

2次元フラストレート系の計算科学的研究

中野博生

兵庫県立大学大学院物質理学研究科

藤堂眞治

東京大学物性研究所

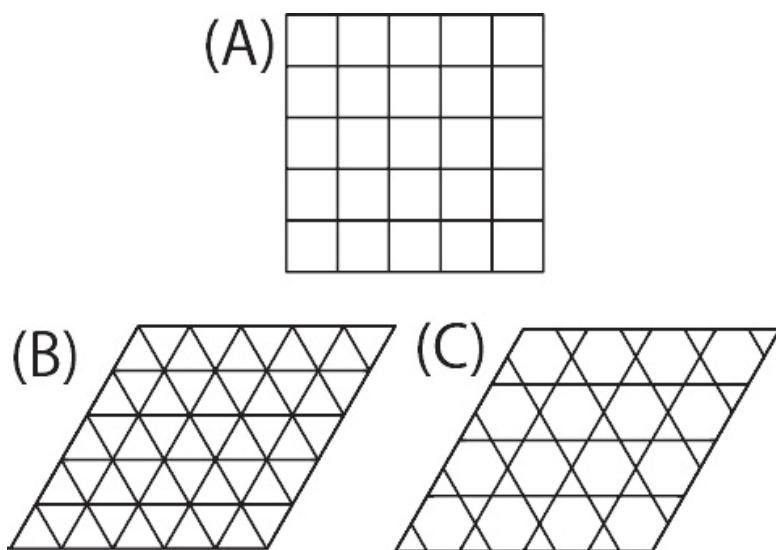
坂井徹

原子力研究開発機構

1. 背景

「あちらを立てればこちらが立たず」は、人間関係の複雑さと難しさを言い表したことわざであるが、その状況は人間社会に限らない。自然現象でも同じようなことはしばしば起こり、その典型的な事例にフラストレート磁性体がある。

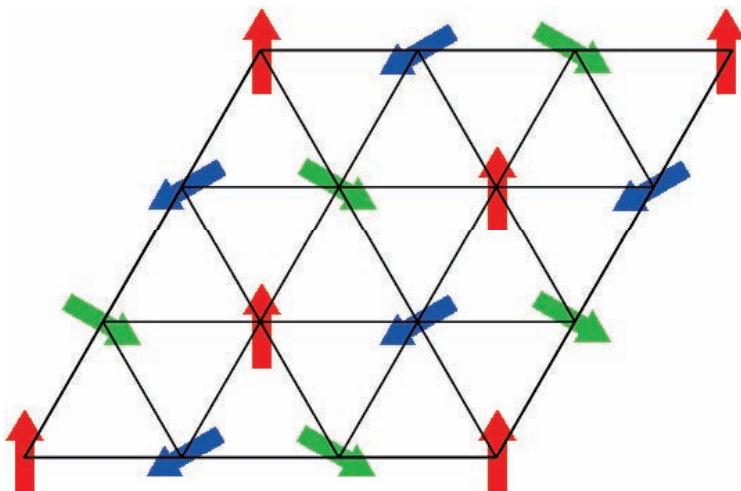
磁性体は一般に、小さな磁石の集まりと見なせる。小さな磁石の1個ずつは、電子が持つ特性の一つであるスピンが担う。電子は、物質中に事実上無限個と言ってよいくらい多数存在しており、互いに影響を受け合いながら全体として状態がどのような振舞いを示すか、ということで磁性体の性質が決まる。絶縁性磁性体物質は、電子が何らかの理由で動きまわることが出来ずに、固体中の原子配置で決まる特定の箇所に局在化した結果として出来たものである。電子自体が動きまわることが出来なくても、スピンの向きに関する自由度は残り、スピンの向きの状況によって絶縁性磁性体の性質が決まる。このような系は量子スピン系と呼ばれている。固体の原子配置には様々な格子形状があり、2次元系では正方格子が一番シンプルなものであろうが、局所的な形狀に正方形でなく三角形を含む物質がある。この三角形の頂点にはスピン



第1図: (A) 正方格子, (B) 三角格子, (C) カゴメ格子。

がって、隣接スピン間に互いに反対向きになる方がエネルギーを得するような相互作用（反強磁性相互作用と呼ばれる。）が働く場合、上述の「あちらを立てれば…」の状況が実現する。こういった三角形を基本構造として、何らかの規則で空間に配置することで出来るのがフラストレート磁性体である。正三角形が、隣接ペア同士で辺を共有する形で平面を敷き詰める規則で構成されるものが三角格子と呼ばれる格子である（第1図参照）。他にも、隣接正三角形が頂点を共有して平面を敷き詰めることで得られるカゴメ格子や、3次元的に配置されたパイロクロア格子も良く知られている。

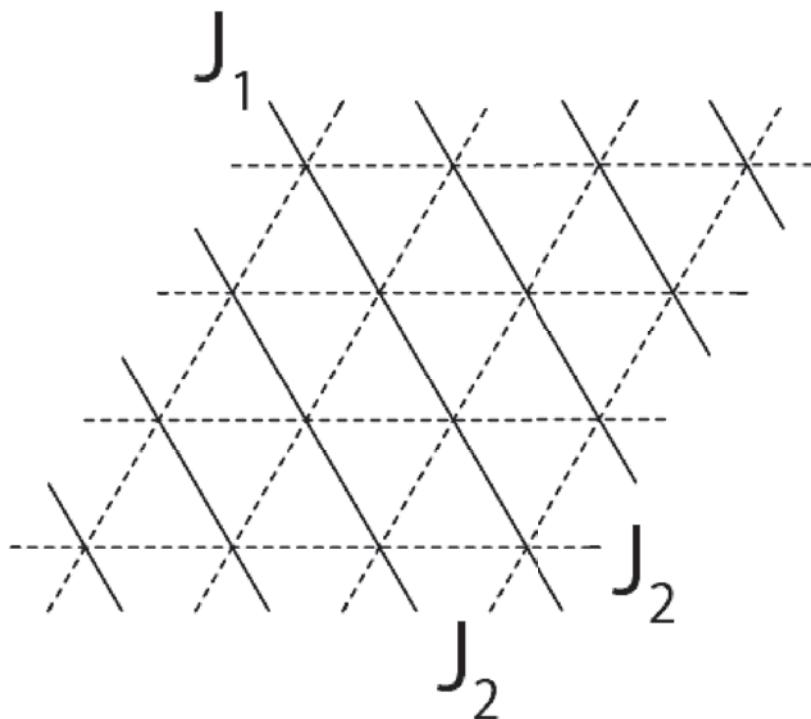
そのような三角格子反強磁性体は、その基底状態が「スピン液体状態」となっている可能性を P. W. Anderson が約 40 年前に指摘[1]して以降、理論と実験の両面から精力的に研究が行われてきた。その結果、今では、後で説明するハイゼンベルクスピンで構成される反強磁性体の基底状態は、Anderson の予想は的中しなかったが、第2図で示した 120 度構造とも呼ばれる 3 副格子構造の長距離秩序状態が実現していると広く信じられている。冒頭のことわざの後には、ことわざ辞典を見ると「双方立てれば身が立たぬ」が続く。磁性体の中では「身が持たぬ」という訳にはいかず、各々の隣接スピンペアが少しずつ妥協した状況を作りだす。その結果として最終的に微妙なバランスのもとに選ばれる状態がこの 120 度構造の状態である。そのような状態は、落語に登場する、いわゆる「三方一両損」の大岡裁きに似ている。



第2図：三角格子反強磁性体の3副格子構造（120度構造）の概念図。

量子スピン系は、それを記述する理論模型の解が数学的に厳密な形で得られる例外的な場合もあるが、一般には解析困難な多体問題の典型である。三角格子反強磁性体に対して理論的研究[2-7]が盛んに行われてきたと述べたが、それらの研究の多くは、多体問題の困難さのために何らかの近似を用いた計算に立脚している。近似を用いれば、解析困難な問題も取り扱いが可能となるが、一方で、近似に由来する効果が現れてしまい、真の姿とは異なる様子を見ている可能性を完全に避けることはできない。それを解決する手段として、量子力学的効果を丸ごと取り込んだ直接数値シミュレーションがあり、その方法に立脚した研究ももちろん行われているものの、様々な制約から十分な知見を得ることが難しい状況にある。量子スピン系で良く使われる直接シミュレーションの方法には、量子モンテカルロ法、密度行列繰り込み群法、数値

的厳密対角化法があり、それぞれ一長一短の特徴を持つ。後で具体的に言及するが、量子モンテカルロ法と密度行列繰り込み群法は2次元フラストレート系の計算にはあまり有効ではない。それに対し、厳密対角化法は2次元フラストレート系に有効で、その計算によって我々は様々なフラストレート磁性体の性質解明を進めてきた[8-12]。本報告では、上述の三角格子 $S=1$ ハイゼンベルク反強磁性体が空間異方性を有する相互作用を持つ場合（第3図）に得られた研究成果[13]について紹介する。



第3図：空間異方性を持つ三角格子と反強磁性相互作用。

2. 模型

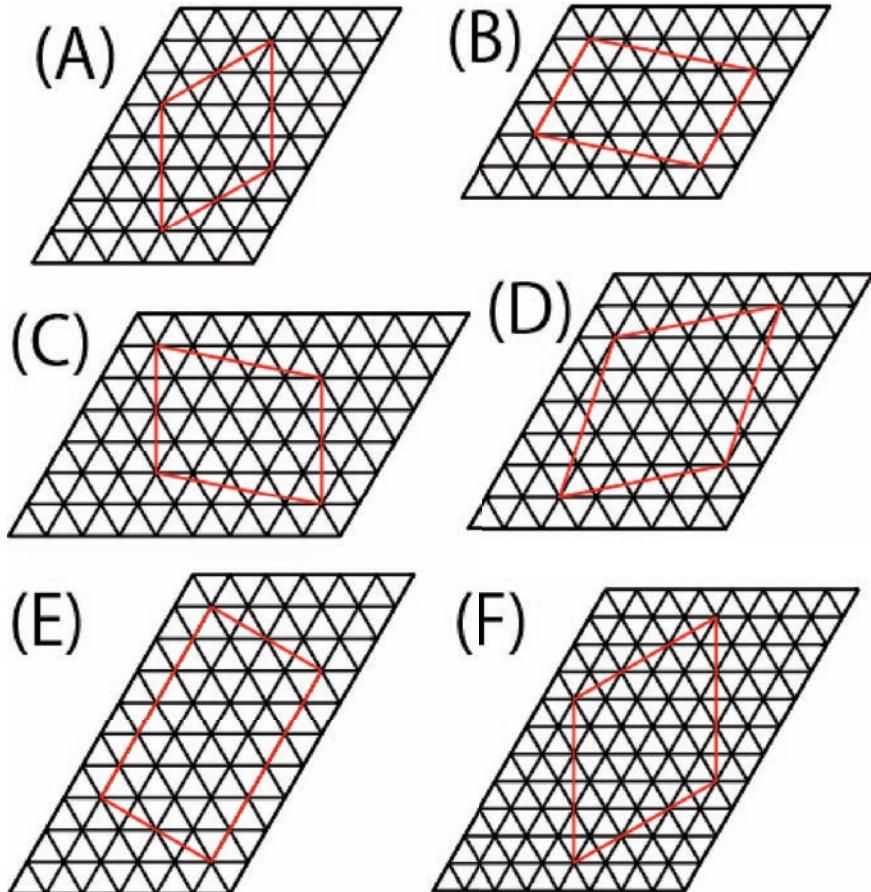
2-1. ハミルトニアン

我々が調べた、異方的三角格子上の $S=1$ ハイゼンベルク反強磁性体を記述するハミルトニアントは、次の式で与えられる。

$$\mathcal{H} = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J_2 \sum_{[i,j]} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$$

ここで、 \mathbf{S}_i はサイト i での $S=1$ スピン演算子であり、第3図の格子点に乗っている。隣接スピン間の相互作用の強さ $J_1(> 0)$ と $J_2(> 0)$ のボンドも第3図の実線と破線で示した位置にあるものとする。有限サイズクラスターは N_s 個のスピンを含むものとし、かつ、その N_s は 3 の倍数に限る。なお、 $J_2=0$ の時に J_1 のボンドだけの 3 サイト系の正三角形クラスターが出来てしまう場合は除外するものとする。可能な有限サイズクラスターは、等方的な場合に第4図として示した。

$N_s=12, 21, 27$ では 120 度の内角を持つ菱形を取ることが出来て、有限サイズクラスターとしては系の 2 次元性を良く反映していると考えられる。一方で、 $N_s=15, 18, 24$ ではそのような菱形を取ることが出来ない。有限サイズクラスターの端は周期境界条件を課しておく。



第 4 図: (A) $N_s=12$, (B) $N_s=15$, (C) $N_s=18$, (D) $N_s=21$, (E) $N_s=24$, (F) $N_s=27$ の各場合に対する三角格子有限サイズクラスター。

我々が厳密対角化法で計算した、これらの系の物理量は、系の磁化に当たる $\sum_j S_j^z = M$ で分類された部分空間の最低エネルギー

$$E(N_s, M)$$

と、その時の固有状態に対するスピン相関関数

$$\langle S_i^z S_j^z \rangle$$

である。直接シミュレーションで得た、上のハミルトニアンに対するこれらの物理量から、上述の模型の基底状態について議論を進めていく。今回我々は、特に $0 \leq J_2/J_1 \leq 1$ の領域に焦点を当てる。 $J_2/J_1=1$ の等方的な場合に長距離秩序が実現していることが確認できれば、 $J_2/J_1=0$ の場合に系が、反強磁性 1 次元鎖の系となり、その 1 次元性から長距離秩序は存在しないこと

が分かっているため、 $0 \leq J_2/J_1 \leq 1$ の範囲のどこかで長距離秩序が消失する相転移の発現が確実だからである。

2-2. これまでの研究報告

三角格子 $S=1$ ハイゼンベルク反強磁性体を考える前に、スピンの大きさが異なる場合についての状況を復習しておこう。量子系を理解する前に、取り扱いが相対的に容易な（ S が無限大の場合に対応する）古典系について調べておくのは有用である。その古典系では、 $J_2/J_1 < 1$ の領域で、隣り合うスピン同士が成すキャント角で特徴づけられるスパイラル基底状態が実現している。これは、古典系のスピンはその実効的な長さが変動出来ず、エネルギーを下げる要素はスピン間の角度しかない状況で選ばれた結果である。 $J_2=J_1$ の等方的な場合に選ばれるのが、キャント角が 120 度となる第 2 図のスピン構造である。ところが量子系では、量子揺らぎの結果、一般にスピンの実効的な長さがスピン演算子の大きさ S から縮む。そのため、量子的基底状態は、個々のスピンの実効的な長さとスピン間の角度が調整されて選ばれた結果として実現することになる。もっとも、Anderson が指摘したような「スピン液体状態」が実現していれば、長距離秩序としてはスピンの実効的な長さがゼロに潰れてしまうような状況となっている可能性もあった訳で、どのような基底状態なのかは、全く自明でない問題である。

$S=1/2$ の系[14-22]については、古典系と類似のスパイラル状態が $J_2/J_1 \sim 1$ 近傍で実現しているという研究報告が複数あるが、スパイラル相の範囲は計算方法によって様々な異なる結果が得られている。級数展開法[14]では、古典系と同じ $J_2/J_1 \sim 0$ までの全領域にスパイラル相が広がっているという結果もあれば、変分モンテカルロ法[17]によるとスパイラル相は $J_2/J_1 \sim 0.85$ までの領域に留まっているという。さらには、汎関数練り込み群法[19]によれば、等方的な場合に現れる長距離秩序は異方性が入ると急速に失われるという報告もある。磁気秩序を定量的に捉えるにはスピン相関関数の振る舞いから秩序変数を引き出すのが直接的な方法であるが、 $J_2/J_1=1$ の直上であっても、現時点で厳密対角化法によって取り扱える範囲の小さいクラスター サイズのデータから外挿手続きによって秩序変数を定量的に精度良く求めることは難しいという報告[6, 7]もある。このように、様々な方法で調べられている $S=1/2$ の系ですら、その性質の理解にコンセンサスが得られている状況とは言えない。

それに対して今回調べた $S=1$ の系は、研究報告自体その数は少ない。そもそも、 $S=1$ の系は、 $J_2/J_1=0$ の 1 次元系の基底状態が、 $S=1/2$ の場合と大きく異なっている。 $S=1/2$ の系の基底状態はスピン励起がギャップレスであるのに対して、 $S=1$ の系は、基底状態のすぐ上にハルデンギヤップと呼ばれるエネルギーギャップが開いているからである。この $J_2/J_1=0$ におけるエネルギーギャップの存在が、 $J_2/J_1=1$ の等方的な場合に現れると考えられる磁気秩序の相のあり方にどのような影響を与えるのかという疑問は非自明な問題と考えられる。そのような状況で、 $S=1$ の系に対しては、連結クラスター級数展開法[23]と結合クラスター法[24]による研究が行われている。前者の方法では、スパイラル状態の磁気秩序相が $J_2/J_1=0.33$ まで広がっていて、そこで無秩序相への相転移が起こる結果となっている。一方、後者では秩序相がさらに広く、少なくとも $J_2/J_1=0.25$ まで広がっていることを報告している。そういう状況で、特定の近似を超えた理解を深める目的で、近似を伴わない直接シミュレーションの重要性が高まっていると言える。そこで本研究では、ランチョス法に基づく数値的厳密対角化法の計算によってスピン相関関数を得て、そこから磁気的長距離秩序の定量的情報を引き出すことを試みた。その第一段階

として行ったことは、 $J_2/J_1=1$ の等方的な場合に、厳密対角化法のスピン相関関数の結果で 3 副格子構造の長距離秩序の実現を確認したことである。さらにその次のステップとして、その長距離秩序が、相互作用に異方性が入った場合にどのように変化していくことになるのかを、古典系での議論からくる予断を排除し、もっぱら厳密対角化の計算だけに基づいて調べていくことにする。

3. 計算手法

既に述べたように、量子スピン系に対する直接数値シミュレーションとしては、量子モンテカルロ法と密度行列繰り込み群法、厳密対角化法が代表的な方法である。このうち、量子モンテカルロ法と密度行列繰り込み群法は、比較的大きな系の計算が可能であるが、量子モンテカルロ法は、系にフラストレーションがある場合には負符号問題と呼ばれる計算上の困難が知られている。密度行列繰り込み群法は、フラストレーションの有無に関係なく適用できるが、1 次元的な系に大変強力な方法であるものの、高次元系に対する有効な処方箋は今のところ見つかっていない。これらの状況から、2 次元フラストレート系である三角格子反強磁性体に対してこれらの手法をそのまま適用するのは難しい。一方で、厳密対角化法は、これらの中で最も古くから使われている方法ながら、フラストレーションの有無や系の形状に依らずに計算が可能であることが大きな利点である。取り扱える範囲の大きさの系であれば、統計誤差のない、非常に高精度な結果を得ることが出来て、三角格子反強磁性体の研究に向いていることが分かる。唯一の短所は、取り扱える系の大きさが非常に小さいものに限られることである。その短所を何らかの方法で少しでも克服し、過去に行われていない大きさの系の計算が出来れば、新たな知見を得ることが期待される。その克服の手段として、近年のスーパーコンピュータの特徴を活かした並列計算を行う方向性が考えられ、我々は、そのような並列計算を行う厳密対角化法のプログラムを独自に開発してきた。

ランチヨス法に基づく数値対角化では、ベクトルに対してハミルトニアン行列を繰り返し作用させながら、3 重対角行列を作る計算を行うが、ベクトルに行列を作成させる手続きが高コストの中心部分である。この計算を行うには、行列の次元に対応する長さを持つベクトルを数本、コンピュータのメモリに格納することが必要となる。ハミルトニアンが記述する系の大きさ（スピンの数： N_s ）が小さいうちは、行列次元がそれほど大きくないので問題ないが、 N_s の増加に対して指数関数的に行列次元が増大するため、あつという間に利用可能なコンピュータの資源量を超えてしまう。このような困難を少しでも解消する方法の一つに、MPI を用いて計算を並列化し、各計算ノードが有するメモリに分散してベクトルを格納（それによって单一ノード使用時では使えない大きさの実メモリを複数ノードで同時に使用）することが考えられる。あるノードでの計算には、他のノードのメモリ上にあるデータを使って計算しなければならない状況が発生するが、通信コストの増大を抑えるバタフライ型のノード間データ転送を行うことで、これを実現することが出来る。

今回の大規模チャレンジジョブでは、 $N_s=27$ の $S=1$ スピン系が最大規模の計算となった。これまでの $S=1$ スpin 系に対する数値対角化法による研究報告では、1 次元系のハルデンギャップの精密評価に関する研究で $N_s=24$ の報告事例[25]があり、著者が知る限り、これが最大である。なお、 $N_s=27$ の $S=1$ スpin 系については、ごく最近、大きな M に対する部分空間に対する研究報告[26]があるが、行列次元が $M=0$ の場合に比べて小さな行列次元にとどまる部分空間に対する

計算に限られていて、空間次元が最大となる $M=0$ の部分空間までは到達できていない。それに対して我々は、この $M=0$ の部分空間に対する計算を大規模チャレンジジョブで成功させた。行列次元の具体的な数字としては、 $S=1$ スピン系の $N_s=27$ 、 $M=0$ の部分空間の次元が 712,070,156,203 である。この場合に対して、我々は、59049($=3^{10}$)個のプロセス並列で計算を実行し、その際のランチョスステップ 1 回分の時間は約 167 秒であった。

4. 数値計算の結果

4-1. 等方的な場合

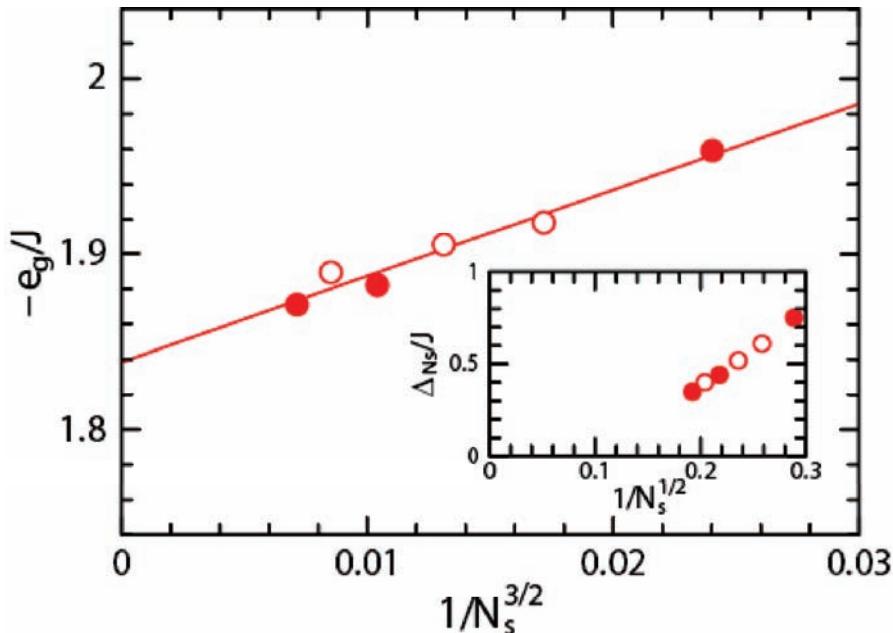
我々がまず調べたのは、サイト当たりの基底状態エネルギー

$$e_g = E(N_s, M=0) / N_s$$

と、基底状態の上のスピニ励起エネルギーギャップ

$$\Delta_{N_s} = E(N_s, M=1) - E(N_s, M=0)$$

である。サイト当たりの基底状態エネルギーは、 $N_s^{3/2}$ の関数としてプロットし、第 5 図に示した。システムサイズ依存性として良い直線性が見られ、最小二乗法でフィッティングすると



第 5 図: 等方的な場合の基底状態エネルギーのシステムサイズ依存性。

挿入図は、基底状態のすぐ上のスピニ励起エネルギーギャップのシステムサイズ依存性。塗り潰された丸印は菱形クラスターの場合で、白抜きの丸印は菱形でない平行四辺形のクラスターの場合である。

$e_g/J_i = 1.838 \pm 0.007$ という値が得られる。この値は、スピニ波近似で得られる値および結合クラスター法の近似で得られるものと良く合致している。また、第 5 図の挿入図では、エネルギーギャップのサイズ依存性を $N_s^{1/2}$ の関数としてプロットした。熱力学極限では、このエネルギーギャップが消失するように見える。ギャップの消失は、基底状態に長距離秩序があることと

矛盾のない振舞である。これらの状況は、第4図の有限サイズクラスターが、サイズ外挿によって熱力学極限の値を知るのに適切な系列となっていることを意味している。

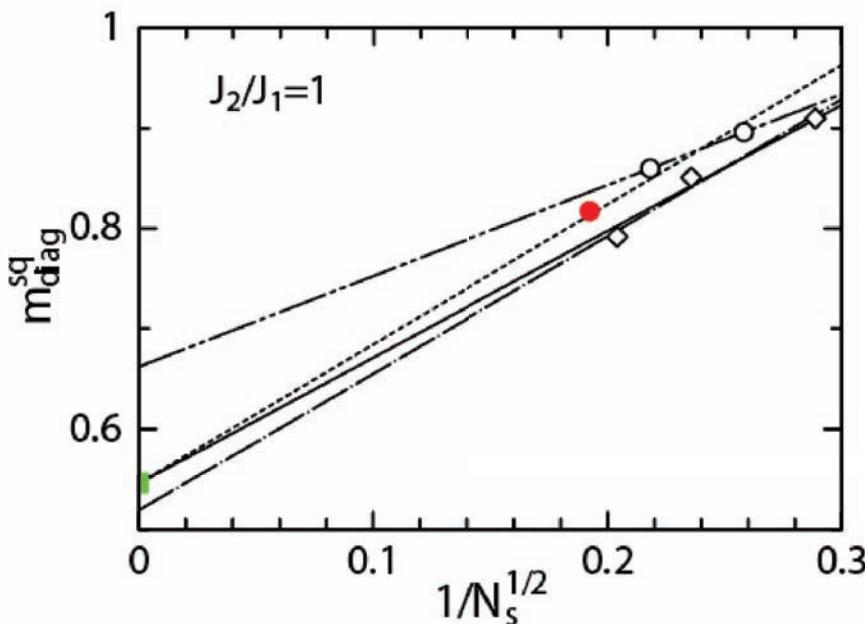
次に我々は、三角格子反強磁性体の有限サイズクラスターの磁気秩序を調べるために、以下の量を各サイズで見積もった。

$$m_{\text{diag}}^{\text{sq}} = \frac{1}{N_\alpha} \sum_{\alpha} \frac{1}{N_s(N_s/3 - 1)} \sum'_{i,j} \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle$$

この時、 $\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle$ はスピン空間について等方的な相互作用を考えていることから、厳密対角化法によって計算されたスピン相関関数を用いて $3\langle S_i^z S_j^z \rangle$ によって得られるものである。また、 $m_{\text{diag}}^{\text{sq}}$ を見積もる上で、サイト i と j に関するプライム付きの和記号は、 i と j が (3 個の副格子のうち) 同じ副格子に属し、 i と j が同じサイトにならない場合に和を取ることを意味する。さらに、 α は、どの方向に相互作用の強い J_1 のボンドを選ぶか、ということに対するラベルであり、 $m_{\text{diag}}^{\text{sq}}$ の計算では α に関する平均を取っている。この平均は、第4図の中で菱形でない平行四辺形のクラスターとなる場合を考慮して行うものである。この $m_{\text{diag}}^{\text{sq}}$ は、系が磁気秩序している場合に熱力学極限で副格子磁化の 2 乗に対応する物理量である。等方的な場合のスピン波近似では、古典的な長さから量子性に起因して発生するスピンの縮みによって副格子磁化が

$$m_{\text{SW}} = S - \Delta_0 + O[1/S]$$

となる。ただし、 $\Delta_0 = 0.261$ である。したがって、 $m_{\text{SW}}^2 = 0.546$ という値が得られるが、それは等方的な場合 $m_{\text{diag}}^{\text{sq}}$ の比較対象となるものであることが分かる。なお、この $m_{\text{diag}}^{\text{sq}}$ は、 $S=1/2$ スピ



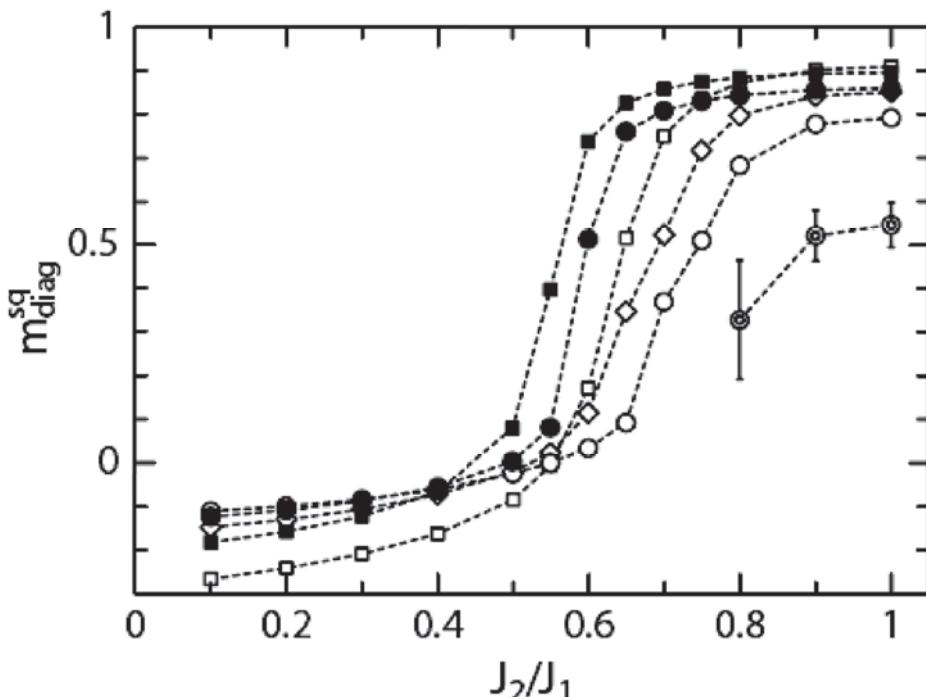
第6図: 等方的な場合の $m_{\text{diag}}^{\text{sq}}$ の外挿。

丸印は N_s が奇数、ダイヤ印は偶数の場合である。赤丸は大規模チャレンジジョブで得た $N_s=27$ の結果である。

緑印はスピン波近似で得られる副格子磁化の値である。

ン系について調べた文献[6]における式(2.11d)と同じものである。また、 i と j が同じ副格子に属している場合のみ和に考慮されていることから、この $m_{\text{diag}}^{\text{sq}}$ は、異なる副格子に属するスピンの間の関係についての情報を直接与えるものではないことに留意する必要がある。

この $m_{\text{diag}}^{\text{sq}}$ に対する数値計算結果は第6図に $N_s^{1/2}$ の関数として示した。 N_s の偶奇で振舞に振動が見られることから、 N_s が偶数の場合と奇数の場合とで分けて取り扱うべきであることが伺える。 N_s の偶奇で異なる系列のデータとなっているとは言え、 N_s が無限大の熱力学極限では二つの系列は同じ値に収束しなければならない。このことを踏まえ、第6図での解析の一つとして、 N_s の偶奇の系列を別々に直線フィットの最小二乗法を行うが、縦軸切片の値としては同じ値となるような拘束条件を付けてフィットを行うことが考えられる。それを $N_s=24$ までのデータで行ったのが、第6図の実線と点線である。共通の縦軸切片の値として、 0.536 ± 0.051 が得られる。さらに、拘束条件付きの同じ解析を $N_s=27$ までのデータで行ったところ、縦軸切片は 0.551 ± 0.035 となった。これらの外挿値は、互いに一致しており、また、スピニ波近似の結果とも合致している。したがって、拘束条件付きの解析は、 $N_s=27$ のデータが無く、 $N_s=24$ までのデータを用いて外挿した場合でも、誤差はやや大き目の結果となるものの、定量的に信頼性の高い値を得ることができることを示している。第6図では、拘束条件付き解析と併せて、 $N_s=24$ までのデータの範囲内で、 N_s の偶奇の各系列で拘束条件を使わずに直線フィットを行った結果も1点鎖線と2点鎖線で示した。縦軸切片の値として得られるものは、拘束条件付きの同じ解析で得られた外挿値と比べて、 N_s が偶数の場合は相対的に小さく、 N_s が奇数の場合は相対的に大きくなることが分かった。



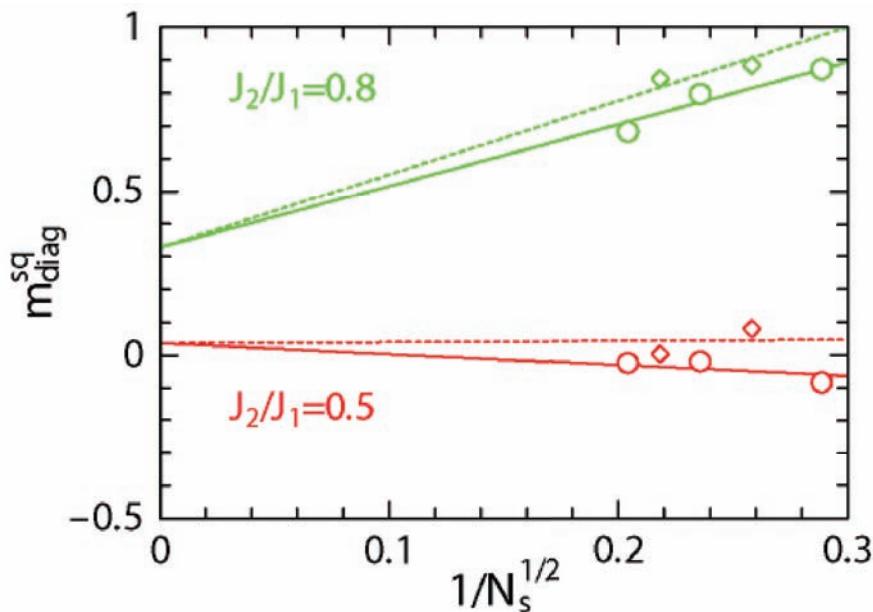
第7図: 異方的な場合の $m_{\text{diag}}^{\text{sq}}$ の J_2/J_1 依存性。

□, ■, ◇, ●, ○は、 $N_s=12, 15, 18, 21, 24$ の各場合である。エラーバー付きの二重丸は外挿の結果得られたものである。

4-2. 異方的な場合

それでは、空間異方性がある場合 ($J_2/J_1 < 1$) について見てみよう。有限サイズ N_s での $m_{\text{diag}}^{\text{sq}}$ を J_2/J_1 の関数として第7図に示した。 J_2/J_1 を 1 から小さくするにつれて、 $J_2/J_1=0.8$ から 0.5 付近の範囲で磁気秩序が急激に減少していく様子が見て取れる。この $J_2/J_1=0.8$ と 0.5において、上で述べた拘束条件付き解析を行ったのが、第8図である。 $J_2/J_1=0.5$ では共通の縦軸切片として 0.04 ± 0.17 となり、3副格子構造の長距離秩序が消失していることが示唆される。一方、 $J_2/J_1=0.8$ では、共通の縦軸切片として有意に零とは異なる値が得られた。その結果は、第7図の中で $J_2/J_1=0.9$ と 1 の場合と共に示した。 $J_2/J_1=0.8$ から 1 の領域では、3副格子構造の長距離秩序が確かに現れていることが分かる。

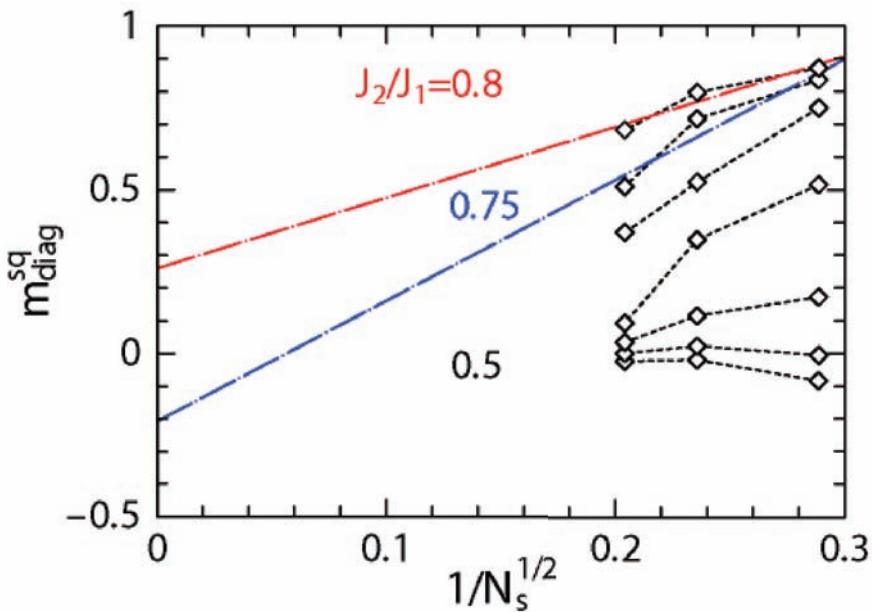
$J_2/J_1=0.8$ と 0.5 の間では、有限サイズ効果が深刻な形で現れるため、拘束条件付き解析の適用は困難である。その代わりに、我々は拘束条件を課さず N_s の偶奇の各系列で直線フィットを試みた。第9図は N_s が偶数の系列に対しての結果、第10図は N_s が奇数の系列に対しての結果である。第9図で縦軸切片が零となるのは、 $J_2/J_1=0.75$ と 0.8 の間で現れる。等方的な相互作用の場合にみたように、偶数の系列にこの解析を行うと磁気秩序が小目で評価されると考えられるので、縦軸切片が有限な値に留まる領域はやや狭めな形で得られることになる。一方、第10図で縦軸切片が零となるのは、 $J_2/J_1=0.6$ と 0.65 の間である。 N_s が奇数の系列に対しては、偶数の場合と反対で磁気秩序を大き目に評価していると見られ、縦軸切片が有限な値に留まる領域はやや広めの結果となると考えられる。これらの様子から、今回調べた長距離秩序が消失する J_2/J_1 の比は 0.7 ± 0.1 と見積もられる。



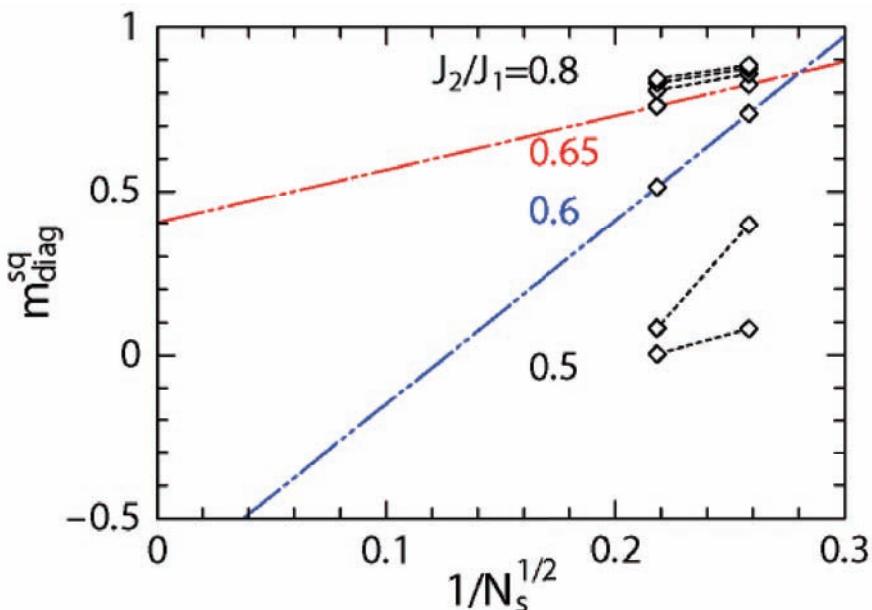
第8図: $J_2/J_1=0.5$ と 0.8 の場合に対する $m_{\text{diag}}^{\text{sq}}$ の外挿。

以上のことから、直接シミュレーションで得られた数値データを調べた結果として分かることは、等方的な三角格子の $S=1$ スピン系に発現している磁気秩序は、相互作用に空間異方性が入った場合でもただちに消失するのではなく、3副格子構造を保ったまま副格子磁化が徐々に

小さくなっていくということである。



第9図: $J_2/J_1=0.5$ と 0.8 の間の偶数サイト系に対する $m_{\text{diag}}^{\text{sq}}$ の外挿。
有限サイズのデータは、 J_2/J_1 について 0.05 刻みで与えている。



第10図: $J_2/J_1=0.5$ と 0.8 の間の奇数サイト系に対する $m_{\text{diag}}^{\text{sq}}$ の外挿。
有限サイズのデータは、 J_2/J_1 について 0.05 刻みで与えている。

5. まとめと展望

我々は、空間異方性を持つ三角格子上の $S=1$ ハイゼンベルク反強磁性体の基底状態について、

3副格子構造の磁気秩序の安定性を、近似を伴わない直接シミュレーションである数値対角化の方法（ランチヨス法）で調べた。異方性がない等方的な場合には、スピン相関関数の計算データを外挿し、スピン波近似で得られる副格子磁化の結果と定量的に合致することを確認できた。この長距離秩序は、相互作用が空間異方性を持つようになる場合、3副格子構造を保ったまま徐々に減少し、 J_2/J_1 の比が0.7付近で消失する結果を得た。磁気秩序相の範囲としては、近似を用いた研究でこれまでに報告されているものと比べるとかなり狭い領域となっている。 $J_2=0$ の場合に現れるハルデンギャップに関する限り、 J_2/J_1 の比が小さい領域ではスピン励起にギャップが開いていることが予想され、 J_2/J_1 の比が大きい場合の秩序相に近づくにつれてどのようにギャップが小さくなっていくのかという問題は、次なる課題である。エネルギーギャップを調べるには、系統的な系列の情報が必要となるが、それには大きな系のデータが必要となるため、スペコンを用いた大規模計算の重要性はますます高まってくる。

三角格子上のS=1ハイゼンベルク反強磁性体に対する実験としては、これまでに、NiGaS[27]やBa₃NiSb₂O₉[28]が等方的な事例の良い候補物質として報告されている。とは言え、これらの物質に対する実験で観測されていることと理論的な予測が、全ての面で合致している状況ではない。空間異方性を持つ系の候補物質が見つかれば、フラストレーション系の現象を深く理解していく上で非常に有効であることが期待される。

謝辞

本研究は、科学研究費助成事業学術研究助成基金助成金（基盤（C）24540348、基盤（C）23540388）および文部科学省科学研究費補助金（基盤（B）23340109）の支援を受けました。東京大学情報基盤センターのスーパーコンピュータの大規模チャレンジジョブとして実行した大規模数値計算に加えて、数値計算の一部は、東京大学物性研究所および自然科学研究機構核融合科学研究所、東北大学金属材料研究所、九州大学情報基盤センターのスーパーコンピュータの共同利用によって得られたものです。

参考文献

- [1] P. W. Anderson: Mater. Res. Bull. **8** (1973) 153.
- [2] D. A. Huse and V. Elser: Phys. Rev. Lett. **60** (1988) 2531.
- [3] Th. Jolicour and J. C. Le Guillou: Phys. Rev. B **40** (1989) 2727(R).
- [4] R. R. P. Singh and D. A. Huse: Phys. Rev. Lett. **68** (1992) 1766.
- [5] B. Bernu, C. Lhuillier, and L. Pierre: Phys. Rev. Lett. **69** (1992) 2590.
- [6] P. W. Leung and K. J. Runge: Phys. Rev. B **47** (1993) 5861.
- [7] B. Bernu, P. Lecheminant, C. Lhuillier, and L. Pierre: Phys. Rev. B. **50** (1994) 10048.
- [8] H. Nakano and T. Sakai: J. Phys. Soc. Jpn. **79** (2010) 053707.
- [9] H. Nakano, T. Shimokawa, and T. Sakai: J. Phys. Soc. Jpn. **80** (2011) 033709.
- [10] T. Sakai and H. Nakano: Phys. Rev. B **83** (2011) 100405(R).
- [11] 中野博生, 坂井徹: 日本物理学会誌 **66** (2011) 832.
- [12] H. Nakano and T. Sakai: J. Phys. Soc. Jpn. **80** (2011) 053704.
- [13] H. Nakano, S. Todo, and T. Sakai: submitted to J. Phys. Soc. Jpn.
- [14] W. Zheng, R. H. McKenzie, and R. P. Singh: Phys. Rev. B **59** (1994) 14367.

- [15] S. Yunoki and S. Sollera: Phys. Rev. B **74** (2006) 014408.
- [16] O. A. Starykh and L. Balents: Phys. Rev. Lett. **98** (2007) 077205.
- [17] D. Heidarian, S. Sollera, and F. Becca: Phys. Rev. B **80** (2009) 012404.
- [18] J. Reuther and R. Thomale: Phys. Rev. B **83** (2011) 024402.
- [19] J. Reuther and R. Thomale: Phys. Rev. B **83** (2011) 024402.
- [20] A. Weichselbaum and S. R. White: Phys. Rev. B **84** (2011) 245130.
- [21] S. Ghamari, C. Kallin, S. S. Lee, and E. S. Sørensen: Phys. Rev. B **84** (2011) 174415.
- [22] K. Harada: Phys. Rev. B **86** (2012) 184421.
- [23] T. Pardini and R. R. P. Singh: Phys. Rev. B **77** (2008) 214433.
- [24] P. H. Y. Li and R. F. Bishop: Euro. Phys. J. **85** (2012) 25.
- [25] H. Nakano and A. Terai: J. Phys. Soc. Jpn. **78** (2009) 014003.
- [26] J. Richter, O. Götze, R. Zinke, D. J. J. Farnell, H. Tanaka: arXiv:1210.7594.
- [27] S. Nakatsuji and Y. Nambu, H. Tonomura, O. Sakai, S. Jonas, C. Broholm, H. Tsunetsugu, Y. Qiu, and Y. Maeno: Science. **309** (2005) 1697.
- [28] Y. Shirata, H. Tanaka, T. Ono, A. Matsuo, K. Kindo, and H. Nakano: J. Phys. Soc. Jpn. **80** (2011) 093702.