

令和元年5月29日現在

機関番号：82401

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2014～2018

課題番号：26400413

研究課題名(和文)量子モンテカルロ法によるディラック電子系におけるモット転移と磁気特性の解明

研究課題名(英文) Quantum Monte Carlo study of Mott transition and magnetic properties in Dirac electrons

研究代表者

大塚 雄一 (Otsuka, Yuichi)

国立研究開発法人理化学研究所・計算科学研究センター・研究員

研究者番号：30390652

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,600,000円

研究成果の概要(和文)：ディラック電子系における量子相転移の臨界性を量子モンテカルロ法によって調べた。斥力相互作用による反強磁性転移に関しては、ハニカム格子および磁束を持つ正方格子上でのハバード模型に対して、磁化および準粒子重みに関する有限サイズスケール解析を行った。その結果、二つの異なる格子模型から得られた臨界指数は高い精度で一致し、普遍性クラスの存在が数値的に明らかにされた。また、三角格子上での引力ハバード模型に対しても同様の計算を行い、一連の臨界指数を得た。これらの結果はそれぞれ、Gross-Neveu模型でのchiral-Heisenberg、chiral-XYクラスに相当するものである。

研究成果の学術的意義や社会的意義

グラフェンなどで見られる質量ゼロの2次元ディラック電子系において、電子間の相互作用が引き起こす金属から絶縁体への相転移が普遍的な性質をもつことを明らかにした。ディラック電子系を構成する2つの異なる模型に対し、量子モンテカルロ法によるシミュレーションを「京」コンピュータ上で実行し、2つの模型の臨界指数(相転移点で物理量が示す特徴的な指数)が互いによく一致し、普遍性をもつことを示した。この成果は、物性物理から素粒子物理まで、スケールを超えた臨界現象の理解につながるほか、銅酸化物高温超伝導体の金属-絶縁体転移のメカニズムを解明する手がかりとしても期待される。

研究成果の概要(英文)：We have investigated quantum criticalities in Dirac electrons by large-scale quantum Monte Carlo simulations. First, the universal character of the antiferromagnetic phase transitions is revealed on the basis of two different lattice models, the Hubbard model on a honeycomb lattice and on a square lattice with magnetic flux, which corresponds to the chiral-Heisenberg class in terms of the Gross-Neveu model. We have also studied the superconducting phase transition in the attractive Hubbard model on a triangular lattice with alternating magnetic flux and obtained the critical exponents corresponding to the chiral-XY universality class in the Gross-Neveu model.

研究分野：物性理論

キーワード：物性理論 強相関電子系 量子相転移 臨界現象 量子モンテカルロ法 ディラック電子

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19、CK - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

単層グラファイトとしてのグラフェンの単離が実験的に確認された 2005 年以来、グラフェンの研究は精力的に続いていた。グラフェンの際立った特徴は、それが原子層程度の厚みしか持たない真の 2 次元系であることに加え、電子状態がいわゆるディラック電子系となっていることにある。これはグラフェンの骨格であるハニカム(蜂の巣)格子の対称性により、エネルギー分散がフェルミ面近傍で線形となり、相対論的量子論であるディラック方程式によって電子状態が実効的に記述されるためである。通常の物質中では電子は非相対論的なシュレディンガー方程式に従うが、これがディラック方程式に置き換えられることで、量子ホール効果やアンダーソン局在などが大きな変更を受けることになる。また、グラフェンによってキックオフされたディラック電子系の物理は、次世代スピントロニクス材料の有力候補と目されるトポロジカル絶縁体とも密接に関連しており、その電子状態がもたらす特異な性質や機能性材料としてのポテンシャルがますます注目されつつあった。

それまでの研究において、グラフェン中の電子間相互作用は多くの場合無視されるか近似的な取扱いに留まっていた。これは、グラフェンを構成する sp² 結合はバンド幅が広いので、本来的に弱相関系であると考えられていたためであった。しかし、第一原理計算によると、グラフェンにおける有効的な電子間相互作用はそれほど小さくはないことが指摘され (Wehling et al., Phys. Rev. Lett., 2011)。実験的にもグラフェンを伸長することで電子間相互作用を制御し金属絶縁体転移をスイッチする試みが行われるようになった。また、強磁場下での分数量子ホール効果 (Bolotin, et al., Nature, 2009) やナノグラフェン端のスピン分極 (Enoki, et al., Sol. Stat. Comm., 2009) においても電子間相互作用が重要な役割を担うものと指摘されるようになった。

基礎論的な側面からもグラフェン(あるいはより一般的にディラック電子系)における強相関効果を調べる研究が精力的に行われるようになった。その中でも大きな注目を浴びたのは、2010 年に報告されたハニカム格子ハバード模型におけるスピン液体相の可能性であった。これは、弱相関における半金属相と強相関領域の反強磁性モット絶縁体相の間に非磁性絶縁相が存在すると主張するもので、この相が相関効果由来の絶縁相であるにも関わらず、反強磁性相関等の長距離秩序が見られないことからスピン液体相であると主張された (Meng, et al., Nature, 2010)。スピン液体相とは顕著な量子揺らぎ(零点振動)によって、絶対零度まで秩序化を起さない相として理論的に提案されていたが、実際に 2 次元以上の現実的な模型においてその存在が実証された例は非常に稀であり、そのような新奇相がハニカム格子のように幾何学的フラストレーションも持たない「素性の良い」格子模型で実現することは驚きであった。また、この提案に続いて、フラックス相においてもスピン液体相が存在するという報告がされた (Chang and Scalettar, Phys. Rev. Lett., 2012)。ただし、この相はスピンギャップの有無に関してハニカム格子ハバード模型の場合とは定性的に異なるものであり、ディラック電子系におけるスピン液体相に関する理論計算の結果は錯綜した状況であった。このような中、我々は 2011 年に稼働した京コンピュータを利用して、高度に並列化された量子モンテカルロ計算を行うことで先行研究より計算量で約二桁以上大きな問題を扱うことを可能とし、世界最大規模の計算を実現した。これによりモット転移は半金属相から反強磁性絶縁体への直接転移であり、得られた基底状態相図の中にスピン液体相は存在しないことを示した (Sorella, et al., Scientific Reports, 2012)。

2. 研究の目的

(1) 大規模な量子モンテカルロ計算が可能な系、つまり負符号問題が生じないようなクラスの中で、近年精力的に研究されている問題の一つがディラック電子系における強相関効果の問題である。この問題は比較的歴史が古く、例えばハニカム格子上の half-filled ハバード模型におけるモット転移が有限の相互作用の強さ (U_c/t) で起こることは 20 年以上前に報告されていた [Sorella and Tosatti, Euro. Phys. Lett. 19, (1992)]。しかし近年、まったく同じ模型において新奇な量子相であるスピン液体相が存在する可能性が指摘され [Meng et al., Nature 464 (2010)]、この問題が世界的に再び注目を集める端緒となった。その後、本研究代表者らが京コンピュータを用いて行った大規模高精度シミュレーション計算によって、スピン液体の可能性は否定されたものの、これらの一連の研究の流れの中で新たな視点による研究トピックが現れた。それが、ディラック電子系における量子臨界性の解明である。これは、強相関電子系において臨界性が数値的に厳密に明らかになった例はほぼないという意味で新規性を持つのみならず、大規模数値計算を行うことで初めて解明が可能となる問題であり、計算物理的にもチャレンジングであると言える。このような観点から、ディラック電子系におけるハバード型斥力相互作用による半金属-反強磁性モット絶縁体の臨界性を、大規模量子モンテカルロシミュレーションによって明らかにすることを研究の第一段階での目的とした。

(2) ディラック電子系における相互作用誘起相転移の有効模型は素粒子分野においては Gross-Neveu 模型として知られている。この有効模型における分類では、上で述べた半金属-反強磁性モット転移は chiral-Heisenberg と呼ばれる普遍的クラスに属することが知られている。Gross-Neveu 模型の枠内では、その他にも chiral-Ising と chiral-XY という分類が存在するが、その臨界性を定める臨界指数は繰り込み群法等の解析的手法では定量的な評価が定まっていなかつ

た。そこで我々は chiral-Heisenberg クラスにおける成功を踏まえ、chiral-XY クラスの臨界指数を物性理論の格子模型を基にして求めることを目指した。

3. 研究の方法

計算手法としては基底状態の補助場量子モンテカルロ法を用いた。この方法はいわゆる負符号問題が生じない問題に関しては非常に強力であり、2次元電子系に関して数百サイトまでの計算が現実的に可能であった。本研究代表者らはこの手法を京コンピュータ等の大型計算機上で最適化し、研究目的(1)のモット転移の解明においては2,592 サイトまでの計算を実行した。これにより高精度な有限サイズスケール解析が可能となった。また、解析においては原田 (Harada, Phys. Rev. E., 2011) により提唱されたベイズ推定に基づく統計的手法も用いた。

4. 研究成果

(1)ここで対象とした八ニカム格子、および フラックス模型では相互作用のない極限ではいわゆるディラック電子系となっている。このため、弱結合領域では常磁性半金属相が安定した基底状態として存在する。一方、両模型とも副格子構造を持つため、相互作用の強い極限ではネール秩序を伴う反強磁性モット絶縁相が基底状態となる。

先行研究ではこの半金属相とモット絶縁体との中間相としてスピン液体が存在することが示唆されていた。我々はまずこのスピン液体相の存在を再検討することを目的として、二つの格子模型の基底状態相図を決定した。注目した物理量は運動量分布関数およびスピン構造因子であり、それぞれモット転移を特徴づける金属-絶縁体転移、常磁性-反強磁性転移を検出するための指標となる量である。これらの量を計算して得られた相図は図1のようにまとめられる。図中の青点で示されているのは運動量分布関数のフェルミ面における飛びであり、これが有限であれば(半)金属相であると判断される。両模型ともに、この飛びが消失する、つまり金属状態から絶縁相に転移すると同時にスピン構造因子から得られた交替磁化が発達しており、これは金属-絶縁体転移と常磁性-反強磁性転移が同時に起こることを明確に示している。スピン液体相であるためには何らかの長距離秩序を持たない絶縁相であることが必要条件であるので、この結果はスピン液体相が存在せず、モット転移は半金属相から反強磁性絶縁体への直接連続転移であることを示している。さらにモット転移の臨界性を調べるため、これらの物理量に対する有限サイズスケール解析を行った。図2に示したのはいくつかの有限サイズクラスターで計算された交替磁化を collapse fit したもので、この解析から臨界点および臨界指数を決定することができる。八ニカム格子と フラックス模型ではフェルミ準位近くで線形分散となることを除けば異なるエネルギー分散を持つので当然臨界点は異なるが、得られた臨界指数の値は高い精度で一致することが確認された。この結果はディラック電子系におけるモット転移に普遍性クラスが存在することを示している。この普遍性クラスは場の理論における Gross-Neveu 模型で記述されることが示唆されており、我々の結果はこの普遍性クラスの臨界指数に対して初めて数値的に厳密な評価を与えたものである。

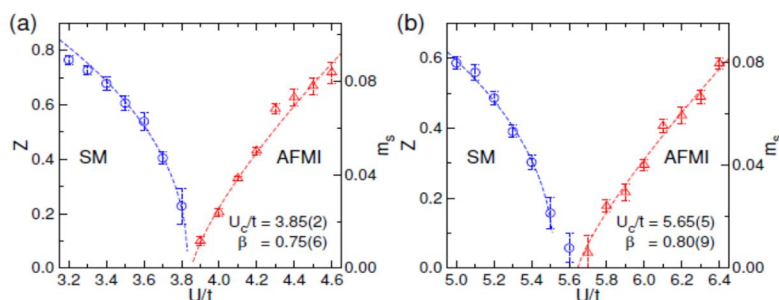


図1: 基底状態相図 (左: 八ニカム格子、右: フラックス模型)

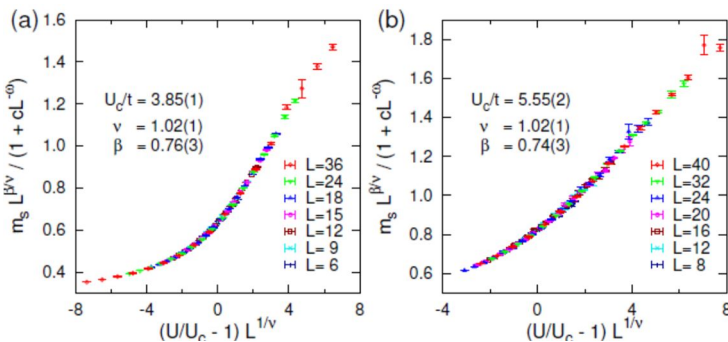


図2: 有限サイズスケール解析 (左: 八ニカム格子、右: フラックス模型)

(2) ディラック電子系における chiral-XY 対称性の破れを示す相転移を調べるため、図3左に示されるような交替 フラックス磁束を持つ三角格子上における引力ハバード模型を対象とした。この模型では相互作用のない極限において、ディラック電子系を特徴づける線形分散 (図3

右)を持つ。chiral 対称性を持つハーフフィルドの場合、基底状態では $E < 0$ の状態が占有され、半金属相となる。ここに引力相互作用を印加していくと、系は等方的な s 波超伝導相へ転移する。

図 4 に s 波超伝導の秩序変数、および同時刻グリーン関数から見積もられた準粒子重みに対して行った有限サイズスケール解析の結果を示す。異なる物理量に対して独立に求めた転移点 U_c/t および相関長に関する臨界指数 ν はともによく一致しており、結果が定量的に信頼できることを示している。また、 ν と秩序変数の臨界指数 β はケクレ転移で見積もられている値とよく一致することが分かった (Natu. Commun. 2017)。このケクレ転移では臨界点のみで $U(1)$ 対称性が創発されるという特異な理論が提唱されているが、臨界指数が一致するという結果はこのシナリオを強くサポートするものと考えられる。

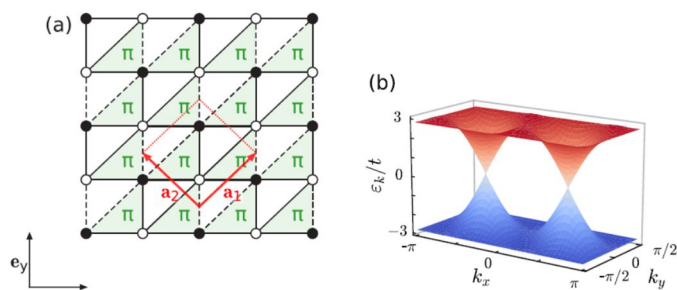


図 3: フラックス磁束を持つ三角格子(左:格子構造, 右:分散関係)

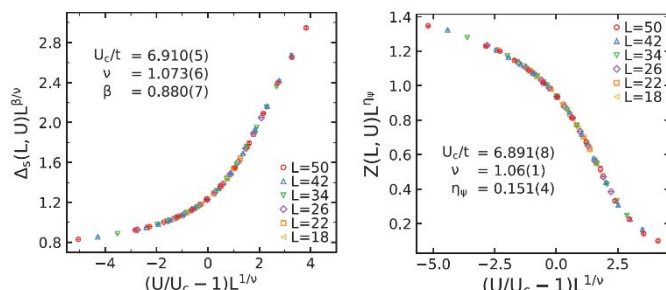


図 4: スケールングプロットの結果(左:超伝導秩序変数, 右:準粒子重み)

5. 主な発表論文等

[雑誌論文](計 6 件)

Seki Kazuhiro, Yuichi Otsuka, Seiji Yunoki, and Sandro Sorella, “Fermi-liquid ground state of interacting Dirac fermions in two dimensions”, Physical Review B, 査読有, Vol. 99, 2019, pp. 125145/1-9

Yuichi Otsuka, Seki Kazuhiro, Sandro Sorella, and Seiji Yunoki, “Quantum criticality in the metal-superconductor transition of interacting Dirac fermions on a triangular lattice”, Physical Review B, 査読有, Vol. 98, 2018, pp. 035126/1-7

大塚雄一, 柚木清司, 「相互作用する 2 次元ディラック電子系における量子相転移とその臨界性」, 固体物理, 査読有, Vol. 52, 2017, pp. 373-384

Yuichi Otsuka, Seiji Yunoki, and Sandro Sorella, “Universal Quantum Criticality in the Metal-Insulator Transition of Two-Dimensional Interacting Dirac Electrons”, Physical Review X, 査読有, Vol. 6, 2016, pp. 011029/1-18

Yuichi Otsuka, Hitoshi Seo, and Yukitoshi Motome, “Magnetic Field Effect in One-Dimensional Charge Ordering Systems”, Journal of the Physical Society of Japan, 査読有, Vol. 83, 2014, pp. 083703/1-4

Yuichi Otsuka, Seiji Yunoki, and Sandro Sorella, “Mott transition in the 2D Hubbard model with π -flux”, JPS Conference Proceedings, 査読有, Vol. 3, 2014, pp. 013021/1-5

[学会発表](計 12 件)

Yuichi Otsuka, “Quantum Monte Carlo study of interacting Dirac fermions”, Electron correlation, Quantum biology and Quantum information (国際会議, 招待講演), Beijing China, July 2018

Yuichi Otsuka, “Semimetal-superconductor phase transition of interacting Dirac fermions on a triangular lattice with π -flux”, Tensor Network States: Algorithms

and Applications 2018-2019 (国際学会), Kobe Japan, December 2018

大塚雄一, 「引力相互作用を持つディラック電子系における半金属-超伝導転移 II」, 日本物理学会 2017 年秋季大会, 岩手大学, 2017 年 9 月

Yuichi Otsuka, “Large-scale quantum Monte Carlo study of semimetal-superconductor phase transition in Dirac fermions”, Italian National Conference on Condensed Matter Physics (国際学会), Trieste Italy, October 2017

Yuichi Otsuka, “Quantum criticality in two-dimensional interacting Dirac Fermions”, 12th International Symposium on Crystalline Organic Metals, Superconductors and Ferromagnets (国際学会), Miyagi Zao Japan, September 2017

Yuichi Otsuka, “Quantum criticality of the semimetal-superconductor phase transition in the two-dimensional interacting Dirac fermions”, International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (国際学会), Prague Czech, July 2017

大塚雄一, 「引力相互作用を持つディラック電子系における半金属-超伝導転移」, 日本物理学会 2016 年秋季大会, 金沢大学, 2016 年 9 月

Yuichi Otsuka, “QMC study of quantum criticality in two-dimensional interacting Dirac fermions”, The 2nd Conference on Condensed Matter Physics (国際学会), Nanjing China, July 2016

Yuichi Otsuka, “Universal quantum criticality in Hubbard models with massless Dirac dispersion”, American Physical Society March Meeting 2016 (国際学会), Baltimore USA, March 2016

大塚雄一, 「量子モンテカルロ法によるディラック電子系の大規模高精度シミュレーション」, 大阪大学サイバーメディアセンターCyber HPC Symposium (招待講演), 大阪大学, 2015 年 3 月

大塚雄一, 「Universal quantum criticality in the 2D interacting Dirac electrons」, 第 4 回強相関電子系理論の最前線, 和歌山県勝浦, 2014 年 12 月

大塚雄一, 「ディラック電子系における金属・絶縁体転移のユニバーサリティークラス」, 日本物理学会 2014 年秋季大会, 中部大学, 2014 年 9 月

〔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〕

プレスリリース

柚木清司, 大塚雄一, サンドロ・ソレラ, 「ディラック電子系に潜む普遍性を実証 - 世界最大規模のシミュレーションで金属-絶縁体転移の臨界指数を決定 - 」, 理化学研究所 2016 年 3 月 19 日, URL: http://www.riken.jp/pr/press/2016/20160319_1/

広報誌発表

“Electrons lose identity”, RIKEN Research, Summer Issue 2016

“In or out of phase? - Large-scale computer simulations show that an intriguing state of matter previously predicted in graphene-like materials might not exist after all - ”, RIKEN Research, Volume 8, Issue 5, May 2, 2013. URL:

<http://www.riken.jp/en/research/rikenresearch/highlights/7242/>

ホームページ等

<https://www.r-ccs.riken.jp/labs/cms/>

<https://www.r-ccs.riken.jp/labs/cms/QMC/>

6. 研究組織

(1)研究分担者

該当なし

(2)研究協力者

該当なし

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。