

新奇量子相の実現・観測へむけた電子状態に基づく理論的予測 -スピン軌道相互作用と電子相関が生み出すトポロジカル量子相

東大院工 山地洋平、今田正俊

より高い転移温度を示す高温超伝導体やスピントロニクス等の舞台を提供する高機能な物質群を理論的に予測することは理論的・数値的研究の大きな目標の一つである。本発表では、理論的物質設計の実現に向けた試みの一つとして、スピン軌道相互作用と電子間クーロン相互作用が新奇量子相を生み出すと期待されているイリジウム酸化物をターゲットとした研究を紹介する。

近年遷移金属元素イリジウムの酸化物において、スピン軌道相互作用と電子間クーロン相互作用の協奏が、トポロジカルな量子相を発現する可能性が相次いで予言されている[1,2]。その一つに、可解模型の解として導かれたスピン液体相が、イリジウム酸化物 $A_2\text{IrO}_3$ ($A=\text{Li,Na}$) の基底状態となる可能性[1]がある。このスピン液体相は、磁性を示す絶縁体としては希有な、基底状態において自発的対称性の破れを示さない量子液体状態である。また、パイロクロア格子イリジウム酸化物 $R_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ (R :希土類元素) の磁性相[3]では、ワイル半金属[2]と呼ばれる質量ゼロの『ニュートリノ』が低エネルギー物性を担うゼロギャップ半導体相の実現が予言され、とくに注目を集めている。しかし残念ながら、いずれの量子相も実現あるいは直接的な実験的観測には至っていない。

本発表では、イリジウム酸化物で期待されているこれら二つの新奇量子相、スピン液体とワイル電子を、いかに現実の物質群で実現、あるいは観測するかについての理論的指針を示す。ハニカム格子イリジウム酸化物 Na_2IrO_3 の微視的な電子状態から出発し、その基底状態・有限温度における熱力学量の物質パラメータ依存性を、多体波動関数から数値的に求め物質設計指針を与える[4]。また、パイロクロア格子イリジウム酸化物 $R_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ (R :希土類元素) において、磁壁近傍にワイル電子のもつ量子異常を反映したトポロジカルな 2 次元電子系が、ワイル電子の観測可能な痕跡として現れることを示す[5]。これらの研究は今後、京コンピュータの利用が不可欠となる 10TB 規模の多体波動関数に基づく高精度な物性予測や、高精度電子状態計算に基づく、磁壁を始めとする結晶中のメゾからマクロスケールにおよぶ機能性非一様構造の予測に対し、強い動機と出発点をあたえる。同時にこれら大規模数値計算の学術的意義を基礎づけるものである。

文献

- [1] J. Chaloupka, G. Jackeli and G. Khaliullin, Phys. Rev. Lett. **105**, 027204 (2010).
- [2] X. Wan, *et al.*, Phys. Rev. B **83**, 205101 (2011).
- [3] D. Yanagishima and Y. Maeno, J. Phys. Soc. Jpn. **70**, 2880 (2001); K. Matsuhira, *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **80**, 094701 (2011).
- [4] Y. Yamaji *et al.*, in preparation.
- [5] Y. Yamaji and M. Imada, arXiv:1306.2022.