

課題名 (タイトル) : Large scale simulations in correlated lattice models

利用者氏名 : Sandro Sorella*, **, 関和弘*, **, 大塚雄一*, Michele Casula*, 柚木清司*, **, ***

理研での所属研究室名 :

*計算科学研究機構 量子系物質科学研究チーム

**柚木計算物性物理研究室

***創発物性科学研究センター 計算量子物性研究チーム

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

本研究では、物性物理学の強相関電子系分野で、電子同士に働く相互作用が多電子系の状態に与える効果を調べる目的で用いられる電子相関のある格子模型を対象として、補助場量子モンテカルロ方を計算手法とする大規模シミュレーションを行った。対象とした模型は具体的には 2 次元三角格子に規則的に磁束を加えた引力ハバード模型と 2 次元ハニカム格子上で定義されたハバード模型である。これらの模型のハミルトニアンは、電子が格子点上を飛び移る運動エネルギー項と、電子同士に働く相互作用項の和で与えられる。これらの模型は、電子数が格子点数と同じかつ電子間相互作用パラメタをゼロにした場合には、フェルミ準位近傍に、グラフェンで見られるようないわゆるディラック電子が現れる。これらの模型のハミルトニアンの基底状態は、絶対零度で電子間相互作用パラメタの大きさを大きくしていくと、それぞれ半金属状態から超伝導状態(U(1)対称性の破れた状態)、半金属状態から反強磁性状態(SU(2)対称性の破れた状態)の相転移を示すと考えられ、その詳細を大規模数値計算によって調べることに興味を持って研究に取り組んだ。なお、研究対象とした 2 つの模型は、それぞれ冷却原子系や等方的に引っ張ったグラフェンで模型と類似の状況が現れると考えられる。

2. 具体的な利用内容、計算方法

自発的対称性の破れを伴う相転移は熱力学極限での現象であり、実際には相転移が起きない有限のシステムサイズの数値計算からこの現象を調べるには、出来るだけ大きなサイズまでのシステムを含めて長距離の相関関数などの計算を行い系統的な有限サイズスケーリングを行う必要

がある。そのため本研究では、強相関電子系分野で遍歴電子系に対して用いられる計算手法としては大きなシステムサイズを扱える補助場量子モンテカルロ法を用いて格子模型の解析を行なった。

本研究で用いるのは絶対零度の補助場モンテカルロ法である。この方法では基底状態における物理量の期待値は、試行関数を (十分長い時間) 虚時間発展させた状態による量子力学的な期待値として定義する。物理量の期待値は、虚時間発展演算子(ハミルトニアン演算子の指数関数)を鈴木・トロッター分解により電子の運動エネルギー部分と電子間相互作用部分に分けて、電子間相互作用部分についてはストラトノビッチ-ハバード変換により補助場中を運動する相互作用のない電子系に変換し、変換の代償として現れる補助場に関する多重積分をモンテカルロ法で行うことで計算する。計算コストは電子系の大きさの 3 乗に比例しかつ時間発展させる虚時間の長さの 1 乗に比例するので、物性物理学の分野において補助場量子モンテカルロ法以外の厳密計算 (バイアスの無い計算) としてしばしば用いられる厳密対角化法や密度行列繰り込み群法では扱えないほど大きな電子系を扱うことができる。補助場量子モンテカルロ法には、重点サンプリングの重みが負になることで統計精度が著しく損なわれる負符号問題が生じ得ることが知られている。しかし本研究で扱う模型では、模型が持つ対称性により負符号問題が生じないため、バイアスなしの計算で高精度な統計平均を得ることができる。

システムサイズが十分小さく計算に必要なメモリが 1 コアあたりのメモリに収まる場合は、1 コアに 1 プロセスを割り当てる MPI 並列を用いた。システムサイズが大きくなり 1 コアあたりのメモリに必要なメモリが確保できない場合は、1 プロ

セスあたり必要なメモリを確保できるコア数を指定した OpenMP と MPI のハイブリッド並列を用いた。

3. 結果

二次元ディラック電子系の量子相転移について、模型の持つ対称性を利用して本研究課題に特化した計算機プログラムを作成・利用することで、大規模な電子系のシミュレーションを行った。具体的には、2次元三角格子に磁束を加えた引力ハバード模型では 2500 格子点、ハニカム格子上で定義されたハバード模型ではそれを超えるシステムサイズまでを含めて、相転移を特徴付ける相関関数の計算とその有限サイズスケーリングを行なった。対称性の破れる仕方により相転移が起きるパラメタ近傍で物理量のパラメタ依存性の冪に普遍性が現れることが知られており、2次元三角格子に磁束を加えた引力ハバード模型の相転移が分類される普遍性クラスとその冪の指数を研究した。ハニカム格子ハバード模型では、用いたシステムサイズの大きさを生かして半金属状態を特徴付ける準粒子重みを計算した。

4. まとめ

二次元ディラック電子系の相転移を調べる目的で HOKUSAI を利用した。模型の対称性を利用した計算機プログラムを作成・利用することで、課題メンバーが知る限りでこれまでになく大きなシステムサイズを扱うことができ、結果として相転移を先行研究より詳しく調べた。

5. 今後の計画・展望

金属・絶縁体転移等の量子相転移に関連して、電子が固体中で伝播する様子を定量的に記述する同時刻グリーン関数の距離依存性を補助場量子モンテカルロ法による数値的厳密計算で明らかにしたい。

平成 29 年度 利用研究成果リスト

【国際会議、学会などでの口頭発表】

- [1] Seiji Yunoki, “Quantum criticality in the metal-insulator transition of two-dimensional interacting Dirac fermions”, FisMat2017, October 1-5, 2017, ICTP-SISSA Miramare Campus, Trieste, Italy