

新奇 3 次元キタエフ物質の模型の基底状態についての数値的研究

Numerical study on the ground states of models for novel Kitaev materials

福井毅勇

立命館大学理工学部物理科学科

1. 研究目的

本プロジェクトの目的は、最近新たな発見が相次ぐ 3 次元キタエフ量子スピ液体の候補物質を念頭に、これらの候補物質を記述する模型の基底状態やその相図を数値的手法を用いて解明することである。キタエフ模型は、2 次元ハニカム格子上で定義された、基底状態が量子スピ液体であることを数学的に厳密に示すことができる稀有な模型である。この模型は、配位数が 3 である任意の次元の任意の格子上に拡張できるが、特に、3 次元量子スピ液体の実現という観点から 3 次元格子上への拡張が特に興味深い。3 次元キタエフスピ液体は、その 3

次元の格子構造に由来して、量子スピ液体への有限温度相転移や、格子の対称性に応じて多彩なマヨラナフェルミ面を持つ量子スピ液体状態が実現するため量子スピ液体がもたらす物理現象の宝庫として非常に興味深い。特に、ハイパーハニカム格子 (図 1) をもつ候補物質として、これまで研究されてきた $\beta\text{-Li}_2\text{IrO}_3$ に加え、最近では、 $\beta\text{-ZnIrO}_3$ と $\beta\text{-Na}_2\text{PrO}_3$ がそれぞれ合成されるなど、3 次元キタエフ物質の研究は新たな展開を迎えている。

こうした新規候補物質における 3 次元スピ液体状態の実現可能性の検証や、今後の新たな物質探索・設計に向けて、現実的なモデルの基底状態の解明は極めて重要な課題である。しかしながら、3 次元格子上の強いフラストレーションをもつ量子スピ模型を取り扱うことのできる数値手法は限られており、これまでは半古典系の計算や平均場近似計算に終始していた。我々は、この困難を克服する手法として、汎関数繰り込み群を量子スピ模型に適用した PFFRG 法に注目する。PFFRG 法は、任意の空間次元の量子スピ模型を大きなシステムサイズで取り扱うことのできる汎用的で強力な数値手法である。本研究では特に上述の候補物質に着目し、これらを記述する模型として、実験結果との比較や第一原理計算で示唆されているキタエフ-ハイゼンベルグ- Γ 模型を考え、ハイパーハニカム格子における基底状態相図を PFFRG 法を用いて解明する。

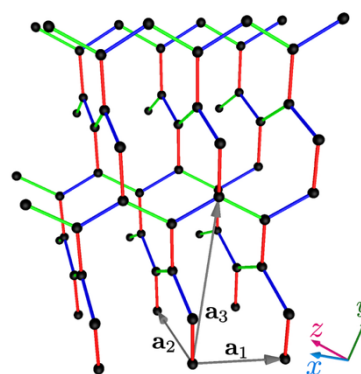


図 1: ハイパーハニカム格子上のキタエフ模型の模式図。赤、青、緑のボンド上でスピンの x , y , z 成分がイジング型の相互作用をもつ。

2. 研究成果の内容

上述の PFFRG 法を用いることで、3 次元ハイパーハニカム格子上的キタエフ-ハイゼンベルグ- Γ 模型の基底状態相図を詳細に解明することに成功した。その結果、2 次元ハニカム格子の場合と同様に、キタエフ相互作用が強磁性的な場合よりも反強磁性的な場合の方が量子スピン液体状態が Γ 相互作用に対してより安定であること、さらに、2 次元の場合と異なり、多重 Q 秩序を含む多彩な磁気秩序相が現れることを明らかにした。これらの磁気秩序には古典スピンによる相図を論じた先行研究に現れないものもあることから、スピン $S > 1/2$ への PFFRG 法の拡張法を適用してスピンの大きさ S を変化させることで、それらの発現に対する量子効果の重要性を明らかにした。

本プロジェクトの結果は、 Γ 相互作用の無いキタエフ-ハイゼンベルグ模型についての PFFRG 法による我々の先行研究 (K. Fukui, Y. Kato, and Y. Motome, *J. Phys. Soc. Jpn.* **92**, 064708 (2023), こちらも学際共同研究の成果である) と併せて、候補物質の探索や実験結果の理解に理論的な指針を与え、近年めざましい進展を見せている 3 次元キタエフスピン液体の実現のために重要な役割を果たすものである

3. 学際共同利用プログラムが果たした役割と意義

本研究で用いた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、Pegasus や Miyabi 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、Kitaev-Heisenberg- Γ 模型を取り扱ったため、(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)、(iii) そもそも 3 次元格子上的模型はシステムサイズが大きくなってしまふ、という主に 3 つの要因によって計算コストが以前より桁違いに増加した。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から数百回実行する必要があり、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

本プロジェクトにおける研究で用いた手法は、 Γ 相互作用のようなスピン非対角な相互作用を持つ 3 次元格子上的他の量子スピン模型においても有効であることが予想できる。本プロジェクトで明らかにしたハイパーハニカム格子の結果を論文として出版し、さらに、別の 3 次元格子上的量子スピン模型について、キタエフ量子スピン液体か否かに依らず広く取り組んでいきたいと考えている。

5. 成果発表

(1) 学術論文

1. **K. Fukui** and Y. Motome, "Topological Majorana flat bands in the Kitaev model on a Bishamon-kikko lattice", *Physical Review B* **112**, 144411 (2025).

[DOI: <https://doi.org/10.1103/ztny-z9yb>]

(2) 学会発表

2. (国際学会・ポスター発表・査読有) **K. Fukui** and Y. Motome, "Exploring new magnetic phases in 3D extended Kitaev model: interplay of frustration and quantum effect", The International Workshop on Exotic Quantum Phases due to Unhappy Electrons, 11/12-11/14, 2025, Tokyo, Japan.

2. (国際学会・口頭発表・査読有) **K. Fukui** and Y. Motome, "Unveiling new magnetic phases in 3D extended Kitaev models", 30th International Conference on Low Temperature Physics, 8/7-8/13, 2025, Bilbao, Spain.

3. (国際学会・ポスター発表・査読有) **K. Fukui** and Y. Motome, "Unveiling new magnetic phases in an extended Kitaev model on a 3D hyperhoneycomb lattice", International Conference on Strongly Correlated Electron Systems 2025, 7/6-7/11, 2025, Montreal, Canada.

4. (国内学会・口頭発表・査読有) **福井毅勇**, 求幸年, "キタエフ-ハイゼンベルグ- Γ 模型の基底状態 II: 量子相図の再検討", 日本物理学会 2026 年春季大会, 3/23-3/26, 2026, オンライン開催.

5. (国内学会・口頭発表・査読有) **福井毅勇**, 求幸年, "キタエフ-ハイゼンベルグ- Γ 模型の基底状態 I: 古典相図の再検討", 日本物理学会 2026 年春季大会, 3/23-3/26, 2026, オンライン開催.

6. (国内学会・口頭発表・査読有) **福井毅勇**, "キタエフスピン液体候補物質の模型における多彩な磁気秩序", 第 21 回量子スピン系研究会, 12/13-12/14, 2025, 下関.

7. (国内学会・口頭発表・査読有) **福井毅勇**, 求幸年, "3 次元ハイパーハニカム格子上的拡張キタエフ模型における多彩な磁気相の解明", 日本物理学会第 80 回年次大会, 9/16-9/19, 2025, 広島大学.

(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 | 移行* | 一般利用による追加 |
| Pegasus | ○ | 16000 | | 0 |
| Miyabi-G | ○ | 45000 | ±0 | 0 |
| Miyabi-C | ○ | 6400 | ±0 | 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 | | | | |