

課題名 (タイトル) :

## 動的密度行列繰り込み群法を用いた強相関多体系の研究

利用者氏名 : ○白川知功

所属 : 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

動的密度行列繰り込み群法とは、密度行列繰り込み群法(DMRG)を用いて動的物理量を求める計算手法である。特に、動的帯磁率や状態密度などの動的物理量は、実験と直接比較することのできる量であり、量子多体系を調べるための重要な情報を与える。そこで、本研究課題では、この動的密度行列繰り込み群法を様々な強相関多体系へと応用することを目的とする。

## 2. 具体的な利用内容、計算方法

申請者は任意の磁性不純物模型をブロックランチョスの基底を使ってユニタリ変換することで、準1次元系へとマップし、これを密度行列繰り込み群法で解くというブロックランチョス密度行列繰り込み群法 (BL-DMRG) を開発した。この手法は、伝導電子を記述するハミルトニアンがいかに複雑であっても適用することができる。そこで、本課題では、特にグラフェンにおける磁性不純物問題に対して BL-DMRG 法を適用し、磁性不純物サイトの帯磁率や状態密度などの解析を行った。

## 3. 結果

本研究課題では、(a) 磁性不純物がグラフェンのある炭素サイトの上に付いた場合 (吸着型模型)、(b) グラフェン内の炭素サイトが磁性不純物で入れ替わった場合 (置換型模型)、(c) 炭素欠陥のあるグラフェンの有効模型 (格子欠陥模型) の三つの場合について、それぞれ動的帯磁率、動的電荷相関関数、局所状態密度の三つを調べた。その結果、(a) の吸着型模型では、電子ホール対称性のある場合に局在モーメントが伝導電子に遮蔽されずに残り、電子ホール対称性を強く破った場合には、二つの電子 (もくしはホール) が磁性不純物サイトに入って非磁性状態になる事、さらに、グラフェンに電子ドーブをしないう限り、近藤遮蔽

状態がおこらないことがわかった。他方、(b) の置換型模型と (c) の格子欠陥模型の場合には、どちらも相図の広い領域で非磁性状態となることがわかった。ただし、局所状態密度はフェルミ面近傍で擬ギャップ構造を持っており、近藤共鳴準位が現れない事から、通常の近藤遮蔽状態とは言えない状態である事がわかった。

## 4. まとめ

本研究課題では、動的密度行列繰り込み群法を用いて、量子多体系の電子状態の振る舞いを調べる事を目的とした。特に、最近開発した BL-DMRG 法をグラフェンにおける磁性不純物問題に応用し、そこでの動的物理量を調べることで、広いパラメータ領域において、詳細な電子状態を明らかにした。

## 5. 今後の計画・展望

本研究で得られた結果は、吸着型不純物の入ったグラフェンが、極低温までスピン 1/2 の常磁性体として振舞う事を観測した実験結果[R. R. Nair *et al.*, *Nat. Phys.* **8**, 199 (2012)]と上手く一致している。他方、格子欠陥については実験結果と一致した結果は得られなかった。今後、この問題の解決に向けて理論と実験の双方から研究が進展することを期待している。また、今後の課題としては、より複雑な情報を取り入れた磁性不純物問題に BL-DMRG 法を応用していきたいと考えている。

平成 26 年度 RICC 利用研究成果リスト

**【国際会議などの予稿集、proceeding】**

[1] T. Shirakawa and S. Yunoki, “Density matrix renormalization group study on a magnetic impurity in the honeycomb lattice”, JPS Conf. Proc. **3**, 012025 (2014).

**【国際会議、学会などでの口頭発表】**

[2] 白川知功、“水素吸着グラフェンに関連する有効モデルの解析”、第 4 回強相関電子系理論の最前線—若手によるオープン・イノベーション、紀伊勝浦、12 月（2014）

**【その他】**

ポスター発表

[3] T. Shirakawa, “Numerical Studies of Anderson Impurity Models on the Honeycomb Lattice”, Energy Materials Nanotechnology Summer Meeting (EMN2014), Cancun, Mexico, June (2014)

[4] T. Shirakawa, “Magnetic impurity problems in graphene”, International Workshop on Dirac Electrons in Solids, Hongo, Japan, January (2015)

[5] 白川知功、新城一矢、柚木清司、“リング交換のある三角格子スピンモデルの基底状態相図”、日本物理学会 2014 年秋季大会、中部大学（春日井）、9 月（2014）