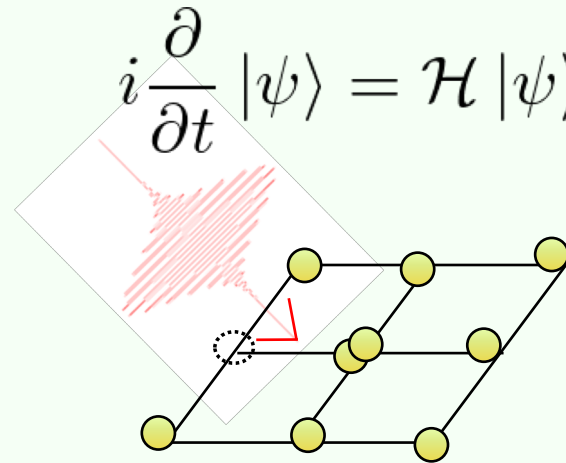


新機能の紹介(実時間発展)



東京大学 物性研究所

井戸 康太

量子ダイナミクス

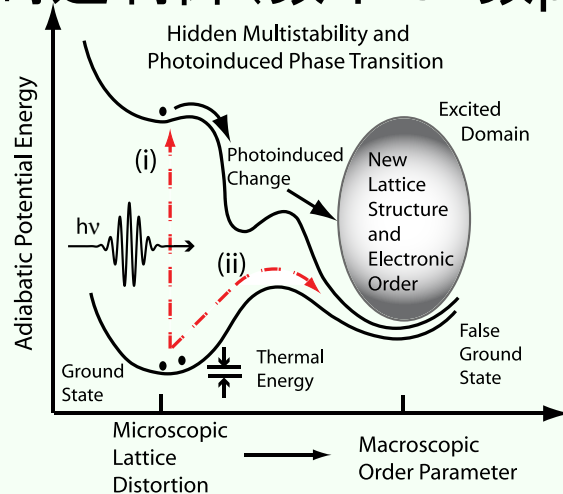
“強相関電子系”

多彩な現象が出現

- ・金属絶縁体転移
- ・高温超伝導
- ・磁気秩序
- ...

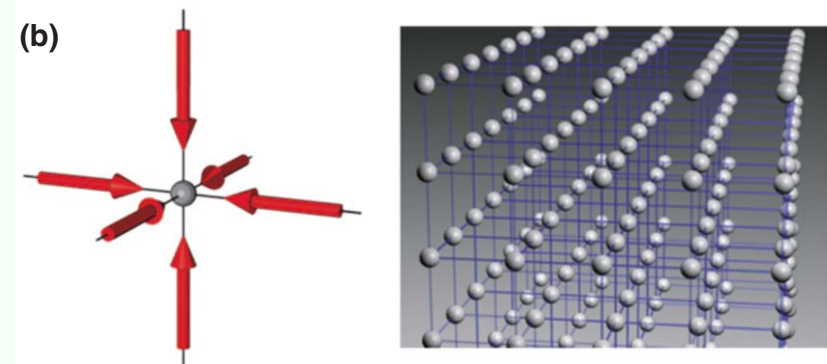
近年におけるレーザー技術の発達により、強相関電子系における非平衡状態に注目されている

ex1) 光誘起相転移
光照射による相転移の
超高速制御 (数十fs~数ps)



Basov et al. , Rev. Mod. Phys. **83**,431(2011).

ex2) 光格子における冷却原子の
ダイナミクス
非平衡ダイナミクスの基礎的性質



Bloch et al. , Rev. Mod. Phys. **80**,885431(2008).

HΦへの量子ダイナミクス機能実装

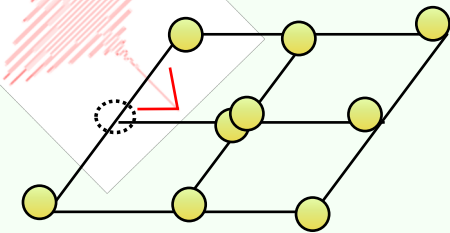
・テイラー展開に基づく実時間発展計算

$$e^{-i\mathcal{H}(t_n)\Delta t} \approx \sum_{l=0}^M \frac{1}{l!} (-i\mathcal{H}(t_n)\Delta t)^l$$

$$|\psi(t_{n+1})\rangle = e^{-i\mathcal{H}(t_n)\Delta t} |\psi(t_n)\rangle$$

非平衡強相関系

$$i\frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \mathcal{H} |\psi\rangle$$



- スタンダードモード: 相互作用クエンチ、光照射(パルス、AC、DC)
- エキスパートモード: 各時刻での一体・二体相互作用を指定

・出力

各時刻でのエネルギー、二重占有度、ノルム、
同時刻グリーン関数

スタンダードモードを使った全体の流れ

- 1st. Step: 基底状態の計算
Lanczos法による初期状態(固有ベクトル)の計算・出力
- 2nd. Step: 実時間発展演算
Method= “Time-Evolution” に指定
時間発展の仕方を指定(キーワードPumpType)
各種パラメータを指定

※必要に応じて、光学伝導度などのスペクトル計算やTPQなどの有限温度計算を行う。

スタンダードモードを使った基底状態の計算

```
model = "Hubbard"
```

```
lattice = "Square"
```

```
a0W = 2
```

```
a0L = 2
```

```
a1W = 2
```

```
a1L = -2
```

```
method = "CG"
```

```
t = 1.0
```

```
U = 10.0
```

```
nelec = 8
```

```
2Sz = 0
```

```
EigenvecIO = "out"
```

zvo_eigenvec_%%_rank_\$.dat (%%: 固有値の番号、
\$: プロセス番号)がoutputディレクトリに出力される

スタンダードモードを使った時間発展演算

関連キーワード

method: “Time-Evolution”を指定

lanczos_max: 時間発展のステップ数

dt: 時間刻み幅

PumpType = “Quench”, “AC Laser”, “DC Laser”, “Pulse Laser”

スタンダードモードを使った時間発展演算

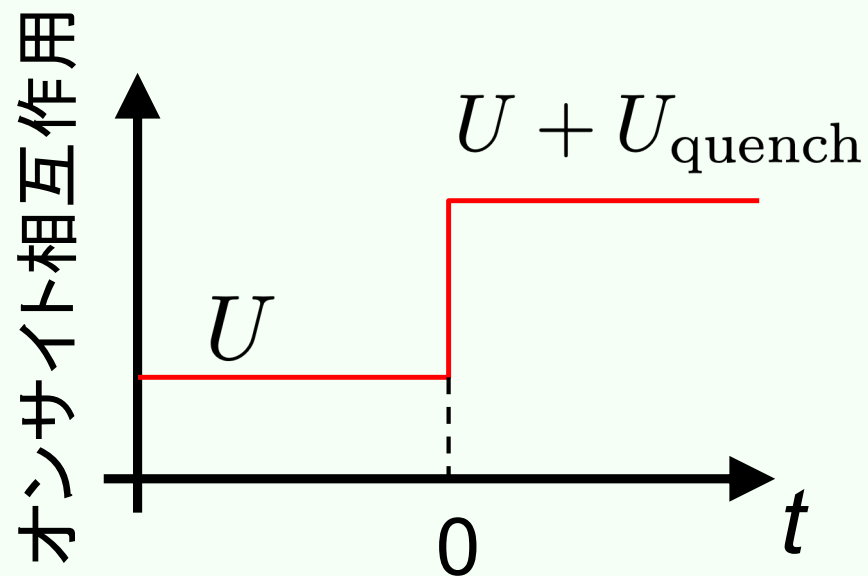
関連キーワード

method: “Time-Evolution”を指定

lanczos_max: 時間発展のステップ数

dt: 時間刻み幅, ExpandCoef: テイラー展開次数

PumpType = “Quench”, “AC Laser”, “DC Laser”, “Pulse Laser”



キーワード U_{quench} (実数)

$$U_{\text{quench}} \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

が初期時刻で加えられる

スタンダードモードを使った時間発展演算

関連キーワード

method: “Time-Evolution”を指定

lanczos_max: 時間発展のステップ数

dt: 時間刻み幅, ExpandCoef: テイラー展開次数

PumpType = “Quench”, “AC Laser”, “DC Laser”, “Pulse Laser”

パイエルス位相により電場効果を導入

$$t_{ij} \rightarrow t_{ij} e^{-i\mathbf{A}(t) \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) / (2\pi)}$$

■ スタンダードモードを使った時間発展演算

各モードごとのベクトルポテンシャル

- “AC Laser” $\mathbf{A}(t) = \mathbf{A}_0 \sin [\omega(t - t_0)]$

- “DC Laser” $\mathbf{A}(t) = \mathbf{A}_0 t$

- “Pulse Laser”

$$\mathbf{A}(t) = \mathbf{A}_0 \exp \left[-(t - t_0)^2 / (2t_{\text{dump}}^2) \right] \cos [\omega(t - t_0)]$$

関連キーワード

freq: ω

tdump: t_{dump}

tshift: t_0

VecPotW, L: \mathbf{A}_0 の強度

時間発展演算での出力ファイル

Outputディレクトリ

Norm.dat

各時刻ごとのノルム絶対値を出力

→ユニタリー時間発展がどれだけうまくいっているかの指針

SS.dat

各時刻ごとのエネルギー、二重占有度などを出力

##_cisajs_step%%.dat

各時刻ごとのOneBodyGで指定した一体グリーン関数の
計算結果を出力

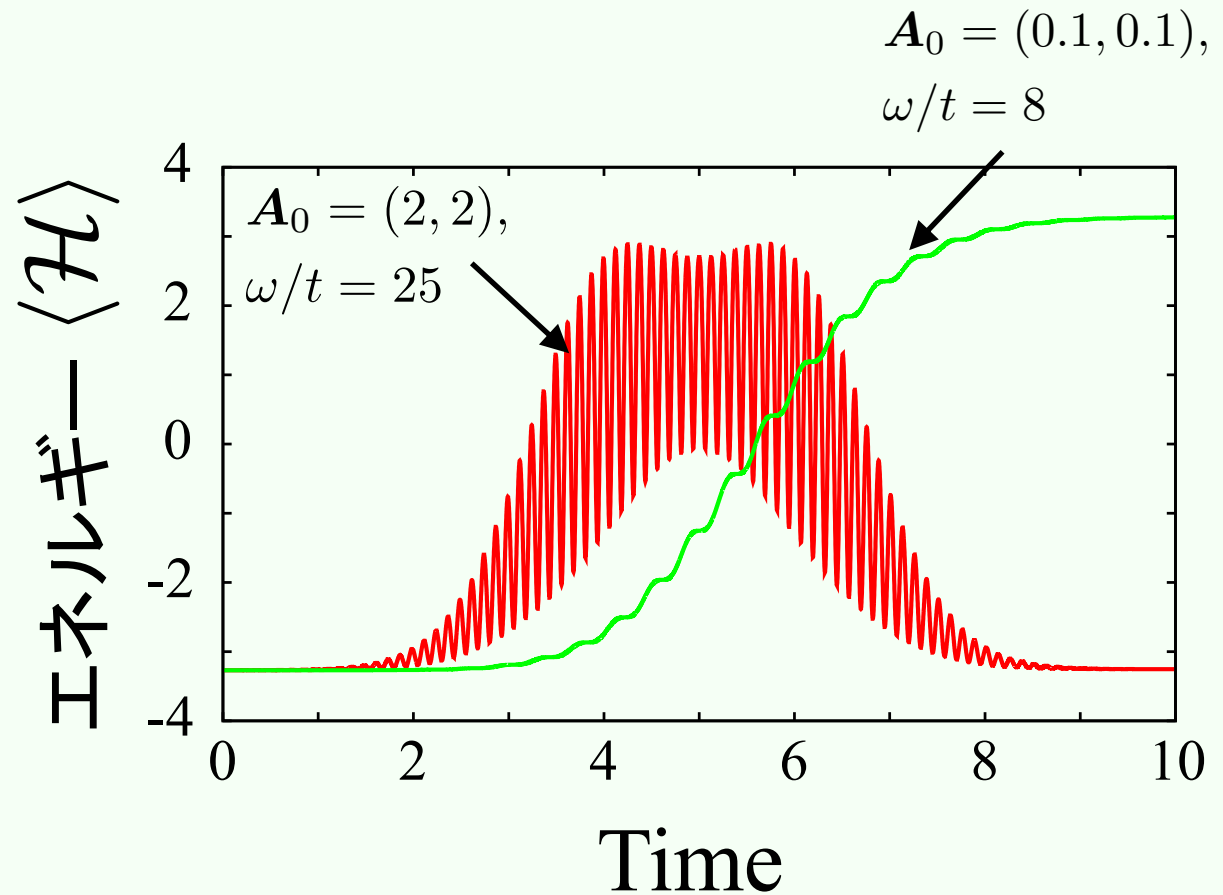
など

※実行ディレクトリ直下には、各時刻でのベクトルポテンシャル
と電場を図示するためのファイル potential.dat が出力

実例: Gaussianパルス照射

```
model = "Hubbard"  
method = "Time-Evolution"  
lattice = "Square"  
a0W = 2  
a0L = 2  
a1W = 2  
a1L = -2  
lanczos_max = 5000  
dt = 0.001  
PumpType = "Pulse Laser"  
  
t = 1.0  
U = 10.0  
nelec = 8  
2Sz = 0  
EigenvecIO = "in"  
tshift = 5.0  
tdump = 1.5  
freq = 8.0  
VecPotW = 0.1  
VecPotL = 0.1
```

$$\mathbf{A}(t) = \mathbf{A}_0 \exp \left[-(t - t_0)^2 / (2t_{\text{dump}}^2) \right] \cos [\omega(t - t_0)]$$



- エキスパートモードではOneBodyTEやTwoBodyTEを使うことで、任意の一体・二体相互作用作用をハミルトニアンに導入できます。

- 詳細はマニュアルをご覧ください

http://issp-center-dev.github.io/HPhi/manual/userguide_HPhi_ja.pdf