

課題名(タイトル): 相関格子模型の大規模シミュレーション

利用者氏名: Sandro Sorella(1)、関和弘(1,2)、大塚雄一(1)、柚木清司(1,2,3)

理研における所属研究室名:

- (1) 計算科学研究センター 量子系物質科学研究チーム
- (2) 開拓研究本部 柚木計算物性物理研究室
- (3) 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

#### 概要

本研究では、強相関電子系分野で用いられる格子模型に対して、補助場量子モンテカルロ法を用いた大規模かつ高精度なシミュレーションを行い、その基底状態を解明することを目的とした。以下では、補助場量子モンテカルロ法によるハニカム格子上的ハバード模型の半金属相におけるフェルミ液体状態の探索により得られた結果を報告する。

#### 研究の背景

グラフェンは炭素原子がハニカム格子(六角格子)を成してできる物質である。炭素原子同士は、炭素原子に束縛された電子のうち一つの  $s$  軌道と2つの  $p$  軌道( $p_x, p_y$ )の混成として表される  $sp^2$  混成軌道によって結合( $\sigma$  結合)するものと理解でき、その強い結合によりグラフェンの力学的な強度は高い。また、一般に物質の電子物性の大半はフェルミ準位近傍の電子により決定されるが、グラフェンの場合、それは  $p_z$  軌道間をトンネルする電子により担われ、この  $p_z$  軌道間のネットワークはハニカム格子を形成する。グラフェン中の電子の運動量とエネルギーの関係(分散関係)は、フェルミ準位近傍において2次元平面内の全ての方向に対してフェルミ準位を原点とした比例関係(線形分散)を持つことが、グラフェン結晶が持つ対称性から理論的に保証されており、実際にこの特徴的な線形分散は角度分解光電子分光実験により観測されている[1]。グラフェンは電子デバイス材料や力学的材料としての興味だけでなく、グラフェン中の電子の線形分散を記述する方程式と相対論的量子力学における質量のないディラック方程式との類似性から、物性物理学や高エネルギー物理学の学術的興味の対象となっている[2-5]。

グラフェン中の電子の最小模型であるハニカム格子上的ハバード模型における半金属-絶縁体転移について、補助場量子モンテカルロ法による数値シミュレーションがこれまで多数行われてきている。ハバード模型とは結晶中の多電子系を記述するハミルトニアンであり、電子が格子点を飛

び移る運動を記述する項と、2つの電子が同一格子点上に受ける(遮蔽されたクーロン相互作用による)電子同士の反発を記述する項の和で与えられる、強相関電子系分野においてその物理を理解するために解析される典型的な格子模型の一つである。

ハニカム格子上的ハバード模型を扱った先行研究では、半金属-絶縁体転移は絶縁体側で有限の交代磁気モーメントが発生する(すなわち自発的時間反転対称性の破れを伴う)連続転移であることが 1992 年の量子モンテカルロ法による研究ですでに議論されていた[6]。当時の研究で扱ったハバード模型のシステムサイズは最大で 128 電子系であったが、その後計算手法と計算機の進歩によって最大 2592 電子系の大規模計算がなされ、1992 年の半金属-絶縁体転移の議論の正当性がより説得力を持つようになった。さらに、連続転移である場合、相転移の臨界現象は系の次元や対称性によって決まる普遍性クラスで記述されることが知られている。ハニカム格子上の反強磁性絶縁体転移では、この普遍性クラスは場の理論で古くから知られていた Gross-Neveu 模型における chiral-Heisenberg クラスに相当し、実際に大規模計算に基づく詳細な解析により、普遍性クラスの存在と臨界指数の定量的評価が行われた [7-9]。

#### 研究の目的

これまでの量子モンテカルロ法による半金属-絶縁体転移の研究は、絶縁体相を特徴付ける秩序変数(交代磁気モーメントまたはその発生に伴う一粒子励起ギャップ)の計算によるものであった[10,11]。一方、L. D. Landau により提唱されたフェルミ液体論 [12] (相互作用するフェルミ粒子系の低エネルギー励起を、自由フェルミ粒子と同じ量子数を持ちかつ異なる速度・質量で運動する新たな粒子 - 準粒子 - により記述する理論) によれば、相互作用している電子系の金属相において準粒子の存在あるいは“相互作用する電子に残る自由電子らしさ”を特徴付け、かつ絶縁体相においては消失する、準粒子重み  $Z$  と呼ばれる量が最も重要な指標となる [13,14]。言い換えると、半金属相で準粒子重み  $Z$  が有限であることが確かめられれば、2次元電子

系においてフェルミ液体が実現していることを確かめることになる。実際、2次元電子系における電子状態がフェルミ液体か非フェルミ液体かという問題は、グラフェンのみでなく、銅酸化物高温超伝導体の正常状態(超伝導転移温度より高温の状態)や、有機モット絶縁体に対して加圧または電場効果によってキャリアを注入した時に実現する金属状態など、強相関電子系分野において注目される擬2次元物質群の電子状態研究で理論・実験を問わず非常にしばしば論じられる問題である。この問題に、数値的厳密計算(バイアスの無い計算)を用いた答えを提示することができれば大きな意義があると考えられる。

本研究では、数値的厳密で高精度な計算が可能な補助場量子モンテカルロ法を用いて、2次元電子系でフェルミ液体が実現するか否かの問題に対して、ハニカム格子上のハバード模型という一つの具体例について数値的厳密計算に基づき論じること目的とする

## 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。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。

虚時間発展は、ハミルトニアン $H$ の運動エネルギーに対応する項の指数関数と、ハミルトニアン $V$ のポテンシャルエネルギーに対応する項の指数関数を、交互に試行関数に演算することで行われる。このうちポテンシャルエネルギーに対応する項の行列の指数関数は、実空間表示で対角化されることが知られている。運動エネルギーに対応する項の指数関数は、通常、スペクトル分解を用いて密行列として扱われる。本研究では、ハミルトニアン $H$ の運動エネルギーに対応する項の行列表示が実空間表示で疎であることを利用して、Chebyshev 多項式展開に基づく疎行列の指数関数の計算法を用いることで計算コスト削減を図った。今回の補助場量子モンテカルロ計算では、 $N_{\text{site}}$ をサイト数として、 $N_{\text{site}}$ 行  $N_{\text{site}}$ 列の行列演算が必要になる。密行列同士の積は  $O(N_{\text{site}}^3)$ だが、疎行列と密行列の積は  $O(N_{\text{site}}^2)$ なので、サイト数が大きい場合に疎行列として扱った方が有利になると予想される。実際、HOKUSAI GreatWave で計算を行った場合、2048 サイト以上で疎行列として扱う方が有利になり、サイト数が大きいほどスピードアップの効果が大きいことがわかった(図1)。10952 サイトを扱うときに通常の場合と比べて3倍程度のスピードアップを得た。ただし、補助場量子モンテカルロ計算では、波動関数を虚時間発展させる過程で、計算の安定化のために波動関数を表す行列の規格直交化  $O(N_{\text{site}}^3)$ が必要なので、補助場量子モンテカルロ計算の演算量の次数が  $N_{\text{site}}$  に関して3乗から2乗になるわけではない。

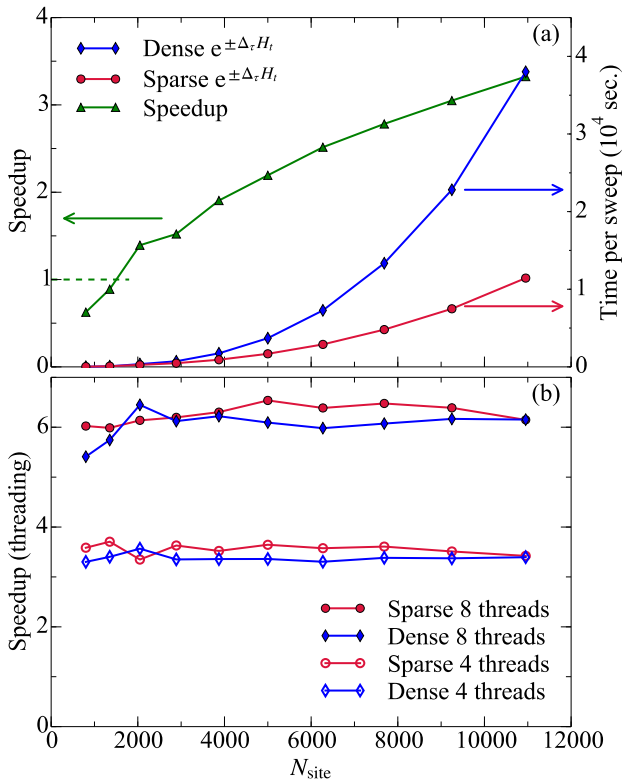


図1:(a) 運動エネルギー項の指数関数の演算を疎行列として扱った場合と密行列として扱った場合の経過時間(右軸)とスピードアップ(左軸)の比較。横軸はサイト数。(b) 疎行列として扱った場合と、密行列として扱った場合との、スレッド並列によるスピードアップの比較。計算は HOKUSAI GreatWave で行った。横軸はサイト数で(a)と共通。この比較は、行列積部分だけではなく、補助場量子モンテカルロシミュレーションに必要なすべての計算の経過時間で比較している。

### 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のために計算機プログラムを改良し利用することで、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、ハニカム格子(図2)で、フェルミ液体状態を特徴付ける準粒子重みと、同時刻グリーン関数の長距離での減衰の幂を研究した。なお扱った最大のシステムサイズは10952サイト、このときの虚時間の大きさは  $80/t$  ( $t$ はハバード模型のホッピングパラメータ)とし、鈴木ロッター分解による虚時間の離散化は  $0.1/t$  とした。すなわち800の虚時間刻みを用いた。

準粒子重みに関して、フェルミ液体理論に従う現象論的グリーン関数を解析することで、フェルミ液体理論が適用できる場合は同時刻グリーン関数が長距離で距離の2乗に反比例すること、および相互作用がある場合とない場合の同

時刻グリーン関数の比から準粒子重み  $Z$  を求める式を導出した。補助場量子モンテカルロ法によりその式を計算することで、準粒子重み  $Z$  を見積もった(図3)。その結果、相互作用パラメータ  $U/t$  が3.6以下では、同時刻グリーン関数が距離の2乗に反比例し、確かに準粒子重みが熱力学極限で有限であることを確かめることができた。

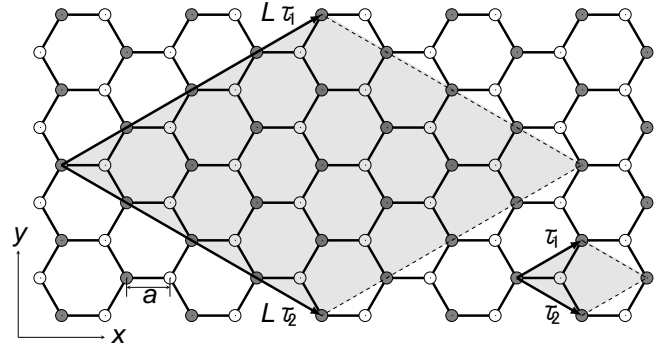


図2: 本研究で扱うハニカム格子の模式図。ハニカム格子は2つの基本並進ベクトル  $\tau_1$  と  $\tau_2$  で張られる。右下の影付き平行四辺形は単位胞(離散的な並進操作に対する繰り返しの基本単位)であり、単位胞は2つの格子点(白丸と黒丸)を含む。 $a$ は格子定数である。システムに含まれるサイト数は  $L$  を整数として  $2L^2$  である。

### 4. まとめ

ハニカム格子上で定義されたハバード模型の半金属状態に着目し、そのフェルミ液体的性質を補助場量子モンテカルロ法により調べた。計算上の工夫として、虚時間発展に必要なハミルトニアン運動エネルギー部分の指数関数を、Chebyshev 多項式展開を用いた疎行列の指数関数として表すことで、10952 サイト系で約3倍のスピードアップを得た。フェルミ液体理論に従う場合の同時刻グリーン関数の長距離の性質を調べ、準粒子重み  $Z$  を計算した。本研究内容はプレプリントとして arXiv から入手できる [Seki, Otsuka, Yunoki, and Sorella, arXiv:1901.06176]。

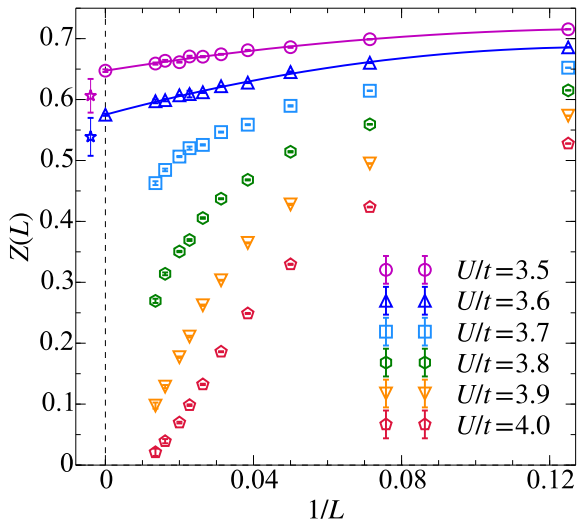


図 3 : いくつかの相互作用パラメータ  $U/t$  についての準粒子重みの有限サイズスケールリング。

#### 5. 今後の計画・展望

これまでの研究はオンサイト相互作用を持つハバード模型を対象としてきた。今後は、連続的な補助場またはフォノン場を導入することで、長距離クーロン相互作用や電子格子相互作用を取り入れた模型を解析できるようにする。これらの相互作用はグラフェンの模型としてハバード模型よりも適切だと考えられる。現在、連続的な変数のサンプリング方法としてハイブリッドモンテカルロ法を用いる計算プログラムの開発を行っており、今後はその方法を用いたモンテカルロ計算を行う計画である。

#### 【参考文献】

1. M. Sprinkle *et al.*, Phys. Rev. Lett. **103**, 226803 (2009).
2. G. W. Semenoff, Phys. Rev. Lett. **53**, 2449 (1984).
3. D. Gross and A. Neveu, Phys. Rev. D **10**, 3235 (1974).
4. G. W. Semenoff, Physica Scripta **T145**, 014016 (2012).
5. M. Schuler *et al.*, Phys. Rev. Lett. **111**, 036601 (2013).
6. S. Sorella and E. Tosatti, EPL **19**, 699 (1992).
7. S. Sorella, Y. Otsuka, and S. Yunoki, Sci. Rep. **2**, 992 (2012).

8. Y. Otsuka, S. Yunoki, and S. Sorella, Phys. Rev. X **6**, 011029 (2016).
9. 大塚雄一, 柚木清司, 「相互作用する 2 次元ディラック電子系における量子相転移とその臨界性」固体物理解 **52**, 373 (2017).
10. Z. Y. Meng *et al.*, Nature **464**, 847 (2010).
11. F. F. Assaad and I. F. Herbut, Phys. Rev X **3**, 031010 (2013).
12. L. D. Landau, JETP **30**, 1058 (1956).
13. P. W. Anderson, “Concepts in Solids” (World Scientific, 1998).
14. A. B. Migdal, JETP **32**, 399 (1957).

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] Yuichi Otsuka, Kazuhiro Seki, Sandro Sorella, and Seiji Yunoki, “Quantum criticality in the metal-superconductor transition of interacting Dirac fermions on a triangular lattice”, *Phys. Rev. B* **98**, 035126 (2018).

[2] Seher Karakuzu, Kazuhiro Seki, and Sandro Sorella, “Study of the superconducting order parameter in the two-dimensional negative- $U$  Hubbard model by grand-canonical twist-averaged boundary conditions”, *Phys. Rev. B* **98**, 075156 (2018).

**【口頭発表】**

[1] Sandro Sorella, “New insight in the sign problem with the auxiliary field quantum Monte Carlo technique”, *Correlated Electron Physics Beyond the Hubbard Model*, 7<sup>th</sup> Feb. 2019, Bremen, Germany