

特異な分数励起を持つ量子スピン液体のための新規Kitaev物質に関する数値的研究

Numerical study on novel Kitaev materials for quantum spin liquid states with exotic fractional excitations

福井毅勇

東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻
立命館大学理工学部物理科学科

1. 研究目的

本研究は、特異な分数励起をもつKitaev量子スピン液体の候補物質やその模型の示す物性、とりわけ、その基底状態相図と量子スピン液体実現可能性、そして、トポロジを数値的に解明することを目的としている。

2. 研究成果の内容

(A) 昆沙門亀甲格子上に定義されたKitaev模型において、ゼロ磁場と磁化中におけるバンド構造とチャーン数、トポロジカル相図を計算した。ゼロ磁場においてはゼロエネルギーに縮退したフラットバンドが出現し、磁場をかけることでそれらがトポロジカルマヨラナフラットバンドとなること、そして、それらが大きなバンドチャーン数を持つことを解明した。それに伴い多彩なトポロジカル相が磁場の大きさや磁気相互作用の異方性に依って実現することを解明した。この大きなチャーン数を持つトポロジカルマヨラナフラットバンドの出現はスピンの分数化を反映しており、量子スピン液体特有の機構が働いていることも解明した。また、この多彩なトポロジカル相は実験で捉えられることを熱ホール伝導度の温度依存性を計算することにより明らかにした。

(B) 近年立て続けに新物質が合成されているハイパーハニカム格子を持つKitaev模型候補物質を念頭に置いた模型において、PFFRG（擬フェルミ粒子汎関数繰り込み群）法を用いて模型の基底状態相図を計算した。これに伴い、これまで計算コストの観点から取り入れてこなかったスピン非対角相互作用を取り扱うことができるようにプログラムを拡張した。結果として、古典スピン系の計算やごく小さいサイズでしか実行できない厳密対角化では捉えられない秩序状態に対する量子効果や新しい磁気秩序相を発見した。また、これらの手法では議論することが難しい、非Kitaev型相互作用に対するKitaev量子スピン液体相の安定性も解明した。

(C) 提案から10年かかり、最近候補物質が合成されたハイパーオクタゴン格子を持つKitaev量子スピン液体候補物質の模型を取り上げ、古典スピン系の基底状態相図解明を狙い、LT（ラッティンジャー・ティサ）法によるスピン配位の計算と機械学

習のための自動微分のライブラリを用いたスピン配位の最適化のプログラムの作成を行なった。また、量子スピン系の基底状態相図を解明するために PFFRG 法のプログラムの作成とベンチマークを行った。ハイパーオクタゴン格子の場合は、通常の実装法ではスピン非対角相互作用の効果を扱うことができないため、プログラムの拡張を要した。

3. 学際共同利用プログラムが果たした役割と意義

毘沙門亀甲格子上のキタエフ模型におけるトポロジーの研究においては、バンドごとのチャーン数（トポロジーの指標となる量の 1 つ）やエネルギー、スピン相関関数を数値的に計算する必要があるが、毘沙門亀甲格子はその大きなユニットセルと基底状態を与える π -フラックスのゲージ場の配置、そして、ゲージ場を組まない局在的なマヨラナ粒子の存在のためにバンドの数が多く、元のハニカム格子の場合と比較して大きな行列を取り扱う必要があったためにスーパーコンピュータの利用の意義は大きい。また、毘沙門亀甲格子において特異的である大きなチャーン数をもったトポロジカルマヨラナフラットバンドのチャーン数の計算においては、バンドがほとんど平坦であることやゼロ磁場での複数本のフラットバンドの縮退に起因して、このバンドについて十分な分解能を実現するためには波数空間の刻み幅を通常よりかなり細かくとる必要があり、計算時間やメモリを圧迫する。こちらについてもスーパーコンピュータにおける並列処理を利用した。

さらに、ハイパーハニカム格子やハイパーオクタゴン格子をもつキタエフ量子スピン液体候補物質の基底状態の解明においては、量子スピン計算のための PFFRG 法は多ノード並列によるハイブリット実行がメインであるため、Wisteria や Pegasus による実行が必要不可欠であった。今回は Γ 相互作用を取り入れたため、(i) 相互作用の対称性の低下による計算コストの増加（8 倍）と(ii) 相互作用の対称性の低下に起因する格子構造の対称性の低下による計算コストの増加（2 倍）の主に 2 つの要因によって計算コストが以前より増加したため、スーパーコンピュータにおける並列実行が無ければ計算を終えることができなかった。また、古典スピンのための自動微分を用いたスピン構造の最適化においては、Python における GPU 利用を想定したライブラリを用いたために Cygnus と Pegasus による実行を欠くことはできなかった。

4. 今後の展望

今年度は、新たなハイパーハニカム格子をもつキタエフ量子スピン液体候補物質が合成されたためにハイパーハニカム格子を持つ候補物質の模型の汎関数繰り込み群による計算に計算資源や時間的リソースを割き、さらに、毘沙門亀甲格子上のキタエフ模型の計算に着手したために、ハイパーオクタゴン格子を持つキタエフ物質の模型の計算についてはプログラムの開発を終えた段階で年度末を迎えてしまった。次年度は、ハ

イパーハニカム格子の候補物質についての解析を終えて論文として出版したい。また、今年度行った毘沙門亀甲格子上のキタエフ模型についての成果についても論文出版を行う予定である。さらに、今回開発したハイパーオクタゴン格子をもつキタエフ物質の模型のためのプログラムを用いた計算を進めることが次の大きな課題である。

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", Physical Review B **110**, 024429 (2024).

(2) 学会発表

2. (国際学会・口頭発表・査読有) **K. Fukui**, Y. Kato, and Y. Motome, "Kitaev spin liquid coupled to environment", ISSP Theory mini-Workshop Correlated Quantum Materials + beyond, 11/18-11/29, 2024, Kashiwa, Japan.

3. (国際学会・口頭発表・査読有) **K. Fukui** and Y. Motome, "Topological Majorana flat bands in the Kitaev model on a Bishamon-kikko lattice", New Frontiers in Advanced Magnetism, 8/5-8/9 (2024), Sapporo, Japan.

4. (国際学会・口頭発表・査読有) **K. Fukui** and Y. Motome, "Topological Majorana flat bands in the Kitaev model on a Bishamon-kikko lattice", 22nd International Conference on Magnetism, 6/30-7/5 (2024), Bologna, Italy.

5. (国際学会・ポスター発表・査読無) K. Fukui and Y. Motome, "Topological Majorana flat bands in the Kitaev model on a Bishamon-kikko lattice", CEMS Topical Meeting on Emergent Phenomena in Topological Quantum Materials, 5/20-5/21 (2024), Wako, Japan.

6. (国内会議・口頭発表・査読無) **福井毅勇**, 求幸年, "3 次元ハイパーハニカム格子キタエフ- Γ 模型の基底状態相図", 日本物理学会 2025 年春季大会, 3/18-3/21, 2025, オンライン.

7. (国内会議・口頭発表・査読無) **福井毅勇**, "汎関数繰り込み群によるキタエフスピ液体実現可能性の研究", 第 20 回量子スピン系研究会, 12/13-12/14, 2024, 秋田市.

8. (国内会議・口頭発表・査読無) **福井毅勇**, 求幸年, "毘沙門亀甲格子上のKitaev
フ模型におけるトポロジカルマヨラナフラットバンド", 物性研究所スパコン共同
利用・CCMS 合同研究会「計算物質科学の現在と未来」, 4/3-4/4, 2024, 柏市.

(3) その他

9. (セミナー招待講演・英語講演) **Kiyu Fukui**, "Feasibility study of the Kitaev spin
liquid and exploration of novel quantum phenomena of the Majorana fermions", 10/29,
2024, Theory of Quantum Matter Unit (Nic Shannon Group), Okinawa Institute of Science
and Technology (OIST).

10. (セミナー招待講演) **福井毅勇**, "模型の拡張によるKitaevスピ液体の実現
可能性の探索: 汎関数繰り込み群による研究", オンライン物性理論セミナー, 5/28,
2024, オンライン (主催: 埼玉大学).

使用計算機	使用計算機に ○	配分リソース※		
		当初配分	移行*	追加配分
Cygnus	○	5600	0	0
Pegasus	○	10500	0	0
Wisteria/BDEC-01	○	128000		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。				
*バジェット移行を行った場合、「+2000」「-1000」のように記入				