Analysis of cold fermi gas with p-orbit in optical lattice

小林恵太、奥村雅彦、太田幸宏、山田進、町田昌彦

日本原子力研究開発機構システム計算科学センター
CREST (JST)
理化学研究所

背景：冷却中性原子気体

・冷却中性原子気体

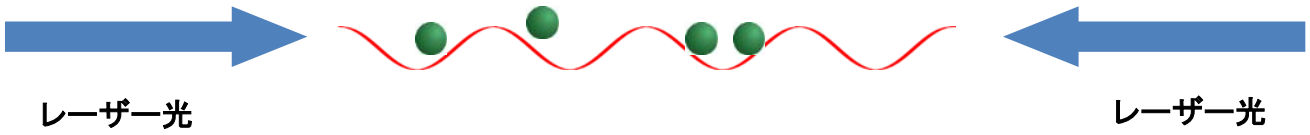
電場・磁場により空間的に捕捉された原子気体：クリーンな系

実験制御性が高い：相互作用の強さ、閉じ込めポテンシャルの形状

→ 制御可能な理想的な量子多体系

・光学格子ポテンシャル

対抗するレーザー光により作られる周期的なポテンシャル



背景：光学格子

・Mott絶縁体転移

2002年：超流動・絶縁体転移の観測（ボゾン）

2008年：Mott絶縁体の観測(フェルミオン)

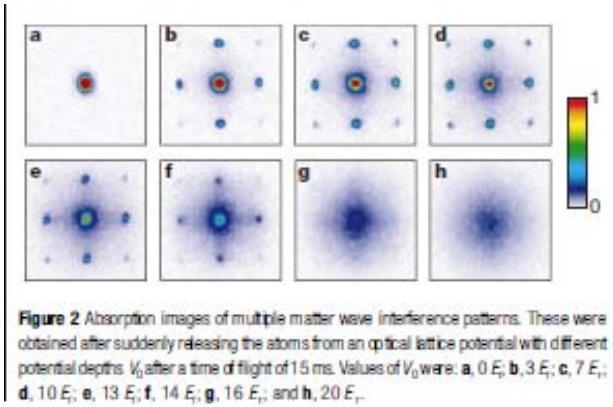
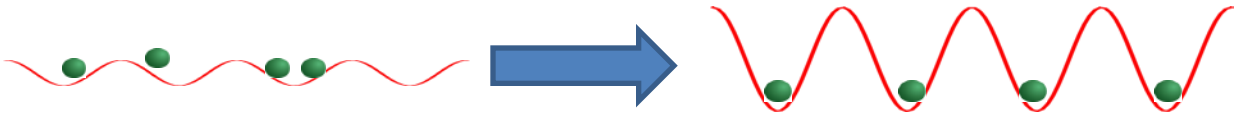


Figure 2 Absorption images of multiple matter wave interference patterns. These were obtained after suddenly releasing the atoms from an optical lattice potential with different potential depths V_0 after a time of flight of 15 ms. Values of V_0 were: **a**, 0 E_r; **b**, 3 E_r; **c**, 7 E_r; **d**, 10 E_r; **e**, 13 E_r; **f**, 14 E_r; **g**, 16 E_r; and **h**, 20 E_r.

Nature (London) **415**, 39 (2002).



金属状態

光学格子ポテンシャルを強くする

Mott状態

・ハバード模型（シングルバンド）によりよく記述される

$$H = -\sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow}\sum_{<i,j>} J a^{\dagger}_{\sigma,i} a_{\sigma,j} + U\sum_{i} a^{\dagger}_{\uparrow,i} a^{\dagger}_{\downarrow,i} a_{\downarrow,i} a_{\uparrow,i}$$

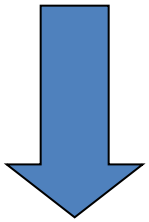
背景：光学格子（多バンド）

- **多バンド系**

実験的に高次のバンド(p-軌道)まで占有させることが可能 **[Phys. Rev. Lett. 99, 200405 (2007)]**

多バンド：高温超伝導（鉄系超伝導など）において本質的に重要

より多彩な物理の可能性：高スピン系、多バンド超流動、軌道秩序・・・



- **第二バンド（P-軌道）まで取り入れた理論**

P-軌道がハーフフィリングの場合、強結合領域でスピン3/2の反強磁性ハイゼンベルグモデルに帰着する Phys. Rev. B 77, 174431 (2008)

高次のスピンを多バンドを用いて中性原子気体で実現することが可能

目的:今回の発表

・一次元整数スピンのハイゼンベルグ模型を光学格子中で実現できないか？

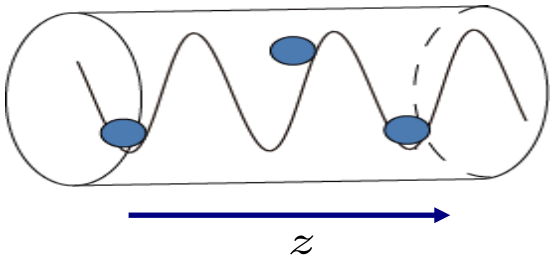
・スピンギャップを持つ系（ハルデーン相）の実現

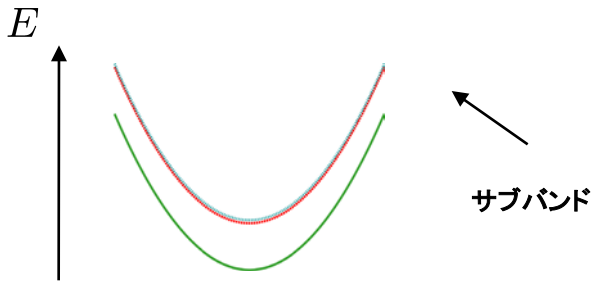
強結合のボゾン系

多成分フェルミオン系（スピン・スピン相互作用を利用した提案）

Phys. Rev. B 81, 020408(R) (2010)

・擬一次元系を考える:サブバンドを用いてスピン1系を作る



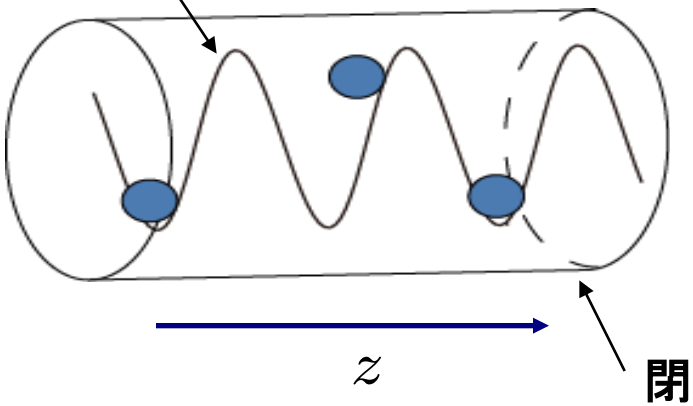


Ex)閉じ込めが強い葉巻型トラップ

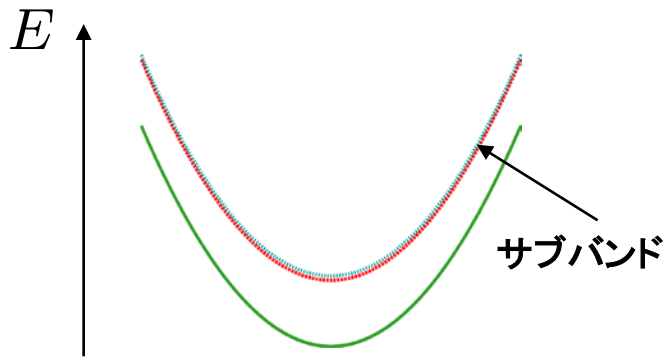
定式化：擬一次元系

$$H = \int d\boldsymbol{x} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left[\psi_\sigma^\dagger \left(\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{\mathrm{opt}}(z) + V_{\mathrm{vert}}(\boldsymbol{x}_\perp) \right) \psi_\sigma + \frac{g}{2} \psi_\sigma^\dagger \psi_{\bar{\sigma}}^\dagger \psi_{\bar{\sigma}} \psi_\sigma \right]$$

光学格子



閉じ込めポテンシャル



垂直方向：閉じ込めポテンシャルの固有関数で展開

$$\psi_\sigma(\boldsymbol{x}) = \sum_n \psi_{n,\sigma} u_n(\boldsymbol{x}_\perp) \qquad \left[\frac{-\hbar^2 \nabla_\perp^2}{2m} + V_{\mathrm{vert}}(\boldsymbol{x}_\perp) \right] u_n(\boldsymbol{x}_\perp) = \epsilon_n u_n(\boldsymbol{x}_\perp) \,,$$

z方向：ワニエ関数で展開

$$\psi_{n,\sigma}(z) = \sum_i a_{n,\sigma,i} W_i(\boldsymbol{x}) \,,$$

強結合近似

（第1サブバンドまで取り入れる）

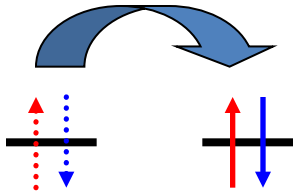
擬一次元ハバードハミルトニアン

$$H = \sum_n \left[-\sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{<i,j>} J a^\dagger_{n,\sigma,i} a_{n,\sigma,j} + \sum_{i,\sigma} \epsilon_n a^\dagger_{n,\sigma,i} a_{n,\sigma,i} + U_{nn} \sum_i a^\dagger_{n,\uparrow,i} a^\dagger_{n,\downarrow,i} a_{n,\downarrow,i} a_{n,\uparrow,i} \right]$$
$$+ \sum_{n \neq n'} U_{nn'} \left[a^\dagger_{n,\uparrow,i} a^\dagger_{n,\downarrow,i} a_{n',\downarrow,i} a_{n',\uparrow,i} + a^\dagger_{n,\uparrow,i} a^\dagger_{n',\downarrow,i} a_{n',\downarrow,i} a_{n,\uparrow,i} + a^\dagger_{n,\uparrow,i} a^\dagger_{n',\downarrow,i} a_{n,\downarrow,i} a_{n',\uparrow,i} \right]$$

n ：基底バンド、第一サブバンド（2重縮退）

$$J = -\int dz W^*_{i+1}(z) u^*_n(\boldsymbol{x}_\perp) \left[\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{\mathrm{opt}}(z) + V_{\mathrm{ho}}(\boldsymbol{x}_\perp) \right] W_i(z) u_n(\boldsymbol{x}_\perp)$$

$$U_{n,n'} = \int d\boldsymbol{x} |W_i(z)|^4 |u_n(\boldsymbol{x}_\perp)|^2 |u_{n'}(\boldsymbol{x}_\perp)|^2$$

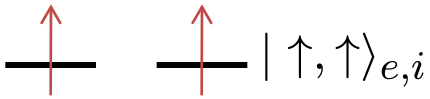


ペアホッピング項

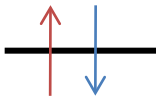
バンド間スピン-スピン相互作用　$-U_{nn'} \left(\boldsymbol{S}_{n,i} \cdot \boldsymbol{S}_{n',i} - \frac{1}{4} n_{n,i} n_{n',i} \right)$

摂動論による解析

第一サブバンドがハーフフィリングの状態を考える

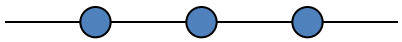


$|\uparrow,\uparrow\rangle_{e,i}$



$|d\rangle_{g,i}$

i-サイト



i-1　　i　　i+1

$E_{S=0}$ ——— $S=0$

$E_{S=1}$ ——— $S=1$

ハーフフィリングでの固有状態

強結合極限　$J=0$

$$E_{S=1} = U_{gg} + 2U_{ge} + 2(\epsilon_g + \epsilon_e)$$

スピン1（トリプレット）

$$S=1 \quad |d\rangle_g|\uparrow,\uparrow\rangle_e \quad |d\rangle_g|\downarrow,\downarrow\rangle_e \quad |d\rangle_g\frac{|\downarrow,\uparrow\rangle_e + |\uparrow,\downarrow\rangle_e}{\sqrt{2}}$$

$$E_{S=0} = U_{gg} + 2U_{ge} + U_{ee'} + 2(\epsilon_g + \epsilon_e)$$

スピン0（シングレット）

$$S=0 \quad |d\rangle_g\frac{|\downarrow,\uparrow\rangle_e - |\uparrow,\downarrow\rangle_e}{\sqrt{2}}$$

摂動の2次 (Brillioun-Wigner)

$$H_J = \sum_e P_G H_{\text{hop}} P_e \frac{1}{E_G - H_U} P_e H_{\text{hop}} P_G$$

P_G 基底状態S=1への射影演算子

P_e 励起状態への射影演算子

$$H_J = \sum_{<i,j>} \sum_{n,n'} \frac{1}{2} J_{\text{ex}} \left(a^\dagger_{n,\sigma,i} a_{n,\sigma',i}\right) \left(a^\dagger_{n',\sigma',j} a_{n',\sigma,j}\right)$$

$$J_{\text{ex}} = \frac{J^2}{2(U_{ee} + U_{ee'})}$$

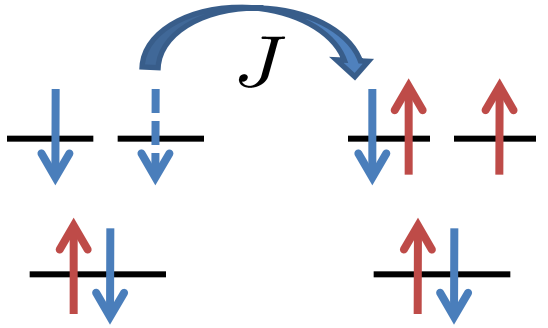
スピン1演算子

$$\boldsymbol{S}_i = \frac{1}{2} \sum_n \boldsymbol{a}^\dagger_{i,n} \boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{a}_{i,n}$$

$$H_J = J_{\text{ex}} \sum_{<i,j>} \boldsymbol{S}_i \boldsymbol{S}_j + \text{const}$$

一次元スピン1ハイゼンベルグモデル

中間状態



$E = U_g + U_{ge} + 2(\epsilon_g + \epsilon_g)$

$|d\rangle_g|0,\uparrow\rangle_e$

$|d\rangle_g|0,\downarrow\rangle_e$

$|d\rangle_g|\uparrow,0\rangle_e$

$|d\rangle_g|\downarrow,0\rangle_e$

$E = U_g + 3U_{ge} + U_e + U_{ee} + 2(\epsilon_g + \epsilon_g)$

$|d\rangle_g|d,\uparrow\rangle_e$

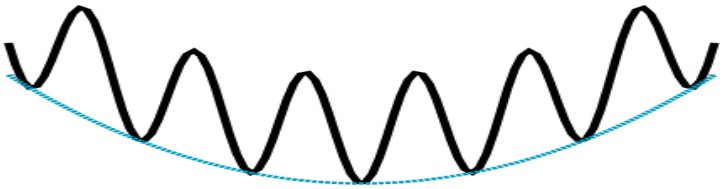
$|d\rangle_g|d,\downarrow\rangle_e$

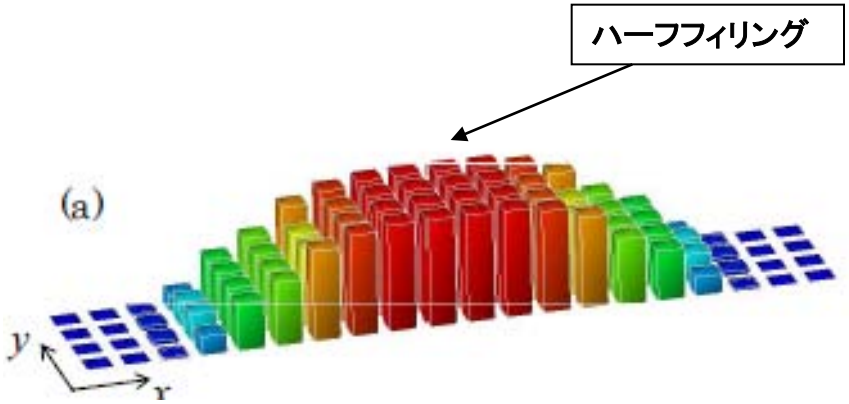
$|d\rangle_g|\uparrow,d\rangle_e$

$|d\rangle_g|\downarrow,d\rangle_e$

数値計算（現在進行中）

実際の実験：光学格子＋調和振動子





M. Machida, M. Okumura, and S. Yamada

Phys. Rev. A **77,** 033619 (2008)

密度行列繰り込み群法（DMRG）による数値計算

- ハーフフィリングの領域にハルデーン相が現われると予測される
- スピン分布にスピンギャップの影響があらわれないか？→とくにスピンインバランス系で
- 相関長、スピンギャップの見積もり

まとめと今後

- 中性原子気体フェルミオン擬一次元系がハーフフィリングにおいてスピン1ハイゼンベルグ模型に帰着することを示した

- **大規模並列計算をもちいた密度行列繰り込み群法（DMRG）による数値計算**
  - **擬一次元光学格子＋調和振動子を含めた数値計算**
  - **スピンインバランス系、相関長、スピンギャップの計算など**
  - **有限温度での計算**
  - **時間依存DMRGによるスピンダイナミックスの計算**