

平成 23 年 5 月 24 日現在

機関番号 : 12601

研究種目 : 若手研究 (B)

研究期間 : 2009~2010

課題番号 : 21740245

研究課題名 (和文) 勾配を持つポテンシャル中の有限温度下秩序状態 - 超流動固体状態の可能性 -

研究課題名 (英文) Orderings at a finite temperature in bosonic Hubbard model with confinement potentials

研究代表者

鈴木 隆史 (SUZUKI TAKAFUMI)

東京大学・物性研究所・助教

研究者番号 : 40444096

研究成果の概要 (和文) : 勾配を持つポテンシャル中に閉じ込めたボーズ粒子系で現れる有限温度下の秩序状態について調べた。まず調和ポテンシャル中の擬 2 次元希薄ボーズ気体の有限温度特性について Projected Gross-Pitaevskii 方程式を数値的に解いて調べた。その結果、位相相関関数の減衰率がポテンシャル中心付近で現れるコヒーレント (凝縮) 領域とその周囲に現れるインコヒーレント (非凝縮) 領域の境界でコストリツ - サウレス型の臨界特性を示すことがわかった。続いて一軸方向にのみポテンシャル勾配を持つハードコア 2 次元拡張ボーズハバードモデルで現れる秩序状態の空間分布について量子モンテカルロ法を用いて調べた。この系は一様ポテンシャル下で化学ポテンシャルを変化させた場合に固体状態から超流動状態へ一次転移を示す。ポテンシャルの勾配を変えた場合に固体状態と超流動状態の境界付近で現れる秩序状態に注目した。その結果ポテンシャル勾配の形を変化させても両者は相分離し、局所密度近似の結果、すなわち一様系で観測される一次転移の振る舞いが相境界で見られることが分かった。

研究成果の概要 (英文) : We investigated finite temperature properties of quasi-2D dilute-bosonic-gas system with confinement potential by numerically solving the projected Gross-Pitaevskii equation. The exponent of phase correlation functions at the boundary between coherent and in-coherent region takes the same values of the KT phase transition. We also studied the orderings of the extended hard-core bosonic-Hubbard model on the square lattice by performing the quantum Monte Carlo simulations. In this system, the chemical potential specially increases along the x-axis. The results indicated that the checker board solid state and superfluid state are well specially separated and the particle density jumps at h_c , where h_c corresponds to the critical values of the first order transition in the systems with uniform potential. This behavior was not changed when we changed the potential shapes. This suggests that the static quantities such as particle density, local compressibility, and local stiffness, can be explained by the local density approximation.

交付決定額

(金額単位 : 円)

	直接経費	間接経費	合計
2009年度	1,500,000	450,000	1,950,000
2010年度	600,000	180,000	780,000
総計	2,100,000	630,000	2,730,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・物性Ⅱ

キーワード：超低温・量子凝縮系

1. 研究開始当初の背景

(1) 超流動固体状態とは固体秩序と超流動秩序が共存する状態のことを指す。この超流動固体に対する研究は 1970 年代から行われており ^4He でその可能性が指摘されてきた。これまでその超流動固体について 2 つのメカニズムが提案されている。1 つは A. Lifshitz, らが提唱した固体ヘリウム 4 中に存在する空孔、転移のボーズ・アインシュタイン (BEC) 凝縮である。高圧下では ^4He は固体化するが、強い量子揺らぎを反映して固体中に空孔、転移といった格子欠陥が存在する。この ^4He 固体中に存在する欠陥が凝縮を起こすことにより、 ^4He 固体が超流動性を示すというものである。他方、Leggett は格子点に局在した 1 原子波動関数の裾が複数格子点に広がっており、それらの重なりが有限に残ることで固体秩序と超流動秩序が共存するというシナリオを提唱した。近年固体 ^4He に対して行ったねじれ振り子実験で非常に興味深い振る舞いが観測されている。すなわち ^4He 固体に対するねじれ振り子の共鳴周期を測定すると、回転慣性モーメントの減少を示唆する異常が極低温領域で現れる。その後、国内外の実験グループによって数多くの検証実験が行われ、高圧-極低温下の固体 ^4He 中に固体回転運動に追従しない何かが存在することが確かめられている。しかしこれまでのところ、 ^4He で上記のような超流動固体状態が実現しているという確固たる証拠は見つかっておらず、固体ヘリウム 4 で観測された特異な振る舞いを十分に説明する理論的シナリオはなく精力的な研究が続いている。

超流動固体状態に対する理論的研究についても古くから行われている。その一つのアプローチとして格子モデルを用いた方法がある。この方法は現実の連続空間モデルを拡張ボーズハバードモデルと呼ばれる格子モデルにマップした後、同一格子点上に 2 個の原子が来ることができないというハードコア条件 (1 サイトに 2 粒子が同時に占有できない) を課すことで、スピン $S=1/2$ のイジング異方性を持つ **XXZ** モデル (Ising-like **XXZ** モデル) に焼きなおすという方法である。このマッピングにより元のボーズモデルで現れる秩序状態は図 1 のようになる。1990 年代後半から、量子モンテカルロ法による数値計算技術が発展したこ

とを受け、2 次元、3 次元格子系の場合について平均場近似を越えた解析が行われるようになり、三角格子や面心立方格子など幾つかの格子系で超流動固体相が有限温度下で安定な状態で存在することが確かめられた。またハードコア・ボーズモデルだけでなくソフトコアの場合も同様に超流動状態が現れる格子モデルが理論的に提案されている。

$\langle s_i^z \rangle_{i \in A, B} = 0$	$\langle s_i^z \rangle_{i \in A} \neq \langle s_i^z \rangle_{i \in B}$	Neel相→固体
	$\langle s_i^z \rangle_{i \in A} = \langle s_i^z \rangle_{i \in B}$	Paramagnetic, Ferromagnetic→液体、気体
$\langle s_i^z \rangle_{i \in A, B} \neq 0$	$\langle s_i^z \rangle_{i \in A} \neq \langle s_i^z \rangle_{i \in B}$	Intermediate→超流動固体
	$\langle s_i^z \rangle_{i \in A} = \langle s_i^z \rangle_{i \in B}$	Spin-flopped→超流動

図 1: スピンの秩序状態とボーズ系の秩序状態の対応関係

これまで均一系 2 次元、3 次元ボーズ格子モデルで見つかった超流動固体状態の発現メカニズムは大まかに次に示す 2 つのパターンに分類できる。

- ① 粒子間相互作用のフラストレーション効果により、有効分子場が 0 となる副格子がネットワークを組むケース。この場合、有効分子場 0 の副格子ネットワークが超流動秩序に寄与し、それ以外の副格子が固体秩序を形成することで超流動固体状態が現れる。
- ② ソフトコアのボソンの系において、同一格子点上の粒子間反発力が次近接格子点間の反発力と等しい場合に、固体状態にある系に余剰粒子が存在すると低温領域で超流動秩序と固体秩序が共存する。

近年、冷却原子気体をトラップした系にレーザー光を入射することでハバードモデルを光学格子上で実現できるようになり、粒子間相互作用の強さをある程度自由に制御することが可能になっている。実際、光学格子上で Mott-超流動転移的な振る舞いが観測されており、今後光学格子系においてこれまで理論的提案であった超流動固体状態の実現とその観測が期待されている。

2. 研究目的

1 で示したように光格子中にボーズ気体を

閉じ込めることで、超流動固体状態を確認しようと試みられている。これまで超流動固体状態が現れると予想された系は一様ポテンシャルを仮定しているのに対し、光格子の実験ではボーズ原子を閉じ込めるためにトラップポテンシャル（勾配を持つ化学ポテンシャル）が存在する。勾配ポテンシャルが、系で現れる秩序状態に対して及ぼす効果については詳細には調べられていない。そこで

- (1) 調和ポテンシャル中擬2次元希薄ボーズ気体
- (2) 一軸方向に勾配を持つ2次元ハードコアの拡張ボーズハバードモデル

を取り上げ、系で現れる秩序状態の空間分布、相境界の有限温度特性に対する勾配ポテンシャル効果に注目した。(1)の系は、化学ポテンシャルが一様（化学ポテンシャルに勾配が無い系）な場合、温度を下げると凝縮状態（超流動状態）が現れる。その場合の相転移はコストリッツ-サウレス（KT）転移で説明される。化学ポテンシャルに勾配を持つ場合、低温領域では、ポテンシャルの中心付近に凝縮状態、その周囲に非凝縮状態が現れる。まず、局所密度近似と両者の相境界における位相相関関数の振る舞いに注目する。(2)はスピン $S=1/2$ の Ising-like XXZ モデルと等価なモデルである。一様系では化学ポテンシャル変化されると絶対零度では粒子がチェッカーボード状に並んだ固体状態から超流動状態へ一次転移する。この系を勾配ポテンシャル中に置くことで、極低温領域で固体秩序と超流動秩序の相境界がどのように振る舞うか調べる。特に勾配効果でチェッカーボード固体状態と超流動状態の共存状態（チェッカーボード固体の土台上に超流動カレントが存在する状態）の可能性について調べた。

勾配を持つポテンシャル中のボーズ気体については局所密度（LDA）近似を用いた解析がよくなされており、この近似が精度良く成り立つことが先行研究で指摘されている。LDA 近似が系の相関長が有限のまま相転移する一次転移の場合も成り立つかどうか、あるいは勾配効果によって LDA 近似では現れない共存領域が現れるかどうか注目した。

得られた結果をもとに、研究背景で紹介したメカニズム以外で超流動固体を示す系について探索を行った。注目した系は、

- (3) 長距離相互作用を持つ2次元ハードコア拡張ボーズハバードモデル

($S=1/2$ Ising-like XXZ モデル)

である。着想に至った経緯などについては研究結果のところで詳細を述べる。

3. 研究の方法

本研究では、ポテンシャル勾配がある場合に、系で現れる有限温度下の秩序状態の特徴を明らかにし、新しい超流動固体状態の探索（目的で述べた超流動固体状態のメカニズムとは異なるメカニズムで安定化する超流動固体状態の探索）にある。次に示す(1)から(3)のテーマを順に研究を進めた。また、研究を推進するうえで必要となる数値計算 - 経路積分表示に基づく量子モンテカルロ法の改良を同時に進めた。

- (1) 閉じ込めポテンシャル中の擬2次元希薄ボーズ気体に対する研究

グロスピタエフスキー方程式を数値的に解くことで、BEC 凝縮を起こしたボーズ気体のダイナミクスについて良く研究されている。本研究では有限温度下でかつ、ボーズ原子間に相互作用が働く場合に有効な Projected グロスピタエフスキー方程式を数値的に解くことで有限温度下の擬2次元希薄ボーズ気体の振る舞いを調べた。

- (2) 一軸方向にポテンシャル勾配を持つ正方格子状拡張ハードコアボーズハバードモデルについては扱うモデルが格子モデルであることから、経路積分表示に基づく量子モンテカルロ法を用いて大規模数値計算を行った。量子モンテカルロ法を用いて格子点当たりの粒子数、超流動密度、スタガード磁化（固体秩序変数）を勾配を持つポテンシャル方向の位置の関数として求めた。得られた結果について、同様の計算を一様系の場合についても行い、両者を比較した。

- (3) 双極子相互作用を持つ正方格子上のハードコア拡張ボーズハバードモデルについて超流動固体状態が起こるメカニズムについて議論した。このモデルは双極子相互作用部分を無視すると(2)の $S=1/2$ Ising-like XXZ モデルと等価である。したがって一様ポテンシャルの場合、化学ポテンシャルを変化させると、チェッカーボード状に粒子が並ぶ固体状態から超流動状態へ一次転移を示し、転移点近傍で両者が共存する超流動固体状態は不安定である。これは、チェッカーボード型の固体状態中に生成されるドメインウォール中を余剰粒子が流れることで超流動性を示す相分離状態のエネルギーが、チェッカーボード固体上

を余剰粒子が動くことで超流動性を示す状態のそれよりも利得が大きいに起因する。しかし粒子間に働く相互作用が長距離に及ぶ場合、チェッカーボード固体状態中にドメインウォールを生成するエネルギーが場合によっては高くなると予想される。この予想をもとにチェッカーボード超流動固体状態が安定化されるのに必要な相互作用レンジを見積もり、その超流動固体状態の特徴について実験で観測可能な物理量から議論を行った。

上記のテーマを遂行するために必要となる数値計算は、本科研費により PC クラスタを購入し実施した。

4. 研究成果

(1) 調和ポテンシャル中擬 2 次元希薄ボーズ気体

I) 閉じ込めポテンシャル中の希薄ボーズ気体

本研究では有限温度下でボーズ原子間に相互作用が働く場合に有効な Projected グロスピタエフスキー (PGP) 方程式を数値的に解くことで有限温度下の調和トラップポテンシャルに閉じ込めた擬 2 次元希薄ボーズ気体で現れる凝縮相の振る舞いを調べた。特に (a) 慣性モーメントの変化量 ΔI の温度依存性とコヒーレント領域の半径の温度依存性 (b) ポテンシャル中心からの距離の関数で与えられる位相相関関数の減衰率の温度依存性に注目した。計算は ENS のグループが行った実験環境を想定し、粒子数 $N_{\text{tot}}=10^4$ 個 (固定) の ^{87}Rb を調和振動数 $\{\omega_x, \omega_y, \omega_z\} = 2\pi\{50, 50, 4000\}\text{Hz}$ の z 軸方向に圧縮されたポテンシャルを仮定した。慣性モーメントの変化量 ΔI は、全粒子が常流動成分だとみなして求めた慣性モーメント I_0 、軸を回転中心とする微小角運動量を系に与えた場合の慣性モーメント I_{rot} として $\Delta I = I - I_{\text{rot}}/I_0$ として求めた。

(a) 慣性モーメントの変化量 ΔI に対する温度依存性とコヒーレント (凝縮) 領域の温度依存性

まずポテンシャル中心から凝縮し始める温度を見積もるためコヒーレント (凝縮) 領域とインコヒーレント (非凝縮) 領域を分ける境界を局所密度 (平均場) 近似レベルで見積もった。具体的には以下のとおりである。PGP 方程式による数値解は与えた初期状態 (全粒子数固定の条件下で非凝縮成

分と凝縮成分の粒子数とその運動量分布) から温度 T が決まる。まず希薄ボーズ気体で成り立つ転移温度と粒子数密度の関係式から、温度 T が転移温度となる粒子数密度 n_c を求める。PGP 方程式で得られた粒子数密度の実空間分布から粒子数密度 n_c となる位置 R_c を見積もる。このようにして見積もった R_c の温度依存性は、 R_c はおよそ $T > 189\text{nK}$ で 0, $T < 189\text{nK}$ で有限の値をとることが分かった。続いて ΔI に対する温度依存性を調べた。その結果、 ΔI は $T \sim 190\text{nK}$ を閾値として温度低下に伴い増大することがわかった。コヒーレント領域の発生は BEC したボーズ原子の現れたことを示唆し、 ΔI の増大は系に超流動成分が現れたことを示唆している。この結果からこの系でも局所密度近似的な取り扱いで、系で現れる秩序状態を比較的良好な精度で議論できることがわかる。

(b) 位相相関関数の減衰率の温度依存性

まず不均一な結合定数を持つ Gaussian モデルを仮定し、位相相関関数の距離依存性について解析計算を行った。位相相関関数は $g_G(\mathbf{r}) = \exp[-\{\nabla K(0) \nabla \phi(0)\}^{-1} \cdot \{\nabla K(\mathbf{r}) \nabla \phi(\mathbf{r})\}^{-1}]$ で与えられる。ただし $K(\mathbf{r})$ は位置に依存するボーズ場の結合定数を表す。 $(K(\mathbf{r}))$ は具体的な形を仮定しておらず、位置 \mathbf{r} に対してなめらかな関数であればよい。) 位相相関関数の減衰率を評価するため、有効指数 $\eta_G(\mathbf{r}) = d \log(g_G) / d \log(\mathbf{r})$ を導入すると $\eta_G(\mathbf{r}) = (2\pi K(\mathbf{r}))^{-1}$ が得られる。すなわち相関関数の減衰率は一様系と違い空間依存性を示す。今 2 次元系を仮定すると KT 転移が期待されるので、一様系での臨界固定点の値 $K(\mathbf{r}) = 2/\pi$ を満たす位置 r_c を相境界とみなす。すると r_c で常に $\eta_G(r_c) = 0.25$ となる。つまりこの結果はコヒーレント - インコヒーレント領域の境界で相関関数の減衰率が 2 次元一様系と同じ 1/4 であることを示唆している。PGP 方程式を数値的に解いて位相相関関数を求め、(a) で見積もった各温度での相境界 R_c における減衰率を見積もったところ $0.25 < \eta_G(R_c) < 0.3$ の範囲でほぼ一定の値をとることがわかった。

(2) 一軸方向に勾配を持つ 2 次元ハードコアの拡張ボーズハバードモデル

(1) での結果は調和ポテンシャルに閉じ込められた擬 2 次元希薄ボーズ気体の常流動 - 超流動 (凝縮 - 非凝縮) の相境界は一様系と同様の KT 型の臨界的性質 (相関関数の減衰率) を示す、局所密度近似描像が良く成り立つことを示唆している。しかし、一様系において、例えば一次転移を示す場

合に同様の局所密度近似のアプローチが上手くゆくか否かは自明ではない。そこで一軸方向にポテンシャル勾配を持つハードコア拡張ボーズハバードモデルで現れる秩序状態について調べた。この系は $S=1/2$ Ising-like XXZ model と等価であり $1/2$ filling でネール秩序(チェッカーボード固体秩序)が現れ、filling を変化させると超流動状態が現れる。このネール相と超流動相の間は一様ポテンシャル(磁場)下では1次転移を介した相図を示すことが知られている。本研究ではポテンシャル(磁場)勾配が一軸方向に距離の関数として、線形、2次、4次、 \cos で与えられる系を考え、現れる

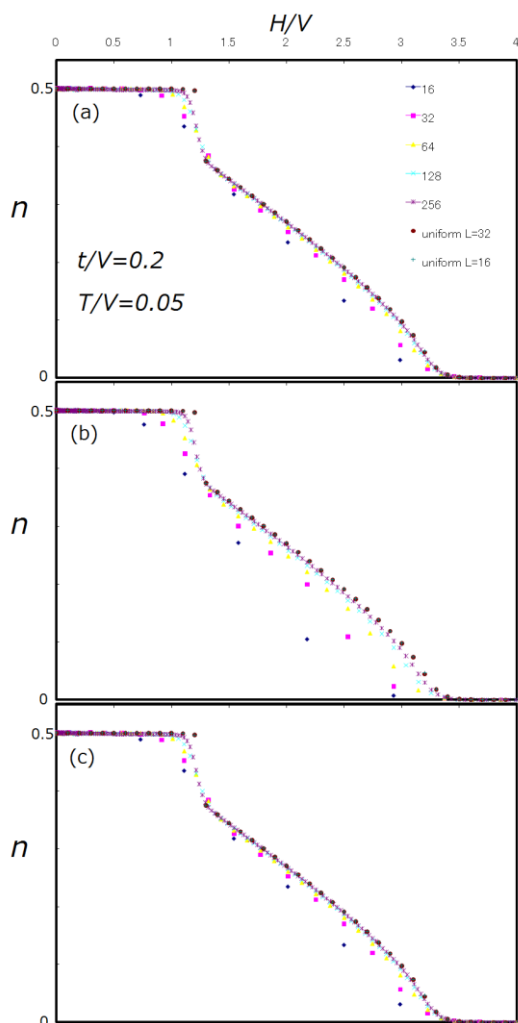


図2: 一軸方向に勾配ポテンシャルを持つハードコア拡張ボーズハバードモデル(磁場勾配を持つ $S=1/2$ Ising-like XXZ モデル)の粒子数分布。(a), (b), (c)はそれぞれ磁場勾配が線形、4次、 \cos の場合の結果で横軸は化学ポテンシャルに対応する量(磁場)の大きさと合わせている。青十字と茶丸が一樣系の結果で、それ以外は一軸方向に磁場勾配をかけた結果。

秩序状態の分布を量子モンテカルロ法により計算した。計算の結果、チェッカーボード固体相と超流動相が転移するポテンシャル近傍で、勾配ポテンシャルの形によらず一様系と同じ化学ポテンシャルのところで相転移する - 固体状態と超流動状態が相分離し共存することが無いことがわかった。例として図2に粒子分布の結果を示す。得られた結果は、少なくとも勾配ポテンシャルを持つ系のローカルな静的物理量については、局所密度近似で良く説明できる、すなわち一様系の転移点と同じ化学ポテンシャルとなることを境に相分離することを示唆している。

(3) 新しいメカニズムを持つ超流動固体状態の探索

(2)の結果から $S=1/2$ Ising-like XXZ モデルはポテンシャル勾配によって一次転移付近においてもチェッカーボード型の固体状態と超流動状態の共存する超流動固体状態を示さないことが分かった。一次転移点近傍においてチェッカーボード型の固体状態中にドメインウォールを生成するエネルギーコストが、チェッカーボード固体中の非占有格子点上を2次摂動的に運動する余剰粒子を一つ加えるのに必要なエネルギーコストより低いことが考えられる。つまりチェッカーボード固体中に余剰粒子が運動するためには、ドメインウォール生成に伴うエネルギーコストを大きくする必要がある。その一つの方法として粒子間に働く斥力相互作用が長距離に及ぶ場合が考えられる。実際に双極子相互作用を持つ正方格子上のハードコア拡張ボーズハバードモデルに対する量子モンテカルロ計算を行い、チェッカーボード型超固体状態が現れることを確認した。ここで大事な点はあくまでボーズ粒子のホッピングパスは最近接格子点間に限定し、粒子間相互作用のみが長距離に及ぶ点である。(ホッピングパスも長距離のパスが存在すると研究目的で述べたような自明な超流動パスができてしまう。)この超流動固体状態は超流動性が、主に余剰粒子のホッピング項 t の2次のプロセスに支配されることを反映して非対角成分の相関関数(一粒子 Green 関数に対応する相関関数)が $(\mathbf{k}_x, \mathbf{k}_y) = (\pi, \pi)$ の波数で振動しながら冪減衰を示す点である。この量をフーリエ変換した量はボーズ粒子の運動量分布に対応し、光格子の実験でよく行われる time of flight 法で観測可能な量である。実験でチェッカーボード超流動固体状態が実現していれば $n(0)$ と $n(\pi, \pi)$ に現れる δ 関数的なピークが期待されることを指摘した。

(4) 経路積分表示に基づく量子モンテカルロアルゴリズムの改良

ボーズ系やスピン系の格子モデルに対する数値計算手法の一つとして、量子モンテカルロ法がある。量子モンテカルロ法のアルゴリズムの一つである向き付きループアルゴリズム (DLA) は適用できるモデル数が多いという汎用性の高さだけでなく、高精度の結果が得られることが知られている。これまで我々はこのアルゴリズムをベースに改良を加えてきた。その結果、光格子の実験で扱われる粒子数と同程度の粒子数を持つシミュレーションが可能となっている。しかし本アルゴリズムにも欠点がある。その一つが、粒子間あるいはスピン間に長距離相互作用が存在する場合である。本アルゴリズムは、ある格子点を中心として相互作用の及ぶ格子点の数が増えると、その数に比例して計算コストが増大する。今回、このアルゴリズムを基本にして、近年長距離相互作用を持つ古典スピン系に対するモンテカルロ法として提案された $O(N)$ 法のアイデアを取り入れることで、長距離相互作用を持つボーズ粒子 (あるいはスピン) 系を計算コスト $O(N)$ で行えるよう改良した。ここで提案したアルゴリズムは長距離相互作用が無い 2 次元、3 次元格子モデルでも、従来方法と比べて効率が良い。

このアルゴリズムのテストを兼ね、シャストリーサザランド格子上的 $S=1/2$ Ising-like XXZ model で現れる $1/2$ 磁化プラトーに関する研究を行った。近年希土類金属化合物 RB_4 (R : 希土類原子) に対する磁化測定から磁化曲線中に多段磁化プラトーが現れることが報告されている。その中で TmB_4 で現れる $1/2$ 磁化プラトーの問題に注目した。この物質は Tm イオンが磁性を担っており、 ab 面内で Tm イオンがシャストリーサザランド格子を組み、それが c 軸方向にスタックしている。これまで行われた実験から c 軸方向に強い一軸異方性が存在することが確認されており、 Tm イオンのスピン軌道モーメントの最低エネルギー状態は $J_z = \pm 6$ の非クラマース 2 重項状態と考えられている。したがって低温領域における TmB_4 の磁氣的性質については $S=1/2$ Ising-like XXZ モデルが良い有効モデルであると考えられる。実験では飽和磁化の半分、 $m=1/2$ の点で大きな磁化プラトーが現れることが報告されていた。理論による先行研究では最近接、第二近接格子点間に相互作用が働く場合の磁化過程について明らかにされており、その場合、Ising 異方性の強い極限では $m=1/3$ プラトーのみが現れ、異方性を弱くしてゆくと $1/2$ プラトーが現れること

が明らかにされている。 TmB_4 で報告された磁化過程を議論する上で大事な点の一つはこの物質が金属であり、モーメント間相互作用が Ruderman-Kittel-Kasuya-Yoshida (RKKY) 型の長距離相互作用に由来する点である。本研究では最近接、第二近接相互作用に加え、幾つかの長距離相互作用を仮定した $S=1/2$ XXZ モデルに対する数値計算を行った。その結果、 TmB_4 に対する実験で観測された大きな $1/2$ プラトーを説明するには第 3、4 近接といった付加的に考えた相互作用が重要であることを明らかにした。これは最近接、第二近接相互作用のみの場合、Ising 異方性の強い極限で常に飽和磁場近傍で強制強磁性状態と $1/3$ 磁化プラトー状態、 $1/2$ 磁化プラトーが縮退していることに起因する。したがって $1/2$ 磁化プラトー状態のエネルギーを下げる摂動 (今の場合、付加的な相互作用) を考慮することで $1/2$ プラトー領域が大きくなる。このシナリオをもとに TmB_4 の磁化過程を説明するパラメータを見積もり実験へのフィードバックを行った。

続いて $1/2$ 磁化プラトー状態への有限温度転移について調べた。 $1/2$ 磁化プラトー状態はシャストリーサザランド格子の 4 副格子中、一つの格子上でスピンが磁場と逆方向を向き、それ以外は磁場と並行方向にスピンが秩序化した状態である。有限温度で破れる対称性は格子の持つ 90 回転対称性であり、この場合 2 つのシナリオが考えられた。すなわち、(A) 4 状態ポッツモデルのユニバーサリティークラスを持つ転移が 1 回起こる、(B) 2 回のイジングユニバーサリティークラスを持つ 2 次転移が 2 回起こり、 180 度回転対称性を持った中間相が存在する。数値計算の結果、Ising 異方性が強い極限では (1) が起こり、そこから量子揺らぎを加えると (2) となることを明らかにした。この結果は Ising 異方性の強い極限から量子ゆらぎを加えた場合に最低温相で破れている対称性が同じであるため、直感的には量子効果によって臨界的性質が変化してしまったように見える。この風変わりな振る舞いを説明する古典モデルとして一般化された 4 状態カイラルクロックモデルを提案し、提案した古典モデルの有限温度相図のある断面を切った場合に、元の量子スピンモデルで得られた有限温度相図と定性的に説明することを明らかにした。

今後の研究の展開として He^4 に合わせた数値計算を行うことを考えている。その上でも、開発した $O(N)+DLA$ による量子モンテカルロ計算は非常に強力であると考えられる。 He^4 に合わせファンデルワールス型の粒子

間相互作用を持つ3次元格子上的のボーズハバードモデルに対する数値計算を行い、実験で報告されている数多くの面白い振る舞いと比較しながら、固体 He^4 で何が起きているのか議論してゆきたい。

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5件) [全て査読有]

① T. Sato, T. Suzuki and N. Kawashima, "Finite-temperature transition in a quasi-2D Bose gas trapped in the harmonic potential", Journal of Physics: Conference Series Vol. 150, 032052 (2009).

② T. Sato, T. Suzuki and N. Kawashima, "Universal characteristics of nonuniform quasi-two-dimensional cold atom system", Physical Review A Vol. 81, 025601 (2009).

③ Takahumi Suzuki, Yusuke Tomita, and Naoki Kawashima, "Magnetic properties of the spin-1/2 XXZ model on the Shastry-Sutherland lattice: Effect of long-range interactions", Physical Review B Vol. 80, 180405(R) (2009).

④ T. Suzuki, Y. Tomita, and N. Kawashima, "Magnetic properties of $S=1/2$ antiferromagnetic XXZ model on the Shastry-Sutherland lattices", Journal of Physics: Conference Series Vol. 200, 022060 (2010).

⑤ T. Suzuki, Y. Tomita, N. Kawashima, and P. Sengupta, "Finite-temperature phase transition to the $m=1/2$ plateau phase in the spin-1/2 XXZ model on the Shastry-Sutherland lattices", Physical Review B Vol. 82, 214404 (2010).

[学会発表] (計15件)

① 鈴木 隆史, 富田 裕介, 川島 直輝, "シャストリーサザランド格子 $S=1/2$ XXZ モデルにおける磁化プラトー相への有限温度相転移" 日本物理学会 2009 年秋季大会, 熊本, 2009 年 9 月 26 日

② 鈴木 隆史, "向き付きループアルゴリズム

の改良と量子スピン系への適用, 物性研究所 短期研究会 計算物理学, 柏, 2009 年 12 月 11 日

③ Takafumi Suzuki, Yusuke Tomita, and Naoki Kawashima, "Long-range interaction effect on fractional magnetization plateaus", American Physical Society March meeting, Mar. 17, 2010, Portland, US.

④ 鈴木 隆史, 富田 裕介, 川島 直輝, "シャストリーサザランド格子 $S=1/2$ XXZ モデルの磁気プラトー状態と長距離相互作用効果", 日本物理学会 第65回年次大会, 2010 年 3 月 20 日, 岡山大学

⑤ 佐藤年裕, 鈴木隆史, 川島直輝, "有限温度におけるグロスピタエフスキー方程式と量子モンテカルロ法との比較", 日本物理学会 第65回年次大会, 2010 年 3 月 21 日, 岡山大学

⑥ Takafumi Suzuki, Yusuke Tomita, Pinaki Sengupta, Naoki Kawashima, and Cristian D. Batista, "Modification of directed-loop algorithm for frustrated spin systems", New Trends in Theory of Correlated Materials 2010 年 9 月 9 日, Seimeinomori Resort, Chiba, Japan

⑦ 鈴木 隆史, 富田 裕介, 川島 直輝, "希土類金属化合物における部分成分秩序", 第65回日本物理学会秋季大会, 2010 年 9 月 25 日, 大阪府立大学

⑧ 古谷 俊介, 鈴木 隆史, 押川 正毅, "一軸異方性を持つ半古典 Haldane 鎖の基底状態の相図", 第65回日本物理学会秋季大会, 2010 年 9 月 25 日, 大阪府立大学

⑨ 鈴木 隆史, 富田 裕介, 川島 直輝, "希土類化合物における逐次相転移と磁気秩序", 第4回物性科学領域横断研究会, 2010 年 11 月 14 日, 東京大学

⑩ 鈴木 隆史, 富田 裕介, 川島 直輝, "希土類化合物の部分成分秩序化と結晶場効果", 物性研・CMSI・次世代ナノ情報 合同研究会 「計算物質科学の課題と展望」, 2011 年 1 月 5 日, 東京大学

⑪ 鈴木 隆史, 坂倉 耕太, 川島 直輝, "Discrete Space Quantum System Solver (DSQSS)の開発と2次元フラストレート磁性体への応用", 物性研・CMSI・次世代ナノ情報 合同研究会 「計算物質科学の課題と展

望」, 2011年1月6日, 東京大学

⑫ Takafumi Suzuki, Yusuke Tomita, Naoki Kawashima, and Pinaki Sengputa, “Magnetic properties and exotic phase transition to a half plateau phase in a $S=1/2$ XXZ model on Shastry-Sutherland lattices”, International Conference on Frustration in Condensed Matter, 2011年1月12日, 仙台国際センター

⑬ Takafumi Suzuki, Yusuke Tomita, Pinaki Sengputa, and Naoki Kawashima, “Finite-temperature phase transition to $m=1/2$ plateau phase in a $S=1/2$ XXZ model on Shastry-Sutherland lattices”, American Physical Society 2011, March meeting, 2011年3月22日, Dallas, U.S.

⑭ 大越 孝洋, 鈴木 隆史, 川島 直輝, “双極子相互作用を持つ希薄ボーズ気体の基底状態相図”, 第66回日本物理学会, 2011年3月25日, 新潟大学

⑮ 鈴木 隆史, 富田 裕介, 川島 直輝, “希土類化合物の部分成分秩序化に対するトイモデル”, 第66回日本物理学会, 2011年3月26日, 新潟大学

[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

鈴木 隆史 (SUZUKI TAKAFUMI)

東京大学・物性研究所・助教

研究者番号: 40444096