

経路積分繰り込み群法のアルゴリズムとその応用

東京大学物性研究所 渡辺真仁 (Shinji Watanabe)

Institute for Solid State Physics,

University of Tokyo

現在の物性物理学の分野で最も重要な問題の一つに、量子ゆらぎと電子相関の効果が本質的な役割を果たす系の性質を解明することがあげられる。従来の予測を超える現象として見出された高温超伝導や、重い電子系、分数量子ホール効果などは、その効果が顕著に現れる代表的な系であり、ここ 20 年ほどの間、物性物理研究の中心的課題となってきた。

このような興味深い物性を理解するためのアプローチとして、現象の本質を抽出した有効モデルを構成して、その性質を明らかにすることがあげられる。電子の運動エネルギーと電子相関の効果を取り入れた最も簡単なモデルとして、いわゆるハバードモデルが、様々な理論的手法により研究されてきた。

厳密対角化法では、数値的に厳密に物理量を計算できるものの、格子点数が高々 20 程度という欠点がある。密度行列数値繰り込み群法は、数百格子点までの大きなシステムサイズを取り扱うことができるものの、主に 1 次元系で開放端境界条件の場合という、格子の形状に制約がある。また、量子モンテカルロ法は、1 次元系から 3 次元系まで十分大きな格子点数を精度よく評価することができるが、負符号問題の発生により、有意な結果が得られない場合がある。このように、少ない格子点数や格子の形状の制約、および負符号問題という困難が、ハバードモデルという、一見非常に単純なモデルの電子状態の理解を妨げていた。近年、これらの困難を克服する新たな数値計算の方法として、経路積分繰り込み群法というアルゴリズムが提案され、成功を収めつつある [1]。

経路積分繰り込み群法はフェルミオンのモデル一般に適用できるが、ここでは系を記述するハミルトニアンを H とする。経路積分の考え方によれば、任意の状態 $|\phi_0\rangle$ から出発して虚時間 τ 方向に時間発展させて、真の基底状態 $|\psi_g\rangle$ に到達することができる。すなわち、 $|\psi_g\rangle = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \exp[-\tau H]|\phi_0\rangle$ が成り立つ。経路積分繰り込み群法では、高々 L 個の基底で展開された変分波動関数

$$|\psi\rangle = \sum_{a=1}^L w_a |\phi_a\rangle \quad (1)$$

において、基底状態への射影を行いながら変分状態を最適化していき、 L を増やししながら制御された指針に基づいてヒルベルト空間の次元を厳密な値まで外挿するという考え方をとする。

量子モンテカルロ法の場合には、サンプリングを行う際に $|\phi_a\rangle$ と $|\phi_b\rangle$ の状態の組 ($a, b = 1, \dots, N_s$, N_s はサンプル数) が異なることによって負符号問題が発生したが、今の枠組みでは、変分波動関数が式 (1) のようにあらわに与えられているので、負符号問題が発生しない。

基底の数 L を増やして行き、厳密なヒルベルト空間の次元に達すれば、式(1)は、厳密な基底状態を与えるが、実際には何らかの指針に基づいて L の値を厳密な値（格子点数が大きい系では事実上、無限大とみなせる）に外挿する必要がある。そこで、エネルギーバリエーションの方法を用いる。つまり、真の基底状態と変分状態のエネルギーの差を $\Delta_E = \langle H \rangle - \langle H \rangle_g$ と書くと、変分状態が基底状態に対してよい近似になっている場合には、エネルギーバリエーション $\delta E = \frac{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2}{\langle H \rangle}$ との間に、 $\delta E \propto \Delta_E$ の関係が成り立つ [2, 3]。この性質を利用することにより、外挿を行うことができる。つまり、式(1)の変分波動関数において、基底の数 L を少しずつ増やしていき、エネルギーとバリエーションの線形部分を用いて $\Delta_E \rightarrow 0$ の極限への外挿を行えば、 N 格子点系における基底状態へ到達することができる。また、同時刻スピン相関関数や運動量分布関数などの物理量も、短距離相関の場合には、エネルギーバリエーションを用いて外挿を行えば、基底状態での値を求めることができる [3]。

この枠組みにおいて出現する誤差は2種類存在することに注意する。一つは、各格子点の系においてバリエーション外挿による誤差であり、もう一つは有限サイズのデータを熱力学極限へ外挿する際に生じる誤差である。前者は経路積分繰り込み群法に特有の誤差であり、後者は有限系の数値計算に普遍的に現れる誤差である。経路積分繰り込み群法による熱力学極限の物理量の誤差は、上記2つの誤差からなる。また、量子モンテカルロ法のようにサンプリングを行わないので、統計誤差は一切生じないことを付記しておく。

上記のアルゴリズムを検証するため、 4×4 までの格子点の系における厳密対角化法、および 6×6 や 8×8 格子点の系での量子モンテカルロ法と、基底状態エネルギーを比較した。その結果、0.3%以下の相対誤差で基底状態エネルギーが一致することが確認され、大きなシステムサイズにおいても有効な計算方法であることが示された [2, 3]。

経路積分繰り込み群法の特徴を以下にまとめる。

- 1) 負符号問題が存在しない。そのため、格子の形状、及び、境界条件に制約がない。つまり、1次元系から3次元系まで、周期的、開放端、いずれの境界条件でもフェルミオン系のモデルに適用できる。
- 2) 変分法に基づいたバリエーションによる物理量の外挿という指針が確立しているため、制御された方法に基づいて基底状態に到達できる。
- 3) 基底の数を1から増やしていくプロセスは、ハートリーフォック法の解から出発して、電子相関や量子ゆらぎの効果を系統的に取り込んでいくというプロセスに対応する。また、初期状態として任意の変分波動関数を与えることができ、基底の数を増やして得られた基底状態と比較することで、初期状態に含まれていなかったゆらぎの効果を定量的に議論することができる。
- 4) 変分波動関数があらわに与えられているので、同時刻相関関数などの基底状態に関する物理量を計算することができる。

経路積分繰り込み群法を用いて、次近接ホッピングをもつ正方格子 [4]、および異方的三角格子 [5] のハーフフィリングの基底状態の相図が決定された。注目すべき結果は、常磁性金属相、反強磁性絶縁体相の間に、非磁性絶縁体相が出現するという結果である。これはハートリーフォック法では予想されていなかった結果であり、電子相関と磁氣的フラス

トレーションの効果を正確に取り入れたこのアルゴリズムの出現により、はじめて見出されたものである。この非磁性絶縁体相の性質を明らかにするため、種々の相関関数を計算し、熱力学極限に外挿した結果、ダイマー秩序や、ブラケットシングレット秩序、スタaggeredフラックス秩序、電荷秩序などの、並進対称性を破った状態は実現していないことがわかった [6]。この結果は、非磁性絶縁体相においてバンド絶縁体と断熱的につながらない、純粋なモット絶縁体状態が実現していることを示唆しており、空間次元2次元以上の系で対称性の破れを伴わないモット絶縁体を示した最初のはっきりした例である。

ごく最近、経路積分繰り込み群法は新たに2つの方向に発展した。一つは、量子数を指定して、その部分空間に対して基底状態への射影を行う、量子数射影のアルゴリズムであり [7]、もう一つは、大正準分布のもとで基底状態への射影を行う、大正準分布のアルゴリズムである [9]。

量子数射影のアルゴリズムでは、全スピンや運動量などの量子数を指定して経路積分繰り込み群法を実行することにより、スピン励起の分散を求めることが可能となった [7]。また、量子数により指定された部分空間の基底状態を求めることにより、精度の向上が実現された。このアルゴリズムにより、ハーフフィリングの正方格子および三角格子の基底状態で実現する、非磁性絶縁体相において熱力学極限でスピギャップが閉じていることが確認された [8]。この結果は、非磁性絶縁体相においてバンド絶縁体と断熱的につながらない、純粋なモット絶縁体状態が実現していることを示唆する上の結果を支持するものである。

最近、この理論的予言を支持する物質が相次いで報告され、注目を集めている。一つは、有機化合物 κ -(ET)₂Cu₂CN₃ [10] であり、もう一つはグラファイトに吸着された ³He である [11]。ともに系を特徴づける交換相互作用の百分の一程度の低温まで磁気秩序を示さない、ギャップレスの状態が実現していることが確認されている。

また、大正準分布のアルゴリズムでは、入力パラメータとして化学ポテンシャルを与え、出力パラメータとして電子数を求めるので、物理量の化学ポテンシャル依存性を精度よく求めることができる [9]。これにより、バンド幅、フィリング、格子構造を制御パラメータとする電子系を同一の枠組みで統一的に取り扱うことが可能となった。この方法を正方格子ハバード模型に適用することにより、化学ポテンシャルとクーロン相互作用のパラメータ空間で基底状態の相図を決定し、V字型のモット絶縁体相が出現することが明らかとなった。V字型の相境界の頂点では、1次のバンド幅制御モット転移が生じるのに対し、V字型のへりの部分で実現するフィリング制御のモット転移では、臨界揺らぎを伴った連続転移が生じる。この両者の対照的な振る舞いは、相図の金属絶縁体転移の境界線の傾きと熱力学量との間に成り立つ一般的な関係式を導くことにより理解することができる。

経路積分繰り込み群法は、フェルミオン系を取り扱うための新しい数値計算のアルゴリズムであり、量子モンテカルロ法の欠点であった負符号問題が存在しないという大きな特徴に加えて、境界条件や相互作用の形（短距離、長距離相関等）の詳細によらずに適用できるという、幅広い汎用性をもっている。今後の展望としては、未解明の基礎的模型へのこの方法の適用があげられる。特に、空間次元2次元以上の系では、量子モンテカルロ法の負符号問題が発生しない特殊なパラメータ領域のほかは、基礎的模型の基底状態でさえ

も、ほとんど理解されていないのが現状であり、新たな理論的手法の出現が切望されていた。また、現実物質の物性予測や新物質の探索を行うための物質科学のシュミレーションの実現へ向けて、第一原理的計算手法とこの方法を融合し、新たな計算方法を確立することも、今後の重要な課題である。

本研究は、今田正俊教授（東京大学物性研究所）と水崎高浩助教授（専修大学）との共同研究により行われた。ここに紹介した研究の一部は科研費若手研究(B)「経路積分繰り込み群法による強相関電子系の研究」の援助を受けて行われたものであることを付記して謝意を表す。

References

- [1] 経路積分繰り込み群法の最近の発展までを含めた解説として、渡辺真仁、水崎高浩、今田正俊: 固体物理, **39** (2004) 9月号 pp.565-576.
- [2] M. Imada and T. Kashima: J. Phys. Soc. Jpn. **69** (2000) 2723.
- [3] T. Kashima and M. Imada: J. Phys. Soc. Jpn. **70** (2001) 2287.
- [4] T. Kashima and M. Imada: J. Phys. Soc. Jpn. **70** (2001) 3052.
- [5] H. Morita, S. Watanabe and M. Imada: J. Phys. Soc. Jpn. **71** (2001) 2109.
- [6] S. Watanabe: J. Phys. Soc. Jpn. **72** (2003) 2042.
- [7] T. Mizusaki and M. Imada: Phys. Rev. B **69** (2004) 125110.
- [8] M. Imada, T. Mizusaki and S. Watanabe: preprint(cond-mat/0307022).
- [9] S. Watanabe and M. Imada: J. Phys. Soc. Jpn. **73** (2004) 1251.
- [10] Y. Shimizu, K. Miyagawa, K. Kanoda, M. Masato and G. Saito: Phys. Rev. Lett. **91** (2003) 107001.
- [11] R. Masutomi, Y. Karaki and H. Ishimoto: Phys. Rev. Lett. **92** (2004) 025301.