

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
準一次元強相関電子系の研究

利用者氏名 : 白川 知功

所属 : 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

密度行列繰り込み群法は、いわゆるハバード模型など、電子相関の効果を取り入れた格子模型の多体問題を正確に解く事の出来る計算手法である。また、動的密度行列繰り込み群法は、上記の計算手法で得られた基底状態に対する一体のグリーン関数やスペクトル関数、スピン励起スペクトル等の動的物理量を計算する方法である。一方、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の熱力学ポテンシャルに基づき、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などを計算する事の出来る計算手法として、近年盛んに研究が行われている数値計算手法である。

両者の計算手法はそれぞれ、独立に発展してきた計算手法であり、現在の所、これら二つの計算手法を組み合わせた研究は行われていない。両者にはそれぞれ弱点が有る。動的密度行列繰り込み群法はとりわけ 1 次元系にのみ高精度の計算が可能で、2 次元電子系を解くのは困難であった。他方、変分クラスター近似法は現在の所、少数クラスターを解くために厳密対角化の手法を用いているため、クラスターは小さいサイズに制限され、多軌道系やクラスターサイズを大きく撮るような計算は不可能であった。そこで、両者を組み合わせる事で、より汎用性の広い計算手法を確立しようというのが本研究の狙いである。

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事で、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、必要となるグリー

ン関数の要素の数は、クラスター内の格子の数の二乗に比例する。各グリーン関数の要素は独立に計算する必要があるため、クラスターサイズの増加にともない多くの計算機リソースを必要とするため、RICC を利用した。

3. 結果

本研究課題ではクラスターを 1 次元方向に長くとする事で、準 1 次元 2 次元正方格子ハバード模型 (1 次元ハバード鎖が弱い鎖間ホッピングで結合した模型) のハーフフィリングにおけるモット絶縁体の絶対零度における反強磁性長距離秩序の安定性について調べた。クラスターサイズは 6 4 サイトまで採用している。その結果、無限小の鎖間ホッピングによって、反強磁性長距離秩序が発現する事を確認した。この結果は、ボゾン化法を用いた繰り込み群理論による解析的な結果とコンシステントな結果となっている。

さらに我々は、鎖間ホッピングの増加にともないスペクトルがどのように変化するかを調べた。鎖間ホッピングのない一次元系では、スピン-電荷自由度の分離により、一粒子スペクトルにスピンプランチ、ホロンブランチと呼ばれる二つのピークが現れる。また、これらのスペクトルの位置はベーテ仮説に基づく厳密解から得ることができる。我々の計算結果はこの振る舞いを定量的に再現しており、非常にクリアなスペクトルの形状が得られた。これは、(1) 動的密度行列繰り込み群法がスペクトルの振動数方向の依存性を非常に高精度に計算できる点と、(2) 変分クラスター近似が熱力学極限における物理量を対象としているため、波数空間方向の解像度が向上した点の二つの利得のために得られたものであると考えられる。次に鎖間ホッピングを大きくして行くと、ホロンブランチは強く抑制され、スピノブランチが強調される傾向が見てとれた。その結果、スペクトル全体では 2 次元電子系で予

想される反強磁性スピン密度波のスペクトルへとクロスオーバーしていく事が再現された。

4. まとめ

本研究では、動的密度行列繰り込み群法と自己エネルギー汎関数法に基づく変分クラスター近似法を組み合わせる事で、汎用的な強相関電子系のモデルに対する計算手法を確立した。また、この計算手法のベンチマークとして、比較的クラスターの計算しやすい準一次元2次元正方格子ハバード模型についての計算を行い、(1) 無限小の鎖間ホッピングによって交替磁化が発生する事、(2) ホロンブランチの抑制による反強磁性スピン密度波分散の再現などを、数値的に初めて再現した。

5. 今後の計画・展望

本研究課題では、計算手法のベンチマークとして準1次元系の最も簡単な模型について調べた。準1次元電子系を数値計算の手法を用いて取り扱った研究はそれほど多く報告されていない。従って、電子数を変化させれば、朝永ラッティンジャー流体からフェルミ流体へのクロスオーバーの問題や、その時のスペクトルの形状の変化などの、固体物理学の基礎的な問題に対する議論も可能である。また、格子構造を三角格子模型へと変化させるなどして、よりフラストレーションの強い系にした場合にどのような電子状態が実現するかというのも興味深い問題である。

一方、元々の密度行列繰り込み群法は1次元に特化した計算手法であるため、当初は準1次元系の計算に制限をしていたが、いくつかのテスト計算を行ってみた結果、クラスターのサイズを2次元的に選んでも、クラスターサイズが十分小さければ、高い精度でスペクトルを得ることが可能である事が分かって来た。そこで、準1次元系という枠にとらわれず、厳密対角化では扱う事の難しかったより現実的な模型に近い多軌道2次元電子系なども視野に入れて計算をおこなっていききたい。具体的には、 Sr_2IrO_4 など、強いスピン-軌道相互作用のある系でのモット絶縁体について、面内磁化の発生の起源、一粒子スペクトルと角度分解光電子分光の実験結果との比較、 $\text{Sr}_{2n+1}\text{Ir}_n\text{O}_{3n+1}$ 系における次

元コントロールモット転移の問題などにも、この方法を応用していきたいと考えている。

また、今後の展望としては、第一原理からの強相関物質設計という側面から、この方法をさらに密度汎関数理論と組み合わせる方向も検討している。こうした試みは、既に動的平均場理論などを用いて行われてきたが、本研究で用いている計算手法は、動的平均場理論を含む近似体系であり、原理的には実行可能である。また、様々なクラスターの適切な撮り方によっては、より小さな計算コストで同等の結果が得られる事が期待されるため、汎用性の広い計算手法を確立することができると考えている。

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

上記の準一次元ハバード模型に対する計算は正方格子模型についてはほぼ終了している。さらにこの研究は継続させて、電子数を変化させた場合、格子構造を三角格子にした場合についての結果も方向して行きたい。

また、これとは別に、5節のテスト計算の結果をふまえ、課題名の準一次元という言葉を取り去って、より広くこの計算手法を応用して行きたいと考えている。具体的には、5節であげた強いスピン-軌道相互作用と電子間の相互作用が電子物性に主な役割を果たす5d電子系の問題への応用を検討している。

7. 利用研究成果が無かった場合の理由

研究成果はまだ論文になってはいないが、既に十分な計算結果は得られており、いくつかの確認計算、補足計算を行った後に、論文として提出する予定である。

平成 21 年度 RICC 利用研究成果リスト

【その他】

白川知功、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、物性科学領域横断研究会、2009年1月30日、東京大学武田先端知ビル

