

強相関電子系のための新しい計算手法

----- 経路積分繰り込み群法-----

物性研究所 今田 正俊

強相関電子系をシミュレートする計算手法はいくつか知られている。補助場量子モンテカルロ法は現在のところ空間2次元以上のハバード模型のような理論模型に対して最も高い精度の結果を与える手法となっていて、最適化試行関数を用いた計算結果は、キャリアドーピングされたモット絶縁体の性質を解明するのに貢献している。しかしながら、方法論上、場合によって負符号問題の困難があることが知られていて、万能ではない。ループアルゴリズムなどの量子モンテカルロ手法も負符号の困難を克服できていない。また密度行列繰り込み群の方法は形状が1次元的な系に対しては強力であり、精度の高い計算が可能であるが、一方空間次元2次元以上の場合や開放端境界条件でない場合には、満足な結果を出すことができないという困難を抱えている。

我々は、2次元以上の系や任意の形状で使えて、負符号問題の困難のない新たな方法を開発し応用を進めた[1]。この方法では最適化された基底状態波動関数が数値的に求められたヒルベルト部分空間の基底の線形結合として与えられる。この部分空間の基底は、計算機的能力で許される範囲内でヒルベルト空間の次元 L を制限しながら、数値的に選ばれる。経路積分で繰り込みの操作を繰り返しながら、高エネルギー状態を捨て、低エネルギー状態へ射影を進めることによってより良い基底状態への近似が得られる。我々の繰り込み操作では、基底の選択だけでなく、その一次結合の係数も最適化される。

この方法の特徴は以下の点にまとめられる。

研究会報告

- (1) ヒルベルト空間の次元を計算機で扱える範囲に制限し、その制限された部分空間内で基底状態を近似する最良の変分波動関数を数値的に求めるので変分原理を満たしかつ波動関数の形が具体的に与えられる。このため負符号問題の困難はない。
- (2) ハートリーフォック近似などの変分法の系統的な改良という性格を持つ。
- (3) 経路積分を行いながら、エネルギーの高い状態を捨て、低エネルギー状態へ順次射影していくため繰り込み群としての性格を持つ。

またより精度の高い基底状態を得るために、有限の L で得られた結果を L 無限大に外挿する手法も開発している。基底状態は有限の L で得られた結果を、計算で得られるエネルギーの分散を横軸にとって外挿することによって L 無限大への外挿が行なわれる、これは正しい基底状態ではエネルギー分散がゼロであり、そこからのずれはエネルギー分散に対して線形に依存することを利用している。

ハバード模型に応用した結果、負符号問題のないハバード模型の場合に、量子モンテカルロ計算の計算精度と同程度かそれを上回り、負符号問題のある場合には、従来の手法では全く計算できなかった場合にも応用できることがわかった。例えば、ハバード模型で、トランスファース $t=1$ 、オンサイトの斥力相互作用 $U=4$ の場合、得られるエネルギーは、 6×6 の周期格子で電子数が 34 のとき、 -0.9283 (量子モンテカルロ計算での結果は -0.925 ± 0.003)、 8×8 の周期格子で電子数が 62 のとき、 -0.9031 (量子モンテカルロ計算での結果は -0.902 ± 0.004)、 10×10 の周期格子で電子数が 100 のとき、 -0.8646 (量子モンテカルロ計算での結果は -0.867 ± 0.003) などとなっている。

今後、最適化をより良く進めるために、繰り込みの過程で生じる、準安定状態への凍結を避けるために、ランダム系で用いられている遅い緩和を避けるための手法、例えば多重ア

ンサンブル法、交換アンサンブル法などの手法との組み合わせは興味深い課題である。

この経路積分繰り込み群法を用いて、今後フラストレーションのある場合など従来の方法で扱えなかった量子系への応用が進むと期待される。

[1] M. Imada and T. Kashima: J. Phys. Soc. Jpn, 69(2000) 2723.