

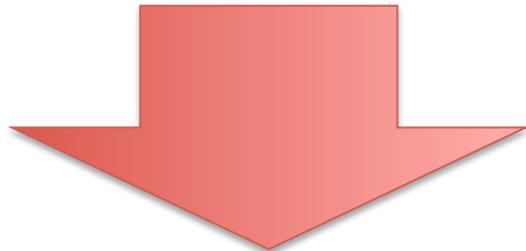
光格子系における長岡強磁性

奥村雅彦^{a,b,c,d}, 山田進^{a,b,c}, 町田昌彦^{a,b}, 青木秀夫^e

- a) 日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター
- b) CREST(JST)
- c) 計算科学研究機構
- d) 理化学研究所
- e) 東京大学 理学部

はじめに

- 磁石の素
 - スピン
- 磁石
 - スピンが揃ったもの



なぜスピンは揃うのか？

- 強磁性の発現機構
- “完全に”人工的な磁石を作る事はできるか？

強磁性の種類

- 局在強磁性
 - 止まっている電子のスピンが揃う
 - 模型としては強磁性は自明(強磁性ハイゼンベルグ模型)
- 金属強磁性
 - 動き回る電子のスピンが揃う
 - 発現機構は現在も探求中(ハバード模型)
 - 平均場的機構
 - ストーナー強磁性
 - 強相關的機構
 - 平坦バンド強磁性
 - 長岡強磁性



設計から実現まで人の手で磁石を作れるか？

ハバード模型

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \sum_{i,\sigma} V_i n_{i\sigma} + \sum_i U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

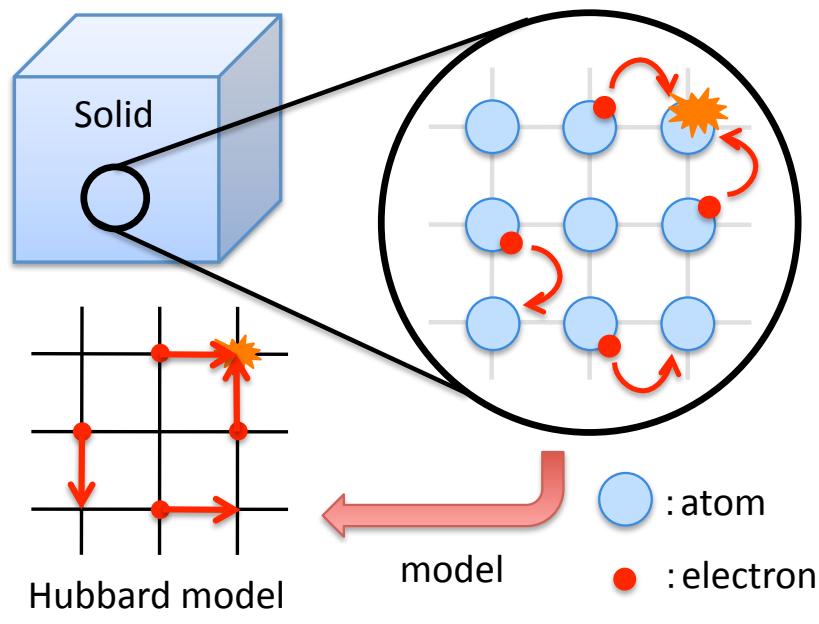
↑ ホッピングの強さ ↑ ポテンシャルの強さ ← 相互作用の強さ
 $(n_i = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma})$

- 固体内電子の簡易模型
 - 格子模型
 - 電子相関

ハバード模型で強磁性は出るのか？

c.f.) 強磁性ハイゼンベルグ模型

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$$



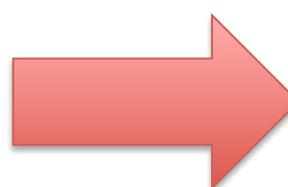
長岡強磁性

- 長岡強磁性の条件(厳密証明)

- ハバード模型

- $U = \infty$

- 1ホール



Y. Nagaoka, Phys. Rev. **147**, 392 ('66).

H. Tasaki, Phys. Rev. B **40**, 9192 ('89).

とても厳しい条件

- 条件を緩めて一般化できないか？
- どのように実現するか？

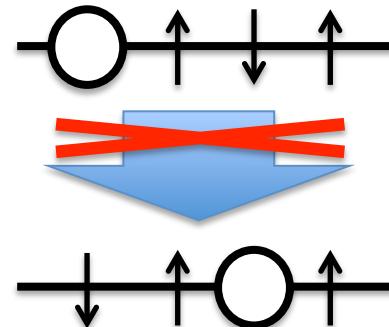
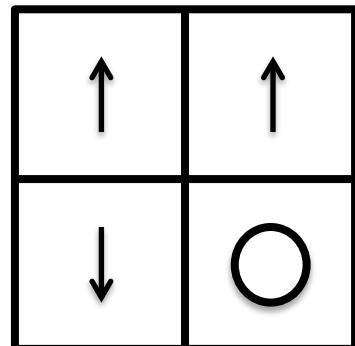
系の大きさに関わらず、half-fillingから電子を1つ抜いた状態

- Connectivity condition

ホールを移動させる事で任意の状態を生成できる

- 例: 2次元正方格子

- 反例: 1次元系



長岡強磁性の拡張

- 有限ホール密度長岡強磁性 M. Kohno, PRB 56, 15015 (1997).

- 梯子型ハーバード模型

- $U = \infty$

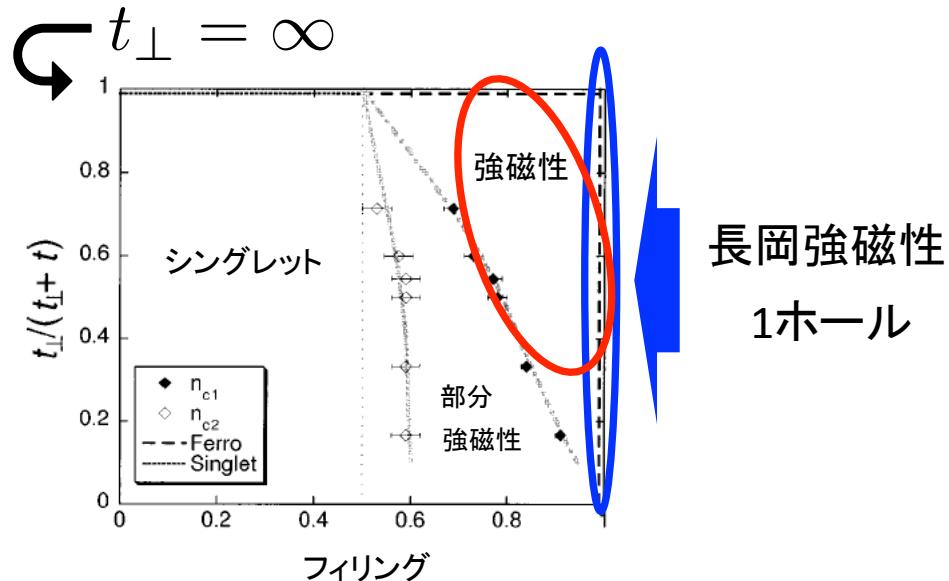
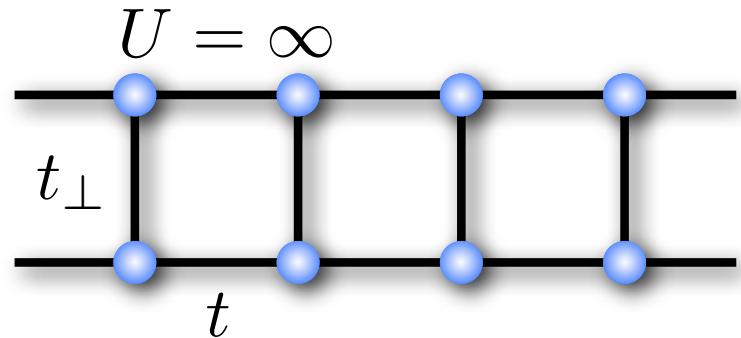
- 有限ホール密度

- 1ホールから条件を緩和

- Connectivity condition

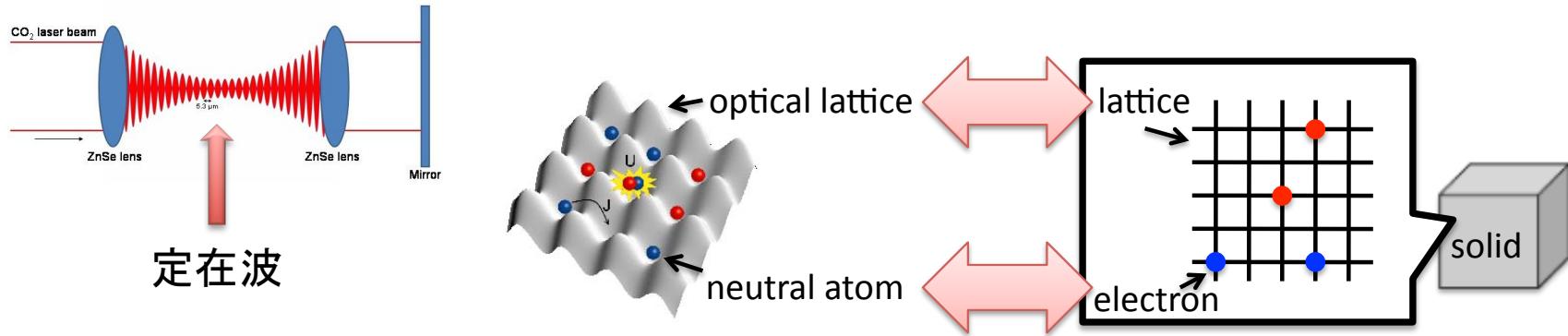
- OK!

- 厳密証明: $t_{\perp} = \infty$
 - 数値計算: それ以外



光格子系

- 光格子系
 - レーザーの定在波の谷に中性原子を閉じ込めた系



- 特徴
 - 不純物がない
 - 制御性が高い(格子構造や相互作用が可変)

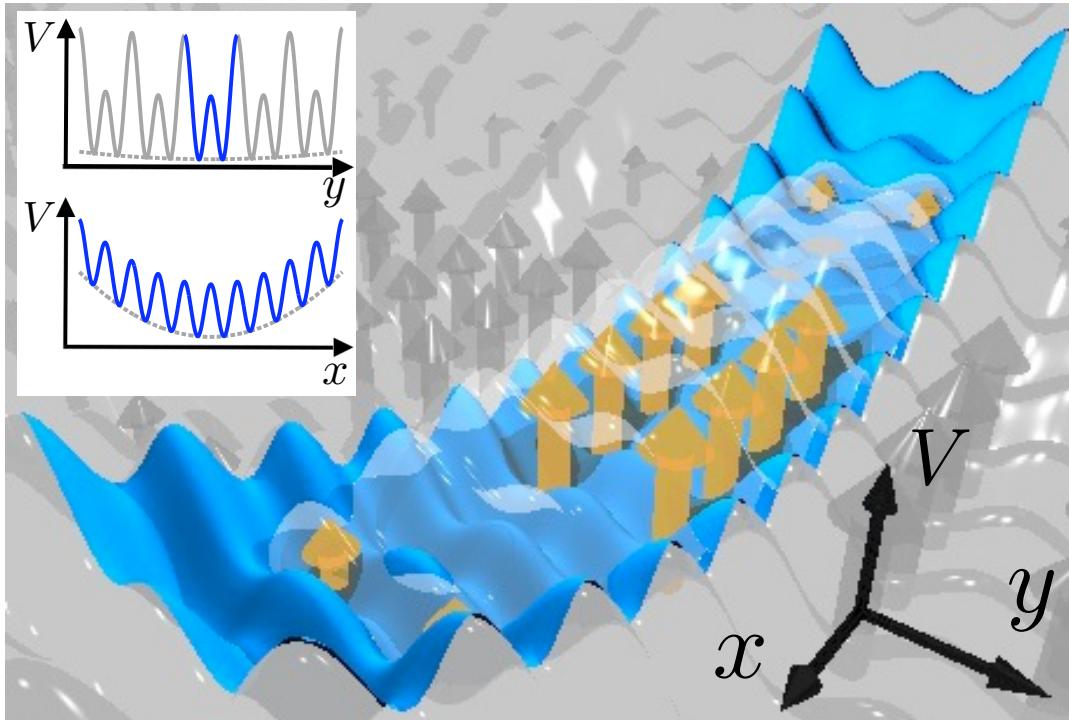
ハーバード模型の量子シミュレーター

量子シミュレーター

- 強相関電子系
 - 電子間相互作用が強い ⇒ ~~解析的手法~~
 - シミュレーション
 - 数値シミュレーション
 - 困難: 量子性 ← “重ね合わせの原理”(全ての状態を考慮)
 - 量子シミュレーター
 - 制御可能な量子系で対称となる量子系を模倣する
 - 原理的に数値シミュレーションの困難を克服している
- 
- 
- 新しい知見

2レッグ梯子状光学格子系

- 格子ポテンシャル(x 方向)
 - + 超格子ポテンシャル(y 方向)



基底状態:完全偏極相を含む相分離

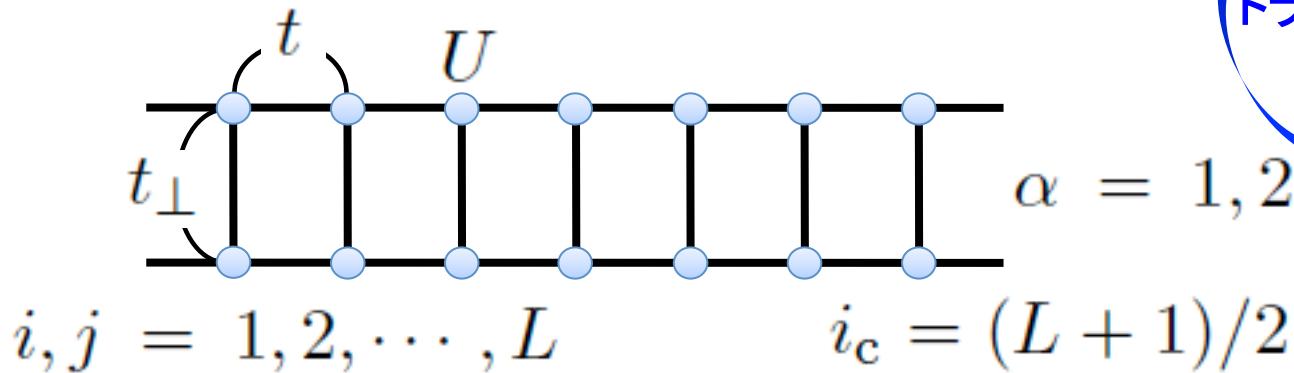
一般化した長岡強磁性の
• 実現方法
• パラメータ
• 観測方法
の提案

光格子系では
• U :有限
• ホール濃度:有限

模型とパラメータ

トラップ入り2レッグ梯子状ハバード模型

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \alpha, \sigma} c_{i\sigma}^{\alpha\dagger} c_{j\sigma}^{\alpha} - t_{\perp} \sum_{i, \langle \alpha, \beta \rangle, \sigma} c_{i\sigma}^{\alpha\dagger} c_{i\sigma}^{\beta} + \sum_{i, \alpha, \sigma} \frac{V(i - i_c)^2 n_{i\sigma}^{\alpha}}{U n_{i\uparrow}^{\alpha} n_{i\downarrow}^{\alpha}}$$



粒子数: $N = 100$

スピンバランス:

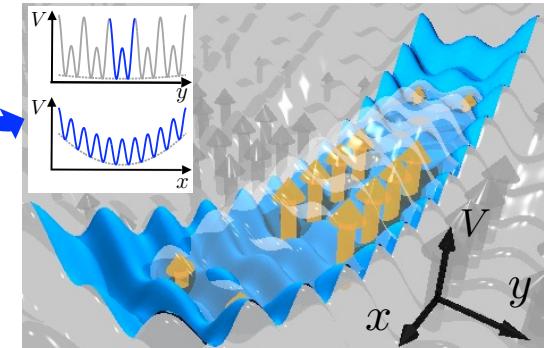
$$\underline{P} = (N_{\uparrow} - N_{\downarrow})/N$$

粒子密度: $n_i \equiv n_{i\uparrow}^1 + n_{i\downarrow}^1$

スピン密度: $n_{Si} \equiv n_{i\uparrow}^1 - n_{i\downarrow}^1$

U : 有限

トラップポテンシャル



無次元量の導入

ホッピングの比: $\tau = t/t_{\perp}$

相互作用の強さ: $\bar{U} = U/t_{\perp}$

トラップの強さ: $\bar{V} = V/t_{\perp} \times 10^3$

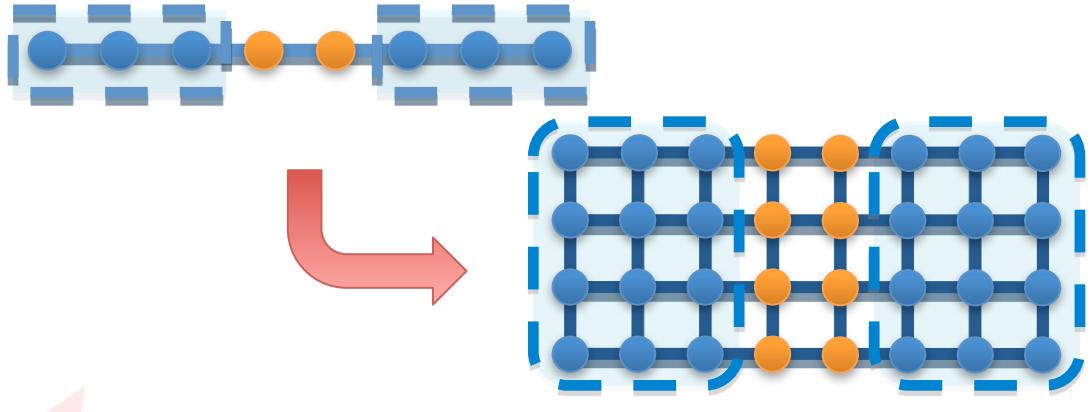
計算手法

- 並列化密度行列繰り込み群法

S. Yamada, MO, and M. Machida, JPSJ **78**, 094004 (2009).

- 梯子系に直接拡張

- 高精度
 - スケーリング



フェルミオンの梯子系において

- 相互作用効果
 - トラップ効果

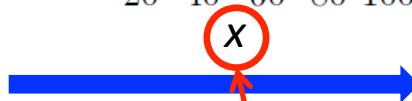
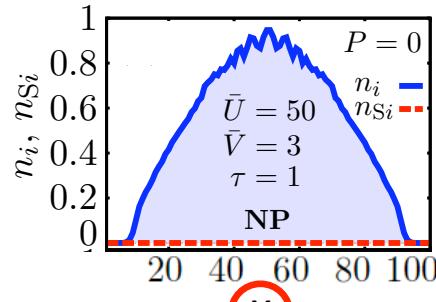
の両方を高精度で評価できる唯一の方法

スピノンインバランス効果 ($U=50$)

スピノンバランス: $P = (N_{\uparrow} - N_{\downarrow})/N$

粒子密度: $n_i \equiv n_{i\uparrow}^1 + n_{i\downarrow}^1$

スピノン密度: $n_{Si} \equiv n_{i\uparrow}^1 - n_{i\downarrow}^1$



NP: 非偏極、PP:部分偏極、FP:完全偏極

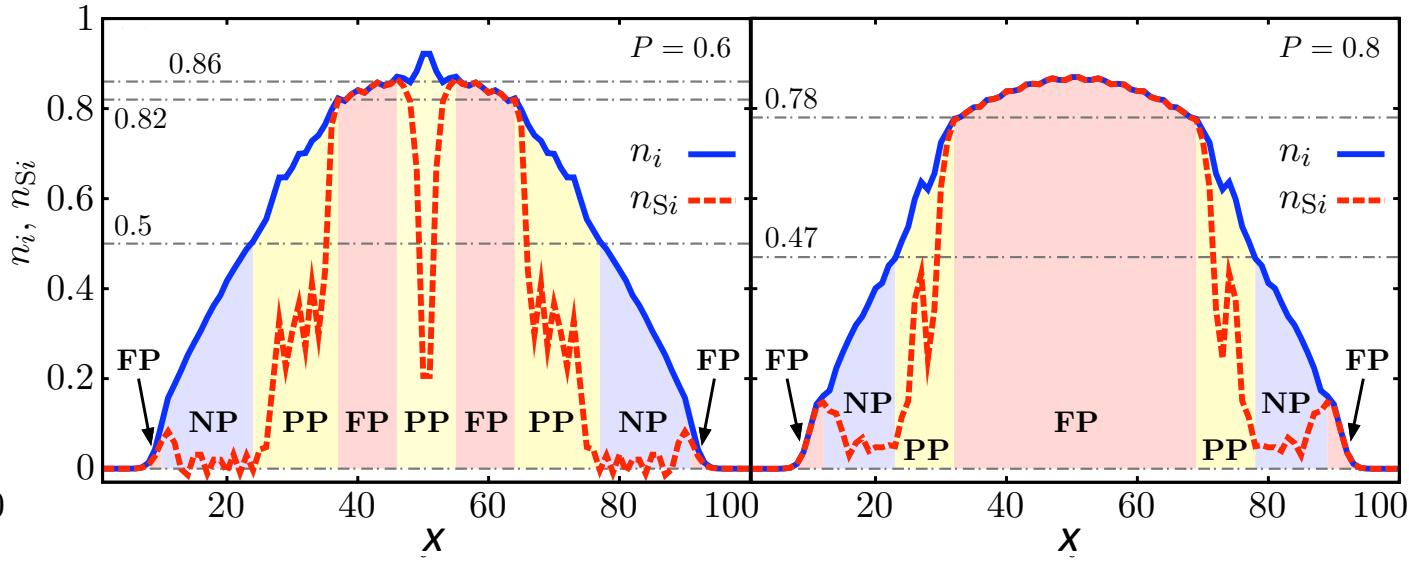
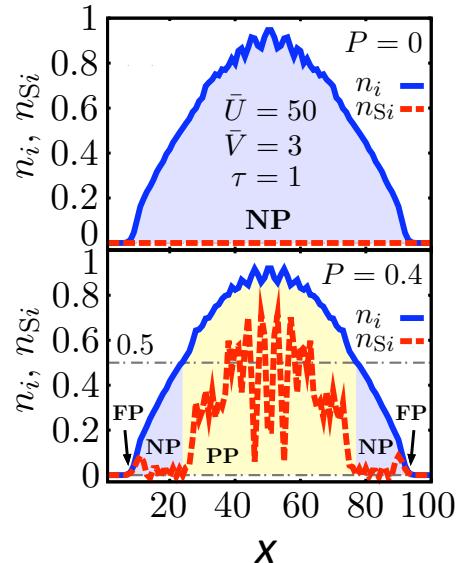
- $P=0$: 全域で非偏極

スピニンバランス効果 ($U=50$)

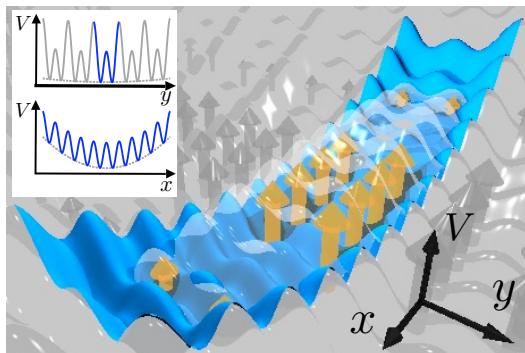
スピニンバランス: $P = (N_{\uparrow} - N_{\downarrow})/N$

粒子密度: $n_i \equiv n_{i\uparrow}^1 + n_{i\downarrow}^1$

スピニン密度: $n_{Si} \equiv n_{i\uparrow}^1 - n_{i\downarrow}^1$



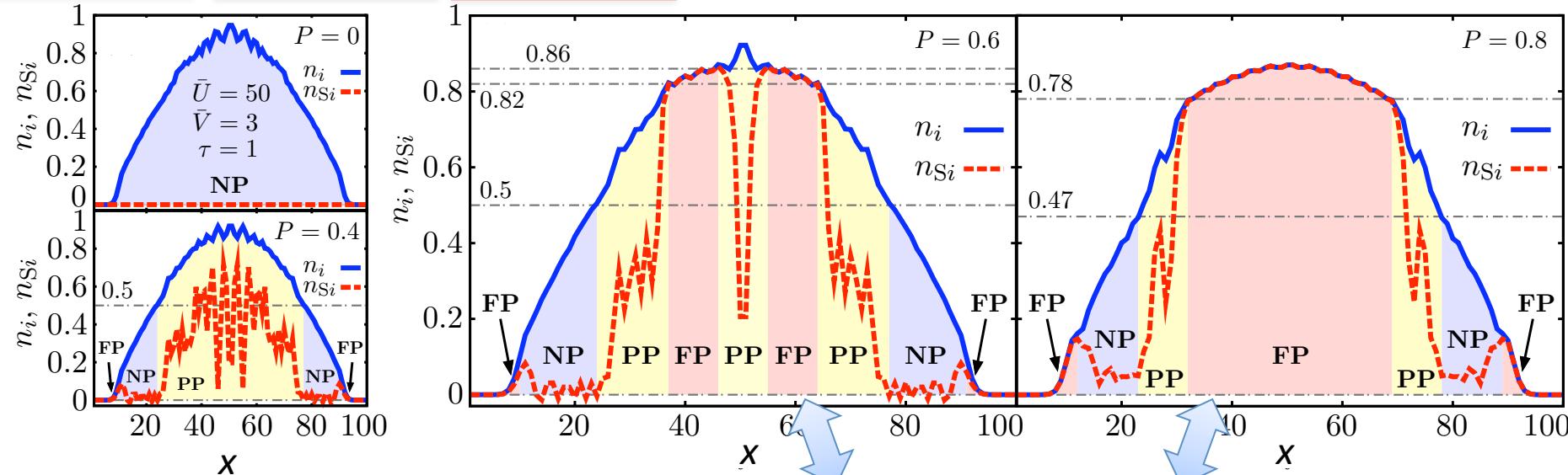
NP: 非偏極、PP:部分偏極、FP:完全偏極



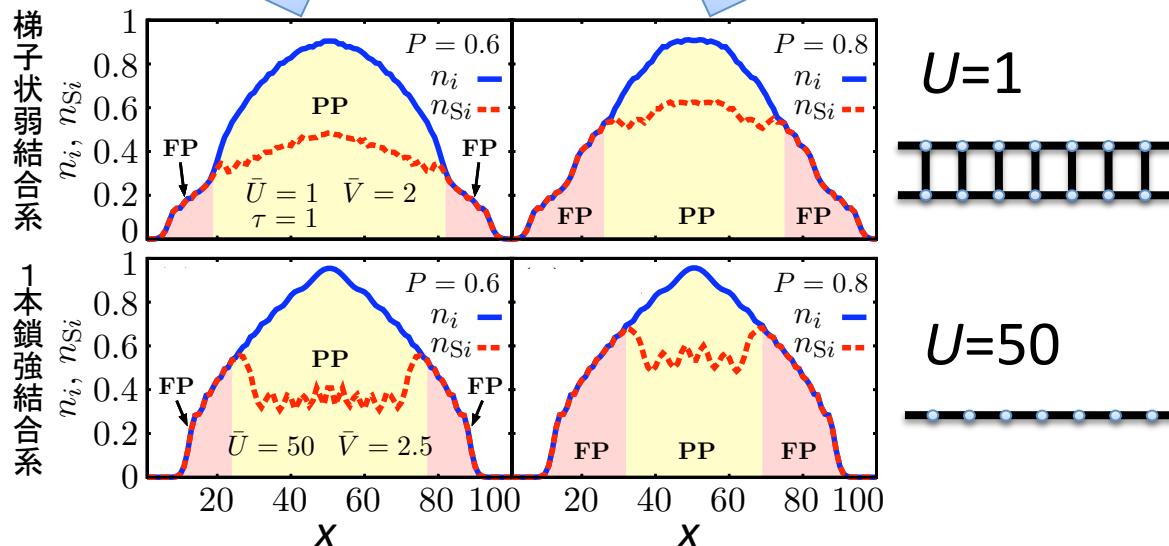
- $P=0$: 全域で非偏極
- $P=0.4$: 端に完全偏極相、その隣に非偏極相、中央に部分偏極相
- $P=0.6$: 複雑な相分離
- $P=0.8$: 中心部分に大きな完全偏極相

スピンインバランス効果(比較)

NP: 非偏極、PP:部分偏極、FP:完全偏極



- 梯子状弱結合系: トラップによってどちらのスピンも中心に集められ、部分偏極相と完全偏極相の単純な相分離
- 1本鎖強結合系: 同様に部分偏極相と完全偏極相の単純な相分離



相分離の起源

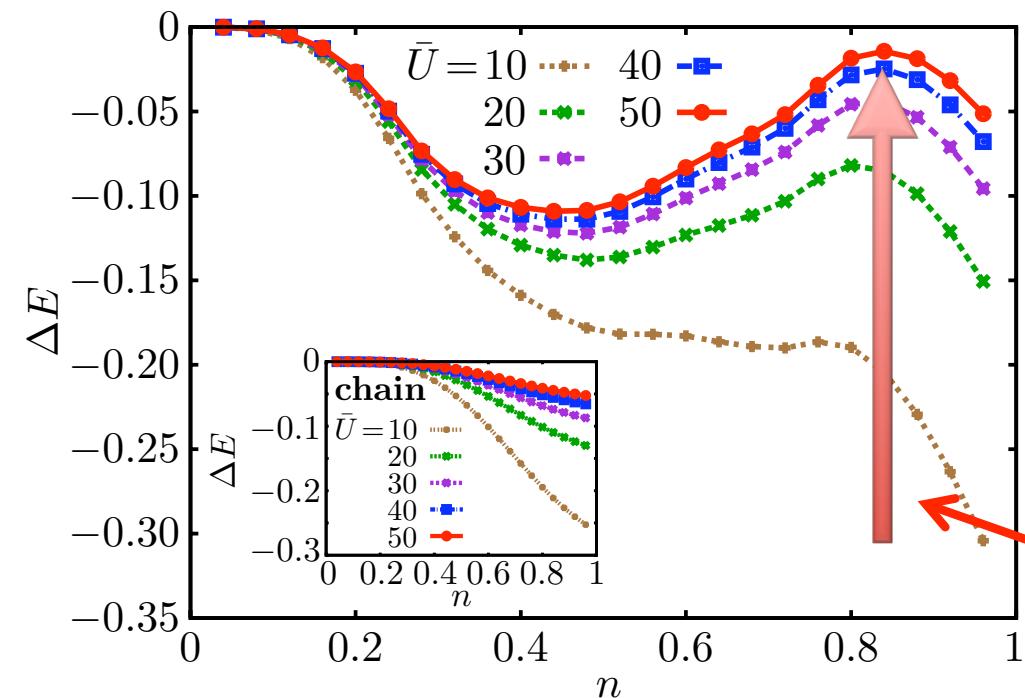
2レッグ梯子ハバード模型(一様系)：

$$\Delta E \equiv E_{S_z=S_{\text{full}}} - E_{S_z=0}$$



$S_z = 0$ の部分空間での基底状態のエネルギー

$S_z = N/2$ の部分空間での基底状態のエネルギー

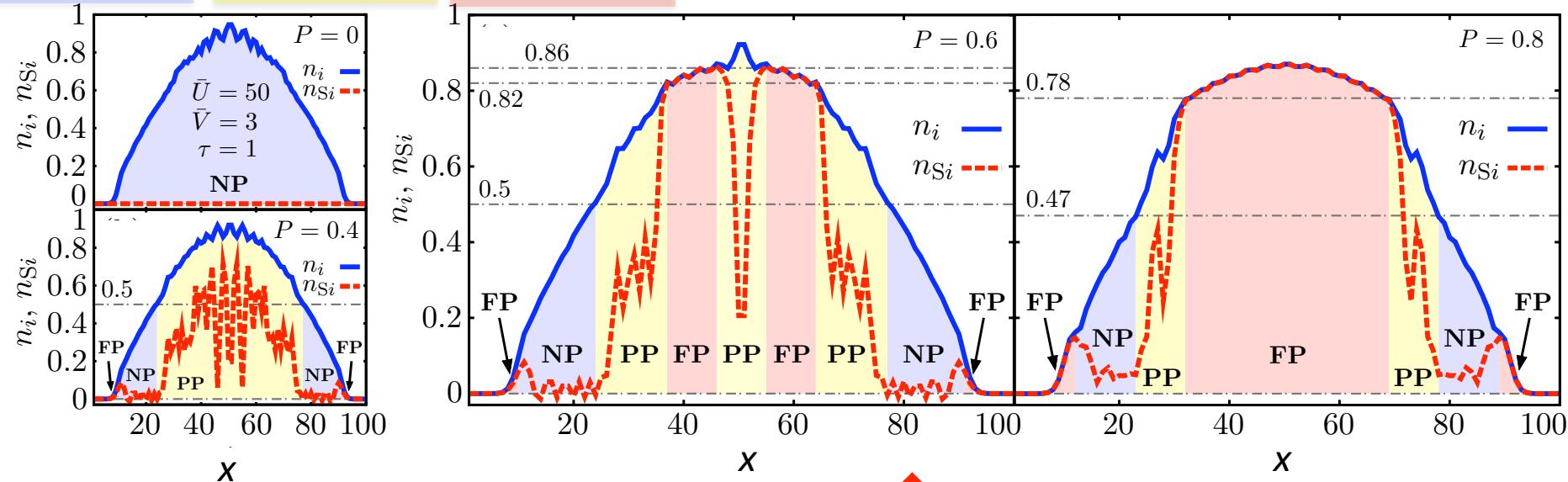


- ΔE が低い：ペアが安定
- ΔE が高い：マジョリティー単独でもエネルギーを損しない

“有限ホール密度長岡強磁性”
[M. Kohno, PRB 56, 15015 (1997).]

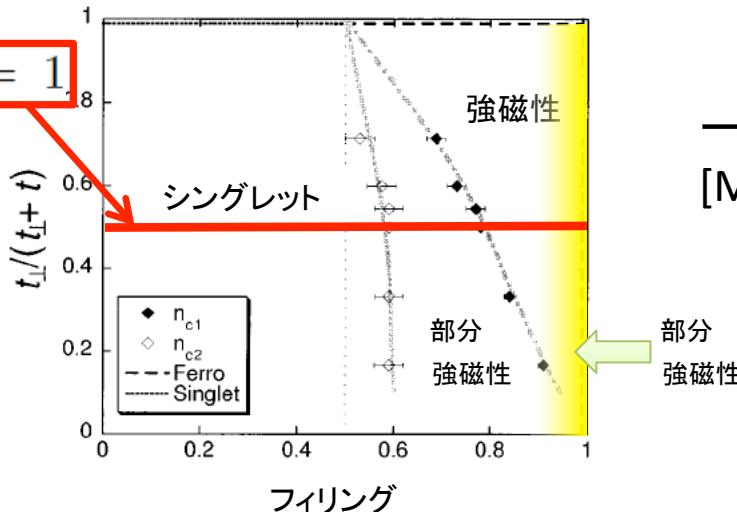
一様系の相図との対応

NP: 非偏極、PP:部分偏極、FP:完全偏極



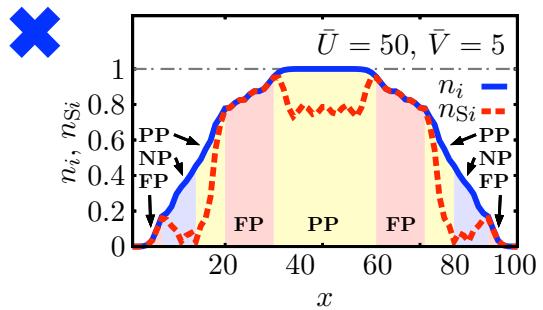
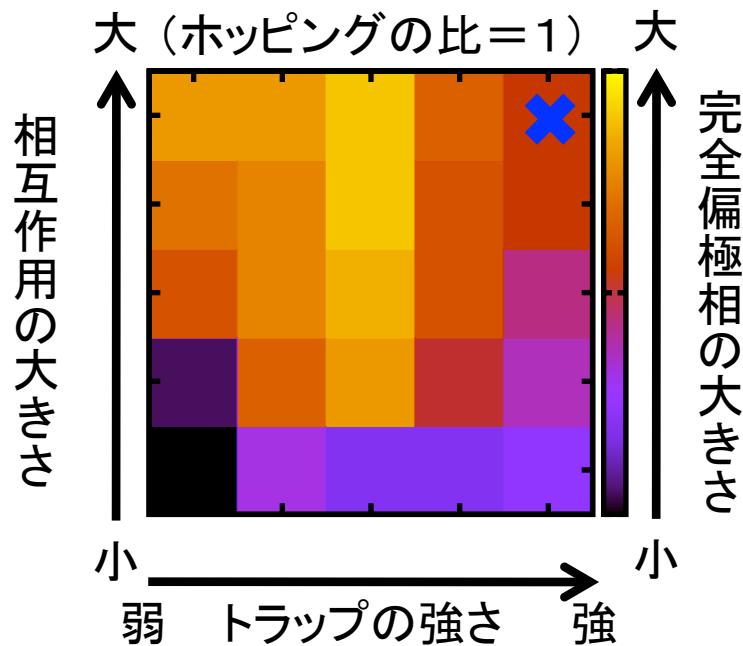
↑ ほぼ対応！

一様系での相図(U 有限)
[M. Kohno, PRB 56, 15015 (1997).]

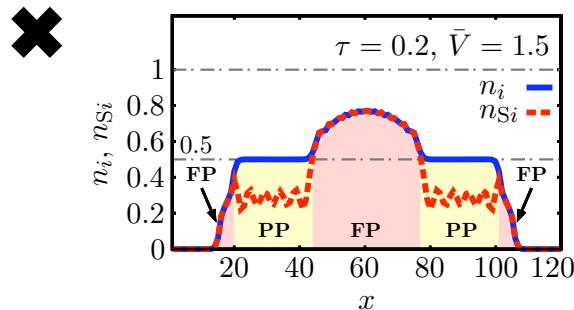
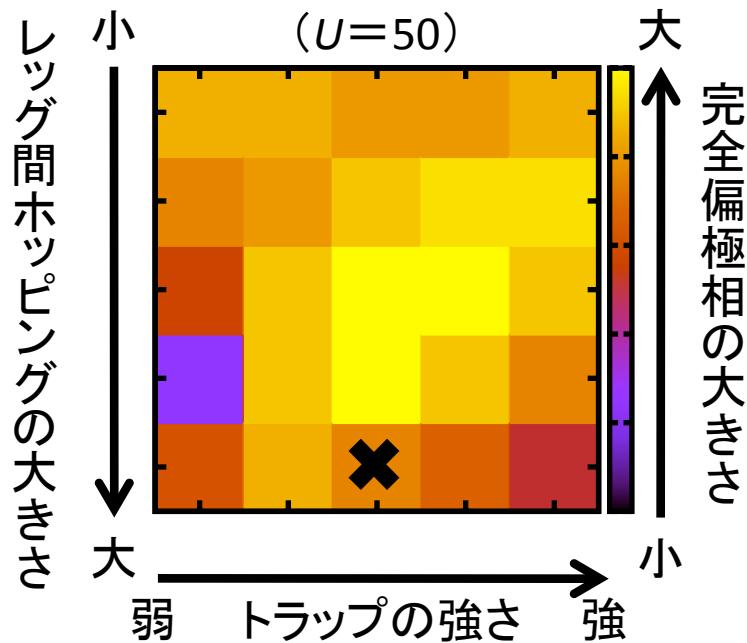


- 非偏極相: $n_i < 0.57$
- 部分偏極: $0.57 < n_i < 0.78$
- 完全偏極: $0.78 < n_i < 0.9$
- 部分偏極: $0.9 < n_i < 1$ (有限 U 効果)

強磁性相生成に最適なパラメータ

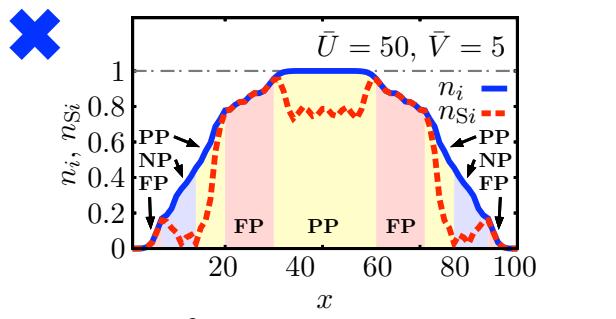
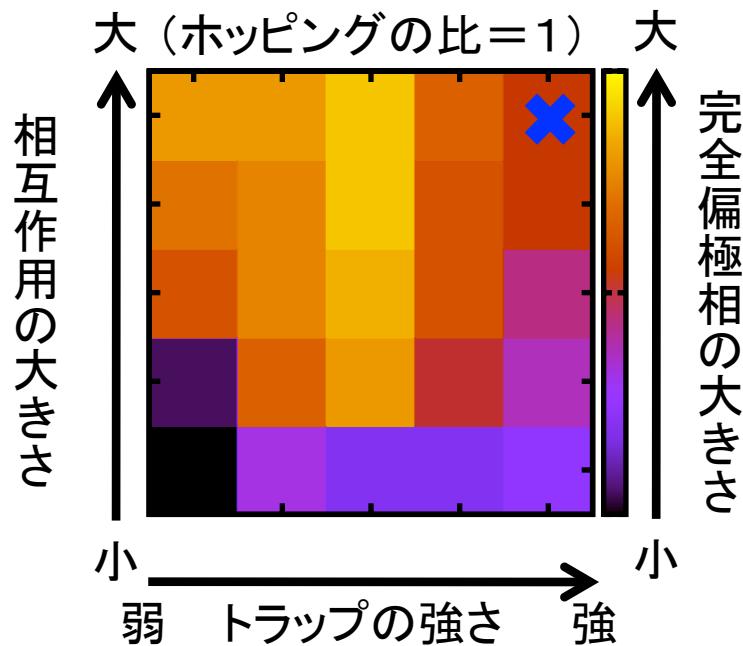


トラップ強 \Rightarrow モット相が発現

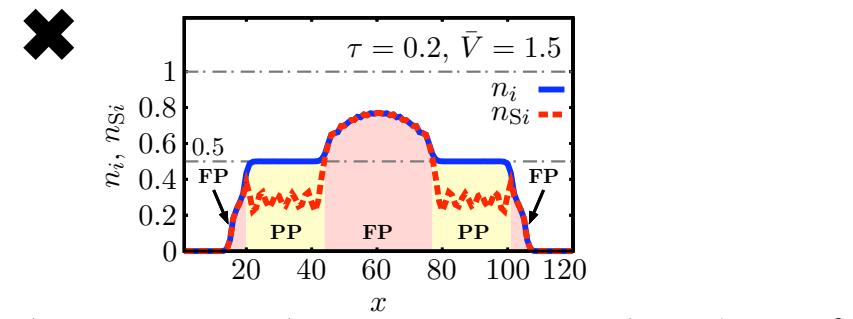
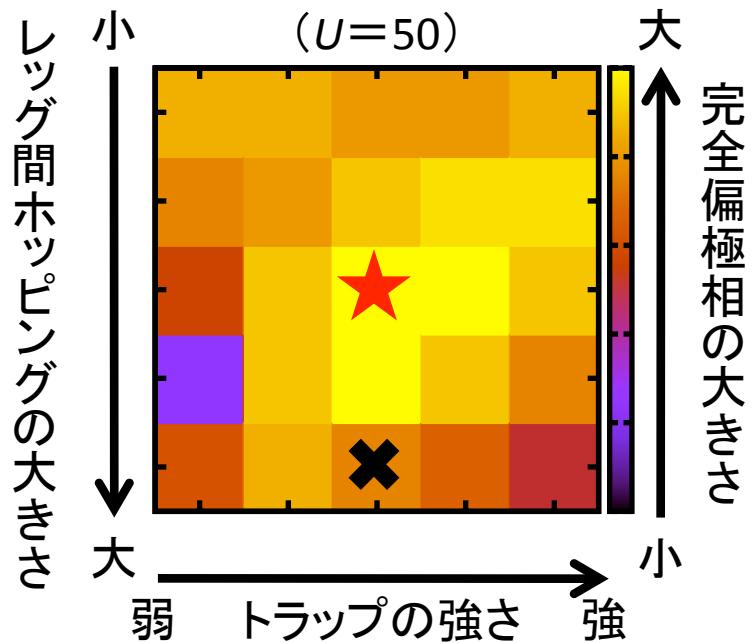


レッグ間ホッピング大 \Rightarrow $\frac{1}{4}$ フィリングにギャップ

強磁性相生成に最適なパラメータ

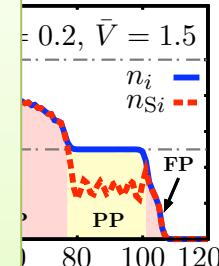
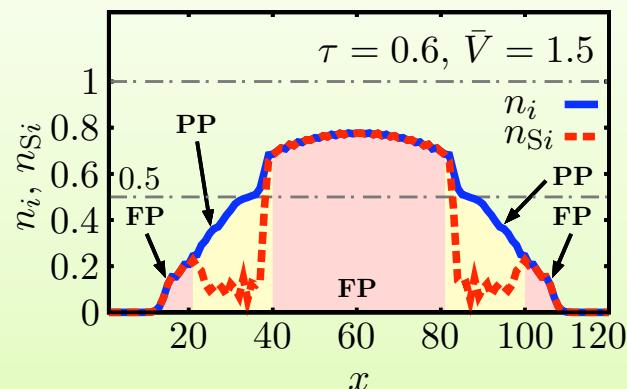
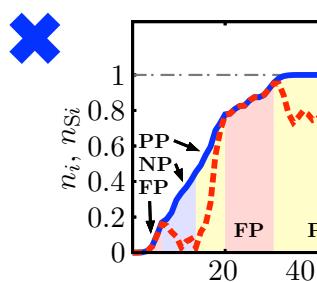
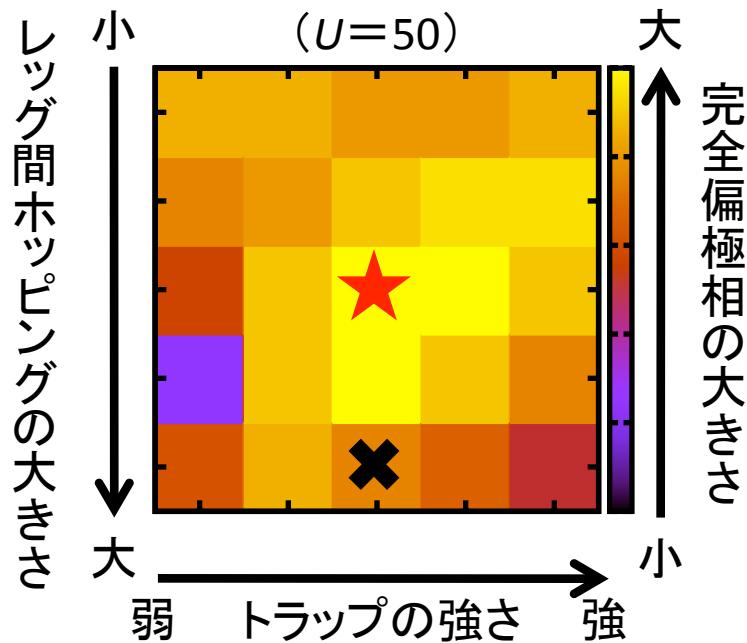
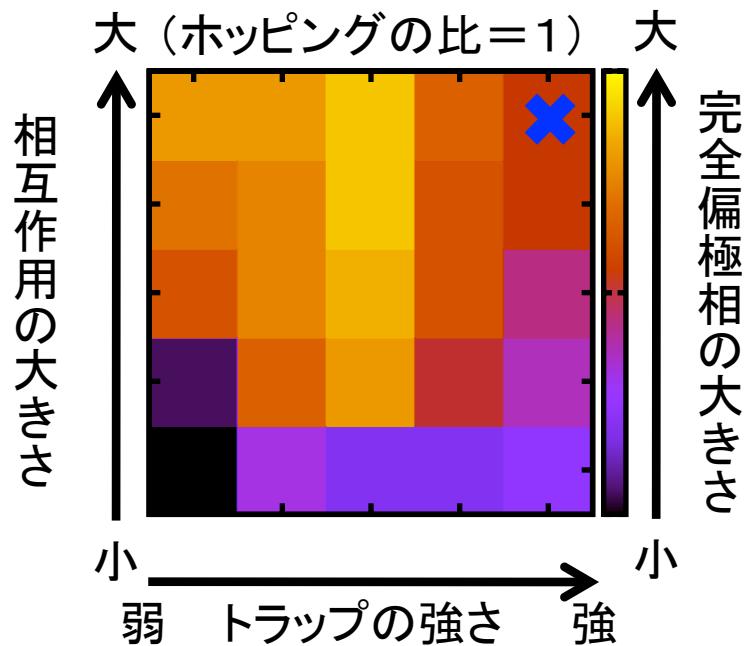


トランプ強 ⇒ モット相が発現



レッグ間ホッピング大 ⇒ $\frac{1}{4}$ フィーリングにギャップ

強磁性相生成に最適なパラメータ



★ 最適値: $U=50, \tau=0.6, V=1.5$

⇒ ¼フィリングにギャップ

まとめ

PRA 83, 031606(R) (2011)

- 2レッグ梯子状光学格子系を密度行列繰り込み群法を用いて解析した
 - スピンインバランス効果を評価
 - 相分離した基底状態 (“有限ホール密度長岡強磁性”に起因する完全偏極相の発現)
 - 一様系の相図とほぼ対応
 - トラップ効果、レッグ間ホッピングの効果を評価
 - 強磁性相を大きくする最適パラメータが存在 ($U=50$, $\tau=0.6$, $V=1.5$)
- 今後
 - 温度効果の評価
 - 2次元系への拡張
(ポテンシャル: 超格子 \Rightarrow 格子)

