

課題名(タイトル):

二次元強相関係の量子ダイナミクスの研究

利用者氏名: ○曾田繁利

理研における所属研究室名: 計算科学研究センター量子系物質科学研究チーム

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

強相関電子系は電子間の強いクーロン相互作用により独自の集団的量子効果を示す。このような強相関電子系の取り扱い、平均場近似の基づく解析的理論の適用は困難であり、数値計算による研究が重要であると考えられている。また、このような強相関電子系の数値的扱いは個々の電子の自由度を独立に取り扱うことは困難であり、電子の多体問題としての取り扱いが必要とされる。したがって、系の自由度は系のサイズに対して指数関数的に増加する。そのため、数値的厳密な取り扱いにおける取り扱い可能な系のサイズは非常に限定される。特に、強相関電子系の研究において系のサイズによらない普遍的な性質を明らかにする立場からは数値的厳密な取り扱いによる計算結果のみでは不十分な場合がある。このような強相関電子系を数値的厳密な手法で取り扱い可能な系のサイズを超えて取り扱うことが可能な代表的な手法としては、量子モンテカルロ法や密度行列繰り込み群法が挙げられる。ただし、量子モンテカルロ法は対象とする系に幾何学的フラストレーションが含まれる場合にいわゆる負符号問題が発生するため、実際に取り扱いが可能な系は限定されること、また、密度行列繰り込み群法は一次元的な電子構造を持つ系に対しては非常に強力な手法である一方、多次元系に対する適用においては、その高精度計算のために必要とされる計算コストが非常に大きくなるなどの困難が存在する。しかしながら、近年の計算機科学の発展により、密度行列繰り込み群法の二次元強相関係への適用は十分現実的なものとなっている。特に、幾何学的フラストレーションを含む二次元強相関係の中には、量子スピン液体状態を始めとした新奇量子相の出現など大きな注目を集めるものが数多く存在するため、このような密度行列繰り込み群法の二次元強相関係への適用は十分意義のあるものであると考えられる。そこで、本研究では密度行列繰り込み群法による二次元強相関係への適用するために必要なプログラムの開発、特に高度に大規模並列化されたプログラムの研究開発を行う。さらに、SPRING-8等の大規模実験施設を始めとした実験結果との連携の立場から、強相関電子系の量子ダイナミクスの理論

的・数値的研究は非常に重要であると考えられる。密度行列繰り込み群法は、励起ダイナミクスを取り扱う動的密度行列繰り込み群法として拡張されている。最新の大企業保計算機を利用した場合、二次元強相関量子系の動的密度行列繰り込み群法による量子ダイナミクス研究も十分可能であると考えられる。そこで、本研究では二次元強相関係に適用可能な大規模並列密度行列繰り込み群法の開発も同時に実施する。本研究を通じて開発された大規模並列密度行列繰り込み群法のプログラムは、「京」、およびポスト「京」(富岳)の重点課題を始めとした多くのプロジェクトでも採用されており、その研究成果も報告している。

2. 具体的な利用内容、計算方法

密度行列繰り込み群法は数値繰り込みの手法であり、厳密に取り扱い可能な小さな系を出発点に密度行列繰り込み群法のアルゴリズムにより系を拡張する。その際、計算の目的となる物理量に対応した状態のみを精密に取り扱うことを考え、その状態を表現するために重要な任意の数の基底で系を表現する。このような取り扱いにより、系のサイズに対して指数関数的に増大する系の自由度を一定の範囲に留めつつ目的の物理量の高精度計算を可能にする。密度行列繰り込み群法の一次元系への適用では小さな計算コストで数値的厳密な手法では困難な巨大な系の高精度計算が可能である。しかしながら、密度行列繰り込み群法の多次元強相関係への適用ではその精密計算に必要な基底の数が非常に大きくなるため、その計算コストは非常に巨大になる。この事情は、エンタングルメント・エントロピーの面積則に対応する。密度行列繰り込み群法の多次元系の適用として代表的なものとしては、一次元系と同様のアルゴリズムを採用し、研究対象の格子形状に対応した長距離相互作用を導入することにより実行されるアルゴリズムが知られており、本研究で開発する密度行列繰り込み群法でもこれと同様のアルゴリズムを採用している。このような密度行列繰り込み群法のアルゴリズムの特徴を考慮し、長距離相互作用に対応する部分、相互作用を表現する演算子に対応する行列に対し多次元の並列化を導入することで、二次元強相関係を効率的に計算可能な大規模並列密度行

列繰り込み群法プログラムを作成している。ここで開発した大規模並列密度行列繰り込み群法のプログラムは、HOKUSAI を始めとした大規模並列計算機上でその計算と性能の確認を行っている。

3. 結果

本年度はこれまでに開発した大規模並列密度行列繰り込み群法に独自に開発した多次元系の計算も可能な時間依存密度行列繰り込み群法を実装し、SPring-8 等の大規模実験施設による計算結果と直接比較することが可能な計算が可能になるよう拡張した。拡張されたプログラムは時間発展に対する計算の場合においてもこれまでと同様の計算効率を達成している。さらに、開発したプログラムをポスト「京」重点課題や JST CREST を始めとした研究課題で利用し、その研究成果を報告している。

4. まとめ

近年の計算機科学の発展はその計算コストから一次元系を中心に適用されてきた密度行列繰り込み群法の二次元系への適用を十分可能にしている。本研究では、HOKUSAI を始めとした大規模並列計算機で効率的な計算が可能で大規模並列密度行列繰り込み群法の開発、さらにその量子ダイナミクス研究への適用が可能で手法の開発とその実装を行っている。本年度の研究においては、特に実時間ダイナミクスに焦点を当てその研究開発を行った。開発されたプログラムは量子ダイナミクスを取り扱う多くのプロジェクトで採用されその研究成果も報告している。

5. 今後の計画・展望

今後の計画としては、これまでに開発した大規模並列密度行列繰り込み群法プログラムをさらに発展させ、物性物理分野のみではなく量子情報分野等、他分野でも有益なプログラムへと拡張していくことが考えられる。さらに、「富岳」の利用に向け、より高効率な大規模並列密度行列繰り込み群法のアルゴリズムの開発が考えられる。

2019 年度 利用研究成果リスト

【口頭発表】

- ・ 曾田繁利, “大規模並列密度行列繰り込み群法の開発と量子ダイナミクスへの応用”, 物性研究所スパコン共同利用・CCMS 合同研究会「計算物質科学の新展開」, 2019 年 4 月, 柏.
- ・ 遠山貴巳, 曾田繁利, 柚木清司, “動的密度行列繰り込み群法による $t-t'-J$ 模型のスピンの励起の研究”, 日本物理学会 2019 年秋季大会, 2019 年 9 月, 岐阜.
- ・ 山口辰威, 岩野薫, 大村周, 高橋聡, 新城一矢, 遠山貴巳, 曾田繁利, 岡本博, “多体ワニエ関数を用いた電荷モデルの熱力学極限における光学伝導度の推定”, 日本物理学会 2019 年秋季大会, 2019 年 9 月, 岐阜.
- ・ 大村周, 高橋聡, 山口辰威, 岩野薫, 新城一矢, 遠山貴巳, 曾田繁利, 岡本博, “電荷モデル: スピナー-電荷分離と電荷揺らぎが両立する 1 次元拡張ハバードモデルの有効モデル”, 日本物理学会 2019 年秋季大会, 2019 年 9 月, 岐阜.
- ・ 新城一矢, 曾田繁利, 遠山貴巳, “時間依存密度行列繰り込み群法による 1 次元および梯子格子拡張ハバード模型の光学伝導度の研究”, 日本物理学会 2019 年秋季大会, 2019 年 9 月, 岐阜.
- ・ S. Sota, T. Shirakawa, S. Yunoki, T. Tohyama, “Dynamical DMRG study of spin excitation dynamics in triangular lattice spin-1/2 antiferromagnet”, APS March Meeting 2020, 2020/3, Denver (USA).
- ・ K. Shinjo, S. Sota, S. Yunoki, T. Tohyama, “Characterization of photoexcited states in the half-filled one-dimensional extended Hubbard model assisted by machine learning”, APS March Meeting 2020, 2020/3, Denver (USA).
- ・ B. H. Kim, S. Sota, T. Shirakawa, Y. Son, S. Yunoki, “Intermediate magnetic phase of the proximate Kitaev system in the in-plane magnetic field”, APS March Meeting 2020, 2020/3, Denver (USA).
- ・ 山口辰威, 岩野薫, 大村周, 高橋聡, 新城一矢, 遠山貴巳, 曾田繁利, 岡本博, “多体ワニエ関数法を援用した 1 次元 1/2 充填ハバード模型の巨大サイズにおける光学伝導度の理論計算”, 日本物理学会第 75 回年次大会, 2020 年 3 月, 名古屋.

【ポスター発表】

- ・ 曾田繁利, 柚木清司, “量子コンピュータによる直交多項式展開法”, 日本物理学会 2019 年秋季大会, 2019 年 9 月, 岐阜.
- ・ S. Sota, T. Shirakawa, S. Yunoki, T. Tohyama, “Dynamical DMRG Study of Spin Excitation Dynamics on the Triangular Lattice Antiferromagnetic Heisenberg model”, International Conference on Strongly Correlated Electron Systems 2019, 2019/9, Okayama.
- ・ 曾田繁利, “密度行列繰り込み群法による強相関量子ダイナミクスシミュレータの開発と応用”, 第 6 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会, 2019 年 11 月, 東京.
- ・ 曾田繁利, 白川知功, 柚木清司, 遠山貴巳, “動的密度行列繰り込み群法による三角格子反強磁性ハイゼンベルク模型の励起ダイナミクスの解析”, 第 6 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会, 2019 年 11 月, 東京.
- ・ 曾田繁利, 柚木清司, 今村穰, 中嶋隆人, “無限系に適用可能な超並列第一原理 DMRG の開発と磁石材料への応用”, 第 6 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会, 2019 年 11 月, 東京.
- ・ 曾田繁利, “大規模並列動的密度行列繰り込み群法(DDMRG)の研究開発”, 第 9 回材料系ワークショップ内ポスト「京」重点課題・萌芽的課題成果報告会, 2020/2, 東京.