

有限温度・磁場中の量子スピン液体物質の

汎関数繰り込み群による研究

Functional renormalization group study on quantum spin liquid materials under magnetic field at finite temperature

加藤 雄介

東京大学大学院総合文化研究科広域科学専攻

1. 研究目的

本研究課題は、Kitaev 量子スピン液体状態の実現可能性や実現のための指針を数値計算によって明らかにするものである。量子スピン液体とは、強い量子力学的な揺らぎによって秩序相への相転移が妨げられた、非自明な基底状態である。一部の量子スピン液体ではトポロジカル秩序に付随する分数励起を用いることで外乱に強いトポロジカル量子計算が行えるため、純粋科学だけでなく応用面からも注目を集めている。応用のためにも量子スピン液体が実現する候補材料の特定や材料探索の指針を与えることは重要である。2006 年に提案された Kitaev 模型は基底状態が量子スピン液体 (以下、Kitaev 量子スピン液体) であることが厳密に示された模型である。当初、純粋な理論模型であった Kitaev 模型だが、2009 年以降に、この模型に現れる特徴的なスピン間相互作用の一部のルテニウム酸化物やイリジウム酸化物での実現が提案され、理論研究だけではなく実験研究も精力的に行われてきた。

本研究は、固体中および冷却原子系での Kitaev 量子スピン液体の実現可能性を汎関数繰り込み群という数値手法により明らかにするものである。

2. 研究成果の内容

本課題研究中には大きく分けて 2 種類の系での Kitaev 量子スピン液体の実現可能性を調べた。1 種類目の系は、光格子中にトラップされた冷却極性分子系である。冷却極性分子系を、分子の回転準位をスピン自由度とみなし量子スピン系のシミュレーターとして用いる提案がされてきた。マイクロ波の照射によってスピン間相互作用を自在にデザインできること、そして、その一例として Kitaev 型の相互作用が実現することが 2013 年に提案された。本研究は、これらの提案を元に dipolar Kitaev 模型という模型を定義し、その基底状態を汎関数繰り込み群により求めた。Dipolar Kitaev 模型に現れるスピン間相互作用は、双極子型の長距離相互作用であるが、その際隣接部分は Kitaev 模型と同じ相互作用であるが、第 2 隣接を超えた長距離部分はサイト間の相対角度に応じた複雑な相互作用である。PFRG による計算では、計算コストが相互作用の到達距離に依らな

いため、双極子型の長距離相互作用を持つ dipolar Kitaev 模型の解析に有用である。

PFFRG により計算した結果としては、全ての異方性パラメータで系は磁気秩序を持つことが分かった。相互作用が強磁性的なら強磁性秩序、反強磁性的ならジグザグ反強磁性秩序が全ての異方性パラメータで実現した。また、dipolar Kitaev 模型の相互作用に人工的なレンジを設定して、隣接の場合 (Kitaev 模型に対応) から徐々に相互作用のレンジを増していくと、第 3、4 隣接相互作用によって Kitaev 量子スピン液体はすぐに崩壊し、秩序相へ相転移することが明らかになった。

2 種類目の系は、スピン S の Kitaev-Heisenberg 模型である。Kitaev 模型は、元々は $S=1/2$ の量子スピン模型であるが、近年、 $S=1$ の場合の数値計算が進んできた。さらに、最近では、 $S=1$ のみならず $S=3/2$ の Kitaev スピン液体候補物質の提案が行われてきた。よって、高スピンの候補物質の中で、どれぐらいのスピンの大きさ S までが Kitaev スピン量子液体実現のために許されるのかを明らかにするために、本研究ではスピンの大きさが S の模型を考えた。候補物質のミニマル模型として Kitaev-Heisenberg 模型を採用した。PFFRG も元々 $S=1/2$ の量子スピン系で定式化された手法であるが、2017 年に提案された一般の大きさのスピンの系への拡張法を用いて、 S をシステムティックに変化させながら相図を求めた。

Kitaev-Heisenberg 模型の相図を、系のパラメータとスピンの大きさ S を変えながら作成した。結果として、 S の大きさを $1/2$ から増していくと、 $S=3/2$ まではスピン液体状態の有限の領域が存在するが、 $S=2$ からは、厳密な Kitaev 点以外ではスピン液体的な振る舞いは見られなくなった (任意の S で純粋な Kitaev 模型は厳密にスピン液体となることが分かっている)。よって、候補物質で許されるスピンの長さとしては $S=3/2$ が限度であるという結論に至った。これは、高スピン Kitaev 量子スピン液体の候補物質探索の指針を与える結果である。

3. 学際共同利用が果たした役割と意義

本研究で用いた PFFRG では、例えばスピン S の Kitaev-Heisenberg 模型の研究で行った計算では、十分収束した結果を得るためには Oakforest-PACS で 64 ノードを用いた MPI+openMP のハイブリッド並列で 1 時間 45 分～2 時間ほどかかる。その計算をパラメータを振りながら何十回も実行する必要があった。よって、多ノード並列を用いない計算では、時間がかかりすぎてしまう。よって、スーパーコンピュータを利用した計算が必要であり、そのために十分な量のトークンを得ることができる学際共同利用は本研究の実行において欠くことができないものであった。

4. 今後の展望

今後は、計算を磁場中に拡張していくつもりである。磁場中では計算コストが $10 \sim 20$ 倍になるため、学際共同利用がさらに重要になると考えられる。

5. 成果発表

(1) 学術論文

発表（投稿）論文等

1. Kiyu Fukui, “Functional Renormalization Group Study on Kitaev Quantum Spin Liquid”, Ph.D thesis, The University of Tokyo (2021).

発表（投稿）予定

2. Kiyu Fukui, Yasuyuki Kato, Joji Nasu, and Yukitoshi Motome, “Absence of quantum spin liquid in dipolar Kitaev model for ultracold polar molecules”, 投稿予定 (2021).
3. Kiyu Fukui, Yasuyuki Kato, Joji Nasu, and Yukitoshi Motome, “Spin-S Kitaev-Heisenberg model: spin liquid survival up to spins with $S < 2$ ”, 投稿予定 (2021) .

(2) 学会発表

1. ○福井毅勇, 加藤康之, 那須譲治, 求幸年, 「冷却極性分子系での Kitaev 量子スピ液体の実現について: 汎関数繰り込み群による研究」, 日本物理学会第 76 回年次大会, 13aH2-1, オンライン開催 (2021 年 3 月).
2. ○Kiyu Fukui, Yasuyuki Kato, Joji Nasu, and Yukitoshi Motome, “Pseudo-fermion Functional Renormalization Group Study of the Feasibility of Kitaev Quantum Spin Liquid”, International Conference on Quantum Liquid Crystal 2021, オンライン開催 (2021 年 5 月).

(3) その他

使用計算機	使用計算機 に○	配分リソース*	
		当初配分	追加配分
Cygnus	○	31,500	0
Oakforest-PACS	○	240,000	0
※配分リソースについてはノード時間積をご記入ください。			