

課題名(タイトル):

単層 FeSe における量子スピンゆらぎ

利用者氏名: ○ 獅子堂 達也 (1)

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

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

鉄系超伝導はこれまで大きな注目を集めてきた。特に SrTiO₃ などの酸化物表面に成長させた単層 FeSe においては非常に高い超伝導転移温度が観測され、その超伝導発現のメカニズムをめぐって活発な議論が続いている。ここで単層 FeSe は磁気秩序を示さない。しかし局在スピンの存在とそれらの間の磁氣的相関は重要であると考えられる。我々は密度汎関数法にもとづく単層 FeSe のスピンスパイラル計算を系統的に行い、この結果を S=1 の二次元正方格子スピンモデルにマップしたところ、(i) 最近接、次近接ハイゼンベルグ相互作用 (J_1 , J_2) が共に反強磁性的であり強い磁氣的フラストレーションがあること、(ii) 高次のスピン間相互作用である Biquadratic exchange および 4-spin cyclic exchange 相互作用がかなり強く (J_1 の 2 割程度の強さで) 存在していること、が明らかになった。(T. Shishidou et al., Communications Physics 1, 8 (2018).) ここで (i) は、磁氣的相関の議論には量子ゆらぎの取扱が本質的であることを示唆する。また (ii) について、鉄系超伝導のコミュニティでは Biquadratic exchange 相互作用の重要性は広く認識されているが、4-spin cyclic exchange 相互作用については全く議論がなく、これが磁氣的相関にどのような役割を担っているか非常に興味深いところである。本研究では、理化学研究所計算科学研究センターの柚木氏・曾田氏との共同研究の体制を取り、これらの相互作用をあらわに考慮した S=1 二次元正方格子量子スピンの問題を考え、密度行列繰り込み群 (DMRG) にもとづく大規模数値計算を実行することをめざす。

2. 具体的な利用内容、計算方法

計算科学研究センター量子系物質科学研究チーム(柚木グループ)の曾田氏が中心となって開発した二次元 DMRG 計算コードを使用し、計算を行っていく。

3. 結果

まずは、 J_1 と J_2 のみを含むハイゼンベルグ模型において、 J_2/J_1 を変化させ、サイズ依存性を吟味しつつ計算を行い、

どのような磁氣的相関が出現するかを明らかにすることをめざした。古典的ハイゼンベルグ模型および、ある近似の範囲で量子ゆらぎを考慮した過去の計算結果に対応する結果が得られつつある。すなわち、 J_2/J_1 が大きいところではストライプ型、小さいところではネール型の相関が優勢となる。

4. まとめ

今回の HOKUSAI 簡易利用の機会により、この量子スピンの問題に二次元 DMRG 計算が非常に有用であることを確認することができた。それと同時に、研究の遂行にはかなり大きな計算資源を必要とすることが体感として分かった。

5. 今後の計画・展望

計算コードの整備が重要になる。サイズを大きく取ると一般利用であってもジョブの制限時間内に計算が収まらなくなる。収束計算を次のジョブに引き継いで行えるように計算コードを改良することが必須となる。曾田氏により 4-spin cyclic exchange 相互作用の計算の実装がほぼ完了している。これをしっかりテストしていくことが重要となる。