

# Mott Insulators in the Strong Spin-Orbit Coupling Limit: From Heisenberg to a Quantum Compass and Kitaev Models

著者: G. Jackeli, and G. Khaliullin

## アブストの翻訳

我々は、部分的に充填された $t_{2g}$ 準位と強いスピン軌道相互作用を有するモット・ハバード系における磁気相互作用を研究した。このスピン軌道相互作用はスピンと軌道空間を絡ませ、格子構造に応じてハイゼンベルク模型から量子コンパス模型まで外挿される低エネルギーのハミルトニアンが多様性を生み出す。この結果、モット絶縁体内で、量子計算に関連するキタエフの正確に解けるスピン模型を「設計」する道が開かれる。最後に、 $\text{Sr}_2\text{IrO}_4$ における異常に大きな強磁性モーメントを伴う「弱い」強磁性を説明する。

## 研究背景・問題意識

- d電子系で、強いスピン軌道結合がスピンと軌道の自由度を絡ませる状況を記述するモデルを作りたい。

## 単一イオンのクラマース二重項

- 低スピンのd5電子配置では、ホールがxy, xz, yz軌道に存在し、有効角運動量 $l = 1$ を持つ。
- 単一イオンのハミルトニアン $H_0 = \lambda \mathbf{l} \cdot \mathbf{s} + \Delta I_z^2$ は、 $\lambda > 0$ のスピン軌道結合と $t_{2g}$ 準位の正方晶分裂からなる。c軸に沿って伸びた酸素八面体に対しては $\Delta > 0$ となる。
- クラマース二重項の基底状態は以下のように記される。

$$|\tilde{\uparrow}\rangle = \sin \theta |0; \uparrow\rangle + \cos \theta |1; \downarrow\rangle, |\tilde{\downarrow}\rangle = \sin \theta |0; \downarrow\rangle + \cos \theta |-1; \uparrow\rangle.$$

$\theta$ は正方晶分裂の相対的な強さをパラメータ化し、 $\tan(2\theta) = \frac{2\sqrt{2}\lambda}{\lambda - 2\Delta}$ であることに注意する。クラマース二重項の波動関数は、異なる軌道及びスピン状態のコヒーレントな重ね合わせであり、実空間におけるスピン密度のユニークな分布を引き起こす。これによりサイト間相互作用の対称性に重要な影響が生じる。

## 隣接するクラマース状態間の交換結合

- 立方対称性の場合と正方歪の場合について議論する。
1. 立方対称、すなわち180度結合の場合、最近接の $t_{2g}$  ホッピング行列は軌道空間で対角的であり、ある結合上では2つの軌道が寄与する。このようなスピン軌道交換ハミルトニアンは $H_{ij} = J_1 \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J_2 (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{S}_j)$ で与えられる。 $J_1$ はアイソスピンの $S = 1/2$ 演算子、 $\mathbf{r}_{ij}$ はij結合に沿った単位ベクトルである。
  - これは予想に反する結果と言える。つまり磁気自由度は小さな $\lambda$ と同様にほぼハイゼンベルク模型により支配され、その異方性は完全にフント結合によるものである。
  2. 90度結合、つまり正方歪の場合。

- 90度結合があると、交換ハミルトニアンは180度結合の場合の幾何学とは異なるものになる。つまり、上部と下部の酸素を介した二つの移動振幅が干渉してハミルトニアンの等方的な部分が完全に消失する。しかし、励起準位のフント結合多重項構造により、有限の異方的相互作用が表れる。ハミルトニアンは

$$H_{ij}^{(\alpha)} = -JS_i^{(a)}S_j^{(a)}$$

である。このハミルトニアンは量子コンパス模型の正確な類似物になっている。

## モット絶縁体におけるキタエフ模型の実装

- キタエフ模型はハニカム格子状の量子コンパス模型に相当し、エニオンの励起やエキゾチックな分数統計、トポロジカル縮退などの興味深い特性を持つ。

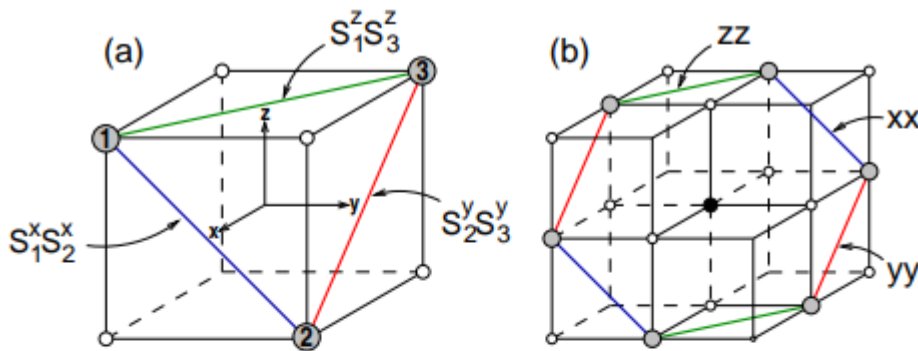


FIG. 3: (Color online) Examples of the structural units formed by 90° TM-O-TM bonds and corresponding spin-coupling patterns. Grey circles stand for magnetic ions, and small open circles denote oxygen sites. (a) Triangular unit cell of ABO<sub>2</sub>-type layered compounds, periodic sequence of this unit forms a triangular lattice of magnetic ions. The model (3) on this structure is a realization of a quantum compass model on a triangular lattice: *e.g.*, on a bond 1-2, laying perpendicular to *x*-axis, the interaction is  $S_1^x S_2^x$ . (b) Hexagonal unit cell of A<sub>2</sub>BO<sub>3</sub>-type layered compound, in which magnetic ions (B-sites) form a honeycomb lattice. (Black dot: nonmagnetic A-site). On an *xx*-bond the interaction is  $S_i^x S_j^x$ , *etc.* For this structure the model (3) is identical to the Kitaev model.

- 図に示されているのは、コンパス相互作用によって形成される三角形ユニットである。この磁性イオン内の三角行使は、TMイオンを周期的に非磁性イオンで置き換えることによりハニカム格子にまで希薄化できる。これにより、キタエフ模型ができる。すなわちハイゼンベルク模型がキタエフ模型に変換され、スピン液体基底状態が生じる。

## Sr<sub>2</sub>IrO<sub>4</sub>の弱い強磁性

- Sr<sub>2</sub>IrO<sub>4</sub>では、強磁性モーメントが大きく0.14μ<sub>B</sub>もある。この秩序化されたスピンは八面体の交互回転に従っているように見えるが、強いISO結合シナリオがこの観察を説明しうる。モデルは以下のである。

$$H = JS_i \cdot S_j + J_z S_i^z S_j^z + \mathbf{D} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j),$$

- スピン尾計射角は $\lambda$ に依存せず、格子のひずみによってのみ決定されている。
- 上で導入されたハミルトニアンはハイゼンベルグ模型にも射影することができる。

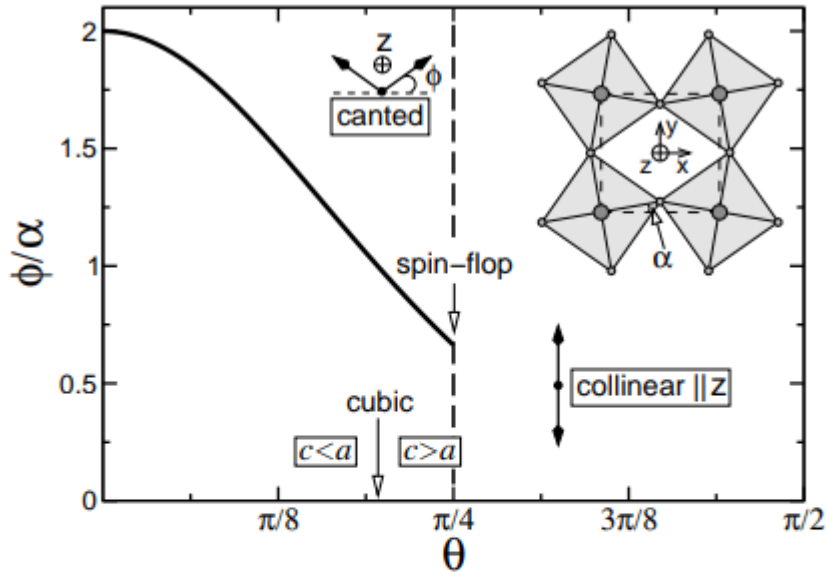


FIG. 4: The spin canting angle  $\phi$  (in units of  $\alpha$ ) as a function of the tetragonal distortion parameter  $\theta$ . Inset shows a sketch of an  $\text{IrO}_2$ -plane. The oxygen octahedra are rotated by an angle  $\pm\alpha$  about  $z$ -axis forming a two sublattice structure. In the cubic case,  $\theta \simeq \pi/5$ , one has  $\phi = \alpha$  exactly. The spin-flop transition from the in-plane canted spin state to a collinear Néel ordering along  $z$ -axis occurs at  $\theta = \pi/4$ .

- 正方晶歪に対するスピン傾斜各の依存性を示すと、スピンは単純に八面体の回転に従って回転することがわかる。
- 八面体の伸長の比が大きくなると、 $z$ 軸に沿ったコリニア秩序へのスピnflop転移が起きる。
- つまるところ、強いスピン軌道結合を持つモット絶縁体では、低エネルギーのハミルトニアンの対称性はもっぱら格子構造によって決定できることを示している。

## 感想

- この論文のどこが強いところなのか考えていたが、強いスピン軌道結合があってもモデルの対称性だけを考えれば十分議論ができることを示したということ？図もかなり純粋に幾何学的である。