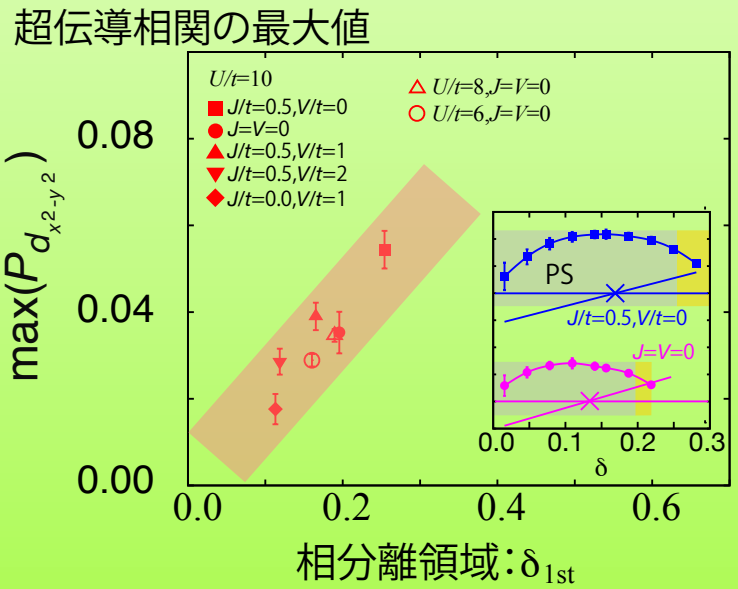
多変数変分モンテカルロ法を用いた ドープしたハバード模型の解析

三澤　貴宏
東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻

共同研究者: 今田 正俊 教授
謝辞:　　森田 悟史 博士, 田原 大資　氏

$$|\phi_{\mathrm{Pf}}\rangle = \left(\sum_{i,j=1}^{N_s} f_{ij} c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{j\downarrow}^{\dagger} \right)^{N_{\mathrm{e}}/2} |0\rangle$$



Ref. TM and M. Imada, Phys. Rev. B 90, 115137 (2014)

Outline

1. Introduction of VMC and mVMC

- 多変数変分モンテカルロ法(mVMC)と通常のVMCとの違い
- mVMCの適用範囲の広さ: 局在スピン系から第一原理有効模型まで

2. Benchmark of mVMC

- 数値的に厳密な手法 (厳密対角化, 量子モンテカルロ法、ガウス基底モンテカルロ法)との比較
- 更なる高精度化: power Lanczos method

3. mVMC analysis of doped Hubbard model

- 超伝導との電荷感受率の増大との因果関係

変分モンテカルロ法 (VMC)

波動関数を変分原理にしたがって最適化, α:変分パラメータ

$$\min_{\boldsymbol{\alpha}} E(\boldsymbol{\alpha}) = \min_{\boldsymbol{\alpha}} \frac{\langle\psi(\boldsymbol{\alpha})|\hat{H}|\psi(\boldsymbol{\alpha})\rangle}{\langle\psi(\boldsymbol{\alpha})|\psi(\boldsymbol{\alpha})\rangle}$$

物理量の計算[MC sampling], x :実空間配置

$$\frac{\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \sum_x \frac{\langle\psi|\hat{A}|x\rangle\langle x|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \sum_x \rho(x) \frac{\langle\psi|\hat{A}|x\rangle}{\langle\psi|x\rangle}$$

$$\sim \sum_{\text{MC samping}} \frac{\langle\psi|\hat{A}|x\rangle}{\langle\psi|x\rangle}$$

内積 を計算する必要

非負の重み

$$\rho(x) = \frac{|\langle\psi|x\rangle|^2}{\langle\psi|\psi\rangle} > 0$$

変分モンテカルロ法 (VMC)

$$|\psi\rangle = \mathcal{P}_{\rm cor}|\phi_0\rangle \Rightarrow \langle\psi|x\rangle = \langle\phi_0|x\rangle\mathcal{P}_{\rm cor}(x)$$

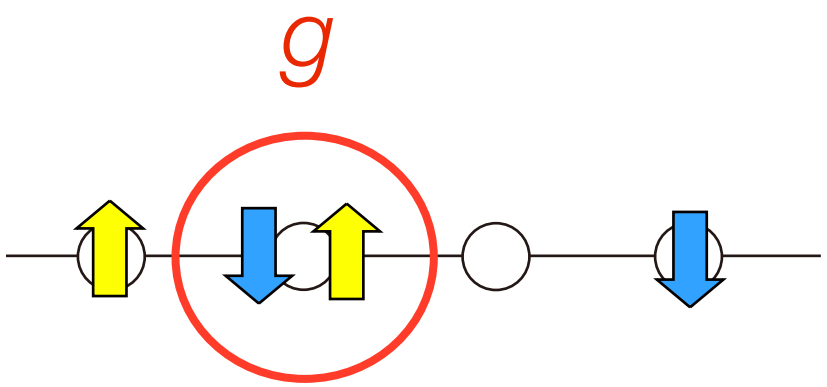
実空間対角な相関因子

一体部分

行列式 or パフィアン

Ex. Gutzwiller 因子

$$\mathcal{P}_{\rm G} = e^{-g\sum_i n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}}$$



$$\mathcal{P}_{\rm G}|x\rangle = |x\rangle e^{-gD(x)}$$

実空間対角な相関因子なら内積の計算は容易
(そうでない場合は困難:乗り越える工夫→power Lanczos)

従来のVMC v.s. mVMC

従来のVMC: 一体部分に強い制限 [# of parameters~10]

ex.反強磁性

$$|\phi_{\mathrm{AF}}\rangle = \prod_{|\boldsymbol{k}|<k_F,\sigma} a^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma}|0\rangle$$

$$a^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} = u_{\boldsymbol{k}} c^\dagger_{\boldsymbol{k},\sigma} + \sigma v_{\boldsymbol{k}} c^\dagger_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{Q},\sigma}$$

$$u^2_{\boldsymbol{k}} = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{E_{\boldsymbol{k}}}{\sqrt{E^2_{\boldsymbol{k}} + \Delta^2_{\mathrm{AF}}}}\right)$$

反強磁性の秩序変数のみが変分パラメータ

多変数変分モンテカルロ法(mVMC):
一体部分の制限を大幅に緩和 [# of parameters~10000]

$$|\phi_{\mathrm{Pf}}\rangle = \left(\sum_{i,j} f_{ij} c^\dagger_{i\uparrow} c^\dagger_{j\downarrow}\right)^{N_e/2}|0\rangle$$

f_{ij}:変分パラメータ

f_{ij} [i,j 実空間 index]を適切にとることで常磁性金属、
反強磁性、超伝導をふくむ様々な状態が記述可能

多変数変分モンテカルロ法 (mVMC):まとめ

$$|\psi\rangle = \mathcal{P}_{\mathrm{G}}\mathcal{P}_{\mathrm{J}}\mathcal{P}^{(2)}_{\mathrm{d-h}}\mathcal{P}^{(4)}_{\mathrm{d-h}}\mathcal{L}^{S}\mathcal{L}^{K}|\phi_{\mathrm{pair}}\rangle$$

一体波動関数

$$|\phi_{\mathrm{pair}}\rangle = \left[\sum_{i,j=1}^{N_{\mathrm{s}}} f_{ij}c^{\dagger}_{i\uparrow}c^{\dagger}_{j\downarrow}\right]^{N/2}|0\rangle$$

拡張したBCS波動関数
→ 金属、反強磁性、
異方的超伝導を
統一的に記述

相関因子

Gutzwiller-Jastrow $\mathcal{P}_{\mathrm{G}}$ $\mathcal{P}_{\mathrm{J}}$
doublon-holon $\mathcal{P}^{(2)}_{\mathrm{d-h}}$ $\mathcal{P}^{(4)}_{\mathrm{d-h}}$

量子数射影

$\mathcal{L}^{S}$: 全スピン射影, S=0
$\mathcal{L}^{K}$: 全運動量射影, K=0

変分パラメータ更新(SR法)

エネルギー $E_{\vec{\alpha}} = \langle H\rangle_{\vec{\alpha}}$ を最小化する

$$\vec{\alpha}_{\mathrm{new}} - \vec{\alpha}_{\mathrm{old}} = -X^{-1}\vec{g}$$

$$g_k = \frac{\partial E_{\vec{\alpha}}}{\partial \alpha_k}$$ エネルギー勾配 (MC Sampling)

多変数の変分パラメータ(~10000)を最適化 [by 京]
→基底状態の高精度な波動関数を数値的に生成
[stochastic reconfiguration method by Sorella(2001)]

Recent Applications of mVMC [2009-]

1. Iron-based SC: [misawa,nakamura,miyake,hirayama,imada]
   LaFeAsO,LaFePO,$BaFe_2As_2$,FeTe,FeSe
2. Doped Hubbard model: [misawa,imada]
   Origin of SC in doped Hubbard model → this talk
3. Organic conductors: [shinaoka,misawa,nakamura,imada]
   κ-$(BEDT\text{-}TTF)_2Cu(NCS)_2$
4. Kondo lattice model: [misawa,yoshitake,motome]
   CO around ¼ filling
5. Frustrated Kondo model: [nakamikawa,yamaji,udagawa,motome]
   Partial Kondo singlet phase in triangular lattice
6. Spin liquids: [morita, kaneko, imada]
   J_1-J_2 Heisenberg model [P8], frustrated Hubbard model
7. Topological insulators: [yamaji, kurita, imada]
   Kane-Mele-Hubbard model,Topological Mott ins., Kitaev model
8. Electron-phonon coupling system [ohgoe, imada]

Benchmark for Hubbard model

$$H = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij}(c^{\dagger}_{i\sigma}c_{j\sigma} + H.c.) + U\sum_{i} n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}$$

Ref. TM and M. Imada, Phys. Rev. B 90, 115137 (2014)

Benchmark: Energy & $S(q)$

2D Hubbard model

Energy

Present study

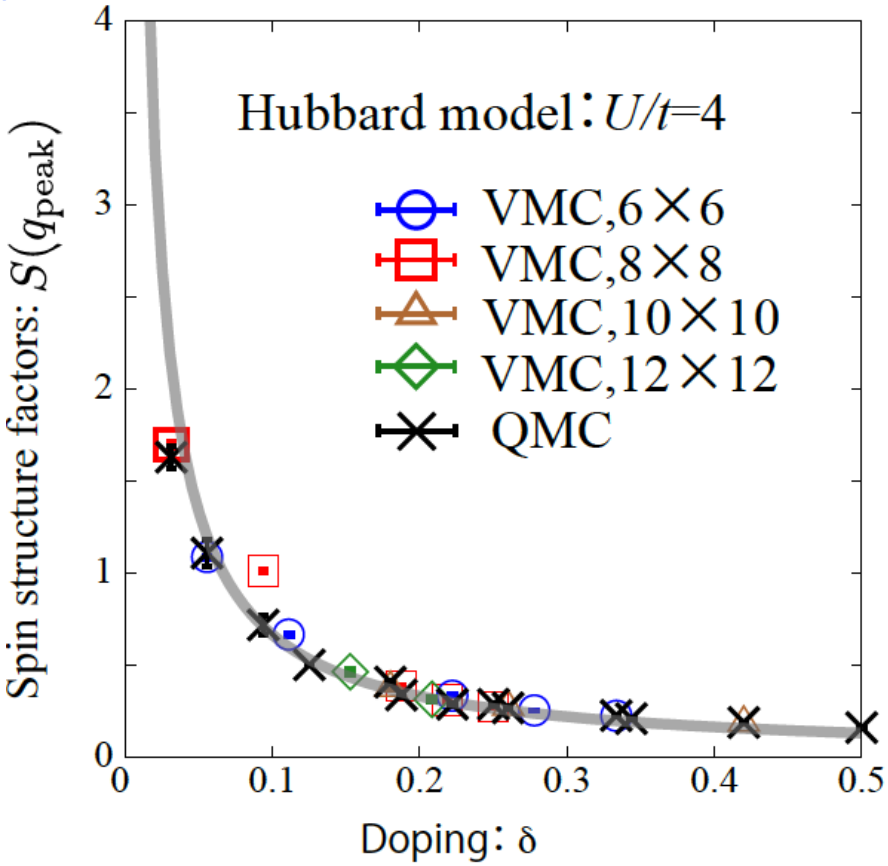
	AF-QMC	GBMC	VMC
8×8, $\delta \sim 0.21$			
$U = 4$	-72.80(6)	-72.51(5)	-71.417(4)
$U = 6$	-	-63.64(12)	-62.553(9)
10×10, $\delta = 0.18$			
$U = 4$	-109.7(6)	-	-107.51(1)
$U = 6$	-	-92.07(22)	-91.91(1)
12×12, $\delta \sim 0.15$			
$U = 4$	-151.4(14)	-	-150.14(2)

Red →VMC results are consistent with results of unbiased calculations within error bars.

GBMC: Aimi-Imada, JPSJ (2007)
AF-QMC: Furukawa-Imada, JPSJ (1992)

Spin structure factors

$$S(\boldsymbol{q}) = \frac{1}{3N_{\mathrm{s}}} \sum_{i,j} \langle \boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{S}_j \rangle e^{i\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j)}$$

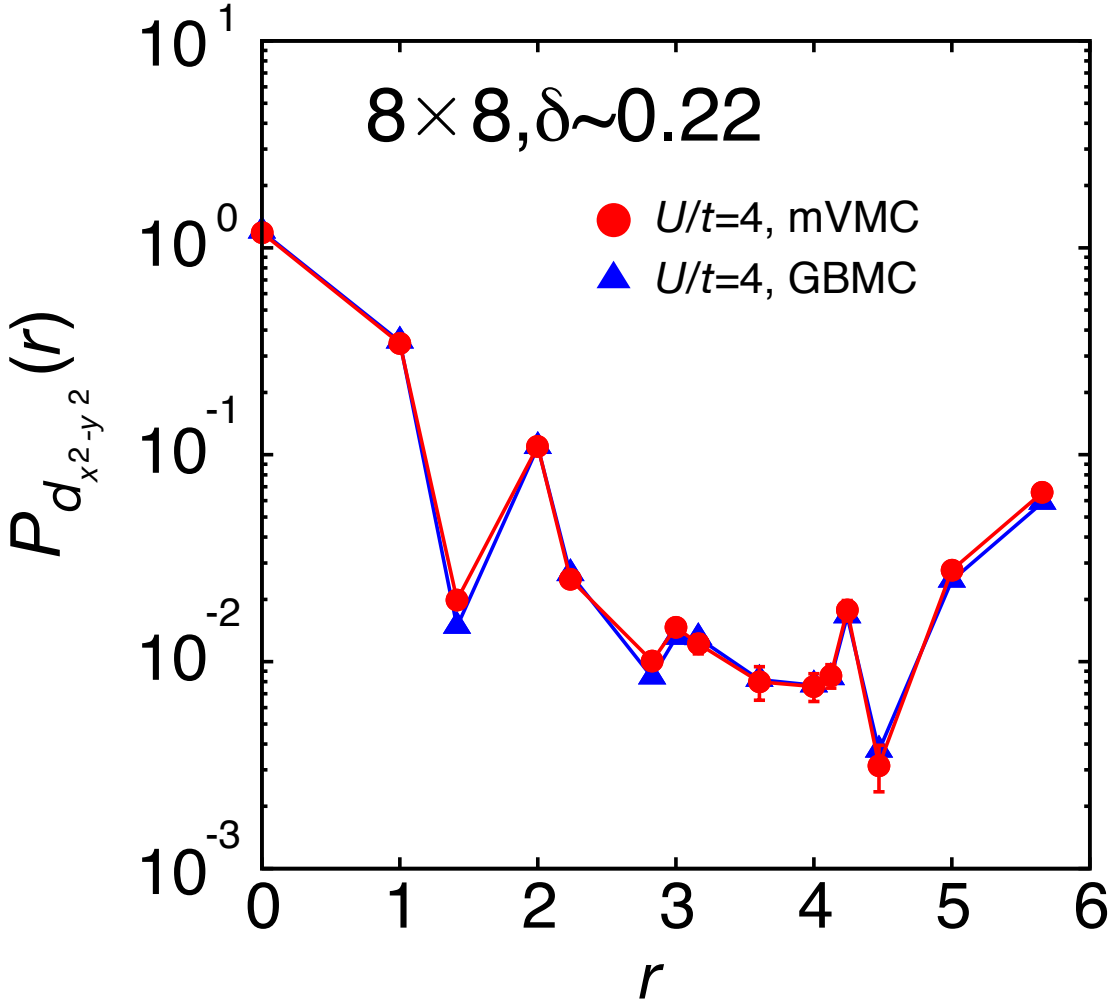


VMC: High-precision estimation of physical properties !

Benchmark

同時刻超伝導相関

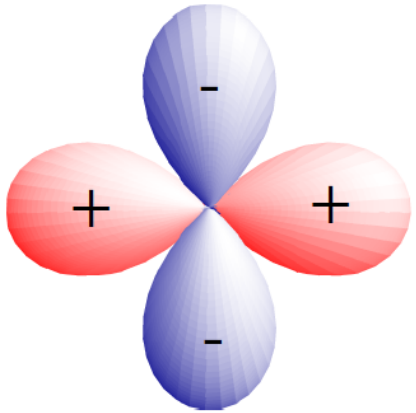
GBMC: Aimi-Imada (2007)



$$P_\alpha(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{2N_s}\sum\langle\Delta_\alpha^\dagger(\boldsymbol{r}_i)\Delta_\alpha(\boldsymbol{r}_i+\boldsymbol{r}) + \Delta_\alpha(\boldsymbol{r}_i)\Delta_\alpha^\dagger(\boldsymbol{r}_i+\boldsymbol{r})\rangle$$

$$\Delta_\alpha(\boldsymbol{r}_i) = \frac{1}{\sqrt{2}}\sum_{\boldsymbol{r}} f_\alpha(\boldsymbol{r})(c_{\boldsymbol{r}_i\uparrow}c_{\boldsymbol{r}_i+\boldsymbol{r}\downarrow} - c_{\boldsymbol{r}_i\downarrow}c_{\boldsymbol{r}_i+\boldsymbol{r}\uparrow})$$

$$f_{d_{x^2-y^2}}(\boldsymbol{r}) = \delta_{r_y,0}(\delta_{r_x,1}+\delta_{r_x,-1}) - \delta_{r_x,0}(\delta_{r_y,1}+\delta_{r_y,-1})$$



$d_{x^2-y^2}$

VMCは他の数値的に厳密な手法の結果をよく再現
→厳密な計算の実行が難しい強相関領域においても
高精度計算の実現！

Further improvement of mVMC: power Lanczos

原理的には, $|\psi_{\mathrm{GS}}\rangle = \lim_{\beta\to\infty} e^{-\beta\mathcal{H}}|\psi\rangle$

実空間非対角

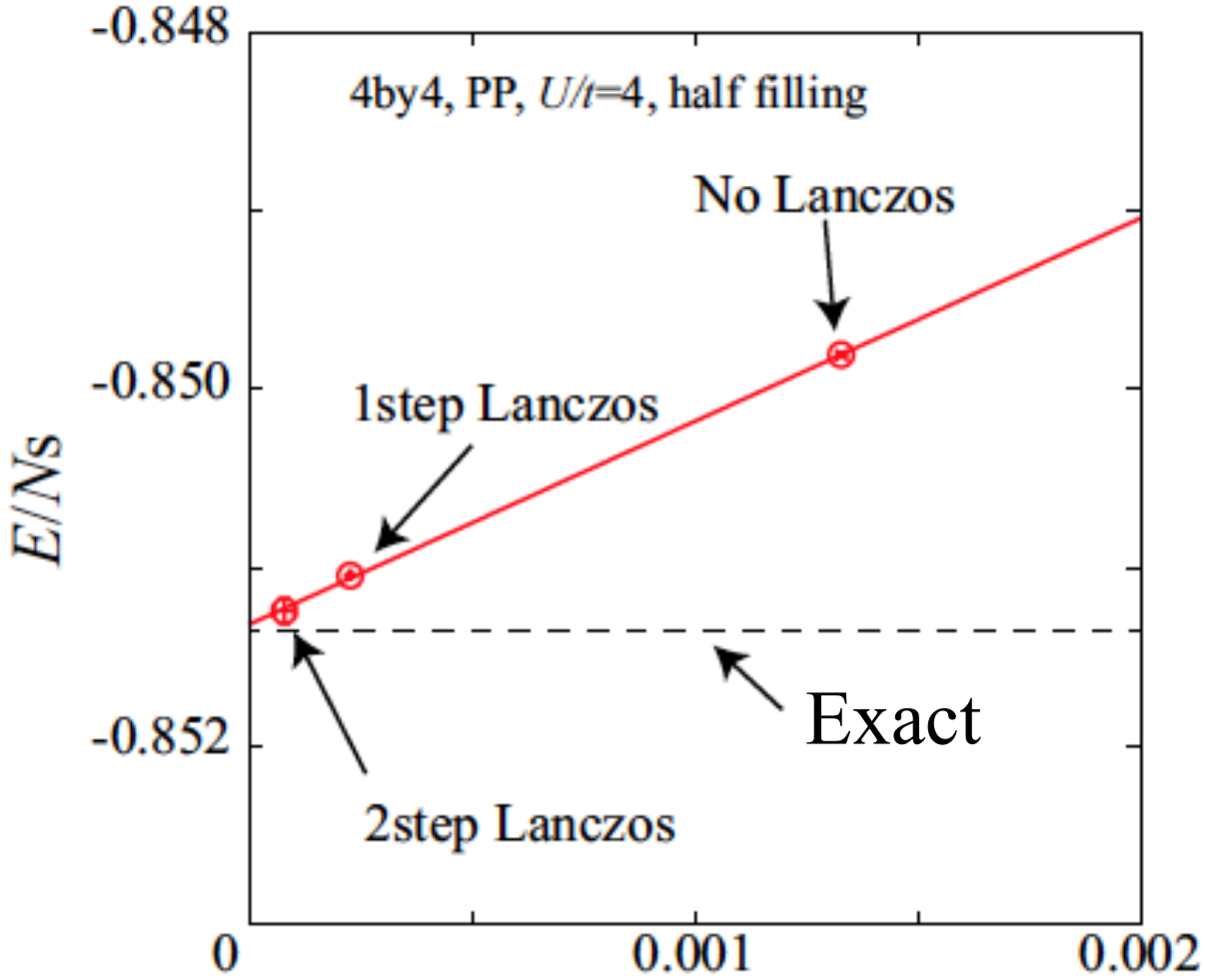
power Lanczos → 波動関数の系統的な改良
(実空間非対角成分の取り込み)

$$|\psi_n\rangle = \left(1 + \sum_{p=1}^{n} \alpha_p \mathcal{H}^p\right)|\psi\rangle$$

Cf. E.S.Heeb &
T.M.Rice, Z.Phys. B 90, 73(1993)

元の波動関数が十分よければ、数回の
power Lanczos stepで厳密な値に(ほぼ)到達

Further improvement of mVMC: power Lanczos

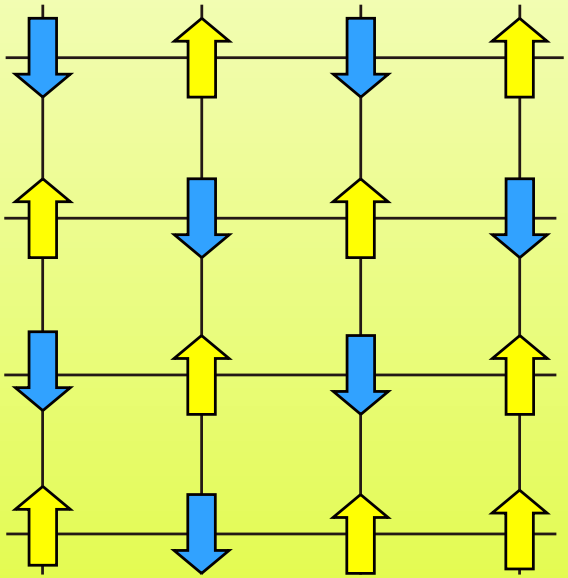


$$\Delta_{\mathrm{var}} = \frac{\langle \mathcal{H}^2 \rangle - \langle \mathcal{H} \rangle^2}{\langle \mathcal{H} \rangle^2}$$

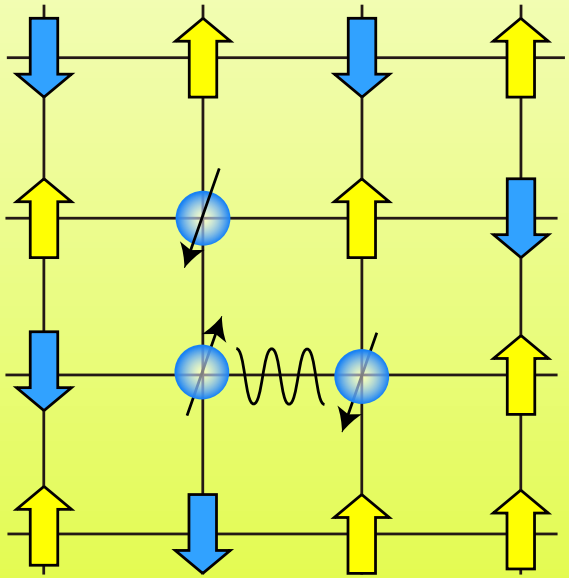
mVMC + a few power Lanczos ~ 数値的に厳密な結果

Analysis of doped Hubbard model

$$H = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij}(c^{\dagger}_{i\sigma}c_{j\sigma} + H.c.) + U\sum_{i} n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}$$



δ=0



δ>0

Ref. TM and M. Imada, Phys. Rev. B 90, 115137 (2014)

Previous studies on the Hubbard model

Authors [Method]	T_c	U/t	SC	AF	PS	ΔE
Present study [mVMC]	- (GS)	4-12	$\delta \lesssim 0.2$[a]	$\delta \lesssim 0.18$	$\delta \lesssim 0.19$[b]	$\sim 0.004t$
N. Furukawa and M. Imada (1992) [10] [QMC]	- (GS)	4	No SC	No AF	No PS	-
S. Watanabe and M. Imada (2004) [13] [PIRG][c]	- (GS)	4	No SC	No AF	No PS	-
T. Aimi and M. Imada (2007) [14] [GBMC]	- (GS)	4-6	No SC	No AF	-	-
T. A. Maier *et al.*(2004)[15] [DCA]	$\sim 0.02t$	4	$\delta \sim 0.1$	-	-	-
E. Khatami *et al.*(2010) [16] [DCA]	$\sim 0.02t$	8	$\delta \lesssim 0.2$	-	QCP at $\delta \sim 0.9$	-
M. Capone and G. Kotliar (2006) [17] [CDMFT]	- (GS)	4-16	$\delta \lesssim 0.15$[d]	$\delta \lesssim 0.15$	$0.05 \lesssim \delta \lesssim 0.15$[e]	$\sim 0.01t$[f]
M. Aichhorn *et al.*(2007) [18] [VCA] [g]	- (GS)	4-12	$\delta \lesssim 0.2$[h]	$\delta \lesssim 0.15$	$0.05 \lesssim \delta \lesssim 0.15$[i]	
E. Gull *et al.*(2012) [19] [DCA]	$\sim 0.016t$	4-6.5	$\delta \lesssim 0.15$[j]	-	-	$\sim 0.01t$
G. Sordi *et al.*(2012) [20] [CDMFT]	$\sim 0.02t$	5.2-6.2	$\delta \lesssim 0.08$[k]	-	$0.04 \lesssim \delta \lesssim 0.06$[l]	
T. Giamarchi and C. Lhuillier (1991) [21] [VMC]	- (GS)	10	$\delta \lesssim 0.4$	$\delta \lesssim 0.2$[m]	-	-
H. Yokoyama *et al.*(2004,2012) [22, 23] [VMC]	- (GS)	0-30	$\delta \lesssim 0.2$[n]	$\delta \lesssim 0.15$	$\delta \lesssim 0.1$	$\sim 0.01t$
D. Eichenberger and D. Baeriswyl (2009) [24] [VMC]	- (GS)	6	$\delta \lesssim 0.2$	$\delta \lesssim 0.1$?	-	$\sim 0.01t$
E. Neuscamman *et al.*(2012) [25] [VMC][o]	- (GS)	4	-	-	$\delta \lesssim 0.15$[p]	-
S. Zhang *et al.*(1997) [26] [CPMC][q]	- (GS)	2-8	No SC	-	-	-
C. -C. Chang *et al.*(2008,2010) [27, 28] [CPMC][r]	- (GS)	2-12	-	$\delta \lesssim 0.1$[s]	$\delta \lesssim 0.1$[t]	-
S. Sorella (2011) [29] [VMC][u]	- (GS)	4	-	-	No PS	-
L. F. Tocchio *et al.* (2013) [30] [VMC]	- (GS)	6	-	-	No PS	-

厳密な数値計算
(U/t<=6)

超伝導、反強磁性量子臨界点、相分離の関係を包括的に調べた研究は少ない。

高精度の計算で超伝導発現可能性及びその起源を明らかにする。

[a] $U/t = 8$, (SC-SC+AF)
[b] U/t = 4-6.5
[c] U/t = 5.2-6.2
[d] (Metal-Metal)
[e] SC+AF
[f] U/t = 5-30
[g] $N_s = 8 \times 8$, TABC
[h] (Metal-AFI?)
[i] $N_s \leq 16 \times 16$, PP
[j] $N_s = 8 \times 8$ - 16×16, TABC
[k] Incommensurate spin structures.
[l] For $U/t \geq 8$, spatially inhomogeneous state is obtained.
[m] $N_s = 98$

mVMC Results: U/t=10

$$H = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij}(c^{\dagger}_{i\sigma}c_{j\sigma} + H.c.) + U\sum_{i} n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}$$

Cf: H. Yokoyama (2012), D. Baeriswyl (2009)

$$\bar{P}_{d_{x^2-y^2}} = \frac{1}{M}\sum_{2<r=|\boldsymbol{r}|<L-1} P_{d_{x^2-y^2}}(\boldsymbol{r})$$

灰色領域＝相分離領域(PS)

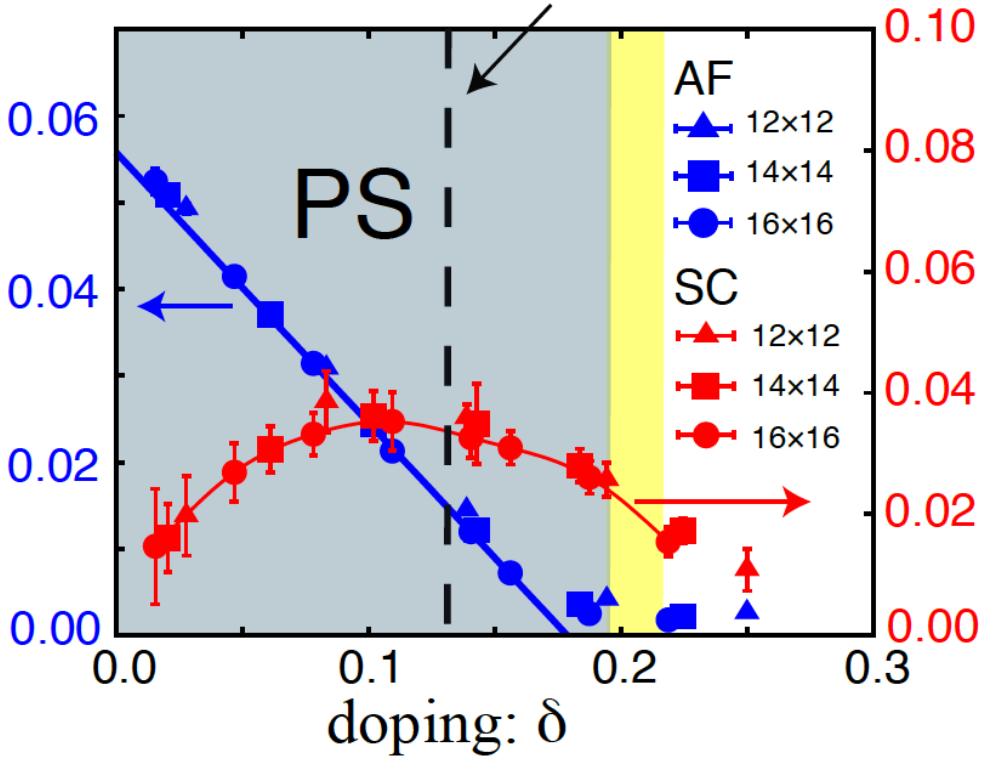
反強磁性秩序

$S(\boldsymbol{q}_{\mathrm{peak}})/N_{\mathrm{s}}$

$\delta_s : \chi_c^{-1} = 0$

超伝導秩序

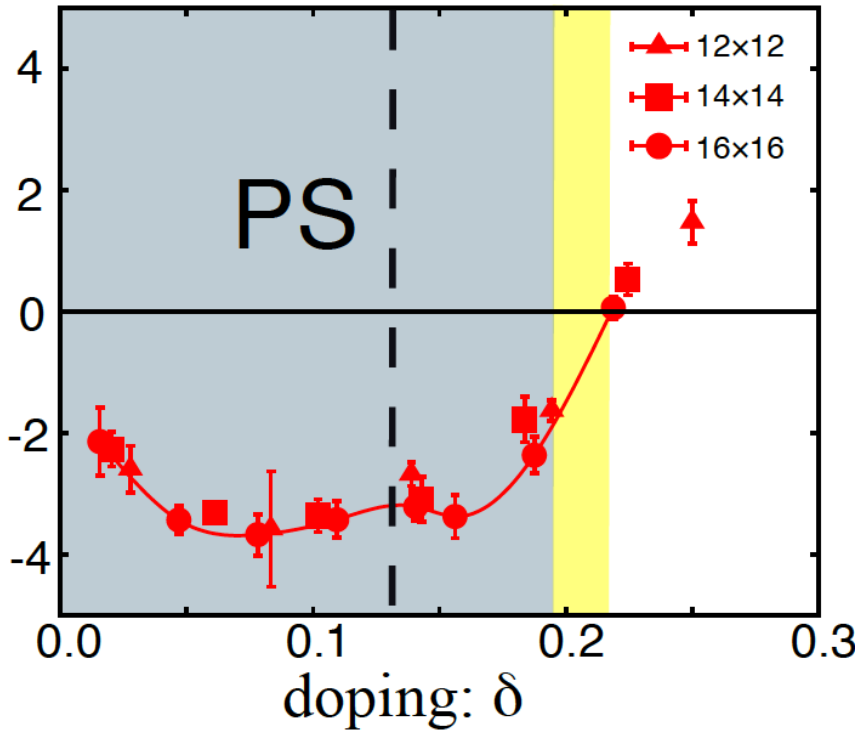
$\bar{P}_{d_{x^2-y^2}}$



凝縮エネルギー

$\Delta E = (E_{\mathrm{SC}} - E_{\mathrm{Normal}})/N_{\mathrm{s}}$

$\Delta E/t \times 10^3$

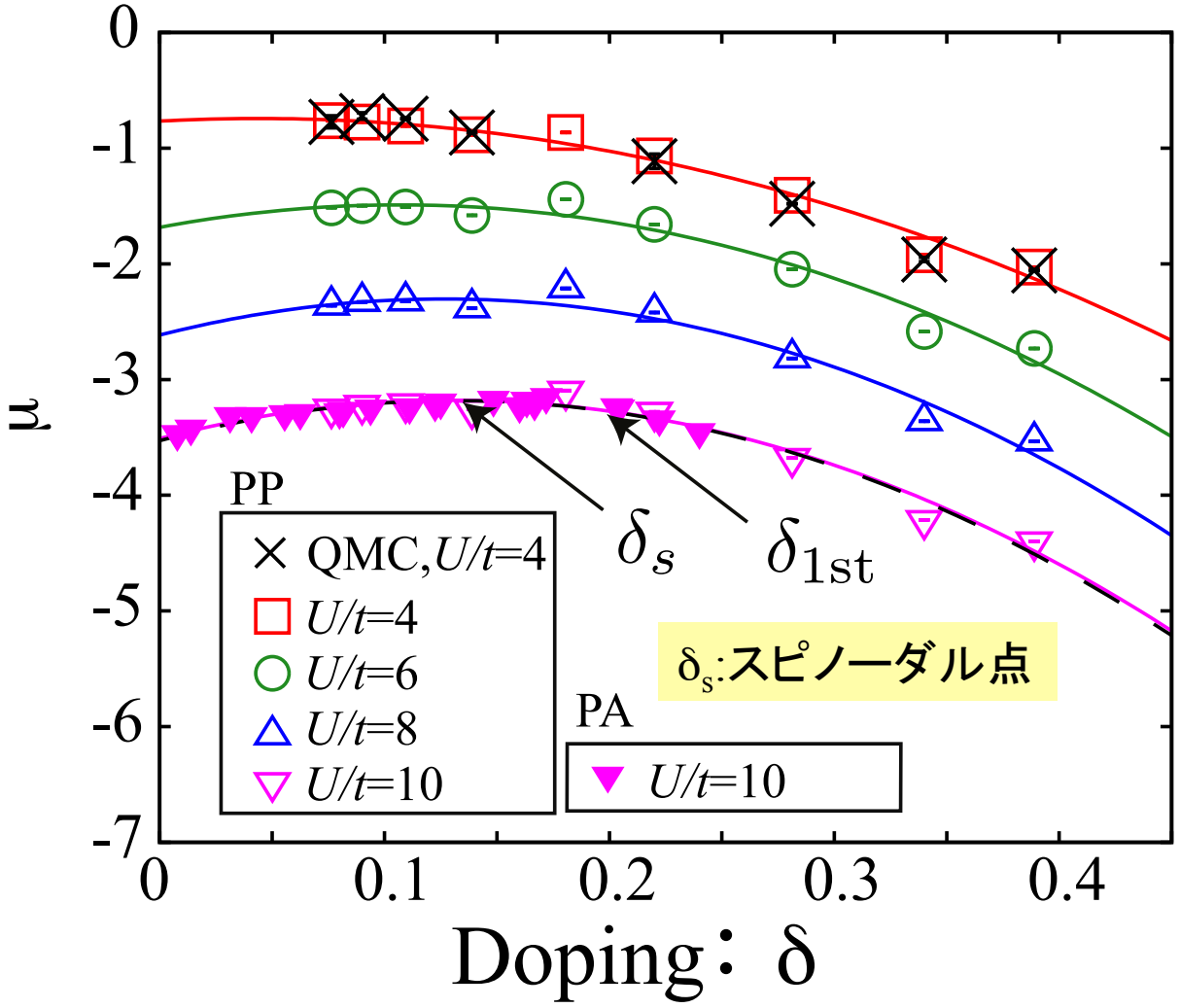


強相関領域で超伝導ドームの発現！
しかし、相分離領域(PS)にほぼ呑み込まれてしまう。

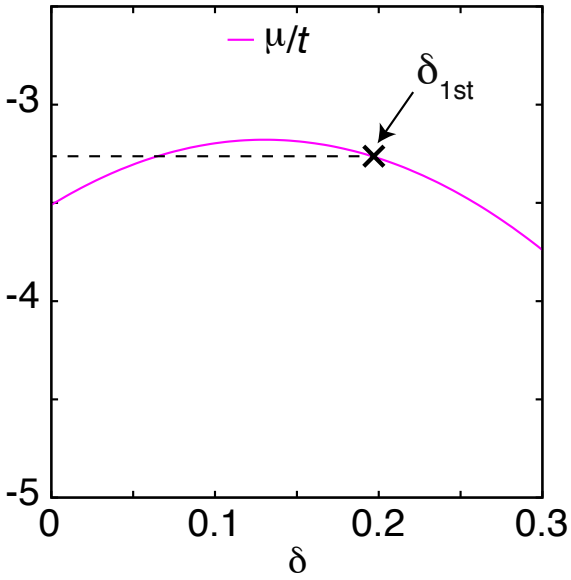
mVMC Results: U/t=10

$$\mu = \frac{E(N_1) - E(N_2)}{N_1 - N_2} - \frac{U}{2} + 4(V - 0.125J)$$

Maxwell's construction→相分離領域を決定



ex. U/t=10

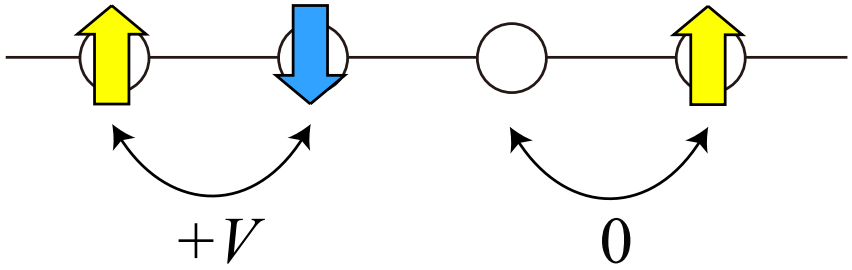


強相関領域で相分離が発現！

Effects of intersite interactions

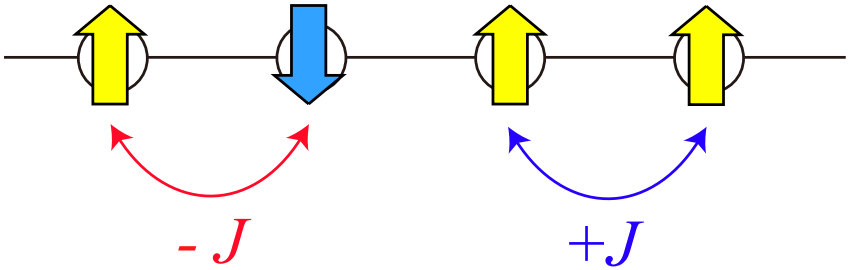
2D Hubbard model + intersite interactions (V & J)

クーロン相互作用: V



$$V \sum_{\langle i,j \rangle} N_i N_j$$

反強磁性相互作用: J



$$J \sum_{\langle i,j \rangle} \boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{S}_j$$

V:相分離を抑制, J:相分離を拡大

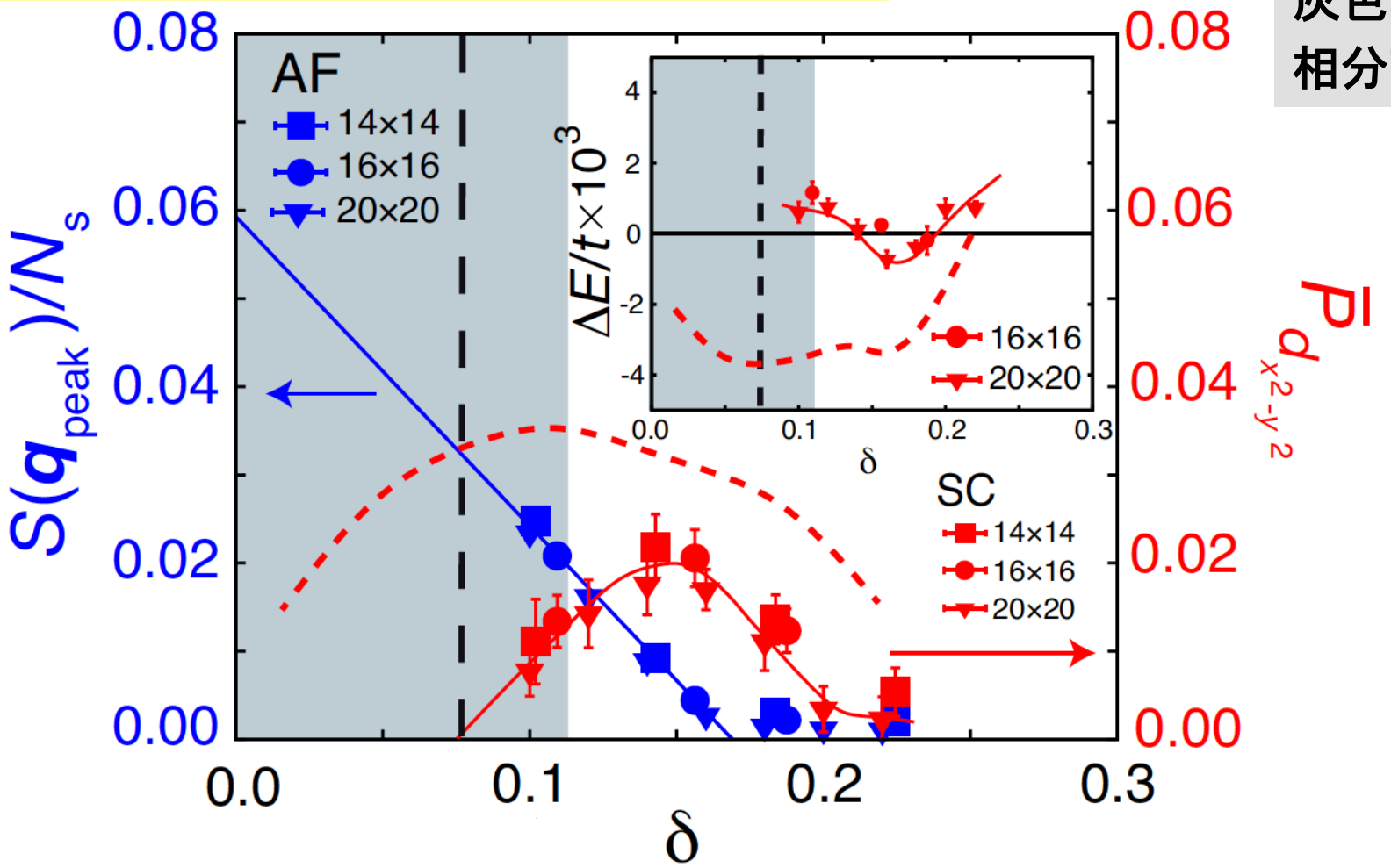
Effects of V:U/t=10, V/t=1

cf.D. Senechal *et al*. PRB(2012),
E. Plekhanov *et al*. PRL (2003)

サイト間相互作用 (V)で相分離を抑制
→超伝導が(ほぼ)消失！

点線 : U/t=10,V/t=0

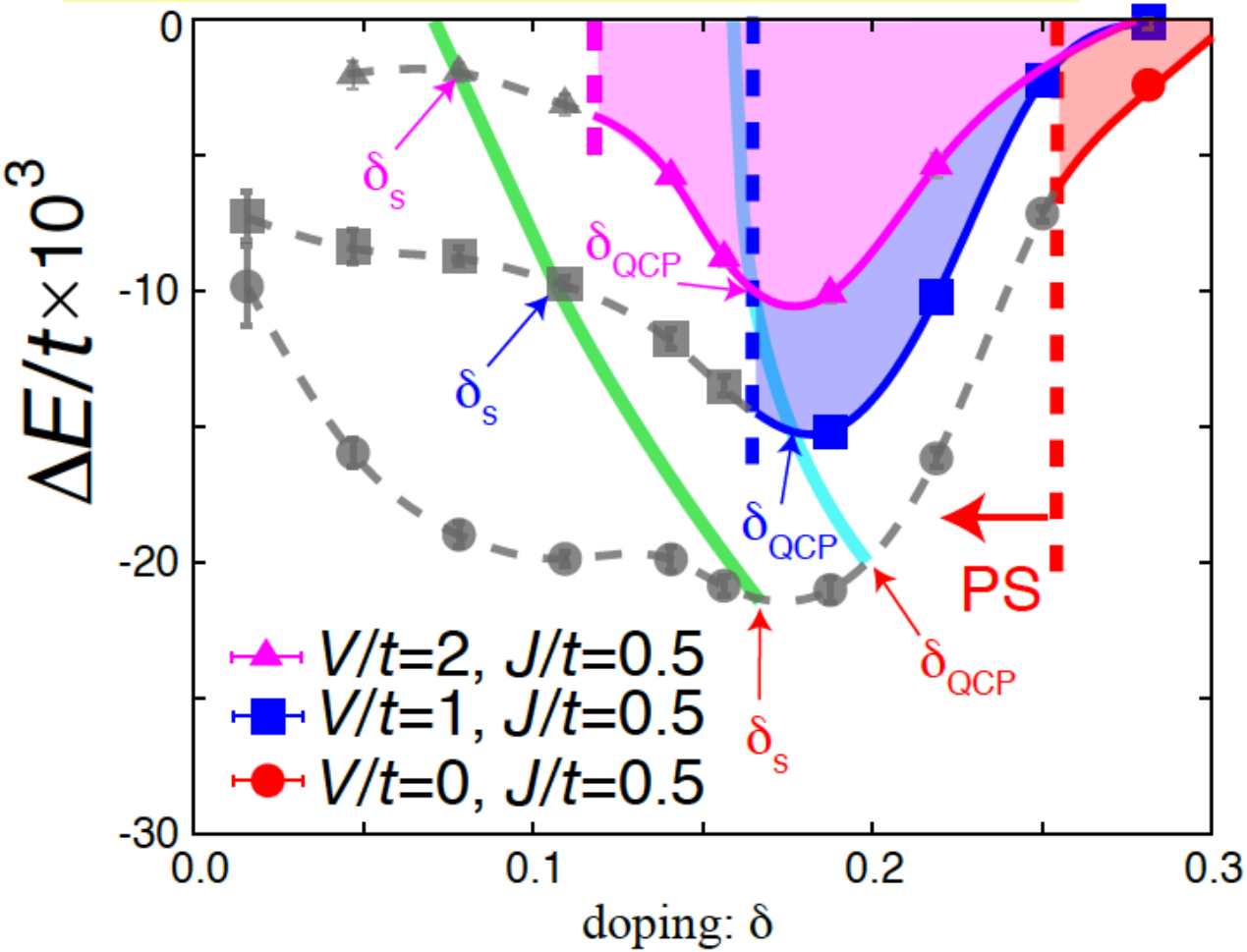
灰色領域＝
相分離領域



電荷揺らぎが超伝導の安定性に大きく寄与!

Effects of J&V:U/t=10, J/t=0.5

J, Vの導入→電荷揺らぎの制御



$\Delta E < 0 \rightarrow$ SC is GS

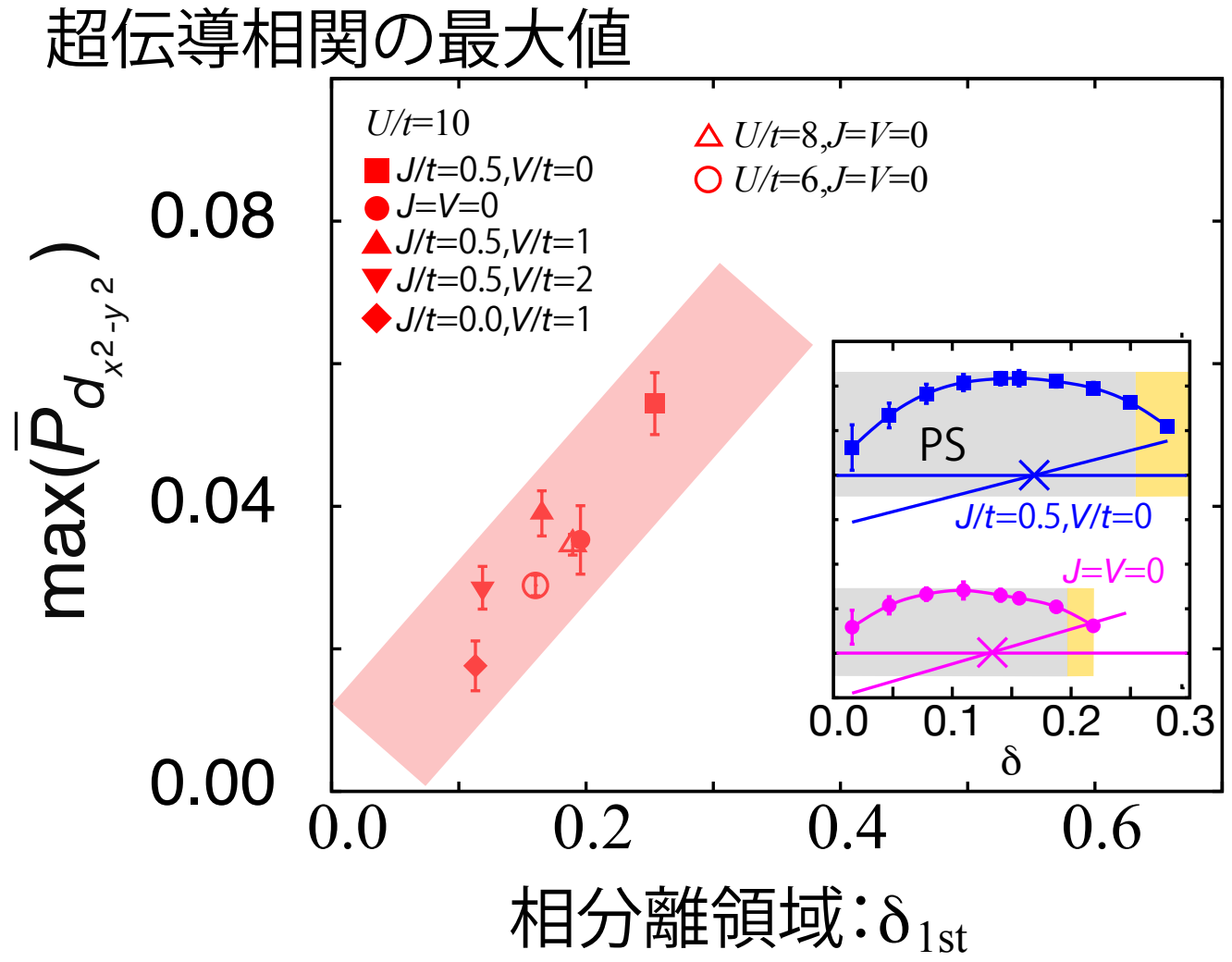
灰色のシンボル＝相分離領域

δ_s:スピノーダル点
=電荷感受率の発散

δ_{QCP}:反強磁性臨界点
=スピン揺らぎの発散

大きな相分離領域
→最も大きな超伝導の凝縮エネルギー

電荷揺らぎの増大と超伝導相関



広い相分離領域→（電子間の大きな有効的な引力）
→大きな超伝導相関

Summary

・多変数変分モンテカルロ法が柔軟かつ高精度な計算手法であることを示した。

・ドープした（拡張した）ハバード模型の解析を行い電荷揺らぎの増大が超伝導と密接に関係していることを明らかにした。

Outlook

・power Lanczosを用いた波動関数の更なる高精度化＆系統的な計算

・銅酸化物に対する第一原理有効模型の解析
(cf. 鉄系超伝導体の解析 TM and M. Imada, arXiv:1409.6536)

Ref. TM and M. Imada, Phys. Rev. B 90, 115137 (2014)