

Title	強相関電子系の有限温度計算手法の開発と励起子絶縁体への応用
Sub Title	Development of finite-temperature calculation method for strongly correlated electron systems and its application to excitonic insulators
Author	杉本, 高大(Sugimoto, Koudai)
Publisher	慶應義塾大学
Publication year	2020
Jtitle	学事振興資金研究成果実績報告書 (2019. )
JaLC DOI	
Abstract	<p>電子が互いに強く相互作用する強相関電子系を対象に、有限温度の計算手法の開発と具体的問題への適用を目的とする研究を行った。有限温度においてはフェルミオン対がボーズ凝縮するよりも高温でプリフォームド対が出現したり、幾何学的フラストレーションを有する系において金属・絶縁体転移が生じたりするなどの興味深い物理現象が実験において多数観測されており、理論的に有限温度の計算手法を確立させることは極めて重要である。</p> <p>従来から有限温度計算によく使用されている量子モンテカルロ法では、電子のようなフェルミオン系において「負符号問題」により特殊な例を除いて計算が実行できなくなることが知られており、その普遍的解決策は見つかっていない。そこで、本研究では有限サイズのクラスターの状態を求め、その結果を無限系へと接続する変分クラスター法(VCA)に注目した。またこの手法の特徴として、平均場を導入することにより有限温度の相転移を議論することも可能である。クラスター内の状態を求める際、素朴には厳密対角化(ED)によって得られた固有状態を使ってカノニカル平均をとることで有限温度での性質を調べることができ、クラスターのサイズが著しく制限されてしまう。これを解決するため、熱的純粋量子(TPQ)状態を用いた有限温度計算を提案した。この手法はEDに比べて比較的大きなサイズのクラスターを扱うことができ、EDで顕著に現れる有限サイズ効果の抑制につながる。</p> <p>VCAとTPQ状態を組み合わせた手法の妥当性を調べるために、2次元正方格子上的ハバード模型に適用した。有限温度における平均場秩序変数、熱力学量、励起スペクトルの温度依存性の計算に成功し、その有用性を示すことができた。今後はこの手法を元にして、励起子絶縁体の有限温度におけるプリフォームド励起子対生成に伴う物理現象の解明を目指す。</p> <p>I developed a numerical method to investigate finite-temperature properties of strongly correlated electron systems, and applied it to some problems. At finite temperatures, many intriguing physical phenomena have been observed in experiments, such as the appearance of preformed pairs above the transition temperature of the Bose-Einstein condensation and the metal-insulator transition in geometrically frustrated systems. Therefore, it is quite important to establish a theoretical method to calculate the physical properties at finite temperatures.</p> <p>In quantum Monte Carlo methods, which are often used for finite-temperature calculations, it is well known that a "negative sign problem" disrupts calculations of fermionic systems, except for several special cases. In this study, I focus on the variational-cluster approach (VCA), which an infinite-system state is constructed from the state of a small-size cluster. In addition, we are also able to discuss a finite-temperature phase transition by introducing a mean-field term. Although we can in principle obtain the physical quantities of the cluster at finite temperatures by taking the canonical-ensemble average with the eigenstates obtained from the exact-diagonalization (ED) method, the size of the cluster is severely restricted. To solve this problem, we make use of the method based on thermal-pure-quantum (TPQ) state. This method can treat a relatively large cluster compared to the ED method, and thus it can suppress the finite-size effect that often appears in ED method.</p> <p>I investigated the validity of the method combining VCA and TPQ states. I succeeded in calculating the temperature dependence of the mean-field order parameters, the thermodynamic quantities, and the single-particle excitation spectra of the Hubbard model on a two-dimensional square lattice with this method. The result clearly shows the usefulness of this method. I am going to investigate the physical properties of the excitonic preformed pairs above the transition temperature of the excitonic-insulator phase in the future.</p>
Notes	
Genre	Research Paper
URL	<a href="https://koara.lib.keio.ac.jp/xoonips/modules/xoonips/detail.php?koara_id=2019000007-20190237">https://koara.lib.keio.ac.jp/xoonips/modules/xoonips/detail.php?koara_id=2019000007-20190237</a>

研究代表者	所属	理工学部	職名	助教(有期)	補助額	1,000 (特A)千円
	氏名	杉本 高大	氏名 (英語)	Koudai Sugimoto		
研究課題 (日本語)						
強相関電子系の有限温度計算手法の開発と励起子絶縁体への応用						
研究課題 (英訳)						
Development of finite-temperature calculation method for strongly correlated electron systems and its application to excitonic insulators						
1. 研究成果実績の概要						
<p>電子が互いに強く相互作用する強相関電子系を対象に、有限温度の計算手法の開発と具体的問題への適用を目的とする研究を行った。有限温度においてはフェルミオン対がボーズ凝縮するよりも高温でプリフォームド対が出現したり、幾何学的フラストレーションを有する系において金属・絶縁体転移が生じたりするなどの興味深い物理現象が実験において多数観測されており、理論的に有限温度の計算手法を確立させることは極めて重要である。</p> <p>従来から有限温度計算によく使用されている量子モンテカルロ法では、電子のようなフェルミオン系において「負符号問題」により特殊な例を除いて計算が実行できなくなることが知られており、その普遍的解決策は見つかっていない。そこで、本研究では有限サイズのクラスターの状態を求め、その結果を無限系へと接続する変分クラスター法(VCA)に注目した。またこの手法の特徴として、平均場を導入することにより有限温度の相転移を議論することも可能である。クラスター内の状態を求める際、素朴には厳密対角化(ED)によって得られた固有状態を使ってカノニカル平均をとることで有限温度での性質を調べることができるが、クラスターのサイズが著しく制限されてしまう。これを解決するため、熱的純粋量子(TPQ)状態を用いた有限温度計算を提案した。この手法はEDに比べて比較的大きなサイズのクラスターを扱うことができ、EDで顕著に現れる有限サイズ効果の抑制につながる。</p> <p>VCAとTPQ状態を組み合わせた手法の妥当性を調べるために、2次元正方形上のハバード模型に適用した。有限温度における平均場秩序変数、熱力学量、励起スペクトルの温度依存性の計算に成功し、その有用性を示すことができた、今後はこの手法を元にして、励起子絶縁体の有限温度におけるプリフォームド励起子対生成に伴う物理現象の解明を目指す。</p>						
2. 研究成果実績の概要 (英訳)						
<p>I developed a numerical method to investigate finite-temperature properties of strongly correlated electron systems, and applied it to some problems. At finite temperatures, many intriguing physical phenomena have been observed in experiments, such as the appearance of preformed pairs above the transition temperature of the Bose-Einstein condensation and the metal-insulator transition in geometrically frustrated systems. Therefore, it is quite important to establish a theoretical method to calculate the physical properties at finite temperatures.</p> <p>In quantum Monte Carlo methods, which are often used for finite-temperature calculations, it is well known that a "negative sign problem" disrupts calculations of fermionic systems, except for several special cases. In this study, I focus on the variational-cluster approach (VCA), which an infinite-system state is constructed from the state of a small-size cluster. In addition, we are also able to discuss a finite-temperature phase transition by introducing a mean-field term. Although we can in principle obtain the physical quantities of the cluster at finite temperatures by taking the canonical-ensemble average with the eigenstates obtained from the exact-diagonalization (ED) method, the size of the cluster is severely restricted. To solve this problem, we make use of the method based on thermal-pure-quantum (TPQ) state. This method can treat a relatively large cluster compared to the ED method, and thus it can suppress the finite-size effect that often appears in ED method.</p> <p>I investigated the validity of the method combining VCA and TPQ states. I succeeded in calculating the temperature dependence of the mean-field order parameters, the thermodynamic quantities, and the single-particle excitation spectra of the Hubbard model on a two-dimensional square lattice with this method. The result clearly shows the usefulness of this method. I am going to investigate the physical properties of the excitonic preformed pairs above the transition temperature of the excitonic-insulator phase in the future.</p>						
3. 本研究課題に関する発表						
発表者氏名 (著者・講演者)	発表課題名 (著書名・演題)	発表学術誌名 (著書発行所・講演学会)	学術誌発行年月 (著書発行年月・講演年月)			
Hisao Nishida, Ryo Fujiuchi, Koudai Sugimoto, Yukinori Ohta	Typicality-Based Variational Cluster Approach to Thermodynamic Properties of the Hubbard Model	Journal of the Physical Society of Japan	2020年1月			
杉本高大、太田幸則	d-p 模型による Ta <sub>2</sub> NiSe <sub>5</sub> の励起 子絶縁体転移 II	日本物理学会 第75回年次大会	2020年3月			