

平成22年4月28日現在

研究種目： 若手研究 (A)  
研究期間： 2006～2008  
課題番号： 18684012  
研究課題名 (和文) 密度行列繰り込み群を用いた多自由度二次元量子多体系の数値的研究  
研究課題名 (英文) Study of multi-component two-dimensional quantum many body systems by the density matrix renormalization group method  
研究代表者  
柴田 尚和 (SHIBATA NAOKAZU)  
東北大学・大学院理学研究科・准教授  
研究者番号： 40302385

## 研究成果の概要：

多自由度量子多体系に対する優れた計算法である密度行列繰り込み群の計算法に最適化された並列計算機環境を構築することで、ソフトウェアとハードウェアの双方の技術を融合させ、これまでの計算技術では不可能であった多自由度量子多体系の研究を行った。特に、二層量子ホール系やグラフェン等の磁場中の電子状態の計算を行い、半導体界面やグラフェン等で実現する多自由度二次元量子多体系状態を実験的に検証するために必要な定量的理論予測を得た。

## 交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2006年度	5,100,000	1,530,000	6,630,000
2007年度	9,700,000	2,910,000	12,610,000
2008年度	6,500,000	1,950,000	8,450,000
年度			
年度			
総計	21,300,000	6,390,000	27,690,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・物性 I

キーワード：量子多体系、分数量子ホール効果、密度行列繰り込み群、グラフェン、二層系

## 1. 研究開始当初の背景

密度行列繰り込み群の方法は 1992 年に S.White により一次元量子多体系の基底状態と低エネルギー励起を精密に求めるために考案された。この方法により従来の計算法では困難であった一次元量子多体系の基底状態と低エネルギー励起の精密な研究が可能になり、特に一次元電子系やフラストレーションのある系の研究などはこの計算法により大きく進展し、急速に理解が深まった。その後、この計算法の優れた特徴を生かした応用、拡張法が盛んに模索され、その流れの中で我々は 1997 年に、密度行列繰り込み群の方法と量子転送行列法を組み合わせた新しい計算法（有限温度密度行列繰り込み群の方法）を開発し、その翌年にはこの方法を用いた動的相関関数の計算に世界ではじめて成功した。

一方で、高温超伝導体の研究に関連して二次元強相関電子系を高い精度で解析できる計算法の開発も進められ、量子二次元系への密度行列繰り込み群の拡張が多くの研究者によって試みられた。しかしながら、いずれの方法も精度のコントロールが難しく、電子間相互作用が強い系に適用した際に十分な精度を得ることは難しかった。そのような状況の中で我々は 2000 年に磁場中量子二次元系において高い精度が得られる計算法の開発に成功した。

磁場中量子二次元系は、電子間相互作用が系の性質を決定する強相関電子系の極限に位置する系であり、近年、純粋な二次元系である単層のグラファイトであるグラフェンが発見されたことと相まって、その電子物性の理解が重要なテーマとして認識されるようになった。

## 2. 研究の目的

本研究では、密度行列繰り込み群法を多自由度二次元量子系に拡張し、従来の計算法では解析が困難であった二層量子ホール系やバレーの自由度が存在するグラフェンなどの多自由度二次元量子多体系の基底状態と低エネルギー励起を調べ、内部自由度を持つ量子多体系の分数量子ホール状態、および、素励起に見られる内部自由度の役割等を明らかにすることを目的としている。

この目的の達成のためには、これまでの研究で行ってきた計算手法等のソフトウェアの開発や改良だけでなく、開発した計算手法に適した計算機環境の整備も必要になる。今回の研究は、密度行列繰り込み群法に適した 1CPU 当たりの主記憶領域が大きい並列

計算機環境を構築することで、計算手法と計算機環境の双方の開発、及び最適化を行うものであり、優れたハードウェアとそれらに最適化されたソフトウェアを利用することで、未解決の多自由度二次元量子多体系の問題について理論的結論を与えることを目指している。

## 3. 研究の方法

本研究の最大の特色は、先に挙げた理論的課題を独自開発した量子二次元系に対する密度行列繰り込み群の手法とそのために最適化された計算機環境を用いて解決することにある。

密度行列繰り込み群の方法は、行列積型変分関数を自動生成する誤差のコントロールされた精密な変分法であり、摂動計算が不可能な強相関電子系に対しても、与えられた基底の数の範囲で量子多体系の最適化された変分波動関数を自動的に導き出すことができる計算法である。特に、強相関電子系に対するこれまでの伝統的数値計算法である量子モンテカルロ法と比較して、電子系における負符号問題や統計誤差という原理的な問題がなく、また、厳密対角化法と比較してもシステムサイズに関する制約がないため、他の計算法では難しい低次元電子系やフラストレーションのある系について熱力学極限の計算が実行できる信頼できる計算法となっている。

また、波動関数を有限次元の行列積で表現することで生じる波動関数の厳密解からのずれは、捨てた基底に対応する密度行列の固有値によって決まるため、繰り込み後に残す基底の数を減らすことで、この計算法の計算精度と信頼性を容易に確認し制御することができる。

このように密度行列繰り込み群には他の計算法にはない多くの利点が存在するが、繰り込み変換を多数繰り返す必要があり、大規模な計算を行うためには、行列表現された演算子や、変換行列等を保存する大きな主記憶領域が計算機に必要なことになる。従来の大型並列計算機では 1CPU 当たりの 1 次記憶領域が 1~4GB に制限されており、系の自由度が大きな場合にはノード間で主記憶領域を共有する必要が生じる。そのためにノード間通信が頻繁に生じ、データ通信に多くの時間が割かれ効率的な計算が困難になる。この問題を解決するため、1CPU 当りの 1 次記憶領域を 16~24GB とする密度行列繰り込み群に最適化された 48 ノードの並列計算機を作製し、二層量子ホール系やグラフェンなどの多自由度量子系に適用することで世界に先駆けた成果を得ることを目指した。

#### 4. 研究成果

本研究の成果については、1. 計算機の作製に関する成果、2. 計算法の開発に関する成果、および、3. それらを利用して得られた多自由度量子多体系の研究に関する成果がある。以下にこれらの成果について順に述べる。

##### (1) 計算機の作製に関する成果

計算機の作製に関しては、単体演算性能が高い CPU と 1 次記憶領域が多く確保できるチップセットを組み合わせ、さらに、大容量の高速動作が可能なメモリモジュールとの相性を繰り返し比較、検証することで高周波数動作に対する耐性が高い安定した並列計算システムを完成させた。

作製した計算システムの 1CPU 当たりの 1 次記憶領域は 16~24GB で、従来の大型並列計算機に比べて 6~24 倍の容量をもつ。このためノード間で主記憶領域を共有せずに計算を行うことが可能になり、ノード間通信による長い待ち時間を完全になくすことができた。さらに高性能、高速、低消費電力の CPU とメモリモジュールを採用することで、CPU のコア当たりの演算能力を従来の大型計算機の 2~4 倍に向上させる一方、消費電力を低減させることができ、性能向上による電力消費量の増加を抑えることができた。

##### (2) 計算法の開発に関する成果

多自由度量子多体系の内部自由度の増加に伴う計算精度の低下を抑えるため、スピン空間の対称性や保存量子数を用いる工夫により、与えられた記憶領域の範囲で高精度かつ高速な計算を行うプログラムを開発した。

多自由度量子多体系がもつ巨大な自由度を取り扱う上で最も工夫が必要になるのは、自由度の増加に伴う量子多体系の基底の数の指数関数的な増加を如何にして効率的に抑え、必要な波動関数の精度を保持するかという点である。密度行列繰り込み群の方法では系を拡張する際に波動関数の密度行列を対角化し、そこで得られる密度行列の固有ベクトルを新たな基底として採用することで、限られた基底数で波動関数のノルムを最大限保持し、系を拡張する際の基底数の指数関数的な増大を抑えている。しかしながら、この方法ではスピンや軌道自由度など本来等価に扱う必要がある系の内部自由度の増加に起因する基底の指数関数的増大には対処できない。その結果、同じ基底数の計算と比較すると、自由度を増やす前の計算と比較して自由度を増やした後では計算精度が著しく低下してしまう問題が生じる。この問題を

解決するための工夫として、スピン空間の対称性や保存量子数による基底のサブブロック化を行い、基底状態の表現に必要な自由度のみを選択的に残すことを行った。このように系の内部自由度がもつ対称性を利用して基底状態の表現に必要な基底の数を減らすことで、系の内部自由度の増加に伴う計算精度の著しい低下を抑えることができ、多自由度量子多体系の計算が可能になった。

##### (3) 多自由度量子多体系の研究に関する成果

本研究によって開発された高速並列計算機、および、それらに最適化されたプログラムを利用することで、従来の計算法では困難であった多自由度量子多体系の典型といえる二層量子ホール系や、バレーと呼ばれる内部自由度をもつ単層および二層グラファイト (グラフェン) の磁場中の基底状態と低エネルギー励起等の計算を行い、グラフェンにおける安定な分数量子ホール状態の存在や素励起の特徴、さらに、バレー自由度を持つ量子多体系の分数量子ホール状態の階層構造、および、励起に果たすバレー自由度の役割等を明らかにした。以下では、①二層量子ホール系に関する成果、②単層グラフェンに関する成果、③二層グラフェンに関する成果について述べる。

① 二層量子ホール系は上下二層のそれぞれの電子を上向き、下向きの擬スピン自由度で表現することでスピン自由度をもつ量子ホール系として取り扱うことができる。この系では上下二層合計のランダウ準位の占有率  $\nu$  が 1 となる場合において、上下の電子面に電流を反平行に流したときにホール抵抗が消失したり、二層間のトンネルコンダクタンスが低温で急激に増加するという特異な現象が発見されている。そのため、近年理論的な興味を集めていたが、二次元系の量子多体問題を精密に解くことが非常に困難であることから、その現象の理論的解明はこれまで十分になされてこなかった。

今回開発した密度行列繰り込み群の方法とその計算法に最適化された並列計算機を用いることで、従来の計算法の限界を大きく超える磁気長の 6 倍程度の距離までの電子状態を精密に計算することが可能になり、この系の理論的電子状態と実験で明らかになっている特異な電氣的輸送特性との関係を十分な精度で調べることが可能になった。

この計算によって得られた電子間の相関関数を解析した結果、特異な輸送現象が現れる領域で励起子間に巨視的スケールの秩序が形成されていることが分かった。この秩序は二層間の距離が磁気長の 1.6~1.7 倍程度

のところで連続的に消失し、励起子凝縮相から独立二層状態への連続的な転移が現れることが明らかになった。図1に励起子凝縮相を特徴付ける励起子相関  $g_{ex}$  と層間距離  $d$  の間の関係を示すが、相関距離  $d$  が磁気長の1.6~1.7倍程度のところで連続的に消失していることが分かる。

この解析結果は、これまでの実験結果を理論的に説明するものである。

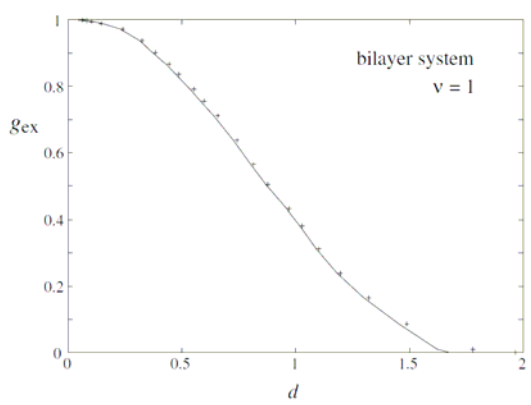


図1 二層量子ホール系  $\nu = 1$  における励起子相関  $g_{ex}$  と層間距離  $d$  の間の関係。

② 近年注目を集めている単層グラファイト（単層グラフェン）に関する成果としては、これまで明確な結論が出ていなかったグラフェンにおける分数量子ホール状態とそこから素励起であるバレー・スカーミオン励起、さらにストライプ、バブルといった様々な電荷秩序状態の存在を理論的に明らかにすることができたことが挙げられる。これらの成果は、今回開発した並列計算機を利用することで従来の2~3倍以上の規模の計算が可能になり、グラフェンに内在するバレーの自由度を考慮した計算が可能になったことにより得られたものである。

図2にバレー縮退が存在する最低ランダウ準位  $n=0$  および一つ上の  $n=1$  のランダウ準位が部分的に占有されている  $\nu_n=1/3$  のときのバレー偏極電荷励起ギャップ  $\Delta_c$  とバレー非偏極電荷励起であるバレー・スカーミオン励起のギャップ  $\Delta_s$  を示す。  $n=0$  および  $n=1$  の両方のランダウ準位で量子多体効果による有限の励起ギャップが存在していることが確認できるが、グラフェンにおけるバレー自由度の存在により、バレー・スカーミオン励起が最小の電荷励起ギャップを形成していることが分かる。

これらの結果により、従来の半導体界面で形成される二次元電子系と単層グラファイトで形成される二次元電子系との相違点が明らかになり、二次元電子系で実現する電子状態の理解と、実験的検証に必要な理論予想値を得ることができた。

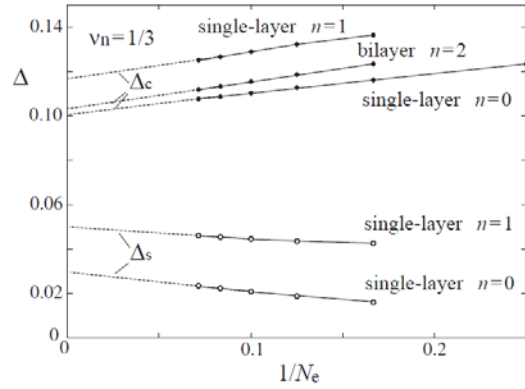


図2  $\Delta_c$  はバレー偏極した電荷励起ギャップ、 $\Delta_s$  はバレー非偏極電荷励起であるバレー・スカーミオン励起。 $n$  はランダウ準位の指数、single-layer は単層、bilayer は二層のグラフェンの結果を示す。 $N_e$  は系の電子数を表わし、 $1/N_e = 0$  が無限系に対応する。

③ 二層グラファイト（二層グラフェン）には、グラフェンに内在するバレーの自由度に加えて上下二層の層の自由度が存在する。この系の磁場中の基底状態と励起構造について調べ、二層グラフェンに非常に安定な分数量子ホール状態が存在することを明らかにした。また、二層グラフェンにおける分数量子ホール状態の素励起は単層グラフェンで現れるバレー・スカーミオン励起と異なり、バレー偏極したラフリン型の素励起であることが分かった。表1に各ランダウ準位 LL が部分的に占有される占有率  $\nu_n$  のときの電荷励起の特徴を示すが、例えば二層グラフェン (BLG) の  $\nu_n=1/3$  の最低電荷励起は、単層グラフェン (SLG) の場合を異なり、バレー偏極 (polarized) したものであることが分かる。

表1に示すこれらの結果より、半導体界面やグラフェン等において実現する多自由度二次元量子多体状態の特徴とそれらを実験的に検証するために必要な定量的理論予想値が明らかになった。

$\nu_n$		LL	ground state	excited state	$\Delta_s$	$\Delta_c$
1	SLG	0	polarized	skyrmion	0.63	
1	SLG	1	polarized	skyrmion	0.28	
1	SLG	2	polarized	skyrmion	0.42	
1	BLG	2	polarized	skyrmion	0.48	
1/3	SLG	0	polarized	skyrmion	0.05	0.101
1/3	SLG	1	polarized	skyrmion	0.03	0.115
1/3	BLG	2	polarized	polarized		0.103
2/5	SLG	0	unpolarized	unpolarized	0.04	(0.050)†
2/5	SLG	1	polarized	polarized		0.059
2/5	BLG	2	polarized	polarized		0.052
2/3	SLG	0	unpolarized	unpolarized	0.08	(0.101)†
2/3	SLG	1	polarized	unpolarized	0.10	0.115
2/3	BLG	2	polarized	polarized		0.103

表1 単層グラフェン (SLG) と二層グラフェン (BLG) の各ランダウ準位 (LL) が占有率  $\nu_n$  のときの基底状態 (ground state) および電荷励起状態 (excited state) のバレー偏極の状態とバレー非偏極電荷励起ギャップ  $\Delta_s$  および、バレー偏極電荷励起ギャップ  $\Delta_c$  の大きさを示す。

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 6 件)

- ① D. Yoshioka, N. Shibata, "Stability of the Excitonic Phase in Bilayer Quantum Hall Systems at Total Filling One -- Effects of Finite Well Width and Pseudopotentials --", Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 79, No.6 (2010) 査読有 (掲載確定)
- ② A. Endo, N. Shibata, Y. Iye, "Collapse of the fractional quantum Hall state by a unidirectional periodic potential modulation", Physica E, Vol.42, 1042-1045 (2010) 査読有
- ③ N. Shibata, K. Nomura, "Fractional Quantum Hall Effects in Graphene and Its Bilayer", Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 78, 104708-1-7 (2009) 査読有
- ④ N. Shibata, K. Nomura, "Coupled charge and valley excitations in graphene quantum Hall ferromagnets", Physical Review B Vol. 77 235426-1-5 (2008) 査読有
- ⑤ N. Shibata, "Quantum Hall Systems Studied by the Density Matrix Renormalization Group Method", Progress of Theoretical Physics supplement, Vol. 176, 182-202 (2008) 査読有
- ⑥ N. Shibata, K. Nomura, "Phase Separation in  $\nu=2/3$  Fractional Quantum Hall Systems", Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 76, 103711-1-4 (2007) 査読有

[学会発表] (計 19 件)

- ① 吉岡大二郎, 柴田尚和, "2層量子ホール励起子相境界の相互作用依存性", 日本物理学会, 2010年3月20日, 岡山大学
- ② N. Shibata, "Entanglement entropy of quantum Hall systems in torus and spherical geometry", APS March Meeting, 2010年3月15日, Portland Convention Center (米国, ポートランド)

- ③ 東達也, 柴田尚和, "強磁場中グラフェンにおける電子相関の効果", 日本物理学会, 2009年9月26日, 熊本大学
- ④ 柴田尚和, 野村健太郎, "磁場中2次元電子系への応用とグラフェンにおける分数量子ホール状態", 日本物理学会, 2009年9月25日, 熊本大学
- ⑤ N. Shibata, "Fractional quantum Hall states in grapheme", Workshop on New Developments in Strongly Correlated Electron Systems, 2009年9月19日, ETH Zurich (スイス, チューリッヒ)
- ⑥ N. Shibata, "Fractional quantum Hall states in 2D electron systems", Workshop on Matrix Product State Formulation and Density Matrix Renormalization Group Simulations, 2009年8月12日, Kobe Institute (University of Oxford)
- ⑦ T. Higashi, N. Shibata, "Ground state phase diagram of graphene in a high Landau level", 18th International Conference on Electric Properties of Two-Dimensional Systems", 2009年7月23日, Kobe International Conference Center
- ⑧ N. Shibata, K. Nomura, "Fractional quantum Hall states in single-layer and bilayer grapheme", 18th International Conference on Electric Properties of Two-Dimensional Systems", 2009年7月23日, Kobe International Conference Center
- ⑨ A. Endo, N. Shibata, Y. Iye, "Collapse of the fractional quantum Hall state by a unidirectional periodic potential modulation", 18th International Conference on Electric Properties of Two-Dimensional Systems, 2009年7月21日, Kobe International Conference Center
- ⑩ 柴田尚和, 野村健太郎, "単層および二層グラフェンにおける分数量子ホール状態の階層構造", 日本物理学会, 2009年3月27日, 立教大学
- ⑪ 東達也, 柴田尚和, "グラフェンの高次のランダウ準位における基底状態の相図", 日本物理学会, 2009年3月27日, 立教大学

- ⑫ 柴田尚和, ”磁場中2次元電子系への応用: 量子ホール系の電子状態”, 密度行列繰り込み群法を用いた物性研究の新展開, 2008年12月16日, 京都大学
- ⑬ 柴田尚和, 野村健太郎, ”二層グラフェンにおける分数量子ホール状態”, 日本物理学会, 2008年9月22日, 岩手大学
- ⑭ 東達也, 柴田尚和, ”グラフェンの高次のランダウ準位におけるCDW構造”, 日本物理学会, 2008年9月22日, 岩手大学
- ⑮ N. Shibata, ”Coupled charge and valley excitations in graphene quantum Hall ferromagnets”, Topological Aspects of Solid State Physics, 2008年6月24日, 京都大学
- ⑯ 柴田尚和, 野村健太郎, ”強磁場中グラフェンにおけるスカーミオン励起”, 日本物理学会, 2008年3月25日, 近畿大学
- ⑰ N. Shibata, ”Bilayer quantum Hall systems”, Interaction and Nanostructural Effects in Low-Dimensional Systems, 2007年11月13日, 京都大学
- ⑱ 柴田尚和, ” $\nu=2$ および $\nu=2/3$ 量子ホール系におけるスピンドメインの形成”, 日本物理学会, 2007年9月21日, 北海道大学
- ⑲ N. Shibata, ”Excitonic state in bilayer quantum Hall systems”, 日中セミナー, 2007年6月27日, 人民大学 (中国, 北京)

[その他]

ホームページ等

<http://www.cmpt.phys.tohoku.ac.jp/~shibata>

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

柴田 尚和 (SHIBATA NAOKAZU)  
東北大学・大学院理学研究科・准教授  
研究者番号: 40302385