

スピン液体状態におけるスピン熱伝導とスピン流

塩見雄毅 (東京大学工学系研究科附属 量子相エレクトロニクス研究センター 特任講師)

低次元量子スピン系の物性は量子揺らぎが支配しており、種々の稀有な状態が発現する。その一例が磁気秩序を伴わない長距離スピン相関であり、エキゾチックな素励起による弾道的な輸送が期待される。このような兆候を検出する方法として、従来は熱伝導測定が利用されてきた。本研究で我々は絶縁体スピントロニクスの実験技術を活用することで、熱流ではなくスピン流(角運動量の流れ)のキャリアとして一次元スピノンを検出可能であることを新たに見出した[1]。

一次元量子スピン液体は量子スピン液体の典型例であり、この状態からの素励起がスピノンである。スピノン描像に従う熱・磁気特性を示すものとして、たとえばモット絶縁体 Sr_2CuO_3 が知られている。我々は Sr_2CuO_3 にスピンゼーベック効果(熱的スピン流生成現象)を適用することで、スピノン・スピン流の実験的観測を試みた。その結果、 $\text{Sr}_2\text{CuO}_3/\text{Pt}$ 二層構造において、Pt の逆スピンホール効果(スピン流-電流変換現象)に起因する電圧信号を検出することに成功した。この電圧信号の極性などを実験・理論の双方から検討することで、スピン流キャリアは確かに一次元スピノンであり、単なるスピン波では実験結果を再現し得ないことを示した。

さらに、スピン液体状態における上記研究を発展させるため、我々は近年注目を集める Kitaev 候補物質 $\alpha\text{-RuCl}_3$ に着目した。Kitaev 模型は honeycomb 格子上的量子コンパス模型として Kitaev が 2006 年に導入した異方的磁性体模型である。その基底状態は無秩序なスピン液体であり、励起状態は局在 Z_2 ゲージ場と結合した遍歴的なマヨラナ粒子で記述できることが示されている。この新奇な準粒子の兆候が報告されている候補物質の一つが $\alpha\text{-RuCl}_3$ であり、本研究[2]で我々は $\alpha\text{-RuCl}_3$ における縦熱伝導度 κ を測定した。その結果、 κ の温度依存性がフォノン由来のメイン・ピークの他に、サブピーク構造を高温領域に形成することを見出した。帯磁率および磁気比熱の測定結果との対応関係の議論、および構造相転移の温度依存性が異なる試料であっても、同様のサブピーク構造が普遍的に現れることを見出したことから、サブピーク構造の起源が単なるフォノンではなく、Kitaev 相互作用に由来する磁気励起であると結論した。この結果は最近の理論計算[3]とも定性的に整合する。

以上の研究は、東北大学の小池洋二教授、川股隆行助教から Sr_2CuO_3 試料、および東工大の田中秀和教授より $\alpha\text{-RuCl}_3$ 試料を提供頂き、東北大学の齊藤英治研究室で実験を行ったものである。測定は、廣部大地(博士3年)によって行われ、理論的解釈については佐藤正寛准教授(茨城大学)に援助頂いた。

[1] D. Hirobe et al., Nat. Phys. 13, 30-34 (2017). [2] D. Hirobe, et al., Phys. Rev. B 95, 241112(R) (2017), [3] J. Nasu et al. Phys. Rev. Lett. 119, 127204 (2017).

キタエフスピン液体における半整数量子熱ホール効果

京大院理 笠原裕一

二次元ハニカム格子におけるスピン 1/2 をもつ量子スピン系におけるキタエフモデルでは、基底状態が厳密に量子スピン液体となり、量子スピンのマヨラナフェルミオンに分数化されることが示されている。実際、ハニカム格子モット絶縁体 α - RuCl_3 では $T_N = 8 \text{ K}$ で反強磁性秩序を示すものの、 T_N 以上において異常な磁気励起が中性子散乱などで観測され、マヨラナフェルミオン励起の可能性が議論されている。しかしながら、マヨラナフェルミオンを確証させるには、より直接的な実験手法が必要不可欠である。そのようななか、熱ホール効果が強力なプローブとして注目される。磁場によりトポロジカルな性質に特徴づけられるカイラルマヨラナエッジ電流を伴う物理量の量子化が期待され、マヨラナフェルミオンの電気的中性な性質から、量子熱ホール効果が期待されるからである。

我々は α - RuCl_3 において熱ホール効果測定を行い、 T_N 以上において大きな熱ホール伝導度を観測し、理論計算ともよく一致することを明らかにした。しかしながら、反強磁性転移のため、量子化を観測するには至らなかった。

一方、 α - RuCl_3 は磁場方向に対して強い異方性を示し、面直磁場では反強磁性秩序は強靱であるのに対し、面内磁場では容易に抑制される。また、反強磁性を完全に抑制させた強磁場領域において、ゼロ磁場・高温領域と類似した特異な磁気励起が低温でも観測されており、磁場誘起スピン液体状態の実現が示唆されている。そこで、この磁場誘起スピン液体状態において熱ホール効果を調べるために、傾斜磁場下での測定を行った。これにより、面内磁場成分によって系の基底状態を制御しつつ、面直磁場成分により熱ホール伝導度の観測が可能となる。その結果、熱ホール伝導度が磁場に対して一定値を示し、量子プラトーを観測した。驚くべきことに、その量子化値は、整数量子ホール系において期待される値の2分の1となった。このような半整数量子熱ホール効果は、2次元電子系の量子ホール状態でも前例のないものであり、キタエフモデルにおける理論予測と一致し、マヨラナカイラルエッジ電流の存在が示唆される。さらに高磁場では熱ホール伝導度は量子値から外れ、ほぼ消失した。トポロジカルに自明な状態へのトポロジカル相転移が示唆される。

キタエフ模型における熱伝導現象

東工大理¹, 東大工²那須讓治¹, 吉竹純基², 求幸年²

Thermal transport in the Kitaev model

¹*Dept. of Phys., Tokyo Inst. of Tech.*, ²*Dept. of Appl. Phys., Univ. of Tokyo*Joji Nasu¹, Junki Yoshitake², Yukitoshi Motome²

極低温まで磁気秩序を示さない量子スピン液体は P. W. Anderson による理論提案以降、およそ半世紀にわたって磁性物理学の主要な研究テーマのひとつになっている。この状態にはあらわな秩序変数が存在しないため、それをどのような特徴づけるかが議論となっている。近年では、その特徴としてスピンの分数化が注目され、それによって生じるフェルミ励起に由来した極低温での比熱の漸近的な振る舞いなどが実験的に調べられている。このような実験結果と比較するためには有限温度の理論計算が必須となるが、量子スピン液体の性質を理論的に理解するのは絶対零度ですら困難であることが知られている。

本研究では、量子スピンの顕著な特徴である分数励起を捕らえるため、厳密に量子スピン液体を基底状態に持つキタエフ模型 [1] に対して、量子モンテカルロ法を適用し、熱伝導特性を詳しく調べた [2]。この模型では、量子スピンの分数化により創発マヨラナ粒子が生じ、それが熱を運ぶ。縦熱伝導度は、相互作用のエネルギースケールに対応する温度でピークを持つ。磁場を導入すると縦熱伝導度はほぼ変化しないが、熱ホール伝導度 κ^{xy} が有限となり絶対零度で κ^{xy}/T が量子化される [1]。我々は、この量が磁場に強く依存し非単調な温度依存性を示すことを見出した。これらの特徴は、有限温度における量子スピン液体の前駆現象として、それに内在する創発マヨラナ粒子が引き起こしているものであり、熱ホール伝導度を測定することによってマヨラナ粒子及びその端状態の存在を実験的に捉えることができると期待される [3]。

References:

- [1] A. Kitaev, *Ann. Phys.* **321**, 2 (2006).
- [2] J. Nasu, J. Yoshitake, and Y. Motome, *Phys. Rev. Lett.* **119**, 127204 (2017).
- [3] Y. Kasahara *et al.*, arXiv:1709.10286.

$S = 1/2$ カゴメ格子ハイゼンベルク反強磁性体の有限温度の性質OIST^A, 阪大理^B, 下川 統久朗^{A,B}, 川村 光^B

典型的な幾何学的フラストレート磁性体であるカゴメ格子ハイゼンベルク反強磁性体は極低温でも如何なる磁気秩序も示さずスピンの液体的に振舞う、いわゆる量子スピン液体状態の実現が期待される磁性体として長年注目されてきた。中でも量子ゆらぎの効果が最も強い $S = 1/2$ の系はその基底状態を記述する描像として $U(1)$ ディラック液体や \mathbb{Z}_2 トポロジカル液体などが理論的に提案されているものの未だ決着はついていない。

基底状態が注目を集める一方で、 $S = 1/2$ カゴメ格子ハイゼンベルク反強磁性体の有限温度の性質についても盛んに研究が行われてきた。最も興味深い性質の一つとして、比熱の温度依存性に複数のピーク構造が現れることが厳密対角化法などを用いた幾つかの理論的研究 (例えば [1-3]) から報告されているものの、これらのピーク構造が無限系でも存在するかどうかやそれらの起源については多くの謎が残されている。

このような状況の中で我々は $S = 1/2$ カゴメ格子ハイゼンベルク反強磁性体の有限温度の性質を Hams-de Raedt 法 (TPQ 法) [3-5] を用いて調べてきた。この Hams-de Raedt 法では、量子モンテカルロ法とは異なり負符号問題などは発生せず、また厳密対角化法の限界を超えてより大きな有限系を取り扱い、有限温度下の物理量をほぼ厳密に評価することが可能である。我々はスピン数が 36 までの系を取り扱い、極低温下での比熱の振る舞いや静的構造因子の温度依存性の詳細を調べた。その結果、比熱の第 3 ピークが見られる $T/J=0.01$ という極低温で、低温側の $q=0$ と高温側の $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ の 2 つの短距離秩序に関する有限温度クロスオーバー現象を見出した [6]。またちょうどクロスオーバー温度付近 $T/J=0.01$ では、幾つかの古典フラストレート磁性体で実現する「リングスピン液体」状態 [7-8] で見られる、リング状構造が静的構造因子に出現することが明らかになった。講演ではこれまでの研究背景や計算結果の詳細を報告しつつ、またカゴメ候補物質である herbertsmithite [8-10] との関連も議論する。

[1] V. Elser, Phys. Rev. Lett. **62**, 2405 (1989). [2] T. Nakamura *et al.*, Phys. Rev. B **52**, 9174 (1995). [3] S. Sugiura *et al.*, Phys. Rev. Lett. **111**, 010401 (2013). [4] M. Imada *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **55**, 3354 (1986). [5] A. Hams *et al.*, Phys. Rev. E **62**, 4365 (2000). [6] T. Shimokawa *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **85**, 113702 (2016). [7] S. Okumura, *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **79**, 114705 (2010). [8] L. Seabra *et al.*, Phys. Rev. B **93**, 085132 (2016). [9] T.-H. Han *et al.*, Nature (London) **492**, 406 (2012). [10] H. Kawamura *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **83**, 103704 (2014). [11] T. Shimokawa *et al.*, Phys. Rev. B **92**, 134407 (2015).

How many spin liquids are there in $\text{Ca}_{10}\text{Cr}_7\text{O}_{28}$?

Rico Pohle

OIST

$\text{Ca}_{10}\text{Cr}_7\text{O}_{28}$ is a novel magnetic insulator with spin-1/2 Cr^{5+} ions on a bilayer breathing–Kagome lattice. Exchange interactions in $\text{Ca}_{10}\text{Cr}_7\text{O}_{28}$ are predominantly ferromagnetic, giving rise to a positive Curie-Weiss temperature of 2.35 K [1,2]. None the less, no magnetic order is observed down to 19 mK, making $\text{Ca}_{10}\text{Cr}_7\text{O}_{28}$ an unusual example of a two-dimensional quantum spin liquid [1].

In this talk we explore the nature and origin of the spin liquid observed in $\text{Ca}_{10}\text{Cr}_7\text{O}_{28}$, starting from the microscopic model of magnetic interactions proposed by Balz *et al.* [1,2]. Using semi-classical molecular-dynamics simulations, we analyze the evolution of spin dynamics in $\text{Ca}_{10}\text{Cr}_7\text{O}_{28}$ in applied magnetic field, and explicitly compare to published inelastic neutron scattering data.

To our surprise, we find that excitations encode not one, but two distinct types of spin liquids at different time scales. Fast fluctuations reveal a “coulombic spin liquid”, seen by broad “bow-tie” features in the magnetic scattering function [see Fig. (a)-(b)] which evolve in applied field into distinct “pinch-points”, as known from the classical Kagome antiferromagnet [3]. On the other hand, slow fluctuations reveal a “spiral spin liquid”, which can be seen in form of “rings” in the magnetic scattering function [see Fig.(c)-(d)], and understood by a mapping onto an effective spin-3/2 honeycomb model [4]. These results provide a concrete scenario for a spin–liquid behavior in $\text{Ca}_{10}\text{Cr}_7\text{O}_{28}$, and highlight the possibility of different spin liquids, existing on multiple timescales.

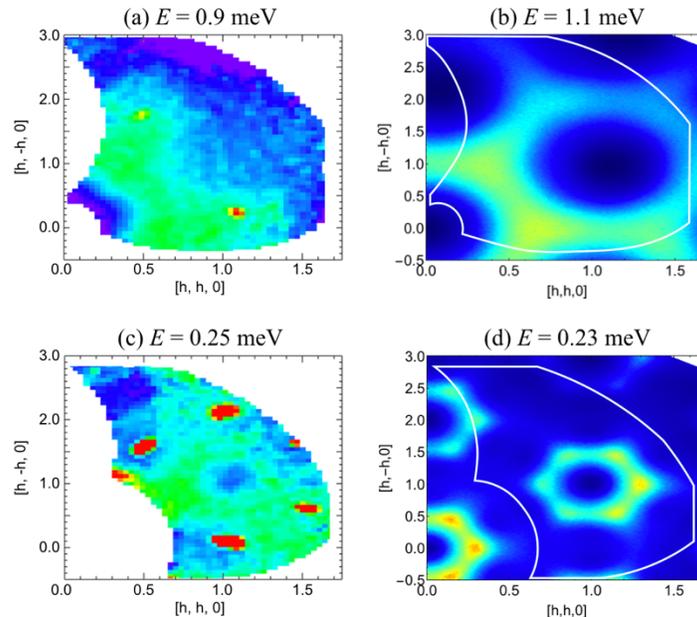


Figure: Spin-Spin correlations in $\text{Ca}_{10}\text{Cr}_7\text{O}_{28}$ seen by inelastic neutron scattering [1,2] (left column) and numerical simulations (right column). (a)-(b) Cross sections at high energy reveal broad “bow-tie” features, reminiscent of a “coulombic spin liquid”, known from the classical Kagome antiferromagnet [3], while (c)-(d) low energy fluctuations show “rings”, a characteristic signature of a “spiral spin liquid”[4].

- [1] C. Balz. *et al.*, Nat. Phys. **12**, 942 (2016)
- [2] C. Balz. *et al.*, Phys. Rev. B **95**, 174414 (2017)
- [3] D. A. Garanin and B. Canals, Phys. Rev. B **59** 443 (1999)
- [4] J. B. Fouet *et al.*, Euro. Phys. J. B **20**, 241 – 254 (2001)

Spin-1/2 パーフェクトカゴメ反強磁性体 $\text{CaCu}_3(\text{OD})_6\text{Cl}_2 \cdot 0.6\text{D}_2\text{O}$ における連続励起の観測

飯田一樹^A、吉田紘行^B、野口直彌^B、小田研^B、中尾朗子^A、熊井玲児^C、
David J. Voneshen^D、Gabriele Sala^E、松田雅昌^E、村井直樹^F、梶本亮一^F、
石角元志^A、河村聖子^F、稲村泰弘^F、中島健次^F
CROSS^A、北大院理^B、KEK^C、ISIS^D、ORNL^E、J-PARC^F

$\text{CaCu}_3(\text{OH})_6\text{Cl}_2 \cdot 0.6\text{H}_2\text{O}$ は、 $S = 1/2$ の Cu^{2+} イオンが歪みのないカゴメ格子を形成する系である [図 1(a)]。カゴメ面の hexagon の中心に非磁性イオンの Ca^{2+} イオンが存在するため、有限の J_2 と J_d が存在する。実際、単結晶磁化率の高温展開から J_1 、 J_2 、 J_d の値がそれぞれが求まっている [図 1(b)]。このようなカゴメ格子に J_1 、 J_2 、 J_d が存在する場合、exotic な基底状態が現れることが知られている [2]。 $\text{CaCu}_3(\text{OH})_6\text{Cl}_2 \cdot 0.6\text{H}_2\text{O}$ では磁化率と比熱は $T^* = 7$ K で磁気転移を示すが、比熱には T -linear 項が見えており、その磁気励起に興味もたれる [1]。

我々は ISIS の Let と J-PARC の AMATERAS において、粉末・単結晶 $\text{CaCu}_3(\text{OD})_6\text{Cl}_2 \cdot 0.6\text{D}_2\text{O}$ に関する中性子非弾性散乱実験をそれぞれ行った。発表では、 $\text{CaCu}_3(\text{OD})_6\text{Cl}_2 \cdot 0.6\text{D}_2\text{O}$ で観測された spinon continuum の詳細について報告する。

[1] H. Yoshida *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **86**, 033704 (2017).

[2] S.-S. Gong *et al.*, Phys. Rev. B **91**, 075112 (2015).

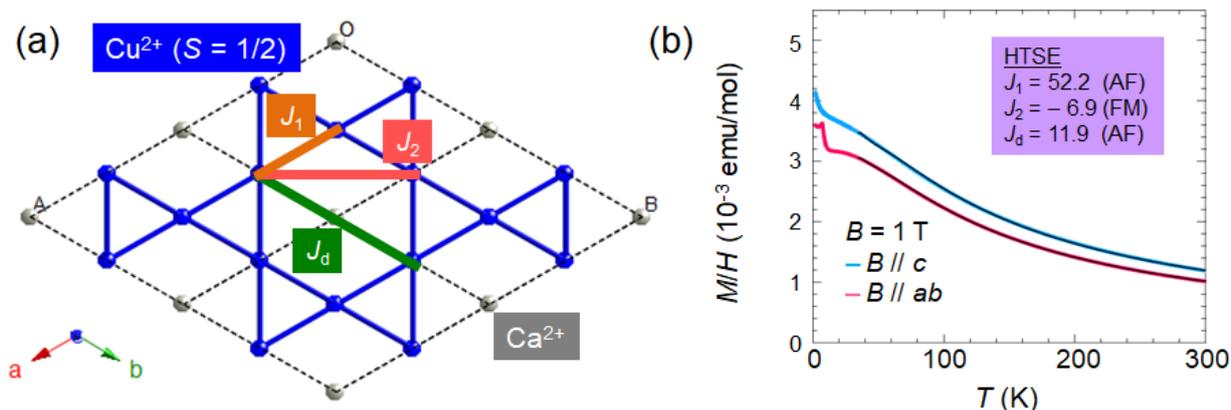


図1 (a) $\text{CaCu}_3(\text{OD})_6\text{Cl}_2 \cdot 0.6\text{D}_2\text{O}$ のカゴメ面の構造と、 $J_1 \cdot J_2 \cdot J_d$ の定義 [1]。 (b) 単結晶 $\text{CaCu}_3(\text{OH})_6\text{Cl}_2 \cdot 0.6\text{H}_2\text{O}$ の磁化率と高温展開 [1]。

かごめ格子量子ハイゼンベルグ模型の有限温度磁化過程

東大物性研, 東大工^A

三澤貴宏、本山裕一、山地洋平^A

量子スピン液体を生み出す最も素直な方法は、幾何学的フラストレーションによって、通常の磁気的な長距離秩序を抑制することである。この方法で、量子スピン液体が発現することが期待されている理論模型として、かごめ格子上のスピン1/2の反強磁性量子ハイゼンベルグ模型がある。この模型の基底状態は長年にわたって精力的に研究されており、磁気秩序が生じないことはほぼ確定しているものの、どのようなタイプの量子スピン液体が発現しているかについてはまだ多くの議論があり解決には至っていない。また、磁場をかけることによって、ゼロ磁場での縮退が部分的に開放されることで、この模型では1/3プラトーを含むいくつもの磁化プラトーが現れることが知られている[1, 2, 3]。この中で、1/3プラトーは一番幅の広いプラトーであるものの、通常のプラトーとは異なり、プラトーの高磁場・低磁場側で磁化の磁場依存性が異なることが指摘されており[3]、その安定性を含めて多くの議論がある。しかし、プラトーの有限温度に対する安定性及びプラトー近傍での比熱などの熱力学量の温度依存性は、実験的にプラトーの性質を同定する上で重要な問題にも関わらず、未解明のままである。

本発表では、数值的に厳密な有限温度計算が行える熱的純粋量子状態[4]の方法を用いて、かごめ格子上のハイゼンベルグ模型の磁場下での有限温度性質を調べた結果について発表する。36サイトまでの計算を行い、特に1/3プラトーに対する有限温度効果を調べた結果、1/3プラトーの低磁場側が温度に対して不安定であり、一方で、高磁場側は安定に残ることを見出した。さらに、低エネルギー励起状態の解析を行った結果、この非対称な有限温度効果は、低磁場側で存在する大きな縮退に起因していることを明らかにした。この結果は基底状態において見出されていたプラトーの前後での磁化の非対称的な磁場依存性と整合している[3]。また、この1/3プラトー直下に存在する大きな縮退に起因した、比熱・エントロピーが示す異常性についても発表する。

本研究の計算は量子格子模型に対する汎用パッケージであるHΦ[5, 6]を用いて行った。

[1] S. Nishimoto *et al.*, Nat. Commun. **4**, 2287 (2013).

[2] T. Picot *et al.*, Phys. Rev. B **93**, 060407(R) (2016).

[3] H. Nakano and T. Sakai, J. Phy. Soc. Jpn. **79**, 053707 (2010).

[4] S. Sugiura and A. Shimizu, Phys. Rev. Lett. **108**, 240401 (2012).

[5] <http://qlms.github.io/HPhi/index.html>

[6] Mitsuaki Kawamura *et al.*, Comput. Phys. Commun. **217**, 180 (2017).

キタエフ型交換相互作用の拓くスピン液体の物理

大串 研也 (東北大学 大学院理学研究科)

2006年に提案されたキタエフ模型は、物性物理・数理物理・量子情報を含む幅広い分野で活発に研究が進められている。キタエフ模型はコンパス型相互作用が働く蜂の巣格子上のスピン模型であり、一見すると複雑に感じられるにも関わらず数学的に厳密に解くことが可能である。キタエフ模型の基底状態はスピンの長距離秩序が失われたスピン液体であり、積年のスピン液体探索研究への決着を付けるべくその具現を目指した物質開発研究がなされている。有力な候補物質は、スピン軌道相互作用の卓越した4d/5d遷移金属化合物であり、 Li_2IrO_3 , RuCl_3 などの物質の磁気物性が精力的に調べられている。また、キタエフスピン液体の素励起はマヨラナ粒子である点も興味深い点であり、中性子散乱やラマン散乱によりマヨラナ的な磁気励起が観測されている。将来的にキタエフスピン液体を用いてトポロジカル量子計算を実行するためには、例えば光学的な操作によってマヨラナ粒子を制御することが求められており、それが可能になった暁には量子情報分野に革新的な影響を与えると考えられる。

我々は、キタエフスピン液体候補物質 RuCl_3 に関して、電気磁気結合とフォノン物性に着目した研究を推進してきた[1,2]。その心は、将来的にスピン系の秩序と励起を制御する上では、スピン系以外の自由度との結合も無視できないであろうという点にある。本講演では、その成果の一端を紹介したい。時間が許せば、ハニカム磁性体 $\text{Ag}_3\text{LiIr}_2\text{O}_6$ の磁気物性や、 RuCl_3 周辺における物質開発の現状についても紹介する予定である。

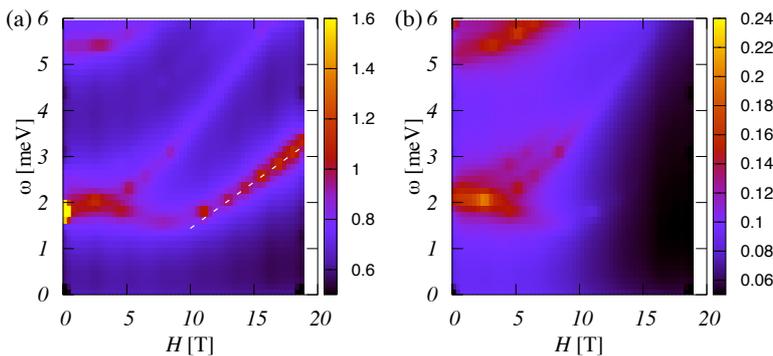
[1] T. Aoyama, Y. Hasegawa, S. Kimura, T. Kimura, and K. Ohgushi, *Phys. Rev. B* **95**, 245104 (2017).

[2] Y. Hasegawa, T. Aoyama, K. Sasaki, Y. Ikemoto, T. Moriwaki, T. Shirakura, R. Saito, Y. Imai, and K. Ohgushi, *J. Phys. Soc. Jpn*, in press.

蜂の巢格子磁性体 α -RuCl₃の動的性質
- 有効模型における Kitaev 相互作用の効果 -
 兵県大工 鈴木 隆史, 菅 誠一郎

蜂の巢格子磁性体 α -RuCl₃ の有効磁気模型は、Ru イオンに由来する合成磁気モーメント $J_{\text{eff}} = 1/2$ に、結晶構造から予想される Kitaev 相互作用[1]が強く働く模型で記述されると考えられている[2,3]. α -RuCl₃ は零磁場では $T_N \sim 7\text{K}$ 以下で磁気秩序を示す[4]一方で、非弾性中性子散乱 (INS) 実験で Kitaev スピン液体特有の励起連続帯の温度依存性[5, 6]が観測されている. このことから、本物質が磁気相図中の Kitaev スピン液体相近くに位置していると期待されている. ごく最近、磁気秩序が消失する約 7T 以上の磁場下で特異なスピングャップ相が見つかった[7,8,9]ことから、新たなスピン液体相の可能性が活発に議論されている. α -RuCl₃ に対する有効磁気模型の提案は数多くあるが、模型を見積もる手法に依存して最近接 Kitaev 項の符号が異なるなど論争が続いている.

本研究では α -RuCl₃ に対する第一原理計算の結果を基にして提案された 4 つの有効模型[10-13]に注目し、それらの模型の動的性質、比熱、静的構造因子の温度依存性を数値対角化法で計算した. 得られた計算結果と実験結果を比較し、次のことを明らかにした. すなわち、1) 4 つ中 2 つの模型は低エネルギー磁気励起を定性的に説明すること、2) 実験で報告のあった比熱の高温ピーク[5]を説明するには、いずれの模型も最近接 Kitaev 項が小さいと予想される. そこで、低エネルギー磁気励起を説明する有効模型を基に比熱の高温ピークを再現するよう強い最近接 Kitaev 項を持つ模型を提案した. 提案した模型は零磁場下の比熱の温度依存性、INS 実験結果[5,6]をはじめ、磁場中 ESR スペクトル[8]も含めてより定量的、定性的に説明できることがわかった.



Polarized electron spin resonance absorption $\omega\chi''(\omega) \propto \omega S(\mathbf{Q} = \mathbf{0}, \omega)$ for our effective model under out-of honeycomb-lattice plane field \mathbf{H} . Magnetic polarizations \mathbf{h}^ω of probe are pointing to (a) $\mathbf{h}^\omega \parallel \mathbf{H}$ and (b) $\mathbf{h}^\omega \perp \mathbf{H}$, respectively.

[1] A. Kitaev, *Annals Phys.* **321**, 2 (2006). [2] G. Jackeli and G. Khaliullin, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 017205 (2009). [3] J. Chaloupka, et al. *PRL* **110**, 097204 (2013). [4] J. A. Sears, et al., *PRB* **91**, 144420 (2015). [5] S. H. Do, et al., arXiv:1703.01081. [6] A. Banerjee, et al., *Science* **356**, 1055-1059 (2017). [7] S. -H. Baek, et al., *PRL* **119**, 037201 (2017). [8] Z. Wang, et al., arXiv:1706.06157. [9] A. N. Ponomaryov, et al., arXiv:1706.07240. [10] H. S. Kim

and H. Y. Kee, *PRB* **93**, 155143 (2016). [11] S. M. Winter, et al., *PRB* **93**, 214431 (2016). [12] R. Yadav, et al., *Sci. Rep.* **6**, 37925 (2016). [13] S. M. Winter, et al., arXiv:1702.08466.

テンソルネットワーク法によるキタエフスピン物質の研究

東大理¹, 東大物性研², 大久保毅¹, 川島直輝²

Na_2IrO_3 や Li_2IrO_3 に代表されるイリジウム酸化物や、ルテニウム化合物 $\alpha\text{-RuCl}_3$ は、強いスピン軌道相互作用を起源とする種々の新奇物性により近年の注目を集めている。これらの物質では、有効スピン $J_{\text{eff}}=1/2$ が二次元ハニカム格子を構成し、有効スピンの間には、相互作用の方向に依存して異なるスピン成分が相互作用する、異方的なキタエフ相互作用[1]が強く存在していると考えられている。このようなキタエフ相互作用のみが存在する $S=1/2$ 量子スピン模型は、キタエフ模型と呼ばれており、その基底状態はスピンが磁気的な長距離秩序を示さない、スピン液体状態（キタエフスピン液体）になっている[1]。一方、実際の物質には、キタエフ相互作用に加えて、等方的なハイゼンベルグ相互作用や、二次・三次近接相互作用、非対角の相互作用等が存在しており、これらの相互作用によりキタエフスピン液体が不安定化し、多くの場合、磁気秩序が基底状態で実現する。

本講演では、このような、キタエフ相互作用を持つハニカム格子物質を念頭に、種々の相互作用による基底状態の変化を解析した結果を報告する。強相関係に対する強力な計算手法である量子モンテカルロ法は、キタエフ相互作用が存在する場合には、いわゆる負符号問題が生じるため、精度のよい計算ができない。我々は、そのような状況でも効率的に基底状態を計算できる手法として、基底状態の波動関数をテンソルのつながりで表すテンソルネットワーク法に注目し、特に Tensor Product State (TPS)、又は、Projected Entangled Pair State (PEPS)と呼ばれる表現を用いた手法の開発を進めてきた。このテンソルネットワーク法より、第一原理計算から導出された Na_2IrO_3 の有効ハミルトニアン[2]の基底状態を計算した結果、その無限系での基底状態が、有限系での厳密対角化や密度行列繰り込み群の計算と同様に、実験での観測と一致する Zigzag 状態であること明らかにした他、三方晶歪みの大きさをコントロールすることで、基底状態が複数の磁気秩序状態へと変化することも明らかにした[3]。講演では、キタエフ相互作用に、 $\alpha\text{-RuCl}_3$ で支配的であるとされる、非対角の相互作用を加えた模型[4]に関する、テンソルネットワーク法での計算結果も含めて紹介し、現実の物質におけるキタエフスピン液体の可能性について議論する予定である。

[1] A. Kitaev, Ann. Phys. **321**, 2 (2006).

[2] Y. Yamaji, Y. Nomura, M. Kurita, R. Arita, and M. Imada, Phys. Rev. Lett. **113**, 107201 (2014).

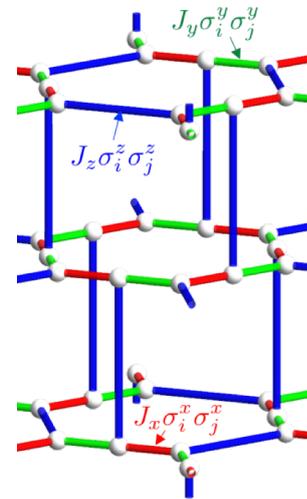
[3] T. Okubo, K. Shinjo, Y. Yamaji, N. Kawashima, S. Sota, T. Tohyama, and M. Imada, Phys. Rev. B **96**, 054434 (2017).

[4] A. Catuneanu, Y. Yamaji, G. Wachtel, H.-Y. Kee, and Y. B. Kim, arXiv:1701.07837.

ハイパーノナゴン格子キタエフ模型の異方極限における 3次元カイラルスピン液体への有限温度相転移

東大工
加藤 康之

蜂の巣格子上に定義されたキタエフ模型は、フラストレート量子スピン系の可解模型である[1]。キタエフ模型は様々な三配位の格子に可解性を保ったまま拡張可能であり、拡張後も基底状態において長距離スピン秩序がないことが厳密に示されている。また、格子に奇数サイトからなるループが存在する場合には基底状態に時間反転操作で結びつくクラマース縮退が存在し、時間反転対称性の自発的な破れが期待される。実際、装飾蜂の巣格子キタエフ模型において時間反転対称性の破れを伴うカイラルスピン液体が現れ[2]、有限温度において常磁性相との間に相転移を示すことが見出されている[3]。本研究では下図に示したような9サイトループから成る三次元格子（ハイパーノナゴン格子）へのキタエフ模型の拡張と、自発的に時間反転対称性を破ったカイラルスピン液体に注目する[4]。はじめに、異方極限 $(J_x \gg J_y, J_z), (J_z \gg J_x, J_y)$ に注目し、低エネルギー有効模型を導出した $[(J_y \gg J_z, J_x)$ は $(J_x \gg J_y, J_z)$ と対称性から等価である]。有効模型は各9サイトループに定義される Z_2 自由度（flux）に関するものであり、異方極限によって異なる模型が得られた： $(J_z \gg J_x, J_y)$ ではフラストレーションが無い模型が得られたのに対して、 $(J_x \gg J_y, J_z)$ ではフラストレートした模型が得られた。有限温度における熱力学特性を調べるため、これらの有効模型のモンテカルロシミュレーションを実装した。その結果、有限温度カイラルスピン液体転移を見出した。この転移はいずれの場合でも一次転移であるが、低温相における flux 配置は異方極限によって異なることがわかった。本講演ではこの低温相における flux 配置についても議論する。



図：ハイパーノナゴン格子キタエフ模型。

- [1] A. Kitaev, Ann. Phys. (NY) **321**, 2 (2006).
- [2] H. Yao and S. A. Kivelson, Phys. Rev. Lett. **99**, 247203 (2007).
- [3] J. Nasu and Y. Motome: Phys. Rev. Lett. **115**, 087203 (2015).
- [4] Y. Kato, Y. Kamiya, J. Nasu, and Y. Motome, Phys. Rev. B. **96**, 174409 (2017).

三次元ハイパーオクタゴン格子上のキタエフ模型が示す “気液”相転移の大規模数値計算による研究

東京大学大学院工学系研究科、ミシエンコピョートル、加藤康之、求幸年

量子スピン液体とは強い量子揺らぎによって最低温まで長距離秩序が抑制されて実現する量子状態のことである[1]。量子スピン液体が実現していることの証左として、高温の無秩序な常磁性状態から最低温まで、長距離秩序状態への相転移が現れないことが論じられてきた。しかし、一般的な物質の三態変化とのアナロジーから液体状態に対応する量子スピン液体と気体状態に対応する常磁性状態の間に相転移が現れる可能性がある。実際、そうした相転移が三次元ハイパーオクタゴン格子上に拡張されたキタエフ模型[2]において近年発見された[3]。この相転移は Z_2 フラックスが形成するループ型の特徴的な励起状態の閉じ込め・非閉じ込め転移として説明される[3]。しかし、こうした量子スピン液体状態への有限温度相転移は他に例がなく、未解明な部分が多く残されていた。

そこで本研究では、このような相転移現象の普遍的性質を理解する目的で、三次元ハイパーオクタゴン格子（図1）上に定義されたキタエフ模型[4]が示す熱力学的な性質を調べた。マヨラナフェルミオン表示に基づいた量子モンテカルロシミュレーション[3]に加えて、グリーン関数法に基づいた多項式展開法[5]を援用することで、2000 サイト以上の大きな系まで系統的な計算を行った[6]。

その結果、ハイパーオクタゴン格子の場合にも、高温の常磁性状態と低温の量子スピン液体の間に有限温度相転移が存在することを見出した[6]。比熱、 Z_2 フラックスの揺らぎ、Wilson ループの三つの物理量に関して、系統的なサイズ外挿を行うことにより、相転移温度を精度良く決定し、ハイパーオクタゴン格子上のキタエフ模型の相転移温度はハイパーオクタゴン格子上のものよりも低いことを明らかにした。この結果は、二つの模型におけるフラックスギャップの大小関係と関連付けることができる。さらに、ハイパーオクタゴン格子上の異方的極限の模型を議論し、それがハイパーオクタゴン格子上のものと一致することを明らかにした。これらの結果から、これらの三次元キタエフ模型が示す有限温度相転移は共通したメカニズムによって引き起こされていることを明らかにした。

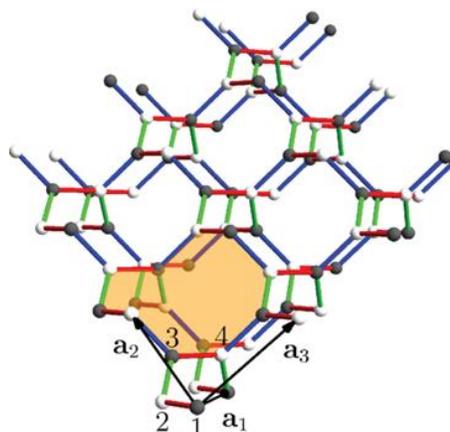


図1：ハイパーオクタゴン格子

- [1] P. W. Anderson, Mater. Res. Bull. **8**, 153 (1973).
- [2] A. Kitaev, Ann. Phys. **321**, 2 (2006).
- [3] J. Nasu, M. Udagawa, and Y. Motome, Phys. Rev. Lett. **113**, 197205 (2014).
- [4] M. Hermanns and S. Trebst, Phys. Rev. B **89**, 235102 (2014).
- [5] A. Weisse, Phys. Rev. Lett. **102**, 150604 (2009).
- [6] P. A. Mishchenko, Y. Kato, and Y. Motome, Phys. Rev. B **96**, 125124 (2017).

π -electron Quantum Magnetism in Ionic Polyaromatic Hydrocarbons

Yasuhiro Takabayashi¹, Melita Menelaou¹, Nayuta Takemori², Takashi Koretsune², Yusuke Nomura³, Ryotaro Arita², Matthew J. Rosseinsky⁴ and Kosmas Prassides¹

¹ WPI-Advanced Institute for Materials Research (WPI-AIMR), Tohoku University, Japan, ² RIKEN Center for Emergent Matter Science (CEMS), Japan, ³ Department of Applied Physics, University of Tokyo, Japan, ⁴ Department of Chemistry, University of Liverpool, UK
Email: yasuihiro.takabayashi.e4@tohoku.ac.jp

The field of π -electron superconductivity in carbon-based systems was ignited a few years ago by reports of high-temperature superconductivity in materials obtained by reaction of alkali metals with polyaromatic hydrocarbons (PAHs) such as phenanthrene and picene. However, despite the flare of experimental and theoretical activity, the results have not been reproduced and the identities of all compounds in this family have remained unknown, reflecting the unavailability of phase-pure samples. Recently we have been successful in devising new reproducible synthetic routes of ionic salts of PAHs under mild conditions that avoid the competing decomposition of PAH molecules at high temperature. As a result, highly-crystalline single-phase materials with variable oxidation states of reduced PAHs such as phenanthrene, pentacene and picene are now available for structural and electronic characterization for the first time [1,2].

Prominent among the new materials emerging from this breakthrough are the multi-orbital strongly-correlated Mott insulating binary phenanthrene salts, $\text{Cs}(\text{C}_{14}\text{H}_{10})$ and $\text{Cs}_2(\text{C}_{14}\text{H}_{10})$ [1]. Whereas $\text{Cs}_2(\text{C}_{14}\text{H}_{10})$ is diamagnetic due to orbital polarization, $\text{Cs}(\text{C}_{14}\text{H}_{10})$ is a Heisenberg antiferromagnet with a gapped spin-liquid state emerging from the coupled highly-frustrated Δ -chain magnetic topology of alternating-exchange spiral tubes of $S = \frac{1}{2}$ $(\text{C}_{14}\text{H}_{10})^{\cdot-}$ radical anions (Fig. 1). The absence of long-range magnetic order down to 1.8 K ($T/J \approx 0.02$; J is the dominant exchange constant) renders the compound an excellent candidate of a three-dimensional Mott insulating spin- $\frac{1}{2}$ quantum spin liquid arising purely from carbon π -electrons.

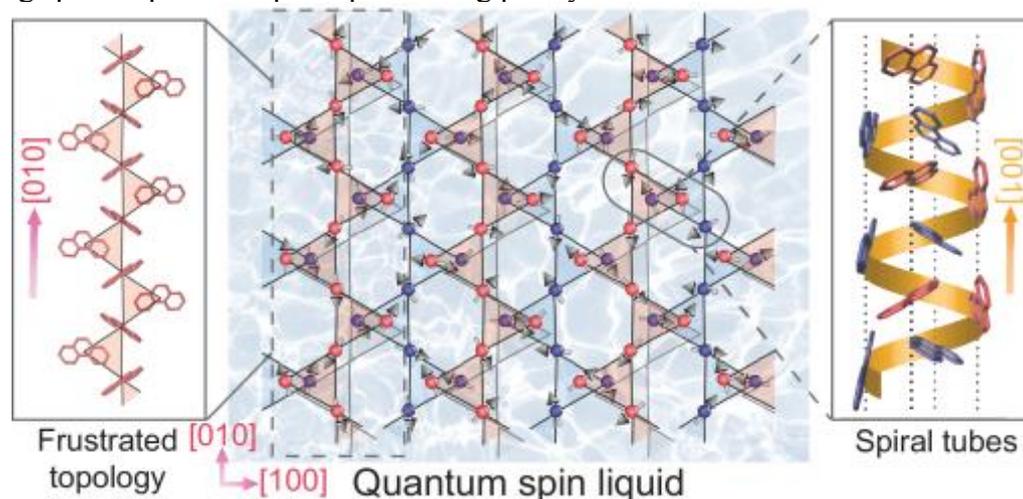


Fig. 1. The left panel shows the packing topology of the spin- $\frac{1}{2}$ phenanthrene molecular ions, which arrange in chains of vertex-sharing triangularly arranged trimers running along the b axis. The right panel depicts the spiral magnetic tubes, which run along the c axis. The middle panel depicts the microscopic magnetic model for $\text{Cs}(\text{C}_{14}\text{H}_{10})$ that results in a staircase-like 3D interlinked arrangement of the characteristic motifs running along the b and c axes.

References

- [1] Y. Takabayashi *et al.*, *Nature Chemistry*, **9**, 635 (2017).
[2] F. Romero *et al.*, *Nature Chemistry*, **9**, 644 (2017).

理研 藤山茂樹

炭素や水素などの軽元素により構成される分子性導体では、スピン軌道相互作用はそれほど大きくはならず、実際に磁気モーメントの測定からも g -因子が2からほとんどずれない ($g < 2.02$, 3d 遷移金属である銅などは $g \sim 2.2$)。これは、分子性導体のスピン相関が等方的であることを担保し、たとえば三角格子様の反強磁性スピンネットワークをもつ分子性導体の基底状態として発現する量子スピン液体の安定化に有利に働くと考えられてきた。

(Cation)[Pt(dmit)₂]₂ は、量子スピン液体の候補物質である Pd(dmit)₂ 塩の中心金属を Pd から 5d 遷移金属である Pt に置換した類縁物質群である。この物質は $T = 160 \sim 220$ K で構造歪みによる金属絶縁体転移を示す。これは高温相は HOMO と LUMO の混成による大きなバンド幅をもつ金属、低温相は交代鎖の形成に由来するバンド絶縁体であると解されてきた。しかし、この物質の ¹³C NMR と第一原理計算から以下の知見を得た。

1. 金属的電気伝導を示す高温相の核スピン格子緩和率 ($1/T_1$) が温度に依存せず、反強磁性モット絶縁体の常磁性状態での $1/T_1$ と同様の温度依存性および絶対値をもつ。
2. バンド計算を行う際にスピン軌道結合を導入しない場合に混成していた HOMO と LUMO はスピン軌道結合の導入により分裂し、モット絶縁体的半充填バンドが実現し、上の実験を説明し得る。
3. バンド絶縁化にともない $1/T_1$ は大きく抑制され $50 < T < 100$ K で温度に依存しないが、 $T < 50$ K で $1/T_1 \propto T$ が実現する。これは磁気励起がフェルミディラク統計に従うことを強く示唆する。コリンガレート ($1/T_1 T \propto \text{DOS}(\epsilon_F)$) は他の (dmit) 塩の金属相での値の半分程度もあり、非自明な凝縮が起こっている。

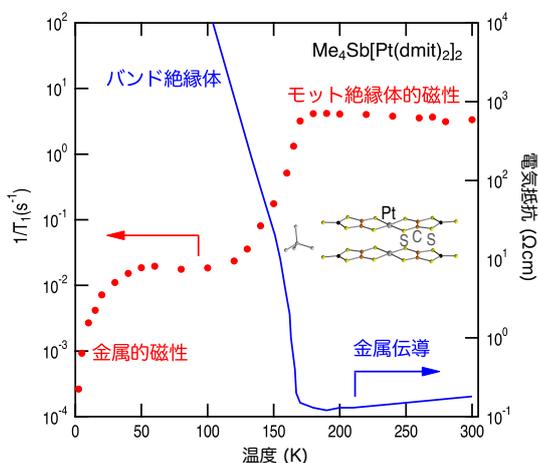


図 1: [Pt(dmit)₂]₂ 塩の電気抵抗と核磁気緩和率 (動的磁化率)

これらは、分子の中間位置に 5d 遷移金属を有することによりはじめて生じる状態である。特に、分子性導体のクーロン反発 (モットギャップ) と 5d 遷移金属元素のスピン軌道相互作用がともに ~ 0.3 eV 程度と拮抗していることにより、従来の分子性導体の理解の範囲を超えた電子状態が実現していると考えられる。

分子性導体の電子スピンは対をなす 2 つの分子で 1 つの $S = 1/2$ スピンを挟み込むように抱えている ([Pt(dmit)₂]₂ など)。これはダイマーモット描像と呼ばれ、二量体どうしを結ぶ磁気相関の幾何学的ネットワークが磁性をよく記述することが知られる。では、Pt 元素を 1 スピンあたり 2 個有する (Cation)[Pt(dmit)₂]₂ の場合、スピン軌道結合をどのように導入すると物性をよく記述するようになるのか。また、そのときの良い量子数は何か。これは、実験結果の理論的解釈の範疇を超え、物理のモデルとしても興味深い。

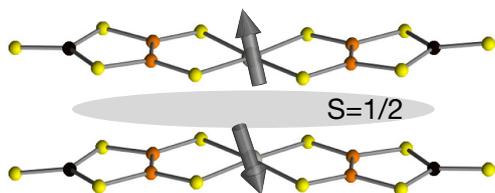


図 2: ダイマーモット模型での電子スピンの広がり と 2 つある 5d 波動関数

ドーピングされたスピン液体が示す異常金属状態と圧力誘起相転移

大池広志（理研 CEMS）

スピン液体は特殊な磁気的性質を持っているため、キャリアドーピングによって金属状態が実現した際に、スピンと電荷の自由度がどのように振る舞うのかは非自明な問題である。理論的な研究は30年前から行われており、ドーピングされたスピン液体が銅酸化物における高温超伝導の起源である可能性が指摘されている。しかし、スピン液体が実験的に確認されている物質系において、キャリアドーピングによって金属状態を実現した研究はなかった。

本研究では、三角格子モット絶縁体に11%のホールがドーピングされた有機導体 κ -(ET)₄Hg_{2.89}Br₈ (図1 a, b) の電子状態を調べた。図1 c に示したように、電気抵抗率は金属的な振る舞いをするのに対し、スピン磁化率の振る舞いはスピン液体物質 κ -(ET)₂Cu₂(CN)₃ とほとんど変わらないことを見出した。これは、キャリアドーピング下においてもスピン液体状態を保持されたまま、金属状態が実現していることを示している。低温における電気抵抗率は温度に対して線形な依存性を有しており、ドーピングされたスピン液体が非フェルミ液体的な振る舞いを示すことが明らかになった[1]。さらに、 κ -(ET)₄Hg_{2.89}Br₈ は、静水圧下ではフェルミ液体へと相転移し [2]、一軸歪を加えると絶縁体へと変化する[3]。これらの加圧による電子状態の変化は、ドーピング系に特有の電子相のエネルギー的な競合が顕在化したものである。このように、 κ -(ET)₄Hg_{2.89}Br₈ の圧力下電子状態の研究により、今までに実現することができなかった三角格子上における電子集団の振る舞いを明らかにした。

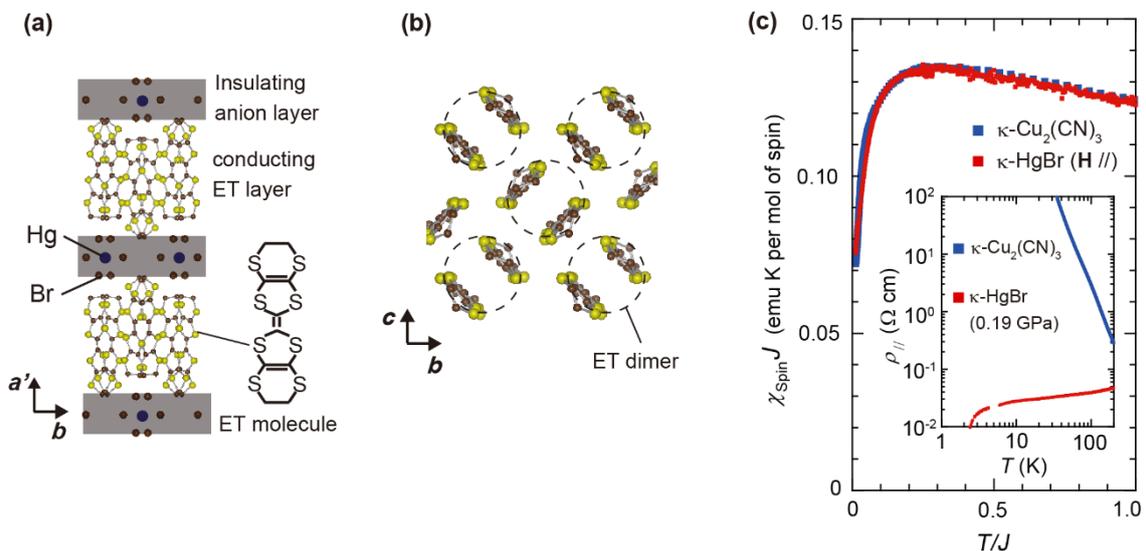


図1、(a) κ -(ET)₄Hg_{2.89}Br₈ の結晶構造, (b)伝導面における ET 分子の配置, (c)交換相互作用 J でスケールした κ -(ET)₄Hg_{2.89}Br₈ と κ -(ET)₂Cu₂(CN)₃ のスピン磁化率の温度依存性。電気抵抗率の温度依存性をインセットに示す。

[1] **H. Oike** et al., *Nature Communications* **8**, 756 (2017). [2] **H. Oike** et al., *Phys. Rev. Lett.* **114**, 067002 (2015). [3] **H. Oike** et al., *in preparation*.

キタエフの量子スピン液体の新たな広がりと 有限温度励起スペクトル

山地 洋平

東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻, JST さきがけ

スピン自由度の分数化を示す Kitaev スピン液体[1]は、 Na_2IrO_3 での実現可能性の理論提案[2]も相まって、大きな注目を集めてきた。とくに候補物質の一つ、 $\alpha\text{-RuCl}_3$ についての実験的・理論的研究は著しい進展を見せている。

このような背景のもと、我々は $\alpha\text{-RuCl}_3$ の有効模型として、Kitaev- Γ 模型[2,3]の数値的研究を行ってきた。蜂の巣格子上で定義される Kitaev- Γ 模型では、最近接の $S=1/2$ スピン対が、Kitaev 項 $-KS_i^\gamma S_j^\gamma$ 、および Γ 項 $\Gamma S_i^\alpha S_j^\beta + S_i^\beta S_j^\alpha$ によって相互作用している。ただし (α, β, γ) はボンド方向に依存する (x, y, z) の並べ替えである。

数値厳密対角化によって、古典スピン液体となる Γ 極限[4]と Kitaev 極限が断熱的に繋がる可能性を見出している[2,3]。比熱の温度依存性が Kitaev 模型のような 2 ピーク構造[5]を示す一方、エントロピーから示唆される Γ 極限の熱的分数化は Kitaev 極限とは異なることがわかってきた[3]。講演では、Kitaev- Γ 模型と $\alpha\text{-RuCl}_3$ の有限温度における動的スピン構造因子[7]の比較、Kitaev 極限と Γ 極限でのスピン励起の違いについても紹介させていただく[8]。

[1] A. Kitaev, *Annals Phys.* 321, 2 (2006).

[2] J. Chaloupka, G. Jackeli, and G. Khaliullin, *Phys. Rev. Lett.* 105, 027204 (2010).

[3] A. Catuneanu, Y. Yamaji, G. Wachtel, H.-Y. Kee, and Y. B. Kim, arXiv:1701.07837.

[4] M. Gohlke, G. Wachtel, Y. Yamaji, F. Pollmann, and Y. B. Kim, arXiv:1706.09908.

[5] I. Rousochatzakis and N. B. Perkins, *Phys. Rev. Lett.* 118, 147204 (2017).

[6] J. Nasu, M. Udagawa, and Y. Motome, *Phys. Rev. B* 92, 115122 (2015).

[7] A. Banerjee, et al., *Science* 356, 1055 (2017).

[8] Y. Yamaji *et al.*, to be submitted.

磁場中 Kitaev スピン液体とマヨラナ多粒子問題

宇田川 将文, 吉田 智大
学習院大学理学部物理学科

近年、Kitaev スピン液体の性質の解明とその現実系での実現の可能性が大きな興味を集めている。Kitaev 模型の顕著な性質は、厳密解を有し、素励起が低エネルギーのみならず、全スペクトル領域で Z_2 flux と結合したマヨラナフェルミオンとして表されることである。磁場中でマヨラナフェルミオンはエネルギーギャップを獲得し、 Z_2 flux に束縛されたゼロエネルギー状態は非可換エニオンとして振る舞うことが提案されている [1]。

しかしながら、磁場中での非可換エニオンの出現は摂動論をベースとした現象論に基づくものであり、非摂動的な大きさの磁場が印加された時の振る舞いを調べることは興味深い問題として残されている。また、現実系においては Kitaev スピン液体を誘起する異方的な結合に加え、等方的な Heisenberg 項を含む様々な相互作用項の可能性が存在し、状況を複雑にしている。本講演では磁場中の Kitaev スピン液体を調べる簡便な平均場近似に基づき、等方的な Heisenberg 項を加えた Kitaev-Heisenberg 模型の相図及び磁場効果について紹介する。磁化過程は厳密対角化法の結果と良い一致を見せ、Kitaev 結合が反強磁性的な場合にはスピン液体相が比較的高磁場まで安定して存在することを示唆する。

後半では磁場中での実現が期待されるマヨラナゼロエネルギー状態の性質について議論する。低温弱磁場における Kitaev スピン液体はマヨラナゼロエネルギー状態を伴う Z_2 flux の「非可換エニオン気体」として振る舞うことが期待されている。しかしながら、 Z_2 flux 間の結合は、マヨラナフェルミオンのエネルギー準位をゼロエネルギーからシフトするため、このような単純な描像は必ずしも成り立たない可能性がある。本講演では磁場中 Kitaev スピン液体と類似のトポロジカル相を示す、 $p_x + ip_y$ 型カイラル超伝導体の渦糸相を取り上げ、マヨラナ多粒子系におけるゼロエネルギー状態の振る舞いと、その多体効果について報告する [2]。

[1] A. Kitaev, *Annals of Physics* **321**, 2 (2006)

[2] T. Yoshida and M. Udagawa, *Physical Review B* **94**, 060507(R) (2016)

配位数3が共通のさまざまな多面体クラス
タ上に可解 Kitaev 模型 (図1 参照)

$$\mathcal{H} = \sum_{\lambda=x,y,z} \sum_{\langle i,j \rangle_{\lambda}} J_{ij}^{\lambda} \sigma_i^{\lambda} \sigma_j^{\lambda} \quad (1)$$

を設定し, そのスピン液体基底状態の対称性
及び分数励起について議論する. Schwinger-
Wigner 変換 $\sigma_i^{\lambda} = i\eta_i^{\lambda} c_i$ により, スピンを物
質 Majorana フェルミオン c_i と \mathbb{Z}_2 ゲージ場
 $u_{\langle i,j \rangle_{\lambda}}$ を担う局在 Majorana フェルミオン
 η_i^{λ} とに分解すると, ハミルトニアンは2次
形式, ゲージ場ごとに 2×2 箱対角な $2N$ 次
元行列となる. Majorana フェルミオンを再
度複素化して得られる準粒子生成演算子を
 α_k^{\dagger} , 多面体頂点数を $2N$ とすると, 完全対
角なハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \sum_{k=1}^N \varepsilon_k \left(\alpha_k^{\dagger} \alpha_k - \frac{1}{2} \right);$$

$$c_i = \sum_{k=1}^N (\psi_{ik} \alpha_k + \psi_{ik}^* \alpha_k^{\dagger}) \quad (2)$$

と書かれる. ここで ψ_{ik} は背景ゲージ場に依
存する“波動関数”である.

Raman 散乱スペクトルは, (背景場励起と分離して) この物質 Majorana 励起モードを抽出する巧妙な顕微
鏡である. Loudon-Fleury 型磁気 Raman 演算子による散乱強度

$$\lim_{T \rightarrow 0} I(\omega) = \frac{1}{4N} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N |B_{kl}|^2 \delta(\hbar\omega - \varepsilon_k - \varepsilon_l);$$

$$B_{kl} = -i \sum_{\lambda=x,y,z} \sum_{\langle i,j \rangle_{\lambda}} J^{\lambda} [\mathbf{e}_{\text{in}} \cdot (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)] [\mathbf{e}_{\text{sc}} \cdot (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)] u_{\langle i,j \rangle_{\lambda}} (\psi_{ik}^* \psi_{jl}^* - \psi_{jk}^* \psi_{il}^*) \quad (3)$$

の計算結果を図2に示す. ここで $\mathbf{e}_{\text{in(sc)}}$ は入(反)射光の偏光ベクタである. 散乱ピークは任意の2粒子励起
を教示し [図2(a)], 比熱と照らして背景場励起が始まるとこれが融解し始める [図2(b)]. 図2(a)において偏光
依存性は極めて弱く, これは Kitaev 蜂の巣格子のそれを彷彿させる. この偏光解消はスピン液体に共通であ
ろうか? その答えを \tilde{O} 群 Kitaev 多面体に求める.

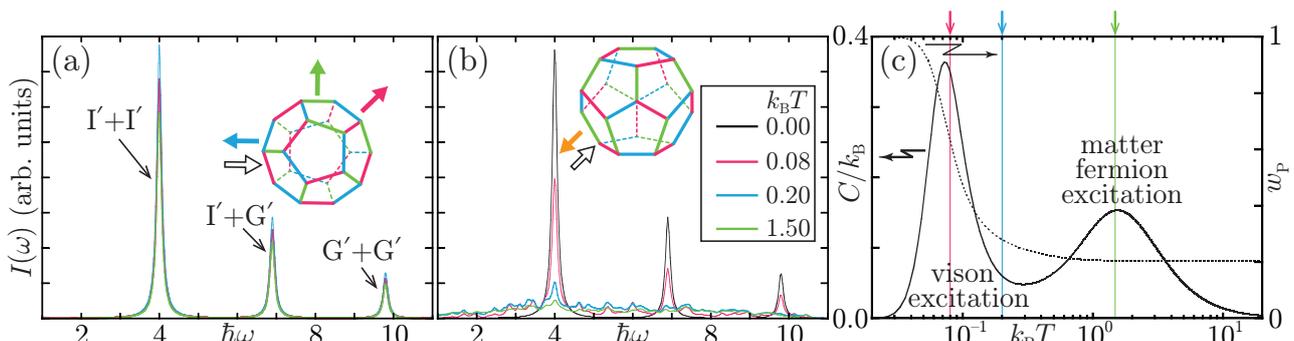


図2: 正十二面体 Kitaev 模型の磁気 Raman 散乱強度 $I(\omega)$: 絶対零度偏光依存性 (a), 固定偏光温度依存性 (b);
比熱 C とプラケット保存量絶対値期待値 $w_P \equiv \left| \sum_{p=1}^{12} \prod_{\langle i,j \rangle_{\lambda} \in p} u_{\langle i,j \rangle_{\lambda}} \right|$ の温度依存性 (c).

Majorana 励起スペクトル ε_k は, 多面体の点群操作と局所
ゲージ変換を組み合わせた拡張対称操作群—projective sym-
metry group (PSG)—を通して読み解くことができる [1].
 $J^x = J^y = J^z = 1$ の場合を考えると, 正十二面体, 切頂
二十面体の点群は I_h , 切頂八面体, 切頂立方体の点群は O_h
であるが, 基底状態ゲージ場が鏡映対称性をもたないため,
PSG はそれぞれ \tilde{I}, \tilde{O} となる. \sim は局所ゲージ変換の2価性に
起因する2重群であることを示す.

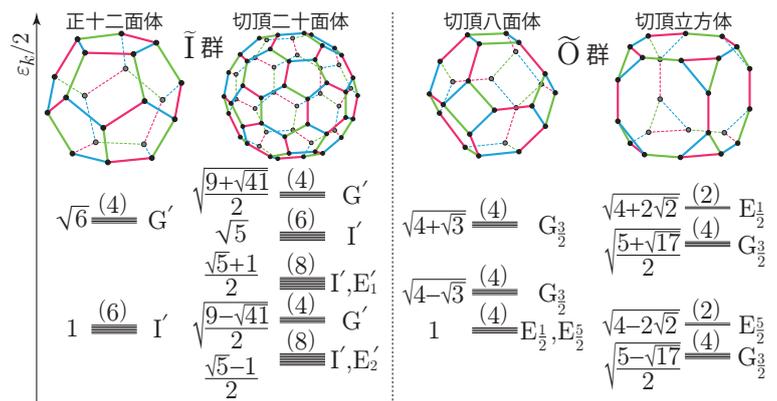


図1: 多面体 Kitaev 模型の背景場基底状態からの Majorana
励起モード. ハミルトニアンをその PSG の既約表現に分解
するとき, 得られる表現及びその次元がスペクトル構造を定
量的に記述する.

ハニカム・ハイパーハニカムIr酸化物のスピン液体物性

東大理^A, 高知大理^B, マックスプランク研究所^C北川健太郎^A, 林義之^A, 高野陸^A, 岸本恭来^B,松本洋介^C, 高山知弘^C, 高木英典^{A,C}

ハニカム格子及びその3次元類縁ネットワークのハイパーハニカム格子上のIr酸化物は、特異な異方的相互作用からKitaevハニカム模型の恰好の舞台候補であると予測されてきた。今までの全ての化合物は常圧下において静的に秩序してしまっていたが、最近我々は α -Li₂IrO₃の層間LiをH置換処理したH₃LiIr₂O₆において、比熱測定では50 mKまで秩序せずNMR線幅も非常に狭い($\sim 0.01 \mu\text{B}$)、非常に良質なスピン液体性を見出して報告してきた。重水素置換体も同様の物性を示すが、いずれも-100 K強の大きな反強磁性的ワイス温度を示し本来の強磁性的Kitaev型相互作用を覆い隠しているのが未解決の問題である。また、ソフト化学置換に起因する欠陥が多く、極低温のゆらぎがほぼそれらに支配されているので最低励起を決定するのも困難な謎の量子スピン液体のままである。

従って、我々は現在、ハイパーハニカム型 β -Li₂IrO₃[1]の超高压下物性に着目している。この物質は常圧下においてKitaev型相互作用が支配的であると推定されるだけでなく、そのノンコリニア秩序相(38 K)は2 GPa強の圧力印加で消えることが報告されている[1]。最近、8 GPaまでNMR測定及び磁化測定から β -Li₂IrO₃の圧力下相図を完成させた。2 GPaで秩序相が消失するとともに、構造相転移を伴う新しい常磁性相が現れる。その相の相転移温度は圧力とともに増大し、概ね4 GPaで室温に達する。X線回折[2]によると、高压相はIr-Ir 2量体的であり磁化率およびナイトシフトが大きく減少することからスピンパイエルズ転移を想起させられるが、Irの擬スピン1/2が非磁性シングレットを選ぶことは全く自明ではない。また、NMR緩和率は低圧相とあまり変わらず極低温でも大きな値をとる。現状の試料はやはり欠陥が多いことから、現在高純度試料での高压NMR・磁化測定を準備している。3次元Kitaev量子スピン液体、もしくはIr酸化物の新奇な磁性絶縁体-非磁性絶縁体転移のどちらかが結論出来る予定である。

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

[2] L. S. I. Vaiga et al., PRB 96, 140402(R) (2017)

キタエフ量子スピ液体候補 α - RuCl_3 の NMR

名古屋大学理学研究科 清水 康弘

キタエフ型量子スピ液体の候補物質として近年注目されているハニカム格子反強磁性体 α - RuCl_3 の NMR の結果について紹介する。 α - RuCl_3 は、層状構造($C2/m$ もしくは $R-3$)を有し、強い異方性のある帯磁率を示す。基底状態は反強磁性秩序をもつが、 ab 面に臨界磁場 H_c 以上印加すると磁気秩序は消失する[1-3]。この度昇華法で作製した単結晶試料においてゼロ磁場下の ^{35}Cl NQR/NMR 測定を行った結果、 $T_N = 7.0$ K で反強磁性秩序、 $T_s \sim 100$ K で構造相転移を観測した。面直方向の磁場下で T_N は変わらず、動的スピ相関を反映する核スピ格子緩和率 T_1^{-1} も磁場に依存しない。一方、面内磁場下で T_1^{-1} は顕著な磁場依存性をもつことが分かった。0.4 K まで ^{35}Cl NMR を詳細に測定した結果、 $H_c = 7.4$ T と求まった。量子イジング模型で見られる量子臨界現象では、 H_c 以上でスピ励起にギャップが開くと考えられるが、 α - RuCl_3 では H_c 以下でも低温で擬ギャップ的な振舞いが見られた。この結果は、キタエフ模型で現れる Z_2 フラックスによって動的スピ相関がゼロ磁場下でもわずかにギャップ的になることと整合している[4, 5]。

本研究は、長井 優弥, 伊藤 正行(名大理), 吉竹 純基, 求 幸年(東大工), 那須 譲治(東工大理)各氏との共同研究である。

- [1] A. U. B. Wolter *et al.*, Phys. Rev. B **96**, 041405 (2017).
- [2] S.-H. Baek *et al.*, Phys. Rev. Lett. **119**, 037201 (2017).
- [3] R. Hentrich *et al.*, arXiv:1703.08623.
- [4] J. Yoshitake *et al.*, Phys. Rev. Lett. **117**, 157203 (2016).
- [5] J. Yoshitake *et al.*, Phys. Rev. B **96**, 024438 (2017).

Kitaev 相互作用に由来する磁気異方性

東大工 石塚 大晃

Magnetic anisotropy due to Kitaev interactions

Dept. of Applied Physics U. of Tokyo Hiroaki Ishizuka

イリジウム酸化物などの重遷移金属からなるMott絶縁体では、スピン軌道相互作用の効果に由来してKitaev相互作用などの様々な異方的相互作用を生じることがある。こうした相互作用が存在する系では、基底状態相図上に異なる相互作用間の競合による多彩な磁気秩序が見られるだけでなく[1,2], order-from-disorder[3,4]や量子スピン液体[5]などの興味深い磁気現象を生じる。一方で、近年の物質に即した理論研究からは、こうした興味深い性質の多くが有効モデルのパラメータの変化に対して極めて敏感であることも明らかとなってきた。その為、こうした物理の実験的研究においては各々の物質における交換相互作用の大きさと異なる相互作用間の比率を理解することは重要である。しかしながら、これまで実験的に異方的な相互作用の強度を評価する方法は知られていない。本講演では、一般的にスピンモデルの磁気異方性が異方的相互作用からくる点に着目し、磁気トルク測定を用いて実験的にKitaev相互作用の強さを測定する方法について理論的に考察した。

以上の目的のため、本研究ではハニカム格子状のイリジウム酸化物の有効モデルを対象として、常磁性相の磁気異方性を高温展開法によって解析した[6]。その結果、Kitaev相互作用に由来して特徴的な温度依存性を持つ磁気異方性が見出された。この特徴的な温度依存性からKitaev相互作用に由来する磁気異方性はvan Vleck帯磁率など、他の機構を起源とする磁気異方性と容易に区別される。さらに、等方的なKitaev-Heisenbergモデルではこの異方性がKitaev相互作用の強度のみに依存し、Heisenberg相互作用の強さには影響されないことを示した。また、結晶の歪みなどによって一軸異方性などが入った場合にも、磁気トルク測定からKitaev相互作用の寄与を分離できることを見出した。これらの結果から、キタエフ・スピン液体の候補物質と考えられているイリジウム酸化物やルテニウム酸化物におけるKitaev相互作用を測定する手法として利用できる可能性がある。

さらに、こうした異方的相互作用に由来する磁気異方性は普遍的にみられ、fcc格子などの格子構造に由来する幾何学的フラストレーションが生じる系では、この異方的相互作用に由来する磁気異方性が常磁性相と基底状態で異なる磁気異方性を生じることを見出した[7]。

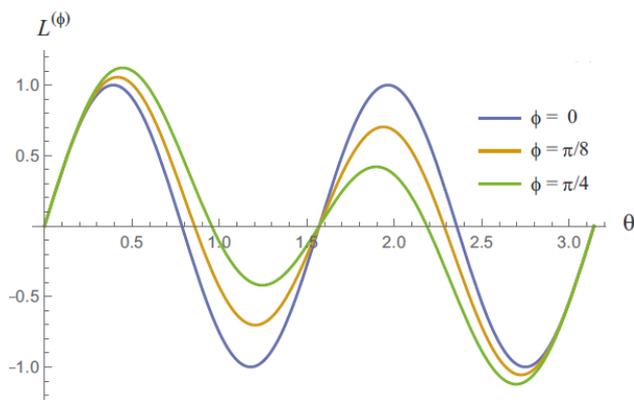


図: Kitaev 相互作用に由来する磁気トルク曲線[6].

- [1] J. Chaloupka, G. Jackeli, and G. Khaliullin, Phys. Rev. Lett. **105**, 027204 (2010).
- [2] J. G. Rau, E. K.-H. Lee, and H. Y. Kee, Phys. Rev. Lett **112**,077204 (2014).
- [3] G. Khaliullin, Phys. Rev. B **64**, 212405 (2001).
- [4] J. Chaloupka and G. Khaliullin, Phys. Rev. B **94**, 064435 (2016).
- [5] A. Kitaev, Ann. Phys. **321**, 2 (2006).
- [6] H. Ishizuka, Phys. Rev. B **95**, 184413 (2017).
- [7] H. Ishizuka and L. Balents, Phys. Rev. B **92**, 020411(R) (2015).

キタエフ・スピン液体の Z_2 フラックスと 線形・非線形磁場応答：強磁性モデルと反強磁性モデル

紙屋佳知、理研

量子スピン液体ではトポロジカルな基底状態波動関数や分数励起が予想される。特に、Kitaev モデルの提案 [1]、さらに凝縮系での実現可能性について議論した Jackeli と Khaliullin の理論[2]以降、実験的にもイリジウム系やルテニウム系の候補物質が次々と見出され、Kitaev 量子スピン液体の研究が盛んに行われている。Jackeli-Khaliullin メカニズムは強磁性的 Kitaev 相互作用を導くが、最も精力的に中性子散乱実験が行われている α - RuCl_3 においても、Kitaev 項が強磁性的であるか反強磁性的であるかさえ決着していない。この発表では、磁場の線形応答・非線形応答に着目し、反強磁性 Kitaev モデルと強磁性 Kitaev モデルに顕著な差異が現れ、したがって両者を簡便に区別できることを示す。特に強磁性 Kitaev モデルの場合、 Z_2 フラックスの励起エネルギーに相当するクロスオーバー温度領域において、非線形帯磁率に特徴的な符号変化が現れる[3]。

References:

- [1] A. Kitaev, *Ann. Phys.* **321**, 2 (2006)
- [2] G. Jackeli and G. Khaliullin, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 017205 (2009).
- [3] YK, J. Yoshitake, Y. Kato, J. Nasu, and Y. Motome, in preparation.

Quasi-continuous transition from a Fermi liquid to a spin liquid in κ -(ET)₂Cu₂(CN)₃

T. Furukawa¹, K. Kobashi², Y. Kurosaki², K. Miyagawa², K. Kanoda²

¹ Department of Applied Physics, Tokyo University of Science, Tokyo 125-8585, Japan

² Department of Applied Physics, University of Tokyo, Tokyo 113-8656, Japan

Email: tetsuya.furukawa@rs.tus.ac.jp

The Mott metal-insulator transition—a drastic manifestation of Coulomb interactions among electrons—is the first-order transition with a clear discontinuity, as shown by various experiments and the celebrated dynamical mean-field theory. Recent theoretical work, however, suggests that the transition is continuous if the Mott insulator carries an exotic spin liquid with a spinon Fermi surface^{1,2}. Indeed, several experimental studies have suggested the existence of such spin liquids³. Here, we demonstrate the case of a quasi-continuous Mott transition from a Fermi liquid to a spin liquid in an organic triangular-lattice system κ -(ET)₂Cu₂(CN)₃ (Ref. 4). Transport experiments performed under fine pressure tuning have found that as the Mott transition is approached, the Fermi-liquid coherence temperature continuously falls to the scale of kelvins, with a divergent quasi-particle decay rate on the metal side, and the charge gap gradually closes on the insulator side (Fig. 1). A Clausius-Clapeyron analysis of the pressure-temperature phase diagram provides thermodynamic evidence for the extremely weak first-order nature of the Mott transition. These results provide additional support for the existence of a spinon Fermi surface, which becomes an electron Fermi surface when charges are Mott delocalized.

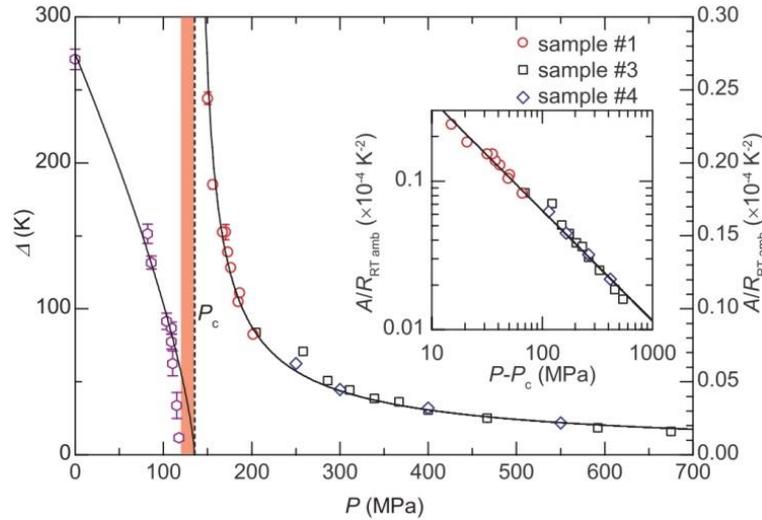


Fig. 1. Pressure dependence of the charge gap Δ and the T^2 coefficient A . The solid lines indicate the fitting curves of $\Delta \propto |P - P_c|^{0.73 \pm 0.04}$ and $A \propto |P - P_c|^{-0.75 \pm 0.01}$, where P_c is 135 MPa. The T^2 coefficient A is normalized by resistance at room temperature under ambient pressure, $R_{RT,ambient}$, for each sample. The charge gap is almost closed in the highlighted pressure region. The inset shows a log-log plot of $A/R_{RT,ambient}$ vs. $P - P_c$.

References

- [1] R. V. Mishmash et al., *Phys. Rev. B* 91, 235140 (2015).
- [2] T. Senthil, *Phys. Rev. B* 78, 045109(2008).
- [3] Y. Zhou, K. Kanoda, T.-K. Ng *Rev. Mod. Phys.* 89, 025003 (2017).
- [4] T. Furukawa et al., arXiv preprint arXiv:1707.05586 (2017).

ハニカム-三角格子における キタエフ・ハイゼンベルク模型の基底状態相図

東理大理

森田克洋, 岸本政徳, 遠山貴巳

Ground state phase diagram of Kitaev-Heisenberg model on honeycomb-triangular lattice

Dept. of Appl. Phys., Tokyo Univ. of Sci.

Katsuhiro Morita, Masanori Kishimoto, Takami Tohyama

近年、様々な格子におけるキタエフ・ハイゼンベルク模型 (KH 模型) が注目を集めている。特にハニカム格子や三角格子で精力的に研究が行われおり、それぞれ古典基底状態の相図が提案されている [1, 2, 3]。両格子で見られる相には差異があるが、これは三角格子が、ハニカム格子とは異なり、幾何学的フラストレーションの効果をもつためである。したがって、両格子を繋ぐ系であるハニカム-三角 (HT) 格子 (図 1) における KH 模型の基底状態を調べ、両格子の相が如何に融け合うかを明らかにすることは興味深い。

そこで、我々はラッティンジャー・ティサ法 [4, 5] 並びに古典モンテカルロ法により、HT 格子における KH 模型の古典基底状態を研究した。ハニカム格子での先行研究 [1] で提案されていた、ネール相、スピン液体状態、ジグザグ型反強磁性相、強磁性相、ストライプ型反強磁性相に加え、三角格子での先行研究 [2, 3] で提案されていた、120 度型反強磁性相、 \mathbb{Z}_2 渦結晶相 (図 2)、ネマチック相、双対 \mathbb{Z}_2 渦結晶相、双対強磁性相を同定した。さらに、120 度構造に似た構造を持つ相や、その双対相も新たに同定した。また、 \mathbb{Z}_2 渦結晶相周りでは周辺相との中間的な性質を持つ状態が確認された。本講演では、各相の詳細について議論する。

[1] J. G. Rau, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **112**, 077204 (2014).

[2] I. Rousochatzakis, *et al.*, Phys. Rev. B. **93**, 104417 (2016).

[3] M. Becker, *et al.*, Phys. Rev. B. **91**, 155135 (2015).

[4] J. M. Luttinger *et al.*, Phys. Rev. **70**, 954 (1946).

[5] M. J. Freiser, Phys. Rev. **123**, 2003 (1961).

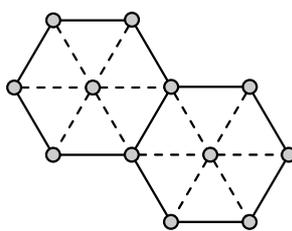


図 1 両格子を繋ぐ、ハニカム-三角格子。実線ボンドと破線ボンドでの相互作用係数の比は $1 : \alpha$ ($0 \leq \alpha \leq 1$) である。

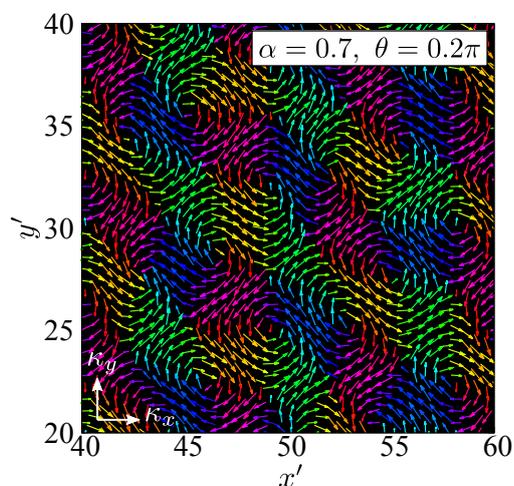


図 2 \mathbb{Z}_2 渦結晶相におけるカイラリティベクトル $\boldsymbol{\kappa}$ 。ベクトルの色は $\kappa_x - \kappa_y$ 面内における角度を表す。

スピネル酸化物におけるスピン分子励起と トポロジカルチャージ描像との関係

学習院大理, ^Aボルドー大 CNRS

溝口知成, ^ALudovic D. C. Jaubert, 宇田川将文

パイロクロア格子上的ハイゼンベルグ磁性体であるスピネル酸化物 ACr_2O_4 や AFe_2O_4 ($A=Zn, Mg, Hg$) では、磁気構造因子にピンチポイント型のパターンが見られず、代わりに第2ブリルアンゾーンにブロードな散乱パターンが見られる [1,2]。それらのパターンは、数個のスピンを含む「スピン分子」と呼ばれる局所的な励起の内部相関でよく再現される。スピン分子の起源として、次近接以降の相互作用の役割が議論されている [3]。一方で、我々は近年、パイロクロア格子 [4] やカゴメ格子 [5] 上の J_1 - J_2 - J_3 イジング模型で、スピンではなく磁気モノポールのクラスタ化によって形成される磁気構造因子の特徴的なパターンが存在することを明らかにした。その結果を踏まえ、本研究では、スピン分子励起の背景に、磁気モノポールのクラスタ化と関連した短距離相関を安定化させる構造がある可能性に着目した。この関連を明らかにするために、イジング模型で見られた磁気モノポールに対応する描像が、ハイゼンベルグスピンの場合に発現するかどうかを解明する必要がある。

本発表では、パイロクロア格子上的 J_1 - J_2 - J_3 ハイゼンベルグ模型を対象に、磁気構造因子とその物理的描像について議論する。まず、Large-N 近似を用いて静的磁気構造因子を解析した結果を示す。特に、 J_2 , J_3 の増大とともに、従来のピンチポイント型とは異なる磁気構造因子のパターンが発現すること、およびそれらのパターンが、イジング型模型で見られた「磁気モノポールのクラスタ化」に特徴付けられるパターンと類似することを示す。次に、Landau-Lifshitz 方程式によるダイナミクスの解析結果を示す。特に、動的磁気構造因子を非弾性中性子散乱の結果 [1,2] と比較することで、新奇なクラスタ状態がスピネル酸化物で実現する可能性を議論する。

[1] S.-H. Lee, *et al.*, Nature **418**, 856 (2002).

[2] K. Tomiyasu, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **110**, 077205 (2013).

[3] P. H. Conlon and J. T. Chalker, Phys. Rev. B **81**, 224413 (2010).

[4] M. Udagawa, *et al.*, Phys. Rev. B **94**, 104416 (2016).

[5] T. Mizoguchi, L. D. C. Jaubert, and M. Udagawa, Phys. Rev. Lett. **119**, 077207 (2017).

Mechanism for sub-gap optical conductivity in honeycomb Kitaev materials

Adrien Bolens

Department of Physics, University of Tokyo, Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo 113-0033, Japan

The Kitaev model on the honeycomb lattice is exactly solvable and possesses a quantum spin liquid ground state [1]. Its potential realization in so-called Kitaev materials through the Jackeli-Khaliullin mechanism [2] attracted a lot of attention in the recent years. As yet, potential Kitaev materials, such as Na_2IrO_3 and $\alpha\text{-RuCl}_3$, all eventually reach a magnetically ordered state at sufficiently low temperature, indicating significant deviations from the pure Kitaev model. Nevertheless, in the case of $\alpha\text{-RuCl}_3$, experimental observations of a residual continuum of excitations have been interpreted as remnants of the Kitaev physics [3]. Exact analytical results for spin correlations have been derived for the Kitaev model [4] and used to predict the signatures of Majorana quasiparticles in inelastic neutron [6], Raman [6] and resonant X-ray scattering [7].

Motivated by recent terahertz absorption measurements of $\alpha\text{-RuCl}_3$ [8], we consider the response of Kitaev materials to an electromagnetic field. In particular, we show that transitions to the continuum of low energy excitations, although magnetic in nature, are possible via the AC *electric* field.

We derive a microscopic mechanism for the sub-gap optical conductivity of Kitaev materials and show that the interplay of Hund's coupling, spin orbit coupling and a trigonal crystal field distortion results in a finite polarization operator at *second* order in the hopping Hamiltonian [9].

Using the integrability of the Kitaev model, we then calculate the polarization dynamical correlation function, and thus the optical conductivity, at $T = 0$ [9].

References

- [1] A. Kitaev, *Ann. of Phys.* **321**, 2 (2006).
- [2] G. Jackeli and G. Khaliullin, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 017205 (2009).
- [3] A. Banerjee *et al.*, *Nat. Mater.* **15**, 733 (2016).
- [4] G. Baskaran, S. Mandal, and R. Shankar, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 247201 (2007).
- [5] J. Knolle, D. Kovrizhin, J. Chalker, and R. Moessner, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 207203 (2014).
- [6] J. Knolle, G.-W. Chern, D. Kovrizhin, R. Moessner, and N. Perkins, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 187201 (2014).
- [7] G. B. Halász, N. B. Perkins, and J. van den Brink, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 127203 (2016).
- [8] A. Little *et al.*, arXiv:1704.07357 (2017).
- [9] A. Bolens, H. Katsura, M. Ogata, S. Miyashita, arXiv:1711.00308 (2017).

$S=1/2$ 正方格子ランダム J_1 - J_2 ハイゼンベルク反強磁性体

$\text{Sr}_2\text{CuTe}_{1-x}\text{W}_x\text{O}_6$ の量子磁性

東工大理学院

渡邊正理, 栗田伸之, 田中秀数

Quantum Magnetic Properties of Spin-1/2 Square-Lattice Random J_1 - J_2

Heisenberg Antiferromagnet $\text{Sr}_2\text{CuTe}_{1-x}\text{W}_x\text{O}_6$

Dept. of Phys., Tokyo Inst. of Tech.

Masari Watanabe, Nobuyuki Kurita, and Hidekazu Tanaka

フラストレートした量子スピン系において、ボンドランダムネスがギャップレスな非磁性状態を誘起するという理論結果が得られている [1,2]. この非磁性状態は singlet が空間的にランダムに凍結した Valence Bond Glass (VBG) 状態であると考えられている. 例えば、ボンドランダムネスがある $S=1/2$ 三角格子反強磁性体やハニカム格子 J_1 - J_2 ハイゼンベルク反強磁性体の厳密対角化計算から、低温でキュリーワイス的な磁化率の上昇や温度に比例する比熱が予言されている [1,2].

我々はボンドランダムネスがフラストレートした量子スピン系の基底状態に及ぼす影響を実験的に明らかにするために、 $S=1/2$ 正方格子ランダム J_1 - J_2 ハイゼンベルク反強磁性体の新規候補物質 $\text{Sr}_2\text{CuTe}_{1-x}\text{W}_x\text{O}_6$ ($x=0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 1$) の多結晶試料を合成し、磁化測定と比熱測定を行った. 母物質の $\text{Sr}_2\text{CuTeO}_6$ では J_1 が、 Sr_2CuWO_6 では J_2 が支配的であることが分かっているので [3], 混晶系 $\text{Sr}_2\text{CuTe}_{1-x}\text{W}_x\text{O}_6$ では J_1 と J_2 にランダムネスが生じることが期待される.

$\text{Sr}_2\text{CuTe}_{1-x}\text{W}_x\text{O}_6$ の磁化率は低温でキュリーワイス的な上昇を示した. また、図 1 に示したように、2 K までの比熱が温度に比例する振る舞いが明瞭に観測された. これらは、VBG 状態で期待される振る舞いと定性的に一致する. 一方、1.2 K 付近から印加磁場に依存しない比熱の急激な減少が見られた. これは singlet 励起の存在を示唆している.

[1] K. Watanabe *et al.*, JPSJ **83**, 034714 (2014).

[2] K. Uematsu and H. Kawamura, JPSJ **86**, 044704 (2017).

[3] T. Koga *et al.*, PRB **93**, 054426 (2016).

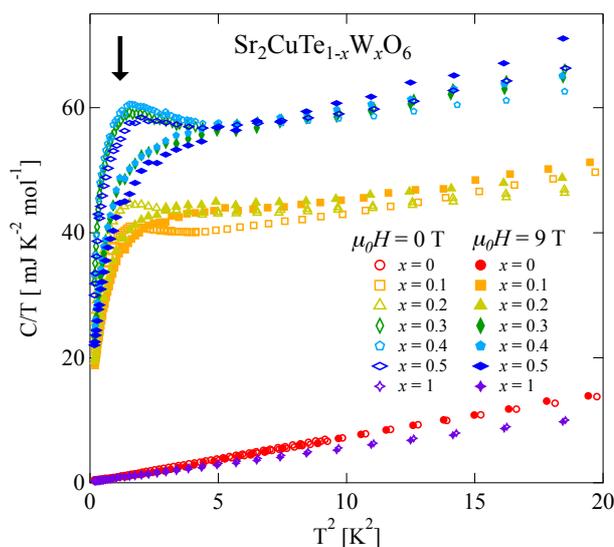


図 1 : $\text{Sr}_2\text{CuTe}_{1-x}\text{W}_x\text{O}_6$ ($x = 0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 1$) の 0 T, 9 T における低温比熱.

d^7 高スピン電子配置に対する Kitaev-Heisenberg 模型

東大工

佐野 了也, 加藤 康之, 求 幸年

Kitaev-Heisenberg Hamiltonian for High-Spin d^7 Mott Insulators

Dept. of Appl. Phys., The Univ. of Tokyo

R. Sano, Y. Kato, and Y. Motome

量子スピン液体は磁性絶縁体の量子相の一種で、絶対零度極限でも磁気秩序を示さない特異な状態である。量子スピン液体の特徴として、スピン自由度が複数の準粒子励起に分離する分数励起があげられる。Kitaev 模型は蜂の巣構造上で定義された量子スピン模型で、その基底状態が量子液体であること、及びその基底状態が分数励起を示すことが厳密に示されている。この模型の重要な特徴として、蜂の巣構造上の 3 種類のボンドに対して異なるスピン成分をもった Ising 型の相互作用を有することがあげられる。このような異方的相互作用は、強いスピン軌道相互作用をもつ低スピン d^5 電子配置をもつ遷移金属化合物における実現可能性が指摘されており、実験的に大きな注目を集めている。しかしながら、そうした候補物質は限られているため、他の電子配置での Kitaev 模型の実現可能性を探る問題は重要な課題である。

本研究では、低スピン d^5 電子配置以外の系における Kitaev 相互作用の実現可能性を探索するために、高スピン d^7 電子配置に対する有効スピン模型を調べた [1]。強相関極限において、 t_{2g} および e_g 軌道にある電子のホッピングに関する二次摂動を計算して有効模型を導出した。その結果、有効模型は Kitaev 相互作用に加えて Heisenberg 相互作用を有する Kitaev-Heisenberg 模型となることを示した。Kitaev-Heisenberg 模型に対する先行研究を参考に、フロント結合および結晶場分裂を変化させた場合の基底状態相図を作成した (図)。その結果、現実的なパラメタ領域で量子スピン液体が実現することがわかった。同様の議論を低スピン d^5 系に対しても行い、両者の結果を比較することによって、両系での量子スピン液体状態の安定性を議論する。

[1] R. Sano, Y. Kato, and Y. Motome, arXiv:1710.11357.

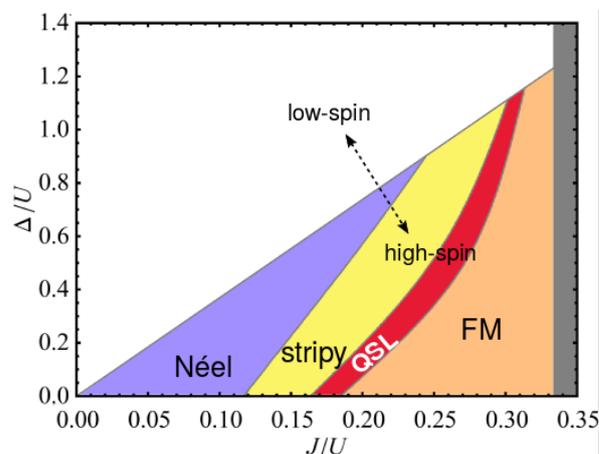


図: d^7 電子配置に対する有効模型の基底状態相図。横軸はフロント結合 J 、縦軸は結晶場分裂 Δ のクーロン斥力 U との比。赤色の QSL の領域で量子スピン液体相状態が実現する。

同様の議論を低スピン d^5 系に対しても行い、両者の結果を比較することによって、両系での量子スピン液体状態の安定性を議論する。

古賀昌久, 中内子龍, 那須讓治

東京工業大学理学院 物理学系

二次元ハニカム構造を持つイリジウム酸化物 Na_2IrO_3 は、大きなスピン軌道結合を持つ強相関電子系として最近注目されている物質の一つである。この系においては、強い 5d 電子間のスピン軌道結合により、3重に縮退した t_{2g} 軌道が分裂し、クラマースダブレットが出現する。さらに、 t_{2g} 軌道の波動関数の空間形状により、クラマースダブレットに対する有効ハミルトニアンは、キタエフ模型に帰着することが指摘されている[1]。最近、キタエフ模型の新たな候補物質としてルテニウム化合物 $\alpha\text{-RuCl}_3$ の低温物性に注目が集められている。しかしながら、この物質においては、4d 電子間のスピン軌道結合が、5d 系に比べて小さいため、スピン軌道結合の役割についてより詳細に議論する必要がある。

本研究では、有限の大きさのスピン軌道相互作用が基底状態に及ぼす影響について注目する。まず、異方的なホッピングを考慮した三軌道縮退ハバード模型を取り上げ、相互作用の大きな極限における以下の有効ハミルトニアンを導出した。

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle ij \rangle \gamma} [h_{1;ij}^{(\gamma)} + h_{2;ij}^{(\gamma)} + h_{3;ij}^{(\gamma)}] - \lambda \sum_i \mathbf{L}_i \cdot \mathbf{S}_i, \quad (1)$$

$$h_{1;ij}^{(\gamma)} = 2J_1 \left(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \frac{3}{4} \right) \left[\tau_{ix}^{(\gamma)} \tau_{jx}^{(\gamma)} - \tau_{iy}^{(\gamma)} \tau_{jy}^{(\gamma)} - \tau_{iz}^{(\gamma)} \tau_{jz}^{(\gamma)} + \frac{1}{4} \tau_{i0}^{(\gamma)} \tau_{j0}^{(\gamma)} - \frac{1}{4} (\tau_{i0}^{(\gamma)} + \tau_{j0}^{(\gamma)}) \right], \quad (2)$$

$$h_{2;ij}^{(\gamma)} = 2J_2 \left(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{1}{4} \right) \left[\tau_{ix}^{(\gamma)} \tau_{jx}^{(\gamma)} - \tau_{iy}^{(\gamma)} \tau_{jy}^{(\gamma)} - \tau_{iz}^{(\gamma)} \tau_{jz}^{(\gamma)} + \frac{1}{4} \tau_{i0}^{(\gamma)} \tau_{j0}^{(\gamma)} + \frac{1}{4} (\tau_{i0}^{(\gamma)} + \tau_{j0}^{(\gamma)}) \right], \quad (3)$$

$$h_{3;ij}^{(\gamma)} = -\frac{4}{3}(J_2 - J_3) \left(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{1}{4} \right) \left[\tau_{ix}^{(\gamma)} \tau_{jx}^{(\gamma)} + \tau_{iy}^{(\gamma)} \tau_{jy}^{(\gamma)} - \tau_{iz}^{(\gamma)} \tau_{jz}^{(\gamma)} + \frac{1}{4} \tau_{i0}^{(\gamma)} \tau_{j0}^{(\gamma)} \right], \quad (4)$$

ここで、 \mathbf{S}_i , \mathbf{L}_i はそれぞれ、スピン、軌道の演算子であり、 $\tau_i^{(\gamma)}$ は結合に依存した演算子 ($\gamma=x,y,z$) である。本研究では、クラスター平均場近似を用いて、このスピン軌道模型の基底状態について調べた。その結果、スピン軌道模型でよく知られている強磁性相、キタエフ極限における量子スピン液体相の他にジグザグ秩序が現れることを明らかにした[2,3]。本講演では、有限温度におけるキタエフ模型に特徴的な比熱のダブルピーク構造[4]がどのように出現するかについても報告する予定である[2]。

[1] G. Jackeli and G. Khaliullin, Phys. Rev. Lett. **102**, 017205 (2009)

[2] A. Koga, S. Nakauchi, and J. Nasu, arXiv:1705.09659.

[3] A. Koga, S. Nakauchi, and J. Nasu, Physica B in press (doi:10.1016/j.physb.2017.09.117)

[4] J. Nasu, M. Udagawa, and Y. Motome, Phys. Rev. B **92**, 115122 (2015).

2層Kitaevモデルにおける層間相互作用の効果

東工大理

富重博之, 那須譲治, 古賀昌久

Effects of the interlayer interaction in the bilayer Kitaev model

Dept. of Phys., Tokyo Inst. of Tech.

Hiroyuki Tomishige, Joji Nasu, Akihisa Koga

近年、強いスピン軌道相互作用をもつ遷移金属化合物である Na_2IrO_3 や $\alpha\text{-RuCl}_3$ がKitaevスピン液体の候補物質として注目されている。これらの磁性をよりよく記述するモデルとしてKitaev・ハイゼンベルクモデルが提案され、理論・実験の双方から盛んな研究がされている。一方、 $\alpha\text{-RuCl}_3$ では Ru イオンがつくるハニカム格子が層状に重なっており、積層の異なる結晶相が異なる相転移点 [1] をもつことも指摘されている。Kitaevスピン液体の候補物質におけるこうした層間相互作用の効果は理論的に未解明の部分が多い。

本研究では、Kitaev層間の相互作用の効果を調べるため、最も簡単なモデルとして2つのKitaev層をハイゼンベルク相互作用で重ねた2層Kitaevモデルを解析する。2層Kitaevモデルの基底状態は、Kitaev型の層内相互作用の強い極限ではスピン液体であり、ハイゼンベルグ型の層間相互の強い極限では層間ボンドでのシングレットが実現する。これら2つの異なる非磁性相が競合する領域でのスピン状態を明らかにするため $\lambda = J_H/J_K$ (J_H : ハイベルク型の層間相互作用、 J_K : Kitaev型の層内相互作用) をパラメータとし、有限サイズの2層Kitaevモデルに対し厳密対角化とTPQ state の手法で解析を行った。当日は、異なるパラメータ領域における基底状態と有限温度での振る舞いを調べた結果について紹介する予定である。

References:

- [1] Y. Kubota, H. Tanaka, T. Ono, Y. Nomura, and K. Kindo, *Phys. Rev. B* **91**, 094422 (2015).
- [2] J. Nasu, M. Udagawa, and Y. Motome, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 197205 (2014).
- [3] J. Nasu, M. Udagawa, and Y. Motome, *Phys. Rev. B* **92**, 115122 (2015).

Direct Observation of the Elementary Excitation in the Molecular Spin Liquid System

Yugo Oshima¹, Sunghyun Kim^{1,2}, and Reizo Kato¹
¹RIKEN

²Faculty of Science, Hokkaido University
 Email: yugo@riken.jp

The anion radical salt $\text{EtMe}_3\text{Sb}[\text{Pd}(\text{dmit})_2]_2$ is a Mott insulator which consists of $S=1/2$ triangular lattice, and shows no long range-order down to 19 mK. Although many studies suggest that $\text{EtMe}_3\text{Sb}[\text{Pd}(\text{dmit})_2]_2$ is a strong candidate for the quantum spin liquid, the nature of the low-lying elementary spin excitation and the presence or the absence of a ‘spin-gap’ is still under strong debate. Here, we report our electron spin resonance (ESR) measurement results on $\text{EtMe}_3\text{Sb}[\text{Pd}(\text{dmit})_2]_2$, and reveal the spin correlations and spin dynamics of this spin-liquid system.

When the magnetic field is rotated within the ab -plane (parallel to the $\text{Pd}(\text{dmit})_2$ layers), two ESR absorption lines that have identical g -tensor with a phase shift of about 30° were observed (Fig. 1a). The ESR origin is from $\text{Pd}(\text{dmit})_2$ dimers in two independent layers where the dimer stacking directions are different as schematically shown in the inset of Fig. 1a. In turn, such observation of ESR absorption lines from two independent $\text{Pd}(\text{dmit})_2$ layers suggests the interlayer exchange interaction is infinitesimal, estimated ca. 0.37 mK, which is in good agreement with the absence of long-range order.

Furthermore, the ESR linewidth shows a characteristic and continuous narrowing down to the lowest temperature, and the power dependence shows a peculiar feature that is not observed for analog salts with different ground states. We suppose that ESR is probing the elementary excitations of the spin-liquid state known as the ‘spinon’, and the narrowing of the ESR linewidth suggests that spinons in this system are highly mobile. The angular dependence of ESR linewidth (blue squares in Fig. 1b), which reflects the spin dynamics of the spinon, shows a minimum, a maximum and an inflection point for both $\text{Pd}(\text{dmit})_2$ layers when the magnetic field is applied along the stacking (t_B), diagonal (t_r) and side-by-side (t_s) direction of the dimers, respectively. This peculiar angular dependence can be fit with the summation (thick blue line in Fig.1b) of an empirical $(1+\cos^2\theta)$ dependence and a $(3\cos^2\theta-1)^2$ dependence where the former angular dependence (orange solid line in Fig. 1b) originates from the contributions of magnetic anisotropies and the latter (green solid line in Fig. 1b) is from the quasi-1D spin diffusion. These ESR results suggest that the spin dynamics of the spinon is quite anisotropic despite that the system have a triangular magnetic network, and quasi-1D diffusive motion along the t_r direction was clearly observed.

In our presentation, the characteristic ESR behavior of $\text{EtMe}_3\text{Sb}[\text{Pd}(\text{dmit})_2]_2$ will be presented, and the nature of the liquid-like ground state (spin dynamics, gapped/gapless character, etc.) will be discussed.

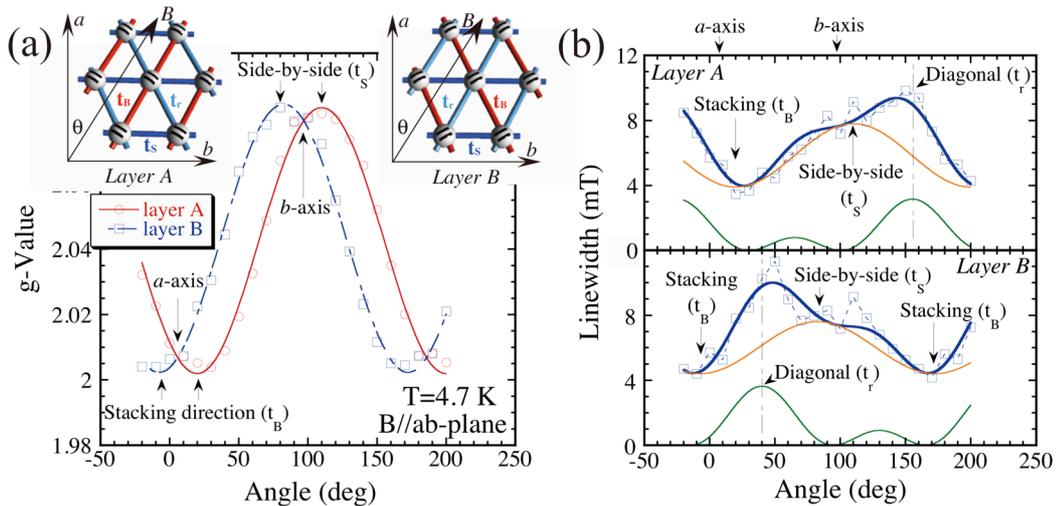


Fig. 1. Angular dependence of (a) g -value and (b) ESR linewidth of $\text{EtMe}_3\text{Sb}[\text{Pd}(\text{dmit})_2]_2$.

蜂巢格子上 Kitaev–Heisenberg 模型の 摂動クラスタ展開による磁気励起の解析

兵県大工、山田拓人、鈴木隆史、菅誠一郎

近年 $4d$ 遷移金属化合物 RuCl_3 等の蜂巢格子磁性体に注目が集っている [1]。 RuCl_3 は低温で zigzag 磁気秩序を示すが、a) 非弾性中性子散乱実験で Kitaev スピン液体 (KSL) を特徴付ける励起連続帯と同様の振舞いが観測された事 [2]、b) 比熱測定では比熱の二重ピーク構造が見られる事 [3] から、Kitaev スピン液体 (KSL) 相近傍に位置する物質と考えられている。この磁性体のミニマルモデルとして $S=1/2$ Kitaev-Heisenberg (KH) 模型がある [4]。KH 模型の低エネルギー励起は、KSL 相に近付くと線型スピン波の分散曲線が数値対角化で求められた動的構造因子の結果と著しく乖離する事が指摘されており [5]、KSL 相近傍における低エネルギー励起の詳細については議論が続いている。この様な背景から本研究では、摂動クラスタ展開 [6] に基づき KH 模型の基底エネルギー及び低エネルギー励起を計算する事で、KSL 相近傍の磁気秩序相における低エネルギー励起の特徴を明らかにする。

摂動クラスタ展開の計算を行うにあたってその無摂動状態は、全てのスピンの揃った強磁性状態と、孤立 dimer を同一方向に並べた状態とを用いた。前者を Ising 展開、後者を dimer 展開と呼ぶ [7,8]。先ず KH 模型の基底エネルギーを調べた。無摂動状態の取り方によらず基底エネルギーが数値厳密対角化の結果と良い一致を示し、また摂動級数の収斂性は dimer 展開が Ising 展開より良いと分かった。続いて KH 模型の低エネルギー励起を調べた。Ising 展開ではシングルスピンプリップ励起を求め [6]、dimer 展開では一つの dimer が励起する事による低エネルギー励起を求めた。dimer 展開で zigzag 相における低エネルギー励起を求めたところ、系が Kitaev 極限に近付くと分散関係が平坦になるモードが存在する事が分かった。Ising 展開で強磁性相におけるスピンプリップ励起を求めたところ、Kitaev 相互作用が強い領域ではスピンプリップ励起の摂動級数は収斂しない事が分かった。同様に zigzag 相や Néel 相における励起を Ising 展開で求めたところ、スピンプリップ励起の摂動級数は収斂しない事が分かった。以上から、KSL 相近傍の磁気秩序相における低エネルギー励起は反強磁性相において Ising 展開よりも dimer 展開を用いた解析が有効である事が明らかになった。KSL 相近傍の zigzag 相で現れた平坦な分散関係は励起子が局在化した状態が低エネルギー励起に現れる事を意味しており、KSL 相における低エネルギー励起の特徴 [9] と似た振舞いが KSL 相近傍の zigzag 相において現れていると考えられる。

- [1] K. W. Plumb, et al., Phys. Rev. B **90**, 041112 (R) (2014).
- [2] A. Banerjee, et al., Nat. Materials **15**, 733 (2016).
- [3] Y. Kubota, et al., Phys. Rev. B **91**, 094422 (2015).
- [4] J. Chaloupka, G. Jackeli and G. Khaliullin, Phys. Rev. Lett. **105**, 027204 (2010).
- [5] Y. Yamaji, et al., Phys. Rev. B **93**, 174425 (2016).
- [6] J. Oitmaa, C. Hamer and W. Zheng, Series Expansion Methods for Strongly Interaction Lattice Models (Cambridge U. P., 2006).
- [7] J. Oitmaa, Phys. Rev. B **92**, 020405 (R) (2015).
- [8] T. Yamada, T. Suzuki and S. Suga, Physica B **525C**, 91 (2017).
- [9] J. Knolle, et al., Phys. Rev. Lett. **112**, 207203 (2014).