

課題名 (タイトル) :

強相関電子系格子模型の電子状態の研究

利用者氏名 : 柚木 清司

理研での所属研究室名 : 和光研究所 基幹研究所 柚木計算物性物理研究室

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

近年、グラフェン (2次元カーボンシート) の電子状態が大変興味を持たれている。本研究では、グラフェンにおける電子間クーロン斥力の効果を調べるために、蜂の巣状格子上で定義された2次元はバード模型の基底状態の電子状態を数値シミュレーションによって調べた。

2. 具体的な利用内容、計算方法

本研究では、補助場法にもとづく絶対零度量子モンテカルロ法を用いた。虚時間プロジェクトジョンを効率的に行うために、試行関数を工夫した。その結果、統計誤差を減らすことが出来た。

3. 結果

金属-絶縁体転移がハバード相互作用  $U$  が  $4t$  ( $t$ : ホッピングパラメータ) 程度で現れることが分かった。さらに、最近指摘された金属・絶縁体転移近傍で現れるスピン液体の可能性を議論するために、スピギャップ、電荷ギャップ、および反強磁性スピン相関関数の系のサイズ依存性を詳細に調べた。その結果、600 サイト程度の系の大きさでは、無限系に対する結論を得るには困難であることが分かった。

4. まとめ

蜂の巣状格子上に定義された2次元ハバード模型の基底状態、特にスピン液体の有無に関する研究は非常に重要である。本研究では、その解明に向けて、基底状態に対する量子モンテカルロシミュレーションを行った。スピン液体の存在の有無を明らかにするためには、本研究で行った系の大きさ以上のサイズが必要であることが明らかになった。

5. 今後の計画・展望

蜂の巣状格子上に定義された2次元ハバード模型におけるスピン液体の有無の解明には、負符号

6. 問題が無い場合量子モンテカルロ法は最適なシ

ミュレーション法である。しかしながら、その最終的な結論を得るためには、少なくとも2000 サイト程度のシミュレーションが必要である。今後、さらに有効な並列アルゴリズムの開発が必須である。

7. RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況 (どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか) や、継続して利用する際に行う具体的な内容

さらに大きな系に対するシミュレーションを行うために、状態を記述する行列をノード間に分割する新しい並列アルゴリズムの開発を行う。さらに、その性能を RICC で調べ、2次元ハバード模型のシミュレーションを実行する。