

平成 30 年 6 月 10 日現在

機関番号：32601

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2014～2017

課題番号：26800200

研究課題名(和文) 新奇フラストレート格子多体系の量子相転移の研究

研究課題名(英文) Quantum Phase Transitions in Novel Frustrated Lattice Systems

研究代表者

山本 大輔 (Yamamoto, Daisuke)

青山学院大学・理工学部・助教

研究者番号：80603505

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,000,000円

研究成果の概要(和文)：量子反強磁性体や光格子中の冷却原子気体などの様々なフラストレート量子多体系の物理を理論的に解明、開拓した。特に新たに確立した手法「数値クラスター平均場+スケーリング法」を活用することで、これまで困難であったフラストレート反強磁性体に対する実験計測と定量的に比較可能な理論解析に成功した。また、近年作成された人工的なスピン軌道相互作用を有するBose原子気体系を念頭に、光格子中量子シミュレーションの基盤となる理論モデルを構築し、その豊富な基底状態物性を明らかにした。

研究成果の概要(英文)：We theoretically investigated the physics of frustrated many-body systems including quantum antiferromagnets and cold atomic gases in an optical lattice. Using the numerical cluster mean-field plus scaling method, we succeeded in a quantitative, microscopic analysis that can be directly compared with experimental measurements for frustrated antiferromagnets. Furthermore, motivated by the recent realization of synthetic spin-orbit coupling in cold-atom systems, we explored new theoretical models that can be created by the latest techniques, and especially, revealed a rich variety of ground-state properties of spin-orbit-coupled Bose gases in a two-dimensional optical lattice.

研究分野：量子物性理論

キーワード：磁性 冷却原子 フラストレーション 物性理論

1. 研究開始当初の背景

(1) 相関する多体系の物理において粒子間相互作用と結晶格子の形状が不整合な場合、低エネルギー領域に無数の準縮退状態が存在する。これはフラストレーションとして知られている。このような場合に「どのような基底状態が選ばれるか」は現代物性物理学の大きな関心事のひとつであり、何らかの秩序相が選ばれる場合 (order-by-disorder 機構) やスピン液体などの新奇な無秩序状態が現れることが示唆されている。しかしながら、フラストレート系の奇妙な物性の理解のためにはいくつかの困難がある。まず、実験的に理想的な量子フラストレート格子系を作成することが難しいという点である。例えば単純な三角格子磁性体の場合でも、結晶構造が歪んでしまったり不必要な相互作用が入ってしまったりする。さらに、理論模型の広いパラメータ空間全域にわたって量子相を特定できるような信頼できる数値計算手法が存在しない。従来のスピン系や Bose 粒子系の解析では量子モンテカルロ法がその役目を担っていた。しかしフラストレート系には「負符号問題」と呼ばれる特有の困難さがあり、この量子モンテカルロ法が適用できない。

(2) 近年、日本や米国などの実験グループによって有効 $S=1/2$ スピンを持つ理想的な (格子歪みの無い) 三角格子反強磁性体 $\text{Ba}_3\text{CoSb}_2\text{O}_9$ の合成および物性測定が行われている。その磁化過程には、これまでの理論解析からは予想できない新たな相転移を示唆する磁化異常が観測され、フラストレート系の多彩な可能性を再認識させた。我々は既に三角格子上の反強磁性スピン模型の量子相図をスピン空間異方性と縦磁場の全域にわたって明らかにし、古典近似では得られない新しい相 (π -coplanar 相) の出現を理論的に予言している。一方、実験における興味深い磁気異常は、縦磁場の場合ではなくスピン空間異方軸と直交する横磁場の場合に観測されている。

2. 研究の目的

(1) 横磁場の場合の三角格子スピン-1/2 XXZ 模型の異方性-磁場面量子相図を明らかにする。横磁場の場合は磁場方向のスピン保存則すら存在しないため、厳密対角化などの手法にとっては非常に困難な問題となる。また、古典近似ではこの模型の基底状態はフラストレーションにより連続的に縮退してしまっており、さらに異方性や横磁場が存在しても解消されない。したがって量子揺らぎを入れて縮退が解けた後の結果の相図は完全に未知である。三角格子反強磁性体 $\text{Ba}_3\text{CoSb}_2\text{O}_9$ で観測された磁気異常の原因としては、弱い層間相互作用による 3 次元性に起因するスピンのスタッキング構造相転移が考えられる。そこで弱い層間相互作用を模

型に加え、実験の磁気異常が層内の相転移に起因するものか、もしくは 3 次元的なスタッキング転移に対応するものかを徹視的に明らかにする。

(2) フラストレートした光格子中の冷却原子気体系における新奇量子相を探索する。本研究では「伝統的な」量子スピン系での問題と異なり、これまでの固体材料に対する研究では考えられてこなかった新しい模型を扱う。冷却原子系のフラストレーションは、ごく最近三角光格子に充填した Rb 原子 (Bose 粒子) に周期的振動外場を与えることで実現された。そこで、この最新技術で実現可能なフラストレート光格子中の負値のホッピングを持つ強相関 Bose 粒子系の量子的基底状態を明らかにする。

(3) 光格子中に充填した 2 種 Bose 原子混合気体の系を調べる。近年、アメリカの実験グループによって疑似的なスピン-軌道相互作用を導入することができるようになったこの実験系の相転移現象は、(1) に記述したフラストレート磁性体と共通の有効模型で一般的に記述されるという点で数学的な共通性がある。一見まったく異なる 2 つの系の根底にある数学的共通性を明らかにすることで、これらの系の相転移現象に関する深い理解を得る。

3. 研究の方法

量子フラストレート系の理論解析には、1 次元系や対称性の高い特殊な場合などを除いては何らかの大胆な近似を用いざるを得なかった。近年我々は、大規模厳密対角化に平均場境界条件を課すことで有限サイズ効果を排除し、さらに独自のスケールリング法と組み合わせることで高精度な量子相図を描くという手法を確立した (CMF+S 法) [①]。この手法を用いることでフラストレート模型の広いパラメータ領域にわたる定量的な基底状態相図を描く。また、飽和磁場近傍の極限では従来の周期境界条件での厳密対角化が有効であるため、これを併用する。

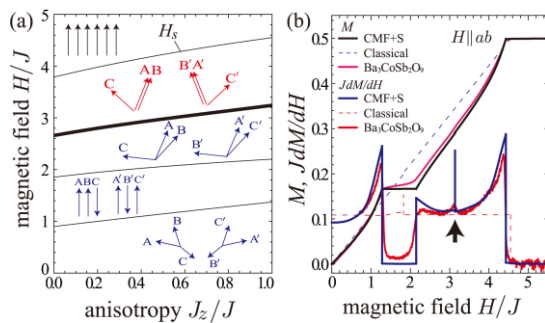
光格子中の Bose 原子気体系に対しては弱相関領域では Bogoliubov 近似を、強相関領域では Mott 絶縁体相の定性的な記述を可能にする Gutzwiller 近似を用いる。これらの近似は波数空間もしくは実空間での有効一体問題を考える平均場近似の一種であるため、揺らぎ効果をより定量的に記述するために平均場の周りの揺らぎを系統的に取り込む手法を確立する。

<引用文献>

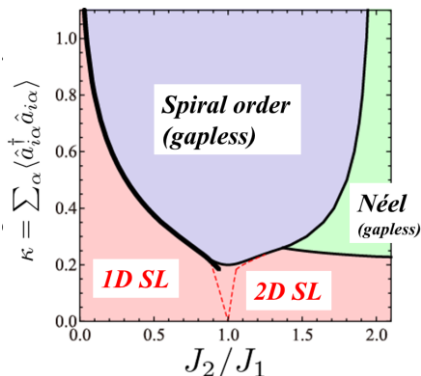
① [Daisuke Yamamoto](#), Giacomo Marmorini, and Ipeei Danshita, Quantum Phase Diagram of the Triangular-Lattice XXZ Model in a Magnetic Field, *Physical Review Letters* **112**, 127203 (2014).

4. 研究成果

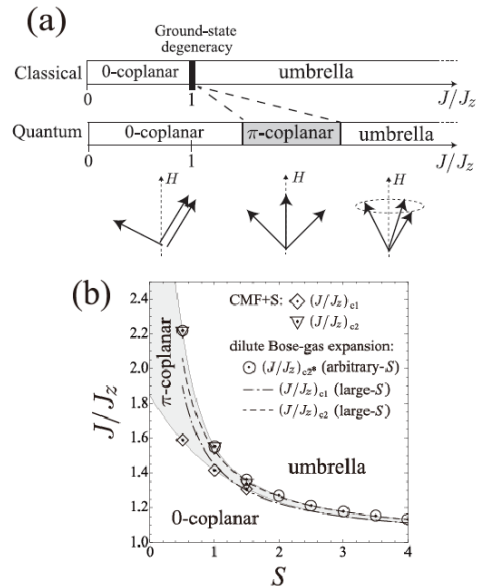
(1) 層状三角格子磁性体 $\text{Ba}_3\text{CoSb}_2\text{O}_9$ に焦点を当て、理論的側面からその特徴的な磁化過程を説明した。最も興味深い点は、三角格子面内に磁場を加えた際に良く知られた磁化 $1/3$ プラトーに加え、飽和磁場の 7 割あたりに非自明な磁気異常が観測されたことである。我々は **CMF+S** 法による解析を横磁場の場合に拡張し、異方性と磁場の強さに対する量子磁気相図を決定した[図(a)]。さらに飽和磁場の 7 割あたりでの磁気異常の原因が現実の物質に存在する微小な面間相互作用とフラストレーションに起因する新奇な量子一次相転移であることを明らかにした。微視的模型解析から得られた理論磁化曲線は、磁気異常の起こる磁場の強さも含めて実験データと定量的に良く一致する[図(b)]。さらに議論をより一般化し、擬2次元物質の理論的考察では通常無視されることの多い非常に小さな面間相互作用が、多数の秩序状態がエネルギー的に拮抗するフラストレート系においては基底状態決定に本質的な役割を果たし得ることを示した。



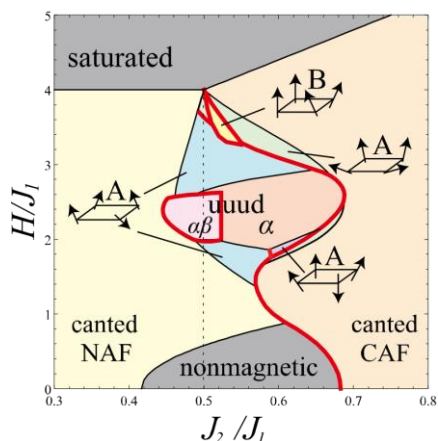
(2) 三角光格子に充填した Bose 原子気体に周期的振動外場を与えた系における人工スピン液体相の実現に向けた理論解析を行った。周期的振動外場によって負値のホッピングを持つフラストレート Bose 粒子多体系が実現する。ここで Bose 粒子の局所的な Fock 状態のうち近接する2つを量子スピンと見立てることで、フラストレート磁性体の量子シミュレーションが可能になる。系を記述する数理模型に対して **Schwinger-boson** 表示を適用し、スパイラル磁気秩序・反強磁性秩序・スピン液体 (SL) を含む基底状態相図を描いた[図]。本成果は将来の量子シミュレーションの重要なガイドマップとなる。



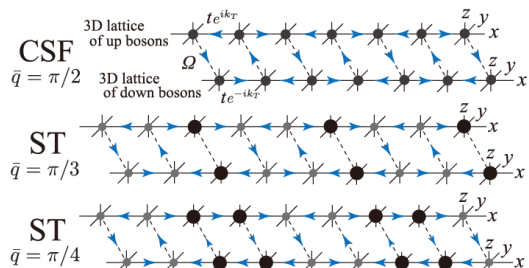
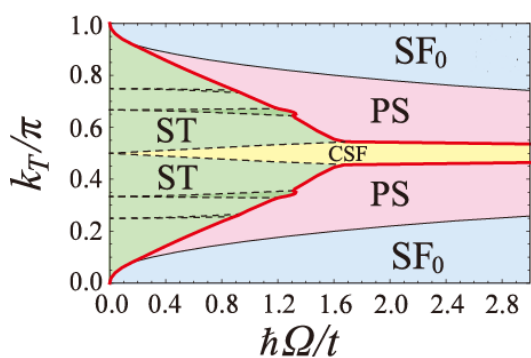
(3) 我々の過去の研究により、**XXZ** 異方性を持つ $S=1/2$ 三角格子量子反強磁性体の強磁場領域では、量子揺らぎの効果によって古典模型には存在しない磁気状態 (π -coplanar 相) が現れることが示唆されている[図(a)]。そこで議論を $S=1/2$ 以外の一般の S に拡張した。まずは大規模な数値厳密対角化計算を行い、この飽和磁場近傍の量子状態を熱力学極限における自発的対称性の観点から深く吟味した。また、 $S=1$ と $S=3/2$ の場合に関しても **CMF+S** を用いて π -coplanar 状態の相境界を決定し、その相境界が S が大きくなるにつれて $1/S$ 展開による近似解に自然に繋がっていくことを示した[図(b)]。これらの研究成果により π -coplanar 状態の現れる領域は S の値に依らず有限に存在し、また、 S が小さい (量子性が強い) ほど広いことが分かった。今後対応する磁性体の作成と、この新奇磁気状態の実現・観測が期待される。



(4) 正方格子上的 $S = 1/2$ J_1 - J_2 Heisenberg 模型の磁化過程を解析した。この模型は最近接相互作用 J_1 と次近接相互作用 J_2 が共に反強磁性である場合、フラストレーションの効果が強い $J_2/J_1 = 0.5$ 近傍で「量子スピン液体」状態が現れることが期待されている。一方で、この模型に磁場を印可した際にどのような磁化過程や量子相転移が現れるかという点に関してはあまり理解が進んでいない。非磁性量子状態に対する磁場効果は、強いフラストレーションに起因して一般に非自明であり、正方格子 J_1 - J_2 模型はこのような問題に対する理解を進める上で必要最小限の模型の一つである。我々は基底状態における磁化過程を詳細に調べ、磁化が飽和磁化の半分の値を取る磁化プラトーが出現する **uuud** 状態の内部で生じるスピン配置の「構造相転移」をはじめ、フラストレーション強度 J_2/J_1 および磁場強度の関数として多彩な磁気状態が現れることを示した[図]。



(5) 人工スピン軌道相互作用を印可した 2 成分混合 Bose 原子気体を用いて実現する新たな量子相を理論的に開拓した。冷却原子系に対するスピン軌道相互作用は、2011 年に NIST/JQI の Ian Spielman 実験グループによって初めて作成された。本研究では、より固体物質の状況に近い光格子による周期的な外場中での人工軌道相互作用系を考察した。Spielman グループと連携し、光格子と人工スピン相互作用の 2 つの長さスケールの競合によって生まれる新奇量子効果を実験に先駆けて理論的に予測した。カイラル超流動相 (CSF) やストライプ超流動相 (ST) などの連続対称性と離散対称性の複合的な破れを伴う量子相の出現領域を特定し、それぞれの相の性質や起源および実験同定のための特徴的な物理量を示した[図]。本研究では「正方光格子+Rashba=Dresselhaus 型スピン軌道相互作用」という最も基本的な場合を扱った。人工スピン軌道相互作用系では様々なタイプの相互作用を連続的な強度・有効距離制御の下で作成可能であるため、今後も様々な方向性の基礎研究の進展が期待される。



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 10 件)

① Daisuke Yamamoto, I. B. Spielman, and C. A. R. Sa de Melo, Quantum phases of two-component bosons with spin-orbit coupling in optical lattices, Physical Review A, 査読有, 96, 2017, 061603(R)
DOI: 10.1103/PhysRevA.96.061603

② Daisuke Yamamoto, Hiroshi Ueda, Ippei Danshita, Giacomo Marmorini, Tsutomu Momoi, and Tokuro Shimokawa, Exact diagonalization and cluster mean-field study of triangular-lattice XXZ antiferromagnets near saturation, Physical Review B, 査読有, 96, 2017, 14431
DOI: 10.1103/PhysRevB.96.014431

③ Shinpei Goto, Susumu Kurihara, and Daisuke Yamamoto, Incommensurate spiral magnetic order on anisotropic triangular lattice: Dynamical mean field study in a spin-rotating frame, Physical Review B, 査読有, 94, 2016, 245145
DOI: 10.1103/PhysRevB.94.245145

④ Giacomo Marmorini, Daisuke Yamamoto, and Ippei Danshita, Umbrella-coplanar transition in the triangular XXZ model with arbitrary spin, Physical Review B, 査読有, 93, 2016, 224402
DOI: 10.1103/PhysRevB.93.224402

⑤ Daisuke Yamamoto, Giacomo Marmorini, and Ippei Danshita, Magnetization process of spin-1/2 Heisenberg antiferromagnets on a layered triangular lattice, Journal of the Physical Society of Japan, 査読有, 85, 2015, 024706
DOI: 10.7566/JPSJ.85.024706

⑥ Keisuke Masuda and Daisuke Yamamoto, Variational cluster approach to s-wave pairing in heavy-fermion superconductors, Physical Review B, 査読有, 91, 2015, 104508
DOI: 10.1103/PhysRevB.91.104508

⑦ Hiroki Yamamura and Daisuke Yamamoto, Collective excitation and stability of flow-induced gapless Fermi superfluids, Journal of the Physical Society of Japan, 査読有, 84, 2015, 044003
DOI: 10.7566/JPSJ.84.044003

⑧ Ippei Danshita, Daisuke Yamamoto, and Yasuyuki Kato, Cubic-quintic nonlinearity in superfluid Bose-Bose mixtures in optical lattices: Heavy solitary waves, barrier-induced criticality,

and current-phase relations, *Physical Review A*, 査読有, 91, 2015, 013630
DOI: 10.1103/PhysRevA.91.013630

⑨ Daisuke Yamamoto, Giacomo Marmorini, and Ipei Danshita, Microscopic Model Calculations for the Magnetization Process of Layered Triangular-Lattice Quantum Antiferromagnets, *Physical Review Letters*, 査読有, 114, 2015, 027201
DOI: 10.1103/PhysRevLett.114.027201

⑩ Keisuke Masuda and Daisuke Yamamoto, Interorbital Cooper Pairing with s-Wave Symmetry in Heavy-Fermion Systems, *JPS Conference Proceedings*, 査読有, 3, 2014, 015024
DOI: 10.7566/JPSCP.3.015024

[学会発表] (計 20 件)

① Exploring Quantum Frustrated Magnetism with Cold-Atom Quantum Simulators, *Recent Trends in Cold and Ultracold Matter*, 2018 年 3 月, Guwahati, India

② 2 成分 Fermi 原子気体におけるフラストレート量子磁性の開拓, 日本物理学会年次大会, 2018 年 3 月, 東京理科大学

③ Interacting ultracold Bose gases with synthetic spin-orbit coupling in an optical lattice, *CREST 「量子状態の高度な制御に基づく革新的量子技術基盤の創出」第 2 回公開シンポジウム*, 2017 年 12 月, 京都大学

④ Strong Field-Induced Phase Transitions in Frustrated Quantum Magnets, *Trends in Theory of Correlated Materials*, 2017 年 9 月, Tsukuba, Japan

⑤ スピン J_1 - J_2 模型の磁化過程, 日本物理学会 2017 年秋季大会, 2017 年 9 月, 岩手大学

⑥ Quantum phases of triangular-lattice spin-S XXZ antiferromagnets near saturation, *International Conference on Low Temperature Physics*, 2017 年 8 月, Gothenburg, Sweden

⑦ 三角格子反強磁性体における希薄マグノンの Bose 凝縮と磁気秩序, 日本物理学会第 72 回年次大会, 2017 年 3 月, 大阪大学

⑧ スピン軌道相互作用する Bose 原子気体の Mott 絶縁体転移と量子相, 日本物理学会 2016 年秋季大会, 2016 年 9 月, 金沢大学

⑨ On the 0 - π transition of coplanar states in quantum triangular XXZ antiferromagnets near saturation, *The 8th International Conference on Highly Frustrated Magnetism*, 2016 年 9 月, Taipei, Taiwan

⑩ フラストレート三角格子磁性体の磁化過程と新奇量子相転移の研究, 日本物理学会第 71 回年次大会, 2016 年 3 月, 東北学院大学

⑪ フラストレート Bose-Hubbard 系の多成分 Schwinger-boson 表示と量子相, 日本物理学会 2015 年秋季大会, 2015 年 9 月, 関西大学

⑫ Schwinger-boson study of Bose gases in a shaken triangular optical lattice, *Synthetic Quantum Magnetism*, 2015 年 8-9 月, Dresden, Germany

⑬ 量子フラストレート磁性絶縁体の微視的解析と量子シミュレーション, 基研研究会『量子制御技術の発展により拓かれる量子情報の新時代』, 2015 年 7 月, 京大基研

⑭ High-Field Quantum Phase Transition Induced by Weak Three Dimensionality in Triangular-Lattice Antiferromagnets, *International Conference on Magnetism*, 2015 年 7 月, Barcelona, Spain

⑮ フラストレート Bose 原子気体の量子相, 日本物理学会第 70 回年秋季大会, 2015 年 3 月, 早稲田大学

⑯ 層状三角格子反強磁性体の量子相転移と磁化過程, 量子スピン系研究会, 2015 年 1 月, 福井大学

⑰ Frustrated Ultracold Bose Gases in a Kagome Optical Lattice, *Novel Quantum States in Condensed Matter*, 2014 年 11 月, Kyoto, Japan

⑱ フラストレートしたホッピングを持つ光格子 Bose 系における量子無秩序相の可能性, 日本物理学会 2014 年秋季大会, 2014 年 9 月, 中部大学

⑲ Quantum phase diagram of triangular-lattice antiferromagnets with XXZ anisotropy and magnetic field, *The 2014 International Conference on Highly Frustrated Magnetism*, 2014 年 7 月, Cambridge, UK

⑳ Effects of phase and amplitude fluctuations on the ground state of a frustrated Bose-Hubbard

system, Higgs modes in condensed matter and
quantum gases, 2014 年 6 月, Kyoto, Japan

[その他]

ホームページ等

[https://sites.google.com/site/daisukeya
mamoto624/home](https://sites.google.com/site/daisukeya/mamoto624/home)

6. 研究組織

(1) 研究代表者

山本 大輔 (YAMAMOTO, Daisuke)

青山学院大学・理工学部・助教

研究者番号：80603505