

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は強相関多体系における系の性質を調べるのに有用な計算手法である。特に、動的帯磁率や状態密度等の動的物理量は、実験と直接比較することのできる量であり、系の性質を特徴付ける際に非常に重要である。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事を目的とする。

## 2. 具体的な利用内容、計算方法

本研究課題では、動的密度行列繰り込み群法を用いて強相関多体模型の解析を行った。特に、本年度は磁性不純物問題に密度行列繰り込み群法を適用するため、ブロックランチョス法を用いた一次元マッピングの方法（以下、これをブロックランチョス密度行列繰り込み群法と呼ぶことにする）を提案し、これをグラフェンにおける磁性不純物問題に適用した。また、この方法を用いると、磁性不純物と伝導電子間のスピン相関など、磁性不純物問題の実空間における物理量を厳密に計算できる。そこで、本研究では、グラフェンにおける磁性不純物問題にこの方法を適用し、磁性不純物-伝導電子間のスピン相関を求めた。

## 3. 結果

本研究では、グラフェンにおける磁性不純物問題として、ブロックランチョス密度行列繰り込み群法を次の3つの場合について適用した。

(a) グラフェンに吸着型磁性不純物がある場合

(b) グラフェンに置換型磁性不純物がある場合

(c) グラフェンに格子欠陥がある場合

まず、それぞれの場合について、磁性不純物上での動的帯磁率を計算した所、(a)についてはゼロエネルギー励起に鋭い発散が見られたのに対

し、(b)と(c)についてはゼロエネルギー励起が擬ギャップ構造を持つ事が示された。これは、(a)では自由モーメントが存在する事、(b)と(c)については、伝導電子によって磁性不純物上のスピンの遮蔽されている事を示している。

次に、それぞれの場合について、磁性不純物上における局所状態密度を計算した。その結果、(a)の場合、相互作用がないときにはフェルミエネルギー付近に発散が見られるのに対し、相互作用を入れたとたんにその発散が抑制され、擬ギャップ構造を形成する事がわかった。また、(b)と(c)の場合については、相互作用がないときにフェルミエネルギー付近に見られる擬ギャップ構造が、相互作用を入れても変わらない事、また、相互作用の増加に伴い、上部ハバードバンドに相当するシヨルダーを形成して行く事がわかった。この振る舞いは従来の近藤効果の物理に非常に良く似ているが、擬ギャップ構造のために近藤共鳴ピークが消失している点が異なる。

さらに、それぞれの場合について、磁性不純物-伝導電子間のスピン相関の距離依存性について調べた所、(a)ではスピン相関が距離の3乗に逆比例する事、(b)と(c)については距離の4乗に逆比例する事がわかった。(a)の場合、相互作用がないときには距離の2乗に逆比例している事から、相互作用によってスピン相関が劇的に抑制されている事がわかる。他方、(b)と(c)の場合は、相互作用がない場合に着いても距離の4乗に逆比例しており、相互作用による変化は、各距離における絶対値を強調するが、指数の変化をもたらすほどの劇的な変化はない事がわかった。

## 4. まとめ

本研究課題では、ブロックランチョス密度行列繰り込み群法を用いて、グラフェンにおける磁性不純物問題の動的物理量（帯磁率と状態密度）や

不純物周りのスピン構造を計算する事で、その電子状態を明らかにした。

5. 今後の計画・展望

本研究課題で用いたブロックランチョス密度行列繰り込み群法は、如何なる磁性不純物問題にも適用できる。また、磁性不純物問題のソルバーは動的平均場理論のソルバーとしても有用である。特に、高エネルギー付近のスペクトル構造を調べるのが困難な数値繰り込み群法や、低温を調べるのが困難な量子モンテカルロ法に対して、本研究で用いた密度行列繰り込み群法はどちらの問題も克服できる手法と考えられる。そこで、来年度は動的平均場理論への応用も行いたい。

平成 25 年度 RICC 利用研究成果リスト

【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】

なし

【国際会議などの予稿集、proceeding】

[1] Shirakawa T. and Yunoki S. : “Density matrix renormalization group study on a magnetic impurity in the honeycomb lattice”, J. Phys. Conf. Ser., published.\*

【国際会議、学会などでの口頭発表】

[2] Shirakawa T. and Yunoki S. : “Density matrix renormalization group study on a magnetic impurity in the honeycomb lattice”, International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (SCES'13), Tokyo, Japan, Aug. (2013)

[3] Shirakawa T. and Yunoki S. : “Electronic correlation and topologically protected metallic boundary states in a two-dimensional topological insulator: numerical evidence for Tomonaga-Luttinger liquid behavior”, Workshop on Oxide Electronics, Singapore, Sep. (2013)

[4] Shirakawa T. and Yunoki S. : “Density-matrix renormalization group studies on a magnetic impurity in graphene”, APS March Meeting, Denver, USA, Mar. (2014)

[5] 白川知功:“密度行列繰り込み群法を用いたグラフェン不純物問題の研究”、「分子システム 研究」第 2 回春合宿、御殿場高原ホテル BU、6 月(2013)

[6] 白川知功、柚木清司:“2 次元トホロジカル絶縁体-モット絶縁体界面における朝永ラッティンジャー流体の振る舞い”、日本物理学会 2013 年秋季大会、徳島大、9 月(2013)

[7] 白川知功:“密度行列繰り込み群法を用いたグラフェン磁性不純物問題の解析”、第 3 回強 相関電子系の最前線-若手によるオープン・イノベーション-、紀伊勝浦、12 月(2013)

【その他】