

## ハイパーハニカム格子上的の $J$ - $K$ - $\Gamma$ 模型の

### 基底状態相図と有限温度効果

#### Ground-state phase diagram and finite-temperature effects of $J$ - $K$ - $\Gamma$ model on a hyperhoneycomb lattice

福井毅勇

東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻

#### 1. 研究背景

研究課題名の 3 次元量子スピン液体の模型についても研究を続けているが、より優先度の高い 2 次元量子スピン液体の外部環境との結合の効果についての研究に本年度では主に取り組んだので、そちらの研究について報告する。

キタエフ模型によって記述されるキタエフ量子スピン液体 (KQSL) は、 $\alpha$ - $\text{RuCl}_3$  などの物質系での実現が期待される量子スピン液体の一種である。KQSL の励起状態は、スピンが分数化した遍歴マヨラナ粒子と局在バイゾンの 2 種類の素励起によって構成され、特に、磁場下で実現するカイラルスピン液体相ではこれらの励起が非可換エニオンを形成する。非可換エニオンは局所的な摂動に対する頑健性をもち、外乱に対して安定なトポロジカル量子計算への応用が期待されている。カイラルスピン液体相の証拠となる熱ホール係数の半整数量子化はすでに実験的に観測され、トポロジカル量子計算の実行のための次の到達点として、非可換エニオンの検出と制御を目標とした研究が現在、精力的に行なわれている。しかしながら、非可換エニオンの検出に成功したとしても、トポロジカル量子計算を実現するための道のりは決して短くない。実際の量子デバイスの中では、特に、基盤の影響や量子状態の読み出し・書き込みに伴い不可避免的に外部環境との結合が生じ、散逸の効果が無視できなくなりうるからである。非可換エニオンの頑健性は閉じた系についてのみ理論的に解明されており、外部環境との結合下では散逸により量子情報が乱されることが直感的に予測されるからである。したがって、トポロジカル量子計算デバイスの実現のためには、外部環境との結合による散逸が量子状態やそれが記録する量子情報に与える影響を解明しなければならない。そこで、まず本研究では、非可換エニオンが現れる舞台となる、キタエフ模型における量子スピン液体状態に対する散逸の効果の解明に取り組む。

#### 2. 研究成果の内容

環境との結合を通じて散逸のある開放量子系に対する有効な理論手法の一つに、非エルミートな有効ハミルトニアンを用いた解析方法がある。こうした非エルミート系の物理は、近年ではトポロジーの観点からも大きな注目を集めている。その興味深い

例として、量子スピン液体を基底状態に持つKitaev模型の非エルミート系への拡張が挙げられる。環境と結合したKitaev模型の非エルミート有効模型では、散逸の効果により相互作用定数が虚部を持つ。エルミートな場合には、スピンの分数化によって現れるマヨラナフェルミオン励起にギャップのないディラック的な分散が現れ、磁場を印加することによってギャップが開いたトポロジカルに非自明な状態が実現する。一方、非エルミートな場合には、ゼロ磁場においてディラック点が2つの例外点に分裂し、例外スピン液体と呼ばれる新たなスピン液体状態が現れることが示されているが、磁場下においてどのような状態が実現するかは調べられていない。

そこで本研究では、非エルミートKitaev模型に対する磁場の効果を調べた。その結果、エルミートな場合と異なり、非エルミートな場合にはマヨラナ励起の例外点にギャップを生じるには有限の磁場が必要となることを見出した。また、ある特定の相互作用定数に対しては、有効磁場の強さに依らず例外点が保持されることを示した。またこの場合、磁場を変化させることによって、例外点の巻き付き数が増えるトポロジカル転移が生じることも明らかにした。さらに、開放境界条件を課した計算によって、ゼロ磁場で非エルミート表皮効果が起きない相互作用定数においても磁場印加により表皮効果が誘起されることを見出した。また、有効磁場によって誘起された端状態のカイラリティーが、バルクのスペクトルの例外点に対応する波数で切り替わることを解明した。これは、エルミートな3次元ワイル半金属における表面に現れるフェルミアーク状態が、ワイル点に対応する波数でもう一方の表面状態に切り替わる振る舞いに類似している。これらの結果は、散逸のある系においてギャップレス量子スピン液体状態を安定化させる新たな可能性を拓くものであるとともに、外部環境により導入される散逸によって系の端状態のカイラリティーを操作できる可能性を示している。

### 3. 学際共同利用プログラムが果たした役割と意義

本研究は、解析的に進められる部分もあるが、その随所で計算資源を投入した数値的計算が必要になった。それが最も顕著なのが、開放境界条件を課した場合の対角化計算である。これは、上述の端状態のカイラリティーが切り替わる点を正しく得るためには大きなシステムサイズの計算を行う必要があることに加え、非エルミート表皮効果が起きる場合は倍精度であっても精度が足りないことに起因する。非エルミート表皮効果が起きる場合は、固有ベクトルである波動関数の重みが系の端に集中する。これにより、系の内部においては固有ベクトルの重みが極端に小さいため、精度を上げなければ対角化計算が破綻してしまう。本研究では、開放境界条件の場合は4倍精度の対角化計算を行っており、倍精度の場合より極めて大きなメモリとフロップ数、実行時間を要した。このような4倍精度計算を系のパラメータについて並列に計算するためにスーパーコンピュータの利用は欠くことのできないものであった。

### 4. 今後の展望

本研究は、非可換エニオンについてではなく、その生み出す舞台となる量子スピン液体状態の散逸の効果を取り扱った。次のステップとして、KQSLのカイラルスピン

液体相において、非可換エニオンに対する外部環境との結合による散逸の効果を、スペクトル構造、ダイナミクス、量子位相、非局所相関の観点から解明することである。多角的な視点から非可換エニオンに対する散逸効果を理解することにより、散逸の強い状況下でも量子情報を失わずに保つ方法を検討する。さらに、むしろ散逸の効果を積極的に利用して非可換エニオンを検出し、操作・制御する方法を模索する。

## 5. 成果発表

### (1) 学術論文

1. **K. Fukui**, Y. Kato, and Y. Motome, “Magnetic field effects on the Kitaev model coupled to environment”, arXiv:2402.05516 (submitted in Physical Review B).

### (2) 学会発表

2. (口頭発表・査読有り) **K. Fukui**, Y. Kato, and Y. Motome, “Effect of a magnetic field on the Kitaev model coupled to environment”, APS March Meeting 2024, W22, Minneapolis, USA (March, 2024).

3. (口頭発表・査読有り) **K. Fukui**, Y. Kato, and Y. Motome, “Effect of a magnetic field on the Kitaev model coupled to environment”, Physics of Open Systems and Beyond (POS&BYD), T5-3, Sapporo, Japan (August, 2023).

4. (ポスター発表・査読有り) **K. Fukui**, Y. Kato, and Y. Motome, “Effect of a magnetic field on the Kitaev model coupled to environment”, International Conference on Quantum Liquid Crystals 2023 (QLC2023), PS1-22, Sapporo, Japan (August, 2023).

5. (ポスター発表・査読有り) **K. Fukui**, Y. Kato, and Y. Motome, “Magnetic-field Induced Transitions in the Kitaev Model Coupled to the Environment”, International Conference on Strongly Correlated Electron Systems 2023 (SCES2023), 10-1369, Incheon, Korea (July, 2023).

6. (口頭発表・査読無し) **福井毅勇**, 加藤康之, 求幸年, 「磁場中の非エルミートキタエフ模型における表皮効果と端状態」, 日本物理学会第 78 回年次大会, 19aA401-5, 東北大学 (2023 年 9 月).

7. (ポスター発表・査読無し・優秀ポスター賞受賞) **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, 東京大学物性研究所 (2023 年 4 月).

8. (口頭発表・査読無し) **福井毅勇**, 加藤康之, 求幸年, 「非エルミートKitaev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).

(3) その他

セミナー招待講演

9. (日本語講演) 「Kitaev スピン液体の実現可能性の探索と磁場中における環境への散逸の効果の解明」, 二国研究室セミナー, 東京理科大学 (2023 年 7 月 14 日).

10. (英語講演) ”Effect of magnetic field on the Kitaev model coupled to environment”, 基礎物理学セミナー (上田研・辻研・蘆田研・Gong 研合同セミナー), 東京大学 (2023 年 6 月 26 日).

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	○	28,000	
Wisteria/BDEC-01	○	200,000	
※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。			