

平成30年 8月29日現在

機関番号：24506

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2015～2017

課題番号：15K05232

研究課題名(和文) 量子シミュレータとしての光格子中の3成分斥カフェルミ原子系に関する理論研究

研究課題名(英文) Theoretical study on three-component repulsive fermionic atoms in optical lattices as quantum simulator

研究代表者

菅 誠一郎 (Seiichiro, Suga)

兵庫県立大学・工学研究科・教授

研究者番号：40206389

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,500,000円

研究成果の概要(和文)：光格子中の3成分斥カフェルミ原子系が示す超流動のクーパーペア対称性を調べ、3種類の斥力の2種類が他より強い(弱い)場合は拡張s波($d_{x^2-y^2}$ 波)が現れる事を明らかにした。この結果は、光格子中の3成分6Li原子系は超流動クーパーペア対称性を制御可能な量子シミュレータである事を示唆する。また、U系化合物におけるs波超伝導の起源を解明する上で重要である。次に蜂の巣格子上のKitaev-Hellmann-Liebモデルを調べ、Kitaevスピン液体相近傍の磁気秩序相ではマヨラナ粒子に起因した非自明な振る舞いが現れる事を示した。更に候補物質RuCl₃の有効モデルを提案し、未解明の実験結果を定性的・定量的に説明した。

研究成果の概要(英文)：We have investigated the Cooper pairing symmetry of the superfluid state in three-component repulsive fermionic atoms in optical lattices. We have found that when two repulsions are stronger (weaker) than the other, the pairing symmetry is an extended s wave (a $d_{x^2-y^2}$ wave). The results suggest that three-component 6Li atoms in optical lattices act as quantum simulator that can control the Cooper pairing symmetry. The results are also important to reveal the origin of the s-wave superconductivity in U-based materials. Next, we have investigated Kitaev-Heisenberg model on honeycomb lattices, and have found that nontrivial behavior originating from Majorana fermions emerges in magnetically ordered phase close to the Kitaev spin liquid (KLS) phase. We have further proposed an effective model for a KSL-material RuCl₃, and have succeeded in explaining the unresolved experimental results for inelastic neutron scattering and specific heat not only qualitatively but also quantitatively.

研究分野：物性理論

キーワード：量子シミュレータ 3成分斥カフェルミ原子 光格子 斥力誘起s波超流動 Kitaevスピン液体 マヨラナフェルミ粒子

1. 研究開始当初の背景

近年、光格子中の冷却フェルミ原子系が持つ高い制御性を利用して、通常の固体物理では実験が困難な現象にアプローチするための研究が活発に行われている。さらに最近では、3成分内部自由度を持つ6Liフェルミ原子気体など多成分内部自由度を持つ系が実現され、それらが示す新奇な性質に注目が集まっている。このような研究の進展により、光格子中の多成分冷却フェルミ原子系は、新奇な量子多体効果を調べるための量子シミュレータとしての役割を果たしている。更に、系にゲージ場を人工的に導入する事にも成功している。これらにより、量子多体効果に関する我々の知見が、分野を横断して広がる事が予想される。

2. 研究の目的

本研究ではまず、我々がこれまで行ってきた光格子中の3成分斥力フェルミ原子系に対する研究を進展させ、3種類の斥力を変化させた場合に超流動のクーパーペア対称性がどのように変化するかを調べる。更に、2次元蜂の巣格子光格子が作成され、そこでキタエフ量子スピンモデルを実現する機構が提案された事に刺激され、キタエフ・ハイゼンベルグモデルの動的性質・熱力学的性質について調べる。蜂の巣格子上のキタエフモデルはスピン液体を基底状態に持ち、励起状態には2種類のマヨラナ粒子が現れる事が厳密に証明されている。更に、その候補物質としてIr化合物やRu化合物が活発に研究され、それらは新規な振る舞いを示す事が明らかにされている。それらの実験結果を理論的に説明する事も目的とする。

3. 研究の方法

(1) まず、3種類の斥力を系統的に変化させた場合の超流動のクーパーペア対称性をエリアシュベルグ方程式に基づき調べる。そして、クーパーペア対称性に関する温度・斥力相互作用の相図を決定する。

(2) 次に、蜂の巣格子上のキタエフ・ハイゼンベルグモデルの動的スピン構造因子、比熱、エントロピーを数値厳密対角化法、および熱的純粋量子状態法に基づき用いて調べる。キタエフ相互作用とハイゼンベルグ相互作用を系統的に変化させてこれらの量の振る舞いを調べ、キタエフスピン液体相近傍の秩序相において、キタエフスピン液体の特徴がどのように現れるかを明らかにする。更に、キタエフスピン液体の候補物質であるRuCl₃の有効モデルを提案し、未解明の非弾性中性子散乱実験結果、および比熱の実験結果を定性的かつ定量的に説明する事を試みる。

4. 研究成果

(1) 光格子中の3成分斥力フェルミ原子系が示す超流動のクーパーペア対称性をエリアシュベルグ方程式に基づき調べた結果、3

種類の斥力の内の2種類が他の斥力よりも強い場合は拡張s波が現れ、弱い場合はd_{x²-y²}波が現れる事を明らかにした。そして、クーパーペアの対称性に関する温度・斥力比の相図を決定した。ここで得られた結果は、光格子中の3成分6Li原子系は超流動クーパーペア対称性を制御可能な量子シミュレータである事を意味する。また、U系化合物における斥力誘起s波超伝導を説明するのに本研究のアイデアが援用されるなど、本研究成果は強相関電子系の超伝導研究にも影響を与えた。

(2) 蜂の巣格子上でキタエフ相互作用を持つ量子スピン系に関する研究成果は以下の通りである。

キタエフ・ハイゼンベルグモデルを調べた結果、キタエフスピン液体相近傍の磁気秩序相では、比熱は温度低下に伴い2つのピークを示す事を明らかにした。そして、それぞれのピークでは、約(1/2)log2のエントロピーを解放すると評価される。これらの振る舞いはキタエフスピン液体の特徴であり、それは量子スピンの2種類のマヨラナ粒子に分裂する事に起因する事が知られている。従って、キタエフ・ハイゼンベルグモデルにおいて、キタエフスピン液体相近傍の磁気秩序相では、励起状態にマヨラナモードが現れると考えられる。そして、比熱の二つのピーク温度の比は、キタエフスピン液体相からの距離を測るメジャーになる事を示した。

キタエフスピン液体の候補物質であるRuCl₃は7K以下で磁気秩序を示す事が知られている。そして、キタエフ相互作用の影響を考える上でキーとなる、次の二つの実験結果の解明に注目が集まっていた。

- ・非弾性中性子散乱実験：磁気秩序に起因する散乱ピークの他に、波数ゼロ近傍にブロードなピークを持つ大きな散乱強度が現れ、それは相転移温度(7K)以下から100K以上まで観測される。

- ・比熱はダブルピークを示し、高温側のピークは100K近くに現れる。

我々はこれまでのRuCl₃に対する4種類の第一原理計算結果を参考にして、経験的有效モデルを提案した。その有効モデルの特徴は、従来の第一原理計算による値と比べて、キタエフ相互作用が数倍強い事である。そして、その有効モデルに基づいて、動的スピン構造因子、比熱を計算した結果、未解明であった上記二つの実験結果を定性的かつ定量的に説明する事に成功した。得られた結果は、非弾性中性子散乱実験で観測された100K近くまで続く大きな散乱強度がマヨラナモードに起因する事を表しており、それは、量子スピンの2種類のマヨラナ粒子に分裂する事に起因した比熱の高温側のピークが約100Kに現れる事と辻褃があう。即ち、RuCl₃は励起状態にマヨラナモードが現れており、それはこの物質は7Kで磁気秩序状態に相転移するものの、キタエフスピン液体相近傍に位置し

ている事を表している。ここで得られた結果は、 RuCl_3 に対する第一原理計算、およびマヨラナモードを探索するための物質設計に影響を及ぼすと考えられる。

キタエフスピン液体相近傍の磁気秩序相にある系の磁気励起スペクトルを調べるため、キタエフ・ハイゼンベルグモデルを摂動クラスター展開で調べた。その結果、系がキタエフスピン液体相に近づくにつれ、励起の分散関係は励起エネルギーを低下させながらフラットになる事を明らかにした。この結果は、系が基底状態において磁気秩序相にあるにもかかわらず、励起スペクトルにはキタエフスピン液体の特徴が現れると解釈される。そして、の結果と首尾一貫している。

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6件)

Effective model with strong Kitaev interaction for -RuCl_3
T. Suzuki and S. Suga,
Phys. Rev. B **97**, 134424-1-11 (2018). 査読有 DOI: 10.1103/PhysRevB.97.134424

Dynamical spin structure factors of -RuCl_3
T. Suzuki and S. Suga, J. Phys. Conference ser. **969**, 012123-1-6 (2018). 査読有 DOI: 10.1088/1742-6596/969/1/012123

Magnetic excitations of Kitaev-Heisenberg models on honeycomb lattices
T. Yamada, T. Suzuki, and S. Suga,
Physica B **525**, 91-93 (2017). 査読有 DOI: 10.1016/j.physb.2017.09.010

Clues and criteria for designing a Kitaev spin liquid revealed by thermal and spin excitations of the honeycomb iridate Na_2IrO_3
Y. Yamaji, T. Suzuki, T. Yamada, S. Suga, N. Kawashima, and M. Imada,
Phys. Rev. B **93**, 174425-1-14 (2016). 査読有 DOI: 10.1103/PhysRevB.93.174425

Controlled pairing symmetry of superfluid state in three-component repulsive fermionic atoms in optical lattices
S. Suga, Phys. Rev. A **92**, 023617-1-6 (2015). 査読有 DOI: 10.1103/PhysRevA.92.023617

Dynamical Properties of Honeycomb-Lattice Iridates Na_2IrO_3
T. Suzuki, T. Yamada, Y. Yamaji, and S.

Suga, Phys Rev B, **92**, 184411-1-6 (2015). 査読有 DOI: 10.1103/PhysRevB.92.184411

[学会発表](計19件)

S. Suga and T. Suzuki
"Low-lying excitations of the Kitaev-Heisenberg model on a honeycomb lattice"
APS March Meeting 2018, Oral, Los Angeles Convention Center, Los Angeles, California, USA, March 5-9 (3/8), 2018.

T. Suzuki and S. Suga
"Dynamical and thermal properties of the Kitaev honeycomb-lattice magnet RuCl_3 "
APS March Meeting 2018, Oral, Los Angeles Convention Center, Los Angeles, California, USA, March 5-9 (3/8), 2018.

鈴木隆史, 菅誠一郎
蜂の巣格子磁性体 -RuCl_3 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) 口頭発表
2018年3月22日(木)~25日(日) 東京理科大学

S. Suga
"Ground state properties and magnetic excitations of the Kitaev-Heisenberg model with series expansions"
International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (SCES2017), poster
Clarion Congress Hotel in Prague, Prague, Czech, September 17-21, 2017.

S. Suga
"Dynamical spin structure factors of -RuCl_3 "
28th International Conference on Low Temperature Physics (LT28), poster
Swedish Exhibition Centre/Gothia Towers, Gothenburg, Sweden.

S. Suga
"Magnetic excitations with series expansion methods for Kitaev-Heisenberg models on honeycomb lattices"
28th International Conference on Low Temperature Physics (LT28), Oral
Swedish Exhibition Centre/Gothia Towers, Gothenburg, Sweden, August 9-16, 2017.

山田拓人, 鈴木隆史, 菅誠一郎
蜂 格子上 Kitaev-Heisenberg 模型の撮動クラスター展開による磁気励起の解析
日本物理学会 2017年秋季大会 口頭発表
2017年9月21日(木)~24日(日) 岩手大学

山田拓人, 鈴木隆史, 菅誠一郎
蜂巢格子上 Kitaev-Heisenberg 模型の摂動
クラスター展開による磁気励起の解析
日本物理学会 第 72 回年次大会 (2017 年)
2017 年 3 月 17-20 日

S. Suga

"Dynamical and thermal properties of the
Kitaev-Heisenberg magnet RuCl₃"
8th International Conference on Highly
Frustrated magnetism (HFM2016)
GIS NTU Convention Center, Taipei, Taiwan,
September 7-11, 2016.

山田拓人, 鈴木隆史, 菅誠一郎
蜂巢格子上 Kitaev-Heisenberg 模型の級数
展開による磁気励起の解析
日本物理学会 第 71 回年次大会 (2016 年)
2016 年 3 月 19-22 日

S. Suga

"Dynamical Properties of Honeycomb
Lattice Iridate Na₂IrO₃",
International Conference on Magnetism,
Barcelona convention Center, Barcelona,
Spain, July 5-10 (5/10), 2015.

山田拓人, 鈴木隆史, 菅誠一郎
Na₂IrO₃ の有効磁気模型に対する低エネルギー
励起
日本物理学会 2015 年秋季大会 2015 年 9 月
16-19 日

〔その他〕

ホームページ等

[http://www.eng.u-hyogo.ac.jp/msc/msc11/
index.html](http://www.eng.u-hyogo.ac.jp/msc/msc11/index.html)

6. 研究組織

(1) 研究代表者

菅 誠一郎 (Suga, Seiichiro)

兵庫県立大学・大学院工学研究科・教授

研究者番号：4 0 2 0 6 3 8 9

(2) 研究分担者

()

研究者番号：

(3) 連携研究者

()

研究者番号：

(4) 研究協力者

山田 拓人 (Yamada, Takuto)