

課題名 (タイトル) :

自己エネルギー汎関数理論に基づく強相関電子系の数値的研究

利用者氏名 : 関 和弘

所属 : 柚木計算物性物理研究室

<p>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</p> <p>近年、自己エネルギー汎関数理論と呼ばれる熱力学ポテンシャルの非摂動的な構築を可能とする理論によりグリーン関数計算に基づく強相関電子系理論の整備がなされた。本研究では、自己エネルギー汎関数理論に基づき有限温度の物理量の計算を可能にする、有限温度変分クラスター近似の開発とその強相関電子系へ応用を目的とする。</p> <p>2. 具体的な利用内容、計算方法</p> <p>変分クラスター近似は、熱力学ポテンシャルに関する変分原理に基づき強相関格子系の熱力学的状態を解析する計算手法である。熱力学ポテンシャルに関する変分の試行関数となる自己エネルギーあるいは一粒子グリーン関数は、少数サイトの強相関格子モデルに対する厳密対角化法により計算する。</p> <p>3. 結果</p> <p>今回、少数サイト系が持つ対称性を利用する等の工夫をして、変分クラスター近似計算の使用メモリ削減と計算速度向上を達成した。そして変分クラスター近似計算を用いて、強相関格子系の典型であるハバードモデルの有限温度物性を解析した。今回、一軌道ハバードモデルについて 10 サイトクラスターを用いた場合は絶対零度から温度 $T/t \sim 0.3$ 程度 (t: 隣接サイトへの電子のホッピング積分) まで有限温度物性を調べることができた。</p> <p>4. 今後の計画・展望</p> <p>有限温度の計算では少数サイト系の励起状態等を一時的に記憶しておくので、絶対零度の計算と比較して使用メモリが多くなる。今回用いた少数サイト系のサイト数は、計算時間よりもメモリにより制限されている。変分クラスター近似では、変分の試行関数あるいは計算結果は少数サイト系の選び方に依存するので、少数サイト系は色々な選び方を試せる方が良く、サイト数はできるだ</p>	<p>け大きいと良い。そこで、より大規模な問題に取り組むため、計算速度を落とさず使用メモリを削減できるか検討する。</p>
--	---

平成 26 年度 RICC 利用研究成果リスト

【国際会議などの予稿集、proceeding】

[1] K. Seki, T. Shirakawa, Y. Sun, and S. Yunoki, “Temperature dependence of the optical conductivity in a half-filled Hubbard model: Mott-type Insulator vs Slater-type insulator”, JPS Conf. Proc. **3**, 014026 (2014).

[2] K. Seki, T. Shirakawa, Q. Zhang, T. Li, and S. Yunoki, “Ferrimagnetism and single-particle excitations in a periodic Anderson model on the honeycomb lattice”, to be published in J. Phys. Conf. Ser.

【その他】

ポスター発表

[1] K. Seki, T. Shirakawa, Q. Zhang, T. Li, and S. Yunoki, “Correlation induced massless Dirac quasi-particles in graphone”, International Workshop on Dirac Electrons in Solids, Koshiba Hall, Tokyo, Japan, January 2015.