

平成 21 年 5 月 7 日現在

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2006～2008

課題番号：1 8 7 4 0 2 5 1

研究課題名（和文） 中性原子系における超流動状態とモット絶縁体転移の解明

研究課題名（英文） Superfluid States and Mott Transitions of Neutral Atom Systems

研究代表者 木村 敬（KIMURA TAKASHI）

神奈川大学・理学部・准教授

研究者番号 30386809

研究成果の概要：

レーザー光でつくられる光格子中などで実験が可能な、量子多体効果についていくつかの成果を上げた。 スピン 1 ボーズ粒子の磁場中のモット転移 調和振動子型の閉じ込めポテンシャルの効果を考慮したフェルミ粒子のモット絶縁体絶縁体転移 一次元フェルミ粒子系での不純物散乱による粒子間相互作用の繰り込み 2 次元フェルミ粒子系の F F L O 状態のモンテカルロシミュレーションである。

交付額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合 計
2006 年度	1,200,000	0	1,200,000
2007 年度	1,200,000	0	1,200,000
2008 年度	1,200,000	360,000	1,560,000
年度			
年度			
総 計	3,600,000	360,000	3,960,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・原子・分子・量子エレクトロニクス

キーワード：量子エレクトロニクス

1．研究開始当初の背景

1995 年にボーズ・アインシュタイン凝縮を、

凝縮密度 99%以上という極めて純粋な形で成功させたトラップ中の中性原子系では、その後も目覚ましい実験技術の発展が見られ、

量子渦、多成分系、フェルミ原子系のフェルミ縮退・超流動などが次々に実現された。

原子の感じるポテンシャルの形状としては、調和振動子型のトラップポテンシャルに1990年代は限定されていたが、今世紀に入るとレーザー光の干渉縞を利用した光格子ポテンシャルが実現されるようになってきた。これにより、従来は固体中でしか実現されなかった周期ポテンシャル中の多体問題という物性物理の最も重要かつ本質的な問題が、固体という複雑極まりない曖昧な環境ではなく、ほとんどすべてのパラメータを実験家が制御できるという極めて理想的な環境で研究できる可能性が出てきた。

実際に2002年には、格子点当たり整数個の原子を用意することにより、ボーズ原子の超流動（ボーズ・アインシュタイン凝縮）とモット絶縁体間の相転移が原子の多体波動関数の干渉縞を通して観測され、原子分子分野だけでなく、非常に多くの物性理論研究者を惹きつけた。この光格子系は、最も単純なハバード模型でほぼ正確に記述されることが分かっている（本研究のうち、(1)(2)(4)でもハバード模型を用いている）。同時期にフェルミ原子の金属・絶縁体転移も観測された。このような背景のもと、銅酸化物にモット絶縁体に電荷をドーピングすることで得られる高温超伝導体など、固体の多体現象のシミュレーターとしての期待も光格子系に対して高まってきた。フェルミ原子の超流動に関して述べれば、上下スピン（正確にはスピン自由度の役割を果たす量子数であればよい）の密度の異なる原子気体において、いわゆるFFLO状態の実験も始まった。

2. 研究の目的

このような背景のもとで我々は、本研究期間において、さまざまな多体効果、しかも従来の固体では実現が難しい（あるいは効果があってもそのように断定できる状況になるとは思いにくい）ために、理論的に余り研究されて来なかった超流動（広義には超流動相関）あるいはモット絶縁体転移における以下の問題に注目して、新しい現象・効果の探索を目指した。一方で、光格子にはその外部に調和振動子型のトラップポテンシャルも存在しているので、その効果についても研究していくことにした。

(1) スピン $S=1$ をもったボーズ原子の超流動 - モット絶縁体転移における磁場効果

ハバード模型上でのスピンをもったボーズ原子の超流動 - モット絶縁体転移については、一次転移と二次転移が相図上で共存することが我々のガッツウィラー近似を用いた

研究で分かっている。本研究では実験に存在する微弱磁場あるいは、外部から意図的に掛けることができる磁場の効果がどのように相転移、特にその次数に影響を及ぼすかを調べるのが目的であった。特に以前、摂動的平均場近似による先行研究がなされたが、例えば磁場を有限の値からゼロに近づける極限と、最初から磁場をゼロと仮定したときの相境界が異なるなど、磁場の関数として不連続な相境界曲線が得られていた。この検証も本研究の目的の一つであった。なお、本研究は早稲田大学上出健二助教、栗原進教授、NTT物性基礎研山下眞主任研究員との共同研究である。

(2) フェルミ原子系の金属 - 絶縁体転移における調和振動子型トラップの効果

フェルミ原子の絶縁体転移については、調和振動子型のトラップがない固体中においては極めて多くの研究がなされている。本研究では固体中の実験には原理的に存在しない一方で、光格子には不可避に存在する調和振動子ポテンシャルの効果についてハバード模型をもとに明らかにすることを目的とし、特に最近のKohlらの実験（PRL04 080403）の再現を意識した。なお、本研究はNTT物性基礎研山下眞氏、M.W.Jack氏、大阪大学川上則雄氏との共同研究である。

(3) 一次元フェルミ系におけるフリーデル散乱の効果

一次元フェルミ粒子系は朝永-Luttinger流体で記述されることが知られている。この朝永-Luttinger流体中に不純物を埋め込んだ系ではその不純物ポテンシャルについての粒子間相互作用による繰り込み効果が以前から研究されており、大まかに言えば、超流動状態に相当する引力的な粒子間相互作用の場合は、不純物散乱（フリーデル散乱ともいう）は抑えられ、斥力的な相互作用の場合は、不純物散乱は逆に強められることが分かっており、その効果は、半導体やカーボンナノチューブの実験で確認されている。一方、光格子中のようなより精密な実験ができる系では、先行研究で無視されていた不純物散乱による粒子間相互作用の繰り込みの効果も見られるはずであり、また、純粹に理論的な観点からも不純物からの相互作用の繰り込みを含んでこそ真の結果が得られるはずで、これを本研究の目的とした。なお、本研究は早稲田大学上出健二助教、栗原進教授との共同研究である。

(4) 2次元フェルミ系のFFLO状態

FFLO状態とは、上下のスピンの密度が異な

る系での運動量をもった電子対から成る超流動状態のことである。1次元のハバード模型では密度行列繰り込み群法などでほぼ厳密な数値解析が行われており、平均場近似の予想を超える非常に広範なパラメータの範囲で FFLO 相関が強められていることが分かっている。一方、3次元系では平均場近似が良い近似であると思われるが、それが予想する FFLO のパラメータ範囲は広くない。そこで両者の中間の2次元系が1次元と3次元のどちらに近いのか、あるいはいずれとも異なるのかが重要な問題となっており、本研究で明らかにしたい問題である。なお、本研究は電気通信大黒木和彦教授との共同研究である。

3. 研究の方法

(1) スピン $S=1$ をもったボーズ原子の超流動 - モット絶縁体転移における磁場効果

本研究ではグッツウィラー近似を用いる。グッツウィラー近似とは系全体の波動関数を各格子点上の変分波動関数の直積として記述する近似である。グッツウィラー近似は本質的にいわゆる平均場近似と同等であるが、波動関数に起点をおいているため、結果の解釈が容易な点に特長がある。なお、3次元などの高次元で良い近似であることが期待され、また無限大次元では厳密な結果を与える。

(2) フェルミ原子系の金属 - 絶縁体転移における調和振動子型トラップの効果

やはり(1)と同様にグッツウィラー近似を用いるが、一要系でないため、格子点に依存した変分波動関数が必要になり、通常の方法では関数の最適化は難しい。そこで本研究では共同研究者のNTT山下氏が開発した虚時間での時間発展方程式を利用した。

(3) 一次元フェルミ系におけるフリーデル散乱の効果

一般に一次元フェルミ系では、長波長の量子揺らぎのために長距離秩序が存在せず、相互作用の取り扱いには常に対数発散の困難を伴う。今回は Yue et al. PRB (1993) によって開発された実空間での1体グリーン関数を用いた繰り込みの手法を、2体グリーン関数に拡張して用いることでその問題に対処した。我々の手法は、他の多くの論文に見受けられるように、まずフェルミ粒子系を相互作用を含めて対角化して朝永 Luttinger 流体で表してから、不純物ポテンシャルの粒子間相互作用による繰り込みを考えるのではなく、まず自由電子気体から出発し、不純物によるフリ

ーデル散乱を位相シフトの形で取り込み、その後、位相シフトと、粒子間相互作用を同レベルで取り扱い、繰り込み方程式を得る枠組みになっている点に大きな特長がある。

(4) 2次元フェルミ系の FFLO 状態

2次元ハバード模型を仮定し、有限温度の量子モンテカルロシミュレーションを用いて出来るだけ大きな有限系（実際の計算は $16 \times 16=256$ 格子）で解析している。温度を徐々に下げつつ計算を行い、概そうによって基底状態の超流動相関の推測を行っていく。

4. 研究成果

(1) スピン $S=1$ をもったボーズ原子の超流動 - モット絶縁体転移における磁場効果

先行研究では、磁場を有限の値からゼロに近づける極限と、最初から磁場をゼロと仮定したときの相境界が異なるなど、磁場の関数として不連続な相境界曲線が得られていた。我々の新しい解析との比較で、これは、先行研究が粒子の格子点間のホッピングを摂動で扱っていたため、2次の転移しか扱えないことに起因していることが分かった。一方我々の解析法は、ホッピング摂動を超えて直接扱えるため、転移の次数を仮定せずに行うことが出来る。実際に相境界の多くの場所で1次転移が生じることが分かり、磁場の関数として連続的なより自然な相境界曲線が得られた。また超流動相が先行研究よりかなり広範な領域でモット絶縁体より安定な基底状態となることも分かった。さらに、磁場を変化させて相境界曲線を見た際に、同一の原子数を持ち、スピンの2だけ異なる2つのモット絶縁体状態が縮退する磁場の周りで、一次相転移に起因した鋭いカスプ構造が現れることが分かった。さらに超流動相が、モット絶縁体相に若干の超流動成分を加えることによって得られる“摂動的”超流動相と、異なる状態を多くコヒーレントに重ね合わせてつくられ、特定の原子数・スピン確定状態を多く含むことのない、“非摂動的”超流動相の二種類に分けられることが分かった。これらの研究は論文番号 1.2. において発表されている。

(2) フェルミ原子系の金属 - 絶縁体転移における調和振動子型トラップの効果

我々は KohI らの実験(PRL94, 080403(2005))と同じパラメータを用いてまず計算を行った。その結果、相互作用がない場合には、サイトでの粒子数が2の平坦な密度分布が得

られた。これは基底状態が相互作用に起因したモットの絶縁体ではなく、バンド的な絶縁体になっていることを示していて、明らかに Kohi らの結果と一致している。また、(相互作用を変化させる)Feshbach 共鳴を用いないもともとの原子間の散乱長を用いて計算したときは、相互作用のための避け合いが起こり密度が低くなった。また中央の金属相とその周りのサイト当たりの粒子数 1 のモット絶縁体相が共存していることが分かった。この結果は学会発表番号 1.において発表されている。

(3) 一次元フェルミ系におけるフリーデル散乱の効果

相互作用に関して摂動的な繰り込み群方程式を立てることに成功した。Yue らによる先行研究の Yue らの計算は相互作用に関して 2 次までであったが、2 体グリーン関数を用いた新しい手法によって 3 次までの繰り込み方程式を立てることができた。我々の結果は 2 次までの範囲では Yue らの計算と完全に同等で、当然ながらボゾン化の手法を用いたその他の計算結果とも矛盾がない。しかしながら、3 次まで考慮すると従来考えられていなかった不純物による相互作用、ひいては朝永-Luttinger 流体の臨界指数への繰り込みという新しい効果が得られた。厳密には本研究の結果は、不純物散乱が有効な不純物から距離 $h\nu/kT$ (ここで h はプランク定数、 ν はフェルミ速度、 k はボルツマン定数、 T は温度)程度の系の有限な領域でのみ正当化されるといふべきであるかも知れないが、少なくともその範囲においては、バルクの量である臨界指数が局所的な量である不純物散乱によって変化を受けるといふ物性基礎論として興味深い結果を与えており、大変興味深い。この結果は学会発表 2.3.において発表されている。(論文執筆も準備中である。)

(4) 2 次元フェルミ系の FFLO 状態

本研究は現在も遂行中である。2 次元ハバード模型について、量子モンテカルロ法によるシミュレーションを行っており、現状までの結果は、1 次元と 3 次元の中間に位置するようなある程度のパラメータの範囲で FFLO 状態に対応した超伝導相関が強められることを見出している。しかしながら、現状ではまだ有限サイズ効果(数値計算上、計算時間のためにやむを得ず有限の大きさの系を扱っているために生じてしまう本来計算したい無限の大きさの系との差のこと)が大きく、上記の結果について確信の持てる状態にはない。

現在は 2 次元系で得られている結果が正

しいかどうかを検証するため、比較の対象として、長さが十分とれ、波数の離散性が抑えられる 1 次元系のシミュレーションも並行して行っている。

5 . 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

〔雑誌論文〕(計 2 件)

1.“Superfluid-Mott Insulator transition of spin-1 bosons in optical lattice under magnetic field”

Takashi Kimura, Shunji Tsuchiya, Makoto Yamashita, Susumu Kurihara

Journal of the Physical Society of Japan,
vol 75, 074601(11pages), 2006. (査読有)

2. “Gutzwiller Study of Spin-1 Bosons in an Optical Lattice under a Magnetic Field”,

Takashi Kimura, Shunji Tsuchiya, Makoto Yamashita, Susumu Kurihara,

The International Journal of the Laser Physics,
vol 17, p54-59 (2007). (査読有)

〔学会発表〕(計 3 件)

1. 「Gutzwiller 近似による 3 次元光格子フェルミ原子気体の解析」

山下真、M.W. Jack、木村敬、川上則雄

第 62 回日本物理学会年会(2007 年 9 月 21 日)。

2. “Luttinger Liquid Renormalized by a Single Impurity”,

Kenji Kamide, Takashi Kimura, Susumu Kurihara,
25th International Conference on Low Temperature Physics (LT—25), Amsterdam
(2008 年 8 月 20 日)。

3. 「一次元電子系における Friedel 散乱による相互作用補正」

上出健二、栗原進、木村敬

第 64 回日本物理学会年会(2009 年 3 月 27 日)。

6 . 研究組織

(1)研究代表者

木村 敬 (KIMURA TAKASHI)

神奈川大学・理学部・准教授

研究者番号 30386809

(2)研究分担者

(3)連携研究者