

課題名 (タイトル) :

量子磁性体と冷却原子気体の量子モンテカルロシミュレーション

利用者氏名 : 加藤康之

所属 : 古崎物性理論研究室

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

本課題では量子多体系のモデルに対し統計誤差の範囲で厳密な解を与える世界線モンテカルロ法 (量子モンテカルロ (QMC) 法) を広く量子強磁性体や冷却原子気体のモデルに適用する。申請者はこれまでに光格子中にトラップされた 2 成分超冷却ボース原子気体の有効モデルに QMC 法を適用し、基底状態相図に量子三重臨界点が存在することを明らかにした [1]。しかしながら量子三重臨界点の臨界性を数値計算で確認することは課題として残されていた。そこで、より計算コストが低い量子多体系のモデルを選び、量子三重臨界点を精度良く決定し、臨界性を調べるのが本研究の目的である。用いたモデルは横磁場反強磁性イジングモデルであり、平均場理論により量子三重臨界点が存在することが予想されている。

2. 具体的な利用内容、計算方法

横磁場反強磁性イジングモデルの QMC シミュレーションを実装した。世界線配位の更新方法はループアルゴリズム [2] を採用した。ループアルゴリズムでは大域的な更新が実現しており極めて効率が良い。

3. 結果

QMC 法の適用により統計誤差の範囲で厳密な基底状態相図を完成させた。その結果、量子三重臨界点が存在することを示した。平均場理論の臨界指数を仮定し、有限サイズスケールリングにより精度良く量子三重臨界点の位置を決定することに成功した。このことは量子三重臨界点が平均場理論の普遍性クラスに属することを示しており、仮定の妥当性を示している。さらに決定した量子三重臨界点における主要な物理量の有限温度依存性も平均場理論の臨界指数と一致することを

確認した。

量子三重臨界点では反強磁性帯磁率だけでなく一様帯磁率も発散する。ただしそれぞれの発散の強さは異なる。そのことを平均場理論を用いて明らかにし、帯磁率と磁気構造因子の波数依存性を導き、数値計算によりそれを確かめた。最後に有限温度における量子三重臨界点への近接効果として一様帯磁率の増大を見た。

4. まとめ

反強磁性横磁場イジングモデルの QMC シミュレーションにより量子三重臨界点の存在と臨界性を明らかにした。

[1] Y. Kato, D. Yamamoto, and I. Danshita, Phys. Rev. Lett. **112**, 055301 (2014).

[2] H. G. Evertz, G. Lana, and M. Marcu, Phys. Rev. Lett. **70**, 875 (1993).

平成 27 年度 利用研究成果リスト

【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】

Kato, Y. and Onoda, S., “Numerical Evidence of Quantum Melting of Spin Ice: Quantum-to-Classical Crossover”, Phys. Rev. Lett. **115**, 077202 (2015).

Kato, Y. and Misawa, T., “Quantum tricriticality in antiferromagnetic Ising model with transverse field: A quantum Monte Carlo study”, Phys. Rev. B **92**, 174419 (2015).

【国際会議、学会などでの口頭発表】

Kato, Y, and Misawa, T.: “横磁場イジング模型における量子三重臨界点：量子モンテカルロ法を用いた解析(17pCM-6)”日本物理学会「秋季大会」，大阪市，9月(2015).