

研究会「密度行列繰り込み群法を用いた物性研究の新展開」報告

開催日時: 2008年12月16日~2008年12月17日

開催場所: 京都大学基礎物理学研究所 パナソニック国際交流ホール

参加者数: 26名

【研究会の目的・趣旨】

密度行列繰り込み群法 (DMRG) は、1993年の S. R. White による提案以来、一次元スピンスピン系・電子系の基底状態を研究する数値的研究手法として物性理論の発展に大きく寄与してきた。現在では、一次元スピンスピン系・電子系の研究には欠かせない手法となっている。最近では基底状態だけでなくより複雑な物理的性質に対してこの DMRG が応用されている。動的性質を計算するための動的 DMRG、有限温度での性質を扱う有限温度 DMRG、非平衡状態の記述が可能な時間依存 DMRG などが挙げられる。それらを用いた一次元電子系の一粒子グリーン関数や動的二体相関関数の解析、一次元近藤格子模型の熱力学的性質、量子ドットなどのナノ構造体でのコンダクタンスの解析などのほか、グラフェンなどの二次元電子系への拡張も行われている。さらに、DMRG の波動関数とエンタングルメントとの関連も議論され量子情報とのかかわりも指摘されている。

このような状況を踏まえ、日本国内で DMRG を用いて成果を挙げている第一線の研究者を集め、最近の DMRG の発展について討論するとともに、DMRG をより複雑な多自由度系へ適用するための新しい方向性について議論するための研究会を開催する。具体的には、動的 DMRG、有限温度 DMRG による一次元強相関電子系の研究、複雑な相互作用を持つ一次元スピンスピン系への適用、二次元電子系や光学格子などへの DMRG の適用、電場・光励起による非平衡状態のダイナミクスなどのトピックスを取り上げる。

【研究会の内容】

研究会では、30分講演15件、15分講演1件の計16件の講演が二日間にわたって行われた。DMRG という手法を共通点とした研究会のため、対象としている系は多岐にわたっている。そのため、討論が低調になるのではと危惧していたが、そのようなことはなく講演中にも質問が飛びだし活発な討論が行われた。DMRG は基本的には強相関電子系に有効な手法であるので、対象とする系は異なってもその物理の本質は共通であることがそのバックグラウンドにあると思われる。DMRG の手法としての最近の進展に対する講演もあり、多くの参加者にとっては今後の研究に役立つ情報が豊富な研究会であった。講演者は全員いわゆる若手研究者 (若干の例外もあるが) であり、博士課程の学生による講演も3件あった。若い世代の研究者が活躍している分野であるといえる。

以下に研究会の内容について簡単にまとめる。系の時間発展を DMRG により調べた研究

の講演が最初に行われた。松枝（仙台電波高専）は電子・格子相互作用まで含む一次元モット絶縁体のパルス励起された励起状態の時間発展を調べた。そして、最近の実験データとの対比を行った。岡（東大理）は、モット絶縁体の電場誘起金属絶縁体転移や界面誘起金属絶縁体転移を時間依存 DMRG を用いて解析した結果について報告した。時間依存 DMRG をより複雑な複数軌道を含むモデルに適用する試みが大西（原子力機構）によって報告された。桐野（東大物性研）は有限バイアス下の量子ドット系に時間依存 DMRG を適用し、微分コンダクタンス等の物理量を議論した。非平衡状態を時間依存 DMRG で解析する研究方向は今後様々な系に適用されていくものと思われる。

多くの問題では、全粒子数が保存されている系を扱っているが、中には粒子数が非保存となる問題も存在する。丸山（阪大基礎工）はそのような粒子数非保存の場合の DMRG の定式化について紹介し、鎖間相互作用を平均場で扱ったハバード模型の研究について報告した。DMRG を強磁場中二次元電子系の量子ホール状態に適用した講演が柴田と東（ともに東大理）によって行われた。特に東は、最近話題となっているグラフェンの量子ホール状態を DMRG で解析しており、興味深い結果が得られている。

光学格子上で実現されているフェルミ原子気体の研究も DMRG を用いて活発に研究されている。奥村（原子力機構）は、トラップされた 3-leg 三角格子系を解析し、トラップの中心部分が、スピン 1/2 三角格子ハイゼンベルグ模型と同様な磁化曲線の 1/3 プラトーを示すことを明らかにした。山本（阪大工）は一次元光学格子上のフェルミオン原子のダイナミクスについて時間依存 DMRG を用いて解析し、局所スピン揺らぎの時間発展などについて議論した。手塚（東大理）はフェルミオン原子気体や電子・格子相互作用する電子系のペア凝縮について、DMRG アルゴリズムの工夫についても触れながら報告した。

スピン系に対する DMRG の適用に関しては膨大な研究が蓄積されているが、奥西（新潟大理）はフラストレート系（ジグザグハイゼンベルグ鎖）に着目し、カイラル秩序を含めた磁気相図をベクトル・カイラリティの一体期待値を直接計算することで決定した。引原（北大理）は開放端境界条件で計算された DMRG の相関関数からボゾン化法を援用することで朝永・ラッティンジャー液体のパラメータを正確に決定できることを示した。堀田（京産大）は系の並進対称性の破れを正確に見極めるためには、さまざまな条件で相関関数を計算することが必要であることを強調した。その例として一次元近藤格子模型の計算結果を示した。

DMRG の手法開発や計算アルゴリズムの開発という観点からの講演もあった。曾田（京大基研）は多項式展開法を用いて低温領域で効率的に静的・動的物理量を計算できる新手法を報告した。山田（原子力機構）は DMRG の並列化の試みについて議論し、二次元ハバード模型に対する大規模計算の結果について報告した。10 ペタフロップス級の次世代スーパーコンピュータが数年後には実現される現状においては、DMRG の並列計算をいかに効率よく行うかが重要なポイントとなってくるであろう。研究会の最後に西野（神戸大理）による講演があり、ハミルトニアンの変形という考え方を用いると、例えば一次元ハ

イゼンベルグ模型のサイズ依存性を効率よく評価できることを報告した。これはいろいろな場面で有用な考え方となる可能性がある。

以上のように本研究会で対象とした系は多岐にわたっており、現在 DMRG を用いて精力的に研究を進めている研究者が一堂に集うことができた。よくまとまった講演、活発な討論を通じて、本研究会の目的であった「最近の DMRG の発展について討論するとともに、DMRG をより複雑な多自由度系へ適用するための新しい方向性について議論する」は十分達成できたと考えられる。今後、この研究会を土台として DMRG を手法として研究を進めている若手研究者を中心とした新しいコミュニティーが形成されることが望まれる。

研究会プログラムおよび講演のアブストラクトを以下に掲載する。また、発表のプレゼンテーションファイルも基研ホームページ

<http://www.yukawa.kyoto-u.ac.jp/contents/seminar/past-ws.html>

から閲覧可能なので参考にさせていただきたい。

【世話人】

遠山 貴己（京都大学基礎物理学研究所）（代表）

柴田 尚和（東北大学理学研究科）

町田 昌彦（日本原子力研究開発機構システム計算科学センター）

松枝 宏明（仙台電波工業高等専門学校）