

課題名 (タイトル) :

自己エネルギー汎関数理論に基づく強相関電子系の数値的研究

利用者氏名 : ○関 和弘

所属 : 柚木計算物性物理研究室

| | |
|--|--|
| <p>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</p> <p>強相関電子系では、エネルギーを記述するハミルトニアン演算子を行列表示したときの行列の寸法が、系のサイズに関して指数関数的に増大する。そのため、厳密な固有値や固有ベクトルを得ることがたちまち困難になる。莫大な自由度が現れることは強相関電子系を含む量子多体問題に本質的なもので一般的には解消できない。そこで、数値的厳密な計算手法に加えて、一電子近似を越えて電子相関効果を取り入れた近似的計算手法を進展させることも、強相関電子系の理解のために必要である。</p> <p>本課題では、熱力学ポテンシャルの変分原理 (自己エネルギー汎関数理論) に基づき、計算可能な少数電子系の数値的厳密な自己エネルギーを変分計算の試行関数として熱力学ポテンシャル汎関数を計算してその停留点を探ることで強相関電子系の安定な状態の探索や熱力学量の計算を行う、有限温度変分クラスター近似の開発を行った。</p> <p>2. 具体的な利用内容、計算方法</p> <p>有限温度変分クラスター近似では、与えられたパラメータ 1 組に対する熱力学ポテンシャル汎関数一点の計算につき、エルミート行列の対角化とグリーン関数計算を一度行い、小規模な行列 (行列サイズ: 10 行 10 列程度) に対する行列要素の作成、その行列に対する行列式・逆行列・行列積・行列和の計算を 10^7 回程度行う。</p> <p>3. 結果</p> <p>松原周波数の無限和の計算方法を工夫して、熱力学ポテンシャル汎関数の計算速度と計算精度を向上させた。松原周波数の無限和は有限温度の場の理論の計算に必然的に現れるので、この工夫は熱力学ポテンシャル汎関数の計算のみでなく色々な有限温度の物理量の計算にも応用できた。</p> | <p>また、ブロックランチョス法により疎行列用にエルミート行列の固有値と固有ベクトルを複数求めるプログラムを作成した。また、タイトバインディング近似、ハバード-I 近似、平均場近似といった電子や準粒子の分散関係が決定できる近似計算方法において電子や準粒子の状態密度を精度よく計算するのに有効な線形四面体法のプログラムを、GPU ノードを利用して GPU 用に作成した。</p> <p>4. まとめ</p> <p>効率の良い有限温度変分クラスター近似計算の開発を進めることができた。線形四面体法による状態密度計算は単純な do ループで書けるので容易に GPU を利用できた。その結果 1CPU 1core 利用の場合と比較して、GPU 利用の場合は計算の速さは 20 倍以上に向上し、少ないリソースで短時間に多くのデータが得られるようになった。以上のような改良を行ったプログラムを強相関電子系の典型的なモデルであるハバードモデルやある種の周期的アンダーソンモデルに適用し、種々の有限温度物性を明らかにすることができた。</p> <p>5. 今後の計画・展望</p> <p>厳密対角化法、変分クラスター近似法等に GPU をうまく利用できるかどうかを検討して、可能ならばプログラムを作成して計算を高速にしたい。</p> |
|--|--|