

平成 30 年 6 月 1 日現在

機関番号：12601

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2015～2017

課題番号：15K13533

研究課題名（和文）マヨラナフェルミオン描像に基づいた量子スピン系に対する数値的研究

研究課題名（英文）Numerical study of quantum spin systems on the basis of Majorana fermion picture

研究代表者

求 幸年（Motome, Yukitoshi）

東京大学・大学院工学系研究科（工学部）・教授

研究者番号：40323274

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,900,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、磁性体に現れる奇妙な量子状態である量子スピン液体の性質を解明する目的で、新しい数値計算手法の開発を行った。Kitaev模型と呼ばれる理論モデルの厳密解で用いられるマヨラナフェルミオン描像に基づいて、新しい量子モンテカルロ法、動的な平均場法、および連続時間量子モンテカルロ法を開発した。それらを用いて、様々な物理量の温度依存性やエネルギー依存性を明らかにし、Kitaev模型に対する候補物質における最新の実験結果との定量的な比較を行うことで、これらの物質において量子スピン液体が発現している強い証拠を与えることに成功した。

研究成果の概要（英文）：In this project, we have developed new numerical methods for clarifying the nature of exotic quantum phases of magnets, quantum spin liquids. On the basis of the Majorana fermion picture used in the exact solution for the so-called Kitaev model, we developed a new quantum Monte Carlo method, dynamical mean-field approximation, and continuous-time quantum Monte Carlo method. By utilizing the new methods, we clarified the temperature and energy dependences of various physical quantities. From the comparison with the experimental data for candidate materials for the Kitaev model, we provided strong evidences for the realization of quantum spin liquids in these materials.

研究分野：物性理論

キーワード：強相関電子系 計算物理 量子スピン系 トポロジ

## 1. 研究開始当初の背景

固体中の電子がもつスピンの量子性は、新奇な磁気秩序や磁気励起、特異な外場応答など、種々の興味深い物性の起源として長年にわたって精力的に研究が行われている。理論的には、近年の計算機の急速な発達と数値計算アルゴリズムの発展により、様々な手法を用いた数値的な研究が世界中で盛んに行われている。

とりわけ現実の磁性体を理解する上で重要となる2次元以上の量子スピン模型に対しては、これまで主に世界線法に基づいた量子モンテカルロ法が広く用いられてきたが、負符号問題による制約のため、例えばフラストレーションのある系は取り扱えないなど、適用出来るモデルの範囲が限られている。この状況を打開するために、1次元系で実績のある密度行列繰り込み群法の高次元への拡張や、テンソルネットワーク法といった新しい手法の開発が精力的に行われているが、汎用性の高い計算手法は確立されていなかった。

## 2. 研究の目的

本研究の目的は、2次元以上の量子スピン系に対して、従来法を超える高い汎用性をもった新しい数値計算手法を開発し確立することである。従来の研究では、主に世界線法に基づいた量子モンテカルロ法が用いられてきたが、負符号問題による制約のため適用範囲が限定されている。本研究では、キタエフ型の量子スピン模型に対して我々が見出した、マヨラナフェルミオン描像に基づく新しい量子モンテカルロ法を軸として、それを発展させるとともに、動的平均場法をはじめとする他の計算手法への拡張を行うことで、新しい数値計算の枠組みを創出する。これにより、量子スピン液体といった従来取り扱いが困難であった新奇な量子状態の定量的な計算を初めて可能とし、量子磁性体研究に計算手法開発の側面からブレークスルーをもたらすことを目的とする。

## 3. 研究の方法

本研究では、適用出来るモデルの範囲に限界がある従来の計算手法を超えた枠組みの構築を目的として、マヨラナフェルミオン描像に基づいた量子スピン系に対する新しい数値計算スキームの開発を行う。具体的には、まず、マヨラナフェルミオン描像に基づく量子モンテカルロ法の拡張を行い、大規模計算や動的性質の計算を可能とする。この手法をキタエフ模型を中心とするスピン模型に適用し、その適用可能性を検証するとともに、新奇な量子状態の探索と解明を行う。さらに、動的平均場法、および連続時間量子モンテカ

ルロ法の開発と適用を行い、基底状態、有限温度、および動的性質といった包括的な計算を行う。研究代表者と分担者各自がもつスキルを最大限に活用して相補的な役割を担い、これまでの共同研究を通じて培ってきた有機的な連携をさらに発展させることで、強力な研究チームを形成して研究遂行にあたる。

## 4. 研究成果

まず、本研究のコアとなる数値計算手法開発の面での主な研究成果を以下に挙げる。

(1) 計算プログラムの開発・整備・改良：キタエフ模型におけるスピンドYNAMIKSの計算のために、マヨラナフェルミオン表示に基づいた新しい動的平均場法と連続時間量子モンテカルロ法を開発した。さらに、これらを改良し、プログラムの効率化・高速化と計算精度の向上を行った。具体的には、連続時間量子モンテカルロ法におけるアップデートの効率化と、実振動数への解析接続に用いている最大エントロピー法の実行方法の見直しを行った。

(2) 動的平均場法を超える新しい数値計算手法の開発：当初は想定していなかった進展として、連続時間量子モンテカルロ法と、マヨラナフェルミオン表示を用いた実空間量子モンテカルロ法を組み合わせることで、新しいスピンドYNAMIKSの計算手法を開発した。これにより、動的平均場法では計算できない極低温を含む非常に広い温度範囲でダイナミクス計算が可能となった。

(3) グリーン関数多項式展開法を用いた量子モンテカルロ法の改良：マヨラナフェルミオン表示を用いた実量子モンテカルロ法に、グリーン関数多項式展開法を用いたアルゴリズムを実装することで、計算速度の大幅な向上を実現した。これにより、3次元における拡張キタエフモデルの計算を系統的に行えるようになった。

(4) 磁場中のキタエフ模型に対する新しい数値計算手法の開発：計画にはなかった進展として、近年実験的に大きな注目を集めている磁場効果を明らかにする目的で、磁場中のキタエフ模型に適用可能な連続時間量子モンテカルロ法を開発を行なった。具体的には、マヨラナ表示によるアルゴリズムと、元のスピン表示によるアルゴリズムの両方を実装し、それらの実効性を調べた。

次に、上記の新しい数値計算手法を用いることで得られた主な研究成果を以下に挙げる。

(5) 蜂の巣格子状のキタエフモデルにおけ

るスピンの分数化：申請者らが開発した量子モンテカルロ法を用いて、比熱や同時刻スピン相関などの熱力学的な物理量に、量子スピン液体の特徴のひとつであるスピンの分数化がどのように現れるかを明らかにした。

(6) 磁気ラマン散乱の計算：マヨラナフェルミオンの特徴が直接現れる物理量として磁気ラマン散乱に着目し、量子モンテカルロ法を用いた有限温度の計算を行った。計算結果と実験結果の温度依存性を定量的に比較することで、現実の物質でマヨラナフェルミオンが捉えられている可能性を論じた。ここでは、当初より予定していた通り、国外の研究協力者との国際共同研究を行なった。

(7) 動的スピン構造因子の計算：(1), (2)で開発した計算手法を用いて、中性子散乱実験で得られる動的スピン構造因子の計算を行った。その結果について、当初の計画を超えて、韓国や米国などの実験グループとの国際的な共同研究を行なった。

(8) 3次元キタエフ模型が示す気液相転移：(3)で開発した新しい計算手法を用いて、ハイパーオクタゴン格子と呼ばれる3次元格子上のキタエフ模型が示す有限温度相転移の様子を明らかにした。ここでは、当初の計画を超えて、ドイツの理論グループとの共同研究へと発展した。

#### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計20件)

求 幸年, 分裂するスピン, 日本物理学会誌 **72**, 852 (2017)  
<http://www.jps.or.jp/books/gakkaishi/2017/12/72-12trends.pdf>

求 幸年, 那須 讓治, 量子スピン液体研究の最前線(その1), 固体物理 **52**, 199 (2017)  
<http://www.agne.co.jp/kotaibutsuri/kota1052.htm#no614>

S.-H. Do, S.-Y. Park, J. Yoshitake, J. Nasu, Y. Motome, Y. S. Kwon, D. T. Adroja, D. J. Voneshen, K. Kim, T.-H. Jang, J.-H. Park, K.-Y. Choi, and S. Ji, Majorana fermions in the Kitaev quantum spin system  $\text{-RuCl}_3$ , Nature Physics, **13**, 1079 (2017)  
doi:10.1038/nphys4264

P. A. Mishchenko, Y. Kato, and Y. Motome, Finite-temperature phase transition to a Kitaev spin liquid phase on a hyperoctagon lattice: A large-scale quantum Monte Carlo

study, Physical Review B **96**, 125124 (2017)  
doi:10.1103/PhysRevB.96.125124

J. Yoshitake, J. Nasu, and Y. Motome, Temperature evolution of spin dynamics in two- and three-dimensional Kitaev models: Influence of fluctuating  $Z_2$  fluxes, Phys. Rev. B **96**, 064433 (2017)  
doi:10.1103/PhysRevB.96.064433

J. Yoshitake, J. Nasu, Y. Kato, and Y. Motome, Majorana dynamical mean-field study of spin dynamics at finite temperatures in the honeycomb Kitaev model, Physical Review B **96**, 024438 (2017)

求 幸年, 計算機で見る磁性体の新しい相転移, パリティ **31**, 1月号 p22 (2016)

J. Yoshitake, J. Nasu, and Y. Motome, Fractional Spin Fluctuation as a Precursor of Quantum Spin Liquids: Majorana Dynamical Mean-Field Study for the Kitaev Model, Physical Review Letters **117**, 157203 (2016)  
doi:10.1103/PhysRevLett.117.157203

J. Nasu, J. Knolle, D. L. Kovrizhin, Y. Motome, and R. Moessner, Fermionic response from fractionalization in an insulating two-dimensional magnet, Nature Physics **12**, 912 (2016)  
doi:10.1038/nphys3809

那須 讓治, 宇田川 将文, 求 幸年, キタエフ量子スピン液体の"気液"相転移, 日本物理学会誌 **70**, 776 (2015)

求 幸年, 量子スピン液体を計算機で温める: 新しい磁気相転移の発見, パリティ **30**, 10月号 p36 (2015)

J. Nasu, M. Udagawa, and Y. Motome, Thermal fractionalization of quantum spins in a Kitaev model: Temperature-linear specific heat and coherent transport of Majorana fermions, Physical Review B **92**, 115122 (2015)  
doi:10.1103/PhysRevB.92.115122

[学会発表](計42件)

求 幸年, Kitaev スピン液体の理論: Majorana 粒子の観測に向けて, 日本物理学会第 73 回年次大会, シンポジウム講演 (2018)

Y. Motome, Thermal Fractionalization in Kitaev Quantum Spin Liquids, 2018 APS March meeting, 招待講演 (2018)

Y. Motome, Majorana fermions in Kitaev spin liquids, 1st Asia Pacific Workshop on Quantum Magnetism, 招待講演 (2017)

Y. Motome, Evincing Majorana fermions in Kitaev magnets, APCTP-Quantum Materials Symposium 2017 in conjunction with 17th Korea-Taiwan-Japan Workshop on SCES & APW, 招待講演 (2017)

J. Nasu, J. Yoshitake, Y. Motome, Thermal transport in the Kitaev model, Novel Quantum States in Condensed Matter 2017 (2017)

吉竹純基, 那須讓治, 求 幸年, キタエフ模型における磁場効果: NMR 磁気緩和率と非線形磁化率, 日本物理学会第 72 回年次大会 (2017)

Y. Motome, Fractional Spin Fluctuation as a Precursor of Quantum Spin Liquids, 8th International Conference on Highly Frustrated Magnetism (2016)

那須讓治, J. Knolle, D.L. Kovrizhin, 求 幸年, R. Moessner, キタエフ模型における分数化に由来したフェルミ励起:  $\text{-RuCl}_3$  におけるラマン散乱実験との比較, 日本物理学会 2016 年秋季大会 (2016)

Y. Motome, Majoranization in Kitaev spin liquids, The 2nd Conference on Condensed Matter Physics, 基調講演 (2016)

吉竹純基, 那須讓治, 求 幸年, キタエフ量子スピン液体近傍の磁気揺らぎとダイナミクス, 日本物理学会第 71 回年次大会 (2016)

Y. Motome, Thermodynamics of Fractional Quantum Spin Liquids, Deutsche Physikalische Gesellschaft e.V. (DPG: German Physical Society meeting), 招待講演 (2016)

吉竹純基, 求 幸年, Kitaev 模型のクラスター動的平均場近似法による研究, 日本物理学会 2015 年秋季大会 (2015)

Y. Motome, Hunting Majorana fermions in quantum spin liquids: Quantum Monte Carlo studies of Kitaev-type models, KITP Conference: Novel States in Spin-Orbit Coupled Quantum Matter: from Models to Materials, 招待講演 (2015)

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕

出願状況 (計 0 件)

取得状況 (計 0 件)

〔その他〕

ホームページ

<http://www.motome-lab.t.u-tokyo.ac.jp/index.html>

プレスリリース

東京大学大学院工学系研究科 プレスリリース, 幻の「マヨラナ粒子」の創発を磁性絶縁体中で捉える -電子スピンの分数化が室温まで生じていることを国際共同研究で実証-  
[http://www.t.u-tokyo.ac.jp/soe/press/se tnws\\_20160705102631416211849015.html](http://www.t.u-tokyo.ac.jp/soe/press/se tnws_20160705102631416211849015.html)

新聞報道等

日刊工業新聞 (2016 年 7 月 15 日付)  
東工大と東大、幻の「マヨラナ粒子」の創発を発見-室温磁性絶縁体中で

化学工業日報 (2016 年 7 月 5 日付)  
東工大-東大 「マヨラナ粒子」の創発 磁性絶縁体中で捕捉

6. 研究組織

(1) 研究代表者

求 幸年 (MOTOME, Yukitoshi)  
東京大学・大学院工学系研究科・教授  
研究者番号: 4 0 3 2 3 2 7 4

(2) 研究分担者

那須 讓治 (NASU, Joji)  
東京工業大学・理学院・助教  
研究者番号: 4 0 6 1 0 6 3 9

宇田川 将文 (UDAGAWA, Masafumi)  
学習院大学・理学部・准教授  
研究者番号: 8 0 4 3 1 7 9 0

加藤 康之 (KATO, Yasuyuki)  
東京大学・大学院工学系研究科・助教  
研究者番号: 5 0 7 0 8 5 3 4

(3) 連携研究者

(4) 研究協力者

Johannes Knolle  
Roderich Moessner  
吉竹 純基 (YOSHITAKE, Junki)  
Petr A. Mishchenko