

磁性体中の電子スピンの示す気体-液体転移 - 大規模数値計算による新しい相転移現象の発見 -

1. 発表者： 那須 譲治（東京工業大学大学院理工学研究科物性物理学専攻 助教、
研究実施当時 東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻）
宇田川 将文（東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 助教）
求 幸年（東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 准教授）

2. 発表のポイント：

- ◆磁性体中の電子がもつスピンには固体（強磁性状態）、液体（スピン液体状態）、気体（常磁性状態）の3つの状態が存在し、温度や圧力に応じて状態が変化します。
- ◆従来、相転移が起きないと考えられてきたスピン液体と常磁性状態との間で、相転移が起きることを新しい数値計算手法を用いた大規模シミュレーションで明らかにしました。
- ◆本成果は、量子もつれを情報の記憶や演算に利用する量子情報分野への波及が期待できます。

3. 発表概要：

物質は温度や圧力に応じて固体・液体・気体の3つの状態に変化します。このうち、液体と気体の間には相転移（注1）が起きる必要はなく、連続的に移り変わることが可能です。磁性体中の電子がもつ微小な磁石であるスピンの向きに関しても、このような3状態を考えることができます。固体は例えばスピンの向きがそろった強磁性状態に対応し、気体はそれらがランダムな常磁性状態に対応します。一方、液体については、極低温まで固体にならず液体のままであるヘリウムから類推した「量子スピン液体」という概念が提案されていますが、その存在や性質は長年の謎とされてきました。

東京工業大学大学院理工学研究科物性物理学専攻の那須譲治（なす じょうじ）助教（研究実施当時 東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻）、東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻の宇田川将文（うだがわ まさふみ）助教、求幸年（もとめ ゆきとし）准教授らは、キタエフ模型（注2）と呼ばれる理論モデルに対する大規模数値シミュレーションにより、量子スピン液体と常磁性状態の間には常に相転移が存在し、両者は連続的に移り変わることができないことを見出しました。これは従来の相転移理論（注3）で説明できない新しい気体-液体転移で、トポロジカルな性質（注4）の変化と見なせることを明らかにしました。

この発見は、相転移の不在をもって量子スピン液体を示唆している最近の実験研究の全面的な見直しを促すものです。また、トポロジカルな性質を情報処理に利用する量子情報の分野にも大きなインパクトを与えると期待されます。

4. 発表内容：

あらゆる物質は温度や圧力などに応じてその姿を変え、固体・液体・気体と呼ばれる3つの状態を移り変わります（図1上）。水を例にとると、固体=氷、液体=水、気体=水蒸気です。このうち固体は、原子や分子が規則的に並んだ状態で、液体と気体は原子や分子が動き回っている状態です。固体と液体（あるいは気体）の間には必ず相転移が生じます。一方、液体と気体の間には相転移が生じる必要はなく、両者は連続的に移り変わることができます。水で

いうと、常圧で水から水蒸気に変わる際には蒸発や沸騰といった相転移が生じますが、高压下では両者は相転移を示さず、連続的に移り変わることが知られています（図1左下）。

磁石となる磁性体は、物質中の電子がもつスピンと呼ばれる微小な磁石が多く集まってできています。この電子スピンの向きに関しても、上記の3状態を考えることができます（図1上）。固体は強磁性などの電子スピンの向きが規則的にそろった状態、気体はそれらがばらばらな常磁性状態に対応します。では電子スピンの液体は？という、水中の水分子のように、電子スピンの向きがお互いに強く影響し合いながらも、規則的にそろってはいない状態と考えられます。

1973年に P. W. Anderson は、極低温まで液体のままであるヘリウムから類推して、極低温まで電子スピンの向きがそろわない「量子スピン液体」という概念を提案しました。これは、電子スピンの固化＝秩序化が量子的な強い揺らぎ（注5）によって妨げられながらも、全ての電子スピンの向きがお互いに強く影響し合った新しい状態です。このように量子力学的に絡み合った状態を、量子もつれをもった状態と呼びます。こうした量子もつれを利用することで量子計算が可能となり、次世代の量子コンピュータの実現につながる可能性も指摘されています。この魅力的な提案は実験・理論ともに広く興味を集め、さまざまな磁性体や理論モデルにおいて量子スピン液体の可能性が精力的に調べられてきました。最近では、量子スピン液体が実現しているとされる物質がいくつか見つかっています。しかしここでは、物質を極低温まで冷やしても何の相転移も見つからないことをもって、量子スピン液体の証拠としています。これは、通常の物質における液体と気体の連続的な変化とのアナロジーに基づいています。しかし水-水蒸気の例でも分かるように、液体と気体の間には相転移が起きることもあります。こうした電子スピンの気体-液体転移の可能性はこれまで十分に調べられていません。また、量子スピン液体状態がどのような特徴をもつのかという基本的な問いに対しても満足な答えは得られていませんでした。

この長年の謎を解明する目的で、研究グループは、キタエフ模型と呼ばれる理論モデルに対する大規模な数値シミュレーションを行いました。このモデルでは、絶対零度で量子もつれをもった量子スピン液体が現れることが数学的に示されています。また最近では、例えばイリジウムを含む化合物が示す奇妙な性質や、量子計算の可能性を考える上で有用な理論モデルとして盛んに研究されています。本研究グループは、このキタエフ模型を拡張したモデルを用いて、量子スピン液体から常磁性状態へどのように温度変化するかを詳しく調べました。シミュレーションには、マヨラナフェルミオン（注6）と呼ばれる補助粒子を用いた新しい量子モンテカルロ法（注7）を開発して適用しました。

その結果、量子スピン液体と常磁性状態の間には相転移が存在することを見出しました（図2）。さらにこの相転移は、圧力などに対応する変化によらず、常に存在することも明らかにしました（図1右下）。このことは、この量子スピン液体は、スピン気体である常磁性状態と連続的に移り変わることができないことを意味しています。これは通常の物質が示す気体-液体転移とは全く異なる性質です。この結果は、相転移が見られないことを証拠としていたこれまでの量子スピン液体に関する実験研究を、全面的に見直す必要があることを示唆しています。

本研究で得られた電子スピンの気体-液体転移は、従来の相転移理論では説明できません。これは、強磁性体における磁化といった通常の秩序変数（注8）が見当たらないからです。本研究では、この新奇な相転移をトポロジカルな性質を用いて特徴付けすることに成功しました。この結果は、従来の枠組みを超える新しい相転移理論が必要であることを示唆しています。また、このようなトポロジカルな性質をもった相が熱揺らぎに対して安定に存在することは、ト

ポロジカルな相における量子もつれを積極的に利用する量子情報分野の発展にも寄与することが期待されます。

本研究の成果は、第一著者である那須讓治氏が東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻に所属していた際に得られたものです。また本研究は、文部科学省の科学研究費補助金 (No. 24340076)、HPCI 戦略プログラム (SPIRE) および 計算物質科学イニシアティブ (CMSI) の助成を受けて行われました。またシミュレーションには東京大学物性研究所のスーパーコンピュータが使われました。

5. 発表雑誌：

雑誌名：「Physical Review Letters」 (11月7日オンライン版出版)

論文タイトル：Vaporization of Kitaev Spin Liquids

著者：Joji Nasu, Masafumi Udagawa, and Yukitoshi Motome

DOI 番号：10.1103/PhysRevLett.113.197205

アブストラクト URL：<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.113.19720>

6. 問い合わせ先：

国立大学法人 東京大学大学院工学系研究科 物理工学専攻

准教授：求 幸年 (もとめ ゆきとし)

国立大学法人 東京工業大学大学院理工学研究科 物性物理学専攻

助教：那須 讓治 (なす じょうじ)

7. 用語解説：

(注1) 相転移：ある物質の状態 (相) が別の状態に変わる現象。氷から水への変化である融解や、その逆の凝固は相転移の一例 (図1上)。一般に、相転移の際には、比熱などの熱力学的な物理量に発散や不連続な振る舞いが現れます。

(注2) キタエフ模型：A. Kitaev によって 2006 年に提案された電子スピンに関する理論模型。2次元蜂の巣格子上に並んだ電子スピンの間に、結合の方向に強く依存する相互作用を仮定したモデルとなっています。

(注3) 従来の相転移理論：Ginzburg-Landau-Wilson 理論と呼ばれる、相転移現象に対する基礎理論。

(注4) トポロジカルな性質：連続的な変形によって変化しない性質。これを対象とする数学の分野はトポロジーと呼ばれます。本研究で見出した相転移は、熱的に励起された状態がもつループ構造のトポロジカルな性質を用いることで特徴付けることができます。

(注5) 量子的な揺らぎ：量子力学が支配するミクロな世界では、熱的な揺らぎが死に絶えた絶対零度においても量子力学的な揺らぎが存在します。零点振動とも呼ばれます。

(注6) マヨラナフェルミオン：E. Majorana によって 1937 年に見出された粒子。粒子と反粒子が同一である中性フェルミ粒子という性質をもちます。

(注7) 量子モンテカルロ法：乱数を用いて統計力学的な状態を生成し、量子系の物理量を数値的に求めるシミュレーション技法。本研究では、量子スピン系をマヨラナフェルミオンで書き換えた形式を用いてシミュレーションを行っています。

(注8) 秩序変数：強磁性体における磁化や強誘電体における電気分極といった、相転移を特徴付ける変数。従来の相転移理論では、こうした局所的に定義できる秩序変数が重要な役割を果たしま

す。本研究で見出した新しい相転移現象では、このような局所的な秩序変数が定義できないため、従来の枠組みに収まらないものと考えられます。

9. 添付資料：

図1：物質の3つの状態（上図）。通常物質ではこれらの3状態の間で図に示すような相転移を示します。例として、温度と圧力を変化させたときの“水”の3つの状態の変化の様子を左下図に示しました。ここにある通り、液体と気体の間の蒸発・凝縮現象は必ずしも相転移である必要はなく、両者は連続的に移り変わることが可能です。上図中には、磁性体中の電子スピンにおける3状態も示しました。本研究で調べた3次元キタエフ模型では、通常物質と異なり、液体と気体に対応する量子スピン液体と常磁性状態の間に必ず相転移が存在することを見出しました。右下図はその様子を概念的に示しています。

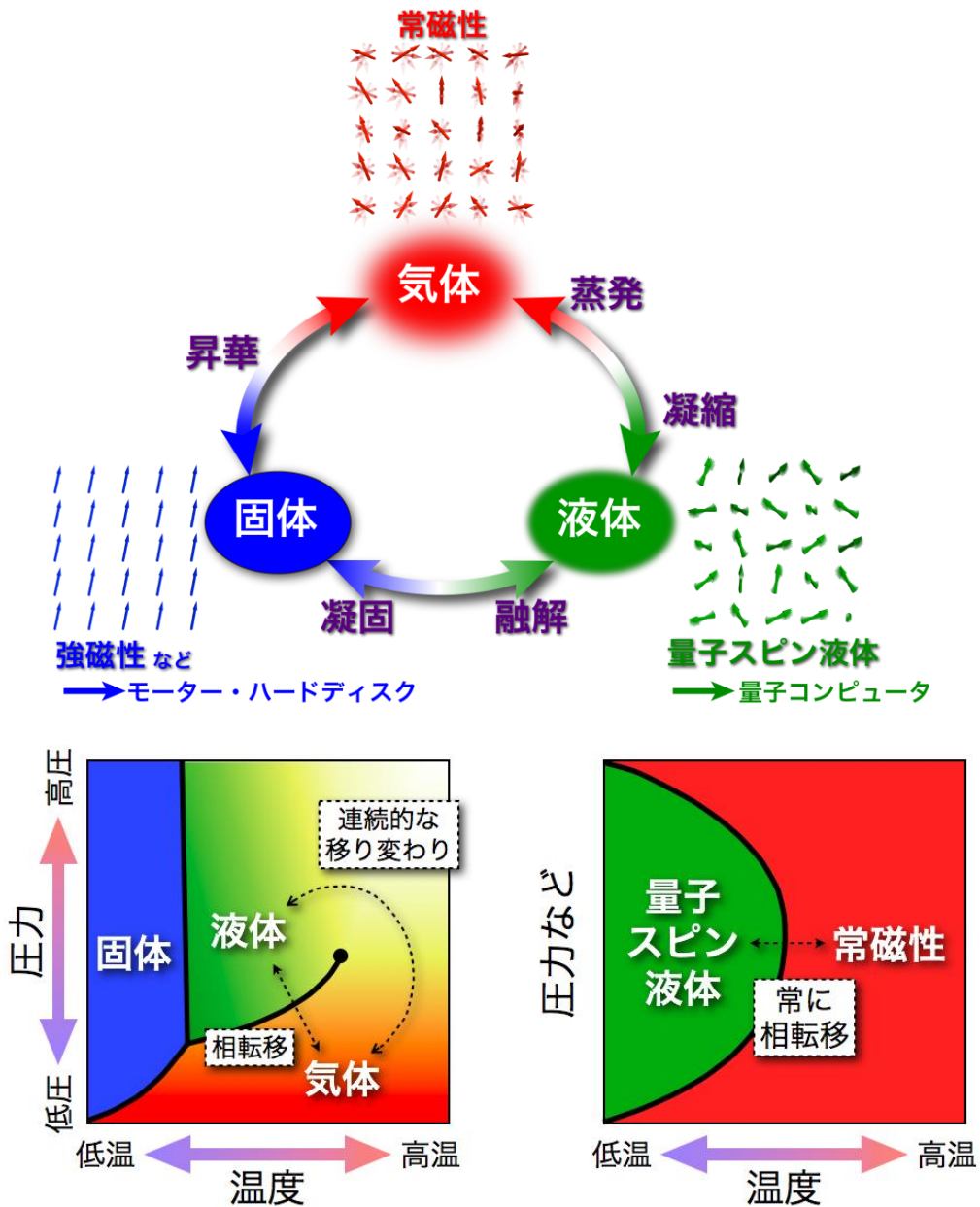


図 2 : 電子スピンの示す気体-液体転移の概念図。格子構造は本研究で調べた 3 次元キタエフ模型のもつハイパーハニカム格子と呼ばれるもので、各格子点に置かれた矢印は電子スピンを模式的に表しています。図の下半分は全ての電子スピンの量子的にもつれた量子スピ液体、上半分は電子スピンの独立に振る舞う常磁性状態を表しています。

