

課題名 (タイトル) :

近藤格子系へのカーネル多項式法の適用

利用者氏名 : 紙屋佳知

所属 : 古崎物性理論研究室

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

近年、スピントロニクスへの応用という観点から、磁性体においてスカーミオン構造が格子状に整列した磁気構造 (スカーミオン格子) が注目を集めている。本研究の目的は、伝導電子と局在磁気モーメントが相互作用するモデルにおいて、フェルミ面の多重ネスティングに起因するスカーミオン格子の実現可能性を調べるためのプログラム開発を行うことである。

2. 具体的な利用内容、計算方法

ネスティングの不安定性は対数的に小さく、このためこれに由来する磁気秩序を検出するには大きな格子サイズを取り扱う必要があり、効率の良いアルゴリズムによるコードが望まれる。本研究では、カーネル多項式展開法 [Barros and Kato, PRB 88, 235101 (2013)] にもとづくコード開発を行い、プログラムのベンチマークテストを行った。開発したコードとそれぞれの計算コストは以下の通りである：(1) 厳密対角化にもとづくモンテカルロ法・コスト $O(N^4)$ (2) 厳密な漸化式評価によるカーネル多項式法にもとづくモンテカルロ法・コスト $O(N^3)$ (3) 厳密な漸化式評価によるカーネル多項式法にもとづくランジェバンダイナミクス法・コスト $O(N^2)$ 。なお N はシステムサイズ (局在スピンの総数) である。

3. 結果

上記 3 種のアルゴリズムでベンチマークを行い、互いにコンシステントな計算結果を与えることを確認した。またそれぞれの計算コストが期待されるスケーリングを示していることを確認した。

4. まとめ

伝導電子と局在磁気モーメントが相互作用するモデルを効率良く数値計算するためのプログラム開発を行った。厳密な漸化式評価によるカーネル多項式法にもとづくランジェバンダイナミクス法を含む、3 種のコードを開発し、ベンチマー

クを行ってプログラムの性能評価を行った。

5. 今後の計画・展望

さらに効率のよいアルゴリズムとして (4) 乱数を用いた近似的漸化式評価によるカーネル多項式法にもとづくランジェバンダイナミクス法 [計算コストは $O(N)$] が知られている。今後このアルゴリズムによりコード開発とベンチマークを行う計画である。