

強相関極限解析のデータ構造

埼玉大理工
岩崎 龍太

2023 年 1 月 30 日

概要

強相関極限解析に用いるデータ構造についてまとめる。具体例を挙げる際には、簡単のため単純立方格子で軌道自由度のない場合を考える。

1 一般論

このノートで用いる記法を表 1 にまとめる。なお、特定の 2 サイト間の結合定数など、副格子自由度を明示的に表記する必要がない場合には i, j によりサイトを指定する場合がある。

解析に必要なデータは次の 3 点である。

1. `***lattice.dat`

基本並進ベクトルとそれを用いて表した副格子の座標 (表 2 参照)

2. `***iiij.dat`

ij サイト間の結合定数の行列要素 (表 3 参照)

3. `***base.dat`

副格子 λ における $SU(N)$ 生成子の行列要素 (表 4 参照)

以下ではそれぞれのデータ内容についてまとめる。

結晶中の全てのサイトは

$$\mathbf{r}_{\ell, \lambda} = \mathbf{R}_{\ell} + \mathbf{d}_{\lambda} \quad (1)$$

により指定できる。ここで ℓ と λ はそれぞれユニットセルと副格子を指定するインデックスである。さらに \mathbf{R}_{ℓ} と \mathbf{d}_{λ} は結晶の基本並進ベクトル \mathbf{a}_i を用いて

$$\mathbf{R}_{\ell} = \sum_{i=1}^3 n_i \mathbf{a}_i \quad (2)$$

$$\mathbf{d}_{\lambda} = \sum_{i=1}^3 d_{\lambda}^i \mathbf{a}_i \quad (3)$$

表 1: このノートで用いる表記。

記法	意味
\mathbf{R}	ユニットセルの位置ベクトル
\mathbf{a}_i	$i (= 1, 2, 3)$ 方向の基本並進ベクトル
\mathbf{d}_{λ}	副格子 λ のユニットセル内での位置ベクトル
\hat{x}_{μ}	デカルト座標系における $\mu (= x, y, z)$ 方向の単位ベクトル
ℓ (イオタ)	ユニットセルを指定する整数のセット n_i
λ, λ'	副格子のインデックス
ξ, ξ'	$SU(N)$ 生成子の成分
α, β	電子系における局所的なハミルトニアン固有状態のインデックス

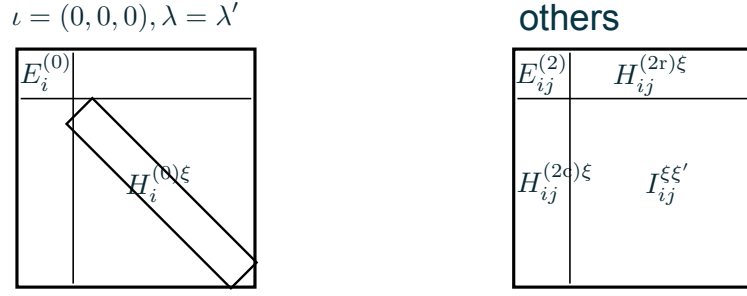


図 1: $I_{ij}^{\xi\xi'}$ の各ブロックの意味。(左) $\iota = (0, 0, 0), \lambda = \lambda'$ つまり、自分自身のサイトを表し、対角成分のみが有限となり得る。(右) その他のサイト。

と書かれる。ここで $n_i \in \mathbb{Z}, d_\lambda^i \in \mathbb{R}$ であり $0 \leq d_\lambda^i < 1$ である。基本並進ベクトルは

$$\mathbf{a}_i = \sum_{\mu=x,y,z} d_i^\mu \hat{\mathbf{x}}_\mu \quad (4)$$

と書かれるので、これらの関係を用いて全てのサイトはデカルト座標で表現が可能である。

サイト間のホッピングを 2 次摂動により取り入れることで、2 サイトの有効ハミルトニアンは

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}^{(ij)} = - \sum_{i\xi} H_i^\xi \mathcal{O}_i^\xi + \sum_{\xi\xi'} I_{ij}^{\xi\xi'} \mathcal{O}_i^\xi \mathcal{O}_j^{\xi'} \quad (5)$$

$$= \sum_i E_i^{(0)} - \sum_i \sum_\xi H_i^{(0)\xi} \mathcal{O}_i^\xi + E_{ij}^{(2)} - \sum_\xi H_{ij}^{(2r)\xi} \mathcal{O}_j^\xi - \sum_\xi H_{ij}^{(2c)\xi} \mathcal{O}_i^\xi + \sum_{\xi\xi'} I_{ij}^{\xi\xi'} \mathcal{O}_i^\xi \mathcal{O}_j^{\xi'} \quad (6)$$

と書くことができる。 \mathcal{O}_i^ξ は $\text{SU}(N)$ 生成子で、元の電子系の局所的なハミルトニアンの固有状態 $|\alpha\rangle_i$ を用いて

$$\mathcal{O}_i^\xi = \sum_{\alpha\beta} |\alpha\rangle_i O_{\alpha\beta}^\xi |\beta\rangle \quad (7)$$

である。行列要素 $O_{\alpha\beta}^\xi$ は文献 [1] の SM3 にまとめてあるが、 ξ の順番は文献での表記と実際の出力データは異なるので注意願いたい。2 行目は物理的な意味が明瞭になるように分割して示したものであり

$$E_i^{(0)} = -H_i^1, \quad H_i^{(0)\xi} = H_i^\xi \quad (8)$$

$$E_{ij}^{(2)} = I_{ij}^{11}, \quad H_{ij}^{(2r)\xi} = -I_{ij}^{1\xi}, \quad H_{ij}^{(2c)\xi} = -I_{ij}^{\xi 1}, \quad I_{ij}^{\xi\xi'} = I_{ij}^{\xi\xi'} \quad (9)$$

である。 \sum'_ξ は恒等演算子を除いて和をとることを表す。なお、一体近似をする上では $H_{ij}^{(2r)\xi}$ と $H_{ij}^{(2c)\xi}$ はダブルカウントしてしまうので注意が必要である。ある i, j を指定した際の $I_{ij}^{\xi\xi'}$ を (ξ, ξ') について行列表示したときの各ブロックの意味を図 1 に示す。

2 1 軌道の場合の例

具体例として 1 軌道ハバードモデル

$$\mathcal{H} = t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} \quad (10)$$

を考える。 $\sum_{\langle ij \rangle}$ は最近接サイトのみ和をとることを表し、 $t = 1 \text{ eV}, U = 8 \text{ eV}$ とする。ハーフフィルドを考えるとモデルヒルベルト空間の次元数は $n_{\text{lev}}(\lambda) = 2$ である。よって局在有効モデルは $\text{SU}(2)$ 生成子

$$O^1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad O^2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad O^3 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad O^4 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (11)$$

で記述される。

表 2: `***_lattice.dat` のデータ構造。インデックスは 1 から始まる。

date				
$a_{i=1}^{\mu=x}$	$a_{i=1}^{\mu=y}$	$a_{i=1}^{\mu=z}$	$a_{i=2}^{\mu=x}$	\cdots
$d_{\lambda}^{i=1}$	$d_{\lambda}^{i=2}$	$d_{\lambda}^{i=3}$		
\vdots	\vdots	\vdots		

表 3: `***_iiij.dat` のデータ構造。インデックスは 1 から始まる。なお、本文で示したように $(n_1, n_2, n_3) = (0, 0, 0)$ の場合には意味が異なるため、具体的に示した。ただし $n_{\text{sub}} = \sum_{\lambda} 1$ 及び $n_{\text{lev}}(\lambda)$ は副格子 λ でのモデルヒルベルト空間の次元数である。よって ξ は恒等演算子を含め $[n_{\text{lev}}(\lambda)]^2$ 個ある。

date									
n_{sub}									
$n_{\text{lev}}(\lambda)$ \cdots									
n_1	n_2	n_3	λ_i	λ_j	ξ	ξ'	$\text{Re } I_{ij}^{\xi\xi'}$	$\text{Im } I_{ij}^{\xi\xi'}$	
							\vdots	\vdots	
0	0	0	λ_i	$\lambda_j (= \lambda_i)$	ξ	ξ	$\text{Re } H_i^{\xi}$	$\text{Im } H_i^{\xi}$	
							\vdots	\vdots	
0	0	0	λ_i	$\lambda_j (\neq \lambda_i)$	ξ	ξ'	$\text{Re } I_{ij}^{\xi\xi'}$	$\text{Im } I_{ij}^{\xi\xi'}$	
							\vdots	\vdots	

表 4: `***_base.dat` のデータ構造。インデックスは 1 から始まる。

date					
λ	ξ	α	β	$\text{Re } O_{\alpha\beta}^{\xi}$	$\text{Im } O_{\alpha\beta}^{\xi}$
				\vdots	\vdots

2.1 副格子自由度のない単純立方格子

ファイル名は cubic1sub_***.dat である。基本並進ベクトルは

$$\mathbf{a}_1 = (1, 0, 0) \quad (12)$$

$$\mathbf{a}_2 = (0, 1, 0) \quad (13)$$

$$\mathbf{a}_3 = (0, 0, 1) \quad (14)$$

である。

2.2 2 副格子の単純立方格子

ファイル名は cubic_***.dat である。文献 [1] の SM6 に対応する。格子形状は bcc 構造の最近接サイトを非等価な 2 副格子 ($\lambda = A, B$) とした単純立方格子である。よって

$$\mathbf{a}_1 = (1, 0, 0) \quad (15)$$

$$\mathbf{a}_2 = (0, 1, 0) \quad (16)$$

$$\mathbf{a}_3 = (0, 0, 1) \quad (17)$$

$$\mathbf{d}_A = \mathbf{0} \quad (18)$$

$$\mathbf{d}_B = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \\ \mathbf{a}_3 \end{pmatrix} \quad (19)$$

である。

参考文献

[1] R. Iwazaki, H. Shinaoka, and S. Hoshino, arXiv:2301.09824 (2023).