

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 : 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ジョ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、統計誤差を著しく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、蜂の巣格子上ハバード模型の半金属-反強磁性絶縁体転移は連続であり、その間にスピン液体相が存在しないことが分かった。 π -fluxを有するハバード模型でも、同様に半金属-反強磁性絶縁体転移は連続であり、先行研究で指摘されていたスピン液体の存在は確認されなかった。

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

型およびこの模型と関連がある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、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て調べた。どちらの模型も電子相関 U/t を増やすに連れて、半金属-反強磁性絶縁体転移が起きその転移は連続であることが分かった。さらに、先行研究で指摘されていた、半金属と反強磁性絶縁体の間にスピン液体相は確認されなかった。

5. 今後の計画・展望

本研究では、ディラック電子を有するハバード模型の金属絶縁体転移を調べ、その転移が連続であることが分かった。転移の臨界指数を詳細に調べてみるとどちらの場合も統計誤差の範囲で同じであることが分かった。今後は、ディラック電子を有する他のハバード模型の金属・絶縁体転移を調べ、そのユニバーサリティーを明らかにしたい。