ねじれ二層ハニカム構造上での線形・非線形ホール応答

求研究室　物理工学科4年　山本大雅

研究背景・目的

ねじれ二層WSe_2における非線形ホール効果

近年, ねじれ二層WSe_2において巨大な非線形ホール伝導度の実験的な報告がされている[1].

原子層を捻って積層するモアレ系の数値解析には実空間手法が有効である一方で, 非線形伝導の計算には大きな計算量を要する.

カーネル多項式法 (KPM)

演算子をチェビシェフ多項式により近似展開し, 物理量を計算する手法[2].
行列サイズ (系の大きさ) Dに対し, 行列積の演算は$O(D^2)$ (疎行列)であるが, KPMでは行列・ベクトル積のみを扱うため, $O(D)$での計算が可能

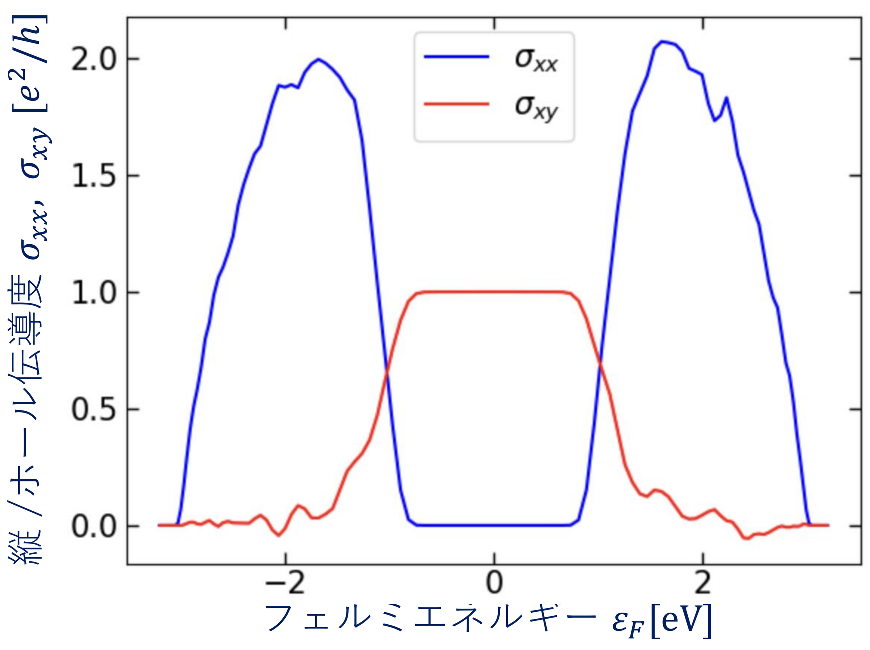
→大規模計算に有利

演算子1つあたりの計算量は, 展開次数Nに対して$O(N)$. 物理量の計算量は

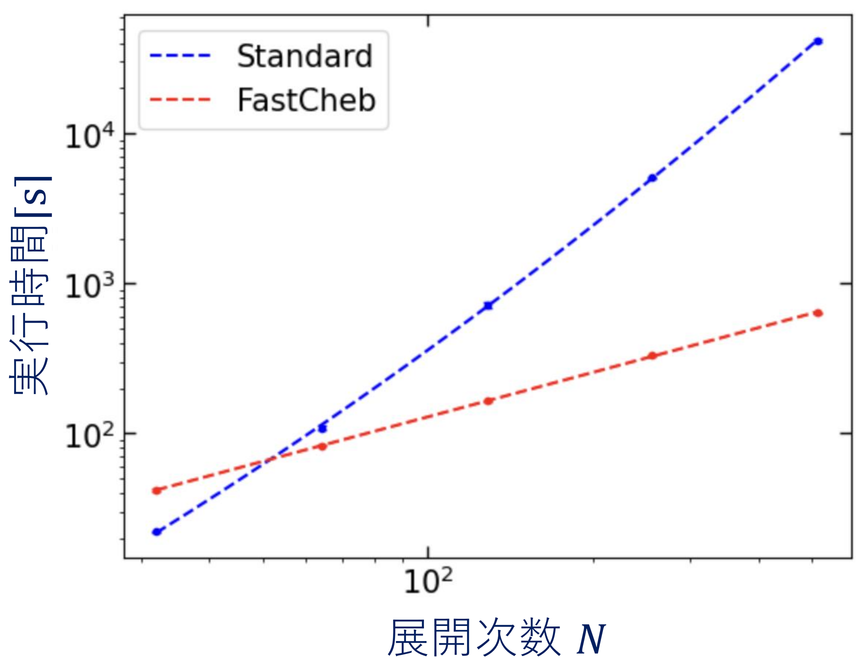
線形ホール伝導度 : $\sigma_{xy} \sim O(N^2)$

非線形ホール伝導度 : $\sigma_{yxx} \sim O(N^3)$

のようになる. 一方で, **チェビシェフ多項式の性質**と**高速Fourier・cos変換**を組み合わせることで線形伝導度の計算量が$O(N\log N)$になることが報告されている[3].
実際、本輪講にてHaldane模型[4]の線形ホール伝導度を計算し, 実行時間を比較した.



サイト数 : 20000 展開次数 : 128
トポロジカル相となるパラメータを選択



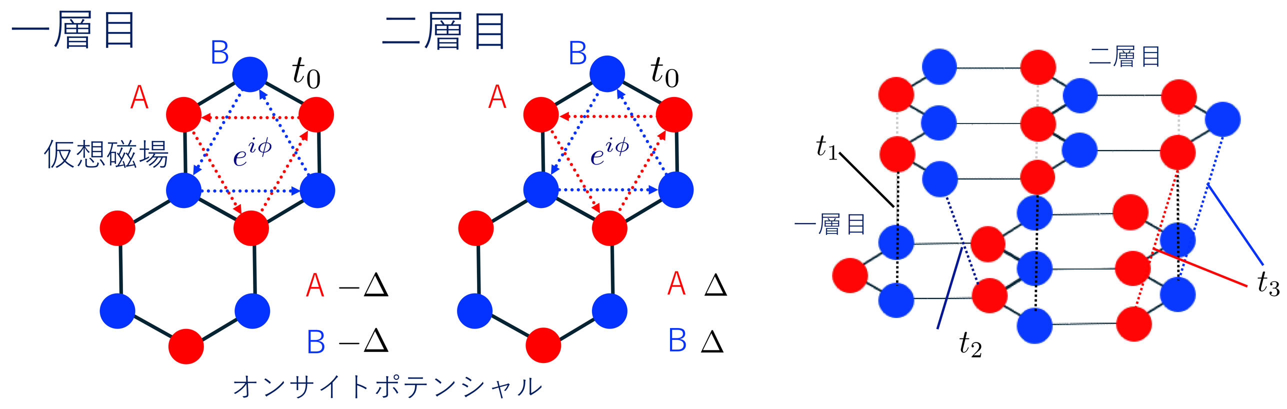
青線 : 通常の方法
赤線 : 高速Fourier変換を用いる方法

目的

カーネル多項式法 × 高速Fourier・cos変換
→非線形ホール伝導度の計算

モデル・手法

モデル : AB積層Haldane模型



オンサイトポテンシャル
+
層間相互作用
+
仮想磁場
↓
空間反転対称性の破れ
時間反転対称性の破れ
↓
線形・非線形ホール応答

強束縛ハミルトニアン :
$$\mathcal{H}_{\mathrm{TB}} = \Delta \sum_{n=1,2} \sum_{i} (-1)^n (a^\dagger_{ni} a_{ni} + b^\dagger_{ni} b_{ni}) + t_0 \sum_{n=1,2} \sum_{\langle i,j \rangle} (a^\dagger_{ni} b_{nj} + \mathrm{h.c.})$$
$$+ t_{\mathrm{im}} \sum_{n=1,2} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} (-1)^n (e^{i\phi} a^\dagger_{ni} a_{nj} + e^{i\phi} b^\dagger_{ni} b_{nj} + \mathrm{h.c.})$$
$$+ \sum_{\langle i,j \rangle} (t_1 b^\dagger_{1i} a_{2j} + t_2 a^\dagger_{1i} b_{2j} + t_3 (a^\dagger_{1i} a_{2j} + b^\dagger_{1i} b_{2j}) + \mathrm{h.c.})$$

手法 : カーネル多項式法 ＋ 高速Fourier・cos変換

エネルギーの関数で表した物理量 :

$$A(\varepsilon) = \mathrm{Tr}[\mathcal{A}(\varepsilon)]$$

ランダムに生成したベクトルで近似
$$\sim O(1/\sqrt{DR})$$
D : 系のサイズ　R : ベクトルの個数

$$A(\varepsilon) \approx \frac{1}{R} \sum_r \langle r | \mathcal{A}(\varepsilon) | r \rangle$$

チェビシェフ多項式で展開 $T_n(x) = \cos(n \arccos x)$

一次の展開 $$A(\varepsilon) \simeq \sum_{n=0}^{N} g_n \mu_n T_n(\mathcal{H})$$

μ_n : 展開係数
g_n : **カーネル→ギブス振動を抑える**

$$\longrightarrow A(\varepsilon) \simeq \frac{1}{R} \sum_r \sum_{n_1,\cdots,n_m}^{N} g_{n_1} \cdots g_{n_m} \mu_{n_1} \cdots \mu_{n_m} \langle r | T_{n_1}(\mathcal{H}) \cdots T_{n_m}(\mathcal{H}) | r \rangle$$

カーネル多項式法

展開係数の計算 :
$$\mu_n = \frac{2}{1+\delta_{n,0}} \int_{-1}^{1} d\varepsilon' \frac{\mathcal{A}(\varepsilon) T_n(\varepsilon')}{\pi \sqrt{1-\varepsilon'^2}}$$

エネルギー点をうまく取れば,
グリーン関数やデルタ関数は**高速Fourier・cos変換**と結びつく.
$$\varepsilon_k = \cos\left(\frac{\pi(k+1/2)}{N}\right)$$

$$\mathcal{G}^{\mathrm{R/A}}(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - \mathcal{H} \pm i\delta} = \mp \frac{2i}{\sqrt{1-\varepsilon^2}} \sum_n^N g_n \frac{e^{\pm in(k+1/2)/N}}{1+\delta_{n,0}} T_n(\mathcal{H}) \quad \delta(\varepsilon - \mathcal{H}) = \frac{2}{\pi\sqrt{1-\varepsilon^2}} \sum_{n=0}^{N} g_n \frac{\cos(n\pi(k+1/2)/N)}{1+\delta_{n,0}} T_n(\mathcal{H})$$

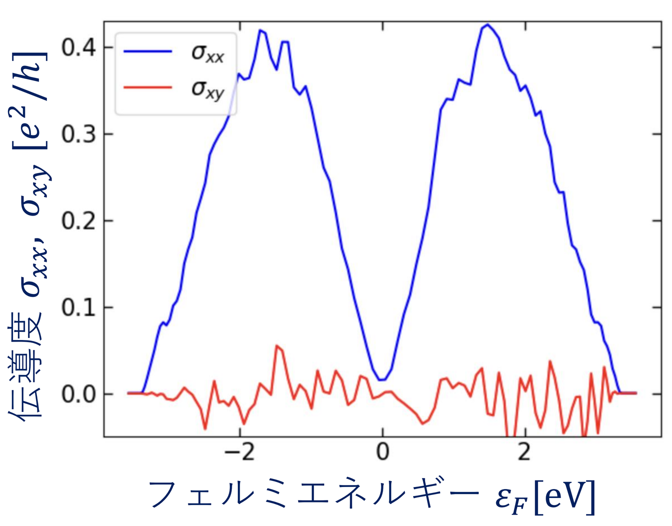
非線形ホール伝導度に現れる三次のチェビシェフ展開へ定式化
計算量を$O(N^3) \to O(N^2 \log N)$へ改善する

計算結果

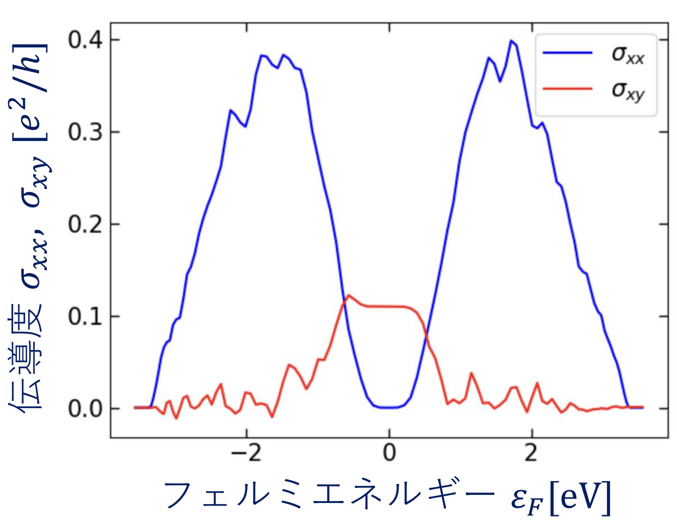
パラメータ設定
$t_0 = 1.0,\ t_1 = -0.3,\ t_2 = 0.1\ t_3 = -0.05,\ \Delta = 0 \text{ or } 0.2,\ t_{\mathrm{im}} = 0 \text{ or } -0.1$

線形電気伝導度

$\Delta = 0.2 \quad t_{\mathrm{im}} = 0$



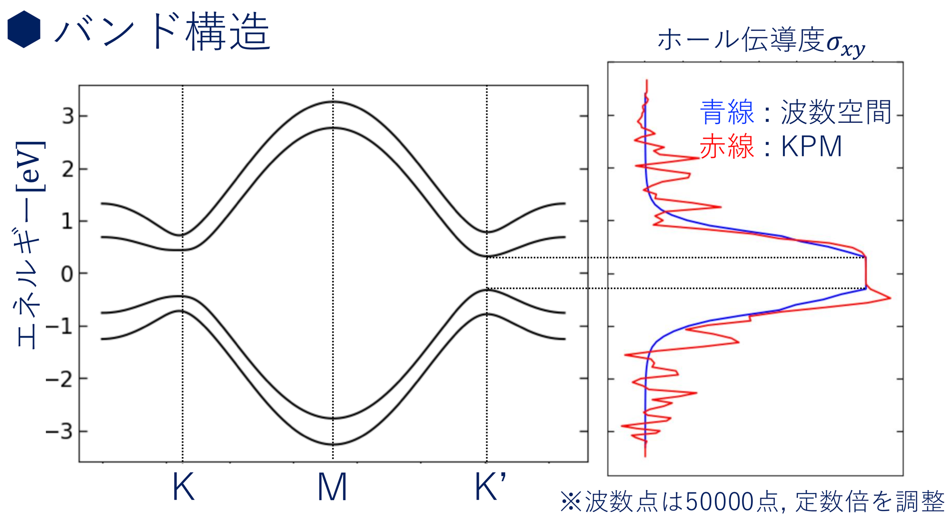
$\Delta = 0.2 \quad t_{\mathrm{im}} = -1.0$



$\Delta \neq 0$
空間反転対称性なし
$t_{\mathrm{im}} \neq 0$
時間反転対称性なし

展開次数
$N = 128$
サイト数
$D = 40000$
ランダムベクトル数
$R = 20$

● バンド構造



※波数点は50000点, 定数倍を調整

波数空間での計算や
バンド構造と矛盾しない振る舞い

時間反転対称性の破れに伴う
線形ホール応答を確認

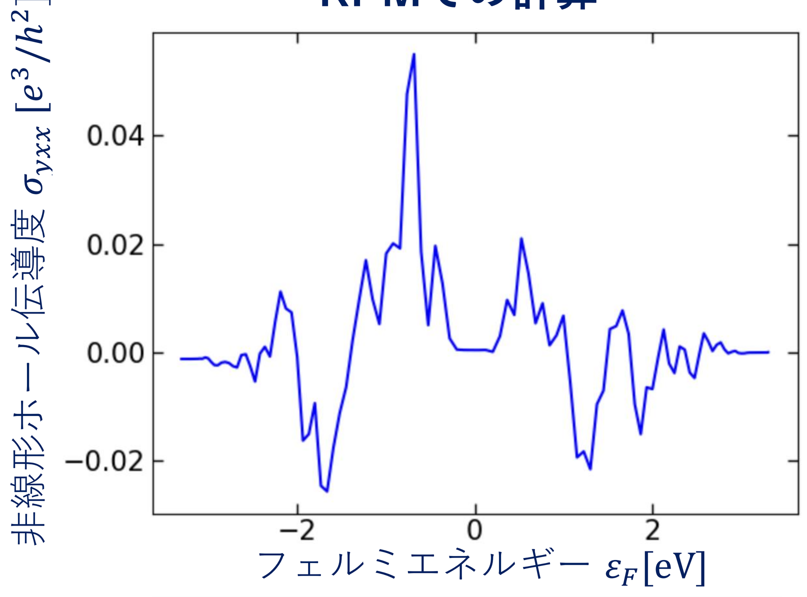
● サイト数, ランダムベクトル数の増加により
振る舞いが改善されると期待される

非線形ホール伝導度

$\Delta = 0.2 \quad t_{\mathrm{im}} = -1.0$

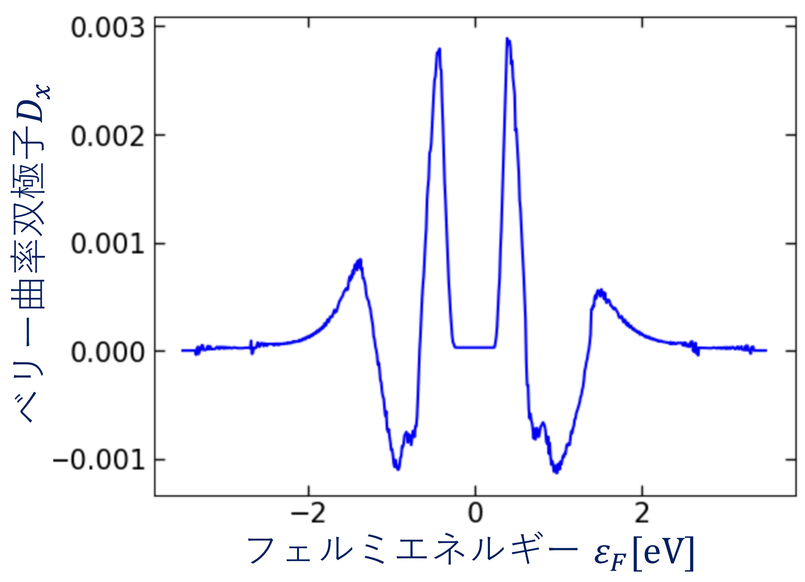
$$\sigma_{yxx} \propto D_x = \int_{\mathrm{Bz}} [dk] f_0 \partial_{k_x} \Omega_z$$

KPMでの計算



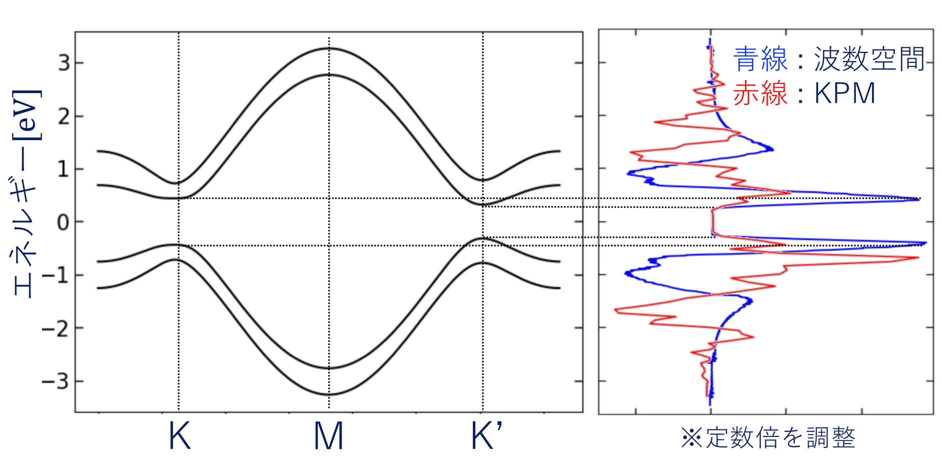
展開次数$N = 128$ サイト数$D = 19600$
ランダムベクトル数 $R = 2$

波数空間での計算



Bzを1000×1000に分割して計算

● バンド構造



※定数倍を調整

ピークの位置が波数での計算や
バンド構造と一致しない

● サイト数の増加, 展開次数拡大の必要性
→より多くの波数点を取り込むことに対応

● DC極限の影響 (緩和定数の取り方)

まとめ・展望

- 線形/非線形ホール伝導度をカーネル多項式法で計算した.
- 効率的な3次のチェビシェフ展開の計算法の定式化を試みた.
- 系サイズの拡大, 展開次数の増加により精度を向上させる.
- モアレ系 (ねじれ2層系)に適用し, 非線形ホール応答を計算する.

参考文献

[1] M. Huang et al., Natl. Sci. Rev. **10**.4 (2023).
[2] A. Weiße et al., RMP. **78**.1 : 275-306 (2006).
[3] S. G. de Castro et al., Phys. Rev. Lett. **132**, 076302 (2024).
[4] F. D. M. Haldane. Phys. Rev. Lett. **61**.18 (1988): 2015.
[5] S. M. João, and JMVP. Lopes. J. Phys. : Condensed Matter **32**.12 :125901 (2019).