

課題名(タイトル):

## 二次元強相関系の量子ダイナミクスの研究

利用者氏名: 曾田繁利

理研における所属研究室名: 計算科学研究センター 量子系物質科学研究チーム

## 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

密度行列繰り込み群法は一次元強相関量子系の基底状態計算に対し非常に有効な方法であり、多くの研究成果が報告されている。密度行列繰り込み群法では、計算の目的となる物理量に対応する状態のみに焦点を当てる。これにより、系のサイズに対し指数関数的に増大する系の自由度を、目的となる状態の記述に最適化された一定の数の基底による表現の上で計算を進めることが可能になる。そのため、厳密対角化法を超えたサイズの系への適用が可能である。さらに、密度行列繰り込み群法は一次元強相関量子系の励起ダイナミクスへの拡張も行われており、動的密度行列繰り込み群法として知られている。このように、密度行列繰り込み群法は一次元強相関系の様々な研究目的に対し、高精度の結果を得ることが可能である。

その一方、このような密度行列繰り込み群法の多次元強相関量子系への適用には巨大な計算資源を必要とする。その理由は、系を精密に記述するために必要となる既定の数が一次元系の場合と比較して非常に大きくなるためである。しかしながら、近年の計算機科学の発展により密度行列繰り込み群法の二次元強相関量子系への適用は現実的となっており、実際に密度行列繰り込み群法の二次元強相関量子系への適用とその研究成果は数多く報告されている。

このような、密度行列繰り込み群法の二次元強相関量子系への適用の利点としては、まず、厳密対角化では事実上計算が不可能なサイズの系へ適用することが可能となる点が挙げられる。また、幾何学的フラストレーションを含む量子モンテカルロ法でいわゆる負符号問題が発生し適用が困難となる場合においても、密度行列繰り込み群法は適用が可能である。したがって、密度行列繰り込み群法の二次元強相関量子系への適用は十分意義のあるものであると考えられる。

本研究課題では、二次元強相関量子系に対する動的密度行列繰り込み群法の適用し、その励起ダイナミクスを明らかにすることを目的とする。非常に巨大な計算コストを要す

る動的密度行列繰り込み群法の二次元強相関量子系への適用例はこれまでもあまり存在していないことから、その手法の確立も重要な計算課題として取り組む。

## 2. 具体的な利用内容、計算方法

本研究では、動的密度行列繰り込み群法を用いて二次元強相関量子系の励起ダイナミクス計算を行う。動的密度行列繰り込み群法は、動的相関関数を計算の対象とするため、基底状態と対応する励起状態を密度行列繰り込み群のターゲット状態となる。ターゲット状態の計算については、基底状態計算はランチョス法で、励起状態計算は直交多項式展開法で行う。

本年度の利用では、二次元強相関量子系に対する動的密度行列繰り込み群法の最適化、および HOKUSAI への最適化のために利用した。

## 3. 結果

本研究課題では、二次元強相関量子系に対する動的密度行列繰り込み群法の手法確立のための計算パラメータの最適化を行った。具体的には、動的密度行列繰り込み群法では基底状態、および計算する動的な物理量に対応する励起状態の最適化をどのように行うかである。本研究の二次元強相関量子系の計算のための密度行列繰り込み群法のアルゴリズムは、一次元系に対する密度行列繰り込み群法に目的とする二次元格子に対応した長距離相互作用を導入することで実行する。この長距離相互作用は、系のサイズが密度行列繰り込み群法の無限系アルゴリズムを経て目的のサイズまで拡張された後に導入される。いくつかの条件で試行した結果、二次元強相関量子系に対する動的密度行列繰り込み群法の適用として、基底状態の十分な収束が得られた後に励起状態計算を行うことが重要であることが分かった。特に、基底状態を精度良く得ることが重要である。また、基底状態や励起状態計算に対するランチョス法、直交多項式展開法の打ち切り回数に対するパラメータを見直すことで、より効率的な適用が可能となった。

また、「京」コンピュータの利用を目的に最適化された大

規模並列動的密度行列繰り込み群法プログラムの HOKUSAI への最適化を行った。特に、openMP によるスレッド並列化されたループについてループ結合などを行うことにより、HOKUSAI においても十分な性能が得られることが確認された。

#### 4. まとめ

本年度の利用では、二次元強相関量子系に対応した大規模並列密度行列繰り込み群法の整備と効率的に HOKUSAI を利用するための改良を行った。二次元強相関量子系の励起ダイナミクスを動的密度行列繰り込み群法で効率よく計算するためのアルゴリズムの見直しや、HOKUSAI を効率的に利用するため、特に openMP によるスレッド並列部分の改良を行った。以上のように改良されたプログラムを実際に HOKUSAI 上で実行した結果、これまでと比較してより効率的な実行が可能になったことを確認した。

#### 5. 今後の計画・展望

今後の予定としては、ここで改良された大規模並列動的密度行列繰り込み群法のプログラムを用いた二次元強相関量子系の励起ダイナミクス研究に対するプロダクトランを実施する予定である。本研究課題により、二次元強相関量子系の励起ダイナミクスの理解が深まることが期待される。

## 平成 30 年度 利用研究成果リスト

### 【雑誌に受理された論文】

1. T. Tohyama, M. Mori, and S. Sota, “Dynamical DMRG study of spin and charge excitations in the four-leg  $t-t'-J$  ladder”, Phys. Rev. B **97**, 235137 (2018).
2. M. Kishimoto, K. Morita, Y. Matsubayashi, S. Sota, S. Yunoki, and T. Tohyama, “Ground state phase diagram of Kitaev–Heisenberg model on honeycomb–triangular lattice”, Phys. Rev. B **98**, 054411 (2018).

### 【口頭発表】

1. 曾田繁利, 白川知功, 柚木清司, 遠山貴己, “三角格子量子スピン系 Ba<sub>3</sub>CoSb<sub>2</sub>O<sub>9</sub> の非弾性中性子散乱の解析”, H30 年度ポスト「京」重点課題(7)第 3 回 CDMSI 研究会, 2018/7, 東京.
2. 曾田繁利, 新城一矢, 遠山貴己, 柚木清司, “機械学習による一次元拡張ハバード模型における基底状態の相図”, 日本物理学会 2018 年秋季大会, 2018/9, 同志社大学.
3. 曾田繁利, 新城一矢, 遠山貴己, 柚木清司, “多次元強相関量子系のための時間依存密度行列繰り込み群法の改良と応用”, 日本物理学会 2018 年秋季大会, 2018/9, 同志社大学.
4. 佐々木広太, 杉本貴則, 曾田繁利, 遠山貴己, “フラストレート梯子スピン系の磁化プラトー相における磁気励起 II”, 日本物理学会 2018 年秋季大会, 2018/9, 同志社大学.
5. 森田克洋, 藤原理賀, 満田節生, 松尾晶, 金道浩一, 曾田繁利, 遠山貴己, “正方カゴメ格子反強磁性体 Cu<sub>6</sub>AlBiO<sub>4</sub>(SO<sub>4</sub>)<sub>5</sub>·KCl の磁気解析”, 日本物理学会 2018 年秋季大会, 2018/9, 同志社大学.
6. S. Sota, T. Tohyama, and S. Yunoki, “Development of massively parallel density matrix renormalization group method algorithm for two-dimensional strongly correlated systems and its applications”, The 1st R-CCS International Symposium, 2019/2, Kobe.
7. 曾田繁利, 柚木清司, 遠山貴己, “三角格子反強磁性 Heisenberg 模型における量子スピン液体状態とスピン励起ダイナミクス”, 日本物理学会第 74 回年次大会, 2019/3, 九州大学.
8. 新城一矢, 曾田繁利, 柚木清司, 遠山貴己, “機械学習を援用した 1 次元拡張ハバード模型における光励起状態の研究”, 日本物理学会第 74 回年次大会, 2019/3, 九州大学.

### 【ポスター発表】

1. S. Sota, T. Shirakawa, T. Tohyama, and S. Yunoki, “Dynamical DMRG study of excitation dynamics of triangular lattice antiferromagnetic Heisenberg models”, TNSAA 2018–2019, 2018/12, Kobe.
2. 曾田繁利, 新城一矢, 柚木清司, 遠山貴己, “多次元強相関量子系のための時間依存密度行列繰り込み群法の改良と応用”, ポスト「京」重点課題(7)「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成(CDMSI)」第 4 回シンポジウム, 2018/12, 柏.