論文内容の要旨

論文題目　Study on the Coexistence of Diagonal and Off-Diagonal Long Range Orders in Lattice Bose Systems

（格子ボース系における対角・非対角長距離秩序の共存についての研究）

氏名　山本啓介

対角長距離秩序 (DLRO) 秩序と非対角長距離秩序 (ODLRO) の共存状態は超固体状態と呼ばれる。DLRO とは粒子の位置や磁化などの物理量の観測量自身が秩序化するもので、たとえば粒子の配置が長距離にわたって整列する固体状態を表している。一方 ODLRO は超流動や超伝導などにおいて、波動関数の位相が長距離の相関を持つことを表している。従って超固体とは固体性と超流動性を同時に持つという新奇な特徴を持っている。E. Kim ら (2004) によって固体 ^{4}He における NCRI が観測されて以来、超固体に対する精力的な研究が行われるようになった。格子ガスモデルを用いた研究では、粒子数密度が整合な場合 ($\rho = 1/2$) からずれており、かつ粒子同士の重なりが許されるとき (ソフトコア性) に超固体が実現されることが明らかにされている。特に１，２次元における研究では $\rho > 1/2$ でのみ超固体が実現されることが示されており、このことから超固体は固体を組んでいる粒子の上を超流動化した余剰粒子が動いているという描像で理解することができる。しかしながら $\rho < 1/2$ の場合については、上記の描像では理解できない。この領域においては、平均場では超固体は実現するものの、１，２次元では実現が確認されなかった。従って、３次元の場合ではこのような超固体の実現するか、実現するとしたらそのメカニズムは何かという問題が生ずる。一方でこれら一連の研究は主に秩序パラメータを用いた基底状態の研究であり、超固体自身の持つ性質についてはまだ十分に理解されているとは言いがたい。

本研究の目的はボース・ハバードモデルにおける超固体の実現条件とその性質を調べることである。我々の扱うボース・ハバードモデルは次のようなハミルトニアンで

表される。

$$\mathcal{H} = -t\sum_{<ij>}(a_i^\dagger a_j + a_j^\dagger a_i) + \frac{1}{2}U\sum_i n_i(n_i-1)$$
$$+V\sum_{<ij>} n_i n_j - \mu\sum_i n_i$$

ここで t は最近接間のホッピングを、U と V はそれぞれオンサイト相互作用、最近接相互作用を、μ は化学ポテンシャルを表す。このモデルでは、超固体は固体の秩序パラメータ S_π と超流動の秩序パラメータ ρ_s が同時に有限値を持つ状態として定義される。

第３章では確率級数展開法によるシミュレーションを行うことにより、３次元立方格子系において、基底状態で超固体が実現することを示した。まず秩序パラメータの μ 依存性を調べた結果、１，２次元のときと同様に粒子数密度 $\rho > 1/2$ の広いパラメータ領域で超固体が実現することがわかった。一方 $\rho < 1/2$ の領域については、平均場では超固体が実現するのに対し１，２次元では実現されておらず、３次元の場合にこのような超固体が実現するかは興味深い問題である。そこでパラメータ空間上を探索した結果、$\rho < 1/2$ で超固体が実現することを確認した (図 1 左)。実際サイズ依存性を調べたところ、熱力学極限で $\rho < 1/2$ を保ちつつ２つの秩序パラメータが有限な値をとることがわかった (図 1 右)。この結果から、３次元の基底状態の相図が平均場の相図と定性的に一致することが判明した。

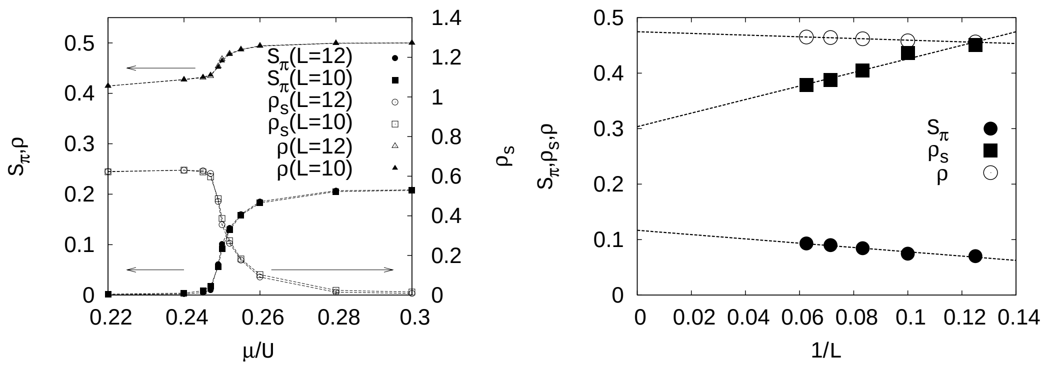

図 1: ３次元ボース・ハバードモデルにおける $\rho < 1/2$ での超固体。左図：$V/U = 1/6, t/U = 0.055$ における物理量の μ 依存性。$\mu/U \simeq 0.25$ 付近で密度 $\rho = 1/2$ 以下で固体と超流動の秩序パラメータが共存している。右図:$V/U = 1/6, t/U = 0.055, \mu/U = 0.2495$ での物理量のシステムサイズ依存性。$L \to \infty$ で $\rho < 1/2$ の超固体が実現されている。

第４章では超固体が有限温度においてどのように実現されるか、また超固体における固体秩序と超流動秩序の競合について調べた。熱揺らぎが共存に及ぼす影響を調べるため、各秩序パラメータの温度依存性を確率級数展開法を使って調べたところ、一方の秩序の発生が他方の秩序を阻害することがわかった。また複数のサイズでシミュレーションした結果から有限温度での相図を得た (図 2)。この相図上で我々は、

固相、常流動相、超流動相、超固体相の４つの相が接する４重臨界点が存在することを発見した。またこの相図上でも固体、超流動の競合を確認することができた。すなわち、超流動が存在するときの固体秩序の転移温度は、超流動がないときのものより低くなる。固体と超流動の順序が逆の場合にもこれは成り立っている。また我々はギンツブルグーランダウ理論によってもこの相図の性質を説明できることを示した。一方、我々は相図上における超固体領域が、オンサイト斥力 U を変えることによってどのような影響を受けるかを平均場近似を使って調べた。その結果、U を大きくするに従って超固体領域が小さくなり、$U \to \infty$ で完全に消えてしまうことがわかった。この結果は粒子の重なりの効果が固体と超流動の共存に重要な役割を果たしていることを意味している。

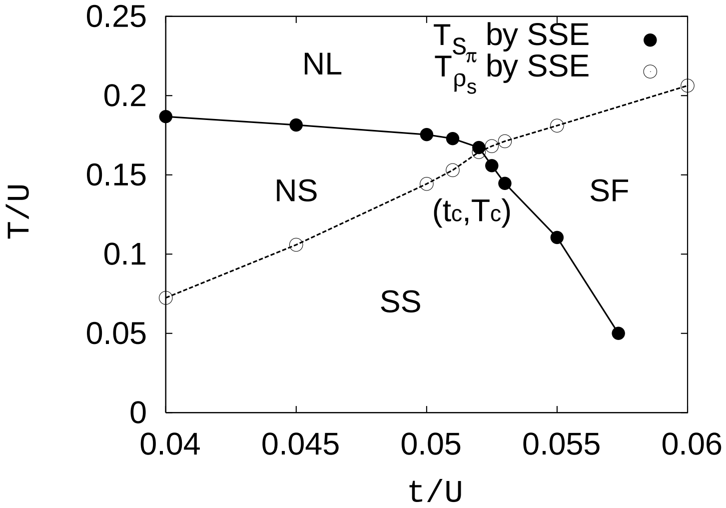

図 2: ３次元ボース・ハバードモデルにおける有限温度相図。パラメータを $V/U = 1/6$、$\mu/U = 0.7$ に固定し、$t - T$ 平面上で相図を描いている。固体転移温度 T_{S_π} は黒丸で、超流動転移温度 T_{ρ_s} は白丸で表されている。NL は常流動相、NS は固体相、SF は超流動相、SS は超固体相を表している。

第５章では１次元格子における超固体のエネルギー構造、及び振動するホッピング項に対する応答関数について調べた。格子系では、固体の分散関係は基底状態の二重縮退と、基底状態と第一励起状態の間のエネルギーギャップで特徴づけられる。一方超流動の分散関係は基底状態からの連続励起によって特徴付けられ、またこれは波数 $k = 0$ 上でも連続励起を持つ。それらに対し超固体の分散関係では、基底状態の二重縮退と、基底状態からの連続励起が存在することがわかった。これらはそれぞれ固体性、超流動性に対応していると思われる。さらにホッピング項の振動に対する応答関数 $\chi(\omega)$ を調べたところ、超流動では振動数 $\omega = 0$ からの連続スペクトルが存在するのに対し、超固体では離散的なスペクトルが存在することがわかった。超固体の応答関数は３つの特徴的なピーク群を持ち、そのうち一番小さな振動数を持つものが超固体を特徴付けている。それはこのピークが固体上の余剰粒子の運動に対応するものだからである。

第６章では第３章で発見された $\rho < 1/2$ の超固体がどのような描像で表されるかを議論した。$\rho > 1/2$ の超固体における超流動性が余剰粒子の動きで説明されたのに対し、$\rho < 1/2$ の超固体について我々は、固体を構成していた粒子が平衡位置から飛び出しもとの固体構造を壊さないまま動き続ける、という描像を提案した。ただしこの描像の妥当性を検証するためにはさらなる研究が必要である。

この研究により、３次元系では $\rho > 1/2$ と $\rho < 1/2$ のどちらの領域でも、超固体が実現することがわかった。またオンサイト斥力 U を大きくするとこれらの超固体の実現領域が小さくなり、$U \to \infty$ で消えてしまうことから、どちらの場合でも超固体の実現には粒子の重なりの効果が重要な役割を果たしていることがわかった。これらの結果は超固体の描像を理解する上で重要な手がかりとなる。さらに超固体に対する熱揺らぎの効果を調べた結果、４重臨界点を含む相図を得た。またこの研究により超固体を、秩序パラメータだけでなく、エネルギー構造や応答関数で特徴づけることができた。