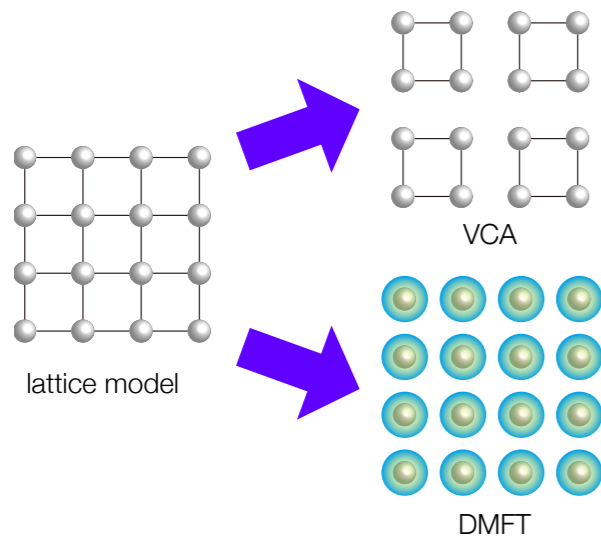


物性物理における量子多体系計算手法とその応用

課題代表者：白川知功（理化学研究所・創発物性化学研究センター・計算量子物性チーム）

quantum cluster methods

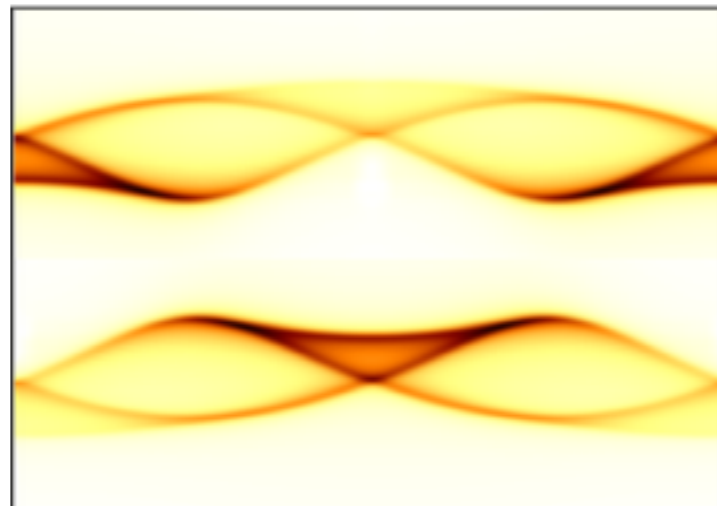


- [K. Seki et al., PRB **93**, 155419 ('16)]
- [K. Seki & S. Yunoki, arXiv:1603.07794]
- [T. Sato, T. Shirakawa, & S. Yunoki, PRB **91**, 125122 ('15)]
- [R. Peters & J. Bauer, PRB **92**, 014511 ('15)]
- [R. Peters & N. Kawakami, PRB **92**, 035129 ('15)]

large scale
parallel QMC (PMWA)

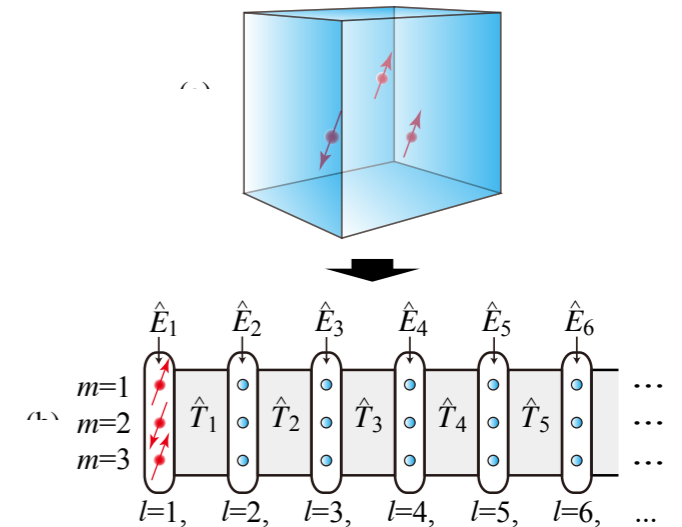
[A. Masaki-Kato et al., PRL **112**, 140603 ('14)]

dynamical-DMRG
time dependent-MPS



- [S. Sota, S. Yunoki, & T. Tohyama, JPSJ **84**, 054403 ('14)]
- [T. Shirakawa & E. Jeckelmann, PRB **90**, 195121 ('09)]
- [T. Shirakawa & S. Yunoki, arXiv:1604.00721]

1D mapping technique
for impurity models



- [T. Shirakawa & S. Yunoki, PRB **90**, 195109 ('14)]
- [T. Shirakawa & S. Yunoki, arXiv:1604.00721]

ターゲット

遷移金属酸化物、グラフェン、分子性固体、
ランタノイド・アクチノイド系化合物、等

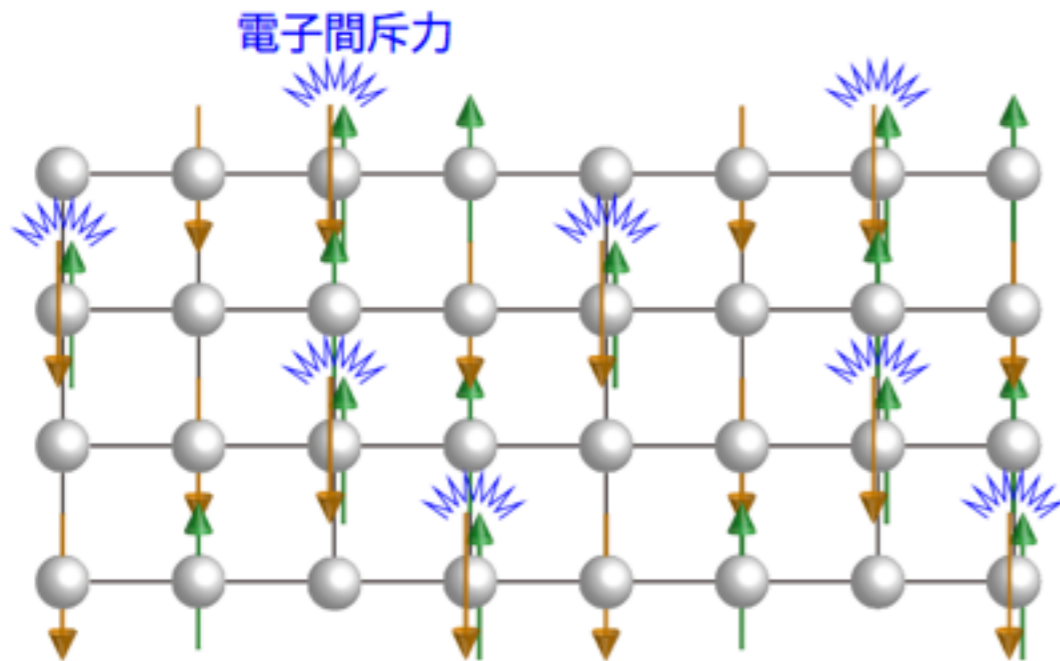
～本研究課題の目標～

2次元強相関量子系のスペクトル解析
輸送現象等の動力的シミュレーション

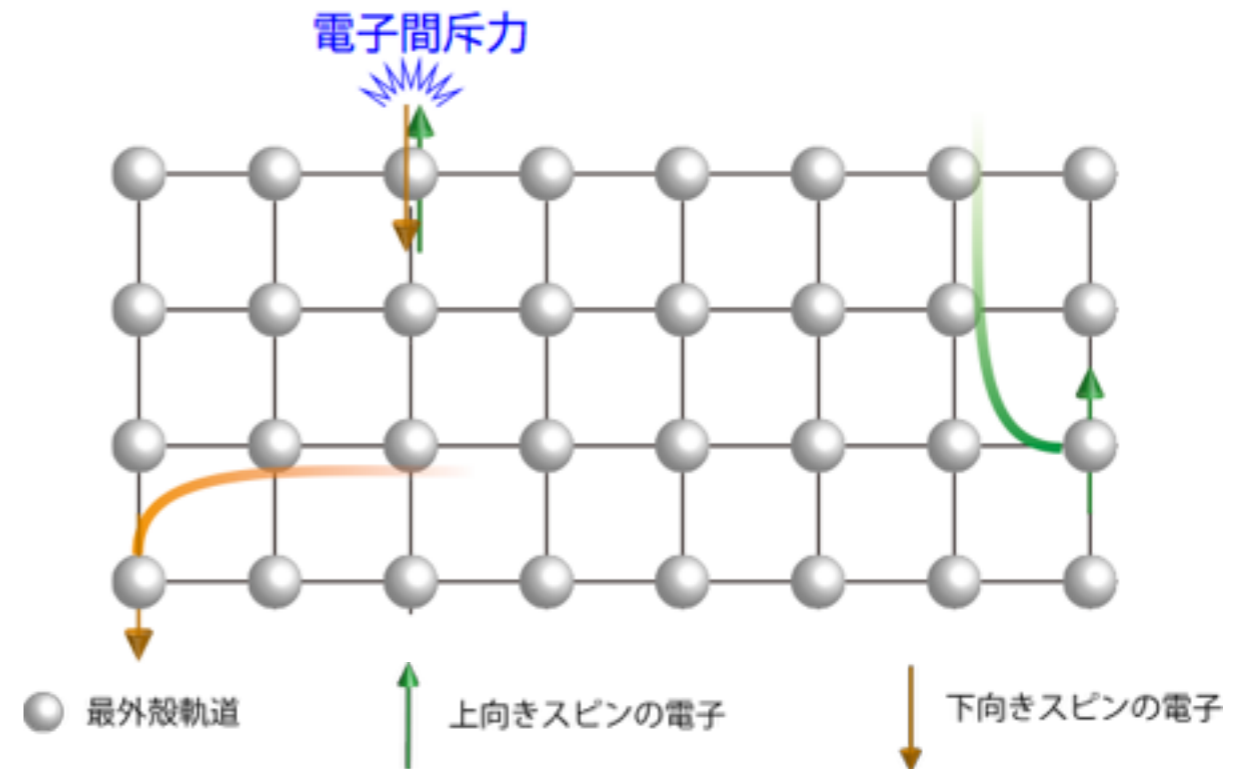
物性物理における量子多体系

強相関物質：遷移金属酸化物、分子性固体、ランタノイド・アクチノイド系化合物、等

強相関物質中の電子構造



c.f. 半導体等：自由に動ける



- 電子同士がいたるところでぶつかりながら運動している
- 何が起こるかわからない（量子効果、多体効果）

数値計算の必要性

量子多体問題

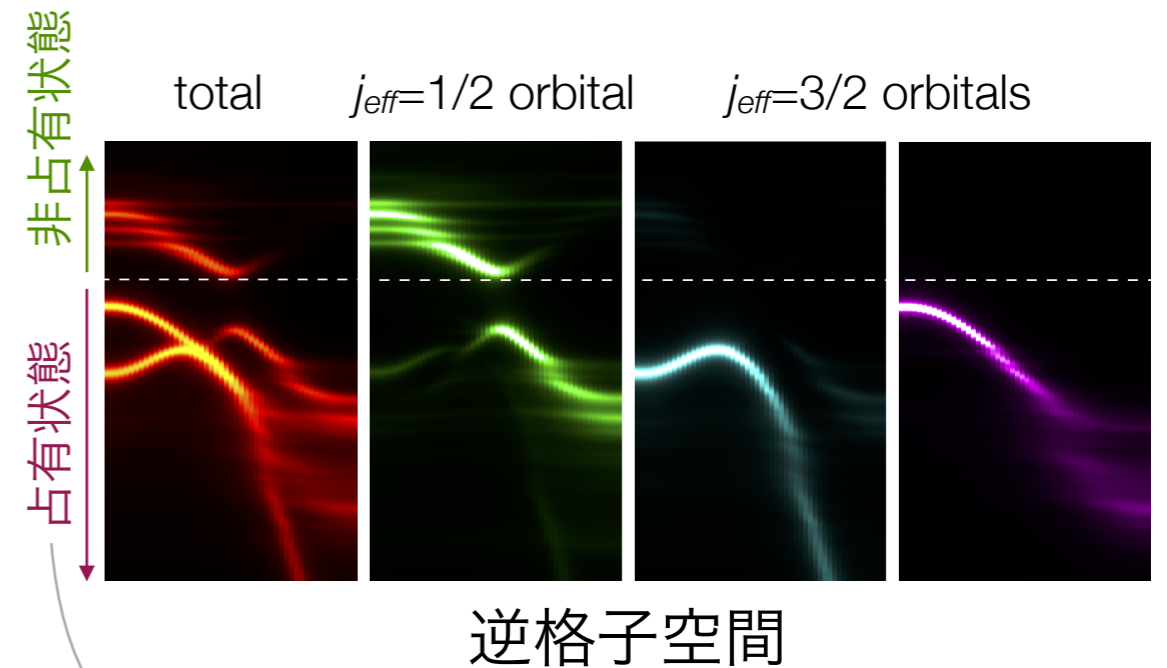
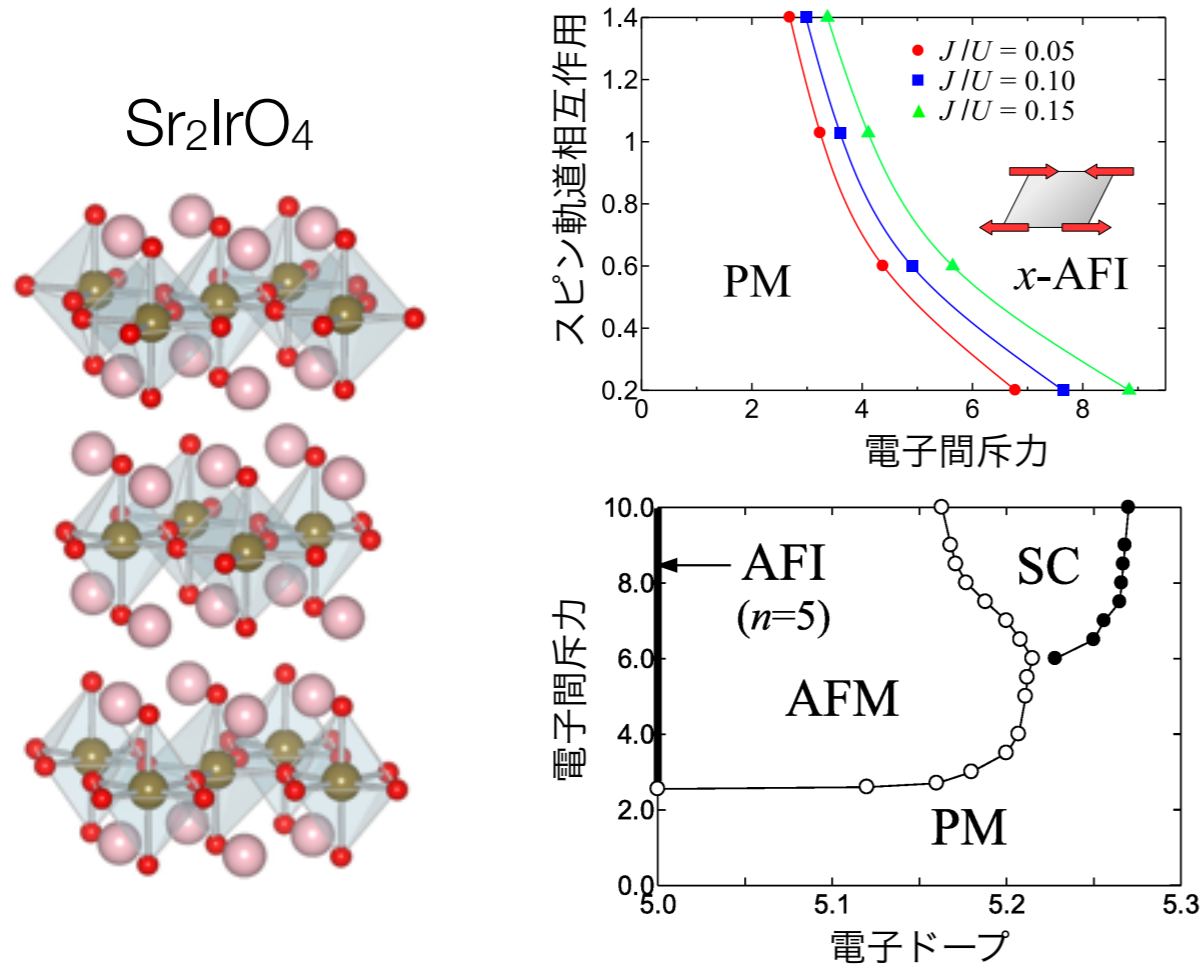
非自明な現象の宝庫

集団現象、新機能デバイス

利用成果①：イリジウム酸化物の電子状態の理論的研究

イリジウム酸化物 Sr_2IrO_4 の有効模型について
理論的に予測される基底状態相図の決定

ARPES実験（1粒子スペクトル）の
軌道のプロファイルを数値的に検証



占有状態の強度分布は
角度分解光電子分光（ARPES）実験に対応

- $j_{\text{eff}}=1/2$ 軌道内にギャップの開いた反強磁性絶縁体の実現している事を数値的に検証
- キャリアドーピングによる超伝導発現の可能性について数値計算を元に議論

[H. Watanabe, T. Shirakawa, and S. Yunoki, Phys. Rev. Lett. **105**, 216410 (2010)]

[H. Watanabe, T. Shirakawa, and S. Yunoki, Phys. Rev. Lett. **110**, 027002 (2013)]

[H. Watanabe, T. Shirakawa, and S. Yunoki, Phys. Rev. B **89**, 165115 (2014)]

[T. Sato, T. Shirakawa, and S. Yunoki, Phys. Rev. B **91**, 125122 (2015)]

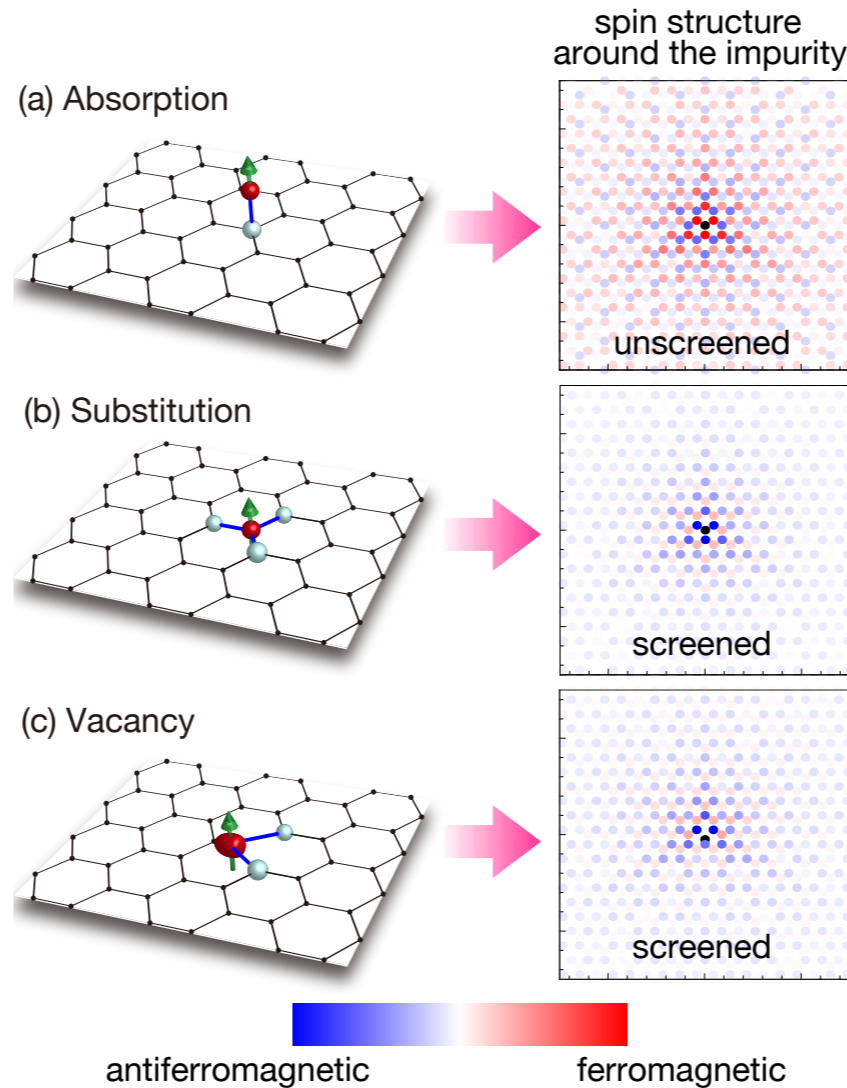
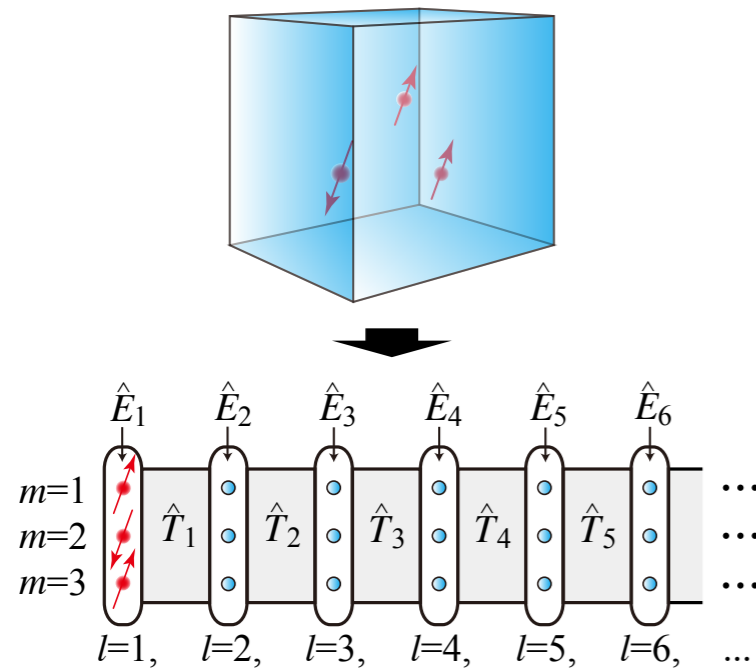
利用成果②：グラフェンにおける磁性不純物効果

量子不純物モデルに対する
新しい計算手法の提案

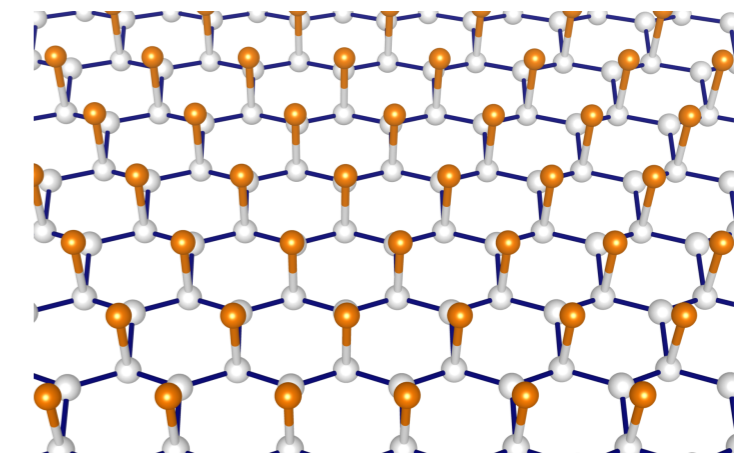
不純物の混入の仕方による
磁性の変化を数値的に検証

不純物が沢山入ったときに
期待される電子状態の予測

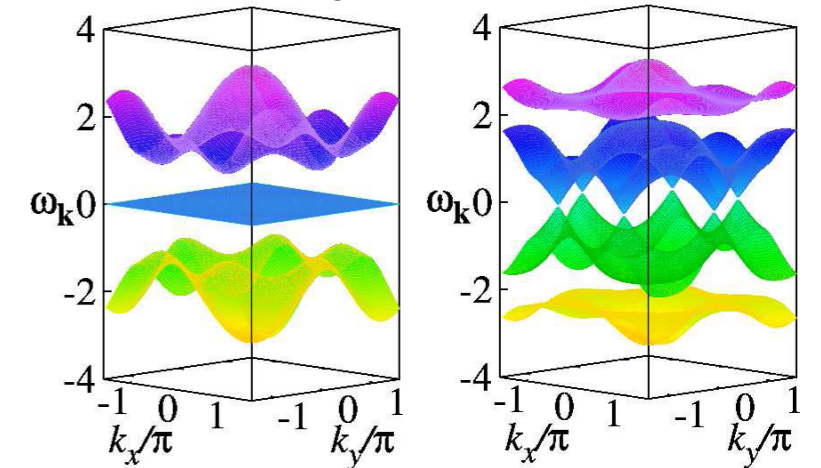
Impurity DMRG



(a) half-side hydrogenated graphene



(b) non-interacting case (c) interacting case



[T. Shirakawa, and S. Yunoki, Phys. Rev. B **90**, 195109 (2014)]

[K. Seki, T. Shirakawa, Q. Zhang, T. Li, and S. Yunoki, Phys. Rev. B **93**, 155419 (2016)]

[T. Shirakawa, and S. Yunoki, Phys. Rev. B in press (2016)/arXiv:1604.00721]