

課題名 (タイトル) :

動的密度行列繰り込み群法を用いた変分クラスター近似法による  
強相関電子物性の研究

利用者氏名 : 白川 知功

理研での所属研究室名 : 和光研究所 基幹研究所 柚木計算物性物理研究室

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

変分クラスター近似法は、Potthoff によって提案された自己エネルギー汎関数法に基づき、少数クラスターのグリーン関数から系の熱力学極限における物理量、一粒子スペクトル関数等を計算する手法であり、近年、高温超伝導の問題やスピン流体など、強相関電子系の物性研究に幅広く応用されている。変分クラスター近似は現在の所、少数クラスターを解く為に厳密対角化法を用いているため、より大きなクラスター内部の自由度を扱う計算、特に、多軌道模型の解析には不向きである。そこで、本研究では、変分クラスター近似のクラスターソルバーとして、動的密度行列繰り込み群法を採用することで、クラスターの内部自由度を拡大し、汎用性の広い強相関電子物性の数値計算手法の開発を目指す。

密度行列繰り込み群法は、いわゆるハバード模型など、量子多体問題について電子相関の効果を厳密に解くために開発された計算手法である。動的密度行列繰り込み群法とは、上記の計算で得られた基底状態に対する一粒子スペクトル関数、電荷・スピン励起スペクトル、光学伝導度等、様々な実験と密接に関係するスペクトル関数を精度良く求めるための計算手法である。動的密度行列繰り込み群法は、とりわけ 1 次元系電子系では最も高精度の計算手法となっているが、2 次元電子系を解くのは困難である。

クラスターソルバーとして、この他に有用な計算手法として挙げられるのは、厳密対角化法と量子モンテカルロ法である。厳密対角化法はヒルベルト空間の制約が厳しく、大きなクラスターサイズを取り扱う事が、原理的に不可能である。他方、電子系における量子モンテカルロ法では、負符号問題に起因するハミルトニアンの制約や、スペクトル関数を直接求める事ができないなどの問題点が挙げられる。密度行列繰り込み群

法は、これらの問題は特でない。ただし、次元による制約が挙げられるが、これに関しても、精度の範囲でコントロール可能である汎用性を持っている。

2. 具体的な利用内容、計算方法

変分クラスター近似では、クラスター内のグリーン関数を厳密に解く必要がある。また、得られたグリーン関数を用いて熱力学ポテンシャルを計算し、それを繰り返し行うことで、熱力学ポテンシャルに対する最適化問題を解く必要がある。ここで計算すべきグリーン関数の要素の数は、クラスター内の(格子自由度)×(軌道自由度)の 2 乗に比例する。各グリーン関数の要素は独立に計算する必要があり、クラスターサイズの増加に伴い多くの計算機リソースを必要とする為、RICC を利用した。

現在までの計算手法の改良点を挙げると、(1) グリーン関数を求める際、振動数の虚軸方向の積分に置き換える事で、動的密度行列繰り込み群法にかかる計算コストを大幅に削減した。また(2) グリーン関数の要素を求める部分と、自己エネルギー汎関数の数値積分を取る部分について、MPI で並列化を実装した。

3. 結果

昨年度の結果を踏まえ、変分クラスター法をさらに発展させるために、本年度はクラスターソルバーとなる密度行列繰り込み群法の大幅な改良を行った。

変分クラスター近似では、相互作用のない熱浴サイトを追加し、そのパラメータを最適化する事ができる。ここで、熱浴サイトを追加したクラスター模型は、不純物アンダーソン模型と同等である。従って、軌道自由度が関連してくる場合には、多軌道不純物アンダーソン模型を精度よく求める必要がある。そこで、本年度は、密度行列繰り込み群法を用いて、多軌道アンダーソン模型を一般的に解く計算手法を提案した。この

## 平成 23 年度 RICC 利用報告書

方法では、ブロックランチョス法を用いて、多次元方向に結合している多軌道模型不純物模型を、梯子格子模型にマップする事で、1 次元的な模型を構築する。このマッピング操作により、不純物問題ならば、本来密度行列繰り込み群法が不得意とする多次元模型の解析が可能となった。

ただし、関連する軌道自由度が増えると、対応する梯子の足の数も増えるので、計算が困難となる。そこで、本研究では、密度行列繰り込み群法のスレッド並列化を行う事で、計算のさらなる高速化を行った。

クラスターソルバの性能評価と応用を兼ねて、この計算手法を 5d 遷移金属酸化物の問題に応用した[1-6]。5d 遷移金属酸化物では、新しい超伝導の可能性が指摘されているが、これを計算で示した報告はまだされていない。そこで、本研究では、超伝導となるための必要条件として、2 粒子間に引力が働いているかどうかを判断するバインディングエネルギーの計算を行った。その結果、ホールドーブと電子ドーブでは、電子ドーブの方がバインディングエネルギーが出やすい、すなわち、超伝導になる可能性が高い事がわかった。また、磁氣的交換相互作用についても調べ、配位子場による局所的波動関数の変化が、交換相互作用に異方性を与えている事を示した。

### 4. まとめ

本年度は、変分クラスター近似の近似手法改善のために、クラスターソルバのさらなる発展を行った。特に、(1) 一般化された不純物模型の解法を提案し、(2) コードのスレッド並列化を行う事で、計算のさらなる高速化をおこなった。また、実装したクラスターソルバは、(3) 5d 遷移金属の超伝導発現の有無に関する研究に応用し、超伝導発現と、磁氣的交換相互作用に関する新たな知見を得た。

### 5. 今後の計画・展望

開発したクラスターソルバは、不純物アンダーソン模型のソルバとしても有用である。これに関連して、ヘムタンパク質などの有効模型として、不純物アンダーソン模型が提案されているが、今のところ、平均場的な解法のみが使用されている[7]。電子相関を厳密に

取り扱うことのできる本研究の手法を用いれば、スペクトル関数などに見られる多重項の中間状態の詳細を明らかにする事ができる。また、近年注目を集めているトポロジカル絶縁体に関して、磁性不純物が与える影響などを厳密に解く事もできる。

6. RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況(どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか)や、継続して利用する際に行う具体的な内容

本年度は、特にクラスターソルバである動的密度行列繰り込み群法の高速化に取り組んだが、この計算手法を、実際のソルバーとしてはまだ応用できていない。とりわけ、本年度開発したソルバーを使う事で導入可能となった熱浴サイトを追加した場合の計算について、自動最適化の方法を開発する必要がある。また、これまでに作成したコードは、磁性、常磁性金属などの計算は行えるが、超伝導状態についての計算は実装していない。

7. 一般利用で演算時間を使い切れなかった理由

8. 利用研究成果が無かった場合の理由

平成 23 年度 RICC 利用研究成果リスト

【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】

【国際会議などの予稿集、proceeding】

- [1] T. Shirakawa, H. Watanabe, and S. Yunoki, “Variational cluster approximation study of Mott transition with strong spin-orbit coupling”, J. Phys.:Conf. Ser. **273**, 012148 (4 pages) (2011).
- [2] H. Watanabe, T. Shirakawa, and S. Yunoki, “Variational Monte Carlo study of two-dimensional strong spin-orbit coupling system: Novel Mott insulating state in Ir Oxide”, J. Phys.: Conf. Ser. **273**, 012143 (4 pages) (2011).
- [3] T. Shirakawa, H. Watanabe, and S. Yunoki, “Microscopic Study of Electronic and Magnetic Properties for Ir Oxides”, J. Phys. Soc. Jpn. **80** Suppl. B, SB010 (4 pages) (2011).
- [4] H. Watanabe, T. Shirakawa, and S. Yunoki, “Variational Monte Carlo study of two-dimensional strong spin-orbit coupling system: Novel Mott insulating state in Ir oxides”, J. Phys. Soc. Jpn. **80** Suppl. B, SB006 (3 pages) (2011).
- [5] T. Shirakawa, H. Watanabe, and S. Yunoki, “Theoretical study of  $J_{\text{eff}}=1/2$  Mott insulator in Ir oxides: a strong spin-orbit coupling vs local electron correlations”, accepted in J. Phys.: Conf. Ser.
- [6] H. Watanabe, T. Shirakawa, and S. Yunoki, “Variational Monte Carlo study for superconductivity in multi-orbital systems”, accepted in J. Phys.: Conf. Ser.
- [7] V. Badaut, T. Shirakawa, and S. Yunoki, “A Haldane-Anderson impurity model study for the spin- and charge-states of iron in heme proteins”, accepted in J. Phys.: Conf. Ser.

【国際会議、学会などでの口頭発表】

- [8] T. Shirakawa, H. Watanabe, and S. Yunoki, “Microscopic Study of Electronic and Magnetic Properties for Ir Oxides”, International Workshop on Neutron Applications on Strongly Correlated Electron System 2011 (NASCES11), Ibaraki Quantum Beam Research Center (IQBRC), Feb. 23-25, 2011.
- [9] T. Shirakawa, H. Watanabe, and S. Yunoki, “Theoretical study of  $J_{\text{eff}}=1/2$  Mott insulator in Ir oxides: cooperation of a strong spin-orbit coupling and local electron correlations”, 26th International Conference on Low Temperature Physics (LT26), Beijing, Aug 10-17, 2011.
- [10] 白川知功、渡部洋、柚木清司、“スピン軌道相互作用誘起モット絶縁体 $\text{Sr}_2\text{IrO}_4$ の理論的研究”、日本物理学会 2011 年秋季大会、富山大学、2011 年 9 月 21 日～24 日
- [11] 白川知功、渡部洋、柚木清司、“ $\text{Sr}_2\text{IrO}_4$ の金属絶縁体転移と超伝導”、新学術領域研究「重い電子系の形成と秩序化」ワークショップ～多自由度強相関係の新しい量子相～、新潟大学、2011 年 11 月 11 日～12 日（招待講演）
- [12] 白川知功、渡部洋、柚木清司、“変分クラスター近似を用いた Ir 酸化物の理論的研究”、強相関電子系理論の最前線—若手によるオープン・イノベーション、勝浦観光ホテル、2011 年 12 月 21 日～23 日（招待講演）

【その他】