

論文審査の結果の要旨

氏名 山田 昌彦

スピン空間の対称性が通常 $SU(2)$ ではなく、 $SU(N)$ ($N > 2$) である系では、その高い対称性が強い量子ゆらぎをもたらすことから、量子スピン液体などの非自明な状態が基底状態で実現されることが期待される。そのため、このような系は理論的には古くから調べられていたが、その固体中での実現は難しいと考えられていた。これは、固体中では軌道縮退がある場合であっても、実際はスピン軌道相互作用によりスピン空間の $SU(2)$ 対称性ですら破れてしまうためである。一方、近年になりスピン軌道相互作用が強い系であっても、強い量子ゆらぎにより量子スピン液体が実現する系 (Kitaev スピン液体) が理論・実験の両面から注目されている。本論文は、このような背景のもと、強いスピン軌道相互作用の存在下で $SU(4)$ 対称性が創発する可能性があることを理論的に示したものである。また、この発現が期待される候補物質を具体的に提案し、さらにそれらにおいて量子スピン軌道液体と呼ばれる新奇相が実現される可能性を議論している。

本論文は英文で、3章と付録からなる。第1章は序論で、研究背景と目的、および本論文の構成について述べられている。まず、 $SU(2)$ 対称なスピン系と量子スピン液体の概念を導入し、resonating-valence-bond 状態やそのフェルミオンを用いた平均場的記述について解説している。続いて、 $4d$, $5d$ 電子系におけるスピン軌道相互作用と Kitaev 型の相互作用を生み出す Jackeli-Khaliullin 機構についてまとめられた後に、本論文で重要となる $SU(N)$ 対称性をもつ Heisenberg 模型を導入している。また、spinon、orbitalon などの素励起もここで導入している。さらに、基底状態がギャップの存在する自明な絶縁体である可能性を排除する Lieb-Schultz-Mattis-Affleck (LSMA) 型の定理を導入した後に、蜂の巣格子上の $SU(4)$ Heisenberg 模型がギャップレスの Dirac スピン液体であることを示唆する先行研究を紹介し、最後に本論文の主眼となる量子スピン軌道液体の概念を導入し、その固体中での実現の難しさを議論している。

第2章の内容が、本論文の主要結果である。まず、 $\alpha-MX_3$ ($M = \text{Ti, Zr, Hf}$, $X = \text{F, Cl, Br}$) という蜂の巣格子状の物質群を導入し、各 M サイトの電子配置が d^1 でスピン軌道相互作用が強い極限を考える。このとき、低エ

エネルギーでは、有効全角運動量 $J_{\text{eff}} = 3/2$ の多重項に対する Hubbard 型のハミルトニアンを導出することができる。この有効モデルのホッピング項は異なる軌道間の遷移を含むため、一見対称性の低いモデルに見えるが、実はこの行列で表されるホッピング項の任意のループ上の積は $\pm I$ (I : 単位行列) となるため、適切なユニタリー変換により $SU(4)$ 対称性のある Hubbard 模型に変換することができる。またこのことから、ホッピングを摂動的に扱って得られる有効スピン模型は、 $SU(4)$ Heisenberg 模型となることが分かる。これが本論文における主要な発見である。第2章ではさらに、MOFs (metal-organic frameworks) により Zr や Hf の、三次元の trivalent なネットワークが実現したとすると、どのような格子構造の場合には $SU(4)$ 対称性が創発するか、ということを経験している。また、これらの格子上のループにおいて、ホッピング項の積が $\pm I$ のどちらになるかということを経験的な計算により求めている。さらに結晶スピン液体を定義し、その拡張である結晶スピン軌道液体が、どのような場合に実現されるかということが LSMA 型の定理を用いて議論されている。第2章ではその他に、三角格子上で同じ電子配置の系を考えた場合、 $SU(4)$ 対称性は $SU(2) \times SU(2)$ まで破れること、蜂の巣格子系においても、Hund 結合の効果を経験した場合には、対称性は $SO(5)$ まで下がることを議論している。

最後に第3章では、論文全体のまとめと結論が述べられている。付録は A と B からなり、本文中の議論に必要な LSMA 型の定理や Kitaev 模型、そのフラックス・セクターなどについてまとめられている。

以上のように、本論文は、従来は対称性が低いと考えられていたスピン軌道相互作用の強い相関電子系において、創発的な $SU(4)$ 対称性が生じる可能性をはじめて指摘し、その発現が期待される候補物質を、 $\alpha\text{-ZrCl}_3$ をはじめ多数提案したものである。また、それらにおける量子スピン軌道液体の実現可能性を理論的に議論しており、得られた結果は今後の理論的・実験的研究を刺激することが期待される。よって本論文は、学位論文として十分な内容を持つものと審査委員全員が認めた。なお、本論文の結果は押川正毅氏、George Jackeli 氏との共同研究に基づいているが、論文提出者が主体となって問題設定と定式化、解析及び結果の検討を行ったもので、論文提出者の寄与が十分であると判断する。

したがって、博士（理学）の学位を授与できると認める。