

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 5月31日現在

機関番号：82401

研究種目：研究活動スタート支援

研究期間：2011～2012

課題番号：23840054

研究課題名（和文） 異常なヒステリシスを伴う新奇一次相転移現象の理論的解析

研究課題名（英文） First-order transition with an anomalous hysteresis behavior

研究代表者

山本 大輔（YAMAMOTO DAISUKE）

独立行政法人理化学研究所・古崎物性理論研究室・基礎科学特別研究員

研究者番号：80603505

研究成果の概要（和文）：

ヒステリシスループを伴わない「異常な履歴現象」の発現条件と数学的構造を明らかにした。この異常な履歴現象では、相転移の経路が初期状態に依存するだけでなく相転移の有無自体が初期状態に依存する。我々は、冷却原子気体系や量子スピン系における異常履歴現象を調べ、個々の系を比較することで最終的な異常履歴現象発現条件を確定した。この発見は「一次相転移はヒステリシスループを必ず伴う」という教科書的知識を覆すものである。

研究成果の概要（英文）：

We studied an anomalous hysteresis behavior in first-order transitions. In contrast to a conventional hysteresis process, the hysteresis trajectory of the anomalous hysteresis does not form a loop structure and the phase transition occurs only in a unidirectional way. We revealed the required conditions for the anomalous hysteresis through complementary studies on ultracold atomic gases and quantum spin systems.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2011年度	1,300,000	390,000	1,690,000
2012年度	1,200,000	360,000	1,560,000
総計	2,500,000	750,000	3,250,000

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：一次相転移、履歴現象、冷却原子気体、光格子、ボース・アインシュタイン凝縮、量子スピン系、スピン二量体

1. 研究開始当初の背景

近年、双極子モーメントが非常に大きい極性冷却気体に関する実験が盛んに行われるようになってきた。また、3方向からのレーザーを用いて作成された三角光格子中におけるRb原子気体の超流動 - Mott絶縁体転移が観測された。これらの実験技術の発展を受

けて、以前我々は三角光格子中の極性 Bose 気体系に対して準安定状態を含んだ詳細な解析を行った。その結果、超固体相（または通常の固体相）と超流動相間の量子一次相転移において「異常な履歴現象（ヒステリシス）」が現れ得ることを明らかにした。通常の液体

-固体転移のような一次相転移現象では、準安定状態（過熱状態や過冷却状態など）の存在に起因して「ヒステリシスループ」と呼ばれるループ状の履歴曲線が現れることが知られている。この場合二相間の転移は双方向に起こり、その転移経路のみが初期状態に依存して異なったものになる。

一方、我々が解析した系では、超固体相（または固体相）から超流動相への一方向にしか相転移が起こらないパラメータ領域が存在することが分かった。この領域では、超固体（または固体）から超流動状態への量子的「融解」は起こり得るが、逆の経路をたどって再び「固化」することは出来ない。相転移の経路のみが初期状態に依存する従来の双方向履歴現象とは異なり、この「異常な履歴現象」では相転移自体が一方向にしか起こらず、履歴曲線は通常ヒステリシスループ構造を取らない。これはこれまで知られていたものと全く異なる新しい一次相転移現象である。

2. 研究の目的

「異常な履歴現象」に関してのより深い理解を目指す。様々な系における異常履歴現象を調査し、その発現条件を統一的に明らかにする。また、この新奇相転移現象は Landau 理論の範疇で説明できるか否かも明らかにする。この研究を通して、ヒステリシスループを伴わない異常な履歴現象を新たな型の一次相転移として確立し、「一次相転移は常にループ構造を伴う」という教科書的期待を塗り替える。

3. 研究の方法

冷却原子系、量子スピン系の幾つかのモデルに対して異常履歴現象を調べる。具体的には、既に調べている三角格子上の極性 Bose 気体

以外に (i) 光格子中の Bose-Bose 混合気体、(ii) 光格子中の spin-1 Bose 気体、(iii) 三角格子形状を持つスピン二量体化合物の 3 つの系を対象にする。それらを統一的に俯瞰することで、異常履歴現象の発現条件を明らかにする。

(i)、(ii)の系では、超流動-Mott 絶縁体転移が一次相転移になることが知られている。この転移における履歴現象の転移過程を詳しく調べ、異常履歴現象の有無を確かめる。この超流動-Mott 絶縁体一次相転移は、実効的な一体問題近似の範囲で議論することが可能である。したがって超流動の秩序変数で基底エネルギーを展開することで Landau 理論を構成できる。基礎的な相転移理論である Landau 理論の範疇で異常履歴現象を記述することで、その存在を数学的に確立する。

さらに冷却原子系のみならず(iii)の量子スピン系においても異常履歴現象が存在し得ることを示し、この新奇相転移現象を一般化する。スピン二量体物質は相互作用のエネルギースケールに対し達成可能な温度領域が十分低いため、履歴現象の実験的観測が容易であると考えられる。さらに近年の高磁場実験の発展により、飽和磁化までの全磁化過程を見ることが出来るようになった。そこで実験的観測に向けて、この磁性体の系で異常な履歴現象が観測され得るパラメータ領域を明らかにする。具体的には大規模クラスター平均場近似と外挿理論を合わせて用い、定量的な量子相図を明らかにする。

4. 研究成果

まず我々は、2成分 Bose-Hubbard 模型で記述される光格子中 Bose-Bose 混合気体の一次相転移現象に注目した。この系の、特に等方的な場合の基底状態相図は Gutzwiller 近似や摂動法などを用いて良く調べられている。

異種粒子間相互作用が斥力の場合は、サイトあたりの粒子数が偶数個のときに超流動-Mott 絶縁体転移が一次転移になることが予想されている。我々はこの一次相転移に伴って「異常な履歴現象」が現れることを示した。例えば、Mott 絶縁体相の初期状態から化学ポテンシャルを変化させた場合、準安定解が存在しなくなる点で状態が不安定化し超流動相へ転移する。しかし、逆に超流動相から出発した場合には状態が常に(準)安定性を保つため、Mott 絶縁体相への転移は起こらない。この一方向の転移過程では、通常ヒステリシスループは形成されない。まったく同様のことが光格子中 spin-1 Bose 気体の場合も起こる。また、Landau 理論による定式化にも成功し、秩序変数で展開したエネルギー関数の各項の指数ではなく「係数の振る舞い」が本質的に重要であることを示した。

上記の光格子中 Bose 気体における研究から得た知見から、スピン二量体物質のような磁性体の系でも同様な異常履歴現象が存在し得ると予測し、三角格子スピン二量体モデルにおける磁気相図の決定を行い、各相間の量子相転移現象について調べた。二量体内の強い反強磁性相互作用に加え、三角格子上に配置された各二量体間に働く弱い2種類の反強磁性相互作用 (direct, crossed) を考慮した。大規模クラスター平均場近似と外挿理論を合わせて用い、このモデルの量子状態の磁場依存性を解析した。その結果、1/3 磁化のプラトーにおいて固体秩序を持つシングレット-シングレット-トリプレット (sst) 状態が現れることが分かった。さらに、この状態から磁場を強くしていくとマグノンの Bose-Einstein 凝縮 (BEC) が起こり、対角 (固体) 秩序と非対角 (BEC) 秩序が共存する「超固体相」に相転移する。さらに sst 固体相と BEC 相の一次転移過程では、「固体状

態から BEC 状態への融解は起こるが、逆の経路をたどって再び固体状態に固化することができない」という異常履歴現象の存在を確認した。

これら複数の系における異常履歴現象の発現領域を俯瞰的に眺めることで、以下に挙げる発現条件を特定した。

- (I) 相図上で lobe 型領域を持つ相が存在する。(光格子中 Bose 気体系で Mott 絶縁体相、スピン二量体モデルでは sst 固体相。)
- (II) その lobe 型領域相とそれを取り囲む相の間の相転移が一次である。(lobe 領域が一次転移線で囲まれている。)

これら2つの条件を満たしていれば、異常な履歴現象は一般的に起こり得る普遍的な現象である。今後の実験的観測が期待される。

ここまでの結果に関して、計9回の学会発表と計3報の学術論文出版を行った。さらに現在、スピン二量体モデルの研究に関する1報の論文を投稿、査読中である。

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3件)

① Daisuke Yamamoto, Akiko Masaki, and Ipeei Danshita, 「Quantum phases of hardcore bosons with long-range interactions on a square lattice」, 『Physical Review B』, American Physical Society, Vol. 86, 054516 (2012). 査読有り

② Daisuke Yamamoto, Ipeei Danshita, and Carlos A. R. Sá de Melo, 「Anomalous hysteretic behavior in a system of dipolar Bose gases」, 『Journal of Physics: Conference Series』, IOP Publishing Ltd, Vol. 400, 012083 (2012). 査読有り

③ Daisuke Yamamoto, Ipei Danshita, and Carlos A. R. Sá de Melo, 「Dipolar bosons in triangular optical lattices: Quantum phase transitions and anomalous hysteresis」, 『Physical Review A』, American Physical Society, Vol. 85, 021601(R) (2012). 査読有り

〔学会発表〕(計9件)

① 山本大輔, 尾崎剛, Carlos A. R. Sá de Melo, 段下一平, 「光格子中の Bose 混合気体における超流動-Mott 絶縁体一次転移と履歴現象」, 『日本物理学会第68回年次大会』, 29aEE-1, 広島大学, 2013年3月29日.

② 山本大輔, 段下一平, 「スピン二量体化合物における超固体相と異常な履歴現象」, 『日本物理学会秋季大会』, 20pAC-11, 横浜国立大学, 2012年9月20日.

③ Daisuke Yamamoto, Ipei Danshita, and Carlos A. R. Sá de Melo, 「Quantum phases and anomalous hysteresis of dipolar Bose gases in a triangular optical lattice」, 『The 23rd International Conference on Atomic Physics (ICAP2012)』, Mo-079, Palaiseau, France, July 23, 2012.

④ Daisuke Yamamoto, Ipei Danshita, and Carlos A. R. Sá de Melo, 「Anomalous hysteresis of Bose gases in an optical lattice」, 『Workshop on Quantum Simulations with Ultracold Atoms』, Trieste, Italy, July 30, 2012.

⑤ Daisuke Yamamoto and Ipei Danshita, 「Supersolids and Anomalous Hysteresis in Frustrated Spin-Dimer Model」, 『The APS March Meeting』, F15.3, Baltimore, USA, March 19, 2013.

⑥ 山本大輔, 段下一平, Carlos A. R. Sá de Melo, 「光学格子中 Bose 気体のリエントラント一次相転移における異常な履歴現象」, 『Ultracold Gases: Superfluidity and Strong Correlations (USS-2012)』, B-3, 東京理科大学, 2012年1月12日. 招待講演

⑦ 山本大輔, 段下一平, 「光格子中の Bose 気体における異常な履歴現象」, 『日本物理学会秋季大会』, 21pEE-2, 富山大学, 2011年9月21日.

⑧ Daisuke Yamamoto, Ipei Danshita, and Carlos A. R. Sá de Melo, 「Re-entrant first-order phase transitions and anomalous hysteresis of dipolar Bose gases in a triangular optical lattice」, 『The APS March Meeting』, D4.15, Boston, USA, February 27, 2012.

⑨ Daisuke Yamamoto, Ipei Danshita, and Carlos A. R. Sá de Melo, 「Anomalous hysteretic behavior in a system of dipolar Bose gases」, 『26th International Conference on Low Temperature Physics (LT26)』, 12P-A011, Beijing, China, August 12, 2011.

〔その他〕

ホームページ等

<https://sites.google.com/site/daisukeyamamoto624/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

山本 大輔 (YAMAMOTO DAISUKE)

独立行政法人理化学研究所・古崎物性理論研究室・基礎科学特別研究員

研究者番号：80603505