

MERIT 長期海外派遣報告書（派遣期間：2022/08/01 – 2022/10/01）

新領域創成科学研究科 物質系専攻 博士三年
有馬徳永研究室 渡辺義人

【概要】

ドイツのケルン大学にて Simon Trebst 教授と Ciarán Hickey グループリーダーとともに約二ヶ月の研究生活を行なった。厳密対角化（exact diagonalization, ED）と擬フェルミオン汎関数くりこみ群（pseudo fermion functional renormalization group, pf-FRG）という二つの数値計算手法を相補的に用いてハニカム格子上的スピン模型の J_1 - J_2 - J_3 スピンモデル (J_n : 第 n 次近接の磁気相互作用)の磁気相図を詳しく調べた。本報告書ではこれらの詳細について報告する。

【研究内容】

二次元ハニカム格子は各サイトの配位数が 3 と小さいことに起因して強い量子効果が期待できる系である。近年ではハニカム格子上的量子スピン模型「Kitaev 模型」において特殊な量子スピン液体状態が実現することが理論的に提唱されており、モデル物質の探求が盛んに行われている。一方で、モデル物質として提案されている物質のいくつかはむしろ J_1 - J_2 - J_3 スピンモデルという別モデルで良く記述されるということが報告されている。古典スピン J_1 - J_2 - J_3 モデルに関しては古くから研究が行われており、特に最近接相互作用が強磁性的である場合 ($J_1 < 0$) と反強磁性的である場合 ($J_1 > 0$) にゼロ磁場下で厳密な対応関係があることが知られている。この対応関係は量子スピン系では成り立たないが、既存研究では主に反強磁性的な相互作用を持つ場合にのみ焦点が当てられてきた。



図 1 Institute for Theoretical Physics 所属の方々との写真。ケルン大学創立者である Albertus Magnus 像の前で撮影。

本研究では ED と pf-FRG の二つの計算手法を用いて量子スピン J_1 - J_2 - J_3 モデルの磁気相図を調べた。ED は系の性質を規定する基底状態や励起状態の波動関数が得られる強力な数値計算手法である。一方で、コンピュータで扱えるサイト数は比較的小さいため、有限サイズ効果を慎重に取り扱う必要がある事や、incommensurate な磁気秩序との相性が悪いなどの問題がある。pf-FRG は ED に比べアクセスできる情報には限りがある一方、比較的大きなサイズを扱うことができるため運動量空間の分解能が大きい。従って量子スピン系の磁気相図を調べる上では ED と pf-FRG を相補的に用いることが重要となる。

本研究の主要な結果として、従来よく調べられていなかった強磁性最近接相互作用 ($J_1 < 0$) をもつ系の特異な磁気相図を得た点が挙げられる。古典的スピン系で報告されている磁気相に加え、それらの相境界付近に明確な長距離秩序の兆候を示さない量子相を発見した。ED によりこの相のエネルギーギャップは非常に小さいことを示唆する結果を得たため、ギャップレスな量子スピン液体状態が実現していると考えられる。また、相互作用に容易面型の異方性を導入すると、このスピン液体相は古典スピン系でも見られるらせん秩序相へと発展することを突き止めた。以上の結果は論文にまとめる予定である。

【現地での生活】

ドイツ西部ライン川流域に位置するケルンは天気の変わりやすい町らしいが、筆者が到着してから1ヶ月間は殆ど雨の無い乾燥した気候だった。特に最初の2週間は最高気温が摂氏30度後半の日が続き、室内は冷房が配備されていないことが普通であるためとても苦勞した。水不足を危惧する声も挙がっていたようだった。一方で9月には例年通りの気候に戻ったのか雨が多いながらも快適な気候であった。

ケルンには自然豊かな公園が多かったため、平日の午後や休日はランニングをして過ごした。Simon先生にランニングしていることをお話ししたところ偶然にも先生も同じ場所をよく走っていることが判明し、更にオススメのランニングスポットや地元のランニングイベントを紹介していただいた。実際に一つランニングイベントに参加してきたが、残念ながら結果は振るわなかったのが今後精進したい。

平日の昼食は研究グループの垣根を越え同じ建物内の人々で集まってメンサ（食堂）で摂ることが多かった。筆者が滞在していた8月、9月は授業が無い期間ということで通常よりもメニュー数が少ない状態だったらしいが、ベジタリアン用のメニューの方が多かったことが印象に残っている。聞くところによると、近年ドイツでは動物福祉や環境保護、健康への配慮から肉食を以前より減らす人やベジタリアンとなる人が増えているようだ。実際グループのメンバーにも肉食を控えている人が多くいた。日本でも今後このような動向が見られるかもしれない。

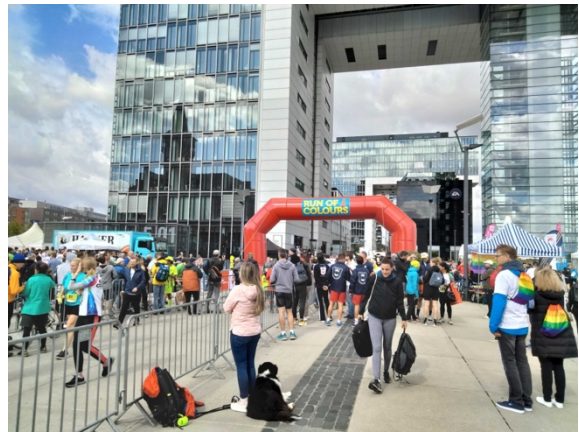


図2 現地で参加したランニングイベントの様子。当日は雨が降ったり晴れたりを短時間で繰り返すとケルンの典型的な天気だった。

【謝辞】

今回の滞在にあたり、新学術領域研究「量子液晶の物性科学」若手海外派遣のご支援をいただきました。また、長期海外派遣の機会を与えていただいた指導教員の有馬孝尚教授、副指導教官の芝内孝禎教授、MERITプログラムにお礼を申し上げます。普段実験を中心に行なっている筆者にとって理論家の先生方の指導のもと数値計算手法を学ぶ日々はとても刺激的でした。2ヶ月という短い時間で手法を学び何かを達成できるか不安はありましたが、滞在中 Simon Trebst 教授、Ciarán Hickey グループリーダーが心身に議論して下さったおかげで充実した研究生活を過ごすことができました。訪問を快諾して下さった両名とそのグループメンバーに改めてお礼を申し上げます。