環境と結合したキタエフ模型における磁場効果

福 井 毅 勇

東京大学工学系研究科物理工学専攻

１．はじめに

本研究では、量子スピン液体状態を厳密な基底状態として持つ Kitaev 模型が外部環境と結合した際に生じる、新たな量子スピン液体状態に対する磁場の効果を明らかにする [1]。通常の磁性体では、熱力学第 3 法則に従い絶対零度でエントロピーをゼロにするために、低温で磁気秩序状態への相転移が起こる。ところが、**フラストレーション**の大きな量子スピン系では、**量子スピン液体**と呼ばれる非自明な非磁性状態をとることでエントロピーの解放を実現する場合がある。量子スピン液体とは、強いフラストレーションと量子力学的な揺らぎによって磁気秩序相への相転移が妨げられた、従来型の対称性の自発的破れが存在しない特殊な基底状態である。一部の量子スピン液体では、トポロジカル秩序と呼ばれる非従来型の秩序が存在し、それに付随する分数励起を用いることにより外乱に対して強固な**トポロジカル量子計算**を実現できるため、純粋科学だけでなく応用面からも注目を集めている。2006 年に提案された **Kitaev 模型** [2]は、2 次元ハニカム格子上で定義された量子スピン模型であり、ボンドに依存する異方的な相互作用（Kitaev 型相互作用）による強いフラストレーションを持つにもかかわらず、基底状態が厳密に求まり、さらに、その基底状態が量子スピン液体状態となる。2 次元以上の模型で、基底状態が量子スピン液体状態であることを厳密に示すことができる模型は非常に稀である。2009 年に、この模型に現れる特徴的な Kitaev 型相互作用が一部のスピン軌道 Mott 絶縁体と呼ばれる物質群において実現することが指摘されてから [3]、理論と実験の双方からの精力的な研究により候補物質が多く発見され、その物性が解明されてきた。

このように、精力的に研究されてきた Kitaev 模型であるが、外部環境との結合の効果はあまり明らかにされていない。トポロジカル量子計算の応用を見据えると、実際の量子デバイスにおいては量子状態の読み出し・書き込みや基盤の効果等によって不可避的に外部環境との結合が重要になるため、**環境との相互作用による散逸**の効果の解明は重要である。環境と相互作用する開放量子系の理論的な取り扱いは一般には困難だが、計算手法の 1 つとして散逸の効果を取り入れた有効ハミルトニアンを用いる方法が知られており、そこでは有効ハミルトニアンが**非エルミート**となる。非エルミート系の物理は、最近ではトポロジーの観点からも注目を集めており、エルミート系では現れない相転移やトポロジカル相の実現が様々な系において精力的に調べられている。なかでも興味深い例の 1 つとして、量子スピン液体を基底状態に持つ Kitaev 模型における非エルミート効果が提案された。環境と結合した Kitaev 模型の非エルミート有効模型では、相互作用の結合定数が複素数に拡張される。通常の Kitaev 模型のギャップレス相では、量子スピン液体状態における分数励起である遍歴 Majorana 粒子の分散が Dirac 点を持つが、非エルミートの場合は Dirac 点が Fermi アークで繋がった 2 つの**例外点**に分裂し、例外スピン液体と呼ばれる非エルミート系固有の新たなスピン液体状態が現れる [4]。一方、エルミートな Kitaev 模型では、磁場の効果が摂動論を用いて議論されており、Majorana 励起が Dirac 的な分散を持つギャップレス相では、磁場により Dirac 点にギャップが開き、トポロジカルに非自明な状態になることが示

されている [1]。しかし、非エルミートな場合について、これらの磁場の効果は明らかにされていない。

そこで本研究では、非エルミート Kitaev 模型におけるこれらの磁場の効果を摂動論を用いて調べる [1]。非エルミート模型特有の複素エネルギー固有値に対する磁場の効果をギャップの大きさ、例外点のトポロジー、表皮効果の観点から総合的に明らかにするのが本研究の目的である。

２．模型

本研究では、磁場中の Kitaev 模型に対する散逸の効果を非エルミート有効相互作用として取り入れる。模型の模式図を第 1 図に示す。磁場中の Kitaev 模型のハミルトニアンは、3 次摂動の範囲で

$$H_0 = -\sum_{<i,j>_\mu} J_\mu \sigma_i^\mu \sigma_j^\mu - \tilde{h} \sum_{<<i,j,k>>_{\mu,\nu,\lambda}} \sigma_i^\mu \sigma_j^\nu \sigma_k^\lambda$$

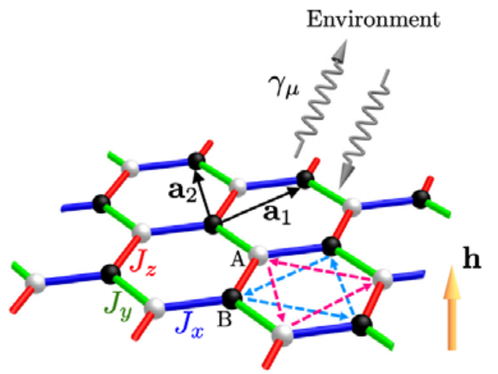
である。J_μ $(\mu = x, y, z)$は Kitaev 模型の磁気相互作用、$\tilde{h}$は 3 次摂動による有効磁場である。ここで、環境との結合の効果を Lindblad 方程式で取り扱うことを考えるが、量子ジャンプが起きない範囲内の有効ハニルトニアンとして、ゼロ磁場の先行研究 [4]を参考に、

$$\begin{aligned} H_{\mathrm{eff}} &= H_0 - \frac{\mathrm{i}}{2} \sum_{<i,j>_\mu} \gamma_\mu \sigma_i^\mu \sigma_j^\mu \\ &= -\sum_{<i,j>_\mu} G_\mu \sigma_i^\mu \sigma_j^\mu - \tilde{h} \sum_{<<i,j,k>>_{\mu,\nu,\lambda}} \sigma_i^\mu \sigma_j^\nu \sigma_k^\lambda \end{aligned}$$

という静的な非エルミート有効ハミルトニアンが導出できる。ここで、$G_\mu = J_\mu + \mathrm{i}\gamma_\mu = |G_\mu| \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_\mu}$は散逸の効果を取り入れた複素結合定数である。ここで、スピンを Majorana 粒子を用いて表現すると、基底状態がフラックスフリー状態であるという仮定を用いて、

$$H_{\mathrm{eff}} = \mathrm{i} \sum_{<i,j>_\mu} G_\mu c_i c_j - \mathrm{i}\tilde{h} \sum_{\{i,j\}} c_i c_j$$

という自由 Majorana 粒子のハミルトニアンに還元される。第 2 項の和は、第 1 図の破線矢印のようにとる。



第 1 図: 模型の模式図

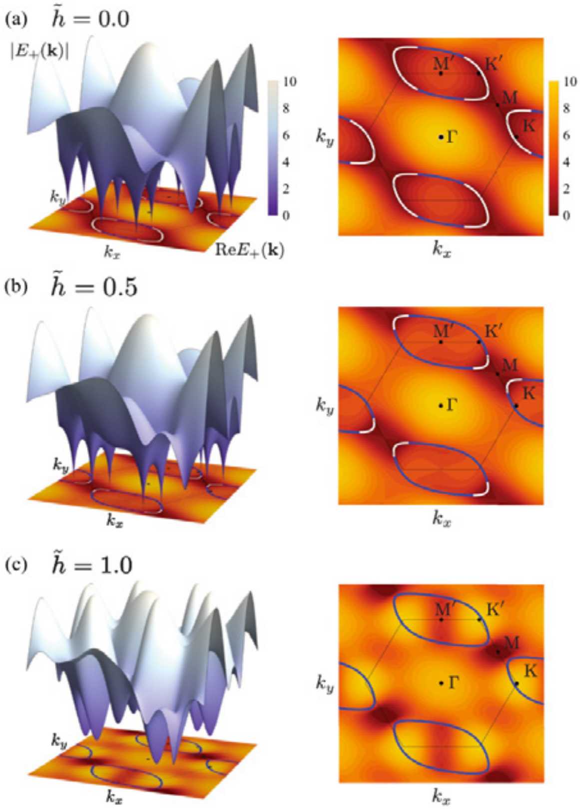
外部環境と結合した Kitaev 模型。Kitaev 模型は 2 次元ハニカム格子上に定義され、青、緑、赤色のボンド上で量子スピンの x, y, z 成分がそれぞれ相互作用している。γ_μ（$\mu = x, y, z$）は外部環境との結合定数。水色とピンク色の破線矢印は 3 次摂動によって現れる Majorana 粒子間の次近接ホッピングの向きを表す。右のオレンジ色の矢印は、一様磁場 **h** の向きを表す。

３．結果 1：臨界有効磁場

まずは、Majorana 粒子の分散関係にギャップが開く磁場である臨界有効磁場$\tilde{h}_{\mathrm{c}}$の数値的な見積もりを行った。磁場によってギャップが開く様子の典型例を第 2 図に示す。上記のハミルトニアンを Fourier 変換すると、副格子が 2 つあることに対応して、Majorana Bloch ハミルトニアンが 2 次の正方行列となる。その固有値は

$$E_\pm(\mathbf{k}) = \pm\sqrt{\varepsilon(\mathbf{k})\varepsilon(-\mathbf{k}) + \Delta(\mathbf{k})^2}$$

で与えられる。ハミルトニアンが非エルミートであることに対応して、この固有値は複素数である。第 2 図では、この複素エネルギー固有値の絶対値を左図の 3D 図で示し、左図の底面と右図に複素固有値の実部を示している。白線と青線は、複素エネルギーの実部がゼロとなる Fermi アークと虚部がゼロとなる i-Fermi アークをそれぞれ表している。図から見て取れる通り、$\tilde{h}_{\mathrm{c}} = 0.0$と$\tilde{h}_{\mathrm{c}} = 0.5$の場合にはギャップレスになっており、$\tilde{h}_{\mathrm{c}} = 1.0$ではギャップが開いている。非エルミートの場合は有限の有効磁場で Majorana 粒子の分散にギャップが開くことが分かる。実際に、ギャップが開く臨界有効磁場を数値的に見積もると$\tilde{h}_{\mathrm{c}} \cong 0.78$である。



第 2 図: Majorana 粒子の分散関係の有効磁場依存性
系のパラメータは$G_x = 2.0, G_y = 1.0, G_z = 2.5\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi/3}$。左の 3D 図は複素エネルギー固有値の絶対値、左図の底面と右図は実部を示している。白線と青線は、フェルミアークと i-フェルミアークをそれぞれ表す。

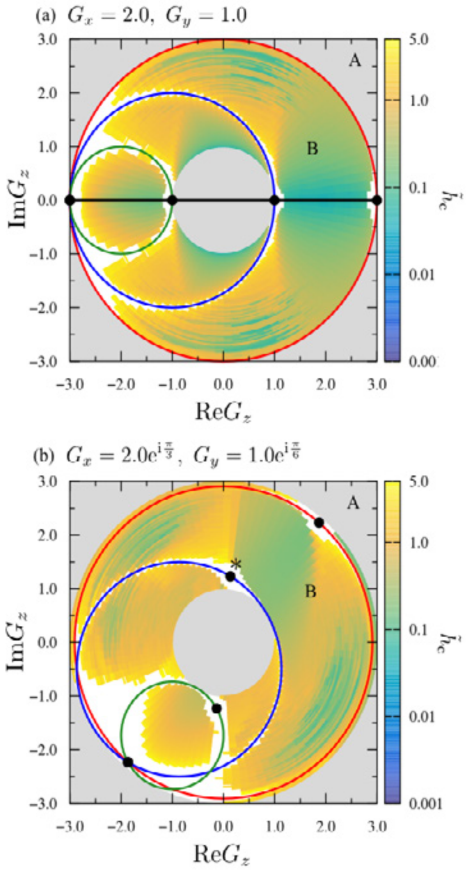
この臨界有効磁場$\tilde{h}_{\mathrm{c}}$の値は系のパラメータに依存する。そこで、$\tilde{h}_{\mathrm{c}}$の値を数値的に見積もったものを第 3 図に示す。図では、G_xとG_yの値を固定し、複素G_z平面において$\tilde{h}_{\mathrm{c}}$をプロットした。計算においては各G_zについて並列化を行い、500×500 **k** メッシュを用いた。ギャップの判定は、$|E_{\pm}(\mathbf{k})|^4$の最小値が5.0×10^{-4}を超えるかどうかを基準にしている。これは、少々緩い判定基準であるが、第 2 図に見て取れるようにギャップが閉じている例外点において分散関係が波数のルートで立ち上がっている上に、磁場によって位置が変化するため、数値的にギャップを検出するのが非常に大変であるからである。図から、一般に非エルミートな場合には有限の有効磁場で系にギャップが開くことが分かる。これは、無限小の磁場で Majorana 粒子の分散関係にギャップが開くエルミートな場合とは対照的である。さらに、白く塗られた領域は 5.0 までギャップが開かない領域である。この領域の起源を理解するために、我々は、3 次摂動の範囲内で、ギャップが磁場によって開かない領域の解析解を導出した。この解析解を青、緑、赤色の線で図に書き入れている。白く塗られた領域は、これらの解析解の近傍に現れており、解析解で示されるギャップの開かない領域に近づくにつれて臨界有効磁場が発散していくために白い領域が現れていることが理解できる。解析解の表式やその導出はスーパーコンピュータとは関連が薄いため、ここでは議論しないが、詳細は原論文 [1]を参照されたい。

4. 結果 2: 磁場誘起トポロジカル転移

この系におけるギャップが閉じている点は、非エルミート系の文脈で例外点と呼ばれ、系の複

数の固有ベクトルが縮退する点であり、今の場合は、複素エネルギー固有値$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm\sqrt{\varepsilon(\mathbf{k})\varepsilon(-\mathbf{k}) + \Delta(\mathbf{k})^2}$のゼロ点に対応する。よって、例外点は複素エネルギー固有値の位相の特異点となっているため、各例外点について、

$$W = \oint \frac{\mathrm{d}\mathbf{k}}{2\pi \mathrm{i}} \nabla_{\mathbf{k}} \ln \det[H(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k}_{\mathrm{EP}})]$$

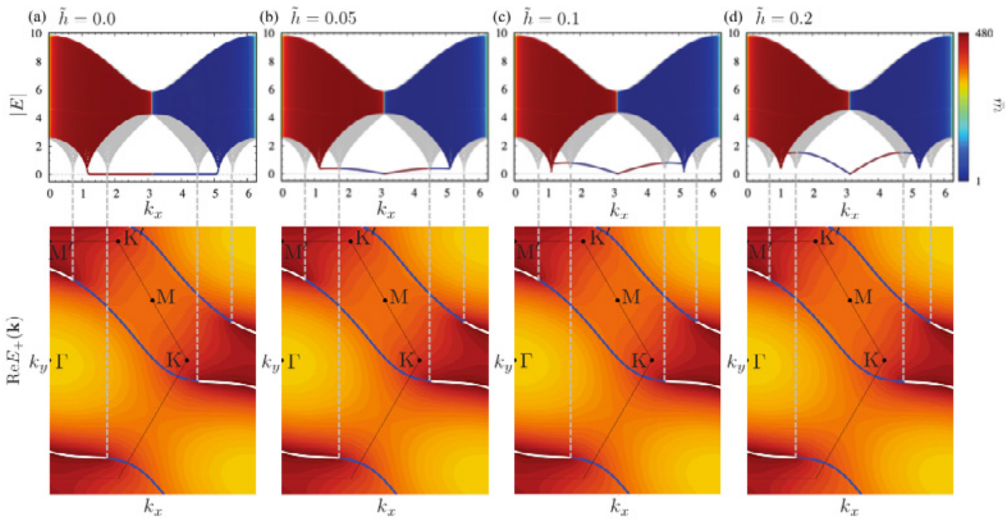


第 3 図: 複素G_z平面における臨界有効磁場 G_xとG_yを図中の値に固定している。灰色の領域はゼロ磁場ですでにギャップが開いている A 相、白い領域は 5.0 までギャップが開かなかった領域。青、緑、赤色の線はギャップが開かない領域の解析解を示している。黒色の点は$\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon(-\mathbf{k}) = 0$が同じ波数で満たされるパラメータ。

として例外点周りを反時計回りに 1 周する線積分によって巻き付き数を定義することができる。ここで、$H(\mathbf{k})$は Majorana Bloch ハミルトニアン、$E(\mathbf{k}_{\mathrm{EP}})$は例外点$\mathbf{k}_{\mathrm{EP}}$におけるエネルギー固有値である。この定義にそって例外点の巻き付き数を計算すると、第 3 図の B 相の青、緑、赤色の線上以外の領域において、磁場印加によってギャップが開くまでは例外点は巻き付き数 $W = \pm 1$をとる。青、緑、赤色の線上において、黒点以外のパラメータにおいては磁場によってギャップが開くことがないため、磁場に依らず各例外点が巻き付き数 $W = \pm 1$をもつ。さらに、黒点で示されたパラメータにおいては、$W = \pm 1$をもつ例外点に加え、$\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon(-\mathbf{k}) = 0$を満たす例外点は、ゼロ磁場で$W = \pm 2$をもち、磁場を印加するとある磁場で$W = 0$へと例外点の巻き付き数のトポロジカル転移が起きることを見出した。また、トポロジカル転移が起きる有効磁場の値の解析的表式を導出した。これは、磁場の印加によって例外点の巻き付き数が変化するトポロジカル転移の数少ない例となっている。

5. 結果 3:非エルミート表皮効果

ここまでの結果は、系に周期境界条件を課して Fourier 変換を行った表示による計算であったが、ここでは端のある系を考え、数値対角化による計算を行う。具体的には、系の上下にジグザグ開放端を設け、横方向には周期性を課したまま Fourier 変換を行い、縦方向には開放境界条件を課して対角化計算を行う。この計算には、スーパーコンピュータによる計算が重要であることに言及しておく。理由は主に 2 つあり、下で述べる端状態の局在方向が入れ替わる波数点の位置は系のサイズを大きくとらないと収束しないこと、そして、非エルミート表皮効果が起きる場合は、精度の担保のために倍精度を超えて 4 倍精度の計算を行う必要があることである。非エルミート表皮効果は非エルミート系特有の現象であり、系に開放境界条件を課した際にマクロな数の固有状態が系の端に局在する。これにより、



第 4 図: 磁場の印加による開放系のスペクトルと波動関数の平均位置の変化

G_xとG_yを固定している。灰色の領域はゼロ磁場ですでにギャップが開いている A 相、白い領域は 5.0 までギャップが開かなかった領域。青、緑、赤色の線はギャップが開かない領域の解析解を示している。黒色の点は$\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon(-\mathbf{k}) = 0$が同じ波数で満たされるパラメータ。

系の端から局在長を超える程度の系の内部において、固有ベクトルの精度が著しく悪くなってしまい、倍精度を超えた精度が必要になる。4 倍精度の対角化は、必要なメモリも計算時間も倍精度の時より大きく増大するため、スーパーコンピュータにおける実行が必要不可欠である。本研究では、4 倍精度の対角化計算コードして公開されている QEISPACK [5]を用いた。

先行研究 [4]において、ゼロ磁場の場合に非エルミート表皮効果が起きる条件が調べられている。そこで、本研究においては、ゼロ磁場で表皮効果が起きる場合と起きない場合のそれぞれについて、磁場印加の効果を調べた。まず、ゼロ磁場で表皮効果が起きない場合では、磁場の印加とともに表皮効果が誘起されることを数値的に明らかにした。これは磁場の印加とともに、系のポイントギャップトポロジーが変化し、開放境界条件のスペクトルが複素エネルギー平面において有限の面積を囲むように変形することで理解できる。次に、ゼロ磁場ですでに表皮効果が起きるパラメータにおける磁場によるスペクトルと波動関数の平均位置の変化を第 4 図に示す。ここでは、$G_x = 2.0\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi/3}, G_y = 1.0\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi/6}, G_z = 2.5$にパラメータを固定している。$x$方向に周期境界条件を課し、4 倍精度対角化計算により得られた複素スペクトルの絶対値の波数k_x依存性をプロットしている。y方向に開放境界条件を課した場合の結果について、波動関数の平均位置

$$\tilde{m} = \sum_{m=1}^{M} m|\psi(k_x, m)|^2$$

をカラープロットで示している。ここで、mはy方向のサイト位置を示す離散座標である。また、y方向にも周期境界条件を課した結果を灰色で示す。また、下のパネルには両方向に周期境界条件を課して計算した複素エネルギーの実部の等高線プロットを示している。灰色の点線は、上のパネルの周期境界条件の結果に現れる例外点と下のパネルの対応する例外点を繋いでいる。開放境界条件の結果のみに現れているゼロエネルギー付近のモードは端状態（正確に言うと、エルミート極限の端状態に接続する状態）を示している。まず、(a)のゼロ磁場の場合には、開放境界条

件の全ての固有値が$k_x = \pi$を境に赤色と青色になっており、これは、ゼロ磁場ですでに非エルミート表皮効果が起きているために全てのモードが系の両端に局在していることを示している。有限の磁場の場合には、バルクのモードの局在は大きく変化しないが、端状態の局在方向がある波数で切り替わっていることが分かり、サイズ依存性を注意深く調べてみると、この波数は灰色の点線で示されている周期境界条件のスペクトルの例外点に対応していることが分かる。これは、エルミートな場合の 3 次元 Weyl 半金属の表面に現れる表面 Fermi アーク状態に類似している。エルミートな 3 次元 Weyl 半金属では、バルクのスペクトルに現れる Weyl 点の 2 次元波数空間への射影をつなぐように表面 Fermi アークが存在し、磁場中で電子の表面モードがこの Fermi アークの終端で反対側の表面モードに切り替わる。本研究の結果は、これの非エルミートかつ 2 次元版となっており、2 次元非エルミート系と 3 次元エルミート Weyl 系の対応の一例を与えている。

6. まとめ

本研究では、非エルミート Kitaev 模型に対する磁場の効果を摂動論の範囲で明らかにした。特に、エルミートな場合とは異なり、例外点(=今の場合はギャップレス点）が有限の磁場でギャップアウトされること、特に、磁場の強さによらずギャップが開かないパラメータ領域が存在することを明らかにした。また、このような領域の特定のパラメータにおいては、磁場によって例外点の巻き付き数が変化するトポロジカル転移が起きることを見出した。さらに、開放境界条件を課した計算においては、ゼロ磁場で非エルミート表皮効果が起きないパラメータにおいては磁場の印加により表皮効果が誘起されること、ゼロ磁場で表皮効果が起きる場合は、表面モードの局在方向がバルクのスペクトルの例外点に対応する波数で切り替わるという現象を明らかにした。特に最後の表皮効果の計算においては、マクロな数の波動関数が系の端に局在してしまうために、倍精度計算では十分な精度で計算が行えないため、4 倍精度以上の精度が必要であり、メモリの観点からも計算時間の観点からもスーパーコンピュータにおける計算が重要な役割を果たした。本研究の結果は、散逸が強い場合のギャップレス量子スピン液体の新たな安定化機構を示唆しており、また、散逸によって系の表面状態を制御できる可能性も示している。本研究は、開放量子系における量子スピン液体の物理の新展開の扉を開くものであり、今後は、3 次元量子スピン液体や Kitaev 量子スピン液体以外の量子スピン液体における散逸がもたらす興味深い現象の探索を続けたい。

参 考 文 献

[1] K. Fukui, Y. Kato, and Y. Motome, Phys. Rev. B **110**, 024429 (2024).

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

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

[4] K. Yang, S. C. Morampudi, and E. J. Bergholtz, Phys. Rev. Lett. **126**, 077201 (2021).

[5] Y. Hanada, QEISPACK, https://github.com/hanada-yasutaka/QEISPACK