

平成 26 年 5 月 14 日現在

機関番号：11301

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2012～2013

課題番号：24654116

研究課題名(和文)非平衡状態のダイナミクス解明とナノスケール量子輸送の理論研究

研究課題名(英文)Study of dynamics in non-equilibrium state and nanoscale quantum transport

研究代表者

清水 幸弘 (SHIMIZU, Yukihiro)

東北大学・工学(系)研究科(研究院)・准教授

研究者番号：70250727

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,100,000円、(間接経費) 630,000円

研究成果の概要(和文)：スピン注入磁化反転素子などのナノスケールな系における短時間の状態変化，すなわち，非平衡状態における状態のダイナミクスの解明を目的として，状態の時間発展を数値計算する手法の開発を行った．連続体模型においては，量子輸送理論を用い，電子ガス模型の状態密度と確率分布関数を自己無撞着に数値計算する計算機プログラムを開発した．格子模型においては，行列積状態の変分波動関数の方法を用いて，ハバード模型に従い状態が時間変化する系の数値計算を行った．常磁性状態と強磁性状態を接続した系において，電子間相互作用がスピン流の抵抗となることを示した．

研究成果の概要(英文)：In order to understand the dynamics of non-equilibrium state in nanoscale systems such as spintronics device, we develop the numerical solution for the time evolution of non-equilibrium state. For the continuum model we develop the self-consistent computation of the density of states and the probability distribution function by employing the quantum transport theory. For the correlated lattice model, we employ the so called matrix product states (MPS) and the time evolving block decimation (TEBD) for the Hubbard model. We show that the electron correlation blocks the spin current at the interface of paramagnetic and ferromagnetic states.

研究分野：物理学

科研費の分科・細目：数理物理・物性基礎

キーワード：量子輸送理論 非平衡状態 行列積状態 電子相関

1. 研究開始当初の背景

スピン注入磁化反転を利用するスピントロニクス素子や遷移金属酸化物薄膜における電場誘起抵抗変化素子 (ReRAM) が、次世代の重要な素子技術として注目されている。これらの素子においては、数十ナノ秒オーダーという短時間のバイアス印可によって系の磁気特性や電気抵抗が大きく変化する。光誘起相転移現象も短時間の光照射によって引き起こされる。これらの現象を微視的に理解するためには、系が熱平衡状態に達するよりも短い時間スケールにおける「中間過程の追跡」が必要不可欠である。すなわち非平衡状態における電子状態やスピン状態の時間発展 (ダイナミクス) の研究が重要となる。従来の非平衡状態の輸送研究においては、Keldysh のグリーン関数を用いて電子状態を記述し、ボルツマン方程式を用いて確率分布関数の時間発展を記述する。しかしながら、この方法は「中間過程の追跡」には不十分である。

2. 研究の目的

背景に記したデバイスにおける現象の機構解明や素子の性能向上を目指した基礎研究のために、ミクロな模型に基づいた微視的理論研究が必要である。非平衡状態を取り扱う理論や計算手法の整備を本研究の目的とする。連続体模型においては、量子輸送方程式の理論に着目し、状態の時間発展を数値的に計算する手法を開発する。また、格子模型においては、行列積状態 (MPS) を変分波動関数とする方法を用いて状態の時間発展の追跡を行う。

3. 研究の方法

(1) 連続体模型において量子輸送理論を用いる方法

量子輸送理論の枠組みが最も簡単となる、クーロン相互作用をする電子ガスの模型を用いる。そのスペクトル関数 (状態密度) と確率分布関数の時間発展を自己無撞着に計算するために、非線形連立偏微分方程式である量子輸送方程式を数値的に解く計算機プログラムを開発する。

(2) 格子模型において行列積状態の変分法を用いる方法

設定した初期状態の時間発展を MPS の方法により数値計算する。一次元ハバード模型に従い状態を時間発展させる計算機プログラムを開発する。フェルミオン演算子を含む模型の時間発展を MPS の方法を用いて計算するために、以下の手順で研究を実施する。はじめに、フェルミオン演算子の反交換関係を満たすように MPS の方法を構築する。本研究において行列積演算子 (MPO) の方法を開発する。次に、数値計算のテストとして、相互作用の無い模型 ($U = 0$) の基底状態のエネルギー、および、電子数や運動量分布の計算結

果からこの手法の信頼性を確認する。次に、状態の時間発展の計算は、time-evolving block decimation (TEBD) と呼ばれる手法を用いる。TEBD は、時間発展演算子の Trotter 分解に特異値分解を組み合わせる手法である。保存量の計算誤差から時間発展の計算精度を評価する。

4. 研究成果

量子輸送方程式を用いた研究においては、非線形連立偏微分方程式の数値解の不安定性の問題が残り、状態の時間発展の計算結果の信頼性の確立が未だ十分ではない。ここでは、状態の時間発展の計算結果の信頼性が十分に確立できた行列積状態の変分波動関数を用いた研究の成果について報告する。

スピン系の模型に関して定式化されていた MPS の方法をフェルミオン模型に応用するために、本研究において、フェルミオンの反交換関係の符号を MPO の行列要素に含める新しい手法を提案した。MPO を用いたこの手法の定式化 (詳細は雑誌論文①) により、従来から用いられている仮想フェルミオンを用いる手法に比べて簡便にフェルミオン模型を MPS により取り扱うことが可能となった。この手法は、空間 2 次元の模型においても同様に定式化でき、今後空間 2 次元のフェルミオン模型にテンソルネットワークの方法を適用させるときにも有用となる。

MPS の方法は、波動関数の基底の係数に特異値分解を施して行列の積で表す近似を用い、それらの行列要素を変分最適化することによって決定する近似法である。変分最適化する行列の次元 (ボンド次元 D という) を小さくすると状態の情報量を圧縮することができ、数値計算時間の節約に寄与するが、基底の状態間のもつれ (エンタングルメント) を十分に取り入れることができない。そのため模型と必要な計算精度に応じた適切なボンド次元の同定が必要である。そのためには実際に数値計算を行う必要がある。

図 1 に一次元ハバード模型の基底状態のエネルギーの変分最適化の様子を示した。基底状態のエネルギーが厳密に求められる $U = 0$ を選び、テスト計算とした。境界条件は、開放境界条件とした。グラフの横軸が変分最適化を回数であり、縦軸が相対誤差を表している。各サイトを 2 回ずつ最適化することによって、基底状態にほぼ到達している。100 サイト程度の模型においてもボンド次元を $D = 64$ とすると、十分な計算精度が得られる。ハバード模型に MPS の手法を適用して実際に数値計算を行い、計算精度を明示した研究は、本研究が最初である。相互作用のある ($U \neq 0$) の場合においても基底状態のエネルギーの変分最適化の振る舞いは同様となる。少数サイトの厳密対角化を用いた研究によって、 $U \neq 0$ の場合には、 $U = 0$ の場合に比べて特異値分解の近似による誤差が少なくなると見積もられる。それ故に図 1 に示

したテスト計算による計算精度の評価は、 $U \neq 0$ の場合にも有効な評価となる。これらの詳細と周期境界条件を用いた場合の計算結果を雑誌論文①に発表済みである。

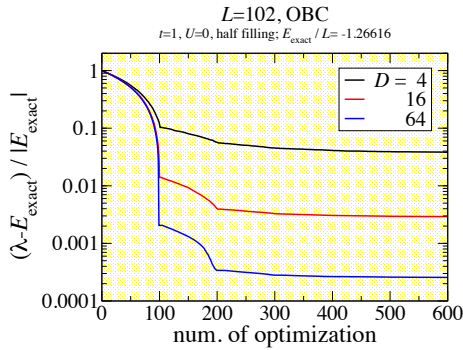


図 1: 一次元ハバード模型 ($U = 0$) の基底状態エネルギーの相対誤差。開放端境界条件を用いた。サイト数 $L = 102$ 。 D はボンド次元を表す。

変分最適化された基底状態を用いて物理量を計算することができる。電子数や相関関数の計算を行い、この手法による物理量の計算結果の信頼性を確認する。図 2 にサイト間相関関数の計算結果を示した。60 サイト程度離れたサイト間の長距離相関も計算できていることからエンタングルメントが十分に取り入れられていることがわかる。この結果をフーリエ変換して運動量分布を計算した結果を図 3 に示した。青線は、フェルミ波数近くの運動量分布における冪依存性をフィットした結果である。一次元ハバード模型における朝永・ラッティンジャー液体論により $\eta = 1.125$ となることが知られている。図 3 のフィッティングにおいては $\eta = 1.37$ となり、朝永・ラッティンジャー液体の臨界指数を決定する観点からは、ボンド次元を $D = 128$ としてもエンタングルメントの取り入れが不十分である。表 1 にボンド次元と臨界指数の関係を示した。

表 1: 一次元ハバード模型における臨界指数 η の数値計算結果。周期境界条件を用い、サイト数 $L = 202$, half filling, $U = 1$ として、ボンド次元 D を変化させた。

D	η
16	1.91
32	1.71
64	1.49
128	1.37

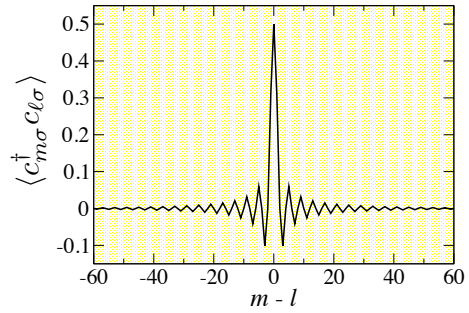


図 2: 一次元ハバード模型 (halffilling, $U = 1$) のサイト間相関関数。周期境界条件を用いた。サイト数 $L = 202$ 。ボンド次元 $D = 128$ 。

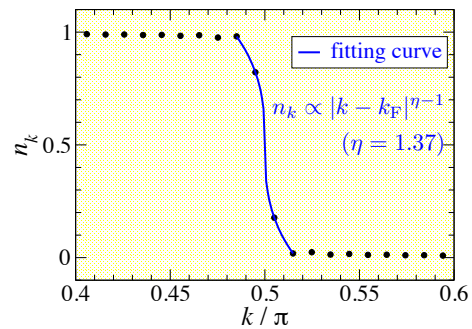


図 3: 一次元ハバード模型 (halffilling, $U = 1$) の運動量分布。周期境界条件を用いた。サイト数 $L = 202$ 。ボンド次元 $D = 128$ 。青色の実線は、朝永・ラッティンジャー液体論から知られている臨界指数と比較するためのフィッティング曲線。(本文参照)

物理量の時間発展を TEBD 法を用いて計算した結果について記す。初めにハバード模型のエネルギーや粒子数などの保存量の計算を行い、TEBD 法の計算精度を評価した。4 次の Trotter 分解を用いると、基底状態のエネルギー、粒子数ともに 20,000 ステップの時間発展時における相対誤差が 0.01% 以下となり、実用的な計算時間で信頼できる計算結果を得ることが可能である。

初期状態として、一次元 50 サイトの左半分を常磁性状態とし、右半分のサイトは上向きスピンの電子が各サイトに 1 つずつ占めている状態を与え、ハバード模型による時間発展を計算した。図 4 に初期状態からわずかに時間が経過した後の磁化の分布を示す。上向きスピンの電子が右側サイトから左側サイトに移動し、移動した上向きスピンの電子と同数の下向きスピンの電子が逆向きに移動し、電流を流さずにスピン流が流れる。クーロン相互作用 U を大きくするとスピン流は減少し、 U がスピン流の抵抗となる。さらに時間が経

過すると図5に示したようにスピン流の向きが逆向きになり，系全体は徐々に常磁性状態となる。

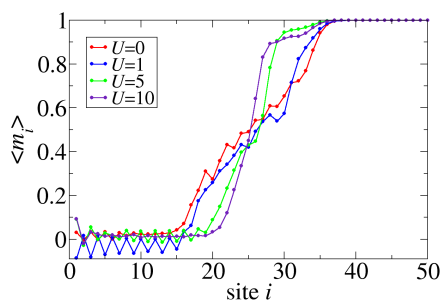


図4: $t = 5$ における磁化分布(各サイトの磁化)の U 依存性. 初期状態の磁化分布は, 左側半分のサイトを常磁性状態とし, 右半分のサイトをスピン分極させた状態とした. 状態の時間発展は, half fillingのハバード模型に従うとした. エネルギーの単位を[eV]とすると, $t = 1$ は 6.58×10^{-16} [秒]に対応する.

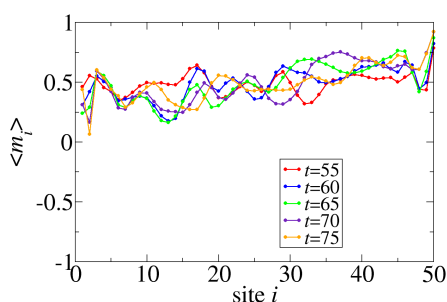
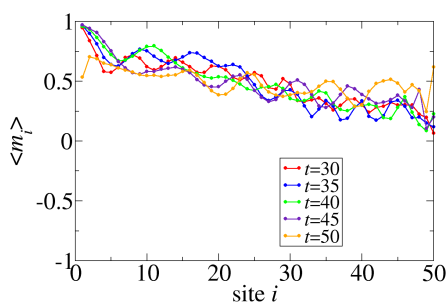


図5: 磁化分布(各サイトの磁化)の時間変化の計算結果. 初期状態の磁化分布は, 左側半分のサイトを常磁性状態とし, 右半分のサイトをスピン分極させた状態とした. 状態の時間発展は, half fillingのハバード模型に従うとした. t は時間を表す. $t = 50$ 程度の時間でスピン流の向きが逆向きになる.

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計1件)

- ① Yukihiro SHIMIZU Koji MATSUURA and Hikaru YAHAGI, Application of Matrix Product States to the Hubbard Model in One Spatial Dimension, JPS Conference Proceedings, 査読有, 1巻, 2014, 016011-1-5, DOI:016011, 10.7566/JSPCP.1.016011

[学会発表] (計5件)

- ① 矢作輝, 清水幸弘, 行列積状態を用いた変分法によるハバード模型の基底状態の時間発展に関する研究, 日本物理学会, 2013年9月28日, 徳島大学
- ② 松浦浩司, 清水幸弘, 二次元ハバード模型における FERMIONIC PEPS アルゴリズムの有用性の評価, 日本物理学会, 2013年9月28日, 徳島大学
- ③ 清水幸弘, ハバード模型における行列積状態変分波動関数とその数値計算法の開発, 日本物理学会, 2013年9月27日, 徳島大学
- ④ Yukihiro SHIMIZU Koji MATSUURA and Hikaru YAHAGI, Application of Matrix Product States to the Hubbard Model in One Spatial Dimension, The 12th Asia Pacific Physics Conference, 2013年7月16日, 幕張
- ⑤ 松浦浩司, 清水幸弘, PEPS(projected entanglement pair states)アルゴリズムのフェルミオン系への応用, 日本物理学会, 2013年3月27日, 広島大学

6. 研究組織

(1)研究代表者

清水 幸弘 (SHIMIZU, Yukihiro)
 東北大学・大学院工学研究科・准教授
 研究者番号: 70250727