

低温領域に対応した新しい動的密度行列繰り込み群法

曾田繁利, 遠山貴己

京都大学基礎物理学研究所

sotas@yukawa.kyoto-u.ac.jp

概要: 低次元強相関電子系の有限温度における量子現象を明らかにするための数値的アプローチとして、密度行列繰り込み群法による新しい計算手法を提案する。本手法は、与えられた温度に対応する状態を直交多項式展開法により直接算出することで、シンプルかつ効率的な密度行列繰り込み群法を可能にする。また、物理量の期待値についてサンプル平均を実行することにより、様々な物理量の算出に適用可能である。本手法は、特にこれまでの密度行列繰り込み群法で困難の生じた低温領域での計算に対して高精度かつ効率的な適用が可能である。

1 はじめに

ナノスケールの電子系では、電子間に働くクーロン相互作用が強いため、電子相関の効果が重要となる。この強相関効果のため、電子の持つ内部自由度が独自の集団的量子効果を生み出す。1次元的な電子構造を持つ1次元 Mott 絶縁体は、巨大な非線形光学応答と超高速な緩和現象を示す。これは、1次元 Mott 絶縁体が光による新しいスイッチング素子としての可能性を秘めた物質であることを示している。したがって、この特異な量子現象を明らかにすることが大いに期待される。

1次元 Mott 絶縁体の様な低次元強相関電子系に対しては、White によって提案された密度行列繰り込み群 (DMRG) 法[1]が威力を発揮する。DMRG 法は、系を任意のサイズまで広げていく数値繰り込み群法の一種であり、系を表現する行列の次元より小さい任意の打ち切りの次元 m での最適なターゲット状態の表現を与える。さらに、系に環境の効果を取り込み、系を広げたときに残る有限サイズの系の影響を効果的に打ち消す。DMRG 法は、絶対零度における物理量の計算に適用され、大きな成果を上げた。また、DMRG 法は Hallberg によって動的な物理量の計算手法として拡張されている[2]。さらに、DMRG 法による有限温度での効果的な計算手法の開発もすでに行われている。しかし、これまでの有限温度 DMRG 法は低温領域の計算、または複雑な体系への適用において困難が生じた。そこで、低温領域を高精度かつ簡潔に計算可能な手法の開発が望まれる。さらに、上述の特異な現象を明らかにする目的から動的な物理量の計算も可能な計算手法の開発が望まれる。

2 計算手法

本手法では、DMRG 法のターゲット状態を次の線形結合 $\sum_n e^{-\beta \epsilon_n / 2} |n\rangle$ とする。ここで、 $|n\rangle$ はハミルトニアン H の n 番目の固有状態、 ϵ_n は対応する固有値、 β は逆温度である。このターゲット状態の内積は分配関数を与えるため、有限温度の物理量を計算する目的に対して適当であると考えられる。ところで、このターゲット状態の算出にはすべての固有状態が必要である。しかし、各固有状態を算出することは現実的であるとはいえない。

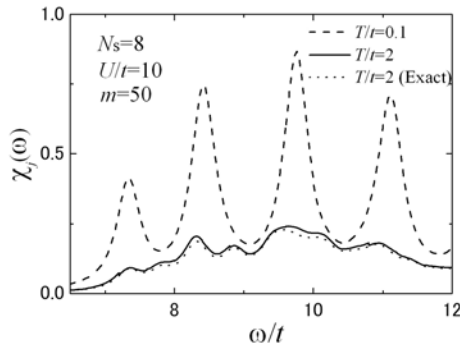
そこで、本研究では各固有状態を算出するのではなく、直交多項式展開法[3]を適用してターゲット状態を直接算出することを試みた。この手法は、計算時間が行列のサイズに比例するオーダー N の方法であり、ターゲット状態を効率的に算出することが可能である。また、この計算は巨大な行列とベクトルの積で構成される。しかし、並列化を適用し行列とベクトルの配列を分割することで計算を実行する。ところで、このターゲット状態はハミルトニアン H の固有状態の線形結合である。したがって、ハミルトニアンと非可換な物理量 A の算出を、このターゲット状態から $\sum_{n,m} e^{-\beta(\epsilon_n + \epsilon_m)/2} \langle n | \hat{A} | m \rangle$ とした場合、非対角要素に対応する項が現れる。したがって、このままではターゲット状態からハミルトニアンと非可換な物理量の期待値を算出できない。そこで、本手法では物理量の期待値についてランダムサンプリングと平均操作を行う[4]。これにより非対角項は打ち消され、様々な物理量の算出が可能となる。この平均操作の手法は、完全並列化が可能なアル

ゴリズムであり、大規模並列化によって大幅な計算効率の向上が期待される。

さらに、本手法の動的な物理量への拡張を考える。絶対零度における動的な物理量を計算では、基底状態と対象とする物理量に付随する励起状態のマルチターゲットで実行される。そこで本手法では絶対零度における基底状態の部分を上述のターゲット状態に置き換えることで、有限温度における動的な物理量の計算を可能にした[4]。

3 計算例と有効性

本研究では、1次元鎖のハバードモデルに本手法を適用し、その有効性を検証した。ハバードモデルは、固体中の伝導電子を記述する基本的なモデルであり、サイト間の電子の飛び移り積分 t と、同一サイトに2つの電子が入ったときのクーロン相互作用 U で与えられる。クーロン相互作用が原因で絶縁体になる物質が Mott 絶縁体である。下図に、1サイトあたりの電子数を1、サイト数 $N_s=8$ 、 $U/t=10$ 、 $m=50$ とした光学吸収スペクトルに対応する動的な電流-電流相関関数 $\chi_j(\omega)$ の計算結果を示す(京都大学学術メディアセンターFat-node サブシステム、8コアで実行)。破線は温度 $T=0.1t$ で



の計算結果である。この結果は、直接対角化で算出した厳密解と完全に一致している。また実線は $T=2t$ における計算結果で、点線は対応する厳密解を示している。ここでは、厳密解との誤差が確認できる。これは、DMRG法の打ち切り m による誤差であり、 m を大きくすることで解消される。したがって、本手法は高い温度に対して大きな m が必要である。この m は、ハミルトニアン次元が m^2 のオーダーで与えられることから、本手法が必要とする計算資源に対して最も影響を与えるパラメータである。一方低温側に対しては、より小さな m で精密な計算が可能である。これは、本手法が低温で効率的な計算が可能であることを示し

ている。したがって、これまでの有限温度 DMRG 法では計算が困難であった低温において、本手法が有効であると考えられる。

ところで、必要とする計算資源に最も影響を与える m であるが、より大きな系に対しては、より大きな m が必要である。特に、マルチターゲットで実行される動的な物理量の計算では、その要求は大きいと予想される。したがって、本研究の目的である1次元 Mott 絶縁体の特異な量子現象の解明には、巨大な m の値が必要であると考えられる。そこで、次世代スパコンの活用が期待される。

4 まとめ

本手法は、低次元強相関電子系の有限温度における量子現象を明らかにするために開発された。ボルツマン分布に従ったターゲット状態の算出に対して直交多項式展開法を用いることで効率的なアルゴリズムを実現した。本手法は、物理量の計算でランダムサンプリングを導入することにより、様々な物理量の算出を可能とした。さらに、本手法は動的な物理量の計算に対して拡張された。計算例より、低温側では高温側に比べ少ない計算量で精密な結果を再現できることが確認された。本手法は、他の有限温度 DMRG 法と比較して低温側で優れた性能を発揮する。また、簡潔なアルゴリズムのため、様々な問題に対する応用が可能である。本手法を適用することで有限温度における1次元 Mott 絶縁体の量子現象が解明され、光による新しいスイッチング素子の実現が期待される。

参考文献

- [1] S. R. White, “Density matrix formulation for quantum renormalization groups”, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992), “Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups”, Phys. Rev. B **48**, 10345 (1993).
- [2] K. Hallberg, “New Trends in Density Matrix Renormalization”, Adv. Phys. **55**, 477 (2006).
- [3] S. Sota and M. Itoh, “Fast and Accurate Scheme for Green Functions and Eigenvectors: Regulated Polynomial Expansion without Gibbs Oscillation”, J. Phys. Soc. Jpn. **76**, 054004 (2007).
- [4] S. Sota and Takami Tohyama, “Low-Temperature Density Matrix Renormalization Group using Regulated Polynomial Expansion”, to be published in Phys. Rev. B.