

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法による  
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

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、1 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。

クラスターソルバとして、この他に有用な計算手法として挙げられるのは、厳密対角化法と量子モンテカルロ法である。厳密対角化法はヒルベルト空間の制約が厳しく、大きなクラスターサイズを取り扱う事が、原理的に不可能である。他方、電子系における量子モンテカルロ法では、負符号問題に起因するハミルトニアンへの制約や、スペクトル関数を直接求める事ができないなどの問題点が挙げられる。密度行列繰り込み群法は、これらの問題は特にない。ただし、次元による制約が挙げられる。

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、(1) 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削減した。また(2) グリーン関数の要素を求める部分と、自己エネルギー汎関数の数値

積分を取る部分について、MPI で並列化を実装した。変分クラスター近似では、相互作用のない熱浴サイトを追加し、そのパラメータを最適化する事ができる。ここで、熱浴サイトを追加したクラスターモデルは、不純物アンダーソン模型と同等である。従って、軌道自由度が関連してくる場合には、多軌道不純物アンダーソン模型を精度よく求める必要がある。そこで、昨年度は、(3) 密度行列繰り込み群法を用いて、多軌道アンダーソン模型を一般的に解く計算手法を考案・開発した。さらに、(4) 密度行列繰り込み群法のスレッド並列化を行う事で、計算のさらなる高速化を行った。

3. 結果

本年度は、昨年度開発した多軌道不純物ソルバの性能を評価する為に、近年注目を集めているグラフェンにおける格子欠陥の問題に適用した。特に、これまで計算する事のできなかった、不純物と周りの伝導電子とのスピン相関関数などを高精度に計算する事に成功した。

また、これまでに開発したクラスターソルバの性能評価と応用を兼ねて、この計算手法を 5d 遷移金属酸化物の問題に応用している。本年度は磁気的交換相互作用について調べ、配位子場による局所的波動関数の変化が、交換相互作用に異方性を与えている事を明らかにした。さらに、動的磁気相関関数の計算も行い、低エネルギーに現れる構造から交換相互作用の大きさを見積もった結果、実験結果と非常に良い一致を見せた。

4. まとめ

本年度は、変分クラスター近似の近似手法改善のために開発したコードの性能評価として、(1) グラフェン欠陥の近藤問題に応用した。また、これまでに実装したクラスターソルバを(2) 5d 遷移金属の磁性に関する研究に応用し、実験結果とコンシステントな結

果を得た。

#### 5. 今後の計画・展望

開発したクラスターソルバは近年注目を集めているトポロジカル絶縁体に関して、磁性不純物を与える影響などを厳密に解く事ができる。また、変分クラスター近似として使う事で、トポロジカル絶縁体における相関効果などへの応用も期待される。さらに、フラストレーションによる負符号問題も現れないため、スピ液体などの研究への応用も期待できる。

平成 24 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] Watanabe H., Shirakawa T. and Yunoki S. : “Monte Carlo Study of an Unconventional Superconducting Phase in Iridium Oxide Mott Insulators Induced by Carrier Doping”, Phys. Rev. Lett. 110 027002 (5 page) (2013).

【国際会議などの予稿集、proceeding】

[2] Shirakawa T., Watanabe H. and Yunoki S. : “Theoretical study of  $J_{\text{eff}}=1/2$  Mott insulator in Ir oxides: a strong spin-orbit coupling vs local electron correlations”, J. Phys.: Conf. Ser., 400 032088 (4 page) (2012).

[3] Shirakawa T., Watanabe H. and Yunoki S. : “Theoretical studies of a three-band Hubbard model with a strong spin-orbit coupling for 5d transition metal oxides  $\text{Sr}_2\text{IrO}_4$ ”, J. Phys.: Conf. Ser., published.

[4] Badaut V., Shirakawa T. and Yunoki S. : “A Haldane-Anderson impurity model study for the spin- and charge-states of iron in heme proteins”, J. Phys.: Conf. Ser., 400 032006 (4 page) (2012).

[5] Watanabe H., Shirakawa T. and Yunoki S. : “Variational Monte Carlo study superconductivity in multi-orbital systems”, J. Phys.: Conf. Ser. 400 022134 (4 page) (2012).

【国際会議、学会などでの口頭発表】

[6] Shirakawa T., Watanabe H. and Yunoki S. : “Effective exchange interaction in 5d transition metal oxides”, 19th International Conference on Magnetism, Busan, Korean, Aug. (2012)

[7] Shirakawa T., Watanabe H. and Yunoki S. : “Theoretical studies of a three-band Hubbard model with a strong spin-orbit coupling for 5d transition metal oxides  $\text{Sr}_2\text{IrO}_4$ ”, Conference on Computational Physics (CCP2012), Kobe, Japan, Oct. (2012)

[8] Shirakawa T., Watanabe H. and Yunoki S. : “The low-energy magnetic excitations of a three-band Hubbard model with a strong spin-orbit coupling for 5d transition metal oxide  $\text{Sr}_2\text{IrO}_4$ ”, APS March Meeting, Baltimore, USA, Mar. (2013)

[9] 白川知功、大西弘明、J. C. Xavier、渡部洋、柚木清司 : “スピン軌道相互作用を含む梯子格子 3 軌道 Hubbard 模型におけるクーパー対の束縛エネルギー”、日本物理学会 2012 年秋季大会、横国大、9 月(2012)

[10] 白川知功 : “イリジウム酸化物における磁氣的性質”、第 2 回強相関電子系の最前線、紀伊勝浦、12 月 (2012)

[11] 白川知功、渡部洋、柚木清司 : “5d 遷移金属酸化物における低エネルギー磁気励起の理論的研究”、日本物理学会第 68 回年次大会、広島大、3 月(2013)