

# 多軌道を持つ引カフェルミ原子気体における相分離

小林恵太<sup>A</sup>, 太田幸宏<sup>B</sup>, 奥村雅彦<sup>A</sup>, 山田進<sup>A</sup>, 町田昌彦<sup>A</sup>  
 原子力研究開発機構<sup>A</sup>, 理化学研究所<sup>B</sup>

光学格子中の中性原子気体実験は急速に進歩しており、様々なパラメーター（相互作用、温度、トラップポテンシャルの形状等）の制御性の高さから、量子多体系の、特に強相間電子系の量子シミュレーターとして期待されている。また、近年では  $p$  バンド中の原子気体の実現しており [1]、より複雑かつ多彩な強相間多体効果が観測されようとしている。特に多バンドの自由度を実現することにより、高温超伝導、軌道秩序、磁性などの問題に対し新たな物理を与えてくれるものと思われる。本稿では多軌道を持つ次元引カ相互作用中性原子気体フェルミオン気体に対し、密度行列繰り込み群 [2] を用いた数値計算を行なった。先ず、ハルデー絶縁体相 [3, 4]、Luther-Emery 相 [5] が実現することを示す。更にスピンインバランスが存在する場合に、余剰スピンとフェルミオンペアの強い相分離が引き起こされることを示す。

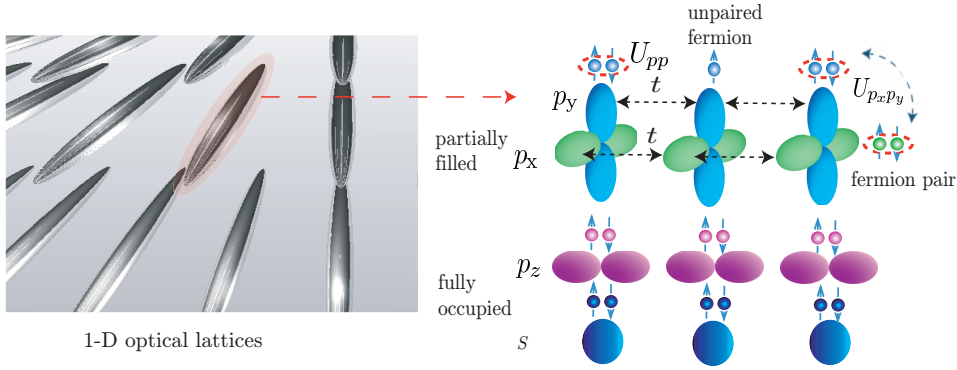


図 1: (左図) 強い異方性を持つ光学格子ポテンシャル:  $V_{\text{opt}}(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha=x,y,z} V_{\alpha} \cos^2(2\pi\alpha/\lambda_{\alpha})$ , ( $V_x = V_y \gg V_z, \lambda_x = \lambda_y \neq \lambda_z$ ) から作られる擬次元光学格子。(右図) 次元光学格子中において  $p_x(y)$  軌道まで原子が占有している状態の模式図。ここでエネルギーが低い軌道  $s, p_z$  は原子が2重占有しているとする。

本稿では図.1にあるような多軌道を持つ次元光学格子系を考える。 $s, p_z$  軌道は原子が2重占有しており、 $p_x, p_y$  軌道に原子が部分占有しているとする。この時、 $s, p_z$  軌道の寄与は小さいとし、 $p_x, p_y$  軌道に注目した強結合ハミルトニアンは以下のように与えられる。

$$H = -\sum_{p,\sigma} \sum_{\langle i,j \rangle} t c_{p,\sigma,i}^{\dagger} c_{p,\sigma,j} - \mu \sum_{p,\sigma,i} n_{p,\sigma,i} + \sum_i \left[ \sum_p U_{pp} n_{p,\uparrow,i} n_{p,\downarrow,i} + \sum_{p \neq p'} U_{pp'} \left\{ n_{p,\uparrow,i} n_{p',\downarrow,i} + c_{p,\uparrow,i}^{\dagger} c_{p,\downarrow,i}^{\dagger} c_{p',\downarrow,i} c_{p',\uparrow,i} + c_{p,\uparrow,i}^{\dagger} c_{p',\downarrow,i}^{\dagger} c_{p,\downarrow,i} c_{p',\uparrow,i} \right\} \right]. \quad (1)$$

ここで  $n_{p,\sigma,i} (\equiv c_{p,\downarrow,i}^{\dagger} c_{p,\uparrow,i})$  は  $i$ -サイト、 $p$  軌道の粒子数演算子であり、和は  $p_x, p_y$  軌道に対して取るものとする。ホッピング項  $t$  及び相互作用項  $U_{pp'}$  は  $t = -\int dz w_{p,i+1} \left[ \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2M} + V_{\text{opt}} \right] w_{p,i}$ ,  $U_{pp'} = g \int dx w_{p,i}^2 w_{p',i}^2$  として与えられる。ここで  $w_{p,i}$  は  $p_x, p_y$  軌道の Wannier 関数であり、いま引カ相互作用  $g < 0$  を考えている。ここで系がスピンインバランス  $P (\equiv \sum_{p,i} (n_{p,\uparrow,i} - n_{p,\downarrow,i})) \geq 0$  を持つ場合の有効ハミルトニアン ( $|U_{pp'}|/t \gg 1$ ) は2次摂動により以下のように与えられる。

$$H_{\text{eff}} = -\sum_{p,\sigma} \sum_{\langle i,j \rangle} \mathcal{P} t c_{p,\sigma,i}^{\dagger} c_{p,\sigma,j} \mathcal{P} + J_{\text{ex}} \sum_{p,p'} \sum_{\langle i,j \rangle} \mathcal{P} \left( \rho_{p,i}^{(z)} \rho_{p',j}^{(z)} - \frac{1}{2} \rho_{p,i}^{(+)} \rho_{p',j}^{(-)} - \frac{J_{\text{ex}}}{4} n_{p,\uparrow,i} n_{p',\uparrow,j} \right) \mathcal{P} - \sum_p \sum_i 2\bar{\mu} \mathcal{P} \rho_{p,i}^{(z)} \mathcal{P}. \quad (2)$$

ここで  $\rho_{p,i}^{(l)}$  は擬スピン 1/2 演算子  $\rho_{p,i}^{(+)} = c_{p,\uparrow,i}^\dagger c_{p,\downarrow,i}$ ,  $\rho_{p,i}^{(-)} = [\rho_{p,i}^{(+)}]^\dagger$ ,  $\rho_{p,i}^{(z)} = (\sum_\sigma n_{p,\sigma,i} - 1)/2$  であり、フェルミオンペアの自由度を表している。また  $\bar{\mu} = \mu + (|U_{pp}| + |U_{p_x p_y}|)/2$ ,  $J_{\text{ex}} = 2t^2 / (|U_{pp}| + |U_{p_x p_y}|)$  である。射影演算子  $\mathcal{P}$  は状態を擬スピン 1 状態:  $\{|0,0\rangle_i, (|\uparrow\downarrow,0\rangle_i + |0,\uparrow\downarrow\rangle_i)/\sqrt{2}, |\uparrow\downarrow,\uparrow\downarrow\rangle_i\}$  及び余剰スピンを含む状態:  $\{|\uparrow,\uparrow\downarrow\rangle_i, |\uparrow\downarrow,\uparrow\rangle_i, |\uparrow,0\rangle_i, |0,\uparrow\rangle_i, |\uparrow,\uparrow\rangle_i\}$  に射影するものである。この有効ハミルトニアンはス

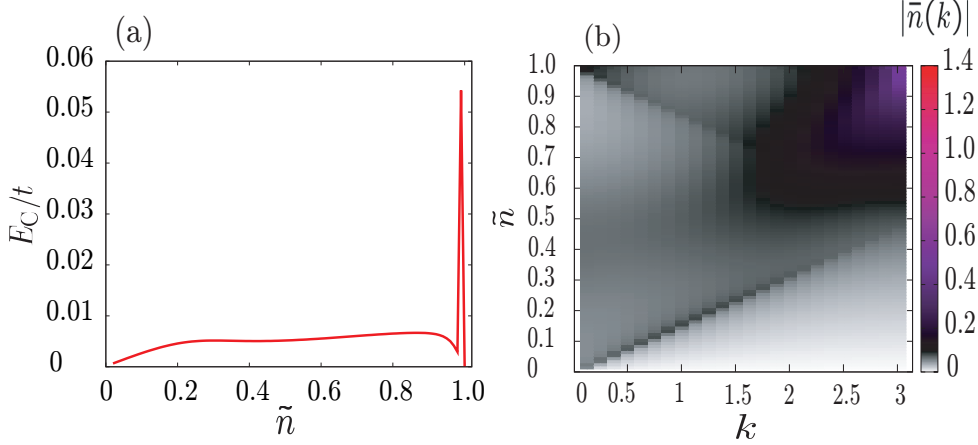


図 2: (a) 縦軸: チャージギャップ  $E_C \equiv E(N+ \uparrow\downarrow) + E(N- \uparrow\downarrow) - 2E(N)$ , 横軸: フィリング  $\tilde{n} = \sum_{p,\sigma,i} n_{p,\sigma,i} / 2L$ . (b) 密度分布のフーリエ変換  $\tilde{n}(k) = \sum_j (n(i) - 2\tilde{n}) e^{ikj} / \sqrt{L}$ . 数値パラメータ:  $U_{pp} = -10$ ,  $U_{p_x p_y} = (4/9)U_{pp}$ ,  $L = 100$ ,  $P = 0$ .

ピンインバランス  $P = 0$  において擬スピン 1XXZ モデル  $H_{\text{eff}} = J_{\text{ex}} \sum_{\langle i,j \rangle} (\rho_i^{(z)} \rho_j^{(z)} - \frac{1}{2} \rho_i^{(+)} \rho_j^{(-)})$  に帰着する (擬スピン 1 演算子は  $\rho_i^{(l)} = \sum_p \rho_{p,i}^{(l)}$  である)。スピン 1XXZ モデルではハルデー相 [6] が実現し、スピンギャップ、端 1/2 スピンの存在が知られている [7, 8]。また有効磁場  $\bar{\mu}$  が強い状態では系は朝永・ラッテンジャー流体として振る舞うことになる [9, 10, 11]。今の場合、ハーフフィリングではチャージギャップ、端状態によるギャップレス励起の存在、ハーフフィリング以外では Luther-Emery 相が予想される。図.2 には式 (1) に対し DMRG を用いた数値計算結果を示している。まず図.2.(a) においてハーフフィリング付近 ( $\tilde{n} \simeq 1$ ) においてギャップレス励起及びチャージギャップの存在が確認できる。このことからハーフフィリングではハルデー絶縁体相が実現していることが確認できる。図.2.(b) は密度分布のフーリエ変換を示している。まず、 $(k, \tilde{n}) \simeq (1, \pi)$  付近に端状態に起因する強いピークの存在が確認できる。またハーフフィリング以下に規則的になるピークが確認できる。これは Luther-Emery 相における CDW によるものであり、朝永・ラッテンジャー流体から予測される周期  $2k_F = 2\pi(1 - |\sum_i \rho_i^{(z)} / L|) = 2\pi\tilde{n}$  [9] と一致している。以上の解析から、この系ではハルデー絶縁体相、Luther-Emery 相が実現していることが解る。

次にスピンインバランスがある場合の解析を行ってこよう。図.3.(a)-(d) はスピンインバランス ( $P = 12$ ) が存在する場合の密度・スピン密度分布を示している。フィリング  $\tilde{n} = 0.99, 0.6$  ではスピン密度分布に Friedel 振動が現れ、 $\tilde{n} = 0.6$  では密度分布にも逆位相の Friedel 振動が現れる。フィリングが低い領域  $\tilde{n} = 0.4, 0.2$  ではフェルミオンペアと余剰スピンの相分離が引き起こされる。ここで余剰スピンの運動に注目しよう。有効ハミルトニアンの中で余剰スピンの運動は  $H_K = -\sum_{p,\sigma} \sum_{\langle i,j \rangle} \mathcal{P} t c_{p,\sigma,i}^\dagger c_{p,\sigma,j} \mathcal{P}$  として与えられる。今、2-site で余剰スピンのホッピング過程  $H_K |\psi_i\rangle_i |\psi_{i+1}\rangle_{i+1} = C |\psi'_i\rangle_i |\psi'_{i+1}\rangle_{i+1}$  を考えよう (図.3.(e))。まず、粒子数がハーフフィリングに近い場合  $N = 3 \sim 4$  では余剰スピンの遷移振幅は  $-t/\sqrt{2} (-t/2)$  となることが解る。一方、粒子数が少ない場合  $N = 1 \sim 2$  余剰スピンの遷移振幅は  $-t$  となり、ハーフフィリングに近い場合より運動エネルギーを得ることが解る。このことは余剰スピンは運動エネルギーを稼ぐために、密度の低い領域を作りたがる傾向があることを意味している。実際に、図.3.(b) においてスピン密度が大きい領域では密度分布が低くなっており、余剰スピンの密度分布に逆位相の Friedel 振動を引き起こしている

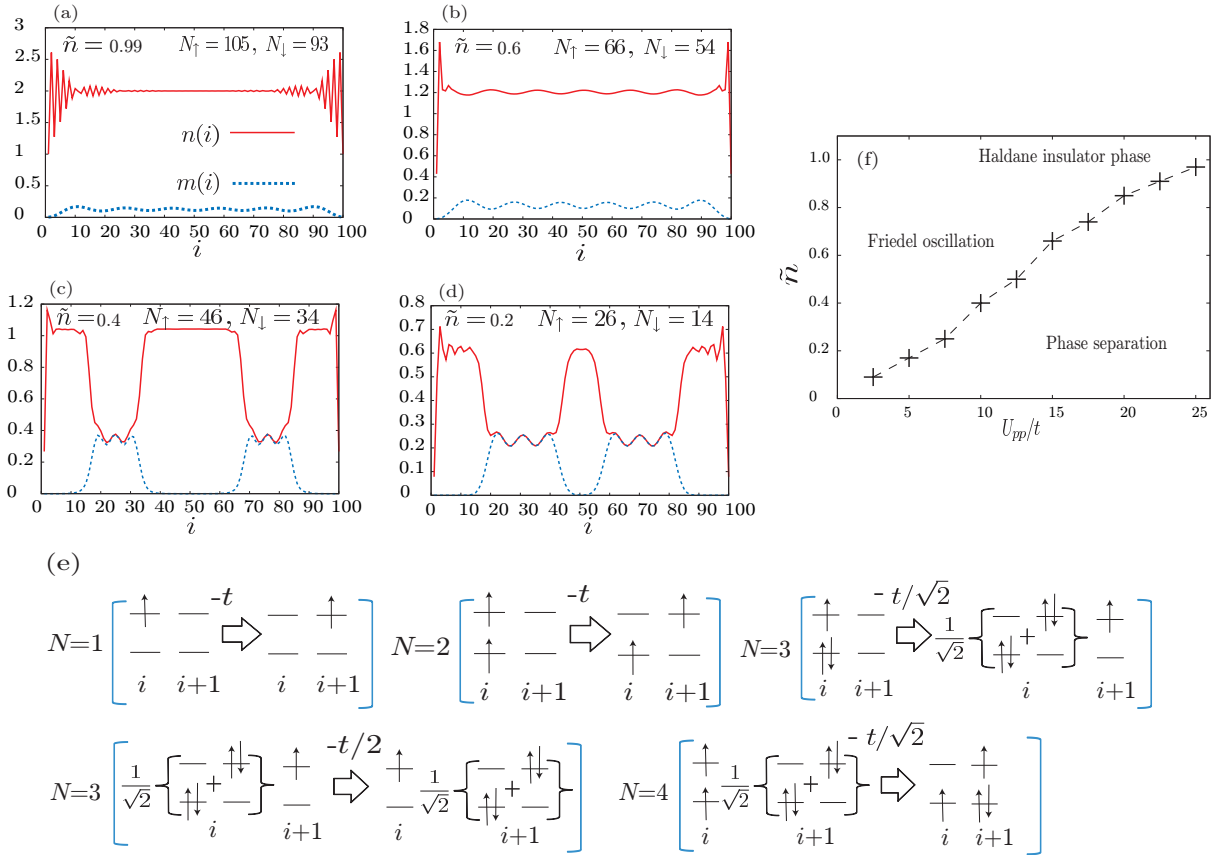


図 3: (Color Online) (a)-(d) 密度分布  $n(i) = \sum_{\sigma,p} n_{\sigma,p,i}$ 、スピン密度分布  $m(i) = \sum_p (n_{\uparrow,p,i} - n_{\downarrow,p,i})$  (フィリング  $\tilde{n} = 0.99$ ,  $\tilde{n} = 0.6$ ,  $\tilde{n} = 0.4$ ,  $\tilde{n} = 0.2$ )。数値パラメータ:  $U_{pp} = -10$ ,  $U_{p_x p_y} = (4/9)U_{pp}$ ,  $L = 100$ ,  $P = 12$ . (e) 余剰スピンのホッピング過程. (f) 相図

理解できる。ただし図.3.(a) ではハルデーン絶縁体相によるチャージギャップのため余剰スピンの影響はバルク部分では小さく、ギャップレス状態である端状態に強く表れていることが解る。更にフィリングが小さい場合には余剰スピンとフェルミオンペアの相分離を引き起こすことにより、余剰スピンの運動エネルギーを得ていると理解できる。図.3.(f) は相分離に対する相図を DMRG から求めたものであるが、 $U_{pp}$  が大きく  $\tilde{n}$  が小さい領域で相分離領域が拡大していることが解る。まず  $U_{pp}$  が大きい場合には  $J_{ex} \rightarrow 0$  となり、余剰スピンの運動が系にとって主要となる。また  $\tilde{n}$  が小さい場合は、 $\bar{\mu}$  が大きくなるため擬スピン・スピン相互作用の寄与が小さくなり、やはり余剰スピンの運動が系にとって主要となることから相図の振る舞いが理解できる。

本稿では多軌道を持つ一次元引力相互作用中性原子気体フェルミオン気体に焦点をあて DMRG による解析を行った。ハルデーン絶縁体相、Luther-Emery 相、余剰スピンとフェルミオンペアの強い相分離などの結果を得た。余剰スピンとフェルミオンペアの相分離は単一軌道の一次元フェルミオン気体においてもトラップ中において見られる現象であるが [12, 13]、多軌道を持つ相分離は単一軌道の場合のものより強く、トラップなしでも起こりうるものである。

## 参考文献

- [1] Torben Müller, Simon Fölling, Artur Widera, and Immanuel Bloch, Phys. Rev. Lett. **99**, 200405 (2007).
- [2] S.R. White, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992); Phys. Rev. B **48**, 10345 (1993).
- [3] Emanuele G. Dalla Torre, Erez Berg, and Ehud Altman, Phys. Rev. Lett. **97**, 260401 (2006).
- [4] H. Nonne, P. Lecheminant, S. Capponi, G. Roux, and E. Boulat, Phys. Rev. B. **81**, 020408(R) (1995).
- [5] A. Luther and V. J. Emery, Phys. Rev. Lett. **33**, 589 (1974).
- [6] F. D. M. Haldane, Phys. Lett. A **93**, 464 (1983); Phys. Rev. Lett **50**, 1153 (1983).
- [7] I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb, and H. Tasaki, Phys. Rev. Lett. **59**, 799 (1987); Commun. Math. Phys. **115**, 477 (1988).
- [8] S. Miyashita and S. Yamamoto, Phys. Rev. B **48**, 913, (1993).
- [9] Gabor Fath, Phys. Rev. B **68**, 134445, (2003).
- [10] Ian Affleck, Phys. Rev. B **72**, 132414, (2005).
- [11] L. CAMPOS VENUTI, E. ERCOLESSI, G. MORANDI, P. PIERI and M. RONCAGLIA, Int. J. Mod. Phys. B **16**, 1363, (2002).
- [12] A. E. Feiguin and F. Heidrich-Meisner Phys. Rev. B. **76**, 220508(R) (2007).
- [13] Masaki Tezuka, and Masahiko Ueda, Phys. Rev. Lett. **100**, 110403 (2008).