

課題名(タイトル):量子モンテカルロ法による相関格子模型の研究

利用者氏名:○関和弘(1), 大塚雄一(2), 柚木清司(1,2,3), Sandro Sorella(1,2,3)

理研における所属研究室名:

(1) 創発物質科学研究センター 計算量子物性研究チーム

(2) 計算科学研究センター 量子系物質科学研究チーム

(3) 開拓研究本部 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

ディラックフェルミオンの量子臨界点の研究は、多くの研究分野で注目を集めている。質量のないディラックフェルミオンは、様々な凝縮系において準粒子として現れるが、準粒子間に働く相互作用は避けられない。相互作用するディラックフェルミオンを記述するために用いられる最も一般的なモデルは、その運動エネルギー部分がフェルミ準位付近の線形分散によって特徴づけられる標準的なハバード模型である。これらのモデルを用いた数値研究では、半金属と反強磁性絶縁体の間にモット転移が存在することが明らかになった。そしてそのモット転移の有効理論が、高エネルギー物理学でよく研究されている Gross-Neveu (GN) モデルによって記述されることが明らかになった。

GN 理論では、相互作用するディラックフェルミオン系の相転移が Z_2 , $U(1)$, $SU(2)$ 対称性の破れに対応して、カイライジング、カイラル XY, カイラルハイゼンベルクの3つの普遍性クラスに分類される。普遍性クラスは臨界指数の組によって特徴づけられるので、普遍性クラスの特定には臨界指数の評価が必要である。実際これまで、ディラックフェルミオン系の量子相転移を実現する様々な格子モデルに対して、量子モンテカルロ計算が行われてきた。しかし、異なる理論的手法の間で GN 普遍性クラスの臨界指数の評価値にばらつきがあり、さらなる研究が必要である。

本研究では d 波超伝導対場を持つハーフフィリングの正方格子ハバード模型を用い、その反強磁性転移における GN 普遍性クラスの臨界指数を、補助場量子モンテカルロ法を用いた計算に基づき評価する。

2. 具体的な利用内容、計算方法

本研究で用いる模型は、ホッピングパラメタ t をエネルギーの単位($t=1$)として、 d 波超伝導対場の大きさを表すパラメタ Δ と相互作用パラメタ U をもつ。相互作用パラメタ U が相転移を制御するパラメタである。一方、 d 波超伝導対場パラメタ Δ は、線形分散のフェルミ速度の異方性を変化させる(図1)。 $\Delta=1$ の場合は、線形分散はフェルミ準位近傍

で円錐(等方的)に近似されるが、一般には線形分散はフェルミ準位近傍で楕円錐(異方的)に近似される。

本研究では、 $\Delta=1$ と 0.5 の場合について、反強磁性転移を起こす U の値(U_c)と、GN 普遍性クラスの臨界指数の組を計算する。模型の解析には補助場量子モンテカルロ法を用いる。システムは周期境界条件を課した $L \times L$ サイト系、ただし $L=8,12,16,20,24,32,40$ とした。

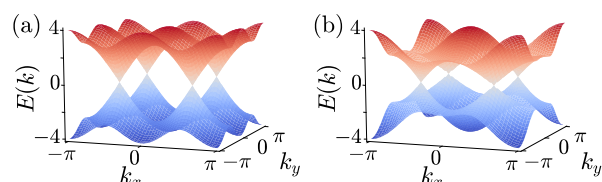


図1: 本研究で用いた模型の運動エネルギー部分の分散関係。(a) $\Delta=1$ の場合。(b) $\Delta=0.5$ の場合。 $x(y)$ 軸は $x(y)$ 方向の結晶運動量 $k_x(k_y)$ 、 z 軸はエネルギー $E(k)=E(k_x, k_y)$ であり $E(k)=0$ がフェルミ準位に対応する。

3. 結果

U_c の値と臨界指数の組の値を、 $\Delta=0.5$ と 1 の場合について、補助場量子モンテカルロ法で計算したスピン構造因子と準粒子重みのデータに有限サイズスケールングの手法を適用して、評価した。ここで、スピン構造因子は熱力学極限で反強磁性秩序が発生する場合に発散する量であり、準粒子重みは熱力学極限で質量ゼロのディラックフェルミオンが存在する場合に有限になる量である。

$\Delta=0.5$ と 1 の場合について、異方性の有無にかかわらず、臨界指数の値の差はわずかであり、かつハニカム格子上のハバード模型等で得られていた先行研究の結果とも概ね整合していた。また、 U_c の値は、線形分散の状態密度の係数の逆数の平方根(フェルミ速度の幾何平均に比例)をエネルギーの基準にすると、 Δ の値によらずほぼ同じ値が得られた。これらの結果は、 d 波超伝導対場を持つハーフフィリングの正方格子ハバード模型における反強磁性転移が、線形分散の異方性の有無にかかわらずカイラルハイゼンベルク普遍性クラスに属することを示唆している。

4. まとめ

カイラルハイゼンベルク普遍性クラスの相転移の量子臨界性を GN モデルの観点から再検討した。正方格子上のハバード模型に d 波超伝導対場を導入することで、ディラックフェルミオンの線形分散を構築した。結果として得られる有効モデルは、広く研究されているハニカム格子上のハバード模型と同じである。補助場量子モンテカルロ法を利用して、スピン構造因子と準粒子重みを計算し、臨界指数の組の値を評価した。

利用成果は以下の論文で発表した: Yuichi Otsuka *et al.*, “Dirac electrons in the square lattice Hubbard model with a d -wave pairing field: chiral Heisenberg universality class revisited”, *Physical Review B* **102**, 235105 (2020).

5. 今後の計画・展望

分散メモリ並列計算に対応するようにプログラムを並列化して大規模計算を行えるようにする。

2020 年度 利用研究成果リスト

【雑誌に受理された論文】

1. Yuichi Otsuka, Kazuhiro Seki, Sandro Sorella, Seiji Yunoki, “Dirac electrons in the square lattice Hubbard model with a d -wave pairing field: chiral Heisenberg universality class revisited”, *Physical Review B* **102**, 235105 (2020).
2. Natanael C. Costa, Kazuhiro Seki, Seiji Yunoki, Sandro Sorella, “Phase diagram of the two-dimensional Hubbard-Holstein model: enhancement of s -wave pairing between charge and magnetic orders”, *Communications Physics* **3**, 80 (2020).

【口頭発表】

1. Yuichi Otsuka, “QMC study of the Gross-Neveu universality class; the chiral-Heisenberg class revisited”, Mini-workshop on “Fermion Quantum Criticality and beyond”, Wurzburg, Germany, February 2020.