

3 次元 Kitaev 磁性体の汎関数繰り込み群による研究

Functional renormalization group study on the three-dimensional Kitaev magnets

福井毅勇

東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻

1. 研究目的

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) により強いスピンフラストレ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 型相互作用のスピン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。

Kitaev 模型は、元々 2 次元ハニカム格子に定義された量子スピン模型であるが、任意の tricoordinate 構造に拡張可能である。実際、3 次元ハイパーハニカム格子への拡張が考えられ、そこで実現する 3 次元量子スピン液体の候補物質として、 $\beta\text{-Li}_2\text{IrO}_3$ などが調べられてきた。最近になって、 $\beta\text{-ZnIrO}_3$ という新たな候補物質が見出され、最低温まで磁気秩序が現れないことから新たな興味を集めている。しかしながら、現実の物質に必ず存在する Kitaev 型以外の相互作用の効果を調べる上で、3 次元系の計算には困難が多いため、多くの場合に平均場近似や古典スピンの場合の計算にとどまっている。ミニマルな模型の一つであるハイパーハニカム格子の Kitaev-Heisenberg 模型については、テンソルネットワークに基づいた gPEPS 法による研究結果が報告されているが、相図が模型の持つ 4 副格子対称性とと呼ばれるの対称性を満たしていないといった問題点が見られる。

そこで我々は、汎関数繰り込み群の量子スピン系への応用である擬フェルミ粒子汎関数繰り込み群 (PFRG) 法を用いて、3 次元ハイパーハニカム格子の Kitaev-Heisenberg 模型の基底状態相図を調べる。

2. 研究成果の内容

まずは、相互作用が等方的な場合について、3 次元ハイパーハニカム格子の Kitaev-Heisenberg 模型の Kitaev 相互作用と Heisenberg 相互作用の比を変化させながら PFRG 法によってスピン感受率を計算することによって、基底状態相図を解明した。結果として得られた基底状態相図は gPEPS 法による先行研究と異なり、結果の満たす 4 副格子対称性を満たしたものであった。また、2 次元ハニカム格子の模型の結果とかなり類似しているが、これは、

- ・ 2次元ハニカム格子も 3次元ハイパーハニカム格子もどちらも各サイトの配位数が 3 である *tricoordinate* 構造をしていること
 - ・ *Kitaev-Heisenberg* 模型の範囲では相図に現れる磁気秩序相が *commensurate* であり、そのエネルギーが最隣接サイト間の相互作用エネルギーのみで決まっていること
 - ・ *Kitaev* 模型ではスピン相関が厳密に最隣接サイト間のみで有限であることの 3 点から理解できる。実際に、*Luttinger-Tisza* 法による古典スピン系のエネルギーを計算すると、相境界のみならず基底状態エネルギーも 2 つの格子間で等しくなる。
- また、相互作用が異方的な場合についても、*Kitaev* 相互作用・*Heisenberg* 相互作用がそれぞれ強磁性的・反強磁性的である場合に *PFFRG* 法により基底状態相図を計算した。結果としては 2次元ハニカム格子の場合の密度行列繰り込み群 (*DMRG*) 法による先行研究と定性的に類似した相図が得られ、また、相互作用が等方的な場合に *Kitaev* 量子スピン液体相が最も安定となることが示された。

3. 学際共同利用プログラム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、例えばハイパーハニカム格子上の *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 *Wisteria* 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 7 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、現実的な計算時間で研究を完遂するためには大規模並列計算が不可欠である。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

今回は、*Kitaev* 相互作用と *Heisenberg* 相互作用のみを取り扱ったが、候補物質中には Γ 相互作用や Γ' 相互作用と呼ばれるスピン非対角相互作用が存在し、それらの相互作用のために *Kitaev-Heisenberg* 模型の相図では現れない磁気秩序相をとる。実際に、 β - Li_2IrO_3 においては、本研究の相図に現れない *incommensurate* なスパイラル秩序が実現していることが実験研究で明らかにされてきた。そこで、本研究で用いた *PFFRG* 法をスピン非対角相互作用を取り扱う形式に拡張し (*Buessen et al.*, 2019)、 Γ 相互作用や Γ' 相互作用を取り入れた計算を行い、基底状態相図を解明する。実際に我々は、これらの非対角スピン相互作用を扱う *PFFRG* 法の拡張を実装しベンチマークテスト済みである。また、この拡張により計算コストは約 16 倍となることが分かっているため、学際共同利用によるスーパーコンピュータを用いた大規模並列計算がより重要となる。

5. 成果発表

(1) 学術論文

1. Kiyu Fukui, Yasuyuki Kato, and Yukitoshi Motome, “Ground-State Phase Diagram of the Kitaev-Heisenberg Model on a Three-dimensional Hyperhoneycomb Lattice”, arXiv:303.09156 (Journal of Physical Society of Japan に掲載決定済み).
2. Kiyu Fukui, Yasuyuki Kato, Joji Nasu, and Yukitoshi Motome, “Ground-state phase diagram of spin- S Kitaev-Heisenberg models”, Physical Review B **106**, 174416 (2022).
3. Kiyu Fukui, Yasuyuki Kato, Joji Nasu, and Yukitoshi Motome, “Feasibility of Kitaev quantum spin liquids in ultracold polar molecules”, Physical Review B **106**, 014419 (2022).

(2) 学会発表

1. K. Fukui, Y. Kato, and Y. Motome, “Magnetic-field Induced Transitions in the Kitaev Model Coupled to the Environment”, SCES2023, Incheon, Korea (July, 2023).
2. 福井毅勇, 加藤康之, 求幸年, 「環境と結合したキタエフ模型における磁場誘起転移」, 物性研究所スパコン共同利用・CCMS 合同研究会「計算の時代における物性科学」, PB-1, 物性研究所 (2023 年 4 月). *優秀ポスター賞
3. 福井毅勇, 加藤康之, 求幸年, 「非エルミートキタエフ模型における磁場誘起トポロジカル転移」, 日本物理学会 2023 年春季大会, 23aH3-9, オンライン (2023 年 3 月).
4. 福井毅勇, 加藤康之, 求幸年, 「3 次元ハイパーハニカム格子 Kitaev-Heisenberg 模型の基底状態相図」, 日本物理学会 2022 年秋季大会, 13pW541-1, 東京工業大学 (2022 年 9 月).
5. K. Fukui, Y. Kato, J. Nasu, and Y. Motome, “Feasibility study of Kitaev quantum spin liquid for ultracold polar molecules and higher spin materials”, LT29, P20-SF3A-30, Sapporo, Japan (August, 2022).
6. K. Fukui, Y. Kato, J. Nasu, and Y. Motome, “Feasibility study of Kitaev quantum spin liquid for ultracold polar molecules and higher spin materials”, SCES2022, #245, Amsterdam, The Netherlands (July, 2022).
7. K. Fukui, Y. Kato, J. Nasu, and Y. Motome, “Feasibility study of Kitaev quantum spin liquid: effect of long-range dipolar interactions and higher spin $S > 1/2$ ”, HFM2022, T39, Paris, France (June, 2022).

(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	○	8,820	
Wisteria/BDEC-01	○	191,250	
※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。			