

パイロクロア磁性体における 4 者間量子もつれに由来するトポロジカル相

[1] 要旨

ブリージングパイロクロア立体構造上のスピン 1/2 異方的ハイゼンベルク模型を用いて、多様なトポロジカル相が現れることが明らかになった。これらは 4 者間量子もつれに由来する相である。量子モンテカルロ法を用いた本研究により、多様な相を特徴づけるベリー位相の同定が行われ、これらが高次トポロジカル相であることが確認された。

[2] 本文

物質中の量子もつれという現象を理解するうえで、トポロジーという概念は重要な役割を果たしている。トポロジーを用いて理解することができる物性の代表的なものとしてトポロジカル絶縁体（表面は金属的だが内部は絶縁体である物質）が知られているが、近年は、そのようなギャップレス表面状態（金属的な表面状態）を示す系だけにとどまらず、ギャップをもつ表面状態を示す系へと研究対象が広がっている。ここで取り上げる高次トポロジカル絶縁体はギャップをもつ表面状態が現れる物質として知られ、物質中の多者間量子もつれと深く関わっている。

パイロクロアネットワークをもつ物質は、競合する相互作用に起因して非自明な量子状態を示すことがあり、高次トポロジカル相についても議論されてきた。パイロクロアネットワークは図 1 (a) のような立体構造であり、カゴメネットワークを 2 次元断面にもつ [図 1 (b)]。四面体の向きによって四面体の大きさが異なるようなパイロクロアネットワークはブリージングパイロクロアとよばれ、このような立体構造をもつ物質、例えば $\text{Ba}_3\text{Yb}_2\text{Zn}_5\text{O}_{11}$ や $\text{Ba}_3\text{Tm}_2\text{Zn}_5\text{O}_{11}$ などの研究が進んでいる。

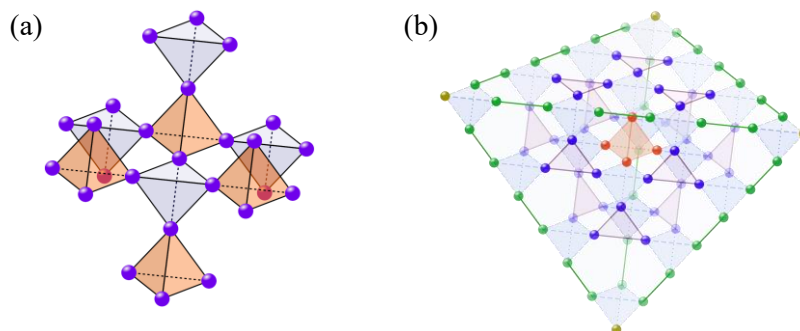


図 1. (a) パイロクロアネットワークの立体構造。2 種類の向きの正四面体が交互に頂点を共有している。(b)パイロクロアネットワークの四面体状の表面はカゴメネットワークを形成する。

最近、東邦大学大学院理学研究科物理学専攻のメンバーを中心とする研究グループは、ブリージングパイロクロア立体構造をもつ磁性体において、高次トポロジカル相が実現することを、量子モンテカルロ法を用いた数値計算によって明らかにした。この成果は JPSJ の 2025 年 4 月号に掲載された。

本研究では、ブリージングパイロクロアネットワーク上の、スピンの x 成分と y 成分で強磁性的、 z 成分で反強磁性的に相互作用するスピン 1/2 異方的ハイゼンベルク模型に現れる常磁性八極子 (octupolar paramagnetic: OPM) 相および 4 量子ビット W 相のトポロジカルな性質について、量子

モンテカルロ法を用いて数値的に調べられた。まず、隣接する xy 面内強磁性相との相境界がスピン硬性 (spin stiffness) に対するスケーリング解析によって決定され、ブリージングの強さと磁場に関する相図が明らかとなった。その上で、OPM 相と 4 量子ビット W 相における量子化ベリー位相を数値的に評価することにより、これら 2 つの相が $\mathbf{Z}_4$ ベリー位相で特徴づけられること、OPM 相は $\mathbf{Z}_6$ ベリー位相でも特徴づけられることが定量的に示された。これにより、OPM 相と 4 量子ビット W 相が 4 者間量子もつれによって形成されるトポロジカル相であることが明らかとなった。

また、開いた境界条件をもつ四面体状の系 [図 1 (b)] における、OPM 相および 4 量子ビット W 相の磁氣的性質についても調べられた。磁化曲線の計算により、これら 2 つの相でギャップをもつ表面状態に起因する磁化プラトーが現れることが明らかになった。さらに、磁化プラトーにおける局所磁化が得られ、OPM 相の一部の領域で 3 次トポロジカル相 [図 2 (a)]、4 量子ビット W 相の一部の領域で 2 次トポロジカル相 [図 2 (b)] および 1 次トポロジカル相 [図 2 (c)] となることが、系の境界の四面体の面、辺、頂点における特徴的な磁化の振る舞いから明らかとなった。この結果は、局所的な磁性を調べることにより、実験的にこれらの高次トポロジカル相を同定できる可能性を示唆している。さらに、2 次元表面状態が $\mathbf{Z}_3$ ベリー位相で、1 次元エッジ状態が $\mathbf{Z}_2$ ベリー位相で特徴づけられるトポロジカル状態となっていることも確認された。

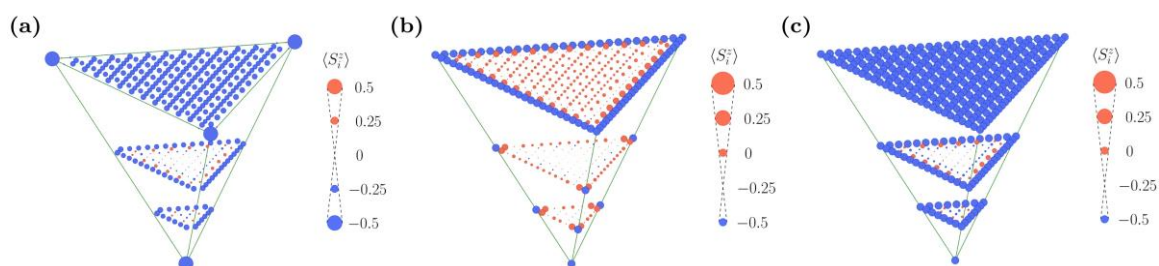


図 2. 開いた境界条件をもつ四面体状の系の (a) 3 次トポロジカル相、(b) 2 次トポロジカル相、(c) 1 次トポロジカル相における局所的磁性。局所磁化 $\langle S_i^z \rangle$ が $-1/2$ であるときは古典的な状態である (= 量子もつれ状態を形成しない) ことを示唆し、 $\langle S_i^z \rangle = 0, -1/6, -1/4$ であるときトポロジカルに安定な量子もつれ状態を形成していることを示唆している。

本研究は、大規模系に対する数値計算法を用いて 3 次元トポロジカル相を定量的に議論した数少ない例であり、特に、3 次元多体系の量子化ベリー位相の量子モンテカルロ法による計算例としては本研究が初めてである。表面状態を特徴づけるトポロジカル量 (量子化ベリー位相) の量子化についても初めて実証され、これにより内部から表面、表面から辺へと対称性が低下するに伴って、量子化ベリー位相が $\mathbf{Z}_4$ から $\mathbf{Z}_3$ 、 $\mathbf{Z}_3$ から $\mathbf{Z}_2$ へと逐次的に変化する典型的な高次トポロジカル相の存在が明らかとなった。このような 4 者間量子もつれに由来する典型的な高次トポロジカル相の性質は、多者間量子もつれに伴うより複雑な高次トポロジカル相の理解の進展に役立つことが期待される。

原論文 (2025 年 3 月 11 日公開済)

Topological Properties of Four-qubit Entangled Phases on the Breathing Pyrochlore Lattice

K. Aoyagi, Y. Hatsugai, and T. Kawarabayashi, J. Phys. Soc. Jpn. **94**, 044702 (2025).

<情報提供：青柳克 (東邦大学理学研究科物理学専攻)>

初貝安弘（筑波大学数理物質系物理学域 教授）
河原林透（東邦大学理学部物理学科 教授）>