

令和元年6月6日現在

機関番号：24506

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2016～2018

課題番号：16K17751

研究課題名(和文) ボーズ系・量子スピン系におけるトポロジカル秩序とその端状態に対する数値的研究

研究課題名(英文) Topological state and its edge state in bosonic and quantum spin systems

研究代表者

鈴木 隆史 (Suzuki, Takafumi)

兵庫県立大学・工学研究科・准教授

研究者番号：40444096

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,100,000円

研究成果の概要(和文)：近年トポロジカル量子状態に注目が集まっている。本研究では、1. 蜂の巣格子上のSU(N)スピンを持つHeisenberg模型における基底状態相図を量子モンテカルロ法で調べた。その結果、蜂の巣格子の場合磁気秩序相は $n > 4N$ で消失し、非磁性相が現れることを明らかにした。ただし n はSU(N)スピンのヤング図表現、 $(1, n)$ に対応する。続いて、2. スピン液体の実現が期待されている蜂の巣格子Kitaevスピン液体関連物質に注目し、数値厳密対角化法を用いて磁気励起や比熱の温度依存性を調べた。拡張Kitaev模型の磁気励起、比熱温度依存性を明らかにし、関連物質の有効磁気模型の提案を行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

蜂の巣格子をもつ模型で現れるトポロジカル量子状態の特徴を数値計算によって調べた。1つ目は、先行研究で2次元ハルデー状態が現れると期待される理論模型を調べ、予想された磁気秩序相と非磁性秩序相の境界が確かに存在することを明らかにした。2つ目は厳密にトポロジカル量子状態の一つ、スピン液体が現れる模型の候補物質に注目し、実験を通してスピン液体の特徴を如何に見出すかの提案を行った。

研究成果の概要(英文)：We have performed quantum Monte Carlo calculations to obtain the ground state phase diagram of SU(N)-spin Heisenberg models on a honeycomb lattice. We have found that magnetically ordered phase disappears for $n > 4N$, where n corresponds to the number of bosonic boxes in the Young representation for the SU(N) spin. We have also investigated magnetic excitations and the temperature dependence of the specific heat in generalized Kitaev models on a honeycomb lattice by using the numerical exact diagonalization method. The effective model to explain experimental results quantitatively has been proposed from the obtained results.

研究分野：統計力学，物性基礎論，計算科学

キーワード：トポロジカル状態 量子スピン 量子モンテカルロ法 キタエフスピン液体

1. 研究開始当初の背景

近年、物質合成・微細加工技術の急速な発展により、電子の電荷自由度に加えてスピンや軌道の自由度を制御することで新機能性材料を開発する試みが精力的に行われている。その中で電子スピンと軌道自由度に起因した興味深い現象の一つ、トポロジカル絶縁体・超伝導体など、従来の局所秩序変数とは異なる物理量で特徴づけられる新奇量子秩序状態の探索が精力的に研究されている。これらの量子秩序状態では、バルクの波動関数が持つ幾何学的性質を反映して、系の表面・端に特異なギャップレス状態が現れる。これまでトポロジカル状態に対する研究は、電子間相互作用の無い自由電子系を中心とした議論であったが、近年、電子間相互作用が強く働く強相関係数での研究が盛んになっている。

強相関係数の一つ、量子スピン系ではトポロジカル絶縁体とよく似た性質を持つ状態が存在することが古くから知られていた。S=1 反強磁性 Heisenberg スピン鎖の基底状態に現れるハルデーン状態である。この2次元版のハルデーン状態が現れると考えられている模型に一般化されたスピンSU(N)を持つ2次元 Heisenberg 模型がある。実際に2次元版のハルデーン状態が現れるか未解明の問題として残されている。

同じく基底状態でトポロジカル状態が現れる模型として Kitaev 模型がある。これは 2004 年に A. Kitaev によって提案された模型で、基底状態にスピン液体が現れることが厳密に示されている。当初、実現の困難な玩具模型であると見なされていたが、最近になって、 Na_2IrO_3 や RuCl_3 といったモデル物質が見つかった。これらの物質に対する精力的な実験が進むようになったが、スピン液体を特徴づける準粒子を実験で如何に捉えるか、モデル物質の有効模型が本当に Kitaev 模型に近いかが問題となっていた。

2. 研究の目的

[1] 蜂の巣格子, 正方格子上 SU(N)スピンを持つ一般化 Heisenberg 模型の基底状態

蜂の巣格子, 正方格子上 SU(N)スピン Heisenberg 模型の基底状態に注目した。SU(N)スピンは一般的なスピンである SU(2)を一般化したもので、ヤング図を用いてその反対称な箱の数 m と対称な箱の数 n で特徴づけられる。この一般化 SU(N)スピンを持つ Heisenberg 模型の基底状態は、 $(m,n)=(1,n)$ の場合に対する $1/N$ 展開から議論されている[N. Read and S. Sachdev, Nucl. Phys. B316, 609 (1989). N. Read and S. Sachdev, Phys. Rev. B 42, 4568 (1990).]. それによると格子点あたりの隣接スピン数 (coordination number) を Z とすると、 N が小さいところではネール秩序、 N が大きいところで n の値に応じて非磁性相が現れる。すなわち、(1) $n \neq 0 \pmod{Z}$ のとき、格子の持つ回転対称性を破った VBS 状態が現れ、(2) $n = 0 \pmod{Z}$ のとき、格子の対称性を破らない VBS 状態が現れ、それは2次元ハルデーン状態に対応するトポロジカル状態と考えられている。これまで正方格子の場合だと、 $n=1$ のときに格子の 90° 回転対称性を破った columnar VBS 状態、 $n=2$ のときに Nematic VBS 状態と呼ばれる格子の 180° 回転対称性を破った秩序状態が、 N が十分大きいところで現れることが量子モンテカルロ計算から確認されている[N. Kawashima and Y. Tanabe, Phys. Rev. Lett. 98, 057202 (2007), T. Okubo, et al., Phys. Rev. B 92, 134404 (2015).]. (1)や(2)で分類される非磁性相の現れる条件は格子の形状や (m, n) の組み合わせによらないと考えられているが、正方格子を除くと系統的には調べられていない。本研究では、蜂の巣格子, 正方格子上の SU(N) Heisenberg 模型の基底状態を量子モンテカルロ法で調べることを目的とした。

[2] Kitaev スピン液体関連物質におけるマヨラナ粒子探索

Kitaev によって提案された Kitaev 模型の基底状態はスピン液体であることが厳密に示されている。この Kitaev 模型を有効模型に持つ物質として、蜂の巣格子磁性体、 RuCl_3 や Na_2IrO_3 が見つかった。両磁性体では Ru イオン、Ir イオンが磁性を担い、強いスピン軌道相互作用と結晶場を反映して合成磁気モーメント $J_{\text{eff}} = 1/2$ の自由度が現れる。さらに、磁気モーメント間に働く相互作用が RuCl_6 や IrO_6 八面体の辺共有構造を介するために、Kitaev 相互作用と呼ばれるスピンを繋ぐボンドの方向に依存した Ising 型異方的相互作用が現れる。実際の物質では、Kitaev 相互作用以外の相互作用、すなわち Heisenberg 相互作用や対称非対角相互作用といったものが存在するため、それらを含む拡張 Kitaev 模型と呼ばれる模型で両物質の磁性が記述されると考えられている。興味深いことに、 RuCl_3 に対する実験では、Kitaev スピン液体由来と思われる特徴的な振る舞いが数多く報告されている。例えば、比熱の温度依存性に Kitaev スピン液体を裏付けるマヨラナ粒子生成に伴うダブルピーク構造[Y. Kubota, et al., Phys. Rev. B 91, 094422 (2015).]や非弾性中性子散乱実験でマヨラナ励起連続帯由来と思われるブロードピークが磁気転移温度はるか高温でも現れる[S. -H. Do, Nat. Phys. 13, 1079(2017)]ことが報告されている。両物質において Kitaev 相互作用以外の相互作用がどの程度含まれるか、すなわち有効模型が何か、について第一原理計算などが行われ、数多くの模型が提案されている。しかし、実験結果を定量的に説明するには至っていない。そこで本研究では、拡張 Kitaev 模型に対する磁気励起や比熱の温度依存性を調べ、 RuCl_3 の実験結果を説明できる有効磁気模型の提案を目的とした。また Kitaev 相互作用以外の相互作用が存在する場合に、スピン液体につながるマヨラナ粒

子の影響が如何に磁気励起や比熱の温度依存性に現れるかを明らかにすることを目的とした。

3. 研究の方法

[1] 蜂の巣格子, 正方格子上 SU(N) スピンを持つ一般化 Heisenberg 模型の基底状態

本研究では、まず小さな n で 2 次元ハルデー状態が期待される蜂の巣格子 SU(N) スピン反強磁性 Heisenberg 模型に注目した。負符号問題が生じない $(1, n)$ の SU(N) スピンを扱い、 N と n を代えた場合に現れる基底状態を量子モンテカルロ計算で調べた。

[2] Kitaev スピン液体関連物質におけるマヨラナ粒子探索

本研究では蜂の巣格子拡張 Kitaev 模型の基底状態や励起状態について数値厳密対角化法を用いて計算した。絶対零度や有限温度下における動的構造因子やテラヘルツ分光の磁場依存性、比熱の温度依存性に注目した。

4. 研究成果

[1] 蜂の巣格子, 正方格子上 SU(N) スピンを持つ一般化 Heisenberg 模型の基底状態

研究が先行している正方格子の場合 [N. Read and S. Sachdev, Nucl. Phys. B316, 609 (1989), N. Read and S. Sachdev, Phys. Rev. B 42, 4568 (1990), N. Kawashima and Y. Tanabe, Phys. Rev. Lett. 98, 057202 (2007), T. Okubo, et al., Phys. Rev. B 92, 134404 (2015).], N が小さいところで磁気秩序が現れ、 N を大きくすると磁気秩序が消失し、 $n=1, 3$ で VBS, $n=2$ で Nematic VBS, $n=4$ で Haldane 状態が現れる。磁気秩序が消失する N と n の関係は、 $n \sim 5.3N$ であることが明らかにされている。一方、蜂の巣格子では最近接スピン数の違いを反映して、 $n=1, 2$ で VBS 状態, $n=3$ で Haldane 状態が予想され、磁気秩序消失が予想される N の値も正方格子よりも小さいことが期待された。そのため、まず始めに蜂の巣格子 SU(N) Heisenberg 模型の基底状態を N を変えて調べた。その結果、 $n=1$ の場合 $N > 4$, $n=2$ の場合 $N > 8$ で磁気秩序が消失することが明らかとなった。すなわち磁気秩序と VBS 相との相境界が $n \sim 4N$ で現れることがわかった。このことは蜂の巣格子では正方格子の場合に比べて小さな N で磁気秩序が消失することを意味する。数値計算上、 n や N が大きくなると高い計算精度を出すことが困難になるため、有利な条件で 2 次元 Haldane を実現できることを示唆した。蜂の巣格子 $n=3$ の場合に磁気秩序消失がどの N で起こるか調べたところ、 N が 11 までは、非常に弱い磁気秩序が残ると期待されることがわかった。しかし、 $N > 12$ 以上で現れる状態については、秩序が非常に弱く、数値計算アルゴリズムの改善や計算精度を高めた計算が必要であることがわかった。このことから正方格子で $n=4$ で期待される秩序相の検出が極めて困難であることが予想される。

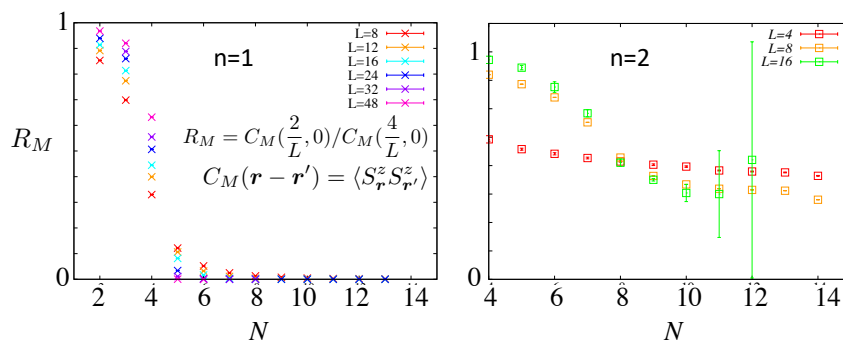


図1: 蜂の巣格子一般化Heisenberg模型におけるスピン相関比。(a) $n=1$, (b) $n=2$. 長距離磁気秩序があれば比の値はシステムサイズ L を大きくすると1に近く、 $n=1$ であれば $N > 5$, $n=2$ であれば $N > 9$ で磁気秩序が消失する。

[2] Kitaev スピン液体関連物質におけるマヨラナ粒子探索

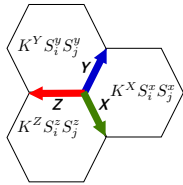


図1: 蜂の巣格子Kitaev模型. 蜂の巣格子を形成する3方向のボンド(X, Y, Z)上で, 方向に応じたイジング相互作用する.

$$\mathcal{H}_{\text{KH}} = \sum_p \sum_{B_p} \sum_{(ij) \in B_p} \sum_{\mu, \nu=x, y, z} S_i^\mu \hat{J}_{B_p}^{\mu\nu} S_j^\nu$$

$$\hat{J}_{Z_i}^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} J_{1st}^z & \Gamma_{1st}^z & \Gamma_{1st}^z \\ \Gamma_{1st}^z & J_{1st}^z & \Gamma_{1st}^z \\ \Gamma_{1st}^z & \Gamma_{1st}^z & J_{1st}^z + K_{1st}^z \end{pmatrix}$$

図2: 拡張Kitaev模型. 行列は図1のzボンド上の相互作用を表す.

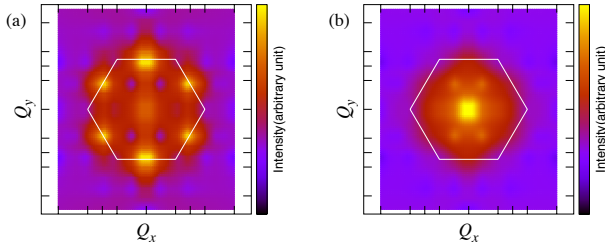


図3: 提案した有効模型に対する動的構造因子. (a)低エネルギー領域(3meV)における散乱強度分布. (b)高エネルギー領域(10meV)における結果.

を定性的, 定量的に説明する有効模型を提案した. さらに提案した有効模型は, 実磁場中のテラヘルツスペクトルについても定性的に説明できることを示した.

本研究では, 蜂の巣格子磁性体 RuCl₃ に注目した. 本物質の有効模型は図1, 2に示す蜂の巣格子拡張 Kitaev 模型で記述されると考えられている. 第一原理計算の結果を基に提案された4つの有効模型 [H. S. Kim and H. Y. Kee, Phys. Rev. B 93, 155143 (2016), S. M. Winter, et al., Phys. Rev. B 93, 214431 (2016), R. Yadav,

et al., Sci. Rep. 6, 37925 (2016), S. M. Winter, et al., Nat. Comm. 8, 1152 (2017).] に注目し, それらの模型の動的性質, 比熱, 静的構造因子の温度依存性を数値対角化法で計算した. 得られた計算結果と実験結果との比較を行った. その結果, 提案された4つの模型では比熱測定実験の結果や非弾性中性子散乱実験の結果を説明できないことを示した. そこで, 比熱の温度依存性と零磁場での磁気励起に対する実験結果

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 4 件) [全て査読あり]

1. Takafumi Suzuki and Sei-ichiro Suga : "Quantized DS=2 Excitation Spectra by Confinement in an S=1 Spin Chain", J. Phys. Soc. Jpn. **88** (2019) 053702.
2. Takafumi Suzuki and Sei-ichiro Suga : "Quantized excitation spectra by magnon confinement in quasi-one-dimensional S=1 spin systems" Phys. Rev. B **98** (2018) 180406.
3. Takafumi Suzuki and Sei-ichiro Suga : "Effective model with strong Kitaev interactions for α -RuCl₃", Phys. Rev. B **97** (2018) 134424.
4. Youhei Yamaji, Takafumi Suzuki, Takuto Yamada, Sei-ichiro Suga, Naoki Kawashima, and Masatoshi Imada : "Clues and criteria for designing a Kitaev spin liquid revealed by thermal and spin excitations of the honeycomb iridate Na₂IrO₃" Phys. Rev. B **93** (2016) 174425.
5. Takafumi Suzuki and Sei-ichiro Suga : "Dynamical spin structure factors of $\sqrt{3}\alpha$ -RuCl₃", J. Phys.: Conf. Ser. **969** (2018) 012123.
6. Takafumi Suzuki and Sei-ichiro Suga : "Field dependence of THz spectra of effective models for α -RuCl₃", AIP Advances **8** (2018) 101414.
7. Takafumi Suzuki and Youhei Yamaji : "Thermal properties of spin-S Kitaev-Heisenberg model on a honeycomb lattice", Physica B: Condensed Mater **536** (2018) 637-639.
8. Takuto Yamada, Takafumi Suzuki and Sei-ichiro Suga : "Magnetic excitations of Kitaev-Heisenberg models on honeycomb lattices", Physica B **525** (2017) 91-93.

[学会発表] (計 25 件)

1. 鈴木隆史, 菅誠一郎 : "蜂の巣格子拡張Kitaev模型の基底状態相図", 日本物理学会

大 7 4 回年次大会, 2019 年 3 月 14 日

2. Takafumi Suzuki : “Quantized magnon-excitation continuum in quasi one-dimensional antiferromagnetic $S=1$ Heisenberg systems”, APS march meeting 2019 , March 6, 2019

3. 鈴木隆史, 菅誠一郎 : “蜂の巣格子磁性体 α -RuCl₃ の有効模型と磁場中励起 2” , 日本物理学会 2018 年秋季大会, 2018 年 9 月 9 日

4. Takafumi Suzuki and Sei-ichiro Suga : “Dynamical properties of α -RuCl₃ in magnetic fields”, International Conference on Highly Frustrated Magnetism 2018, July 12, 2018

5. 鈴木隆史, 菅誠一郎 : “蜂の巣格子磁性体 α -RuCl₃ の有効模型と磁場中励起” , 日本物理学会第 73 回年次大会, 2018 年 3 月 24 日

6. Takafumi Suzuki : “Dynamical and thermal properties of the Kitaev honeycomb lattice magnet RuCl₃”, APS march meeting 2018, March 8, 2018.

7. Takafumi Suzuki : “Discretized excitation spectra by magnon confinement in quasi $S=1$ spin-chain systems”, APS march meeting 2018, March 6, 2018.

8. 鈴木隆史 : “蜂の巣格子磁性体 α -RuCl₃ の有効模型と磁場中励起” , 第二回量子スピン液体研究の新展開, 2017 年 12 月 14 日

9. Takafumi Suzuki and Youhei Yamaji : “Thermal properties of spin- S Kitaev-Heisenberg model on a honeycomb lattice”, Strongly Correlated Electron Systems 2017, July 18, 2017

10. 鈴木隆史 : “蜂の巣格子上の $SU(N)$ ハイゼンベルク模型における基底状態とその端状態” , 日本物理学会第 72 回年次大会, 2017 年 3 月 20 日

11. Takafumi Suzuki and Youhei Yamaji : “Two-peak structure in temperature dependence of the specific heat in spin- S Heisenberg-Kitaev models on a honeycomb lattice” , APS march meeting 2017, March 13, 2017.

12. 鈴木隆史, 山地洋平 : “蜂の巣格子上スピン S キタエフ模型と比熱ピーク” , 日本物理学会 2016 年秋季大会, 2016 年 9 月 13 日

13. Takafumi Suzuki and Masahiro Sato, “Unavoidable gapless edge state of bosonic Mott state trapped in two-dimensional optical lattices”, STATPHYS26, Lyon France, July 19, 2016.

14. 鈴木隆史 「蜂の巣格子磁性体の磁気励起と熱力学的性質」 第一回量子スピン液体研究の新展開, 東京大学, 2016 年 7 月 14 日 (招待講演)

15. Takafumi Suzuki : “Dynamical and thermal properties of Kitaev-Heisenberg magnets”, TNQMP2016, 東京大学, July 7, 2016.

〔図書〕 (計 0 件)

〔産業財産権〕

○出願状況 (計 0 件)

名称 :

発明者 :

権利者 :

種類 :

番号 :

出願年 :

国内外の別 :

○取得状況（計 0 件）

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年：
国内外の別：

〔その他〕
ホームページ等

6. 研究組織

(1) 研究分担者

研究分担者氏名：
ローマ字氏名：
所属研究機関名：
部局名：
職名：
研究者番号（8桁）：

(2) 研究協力者

研究協力者氏名：
ローマ字氏名：

※科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。