

量子格子模型プログラムパッケージ

DCore (integrated DMFT software for CORrelated Electrons)の開発

品岡 寛

埼玉大学



Saitama University  
埼玉大学



東京大学  
THE UNIVERSITY OF TOKYO

# 発表概要

1. 背景：強相関電子電子系
2. 第一原理計算・動的平均場近似の概要
3. 既存のソフトウェア紹介
4. DCoreの説明

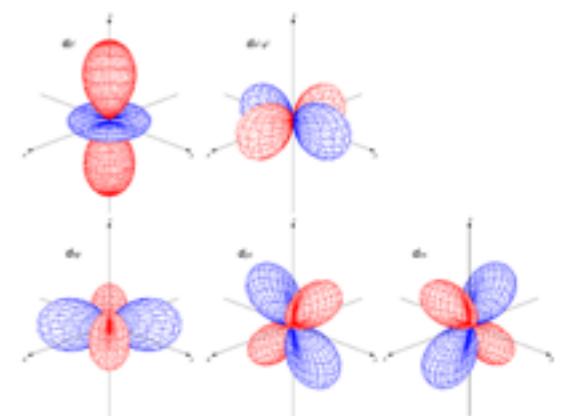
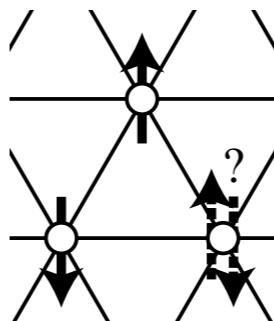
# 背景: 強相関電子系の広がり

超伝導

鉄系遷移金属酸化物、有機導体等

スピン、軌道、  
電荷秩序

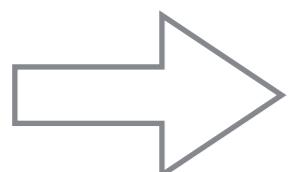
フラストレート磁性体、マルチフェロイック



トポロジカル相

5d遷移金属酸化物、界面・表面

定量的な物性予測を強く要請されている  
スペクトル関数など



# 第一原理計算とは？

密度汎関数理論

P. Hohenberg and W. Kohn (1964)  
W. Kohn and L. J. Sham (1965)

- ・様々な近似: 局所密度近似(LDA)、一般化勾配近似 (GGA)
- ・全電子計算 or not
- ・基底関数の種類: 平面波+ $\alpha$ 、FP-LAPW、数値原子基底

	全電子計算	基底関数
VASP	N	PAW
Quantum ESPRESSO	N	PAW
Wien2k	Y	FP-LAPW
OpenMX	N	数値原子基底

Abinit, Elk, AkaiKKR, QMAS, etc.

# Quantum ESPRESSO

<https://www.quantum-espresso.org>



QUANTUMESPRESSO

---

HOME PROJECT DOWNLOAD RESOURCES PSEUDOPOTENTIALS CONTACTS NEWS & EVENTS

## NEWS

10.05.18

### THE WALTER KOHN PRIZE

Nominations are now being accepted for the second Walter Kohn Prize for quantum-mechanical materia...

30.01.18

### QE DEVELOPERS' MEETING 2018

Agenda

February 1st 2018

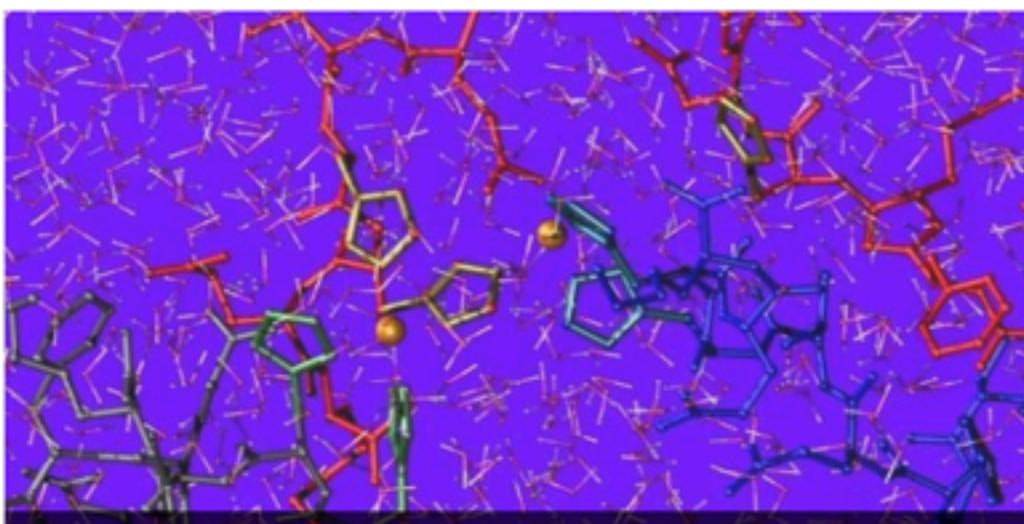
9:30 - 9:55 -- Paolo Giannozzi: *Introduction*.  
slides

10:00 -...

11.12.17

### QUANTUM ESPRESSO V.6.2.1

Version 6.2.1 of QUANTUM ESPRESSO is available for download from GitLab and on qe-forge..



### QUANTUM ESPRESSO

is an integrated suite of Open-Source computer codes for electronic-structure calculations and materials modeling at the nanoscale. It is based on density-functional theory, plane waves, and pseudopotentials.

[READ MORE >](#)

- 擬ポテンシャル法
- Wannier90との連携  
(symmetry-adapted Wannier functions)

# OpenMX

<http://www.openmx-square.org>

## Welcome to OpenMX

Open source package for Material explorer

### Contents

- [What's new](#)

[International Summer Workshop for July 2nd-12th, 2018](#)

[Patch \(Ver. 3.8.5\) to OpenMX Ver. 3.8 \(June 12, 2018\)](#)

- [What is OpenMX?](#)

- [Download](#)

- [Manual of Ver. 3.8](#)

- [Manual of Ver. 3.7](#)

- [Technical Notes](#)

- [Video Lectures](#)

- [Publications](#)

- [OpenMX Forum](#)

- [OpenMX Viewer](#)

- [Workshop](#)

- [Database of VPS and PAO](#)

[Ver. 2013](#)

- [ADPACK](#)

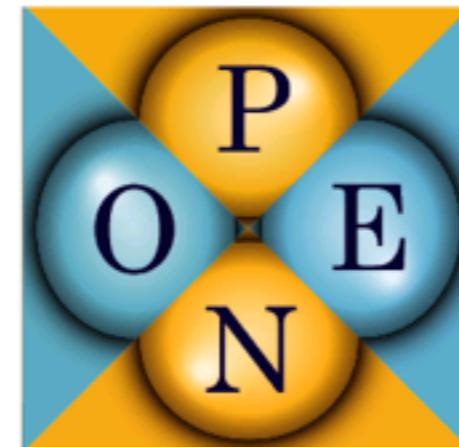
- [Miscellaneous informations](#)

- [Contributors](#)

- [Acknowledgment](#)

- [Opening positions](#)

- [Links](#)

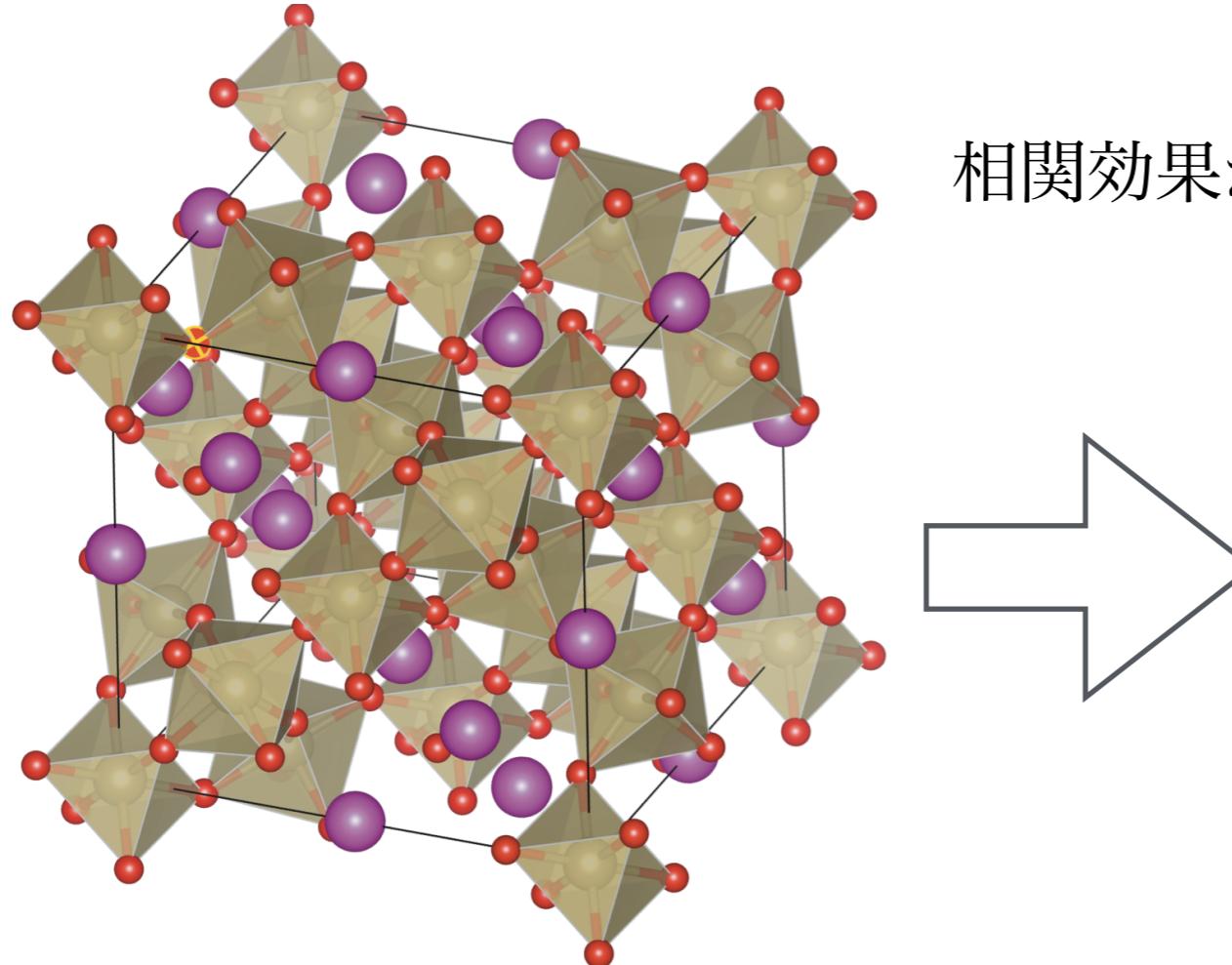


- 擬ポテンシャル+数値原子軌道基底
- 大規模系の計算
- Wannier90との連携
- 対称操作は無し

# 密度汎関数理論+動的平均場近似

LDA/DFT+DMFT

G. Kotliar *et al.*, RMP 78, 865 (2006)



相関効果が強い原子軌道への射影



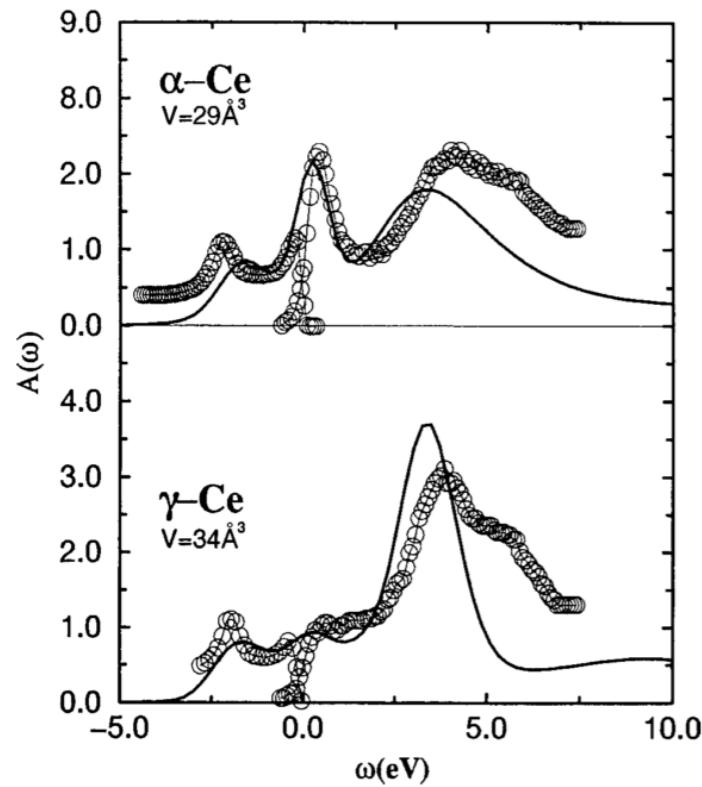
$$\Sigma(k, \omega) \rightarrow \Sigma(\omega)$$

- 格子問題を量子不純物問題へマップ
- 動的物理量の計算: スペクトル関数、動的感受率
- 摂動理論による拡張が可能 (DMFT+GWなど)

# 計算できる量

## ● スペクトル関数

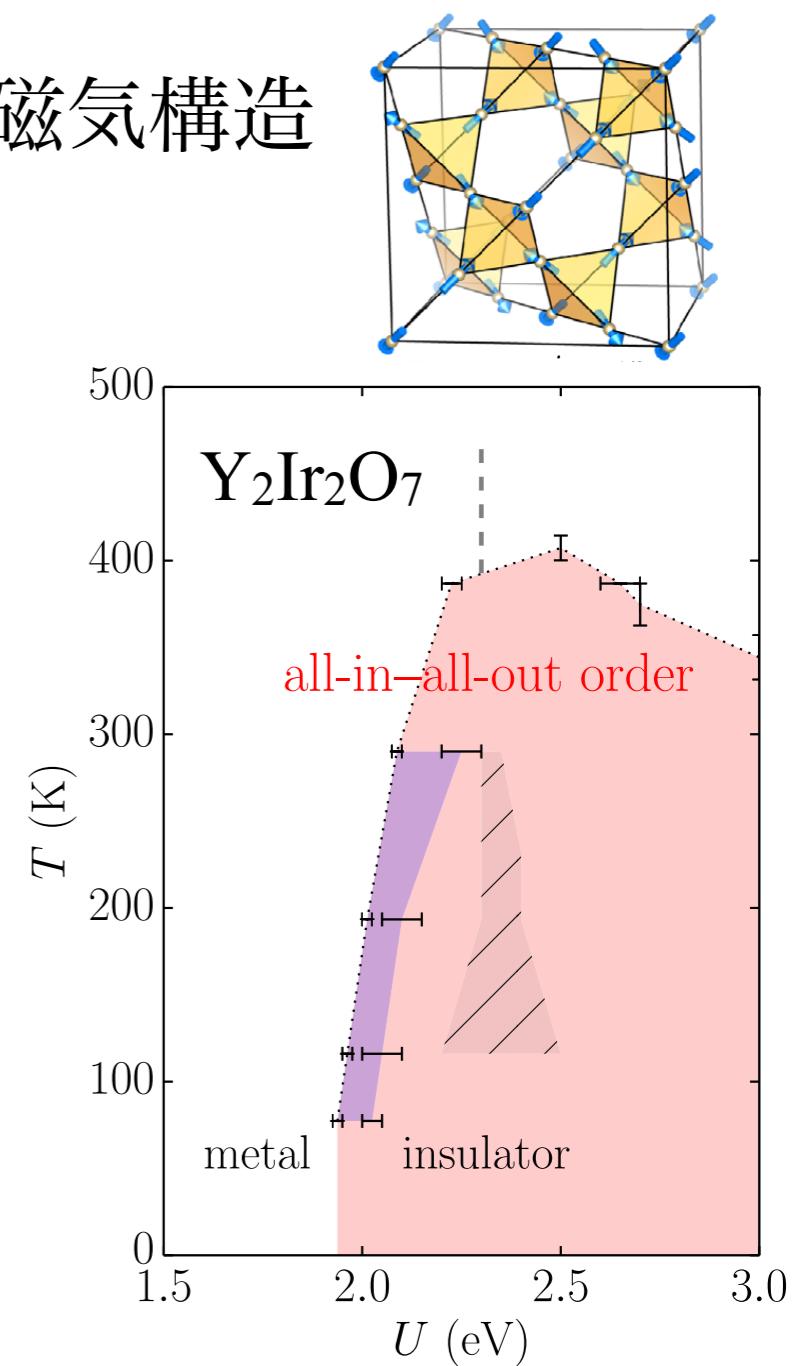
$$A(k, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}G(k, \omega + i0^+)$$



McMahan *et al.*, 2003

→光学実験との直接比較

## ● 複雑な磁気構造



HS, S. Hoshino, M. Troyer and P. Werner (2015)

## ● 静的・動的感受率

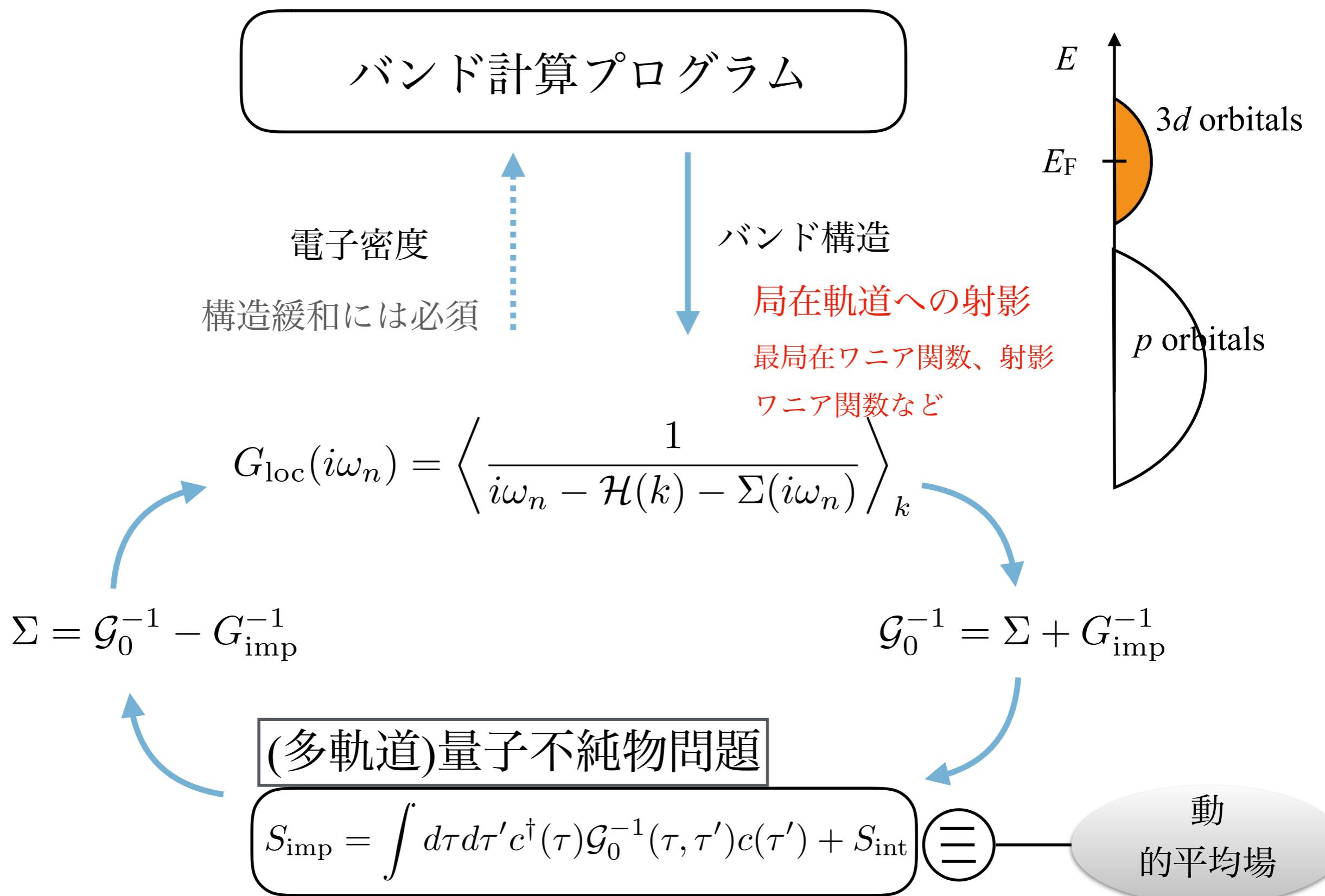
M. Jarrell (1992), H. Park *et al.* (2011), L. Boehnke *et al.* (2011), J. Kuneš *et al.* (2017)

## ● 構造緩和

K. Haule and G. L. Pascut (2016)

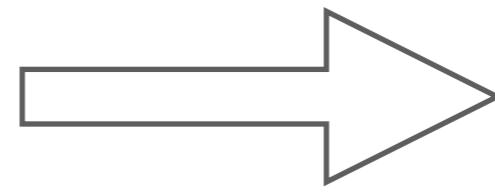
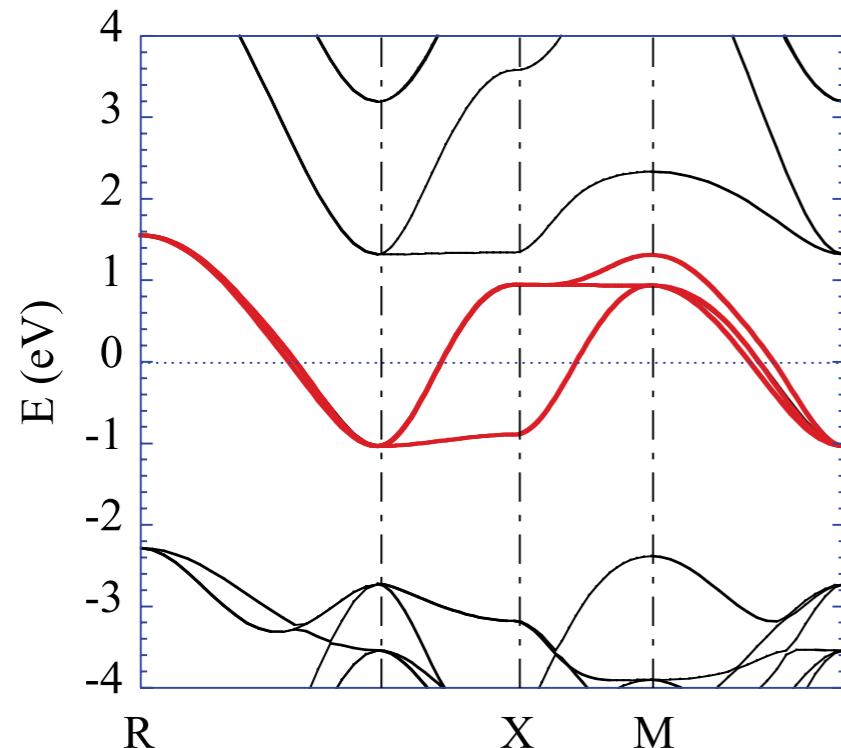
# DFT+DMFTの計算スキーム

G. Kotliar *et al.*, RMP 78, 865 (2006)

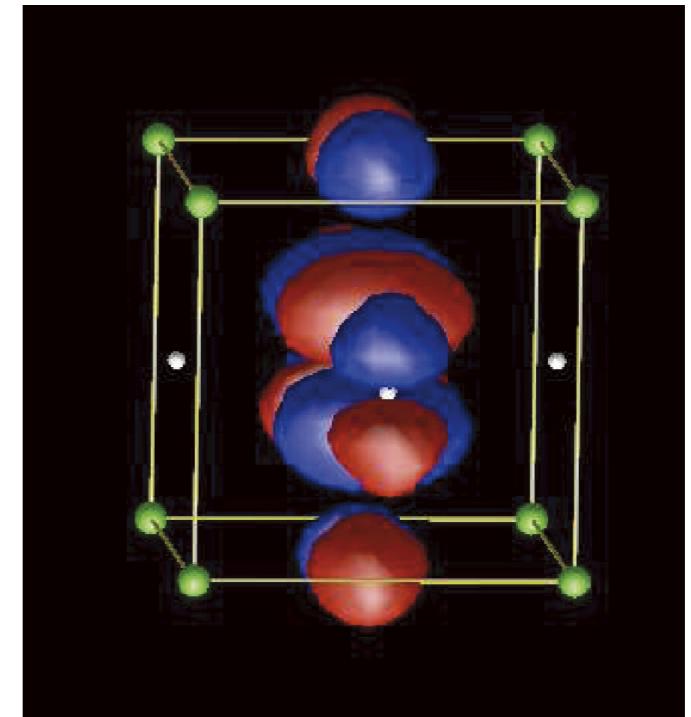


# 最局在ワニア関数

N. Marzari and D. Vanderbilt (1997), I. Souza *et al.* (2001)



波数、軌道に依存  
したゲージ変換



SrVO<sub>3</sub>: M. Imada and T. Miyake (2010)

- DFTコードが使う基底に依存しない
- ワニア関数の最適化が必要

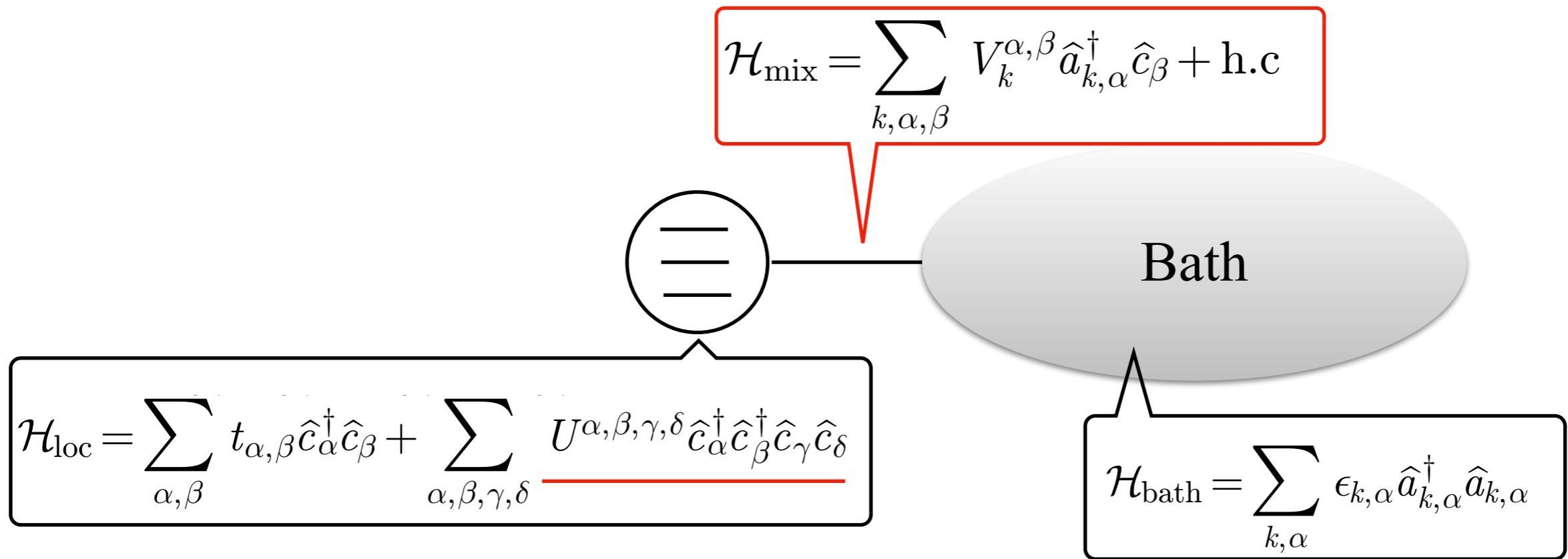
Projectors

<http://hauleweb.rutgers.edu/tutorials/Overview.html>

M. Aichorn *et al.*, PRB **80**, 085101 (2009)

[https://triqs.github.io/dft\\_tools/master/\\_downloads/TutorialDmftproj.pdf](https://triqs.github.io/dft_tools/master/_downloads/TutorialDmftproj.pdf)

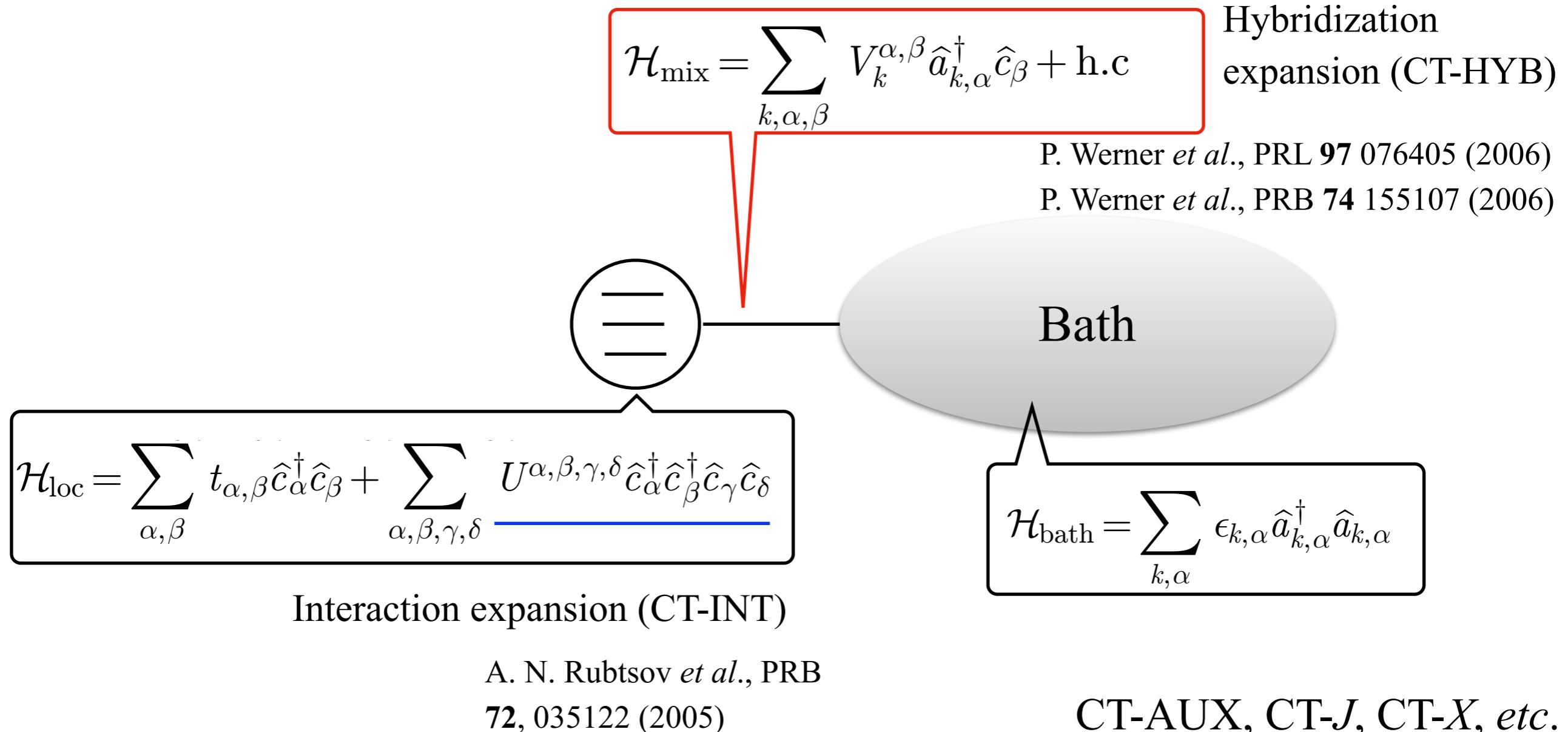
# Quantum (Anderson) impurity problem



NRG, Exact diagonalization, Hubbard-I, **CT-QMC** etc.

# Continuous-time Monte Carlo method

Review: E. Gull *et al.*, RMP **83**, 349 (2011)



- A serious expansion of partition function
- Sign problem in solving multi-orbital model

# CT-HYB

P. Werner *et al.*, PRL **97** 076405 (2006)

P. Werner *et al.*, PRB **74** 155107 (2006)

$$\begin{aligned} Z = \text{Tr}[e^{-\beta \mathcal{H}}] &= \text{Tr}\left[e^{-\beta \mathcal{H}_1} T e^{-\int_0^\beta d\tau \mathcal{H}_2(\tau)}\right] \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^\beta d\tau_1 \cdots \int_{\tau_{n-1}}^\beta d\tau_n (-1)^n \text{Tr}\left[e^{-(\beta-\tau_n)\mathcal{H}_1} \mathcal{H}_2 e^{-(\tau_n-\tau_{n-1})\mathcal{H}_1} \cdots \mathcal{H}_2 e^{-\tau_1 \mathcal{H}_1}\right] \end{aligned}$$

$$\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_{\text{loc}} + \mathcal{H}_{\text{bath}} \text{ and } \mathcal{H}_2 = \mathcal{H}_{\text{mix}}$$

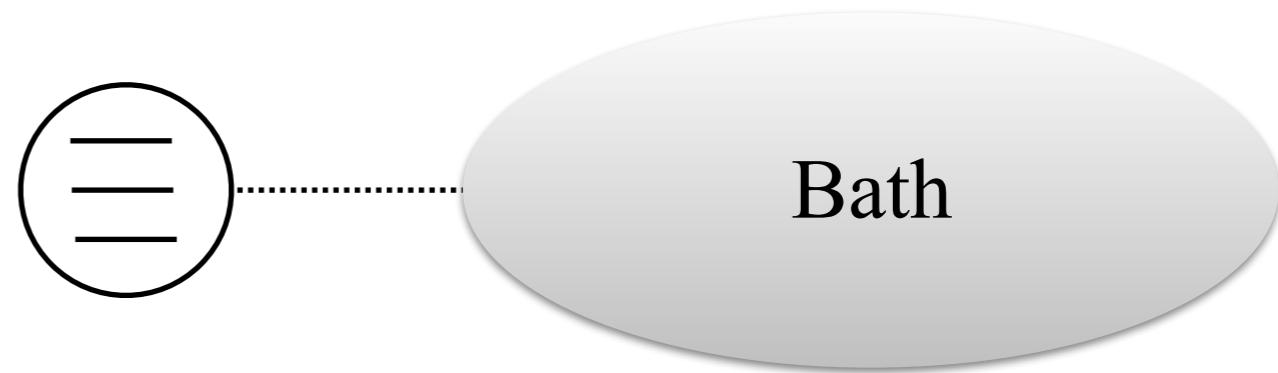


- Multi-orbital models with general instantaneous interactions
- Low expansion order in correlated regime
- Measurement of single-/two-particle Green's functions

# Hubbard I approximation

J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. London A**276**, 238 (1963)

- Insulating solution at integer fillings
- Multi-orbital systems
- Real-frequency data



# 発表概要

1. 背景：強相関電子電子系
2. 第一原理計算・動的平均場近似の概要
3. 既存のソフトウェア紹介
4. DCoreの説明

# 既存のソフトウェア

## • TRIQS: A Toolbox for Research on Interacting Quantum Systems

<https://triqs.ipht.cnrs.fr/>

- Green's function libraries
- Quantum impurity solvers
- Interface with *ab-initio* codes

Pythonでライブラリを組み合わせて、物質、模型ごとにプログラムを作る必要あり

## • DFT + Embedded DMFT Functional

<http://hauleweb.rutgers.edu/tutorials/>  
Rutger's university

- Quantum impurity solvers
- Charge self consistency with Wien2k
- *License issues*

## • ALPSCore project

<https://alpscore.org>

- Continuous-time quantum impurity solvers
- Hybridization-expansion algorithm  
HS, E. Gull, P. Werner (2017)
- Interaction-expansion algorithm  
HS, Y. Nomura, E. Gull, in preparation

## • iQIST (Interacting Quantum Impurity Solver Toolkit)

<https://github.com/iqist/iqist>

- Quantum impurity solvers

## • w2dynamics

M. Wallerberger *et al.*, arXiv:1801.10209v1

- Quantum impurity solver

誰もが簡単に使えるようなソフトウェアが必要  
(理論家にも実験家にも) → **DCore**

# TRIQS: A Toolbox for Research on Interacting Quantum Systems

<https://triqs.ipht.cnrs.fr/>

<https://triqs.github.io/triqs/master/tour/ctqmc.html>

▶ C++, Pythonライブラリ

主要な機能をPythonから利用可能

▶ 開発者は欧米中心

▶ 最新のC++言語環境が必要

TRIQS 1.4 (C++14), TRIQS 2.0 (C++17)

物性研システム  
μB OK

DCoreはまだ  
未対応

```
from pytriqs.gf import *
from pytriqs.operators import *
from pytriqs.applications.impurity_solvers.cthyb import Solver

# Parameters
D, t, U = 1.0, 0.2, 4.0
e_f, beta = -U/2.0, 50.0

# Construct the impurity solver with the inverse temperature
# and the structure of the Green's functions
S = Solver(beta = beta, gf_struct = {'up':[0], 'down':[0]})

# Initialize the non-interacting Green's function S.G0_iw
for spin, g0 in S.G0_iw:
    g0 << inverse( iOmega_n - e_f - t**2 * Flat(D) )

# Set the solver parameters.
params = {}
params['n_cycles'] = 1000000
params['length_cycle'] = 200
params['n_warmup_cycles'] = 10000
params['measure_g_1'] = True

# Number of QMC cycles
# Length of one cycle
# Warmup cycles
# Measure G in Legendre

# Run the solver. The result will be stored in S.G_tau.
S.solve(h_int = U * n('up',0) * n('down',0), \**params)

# Save the results in an hdf5 file (only on the master node).
from pytriqs.archive import HDFArchive
import pytriqs.utility.mpi as mpi

if mpi.is_master_node():
    Results = HDFArchive("solution.h5", 'w')
    Results["G_tau"] = S.G_tau
    Results["G_1"] = S.G_1
```

# CT-HYB

オープンソース実装

	Correct measurement of off-diagonal components of Green's function	Two-particle Green's functions ( <i>not supported by DCore yet</i> )
ALPSCore/CT-HYB	Y	Y
TRIQS/cthyb	N	N
iQIST	N	N
w2dynamics	Y	Y

# ALPS/CT-HYB

HS, E. Gull, P. Werner, Computer Physics Communications (2017)  
<https://github.com/ALPSCore/CT-HYB>

- ▶ C++プログラム (かなり古い環境でも動く  
C++03)
- ▶ テキストファイル+HDF5ファイルベース  
のインターフェース
- ▶ スピン軌道相互作用
- ▶ グリーン関数の非対角成分の計測

```
seed=20
timelimit=600

model.sites=3
model.spins=2
model.coulomb_tensor_input_file="Uijkl.txt"
model.hopping_matrix_input_file="hopping.txt"
model.beta=20.0
model.delta_input_file="delta.txt"
model.n_tau_hyb=1000
```

TRIQSからシームレス呼び出す  
ことも可能 (Python, オプション)

# DCore : 開発背景 既存のソフトウェア

• TRIQS: A Toolbox for Research on Interacting Quantum Systems

<https://triqs.ipht.cnrs.fr/1.x/index.html>

- Green's function libraries
- Quantum impurity solvers
- Interface to Wannier 90, Wien2k

• ALPSCore project

<https://alpscore.org>

- Monte Carlo libraries
- Quantum impurity solvers

Only single-orbital code in *original* ALPS

Pythonでライブラリを組み合わせて、物質、模型ごとにプログラムを作る必要あり

• DFT + Embedded DMFT Functional

<http://hauleweb.rutgers.edu/tutorials/>  
Rutger's university

- Quantum impurity solvers
- Charge self consistency with Wien2k
- License issues



→ 既存のライブラリを組み合せたソフトウェア開発  
誰もが簡単に使えるようにする！

• iQIST (Interacting Quantum Impurity Solver Toolkit)

<https://github.com/iqist/iqist>

- Quantum impurity solvers

• w2dynamics

M. Wallerberger *et al.*, arXiv:1801.10209v1

- Quantum impurity solver

# 発表概要

1. 背景：強相関電子電子系
2. 第一原理計算・動的平均場近似の概要
3. 既存のソフトウェア紹介
4. DCoreの説明

# DCore : 開発背景 ソフトウェア開発・高度化プロジェクト

学術的・社会的ニーズが高い、物質科学計算用ソフトウェアの開発・高度化  
簡便なシミュレーション環境を物性研スパコン上に構築  
全国共同利用スパコンユーザー層の底上げをする。

## ユーザビリティ向上



プリインストール

物質科学計算用ソフトウェア

のユーザビリティ向上

(機能整備、新規機能追加 etc.)

1~2ソフトウェア/年

オープンソースソフトウェアで公開

## 2015-2016年で高度化されたソフトウェア一覧

K<sub>w</sub>(2016)



数値ライブラリ  
新規開発

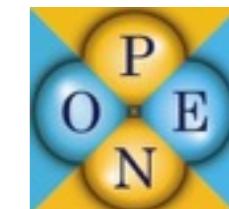
→  
機能強化

HΦ (2015) mVMC(2016)



強相関系向け量子格子模型ソルバー  
既存コード整備・機能追加

OpenMX (2015)

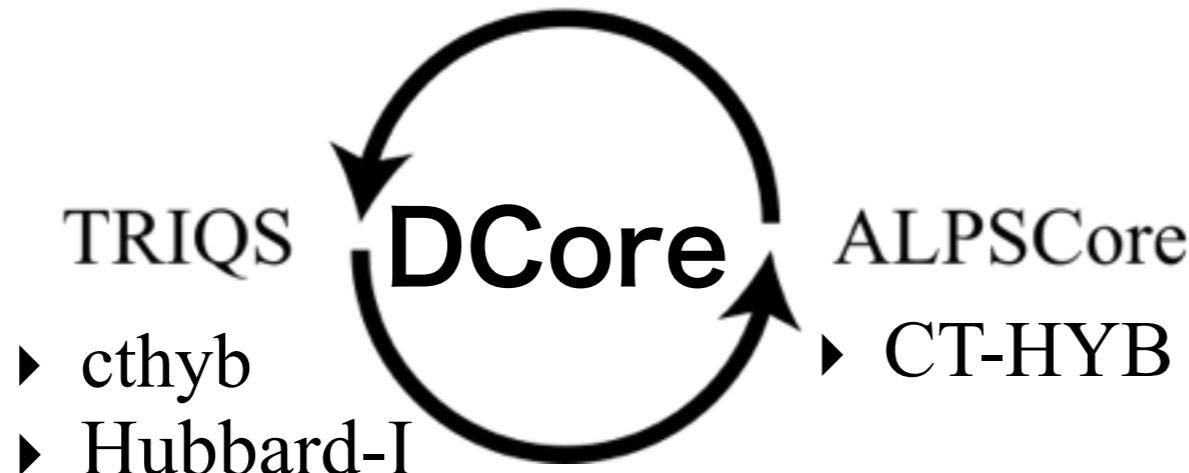


第一原理計算ソフトウェア  
機能新規追加

# DCore : 開発背景

2017年度ソフトウェア開発・高度化プロジェクトで開発！

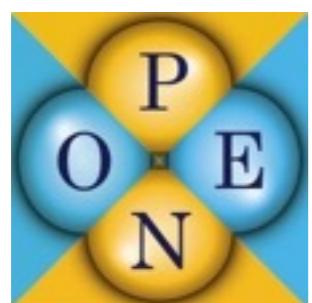
Connecting power of elaborate TRIQS and ALPS libraries



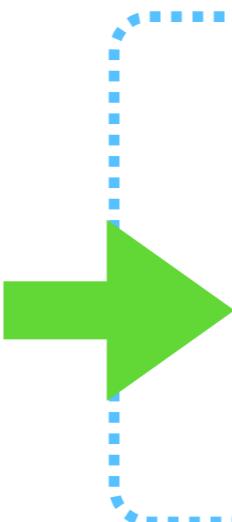
- テキストベースのインターフェース
- ▶ 自己無撞着計算
- ▶ 物理量計算
- ▶ モデル定義

Output: 自己エネルギー、グリーン関数、スペクトル関数

第一原理計算を用いたモデル生成  
バンド構造 (Wannier90形式)

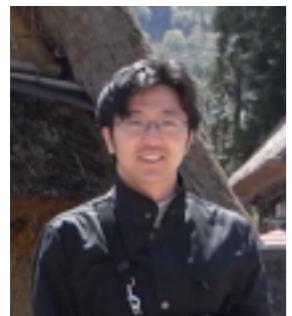


相互作用 (Wannier90形式)



# DCore : 基本情報

## ▶ DCore 開発者 (自分は除く)



吉見一慶



河村光晶



加藤岳生



品岡寛

(埼玉大学 理学部) (東北大学 理学部)



大槻純也

ソフトウェア高度化チーム (東京大学 物性研)

提案者

連携協力者

## ▶ 言語

- Python2.7
- C++14 (for building TRIQS)

## ▶ ライセンス



オープンソースソフトウェアなので、誰でも利用可能！

## ▶ 動作環境

- Linux , OS Xでの動作確認済

# DCore : 基本情報 機能一覧

## ▶ モデル

- 格子形状
  - 標準的な格子 : Bethe, chain, square, cubic lattice
  - Wannier90形式 : DFT calculations with/without spin-orbit coupling
- 相互作用
  - Slater-Kanamori interaction,
  - 制限RPA法を用いて導出した有効相互作用 (Wannier90形式)  
RESPACK: <http://ma.cms-initiative.jp/ja/listapps/repack/repack>

## ▶ 自己無撞着計算

- 非磁性計算、コリニア磁気構造

## ▶ 物理量

- 自己エネルギー  $\Sigma(i\omega_n)$
- スペクトル関数  $A(\omega), A(k, \omega)$

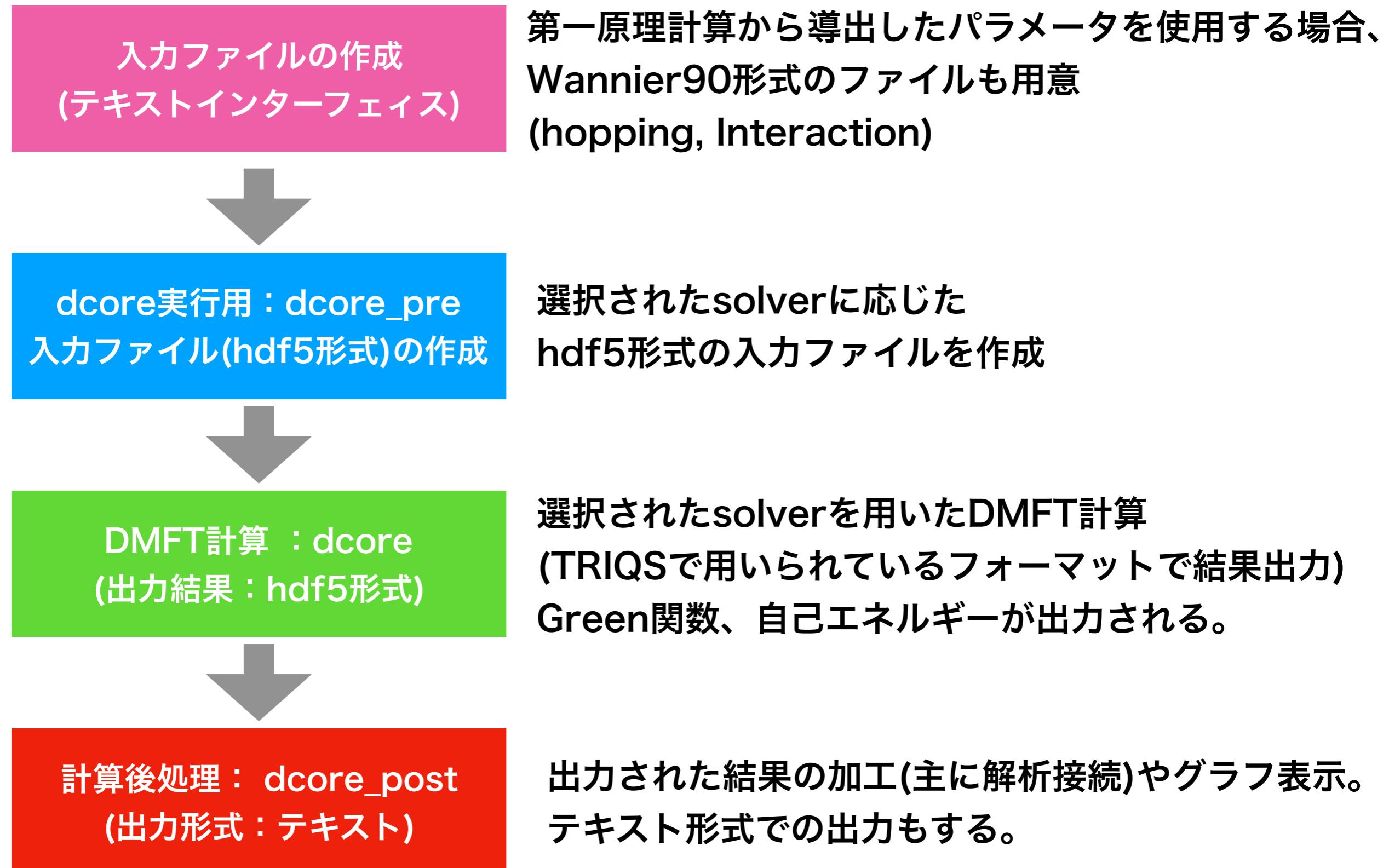
物理量は今後追加予定  
開発者としての参加を歓迎！

## ▶ MPI並列化

- 自己無撞着計算 (implemented in TRIQS/DFTools)
- 量子不純物ソルバー (ALPSCore/CT-HYB, TRIQS/cthyb)

DCoreで扱える相互作用  
入力・出力ファイルに関する説明 etc.

# DCore: 基本情報(6) 計算の流れ



# DCore: 基本情報(7) 入力ファイル

全5つのblockから構成される

[model] : 模型に関する設定  
格子  
軌道の数・種類  
電子数  
相互作用の種類  
相互作用の大きさ

[impurity\_solver] : ソルバーの設定  
TRIQS/hubbard-l, TRIQS/cthyb,  
ALPS/cthyb

[control] : ソルバーの計算条件の設定  
次のステップに進む際のmixingパラメータ  
DMFT-loopの最大ループ数  
再計算フラグ

[system] : 系に関する設定  
虚時間の分点の数  
松原振動数の分点の数  
逆温度  
化学ポテンシャル  
etc…

[tool] : ポスト処理時の設定  
最大・最小実振動数  
k点の始点・終点と分点数  
振動数の虚部のシフト量  
etc.

ref.) <https://issp-center-dev.github.io/DCore/reference/input.html>

# 計算例: single-band 2D Hubbard model (1)

## dmft\_square.ini

<https://issp-center-dev.github.io/DCore/tutorial/square/square.html>

```
[model]
seedname = square
lattice = square
norb = 1
nelec = 1.0
t = -1.0
kanamori = [(2.0, 0.0, 0.0)] ← 軌道数

[system]
beta = 40.0 ← 電子数
nk = 8
n_iw = 1000
prec_mu = 0.001
← ホッピング

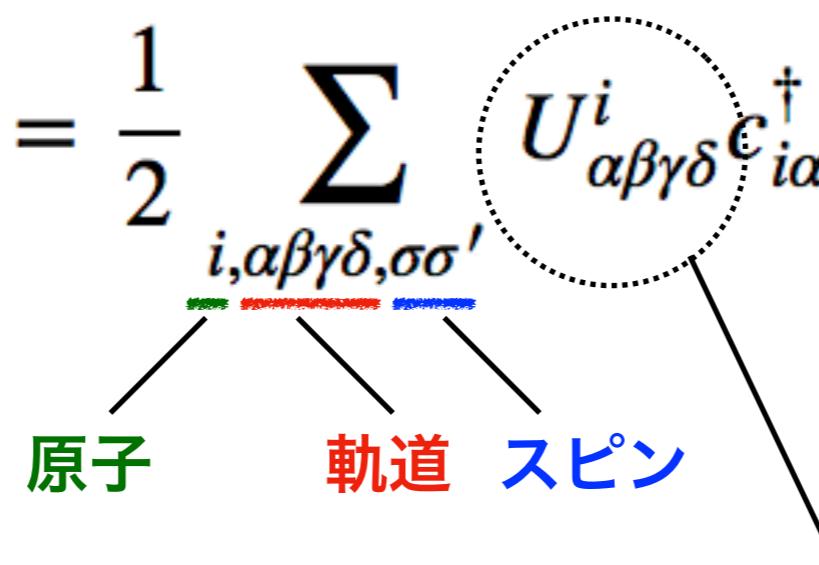
[impurity_solver]
name = TRIQS/hubbard-I ← 相互作用

[control]
max_step = 7 ← 逆温度

[tool]
broadening = 0.4
nnode = 4
knode = [(G,0.0,0.0,0.0), (X,0.5,0.0,0.0), (M,0.5,0.5,0.0), (G,0.0,0.0,0.0)]
nk_line = 100
omega_max = 6.0
omega_min = -5.0
Nomega = 400 ← 不純物ソルバー

A(k,ω)を計算するパス
```

# 原子内相互作用

$$\hat{H}_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{i,\alpha\beta\gamma\delta,\sigma\sigma'} U_{\alpha\beta\gamma\delta}^i c_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{i\beta\sigma'}^\dagger c_{i\delta\sigma'} c_{i\gamma\sigma}$$


原子 軌道 スピン 原子に依存した4階テンソル

DCoreでは、以下の形式をサポート

- ・少数のパラメータに依存した標準的な形式の選択 (kanamori相互作用など)
- ・RESPACK形式での入力

# Kanamori相互作用

$$\begin{aligned}U_{aaaa} &= U, \\U_{\alpha\beta\alpha\beta} &= U' \quad (\alpha \neq \beta), \\U_{\alpha\beta\beta\alpha} &= J \quad (\alpha \neq \beta), \\U_{\alpha\alpha\beta\beta} &= J \quad (\alpha \neq \beta),\end{aligned}$$

where  $U, U', J$  at each correlated shell are specified by the parameter `kanamori` as

```
interaction = kanamori
kanamori = [(U_1, U'_1, J_1), (U_2, U'_2, J_2), ...]
```

Slater型など、他のパラメータ化もサポート

# 計算例: single-band 2D Hubbard model (2)

<https://issp-center-dev.github.io/DCore/tutorial/square/square.html>

1. 入力ファイルからHDF5ファイルを作成

```
> dcore_pre dmft_square.ini
```

dmft\_square.ini → square.h5

2. 自己無撞着計算

```
> dcore dmft_square.ini
```

▶ dmft\_square.ini → square.out.h5  
▶ square.h5

3. 自己無撞着計算の収束を確認

```
> dcore_check dmft_square.ini
```

4. 物理量解析

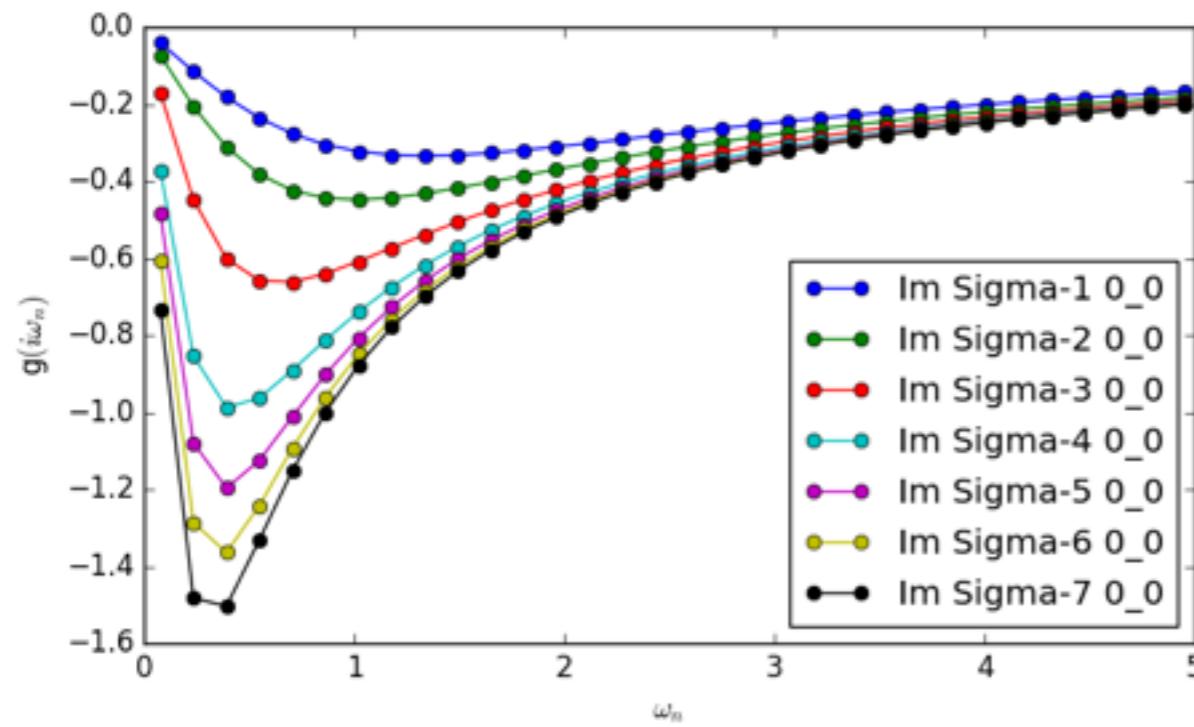
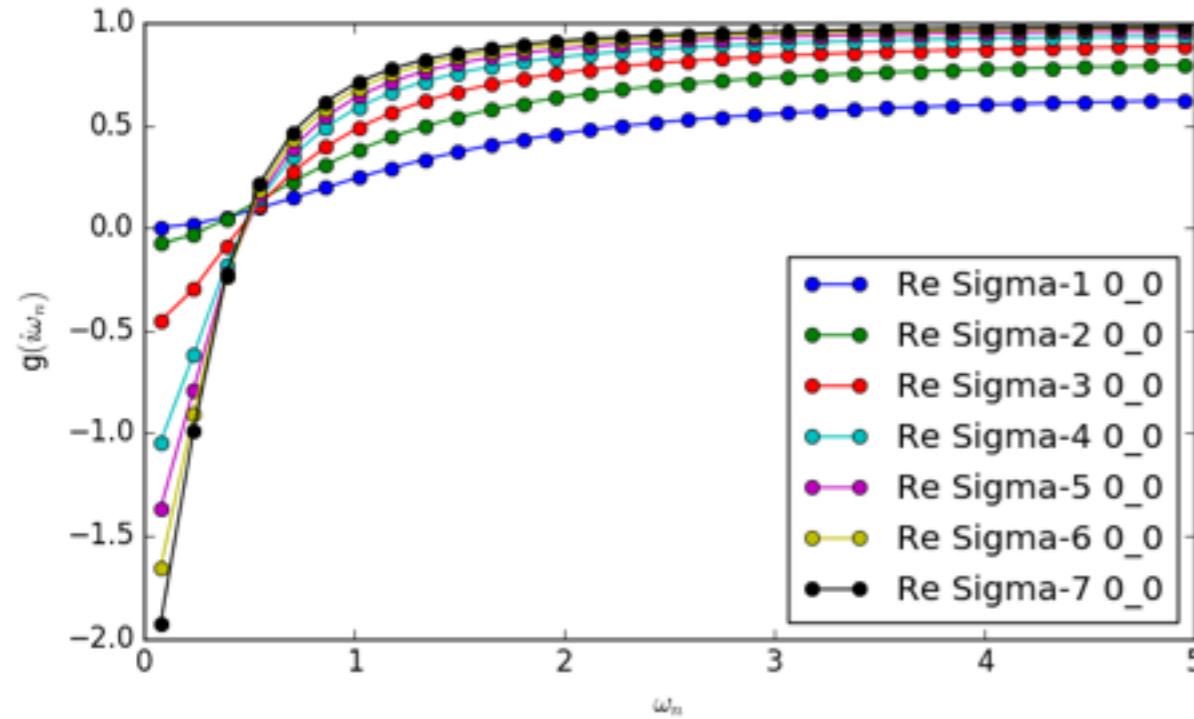
```
> dcore_post dmft_square.ini
```

# 計算例: single-band 2D Hubbard model (3)

<https://issp-center-dev.github.io/DCore/tutorial/square/square.html>

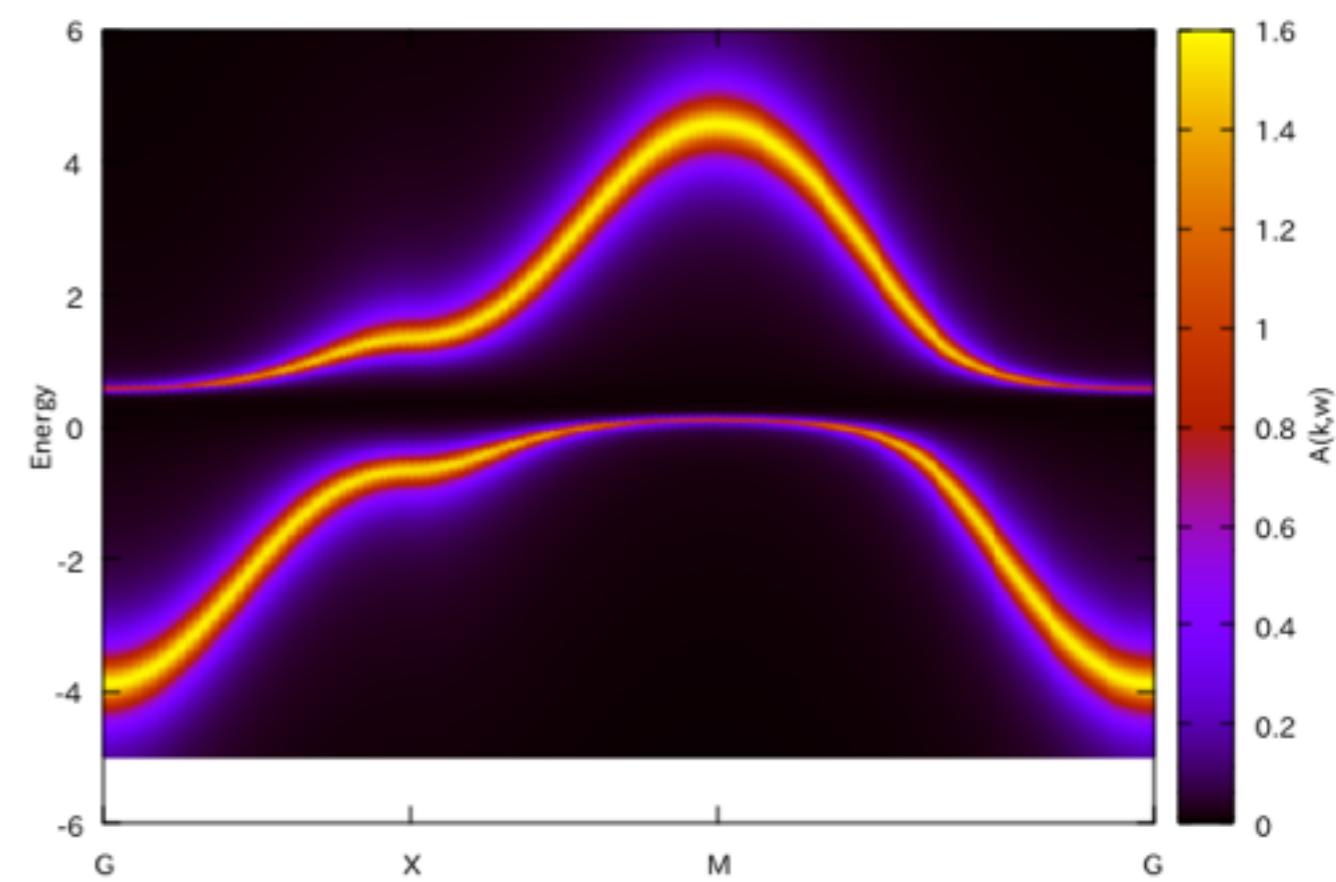
## 3. 自己無撞着計算の収束を確認

```
> dcore_check dmft_square.ini
```



## 4. 物理量解析

```
> dcore_post dmft_square.ini  
> gnuplot square_akw.gp
```



# 計算例: SrVO<sub>3</sub> with Quantum ESPRESSO (1)

[https://issp-center-dev.github.io/DCore/tutorial/srvo3\\_qe/srvo3.html](https://issp-center-dev.github.io/DCore/tutorial/srvo3_qe/srvo3.html)

## 0. Quantum ESPRESSOによる最局在ワニア関数作成

### 1. 入力ファイルからHDF5ファイルを作成

> dcore\_pre srvo3.ini

srvo3.ini

```
[model]
lattice = wannier90
seedname = srvo3
nelec = 1.0
ncor = 1
norb = 3
kanamori = [(3.419, 2.315, 0.530)]
bvec=[(1.627091,0.0,0.0),(0.0,1.627091,0.0),(0.0,0.0,1.627091)]
```

### 2. 自己無撞着計算

> dcore srvo3.ini

### 3. 自己無撞着計算の収束を確認

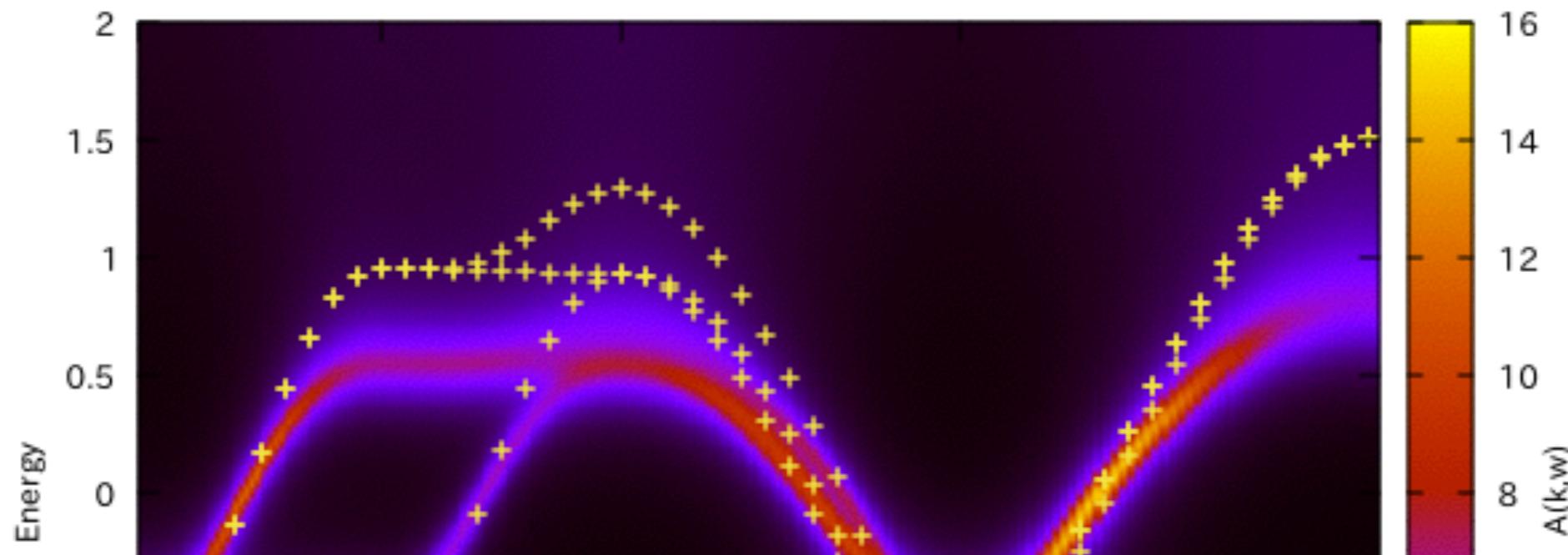
> dcore\_check srvo3.ini

### 4. 物理量解析 $i\omega_n \rightarrow \omega$

> dcore\_post srvo3.ini

# 計算例: SrVO<sub>3</sub> with Quantum ESPRESSO (2)

[https://issp-center-dev.github.io/DCore/tutorial/srvo3\\_qe/srvo3.html](https://issp-center-dev.github.io/DCore/tutorial/srvo3_qe/srvo3.html)



```
[model]
lattice = wannier90
seedname = srvo3
nelec = 1.0
ncor = 1
norb = 3
interaction = respack
bvec=[(1.627091,0.0,0.0),(0.0,1.627091,0.0),(0.0,0.0,1.627091)]
```

<https://issp-center-dev.github.io/DCore/documentation.html>