

乱れたボゾン系の超流動—絶縁体相転移

東大理 · 羽田野 直道

相転移現象におけるランダムネスの効果は、スピングラスなど興味ある現象を引き起こすものとして注目されて久しい。一方、絶対零度で量子揺らぎが引き起こす様々な相転移も注目を集めてきた。両者はその取り扱いの難しさにも関わらず詳しく研究され、その過程で数値計算が大きな役割を果たした。最近になって、この両者、量子揺らぎとランダムネスを組み合わせた問題が世界的に研究され始めた。古くは Anderson 局在に始まり、量子スピングラスの研究も活発になってきた。計算機の進歩に伴い、このような問題も数値計算の手の届く範囲に入ったと言えるだろう。ここでは、この種の問題としてランダム・ポテンシャル中のボーズ流体を取り上げる [1]。実験的には多孔質ガラス中の液体ヘリウムなどで実現される [2-4]。また、多粒子超伝導体の絶対零度における超伝導—絶縁体相転移 [5-10] も同じユニヴァーサリティーの相転移であろうと議論されている [11]。

まず実際に取り扱うボゾン・ハバード模型について述べ、スケーリング理論の予想についてふれる。次にボゾン・ハバード模型についての量子モンテカルロ計算の定式化について述べる。最後に、得られた結果の一例を示す。

ボゾン・ハバード模型はハミルトニアン $\mathcal{H} \equiv \mathcal{H}_{\text{hop}} + \mathcal{H}_{\text{pot}}$,

$$\begin{cases} \mathcal{H}_{\text{hop}} & \equiv -\frac{t}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (b_i^\dagger b_j + b_j^\dagger b_i) \\ \mathcal{H}_{\text{pot}} & \equiv \frac{U}{2} \sum_i n_i (n_i - 1) - \sum_i (\mu + \delta\mu_i) n_i \end{cases} \quad (1)$$

で与えられる。なお $b_i^\dagger$ と b_i はボゾンの生成・消滅演算子であり、和記号 $\sum_{\langle i,j \rangle}$ は最近接格子点に関する和を表す。また $\delta\mu_i$ は格子点毎に独立に確率分布するランダム・ポテンシャルである。以下では、区間 $[-\Delta, \Delta]$ の間を一様に分布するとする。

現象論的な議論 [12] から、ボゾン・ハバード模型は絶対零度で以下の3相を示すと予想されている。まず、Coulomb 力が支配的な領域では Mott 絶縁体相が現れる。各格子点におけるボゾン数が一定の整数に固定されたような相である。次に、ホッピングが支配的な領域では超流動相になる。この相では粒子数はよい量子数ではなく、粒子数と conjugate な量である位相が全系にわたって一定であるような状態をとる。以上はランダム・ポテンシャルがない場合に現れる2相であるが、ランダム・ポテンシャルがある場合には上の2相の間に新たにボーズ・グラスと呼ばれる相が現れる*。この相では、ランダム・ポテンシャルのために波動関数の位相の空間的相関が失われ、時間的相関のみが残っている。したがってボーズ・グラスはランダムネスによって引き起こされた新たな絶縁体相である。以上の3相は、セラミックスを温度変化さ

*「グラス」という名が適当であるかどうかは疑問の残るところである。スピングラス相ではスピンの向きは空間的には一見ランダムであるが、実際にはスピングラス相関 $[\langle S_i S_j \rangle]^2$ が長距離にわたって存在する。しかしボーズ・グラス相においてそのような長距離相関があるかどうかは今のところ明らかではない。

せたときに観測されている常伝導相・スーパーパラ相・超伝導相 [13] に対応していると言えるかもしれない。

スケーリング理論に基く予想 [12,14,15] を以下に述べる。ある物理量に対して、相転移点付近で有限サイズ・スケーリング形 $Q \simeq L^{-\psi} \tilde{Q}(\delta L^{1/\nu}, \delta \beta^{1/z\nu}, L^z/\beta)$ を仮定する。ただし、 δ は相転移点からの距離を表す。指数 ψ は演算子 Q のスケーリング次元、 ν は空間方向相関長の発散 $\xi_x \sim \delta^{-\nu}$ の指数である。指数 z は動的臨界指数と呼ばれるもので、時間方向の相関長を用いて $\xi_\tau \sim \xi_x^z \sim \delta^{-z\nu}$ で定義される。上のスケーリング形を基にして通常の有限サイズ・スケーリングの議論を展開すると、物理量 Q の絶対零度転移点における異常性が $Q \sim \delta^{-\nu\psi}$ ($T=0$) や $Q \sim T^{-\psi/z}$ ($\delta=0$) の形で求められる。また、実験で実際に測定される量である構造因子は $Q(k, \omega) \sim k^\psi \tilde{Q}(k^z/\omega)$ の形にスケールされることが結論される。

さて、スケーリング理論の予想 [12] によると、超流動—ボーズ・グラス転移における動的臨界指数が任意の次元において $z=d$ で与えられる。ところが、2次元ハードコア・ボゾン系についてのモンテカルロ計算 [16] で $z=1/2$ が示唆され、スケーリング理論の予想との矛盾が問題となっている。

また、超流動—ボーズ・グラス転移においては転移点直上での伝導度が2次元で普遍的になる（一般の次元ではコンダクタンス $R^{-1} = L^{d-2}\sigma$ が普遍的になる）という予想 [14,15] が立てられている。ここで「普遍的」とは「同じユニヴァーサリティー・クラスに属する転移では等しい」という意味であるが、一部の実験 [5-7] ではこの値が「普遍的定数」で書ける値 $h/(2e)^2$ になると主張されており、議論を呼んでいる。この普遍的伝導度の数値計算による評価もいくつかある [16-18] が、その値は互いに一致せず、これも問題となっている。

そこでボゾン・ハバード模型を量子モンテカルロ計算することを考えよう。最初に提案されたアルゴリズム [19-21] では第2量子化した表示を使っていないため、ボゾンの入れ換えについてもサンプリングしなければならず非効率的であった。後に第2量子化された表示でのアルゴリズムが提案された [22] が、そこでは以下に与える公式を導いておらず、数値誤差に疑問が残る。

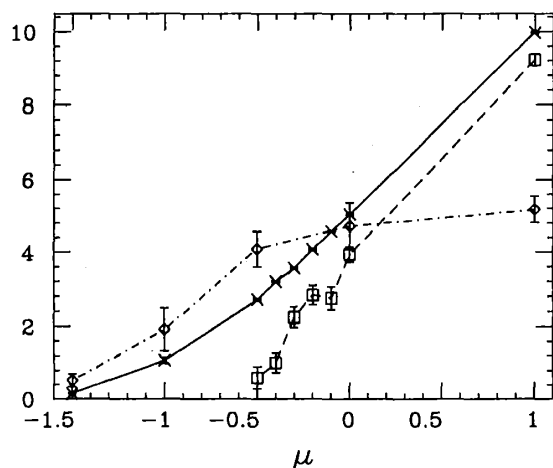
簡単のため長さ L の1次元系で話を進める。まず、出発点として鈴木-Trotter 公式 [23-25]

$$e^{-\beta\mathcal{H}} = \left(e^{-\beta\mathcal{H}_{\text{hop}}^{\text{even}}/2M} e^{-\beta\mathcal{H}_{\text{pot}}/2M} e^{-\beta\mathcal{H}_{\text{hop}}^{\text{odd}}/M} e^{-\beta\mathcal{H}_{\text{pot}}/2M} e^{-\beta\mathcal{H}_{\text{hop}}^{\text{even}}/2M} \right)^M + O(M^{-2}) \quad (2)$$

を用いる。なお、 $\mathcal{H}_{\text{hop}}^{\text{even}}$ と $\mathcal{H}_{\text{hop}}^{\text{odd}}$ は、ハミルトニアンホッピング項を偶数番目のボンドと奇数番目のボンドに分けたものである。式 (2) の右辺の各演算子を

$$|n_1, n_2, \dots, n_L\rangle \equiv \frac{(b_1^\dagger)^{n_1} (b_2^\dagger)^{n_2} \dots}{\sqrt{n_1! n_2! \dots}} |0\rangle \quad (3)$$

という基底の張る完全系で表現すると、大きさ $L \times 2M$ の2次元古典系が得られる。各格子点には0から ∞ までの整数値をとる変数 n_i が付随している。この系の Boltzmann 重みは、ポ



図：長さ $L = 16$ の系に対するシミュレーション結果。パラメータの値は $t = 1.0$, $U = 0.2$, $\Delta = 1.0$ である。実線が粒子数密度 ρ , 破線が超流体密度 ρ_s , 1点鎖線が圧縮率 $\kappa = \partial\rho/\partial\mu$ を表す。

テンシャルの寄与による1体力

$$\exp \left[-\frac{\beta}{2M} \left\{ \frac{V}{2} n_i(n_i - 1) - (\mu + \delta\mu_i) n_i \right\} \right] \quad (4)$$

と, ホッピングの寄与による4体力 [1]

$$\left\langle n'_1, n'_2 \left| e^{xK_1} \right| n_1, n_2 \right\rangle = \sqrt{n_1! n_2! n'_1! n'_2!} \sum_{\{m_{ij}\}} \frac{c^{m_{11}+m_{22}} s^{m_{12}+m_{21}}}{m_{11}! m_{12}! m_{21}! m_{22}!} \quad (5)$$

の積で与えられる。ここで、整数の組 $\{m_{ij}\}$ は $\sum_i m_{ij} = n_j$ と $\sum_j m_{ij} = n'_i$ を満たす範囲で変化し、また $c \equiv \cosh x$ および $s \equiv \sinh x$ とする。この古典系をモンテカルロ・シミュレーションすることによって、ボゾン・ハバード模型の性質を知ることができる。常磁性カレント

$$J_i \equiv \frac{t}{2} (b_{i+1}^\dagger b_i - b_i^\dagger b_{i+1}) \quad (6)$$

は、非対角的物理量であるにも関わらず

$$\langle J \rangle = \beta^{-1} \sum_k' \langle n_{i,k} - n_{i,k+1} \rangle_{\text{MCS}}, \quad (7)$$

のように、対角量の測定から求めることができる [1]。また超流体密度は $\rho_s = \beta L^{2-d} \langle J_i^2 \rangle$ で与えられる [1]。

数値結果の一例を図に示す。超流体密度有限の領域が超流動相である。粒子密度有限かつ超流体密度ゼロの領域がボーズ・グラス相と考えられる。(Mott 絶縁体相はこのパラメタ領域では現れない。) 両者の間の転移点付近で圧縮率 κ が何ら異常性を見せていないことがわかる。圧縮率の異常性はスケーリング理論から $\kappa \sim \delta\nu^{(d-z)}$ と与えられる [12] ので、図に示した結果はスケーリング理論の一つの予言 $d = z$ を確認したものである。

なお、超流体密度は $\rho_s \sim \delta\nu^{(d+z-2)}$ とされる [12]。したがって1次元では指数がゼロとなり、転移点で Nelson-Kosterlitz の普遍的跳び [26] を示すと思われる [14] が、ここでは系の大きさが不足しているために観測できていない。また伝導度は $\sigma \sim \delta\nu^{(d-2)}$ となり [14,15], 上にも述べたように2次元で普遍的値をとると期待される。これら2点が今後の課題とされる。

参考文献

- [1] N. Hatano, Monte Carlo study of superfluid-insulator transitions in Boson Hubbard models, to be published in *Physica B*.
- [2] B. C. Crooker, B. Hebral, E. N. Smith, Y. Takano and J. D. Reppy, *Phys. Rev. Lett.* 22 (1983) 666.
- [3] J. D. Reppy, *Physica B* 126 (1984) 335.
- [4] D. Finotello, K. A. Gillis, A. Wong and M. H. Chan, *Phys. Rev. Lett.* 61 (1988) 1954.
- [5] D. B. Haviland, Y. Liu and A. M. Goldman, *Phys. Rev. Lett.* 62 (1989) 2180.
- [6] Y. Liu, K. A. McGreer, B. Nease, D. B. Haviland, G. Martinez, J. W. Halley and A. M. Goldman, *Phys. Rev. Lett.* 67 (1991) 2068.
- [7] T. Wang, K. M. Beauchamp, D. D. Berkley, B. R. Johnson, J.-X. Liu, J. Zhang and A. M. Goldman, *Phys. Rev. B* 43 (1991) 8623.
- [8] S. J. Lee and J. B. Ketterson, *Phys. Rev. Lett.* 64 (1990) 3078.
- [9] A. F. Hebard and M. A. Paalanen, *Phys. Rev. Lett.* 54 (1985) 2155.
- [10] L. J. Geerligs, M. Peters, L. E. M. de Groot, A. Verbruggen and J. E. Mooji, *Phys. Rev. Lett.* 63 326.
- [11] M. Ma, B. I. Halperin, P. A. Lee, *Phys. Rev. B* 34 (1986) 3136.
- [12] M. P. A. Fisher, P. B. Weichman, G. Grinstein and D. S. Fisher, *Phys. Rev. B* 40 (1989) 546.
- [13] 松浦 基浩, 非線形磁気応答に観る「セラミックス」の秩序化, 当研究会講演 (6月6日)。
- [14] K. Kim and P. B. Weichman, *Phys. Rev. B* 43 (1991) 13583.
- [15] M.-C. Cha, M. P. A. Fisher, S. M. Girvin, M. Wallin and A. P. Young, *Phys. Rev. B* 44 (1991) 6883.
- [16] M. Makivić, N. Trivedi and S. Ullah, *Phys. Rev. Lett.* 71 (1993) 2307.
- [17] M. Wallin, E. S. Sørensen, S. M. Girvin and A. P. Young, *Phys. Rev. B* 49 (1994) 12115.
- [18] G. G. Batrouni, B. Larson, R. T. Scalettar, J. Tobochnik and J. Wang, *Phys. Rev. B* 48 (1993) 9628.
- [19] E. L. Pollock and D. M. Ceperley, *Phys. Rev. B* 36 (1987) 8343.
- [20] W. Krauth and N. Trivedi, *Europhys. Lett.* 14 (1991) 627.
- [21] W. Krauth, N. Trivedi and D. Ceperley, *Phys. Rev. Lett.* 67 (1991) 2307.
- [22] G. G. Batrouni and R. T. Scalettar, *Phys. Rev. B* 46 (1992) 9051.
- [23] M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* 56 (1976) 1454.
- [24] M. Suzuki, S. Miyashita and A. Kuroda, *Prog. Theor. Phys.* 58 (1977) 1377.
- [25] M. Suzuki, *Phys. Rev. B* 31 (1985) 2957.
- [26] D. R. Nelson and J. M. Kosterlitz, *Phys. Rev. Lett.* 39 (1977) 1201.