

課題名(タイトル):量子モンテカルロ法による相関格子模型のシミュレーション

利用者氏名:○関和弘(1),大塚雄一(2),柚木清司(1,2,3), Sandro Sorella(1,2,3,4)

理研における所属研究室名:

(1) 創発物質科学研究センター 計算量子物性研究チーム

(2) 計算科学研究センター 量子系物質科学研究チーム

(3) 開拓研究本部 柚木計算物性物理研究室

(4) International school for advanced studies (SISSA), Condensed matter group

## 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

ハバード模型の基底状態の物理量を求めることは量子多体モデル計算の中でも挑戦的な課題の一つである。近年、様々な多体モデル計算法を2次元ハバード模型に適用した結果を集約したベンチマーク論文が出版され、様々な多体モデル計算法が、2次元ハバード模型の基底状態のエネルギーに関しては整合する計算結果を出せるようになりつつあることが報告された[J. P. F. LeBlanc, *et al.*, *Phys. Rev. X* **5**, 041041 (2015), B.-X. Zheng, *et al.*, *Science* **358**, 1155 (2017)]。

ハバード模型は銅酸化物高温超伝導体を調べるためにしばしば用いられる模型であり、そこで興味を持たれるのはホールドーピングした状況の基底状態である。この状況では補助場量子モンテカルロ法では負符号問題が起きるため、十分長い虚時間発展を行うことができない。符号の期待値は虚時間の大きさとともに指数関数的に小さくなるからである[E. Y. Loh, *et al.*, *Phys. Rev. B* **41**, 9301 (1990)]。なるべく小さい虚時間で基底状態に近づくことができれば、基底状態エネルギーの上限を与える意味で有用である。

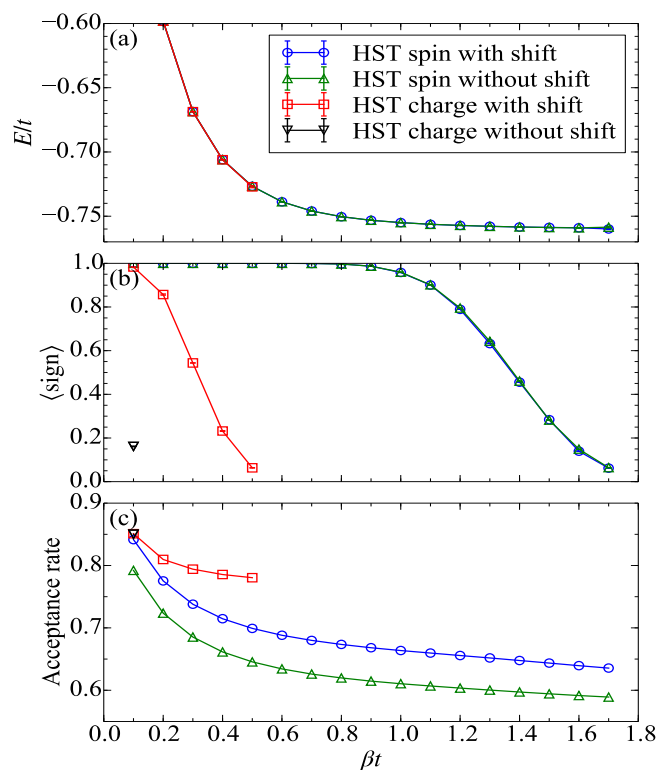
## 2. 具体的な利用内容、計算方法

補助場量子モンテカルロ法では試行関数の選択と補助場の選択にある程度任意性があり、その選択は計算の効率に影響する。最近、ドーピングされたハバード模型のための試行関数として、非制限ハートリーフォック法によるストライプ状態が適していることが数値計算から示唆された[B.-X. Zheng, *et al.*, *Science* **358**, 1155 (2017)]。本研究では、ストライプ状態のような空間的非一様な状態に適して、しかも離散的であるハバード-ストラトノビッチ変換を定式化し、その定式化を補助場量子モンテカルロ計算に応用した。

## 3. 結果

本研究で導いたハバード-ストラトノビッチ変換では、通常

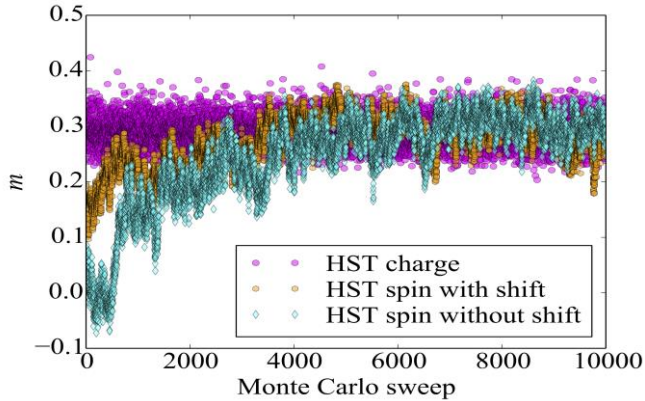
を用いた場合はモンテカルロ法の実受率が増加し、純虚数の補助場を用いた場合は符号の期待値が増加(負符号問題が軽減)されることがわかった(図1)。ただし符号の期待値は実数の補助場を用いた場合の方が純虚数の場合よりも常に大きいので、ドーピング時には実数の補助場を使う方がよいとわかった。なお、どの変換方法を用いても得られる波動関数は同じなので、エネルギー(など物理量の期待値)は統計誤差の範囲で一致する[図1(a)]。



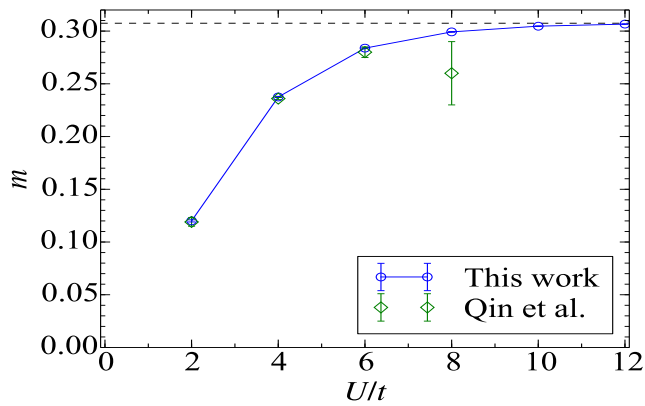
(図1) 16x16サイト 224 電子系,  $U/t=8$  における(a)1 サイトあたりのエネルギー期待値、(b)符号の期待値、(c)受容率の虚時間  $\beta$  依存性。

ハーフフィリングでは、実数と純虚数どちらの補助場を用いても負符号問題が生じないが、計算の効率は異なることがわかった。図2は、正方格子上的ハーフフィリングのハバード模型において、交代磁気モーメント  $m$  をモンテカルロステップに対してプロットしたものである。ハーフフィリングで用いた試行関数は反強磁性平均場状態である。パラメータ

は  $U/t=8$ , 虚時間の大きさは  $\beta t=24$ , システムサイズは  $16 \times 16=256$  サイトである。この結果は、純虚数の補助場を用いると平衡化に必要なモンテカルロステップ数を減らせることを示している。なお、ハーフフィリングのハバード模型においては本研究で導入した純虚数の補助場と従来から知られている純虚数の補助場は一致するので、両者の計算の効率に違いはない。

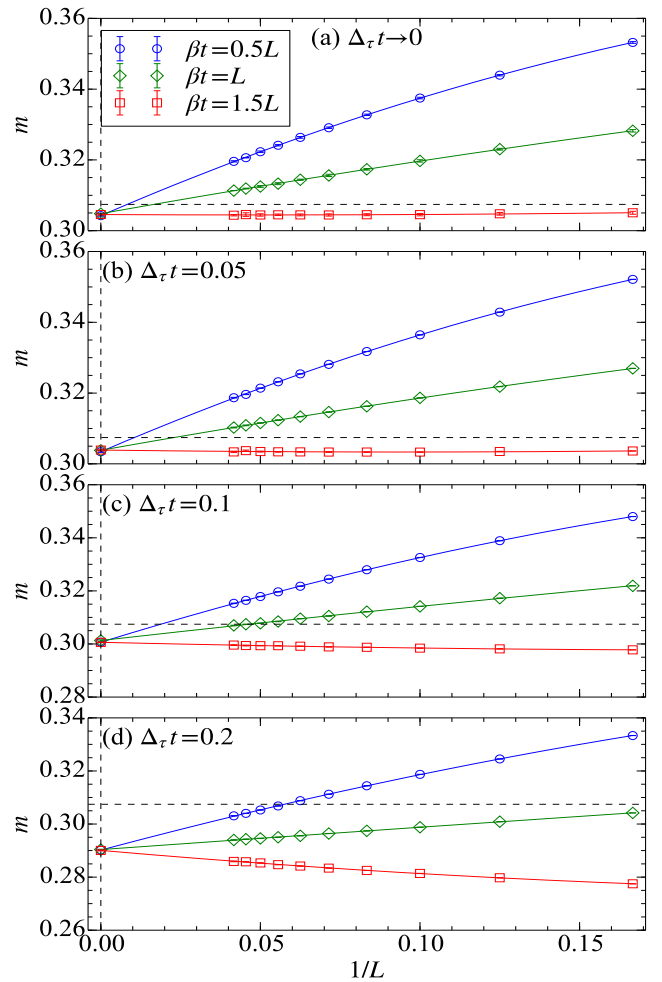


(図2) 磁気モーメント  $m$  のモンテカルロステップ依存性。HST charge(ピンク)は純虚数の補助場、HST spin with shift(黄色)が本研究で導入した実数の補助場、HST spin without shift(緑)がすでに知られている補助場を用いた結果。



(図3) 熱力学極限における  $m$  の  $U/t$  依存性。点線はハイゼンベルク模型の磁気モーメント[A. W. Sandvik and H. G. Evertz, Phys. Rev. B 82, 024407 (2010)]。比較のため先行研究[M. Qin *et al.*, Phys. Rev. B 94, 235119 (2016)]の結果もプロットしている。

ハーフフィリングでは純虚数の補助場を用いると、実数の補助場を用いた場合と比較して交代磁気モーメントが効率よく見積もれることがわかった。図3に反強磁性秩序変数の  $U/t$  依存性を示す。これは各  $U/t$  の値について、図4に示したように、サイズ外挿と連続虚時間極限の両方をとった結果をプロットしたものである。



(図4)  $U/t=10$  の場合の磁気モーメント  $m$  のサイズ外挿 ( $1/L \rightarrow 0$ )と連続時間極限外挿 ( $\Delta \tau \rightarrow 0$ )を行った図。  $L$  はシステムサイズの一辺の長さであり、システムサイズ(サイト数)は  $L^2$  で与えられる。

#### 4. まとめ

補助場量子モンテカルロ法において、ハバード-ストラトノビッチ変換の違いによる計算効率の違いを調べた。また、ハーフフィリングでは、純虚数の補助場を用いて反強磁性秩序変数の  $U/t$  依存性を計算した。

#### 5. 今後の計画・展望

補助場量子モンテカルロ法はこれまでハバード模型を中心に適用されてきた。しかし近年示されたように、連続的な補助場を用いれば、長距離クーロン相互作用 [M. Hohenadler *et al.*, *PRB* **90**, 085146 (2014)] や、電子格子相互作用 [S. Karakuzu, K. Seki, and S. Sorella, Phys. Rev. B **98**, 201108 (2018)] を取り入れた計算が、あるパラメタ領域において負符号問題なしで可能になる。今後はそのような相互作用を取り入れた量子モンテカルロ法計算プログラムを開発し物理に応用したい。

2019 年度 利用研究成果リスト

【雑誌に受理された論文】

[1] Kazuhiro Seki, Sandro Sorella, "Benchmark study of an auxiliary-field quantum Monte Carlo technique for the Hubbard model with shifted-discrete Hubbard-Stratonovich transformations", Physical Review B 99, 144407 (2019).

[2] Kazuhiro Seki, Yuichi Otsuka, Seiji Yunoki, Sandro Sorella, "Fermi-liquid ground state of interacting Dirac fermions in two dimensions", Physical Review B 99, 125145 (2019).