

課題名 (タイトル) :

動的密度行列繰り込み群法を用いた変分クラスター近似による  
強相関電子物性の研究

利用者氏名 : 白川 知功

所属 : 和光研究所 基幹研究所 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

密度行列繰り込み群法は、いわゆるハバード模型など、量子多体問題について電子相関の効果を厳密に解くために開発された計算手法である。動的密度行列繰り込み群法とは、上記の計算で得られた基底状態に対する一粒子スペクトル関数、電荷・スピン励起スペクトル、光学伝導度等、様々な実験と密接に関係するスペクトル関数を精度良く求めるための計算手法である。一方、変分クラスター近似法は、Potthoff によって提案された自己エネルギー汎関数法に基づき、少数クラスターのグリーン関数から系の熱力学極限における物理量、一粒子スペクトル関数等を計算する手法であり、近年、高温超伝導の問題やスピン流体など、強相関電子系の物性研究に幅広く応用されている。

両者は独立に発展して来た計算手法であるが、それぞれに長所・短所がある。動的密度行列繰り込み群法は、とりわけ 1 次元系電子系では最も高精度の計算手法となっているが、2 次元電子系を解くのは困難である。他方、変分クラスター近似は現在の所、少数クラスターを解く為に厳密対角化法、量子モンテカルロ法を用いているため、より大きなクラスター内部の自由度を扱う事、インコメンシュレイトな電子数の計算に不向きである。そこで、本研究では、変分クラスター近似のソルバーとして動的密度行列繰り込み群法を採用することで、クラスターの内部自由度を拡大し、汎用性の広い強相関電子物性の数値計算技術を確立を目指す。

## 2. 具体的な利用内容、計算方法

変分クラスター近似では、クラスター内のグリーン関数を厳密に解く必要がある。また、得られたグリーン関数を用いて熱力学ポテンシャルを計算し、それを

繰り返し行うことで、熱力学ポテンシャルに対する最適化問題を解く必要がある。ここで計算すべきグリーン関数の要素の数は、クラスター内の(格子自由度)×(軌道自由度)の 2 乗に比例する。各グリーン関数の要素は独立に計算する必要があり、クラスターサイズの増加に伴い多くの計算機リソースを必要とする為、RICC を利用した。

現在までの計算手法の改良点を挙げると、グリーン関数を求める際、振動数の虚軸方向の積分に置き換える事で、動的密度行列繰り込み群法にかかる計算コストを大幅に減少可能となった。

## 3. 結果

昨年度に引き続き、クラスターを 1 次元方向に長く取る事で準 1 次元 2 次元正方格子ハバード模型 (1 次元ハバード鎖が弱い鎖間ホッピングで結合した模型) のハーフフィリングにおけるモット絶縁体の反強磁性長距離秩序の安定性、さらにその時のスペクトル関数を計算し、1 次元朝永ラッティンジャー流体特有のスピン-電荷自由度の分離から 2 次元系での反強磁性長距離秩序へとどのように移り変わって行くかを明らかにした[9]。

今年度は、スピン-軌道相互作用と電子相関の効果が重要となる Ir 酸化物の物性研究にも、変分クラスター近似法を適用した。5d 遷移金属酸化物  $\text{Sr}_2\text{IrO}_4$  は、モット絶縁体であり、その強いスピン-軌道相互作用のために、 $J_{\text{eff}}=|S-L|=1/2$  で特徴付けられるバンドが形成されていることが示唆されていたが、これを相互作用の効果を精密に取り入れた微視的理論の立場から証明する理論はなかった。そこで、本研究で用いた変分クラスター近似法を用いて、この系の絶縁状態におけるスペクトルの形状を明らかにし、(1) 低エネルギー励起のホール状態は確かに  $J_{\text{eff}}=1/2$  状態で特徴付けられる事、(2) スピン軌道相互作用の増加に伴い電荷ギャップ

プが大きくなる事、(3) フント結合によって磁気異方が発現している事などを示した[1-8]。

#### 4. まとめ

本研究では、動的密度行列繰り込み群法と自己エネルギー汎関数法に基づく変分クラスター近似法を組み合わせる事で、汎用的な強相関電子系の模型に対する計算手法を確立した。また、今年度は、この計算手法を、スピン-軌道相互作用と電子相関の効果が重要となる Ir 酸化物の研究に応用し、1 粒子励起スペクトルの性質を明らかにした。

#### 5. 今後の計画・展望

変分クラスター近似法は非常に汎用性の広い計算手法であり、とりわけ一粒子励起のスペクトル計算が容易である。したがって、他の計算手法ではスペクトル計算が難しい場合、相補的にこの計算手法を用いる事で、より詳細に物質特有の電子状態を調べる事ができる。物質の個性を精密に調べる際、重要となってくるのは、扱う模型の各パラメータであり、変分クラスター近似のみではパラメータの決定を行う事はできない。改善策として、第一原理計算とこの計算手法を組み合わせ、パラメータの決定を行う事が考えられる。これにより、実験とは独立に調べる計算手法を開発する事で、統一的な電子状態の解釈に繋がると考えている。動的平均場理論などでは、すでにこうした研究手法が主流となってきているが、本研究課題の計算手法も、動的平均場とよく似た計算手法であるため、このような発展が望まれる。

#### 6. RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況 (どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか) や、継続して利用する際に行う具体的な内容

変分クラスター近似の最適化問題は、パラメータを手で変えて、安定点を探す方法を取って来たが、より多くの変分パラメータを導入する為にも、最適化問題を自動化する必要がある。また、今後の応用も考えて、コードのカプセル化を行う事がまず先決であると考え

ている。

次に、本研究手法を用いて Ir 酸化物の物性を調べる際、模型のパラメータは、過去になされた密度汎関数法によって得られるバンド計算の結果を参考にした。来年度は密度汎関数と本研究の計算手法を組み合わせ、第一原理的に新規物質の計算を行えるようにしたい。

また、今年度までは、どの応用例もコメンシュレイトなフィリング (電子数) における計算を行っていた。しかしながら、フェリングを変化させたときには、自己エネルギーを改善するための熱浴サイトの導入が重要となってくる。そこで、来年度は、この熱浴サイトを導入し、インコメンシュレイトなフィリングにも対応した変分クラスター近似法の計算にも挑戦したい。

計算時間短縮のためには、クラスターソルバーである密度行列繰り込み群法の最適化も重要である。そこで、来年度はコードの GPGPU 化、並列化などにも挑戦する予定である。

最後に今後の応用例として、遷移金属を含むタンパク質、光学格子系などの問題への計算手法の適用を考えている。

#### 7. 一般利用で演算時間を使い切れなかった理由

#### 8. 利用研究成果が無かった場合の理由

平成 22 年度 RICC 利用研究成果リスト

【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】

[1] Hiroshi Watanabe, Tomonori Shirakawa, and Seiji Yunoki, “Microscopic Study of a Spin-Orbit-Induced Mott Insulator in Ir Oxides”, *Phys. Rev. Lett.* **105** (2010) 216410.

【国際会議などの予稿集、proceeding】

[2] Tomonori Shirakawa, Hiroshi Watanabe, and Seiji Yunoki, “*Variational cluster approximation study of Mott transition with strong spin-orbit coupling*”, *J. Phys.: Conf. Series*, accepted.

[3] Hiroshi Watanabe, Tomonori Shirakawa, and Seiji Yunoki, “Variational Monte Carlo Study of two-dimensional strong spin-orbit coupling system: Novel Mott insulating state in Ir Oxide”, *J. Phys.: Conf. Series*, accepted.

【国際会議、学会などでの口頭発表】

[4] Tomonori Shirakawa, Hiroshi Watanabe, and Seiji Yunoki, “*Variational cluster approximation study of Mott transition with strong spin-orbit coupling*”, International Conference on Strongly Correlated Electron Systems, June 27-July 2, 2010, Santa Fe.

[5] Hiroshi Watanabe, Tomonori Shirakawa, and Seiji Yunoki, “*Variational Monte Carlo study of two-dimensional strong spin-orbit coupling system: Novel Mott insulating state in Ir Oxide*”, International Conference on Strongly Correlated Electron Systems, June 27-July 2, 2010, Santa Fe.

[6] 渡部洋、白川知功、柚木清司、“*Ir酸化物におけるスピン軌道相互作用誘起モット絶縁体の理論的研究*”、第 4 回物性科学領域横断研究会

[7] 白川知功、渡部洋、柚木清司、“*Ir酸化物モット絶縁体の一粒子励起スペクトル*”、日本物理学会 2010 年秋季大会、平成 22 年 9 月 23 日～26 日、大阪府立大学

[8] 渡部洋、白川知功、柚木清司、“*Ir酸化物におけるスピン軌道相互作用誘起モット転移*”、日本物理学会 2010 年秋季大会、平成 22 年 9 月 23 日～26 日、大阪府立大学

[9] Tomonori Shirakawa and Eric Jeckelmann, “*Variational cluster approximation combined with dynamical density-matrix renormalization group method*”, New Development of Numerical Simulations in Low-Dimensional Quantum System, October 27-October 29, 2010, 京都大学基礎物理学研究所パナソニックホール

【その他】