

科学研究費補助金 基盤研究(A) スピンの分数化による量子スピン液体の開拓 (H28-31 年度)

## 研究会「第一回 量子スピン液体研究の新展開」

2016 年 7 月 14 日(木), 15 日(金) 東京大学本郷キャンパス 工学部 6 号館 3 階 セミナー室 A

### 7/14 (木)

- 13:10-13:20 opening
- 13:20-14:00 遠山貴巳 (東理大理)  
[14-1] 「密度行列繰り込み群法による拡張されたKitaev・ハイゼンベルグ模型の研究」
- 14:00-14:40 鈴木隆史 (兵県大工)  
[14-2] 「蜂の巣格子磁性体の磁気励起と熱力学的性質」
- 14:40-15:00 coffee break
- 15:00-15:40 田中秀数 (東工大理)  
[14-3] 「強い XY 型交換相互作用をもつスピン 1/2 蜂の巣格子磁性体  $\alpha$ - $\text{RuCl}_3$  の磁気特性」
- 15:40-16:20 山内一宏 (佐賀大院工)  
[14-4] 「ミュオンスピン回転/緩和法で見たハニカム格子スピン系  $\alpha$ - $\text{RuCl}_3$  の磁気秩序」
- 16:20-16:40 coffee break
- 16:40-17:20 紙屋佳知 (理研)  
[14-5] 「量子スピン液体相・常磁性相・磁気秩序相の有限温度「三態」相図」
- 17:20-18:00 森前智行 (群大先端科学研究指導者育成ユニット)  
[14-6] 「トリークコード、トポロジカル量子計算の基礎と最近の話題」
- 18:30- 懇談会@工学部 6 号館屋上テラス (雨天時セミナー室 A)

### 7/15 (金)

- 09:00-09:40 常盤欣文 (京大理)  
[15-1] 「熱伝導測定による量子スピンアイスの新奇素励起の観測」
- 09:40-10:20 高津浩 (京大院工)  
[15-2] 「 $\text{Tb}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$  のスピン液体とその近くに現れる四極子秩序」
- 10:20-10:40 coffee break
- 10:40-11:20 那須譲治 (東工大理)  
[15-3] 「Kitaev 模型の有限温度ダイナミクスと分数励起」
- 11:20-12:00 山本新 (東大理)  
[15-4] 「格子 QCD と非相対論系への応用」
- 12:00-13:00 lunch
- 13:00-13:40 北川健太郎 (東大院理)  
[15-5] 「NMR で観た Ir ハニカム酸化物におけるスピン液体的ふるまい」
- 13:40-14:20 溝口知成 (東大理)  
[15-6] 「ハイパーかごめ格子をもつイリジウム酸化物における異方的相互作用の効果」
- 14:20-14:40 coffee break
- 14:40-15:20 松野丈夫 (理研 CEMS)  
[15-7] 「スピン-軌道物性の新たな舞台: Ir 酸化物の薄膜物質設計」
- 15:20-16:00 山田昌彦 (東大物性研)  
[15-8] 「有機金属構造体における Kitaev スピン液体の物質設計」
- 16:00-16:10 closing

## 密度行列繰り込み群法による拡張されたキタエフ・ハイゼンベルク模型の研究

東理大理 遠山貴巳

キタエフ・ハイゼンベルク模型は層状 Ir 酸化物  $A_2\text{IrO}_3$  ( $A=\text{Li}, \text{Na}$ ) の有効模型として精力的に研究が行われている。この模型はハニカム格子上で等方的なハイゼンベルク型の相互作用項と異方的なキタエフ型の相互作用項をもち、後者はスピン軌道相互作用によってスピンの  $\text{SU}(2)$  対称性が壊れた、新しいタイプのフラストレーションを導入する。基底状態は多様な相を示すことが知られているが、 $\text{Na}_2\text{IrO}_3$  で実現するジグザグ型反強磁性相を直接説明できない。そのため、さらに最近接を超えた相互作用や Ir 周りの酸素八面体の斜方晶歪みによる異方的な相互作用を導入した模型の提案が行われている。

この異方的な相互作用を導入して拡張したキタエフ・ハイゼンベルク模型を、密度行列繰り込み群法 (DMRG) を用いて研究した [1]。スピン液体相の周りには、強磁性相、 $120^\circ$  型反強磁性相、2 種類の不整合相、ジグザグ型反強磁性相が現れる。ジグザグ型反強磁性相は山地ら [2] によって提案された  $\text{Na}_2\text{IrO}_3$  の基底状態と連続的につながる相である。エンタングルメント・エントロピー (EE) は相転移点で必ずしも異常な振る舞いを示さない。エンタングルメント・スペクトル (ES) は、磁気秩序を持つ相では縮退しないが、キタエフスピン液体相では縮退する。このスピン液体相での縮退はゲージ揺らぎによるもので、縮退の数はキタエフスピン液体のトポロジカルな性質を反映して境界条件に依存する。ES の最低準位と第一励起準位の差で定義されるシュミット・ギャップは、スピン液体相と磁気秩序相間の境界を決める上で有用である。

三角格子上のキタエフ・ハイゼンベルク模型では幾何学的フラストレーションも存在しており、どのような相が現れるかは非自明な問題である。また、実現する候補物質  $\text{Ba}_3\text{IrTi}_2\text{O}_9$  も提案されており [3]、理論と実験の両面から興味深い系となっている。先行研究で提案されていた、 $120^\circ$  型反強磁性相、 $Z_2$ -渦結晶相、ネマティック相、双対  $Z_2$ -渦結晶相 ( $Z_2$ -渦結晶相のクライン双対対応相)、 $Z_6$  強磁性相、双対強磁性相 ( $Z_6$  強磁性相のクライン双対対応相) を同定した。相境界でシュミット・ギャップが閉じ、EE が明瞭に変化する。これはハニカム格子上とは異なった振る舞いであり興味深い [4]。

[1] K. Shinjo, S. Sota, and T. Tohyama, *Phys. Rev. B* **91**, 054401 (2015).

[2] Y. Yamaji *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 107201 (2014).

[3] T. Dey *et al.*, *Phys. Rev. B* **86**, 140405(R) (2012).

[4] K. Shinjo, S. Sota, S. Yunoki, K. Totsuka, and T. Tohyama, arXiv:1512.02334.

## 蜂の巢格子磁性体の磁気励起と熱力学的性質

### － キタエフスピン液体探索に向けて －

鈴木隆史<sup>a</sup>、山地洋平<sup>b,c</sup>、山田拓人<sup>a</sup>、菅誠一郎<sup>a</sup>、川島直輝<sup>d</sup>、今田正俊<sup>c</sup>

<sup>a</sup>兵県大工, <sup>b</sup>東大 QPEC, <sup>c</sup>東大工, <sup>d</sup>東大物性研

近年、蜂の巢格子磁性体である  $\text{RuCl}_3$  や  $\text{Na}_2\text{IrO}_3$  の物性に注目が集まっている。両磁性体の有効模型は、結晶場と強いスピン軌道相互作用に起因する合成磁気モーメント  $J_{\text{eff}} = 1/2$  と、結晶構造を反映した特異な異方的相互作用（キタエフ型相互作用）による、蜂の巢格子  $S=1/2$  キタエフ・ハイゼンベルク模型 (KH 模型)

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle ij \rangle} (K S_i^\mu S_j^\mu + J \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)$$

で記述されると考えられている ( $\mu = x, y, z$ ) [1]。KH 模型は、キタエフスピン液体 [2] が基底状態となるパラメータ領域を持つことから、 $\text{RuCl}_3$  や  $\text{Na}_2\text{IrO}_3$  をはじめ、関連物質でキタエフスピン液体実現に向けた研究が盛んに行われている。特に両物質ではパラメータ空間内でどの程度キタエフスピン液体相に近いかを見積もるために第一原理計算が行われている。しかし例えば手法が異なると最近接キタエフ項の符号が異なるなど論争が続いている。

これまで我々は一般化 KH 模型 [3] の動的性質、熱力学的性質に注目し、キタエフスピン液体相近傍における磁気励起や比熱の温度依存性を数値対角化法で調べてきた[4,5]。その結果、1) 模型が磁気秩序相側でキタエフスピン液体相との相境界近傍にあると、磁気励起の低エネルギー分散がスピン波励起では説明できない、2) キタエフスピン液体相近傍の磁気秩序相でも、比熱の温度依存性には、キタエフ模型で議論されたスピン自由度の分数化に伴うダブルピーク構造[6]が見られることを明らかにし、3) キタエフスピン液体相からの近さを測る指標として比熱のダブルピークのピーク温度比[5]を提案した。これらの特徴は  $\text{Na}_2\text{IrO}_3$  や  $\text{RuCl}_3$  に対して提案された模型でも共通して現れる。講演では両物質について提案された模型に対する計算結果と非弾性中性子散乱実験結果[7,8]とを比較しながら議論する。

[1] G. Jackeli and G. Khaliullin, Phys. Rev. Lett. 102, 017205 (2009). [2] A. Kitaev, Annals Phys. 321, 2 (2006). [3] J. Chaloupka, G. Jackeli, and G. Khaliullin, Phys. Rev. Lett. 110, 097204 (2013). [4] T. Suzuki, et al., Phys. Rev. B 92, 184411 (2015). [5] Y. Yamaji, et al., Phys. Rev. B 93, 174425(2016). [6] J. Nasu, M. Udagawa, and Y. Motome, Phys. Rev. B 92, 115122 (2015). [7] S. K. Choi, et al., Phys. Rev. Lett. 108, 127204 (2012). [8] A. Banerjee, et al., Nat. Mater (2016), doi:10.1038/nmat4604.

## 強いXY型交換相互作用をもつスピン1/2蜂の巣格子磁性体 $\alpha$ -RuCl<sub>3</sub> の磁気特性

東京工業大学理学院 田中秀数

スピンの大きさ  $S$  が  $1/2$  の蜂の巣格子磁性体は  $J_1 - J_2$  模型と Kitaev 模型の観点から関心を集め、活発な研究が展開されている。両模型共にあるパラメーターの範囲でスピン液体が出現することが理論的に示されている。本研究で取り上げた  $\alpha$ -RuCl<sub>3</sub> は有効スピン  $1/2$  を持つ Ru<sup>3+</sup> が蜂の巣格子を形成する物質である。本講演では、これまでに行った磁化測定と比熱測定の結果 [1]、及び最近行っている圧力効果についてお話しする。 $\alpha$ -RuCl<sub>3</sub> は柔らかい結晶で、ブリッジマン法で育成することができる。図1(a)に示したように、磁化率の大きさは磁場  $H$  を加える方向に大きく依存し、 $H$  が蜂の巣格子面 ( $ab$ ) に平行に加えられた場合の磁化率が、垂直の場合に比べて圧倒的に大きい。同様に磁化曲線から得られた飽和磁化も  $H \parallel ab$  の値が  $H \perp ab$  の値よりも圧倒的に大きい。これは主に  $g$  値の異方性によるもので、これらの結果からそれぞれの磁場方向の  $g$  値は  $g_{ab} = 2.5$  and  $g_c = 0.40$  のように求められる。 $g$  値が大きく異方的であれば、必然的にスピン間の交換相互作用も大きく異方的になる。したがって、 $\alpha$ -RuCl<sub>3</sub> では、交換相互作用はXY性が強いと結論される。

育成された結晶に力学的なストレスを加えずに比熱を測定すると、通常  $T_{N1} = 13.8$  K,  $T_{N2} = 12.3$  K,  $T_{N3} = 10.4$  K,  $T_{N4} = 7.6$  K に4つの磁気相転移が観測される。当初は  $\alpha$ -RuCl<sub>3</sub> は4つの逐次相転移を示すと考えられていたが、その後の研究から、蜂の巣格子の積層の仕方が異なる4つの結晶相が別々の温度で磁気相転移を示していることが分かってきた (山内氏の講演参照)。図1(b)は室温で  $ab$  面に垂直に圧力を加えた後に圧力を0に戻して測定した低温比熱である。圧力を加えない場合には7.6 Kで相転移を示す結晶相の体積分率が圧倒的に大きいのが、加圧とともにこの相の体積分率は低下し、消失する。これと入れ替えに、13.8 Kに相転移を示す結晶相が支配的になる。

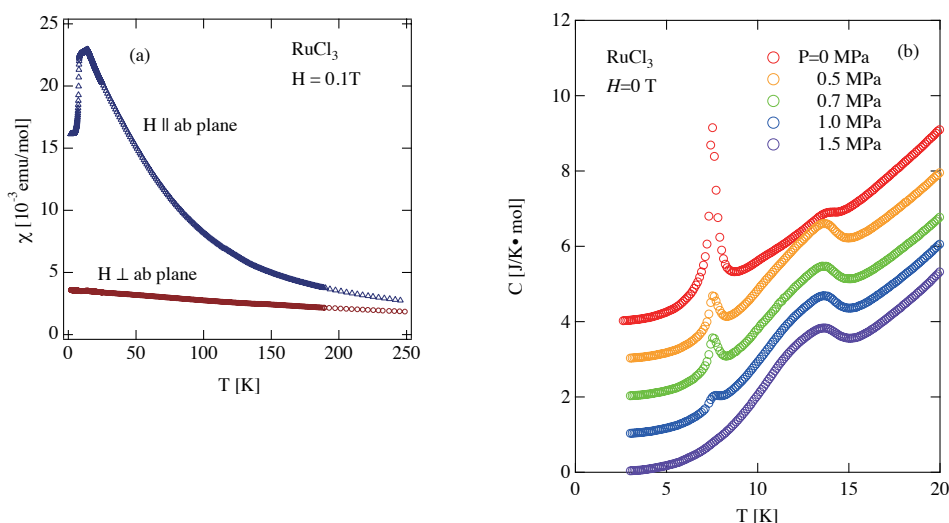


図 1: (a)  $\alpha$ -RuCl<sub>3</sub> における、磁場が  $ab$  面に平行と垂直な場合での磁化率の温度依存性。(b)  $ab$  面に垂直に圧力を加えた後に測定した低温比熱。

[1] Y. Kubota, H. Tanaka, T. Ono, Y. Narumi, and K. Kindo, Phys. Rev. B **91**, 094422 (2015).

## ミュオンスピン回転／緩和法で見た ハニカム格子スピン系 $\alpha$ - $\text{RuCl}_3$ の磁気秩序

佐賀大院工, KEK 物構研<sup>A</sup>, 東工大理<sup>B</sup>

山内一宏, 平石雅俊<sup>A</sup>, 岡部博孝<sup>A</sup>, 竹下聡史<sup>A</sup>,  
幸田章宏<sup>A</sup>, 小嶋健児<sup>A</sup>, 門野良典<sup>A</sup>, 田中秀数<sup>B</sup>

ハニカム格子スピン系  $\alpha$ - $\text{RuCl}_3$  は、 $\text{Ru}^{3+}(4d^5)$  が作る二次元ハニカム格子面を有する物質で、スピン軌道相互作用に起因して Ru の有効スピンの  $J_{\text{eff}} = 1/2$  で表されると考えられている。この物質は、Kitaev-Heisenberg 模型のモデル物質の候補として注目されており、幾つかの実験グループにより単結晶が作製され、7 K から 14 K の間に複数の磁気秩序転移があることが見出されているが、その詳細に関しては不明な点も多い。

我々は、磁気秩序転移の詳細を明らかにするため、4つの相転移 ( $T_{\text{N}1} = 13.8$  K,  $T_{\text{N}2} = 12.3$  K,  $T_{\text{N}3} = 10.4$  K,  $T_{\text{N}4} = 7.6$  K) を示す単結晶試料 [1] を用いて、ミュオンスピン回転／緩和 ( $\mu\text{SR}$ ) 実験を行った。 $\mu\text{SR}$  では、物質中に止まったミュオンが、自発磁化に由来する内部磁場の下で行う歳差運動を通じて磁気秩序を観測する。図 1(a) は、各相におけるミュオンスピン偏極度の時間依存性である。磁気秩序の存在を示すスピン偏極度の振動が、 $T_{\text{N}1}$  において 2 成分、 $T_{\text{N}2}$  と  $T_{\text{N}4}$  において各 1 成分ずつ出現し、各成分の振動周波数は独立な温度変化を示した。この結果は、4つの相転移が相分離に起因することを示唆している。また、 $T_{\text{N}4}$  を除く 3つの磁気秩序は、ハニカム面の積層の乱れに起因することが、最近の X 線および中性子回折実験から明らかにされた。[2] 図 1(b) に示したように、我々が、 $T_{\text{N}4}$  直下で出現する振動成分の周波数  $\nu_{\text{D}}$  の温度依存性から自発磁化の臨界指数  $\beta$  を決定したところ、 $\beta = 0.37 \pm 0.06$  と見積もられた。この値は、 $T_{\text{N}4}$  における磁気秩序が三次元系のユニバーサリティクラスに属しており、ハニカム面内で働く相互作用に加え、面間に働く相互作用も磁気秩序に寄与することを示唆している。

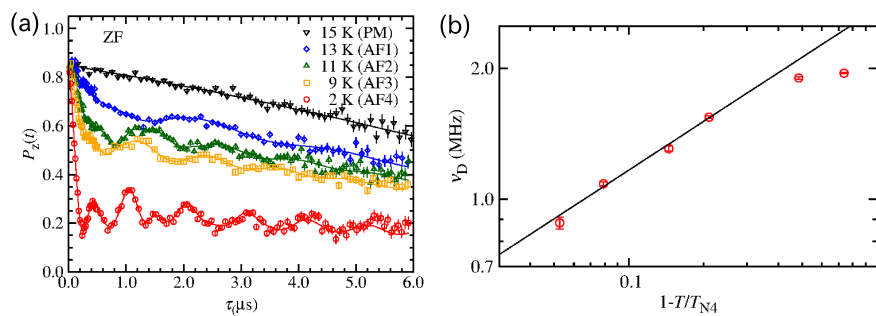


図 1 (a) ゼロ磁場の下で測定した  $\mu\text{SR}$  スペクトルの温度依存性。(b)  $\nu_{\text{D}}$  vs.  $1-T/T_{\text{N}4}$  プロット。

- 1 Y. Kubota et al., Phys. Rev. B, **91**, 094422 (2015).
- 2 H. B. Cao et al., Phys. Rev. B. **93**, 134423 (2016).

## 量子スピン液体相・常磁性相・磁気秩序相の有限温度「三態」相図

理研 紙屋佳知

量子スピン液体をどうやって実験的に同定するかについては長年研究が続けられているが、Kitaev 模型の提案と、触発されて盛んに行われている候補物質探索により、いっそう重要なテーマとなった。現実の候補物質の基底状態は、量子スピン液体と競合する磁気秩序相や、その近傍にあることが多いと考えられることから、(1)系の空間次元、(2)量子スピン液体のタイプ、(3)交換相互作用の大きさ、(4)温度などの因子によって、どのような有限温度相図がありうるのかについて、研究を行っている。

本講演では、量子スピン液体相・常磁性相・磁気秩序相の「磁氣的三態」を全て含む有限温度相図の例を紹介する。この結果は、2次元および3次元のトーリック・コード模型（いずれも量子スピン液体を実現する）を磁気秩序相を安定化するイジング相互作用によって拡張した量子スピン系を、世界線量子モンテカルロ法で調べることによって得られたものである [Y. Kamiya, Y. Kato, J. Nasu, and Y. Motome, PRB **92**, 100403(R) (2015)]。相図構造の詳細や熱力学量のふるまいに加え、基底状態が量子スピン液体相近傍の磁気秩序相であるとき、有限温度にどのような量子スピン液体近接効果があるかについて議論する。

## トーリックコード、トポロジカル量子計算の基礎と最近の話題

森前智行（群馬大学先端科学研究指導者育成ユニット）

Kitaev が提案したトーリックコードモデルは、トポロジカルオーダーを記述するシンプルなモデルとして物性物理で興味をもたれているだけでなく、量子誤り訂正符号を組み込んで、ノイズに強い量子計算を行う、トポロジカル量子計算の基礎においても重要な働きをしているため、量子計算の分野においても重要なモデルとなっている。本講演では、その基礎を説明するとともに、最近の応用についても触れる。

## 熱伝導測定による量子スピニアイスの新奇素励起の観測

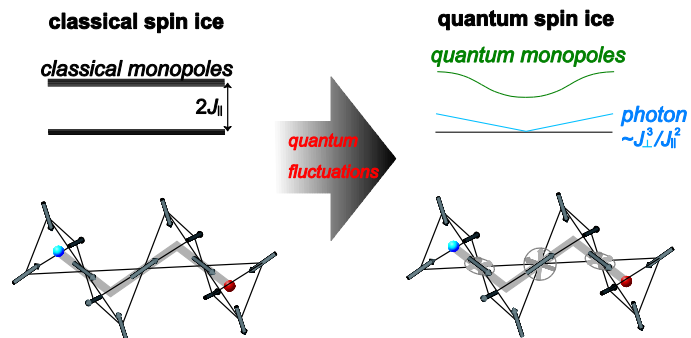
京大院理<sup>A</sup>、京大低温セ<sup>B</sup>、東大院工<sup>C</sup>、東大物性研<sup>D</sup>、明治大理工<sup>E</sup>、阪大基礎工<sup>F</sup>、東大院新領域<sup>G</sup>  
 常盤欣文<sup>A,B</sup>、山下卓也<sup>A</sup>、寺澤大樹<sup>A</sup>、宇田川将文<sup>C</sup>、橘高俊一郎<sup>D</sup>、榊原俊郎<sup>D</sup>、下山祐介<sup>A</sup>、  
 寺嶋孝仁<sup>B</sup>、安井幸夫<sup>E</sup>、木村健太<sup>F</sup>、Mario Halim<sup>D</sup>、中辻知<sup>D</sup>、芝内孝禎<sup>G</sup>、松田祐司<sup>A</sup>

希土類パイロクロア格子における、多重縮退したスピニアイス基底状態や、磁気モノポール励起は、これまで多くの注目を集めてきた。最も研究されてきた  $\text{Dy}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$  や  $\text{Ho}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$  といった物質では、磁気モーメントはイジング異方性を持った古典スピンとして扱われ、量子揺らぎによる効果は無視されている。一方、 $\text{Yb}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$  や  $\text{Pr}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  といった物質では、磁気モーメントが小さく、相互作用の  $xy$  成分 ( $J_{\perp}$ ) などにより生み出される量子揺らぎの効果が無視できない[1,2]。興味深い点は、量子揺らぎによってスピニアイス状態がどのように影響を受けるのかということであり、理論的な研究が行われている(下図、Ref[3])。我々は、量子揺らぎの強いスピニアイスにおけるモノポール励起などの準粒子の性質を調べるため、 $\text{Yb}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$  と  $\text{Pr}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  の熱伝導測定を行った。

$\text{Yb}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$  は  $T_C=0.2\text{K}$  で強磁性状態に一次相転移する[1]。そして、中性子散乱実験により、 $T_C$  以上、モノポール励起の平均エネルギー  $2J_{\parallel} \sim 4\text{K}$  以下の温度領域においてスピニアイス相関を持つことが報告されている[4]。我々の測定により、この温度領域で、磁場とともに  $\kappa(H)$  がゼロ磁場近傍では減少し、その後増加に転じることが分かった[5]。この非単調な磁場依存性はスピン-フォノン散乱と低磁場領域における磁気励起による熱伝導によって良く説明される。この磁気励起の寄与は、スピニアイス相関が発達している温度領域にのみ現れることから、磁気モノポールの伝導と考えるのが最も自然である。そして、解析から得られたモノポールの励起エネルギーは、古典モノポールで予想されるものより大きく減少しており、量子揺らぎによりモノポールが分散を持っていることを示唆している(下図)。これらの結果は、拡散によって運動する古典モノポールとは対照的に、分散を持つ量子モノポールが、長い平均自由行程を伴って結晶中をコヒーレントに運動していることを示唆している。

一方、 $\text{Pr}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  では、極低温まで磁気秩序は観測されておらず、量子スピン液体状態が実現している可能性がある[2]。我々の測定によって、約  $0.2\text{K}$  以下で、温度減少とともにゼロ磁場での  $\kappa(T)/T$  が異常増大する

ことが分かった。モノポールの励起エネルギーは  $1.6\text{K}$  と見積もられており[2]、 $0.2\text{K}$  ではモノポール密度は無視できるほど小さくなっている。したがって、この異常は、スピニアイスの縮退を解く新しい素励起「フォトン」[3]の存在を示している可能性がある。



- [1] K. A. Ross, *et. al.*, Phys. Rev. X **1**, 021002 (2011).
- [2] K. Kimura, *et. al.*, Nature comm. **4**, 1934 (2013).
- [3] M. Hermele, *et. al.*, Phys. Rev. B **69**, 064404 (2004).
- [4] L. J. Chang, *et. al.*, Nature Commun. **3**, 992(2012).
- [5] Y. Tokiwa, *et. al.*, Nature Commun. **7**, (2016) 10807



Tb<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub>のスピ液体とその近くに現れる四極子秩序

高津浩

京都大学 大学院工学研究科

パイロクロア磁性体 Tb<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub> は、キュリーワイス温度-19 K より十分低温の 0.07 K まで磁気長距離秩序を示さない驚くべき実験事実が報告[1]されて以来、量子スピ液体の候補物質として精力的に研究されている。しかし、そのスピ液体の性質については、これまでに 100 を超える実験[2]と様々な理論モデル[3-5]が提案されているにも関わらず、未だ十分に解決されていない。問題点のひとつは、いくつかの試料において磁気長距離秩序とは異なる「隠れた秩序」と呼ぶべき謎の秩序が度々観測されることで、この秩序状態は一体何なのか？という問題が、Tb<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub> のスピ液体の理解を難解にしている。一方、最近の多結晶を使った研究[6]によると、Tb/Ti の組成比率をわずか 1%以下の極微量変化させると長距離秩序が誘発できること、すなわち Tb<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub> ではスピ液体状態のすぐ近くに長距離秩序状態があり、それらの中で量子相転移が起きる可能性が次第にわかってきた。

今回、我々は長距離秩序相の理解が Tb<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub> のスピ液体の性質を理解する上で重要な知見になると考えて、長距離秩序を示す Tb<sub>2.005</sub>Ti<sub>1.995</sub>O<sub>7+y</sub> の純良な単結晶 ( $T_c = 0.53$  K) を作成し、0.1 K 以下までの極低温・磁場中比熱や磁化の測定と中性子散乱実験を行って、その性質を調べた。そして、様々な実験結果が、電気四極子の寄与を取り入れた量子スピアイス模型[5]をもとにした理論計算と良く合うことを明らかにした[7]。特に、実験結果は、量子スピアイスと呼ばれる量子液体相に近い

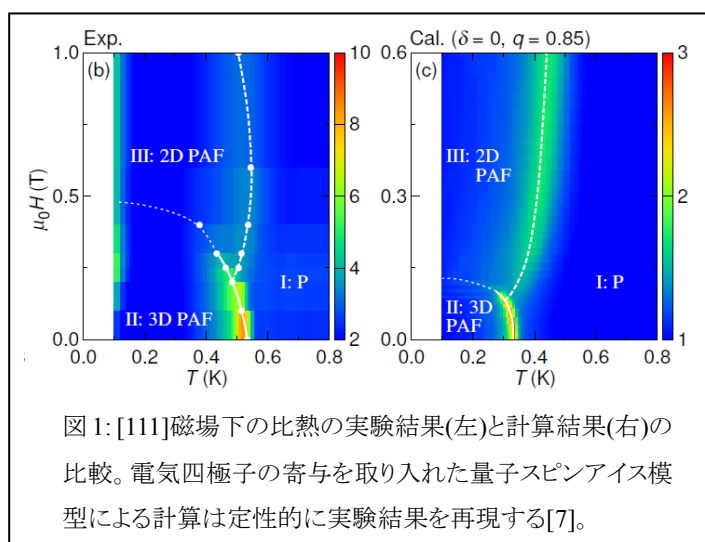


図 1: [111]磁場下の比熱の実験結果(左)と計算結果(右)の比較。電気四極子の寄与を取り入れた量子スピアイス模型による計算は定性的に実験結果を再現する[7]。

ところに位置する四極子秩序相のパラメーターで説明できることがわかった(図 1)。このことは、Tb/Ti の組成比率をわずかに変化させるとスピ液体から長距離秩序が起きる実験結果[4,8]の理解とも符合する。今回の結果、これまで明らかにされてこなかった Tb<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub> の「隠れた秩序」の問題は、量子スピアイスに近い現れる Tb<sup>3+</sup>イオンが持つ電気四極子の自由度の秩序で理解できることが浮き彫りとなった。

発表では実験結果の詳細を報告し、Tb<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub> のスピ液体とその近くに現れる四極子秩序について議論したい。本研究は以下の方々(門脇広明、谷口智洋、脇田美香、小野田繁樹、加藤康之、橘高俊一郎、笠原聡、河野洋平、榊原俊郎、B. Fak、J. Ollivier、J. W. Lynn 各氏)の協力をもとに行われました。ここに感謝の意を表します。

- [1] J. S. Gardner *et al.*, Phys. Rev. Lett. **82**, 1012 (1999). [2] e.g., J. S. Gardner, M. J. P. Gingras, and J. E. Greedan, Rev. Mod. Phys. **82**, 53107 (2010)., S. Petit *et al.*, EPS Web Conf. **83**, 03012 (2015). [3] M.J.P. Gingras *et al.*, Phys. Rev. B **62**, 6496 (2000).; H. R. Molavian, M. J. P. Gingras, and B. Canals, Phys. Rev. Lett. **98**, 157204 (2007).; M. J. P. Gingras and P. A. McClarty, Rep. Prog. Phys. **77**, 056501 (2014). [4] P. Bonville *et al.*, Phys. Rev. B **84**, 184409 (2011).; S. Petit *et al.*, Phys. Rev. B **86**, 174403 (2012). [5] S. Onoda and Y. Tanaka, Phys. Rev. B **83**, 094411 (2011). [6] T. Taniguchi *et al.*, Phys. Rev. B **87**, 060408(R) (2013). [7] H. Takatsu *et al.*, Phys. Rev. Lett. **116**, 217201 (2016). [8] M. Wakita *et al.*, J. Phys. Conf. Ser. **683**, 012023 (2016).

東工大理, 東大工<sup>A</sup>, 学習院大理<sup>B</sup>, ケンブリッジ大<sup>C</sup>, マックスプランク研究所<sup>D</sup>,  
那須謙治, 吉竹純基<sup>A</sup>, 宇田川将文<sup>B</sup>, 求幸年<sup>A</sup>, Johannes Knolle<sup>C</sup>, Dmitry L. Kovrizhin<sup>C</sup>, Roderich Moessner<sup>D</sup>

### Finite-temperature magnetic dynamics and fractionalization in the Kitaev model

Tokyo Inst. Tech., Univ. of Tokyo<sup>A</sup>, Gakushuin Univ.<sup>B</sup>, Univ. of Cambridge<sup>C</sup>, Max Plank Inst.<sup>D</sup>  
J. Nasu, J. Yoshitake<sup>A</sup>, M. Udagawa<sup>B</sup>, Y. Motome<sup>A</sup>, J. Knolle<sup>C</sup>, D. L. Kovrizhin<sup>C</sup>, R. Moessner<sup>D</sup>

2006年にA. Kitaevによって導入されたKitaev模型は、固体物理や量子情報などを含む幅広い分野で注目を集めている[1]。この模型は蜂の巣格子上で定義された量子スピン模型で、厳密に解くことができ、その基底状態は分数化されたフェルミ励起を素励起に持つ量子スピン液体となることが知られている。さらに、あるボンドの相互作用が大きい極限では、トポロジカル量子計算の演算要素となり得る toric code になることから、量子計算の分野からも精力的な研究がなされている。一方で、固体物理学の観点からは、量子スピン液体が高温の常磁性状態へと有限温度でどのように変化するか興味が持たれていたが、これまでの量子スピン液体の理論計算は、計算方法の制限から、絶対零度の解析ですら困難を伴うことが知られていた。量子スピン液体と常磁性状態は、通常の秩序変数によって区別することはできないため、これらの状態の間の変化を調べることによって量子スピン液体の特徴付けができることが期待される。また、この模型はスピン軌道相互作用の強いイリジウム酸化物に代表される5d電子系において実現されると考えられており[2]、実験との比較を行うためにも、有限温度の解析が必須となる。

本研究では、2次元及び3次元Kitaev模型に対して、有限温度の熱力学量と動的磁気応答を解析した[3-6]。この模型はJordan-Wigner変換により相互作用のないマヨラナフェルミオン系とそれと結合する保存量である局所 $Z_2$ 変数という形に書き換えることができる。フェルミオン系を厳密対角化し、局所 $Z_2$ 変数の配置をモンテカルロ法によって更新することで、有限温度のシミュレーションをおよそ1000サイトまでのサイズで行った。その結果、比熱に2つのピーク構造を見出した[3,4]。この2つのピークのそれぞれでエントロピーが半分ずつ解放される。これは、量子スピン液体の特徴であるスピンの分数化を反映したものである。

3次元系では特に、低温の比熱のピークで相転移を示す。これは高温の常磁性から低温の量子スピン液体へのスピン系の“気液転移”と見なせる。この相転移は、通常のランダウ-ギンツブルグ-ウィルソン理論では説明が難しく、本研究では局所保存量のトポロジカルな性質に注目した。3次元格子では、局所保存量は必ずループ構造を作って励起される。このループ構造のトポロジーによって量子スピン液体を特徴付けることに成功した[3]。このループのトポロジーの変化は、量子色力学における閉じ込め-非閉じ込め転移などでも見出されていることから、共通の物理が潜んでいることが期待される。

さらに、2次元系において、動的スピン構造因子とラマンスペクトルの温度依存性を計算し、フェルミ励起を反映した温度変化を示すことを見出した。この計算結果が幅広い温度領域で $\alpha$ -RuCl<sub>3</sub>の実験結果とよい一致を示す[5]。この結果は、これまでのフェルミ励起を起源とした極低温の漸近形に立脚した従来のスピン液体の検証方法とは一線を画しており、現実の物質において分数励起が存在する直接的な証拠となる。また、NMR緩和率の計算結果からも量子スピンの分数化を反映した特異な温度変化が見られており、実験からの検証が期待されている[6]。

- [1] A. Kitaev, Ann. Phys., **321**, 2 (2006).
- [2] G. Jackeli and G. Khaliullin, Phys. Rev. Lett. **102**, 017205 (2009).
- [3] J. Nasu, M. Udagawa, and Y. Motome, Phys. Rev. Lett. **113**, 097205 (2014).
- [4] J. Nasu, M. Udagawa, and Y. Motome, Phys. Rev. B **92**, 115122 (2015).
- [5] J. Nasu, J. Knolle, D. Kovrizhin, Y. Motome, and R. Moessner, arXiv:1602.05277.
- [6] J. Yoshitake, J. Nasu, and Y. Motome, arXiv:1602.05253.

## 格子 QCD と非相対論系への応用

山本新（東大理）

原子核・ハドロン系は、強い相互作用の基礎方程式である量子色力学(QCD)によって記述される。QCD を厳密に解く事は、人間の力では不可能であるが、格子 QCD シミュレーションによって数値的に実現されている。このため、格子 QCD シミュレーションは、今日の QCD 研究における最も標準的かつ重要な解析手法である。また、格子 QCD で用いられる解析手法は、QCD 以外の理論にも応用することができる。本講演では、格子 QCD の概要と非相対論系への応用例を紹介する。

## NMRで観たIrハニカム酸化物におけるスピン液体的ふるまい

東大理<sup>A</sup>, 高知大理<sup>B</sup>, マックスプランク研究所<sup>C</sup>北川健太郎<sup>A</sup>, 高野陸<sup>A</sup>, 岸本恭来<sup>B</sup>, 高山知弘<sup>C</sup>, 高木英典<sup>A,C</sup>

ハニカム格子Ir酸化物はハニカムKitaev模型の恰好の舞台候補であると予測される。しかし、報告されてきた全ての2次元ハニカム ( $\alpha$ 型 $A_2IrO_3$ ) 及び3次元ハニカム様 ( $\beta, \gamma$ 型 $Li_2IrO_3$ ) 化合物は常圧下において長距離秩序してしまい、量子スピン液体にはならなかった。 $\alpha$ - $RuCl_3$ や $Li_2RhO_3$ も似たような物である。我々は、 $\alpha$ - $Li_2IrO_3$ の層間LiをH置換処理した $H_3LiIr_2O_6$ と、2GPa強下でのHyperhoneycomb型 $\beta$ - $Li_2IrO_3$ [1]においてバルク及びNMR実験によりスピン液体状態の証拠もしくは徴候を見出した。 $H_3LiIr_2O_6$ では高温の磁化率により $J_{\text{eff}}=1/2$ 状態に相当する有効磁子数が確かに観測される一方、 $\mu\text{s}$ 以上の静的な磁性に敏感な $^1\text{H}, ^7\text{Li}$ -NMRスペクトル測定では最低温度まで秩序・ガラス化の傾向は見られず、そこでの広がりが高々 $0.01 \mu\text{B}$ に相当する(図1)。これは、Herbertsmithiteや有機二量体三角格子量子スピン液体に比べても1~2桁小さい値であり、これまでで一番綺麗な量子スピン液体の発見である。次の段階の興味は、このスピン液体がKitaev模型の物かどうかであるが、今のところ単純には整合しない。静的磁化率・ナイトシフトと動的帯

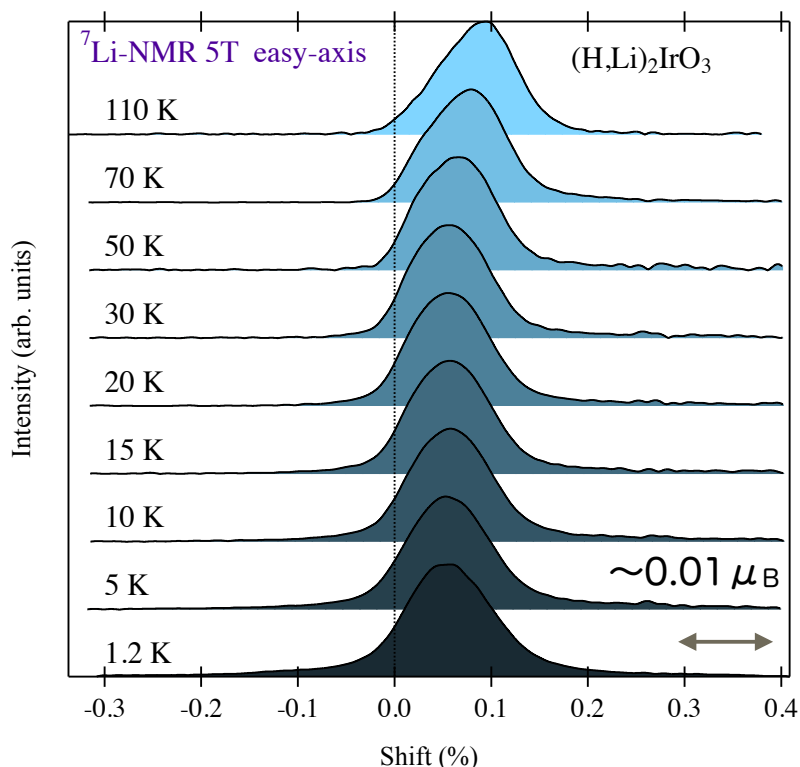


図1：磁場配向 $H_3LiIr_2O_6$ の $^7\text{Li}$ -NMRスペクトル。両矢印は超微細構造定数から見積ったIrあたりのモーメントサイズを表す。

磁率 ( $1/T_1T$ ) は完全に異なった磁場・温度依存性を示すため、2面性は正に表れているものの、それらの振る舞いはKitaev模型で予測されているものと異なる。さらに、支配的なスピンゆらぎは反強磁性的である。2.5 GPa下での $\beta$ - $Li_2IrO_3$ でも、似たようなギャップレスな緩和率の振る舞いが見られている。本講演では、 $^1\text{H}/^6, ^7\text{Li}$ -NMRにより微視的な磁気状態を議論する予定である。

[1] T.Takayama et al., PRL 114, 077202 (2015).

## ハイパーかごめ格子をもつイリジウム酸化物における 異方的相互作用の効果

東大理  
溝口知成

5d 電子系では、スピン軌道相互作用と電子相関の協奏により、多彩な量子相が発現する。その中でハイパーかごめ格子をもつイリジウム酸化物  $\text{Na}_4\text{Ir}_3\text{O}_8$  [1] は、擬スピン  $j_{\text{eff}} = 1/2$  の自由度を持つ  $\text{Ir}^{4+}$  イオンが幾何学的フラストレーションをもつハイパーかごめ格子（3次元のかごめ格子）上に並んでいるため、量子スピン液体が実現する物質の候補として注目されている。本物質は、磁化率の測定により、低温まで磁気秩序を示さないことが知られている [1]。さらに、 $\mu\text{SR}$  [2] や  $\text{NMR}$  [3] により、6-7 K 以下の温度でのスピンドイナミクスの凍結が示唆されている。

この低温での振る舞いの起源を解明するために、我々は異方的相互作用の効果に着目した [4]。先行研究では、ハイゼンベルグ相互作用といくつかの異方的相互作用を組み合わせたモデルの解析が行なわれ、異方的相互作用が基底状態の決定に重要な役割を果たすことが明らかになっている [5, 6, 7]。これを踏まえ、我々は微視的な多軌道モデルから出発して、より一般的なスピンモデルの導出を行い、得られたモデルの基底状態相図の解析を行った。

本講演では、まず本物質に対する一般的なスピンモデル ( $J$ - $K$ - $D$ - $\Gamma$  模型) の導出について説明する。次に、導出したモデルに対し、Luttinger-Tisza 法およびアニーリングを用いて古典レベルでの解析を行い、得られた基底状態相図を議論する。特に、得られた相のうち、3つの  $\mathbf{q} = 0$  の磁気秩序状態 ( $\mathbb{Z}_2$  相、 $\mathbb{Z}_6^{2p}$  相、および  $\mathbb{Z}_6^{1p}$  相) に注目し、これらのスピン配置を、結晶の対称性の観点から議論する。最後に、得られた結果をもとに、実験的に観測されているスピンドイナミクスの凍結のシナリオを提示する。

- [1] Y. Okamoto, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **99**, 137207 (2007).
- [2] R. Dally, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **113**, 247601 (2014).
- [3] A. C. Shockley, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **115**, 047201 (2015).
- [4] T. Mizoguchi, *et al.*, arXiv: 1603.00469 (2016).
- [5] G. Chen and L. Balents, Phys. Rev. B **78**, 094403 (2008).
- [6] I. Kimchi and A. Vishwanath, Phys. Rev. B **89**, 014414 (2014).
- [7] R. Shindou, Phys. Rev. B **93**, 094419 (2016).

## スピン-軌道物性の新たな舞台: Ir 酸化物の薄膜物質設計

理化学研究所 創発物性科学研究センター (CEMS)

松野 丈夫

E-mail: matsuno@riken.jp

Ir 酸化物の  $5d$  電子はスピン-軌道相互作用と電子相関がともに  $0.5$  eV 程度で競合するという特徴を持つ。そのため  $\text{Sr}_2\text{IrO}_4$  がスピン-軌道モット絶縁体となることを見出されたことで [1], 遍歴的であると信じられてきた Ir 酸化物が新たな視点から研究の対象となっている。中でも, Ir 原子がハニカム格子を組む  $\text{Na}_2\text{IrO}_3$  では結合方向に依存した Kitaev 相互作用が観測されており, 量子スピン液体の舞台となる可能性が指摘されている [2].

一方で, 遷移金属酸化物における薄膜合成技術の進展により, 原子層レベルで制御された異種物質の積層界面が合成可能となっている。バルク物質の限界を超えた薄膜物質設計により, 実際に我々のグループでは界面・超格子を用いた Ir 酸化物「新物質」の合成に成功している [3]. 本講演では, 薄膜の自由度を活かし Ir 酸化物が持つスピン-軌道相互作用の学理に迫る以下の試みを紹介する。

- (1) ペロブスカイト構造を持つ  $\text{SrIrO}_3 \cdot \text{CaIrO}_3$  は格子歪みとスピン-軌道相互作用のカップリングの引き起こす半金属となっており, Dirac ノードを持つことが理論的に示唆されている。基板歪みを用いた圧力効果により,  $\text{CaIrO}_3$  薄膜において対称性に守られた Dirac ノードを示唆する結果を得た [4].
- (2)  $\text{SrIrO}_3$  を (111) 方向に 2 層ずつ積層することで Ir が  $\text{Na}_2\text{IrO}_3$  と同様のハニカム格子を組むトポロジカル絶縁体を実現できるという理論的提案 [5] がなされている。  $\text{SrIrO}_3$  とバンド絶縁体  $\text{SrTiO}_3$  からなる超格子  $[(\text{SrIrO}_3)_{2m}, (\text{SrTiO}_3)_2]$  を  $\text{SrTiO}_3$  (111) 基板上に作製したところ, 基底状態が磁性絶縁体となることを見出した [6].

本研究は平井大悟郎氏, 高木英典氏と共同で行われた。

[1] B.J. Kim *et al.*, *Science* **323**, 1329 (2009).

[2] S.H. Chun *et al.*, *Nat. Phys.* **11**, 462 (2015).

[3] J. Matsuno *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 247209 (2015).

[4] D. Hirai *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **107**, 012104 (2015).

[5] D. Xiao *et al.*, *Nat. Commun.* **2**, 596 (2011).

[6] D. Hirai, J. Matsuno, and H. Takagi, *APL Mater.* **3**, 041508 (2015).

## 有機金属構造体における Kitaev スピン液体の物質設計

山田昌彦、藤田浩之、押川正毅（東大物性研）

拡張 Kitaev-Heisenberg 模型を実現する候補物質として、新たに遷移金属 Ru を用いた有機金属構造体(MOF)を提案する。MOF には、イリジウム酸化物や  $\alpha$ - $\text{RuCl}_3$  といった従来の無機物質の候補物質と比較して、直接交換相互作用が強く抑制されるという利点があるが、一方で、構造によっては超交換相互作用から非 Kitaev 相互作用が誘起される可能性もある。我々は、超交換相互作用において Kitaev 相互作用が優位となるには、有機配位子の HOMO (最高被占軌道) の縮退性が重要であることを明らかにし、この機構を実現する複数の有機配位子の例を提案する。