

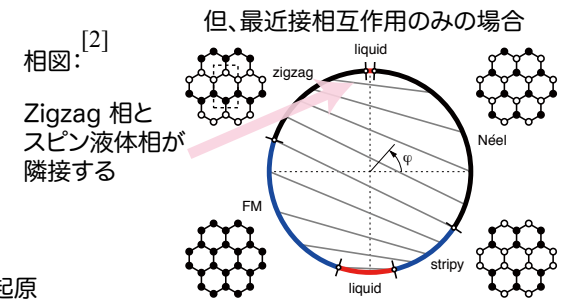
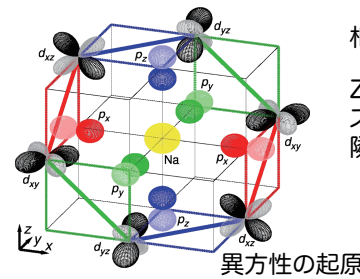
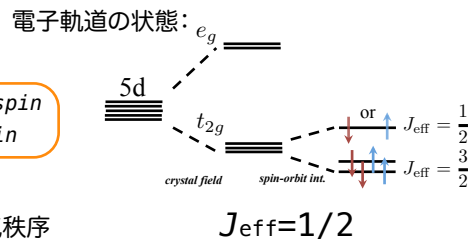
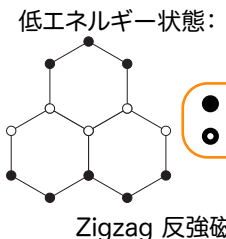
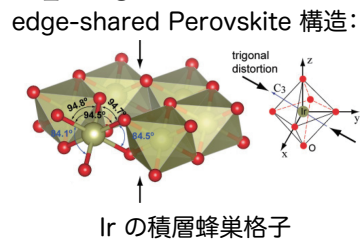
Motivation どんな問題に取り組むのか？

電子の電荷・スピン・軌道自由度の絡み合いで現れる量子状態を利用した新機能性材料の探索が盛んになされている。Na₂IrO₃ は、Ir 原子の電子に強いスピン軌道相互作用とクーロン相互作用が働く為、マヨラナフェルミ粒子を励起状態に持つ量子スピン液体に近いと云う予測がある事から、近年、活潑に研究されている。これまで、複数のモデルが提案されているが、熱力学量の解析から Na₂IrO₃ を記述するモデルを判断するのは困難である。そこで本研究では、動的スピン構造因子を計算し、非弾性中性子散乱実験と比較する事で、Na₂IrO₃ を記述するモデルを明らかにする。

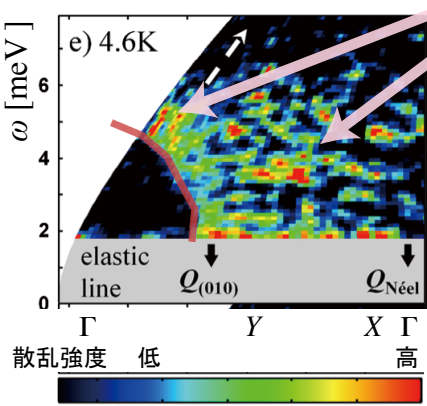
Originality and Impact 新規性とインパクトは？

これまで提案された Na₂IrO₃ に対する複数のモデルを用いて動的スピン構造因子を計算し、結果を非弾性中性子散乱実験と比較した。その結果、Y. Yamaji らが提案したモデルが最も良く Na₂IrO₃ の動的性質を記述することを明らかにした。今回の結果は、マヨラナフェルミ粒子を励起状態に持つ量子スピン液体状態を実現する候補物質の探索や、第一原理計算と物質設計の見地からも、有意義な知見であると考えられる。

Na₂IrO₃ Ir 5d⁵ の絶縁体



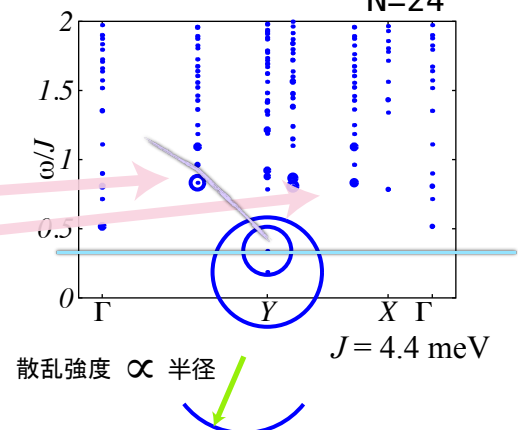
粉末非弾性中性子散乱実験 [1]



実験結果の特徴: 1. 励起“境界”の存在, 2. 秩序化由来の散乱強度

計算結果の評価: 1. 励起“境界”を再現, 2. 散乱強度の特徴を再現

動的構造因子の計算結果 N=24



有効スピン模型

$$\mathcal{H} = \sum_{(i,j) \in \mathcal{I}} \sum_{\lambda, \mu \in \Gamma} S_i^\lambda J_{n(i,j)}^{\lambda\mu} S_j^\mu$$

一般化された Kitaev-Heisenberg (KH) 模型

まとめ

第一原理計算に基づいた Y. Yamaji らの相互作用パラメータによる動的性質は粉末非弾性中性子散乱実験を再現。KH 模型の最近接相互作用に加え、長距離相互作用が重要になる。 [3]

[1] S.K. Choi, et al., *Phys. Rev. Lett.* **108**, 127204 (2012).

[2] J. Chaloupka, et al., *Phys. Rev. Lett.* **110**, 097204 (2012).

[3] Y. Yamaji, et al., *Phys. Rev. Lett.* **113**, 107201 (2014).