

令和 6 年 6 月 2 日現在

機関番号：24506

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2019～2023

課題番号：19K03721

研究課題名（和文）蜂の巣格子4d, 5d遷移金属化合物の新奇物性に関する理論研究

研究課題名（英文）Theoretical study on novel properties of 4d-, 5d-transition-metal compounds on honeycomb lattices

研究代表者

菅 誠一郎 (Suga, Seiichiro)

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） 3,300,000円

研究成果の概要（和文）：1. キタエフ候補物質の有効モデルにおいて、ダイマー極限から等方的相互作用の系にわたるパラメータ領域で相図を得た。そして、等方的相互作用の系は量子臨界点上にあり相互作用の異方性に対して不安定である。
2. 異方的相互作用までを含むキタエフモデルに歪を加えた系のエネルギースペクトルには、歪み誘起擬ベクトルポテンシャルに起因したマヨラナランダウ準位が現れる。そして系が時間反転対称性を持つため、ゼロエネルギーのランダウ準位は片方の副格子にだけ現れる。
3. ホールドープしたキタエフモデルの基底状態には、時間反転対称性を破るp波超伝導状態・保存するp波超伝導状態・回転対称性を破るp波超伝導状態が現れる。

研究成果の学術的意義や社会的意義

マヨラナ粒子を用いた誤り耐性を持つトポロジカル量子計算の方法が示され、更に遷移金属化合物にマヨラナ粒子が現れる事が示されて以来、物質中でのマヨラナ粒子の研究が活発に行われている。しかし、マヨラナ粒子は電磁場と反応しないため、存在を確認し制御する事は困難な問題となっている。本研究では、候補物質に対する有効モデルの基底状態相図を広いパラメータ領域で明らかにした。次に、系に加えた歪みがマヨラナ粒子と反応し、エネルギーはランダウ準位に量子化される事を明らかにした。この結果はマヨラナ粒子を制御する方法の確立に繋がる。更に、ホールドープした候補物質は新規な超伝導状態を実現する舞台である事を明らかにした。

研究成果の概要（英文）：1. Phase diagrams of the effective model of the Kitaev candidate materials are obtained from the dimer limit to the isotropically interacting system. The isotropically interacting system is on the quantum critical point and thus is unstable to the anisotropy of the interactions.

2. The energy spectrum of the anisotropically interacting Kitaev model with strain shows Majorana Landau levels due to the strain-induced pseudovector potential. Since the system has time-reversal symmetry, the Landau level at zero energy appears only on the one sublattice.

3. In the ground state of the hole-doped Kitaev model, the p-wave superconducting states with time-reversal symmetry breaking, with time-reversal symmetry preserving, and with rotational-symmetry breaking appear, as the hole concentration increases.

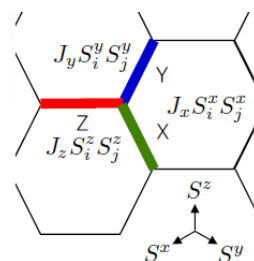
研究分野：物性理論

キーワード：拡張キタエフモデル 相互作用の異方性 基底状態相図 歪み誘起擬ベクトルポテンシャル マヨラナランダウ準位 ホールドープ カイラルp波超伝導 ネマティックp波超伝導

様式 C - 19、F - 19 - 1 (共通)

1. 研究開始当初の背景

近年、蜂の巣格子において三種類のボンド方向に依存した成分の強磁性イジング型スピン間相互作用(キタエフ相互作用、右図参照)を持つスピンモデルの基底状態は、マヨラナ粒子で記述される量子スピン液体である事が証明された。2006年に発表されたキタエフの論文では、また、マヨラナ粒子を用いた誤り耐性を持つトポロジカル量子計算の可能性が示され注目を集めた。その後、 α -RuCl₃、Na₂IrO₃など一群の4d、5d遷移金属化合物はキタエフ相互作用を持つ事が理論的に示された。これらの研究を契機として、キタエフ相互作用を持つ候補物質(キタエフ候補物質)にマヨラナ粒子が現われる事を確認し、その制御に繋がる知見を得るための研究が活発に行われている。しかし、マヨラナ粒子は電磁場に反応しないため、直接観測する事や外部から制御する事は困難な問題となっている。そのため、マヨラナ粒子と反応する外場を加え、その応答を観測する方法を確立する事が求められている。また、キタエフ候補物質を記述する有効モデルを確立し、その相図を解明する事も求められている。さらに、キタエフ候補物質は強いスピン軌道相互作用と電子相関効果によるモット絶縁体であるため、この物質にキャリアをドーブすると新規なクーペペア対称性を持つ超伝導が現れると考えられる。実際、スレーブボソン平均場近似を用いた先行研究により、時間反転対称性を破るp波超伝導・保存するp波超伝導、及び回転対称性を破るp波超伝導などが得られている。しかし、超伝導のペア対称性は採用するスレーブボソンの対称性により異なるため、どのようなペア対称性を持つ超伝導が現れるかは未解決なままである。



2. 研究の目的

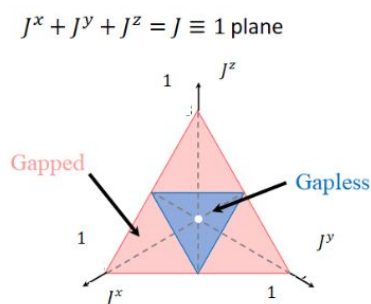
そこで本研究では、以下のテーマを扱う。

1. キタエフモデルに歪みを与えた場合のマヨラナ粒子の低エネルギー状態を調べる。歪みの効果は擬ベクトルポテンシャルと見做すことができるため、歪みは直接マヨラナ粒子に作用する。そして、マヨラナ粒子のエネルギーはランダウ準位に量子化されると考えられる。そこで、キタエフ相互作用の異方性を含む広いパラメータ領域でエネルギースペクトルを調べ、マヨラナ粒子のランダウ準位が現れるパラメータ領域を明らかにし、その観測可能性を議論する。
2. キタエフ候補物質の有効モデルは、キタエフ相互作用・非対角対称相互作用・ハイゼンベルク相互作用から構成される。これら三種類の相互作用の異方性を変化させ、ダイマー極限から等方的相互作用をする系までの範囲において、三種類の相互作用の強さを系統的に変化させた場合の基底状態相図を調べる。
3. スレーブボソン法とは異なる計算方法を用い、キタエフ候補物質の有効モデルにホールをドーブした系の基底状態を調べる。そして、ホール濃度依存して、どのようなペア対称性を持つ超伝導状態が現れるかを明らかにし、先行研究との違いの理由を議論する。

3. 研究の方法

以下の方法で、上記のテーマを研究した。

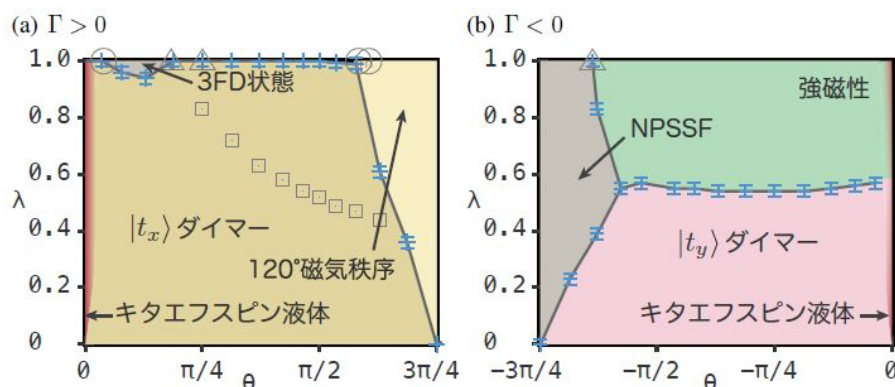
1. 歪みがないキタエフモデルでは、キタエフ相互作用の二つの成分の和が他の成分よりも大きい場合、マヨラナ粒子の低エネルギー分散はディラック型でギャップを持たない。(右図はキタエフ相互作用の三成分で張られるパラメータ空間。中心を含む下向き三角形の領域ではギャップレスである。)この相互作用の領域で、三軸歪が加わった蜂の巣格子のキタエフモデルのエネルギースペクトルを特異値分解法により調べる。更に、低エネルギー有効理論を用いて、この系のエネルギー状態を解析計算により調べ、数値計算結果と比較・検討する。
2. 摂動クラスター展開と数値厳密対角化により、キタエフ候補物質の有効モデルが持つ三種類の相互作用の異方性を変化させ、ダイマー極限から等方的相互作用をする系までのパラメータ範囲において、三種類の相互作用の強さを系統的に変化させながら基底状態を調べる。そして、得られた結果をまとめて相互作用の強さと異方性に関する相図を明らかにする。
3. グッツヴィラー近似に基づく繰り込まれた平均場近似を用い、ホールをドーブしたキタエフモデルの超伝導状態を調べる。この方法で計算した2次元相関電子系の変分超伝導エネルギーは、変分モンテカルロ法の結果と比べても精度に問題ない事が知られている。そして、ホッピングチャンネル、ペアリングチャンネル、同一格子点での散乱チャンネルに対する平均場を導入して自己無撞着な解析を行う。



4. 研究成果

得られた結果は以下の通りである。

1. キタエフ相互作用の異方性を変化させながら特異値分解により数値計算した結果、歪がない系のギャップレス領域(上図参照)では、マヨラナ粒子のエネルギースペクトルは低エネルギー領域において、ディラック粒子に特徴的なランダウ準位に量子化される事を明らかにした。すなわち、 $E_n \propto \sqrt{n}$ ($n = 0, 1, 2, \dots$)。更に、系が時間反転対称である事を反映して、ゼロエネルギーのランダウ準位は、蜂の巣格子の片方の副格子にしか現れない事を明らかにした。これらの結果を、低エネルギー有効理論を用いた解析計算によっても確かめた。これらの振る舞いは、走査型トンネル分光法などによって観測可能と考えられる。
2. キタエフ候補物質の有効モデルは、キタエフ相互作用・非対角対称相互作用・ハイゼンベルク相互作用から構成される。これらの相互作用の異方性を変化させ、ダイマー極限から等方的相互作用の系までの範囲において、相互作用の強さを系統的に変化させた場合の基底状態を摂動クラスター展開と数値厳密対角化により調べた。その結果、ダイマー状態・スピン液体状態・非整合秩序状態などが現れる事を明らかにした。下図はキタエフ相互作用(K)と非対角対称相互作用(Γ)により構成されるモデルの相図である。ここで、 $K = -\cos \theta$, $\Gamma = \sin \theta$ としてお



り、横軸の θ は相互作用の強さと符号を変化させる。また、縦軸の λ は相互作用の異方性を制御するパラメータで、 $\lambda = 0$ は z ボンド上の相互作用だけが値を持つダイマー状態、 $\lambda = 1$ は x, y, z ボンド上の相互作用が等しい等方的相互作用の系である。相図中で 3FD 状態は「三重縮退スパイラル相」、NPSSF は「静的スピン構造因子にピークが見られないスパイラル相」の意味である。このように、相互作用の異方性と強さ・符号に依存して、様々な状態が現れる事が分かる。この結果はまた、等方的な相互作用をする系は、様々な状態の臨界点(線)上にある事を示している。一方、第一計算などにより、キタエフ候補物質の有効モデルにおいて、三種類の相互作用は等方的かそれに近いことが知られている。すなわち、キタエフ候補物質は相互作用の異方性に関して不安定な状況にあると考えられる。

3. グッツヴィラー近似に基づく繰り込まれた平均場近似を用いてホールドーブしたキタエフモデルの基底状態を調べた結果、ホール濃度が増加するにつれて、基底状態は時間反転対称性を破る p 波超伝導・破らない p 波超伝導・回転対称性を破る p 波超伝導が現れる事を明らかにした。すなわち、これら三種類の超伝導状態は採用するスレーブボソンの対称性に依存したゴーストではなく、ホッピングチャンネル、ペアリングチャンネル、同一格子点での散乱チャンネルという自然な散乱過程を考慮すれば得られる。得られた結果は、ホールをドーブしたキタエフ候補物質が、新規な超伝導状態を実現するための舞台である事を意味している。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計4件（うち査読付論文 4件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Takuto Yamada and Sei-ichiro Suga	4. 巻 92
2. 論文標題 Strain-induced Landau levels of Majorana fermions in an anisotropically interacting Kitaev model on a honeycomb lattice	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 J. Phys. Soc. Jpn.	6. 最初と最後の頁 114705-1-8
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.7566/JPSJ.92.114705	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 T. Suzuki, T. Yamada, and S. Suga	4. 巻 103
2. 論文標題 Ground-state phase diagram of anisotropically interacting Heisenberg- γ models on a honeycomb lattice	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Phys. Rev. B	6. 最初と最後の頁 224425-1-10
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.103.224425	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Takuto Yamada, Takafumi Suzuki, and Sei-ichiro Suga	4. 巻 102
2. 論文標題 Ground-state properties of the K - model on a honeycomb lattice	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 PHYSICAL REVIEW B	6. 最初と最後の頁 024415-1-8
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.102.024415	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Takafumi Suzuki and Sei-ichiro Suga	4. 巻 88
2. 論文標題 Quantized $S=2$ Excitation Spectra by Confinement in an $S=1$ Spin Chain	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 J. Phys. Soc. Jpn	6. 最初と最後の頁 053702-1-3
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.7566/JPSJ.88.053702	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

[学会発表] 計29件(うち招待講演 1件/うち国際学会 17件)

1. 発表者名 S. Suga
2. 発表標題 Strain-induced Landau levels of Majorana fermions in an anisotropically interacting Kitaev model
3. 学会等名 12th International Conference on Highly Frustrated Magnetism (国際学会)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 S. Suga
2. 発表標題 Real-space analysis of a hole-doped Kitaev model
3. 学会等名 International Symposium on Superconductivity ISS2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 J. Tanaka, T. Suzuki, and S. Suga
2. 発表標題 Phase Classification Accuracy of Neural Networks Learned from Spin-spin Correlation Functions in a Ferromagnetic Model
3. 学会等名 9th Joint Symposium on Advanced Materials and Applications 2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 S. Suga
2. 発表標題 Strain-induced Landau levels of Majorana fermions in an anisotropically interacting Kitaev model on a honeycomb lattice
3. 学会等名 The 28th IUPAP International conference on Statistical Physics (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 山田拓人, 菅誠一郎
2. 発表標題 蜂巢格子Kitaev模型のギャップ相におけるマヨラナフェルミ粒子の歪み誘起ランダウ準位
3. 学会等名 日本物理学会 2024年春季大会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 山田拓人, 菅誠一郎
2. 発表標題 異方的相互作用をする蜂巢格子Kitaev模型における歪み誘起マヨラナランダウ準位の歪み角度依存性
3. 学会等名 日本物理学会 第78回年次大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 S. Suga
2. 発表標題 Strain-induced Majorana Landau levels in an anisotropically interacting Kitaev model
3. 学会等名 11th International Conference on Highly Frustrated Magnetism 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 S. Suga
2. 発表標題 Majorana Landau levels in an Anisotropically Interacting Strained Kitaev Model
3. 学会等名 29th International Conference on Low Temperature Physics (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 S. Suga
2. 発表標題 Real-space analysis of hole-doped spin liquid states in an extended Kitaev model
3. 学会等名 29th International Conference on Low Temperature Physics (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 S. Suga
2. 発表標題 Strain-induced Majorana Landau levels in an anisotropically interacting Kitaev model on a honeycomb lattice
3. 学会等名 Novel Quantum States in Condensed Matter 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 山田拓人, 菅誠一郎
2. 発表標題 異方的相互作用をする蜂の巣格子キタエフモデルの歪み誘起低エネルギー状態
3. 学会等名 日本物理学会 2022年秋季大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 山田拓人, 菅誠一郎
2. 発表標題 異方的相互作用をする蜂の巣格子キタエフモデルにおけるマヨラナフェルミ粒子の歪み誘起ランダウ準位
3. 学会等名 日本物理学会 2023年春季大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 S. Suga
2. 発表標題 Ground-state phase diagrams of the anisotropically interacting Kitaev- γ -Heisenberg models on honeycomb lattices
3. 学会等名 International Conference in Strongly Correlated Electrons systems 2020 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 S. Fukuda, H. Tsuchiura, and S. Suga
2. 発表標題 Real-space analysis of hole-doped spin liquid states based on an extended Kitaev model
3. 学会等名 International Symposium on Superconductivity 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 菅 誠一郎
2. 発表標題 キタエフ相互作用を持つ蜂の巣格子遷移金属化合物の性質
3. 学会等名 岡山理科大学大学院理学研究科応用物理学専攻セミナー (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 谷口亮太, 山田拓人, 鈴木隆史, 菅誠一郎
2. 発表標題 異方的相互作用をするキタエフモデルにおけるマヨラナ粒子の歪み誘起ランダウ準位
3. 学会等名 日本物理学会 第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 福田周平, 土浦宏紀, 菅誠一郎
2. 発表標題 キャリアドープされた拡張Kitaev模型の超伝導状態に関する実空間解析
3. 学会等名 日本物理学会 第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 山田拓人, 鈴木隆史, 菅誠一郎
2. 発表標題 蜂の巣格子上のK-モデルの基底状態相図
3. 学会等名 日本物理学会2020秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 鈴木隆史, 菅誠一郎
2. 発表標題 蜂の巣格子Heisenberg-モデルの基底状態
3. 学会等名 日本物理学会2020秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 S. Suga
2. 発表標題 Ground-state phase diagram of anisotropically interacting Kitaev-Heisenberg - models on a honeycomb lattice
3. 学会等名 Waiting for the conference on Highly Frustrated Magnetism (wHFM21) Virtual (国際学会)
4. 発表年 2021年

1 . 発表者名 T. Yamada, T. Suzuki, and S. Suga
2 . 発表標題 Ground State Properties of the K- Model on a Honeycomb Lattice
3 . 学会等名 Waiting for the conference on Highly Frustrated Magnetism (wHFM21) Virtual (国際学会)
4 . 発表年 2021年

1 . 発表者名 S. Suga
2 . 発表標題 Ground-state phase diagram of the S=1/2 Heisenberg- model on a honeycomb lattice
3 . 学会等名 APS March Meeting 2021 ON LINE (国際学会)
4 . 発表年 2021年

1 . 発表者名 T. Yamada, T. Suzuki, and S. Suga
2 . 発表標題 Ground-state phase diagram of the Kitaev- model on a honeycomb lattice
3 . 学会等名 APS March Meeting 2021 ON LINE (国際学会)
4 . 発表年 2021年

1 . 発表者名 S. Suga
2 . 発表標題 Quantized Excitation Spectra by Confinement in (Quasi-)One-Dimensional S=1 Quantum Spin Systems
3 . 学会等名 International Conference on Frontiers of Correlated Electron Sciences (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Suzuki and S. Suga
2. 発表標題 Ground-state phase diagram of the extended Kitaev- model on a honeycomb lattice
3. 学会等名 International Conference on Frontiers of Correlated Electron Sciences (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 S. Suga
2. 発表標題 Quantized $S=2$ excitation spectra by confinement in an $S=1$ Ising spin chain under magnetic fields
3. 学会等名 APS March Meeting 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 鈴木隆史, 菅誠一郎
2. 発表標題 擬一次元シングルイオン異方性を持つ $S=1$ 反強磁性Heisenberg模型における離散励起
3. 学会等名 日本物理学会 2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 菅誠一郎, 鈴木隆史
2. 発表標題 磁場中 $S=1$ イジングスピソ鎖における量子化された $S=2$ 励起スペクトル
3. 学会等名 日本物理学会 2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 鈴木隆史, 菅誠一郎
2. 発表標題 蜂の巢格子拡張キタエフ模型の基底状態相図2
3. 学会等名 日本物理学会 第74回年次大会
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

材料物理学研究グループ https://www.eng.u-hyogo.ac.jp/msc/msc11/index.html
--

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	山田 拓人 (Yamada Takuto)	兵庫県立大学 (24506)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------