

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 6 月 3 日現在

機関番号：82401

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2012～2013

課題番号：24740269

研究課題名(和文) 2次元密度行列繰り込み群法によるディラックフェルミオンに対する強相関効果の解明

研究課題名(英文) Two-dimensional density-matrix renormalization group studies of strongly correlated Dirac Fermion systems

研究代表者

白川 知功 (SHIRAKAWA, Tomonori)

独立行政法人理化学研究所・柚木計算物性物理研究室・基礎科学特別研究員

研究者番号：40571237

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,500,000円、(間接経費) 1,050,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、世界最大規模の状態数 ( $m \sim 15000$ ) をとったDMRG計算を実行し、これを質量ゼロのディラック分散を持つハバード模型に応用した。相互作用が入ったときのこの系の二重占有率を調べた結果、我々は転移が一つしかない事を見出した。我々の結果は金属-絶縁体転移が対称性の破れを伴う事を示唆している。また、我々は2および3次元格子上で定義される磁性不純物問題に対する密度行列繰り込み群法も開発し、これをディラックフェルミオンと結合した磁性不純物問題にも応用した。不純物上の局所帯磁率等を調べた結果、電子-ホール対称性がある場合には近藤遮蔽が起こらない事がわかった。

研究成果の概要(英文)：We have implemented state-of-the-art DMRG code, which can take world largest adapted states, approximately  $m \sim 15000$ . We have then applied this code to interacting massless Dirac electrons described by a Hubbard type model. Carefully calculating the double occupancy as a function of the on-site Coulomb repulsion  $U$ , we have found that there is only one transition with  $U$ . In the strong coupling limit, the ground state of this model becomes a symmetry broken state. Therefore, our result suggests that the metal-insulator transition is accompanied by symmetry breaking in this system. We have also developed the DMRG method for the magnetic impurity problem defined in the 2 and 3 dimensions, and the method has been applied to the magnetic impurity problem coupled with massless Dirac electrons. We have calculated local dynamical magnetic susceptibility and found that, in the particle-hole symmetric case, the Kondo screening is absent.

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学、数理物理・物性基礎

キーワード：密度行列繰り込み群法 2次元強相関電子系 量子スピン液体 トポロジカル秩序 ディラックフェルミオン

1. 研究開始当初の背景

(1) 電子間相互作用のある2次元格子模型に対する数値計算手法、アルゴリズムには、まだ決定版と呼ばれるものは存在しておらず、混沌としている。代表的なアルゴリズムには、量子モンテカルロ法 (QMC)、厳密対角化法 (ED)、および密度行列繰り込み群法 (DMRG) などがある。この中で、DMRG は「繰り込み変換で残す状態数  $m$  を大きくとればとるほど、厳密解に近づく」という基本原理を持っている。しかしながら、現在 DMRG 計算で通常用いられている状態数  $m$  は、せいぜい数百から千のオーダーである。事実、密度行列繰り込み群法の開発者である S. R. White の研究グループでは、カゴメ格子ハイゼンベルグ模型の基底状態を調べる際、状態数を 5000 程度まで大きくして計算を行っている[Yan et al., Science **332**, 1173 (2011)]。2次元電子系では、ハイゼンベルグ模型等で表されるスピン系と比べて1サイト当たりの自由度が多くなるため、さらに多くの状態数  $m$  をとる必要がある。

(2) 相互作用のないハニカム格子系では、電子密度が丁度ハーフフィリングとなる時、フェルミ準位近傍に線形分散が現れる事が知られており、これらの系は、質量ゼロのディラック方程式との類似性から“ディラックフェルミオン系”と呼ばれている。ハニカム格子模型の強相関効果については、近年、京コンピュータを用いた大規模な QMC 計算が行われ、金属-絶縁体転移は対称性の破れを伴う事が示された[S. Sorella, Y. Otsuka, and S. Yunoki, Scientific Report **2**, 992 (2012)]。ただし、QMC 計算は電子-ホール変換に対して系が不変な場合に限り有効であるため、一般の質量ゼロのディラックフェルミオン系において、金属-絶縁体転移が対称性の破れを伴うか否かはわからない。特に、金属-絶縁体転移が対称性の破れを伴わない場合には、解析的な手法から、ギャップレス量子スピン液体が実現するという興味深い示唆もあった[e.g., M. Hermele, Phys. Rev. B **76**, 035125 (2007)]。

(3) 強相関効果のもう一つの重要課題として、磁性不純物問題が挙げられる。これに関連して、近年、グラフェンにフッ素が吸着した場合に、極低温まで常磁性を示すという結果が報告されていた[R. R. Nair et al., Nature Physics **8**, 199 (2012)]。グラフェンはハニカム格子を構成しており、フェルミ準位付近の状態は質量ゼロのディラックフェルミオンで記述できる。これに起因して、グラフェンのフェルミ準位近傍の状態密度はゼロとなるため、通常の金属内で議論される磁性不純物問題とは違った振る舞いを示す事が予想される。

2. 研究の目的

本研究の目的は、上記の背景を元に、世界最大規模の状態数  $m$  (10000 状態以上) をとれる世界最高水準の DMRG 計算を実装し、これまで困難であった2次元強相関電子系の模型に応用することである。

まず、強相関電子系の模型として、ハバード模型が挙げられる。ハバード模型とは、ある格子上で定義される模型で、電子が飛び移り積分  $t$  で格子上の各点 (サイト) をつなぐボンド間を飛び移る項と、電子が同じサイトを占有したときに電子間が斥力  $U$  を受けるオンサイト斥力の項のみを取り入れたシンプルな模型である。ハバード模型の性質は、その格子の形状によって大きく変化するが、本研究では、 $U=0$  の時に質量ゼロのディラックフェルミオン系として振る舞うような格子系を考え、この系の電子密度がハーフフィリングのときに実現する金属-絶縁体転移について議論する事を目的とした。

これとは別に、2次元格子上で質量ゼロのディラックフェルミオンとして振る舞う伝導電子と結合した磁性不純物問題も研究対象とした。この有効模型は、磁性サイトのみで相互作用が働き、2次元格子上の伝導電子は相互作用を無視して扱う模型である。

3. 研究の方法

本研究では2次元強相関電子系を調べる為に DMRG を採用した。一般に、DMRG は1次元系に対して有効な波動関数を生成するが、2次元電子系に適用した場合には、精度が落ちる。これを改善するために、本研究では、状態数を出来る限り大きくとる事を目標に掲げ、 $m=15000$  までとった計算を実行する事に成功した。

また、図1(a)、(b)に示すように、DMRG を2次元系に拡張する際には、すべてのサイトを通る経路を考え、その経路に沿って計算を行う。このときの経路の取り方にも計算の収束性が変わる。いくつかの経路の取り方について試した結果、図1(a)、(b)の二つの系では、図に示すようなパスに沿って計算を行うと波動関数の収束性が良くなる事がわかった。

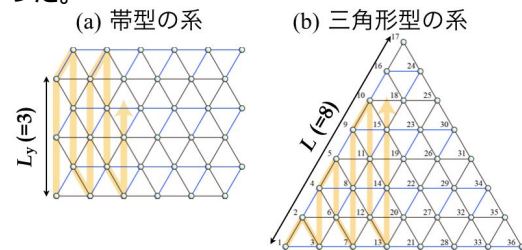


図1 : (a)帯型、(b)三角形型にクラスターをとった三角格子ハバード模型の格子。太い橙色の矢印は DMRG 計算における最適な経路を示す。(b)における  $L$  は三角形の一辺のサイト数を示すものとする。

図 1 (b)の経路をとった場合の計算について、各状態数に対する捨て去った密度行列の重み  $P_m$  と基底状態エネルギー  $E_m$  の典型的な振る舞いを図 2 に示す。 $P_m=0$  の時に  $E_m$  は厳密な値となる。 $P_m$  に対して  $E_m$  は線形に振る舞っている事が見て取れる。

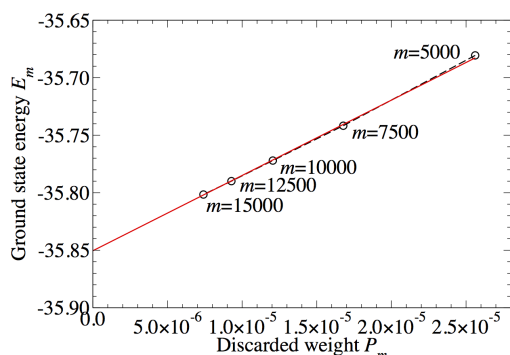


図 2 : 各状態数  $m$  に対する捨て去った密度行列の重み ( Discarded Weight,  $P_m$  ) と基底状態エネルギー ( Ground state energy  $E_m$  ) 図 1 (b) で示される 36 サイトの系で、パラメータは  $t=1$ ,  $U=5$  で、電子数はハーフフィリングにとった時のもの。

#### 4 . 研究成果

本研究課題では、次の(1)(2)に示す二点を明らかにした。

(1)三角格子ハバード模型の格子は、上向きと下向きの三角形から構成されている。そこで、上向きの三角形の周りの辺を掛け合わせると正、下向きの三角形の周りの辺を掛け合わせると負になる格子を考え、これを交替フラックス三角格子ハバード模型とよぶ事にする。まず、この模型は  $U=0$  で線形分散が実現するため、質量ゼロのディラックフェルミオン系となっている。従って、 $U=0$  で基底状態は金属状態を示す。他方、 $U$  が非常に大きいときには、摂動理論によって、三角格子ハイゼンベルグ模型に帰着される事がわかる。三角格子ハイゼンベルグ模型の基底状態は  $120$  度ネール構造という対称性の破れた状態になると言われている。したがって、 $U=0$  から  $U$  を大きくして行くと、ある  $U$  で対称性が破れる事と、金属-絶縁体転移が起こる事がわかる。

そこで、これを見る為に、我々は DMRG 法を用いて基底状態の“二重占有率”と呼ばれる量を、 $U$  の関数として調べた。系の大きさは最大 36 サイトまで大きくし、DMRG 計算の状態数は  $m=15000$  までとって計算を実行した。なんらかの転移がある場合には、この二重占有率が  $U$  の関数として特異性を持つ事が期待されるが、我々の解析結果は特異性が一つしか起こらない事を示した。すなわち、これは金属-絶縁体転移と同時に対称性の破れが起こっている事を示唆している。また、我々の得た二重占有率の振る舞いは、

変分モンテカルロ計算で得られる金属-絶縁体転移近傍で見られる二重占有率の振る舞いとよく一致していた。

この研究成果は、八ニカム格子で行われた先行研究の結果と合わせると、磁気秩序が違うものであるにも関わらず、ディラックフェルミオン系では対称性の破れなしに金属-絶縁体転移が起きていない事を示唆する点で、非常に興味深い結果である。ただし、交替フラックス三角格子ハバード模型は、あらゆる電子-ホール対称性をもっていないが、状態密度は電子-ホール対称性をもっている。従って、フラストレーション等を考慮して、電子-ホール対称性を破った場合に、対称性の破れない絶縁相、すなわち、量子スピン液体相が実現するか否かは、興味深い話題であり、今後の進展が期待される。

(2)我々は、磁性不純物問題に DMRG 計算を適用するため、Lanczos 基底を用いた一次元マッピングの方法を導入した。これにより、任意の次元の任意の格子上で定義される磁性不純物問題に、DMRG を適用する事が可能となった。そこで、これを八ニカム格子のあるサイトと磁性不純物が結合している問題に適用した。これは、グラフェンに磁性不純物が吸着したときの有効模型と見なす事ができる。

本研究では、磁性不純物上の電子密度、帯磁率、状態密度などをパラメータの広い範囲に渡って計算し、基底状態相図を明らかにした。その結果、模型に電子-ホール対称性がある場合には、常に近藤遮蔽が起きない事、および、電子-ホール対称性を強く破った場合には、繰り込み群理論で予想された非対称強結合状態となる事がわかった。また、帯磁率の計算から、近藤遮蔽が起きない領域では、スピン  $1/2$  の自由スピンが残っている事が示された。この事は、近年、実験的に報告された、グラフェンにフッ素が吸着した場合に、極低温までスピン  $1/2$  の常磁性として振る舞うという事実と一致している。

我々の開発した磁性不純物模型のための DMRG は、任意の磁性不純物問題を解くことができる。近年、強相関電子系の第一原理電子状態計算法として有用と考えられている動的平均場理論の不純物ソルバーとしても有用であり、今後の発展が期待できる。

#### 5 . 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 1 件)

T. Shirakawa and S. Yunoki, “Density-matrix renormalization group study on a magnetic impurity in the honeycomb lattice”, J. Phys. Conf. Ser., 掲載決定、査読あり

〔学会発表〕(計5件)

白川知功、曾田繁利、Tao Li、柚木清司、“2次元密度行列繰り込み群法を用いた三角格子ハバード模型の解析”、日本物理学会第69回年次大会、東海大学(神奈川)、2014年3月27日

T. Shirakawa and S. Yunoki, “Density-matrix renormalization group study on a magnetic impurity in graphene”, APS March Meeting, Denver, USA, Mar. 4 (2014)

白川知功、“密度行列繰り込み群法を用いたグラフェン磁性不純物問題の解析”、第3回強相関電子系の最前線—若手によるオープン・イノベーション、紀伊勝浦(和歌山)、2013年12月17日

T. Shirakawa and S. Yunoki, “Density-matrix renormalization group study on a magnetic impurity in the honeycomb lattice”, International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (SCES'13), Tokyo, Japan, Aug. 6 (2013)

白川知功、“密度行列繰り込み群法による二次元三角格子ハバード模型の解析”、平成24年度「京」を中核とするHPCIシステム利用研究課題中間報告、イノカンファレンスセンター(東京)、2013年3月15日

〔図書〕(計0件)

〔産業財産権〕

出願状況(計0件)

取得状況(計0件)

〔その他〕

ホームページ：<http://www.riken.jp/ccmp/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

白川 知功 (SHIRAKAWA, Tomonori)  
独立行政法人理化学研究所・柚木計算物性  
物理研究室・基礎科学特別研究員  
研究者番号： 40571237