

二次元 DMRG の開発と強相関系への応用

京大基研¹、理研 AICS² 遠山貴己¹、新城一矢¹、曾田繁利²

密度行列繰り込み群法 (DMRG) は、低次元強相関電子系・スピン系の数値的研究手法のひとつとして知られており、とりわけ一次元系において多くの研究成果が報告されている。この手法を二次元系へ応用する試みも行われており、その代表的な手法のひとつとして、一次元系のアルゴリズムに長距離相互作用を導入する手法がある。しかしながら、この DMRG の二次元系への応用は、エンタングルメント・エントロピーの面積則からも知られる通り、巨大な計算コストが要求される。実際、二次元系への応用はそれほど多くなかったが、近年のコンピュータ技術の発展によりそれが現実的なものとなり、重要な研究成果もいくつか報告されている。

本研究では、京コンピュータを始めとする巨大な計算資源のもとで実行可能な二次元 DMRG のアルゴリズム開発を行った。特に、超並列計算機を念頭に、超並列二次元 DMRG の開発を行った。DMRG の Sweeping のプロセスに対する並列手法を独自に開発し (図参照)、プログラムに組み込んだ結果、高い並列化効率を示すことがわかった。その結果、京コンピュータでは、DMRG の打ち切り次数が数万のオーダーの計算が可能となっており、高精度の二次元強相関電子系・スピン系の計算が期待できる。

強相関系への応用として、現在、(1) Heisenberg 型相互作用と、スピン・軌道相互作用に起源を持つ Kitaev 型相互作用を持つハニカム格子上的量子スピン系の基底状態、(2) 三角格子ハバード模型の金属・絶縁体転移の研究を行っている。(1)では、第三近接までの反強磁性型 Heisenberg 相互作用と最近接 Kitaev 相互作用を含む模型に対する基底状態の相図を作成し、古典スピンによる同じ模型の相図との比較を行っている。そして、 Na_2IrO_3 で報告されているジグザグ型スピン構造が出現するパラメータ領域を明らかにしてきた。(2)では、同一サイト内クーロン相互作用 U を変化させながら電子の二重占有数を計算し、金属から絶縁体への変化が起こる U の値の決定や、電子のホッピング異方性を加えたときにその値がどのように変化するか検討している。これは、三角格子構造を持つ有機物質のスピン液体状態に理解に寄与すると期待される。

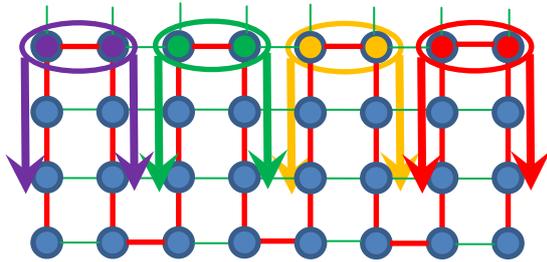


図 二次元 DMRG の sweeping に対する並列化のイメージ図。青丸は格子点を示す。通常の二次元 DMRG では、格子点を結ぶ赤線に沿って一次元型 sweeping を行う。並列化 sweeping では、赤線をいくつかの区間に分けてそれぞれ sweeping を行う。