量子モンテカルロ法によるディラック電子系の 大規模高精度シミュレーション

大塚雄一

理化学研究所 計算科学研究機構 量子系物質科学研究チーム

柚木清司 RIKEN-AICS Sandro Sorella SISSA, Italy



http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/sx_ace_intro/



大阪大学 サイバーメディアセンター Cyber HPC Symposium (2015年3月15日)

自己紹介

~ 京, SX-ACE

- 平成24年度一般利用課題
 「強相関高温超伝導体に対する第一原理量子モンテカルロシミュレーション」
 柚木清司、Sandro Sorella、大塚雄一 (京, 9,535,488 ノード時間)
- 平成26年度 一般利用課題(継続)
 「強相関高温超伝導体に対する第一原理量子モンテカルロシミュレーション」
 柚木清司、Sandro Sorella、大塚雄一 (京, 6,985,728 ノード時間)
- 平成26年度 一般利用課題
 「量子モンテカルロ法による強相関2次元ディラック電子系の物性解明」
 大塚雄一、柚木清司、Sandro Sorella (SX-ACE, 占有 1,600,000 ノード時間)

~ ポスト京

- 平成25年度 文部科学省委託業務
 「アプリケーション分野からみた将来のHPCIシステムのあり方の調査研究」
- 平成26年~ 理研内作業チーム(エクサ)

Outline

1. 研究の背景

- 強相関電子
- モデル化: ハバード模型

- 2. 研究手法
 - 量子モンテカルロ法
 - SX-ACE上でのベンチマーク結果

- 3. 研究成果
 - ハニカム格子ハバード模型の基底状態相図 ~ 京
 - モット転移の臨界性の解明

~ SX-ACE, 京

物性物理学の守備範囲

size (cm)	target	mechanics	category
10 ⁻³³	the early stages of the Big Bang	rela	cosmology (gr-qc)
10 ⁻¹⁶ 10 ⁻¹³	weak interaction atomic nucleus	quantu	particle physics nuclear physics
10 ⁻⁸	atom	В	×.
10 ⁻⁷	molecule	sta	cond-mat
10-4	DNA	atist	icana in ar
10 ⁰	apple	tica	biophysics
10 ²	human		
10 ⁹	earth		astrophysics
10 ¹⁵	solar system	rela	ustrophysics
10 ²⁸	universe	tivity	cosmology

- ・ 物質の性質(物性)をミクロなレベル(原子・電子)から明らかにする
- 物理法則(量子力学、統計力学)は既知
 - 原子の種類 ~ 100 <u>多数</u>の構成要素間の<u>相互作用</u>により
 アボガドロ数 ~ 10²³ 物質の多様性が生じる

強相関電子系 ~ クーロン相互作用している多電子系

物性基礎論的として:

• 量子多体問題の典型例

- ・多彩な物理現象:「相転移」
 - "More is different." P. W. Anderson (1967)
- 計算科学的にもchallenging
 多くの場合は「手」で解けない

<u>物質科学として</u>:

- 高温超伝導(High-Tc) - 銅酸化物
- 磁性 - 遷移金属酸化物
- **誘電性** - 分子性導体

・交差相関物質

 - 巨大磁気抵抗効果
 - マルチフェロイック材料

 ・臨界相制御

 - 光誘起相転移

 ・生体物質

- ミオグロビン、鉄-硫黄クラスター

銅酸化物高温超伝導体の発見(1986年秋)



・従来理論(BCS)の限界を超えた転移温度(Tc)

1990年



結晶中の電子: バンド絶縁体



バンド理論:

結晶の周期ポテンシャルにより Ne/N=2の場合に絶縁化(バンド絶縁体)

> フィリング(充填度): n = Ne/N = 2

> > Ne: 電子数 N:格子数



電子間反発力(クーロン力)が強い場合: 二重占有状態(个↓)は禁止される

フィリング(充填度): n = Ne/N = 1 → バンド理論では金属



ハバード模型 ~ 強相関電子系の基礎モデル

 $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{t} + \mathcal{H}_{U}$ $\mathcal{H}_{t} = -t \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow < i,j>} \sum_{(c_{i\sigma}^{\dagger}c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^{\dagger}c_{i\sigma})} \sim$ 運動エネルギー $\mathcal{H}_{U} = U \sum_{i} n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} \sim \phi - \Box \sim$ 斥カ



☑ 量子性 $\mathcal{H}_{t}\mathcal{H}_{U} \neq \mathcal{H}_{U}\mathcal{H}_{t}$

✓ 多体問題 $n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} \neq n_{i\uparrow} \langle n_{i\downarrow} \rangle$

<u>模型のパラメータ</u> U/t:相互作用の強さ n(=1-x):フィリング T/t:温度

"高温超伝導相図": Experiments vs. Theory



⇒ 厳密に(i.e., 数値的に)明らかになっていることは少ない

Outline

1. 研究の背景

- 強相関電子
- モデル化: ハバード模型

2. 研究手法

- 量子モンテカルロ法
- SX-ACE上でのベンチマーク結果

3. 研究成果

- ハニカム格子ハバード模型の基底状態相図
- モット転移の臨界性の解明

数值的研究手法

▶ 厳密対角化法(ランチョス法)

○ 適用範囲が広い

× 大きなサイズを扱う事が困難(N~20サイト)→ "解像度"が低い

密度行列繰り込み群法
〇 大規模計算(N~1,000サイト)が可能
※ 2次元以上の系での計算は一般に困難

▶ 量子モンテカルロ法(QMC)

- 大規模計算(N~1,000サイト)が可能
- 2次元以上の系にも適用可能
- × 負符号問題が生じる模型では困難(NP-hard)

量子モンテカルロ法

QMC = 量子-古典対応 + 重み付きサンプリング

補助場量子モンテカルロ法

 $Z = \operatorname{Tr} e^{-\beta(\mathcal{H}_{t} + \mathcal{H}_{U})}$ 経路積分表示 $= \operatorname{Tr} \prod^{L} e^{-\Delta \tau \mathcal{H}_{t}} e^{-\Delta \tau \mathcal{H}_{U}}$ 自由電子系に関する積分 $= \sum \operatorname{Tr} \prod D_{\uparrow l} D_{\downarrow l}$ 補助場 \rightarrow $\{s_{li}=\pm 1\}$ l=1 $= \sum \det M_{\uparrow} \det M_{\downarrow}$ $\{s_{li}=\pm 1\}$

補助場自由度(2^{NL}) → MC計算



$$\begin{aligned} \frac{\langle \langle \hat{O} \rangle \rangle}{\mathrm{Tr}_{\{s_{li}\}} \langle \hat{O} \rangle \det M_{\uparrow} \det M_{\downarrow}} \\ \frac{\mathrm{Tr}_{\{s_{li}\}} \langle \hat{O} \rangle \det M_{\uparrow} \det M_{\downarrow}}{\mathrm{Tr}_{\{s_{li}\}} \det M_{\uparrow} \det M_{\downarrow}} \\ = \lim_{N_{\mathrm{MC}} \to \infty} \frac{1}{N_{\mathrm{MC}}} \sum_{\mathrm{MC}} \langle \hat{O} \rangle \end{aligned}$$

 $M_{\sigma} = I + B_{\sigma L} B_{\sigma L-1} \cdots B_{\sigma 1}$ $B_{\sigma l} : N \times N$ 行列

重みの計算: 多数の行列積 → dgemm !!

正規直交化→ dgetrf, dgetri



- ✓ 80% = 102GFLOPS
- ✓ 大規模系で性能向上
- Embarrassingly parallel (Capacity computing):
 - 統計誤差は1/√Nで減少
 - 20,000 $/- \ddot{F} \rightarrow 1.5 PFLOPS$

性能評価: SX-ACE



✓ 85% = 216 GFLOPS
 ✓ V. Op. Ratio ~ 99.5%
 ✓ N~1000程度でも80%近い性能

性能評価: 京 vs. SX-ACE



✓ 実行時間で2倍以上のスピードアップ

Outline

1. 研究の背景

- 強相関電子
- モデル化: ハバード模型

2. 研究手法

- 量子モンテカルロ法
- SX-ACE上でのベンチマーク結果

3. 研究成果

- ハニカム格子ハバード模型の基底状態相図
- モット転移の臨界性の解明

ハニカム格子 ~ 強相関電子系の舞台として

✓ 弱結合極限(U/t≪1) ⇒ 常磁性金属
 ✓ 強結合極限(U/t≫1) ⇒ 反強磁性絶縁体

▶ U_c/t > 0のモット転移を直接的に調べることが可能
 ▶ 強い量子効果 (∵2次元で最小の配位数)





ハニカム格子上のハバード模型 ~ 1992年

Europhys. Lett., 19 (8), pp. 699-704 (1992)

Semi-metal-Insulator Transition of the Hubbard Model in the Honeycomb Lattice.

S. SORELLA(*) and E. TOSATTI(*)(**)

Abstract. – Using quantum Monte Carlo and finite-size scaling for the Hubbard model, we find evidence of a zero-temperature transition between the nonmagnetic semi-metal and an antiferromagnetic insulator in the 2D honeycomb lattice for a nontrivial value of $U/t = 4.5 \pm 0.5$. The corresponding transition in Hartree-Fock mean field is at U/t = 2.23, which indicates the importance of quantum fluctuations. This represents the first example of Mott-Hubbard transition in a 2D bipartite lattice. Similar transitions are predicted for special lattices in higher dimensions, in particular for the 3D diamond lattice.

ハニカム格子上のハバード模型 ~ 2010年



量子力学的効果により絶対零度まで秩序化しない "スピン液体"相の存在を示唆

Meng et al., Nature (2010) (cited by over 220 articles)

スピン液体相の探索

□ 実験: 幾何学的フラストレーションを持つ物質群で発見されている

k-(ET)₂Cu₂CN₃

Shimizu, *et al.*, PRL (2003). Kurosaki, *et al.*, PRL (2005).

EtMe₃Sb[Pd(dmit)₂]₂

Itou, et al., PRB (2008).



□ 理論: やや人工的な模型で存在が示唆

- dimer model on the triangular lattice Fendley, et al., PRB (2002).
- Kitaev model

Kitaev, Ann. Phys. (2006)

⇒ 研究の目的:

フラストレーションのない現実的な模型であるハニカム格子においてスピン液体が存在しうるかは非自明、詳細な検討が必要

研究対象: ハニカム格子上のハバード模型

 $H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \left(c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{j,\sigma} + \text{h.c.} \right) + U \sum_{i} n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}$



of sites: N = 2 L² ~ 2,592 (world record)

cf. 先行研究: *N* ≤ 648 Meng *et al.*, Nature (2010)

研究手法:補助場量子モンテカルロ法

□ 原理: 補助自由度を導入することで自由電子系の模型にマップ

□ 統計誤差の範囲内で近似を含まない

□ 基底状態、有限温度ともに可能

□ 対称性によっては<u>負符号問題</u>が存在しない (負符号問題がある場合は一般にNP困難)

□ O(N³L)のアルゴリズム; 大規模な格子上で計算可能 Blankenbecler et al. Phys. Rev. D (1981)



✓ 小さいが有限の反強磁性秩序
 ⇒ Absence of spin liquid phase



結論: ハニカム格子上ハバード模型の基底状態相図



- Dirac電子系: 量子揺らぎが顕著なため有限サイズ効果が大きい

→ 大規模=高精度計算の必要性を示す格好の舞台

- 先行研究(N=648)に対して、問題規模で4倍(N=2,592)

~計算規模で4³=64倍以上

- スピン液体相に関して数値的に明確な反証を与えた

Outline

1. 研究の背景

- 強相関電子
- モデル化: ハバード模型

2. 研究手法

- 量子モンテカルロ法
- SX-ACE上でのベンチマーク結果

3. 研究成果

- ハニカム格子ハバード模型の基底状態相図
- モット転移の臨界性の解明

その後の展開

Pinning the Order: The Nature of Quantum Criticality in the Hubbard Model on Honeycomb Lattice

Fakher F. Assaad^{1,3} and Igor F. Herbut^{2,3}

¹Institut für Theoretische Physik und Astrophysik, Universität Würzburg, Am Hubland, D-97074 Würzburg, Germany ²Department of Physics, Simon Fraser University, Burnaby, British Columbia V5A 1S6, Canada ³Max-Planck-Institut für Physik Komplexer Systeme, Nöthnitzer Strasse 38, 01187 Dresden, Germany (Received 1 May 2013; published 26 August 2013)

Assaad, Herbut, PRX (2013)

Moreover, Ref. [2] shows that extrapolating from significantly larger system sizes would suggest almost complete disappearance of the spin liquid from the phase diagram. <u>The latter conclusion is reinforced here</u>, where we find excellent data collapse and identical finite-size scaling of both the single-particle gap and staggered magnetization,



その後の展開:モット転移の臨界性

Pinning the Order: The Nature of Quantum Criticality in the Hubbard Model on Honeycomb Lattice

Fakher F. Assaad^{1,3} and Igor F. Herbut^{2,3}

¹Institut für Theoretische Physik und Astrophysik, Universität Würzburg, Am Hubland, D-97074 Würzburg, Germany ²Department of Physics, Simon Fraser University, Burnaby, British Columbia V5A 1S6, Canada ³Max-Planck-Institut für Physik Komplexer Systeme, Nöthnitzer Strasse 38, 01187 Dresden, Germany (Received 1 May 2013; published 26 August 2013)



FIG. 5. Data collapse for the magnetization presented in Fig. 3. The exponents are taken for the ϵ expansion of Ref. [6]. (a) The crossing point pins down the value of U_c . (b) The data collapse, using $U_c/t = 3.78$.

グラフェンの物理は素粒子物理のGross-Neveu模型と同じ?

その後の展開:モット転移の臨界性

Fermionic quantum criticality in honeycomb and π -flux Hubbard models

Francesco Parisen Toldin, Martin Hohenadler, and Fakher F. Assaad Institut für Theoretische Physik und Astrophysik, Universität Würzburg, Am Hubland, D-97074 Würzburg, Germany

Igor F. Herbut

Department of Physics, Simon Fraser University, Burnaby, British Columbia V5A 1S6, Canada

arXiv: 1411.2502

Fermionic quantum critical point of spinless fermions on a honeycomb lattice

Lei Wang¹, Philippe Corboz^{1,2} and Matthias Troyer¹ ¹ Theoretische Physik, ETH Zurich, 8093 Zurich, Switzerland

arXiv: 1407.0029

Fermion-sign-free Majarana-quantum-Monte-Carlo studies of quantum critical phenomena of Dirac fermions in two dimensions

Zi-Xiang Li,¹ Yi-Fan Jiang,^{1,2} and Hong Yao^{1,*}

¹Institute for Advanced Study, Tsinghua University, Beijing, 100084, China

arXiv: 1411.7383

ディラック電子系を構成する2つの格子模型



0

π

k_v

スピン液体相

<u>honeycomb</u>

Meng et al., Nature (2010)



No broken symmetry but a full gap for 3.4 < U/t < 4.3

<u>π-flux</u>

Chang, Scalettar, PRL (2012)



non-magnetic insulator for 5.6 < *U/t* < 6.6 (gapless)

→ 中間状態として非磁性絶縁相?

スピン液体相の再検討



35



Dirac電子系でのMott転移は負符号問題が生じないが、顕著な量
 子揺らぎに起因する有限サイズ効果のため、秩序の有無を判定するのが困難な典型例

解析手法: 有限サイズスケーリング理論

有限系の計算結果から、無限系における相転移点や臨界指数を評価する方法

$$m_{\mathbf{s}}(u,L) = L^{-\beta/\nu} \left(1 + cL^{-\omega}\right) f_m(uL^{1/\nu})$$
$$u = (U - U_{\mathbf{c}})/U_{\mathbf{c}}$$

Uc/t : 相転移点 β, ν, ω: 臨界指数

- シミュレーションは有限系でしか行えない
- 有限系では相転移(対称性の自発的破れ)は起こらない

cf. アボガドロ数 ~ 10²³

有限系でのデータ



note: 外挿式は自明ではない

臨界指数の決定



✓ Uc/tは異なるが同じ臨界指数

⇒ 普遍性クラスの存在

運動量分布関数 ~ 金属-絶縁体転移



研究成果のまとめ

Part.1: 基底状態相図の精密決定

✓ Absence of the spin liquid phase



Part.2: モット転移の臨界性の解明

✓ Presence of the universality class in interacting Dirac fermions



Sorella, YO, Yunoki, Sci. Rep. (2012) YO, Yunoki, Sorella, in preparation

Thank you !

