

キタエフ模型が生み出す量子スピン液体研究の新たな潮流

那須 譲治 / 東京工業大学 理学院 助教 (公募研究 D02)

1. はじめに

電子が強いクーロン斥力によって結晶格子点に局在したモット絶縁体においては、電子の電荷の自由度は凍結し、スピンの自由度が磁氣的性質を支配するいわゆる局在スピン系が実現していると考えられています。電子が局在しているために、バンド描像に基づいた理論体系は適用できず、トポロジカルな性質とは全く無縁なようにも見えます。しかしながら、ある種の量子スピン状態では、その素励起をフェルミ粒子として記述することが可能であり、自由電子系と同様の枠組みでトポロジカル特性を議論できることわかっています。ここでは、局在スピン系の模型のひとつであるキタエフ模型に着目し、その基底状態、熱力学的性質および磁気ダイナミクスを私たちの研究結果を交えながら紹介していきたいと思えます。

2. キタエフ模型と量子スピン液体

キタエフ模型 (図1 参照) は、2006年の Alexei Kitaev によって提案されました [1]。物性物理学の分野では、この模型は量子スピン液体を実現する模型のひとつと考えられています。量子スピン液体は強い量子ゆらぎによって、極低温まで磁気秩序が現れない特異な量子状態です。その可能性は Philip Anderson によって 1973年に提案されたという長い歴史をもち、近年、無機化合物、有機物質の両方でその

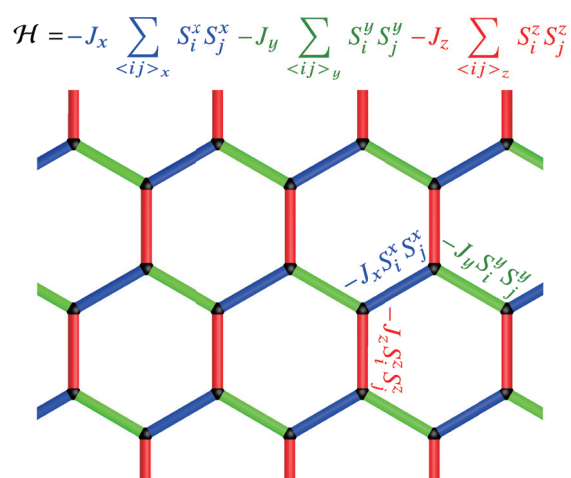


図1: キタエフ模型の相互作用。ここでは、 $J_x=J_y=J_z=J$ とする。

候補物質が発見され続けています。これまで量子スピン液体の理論研究は、幾何学的フラストレーションを有する格子上でのハバード模型やハイゼンベルク模型を中心に行われてきました。これらは量子多体問題に真正面から挑む問題であることから、基底状態の性質すら明らかにすることが困難な場合も多く、現在もお積極的に研究されています。特に、多体効果と量子ゆらぎの共存は、特異な素励起状態を生み出すことが期待され、さらに、内在する強い量子ゆらぎが量子計算へ応用できるのではと量子スピン液体研究の広がりが論じられています。

一方で、キタエフ模型の研究は、それとは全く逆のプロセスで議論されてきました。もともと、Alexei Kitaev は量子情報の分野の研究者であり、トポロジカル量子計算を実現する舞台として、可解な2次元局在スピン系であるキタエフ模型を提案し、その素励起は Z_2 ゲージ場と結合したマヨラナ粒子で記述できることを示しました [1]。その後、Baskaran-Mandal-Shankar らによって長距離スピン相関がないことが示され [3]、続いて、固体中でキタエフ模型が実現する可能性を Jackeli-Khaliullin が提案し [4]、一気に物性物理学で注目が集まったという背景を持ちます。そのため、本当に固体中の磁気状態が純粋なキタエフ模型で記述可能であるかどうかは問題ではありますが、キタエフ模型自体は、量子スピン液体を厳密に基底状態にもつ模型というだけでなく、特殊な素励起の存在や量子計算への応用まで示されたとても魅力的な系です。

3. キタエフ模型と自由マヨラナ粒子系との対応

キタエフ模型は多くの興味深い性質を持ち合わせていますが、基底状態と励起構造の大部分は Alexei Kitaev の原論文 [1] に記述されています。そのため、私たちは物性研究で重要な熱揺らぎの効果を明らかにすることを目的に研究を進めています。特に、キタエフ模型の可解性を利用した数値計算を行うことで、有限温度の解析を行ってきました [5-9]。ここではその計算方法の概略を説明します。

TOPICS

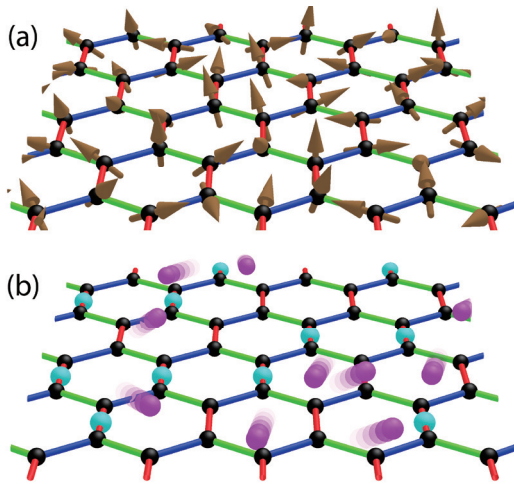


図2：(a) 量子スピン模型としてのキタエフ模型と (b) マヨラナ系へのマッピング。ピンクが遍歴的なマヨラナ粒子、水色が局所的なマヨラナ粒子を表す。

図1に示すように、キタエフ模型は $S=1/2$ の量子スピンの蜂の巣格子に定義された局在スピン模型であり、蜂の巣格子の3つの非等価なボンドで、異なる成分のイジング型の相互作用を持っています。マヨラナフェルミオンは自由度が $S=1/2$ スピンの半分であることから、スピンを2種類のマヨラナフェルミオンで常に書き換えることが可能ですが、キタエフ模型は、この書き換えにより、ボンドに局在するマヨラナ粒子と遍歴する自由マヨラナ粒子からなる系へと変換することができます(図2)。局在するマヨラナ粒子が局所保存量となることから、キタエフ模型は可解となります。この模型は実は、強相関電子系で広く研究されてきた Falicov-Kimball 模型や二重交換模型と類

似しており、多大な蓄積のあるこれら伝導電子系の模型に対する研究手法を量子スピン系であるキタエフ模型に適用するというアプローチを私たちは採用しました。これにより、近似なしに大きなクラスターサイズの系での数値シミュレーションが可能となりました。

4. スピンの分数化の顕在化

私たちはこの数値計算手法を用いて、様々な物理量の温度変化を調べていきました。ここでは特にすべての交換相互作用の強さが等しい場合を考えます。比熱の温度変化には相互作用定数に対応する温度において単一のピークが存在することが期待されますが、キタエフ模型では図3に示すように比熱は2つのピークを示します。これは、 $S=1/2$ 量子スピンの相関効果によって2つのマヨラナ粒子に分数化したことを直接示す重要な結果です。

加えて、有限温度における磁気ダイナミクスも計算しました。ここで問題となるのが、量子スピンは2種類のマヨラナ粒子の複合体と見なされるため、動的スピン相関の計算は、局在したマヨラナ粒子の時間発展を追う必要があり多体問題になってしまうことです[3]。私たちは、動的スピン相関が局所的(短距離)であり、この問題が不純物アンダーソン模型と類似していることに着目しました。これを利用し、不純物アンダーソン模型の解析で良く用いられる連続時間量子モンテカルロ法をキタエフ模型の動的相関に応用することで、動的スピン構造因子の温度変化を計算しました

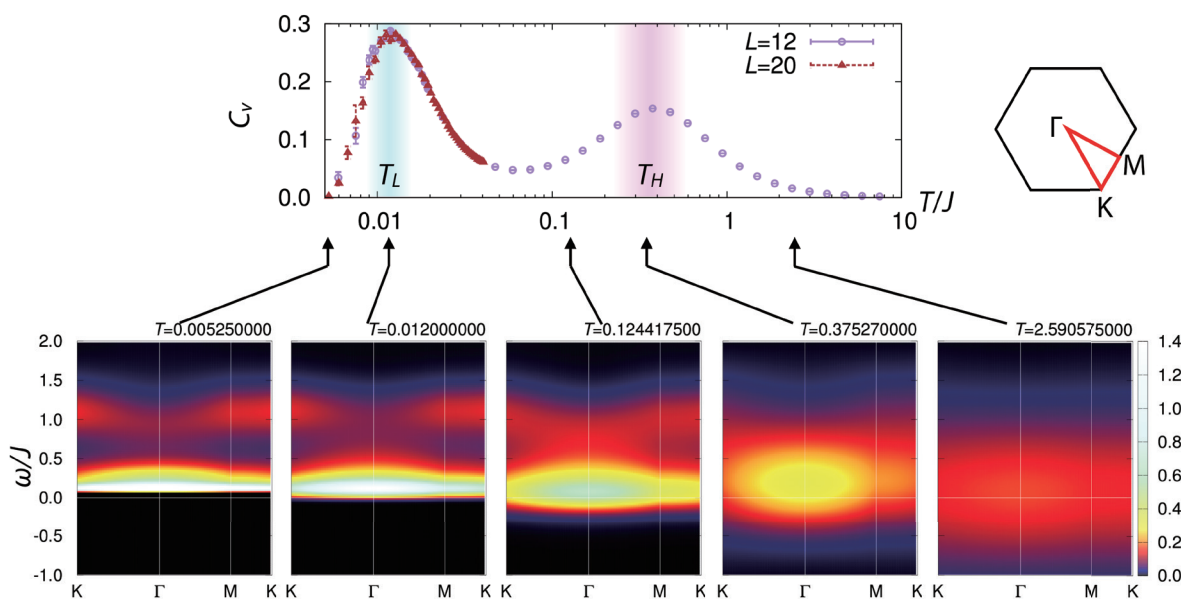


図3：上図：キタエフ模型の比熱の温度変化 [5,6]。下図：各温度での動的スピン構造因子 [7]。

[7]。その結果、極低温で見られる低エネルギーのコヒーレントなピークと高エネルギーにある連続的な構造が別々の温度で消失することを見いだしました (図3)。

上記の動的スピン相関においては、スピンの2種類のマヨラナ粒子の複合体として記述される以上、これらのマヨラナ粒子のダイナミクスを別個に取り出して議論することは難しいです。分数化を議論するには、2種類のマヨラナ粒子の片方のみを反映する物理量で議論する必要があります。ラマン散乱スペクトルは遍歴的なマヨラナ粒子を主に捉えることができるため、私たちはこの温度変化を計算しました。その結果、マヨラナ粒子のフェルミオンとしての性質が、ラマン散乱強度の温度変化に表れることを見いだしました [8]。

5. トポロジカルな性質を反映した熱輸送特性

しかし、ここまでの範囲では、Kitaevモデルの素励起がフェルミ粒子である可能性を、観測量として指摘することはできませんが、それがマヨラナ粒子であることを示すためには不十分です。そのため、遍歴マヨラナ粒子の示すトポロジカルな性質に注目しました。トポロジカルに非自明なマヨラナ粒子系が持つカイラルエッジモードは、それが持つ自由度を反映して通常のフェルミオンの半分の量子化値を与えることが知られています。マヨラナ粒子は電的に中性であることから、物理量として熱ホール係数にマヨラナ性が現れることが期待されます [10,11]。私たちは、磁場下での熱ホール係数の温度変化を計算し、温度低下に伴って非単調な温度変化の後、絶対零度に向かってフェルミ粒子系の半分の量子化値に漸近することを示しました [9]。

6. おわりに

ここまで、私たちが行ったKitaevモデルに関する計算結果の概略を述べてきました。近年、イリジウム酸化物やルテニウム化合物がKitaevモデルの実現舞台と見なされるようになり、実験理論共に多くの研究がなされています。これら現実の系で観測されている物理量は、純粋なKitaevモデルでも説明できるとされていますが [8,12,13]、Kitaev相互作用以外の磁気相互作用も存在し、磁気秩序など様々な影響を与えることが多くの研究からわかっています。また、磁場といった外場による影響の解明も大きな問題であり、ごく最

近、続々と研究成果が報告されています。Kitaev以外の相互作用や外場効果によるトポロジカルな性質の安定性や現実物質との対応など、まだまだ解決すべき問題が山積みですが、Kitaevモデルのもつ可解性を起点とした量子スピン液体研究は、国内外で非常に活発に研究が行われている分野であり、今後の発展が期待されます。

本研究は、求幸年氏 (東大工)、宇田川将文氏 (学習院大理)、吉竹純基氏 (東大工)、Johannes Knolle氏 (Imperial College London)、Dmitry Kovrizhin氏 (Oxford University)、Roderich Moessner氏 (MPI Dresden) との共同研究によって得られたものです。

- [1] A. Kitaev, Ann. Phys. (N. Y). **321**, 2 (2006).
- [2] P. Anderson, Mater. Res. Bull. **8**, 153 (1973).
- [3] G. Baskaran, S. Mandal, and R. Shankar, Phys. Rev. Lett. **98**, 247201 (2007).
- [4] G. Jackeli and G. Khaliullin, Phys. Rev. Lett. **102**, 17205 (2009).
- [5] J. Nasu et al., Phys. Rev. Lett. **113**, 197205 (2014).
- [6] J. Nasu et al., Phys. Rev. B **92**, 115122 (2015).
- [7] J. Yoshitake et al., Phys. Rev. Lett. **117**, 157203 (2016).
- [8] J. Nasu et al., Nat. Phys. **12**, 912 (2016).
- [9] J. Nasu et al., Phys. Rev. Lett. **119**, 127204 (2017).
- [10] K. Nomura et al., Phys. Rev. Lett. **108**, 026802 (2012).
- [11] H. Sumiyoshi and S. Fujimoto, J. Phys. Soc. Jpn. **82**, 023602 (2013).
- [12] S.-H. Do, et al., Nat. Phys. **13** 1079 (2017).
- [13] Y. Kasahara et al., arXiv:1709.10286.

著者紹介



なすじょうじ

1983年生まれ。山形県出身。2006年東北大学理学部卒業。2011年東北大学博士(理学)取得。その後、東北大学大学院理学研究科助教、日本学術振興会特別研究員を経て、2014年より現職。