

第8回日本物理学会若手奨励賞を受賞して

計算物質科学研究センター 特任研究員 大久保 毅

この度、私がこれまでに行ってきた「フラストレート磁性体におけるトポロジカル相転移と多重 Q 秩序の研究」という成果に対して、第8回日本物理学会若手奨励賞を頂きました。ここでは、この研究の経緯等について簡単に語りたいと思います。

受賞対象となったフラストレート磁性体研究の大部分は、大阪大学川村研究室で特任研究員として勤務していた時に行ったものです。私は、九州大学で小田垣孝先生の指導の下、ランダム系の輸送現象に関するテーマで学位を取得した後、縁あって、当時、開始間もなかった特定領域研究「フラストレーションが創る新しい物性」のポスドクとして、川村先生に採用して頂きました。学生時代には、全く磁性研究の実績が無かった私を、何故、川村先生がポスドクとして採用して下さいたのか今でも不思議ですが、ここで、磁性分野に飛び込んだことが、私の研究人生の大きな転機になりました。川村研に着任直後は本当に知らないことばかりで、ハイゼンベルグ模型や XY 模型といった理論モデルに加えて、磁化率や NMR、ESR 等の実験結果の図の見方もさっぱり分かっていませんでした。しかし、幸いなことに、特定領域研究の企画で、ほぼ毎月、関西近辺のフラストレーション研究者を招いたセミナーが企画されており、そこで、理論・実験の最先端の研究成果にどんどん触れて急速に知識を蓄えられたことで、自身の研究を効果的に進めることが出来たのではと思います。また、このフラストレーションセミナーで知り合った研究者の方々と活き活きとしたディスカッションは、直接、研究に役立っただけなく、私にフラストレーション研究の面白さを強く実感させました。

受賞対象となった研究は、このように大変恵まれた環境の中から生み出されました。この研究は、大きく二つのトピックからなっています。一つは、二次元フラストレートハイゼンベルグ反強磁性体における、 Z_2 ボルテックスと呼ばれる、普通の渦とは異なり右巻き・左巻きの区別が無い変わった渦励起に関する研究。もう一つは、複数の波数モードが共存した複雑な秩序状態である、多重 Q 秩序に関する研究です。

Z_2 ボルテックスは、二次元のフラストレート磁性体に共通して現れる重要なトポロジカル励起で、今から 30 年程前に、川村先生、宮下先生らによってこの Z_2 ボルテックスの束縛・非束縛転移である「 Z_2 ボルテックス転移」が起きる可能性が提案されていました。私がフラストレート磁性体の研究を始めた当時（そして今も）、物性研の中辻先生が合成された $NiGa_2S_4$ を始めとする三角格子磁性体の物性がホットトピックで、これらの物性の理解に、 Z_2 ボルテックスが影響している可能性を検討する一連の研究を行いました。私が主体となって寄与したのは、真性特異点であるために、熱力学的な異常が非常に弱い Z_2 ボルテックス転移の影響を、いかに実験で観測するかに関わる部分でした。この困難は、スピндаイナミクスシミュレーションと呼ばれる、古典スピンのダイナミクスを計算する方法を用いて、ダイナミクスを解析したことで解決することが出来ました。それまでに観測が難しかった Z_2 ボルテックス転移を反映した振る舞いは、スピンの動的構造因子に特徴的なピークとして現れることが明らかとなったのです。この研究を基にして、将来、中性子実験等で Z_2 ボルテックス転移の証拠が発見される日が来ればと願っています。

二つ目のトピックである多重 Q 秩序に関する研究は、典型的な三次元の幾何学的フラストレーションの舞台であるパイロクローア格子上のハイゼンベルグ反強磁性体から始まりました。最近接相互作用に加えて二次近接相互作用を併せ持つパイロクローア格子ハイゼンベルグ模型では、私が研究を始める以前から、多重 Q 秩序の可能性が指摘されていたのですが、平均場近似による（準）安定構造の導出を新しく行い、その安定構造に基づいて、モンテカルロシミュレーション結果を解析したことより、多重 Q 秩序状態の構造を上手く同定することが出来ました。この模型では、4つの波数モードが混合した quadruple-Q 状態や6つの波数からなる sextuple-Q 状態といった、他の磁性体ではなかなか現れないような複雑な構造が安定化していることが明らかとなり、私自身、多重 Q 秩序に関する興味が大きく膨らみました。

ここで培った方法は、続いて、磁場中三角格子ハイゼンベルグ模型の解析に応用されました。前述の $NiGa_2S_4$ の模型としても注目されていた三次近接相互作用を持つ古典ハイゼンベルグ模型を平均場近似とモンテカルロシミュレーションを

用いて解析することで、磁場中で多重 Q 秩序状態が安定化することが明らかになったのです。さらに興味深いことに、この模型で現れる 3 つの波数モードが共存した **triple- Q** 状態は、スカーミオンと呼ばれるトポロジカル構造が周期的に整列した、スカーミオン格子状態になっていることも示すことができました。このスカーミオン格子は、**MnSi** 等のカイラル磁性体で **Dzyaloshinskii-Moriya** 相互作用を起源として生じる機構が知られていたのですが、私の研究により、フラストレートした交換相互作用を通じてスカーミオン格子が安定化することが明らかとなりました。この研究で示したスカーミオン格子の安定化機構には、格子の三重回転対称性と磁場の存在のみが重要で、三角格子だけでなく、ハニカム格子やカゴメ格子といった広い範囲の磁性体で、フラストレーションによりスカーミオン格子状態が実現する可能性があります。いつの日か実在の物質で、このような状態が発見されれば嬉しいです。

このような研究を終えた後、現在私は、京コンピュータのプロジェクトである、**CMSI(Computational Materials Science Initiative)** の研究員として、物性研の計算物質科学研究センターで研究を行っています。物性研では、これまで大規模な数値計算が難しかったフラストレート量子スピン系の基底状態計算も可能になる、テンソルネットワーク変分法を用いた研究等を進めており、引き続き、フラストレート磁性体に興味を持ち続けています。最先端で活躍する実験・理論研究者に囲まれた、物性研の素晴らしい環境の中で、さらなる良い研究成果を生み出せるように、これからも日々、頑張りたいと思います。

今回の受賞対象の研究は、大阪大学の川村光先生、川村研の学生だった、鄭成琪氏、**Trung Hai Nguyen** 氏との共同研究です。また、特定領域研究「フラストレーションが創る新しい物性」を構成していた数多くの研究者の方々との議論が、研究を進める上でとても参考になりました。この場を借りて深く感謝申し上げます。

