

課題名(タイトル):

Numerical study of strongly correlated electron systems

利用者氏名:

○大塚 雄一(1)、藤山 茂樹(2)

理研における所属研究室名:

(1) 計算科学研究センター 量子系物質科学研究チーム

(2) 開拓研究本部・上野核分光研究室

1. 本課題の研究の背景、目的、関係する課題との関係

グラフェンは非常に優れた導電体であるため、多くの実用的な応用が期待されている。その一方で、トランジスタやスピントロニクスデバイスなどの電子応用の観点から、電荷ギャップを導入することも強く期待されている。理論的には、グラフェンの基本的なモデルである二次元ディラック電子においては、強いクーロン相互作用がモット転移を引き起こし、電荷ギャップを生じさせることが確立されている。そのため、クーロン相互作用の相対的な強度を制御する手法として、グラフェンを引き伸ばすことにより、モット絶縁体を実現しようとする実験的な取り組みが盛んに行われている。

最近、これらの実験に対応して、第一原理量子モンテカルロ計算が行われた。それによると、モット絶縁体の近傍に格子変形を伴うパイエルス絶縁体状態が存在することが明らかになった。本課題では、第一原理計算とは補完的なアプローチとして、補助場量子モンテカルロ法を用いて、電子格子結合を考慮したハニカム格子上的ハバード模型に基づき、パイエルス相の可能性を検証することを目的とした。この方法では、第一原理量子モンテカルロ計算よりも電子間相互作用を厳密に取り扱うことが可能となる。

2. 具体的な利用内容、計算方法

一般的な2次元以上の格子模型で、格子の空間的な変位パターンを調べることは容易ではない。しかし、ハニカム格子においては大幅に単純化できることが、FrankとLiebにより厳密に示された。彼らは対称性に基づく議論により、ハニカム格子で許容される格子

変形のパターンは、最大で6サイトを含むユニットセル内に限定されることを示した。この結果を用いて、我々は電子格子結合を考慮したハニカム格子上的ハバード模型に対して、大規模な量子モンテカルロ(QMC)計算を行った。本課題のアプローチでは、格子変形に対しては断熱近似を用いて扱い、他の自由度(熱的・量子的ゆらぎを含む)は厳密に取り扱うことが可能となる。

3. 結果

結果としては、まず、系の体積が変わらないと仮定すると、格子変位のパラメータは、RVB型とVBS型の2種類に簡略化して分類することが可能になることを示した。また、我々は電子格子結合(K)と電子間相互作用(U)をパラメータとした、有限温度における相図を決定し。その結果、半金属状態、反強磁性モット絶縁体状態、およびVBS状態が互いに競合することを明らかにした。さらに、格子変位のパラメータがVBSの1種類のみであることがわかったため、QMCシミュレーションで得られた相関関数を数値積分することで自由エネルギーの計算も行った。

4. まとめ

最終的に、基底状態として得られた相図では、モット転移の臨界点近傍でVBS相が凸状に広がることが示された。この結果は、第一原理量子モンテカルロ計算の結果と整合的であり、グラフェンを伸長して実行的な電子間相互作用を増加させると、モット絶縁相に変化する前に、電荷ギャップを持つVBS相へ変化させることが可能であることを示唆している。

2024 年度 利用研究成果リスト

【雑誌に受理された論文】

Yuichi Otsuka and Seiji Yunoki , “Kekulé valence bond order in the Hubbard model on the honeycomb lattice with possible lattice distortions for graphene”, Physical Review B 109, pp. 115131-1/7, 2024