

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24年5月1日現在

機関番号：14031

研究種目：基盤研究（C）

研究期間：2009～2011

課題番号：21540359

研究課題名（和文） 強相関電子系のモット転移と異常量子凝縮相

研究課題名（英文） MOTT TRANSITIONS AND ANOMALOUS QUANTUM PHASES IN CORRELATED ELECTRON SYSTEMS

研究代表者

川上 則雄（KAWAKAMI NORIO）

京都大学・大学院理学研究科・教授

研究者番号：10169683

研究成果の概要（和文）：

本研究では、強相関系におけるモット転移近傍に現れる種々の異常現象の理論的な解明を行なった。強相関系として、固体電子系に限らず近年急速に研究が進展している冷却原子系も解析した。特に、多軌道電子系でのモット転移、フラストレート電子系でのモット転移、冷却フェルミ系での量子相転移とクエンチ動力学、ボーズ・フェルミ混合系での新たな多体効果などを明らかにした。

研究成果の概要（英文）：

In this research, we have clarified a variety of anomalous phenomena that emerge near the Mott transition in strongly correlated systems. We have studied not only electron systems but also cold atom systems which have been studied extensively in recent years. In particular, we have elucidated the Mott transitions in multiorbital and frustrated systems, quantum phase transitions and quench dynamics in cold Fermi systems, a new type of many-body effect in a Bose-Fermi mixture, etc.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
21年度	800,000	240,000	1040,000
22年度	500,000	150,000	500,000
23年度	500,000	150,000	500,000
総計	1800,000	240,000	2040,000

研究分野：数理系科学

科研費の分科・細目：物理学・物性II

キーワード：モット転移、量子凝縮相、光格子、フラストレーション、量子ゆらぎ、強相関

1. 研究開始当初の背景

近年、遷移金属酸化物を中心とした強相関電子系において、モット転移近傍での異常量子凝縮相に関する研究の進展がめざましい。強相関領域でモット転移が生じるとき、転移点付近で大きくなりこみ効果が生じ、これによって様々な異常物性が現れる。特に強相関効果で増幅された量子ゆらぎによって種々の量子凝縮相の競合が生じ、新奇な量子相が

実現する可能性がある。この中には、物性物理の基礎を与えるような著しい例があり、強相関系の格好の研究舞台となっている。

このように、強相関電子系のモット転移近傍では、増幅された量子ゆらぎにより、これまでになくような新奇量子相が発現する可能性がある。強相関系は、今も物性物理の最先端でかつ基本的なテーマを提供している。

2. 研究の目的

本研究は、強相関電子系におけるモット転移近傍に現れる種々の異常現象の理論的な解明を目的としている。モット転移が強相関領域で生じるとき、強相関効果で増幅された量子ゆらぎによって、種々の量子凝縮相の競合が生じる。この競合は、強相関効果や量子揺らぎ効果を直接反映したものである。このような強相関領域に現れる新奇な量子相の理論的探索も研究目標としている。研究テーマを大きく固体電子系と冷却原子系に分けて研究を展開し、これらの成果を融合することでモット転移近傍での相関効果を包括的に理解する。

3. 研究の方法

3-1 理論手法

種々の量子相が競合する強相関電子系においては、強相関効果と大きな量子揺らぎが存在し、理論的な解析を困難なものとしている。解析手法として、動的平均場近似や、これを拡張したクラスタ動的平均場近似を用いた。これと相補的に、統計手法援用型の変分モンテカルロ法、摂動クラスタ展開法なども用いた。さらに、1次元電子系に対して精度の高い密度行列繰り込み群を援用した。上記の方法にはそれぞれ得意、不得意とする部分があるので、相補的に用いることで計算手法そのものに偏らず、問題の本質を捉えた解析を行なった。

3-1 研究体制

主に京都大学大学院生と協力して研究を行った。最先端の研究の場で大学院生をトレーニングすることによって、次世代の物性理論を担える研究者の育成もめざした。ゲッチンゲン大学の Pruschke 教授のグループとは、動的平均場近似を用いた多軌道強相関系の量子相転移の共同研究を行った。また、NTT 物性科学基礎研究所の山下博士と冷却フェルミ系の相競合に関する共同研究を行った。

4. 研究成果

3年間の研究を通して、以下に記す成果が得られた。

(4-1) 光格子フェルミ粒子系の量子クエンチ動力学

冷却原子系の分野で、相互作用やポテンシャルを瞬時に変化させ、その後の時間発展を研究する「量子クエンチ」の実験に大きな進展がみられている。ここでは、フェルミ多体

系のモット相が、量子クエンチによってどのような時間発展を示すかを調べた。その結果、モット相が存在する場合、金属相と全くことなる物理量の時間発展があることを明らかにした。

(4-2) 冷却フェルミ原子系における量子相転移

冷却原子系で将来的に実現されると期待される磁気秩序状態に関する研究を行った。強磁性発現のモデルとして、フラットバンドを持つハバード模型を取り上げた。この系の相関効果を扱うため動的平均場理論と数値繰りこみ群を用いて、基底状態の性質を明らかにした。相互作用の増加に従って、弱相関のフラットバンド強磁性から強相関のハイゼンベルクフェリ磁性へとクロスオーバーが起こることを明らかにした。特に、クロスオーバー領域において磁気秩序状態が最も安定化されることを示した

(4-3) 強相関電子系におけるモット転移

フラストレーションを持つ電子系におけるモット転移を調べた。典型的な例として3角格子電子系を取り上げた。動的平均場近似と連続時間量子モンテカルロ法を組み合わせ、有限温度モット転移について詳細に調べ、異方的3角格子ではリエントラント型のモット転移が生じることを明らかにした。この結果は以前 Hirsch-Fye モンテカルロ法により得られていたものと整合しており、今回の計算で高精度の相図を確立することができた。

(4-4) 冷却フェルミ原子のクラスター衝突

冷却原子系において近年クラスター衝突の実験が注目を集めている。これに関するダイナミクスと量子効果を研究するため、1次元フェルミ粒子系の数値シミュレーションと理論解析を行った。まず、初期条件として上向き・下向きのフェルミ粒子をそれぞれ離してトラップし、その後、2つのクラスターを衝突させる。このクラスターの衝突において、上向き・下向きフェルミ粒子の反発力が強い(弱い)場合、量子効果が強い(弱い)ことを見出した。このシミュレーション結果を再現する理論模型を提案し、強い相互作用領域での量子効果が波動関数の干渉効果に起因することを明らかにした。また、斥力と引力の違いはクラスター衝突に影響を及ぼさないことを上記模型を用いて示した。

(4-5) フェルミ・ボース混合原子系における量子多体効果

フェルミ・ボース混合原子系の実験が最近可能になっている。将来的には、この系における多体効果が系統的に調べられるものと期待される。これを受けて、フェルミ・ボース混合ハバード模型の性質を研究した。この系の相関効果を扱うため動的平均場理論と数値繰りこみ群を用いて、基底状態の性質を明らかにした。その結果、混合系に特有の量子多体効果が出現することを見出した。特にフェルミ系が絶縁状態でボース系が超流動となる場合（超固体と呼ばれる）では、ボース粒子の低エネルギー励起を介してフェルミ系の繰りこみ効果が誘発されること、これは状態密度に鋭いピークをもたらすことを明らかにした。このような多体効果が rf スペクトル分光の実験で観測されるものと期待される。

(4-6) 量子クラスタ展開法を用いた超流動転移の理論

冷却原子系でボース粒子やフェルミ粒子の超流動の研究が盛んに行われている。実験的には弱相関から強相関まで自由に系を制御することができるが、理論でこれを包括的に取り扱うことはかなり難しい。ここでは、古くから知られている Lee-Yang のクラスタ展開法を用いて超流動の研究を行った。これまで、このクラスタ展開法では超流動発現を見積もる方法がなかったが、本研究で初めて超流動転移温度の系統的な計算方法を導入した。この定式化をさらにフェルミ粒子系にも拡張し、BCS-BEC クロスオーバーの研究に、この方法が有力であることを示した。今後の研究で具体的に超流動転移温度を見積もる予定である。

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 14 件)

- ① S. Uchino and N. Kawakami,
 “Spin-Depairing Transition of Attractive Fermi Gases on a Ring Driven by Synthetic Gauge Fields” *Phys. Rev. A* 85 (2012) 013610/1-8 (査読あり)
 DOI: 10.1103/PhysRevA.85.013610
- ② N. Sakumichi, N. Kawakami and M. Ueda,
 “Criteria of off-diagonal long-range order in Bose and Fermi systems based on the Lee-Yang cluster expansion method” *Phys. Rev. A* 85 (2012) 043601/1-19 (査読あり)
 DOI: 10.1103/PhysRevA.85.043601

- ③ K. Noda, R. Peters, N. Kawakami and Th. Pruschke, “Quantum phases of Bose-Fermi mixtures in optical lattices” *Journal of Physics: Conference Series* 273 (2011) 02146/1-4 (査読あり)
 DOI:10.1088/1742-6596/273/1/012146
- ④ T. Kita, T. Ohashi and N. Kawakami,
 “Orbital-selective Mott transition in multiorbital Hubbard model with orbital degeneracy lifting” *J. Phys. Soc. Jpn.* 80 (2011) SA142/1-3 (査読あり)
 DOI: 10.1143/JPSJS.80SA.SA142
- ⑤ R. Peters, N. Kawakami and T. Pruschke,
 “Dynamical Mean Field Study of the Kondo Lattice Model with Frustration” *J. of Physics: Conference Series* 320 (2011) 012057/1-6 (査読あり)
 DOI:10.1088/1742-6596/320/1/012057
- ⑥ Y. Furukawa, T. Ohashi, Y. Koyama and N. Kawakami, “Mott transition in the Hubbard model on the anisotropic kagome lattice” *Phys. Rev. B* 82 (2010) 161101(R)/1-4 (査読あり)
 DOI:10.1103/PhysRevB.82.161101
- ⑦ Y. Fujihara, A. Koga and N. Kawakami,
 “Superfluid Properties of Ultracold Fermionic Atoms in Two-dimensional Optical Lattice” *Phys. Rev. A* 81 (2010) 063627/1-7 (査読あり)
 DOI:10.1103/PhysRevA.81.063627
- ⑧ T. Yoshioka, A. Koga and N. Kawakami,
 “Mott transition in the Hubbard model on the triangular lattice” *Physica Status Solidi* 247 (2010) 635-637 (査読あり)
 DOI: 10.1002/pssb.200983020
- ⑨ K. Noda, A. Koga, N. Kawakami and Th. Pruschke, “Magnetically ordered state of cold fermions on a decorated square lattice” *J. Low Temp. Phys.* 158 (2010) 79-84 (査読あり)
 DOI: 10.1007/s10909-009-0042-5
- ⑩ Y. Fujihara, A. Koga, and N. Kawakami,
 “Analysis of Superfluid State of Ultracold Fermions with Attractive Interactions in Two-dimensional Optical Lattices” *Physica C* 470 (2010) S991-S992 (査読あり)
 DOI: 10.1016/j.physc.2009.12.001
- ⑪ K. Noda, A. Koga, N. Kawakami, T. Pruschke,
 “Ferromagnetism of cold fermions loaded into a decorated square lattice” *Phys. Rev. A* 80 (2009) 063622/1-7 (査読あり)
 DOI:10.1103/PhysRevA.80.063622
- ⑫ Y. Fujihara, A. Koga and N. Kawakami,
 “Superfluidity and magnetism in two-

dimensional fermionic optical lattice systems” Physica B: Condensed Matter 404 (2009) 3324-3327 (査読あり)

DOI: 10.1016/j.physb.2009.07.090

⑬A. Yamamoto, M. Yamashita and N. Kawakami, “Nonadiabatic dynamics of ultracold fermions in optical superlattice” J. Phys. Soc. Jpn. 78 (2009) 123002/1-4 (査読あり) DOI: 10.1143/JPSJ.78.123002

⑭K. Inaba, A. Koga, S. Suga and N. Kawakami, “Zero-temperature Phase Diagram of Two Dimensional Hubbard Model” J. of Physics:Conference Series 150 (2009) 042006/1-4(査読あり) doi:10.1088/1742-6596/150/4/042066

[学会発表] (計 26 件)

① 作道直幸, 川上則雄, 上田正仁
「Lee-Yang の量子クラスター展開法による非対角長距離秩序の判定条件」
日本物理学会第 67 回年次大会、関西大学(西宮) 2012 年 3 月 24 日

② 内野瞬, 川上則雄
「1 次元引力フェルミ気体におけるスピン対破壊転移」
日本物理学会第 67 回年次大会、関西大学(西宮) 2012 年 3 月 24 日

③ 尾崎順一, 手塚真樹, 川上則雄
「フェルミ粒子集団の衝突における多体量子効果」
日本物理学会第 67 回年次大会、関西大学(西宮) 2012 年 3 月 24 日

④ Norio Kawakami,
“Time-Evolution of Quantum Particles in One Dimension” International Workshop on Simulation and Manipulation of Quantum Systems for Information Processing 2011/10/17, Juelich, Germany

⑤ Norio Kawakami,
“Topological Insulators and Anderson Transitions: A Quantum-Walk Study” International Workshop on Novel Quantum States in Condensed Matter, 2011/11/17 Kyoto, Japan

⑥ 野田数人, R.Peters, 川上則雄, Th. Pruschke
「ボースフェルミ光格子混合系における相関効果」, 日本物理学会 2011 年秋季大会 富山大学(富山), 2011 年 9 月 23 日

⑦ 尾崎順一, 手塚真樹, 川上則雄
「移動するスピン依存トラップによるフェルミ粒子系の衝突と励起」
日本物理学会 2011 年秋季大会 富山大学(富山), 2011 年 9 月 23 日

⑧ 北倫子, 大橋琢磨, 川上則雄
「三軌道ハバード模型におけるモット絶縁相とバンド絶縁相」
日本物理学会 2011 年秋季大会 富山大学(富山), 2011 年 9 月 21 日

⑨J. Ozaki, M. Tezuka and N. Kawakami, “Analysis of quantum phases in Bose-Fermi mixtures in optical lattices” International Conference on Low Temp. Physics, 2011/8/29, Cambridge, UK

⑨ 北倫子, 大橋琢磨, 川上則雄
「軌道分裂を有する三軌道ハバード模型におけるモット転移」
日本物理学会 2011 年春の年会 新潟大学(新潟), 2011 年 3 月 28 日

⑩ 竹中裕斗, 鈴木龍太郎, 川上則雄
「変分モンテカルロ法による多軌道ハバードモデルの電子相関効果の解析」
日本物理学会 2011 年春の年会 新潟大学(新潟), 2011 年 3 月 26 日

⑪ Norio Kawakami,
Nonmagnetic Mott Phases in Frustrated Electron Systems” International Workshop on Resonating Valence Bond Physics: Spin Liquids and Beyond, 2010/10/13, Budapest, Hungary

⑬野田数人, 川上則雄, R. Peters, T. Pruschke
「光格子ボースフェルミ冷却原子系における多体効果の役割」
日本物理学会 2010 年秋季大会 大阪府立大学(大阪) 2010 年 9 月 26 日

⑭山本篤史, 山下眞, 菅誠一郎, 川上則雄
「一次元光格子中のヘテロ接合界面における冷却フェルミ原子のダイナミクス」
日本物理学会 2010 年秋季大会 大阪府立大学(大阪) 2010 年 9 月 26 日

⑮北倫子, 大橋琢磨, 川上則雄
「多軌道ハバード模型の軌道依存モット転移における軌道揺らぎの効果」
日本物理学会 2010 年秋季大会 大阪府立大学(大阪) 2010 年 9 月 23 日

⑯Norio Kawakami,
“Relaxation of frustration and enhanced anisotropy near Mott transition” The 11th German-Japanese Symposium: New Quantum States and Phenomena in Condensed Matter Hiroshima, Japan, 2010/9/14

⑰T. Kita, T. Ohashi, S. Suga, N. Kawakami, “Effects of spatial fluctuations in two-orbital Hubbard model around Mott transition” Workshop on Emergent Quantum States in Complex Correlated Matters, Dresden, Germany, 2010 年 8 月 24 日

⑱ K. Noda, N. Kawakami, R. Peters, T.

Pruschke

“ Bose-Fermi mixtures in optical lattices: generalized DMFT approach”
Statistical Physics of Quantum Systems
Tokyo, Japan, 2010/8/12

⑱ Norio Kawakami

“Mott Transition in Triangular Lattice Systems: Some Implications for Frustrated Organic Materials”

International Conference on Science and Technology of Synthetic Materials 2010
Kyoto, Japan, 2010/7/6

⑳ K. Noda, N. Kawakami, R. Peters, Th. Pruschke,

“Quantum phases of Bose-Fermi mixtures in optical lattices” Conference on Strongly Correlated Electron Systems 2010
Santa Fe, USA, 2010/6/28

㉑ 作道直幸, 川上則雄, 上田正仁

「束縛状態を持つ二成分冷却フェルミ気体の熱力学的性質」

日本物理学会 第65回年次大会
岡山大(岡山), 2010年3月20日

㉒ 藤原祐介, 古賀昌久, 川上則雄

「フェルミ原子光格子系におけるトラップ中での超流動状態のノイズ相関」

日本物理学会 第65回年次大会
岡山大(岡山), 2010年3月20日

㉓ 山本篤史, 山下眞, 川上則雄

「擬一次元光格子中における冷却フェルミ原子気体の相転移の解析 II」

日本物理学会 2009年秋季大会
熊本大学(熊本), 2009年9月28日

㉔ T. Yoshioka, A. Koga and N. Kawakami

“Magnetic transition in the Hubbard model on the triangular lattice”

International Symposium on Crystalline Organic Metal, Superconductors and Ferromagnets, September 12-17, 2009, Hokkaido, Japan

㉕ M. Yamashita, A. Yamamoto and N. Kawakami

“DMRG study of ultracold fermionic atoms in optical lattices”

Workshop on Matrix Product State Formulation and Density Matrix Renormalization Group Simulations, August 12, 2009, Kobe, Japan

㉖ T. Yoshioka, A. Koga and N. Kawakami,

“Magnetic transition in the Hubbard model on the triangular lattice”

Quantum Criticality and Novel Phases 2009, August 2-5, 2009, Dresden, Germany

[図書] (計0件)

[産業財産権]

○出願状況 (計 0件)

○取得状況 (計0件)

[その他]

ホームページ等

[http:// cond. scphys. kyoto-u. ac. jp/](http://cond.scphys.kyoto-u.ac.jp/)

6. 研究組織

(1) 研究代表者

川上 則雄 (KAWAKAMI NORIO)

京都大学・大学院理学研究科・教授

研究者番号: 10169683