

# 修士学位論文

## 横磁場下一軸異方性のある $S=1$ 一次元 近藤格子模型の基底状態

指導教授

服部 一匡 准教授

平成 29年 2月 17日 提出

首都大学東京大学院

理工学研究科 物理学 専攻

学修番号 15879310

氏 名 鈴木 浩平

# 横磁場下一軸異方性のある $S = 1$ 一次元近藤格子模型 の基底状態

鈴木浩平

首都大学東京 理工学研究科物理学専攻

平成 29 年 2 月 17 日

# 目次

|       |                            |    |
|-------|----------------------------|----|
| 第 1 章 | 研究背景                       | 3  |
| 1.1   | 強磁性超伝導物質                   | 3  |
| 1.2   | 一次元近藤格子模型                  | 7  |
| 1.3   | 研究目的                       | 7  |
| 第 2 章 | 実空間くりこみ群から密度行列くりこみ群へ       | 8  |
| 2.1   | ブロックくりこみ群                  | 9  |
| 2.2   | Wilson の数値くりこみ群            | 10 |
| 2.3   | 密度行列くりこみ群                  | 12 |
| 2.3.1 | 無限系アルゴリズム                  | 12 |
| 2.3.2 | 有限系アルゴリズム                  | 16 |
| 第 3 章 | 一軸異方性のある $S = 1$ 横磁場近藤格子模型 | 18 |
| 3.1   | 基底の選び方                     | 19 |
| 3.2   | 期待値と相関関数                   | 21 |
| 3.3   | 計算精度                       | 22 |
| 第 4 章 | 結果                         | 23 |
| 4.1   | $h - J$ 相図                 | 23 |
| 4.2   | 磁化                         | 24 |
| 4.3   | スピン分布                      | 27 |
| 4.4   | スピン相関                      | 32 |
| 第 5 章 | まとめと今後の展望                  | 37 |
| 付 録 A | Lanczos 法                  | 38 |
| 付 録 B | 逆反復法                       | 40 |
| 付 録 C | 共役勾配法                      | 42 |
| 付 録 D | $n_c \neq 1/2$ の結果         | 43 |
| D.1   | $n_c = 3/4$                | 43 |
| D.1.1 | $h - J$ 相図                 | 43 |
| D.1.2 | 磁化                         | 44 |
| D.1.3 | スピン分布                      | 46 |
| D.1.4 | スピン相関                      | 50 |
| D.1.5 | 電荷密度波                      | 55 |

|       |             |    |
|-------|-------------|----|
| D.2   | $n_c = 1$   | 57 |
| D.2.1 | $h - J$ 相図  | 57 |
| D.2.2 | 磁化          | 57 |
| D.2.3 | スピン分布       | 59 |
| D.2.4 | スピン相関       | 63 |
| 付 録 E | 伝導電子のフェルミ波数 | 68 |



# 第1章 研究背景

1911年、Kamerlingh Onnesにより Hg が温度  $T_{sc} = 4.2$  K 以下で電気抵抗がほとんどゼロになる超伝導現象が発見された。また、超伝導体に磁場をかけると、これを打ち消すように電流が流れ、超伝導体内部では磁場がゼロになるマイスナー効果も発見された。これ以降、様々な物質で超伝導現象が発見されていくが、理論的な理解にはしばらく時間がかかり、最初の発見から46年後の1957年にこの現象を説明する理論として、John Bardeen、Leon Cooper、John Schrieffer らが BCS 理論を提案した [1]。BCS 理論から導かれる結論は、純粋金属の超伝導現象に対する実験結果をよく説明し、超伝導の理論的な解釈は一応の解決を見た。しかし、その後銅酸化物における高温超伝導など [2]、BCS 理論では説明できないとされる現象がいくつか見つかっている。その中の一つに、強磁性と超伝導の共存がある。マイスナー効果の例もあり、1900年代までは強磁性と超伝導が共存することは難しいと考えられてきた。しかし、2000年に入ってから  $UGe_2$ 、 $UCoGe$ 、 $URhGe$  などのウラン化合物で、強磁性と超伝導が共存することが分かってきており [3]、盛んに研究がなされている。

以下、1.1 節でこれらの実験結果についてまとめた後、1.2 節で次元近藤格子模型について説明し、1.3 節で本研究の目的を述べる。

## 1.1 強磁性超伝導物質

強磁性と超伝導が共存する強磁性超伝導は2000年に  $UGe_2$  で初めて見つかった [4]。この物質は図 1.1 のような U のジグザグ鎖により構成されており [5]、 $a$  軸方向に強い磁気異方性を持つ。強磁性転移は  $T_c = 52$  K で起こり [6]、このとき  $a$  軸方向に大きさ  $M_0 \sim 1.5\mu_B$  の磁気モーメントが発生する。圧力をかけていくと  $T_c$  が下がっていき、臨界圧力  $P_c \sim 1.5$  GPa で常磁性 (PM) が基底状態になる [7]。超伝導 (SC) は圧力が 1.0 GPa 付近から現れ始め、 $P_x \sim 1.2$  GPa のときに最高の超伝導転移温度  $T_{sc} = 0.7$  K となる [図 1.2]。この圧力下では  $T_c \sim 35$  K であり、 $T_{sc}$  より十分に高温で強磁性になっており、強磁性と超伝導が共存していることが分かっている [8]。また、この系は  $P_x \sim 1.2$  GPa を境界として、低圧力側の  $M_0 \sim 1.5\mu_B$  程度の大きな磁気モーメントを持つ強磁性相 (FM2) から、高圧力側の  $M_0 \sim 1\mu_B$  程度の小さな磁気モーメントを持つ強磁性相 (FM1) へと一次転移する。 $P_x$  よりわずかに大きい圧力  $P = 1.35$  GPa 下では、この系の  $a$  軸方向に磁場を印加した場合、FM1 と FM2 の相境界で超伝導臨界磁場  $H_{c2}$  が大きくなり [図 1.3]、超伝導と二つの相における一次転移の臨界終点との関係が注目されている [9, 10]。

$UGe_2$  では、高圧下で強磁性と超伝導が共存したが、2001年に  $URhGe$  が常圧下で強磁性超伝導を発現することが分かった [11]。この物質も強い磁気異方性 ( $\parallel c$  軸) を持ち、 $T_c = 9.5$  K で強磁性転移し、 $c$  軸方向に  $M_0 = 0.4\mu_B$  の磁気モーメントを持つ。さらに低温の  $T_{sc} = 0.26$  K で超伝導になる。結晶構造は図 1.1 のような U によるジグザグ鎖を持つ。また、図 1.4 のように、 $b$  軸方向の磁場を大きくしていくと、 $H = 2$  T までは超伝導であるが、より高磁場では超伝導が消える。しかし、 $H \approx 11$  T で再び超伝導 (Reentrant SC: RSC) が現れ、 $H_R \approx 12$  T で最も高い超伝導転移温度  $T_{sc} = 0.42$  K を持つ [12]。注目すべき点は、この RSC は強磁性状態が横磁

場 ( $\parallel b$  軸) により安定化する臨界磁場 (図 1.4) と関連しているように見える点である。図 1.5 に示したように、磁化は  $H \approx 12$  T 付近でメタ磁性的に急激に増大している [13]。何らかの“ゆらぎ”が磁場下で超伝導を誘起している可能性がある、という点において、 $\text{UGe}_2$ 、 $\text{URhGe}$  は共通していると言える。このような観点から、いくつかの理論提案がなされている [?, 14, 16]。

さらに、2007 年には  $\text{URhGe}$  と同じ結晶構造を持つ  $\text{UCoGe}$  でも強磁性超伝導が発見された [17]。この物質は  $T_c = 3$  K で強磁性転移するが、磁気モーメントの大きさが、 $M_0 \sim 0.05\mu_B$  と極めて小さい。図 1.6 に  $\text{UCoGe}$  の温度 ( $T$ )-圧力 ( $P$ ) 相図を示す [18]。 $\text{URhGe}$  と同様に常圧でも強磁性超伝導となり、 $P \sim 1.2$  GPa で  $T_{sc}$  が最も高くなる。その圧力はやはり強磁性の量子臨界点 (絶対零度の臨界点) に近い。また、スピン格子緩和時間の測定から、スピンのゆらぎも強い一軸磁気異方性を持つことが示されている [19]。図 1.7 にスピン格子緩和時間  $T_1$  の角度依存性を示す。 $b$  軸方向の緩和が非常に速いことから、同じ結晶構造を持つ  $\text{URhGe}$  も  $b$  軸方向に磁気異方性を持つことが期待される。また、図 1.8 に示すように  $\text{UCoGe}$  においても  $b$  軸方向に磁場を印加すると、超伝導の  $H_{c2}$  が非単調な振る舞いを示すことから [20]、 $\text{URhGe}$  と共通の機構が働いている可能性がある。

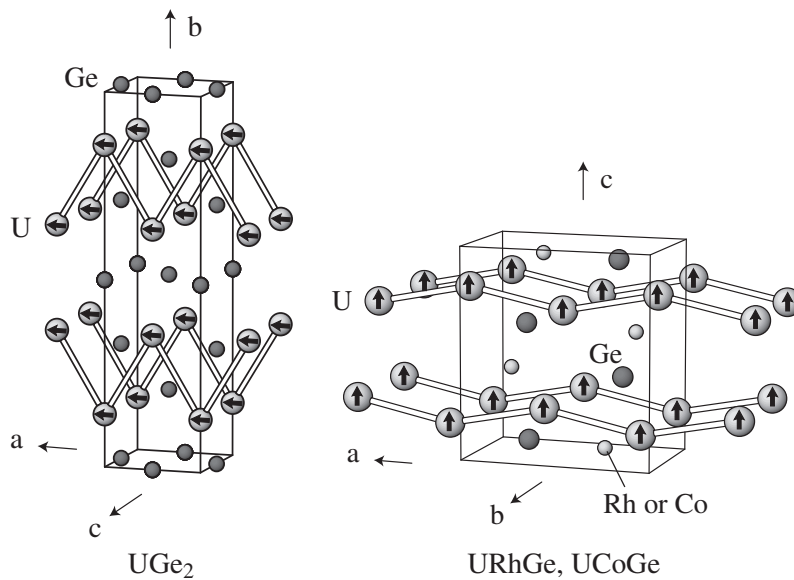


図 1.1:  $\text{UGe}_2$ ,  $\text{UCoGe}$ ,  $\text{URhGe}$  の結晶構造。U サイトの矢印は自発磁化の方向を表す。[3] より転載。

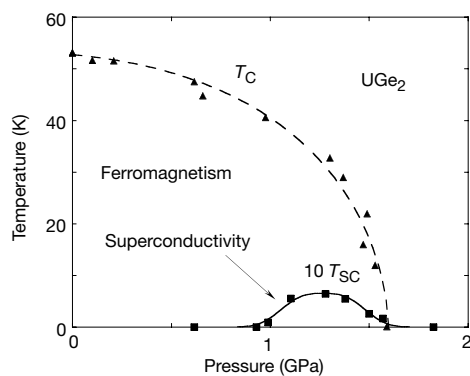


図 1.2:  $\text{UGe}_2$  の温度-圧力相図。  $T_c$  は強磁性転移温度、  $T_{sc}$  は超伝導転移温度を表す。 1 GPa 以下の低圧側では強磁性だが、より圧力をかけると超伝導相が出現する。 [4] より転載。

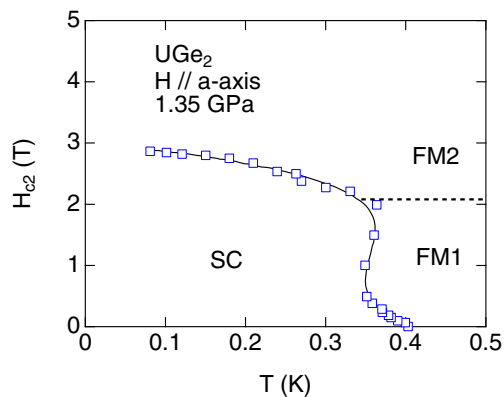


図 1.3:  $\text{UGe}_2$  の  $P = 1.35$  GPa における、超伝導臨界磁場  $H_{c2}$  の温度依存性。磁場は  $a$  軸方向にかかっている。FM1 と FM2 の境界で  $H_{c2}$  が大きくなっているのが確認できる。 [3] より転載。

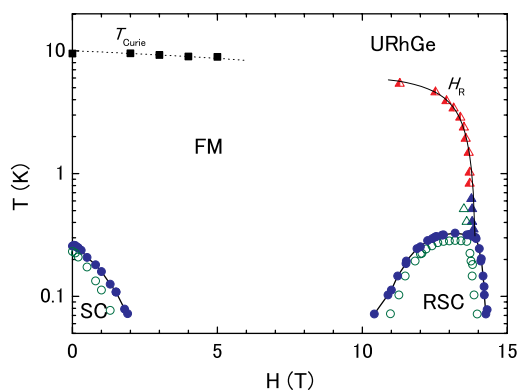


図 1.4:  $b$  軸方向に磁場をかけた場合の  $\text{URhGe}$  の温度 ( $T$ )-磁場 ( $H$ ) 相図。  $H$  を大きくしていくと、  $H = 2$  T で一旦超伝導 (SC) が消えた後、 11 T から 14 T の範囲で再び超伝導が現れる (RSC)。 [12] より転載。

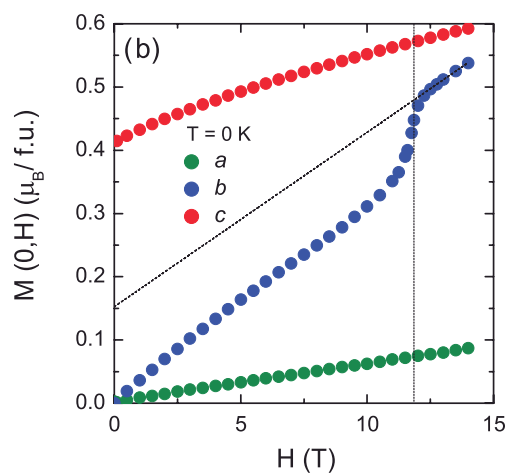


図 1.5:  $\text{URhGe}$  の絶対零度における磁化曲線。  $b$  軸方向に磁場をかけた場合、  $H = 12$  T でスピンの再配向が起こり、メタ磁性的振る舞いが見られる。 [13] より転載。

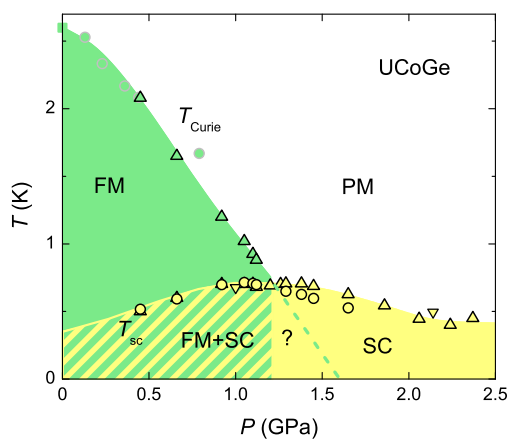


図 1.6: UCoGe の温度 ( $T$ )-圧力 ( $P$ ) 相図。超伝導相 (SC) はドーム型をしており、 $P = 1.2$  GPa で最も  $T_{sc}$  が高くなる。[18] より転載。

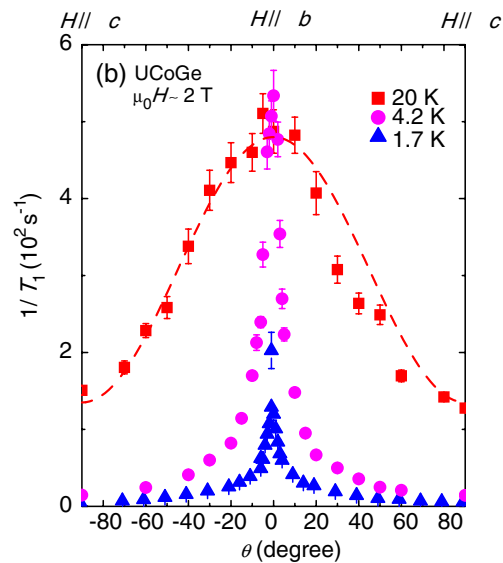


図 1.7: 2 T における UCoGe におけるスピン緩和時間  $T_1$  の角度依存性。磁場は  $bc$  平面内に印加されている。 $b$  軸方向への緩和が速いことが分かる。[19] より転載。

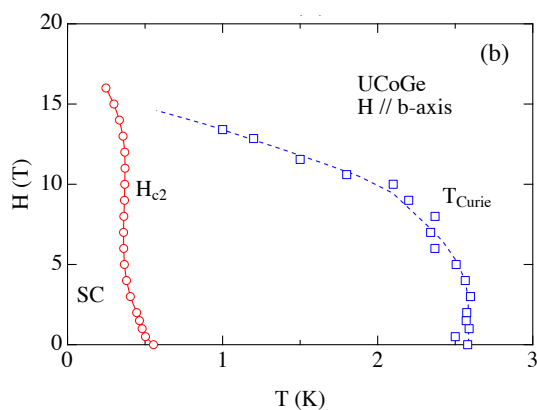


図 1.8: UCoGe の  $b$  軸方向に磁場を印加した場合の磁場 ( $H$ )-温度 ( $T$ ) 相図。  $T_{Curie}$  は強磁性転移温度。[20] より転載。

## 1.2 一次元近藤格子模型

詳細は第3章で述べるが、本研究では簡単のため URhGe の一次元鎖を取り出し、U サイトに局在した電子による局在スピンの、U サイト間をホッピングする伝導電子が反強磁性相互作用する模型を解析する。このような模型は一次元近藤格子模型として知られている [21]。局在スピンの  $1/2$  の場合は 1990 年代から盛んに研究がなされ、およそそのことが分かっている。少数サイトの厳密対角化によると、図 1.9 のように、基底状態は伝導電子のフィリングが小さい領域で強磁性となる [22]。また、一次元のギャップレス状態は朝永ラッティンジャー流体 (TLL) により記述することができる [23]。TLL では系のハミルトニアンをフェルミエネルギー付近で線形近似し、ボソン化法を用いて解析する。基底状態はギャップレスな励起を持ち、特に相関関数は  $\chi \sim r^{-\eta}$  のようなべき減衰を示す [23]。後述するが、本研究でもそのような状態が実現する。

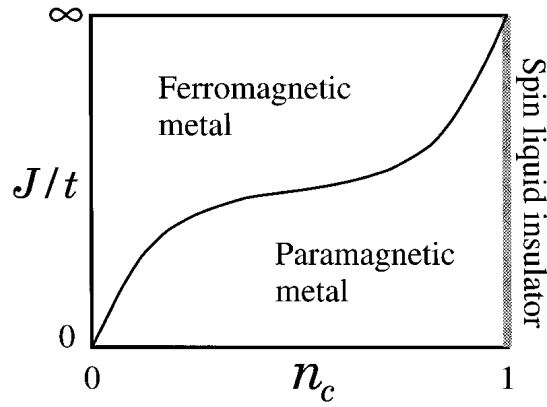


図 1.9: 一次元近藤格子模型の基底状態における相図。 $n_c$  は伝導電子のフィリング、 $J/t$  は伝導電子と局在スピンの相互作用の強さを表す。[21] より転載。

## 1.3 研究目的

上述したように、 $S = 1/2$  の一次元近藤格子模型についてはある程度の理解が得られている。 $S = 1$  の近藤格子模型については平均場を用いた研究 [24, 25] がなされているが、十分に調べられていない。また、URhGe の超伝導および磁氣的性質と関連する横磁場の効果については、スピン波による超伝導の議論 [15] や、スピンモデルの数値解析から現象論的に超伝導を議論した研究がある [16]。しかし、どちらの解析も電子の自由度が正確に考慮されておらず十分とはいえない。そこで、本研究では強磁性超伝導の理解を深めるため、電子の自由度を考慮した模型の精密な解析を行うことが一つの目的である。また、URhGe に特有の強い一軸異方性の効果を考慮し、 $S = 1$  一軸異方性のある一次元近藤格子模型の横磁場下における基底状態の磁気相図を、後述する密度行列くりこみ群を用いて作製することを目的とする。

## 第2章 実空間くりこみ群から密度行列くりこみ群へ

本研究のモデルは解析的に解けないため、何らかの数値計算的手法が必須である。この章では、系の自由度を落とす操作であるくりこみの例として、ブロックスピン変換、Wilson の数値くりこみ群を説明し、最後に本研究で用いた計算手法である密度行列くりこみ群を議論する。

ある系の有効モデルとしてハミルトニアンが与えられたとする。このハミルトニアン基底状態が求められれば、絶対零度におけるエネルギーや磁化など、物理量の値を求められる。これらの値と、実験で測定された値を比較すれば、有効モデルの是非を議論できる。ところが、系の自由度は大きさに対して指数関数的に増えてしまうため、ある程度以上の大きさの系に対しては基底状態を求めることができない。そこで、低エネルギー状態に寄与する自由度だけを考慮し、その他の自由度を落とす操作が必要になる。これをくりこみと呼ぶことにする。このような操作は一般的に、

$$\hat{H}_{\text{ren}} = \hat{T}^\dagger \hat{H} \hat{T}, \quad (2.1)$$

のように表現される。 $\hat{T}$  が自由度を落とす変換行列である。 $\hat{H}$  の次元を  $d \times d$ 、 $\hat{T}$  の次元を  $d \times m$  とすれば<sup>1</sup>、式 (2.1) の変換により、 $\hat{H}$  が  $m \times m$  行列  $\hat{H}_{\text{ren}}$  に圧縮される。したがって、精度良く  $\hat{H}$  を圧縮できる  $\hat{T}$  を求めることが課題となる。

以下の節では  $S = 1/2$  反強磁性一次元 Heisenberg モデルを例に  $\hat{T}$  を求める三つの方法を説明する。このモデルは厳密解が得られており [26]、くりこみの精度を確認するのに便利である。ここでは Heisenberg モデルをまとめておく。ハミルトニアンは、

$$\hat{H} = J \sum_{j=1}^{N-1} \hat{\mathbf{S}}_j \cdot \hat{\mathbf{S}}_{j+1} = J \sum_{j=1}^{N-1} \left( \hat{S}_j^z \hat{S}_{j+1}^z + \frac{1}{2} \hat{S}_j^+ \hat{S}_{j+1}^- + \frac{1}{2} \hat{S}_j^- \hat{S}_{j+1}^+ \right), \quad (2.2)$$

で与えられる。ここで、 $J > 0$  であり、 $N$  はサイト数である。また、

$$\hat{\mathbf{S}}_j = (\hat{S}_j^x, \hat{S}_j^y, \hat{S}_j^z), \quad (2.3)$$

$$\hat{S}_j^+ = \hat{S}_j^x + i\hat{S}_j^y, \quad (2.4)$$

$$\hat{S}_j^- = \hat{S}_j^x - i\hat{S}_j^y, \quad (2.5)$$

は  $j$  サイトのスピン  $1/2$  のスピン演算子である。Heisenberg モデルの場合 1 サイト当たりの自由度が 2 なので、 $N$  サイトの場合の自由度は  $2^N$  であり、 $N$  の大きさとともに指数関数的に増大する。

---

<sup>1</sup>当然  $m < d$  である。

## 2.1 ブロックくりこみ群

ブロックくりこみ群 (Block Renormalization Group: BRG) の議論については、[27] および [28] の前半部分などが参考になる。 $N$  サイトのハミルトニアンは対角化できるとして、

$$\hat{H}_N = J \sum_{j=1}^{N-1} \left( \hat{S}_j^z \hat{S}_{j+1}^z + \frac{1}{2} \hat{S}_j^+ \hat{S}_{j+1}^- + \frac{1}{2} \hat{S}_j^- \hat{S}_{j+1}^+ \right), \quad (2.6)$$

を対角化して、規格化されたエネルギー固有状態を全て求める。この時  $\hat{S}_z^{\text{tot}} = \sum_{j=1}^N \hat{S}_j^z$  などの保存量で  $\hat{H}_N$  をブロック対角にして対角化した方が計算が速い。エネルギーの低い順に番号を振って、これらの固有状態を

$$|E_1\rangle, |E_2\rangle, \dots, |E_d\rangle, \quad (2.7)$$

としよう。ここで  $d = 2^N$  である。BRG では、変換行列  $\hat{T}$  を  $\hat{H}_N$  の固有状態  $\{|E_i\rangle\}_{i=1,2,\dots,d}$  から構成する。具体的には、固有状態をエネルギーの低い順に  $m$  個選ぶ。そして  $|E_i\rangle$  の各成分を、

$$|E_i\rangle = {}^t(a_{1i}, a_{2i}, \dots, a_{di}), \quad (i = 1, 2, \dots, m), \quad (2.8)$$

として、これを並べて作った行列を  $\hat{T}$  とする：

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{d1} & a_{d2} & \cdots & a_{dm} \end{pmatrix}. \quad (2.9)$$

ただし、固有ベクトルの固有値が縮退していた場合、全て採用するか、全て採用しないかのどちらかを選んだほうが良い。なぜなら、固有値の縮退は系の持つ何らかの対称性を反映しているので、こうしなければその対称性が破れてしまうからである。 $\hat{T}$  を用いて、 $\hat{H}_N$  および、右端と左端のスピンを変換する<sup>2</sup>。左右のスピンは次の系を拡大するステップで、相互作用を計算するために使われる。

$$\hat{H}'_N \equiv \hat{T}^\dagger \hat{H}_N \hat{T}, \quad (2.10)$$

$$\hat{S}'_N{}^z \equiv \hat{T}^\dagger \hat{S}_N^z \hat{T}, \quad (2.11)$$

$$\hat{S}'_N{}^+ \equiv \hat{T}^\dagger \hat{S}_N^+ \hat{T}, \quad (2.12)$$

$$\hat{S}'_1{}^z \equiv \hat{T}^\dagger \hat{S}_1^z \hat{T}, \quad (2.13)$$

$$\hat{S}'_1{}^+ \equiv \hat{T}^\dagger \hat{S}_1^+ \hat{T}. \quad (2.14)$$

$\hat{H}'_N$  は固有値が対角成分に並んだ対角行列になる。こうして  $N$  サイトの自由度は  $2^N$  から  $m$  に圧縮された<sup>3</sup>。この圧縮された  $N$  サイト系をブロックと呼ぶことにしよう。次にブロックを連結して系を拡大する。今の場合、ブロックの自由度が  $m$  だから、 $m^b < d$  となる最大の自然数  $b$  を選び、ブロックを  $b$  個連結する。こうして、 $N^b$  サイト系のくりこまれたハミルトニアン

$$\hat{H}'_{N^b} = \sum_{j=1}^b \hat{H}'_{N_j} + J \sum_{j=1}^{b-1} \left( \hat{S}'_{N_j}{}^z \hat{S}'_{1j+1}{}^z + \frac{1}{2} \hat{S}'_{N_j}{}^+ \hat{S}'_{1j+1}{}^- + \frac{1}{2} \hat{S}'_{N_j}{}^- \hat{S}'_{1j+1}{}^+ \right), \quad (2.15)$$

<sup>2</sup> $\hat{S}^- = (\hat{S}^+)^\dagger$  だから、 $\hat{S}^-$  は計算する必要はない。

<sup>3</sup> $m = d$  と選べばユニタリー変換になる。

が得られる。そして今度は  $\hat{H}'_{Nb}$  を対角化して、その固有状態から再び  $\hat{T}$  を作る。これら一連の作業を繰り返せば、任意のサイズの  $\hat{H}$  の基底状態を計算できる。 $\langle \hat{S}_j \rangle = \langle \text{GS} | \hat{S}_j | \text{GS} \rangle$  などの期待値を求めたい場合は、くりこみの各ステップで、 $\hat{S}_j, j = 1, 2, \dots, N$  を全て変換する必要がある。くりこみが終わった段階で  $\hat{H}^{\text{last}}$  の基底状態を求めて、期待値  $\langle \hat{S}_j^{\text{last}} \rangle$  を計算すれば良い。<sup>4</sup>

図 2.1 に  $N = 3$  から開始した場合の BRG のフローチャートを示す。 $N = 3$  の場合、基底状態は二重に縮退するので  $\hat{T}$  を二つの基底状態から作り、ブロックを三つ連結することを繰り返せば、必要な計算は  $8 \times 8$  のハミルトニアンに対角化だけである。この場合は解析的に計算を実行することもできる [28]。また、表 2.3 に計算結果の一例を示す。いずれの場合も基底状態が二重縮退するので、 $\hat{T}$  として二つの基底状態を選んでいる。ブロック内部のスピンを増やすと厳密解に近づく事が分かる。

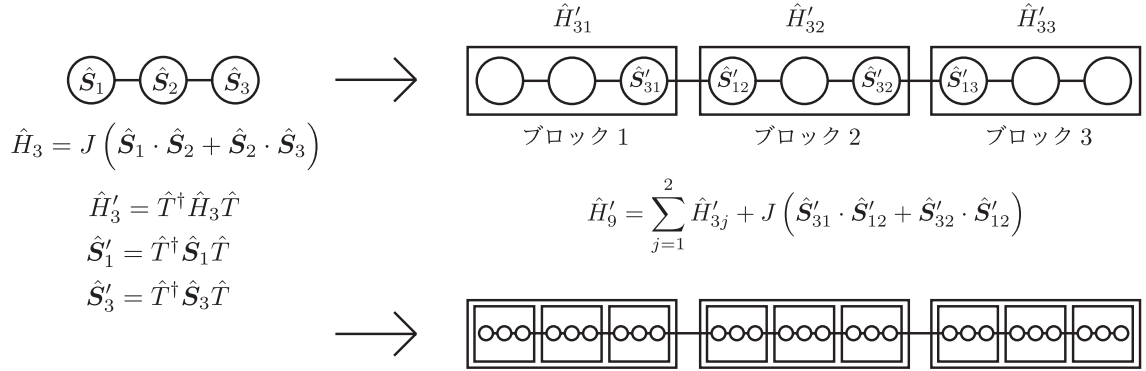


図 2.1:  $N = 3$  から開始した場合の BRG のフローチャート。 $\hat{S}'_{31}$  の最初の添字は、最初にあったスピンの位置を表し、二番目の添字はブロックの位置を表す。またプライム記号はくりこまれた演算子であることを表す。 $\hat{H}'_{31}$  も同様。ここではくりこみを 2 回行った様子を示した。

| 最初のブロック内部のสปิน | $E/S$      | 相対誤差   | 次元   |
|----------------|------------|--------|------|
| 3              | $-0.3913J$ | 0.1170 | 8    |
| 5              | $-0.4068J$ | 0.0820 | 32   |
| 7              | $-0.4156J$ | 0.0622 | 128  |
| 9              | $-0.4211J$ | 0.0497 | 512  |
| 11             | $-0.4249J$ | 0.0412 | 2048 |
| exact          | $-0.4431J$ |        |      |

表 2.1: Heisenberg モデルに対する BRG の結果。 $\hat{T}$  として、二つの縮退した基底状態を選んでいる。 $E/S$  は無限系のサイト当たりの基底状態のエネルギーで、[27] による。相対誤差は厳密解との相対誤差を表し、次元は対角化しなければならないハミルトニアンの次元である。

## 2.2 Wilson の数値くりこみ群

Wilson の数値くりこみ群 (Numerical Renormalization Group: NRG) といえば普通、Kenneth G. Wilson が近藤問題に対して定式化したくりこみ群のことを指す [29]。以下で説明する方法

<sup>4</sup>ただし、精度は非常に悪いことが予想される。



を Heisenberg モデルに適用したのは Xiang と Gehring であり [30]、前節で説明した BRG を少し改良したものになっている。以下の議論では [28] の前半部分を参考にした。

$N$  サイトハミルトニアン  $\hat{H}_N$  を対角化して  $\hat{H}_N$  の固有状態から  $\hat{T}$  を作り、自由度を落とすところまでは同じである。しかし、系を拡大する時に、右端に新たなサイトを一つだけ付け加える。そしてまた自由度を落とし...ということを繰り返す。この方法ではサイトを付け加えるたびに自由度が2倍になるため、変換行列を構成する固有ベクトルとして系の次元の半分まで採用することができる。ただし縮退は考慮しなければならない。物理量の期待値を計算したい場合は BRG と同様で、くりこみを行う度に全てのスピン演算子を変換し、最後に対角化した  $\hat{H}^{\text{last}}$  の基底状態で期待値を計算すれば良い。

$N = 3$  から開始した場合の NRG のフローチャートを図 2.2 に示す。また、計算結果を表 2.3 に示す。BRG と比べて精度が良くなっていることがわかる。また、図 2.3 に基底状態のエネルギーの収束の様子を示す。200 サイト程度までくりこんだ段階でエネルギーはほとんど一定値になっている。次に述べる密度行列くりこみ群の方法を使えば、さらに精度を上げることができる。

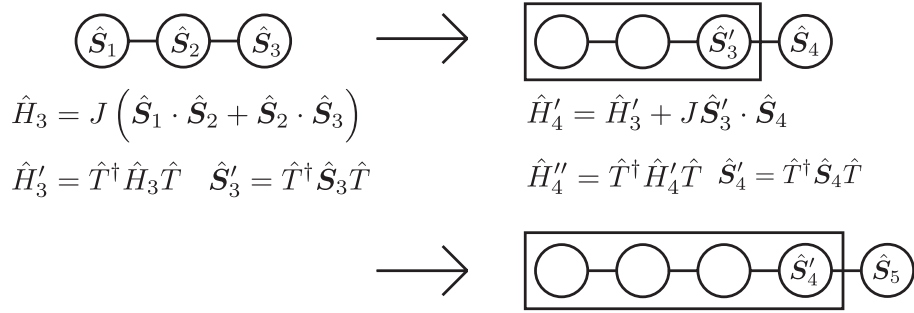


図 2.2:  $N = 3$  から開始した場合の NRG のフローチャート。ここではくりこみを2回行った様子を示した。NRG では系の端に新たなサイトを付け加えることで系を拡大する。

| $E/S$        | 相対誤差     | 次元   |
|--------------|----------|------|
| $-0.422707J$ | 0.046124 | 8    |
| $-0.436283J$ | 0.015489 | 32   |
| $-0.438719J$ | 0.009992 | 128  |
| $-0.440477J$ | 0.006025 | 512  |
| $-0.441502J$ | 0.003712 | 2048 |

表 2.2: Heisenberg モデルに対する NRG の結果。対角化しなければならない行列次元は BRG の結果 (表 2.3) と同じだが、BRG と比べて精度が良くなっていることが分かる。



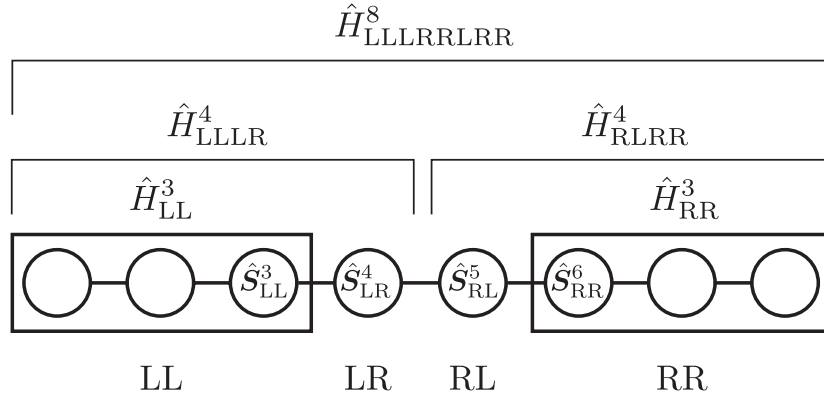


図 2.4:  $N = 8$  の場合の系の分割の方法。左側から順に LL、LR、RL、RR と呼ぶ。 $\hat{H}_{\text{LL}}^3$  は LL のハミルトニアンで、 $\hat{H}_{\text{RR}}^3$  は RR のハミルトニアンを表す。また、 $\hat{H}_{\text{LLLR}}^3$ 、 $\hat{H}_{\text{RLRR}}^4$  はそれぞれ LLLR、RLRR のハミルトニアンであり、 $\hat{H}_{\text{LLRLRR}}^8 = \hat{H}_{\text{LLLR}}^4 + \hat{H}_{\text{RLRR}}^4$  である。

と表記する。 $ll$ 、 $lr$ 、 $rl$ 、 $rr$  はそれぞれ、LL、LR、RL、RR の状態数の分だけ和を取っている<sup>5</sup>。 $|ll\rangle_{\text{LL}}$ 、 $|lr\rangle_{\text{LR}}$ 、 $|rl\rangle_{\text{RL}}$ 、 $|rr\rangle_{\text{RR}}$  はそれぞれのブロックの基底であり、 $\psi_{ll,lr,rl,rr}$  は基底状態の波動関数の係数である。BRG、NRG では LLLRLRR の演算子に作用する変換行列を作ったが、DMRG では LLLR の演算子に作用する変換行列を作り、LLLRLRR の自由度を落とす。そのために  $|\text{GS}\rangle$  から密度行列演算子  $\hat{\rho}$  を構成する。 $\hat{\rho}$  の成分は次のように定義される：

$$\langle rr|_{\text{RR}} \langle rl|_{\text{RL}} \langle lr|_{\text{LR}} \langle ll|_{\text{LL}} \hat{\rho} |ll'\rangle_{\text{LL}} |lr'\rangle_{\text{LR}} |rl\rangle_{\text{RL}} |rr\rangle_{\text{RR}} = \sum_{rl,rr} \psi_{ll,lr,rl,rr}^* \psi_{ll',lr',rl,rr}. \quad (2.17)$$

$\hat{\rho}$  は LLLR に作用する演算子であり、その次元は LLLR の状態数と同じである。 $\hat{\rho}$  を対角化して固有ベクトルを固有値が大きい順に番号を振り、固有ベクトルを次のように書く：

$$|E_1^\rho\rangle, |E_2^\rho\rangle, \dots, |E_d^\rho\rangle. \quad (2.18)$$

$d$  は LLLR の状態数である。ここでは全ての固有状態を求める必要があるが、 $\hat{\rho}$  は LLLR の保存量でブロック対角にできるため、計算は速やかに実行できる。また、密度行列  $\hat{\rho}$  の固有値は正であり、全て足すと 1 になる。 $|E_i^\rho\rangle$  の成分を、

$$|E_i^\rho\rangle = {}^t(\rho_{1i}, \rho_{2i}, \dots, \rho_{di}), \quad (i = 1, 2, \dots, d), \quad (2.19)$$

と書き、LLLRLRR に対する変換行列  $\hat{T}$  を  $|E_i^\rho\rangle$  の成分から次のように作る：

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \cdots & \rho_{1m} \\ \rho_{21} & \rho_{22} & \cdots & \rho_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \rho_{d1} & \rho_{d2} & \cdots & \rho_{dm} \end{pmatrix}. \quad (2.20)$$

ここで、 $m < d$  であり、 $\hat{T}$  は  $d \times m$  行列である。実際には  $\hat{T}$  は  $\hat{H}_{\text{LLLR}}^{\frac{N}{2}}$  の保存量によりブロック対角になる。 $m$  は計算機の性能を考慮して選ばれるが、BST、NRG と同じで、密度行列の縮

<sup>5</sup> $ll$ 、 $lr$ 、 $rl$ 、 $rr$  それぞれで一つの変数を表している。

退を考慮しなければならない。以前と同様に  $\hat{T}$  を用いて LLLR のハミルトニアンと演算子を次のように変換する。

$$\hat{H}_{\text{LL}}^{\frac{N}{2}} \equiv \hat{T}^\dagger \hat{H}_{\text{LLLR}}^{\frac{N}{2}} \hat{T}, \quad (2.21)$$

$$\hat{S}_{\text{LL}}^{\frac{N}{2}} \equiv \hat{T}^\dagger \hat{S}_{\text{LR}}^{\frac{N}{2}} \hat{T}. \quad (2.22)$$

$\hat{S}_{\text{LL}}^{\frac{N}{2}}$  は系を拡大したときの相互作用を計算するために使われる。この変換の精度は密度行列の固有値  $E_\rho^1, E_\rho^2, \dots, E_\rho^d$  の分布に依存しており、選んだ  $m$  個の固有値の合計が 1 に近いほど正確になる。捨ててしまった密度行列の固有値の合計は truncation error と呼ばれ、近似精度の目安になる：

$$\delta_{\text{truncation}} = \sum_{i=m+1}^d E_\rho^i. \quad (2.23)$$

次に、系を拡大する。DMRG では LR と RL の間に新たに 2 サイトを付け加える。 $\hat{H}_{\text{LL}}^{\frac{N}{2}}$  と  $\hat{S}_{\text{LL}}^{\frac{N}{2}}$  は次のブロックの LL にくりこまれる。 $\hat{H}_{\text{RR}}^{\frac{N}{2}}$  と  $\hat{S}_{\text{RL}}^{\frac{N}{2}}$  はそれぞれ、 $\hat{H}_{\text{LL}}^{\frac{N}{2}}$  および  $\hat{S}_{\text{LL}}^{\frac{N}{2}}$  と同じものを用いる<sup>6</sup>。新たな LLLRRLRR の次元は  $m \times 2 \times 2 \times m = 4m^2$  であり、 $4m^2$  が計算機で対角化できるように  $m$  を選ばなければならない。以上のことを系が必要なサイト数になるまで繰り返す。図 2.5 に無限系アルゴリズムのフローチャートを示す。次に説明する有限系アルゴリズムを行わない場合、物理量の期待値を計算するためにはくりこみの各ステップで得た、 $\hat{H}_{\text{LL}}$  と  $\hat{S}_{\text{LL}}$  を全て保存し、変換していく必要がある。系が与えられたサイト数になったところで  $\hat{H}_{\text{LLLRRLRR}}$  の基底状態を求めて、期待値を計算すれば良い。

この方法で BRG、NRG よりも精度良く系の基底状態を求めることができる。そもそも、BRG、NRG で精度が出なかった原因はサイトを付け加える場所が常に系の端であったためである。端のサイトはくりこまれた後ではブロックの内部に取り込まれるが、もともと端にあった影響が残ってしまいブロックの精度が悪くなってしまった。DMRG では系の中心部分にサイトを付け加えることでこれを解消した。付け加えられるサイトの右側には RLRR が繋がっていて、この影響を密度行列に取り込むことで精度を大幅に上げることができたのである。こういう意味で RLRR は environment と呼ばれる。

最後に無限系アルゴリズムによる Heisenberg モデルの結果を表 2.3 に示す。対角化しなければならないハミルトニアンの次元は NRG よりも小さいが、精度は良くなっている。また、図 2.6 に基底状態のエネルギーの収束の様子を示す。NRG と同様に、系にある程度のサイトを加えて以降はエネルギーが収束しているが、NRG より速く収束している。

<sup>6</sup>当然両者は違う演算子であるから行列表現も違うが、その成分は  $\hat{H}_{\text{LL}}^{\frac{N}{2}}$  と  $\hat{S}_{\text{LL}}^{\frac{N}{2}}$  を知っていれば分かる。

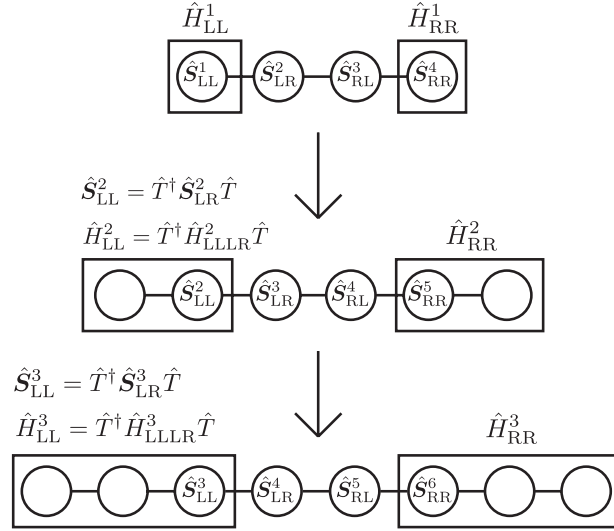


図 2.5: 無限系アルゴリズムのフローチャート。系の拡大は真ん中に二つのサイトを挿入することで行われる。RLRR の演算子は LLLR のものをコピーして使えば良い。

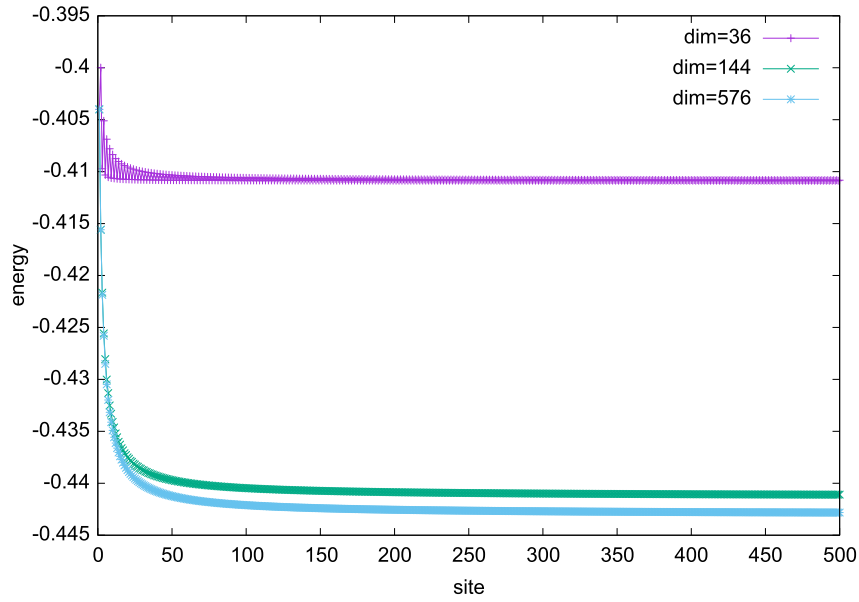


図 2.6: DMRG による基底状態のエネルギーの収束の様子。横軸は系のサイト数で、縦軸は  $J = 1$  の場合のサイト当たりの基底状態のエネルギー、dim は  $\hat{H}_{\text{LLRRLRR}}$  の最大次元である。

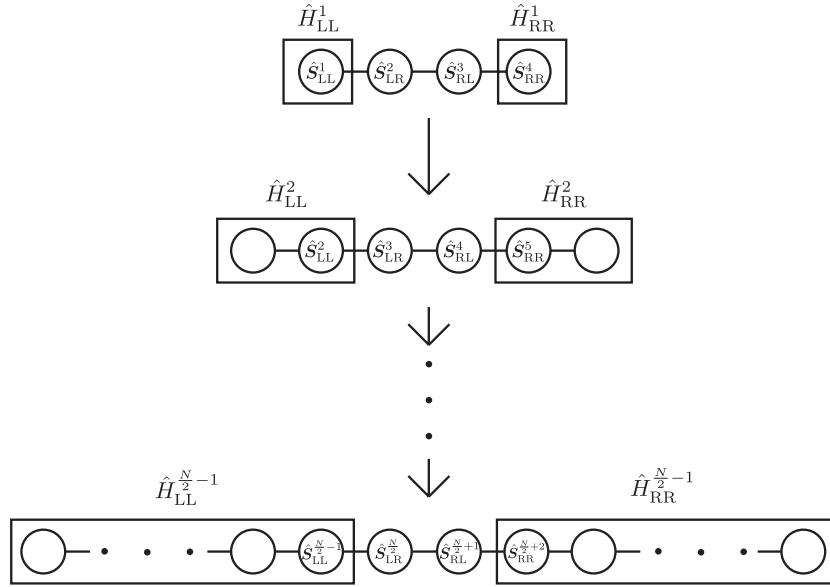
| $E/S$        | 相対誤差     | 次元  |
|--------------|----------|-----|
| $-0.410823J$ | 0.072942 | 36  |
| $-0.441095J$ | 0.004631 | 144 |
| $-0.442817J$ | 0.000744 | 576 |

表 2.3: Heisenberg モデルに対する DMRG の結果。NRG に比べて精度が向上している。

### 2.3.2 有限系アルゴリズム

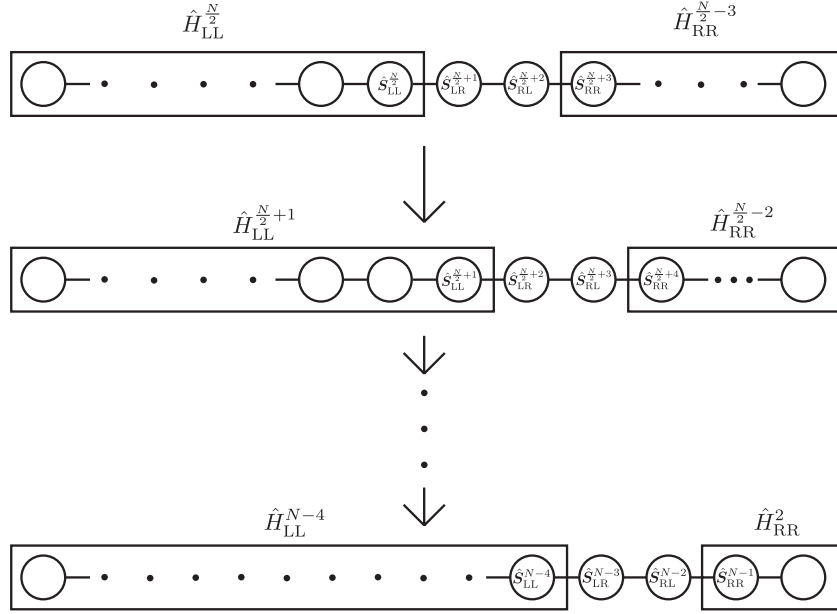
ここでは  $N$  を対角化したい系のサイト数とする。有限系アルゴリズムは無限系アルゴリズムで求めた  $N$  サイトの  $\hat{H}_{\text{LLRRRLRR}}$  の精度をさらに良くするために行われる。無限系アルゴリズムでは系のブロック分割の方法は常に左右対称であったが、有限系アルゴリズムではブロックの分割部分をずらしながらくりこみを行う。これら一連のくりこみは sweep と呼ばれる。ただし、これを行うには無限系アルゴリズムで計算した LL の演算子を全て保存しておく必要がある。さらに物理量の期待値を計算したい場合はくりこみを行うたびに LL の演算子を変換する必要がある。以下に順を追って説明する。

1. 無限系アルゴリズムにより、 $\hat{H}_{\text{LL}}^1, \hat{H}_{\text{LL}}^3, \dots, \hat{H}_{\text{LL}}^{\frac{N}{2}}, \hat{S}_{\text{LL}}^2, \hat{S}_{\text{LL}}^3, \dots, \hat{S}_{\text{LL}}^{\frac{N}{2}}$  を得る。

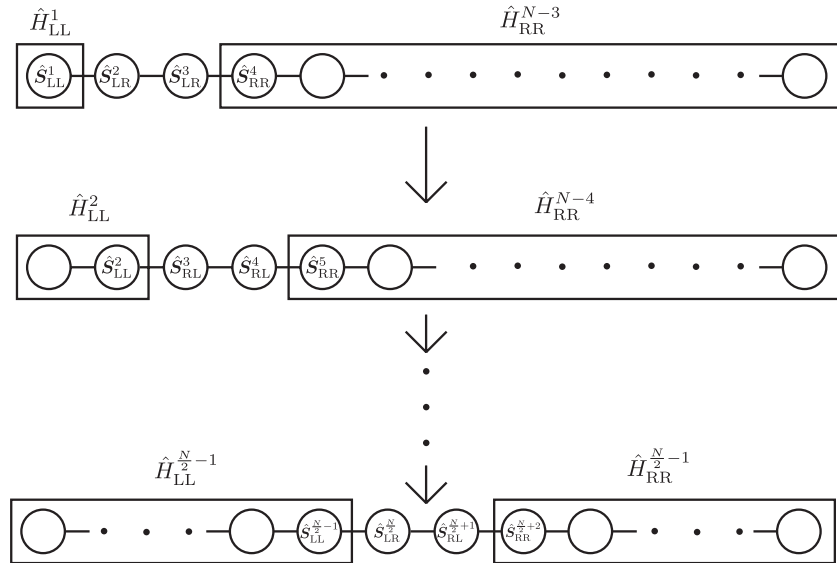


2. 有限系アルゴリズムにより、 $\hat{H}_{\text{LL}}^{\frac{N}{2}+1}, \hat{H}_{\text{LL}}^{\frac{N}{2}+2}, \dots, \hat{H}_{\text{LL}}^{N-3}, \hat{S}_{\text{LL}}^{\frac{N}{2}+1}, \hat{S}_{\text{LL}}^{\frac{N}{2}+2}, \dots, \hat{S}_{\text{LL}}^{N-3}$  を得る。

この時、 $\hat{H}_{\text{RR}}^{\frac{N}{2}-3}, \hat{H}_{\text{RR}}^{\frac{N}{2}-4}, \dots, \hat{H}_{\text{RR}}^2$  については、それぞれ直前のステップで得た  $\hat{H}_{\text{LL}}^{\frac{N}{2}-3}, \hat{H}_{\text{LL}}^{\frac{N}{2}-4}, \dots, \hat{H}_{\text{LL}}^2$  を、 $\hat{S}_{\text{RR}}^{\frac{N}{2}+3}, \hat{S}_{\text{RR}}^{\frac{N}{2}+4}, \dots, \hat{S}_{\text{RR}}^{N-1}$  については、それぞれ直前のステップで得た  $\hat{S}_{\text{LL}}^{\frac{N}{2}-3}, \hat{S}_{\text{LL}}^{\frac{N}{2}-4}, \dots, \hat{S}_{\text{LL}}^2$  を使う。



3. 有限系アルゴリズムにより、 $\hat{H}_{LL}^2, \hat{H}_{LL}^3, \dots, \hat{H}_{LL}^{\frac{N}{2}}, \hat{S}_{LL}^2, \hat{S}_{LL}^3, \dots, \hat{S}_{LL}^{\frac{N}{2}}$  を得る。  
 この時、 $\hat{H}_{RR}^{N-3}, \hat{H}_{RR}^{N-4}, \dots, \hat{H}_{RR}^{\frac{N}{2}-1}$  については、それぞれステップ2で得た  
 $\hat{H}_{LL}^{N-3}, \hat{H}_{LL}^{N-4}, \dots, \hat{H}_{LL}^{\frac{N}{2}-1}$  を、 $\hat{S}_{RR}^4, \hat{S}_{RR}^5, \dots, \hat{S}_{RR}^{\frac{N}{2}+2}$  についてはそれぞれ、ステップ2で得た  
 $\hat{S}_{RR}^{N-3}, \hat{S}_{RR}^{N-4}, \dots, \hat{S}_{RR}^{\frac{N}{2}-1}$  を使う。



4.  $\hat{H}_{LLRRLRR}$  の基底状態の固有値が収束するまでステップ2から3を繰り返す。この作業を sweep と呼ぶ。これにより  $\hat{H}_{LL}^2, \hat{H}_{LL}^3, \dots, \hat{H}_{LL}^{N-3}, \hat{S}_{LL}^2, \hat{S}_{LL}^3, \dots, \hat{S}_{LL}^{N-3}$  が更新され精度が良くなっていく。通常 LLLRRLRR の分割方法が左右対称の場合が精度が良いため、有限系アルゴリズムはステップ3の最後で終了する。
5.  $\langle \hat{S} \rangle$  など物理量の期待値を計算する場合は、最後にもう一度ステップ3を繰り返し  $\hat{S}_{LL}^2, \hat{S}_{LL}^3, \dots, \hat{S}_{LL}^{\frac{N}{2}}$  を計算する。この時、ステップ3の最初から数えて  $n$  回目のくりこみを行う度に  $\hat{T}^\dagger \hat{S}_{LL}^1 \hat{T}, \hat{T}^\dagger \hat{S}_{LL}^2 \hat{T}, \dots, \hat{T}^\dagger \hat{S}_{LL}^n \hat{T}$  を全て計算し更新していく必要がある。

# 第3章 一軸異方性のある $S = 1$ 横磁場近藤格子模型

本研究では、以下の一軸異方性のある  $S = 1$  の一次元近藤格子模型に横磁場を印加した場合の基底状態について DMRG を用いて解析する：

$$\hat{H} = \hat{H}_t + \hat{H}_J + \hat{H}_h + \hat{H}_D, \quad (3.1)$$

$$\hat{H}_t = -t \sum_{j=1}^{N-1} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left( \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{c}_{j+1\sigma} + \hat{c}_{j+1\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} \right), \quad (3.2)$$

$$\hat{H}_J = J \sum_{j=1}^N \hat{\boldsymbol{\sigma}}_j \cdot \hat{\mathbf{S}}_j, \quad (3.3)$$

$$\hat{H}_h = -h \sum_{j=1}^N \left( \hat{\sigma}_j^x + \hat{S}_j^x \right), \quad (3.4)$$

$$\hat{H}_D = -D \sum_{j=1}^N (\hat{S}_j^z)^2. \quad (3.5)$$

ここで、 $N$  はサイト数、 $t$  は飛び移り積分であり、電子の運動エネルギーに対応する。 $J$  は伝導電子と局在スピンの相互作用を表す。 $h$  は印加した横磁場 ( $x$  方向にとる) の大きさに対応し、 $D$  は一軸異方性の強さを表す。また、 $\hat{c}_{j\sigma}^\dagger$  および  $\hat{c}_{j\sigma}$  は  $j$  サイトのスピン  $\sigma$  の伝導電子の生成、消滅演算子である。 $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_j$  は  $j$  サイトのスピン  $1/2$  のスピン演算子であり、 $j$  サイトの基底  $|\text{vac}\rangle_j, |\uparrow\rangle_j, |\downarrow\rangle_j, |\uparrow\downarrow\rangle_j$  で表現すれば、

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}_j = (\hat{\sigma}_j^x, \hat{\sigma}_j^y, \hat{\sigma}_j^z), \quad (3.6)$$

$$\hat{\sigma}_j^x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \hat{\sigma}_j^y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{i}{2} & 0 \\ 0 & \frac{i}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \hat{\sigma}_j^z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.7)$$

である。また、 $\hat{\mathbf{S}}_j$  は  $j$  サイトのスピン  $1$  のスピン演算子であり、 $j$  サイトの基底  $|\uparrow\rangle_j, |0\rangle_j, |\downarrow\rangle_j$  で表現すれば、

$$\hat{\mathbf{S}}_j = (\hat{S}_j^x, \hat{S}_j^y, \hat{S}_j^z), \quad (3.8)$$

$$\hat{S}_j^x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \hat{S}_j^y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \hat{S}_j^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (3.9)$$



である。

### 3.1 基底の選び方

$\hat{H}$  は伝導電子の全粒子数演算子  $\hat{N}_{\text{tot}}$  と交換する。したがって、ヒルベルト空間を  $\hat{N}_{\text{tot}}$  の固有空間に分けることができる。つまり、 $\hat{H}$  をブロック対角にできる。さらに、次のようなパリティ演算子  $\hat{P}$  を考える。これは、 $\hat{\sigma}_j^z$  の四つの固有状態  $|\text{vac}\rangle_j, |\uparrow\rangle_j, |\downarrow\rangle_j, |\uparrow\downarrow\rangle_j$  および、 $\hat{S}_j^z$  の3つの固有状態  $|\uparrow\rangle_j, |0\rangle_j, |\downarrow\rangle_j$  に対して、

$$\hat{P} |\text{vac}\rangle_j = |\text{vac}\rangle_j, \quad \hat{P} |\uparrow\rangle_j = |\downarrow\rangle_j, \quad \hat{P} |\downarrow\rangle_j = |\uparrow\rangle_j, \quad \hat{P} |\uparrow\downarrow\rangle_j = |\uparrow\downarrow\rangle_j, \quad (3.10)$$

$$\hat{P} |\uparrow\rangle_j = |\downarrow\rangle_j, \quad \hat{P} |0\rangle_j = |0\rangle_j, \quad \hat{P} |\downarrow\rangle_j = |\uparrow\rangle_j, \quad (3.11)$$

のように作用する。 $\hat{P}$  は  $\hat{\sigma}_j^z$  と  $\hat{S}_j^z$  の固有値の+と-を入れ替える働きをしていて、この変換のもとで  $\hat{H}$  は不変である。よって、

$$\hat{P}^{-1} \hat{H} \hat{P} = \hat{H} \Leftrightarrow \hat{H} \hat{P} = \hat{P} \hat{H}, \quad (3.12)$$

となり、 $\hat{H}$  は  $\hat{P}$  と交換する。また、 $\hat{P}$  は明らかに  $\hat{N}_{\text{tot}}$  と可換であるので、 $\hat{H}$  は  $\hat{N}_{\text{tot}}$  の固有値  $N_c$  と  $\hat{P}$  の固有値  $P = \pm 1$  の固有空間でブロック対角にできる<sup>1</sup>。これにより、 $\hat{H}$  の行列次元が小さくなり、基底状態を少ない計算量で求めることができるようになる。

次に1サイトの自由度に関して、 $\hat{P}$  の固有状態を実際に求めてみる。 $j$  サイトのヒルベルト空間を、伝導電子の部分空間  $\{|\text{vac}\rangle_j, |\uparrow\rangle_j, |\downarrow\rangle_j, |\uparrow\downarrow\rangle_j\}$  と、局在スピンの部分空間  $\{|\uparrow\rangle_j, |0\rangle_j, |\downarrow\rangle_j\}$  に分けると、それぞれの空間で  $\hat{P}$  は、

$$\hat{P} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \dots \quad \text{伝導電子}, \quad (3.13)$$

$$\hat{P} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \dots \quad \text{局在スピン}, \quad (3.14)$$

と行列表示できる。式 (3.13) の固有状態は、

$$|\text{vac}\rangle_j = |\text{vac}\rangle_j \quad \dots \quad P = 1, N_c = 0, \quad (3.15)$$

$$|\text{ev}\rangle_j = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_j + |\downarrow\rangle_j) \equiv \hat{c}_{j,\text{ev}}^\dagger |\text{vac}\rangle_j \quad \dots \quad P = 1, N_c = 1, \quad (3.16)$$

$$|\text{od}\rangle_j = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_j - |\downarrow\rangle_j) \equiv \hat{c}_{j,\text{od}}^\dagger |\text{vac}\rangle_j \quad \dots \quad P = -1, N_c = 1, \quad (3.17)$$

$$|\text{od, ev}\rangle_j = |\uparrow\downarrow\rangle_j = \hat{c}_{j,\text{od}}^\dagger \hat{c}_{j,\text{ev}}^\dagger |\text{vac}\rangle_j \quad \dots \quad P = -1, N_c = 2, \quad (3.18)$$

---

<sup>1</sup> $\hat{P}^2 = 1$  から  $P = \pm 1$  が分かる。

であり、 $\hat{c}_{j,\text{ev}}^\dagger$ 、 $\hat{c}_{j,\text{od}}^\dagger$  は、

$$\hat{c}_{j,\text{ev}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \hat{c}_{j\uparrow}^\dagger + \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger \right), \quad (3.19)$$

$$\hat{c}_{j,\text{od}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \hat{c}_{j\uparrow}^\dagger - \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger \right), \quad (3.20)$$

である。これらの関係から  $\hat{c}_{j,\text{ev}}^\dagger$ 、 $\hat{c}_{j,\text{od}}^\dagger$  がフェルミオンの交換関係を満たすことが示される。したがって、これらは  $P = 1$ (even) および、 $P = -1$ (odd) のパリティを持つ伝導電子の生成演算子とである。また、式 (3.14) の固有状態は、

$$|\text{EV}\rangle_j = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_j + |\downarrow\rangle_j) \quad \cdots \quad P = 1, \quad (3.21)$$

$$|0\rangle_j = |0\rangle_j \quad \cdots \quad P = 1, \quad (3.22)$$

$$|\text{OD}\rangle_j = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_j - |\downarrow\rangle_j) \quad \cdots \quad P = -1, \quad (3.23)$$

となる。

以上から、 $j$  サイトのヒルベルト空間として、 $\left\{ |\text{vac}\rangle_j, |\text{ev}\rangle_j, |\text{od}\rangle_j, |\text{ev, od}\rangle_j \right\} \otimes \left\{ |\text{EV}\rangle_j, |0\rangle_j, |\text{OD}\rangle_j \right\}$  を採用する。これらの基底により  $\hat{\sigma}_j$ 、 $\hat{S}_j$  は、

$$\hat{\sigma}_j^x = \frac{1}{2} \left( \hat{c}_{j,\text{ev}}^\dagger \hat{c}_{j,\text{ev}} - \hat{c}_{j,\text{od}}^\dagger \hat{c}_{j,\text{od}} \right), \quad (3.24)$$

$$\hat{\sigma}_j^y = \frac{i}{2} \left( \hat{c}_{j,\text{ev}}^\dagger \hat{c}_{j,\text{od}} - \hat{c}_{j,\text{od}}^\dagger \hat{c}_{j,\text{ev}} \right), \quad (3.25)$$

$$\hat{\sigma}_j^z = \frac{1}{2} \left( \hat{c}_{j,\text{ev}}^\dagger \hat{c}_{j,\text{od}} + \hat{c}_{j,\text{od}}^\dagger \hat{c}_{j,\text{ev}} \right), \quad (3.26)$$

$$\hat{S}_j^x = |\text{EV}\rangle_j \langle 0|_j + |0\rangle_j \langle \text{EV}|_j, \quad (3.27)$$

$$\hat{S}_j^y = i \left( |0\rangle_j \langle \text{OD}|_j - |\text{OD}\rangle_j \langle 0|_j \right), \quad (3.28)$$

$$\hat{S}_j^z = |\text{EV}\rangle_j \langle \text{OD}|_j + |\text{OD}\rangle_j \langle \text{EV}|_j, \quad (3.29)$$

となり、ハミルトニアン各項は、

$$\hat{H}_t = -t \sum_{j=1}^{N-1} \sum_{p=\text{ev,od}} \left( \hat{c}_{j,p}^\dagger \hat{c}_{j+1,p} + \hat{c}_{j+1,p}^\dagger \hat{c}_{j,p} \right), \quad (3.30)$$

$$\hat{H}_J = J \sum_{j=1}^N \left( \sigma_j^x S_j^x + \sigma_j^y S_j^y + \sigma_j^z S_j^z \right), \quad (3.31)$$

$$\hat{H}_h = -h \sum_{j=1}^N \left( \frac{1}{2} \hat{c}_{j,\text{ev}}^\dagger \hat{c}_{j,\text{ev}} - \frac{1}{2} \hat{c}_{j,\text{od}}^\dagger \hat{c}_{j,\text{od}} + |\text{EV}\rangle_j \langle 0|_j + |0\rangle_j \langle \text{EV}|_j \right), \quad (3.32)$$

$$\hat{H}_D = -D \sum_{j=1}^N \left( 1 - |0\rangle_j \langle 0|_j \right), \quad (3.33)$$

と表わされる。ただし、

$$\begin{aligned} 2\sigma_j^x S_j^x &= \hat{c}_{j,\text{ev}}^\dagger \hat{c}_{j,\text{ev}} |\text{EV}\rangle_j \langle 0|_j + \hat{c}_{j,\text{ev}}^\dagger \hat{c}_{j,\text{ev}} |0\rangle_j \langle \text{EV}|_j - \hat{c}_{j,\text{od}}^\dagger \hat{c}_{j,\text{od}} |\text{EV}\rangle_j \langle 0|_j - \hat{c}_{j,\text{od}}^\dagger \hat{c}_{j,\text{od}} |0\rangle_j \langle \text{EV}|_j, \\ 2\sigma_j^y S_j^y &= \hat{c}_{j,\text{ev}}^\dagger \hat{c}_{j,\text{od}} |\text{OD}\rangle_j \langle 0|_j + \hat{c}_{j,\text{od}}^\dagger \hat{c}_{j,\text{ev}} |0\rangle_j \langle \text{OD}|_j - \hat{c}_{j,\text{ev}}^\dagger \hat{c}_{j,\text{od}} |0\rangle_j \langle \text{OD}|_j - \hat{c}_{j,\text{od}}^\dagger \hat{c}_{j,\text{ev}} |\text{OD}\rangle_j \langle 0|_j, \\ 2\sigma_j^z S_j^z &= \hat{c}_{j,\text{ev}}^\dagger \hat{c}_{j,\text{od}} |\text{EV}\rangle_j \langle \text{OD}|_j + \hat{c}_{j,\text{ev}}^\dagger \hat{c}_{j,\text{od}} |\text{OD}\rangle_j \langle \text{EV}|_j + \hat{c}_{j,\text{od}}^\dagger \hat{c}_{j,\text{ev}} |\text{EV}\rangle_j \langle \text{OD}|_j + \hat{c}_{j,\text{od}}^\dagger \hat{c}_{j,\text{ev}} |\text{OD}\rangle_j \langle \text{EV}|_j, \end{aligned} \quad (3.34)$$

である。

### 3.2 期待値と相関関数

DMRG で計算されるサイズは通常数百サイトと有限であるため、演算子  $\hat{O}_i$  の相関関数

$$\chi_{i,j} = \langle \hat{O}_i \hat{O}_j \rangle, \quad (3.35)$$

を計算する場合は端の効果を排除するため、 $i, j$  として系の中心付近を選ぶことが望ましい。しかし、 $\hat{O}_i$  が LL に、 $\hat{O}_j$  が RR に属する場合、 $\chi_{i,j}$  を計算する際には  $\hat{O}_i, \hat{O}_j$  ともに LLLRRLRR の基底で表現しなければならず、行列積  $\hat{O}_i \hat{O}_j$  を計算することに膨大な時間がかかる。系のサイズが十分大きければ  $\chi_{i,j}$  は  $|i-j|$  のみに依存すると考えられるため、本研究では  $\chi_{i,j}$  を全て LL 内部で計算することにした。具体的には  $j = \frac{N}{2} - 1$  と固定し、 $i = 1, 2, \dots, \frac{N}{2} - 1$  とした。これにより行列積  $\hat{O}_i \hat{O}_j$  の次元が LL の状態数  $m$  となり、本研究では  $m = 100$  である。

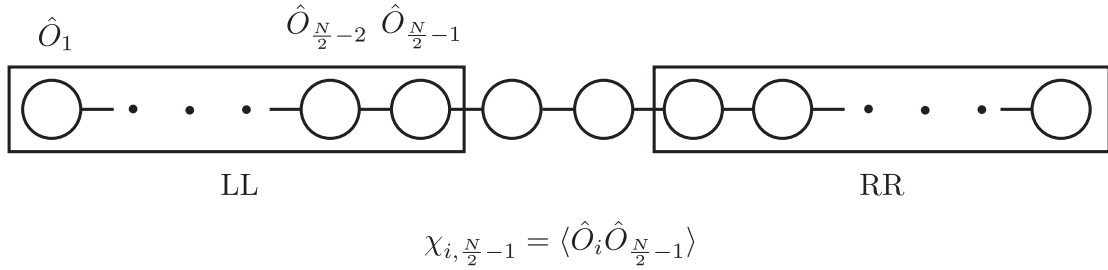


図 3.1: 相関関数の基準点のとり方。相関関数は全てブロック LL 内部で計算する。

次に、実際に計算する物理量や相関関数を定義しておく。伝導電子については、 $x$  軸方向の磁化の平均値  $\langle \hat{\sigma}_x \rangle$ 、スピン相関関数  $\chi_{zz}^\sigma(r)$ 、 $\hat{n}_i$  の相関関数  $\chi^n(r)$  を、

$$\langle \hat{\sigma}_x \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \hat{\sigma}_i^x \rangle, \quad (3.36)$$

$$\chi_{zz}^\sigma(r) = \langle \hat{\sigma}_{\frac{N}{2}-1-r}^z \hat{\sigma}_{\frac{N}{2}-1}^z \rangle, \quad (3.37)$$

$$\chi^n(r) = \langle \hat{n}_{\frac{N}{2}-1-r} \hat{n}_{\frac{N}{2}-1} \rangle, \quad (3.38)$$

で定義する。ここで、 $N$  はサイト数であり、 $\langle \dots \rangle$  は基底状態による期待値を表す。また、 $\hat{n}_i$  は伝導電子の粒子数演算子で  $\hat{n}_i = \hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i\uparrow} + \hat{c}_{i\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i\downarrow}$  である。局在スピンについては、 $x$  軸方向の磁化の平均値  $\langle \hat{S}_x \rangle$ 、スピン相関関数  $\chi_{zz}^S(r)$  を、

$$\langle \hat{S}_x \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \hat{S}_i^x \rangle, \quad (3.39)$$

$$\chi_{zz}^S(r) = \langle \hat{S}_{\frac{N}{2}-1-r}^z \hat{S}_{\frac{N}{2}-1}^z \rangle, \quad (3.40)$$

で定義する。また、 $\chi_{zz}^\sigma(r)$  と  $\chi_{zz}^S(r)$  をまとめて、 $\chi_{zz}(r)$  と表記する。さらに、伝導電子と局在スピンの局所相関関数の平均値  $\langle \hat{\sigma} \cdot \hat{S} \rangle$  を

$$\langle \hat{\sigma} \cdot \hat{S} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \hat{\sigma}_i \cdot \hat{S}_i \rangle, \quad (3.41)$$

で定義する。

最後に相関関数の減衰に関するパラメーターを定義する。伝導電子および局在スピンの相関関数  $\chi_{zz}(r)$  がべき減衰する場合、減衰のべき  $\eta$  を

$$\chi_{zz}(r) \sim r^{-\eta}, \quad (3.42)$$

で定義し、 $\chi_{zz}(r)$  が指数減衰する場合、相関長  $\xi$  を

$$\chi_{zz}(r) \sim e^{-\frac{r}{\xi}}, \quad (3.43)$$

で定義する。

### 3.3 計算精度

本研究では  $\hat{H}_{\text{LLRLRLRR}}$  の基底状態を Lanczos 法 (付録 A) [33, 34] により計算した。また、得られた固有ベクトルは逆反復法 (付録 B) により精度を上げてある。逆反復法で必要となる連立方程式の解法については共役勾配法 (付録 C) [35, 36] を用いた。これらの詳細については付録を参照されたい。密度行列の対角化には lapack の dsyev ルーチン、Lanczos 法の三重対角行列の対角化には Lapack の dstev ルーチンを用いた。これらの計算精度についてだが、DMRG のプログラムは倍精度により作った。これにより一度の四則演算で  $10^{-15}$  程度の精度が保証されている。また、Lapack のルーチンについても計算は倍精度で行われており  $10^{-15}$  程度の精度が保証される。Lanczos 法の基底状態の固有値の収束については、 $n$  と  $n-1$  回目の固有値の差  $\delta_{\text{Lan}}$  が  $\delta_{\text{Lan}} = E_n - E_{n-1} < 10^{-14}$  を満たした場合に収束したとみなした。また、共役勾配法の収束条件は  $\delta_{\text{CG}} < 10^{-15}$ 、逆反復法の収束条件については  $\delta_{\text{Inv}} < 10^{-13}$  とした。ブロック LL の状態数については  $m = 100$  とし、 $10^{-14}$  の精度で密度行列の固有値の縮退を判定した。sweep については収束判定せず全ての計算で 1 回だけ行っている。

## 第4章 結果

本章では模型 (3.5) の DMRG を用いて解析した数値計算結果を示す。本研究では、 $N = 128$  サイトで、 $t = D = 1$  に固定し、 $h$  を  $3/19 \approx 0.16$  から  $3.0$ 、 $J$  については  $J = 0.3, 1.0, 1.5, 2.0$  の 4 点、伝導電子のフィリング  $n_c = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \hat{n}_i \rangle$  については  $n_c = 1/2, 3/4, 1$  として、磁化、相関関数等を計算し、基底状態相図を決定した。 $n_c = 1/2$  の場合を特に詳細に議論する。 $n_c = 3/4, 1$  の場合は強磁性状態が基底状態ではないことが分かったことと、秩序状態の詳細についての差異こそあれ、定性的には  $n_c = 1/2$  と同じ振る舞いであるので、計算結果のみ付録 D にまとめた。ただし  $n_c = 3/4$  の場合、電荷密度波が現れることは特筆しておく。

まず最初に 4.1 節で  $n_c = 1/2$  の場合の基底状態相図の概要を説明する。4.2 節で磁化曲線について議論した後、4.3 節において各相における、スピン分布を議論し、最後に 4.4 節において  $h - J$  相図を決定する上で重要なスピン相関関数の振る舞いについて議論する。

### 4.1 $h - J$ 相図

$n_c = 1/2$  の基底状態の  $h - J$  相図を図 4.1 に示す。 $\square$ 、 $\diamond$ 、 $\triangle$ 、がそれぞれ実際に計算した点である。特徴的なのは、全ての  $J$  において、 $h \approx 0.16$  の低磁場側ではイジング的な秩序相 ( $\triangle$ ) が安定化することである。特に  $J = 2.0$  の場合は強磁性が現れる。この相では、伝導電子と局在スピンのスピン相関関数  $\chi_{zz}(r)$  が遠方でも減衰せず、値が有限に残る。また、広い領域 ( $\diamond$ ) でスピン相関関  $\chi_{zz}(r)$  が  $\chi_{zz}(r) \sim r^{-\eta}$  のようにべき減衰する、朝永ラッティンジャー流体 (TLL) 的振る舞いが見られる [23]。また、 $J = 0.3$  と小さい場合は高磁場側で、伝導電子スピンが飽和することによるスピングャップ相 (polarized) ( $\square$ ) が安定化し、 $J = 1.5, 2.0$  と大きい場合は中間磁場領域で伝導電子と局在スピンが強く束縛されることによるスピングャップ相 ( $\square$ ) が安定化することが分かった。これらの相では、スピン相関関数  $\chi_{zz}(r)$  が  $\chi_{zz}(r) \sim e^{-\frac{r}{\xi}}$  のように指数減衰する。

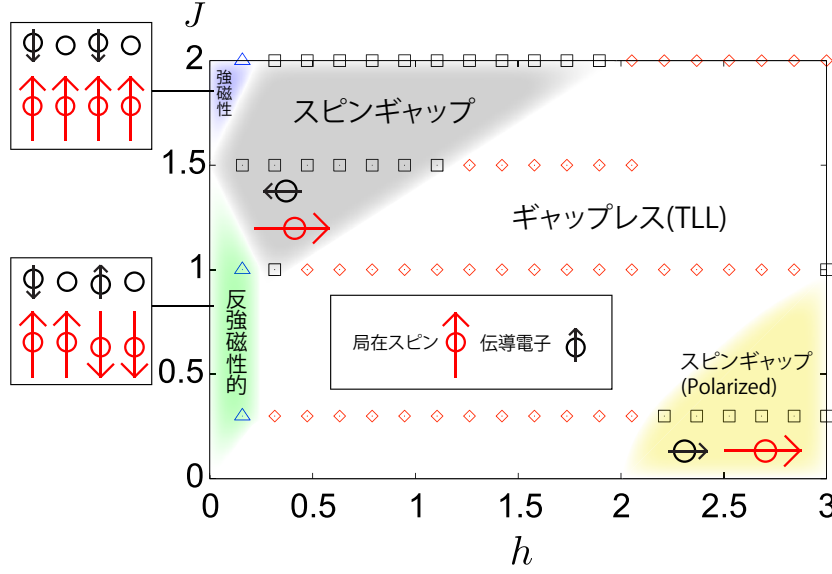


図 4.1: 128 サイト、 $n_c = 1/2$  の場合の  $h - J$  相図。□で表された点ではスピン相関関数  $\chi_{zz}(r)$  が指数減衰している。◇では  $\chi_{zz}(r)$  がべき減衰し、△では  $\chi_{zz}(r)$  の値が遠方でも有限に残っており、 $J = 0.3$  と  $1.0$  では波数  $\pi/2$  の反強磁性状態で、 $J = 2.0$  では強磁性状態である。

## 4.2 磁化

図 4.2(a) に局在スピンの  $x$  軸方向の磁化の平均値  $\langle \hat{S}_x \rangle$  の磁場  $h$  依存性を示す。 $h$  が大きくなるとスピンが磁場方向に誘起されることが分かる。特に  $J = 2.0$  の場合は、 $h \approx 1.5$  で一旦  $\langle \hat{S}_x \rangle$  が飽和し、プラトー的になる様子が確認できる。この領域では磁場を増やしても  $\langle \hat{S}_x \rangle$  がほとんど増加しないことから、局在スピンと伝導電子スピンの強く束縛されていると考えられる。その後  $h \approx 1.96$  付近で再び増加し、飽和していく様子が確認できる。図 4.2(b) に  $h \sim 2.0$  付近の拡大図を示す。 $h \approx 1.96$  で不連続な飛びがある可能性があり一次転移的である。

次に伝導電子の  $x$  軸方向の磁化の平均値  $\langle \hat{\sigma}_x \rangle$  を図 4.3(a) に示す。 $J = 1.0, 1.5, 2.0$  の場合は低磁場側で  $\langle \hat{\sigma}_x \rangle$  が負になっているが、これは次のように解釈できる。まず、磁場が有限の時は  $\hat{H}_h$  の項により局在スピンは全て磁場方向を向こうとする。この時、伝導電子スピンについては、磁場方向を向いて  $\hat{H}_h$  でエネルギー利得を得るか、局在スピンと逆方向を向いて  $\hat{H}_J$  でエネルギー利得を得るかの二通りがあるが、 $J > h$  の時は  $\hat{H}_J$  でエネルギー利得を得た方が得なので、局在スピンと逆方向 (つまり  $h$  と逆方向) を向いて  $\langle \hat{\sigma}_x \rangle$  が負になるわけである。磁場を大きくしていくと伝導電子スピンも磁場方向を向き始め、 $J = 2.0$  の場合は  $h \approx 1.96$  付近でこれが始まっていると考えられる。図 4.2 と対応して、 $h \approx 1.96$  までは磁場を増やしても  $\hat{\sigma}_x$  がほとんど変化しない。これは、上述のように伝導電子スピンの局在スピンと強く結合していることによる。また、図 4.3(b) に示した  $\langle \hat{S}_x \rangle$  と同様に  $\langle \hat{\sigma}_x \rangle$  も  $h \approx 1.96$  において僅かな飛びが見られ、転移は一時転移的である。 $h \gg J$  になると、伝導電子スピンは全て  $x$  方向に誘起され  $\langle \hat{\sigma}_x \rangle = \frac{1}{2} \times n_c = 1/4$  となる。 $J = 0.3$  の場合は  $h \approx 2.2$  で伝導電子スピンが全て  $x$  方向に誘起された結果、 $\langle \hat{\sigma}_x \rangle$  が飽和し  $\langle \hat{\sigma}_x \rangle = 1/4$  となっている。

最後に伝導電子と局在スピンの局所スピン相関関数の平均値  $\langle \hat{\sigma} \cdot \hat{S} \rangle$  の磁場  $h$  依存性を図 4.4 に示す。上述したように、低磁場側では  $\hat{H}_J$  の効果が支配的であるため  $\langle \hat{\sigma} \cdot \hat{S} \rangle$  が負に大きく

なっている。また、図 4.2(b)、図 4.3(b) と同様に  $J = 2.0$  の場合、 $h \approx 1.96$  付近で  $\langle \hat{\sigma} \cdot \hat{S} \rangle$  の僅かな飛びが確認できる [図 4.4(b)]。さらに、強磁性相とスピングャップ相での  $\langle \hat{\sigma} \cdot \hat{S} \rangle$  はほとんど変化していないことから、局所的に伝導電子と局在スピンの“固まった”状態で相転移が起こっていると考えられる。

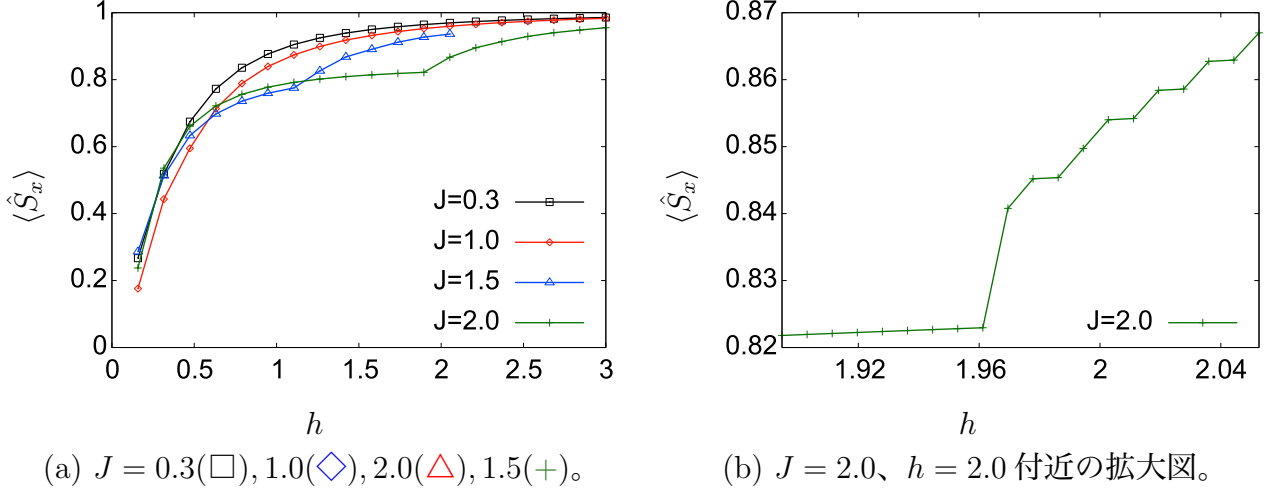


図 4.2:  $\langle \hat{S}_x \rangle$  の磁場  $h$  依存性。(a)  $J = 2.0$  の場合、 $h \approx 1.5$  でプラトー的な振る舞いが見られ、この領域では局在スピンと伝導電子が強く束縛されている。(b)  $h \approx 1.96$  で  $\langle \hat{S}_x \rangle$  に僅かな飛びが見られる。

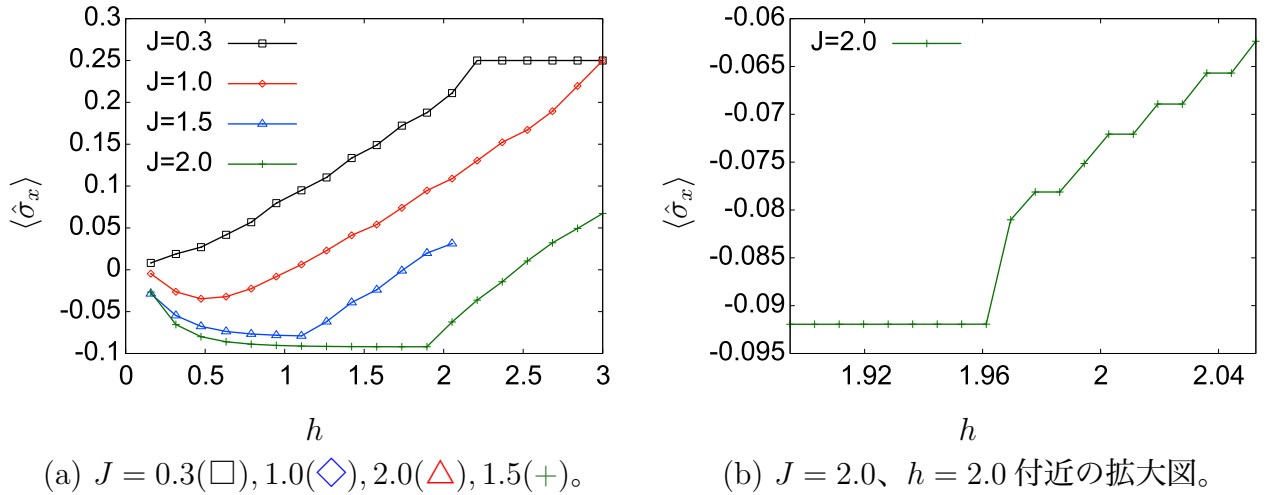
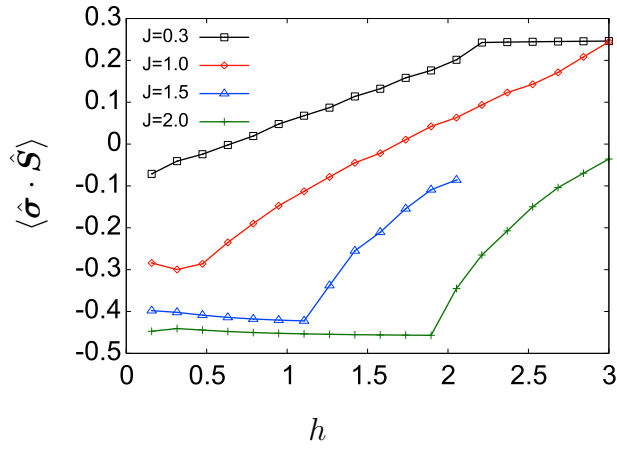
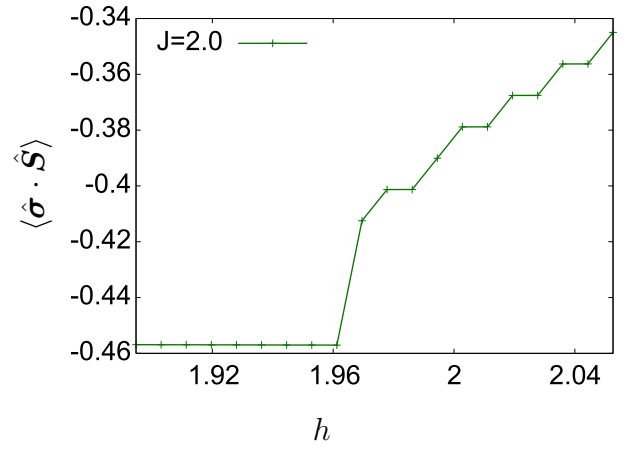


図 4.3:  $\langle \hat{\sigma}_x \rangle$  の磁場依存性。(a)  $J = 0.3$  の場合、 $h \approx 2.2$  付近で伝導電子スピンの飽和する。また、 $J = 1.0$  の場合、 $h \approx 0.5$  付近で伝導電子スピンの  $x$  方向に誘起され始める。(b)  $J = 2.0$  の場合、 $h \approx 1.96$  付近で伝導電子スピンの  $x$  方向に誘起され始め、この直前では伝導電子と局在スピンは強く束縛されている。また、 $\langle \hat{\sigma}_x \rangle$  に僅かな飛びが見られる。



(a)  $J = 0.3(\square), 1.0(\diamond), 2.0(\triangle), 1.5(+)$ 。



(b)  $J = 2.0$ 、 $h = 2.0$  付近の拡大図。

図 4.4:  $\langle \hat{\sigma} \cdot \hat{S} \rangle$  の磁場依存性。(a) 低磁場側では  $\hat{H}_J$  の効果により、 $\langle \hat{\sigma} \cdot \hat{S} \rangle$  は負になっている。(b)  $h \approx 1.96$  付近で  $\langle \hat{\sigma} \cdot \hat{S} \rangle$  に僅かな飛びが見られる。



### 4.3 スピン分布

$J = 0.3, 1.0, 2.0$  それぞれの場合について、スピン分布のサイト  $i$  依存性を議論する。 $J = 1.5$  の場合は  $J = 2.0$  と定性的に同じであるのでここでは議論しない。秩序相および2種類のスピンギャップ相では全ての分布が一様となる傾向にあり、TLL相ではギャップ励起のため端の効果が内側まで伝わりやすく、振動が顕著となる傾向があることが分かった。

$J = 0.3$  のとき

伝導電子スピンの  $x$  成分  $\langle \hat{\sigma}_i^x \rangle$  を図 4.5 に、局在スピンの  $x$  成分  $\langle \hat{S}_i^x \rangle$  を図 4.6 に示す。反強磁性的な相 ( $h \approx 0.16$ ) では、イジング異方性からくるギャップが存在するため端の効果は中心まで伝わりにくく、ほとんど一様な分布である [図 4.5(a)、図 4.6(a)]。

TLL相 ( $0.32 \lesssim h \lesssim 2.05$ ) では、2サイトおきの振動に大きな振動が乗った振る舞いが見られ [図 4.5(a)、図 4.6(b)]、振動の詳細は  $h$  により変化する。伝導電子と局在スピンの反強磁性的な相互作用が働いているため、 $\langle \hat{\sigma}_i^x \rangle$  と  $\langle \hat{S}_i^x \rangle$  には逆位相の振動が現れる [図 4.5(a)、図 4.6(b)]。また、伝導電子のエネルギーバンドは磁場  $h$  をかけると、 $\epsilon_h, \epsilon_{-h}$  という二つのバンドに分かれるが、低磁場側では二つのバンドのエネルギー差が小さいため、二つのフェルミ波数も近い値をとる。一方、スピンギャップ相 (polarized) の直前では  $h$  が大きいいため二つのフェルミ波数の違いが顕著になる (片方はほとんど波数 0 である)。 $\langle \hat{\sigma}_i^x \rangle$  の振動の波長が変化するのは、この二つのフェルミ波数の変化が関係していると考えられる [37]。これを確かめるため、 $\langle \hat{\sigma}_i^x \rangle$  と  $\langle \hat{S}_i^x \rangle$  をフーリエ変換し、スペクトル分布を計算した [図 4.7、図 4.8、図 4.9]。ここで、サイト  $j$  の物理量  $f_j$  のフーリエ変換  $\tilde{f}_k$  とそのスペクトル  $I_k$  は次のように定義される。

$$\tilde{f}_k = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N e^{ikj} f_j, \quad (4.1)$$

$$I_k = \|\tilde{f}_k\| = \frac{1}{N} \sqrt{\left( \sum_{j=1}^N f_j \cos(kj) \right)^2 + \left( \sum_{j=1}^N f_j \sin(kj) \right)^2}. \quad (4.2)$$

ここで、 $k = \frac{2\pi}{N}j$ ,  $j = 0, 1, 2, \dots, N-1$  は波数である。図 4.7 に  $\langle \hat{\sigma}_i^x \rangle$  のスペクトル分布を示す。いずれの磁場においても、四つのピークが見られる。さらに、これらのピークの波数  $k_p$  は、磁場を大きくしていくと増大するものと、減少するものの二種類が確認できる。この  $k_p$  は伝導電子の二つのフェルミ波数  $k_{f1}$  と  $k_{f2}$  を反映しており、 $2k_{f1}, 2k_{f2}, 2\pi - 2k_{f1}, 2\pi - 2k_{f2}$  が  $k_p$  に相当すると考えられる。実際、 $k_p$  の磁場依存性は  $J = 0$  とした場合の伝導電子のフェルミ波数から計算した結果 (付録 E を参照) と同じ振る舞いを示す [図 4.3]。以上から、TLL相における  $\langle \hat{\sigma}_i^x \rangle$  の振動は伝導電子のフェルミ波数で決まることが分かる。また、図 4.9 に  $\langle \hat{S}_i^x \rangle$  のスペクトルを示す。図 4.7 と同様の傾向が見られるが、磁場を大きくしていくと波数 0 以外のスペクトル成分が小さくなっていくことが分かる。これは、磁場の増大と共に局在スピンの向きがより磁場方向を向いていき、振動しにくくなるためである。最後にいずれのスペクトルにおいても  $k = \pi$  が 0 になっていることにコメントしておく。これは、DMRG におけるブロック LLLRRLRR の作り方が原因である。RLRR は LLLR を反転させて作ったので、物理量  $f_j$  の値は系の中心に対して左右対称となる。したがって、 $k = \pi$  の振動は起こり得ない。

スピンギャップ相 (polarized) ( $2.21 \lesssim h$ ) においては、伝導電子スピンは全て磁場方向を向きサイト依存性がなくなる [図 4.5(b-c)]。局在スピンについては、既にほとんど  $x$  方向を向いて

いることと、伝導電子スピンのサイト依存性がなくなった結果、サイト依存性も消失する [図 4.6(c)]。

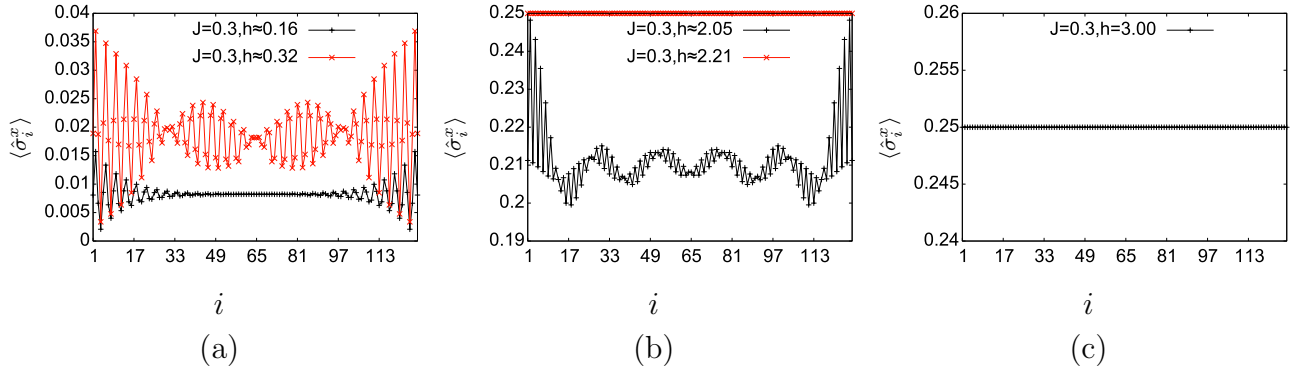


図 4.5:  $\langle \hat{\sigma}_i^x \rangle$  のサイト  $i$  依存性。 (a)  $h \approx 0.16, 0.32$ 、 (b)  $h \approx 2.05, 2.21$ 、 (c)  $h = 3.00$ 。

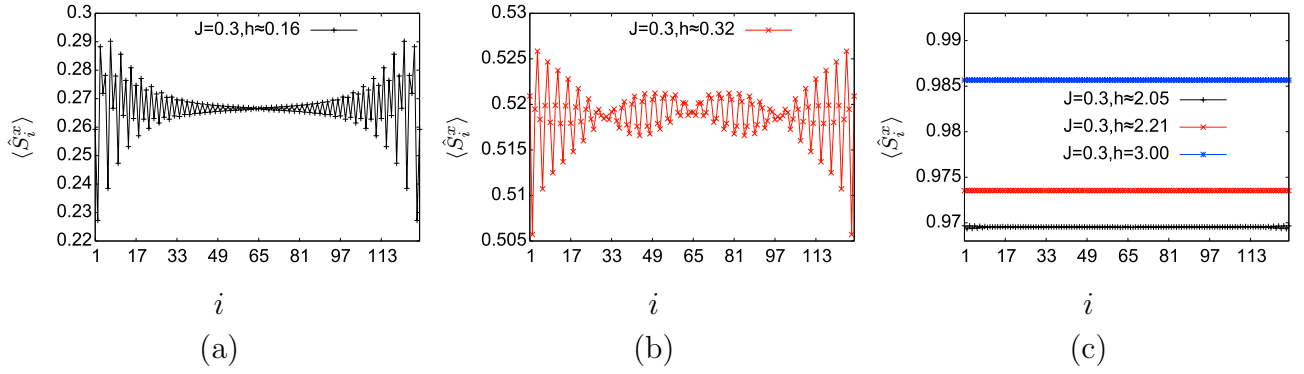


図 4.6:  $\langle \hat{S}_i^x \rangle$  のサイト  $i$  依存性。 (a)  $h \approx 0.16$ 、 (b)  $h \approx 0.32$ 、 (c)  $h \approx 2.05, 2.21, 3.00$ 。

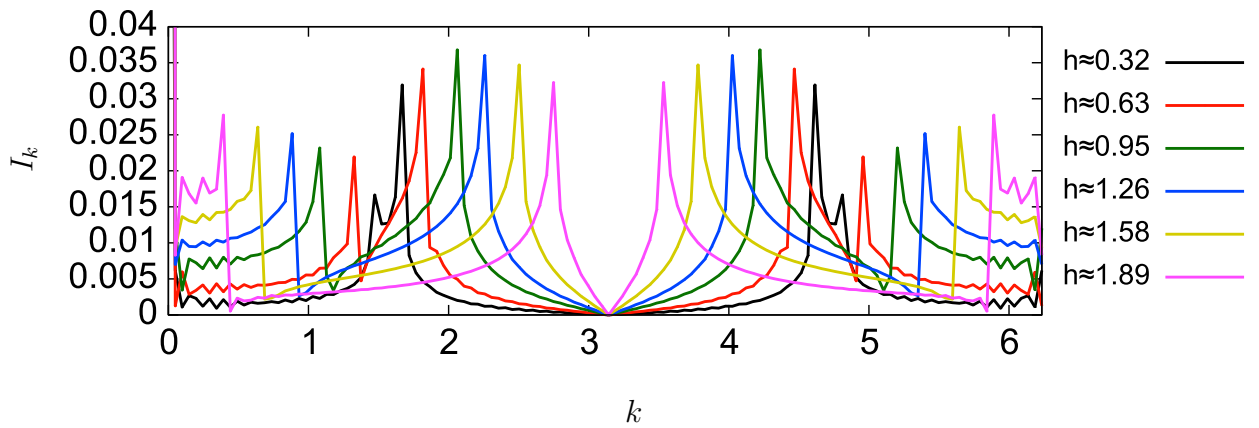


図 4.7: TLL 相における  $\langle \hat{\sigma}_i^x \rangle$  のスペクトル分布。

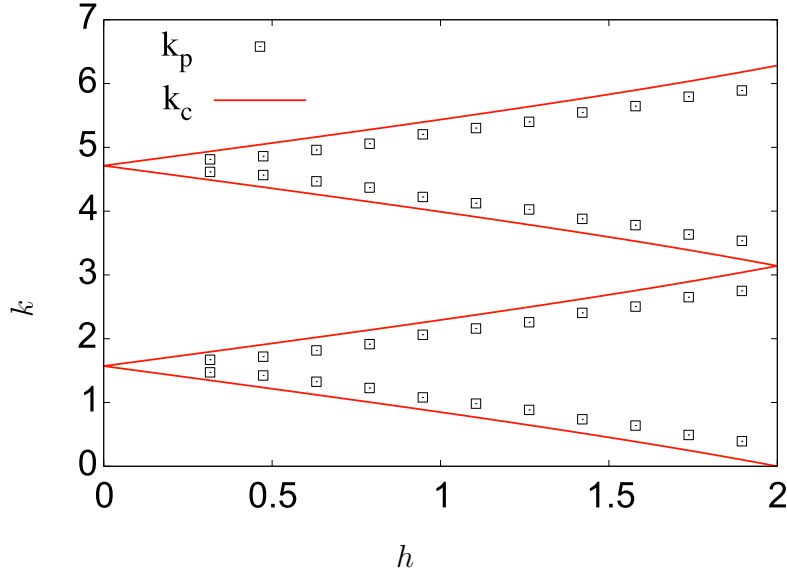


図 4.8: TLL 相における  $\langle \hat{\sigma}_i^x \rangle$  の  $k_p$  の磁場  $h$  依存性。赤線は  $J = 0$  の時の伝導電子の  $k_c = 2k_{f1}, 2k_{f2}, 2\pi - 2k_{f1}, 2\pi - 2k_{f2}$  の磁場  $h$  依存性である。

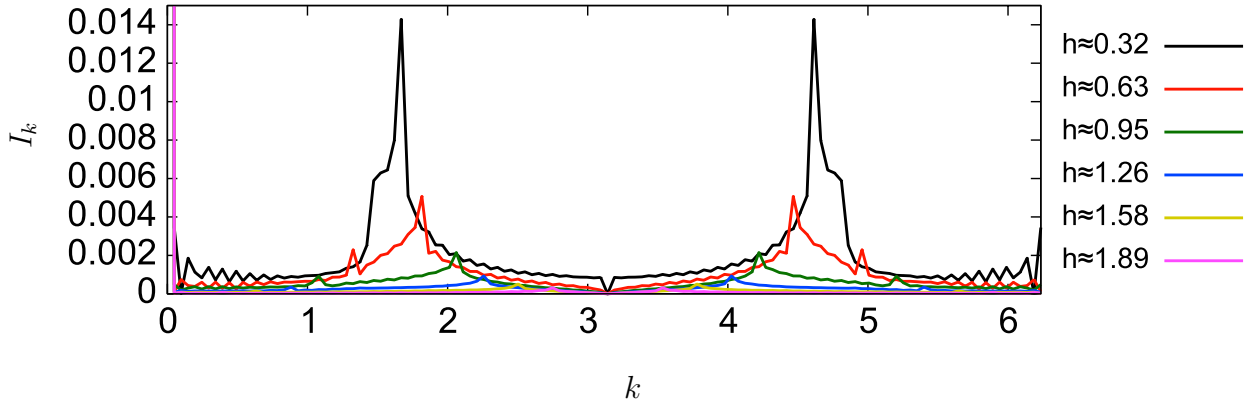


図 4.9: TLL 相における  $\langle \hat{S}_i^x \rangle$  のスペクトル分布。

$J = 1.0$  のとき

伝導電子スピンの  $x$  成分  $\langle \hat{\sigma}_i^x \rangle$  を図 4.10 に、局在スピンの  $x$  成分  $\langle \hat{S}_i^x \rangle$  を図 4.11 に示す。低磁場側の反強磁性的な相 ( $h \approx 0.16$ ) で、一様な分布を取る傾向は  $J = 0.3$  の場合と同じであるが、 $J = 0.3$  の時よりその傾向がより強くなっている。4.3 節で詳細に議論するが、これは  $J = 1.0$  の時のほうがより秩序状態が安定で、イジング異方性からくるギャップが大きいためであると考えられる [図 4.10(a)、図 4.11(a)]。

スピンギャップ相 ( $h \approx 0.32$ ) では伝導電子スピンと局在スピンについてはスピンギャップが開いているため、中心部分は振動が見られない [図 4.10(b)、図 4.11(b)]。これはスピンギャップの存在により、端の効果が中心部分まで伝わらないと考えられる。この領域は次に議論する  $J = 2.0$  の場合に、より広範囲に見られる。

TLL 相 ( $0.47 \lesssim h \lesssim 2.84$ ) において激しく振動し波長が磁場によって変わっていくのは、前述したようにフェルミ波数の磁場変化によるものと考えられる [図 4.10(b-c)、図 4.11(c-e)]。  $J = 1.0$

では  $J = 0.3$  に比べて  $\hat{H}_J$  の効果がより大きいため、TLL 相の高磁場側でも振動が確認できる [図 4.11(e)]。

スピギャップ相 (polarized) ( $3 \lesssim h$ ) では、前述した  $J = 0.3$  の場合と同様の理由で  $\langle \hat{\sigma}_i^x \rangle$  と  $\langle \hat{S}_i^x \rangle$  はサイトに依存しない [図 4.10(c)、図 4.11(f)]。  $J = 0.3$  の時と比べて、スピギャップ相の始まりが  $h \approx 3.00$  と高磁場側にずれたのは  $\hat{H}_J$  の効果がより大きいためである。

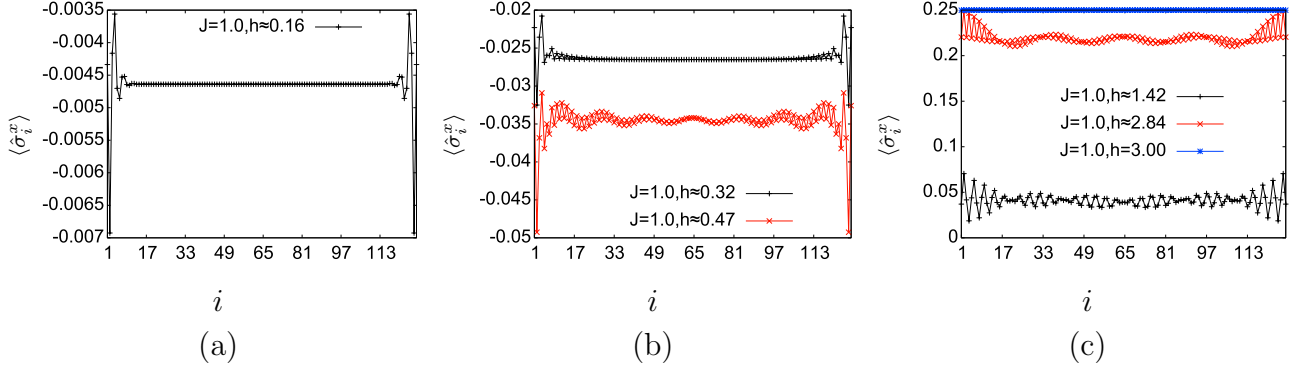


図 4.10:  $\langle \hat{\sigma}_i^x \rangle$  のサイト  $i$  依存性。 (a)  $h \approx 0.16$ 、 (b)  $h \approx 0.32, 0.47$ 、 (c)  $h \approx 1.42, 2.84, 3.00$ 。

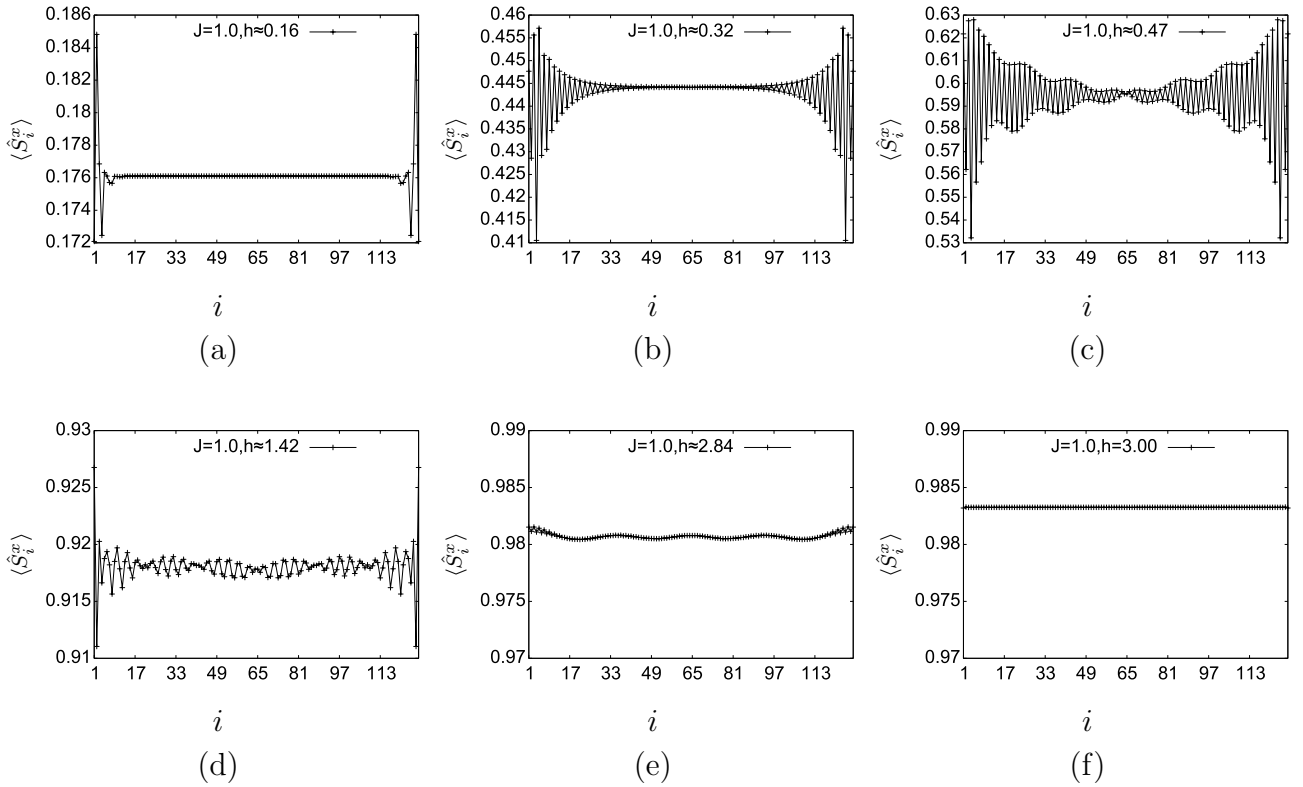


図 4.11:  $\langle \hat{S}_i^x \rangle$  のサイト  $i$  依存性。 (a)  $h \approx 0.16$ 、 (b)  $h \approx 0.32$ 、 (c)  $h \approx 0.47$ 、 (d)  $h \approx 1.42$ 、 (e)  $h \approx 2.84$ 、 (f)  $h = 3.00$ 。

$J = 2.0$  のとき

伝導電子スピンの  $x$  成分  $\langle \hat{\sigma}_i^x \rangle$  を図 4.12 に、局在スピンの  $x$  成分  $\langle \hat{S}_i^x \rangle$  を図 4.13 に示す。ほとんど全ての領域において  $\langle \hat{\sigma}_i^x \rangle$ 、 $\langle \hat{S}_i^x \rangle$  の振る舞いは  $J = 0.3, 1.0$  で現れたものと定性的に同じである。ここでは以下の二点についてコメントする。

まず、 $h \approx 0.16$  では秩序は強磁性的である。強磁性秩序相 ( $h \approx 0.16$ ) では、 $J = 0.3, 1.0$  で現れた反強磁性的秩序相の場合と同様に一様な分布が見られる [図 4.12(a)、図 4.13(a)]。これはどちらの相もイジング異方性が強くスピンの励起にギャップがあるためと考えられる。

スピンギャップ相 ( $0.31 \lesssim h \lesssim 1.96$ ) においても、 $J = 1.0$  と同様に中心部分は振動が見られない [図 4.12(a-b)、図 4.13(a-b)]。ただし、 $J = 2.0$  の場合、 $J \gg h$  なので、この領域が広範囲に現れたことが特徴的である。この領域は 4.1.2 節で議論した、磁化がプラトー的に振る舞う領域と対応している [図 4.2(a)]。

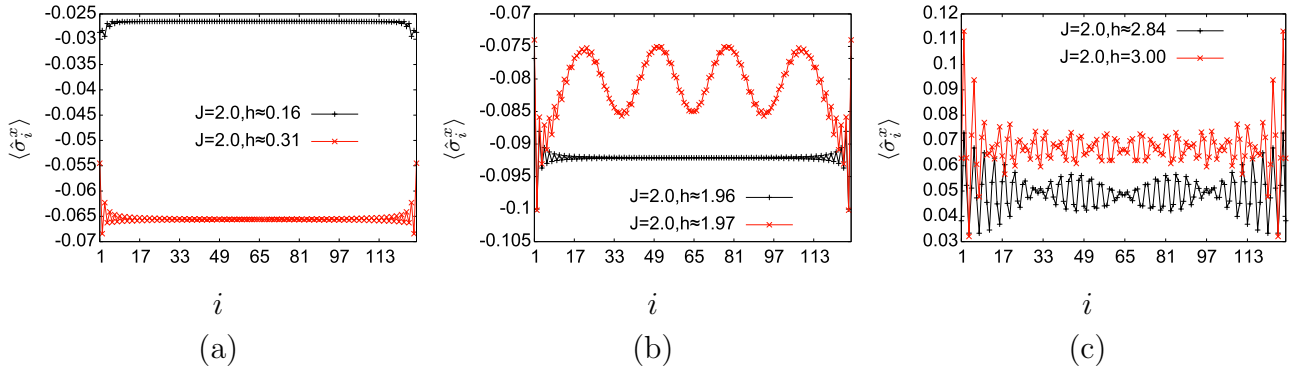


図 4.12:  $\langle \hat{\sigma}_i^x \rangle$  のサイト  $i$  依存性。 (a)  $h \approx 0.16, 0.31$ 、 (b)  $h \approx 1.96, 1.97$ 、 (c)  $h \approx 2.84, 3.00$ 。

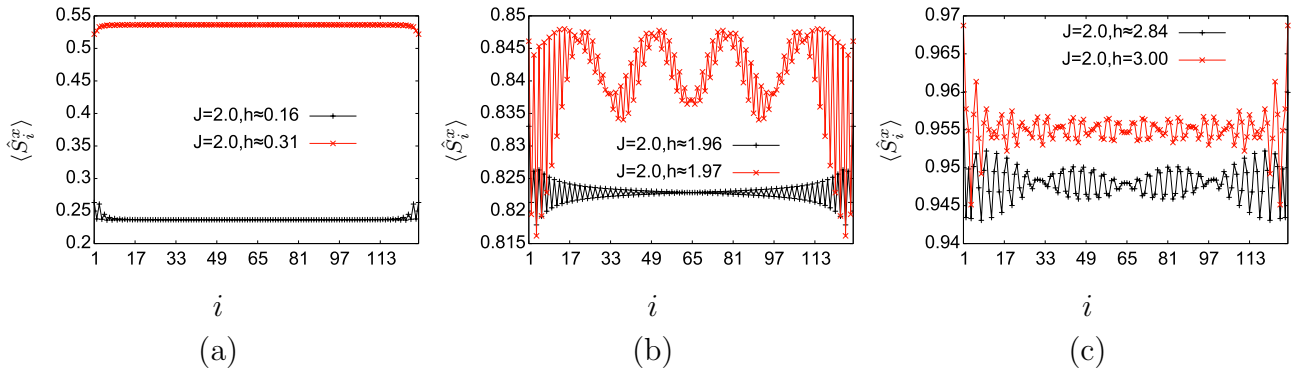


図 4.13:  $\langle \hat{S}_i^x \rangle$  のサイト  $i$  依存性。 (a)  $h \approx 0.16, 0.31$ 、 (b)  $h \approx 1.96, 1.97$ 、 (c)  $h \approx 2.84, 3.00$ 。

## 4.4 スピン相関

伝導電子のスピン相関関数  $\chi_{zz}^\sigma(r)$  および局在スピンの相関関数  $\chi_{zz}^S(r)$  の距離  $r$  依存性は  $h - J$  相図 (図 4.1) を決定する上で重要である。ここでは、これらの相関関数  $\chi_{zz}(r)$  の振る舞いと、その起源について議論する。

$J = 0.3$  のとき

$\chi_{zz}^\sigma(r)$  および  $\chi_{zz}^S(r)$  の距離  $r$  依存性をそれぞれ図 4.14、図 4.15 に示す。反強磁性的秩序相 ( $h \approx 0.16$ ) では、 $\chi_{zz}(r)$  の減衰が見られず、2 サイトおきに振動を繰り返している [図 4.14(a)、図 4.15(a)]。このことから、2 サイトおきに  $\langle \hat{\sigma}_i^z \rangle$  および  $\langle \hat{S}_i^z \rangle$  が反強磁性的に秩序していることが分かる。この起源は  $h = 0$  の場合を考えると容易に理解できる。 $J = 0$  の場合、 $D = 1 \gg J, h$  なので局在スピンは  $\langle \hat{S}_i^z \rangle \pm 1$  の状態を取り、伝導電子はフェルミ波数  $k_F$  まで詰まった状態である。 $J$  が小さい領域では  $\hat{H}_J$  は弱い摂動と考えるのも良いので、局在スピンは伝導電子を介して  $\hat{H}_J$  の二次摂動で RKKY 相互作用をする [38–40]。この時、 $D \gg J$  より局在スピンのスピン反転は抑制され、相互作用はイジング的になる。伝導電子を介した相互作用の振動成分は  $\sim 2k_F$  が支配的であるので、波長  $\lambda = 2\pi/2k_F = 4$  のイジング秩序が現れることが理解できる。

磁場が  $0.32 \lesssim h \lesssim 2.05$  の領域では  $\chi_{zz}(r)$  がベキ減衰していることが分かる [図 4.14(b)、図 4.15(b)]。したがって、この領域の有効模型は TLL であることが期待される。ボソン化法などを用いた解析は本研究の枠を超えるが、今後の課題としたい。

スピングャップ相 (polarized) ( $2.21 \lesssim h$ ) では、 $\chi_{zz}(r)$  が指数減衰していることが分かる [図 4.14(c)、図 4.15(c)]。この領域では磁場  $h$  が大きく、全ての伝導電子が低エネルギー側の  $\epsilon_{-h}$  のバンドに詰まっており、高エネルギー側のバンド  $\epsilon_h$  の底はフェルミエネルギーから  $h - 2t$  だけ上にある。 $\hat{\sigma}_i^z$  は  $x$  方向を向いたスピンを反転させることを考えると、 $h - 2t$  程度の励起エネルギーが必要となり、スピングャップが開くと考えられる。

最後に、伝導電子のスピン相関関数  $\chi_{zz}^\sigma(r)$  と局在スピンのスピン相関関数  $\chi_{zz}^S(r)$  の減衰のベキ  $\eta$  と相関長  $\xi$  の磁場  $h$  依存性を図 4.16 に示す。TLL 相での  $\eta$  の不規則な振る舞いは DMRG の精度不足が原因の可能性がある。TLL 相とスピングャップ相 (polarized) の境界では  $\xi$  は長くなっていることから、相境界で相関長の発散の傾向が見て取れる。低磁場側の TLL 相から相境界に近づくとき  $\eta$  は減少していくが、相境界へ向かってどのような依存性を持つのかは精度の問題もあり、本研究ではよく分からなかった。

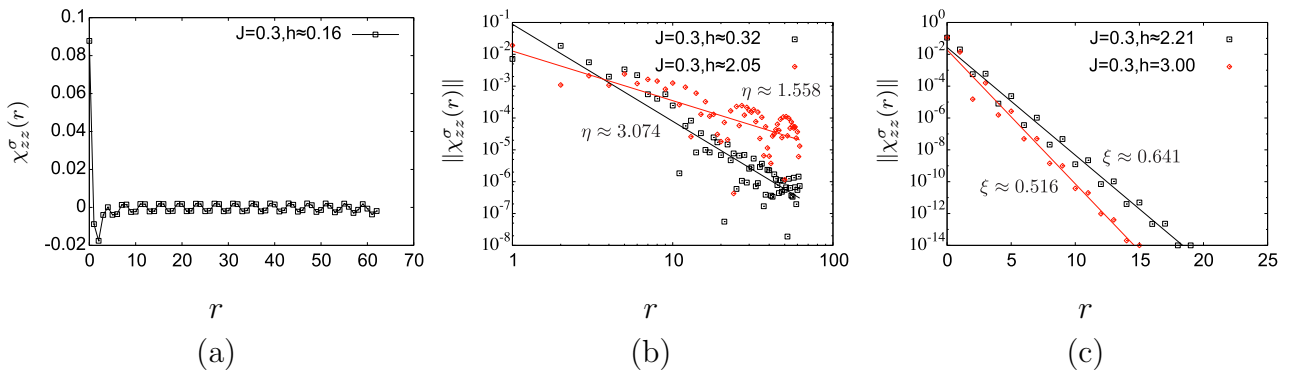


図 4.14:  $\chi_{zz}^\sigma(r)$  の距離  $r$  依存性。(a)  $h \approx 0.16$ 、(b)  $h \approx 0.32, 2.05$ 、(c)  $h \approx 2, 21, 3.00$ 。

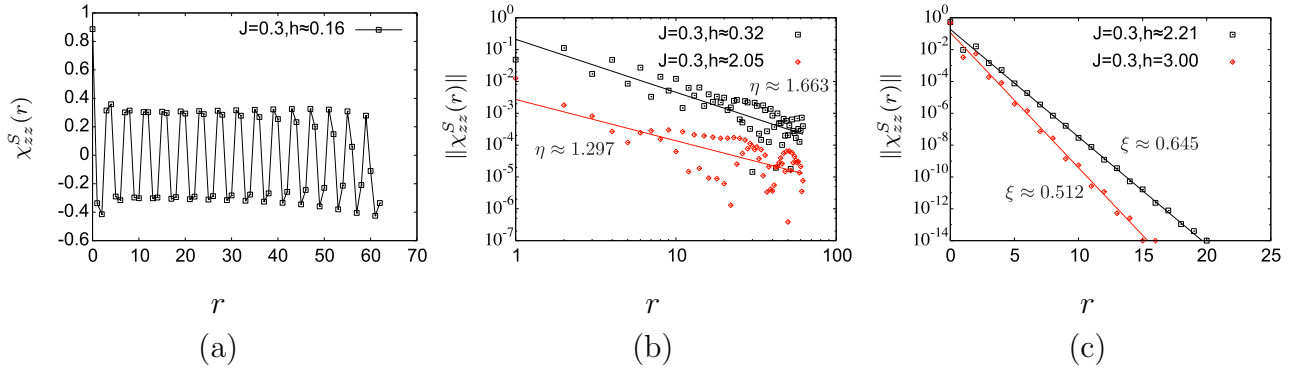


図 4.15:  $\chi_{zz}^S(r)$  の距離  $r$  依存性。(a)  $h \approx 0.16$ 、(b)  $h \approx 0.32, 2.05$ 、(c)  $h \approx 2, 21, 3.00$ 。

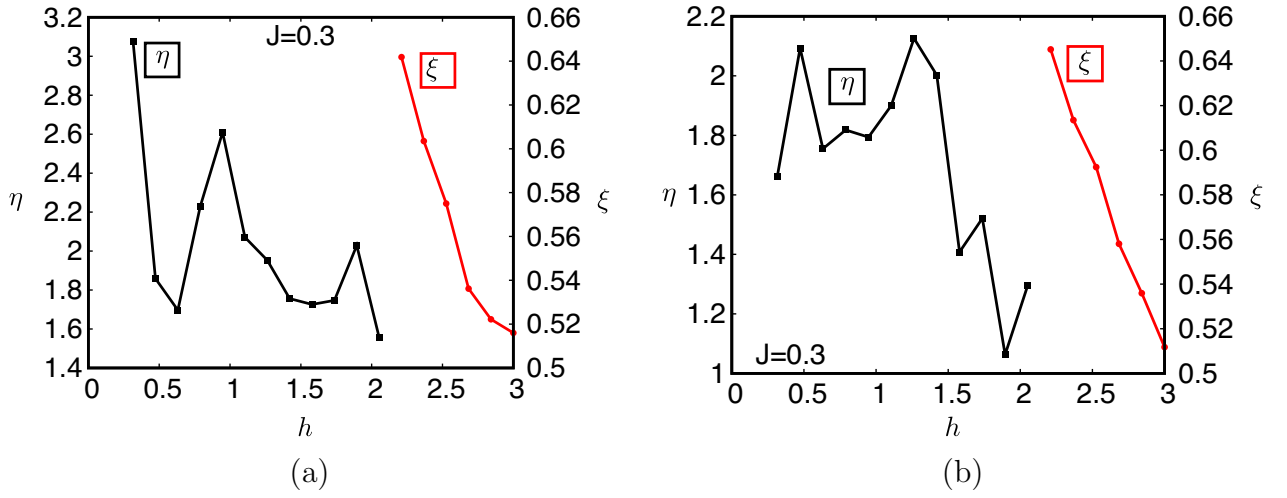


図 4.16: 減衰のベキ  $\eta$  および相関長  $\xi$  の磁場  $h$  依存性。(a) 伝導電子のスピンの相関関数  $\chi_{zz}^\sigma(r)$  のベキおよび相関長。(b) 局在スピンの相関関数  $\chi_{zz}^S(r)$  のベキおよび相関長。



$J = 1.0$  のとき

$\chi_{zz}^\sigma(r)$  および、 $\chi_{zz}^S(r)$  の距離  $r$  依存性をそれぞれ図 4.17、図 4.18 に示す。反強磁性秩序相 ( $h \approx 0.16$ ) では、 $J = 0.3$  の時と同様の 2 サイトおきの振動が見られることから [図 4.17(a)、図 4.18(a)]、 $\langle \hat{S}_i^z \rangle$  および  $\langle \hat{\sigma}_i^z \rangle$  が反強磁性的である。 $J = 0.3$  の時より  $\|\chi_{zz}(r)\|$  が大きいことから、反強磁性的な傾向は強い。

スピングャップ相 ( $h \approx 0.32$ ) では  $\chi_{zz}(r)$  が指数減衰している [図 4.17(b)、図 4.18(b)]。この減衰の起源はスピングャップ相 (polarized) と違い、4.2 節で議論した  $\hat{H}_J$  と  $\hat{H}_h$  の競合による、伝導電子スピンと局在スピンの強い束縛が原因である。これにより、伝導電子スピンもしくは局在スピンを反転するためには有限のエネルギーが必要となり、スピングャップが開くのは polarized したスピングャップ相と同じである。TLL 相 ( $0.47 \lesssim h \lesssim 2.84$ ) では  $J = 0.3$  の時と同様な  $\chi_{zz}(r)$  のべき減衰が見られる [図 4.17(c)、図 4.18(c)]。スピングャップ相 (polarized) ( $3.00 \lesssim h$ ) では上述した理由により、 $\chi_{zz}(r)$  の指数減衰が見られる [図 4.17(b)、図 4.18(b)]。

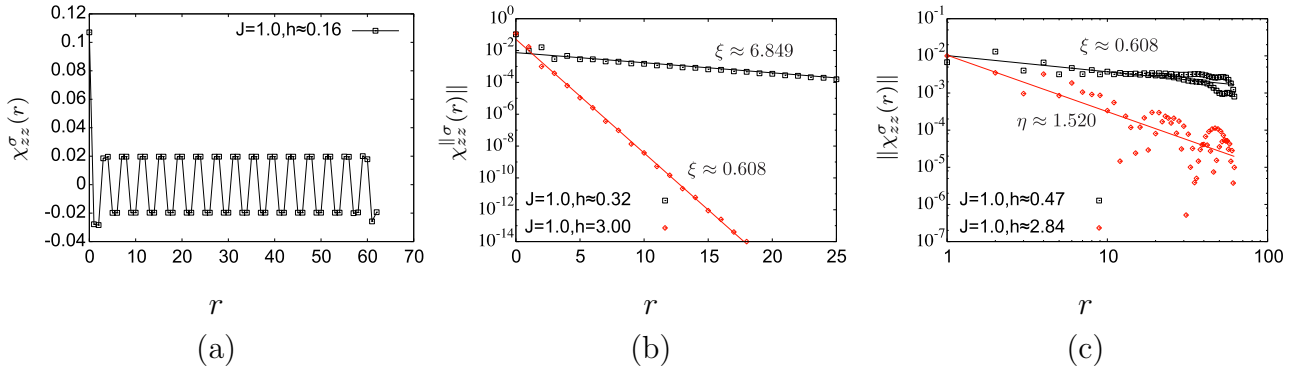


図 4.17:  $\chi_{zz}^\sigma(r)$  の距離  $r$  依存性。 (a)  $h \approx 0.16$ 、 (b)  $h \approx 0.32, 3.00$ 、 (c)  $h \approx 0.47, 2.84$ 。

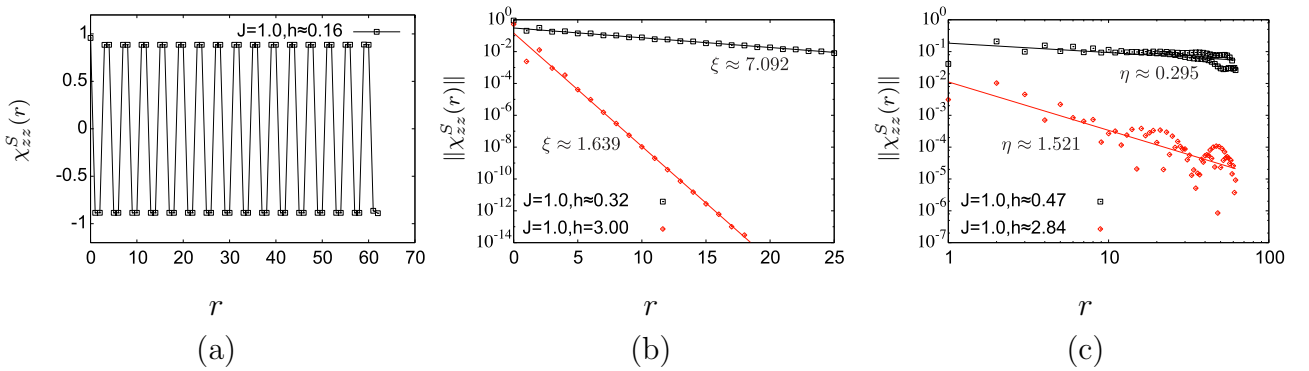


図 4.18:  $\chi_{zz}^S(r)$  の距離  $r$  依存性。 (a)  $h \approx 0.16$ 、 (b)  $h \approx 0.32, 3.00$ 、 (c)  $h \approx 0.47, 2.84$ 。



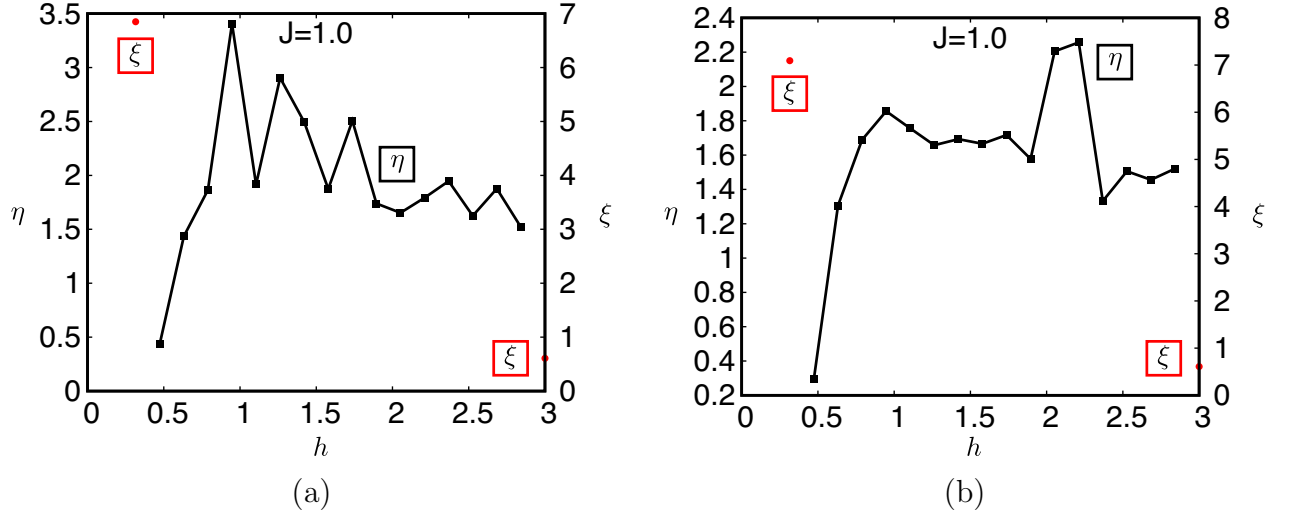


図 4.19: 減衰のベキ  $\eta$  および相関長  $\xi$  の磁場  $h$  依存性。(a) 伝導電子のスピンの相関関数  $\chi_{zz}^{\sigma}(r)$  のベキおよび相関長。(b) 局在スピンの相関関数  $\chi_{zz}^S(r)$  のベキおよび相関長。

$J = 2.0$  のとき

$\chi_{zz}^{\sigma}(r)$  および、 $\chi_{zz}^S(r)$  の距離  $r$  依存性をそれぞれ図 4.20、図 4.21 に示す。 $h \approx 0.16$  では特に  $\chi_{zz}^S(r)$ 、 $\chi_{zz}^{\sigma}(r)$  共に、遠方でも減衰しない成分が見られる [図 4.20(a)、図 4.21(a)]。図 4.4 に示したように  $\langle \hat{\sigma} \cdot \hat{S} \rangle < 0$  であるから、この磁気秩序は局在スピンと伝導電子スピンの反平行になった強磁性秩序であることが分かる。この状態はいわゆる二重交換模型で現れる強磁性状態 [41] と本質的に等価である。つまり、伝導電子の運動エネルギーと  $\hat{H}_J$  の両方からエネルギー利得を得る状態として、この強磁性状態が実現される。このような状態は  $S = 1/2$  のモデルにおいても現れており [21]、共通する状態である。 $\chi_{zz}(r)$  がスピンギャップ相で指数減衰 [図 4.20(b)、図 4.21(b)]、TLL 相でベキ減衰 [図 4.20(c)、図 4.21(c)] するのは、前述したとおりである。

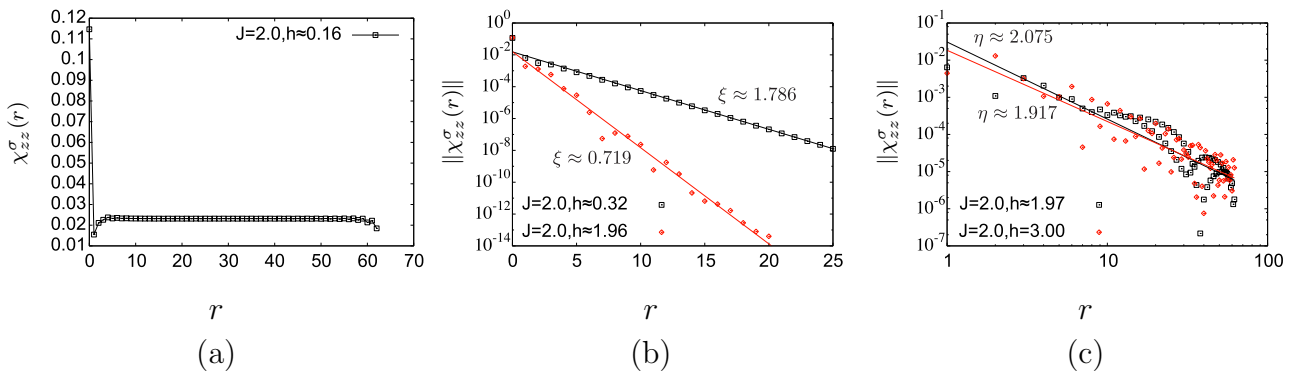


図 4.20:  $\chi_{zz}^{\sigma}(r)$  の距離  $r$  依存性。(a)  $h \approx 0.16$ 、(b)  $h \approx 0.32, 1.96$ 、(c)  $h \approx 1.97, 3.00$ 。

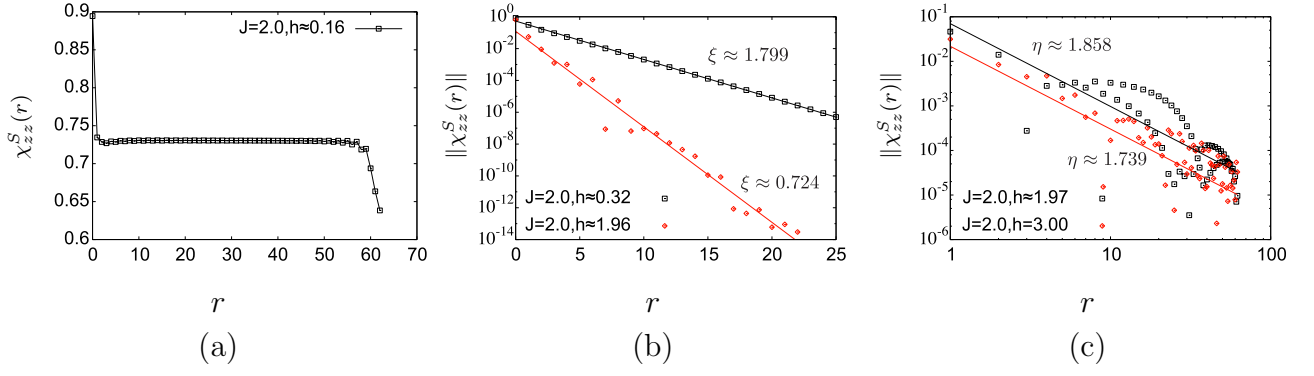


図 4.21:  $\chi_{zz}^S(r)$  の距離  $r$  依存性。(a)  $h \approx 0.16$ 、(b)  $h \approx 0.32, 1.96$ 、(c)  $h \approx 1.97, 3.00$ 。

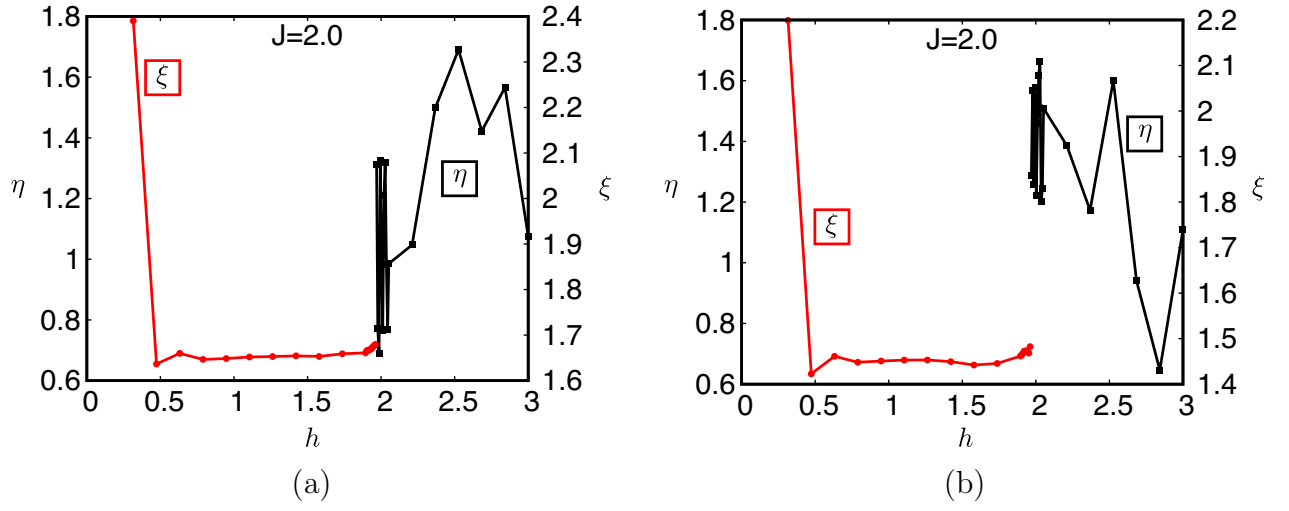


図 4.22: 減衰のベキ  $\eta$  および相関長  $\xi$  の磁場  $h$  依存性。(a) 伝導電子のスピン相関関数  $\chi_{zz}^\sigma(r)$  のベキおよび相関長。(b) 局在スピンの相関関数  $\chi_{zz}^S(r)$  のベキおよび相関長。

## 第5章 まとめと今後の展望

本研究では、横磁場下一軸異方性のある  $S = 1$  次元近藤格子模型の基底状態を DMRG により調べ、基底状態における  $h - J$  相図を決定した。その結果、全てのフィリングにおいて低磁場側ではイジング的な秩序相が安定化することが分かった。 $J$  が小さい場合、局在スピン同士は伝導電子を介した RKKY 相互作用をし、波長  $\lambda = 2\pi/2k_F$  の反強磁性的秩序が現れる。 $J$  が大きい場合、 $n_c = 3/4, 1$  では反強磁性が、 $n_c = 1/2$  の場合には二重交換が起源の強磁性が現れることが分かった。後者は等方的な  $S = 1/2$  次元近藤格子模型の結果と同じ振る舞いである [21]。

また、中間磁場領域ではスピン相関関数  $\chi_{zz}(r)$  がベキ減衰する TLL 相が広い領域で安定化し、高磁場側では伝導電子スピンが  $x$  方向に飽和したスピングャップ相 (polarized) が見出された。さらに、 $J$  が大きい場合は、イジング的秩序相と TLL 相の間に、伝導電子スピンと局在スピンの強く束縛されたスピングャップ相が現れることが分かった。この領域では磁化がプラトー的な振る舞いを示し、TLL 相への転移は一次転移的である。 $x$  方向の磁化のサイト依存性については、二種類のスピングャップ相において中心部分が一樣な分布を取る傾向がある。しかし、ギャップの閉じた TLL 相では端の影響が中心部分まで伝わり、磁場  $h$  に依存した様々な波長を持つ依存性を示すことを確認した。この TLL 相での磁化のサイト依存性を TLL 理論を用いて解析することは今後の課題である。

URhGe は磁場によりスピン配向が変化した領域で超伝導に転移することから、相境界では超伝導ゆらぎが発達していることが期待される。今後の課題として、これを確認するために超伝導秩序変数の相関関数 [42] を調べる必要がある。また、本研究では  $h \sim 0.16$  程度の低磁場までしか計算できていないが、ゼロ磁場での相図を確認し、本研究で決定した磁場中相図とどのようにつながるのかを確認しなければならない。さらに  $J = 0.3, 1.0, 1.5, 2.0$  の四点しか調べていないため、 $J$  の値による相変化については曖昧である。相境界を正確に特定するためには、より多くの  $J$  の値で  $\chi_{zz}(r)$  の振る舞いを確認する必要がある。

DMRG の精度についても課題が残っている。本研究では、DMRG における LLLR の状態数は  $m = 100$  で計算を行ったが、TLL 相での  $\chi_{zz}(r)$  の減衰のベキ  $\eta$  の磁場依存性については、DMRG の精度が足りないため、特に相境界での振る舞いが不明である。計算結果の精度向上のためには  $N$  サイトでの計算結果の  $m$  依存性を調べ、正確な値を  $1/m$  で外挿することにより決定する。これを様々な  $N$  の値で調べ、最後に  $N$  が大きい極限での値を  $1/N$  で外挿することにより決定しなければならない。

# 付 録 A Lanczos 法

Lanczos 法は 1950 年に Cornelius Lanczos によって開発された [34]。この方法は実対称行列の絶対値最大の固有値および、固有ベクトルを求める手法である。Lanczos 法では与えられた  $N \times N$  の実対称行列  $\hat{H}$  を  $n \times n$  の三重対角行列  $\hat{H}_{\text{Lan}}$  に変換するが、絶対値最大の固有値は三重対角行列の固有値に良い精度で一致する。 $N$  が数百万程度でも、 $n$  として 100 程度をとれば十分である。これにより大規模な実対称行列の基底状態を求めることができる。この節では [33] を参考に Lanczos 法のアルゴリズムの解説を行う。

1. 対象となる  $N \times N$  の実対称行列  $\hat{H}$  と  $N$  次元のベクトル  $|v_1\rangle$  を用意する。 $\hat{H}$  の基底状態を求めたい場合は、基底状態が絶対値最大となるように  $\hat{H}$  の対角成分から十分大きな値を引いておく必要がある。 $|v_1\rangle$  は規格化されていればなんでも良い。
2. 三重対角行列の対角成分  $a_1 = \langle v_1 | \hat{H} | v_1 \rangle$  を計算する。
3.  $N$  次元のベクトル  $|v_2\rangle$  を

$$|v_2\rangle = \frac{\hat{H} |v_1\rangle - a_1 |v_1\rangle}{\|\hat{H} |v_1\rangle - a_1 |v_1\rangle\|}, \quad (\text{A.1})$$

により計算する。この時、 $|v_2\rangle$  は規格化されており、 $\langle v_1 | v_2 \rangle = 0$  である。

4. 三重対角行列の対角成分  $a_2$  および非対角成分  $b_2$  を

$$a_2 = \langle v_2 | \hat{H} | v_2 \rangle, \quad (\text{A.2})$$

$$b_2 = \langle v_2 | \hat{H} | v_1 \rangle, \quad (\text{A.3})$$

により計算する。

5. 以下  $n \geq 3$  とする。 $N$  次元のベクトル  $|v_n\rangle$  を

$$|v_n\rangle = \frac{\hat{H} |v_{n-1}\rangle - a_{n-1} |v_{n-1}\rangle - b_{n-1} |v_{n-2}\rangle}{\|\hat{H} |v_{n-1}\rangle - a_{n-1} |v_{n-1}\rangle - b_{n-1} |v_{n-2}\rangle\|}, \quad (\text{A.4})$$

により計算する。この時、 $|v_n\rangle$  は規格化されており、 $\langle v_{n-1} | v_n \rangle = \langle v_{n-2} | v_n \rangle = 0$  である。

6. 三重対角行列の対角成分  $a_n$  および非対角成分  $b_n$  を

$$a_n = \langle v_n | \hat{H} | v_n \rangle, \quad (\text{A.5})$$

$$b_n = \langle v_n | \hat{H} | v_{n-1} \rangle, \quad (\text{A.6})$$

により計算する。

7.  $n \times n$  三重対角行列  $\hat{H}_{\text{Lan}}^n$  を作る：

$$\hat{H}_{\text{Lan}}^n = \begin{pmatrix} a_1 & b_2 & & & O \\ b_2 & a_2 & b_3 & & \\ & b_3 & a_3 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & b_n \\ O & & & b_n & a_n \end{pmatrix}. \quad (\text{A.7})$$

8.  $\hat{H}_{\text{Lan}}^n$  を対角化して基底状態の固有値  $E_n$  および固有ベクトル  $|E_n\rangle$  を得る。

9.  $n \geq 4$  の時、固有値の誤差  $\delta_{\text{Lan}}$  が収束の精度 error を満たしているか確認する：

$$\delta_{\text{Lan}} = E_n - E_{n-1} < \text{error}, \quad (\text{A.8})$$

ならば、ステップ 10 へ。 $n = 3$  または、 $\delta_{\text{Lan}} = E_n - E_{n-1} \geq \text{error}$  ならステップ 5 へ戻る。通常  $\text{error} = 10^{-14}$  としても  $n = 100$  回程度で収束する。

10.  $\hat{H}$  の基底状態の近似固有値  $E_{\text{GS}}$  を  $E_n$  とし、近似固有ベクトル  $|E_{\text{GS}}\rangle$  を、

$$|E_{\text{GS}}\rangle = \sum_{i=1}^n c_i |v_i\rangle, \quad (\text{A.9})$$

により計算する。ただし、 $c_i$  は  $|E_n\rangle$  の成分であり、

$$|E_n\rangle = {}^t(c_1, c_2, \dots, c_n), \quad (\text{A.10})$$

である。計算機のメモリに余裕が無い場合は  $|v_i\rangle$  を全て保存することができないので、再びステップ 1 から 8 を  $n$  回繰り返して  $|v_i\rangle$  を逐次足していけば良い。ただし  $|v_1\rangle$  だけは保存しておく必要がある。

以上のステップにより、 $\hat{H}$  の基底状態の近似固有値  $E_{\text{GS}}$  および、近似固有ベクトル  $|E_{\text{GS}}\rangle$  を計算する。

## 付 録 B 逆反復法

逆反復法は  $N \times N$  行列  $\hat{H}$  の基底状態の近似固有ベクトル  $|E_{\text{GS}}\rangle^{\text{App}}$  の精度を改善するために  
行われる。 $|E_{\text{GS}}\rangle^{\text{App}}$  を  $\hat{H}$  の固有ベクトル  $|E\rangle_{\text{GS}}, |E_2\rangle, \dots, |E_N\rangle$  で次のように展開する：

$$|E_{\text{GS}}\rangle^{\text{App}} = E_{\text{GS}} |E_{\text{GS}}\rangle + \sum_{i=2}^N E_i |E_i\rangle. \quad (\text{B.1})$$

$E_{\text{GS}}, E_2, \dots, E_N$  は  $\hat{H}$  の真の固有値とする。 $|E_{\text{GS}}\rangle^{\text{App}}$  の精度が悪い場合、 $E_i$  が有限の値を持ってしまふ。そこで  $\hat{H}$  の近似固有値を  $E_{\text{GS}}^{\text{App}}$  として、式 (B.1) の両辺に  $\hat{H} - E_{\text{GS}}^{\text{App}}$  の逆行列  $(\hat{H} - E_{\text{GS}}^{\text{App}})^{-1}$  をかけると、

$$\frac{1}{\hat{H} - E_{\text{GS}}^{\text{App}}} |E_{\text{GS}}\rangle^{\text{App}} = \frac{E_{\text{GS}}}{E_{\text{GS}} - E_{\text{GS}}^{\text{App}}} |E_{\text{GS}}\rangle + \sum_{i=2}^N \frac{E_i}{E_i - E_{\text{GS}}^{\text{App}}} |E_i\rangle, \quad (\text{B.2})$$

となる。 $E_{\text{GS}}^{\text{App}}$  の精度が十分よければ、全ての  $i = 2, 3, \dots, N$  に対して、

$$\frac{E_{\text{GS}}}{E_{\text{GS}} - E_{\text{GS}}^{\text{App}}} \gg \frac{E_i}{E_i - E_{\text{GS}}^{\text{App}}}, \quad (\text{B.3})$$

が成り立ち、式 (B.2) の右辺は  $|E_{\text{GS}}\rangle^{\text{App}}$  より精度が改善されたものになっている。これを何度も繰り返して  $|E_{\text{GS}}\rangle^{\text{App}}$  の精度を改善する方法が逆反復法である。実際の計算は逆行列を求める代わりに、式 (B.2) と同値な連立方程式

$$(\hat{H} - E_{\text{GS}}^{\text{App}}) |E_{\text{GS}}\rangle_2^{\text{App}} = |E_{\text{GS}}\rangle^{\text{App}}, \quad (\text{B.4})$$

を解くことで、 $|E_{\text{GS}}\rangle_2^{\text{App}}$  を求める。本研究ではこの連立方程式を共役勾配法で求めるが、その際、係数行列  $\hat{H} - E_{\text{GS}}^{\text{App}}$  が正定値である必要がある。そこで、 $\Delta$  を正の数として、式 (B.4) の代わりに、

$$(\hat{H} - E_{\text{GS}}^{\text{App}} + \Delta) |E_{\text{GS}}\rangle_2^{\text{App}} = |E_{\text{GS}}\rangle^{\text{App}}, \quad (\text{B.5})$$

によって  $|E_{\text{GS}}\rangle_2^{\text{App}}$  を求めることにする。この方法でも  $|E_{\text{GS}}\rangle_2^{\text{App}}$  の精度は改善される。一般に  $\Delta$  を小さくすると逆反復法の収束は早くなるが、その分共役勾配法の収束が遅くなり、式 (B.5) を解くのにかかる時間が長くなる。  $\Delta$  はこれらの兼ね合いで決まるが、本研究では  $\Delta = 0.1$  とした。

最後に逆反復法の手順をまとめる。

1.  $n \geq 2$  として、 $|E_{\text{GS}}\rangle_1^{\text{App}}$  を改善したい近似固有ベクトルとする。連立方程式

$$(\hat{H} - E_{\text{GS}}^{\text{App}} + \Delta) |E_{\text{GS}}\rangle_n^{\text{App}} = |E_{\text{GS}}\rangle_{n-1}^{\text{App}}, \quad (\text{B.6})$$

を解いて  $|E_{\text{GS}}\rangle_n^{\text{App}}$  を得る。

2. 固有ベクトルの誤差  $\delta_{\text{Inv}}$  が収束の精度  $\text{error}$  を満たしているか確認する：

$$\delta_{\text{Inv}} = \| |E_{\text{GS}}\rangle_n^{\text{App}} - |E_{\text{GS}}\rangle_{n-1}^{\text{App}} \| < \text{error}, \quad (\text{B.7})$$

ならば、 $|E_{\text{GS}}\rangle_n^{\text{App}}$  を  $\hat{H}$  の基底状態の固有ベクトルとして、逆反復法を終了する。 $\delta_{\text{Inv}} \geq \text{error}$  ならば、ステップ 1 に戻る。

## 付 録 C 共役勾配法

共役勾配法は 1952 年に Hestenes と Stiefel により開発された [35]。これは連立方程式

$$\hat{A}|x\rangle = |b\rangle, \quad (\text{C.1})$$

の解  $|x\rangle$  を求めるための反復的手法であり、 $|x\rangle$  の近似列  $|x_1\rangle, |x_2\rangle, \dots, |x_n\rangle$  を生成する。反復回数  $n$  は係数行列  $\hat{A}$  に依存する。この節では [36] を参考に共役勾配法の説明を行う。

1. 初期ベクトル  $|x_1\rangle$  を決める。

2.  $|r_1\rangle, |p_1\rangle$  を次式で計算する：

$$|r_1\rangle = |b\rangle - \hat{A}|x_1\rangle, \quad (\text{C.2})$$

$$|p_1\rangle = |b\rangle - \hat{A}|x_1\rangle. \quad (\text{C.3})$$

3.  $\alpha_1$  を次式により求める：

$$\alpha_1 = \frac{\langle r_1 | r_1 \rangle}{\langle p_1 | \hat{A} | p_1 \rangle}. \quad (\text{C.4})$$

4. 以下  $n \geq 2$  とする。  $|x_n\rangle$  を次式により求める：

$$|x_n\rangle = |x_{n-1}\rangle + \alpha_{n-1} |p_{n-1}\rangle. \quad (\text{C.5})$$

5. 近似列の誤差  $\delta_{\text{CG}}$  が収束の精度 error を満たしているか確認する：

$$\delta_{\text{CG}} = \| |x_n\rangle - |x_{n-1}\rangle \| < \text{error}, \quad (\text{C.6})$$

ならば、 $|x_n\rangle$  を式 (C.1) の解として共役勾配法を終了する。 $\delta_{\text{CG}} \geq \text{error}$  ならば、ステップ 6 へ進む。

6.  $|r_n\rangle$  を次式により計算する：

$$|r_n\rangle = |r_{n-1}\rangle - \alpha_{n-1} \hat{A} |p_{n-1}\rangle. \quad (\text{C.7})$$

7.  $\beta_n$  を次式により求める：

$$\beta_n = \frac{\langle r_n | r_n \rangle}{\langle r_{n-1} | r_{n-1} \rangle}. \quad (\text{C.8})$$

8.  $|p_n\rangle$  を次式により求める：

$$|p_n\rangle = |r_n\rangle + \beta_n |p_{n-1}\rangle. \quad (\text{C.9})$$

9.  $\alpha_n$  を次式により計算し、ステップ 4 へ戻る。

$$\alpha_n = \frac{\langle r_n | r_n \rangle}{\langle p_{n-1} | \hat{A} | p_{n-1} \rangle}. \quad (\text{C.10})$$



## 付 録D $n_c \neq 1/2$ の結果

### D.1 $n_c = 3/4$

#### D.1.1 $h - J$ 相図

$n_c = 1/2$  と比べて、低磁場側の秩序相が広がっている。 $n_c = 1$  でも同様の傾向が見られ、伝導電子のフィリングを大きくすると秩序しやすい傾向にある。また、ここでの秩序相は波数  $k \approx 2.39$  の反強磁性的秩序であり、これは  $2k_f = \pi n_c = 3\pi/4 \approx 2.36$  の値と極めて近い。さらに、 $n_c = 3/4$  の場合、 $J = 1.0, 1.5, 2.0$  で電荷密度波が見られた。これについては D.1.5 節で議論する。

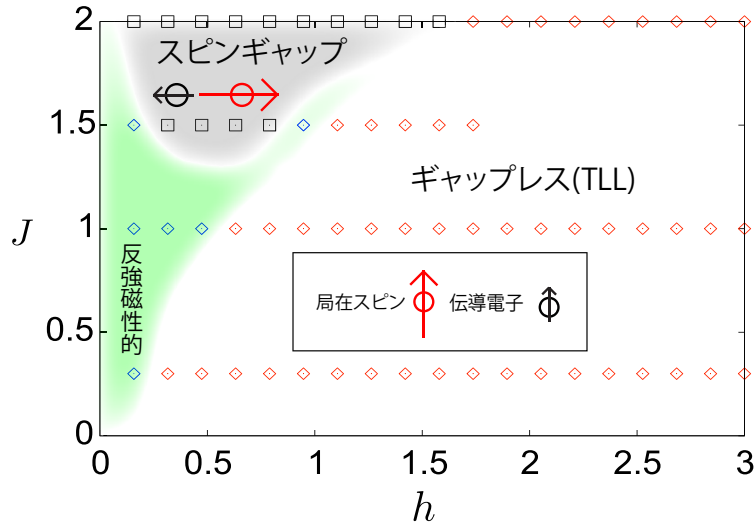
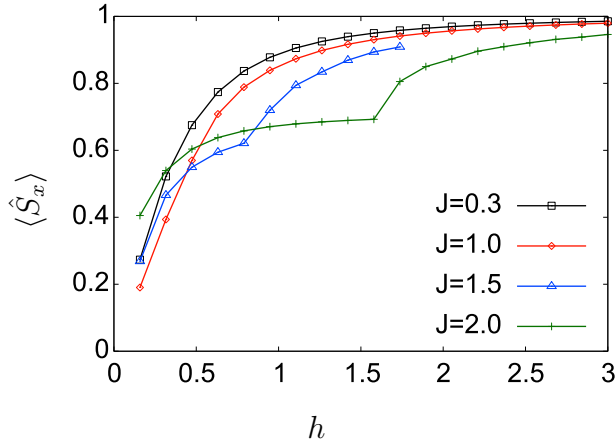
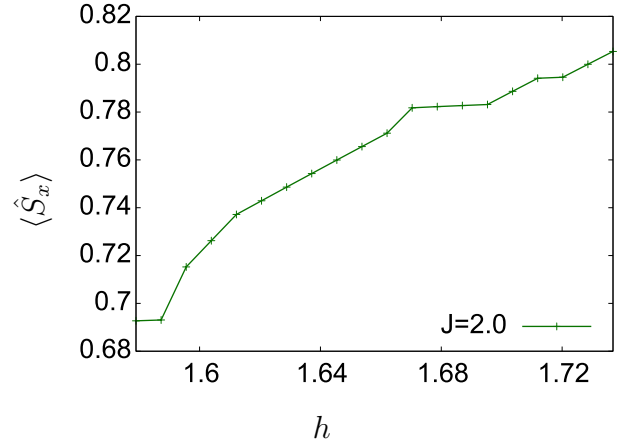


図 D.1: 128 サイト、 $n_c = 3/4$  の場合の相図。□で表された点ではスピン相関関数  $\chi_{zz}(r)$  が指数減衰している。◇では  $\chi_{zz}(r)$  がべき減衰し、△では  $\chi_{zz}(r)$  の値が遠方でも有限に残っている。

## D.1.2 磁化

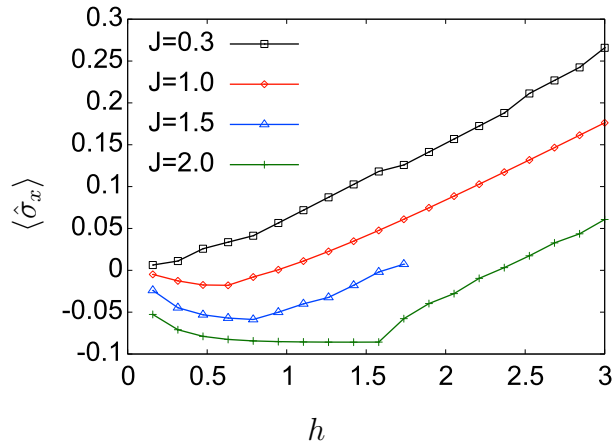


(a)  $J = 0.3(\square), 1.0(\diamond), 2.0(\triangle), 1.5(+)$ 。

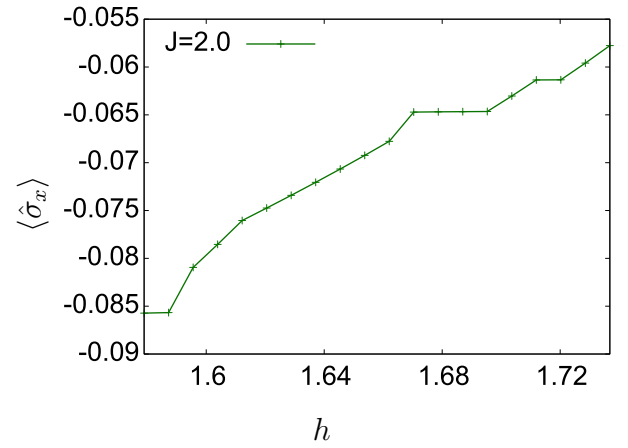


(b)  $J = 2.0, h = 2.0$  付近の拡大図。

図 D.2:  $\langle \hat{S}_x \rangle$  の磁場依存性。

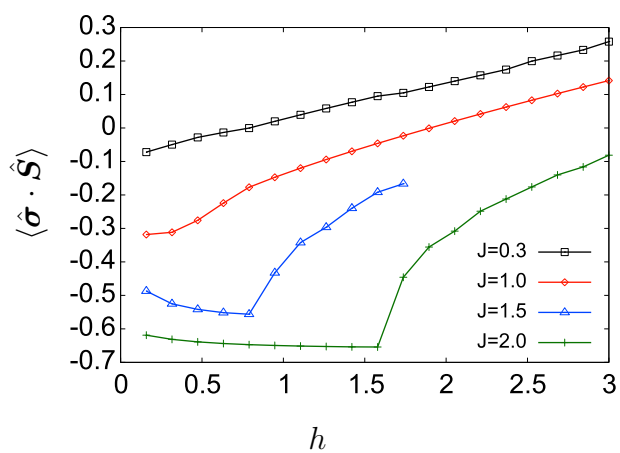


(a)  $J = 0.3(\square), 1.0(\diamond), 2.0(\triangle), 1.5(+)$ 。

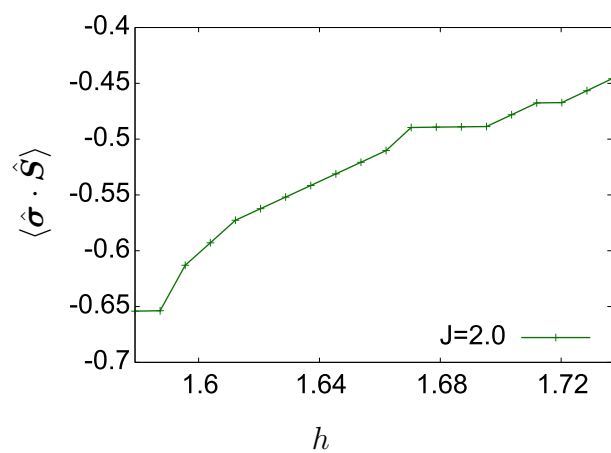


(b)  $J = 2.0, h = 2.0$  付近の拡大図。

図 D.3:  $\langle \hat{\sigma}_x \rangle$  の磁場依存性。



(a)  $J = 0.3(\square), 1.0(\diamond), 2.0(\triangle), 1.5(+)$ 。



(b)  $J = 2.0$ 、 $h = 2.0$  付近の拡大図。

図 D.4:  $\langle \hat{\sigma} \cdot \hat{S} \rangle$  の磁場依存性。

### D.1.3 スピン分布

$J = 0.3$  のとき

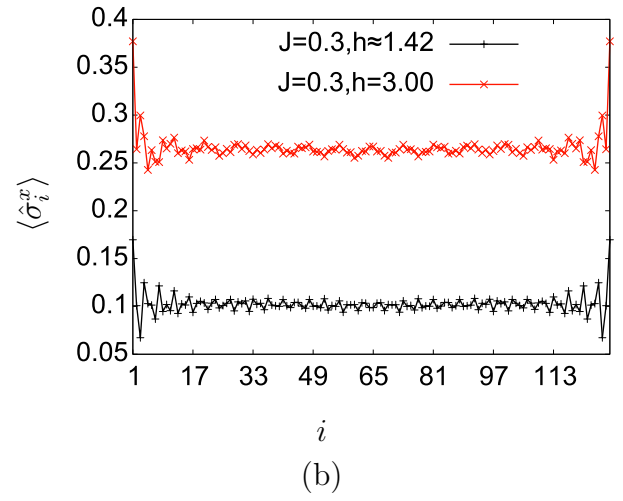
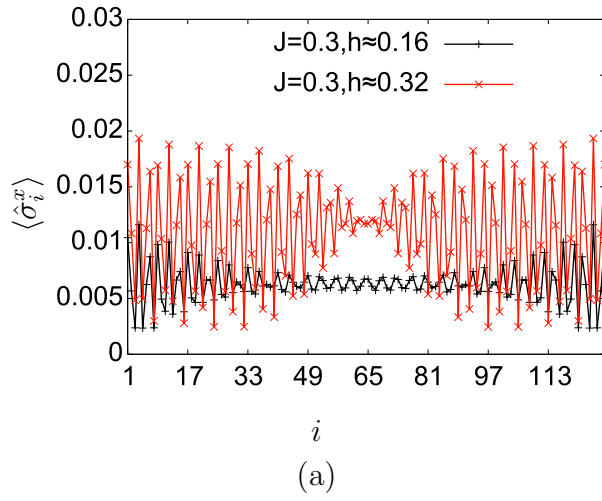


図 D.5:  $\langle \hat{\sigma}_i^x \rangle$  のサイト  $i$  依存性。

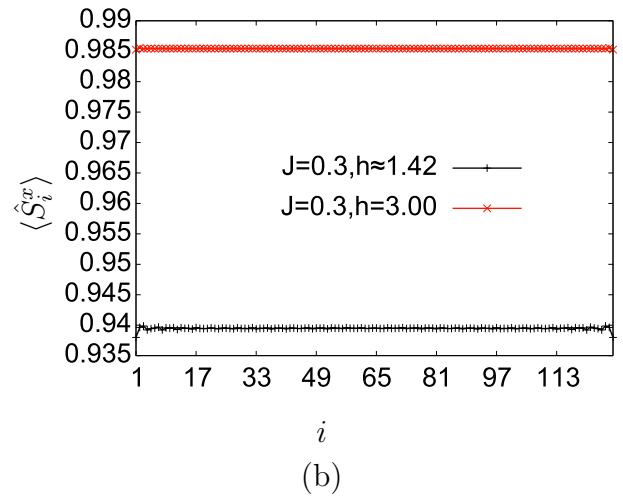
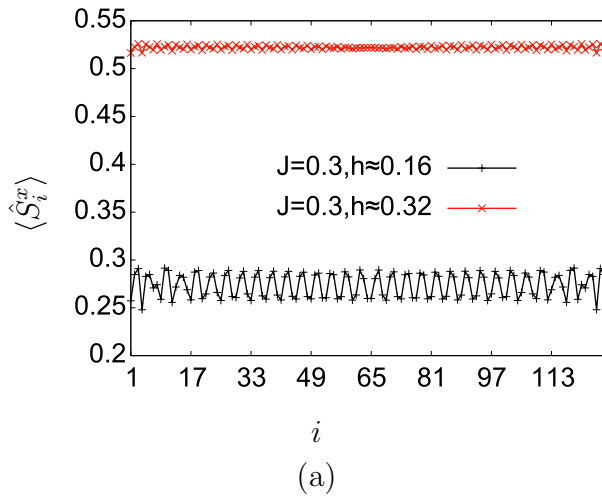


図 D.6:  $\langle \hat{S}_i^x \rangle$  のサイト  $i$  依存性。

図 D.7、D.8、D.9 にそれぞれ TLL 相における  $\langle \hat{\sigma}_i^x \rangle$  のスペクトル分布、 $\langle \hat{\sigma}_i^x \rangle$  の  $k_p$  の磁場  $h$  依存性、 $\langle \hat{S}_i^x \rangle$  のスペクトル分布を示す。 $h \approx 1.74$  の時だけピークが二つになっているのが確認できる。付録 E で議論するが  $J = 0$  の場合  $h \approx 1.4$  近傍では二つのフェルミ波数が  $k_{f1} = k_{f2} = \pi$  となる。今の場合、 $J = 0.3$  と僅かに  $J$  が入った結果  $h \approx 1.74$  付近で  $k_{f1} = k_{f2} = \pi$  となり、したがって本来なら  $k = \pi$  でピークが見られるはずだが、4.3 節で議論したようにブロック LLLRRLRR の作り方から、 $k = \pi$  の振動は起こり得ないので、ピークが二つになったと考えられる。

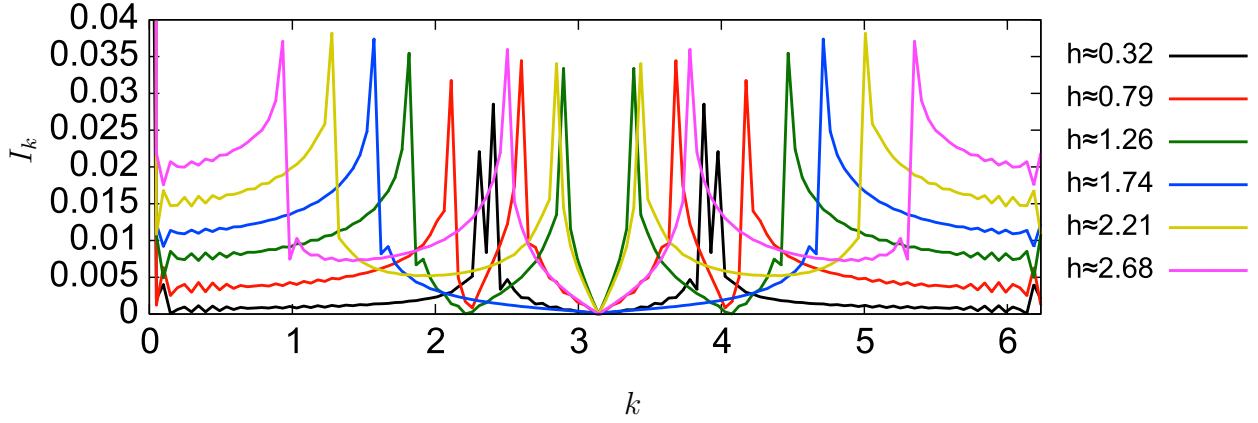


図 D.7: TLL 相における  $\langle \hat{\sigma}_i^x \rangle$  のスペクトル分布。

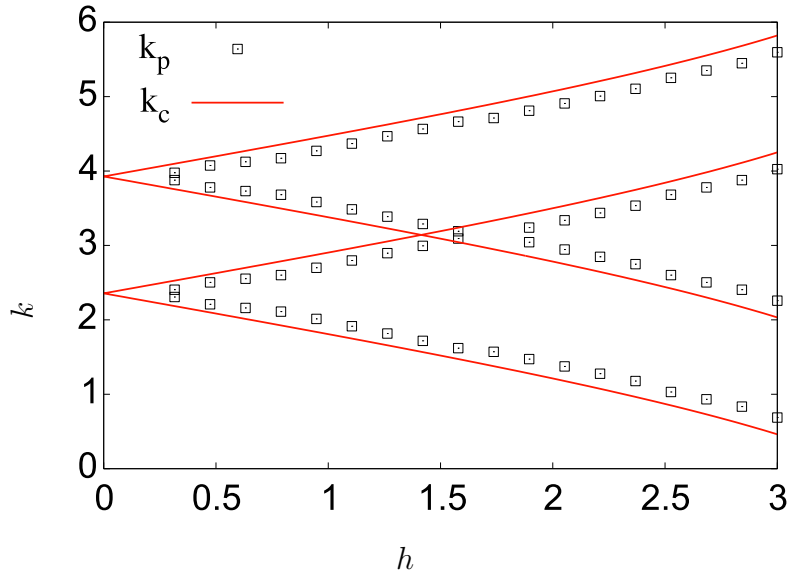


図 D.8: TLL 相における  $\langle \hat{\sigma}_i^x \rangle$  の  $k_p$  の磁場  $h$  依存性。赤線は  $J = 0$  の時の伝導電子の  $k_c = 2k_{f1}, 2k_{f2}, 2\pi - 2k_{f1}, 2\pi - 2k_{f2}$  の磁場  $h$  依存性である。

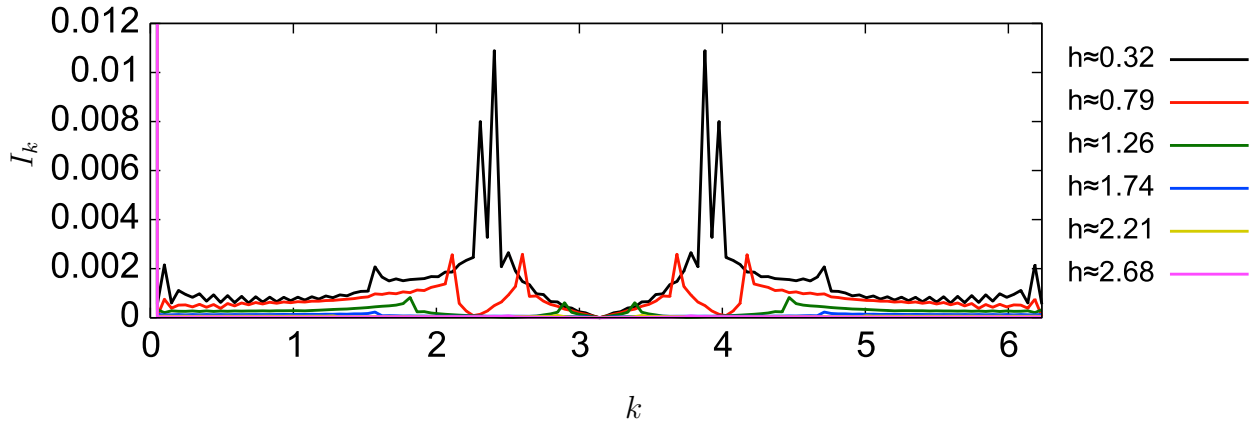


図 D.9: TLL 相における  $\langle \hat{S}_i^x \rangle$  のスペクトル分布。

$J = 1.0$  のとき

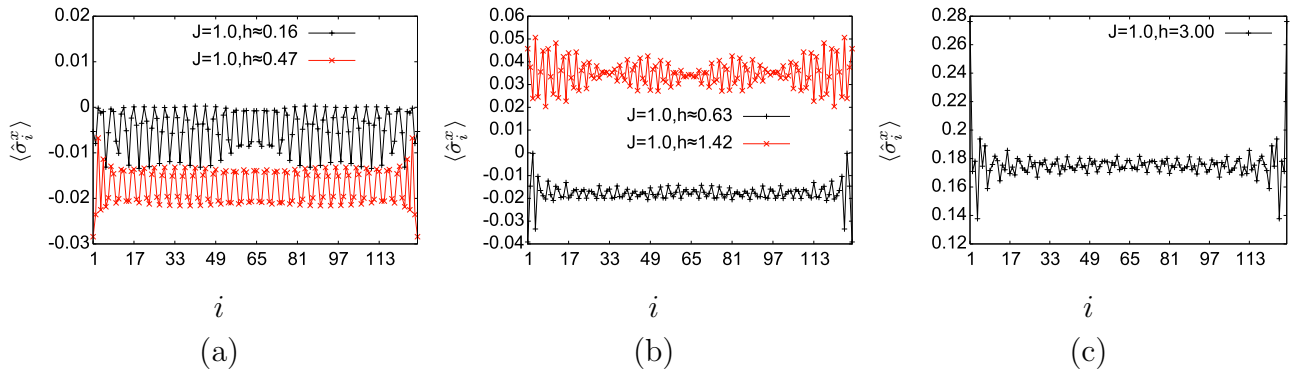


図 D.10:  $\langle \hat{\sigma}_i^x \rangle$  のサイト  $i$  依存性。

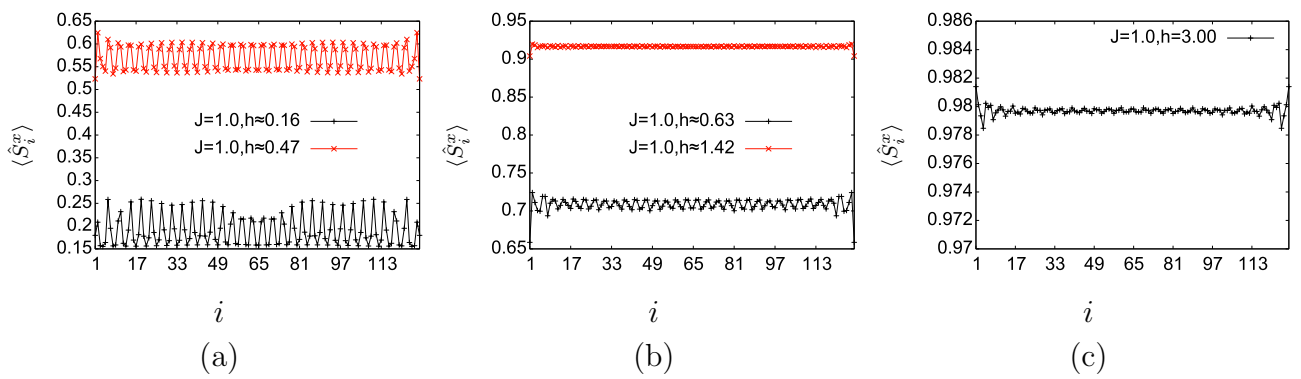


図 D.11:  $\langle \hat{S}_i^x \rangle$  のサイト  $i$  依存性。

$J = 2.0$  のとき

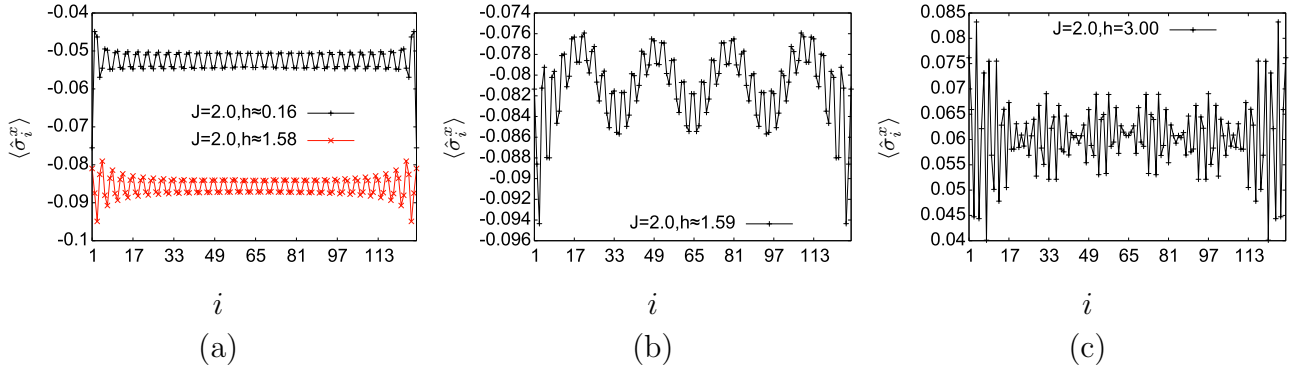


図 D.12:  $\langle \hat{\sigma}_i^x \rangle$  のサイト  $i$  依存性。

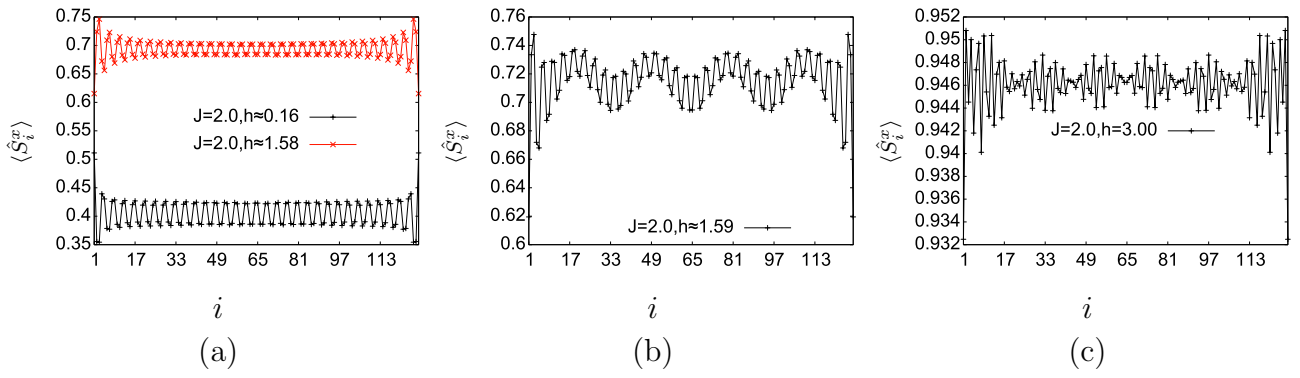


図 D.13:  $\langle \hat{S}_i^x \rangle$  のサイト  $i$  依存性。

## D.1.4 スピン相関

$J = 0.3$  のとき

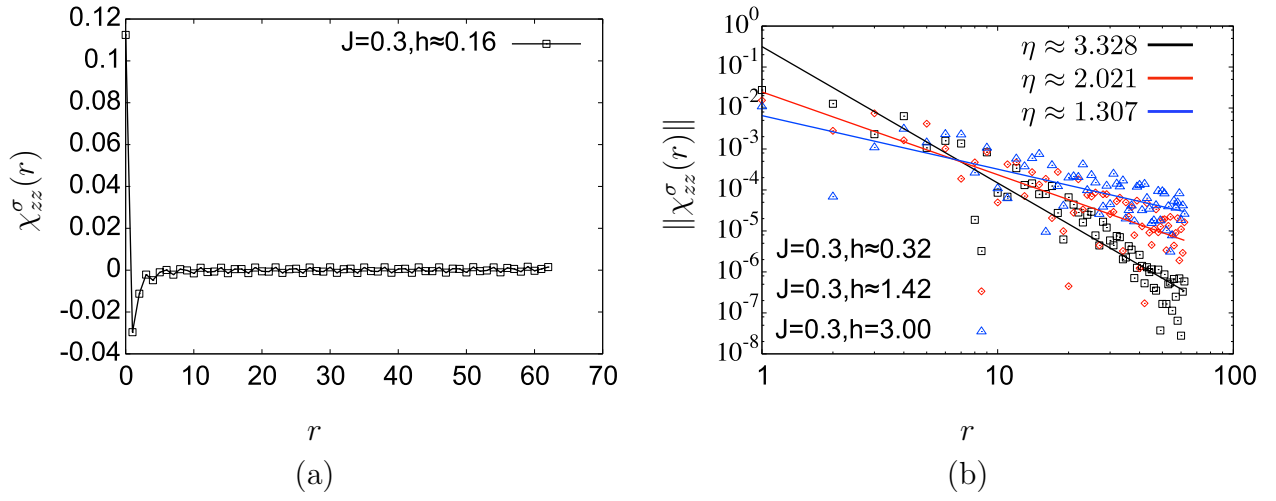


図 D.14:  $\chi_{zz}^{\sigma}(r)$  の距離  $r$  依存性。

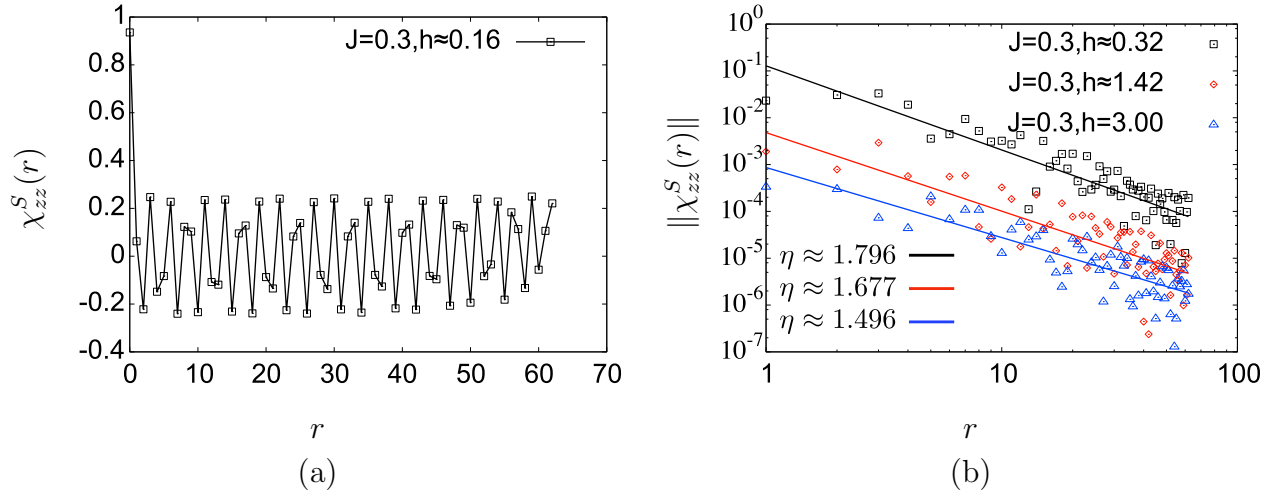
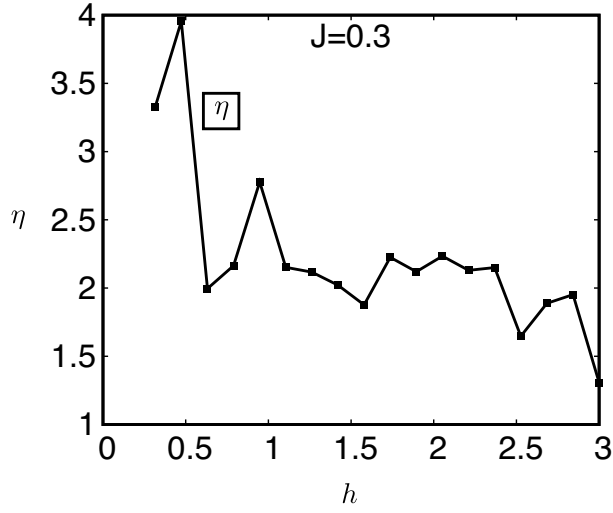
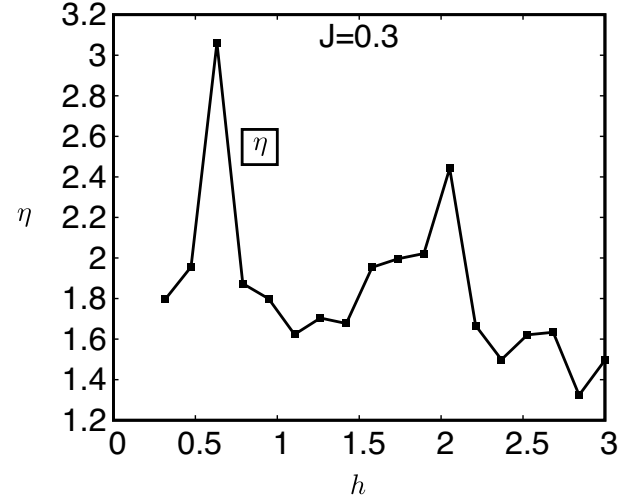


図 D.15:  $\chi_{zz}^S(r)$  の距離  $r$  依存性。





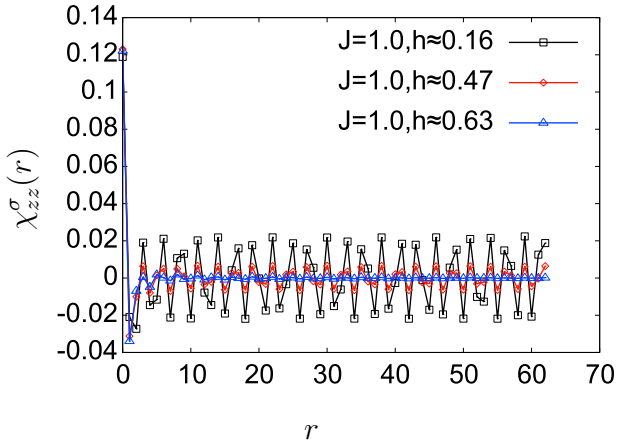
(a)



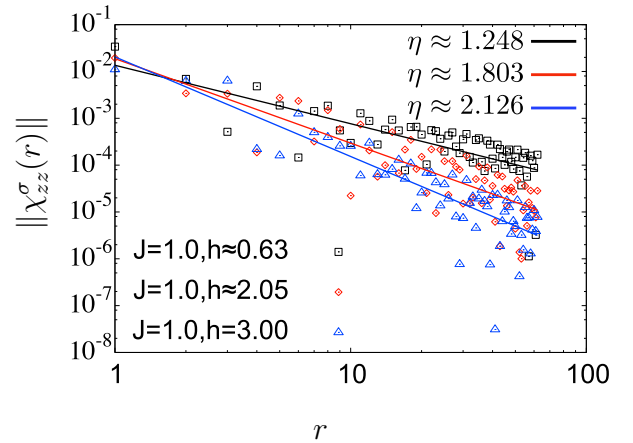
(b)

図 D.16: 減衰のベキ  $\eta$  の磁場  $h$  依存性。(a) 伝導電子のスピンの相関関数  $\chi_{zz}^\sigma(r)$  のベキ。(b) 局在スピンの相関関数  $\chi_{zz}^S(r)$  のベキ。

$J = 1.0$  のとき



(a)



(b)

図 D.17:  $\chi_{zz}^\sigma(r)$  の距離  $r$  依存性。

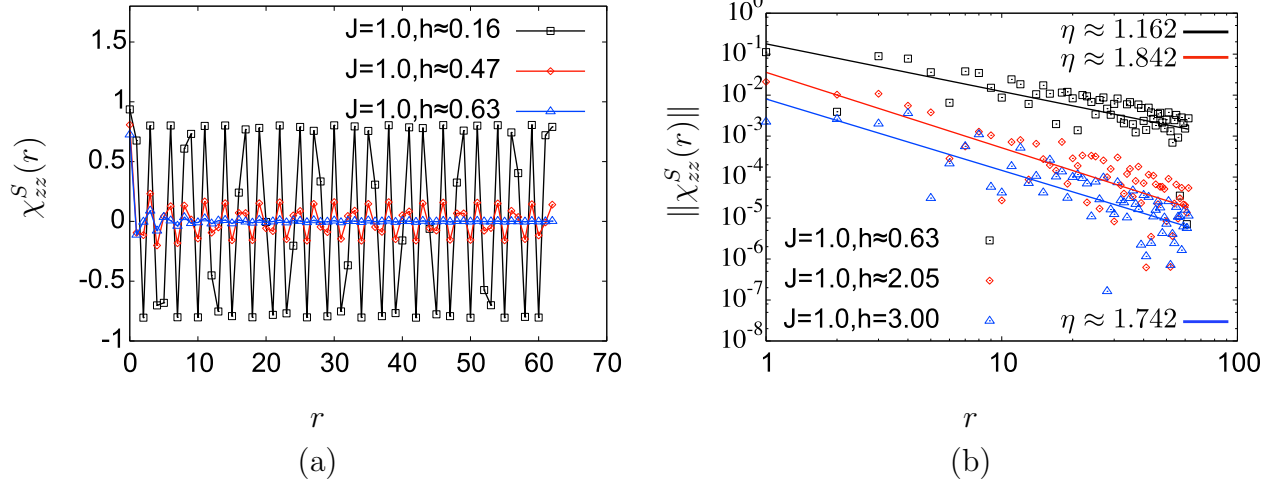


図 D.18:  $\chi_{zz}^S(r)$  の距離  $r$  依存性

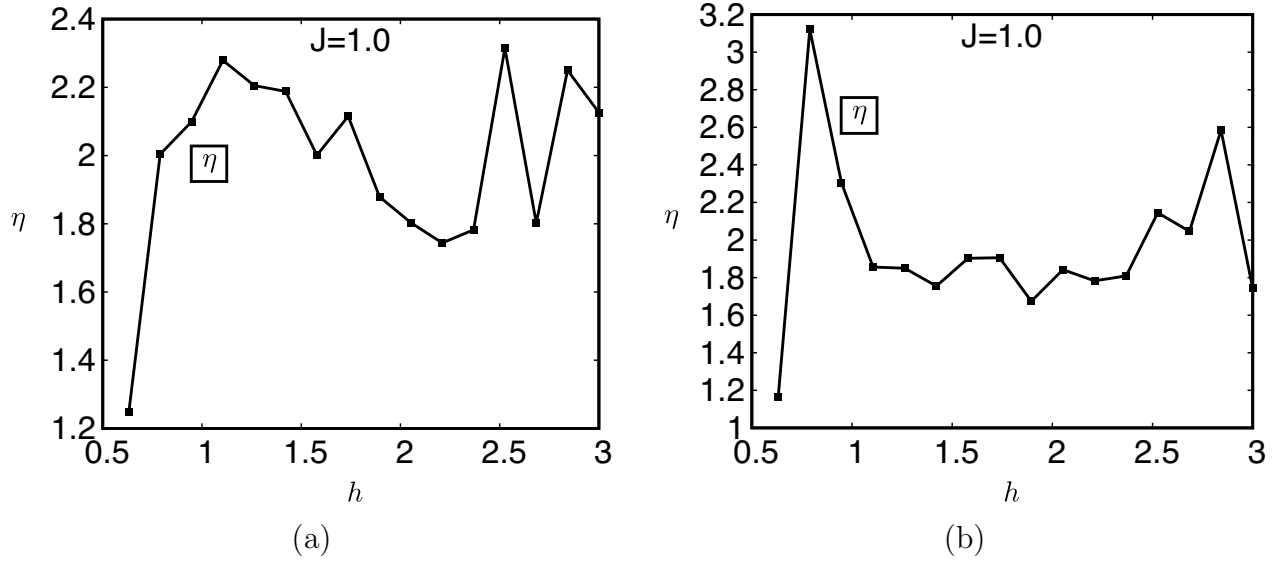


図 D.19: 減衰のベキ  $\eta$  の磁場  $h$  依存性。(a) 伝導電子のスピンの相関関数  $\chi_{zz}^S(r)$  のベキ。(b) 局在スピンの相関関数  $\chi_{zz}^S(r)$  のベキ。

$J = 2.0$  のとき

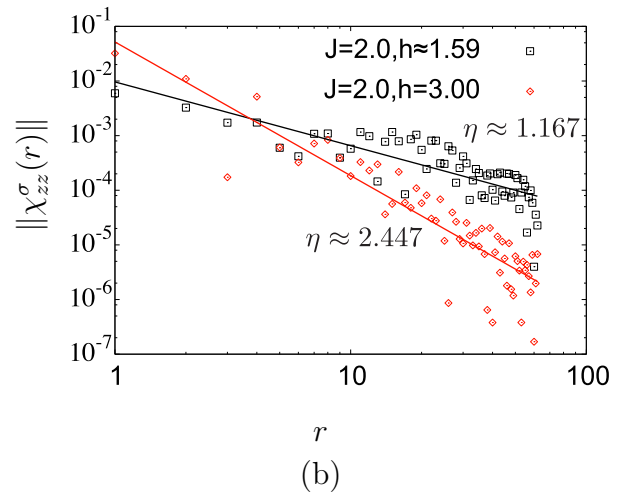
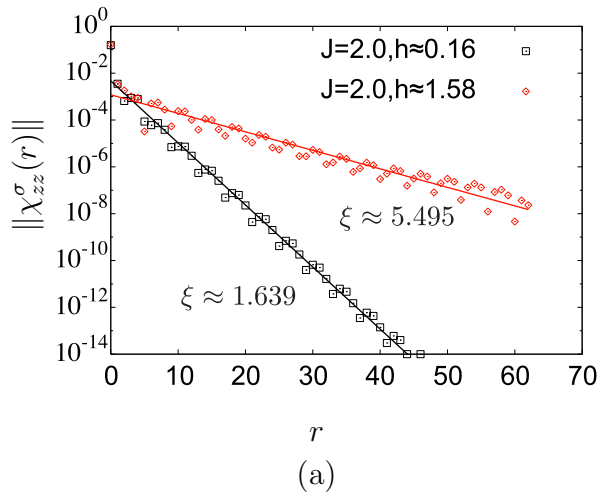


図 D.20:  $\chi_{zz}^{\sigma}(r)$  の距離  $r$  依存性

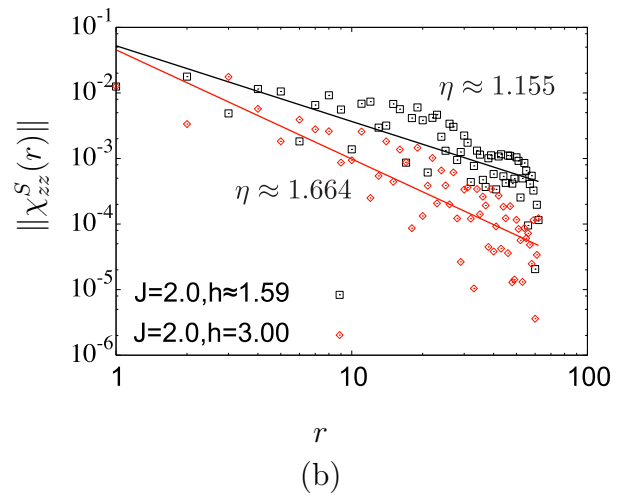
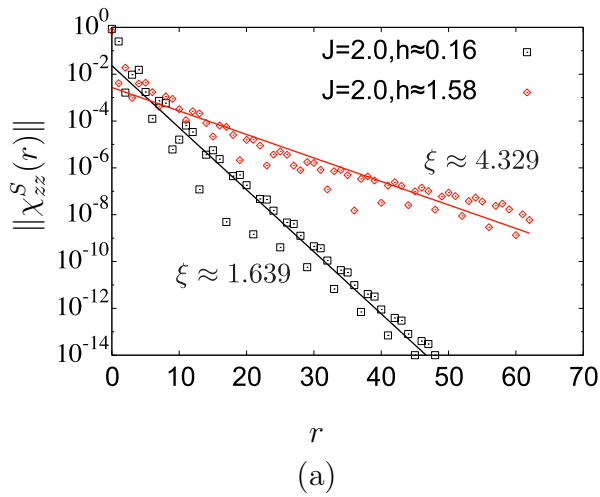


図 D.21:  $\chi_{zz}^S(r)$  の距離  $r$  依存性

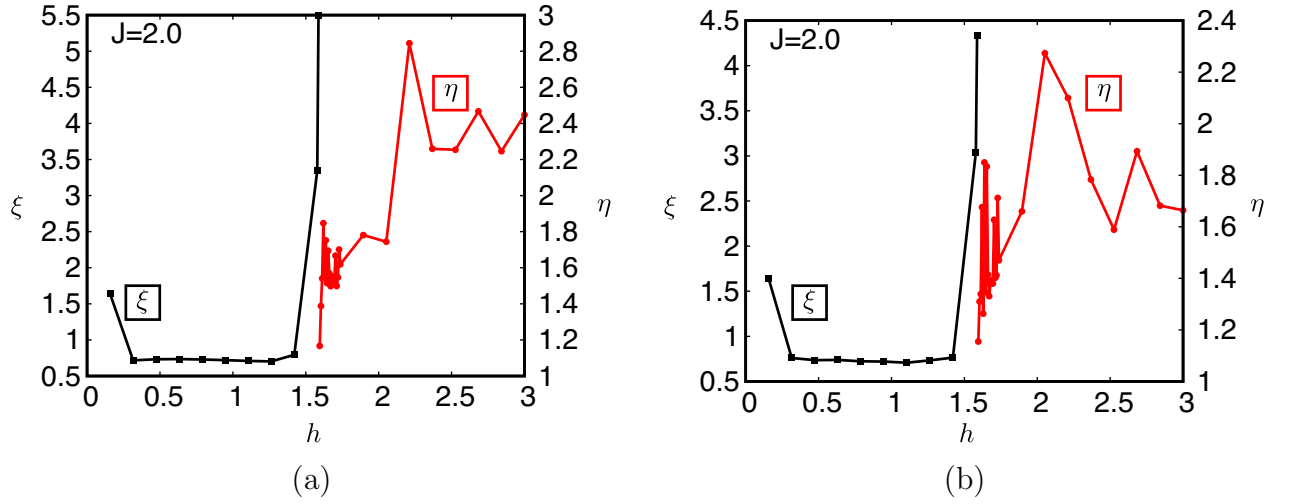


図 D.22: 減衰のベキ  $\eta$  および相関長  $\xi$  の磁場  $h$  依存性。(a) 伝導電子のスピンの相関関数  $\chi_{zz}^{\sigma}(r)$  のベキおよび相関長。(b) 局在スピンの相関関数  $\chi_{zz}^S(r)$  のベキおよび相関長。

上に示した、反強磁性的秩序相における  $\chi_{zz}^{\sigma}(r)$  および  $\chi_{zz}^S(r)$  のスペクトル分布をそれぞれ図 D.23、図 D.24 に示す。 $J$  が大きく  $h$  が小さい方が秩序しやすいことが分かる。ピークの波数は  $k \approx 2.39$  であり、反強磁性的な秩序状態となっている。

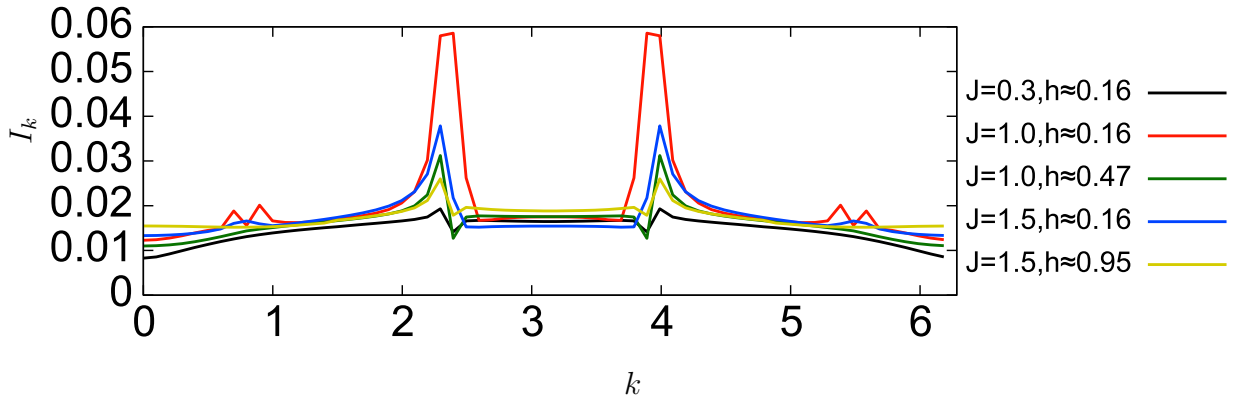


図 D.23: 反強磁性的秩序相における  $\chi_{zz}^{\sigma}(r)$  のスペクトル分布。

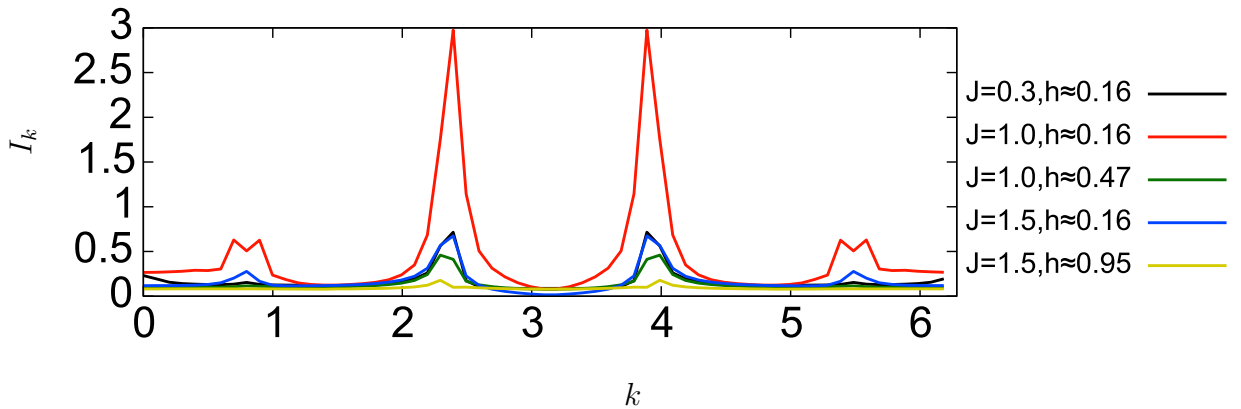


図 D.24: 反強磁性的秩序相における  $\chi_{zz}^S(r)$  のスペクトル分布。

### D.1.5 電荷密度波

$n_c = 3/4$  の場合、 $J = 1.0, 1.5, 2.0$  において、秩序相およびスピンギャップ相で電荷密度波が発現することが分かった。図 D.25(a)、図 D.26(a)、図 D.27(a) にそれぞれ  $J = 1.0, 1.5, 2.0$  の場合の伝導電子の相関関数  $\chi^n(r)$  の距離  $r$  依存性を示す。2 サイトおきの振動が確認できる。また、図 D.25(b)、図 D.26(b)、図 D.27(b) にスペクトル分布を示す。いずれの  $J > 1.0$  においても、波数  $k \approx 1.6$  でスペクトルにピークが見られる。したがって、振動の波長は  $\lambda \approx 3.93$  である。また、 $J$  を大きくするか  $h$  を小さくするとピークが鋭くなり、電荷が秩序しやすい傾向がある。

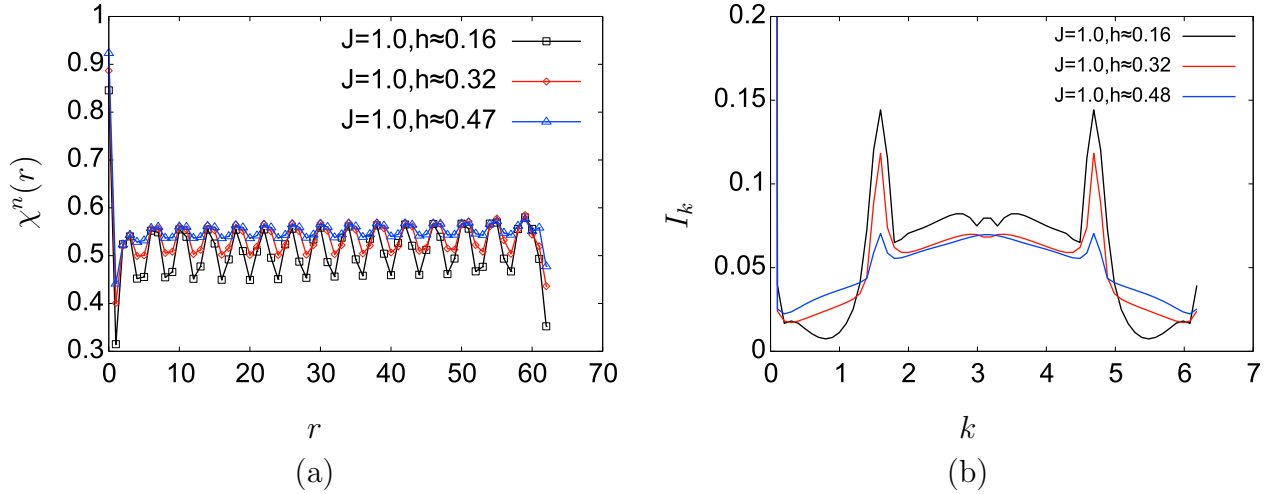


図 D.25: (a)  $\chi_{zz}^S(r)$  の距離  $r$  依存性。 (b)  $\chi_{zz}^S(r)$  のスペクトル分布。

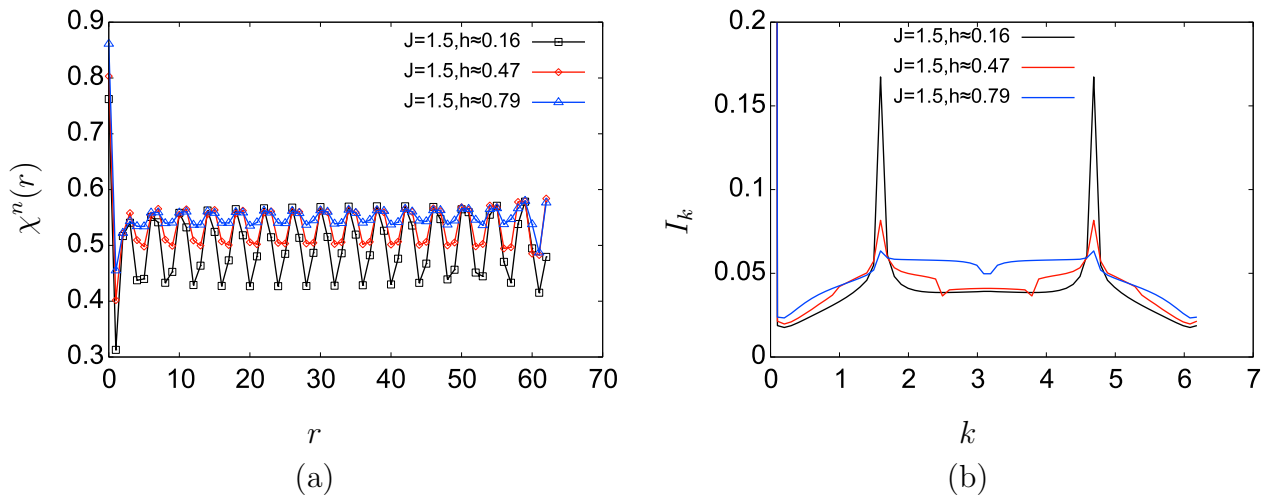
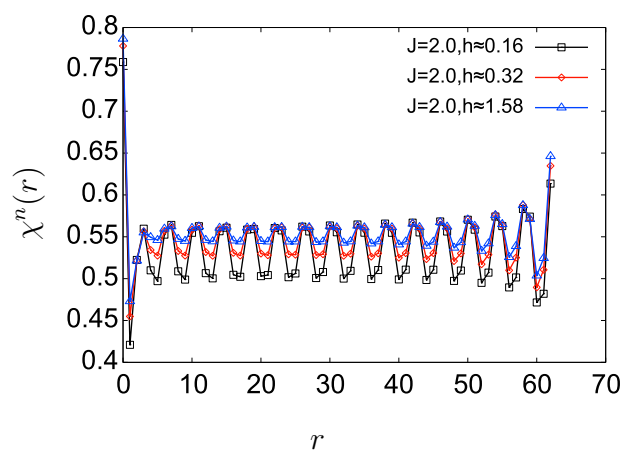
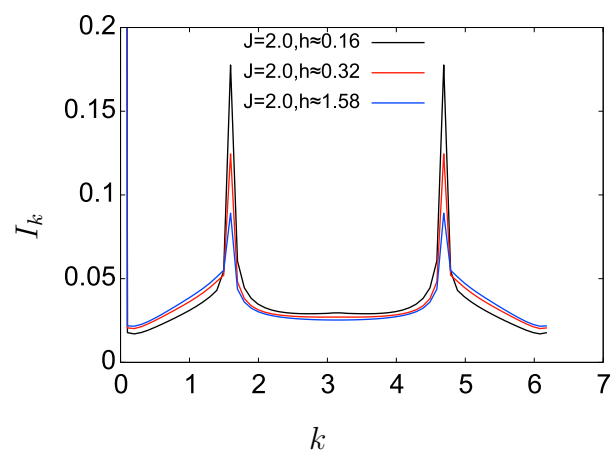


図 D.26: (a)  $\chi_{zz}^S(r)$  の距離  $r$  依存性。 (b)  $\chi_{zz}^S(r)$  のスペクトル分布。



(a)



(b)

図 D.27: (a)  $\chi_{zz}^S(r)$  の距離  $r$  依存性。 (b)  $\chi_{zz}^S(r)$  のスペクトル分布。

## D.2 $n_c = 1$

### D.2.1 $h - J$ 相図

$n_c = 1$  の場合、反強磁性秩序相がより広範囲に渡っている。

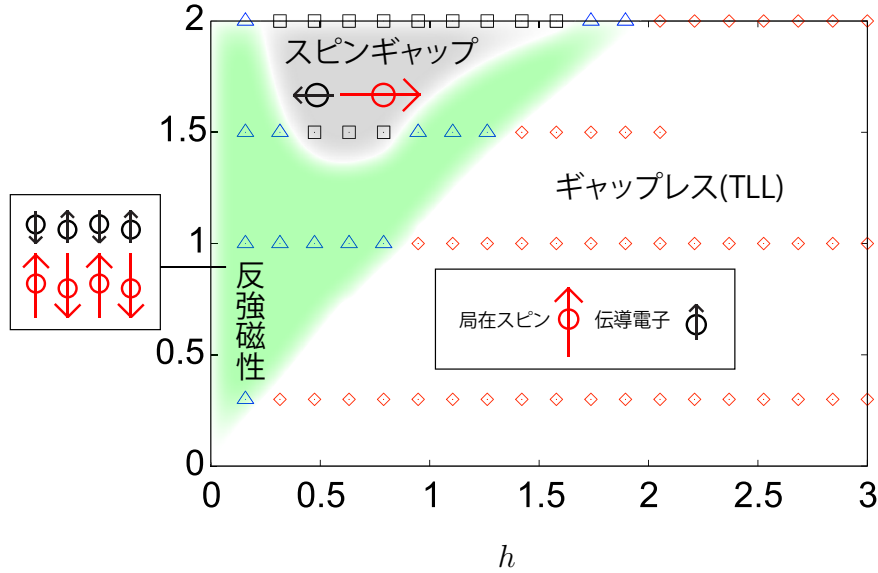
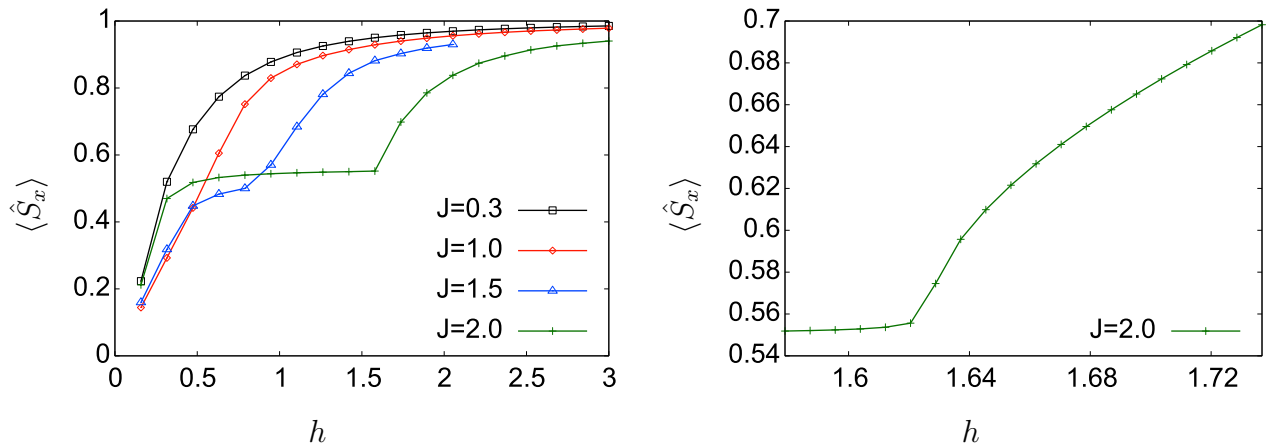


図 D.28: 128 サイト、 $n_c = 1$  の場合の相図。□で表された点ではスピン相関関数  $\chi_{zz}(r)$  が指数減衰している。◇では  $\chi_{zz}(r)$  がべき減衰し、△では  $\chi_{zz}(r)$  の値が遠方でも有限に残っている。

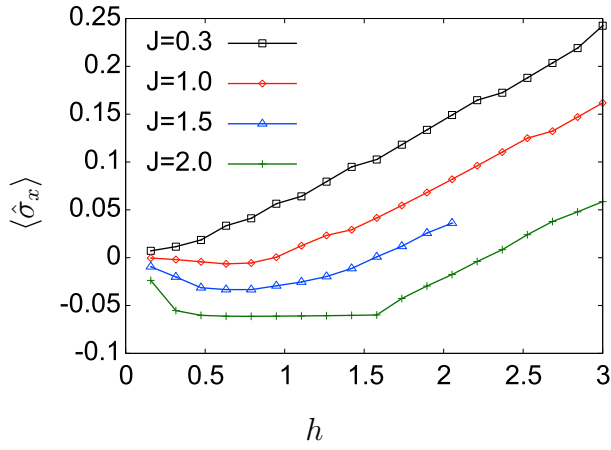
### D.2.2 磁化



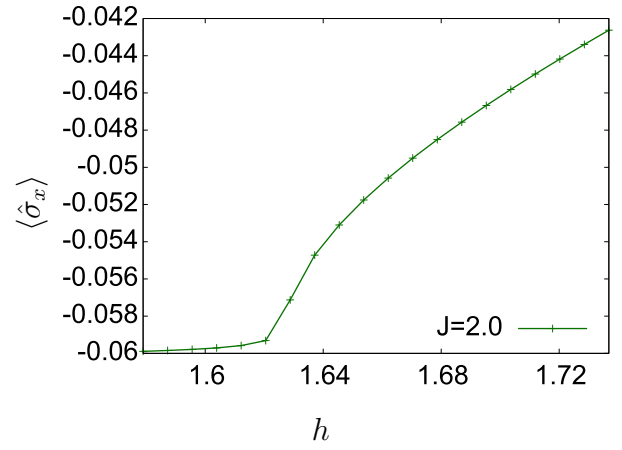
(a)  $J = 0.3(\square), 1.0(\diamond), 2.0(\triangle), 1.5(+)$ 。

(b)  $J = 2.0$ 、 $h = 2.0$  付近の拡大図。

図 D.29:  $\langle \hat{S}_x \rangle$  の磁場依存性

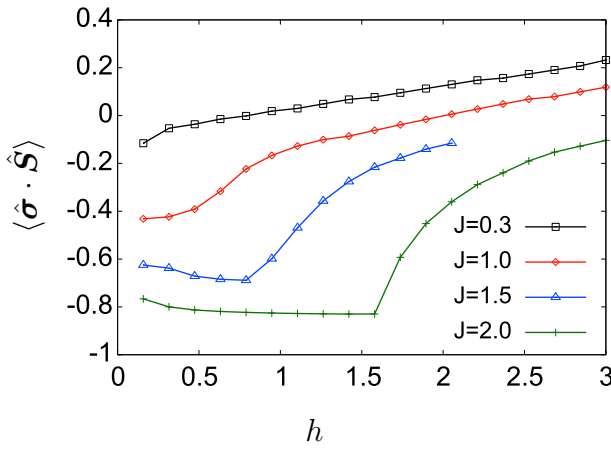


(a)  $J = 0.3(\square), 1.0(\diamond), 2.0(\triangle), 1.5(+)$ 。

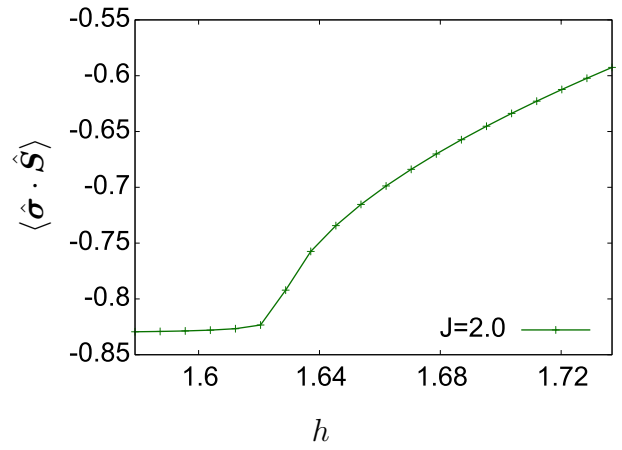


(b)  $J = 2.0$ 、 $h = 2.0$  付近の拡大図。

図 D.30:  $\langle \hat{\sigma}_x \rangle$  の磁場依存性



(a)  $J = 0.3(\square), 1.0(\diamond), 2.0(\triangle), 1.5(+)$ 。



(b)  $J = 2.0$ 、 $h = 2.0$  付近の拡大図。

図 D.31:  $\langle \hat{\sigma} \cdot \hat{S} \rangle$  の磁場依存性



### D.2.3 スピン分布

$J = 0.3$  のとき

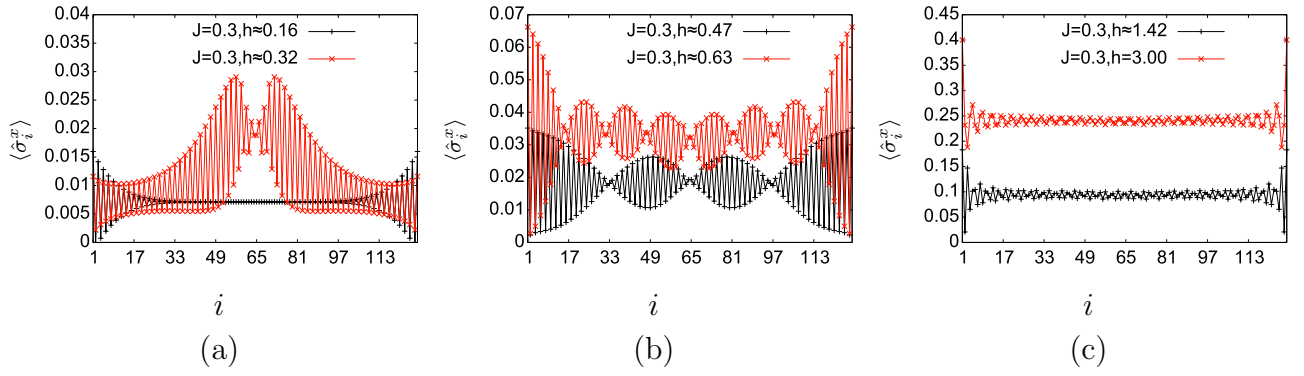


図 D.32:  $\langle \hat{\sigma}_i^x \rangle$  のサイト  $i$  依存性

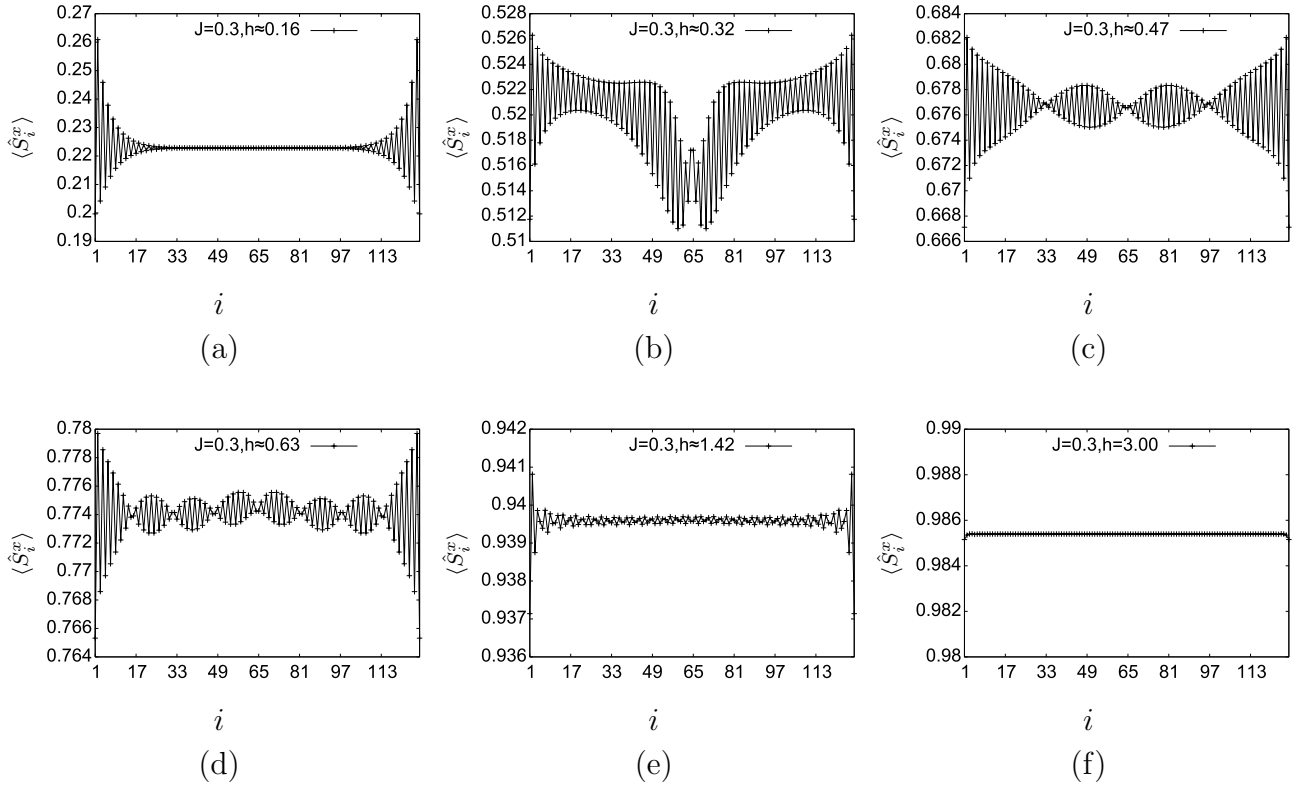


図 D.33:  $\langle \hat{\sigma}_i^y \rangle$  のサイト  $i$  依存性

図 D.34、D.35、D.36 にそれぞれ TLL 相における  $\langle \hat{\sigma}_i^x \rangle$  のスペクトル分布、 $\langle \hat{\sigma}_i^x \rangle$  の  $k_p$  の磁場  $h$  依存性、 $\langle \hat{S}_i^x \rangle$  のスペクトル分布を示す。他のフィリングと違い、二つのピークを持つことが特徴である。付録 E で議論するが、 $n_c = 1$  の場合、 $J = 0$  で伝導電子のフェルミ波数は  $k_{f1} = \arccos(h/4)$ ,  $k_{f2} = \arccos(-h/4)$  となる。この時、 $2\pi - 2k_{f1} = k_{f2}$ ,  $2\pi - 2k_{f2} = k_{f1}$  であり、 $k_c = 2k_{f1}, 2k_{f2}$  となって  $\langle \hat{\sigma}_i^x \rangle$  および  $\langle \hat{S}_i^x \rangle$  のピークが二つになったと考えられる。

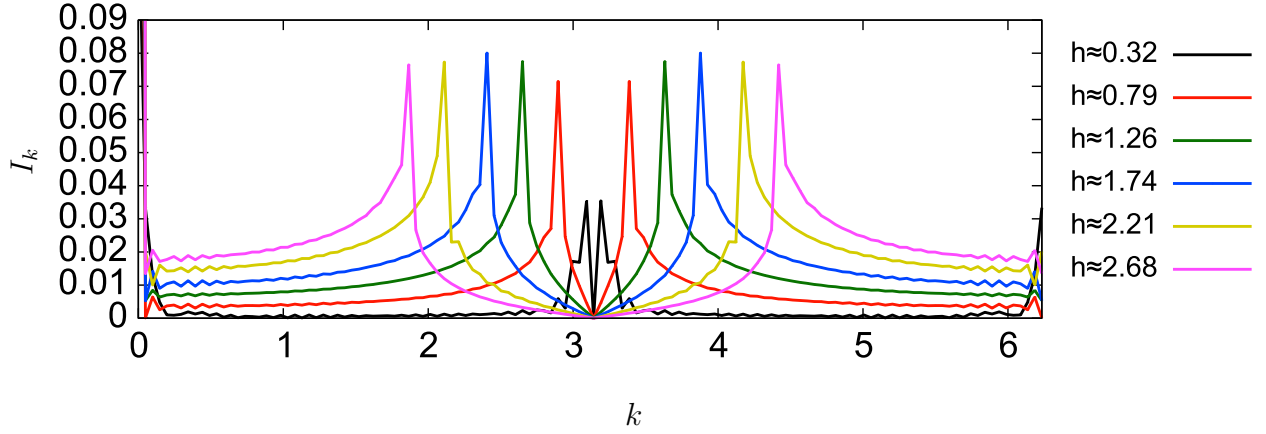


図 D.34: TLL 相における  $\langle \hat{\sigma}_i^x \rangle$  のスペクトル分布。

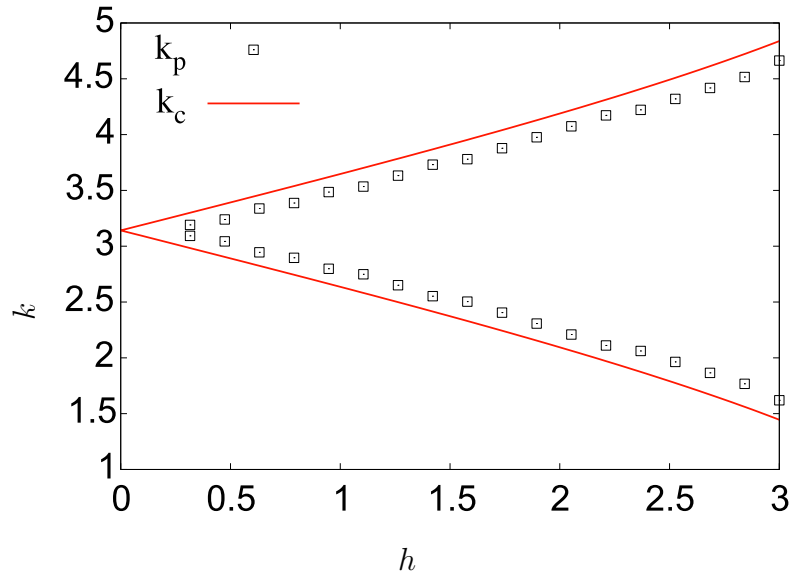


図 D.35: TLL 相における  $\langle \hat{\sigma}_i^x \rangle$  の  $k_p$  の磁場  $h$  依存性。赤線は  $J = 0$  の時の伝導電子の  $k_c = 2k_{f1}, 2k_{f2}$  の磁場  $h$  依存性である。

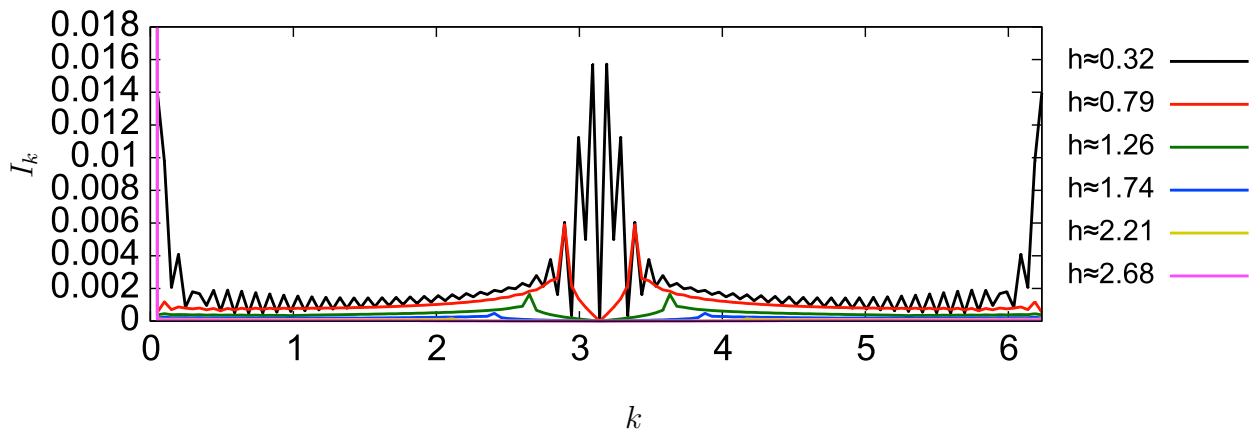


図 D.36: TLL 相における  $\langle \hat{S}_i^x \rangle$  のスペクトル分布。

$J = 1.0$  のとき

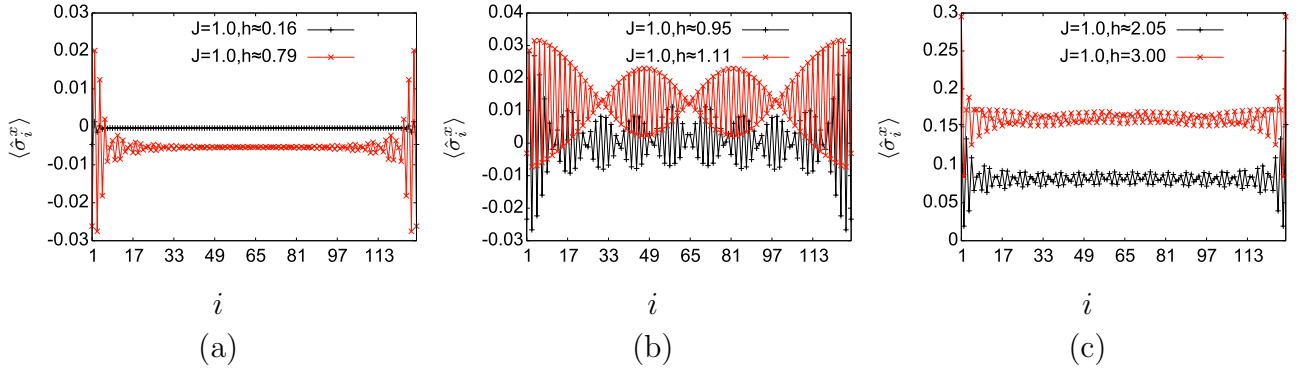


図 D.37:  $\langle \hat{\sigma}_i^x \rangle$  のサイト  $i$  依存性

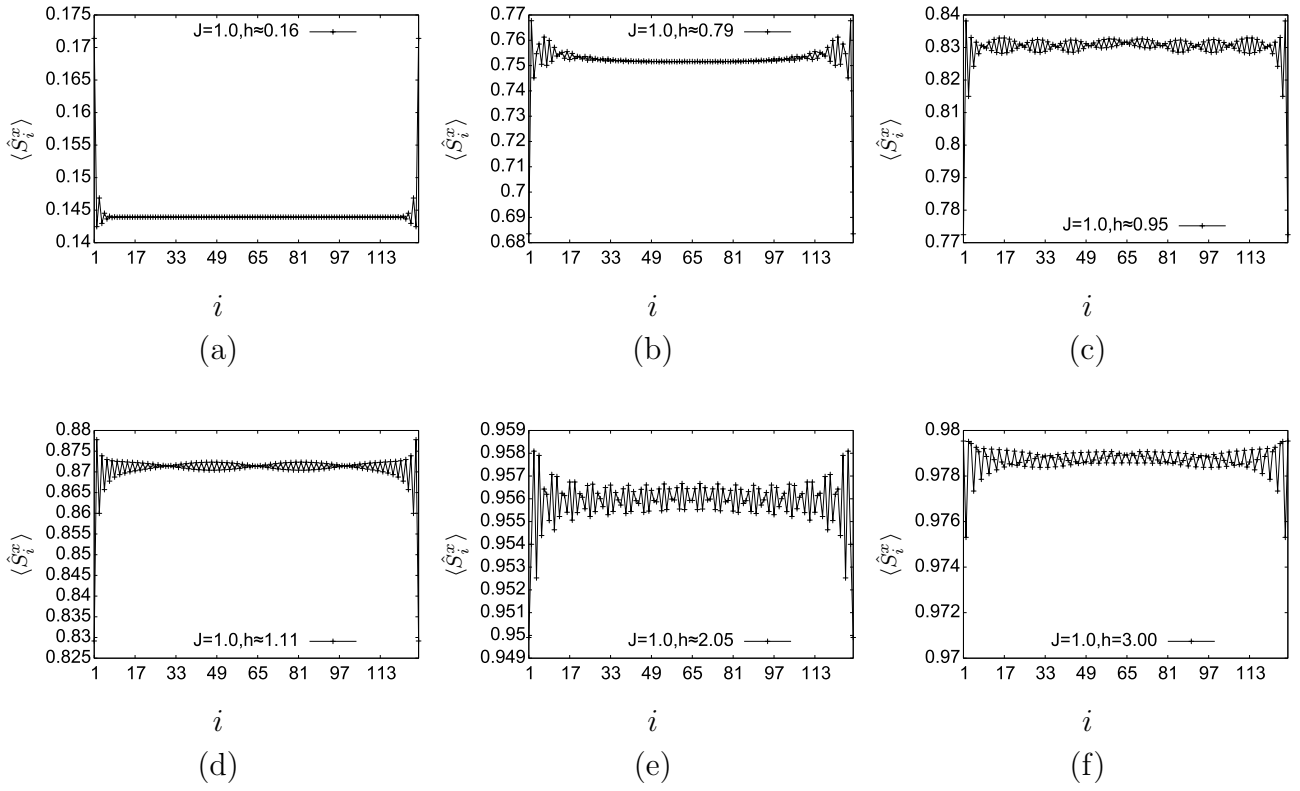


図 D.38:  $\langle \hat{S}_i^x \rangle$  のサイト  $i$  依存性

$J = 2.0$  のとき

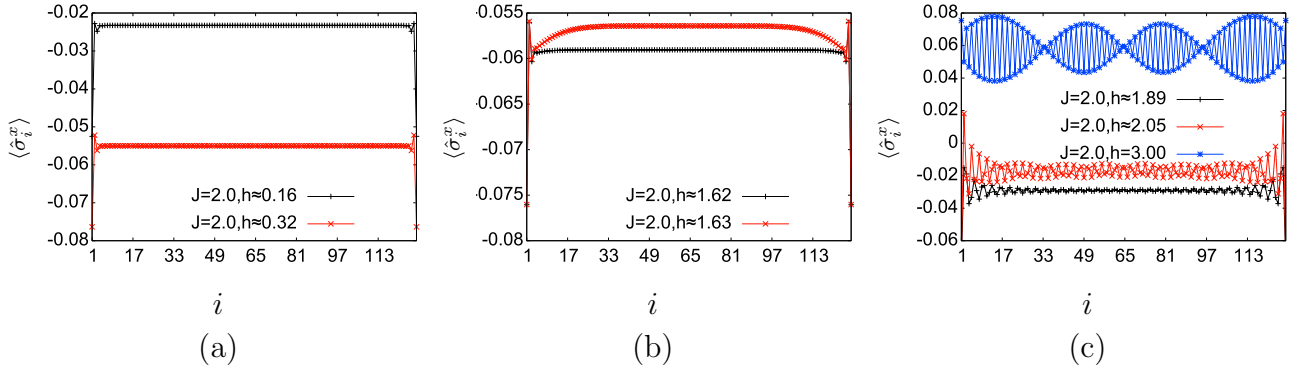


図 D.39:  $\langle \hat{\sigma}_i^x \rangle$  のサイト  $i$  依存性

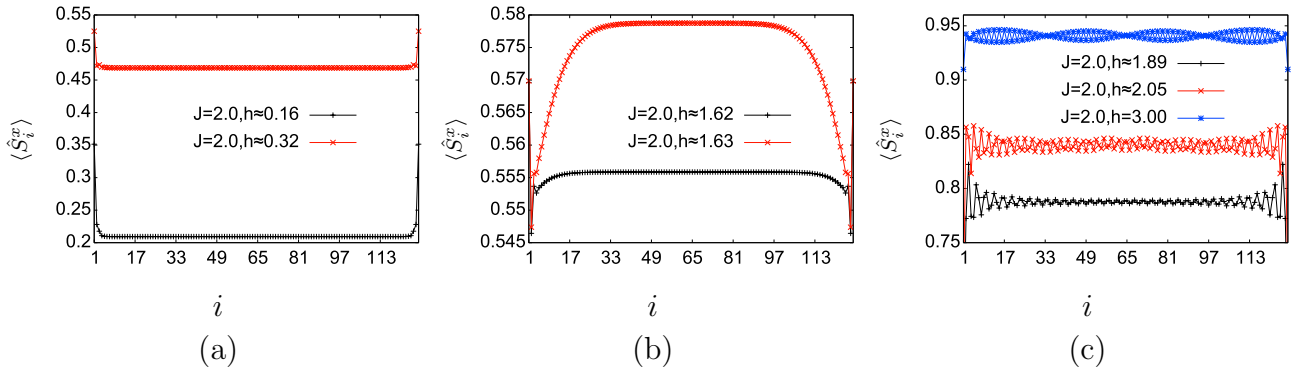


図 D.40:  $\langle \hat{S}_i^x \rangle$  のサイト  $i$  依存性

## D.2.4 スピン相関

$J = 0.3$  のとき

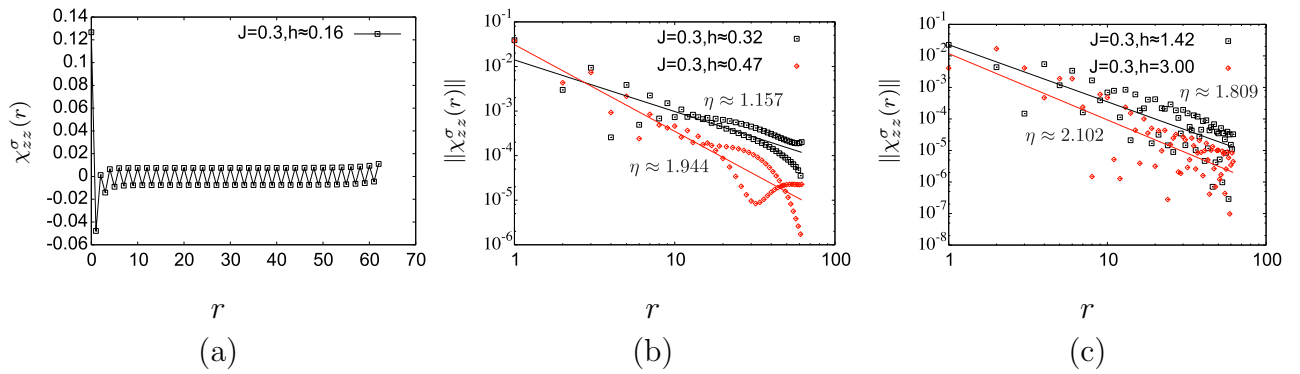


図 D.41:  $\chi_{zz}^\sigma(r)$  の距離  $r$  依存性。

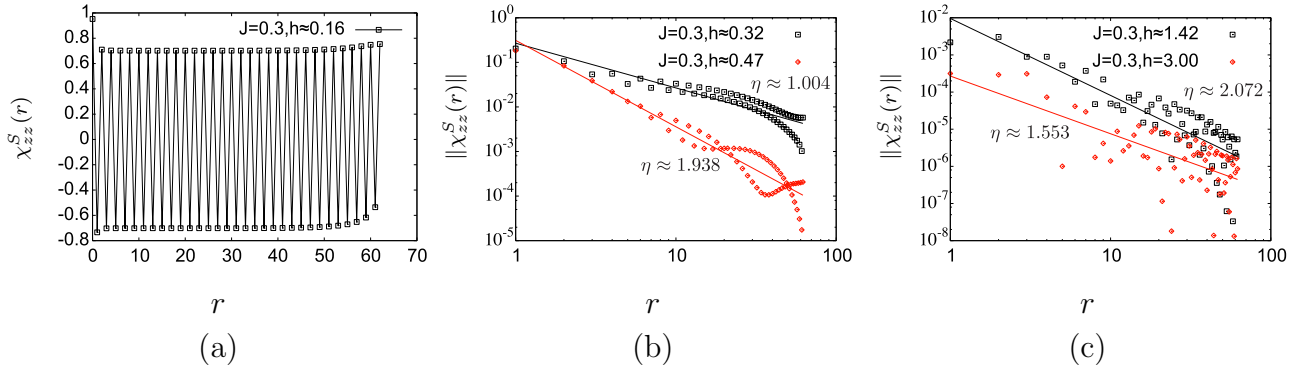


図 D.42:  $\chi_{zz}^S(r)$  の距離  $r$  依存性。

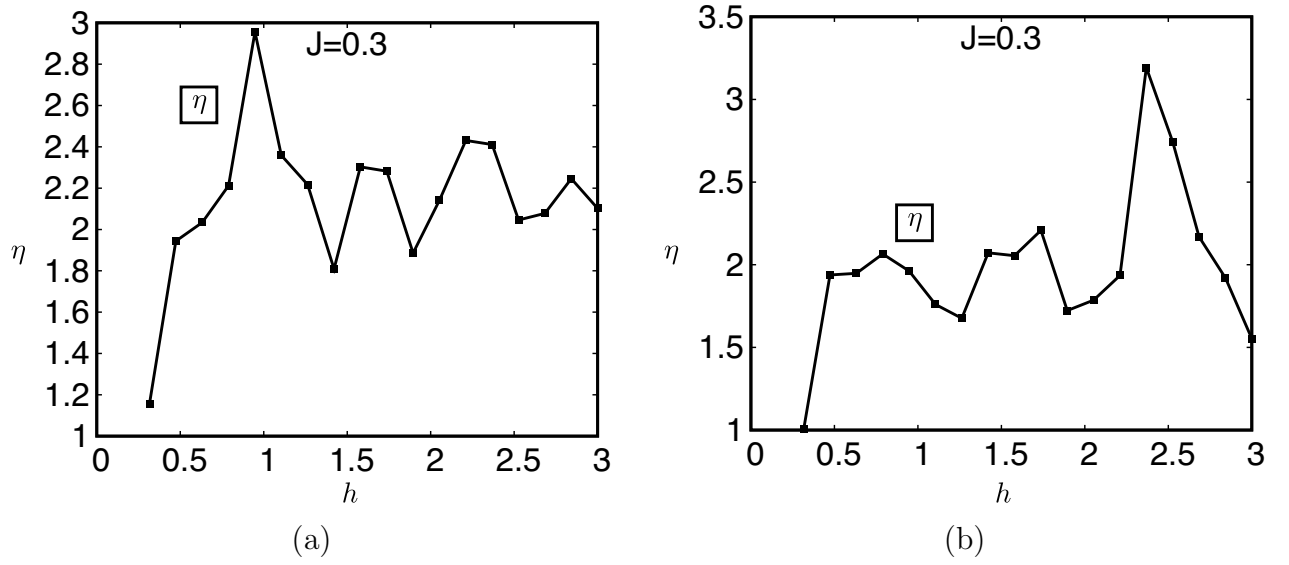


図 D.43: 減衰のベキ  $\eta$  の磁場  $h$  依存性。(a) 伝導電子のスピンの相関関数  $\chi_{zz}^\sigma(r)$  のベキ。(b) 局在スピンの相関関数  $\chi_{zz}^S(r)$  のベキ。

$J = 1.0$  のとき

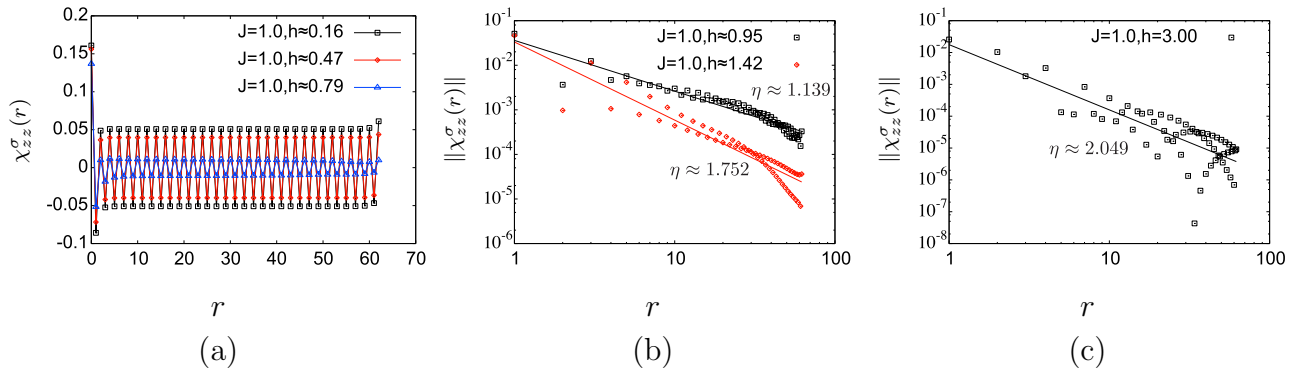


図 D.44:  $\chi_{zz}^\sigma(r)$  の距離  $r$  依存性。

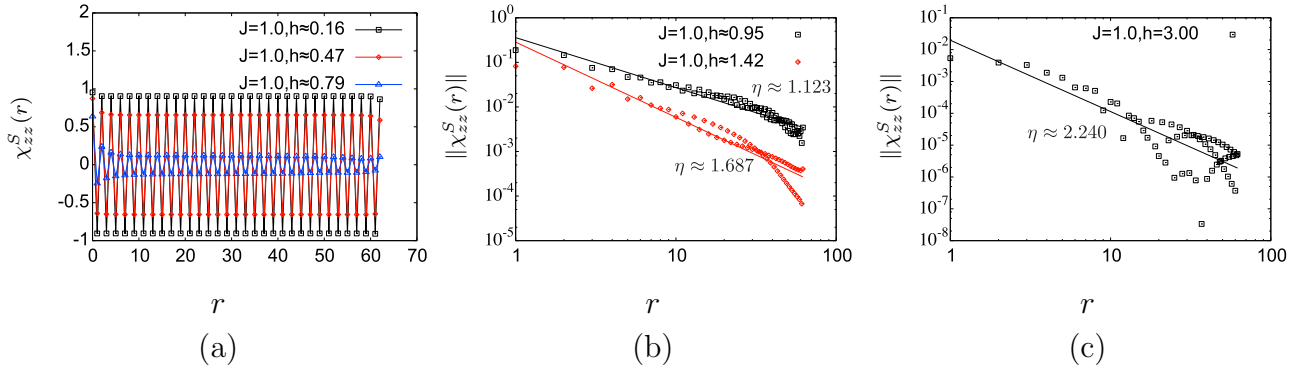


図 D.45:  $\chi_{zz}^S(r)$  の距離  $r$  依存性。

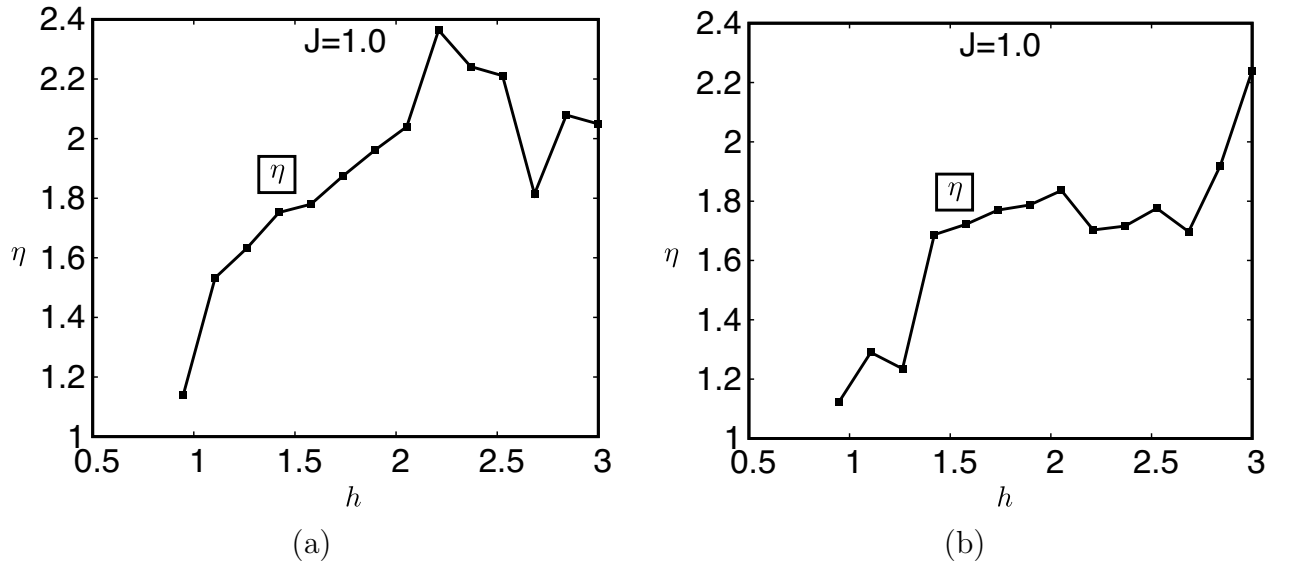
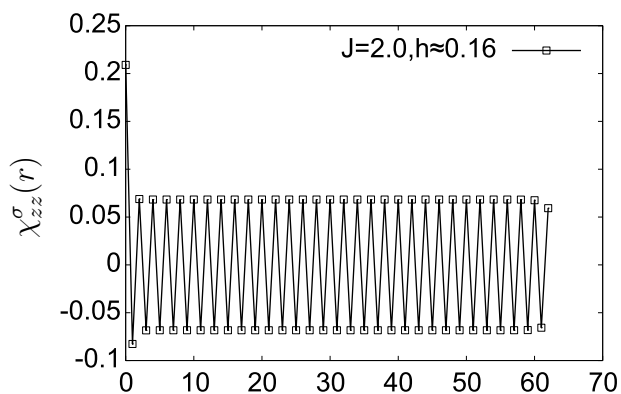
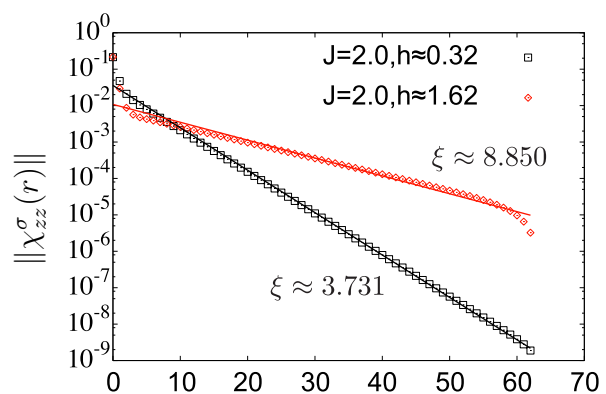


図 D.46: 減衰のベキ  $\eta$  の磁場  $h$  依存性。(a) 伝導電子のスピンの相関関数  $\chi_{zz}^\sigma(r)$  のベキ。(b) 局在スピンの相関関数  $\chi_{zz}^S(r)$  のベキ。

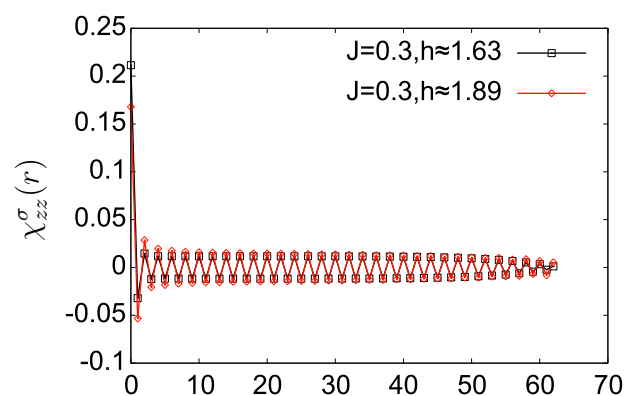
$J = 2.0$  のとき



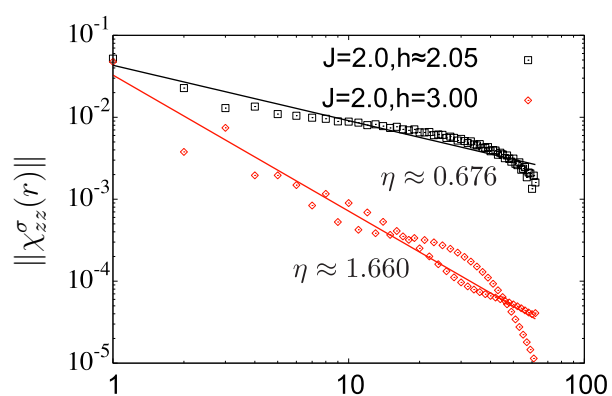
(a)



(b)



(c)



(d)

図 D.47:  $\chi_{zz}^{\sigma}(r)$  の距離  $r$  依存性。



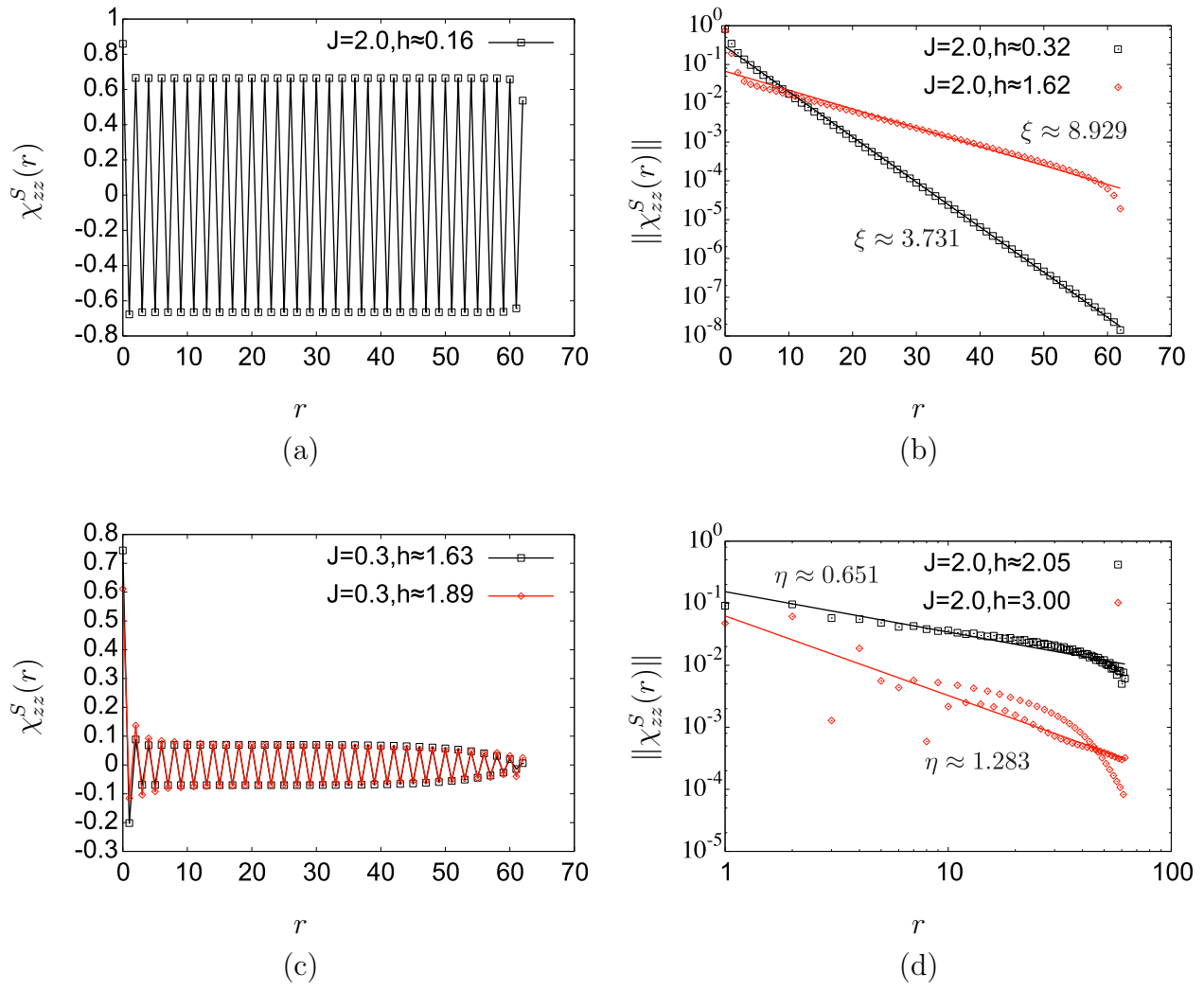


図 D.48:  $\chi_{zz}^S(r)$  の距離  $r$  依存性。

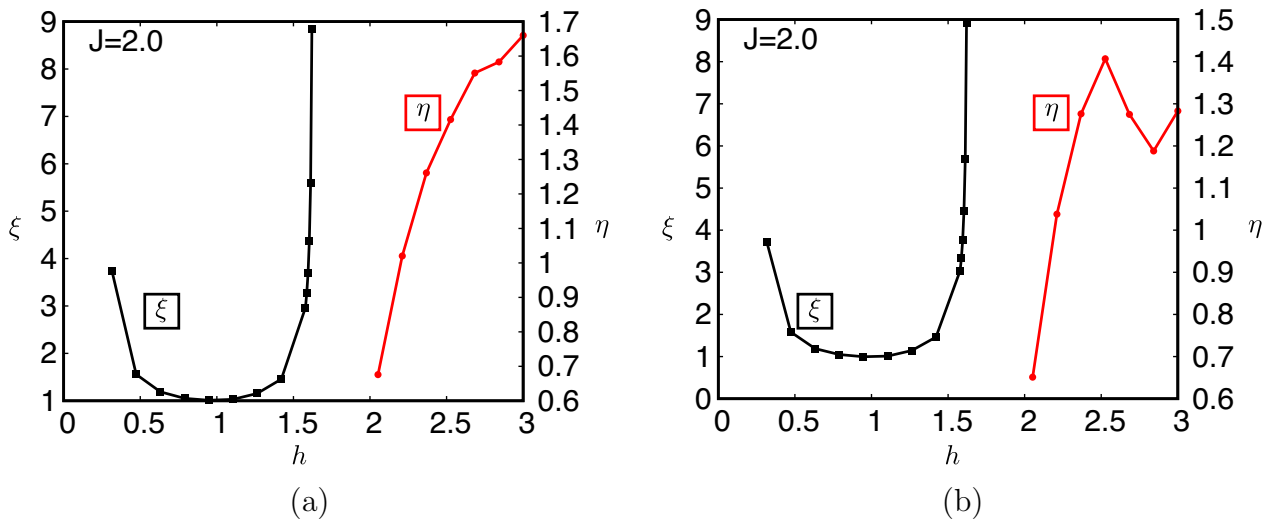


図 D.49: 減衰のベキ  $\eta$  および相関長  $\xi$  の磁場  $h$  依存性。(a) 伝導電子のスピンの相関関数  $\chi_{zz}^S(r)$  のベキおよび相関長。(b) 局在スピンの相関関数  $\chi_{zz}^S(r)$  のベキおよび相関長。

## 付 録 E 伝導電子のフェルミ波数

ここでは、 $J = 0$  の場合の伝導電子のフェルミ波数を導出する。式 (3.1) において  $J = 0$  とすると伝導電子と局在スピンは相互作用しないため、伝導電子のハミルトニアン

$$\hat{H}_{\text{ele}} = -t \sum_{j=1}^{N-1} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left( \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{c}_{j+1\sigma} + \hat{c}_{j+1\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} \right) - h \sum_{j=1}^N \hat{\sigma}_j^x, \quad (\text{E.1})$$

を考えれば良い。簡単のため周期境界条件を考え、 $j$  サイトと  $j + N$  サイトを同一視する。式 (E.1) を対角化するために次のフーリエ変換を導入する。

$$\hat{c}_{k\sigma} \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{-ikj} \hat{c}_{j\sigma}, \quad k = \frac{2\pi}{N} l, \quad l = 0, 1, 2, \dots, N-1. \quad (\text{E.2})$$

これを逆に解くと、

$$\hat{c}_{j\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikj} \hat{c}_{k\sigma}, \quad (\text{E.3})$$

が得られる。ここで、 $\sum_k f(k) = \sum_{l=0}^{N-1} f(\frac{2\pi}{N} l)$  である。 $\hat{\sigma}_j^x = \frac{1}{2} (\hat{c}_{j\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j\downarrow} + \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j\uparrow})$  に注意して、式 (E.1) を書き換えると、

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{ele}} &= \sum_k \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} (-2t \cos k) \hat{c}_{k\sigma}^\dagger \hat{c}_{k\sigma} - \frac{h}{2} \sum_k \left( \hat{c}_{k\uparrow}^\dagger \hat{c}_{k\downarrow} + \hat{c}_{k\downarrow}^\dagger \hat{c}_{k\uparrow} \right) \\ &= \sum_k \begin{pmatrix} \hat{c}_{k\uparrow}^\dagger \\ \hat{c}_{k\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -2t \cos k & -\frac{h}{2} \\ -\frac{h}{2} & -2t \cos k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c}_{k\uparrow} & \hat{c}_{k\downarrow} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (\text{E.4})$$

となる。式 (E.4) の  $2 \times 2$  行列を対角化する行列を  $U$  とすると、

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{ele}} &= \sum_k \begin{pmatrix} \hat{c}_{k\uparrow}^\dagger \\ \hat{c}_{k\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} U U^\dagger \begin{pmatrix} -2t \cos k & -\frac{h}{2} \\ -\frac{h}{2} & -2t \cos k \end{pmatrix} U U^\dagger \begin{pmatrix} \hat{c}_{k\uparrow} & \hat{c}_{k\downarrow} \end{pmatrix} \\ &= \sum_k \begin{pmatrix} \hat{c}_{k\uparrow}^\dagger \\ \hat{c}_{k\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} U \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} U^\dagger \begin{pmatrix} \hat{c}_{k\uparrow} & \hat{c}_{k\downarrow} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (\text{E.5})$$

とできる。対角化する行列がエルミートなので  $U$  はユニタリ行列となり、 $U^\dagger U = U U^\dagger = \hat{1}$  となることに注意。 $\hat{1}$  は  $2 \times 2$  の単位行列である。少し計算すると、

$$E_1 = -2t \cos k + \frac{h}{2}, \quad E_2 = -2t \cos k - \frac{h}{2}, \quad (\text{E.6})$$

となり、伝導電子のエネルギーバンドが得られる。以下では  $t = 1$  とする。

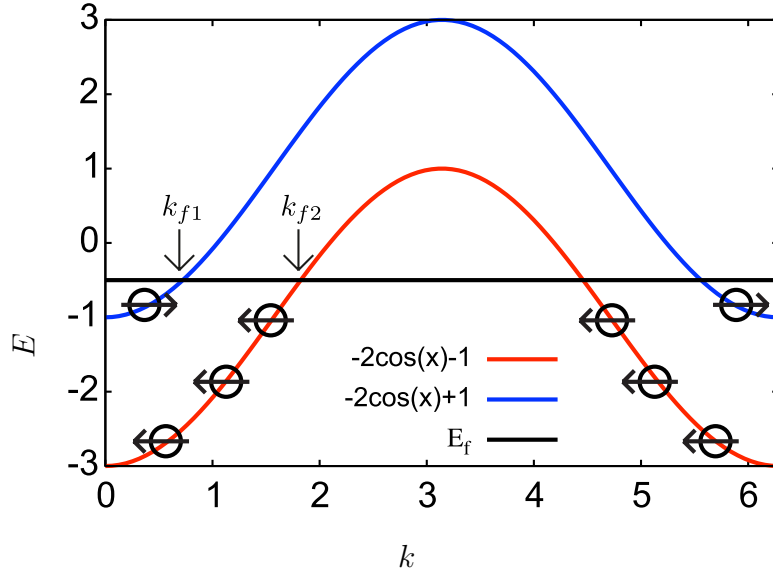


図 E.1: 伝導電子のエネルギーバンド。

図 E.1 にエネルギーバンドの波数  $k$  依存性を示す。この系の基底状態は図 E.1 のように伝導電子をエネルギーが低い順に詰めていけば得られる。フェルミ波数  $k_{f1}, k_{f2}$  は、図 E.1 においてフェルミエネルギー  $E_f$  とエネルギーバンドの交点で与えられる。したがって、

$$k_{f1} = \arccos \frac{h - 2E_f}{4}, \quad k_{f2} = \arccos \frac{-h - 2E_f}{4}. \quad (\text{E.7})$$

また、波数  $k = 2\pi/N$  おきに伝導電子がとれる状態があるため、

$$k_{f1} + k_{f2} = \pi n_c, \quad (\text{E.8})$$

が成り立つ。式 (E.8) から、

$$(E_f)^2 = \frac{8 - 8 \cos^2 \pi n_c - h^2(1 + \cos \pi n_c)}{4 - 4 \cos \pi n_c}, \quad (\text{E.9})$$

が分かるので、これを式 (E.7) に代入して  $k_{f1}, k_{f2}$  を決定すれば良い。具体的なフィリングの値を代入して計算すると以下ようになる。

1.  $n_c = 1/2$  の時

$$k_{f1} = \arccos \frac{h + \sqrt{8 - h^2}}{4}, \quad k_{f2} = \arccos \frac{-h + \sqrt{8 - h^2}}{4}. \quad (\text{E.10})$$

2.  $n_c = 3/4$  の時

$$k_{f1} = \arccos \left( \frac{h}{4} + \frac{1}{4} \sqrt{\frac{8 - (2 - \sqrt{2})h^2}{2 + \sqrt{2}}} \right), \quad k_{f2} = \arccos \left( \frac{h}{4} + \frac{1}{4} \sqrt{\frac{8 - (2 - \sqrt{2})h^2}{2 + \sqrt{2}}} \right). \quad (\text{E.11})$$

3.  $n_c = 1$  の時

$$k_{f1} = \arccos \frac{h}{4}, \quad k_{f2} = \arccos -\frac{h}{4}. \quad (\text{E.12})$$

# 謝辞

本研究を進めるにあたり、日頃から優しく声をかけていただき、貴重な研究時間を割いてアドバイスしていただきました服部一匡准教授に深く感謝いたします。また、日々の授業やゼミなどで貴重なアドバイスを頂いた堀田貴嗣教授にも感謝いたします。上田和夫客員教授、原子力機構先端基礎研究センターの久保勝規客員研究員のお二方には研究室セミナーを通して議論していただき、大変感謝しています。最後に、研究以外の面でもお世話になりました、強相関電子論研究室の先輩、同期、後輩の皆様に感謝申し上げます。

## 参考文献

- [1] J. Bardeen, et al., Phys. Rev. **108**, 1175 (1957).
- [2] J. G. Bednorz and K. A. Müller, Z. Phys. B**64**, 189 (1986).
- [3] D. Aoki and J. Flouquet, J. Phys. Soc. Jpn. **81**, 011003 (2012).
- [4] S. S. Saxena, et al., Nature **406**, 587 (2000).
- [5] K. Oikawa, et al., J. Phys. Soc. Jpn. **65**, 3229 (1996).
- [6] Y. Ōnuki, et al., J. Phys. Soc. Jpn. **61**, 293 (1992).
- [7] G. Oomi, et al., Physica B **206-207**, 515 (1995).
- [8] A. Huxley, et al., J. Phys.: Condens. Matter **15**, S1945 (2003).
- [9] V. Taufour, et al., Phys. Rev. Lett. **105**, 217201 (2010).
- [10] I. Sheikin, et al., Phys. Rev. B **64**, 220503 (2001).
- [11] D. Aoki, et al., Nature **413**, 613 (2001).
- [12] A. Miyake, et al., J. Phys. Soc. Jpn. **77**, 094709 (2008).
- [13] F. Hardy, et al., Phys. Rev. B **83**, 195107 (2011).
- [14] K. G. Sandeman, et al., Phys. Rev. Lett. **90**, 167005 (2003).
- [15] K. Hattori and H. Tsunetsugu, Phys. Rev. B **87**, 064501 (2013).
- [16] Y. Tada, et al., Phys. Rev. B **93**, 174512 (2016).
- [17] N. T. Huy, et al., Phys. Rev. Lett. **99**, 067006 (2007).
- [18] E. Hassinger, et al., Conf. Ser. **200**, 012055 (2010).
- [19] T. Hattori, et al., Phys. Rev. Lett. **108**, 066403 (2012).
- [20] D. Aoki, et al., J. Phys. Soc. Jpn. **78**, 113709 (2009).
- [21] H. Tsunetsugu et al., Rev. Mod. Phys. **69**, 809 (1997).
- [22] H. Tsunetsugu, et al., Phys. Rev. B **47**, 8345(R) (1993).
- [23] 古崎昭「低次元の強相関電子系」 <http://bussei-kenkyu.jp/pdf/04/4/0069-044203.pdf>

- [24] C. Thomas, et al., Phs. Rev. B. **83** 014415 (2011).
- [25] C. Thomas, et al., J. Magn. Magn. Mater **372** (2014).
- [26] H. A. Bethe, Z. Physik **71**, 205-231 (1931) .
- [27] 白井伸宙 卒業論文「実空間くりこみ群を用いた低次元量子スピン系の解析」  
<http://quattro.phys.sci.kobe-u.ac.jp/nishi/Note/shirai.pdf>
- [28] 西野友年「密度行列くりこみ群－計算の原理を中心に」 <http://quattro.phys.sci.kobe-u.ac.jp/nishi/Note/tutorial.pdf>
- [29] K. G. Wilson, Rev. Mod. Phys. **47**, 773 (1975).
- [30] T. Xiang and G. A. Gehring, J. Magn. Magn. Mater. **104-107**, 861 (1992).
- [31] S. R. White, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992); Phys. Rev. B **48**, 10345 (1993).
- [32] 成島毅「S=1/2 Heisenberg 梯子模型の密度行列繰り込み群による研究」  
<http://repository.kulib.kyoto-u.ac.jp/dspace/bitstream/2433/96250/1/KJ00004705193.pdf>
- [33] 初貝安弘「物性論における数値計算について」 <http://rhodia.ph.tsukuba.ac.jp/hat-sugai/modules/pico/PDF/lectures/suuchi.pdf>
- [34] C. Lanczos, J. Res. Nat'l Bur. Std. **45**, 255-282 (1950).
- [35] M. R. Hestenes and E. Stiefel, J. Res. Nat'l Bur. Std. **49**, 409-436 (1952).
- [36] 山本哲朗「数値解析入門」サイエンス社 増訂版 (2003) pp. 56-58.
- [37] N. Shibata, et al., Phys. Rev. B **54**, 13495 (1996).
- [38] M.A. Ruderman and C. Kittel, Phys. Rev. **96**, 99 (1954).
- [39] T. Kasuya, Prog. Theor. Phys. **16**, 45 (1956).
- [40] K. Yosida, Phys. Rev. **106**, 893 (1957).
- [41] E. Dagotto, et al., Phys. Rep. **344**, 1 (2001).
- [42] S. Watanabe et al., J. Phys. Soc. Jpn. **75**, 043710 (2006).