

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成 25 年 6 月 6 日現在

機関番号： 12601
 研究種目： 基盤研究（B）
 研究期間： 2010 年 ～ 2012 年
 課題番号： 22340111
 研究課題名（和文） 光格子における新しい量子相の大規模数値計算による探索
 研究課題名（英文） Exploring New Quantum Phases in Optical Lattice with Numerical Calculation
 研究代表者
 川島 直輝（KAWASHIMA NAOKI）
 東京大学・物性研究所・教授
 研究者番号： 30242093

研究成果の概要（和文）： 光格子において実現されてる様々な量子相に関して、量子モンテカルロ法による数値シミュレーションを利用して、その実現可能性や基本的な性質を解明した。例えば、空間並進対称性とゲージ対称性がともに自発的にやぶれるとされる、超流動固体について、その実現条件を明らかにした。

研究成果の概要（英文）： We studied various quantum phases potentially realizable in cold atoms in optical lattices to clarify their feasibility and basic properties. For example, we investigated super-solid state, in which the lattice translation and gauge symmetries are both broken at the same time, we obtained the conditions of their occurrence.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2010 年度	6,100,000	1,830,000	7,930,000
2011 年度	4,500,000	1,350,000	5,850,000
2012 年度	1,200,000	360,000	1,560,000
総計	11,800,000	3,540,000	15,340,000

研究分野： 数物系科学

科研費の分科・細目： 物理学・数理物理・物性基礎

キーワード： 光格子・量子モンテカルロ・統計力学・ボーズ凝縮・超流動

1. 研究開始当初の背景

極低温原子系の実験に即応した大規模数値計算は光格子系で実現される多くの興味深い現象を理解するためだけでなく、光格子系を『理想の実験場』として整備する大きな潮流に欠くべからざる要素であり、これを通じて、従来未解決であった物性理論上の数々の難問の解決につながるものである。

とくに注目されているのは、新しい量子状態の実現であり、その代表例は、超流動固体状態やトポロジカルに特徴づけられる量子相である。現実的な連続空間における超流動

固体の存在については、いまだに確定的な結論がでていないが、周期的なポテンシャルのもとでの超流動固体状態については、その存在が確立されており、そのような場合のボーズガス系の研究は近年さかんに行われている。その理由は周期的ポテンシャルのもとでの超流動固体状態が連続空間系での超流動固体に関して、そのあるべき性質への予見を与えるだけでなく、光格子系や磁性体などにおいて、本質的に同等の現象が実現されている、あるいは実現されると期待されるからである。

これは方法論的にも挑戦的な課題であり、従来の量子モンテカルロ法の並列化や、従来の方法では扱えなかったケースを解くためのテンソルネットワーク法に代表される新しい手法の確立が必要である。

2. 研究の目的

光格子系を通じて実現される新しい量子相を大規模数値計算によって解明、探索することが本課題の主要な目的である。具体的な課題として次の3つを考える。

(1) ボーズ系の新しい現象（対超流動相、整合的占有率における超流動固体相、など）の解明、とくに、量子モンテカルロ法による数値シミュレーションを利用して、空間並進対称性とゲージ対称性がともに自発的にやぶれるとされる、超流動固体について、その実現条件を明らかにする。

(2) 光格子で近い将来実現可能な有効スピンモデルで期待される新しい量子相転移（ネール相と磁気4重極相の間の脱閉じ込め転移など）の解明。

(3) テンソル積ネットワーク法の改良とそれを用いた量子多体系の研究。

3. 研究の方法

上記、研究目的(1)については、われわれは、周期ポテンシャル、とくに格子上で定義されたボーズ粒子系に関する、量子モンテカルロ法のコンピュータシミュレーションプログラムを開発し、これを物性研究所など共同利用スーパーコンピュータ上で走らせた。また、光格子系では重要となる長距離相互作用の効果を調べるため、双極子相互作用する2次元の格子系についてハードコア条件下、かつ双極子が2次元面に平行な場合についての計算を行った。また、3次元のソフトコア条件下での計算も行った。さらにこの計算を2次元の系にも拡張した。

研究目的(2)については、有効スピンモデルで期待される新しい量子相転移に関しては、ループ更新アルゴリズムに基づく量子モンテカルロ法のプログラムを大規模並列実行用に改良し、これを物性研究所など共同利用スーパーコンピュータ上で走らせた。これによって、モット相から空間回転対称性や並進対称性が破れた相への転移において、脱閉じ込め転移の機構が成立しているかどうかの検証を行った。そのために、SU(N)ハイゼンベルクモデルに関して格子形状を正方格子だけでなく蜂の巣格子やゆがんだ正方格子などの場合についての計算を行った。

(3)のテンソル積ネットワーク法に関しては、この方法による計算手法を確立し、フラストレート系に適用可能な段階に進めた。とくにネットワークが階層構造を持っている

場合について、これに基づく計算プログラムを開発し、幾つかの問題に適用した。

4. 研究成果

研究目的(1)のボーズ系に関しては、多成分ボーズ系の大規模計算からは、ペア超流動状態や超対流動状態に関する相図を得た。さらに、ソフトコア系や双極子相互作用系の基底状態において、それらの効果が本質的な役割を果たしていると思われる超流動固体相などの様々な相があることを発見した。例えば、双極子相互作用する2次元の格子系ハードコア条件下、かつ双極子が2次元面に平行な場合では、そのような系がストライプ的な空間構造を示すことを示した。また、ストライプ相と超流動相の間に圧縮率の非常に小さな相を発見した。3次元ソフトコア条件化では、従来のコンピュータシミュレーションでは見出されていなかった充填率がちょうど $1/2$ のときの超流動固体相が存在することを発見した。このことは、超流動固体が固体形成成分と、超流動形成成分の2成分からなるという単純な理解では十分に把握されないことを示している。さらに2次元系に対する計算からは、より量子揺らぎの効果が大きく超流動固体相の存在が観測しにくい2次元的な場合についても、やはり整合的充填率での超流動固体が存在しうることが立証された。

研究目的(2)については、有効スピンモデルで期待される新しい量子相転移に関しては、ループ更新アルゴリズムに基づく量子モンテカルロ法を実行し、モット相から空間回転対称性や並進対称性が破れた相への転移において、脱閉じ込め転移の機構が成立しているかどうかの検証を行った。そのために、SU(N)ハイゼンベルクモデルに関して格子形状を正方格子だけでなく蜂の巣格子やゆがんだ正方格子などの場合についての計算を行った。格子形状の変形にもなって、VBS相の対称性が変わることになり、一般的には臨界特性が変化することが期待されるが、実際にそのようなことが起こるのかどうかを検証する。更に、中距離相互作用を導入して、Nが大きい場合の脱閉じ込め臨界現象を評価し、 $1/N$ 展開の理論予測との比較を行った結果、この理論予測と計算結果が定量的に一致した。このことは、脱閉じ込め転移機構による転移が存在することを強く示唆している。

研究目的(3)については、三角格子ハイゼンベルクモデルやJ1-J2モデルなどフラストレート量子スピン系に対してテンソルネットワーク法を適用し、非整合スピン状態相などの存在を示唆する結果を得た。

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 23 件)

- (1) Takahiro Ohgoe, Takafumi Suzuki, and Naoki Kawashima: Ground-state phase diagram of the two-dimensional extended Bose-Hubbard model, Phys. Rev. B 86, [査読有] 054520 (9pages) (2012)
DOI:10.1103/PhysRevB.86.054520
- (2) Takahiro Ohgoe, Takafumi Suzuki, and Naoki Kawashima: Quantum phases of hard-core bosons on two-dimensional lattices with anisotropic dipole-dipole interaction, Phys. Rev. A 86, [査読有]063635 (6pages) (2012)
DOI: 10.1103/PhysRevA.86.063635
- (3) Toshihiro Sato, Yasuyuki Kato, Takafumi Suzuki, and Naoki Kawashima: Validity of projected Gross-Pitaevskii simulation: Comparison with quantum Monte Carlo, Phys. Rev. E 85, [査読有] 050105(R) (1-4) (2012)
DOI:10.1103/PhysRevE.85.050105
- (4) T. Ohgoe, T. Suzuki, and N. Kawashima: Commensurate supersolid of three-dimensional lattice bosons, Phys. Rev. Lett. 108, [査読有] 185302 (1-4) (2012)
DOI:10.1103/PhysRevLett.108.185302
- (5) J. Lou, S. Tanaka, H. Katsura and N. Kawashima: Entanglement spectra of the two-dimensional Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki model: Correspondence between the valence-bond-solid state and conformal field theory, Phys. Rev. B84, [査読有]245128 (9 pages) (2011)
DOI:10.1103/PhysRevB.84.245128
- (6) R. Tamura and N. Kawashima: First-Order Phase Transition with Breaking of Lattice Rotation Symmetry in Continuous-Spin Model on Triangular Lattice, Journal of the Physical Society of Japan 80, [査読有]074008 (1-10) (2011)
DOI: 10.1143/JPSJ.80.074008
- (7) R. Tamura, N. Kawashima, T. Yamamoto, Cedric Tassel, and Hiroshi Kageyama: Random Fan-Out State Induced by Site-Random Interlayer Couplings, Physical Review B 84, [査読有]214408 (1-11) (2011)
DOI:10.1103/PhysRevB.84.214408
- (8) R. Ishii, S. Tanaka, K. Onuma, Y. Nambu, M. Tokunaga, T. Sakakibara, N. Kawashima, Y. Maeno, C. Broholm, D. P. Gautreaux, J. Y. Chan, S. Nakatsuji: Successive phase transitions and phase diagrams for the quasi-two-dimensional easy-axis triangular antiferromagnet Rb4Mn(MoO4)3, Europhys. Lett. 94, [査読有]17001(1-5) (2011)
<http://dx.doi.org/10.1209/0295-5075/94/17001>
- (9) T. Ohgoe, T. Suzuki, and N. Kawashima: Novel Mechanism of Supersolid of Ultracold Polar Molecules in Optical Lattices, J. Phys. Soc. Jpn. 80, [査読有]113001 (4 pages) (2011)
DOI: 10.1143/JPSJ.80.113001
- (10) T. Ohgoe and N. Kawashima: Quantum Monte Carlo method for pairing phenomena: Supercounterfluid of two-species Bose gases in optical lattices, Phys. Rev. A 83, [査読有]023622 (1-4) (2011)
DOI:10.1103/PhysRevA.83.023622
- (11) Y. Kamiya, N. Kawashima, and C. D. Batista: Dimensional crossover in the quasi-two-dimensional Ising-0(3) model, Phys. Rev. B 84, [査読有] 214429 (1-12) (2011)
DOI:10.1103/PhysRevB.84.214429
- (12) Y. Tomita and N. Kawashima: Critical and Glassy Phases in Non-Disordered Antiferromagnetic Heisenberg Model on Triangular Lattice, J. Phys. Soc. Jpn. 80, [査読有]054001 (5 pages) (2011)
DOI: 10.1143/JPSJ.80.054001
- (13) Hosho Katsura, Naoki Kawashima, Anatol N. Kirillov, Vladimir E. Korepin, Shu Tanaka: Entanglement in valence-bond-solid states on symmetric graphs, Journal of Physics A 43, [査読有]255303 (28 pages) (2010)
DOI:10.1103/PhysRevLett.93.227203
- (14) Y. Kamiya, N. Kawashima, C. D. Batista: Crossover behavior from decoupled criticality, Phys. Rev. B 82, [査読有]054426 (1-4) (2010)
DOI:10.1103/PhysRevB.82.054426
- (15) T. Sato, T. Suzuki and N. Kawashima: Universal characteristics of nonuniform quasi-two-dimensional cold atom systems, Phys. Rev. A 81, [査読有]025601(1-4) (2010)
DOI:10.1103/PhysRevA.81.025601

[学会発表] (計 59 件)

- (1) Naoki Kawashima: Superfluidity and Supersolidity of Lattice Models, CQDC12, Oct. 30 (2012) Juelich, Germany
- (2) Naoki Kawashima: Quantum Monte Carlo Simulation of Deconfined Critical Phenomena, CCP2012, Oct. 17 (2012) Kobe, Japan
- (3) 大越孝洋, 鈴木隆史, 川島直輝: 双極子相互作用するボーズ粒子系における三回有限温度転移を伴う超固体, 日本物理学会 2012 年秋季大会, 9 月 18 日 (2012) 横浜国立大学
- (4) Naoki Kawashima: Superfluidity and Supersolidity of Lattice Models, Supersolidity in Nature, Jun. 11 (2012) RIKEN, Wako, Japan
- (5) Naoki Kawashima: Quantum Monte Carlo study of SU(N) J-Q models Impurities and Textures in Unconventional Magnets, Apr. 02 (2012) MPIPKS, Dresden, Germany
- (6) Naoki Kawashima, Yoshitomo Kamiya and Cristian Batista Dimensional crossover in the quasi-two-dimensional Ising-0(3) model, APS March Meeting Mar. 01 (2012) Boston. USA
- (7) K. Harada and N. Kawashima: MERA Study of Spatially Anisotropic Triangular Antiferromagnets, APS March Meeting 02. 29 2012 Boston. USA
- (8) Eric Duchon, Yasuyuki Kato, Naoki Kawashima and Nandini Trivedi: Probing Phases and Quantum Criticality using Deviations from the Local Fluctuation- Dissipation Theorem, APS March Meeting, Feb. 28 (2012) Boston. USA
- (9) Naoki Kawashima: Quantum Monte Carlo and Non-Ginzburg-Landau Type Phase Transition, NTU Colloquium, 12. 27 (2011) NTU, Taipei
- (10) Naoki Kawashima: Quantum Monte Carlo simulation on SU(N) Heisenberg model, SMQS-IP2011, 12. 18, (2011) Juelich .Germany
- (11) T. Ohgoe, T. Suzuki, and N. Kawashima: Supersolid Mechanism of Dipolar Bosons and Double Peak Structure in Momentum Distribution, 26th International Conference on Low Temperature Physics (Beijing, China), 08. 12 (2011) Beijing, China
- (12) Naoki Kawashima: Monte Carlo Simulations on Deconfined Critical

Phenomena, ICTP Workshop on Synergies between Field Theory and Exact Computational Methods in Strongly Correlated Quantum Matter, July 25 (2011) ICTP, Trieste, Italy

- (13) Naoki Kawashima: Mixed State and Novel Transitions in Quasi-2D Frustrated Magnets, International Workshop on Recent Developments of Studies on Phase Transitions 06. 09 (2011) Hongo, Tokyo
- (14) Naoki Kawashima: Mixed State and Novel Transitions in Quasi-2D Frustrated Magnets, CIFAR-MEXT Meeting (Coast Plaza Hotel, Vancouver) 05. 31 (2011) Coast Plaza Hotel, Vancouver. Canada
- (15) 桂法称, 田中宗, 川島直輝, Anatol N. Kirillov, Vladimir E. Korepin: 二次元 VBS 状態におけるエンタングルメント エントロピー II, 日本物理学会 2010 年秋季大会, 9 月 25 日 (2010) 大阪府立大

[その他]
ホームページ等
<http://kawashima.issp.u-tokyo.ac.jp/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

川島 直輝 (KAWASHIMA NAOKI)
東京大学・物性研究所・教授
研究者番号: 30242093

(2) 研究分担者

該当なし

(3) 連携研究者

原田 健自 (HARADA KENJI)
京都大学・情報学研究所・助教
研究者番号: 80303882
鈴木 隆史 (SUZUKI TAKAFUMI)
兵庫県立大学・工学部・准教授
研究者番号: 40444096
富田 裕介 (TOMITA YUSUKE)
芝浦工業大学・共通学群・准教授
研究者番号: 50361663

(4) 研究協力者

田中 宗 (TANAKA SHU)
東京大学・理学系研究科・特別研究員
研究者番号: 40507836