並列化密度行列繰り込み群法による光学格子中フェルミ原子気体の解析 ～高温超伝導へのアプローチ～

奥村雅彦 [1,2], 山田進 [1,2], 町田昌彦 [1,2]

日本原子力研究開発機構システム計算科学センター[1], CREST(JST)[2]

[okumura.masahiko, yamada.susumu, Machida,masahiko]@jaea.go.jp

概要：密度行列繰り込み群法を、２次元系へと拡張するため、オリジナル対角化ルーチンとScaLAPACK を用いて並列化し、従来の拡張法よりも計算精度が格段に向上することを示した。また、この方法を箱形光学ポテンシャル中の光学格子上フェルミ原子気体に応用し、バイホールペアという新しい現象を数値計算で初めて確認することに成功した。

1 はじめに

高温超伝導は 1986 年の発見以来、今日まで変わらず物理や工学分野の研究者の注目を集め続けてきた。高温超伝導とは約 170℃以下程度で電気抵抗がゼロになる現象であり、送電線などへの応用によるエネルギー問題への貢献などが期待され、社会からも注目を集めている。但し、「高温」という表現はそれまでの極低温で起こる超伝導と比較したものであり、現実的な応用のためには室温程度での超伝導実現が望まれる。しかし、その発現機構の理解はなかなか進まず、室温超伝導実現への道筋は今も明らかではない。その主な要因の一つは電子同士の強い量子相関を解析的に記述するのが難しいことにある。そこで、この強相関効果を近似なしに取り扱うために様々な数値シミュレーション手法が開発され、高温超伝導の理解を目指した研究が行われてきた。

強相関電子系の解析に用いられる数値シミュレーションには厳密対角化法、量子モンテカルロ法、密度行列繰り込み群法[1]等がある。それぞれ長所と短所を持ち合わせるが、1 次元系では密度行列繰り込み群が最も効率の良く高い精度を与える方法であり（適用例[2]）、高温超伝導の舞台である 2 次元系への拡張が望まれている。

近年、高温超伝導とは全く異なる体系の中性原子気体が高温超伝導との関係から多くの注目を集めている（20001 年のノーベル物理学賞が中性原子気体のボース・アインシュタイン凝縮の実現に対して贈られたのは記憶に新しい)。これは光学格子と呼ばれるレーザーで作られた格子の上に電子と同種のフェルミ原子気体を配置することに成功したため、高温超伝導体と同等な系が作り出せたからである。また、高温超伝導体だけでなく、粒子間の相互作用も含む様々なパラメータが細かく調節可能であるという驚くべき特性を持つため、コントロール可能な擬高温超伝導体を実験室内に作ることが可能になろうとしている。

こうした実験技術の急速な発達の現状を鑑み、我々は密度行列繰り込み群法を 2 次元系にも適用可能な形に拡張し、光学格子と呼ばれるレーザー中の中性フェルミ原子気体系を解析することにより、2 次元強相関系の振る舞いを明らかにし、高温超伝導の理解を進めることを研究の目的とした。

2 並列化密度行列繰り込み群法

量子論の問題は基本的にはハミルトニアン行列の対角化問題に帰着できる。この観点から我々が用いる密度行列繰り込み群法を簡単に表現すると、興味のある量子状態ベクトル（ハミルトニアン行列の固有ベクトル）と関係の少ない量子状態ベクトルを切り捨てて、効率よくハミルトニアン行列を対角化する方法であると言える。具体的には主に (1)ハミルトニアン行列（疎行列）の対角化、(2)関係の少ない量子状態ベクトルの切り捨てのための密度行列（密行列）の対角化という 2 つのステップで成り立っている。これまで用いられていた 1 次元系の密度行列繰り込み群法はこれら 2 つの行列のサイズが小さく、普通のパソコン程度で計算が可能であった。その後、この特性を生かした図 1(b)のような 2 次元系への拡張が提案されていたが、計算精度に問題があり、改善法が模索されている。我々は、この問題を克服するために図 1(a)のような直接的拡張法を提案し、この問題の抜本的解決を図った[3]。ただし、この拡張法を用いると上記の 2 つの行列が大きくなり、大型並列計算機の使用が不可欠となる。そこで、我々は(2)の密行列の対角化には ScaLAPACK 用い、一方の(1)の疎行列の対角化には CG 法をベースとして前処理、行列の分割方法を工夫したオリジナル対角化

ルーチンを用いてこの直接的な拡張法を実装した。

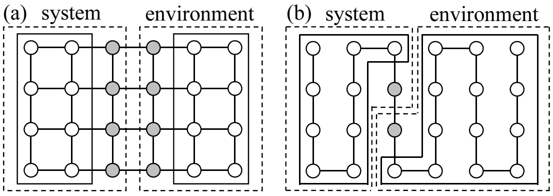

図 1. 2 次元密度行列繰り込み群法。(a)我々の方法。(b)従来の方法。

3 並列化効率・計算精度・物理的結果

まず、並列化効率を図 2 に示す。図中の m は残しておく基底の数で、(1)、(2)の行列の大きさを決めるものである。この値が大きいほど行列の次元が大きく、また、得られる結果の精度も良くなる。この図から行列の次元が大きくなるほど並列化効率が上がることが見て取れる。

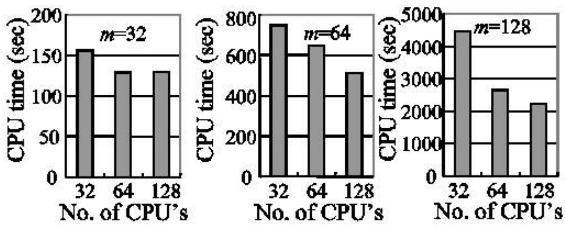

図 2. 並列化効率。

次に、精度の検証について述べる。図 3(a)は同じ条件のもとで従来の方法（図 1(b)）と我々の方法（図 1(a)）で計算した系のエネルギーを比較したものである。密度行列繰り込み群法は変分法の一種であるので、エネルギーが低く出る方が精度が良いといえる。我々の方法の方が常にエネルギーは低い値を示しており、エネルギーの計算精度が優れていることが分かる。次に、図 3(b)はスピン密度分布を表したものである。リープ・マティスの定理からこの量は厳密にゼロにならなければならないことが知られている。この図から、我々の方法は、残しておく基底数を大きく（m=96 程度）とればこの定理を満たすことが分かる。一方で従来の方法はこの定理を満たさないことが分かっており、この点において我々の方法の優位性が際立っている。

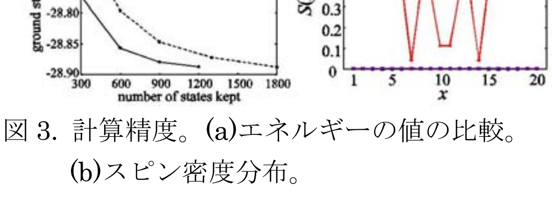

図 3. 計算精度。(a)エネルギーの値の比較。(b)スピン密度分布。

最後に、得られた結果の中、物理学上、重要と判断できる結果を紹介する[4]。図 4 は箱形光学ポテンシャル中の光学格子上フェルミ原子気体における、ホール密度分布を示している。この図から両端に 2 ホールのペア、真中にバイホールペア（2 ホールペアのペア）が存在することが分かる。2 ホールのペアはよく知られている現象であるが、バイホールペアというのはチャンとアフレックによって近似を用いた解析計算で予言されていたもので、数値計算による確認が待たれていた新現象であった。我々は精度のよい並列化密度行列繰り込み群法を用いて、このバイホールペアの存在を初めて確認した。この結果はバイホールペアによる新しい超伝導の可能性も示唆しており、精度の高い本並列計算手法により新たな地平の開拓が進んだ一成功例と言える。

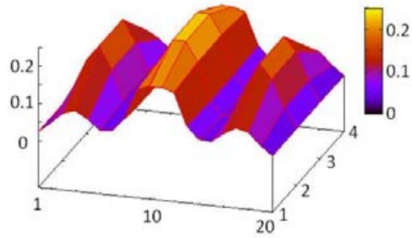

図 4. 4×20 サイト斥力ハバード模型（U/t=5）のホール密度分布（8 ホール）。

4 まとめ

我々は並列化密度行列繰り込み群法を、オリジナル対角化ルーチンと ScaLAPACK を用いて 2 次元系へと拡張し、従来の拡張法よりも計算精度が格段に向上したことを示した。また、この方法を箱形光学ポテンシャル中の光学格子上フェルミ原子気体に応用し、バイホールペアという新しい現象を数値計算で初めて確認することに成功した。

参考文献

[1] S.R. White、「Density matrix formulation for quantum renormalization groups」、Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992).

[2] M. Okumura, S. Yamada, N. Taniguchi, and M. Machida、「Hole Localization in One-Dimensional Doped Anderson-Hubbard Model」、to be published Phys. Rev. Lett.

[3] S. Yamada, M. Okumura, and M. Machida、「Direct Extension of Density-Matrix Renormalization Group toward 2-Dimensional Quantum Lattice Systems: Studies for Parallel Algorithm, Accuracy, and Performance」、arXiv:0707.0159.

[4] M. Machida, M. Okumura, and Y. Yamada、「Stripe Formation in Fermionic Atoms on 2-D Optical Lattice inside a Box Trap: DMRG Studies for Repulsive Hubbard Model with Open Boundary Condition」、Phys. Rev. A **77**, 033619 (2008).