

準結晶の量子状態は大域的に一様なのか、階層的なのか

[1] 要旨

準結晶で発見されている超伝導や強磁性や量子臨界性などを理解する上で、電子の量子状態が大域的にどのようなものであるかを知ることが重要である。大域的な一様性を解析するには、ハイパーユニフォームティ（超一様性）という手法がある。一方で大域的な階層性を調べる手法として、マルチフラクタルティ（複階層性）がある。これらは一見すると独立した無関係なものに思われるが、準結晶のボーズ粒子系に発現する3つの量子相（モット絶縁体相、超流動相、グラス相）に2つの手法を組み合わせた数値解析を実行したところ、それぞれの量子相が超一様構造か複階層構造のいずれになることが明らかになった。

[2] 本文

固体が示す様々な性質は、固体の原子の配列に依存しているため、どのような原子がどのように配列しているかを知らなければならない。実際、周期的配列を持った結晶と、乱雑な配列をとる非晶質とでは、構成原子が同じであっても異なる性質を示す。この他に、周期的ではないが長距離秩序を示す原子配列の準結晶という第3の固体と呼ばれている配列がある。この準結晶の原子配列には、自己相似性と呼ばれる複階層構造が見て取れる一方で、その大域的な構造は、超一様であることがわかっている。原子配列の階層性は、非晶質を含む乱雑な構造によく見られる特徴である一方で、一様性は周期的配列を持つ結晶の特徴である。そのため、この双方の特徴を有する準結晶において、その物理的性質や量子状態がどちらに近いものになるかは、1984年の準結晶発見以来の基礎物理学的に重要な問題であった。

この基礎的な問題に対する一つの理論的回答が、サスカチュワン大学（物理・応用物理学専攻及び quanTA）、東京理科大学、大阪大学の研究グループによって与えられた。ボーズ・ハバード模型と呼ばれる光格子実験系に対応する理論模型を対象にして、準結晶と同様な原子配列を導入し、その量子状態が示す超一様性と複階層性を数値的に解析し、その成果が JPSJ の 2024 年 11 月号に掲載された。

解析された理論模型は、周期的な原子配列においてはモット絶縁体・超流動間の相転移を起こすことが知られている。さらに、不純物や外乱などの局所的な乱れを導入することにより、この相転移境界に、ボーズ・グラスと呼ばれる量子的な乱雑秩序が現れる。このボーズ・ハバード模型を準結晶の原子配列に適用した場合の結果は未解明であった。準結晶では、これらの量子相がどのように発現／消失し、周期的な原子配列の場合とどう異なるか、また、それぞれの量子状態は一様か階層的か、いずれかであるなら3つの相に違いはあるのか、などについて調べられた。

図1は、局所的乱れが無い場合の量子状態における、超一様構造が持つ秩序計量（構造の複雑性を表す指標）である。準結晶（赤線）では、ホッピング強度（ボーズ粒子が原子サイト間を飛び移る確率）がある閾値（黒破線）を超えると、モット絶縁体から超流動に相転移して、超流動秩序変数の秩序計量が有限になる。特に、相転移（黒破線）近傍で急峻に複雑性が增大する様子が見える。これは、結晶（緑線）では見られない特徴であり、相転移近傍で実現する量子状態（図1下）が、準結晶の特徴的な原子配列を反映して局所的な分布が形成され系全体に広がることで、複雑性が顕著になることにより生じる。この複雑性の増大は、どの原子も同じ局所環境に属する結晶では起こり得ない。

なお、この量子状態の構造的複雑性は、補空間と呼ばれる準結晶特有の高次元性に根差した解析により、より明確に視覚化できることも指摘された。一方、図2は、局所的乱れが有る場合の複階層次元解析である。赤線・青線はそれぞれ、上部・下部複階層次元を表す。それらの差が有限のとき、構造は複階層となり超一様ではなくなる。局所的乱れがある場合、3つの相（モット絶縁体相、ボーズ・グラス相、超流動相）が現れるが、このうちモット絶縁体と超流動では、局所的乱れの無い場合と同様、超一様構造を示す。一方、ボーズ・グラス状態では、複階層的構造を示す。

これらの結果は、準結晶の量子状態では、超一様構造と複階層構造のいずれも出現しうること示している。結晶とは異なり、相転移近傍では、原子配列に由来する構造複雑性が増大する。また、局所的乱れの有無によらず、相が確定すれば超一様構造と複階層構造のいずれかに分類される。本研究成果は、準結晶で最近発見されている超伝導や強磁性、近藤効果、量子臨界性を理解する上で、重要な理論的起点になると期待される。超一様性を用いた解析は、近年、物理分野のみならず、生命科学や天文学、数学など幅広い分野の解析に拡張されている。長い歴史を持つ複階層性を用いた解析とともに、空間の幾何学を分析・定量化する手法として今後発展することが期待される。

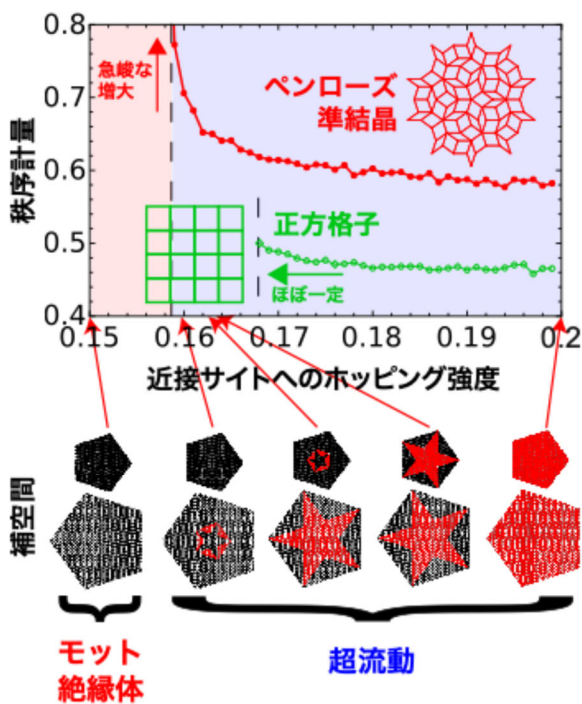


図1. 乱れが無い場合の超一様構造の秩序計量

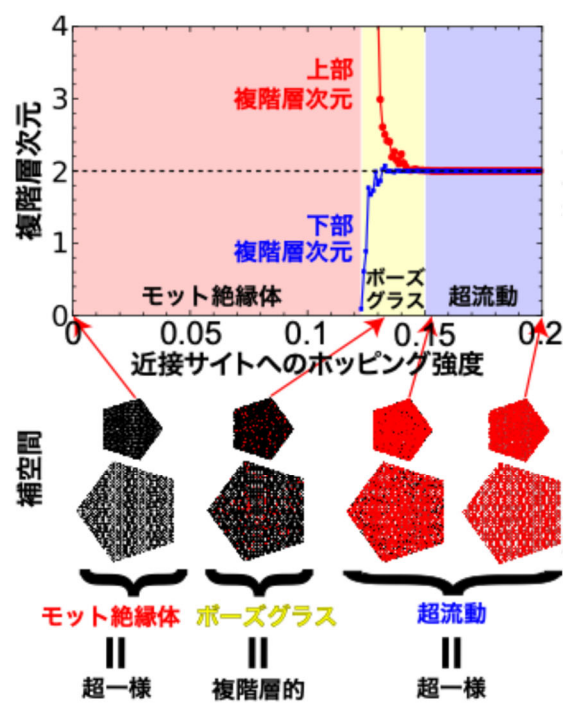


図2. 局所的乱れが有る場合の複階層次元解析

原論文（2024年10月25日公開済）

Multifractality and Hyperuniformity in Quasicrystalline Bose–Hubbard Models with and without Disorder

Masahiro Hori, Takanori Sugimoto, Yoichiro Hashizume, and Takami Tohyama,

J. Phys. Soc. Jpn. **93**, 114005 (2024).

<情報提供：堀 眞弘（サスカチュワン大学 教養学部 物理・応用物理学専攻 及び quanTA、東京理科大学 理学研究科 応用物理学専攻）>