

汎関数繰り込み群による

Kitaev 物質へのキャリアドーピング効果の研究

Functional renormalization group study on the effects of carrier doping into Kitaev materials

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

Kitaev 模型候補物質へのキャリアドーピングを考える以前に、ドーピングされていない Kitaev 模型候補物質や Kitaev 模型の実現可能性について、解決すべき課題が多く見つかったため、本課題研究では、まずはそれらの課題について数値計算による研究を進めた。Kitaev 模型は 2006 年に提案されたハニカム格子に定義された量子スピン模型である。ボンド方向に依存した異方的な相互作用 (Kitaev 型相互作用) により強いスピンプラストラーションを持つにもかかわらず、基底状態を厳密に求めることができ、かつ、その基底状態が量子スピン液体状態である稀有な模型である。2009 年に、この模型に現れる Kitaev 型相互作用のスピ軌道相互作用の大きな Mott 絶縁体での実現が提案されてから候補物質の探索が盛んに行われてきた。本課題研究では、量子スピン系の計算のための汎関数繰り込み群の 1 つである PFFRG(pseudofermion functional renormalization group)法を用いて、冷却極性分子系における Kitaev 量子スピン液体の実現可能性、そして、スピン S の高スピン候補物質における Kitaev 量子スピン液体実現可能性の 2 つの研究を行う。

2. 研究成果の内容

まず一つ目は、光格子中に閉じ込められた冷却極性分子による Kitaev 模型の実現可能性の研究である。深い光格子中に閉じ込められた冷却極性 2 原子分子は、分子の回転のエネルギー準位をスピン状態と見なすことにより、量子スピン系のシミュレーターとして用いることができる。2013 年に、マイクロ波の照射により多彩なスピン間相互作用の実現可能性が議論され、その一例として Kitaev 型相互作用の実現が提案された。しかし、提案された相互作用は、最隣接スピン間では Kitaev 模型と一致するが、分子の双極子相互作用に由来する長距離部分を有し、この長距離相互作用の元でも基底状態が量子スピン液体状態となるかは未解明な問題であった。本研究課題では、この提案された模型に PFFRG を適用することでスピン感受率を計算し、相互作用が強磁性的な場合も反強磁性的な場合も基底状態が磁気秩序状態となることを解明した。また、相互作用の異方性を変化させた計算により、等方的な場合が一番プラストラーションが大きく、量子スピン液体の実現に近いことを見出した。さらに、相互作用の到達距離を変化させながら計算を行い、Kitaev 模型で実現する量子スピン液体状態が長距離相互作用によりすぐに不安定化してしまうことを解明した。2013 年の上述の提案が行われて以降、この提案の検証は行われておらず、本研究課題ではこの検証を始めて行った。

2 つめは、高スピンの Kitaev 模型候補物質についての研究である。Kitaev 模型は元々は $S = 1/2$ の量子スピン模型であるが、近年、 $S = 1$ や $S = 3/2$ の Kitaev 模型の候補物質の提案が行われている。 $S > 1/2$ の Kitaev 模型の理論研究もこれまでされてきたが、一般のスピン S の場合について、候補物質中で不可避免的に存在する非 Kitaev 型相互作用の存在下での Kitaev 量子スピン液体状態の安定性は解明されてこなかった。本研究は、高スピンの候補物質のミニマルな模型の一つとしてスピン S の Kitaev-Heisenberg 模型を考え、スピンの大きさ S と Kitaev 相互作用と Heisenberg 相互作用の比の 2 つをパラメータとして基底状態相図を計算した。得られた相図は、4 つの磁気秩序相と 2 つの量子スピン液体相をもち $S = 1/2$ と $S = 1$ については、磁気秩序相間の相境界はそれぞれ厳密対角化法と密度行列繰り込み群法で得られたものとよく一致した。また、 $S = 50$ の相図の相境界は古典 Kitaev-Heisenberg 模型のモンテカルロ法による相図の相境界とよく一致した。また、2 つの Kitaev 点周りに現れた量子スピン液体相の領域は S の増加とともにすぐに狭くなっていき、 $S = 2$ 以上では本研究の範囲内では有限の量子スピン液体領域が見出されなかった。本研究の結果は、今後の高スピン Kitaev 量子スピン液体の候補物質探索に指針を与えるものである。

3. 学際共同利用が果たした役割と意義

本研究で行った PFFRG 法による計算では、例えばスピン S の Kitaev-Heisenberg 模型について 1 パラメータ点で十分収束した結果を得るためには Oakforest-PACS では 64 ノードを用いた MPI+openMP によるハイブリッド並列実行で 1 時間~2 時間程度の時間がかかる。基底状態相図を得るためには、その計算をパラメータを振りながら数十回実行する必要がある、多ノード並列を行わないと時間がかかり過ぎてしまう。よって、スーパーコンピュータ上でノード間並列による計算が必要不可欠であり、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遂行において欠くことのできないものであった。

4. 今後の展望

今後は、3 次元の Kitaev 量子スピン液体候補物質を記述する模型における PFFRG 計算を考えている。3 次元のフラストレートした量子模型の計算を行うことができる手法は限られているため、PFFRG により相図を解明する意義があると考えられる。

5. 成果発表

(1) 学術論文

1. Kiyu Fukui, Yasuyuki Kato, Joji Nasu, and Yukitoshi Motome, “Feasibility of Kitaev quantum spin liquids in ultracold polar molecules”, arXiv:2204.06144 (Physical Review B に投稿中).

2. Kiyu Fukui, Yasuyuki Kato, Joji Nasu, and Yukitoshi Motome, “Ground-state phase diagram of spin- S Kitaev-Heisenberg models” (投稿予定)

(2) 学会発表

1. Kiyu Fukui, Yasuyuki Kato, Joji Nasu, and Yukitoshi Motome, “Pseudo-fermion Functional Renormalization Group Study on the Feasibility of Kitaev Quantum Spin Liquid”, International Conference on Quantum Liquid Crystal 2021 (ポスター発表, 2021 年 5 月 11-13 日).
2. 福井毅勇, 「汎関数繰り込み群を用いたキタエフスピン液体研究」, キタエフ量子スピン液体研究の新展開(口頭発表(招待講演), 2021 年 8 月 3-5 日).
3. 福井毅勇, 加藤康之, 那須譲治, 求幸年, 「スピン $S > 1/2$ Kitaev-Heisenberg 模型の基底状態相図」, 日本物理学会 2021 年秋季大会 (口頭発表, 2021 年 9 月 20-23 日).
4. Kiyu Fukui, Yasuyuki Kato, Joji Nasu, and Yukitoshi Motome, “Ground state phase diagram of the Kitaev-Heisenberg model with general spin S ”, APS March Meeting (口頭発表, 2022 年 3 月 14 日-18 日).
5. Kiyu Fukui, Yasuyuki Kato, Joji Nasu, and Yukitoshi Motome, “Feasibility study of Kitaev quantum spin liquid: effects of long-range dipolar interactions and higher spin $S > 1/2$ ”, 11th International Conference on Highly Frustrated Magnetism 2022 (発表予定, 2022 年 6 月 20-25 日).
6. Kiyu Fukui, Yasuyuki Kato, Joji Nasu, and Yukitoshi Motome, “Feasibility study of Kitaev quantum spin liquid for ultracold polar molecules and higher spin materials”, International Conference on Strongly Correlated Electron Systems 2022 (発表予定, 2022 年 7 月 24-29 日).
7. Kiyu Fukui, Yasuyuki Kato, Joji Nasu, and Yukitoshi Motome, “Feasibility study of Kitaev quantum spin liquid for ultracold polar molecules and higher spin materials”, 29th International Conference on Low Temperature Physics 2022 (発表予定, 2022 年 8 月 18-24 日).

(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	○	16,000	0
Oakforest-PACS	○	255,000	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。			