子磁性体では、磁場を変数とする磁化曲線の中に磁場を変化しても磁化が変化しない領域(磁化プラトー)が現れることがある。実際、カゴメ・ストリップ格子ハイゼンベルグ鎖には磁化プラトーが多数現れることが知られている [1]。  $J_1=J_2=1$  での磁化曲線を図 2 の挿入図に示す。飽和磁化  $M_{\text{sat}}$  に対する磁化  $M$  の比率が、0.6 と 0.2 のところに磁化プラトーがあることがわかる。それぞれ、3/5 磁化プラトー、1/5 磁化プラトーと呼ばれる。本研究では、1/5 磁化プラトーに焦点を当てる。図 2 では  $J_1, J_2$  を変化させたとき、1/5 磁化プラトーが生じる領域に色付けている。色分けからわかるように、異なる種類の 1/5 プラトーが多数出現している。それぞれの領域で磁気構造を調べたところ、図中のシンボルで示したような磁気構造があることが分かった。最近接格子点間を結ぶ黒色の線は反強磁性的なスピン相関を表しており、その太さが相関の大きさに対応する。格子点上の円はその格子点でのスピンの  $z$  成分を表しており、円のサイズはその大きさに対応する。青色(赤色)は値が正(負)となっている。磁気構造の詳細は文献 [1] にゆずる。図 2 の中で、TL と書かれた領域では、エ

ンタングルメント・エントロピーのサイズ依存性の解析から、セントラル・チャージが 1 の朝永・ラッティンジャー(TL)液体のような振る舞いを示すことが分かった。そこで、その領域の動的スピン構造因子を計算することにした。

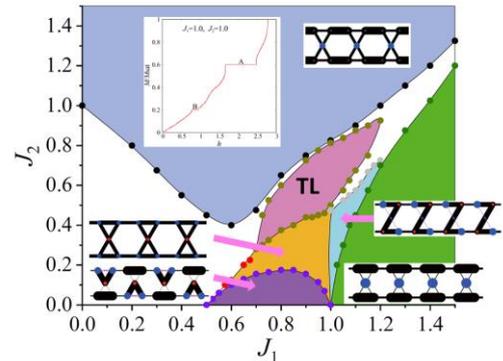


図 2:  $J_1, J_2$  を変化させたとき 1/5 磁化プラトーを示す領域を色で示す。それぞれの領域の磁気構造をシンボルで示している(本文参照)。中央の領域の TL は朝永・ラッティンジャー液体を意味する。挿入図は  $J_1=J_2=1$  での磁化曲線。A は 3/5 プラトー B は 1/5 プラトーを示している。

TL 液体が期待される  $J_1=1, J_2=0.7$  での 1/5 磁気プラトー状態における動的スピン構造因子の縦成分  $S_{zz}(q, \omega)$  を図 3 に等高線図で示す。スピンの  $z$  成分の相関関数は冪的に減衰していく。それを反映して、 $q=2.4\omega$  付近でゼロエネルギー励起に近いスペクトル構造が見える。有限サイズのため厳密にゼロエネルギーとはなっていないが、エネルギーギャップがないギャップレス励起であることが強く示唆される。一方、動的スピン構造因子の縦成分  $S_{zz}(q, \omega)$ ,  $S_{xx}(q, \omega)$  は、スピンの横成分の相関関数が指数関数的に減衰するため、有限のギャップをもつ磁気励起が期待される。実際、図 4 に示されるように、それらの平均値として表示した動的スピン構造因子には低エネルギー励起にギャップがあるように見える。図 3, 図 4 の分散構造の詳細な解析は今後の課題である。

### 4. まとめ

本研究ではカゴメ・ストリップ格子系の一つの磁気プラトー相が朝永・ラッティンジャー液体的な基底状態となっていること、そして、その相での動的スピン構造因子が、スピンの成分によって「エネルギーギャップなし」と「エネルギーギャップあり」という異なった振る舞いをするを見出した。これは磁気相互作用の幾何学的フラストレーション効果と外部磁場による効果の両者が相まって新規な量子状態を形成している例といえる。

## 5. 今後の計画・展望

現在、TL 液体相以外の動的スピン構造因子の計算も進めている。また、それらの結果も含めて現在論文を執筆中である。今後、文献 [2] で報告された物質系の研究がさらに進めば、磁場中での非弾性中性子散乱実験が J-PARC で実施される可能性があり、本研究の結果はその実験に対する重要な情報を与えるものと期待される。

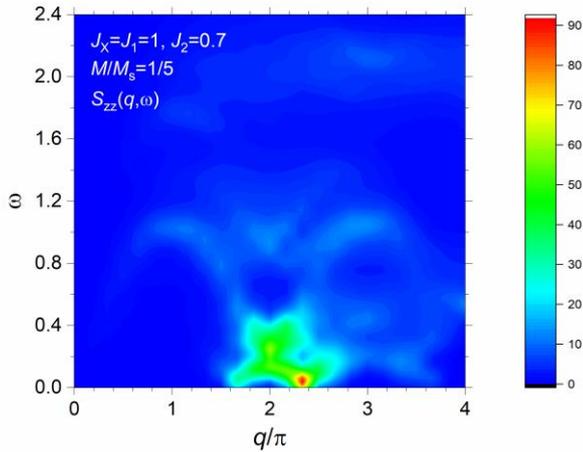


図3:  $J_1=1, J_2=0.7$ での  $1/5$  磁気プラトー状態における動的スピン構造因子の縦成分  $S_{zz}(q, \omega)$  の等高線図。

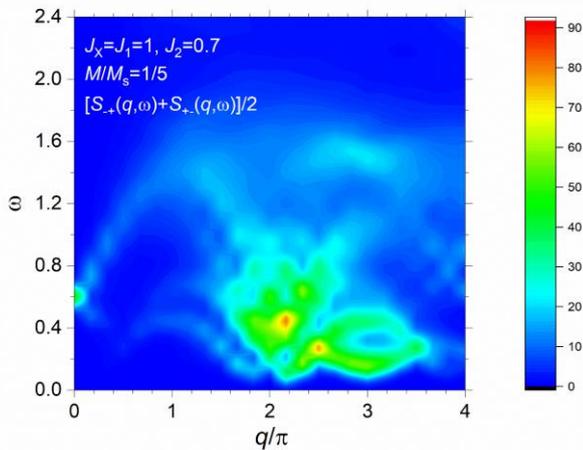


図4:  $J_1=1, J_2=0.7$ での  $1/5$  磁気プラトー状態における動的スピン構造因子の  $S_-(q, \omega)$  と  $S_+(q, \omega)$  の平均値の等高線図。

## 参考文献

- [1] Y. Tang, W. Guo, H. Xiang, S. Zhang, M. Yang, M. Cui, N. Wang, and Z. He, *Inorg. Chem.* **55**, 644 (2016).
- [2] K. Morita, T. Sugimoto, S. Sota, and T. Tohyama, *Phys. Rev. B* **97**, 014412 (2018).
- [3] S. Sota and T. Tohyama, *Phys. Rev. B* **82**, 195130 (2010).

2019年度 利用研究成果リスト

**【ポスター発表】**

発表者名:遠山貴巳; 講演題名:カゴメ・ストリップ格子ハイゼンベルグ模型の磁場中磁気励起スペクトル; 会議名:ポスト「京」重点課題(7)・萌芽的課題成果報告会; 発表年月:2020年2月17日; 場所:秋葉原コンベンションホール