

セミナーのご案内

Continuous-time Monte Carlo methods for multi-orbital quantum impurity problems: matrix product states and improved sampling

品岡 寛氏

Institute for Theoretical Physics,
Eidgenössische Technische Hochschule (ETH) Zürich

4月4日(金) 16:30-
理学研究科合同B棟743号室

強相関電子系の理解を目指して、盛んに理論研究が行われている。その中で、動的平均場近似法(DMFT)は、広く用いられる理論的枠組みの1つである。DMFTでは、格子上の電子系の問題は、動的な平均場中の量子不純物問題に帰着される。DMFTは当初1バンド・ハバード模型に対して提案されたが、現実の物質のより良い記述を目指して、クラスター・多軌道型の不純物への拡張が行われている。

近年、強結合極限からの摂動展開に基づく連続時間モンテカルロ法(CT-QMC)が、量子不純物問題の有効な解法として提案された[1]。この手法は、強相関・低温領域での摂動展開の収束が速いという利点から広く用いられている。しかし、多軌道量子不純物問題の場合には、特殊な系を除き、計算時間が軌道数に関して指数関数的に増大するという困難を抱えている。そのため、現実的な計算は5軌道系に留まっているのが現状である(スピン自由度を含み10自由度) [2]。多軌道超伝導体、4f電子系など興味深い系へDMFT法が盛んに応用される中、より効率的な多軌道量子不純物問題の解法の開発が急務である。

本発表では、多軌道系へのCT-QMCの適用を目指した手法開発の結果を紹介する [3]。前半では、行列積表現(matrix products states)に基づく変分波動関数理論とCT-QMCの複合手法を提案し、その効率を評価する。計算時間は軌道数に対して冪的であり、12軌道以上において従来の方法に比べて速度面で有利になることを示す。後半では、改良されたモンテカルロ・サンプリング法を紹介する。この手法は、強結合展開に基づくCT-QMC法すべてに適用可能であり、低温での自己相関時間を改善する。5軌道模型($U=6$, $J=1$, $\beta=50$)の計算結果を示し、従来の方法[2]に比べて自己相関時間が2桁以上短縮されることを示す。最後に、今後の手法・プログラム開発の展望を議論する。

[1] P. Werner, A. Comanac, L. de' Medici, M. Troyer, and A. J. Millis, Phys. Rev. Lett. **97**, 076405 (2006).

[2] A. M. Läuchli and P. Werner, Phys. Rev. B **80**, 235117 (2009).

[3] H. Shinaoka, M. Dolfi, M. Troyer, and P. Werner, in preparation.

連絡先: 理学研究科物理学専攻 石原純夫
TEL.: (内)6436
e-mail: ishihara@cmpt.phys.tohoku.ac.jp