

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

所属 : 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次元ハ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。また、これと関連する系として、2次元正方格子上で定義される π -flux を有するハバード模型の基底状態を調べた。

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ンを効率的に行うために、試行関数を工夫した。例えば、右と左の試行状態を異なるものを用いることにより、統計誤差を減らすことが出来た。その結果、従来よりも大きな系を同じ CPU 時間で扱うことが可能になった。

3. 結果

蜂の巣格子上のハバード模型に関して、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、相転移の性質を議論するためには、数千サイト以上の系が必要であるとの結論を得た。 π -flux を有するハバード模型に関するシミュレーションは現在進行中である。

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。