

博士論文

一次元 f 電子系における新しい量子状態の研究

東北大学大学院理学研究科

物理学専攻

若目田 寛

平成 27 年

目次

第1章イントロダクション	5
1.1 はじめに	5
1.2 近藤格子模型と周期アンダーソン模型の歴史	6
1.3 一次元近藤格子模型の基底状態	11
1.4 古典的な一次元近藤格子模型	17
1.5 周期アンダーソン模型の基底状態	18
1.6 研究目的	21
第2章密度行列くりこみ群と Sine Square Deformation	23
2.1 密度行列くりこみ群	23
2.2 Sine Square Deformation	24
2.2.1 Tight binding 模型における SSD	25
2.2.2 近藤格子模型における SSD	26
2.2.3 周期アンダーソン模型における SSD	28
第3章一次元近藤格子模型の低電子密度領域	33
3.1 局在スピンの構造の波数の J 依存性について	33
3.2 局在スピンの構造の波数 k_S と電子密度 n_c	40
3.3 絶縁相	45
3.4 複合粒子描像の直接的な確認	50
3.5 古典的な近藤格子模型	51
3.6 常磁性金属相と強磁性金属相の境界	53
3.7 一次元近藤格子模型の低電子密度領域の相図	64
第4章一次元周期アンダーソン模型における複合粒子相	65
4.1 一次元周期アンダーソンの計算のセットアップ	65

4.2 $n_c = 1/3$ における絶縁相	67
4.3 複合粒子金属相	68
第5章 結論	71
5.1 一次元近藤格子模型	71
5.2 一次元周期アンダーソン模型	71
参考文献	75

第 1 章

イントロダクション

1.1 はじめに

本研究は一次元近藤格子模型と一次元周期アンダーソン模型の基底状態を調べたものである。まずこれらの模型の歴史的背景について概観する。

現在の物性物理の源流は、量子力学の誕生に端を発する。金属の性質である伝導特性や常磁性といった特徴は主に電子が担っているため、その電子の運動を記述する最も単純な模型として、電子のフェルミオンとしての性質とその自由な場合の量子力学的な固有状態を考慮する自由電子模型が考られる。このモデルによって金属の低温比熱や帯磁率といった性質はある程度説明できた。

ところが 1930 年頃自由電子模型がよく成り立つアルミのような物質に、磁性不純物を少量混ぜることによって、電気抵抗の極小が見られるということが実験的に示された。この問題は長い間解明されなかったが、1960 年代に近藤淳 [1] によって解決された。彼は、磁性不純物の原子内電子相関、および局在電子と伝導電子の混成によって伝導電子と局在電子の交換相互作用を導き、フェルミ面の存在と量子力学由来のスピン演算子の非可換性から電気抵抗の極小が現れることを見出し理論的に現象を説明した。その後芳田によってこの系の基底状態が伝導電子と局在スピンのシングレットであることが示され、さらに Wilson による数値くりこみ群 [2] によって低温から高温までの現象の解析がなされ、一体不純物の問題についてはほぼ完全な解決が成された。

一方で、希土類化合物の磁性を記述するために RKKY 相互作用 [3, 4] が提唱された。これは局在スピンと伝導電子に交換相互作用が働いた場合に、局在スピン間に有効的な相互作用が働くというものである。この RKKY 相互作用と前述の近藤効果は互いに相反する性質を持っている。近藤効果は伝導電子と局在電子がシングレットを組むことによって局在スピンを遮蔽する役割を果たす。一方で RKKY 相互作用は局在スピンを安定化させる役割を果たす。

本研究は基底状態を最も精度よく求められる一次元の解析を行い、この2つの効果が拮抗する領域についてどのような電子状態が実現するか明らかにすることを目的とする。

1.2 近藤格子模型と周期アンダーソン模型の歴史

f 電子系は原子の周りに局在している f 軌道の電子 (局在電子) と 物質全体を遍歴している s 軌道の電子 (伝導電子) が相互作用をすることで低温において多彩な現象を起こす。この系を記述する最も簡単な数理模型が近藤格子模型 (KL) と周期アンダーソン模型 (PAM) である。

周期アンダーソン模型のハミルトニアンは

$$H_{PAM} = \sum_{r,\sigma} \left\{ \mu c_{r,\sigma}^\dagger c_{r,\sigma} + \epsilon_f f_{r,\sigma}^\dagger f_{r,\sigma} - t(c_{r,\sigma}^\dagger c_{r+1,\sigma} + h.c.) - V(c_{r,\sigma}^\dagger f_{r,\sigma} + h.c.) + \frac{U}{2} n_{f\sigma} n_{f\bar{\sigma}} \right\} \quad (1.1)$$

のように表される。ここで $c^\dagger(c)$ は 伝導電子の 生成 (消滅) 演算子, $f^\dagger(f)$ は局在電子の 生成 (消滅) 演算子である。また 以下では $t = 1$ をエネルギーの基準単位とする。 ϵ_f は局在電子のエネルギー準位、 V が伝導電子と局在電子との混成項、 U が局在電子間の斥力効果を表す。 $\epsilon_f = \mu - \frac{U}{2}$ とすることで、 f 準位に 電子がいない状態と二重占有の状態のエネルギーが等しくなり、 f 準位の平均電子密度が1になる。その条件の下で $U \gg t, V$ とする強相関極限を取ることで周期アンダーソン模型は近藤格子模型になる。

近藤格子模型のハミルトニアンは

$$H_{KL} = \sum_{r,\sigma} \left\{ \mu c_{r,\sigma}^\dagger c_{r,\sigma} - t(c_{r,\sigma}^\dagger c_{r+1,\sigma} + h.c.) \right\} + J \sum_r \mathbf{s}_c \cdot \mathbf{S}_f \quad (1.2)$$

である。ここで \mathbf{s}_c 伝導電子のスピン演算子、 \mathbf{S}_f は局在スピンのスピン演算子。 J は反強磁性的な交換相互作用である。

局在 f 電子をもつ Ce 化合物の物性は近藤格子模型を出発点として理論的な解析が進められてきた。図 1.1 に典型的な重い電子系の Ce 化合物である $\text{Ce}_x\text{La}_{1-x}\text{Cu}_6$ の電気抵抗の温度依存性 [5] を示す。 x は Ce の濃度に対応するため、 x が小さいときには f 電子を含む Ce 不純物として存在し、 x が1に近いと Ce は周期的に存在することになる。

低温の電気抵抗極小現象は、 x が小さい不純物極限で現れる現象で、 $x = 0.094$ の場合には 30K 付近で抵抗極小が観測され、そこから低温に向かって抵抗値は上昇する。電気抵抗はその後一定値に落ち着くが、この電気抵抗の上昇から一定値に至る過程を特徴づけるクロスオーバーの温度が、近藤温度と呼ばれるこの現象の唯一のエネルギースケールで

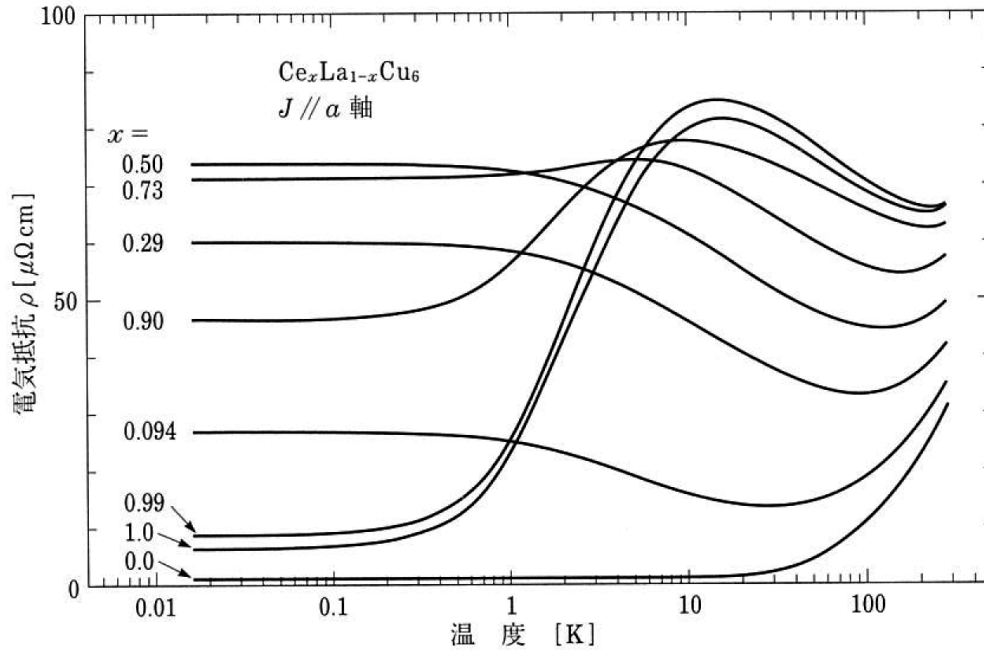


図 1.1 $\text{Ce}_x\text{La}_{1-x}\text{Cu}_6$ の電気抵抗の温度依存性 [5, 6]

ある。不純物近藤模型における近藤温度は

$$T_K = W \exp\left(-\frac{1}{N_c J}\right) \quad (1.3)$$

で与えられる。ここで、 W はバンド幅、 N_c は フェルミ準位における状態密度である。この近藤温度より高温側は、不純物スピンと伝導電子の問題を摂動的に取り扱うことが許され、一方で近藤温度より低温では伝導電子と局在電子がスピンシングレットを組む状態が実現している。したがって、近藤効果として知られる電気抵抗極小現象は、不純物スピンと伝導電子が低温でスピンシングレットを形成する途中過程の現象として理解することができる。しかし、 x を増加させ磁性不純物の濃度を高くしていくと、例えば $x = 1$ の場合約 10K 付近から再度電気抵抗の減少が生じる。このような磁性不純物の高濃度極限が f 電子系であり、そこでは磁性不純物間の相互作用が本質的に問題になる。

RKKY 相互作用は局在スピン間に有効的に働く相互作用である。ある点の局在スピンが局所磁場として伝導電子に影響を与え、空間依存性のある磁化分極を誘起する。その分極を他の点の局在スピンが内部場として感じることで、局在スピン間に伝導電子を媒介とする相互作用が働く。したがって局在スピン間の相互作用の関数形は局所磁場が伝導電子

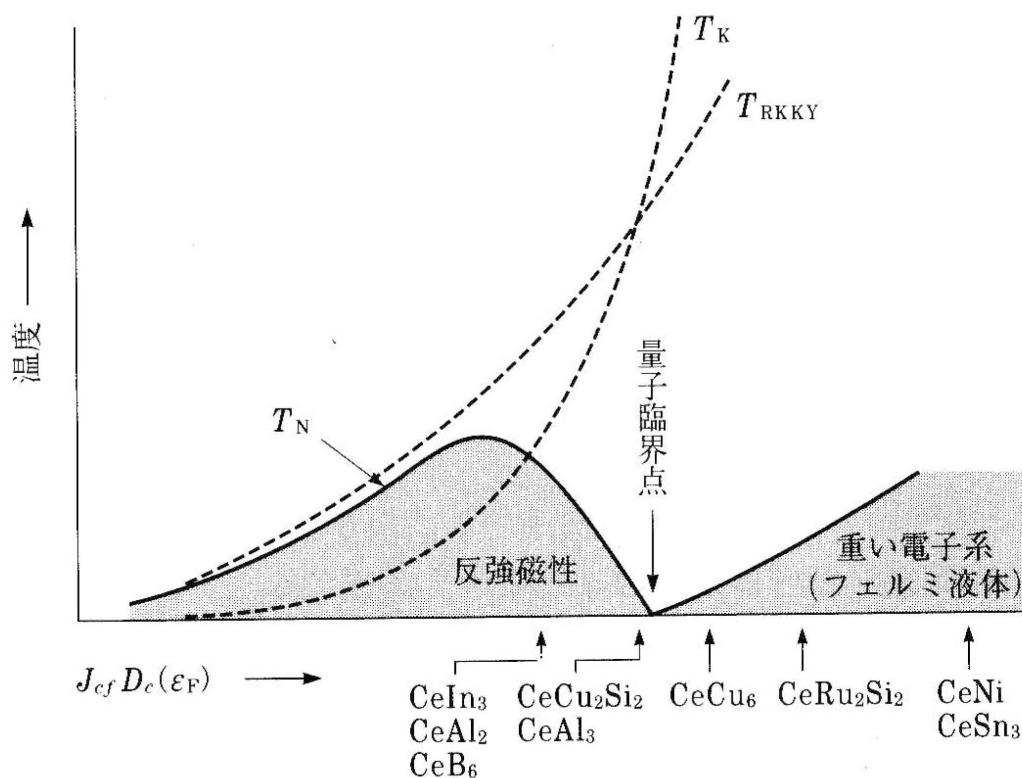


図 1.2 ドニアックの相図 [6]

に与える影響を計算することで得られ、一次元では

$$H_{\text{RKKY}} \propto J^2 \frac{\cos 2k_F r}{r_{ij}} \quad (1.4)$$

となりその特徴的なエネルギーは空間次元によらず J^2 でスケールされる。つまり RKKY 相互作用は局所スピンの伝導電子への影響の二次摂動を考えることで局在スピン間の相互作用が導かれるというものである。

近藤効果と RKKY 相互作用はそれぞれ、スピンを遮蔽する、スピンを安定化させるという意味で正反対の性質を持っている。この競合の様子は通常図 1.2 のドニアックの相図によって理解される。それぞれのエネルギースケールを比較すると近藤効果は J が大きいところで主要となり、RKKY 相互作用は J が小さいところで主要となることがわかる。そしてその中間領域では近藤効果と RKKY 相互作用が競合することで、有限温度では非フェルミ流体が存在することが実験的に観測され、絶対零度においては量子臨界点が存在することが理論的に予想されている。[7]

上記のドニアックの相図による説明は概念的なものであり、実際の近藤格子模型で確かめられたものではないことに注意が必要である。そのため、実際の近藤格子模型でドニアックの描像がどのように実現するかを調べることは意義がある。さらに近藤効果と

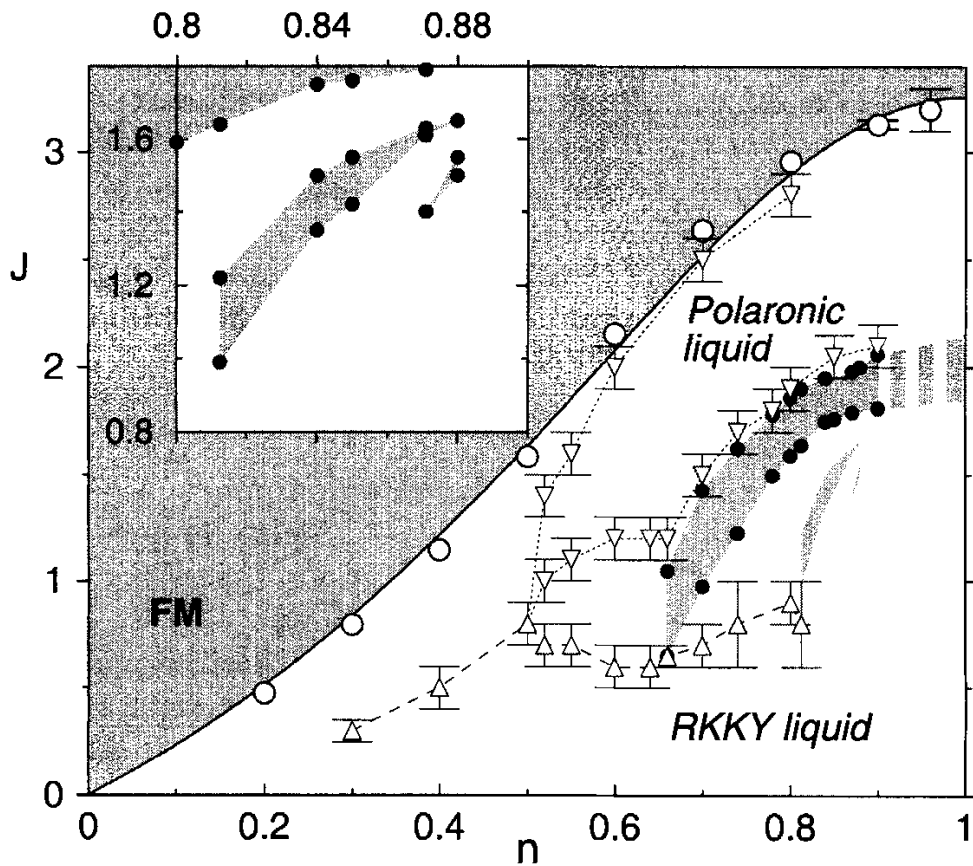


図 1.3 non-Abelian DMRG による基底状態の相図 [8]

RKKY 相互作用の競合するような中間領域において新しい電子状態が実現すると考えられ、その検証が求められている。

このような中間領域では量子揺らぎと長距離相関の発達により通常の近似が成り立たず、精度の良い計算を行う必要がある。そのような解析が行えるのは実質的に一次元か無限次元に限られる。一次元では密度行列くりこみ群 (DMRG)[9] による研究がなされ、図 1.3 に示すような基底状態の相図 [8] が得られている。無限次元では動的平均場 (DMFT) による解析がなされている。無限次元の近藤格子模型については [10, 11] DMFT と 連続時間モンテカルロ法 (CTQMC) を組み合わせた計算によって基底状態の相図が得られている。その結果を図 1.4 に示す。ハーフフィリングにおいて、 J が小さいところで反強磁性相となり、 J が大きいところでは近藤絶縁相になるというドニアック相図に対応する結果が得られている。またハーフフィリングに近い電子密度では J が小さい領域では反強磁性相が実現し、 J が 0.2 以上の領域では常磁性金属相が実現する。またクォータフィリングでは CDW が実現し、低電子密度領域では強磁性金属相が広がっている。

上記の結果は 系に一樣な状態が実現すると仮定した single-lattice の結果である。そ

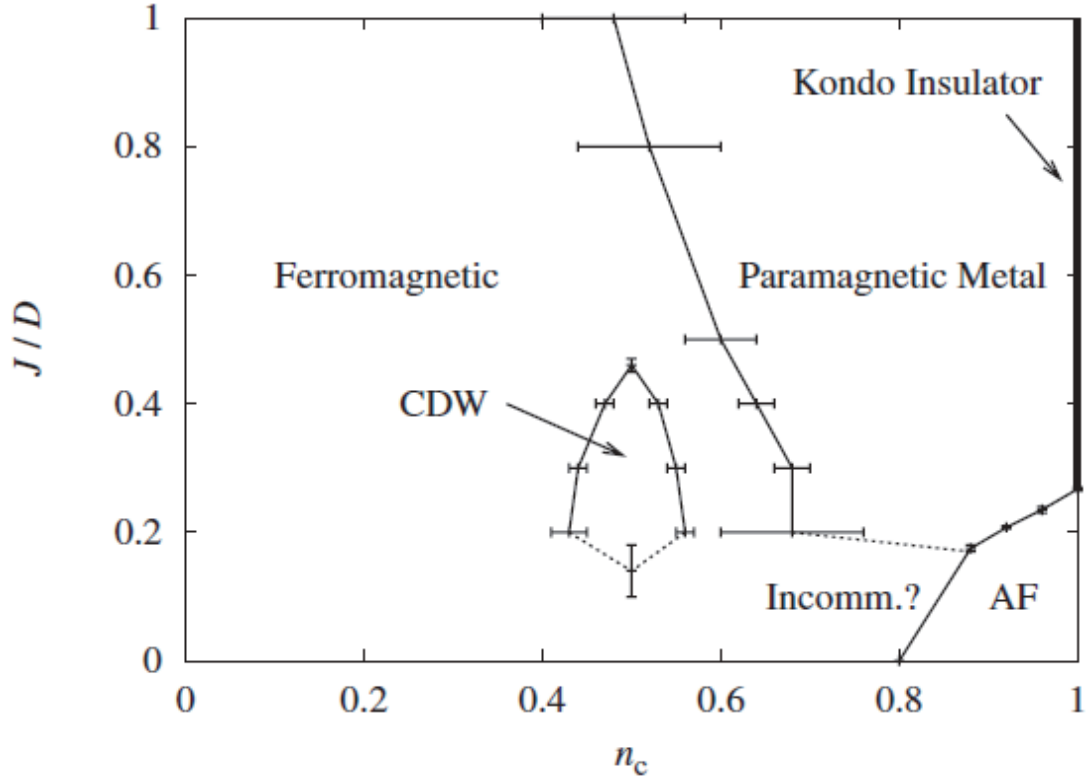


図 1.4 single-lattice の DMFT による無限次元の基底状態の相図 [10]

の後、AB-sublattice を考慮した計算が行われた。その結果を図 1.5 に示す。ハーフフィリングに近い電子密度領域の反強磁性相が実現する領域は当初より狭く、代わりに incommensurate な波数を持つ局在スピンの磁気構造が現れる領域が J の小さい領域で低電子密度領域まで広がっていることが指摘された。また、常磁性相も低電子密度領域まで広がっていることが指摘された。無限次元における基底状態の相図と一次元における基底状態の相図はクォータフィリング未満の電子密度の領域で非常に似通っている。 J が小さい領域で常磁性相が現れ、 J が大きいところで強磁性金属相なる振る舞いは両者で一致している。また無限次元において J が 0 に近い領域で incommensurate な磁気構造が現れることは、一次元においては小さなフェルミ面に対応する局在スピンの構造の波数が現れることに対応する。

また、クォータフィリングにおいて無限次元で CDW が実現することは、一次元でダイマーによるチャージギャップが形成されることに対応していると考えられる。ただし無限次元では J の小さい領域で CDW が不安定になるのに対し、一次元では J が小さい領域までダイマー状態が残ると考えられている点で異なっている。

以上のようにクォータフィリング以下の領域では低次元の極限である一次元と高次元極限である無限次元の相図が類似している。その理由としては、そもそも J が大きくない

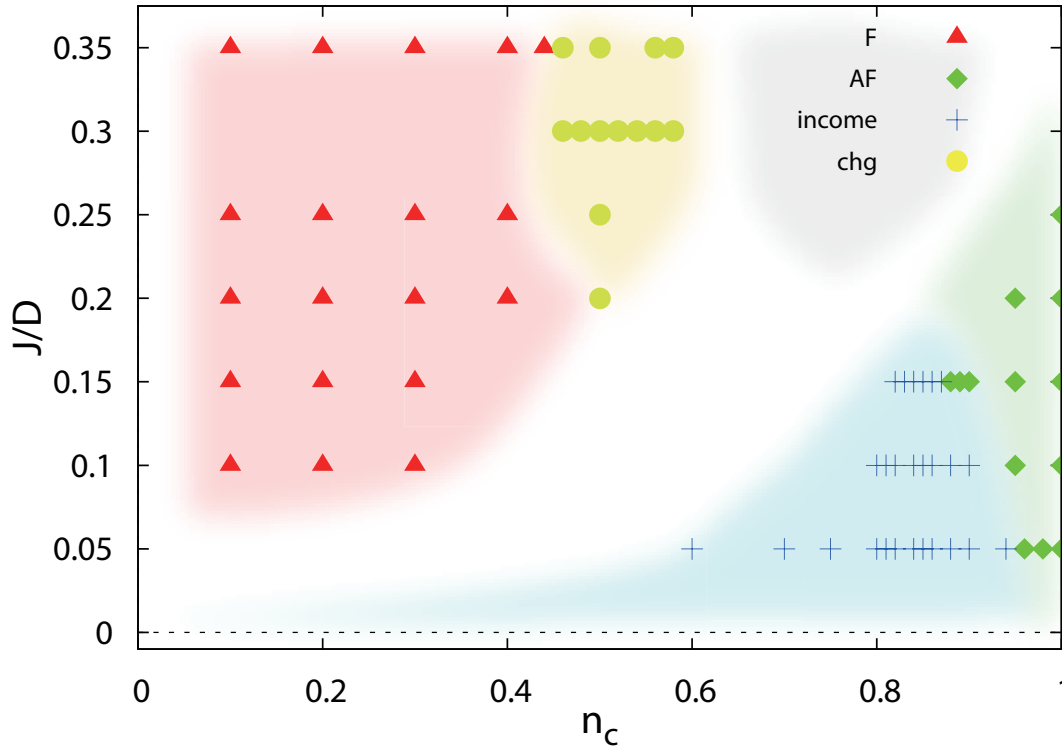


図 1.5 A-B sublattice を考慮した DMFT による基底状態の相図 [11]

領域では長距離の有効相互作用が局在スピン間に働き、スパイラルや強磁性といった一次元の格子と整合する秩序が発達するとともに、多数の局在スピンと直接相互作用することで揺らぎが抑えられることから、1次元であってもその揺らぎから生じる特殊性が目立たなくなっているという事情が考えられる。したがって、両者の中間であり、実際の物質で実現する2次元系や3次元系においても一次元や無限次元の結果は適用できると予想される。今回研究対象とするRKKY相互作用と近藤効果が競合するような領域では、このような長距離の相関の発達を正しくとらえる必要がある。以下では長距離相関を見るのに有利な一次元系に的を絞って議論を行う。

1.3 一次元近藤格子模型の基底状態

一次元近藤格子模型は1990年代にその基底状態の概要 [13, 12] が厳密対角化や量子モンテカルロ法、解析計算によって明らかにされた (図 1.6)。基底状態は3つの相に分けられハーフフィリングの近藤絶縁相、強磁性金属相 [14, 15] および常磁性金属相の存在が確認されている。ハーフフィリングは各サイトで伝導電子と局在電子がシングレットを組む非圧縮性のスピン液体が形成された絶縁相 [16] である。強磁性金属相は低電子密度領域と J の大きい強結合領域で現れる。低電子密度領域では RKKY 相互作用において

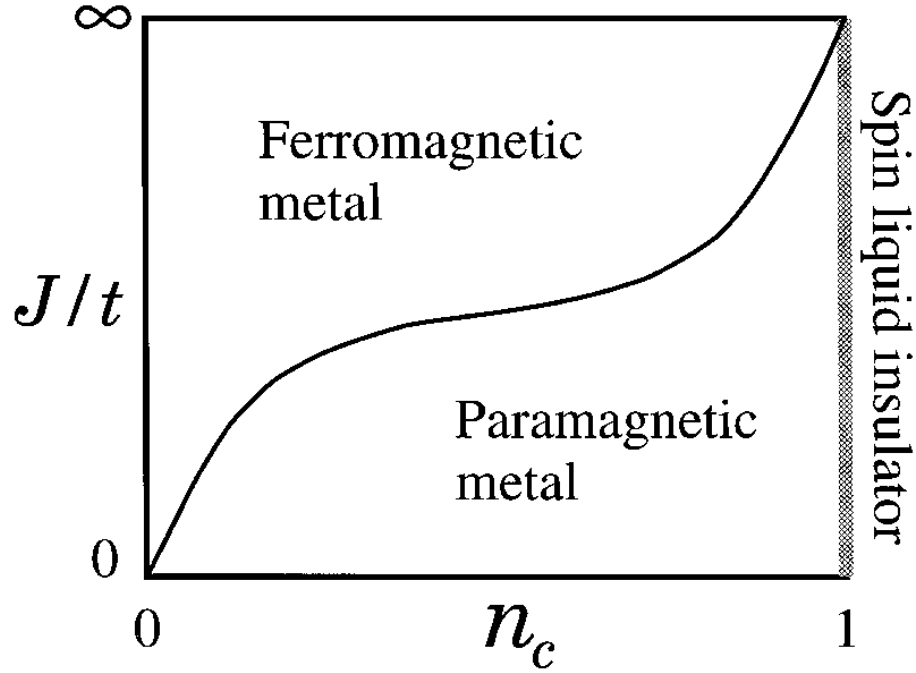


図 1.6 厳密対角化によって得られた相図の概略 [12]。

$k_F \sim 0$ となることから強磁性が理解され、強結合領域では伝導電子と局在電子のシングレットからの t の 2 次摂動により強磁性が実現すると理解されている。以上のようにハーフフィリングの絶縁相と強磁性金属相においてはその物理的な起源、描像が明らかにされている。

厳密対角化によって、相図を調べた結果 [13] を図 1.6 に示す。強磁性相は $S = (L - N)/2$ 、常磁性相は $S = 0$ または $1/2$ として、両者のエネルギーの比較によって基底状態の相を決めている。強磁性金属相についてある極限領域については解析的な結果が得られている。まず有限サイズにおいて、任意の次元で伝導電子の数が 1 つのときに基底状態が強磁性金属相となることが示されている [14]。この結果は $n_c=0$ のときに $k_F = 0$ となったときの、RKKY 相互作用によって理解される。また一次元においては $J = \infty$ の極限で基底状態が強磁性金属相となることが示されている [17]。これは伝導電子と局在電子がシングレットを組む状態に対して二次摂動を考えることで理解できる。このとき強磁性金属相の磁化は伝導電子とシングレットを形成できない余った局在スピンの担っている。そのため強磁性金属相の磁化の値 M は $M = (L - N)/2L$ で与えられる。ここで、 L は系のサイト数、 N は伝導電子の数である。この数字は上で示した厳密対角化において現れた強磁性金属相の磁化の値とも一致している。そのため、強磁性金属相は強結合極限や低密度極限の描像によって理解できると考えられる。

常磁性金属相の特徴としてフェルミ液体の 1 次元版といえる T-L 流体の描像が成り立

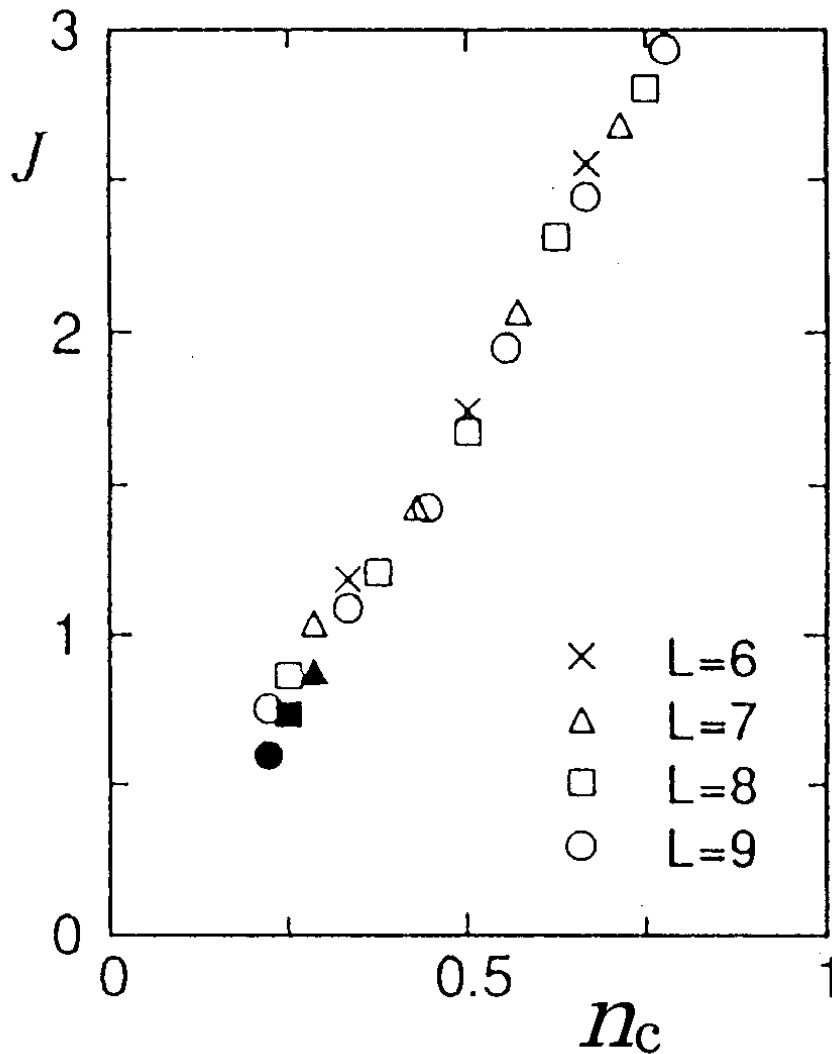


図 1.7 厳密対角化による常磁性相と強磁性相の境界 [13]

つと考えられている。T-L 流体の低エネルギー励起はフェルミ波数 k_F で特徴づけられる。通常の一次元タイトバインディング模型においてフェルミ波数 k_F と 電子密度 n は

$$k_F = \frac{\pi}{2}n \quad (1.5)$$

の関係がある。ここでフェルミ波数を決める二つの描像、大きなフェルミ面と小さなフェルミ面について説明する。大きなフェルミ面は周期的アンダーソン模型につながる描像である、周期アンダーソン模型は局在電子と伝導電子の混成 V によって局在電子が遍歴性を獲得しフェルミ面に寄与する。一方小さなフェルミ面は近藤格子模型の $J = 0$ に接続する描像である。このとき伝導電子と局在電子の混成は完全に切れているため、フェルミ面に寄与するのは伝導電子密度 n_c のみとなる。

Luttinger の定理 [18] によって相互作用が入ったとしても相転移がない限り、フェルミ

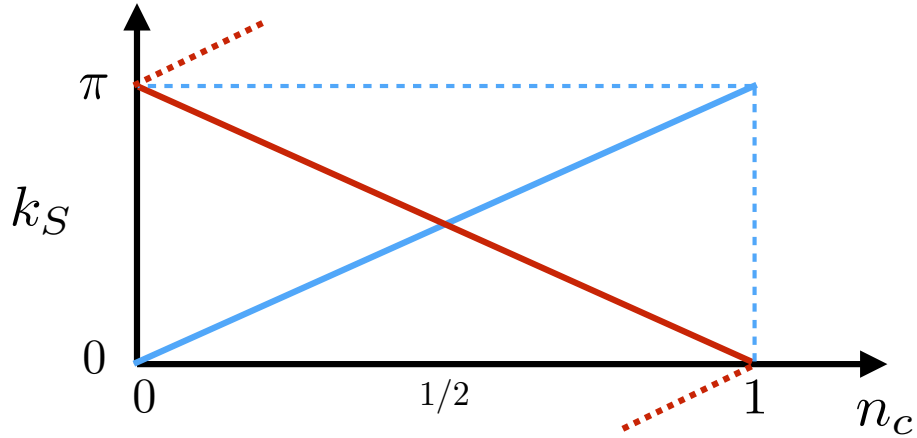


図 1.8 小さなフェルミ面から予想される k_S と n_c の関係 (水色)、大きなフェルミ面からのときの n_c と k_S の関係 (赤色)。

面の大きさは変化しないということが数学的に証明されている。そのため もし一次元近藤格子模型の J の大きい領域で 大きなフェルミ面が存在する場合、 J が小さくなる過程で相転移が起こるはずである。

伝導電子密度を n_c とするとフェルミ波数 k_F は小さなフェルミ面では 伝導電子のみがフェルミ面に寄与するので $k_F = \frac{\pi}{2}n_c$ となり、大きなフェルミ面では伝導電子に加え、局在スピンのフェルミ面に寄与するためフェルミ波数は $k_F = \frac{\pi}{2}\pi(n_c + 1)$ となる。

局在スピン同士には RKKY 相互作用が働き局在スピンの構造の波数はフェルミ波数の 2 倍となる。小さなフェルミ面描像の下では $k_S = \pi n_c$ となる。大きなフェルミ面描像のもとでは $k_S = \pi(n_c + 1)$ ではあるが、波数は 2π の並進対称性、また系の反転対称性による符号の反転によって $k_S = \pi(1 - n_c)$ となる。このように電子密度 n_c と局在スピンの構造の波数 k_S の関係は、小さなフェルミ面描像の下では伝導電子密度に比例し、大きなフェルミ面描像の下ではホール密度に比例する。

一次元の基底状態を求める手法として、密度行列くりこみ群 (DMRG) がある。実際に密度行列繰り込み群を用いた $n_c = \frac{4}{5}, J = 1.5, 2.5$ のパラメータにおける局在スピンの構造からは (図 1.9) 大きなフェルミ面の存在が示された。

その後 McCulloch らによる Non-Abelian DMRG という手法によって常磁性金属相の中に強磁性金属相が存在することが示された。さらに図 1.10 に示すように J が小さい領域ではすべての n_c で 小さいフェルミ面描像から予想される局在スピンの波数 $k_S/\pi = n_c$ をとり、 $n_c = 0.6, 0.7, 0.8$ のそれぞれで J が 2 前後の領域で大きなフェルミ面から予想される 局在スピンの構造の波数 $k_S/\pi = (1 - n_c)$ が得られている。さらに J が中間領域で k_S が小さなフェルミ面に対応する値から 連続的に変化する振る舞いも報告された。しかし、この計算は自由端境界条件によるものであり、このような連続的な波数の変化

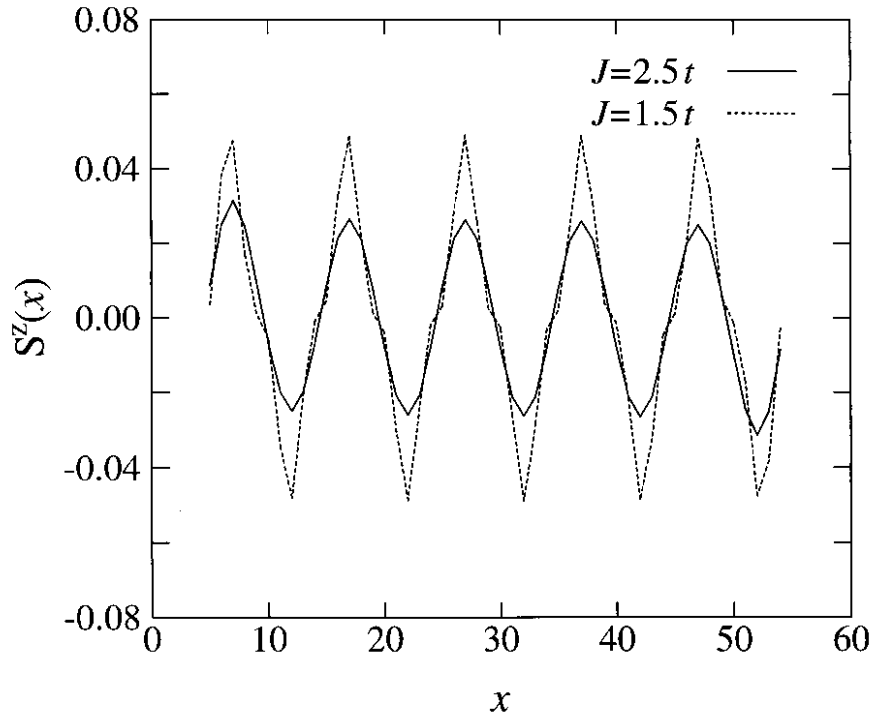


図 1.9 大きなフェルミ面に対応する S_z の分布 [19]。

が有限サイズ効果によるものか、本質的なものであるかははっきりしていない。また、 $n_c = 0.3, 0.5$ といった限られた電子密度領域についてしか計算されていないため、その結果の信頼性を確認するためにはこれらの領域を包括的に調べる必要もある。

その中で私は修士の研究において、クォータフィリング ($n_c = 1/2$) 以下の常磁性金属相領域において、局在スピン構造の波数の異常な振る舞いと、 $n_c = 1/3$ における絶縁相の存在の可能性を指摘した。しかし、その物理的な描像についてははっきりした結論は出せなかった。

このように、一次元近藤格子模型は局在電子が周期的に配置する重い電子系の多彩な電子状態とその基礎的な性質を理解するための最も単純な理論模型であるが、その電子状態を理解するには局在スピンの伝導電子によって遮蔽される近藤効果と、局在スピン間に働く RKKY 相互作用と呼ばれる有効相互作用の効果の両方を理解する必要があり、その解明は簡単ではない。

通常、ハミルトニアンに連続対称性があり、短距離相互作用が働く量子 1 次元系の基底状態には、長距離秩序は現れないと考えられている。これは Mermin-Wagner の定理として知られているが、 J が小さい領域の近藤格子模型において得られる RKKY 相互作用は長距離相互作用であり、この定理の適用範囲外に該当する。1 次元でありながら、この系では多彩な秩序相の存在が可能になっている。

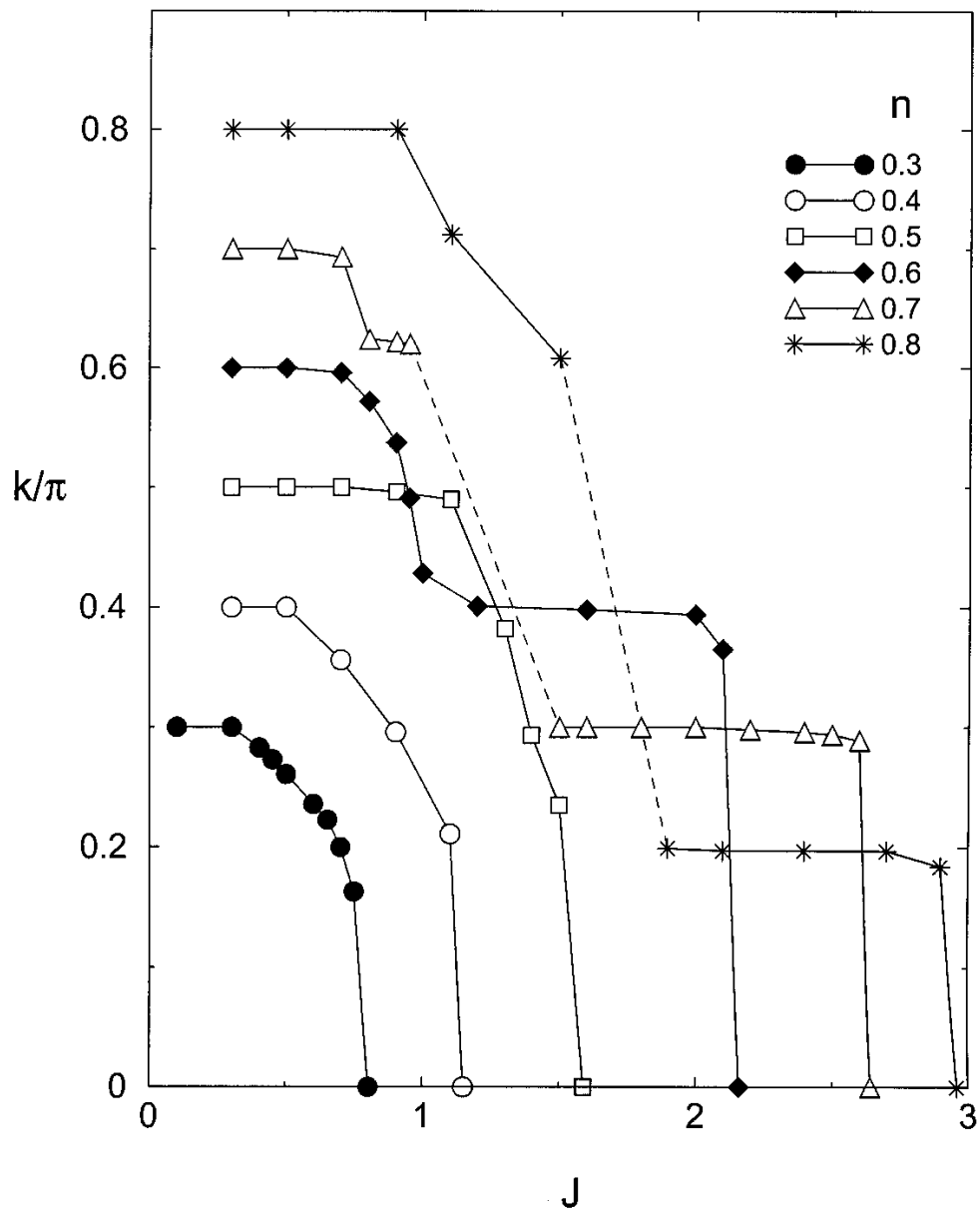


図 1.10 局在スピン構造の波数 k_S の J 依存性 [20, 21].

擬一次元分子性化合物である $(\text{Per})_2\text{M}(\text{mnt})_2$ は $S = 1/2$ のクォータフィリングの一次元近藤格子模型に対応することが知られている [22]。ここで (Per) は perylene、(mnt) は maleonitriledithiolate であり、M は 遷移金属であるがその金属として Pt や Pd を選ぶ。これに関連してクォータフィリングにおける近藤格子模型の基底状態が Xavier ら [23] によって調べられ、DMRG の計算の結果 $J = 0.5$ においてチャージギャップが存在することが指摘され、クォータフィリングにおいて絶縁相が実現することが提唱された。しかしその後、DMRG の計算において境界条件を変更することによって [24] 少なくとも $J = 1.0$ においてチャージギャップが存在しないことが指摘され、クォータフィリングにおけるチャージギャップの有無については未だに決着がついていない。また $n_c = 0.5$ では局在スピンの構造の波数が大きなフェルミ面描像と小さなフェルミ面描像で同じ値を取るため、局在スピンの構造から大きなフェルミ面か小さなフェルミ面かを判断することは出来ない。

1.4 古典的な一次元近藤格子模型

基底状態のスピン構造を理解する上で参考になるのが、局在スピンを古典的に取り扱う古典的近藤格子模型の基底状態である。古典スピンは量子揺らぎがない極限に相当するが、 J が小さい領域で、RKKY 相互作用が強くなり局在スピン間に長距離の相関が発達すると長距離相関を乱す量子揺らぎは抑えられるため、特に J が大きくない領域では、量子系と共通の振る舞いを示すと考えられる。

古典的な近藤格子模型のハミルトニアンは

$$H = \sum c_{r\sigma}^\dagger c_{r+1\sigma} + J \sum c_{r\sigma}^\dagger \sigma_{\sigma\sigma'}^i c_{r\sigma'} S_r^i \quad (1.6)$$

で与えられる。量子系との違いは、局在スピンの z だけでなく、 x, y 方向にも決まった値をとるということである。古典近藤格子模型のもとでは、局在スピンの効果は伝導電子に局所磁場を与える効果となり、量子系では多体のハミルトニアンだったのが、タイトバインディングと同様の 1 体のハミルトニアンに帰着できる。しかし、基底状態を求めるには、局在スピンの構造を調べる必要がある。そこで基底状態を決める手法としてモンテカルロ法を用いた先行研究について説明する。

古典的な近藤格子模型の基底状態をモンテカルロ法による基底状態の相図を図 1.11 に示す。量子近藤格子模型において、基底状態の相図は電子密度 n_c と交換相互作用 J で書かれているが、古典近藤格子模型の基底状態の相図はケミカルポテンシャル μ と交換相互作用 J で定義されている。 $\mu = 0$ はハーフフィリングに対応し、 μ が大きくなるにつれて、電子密度 n_c が小さくなる。まず J が大きい領域では、局在スピンの Neel 的に並ぶ反強磁性状態が実現する。また反強磁性相はすべてハーフフィリングになる。そし

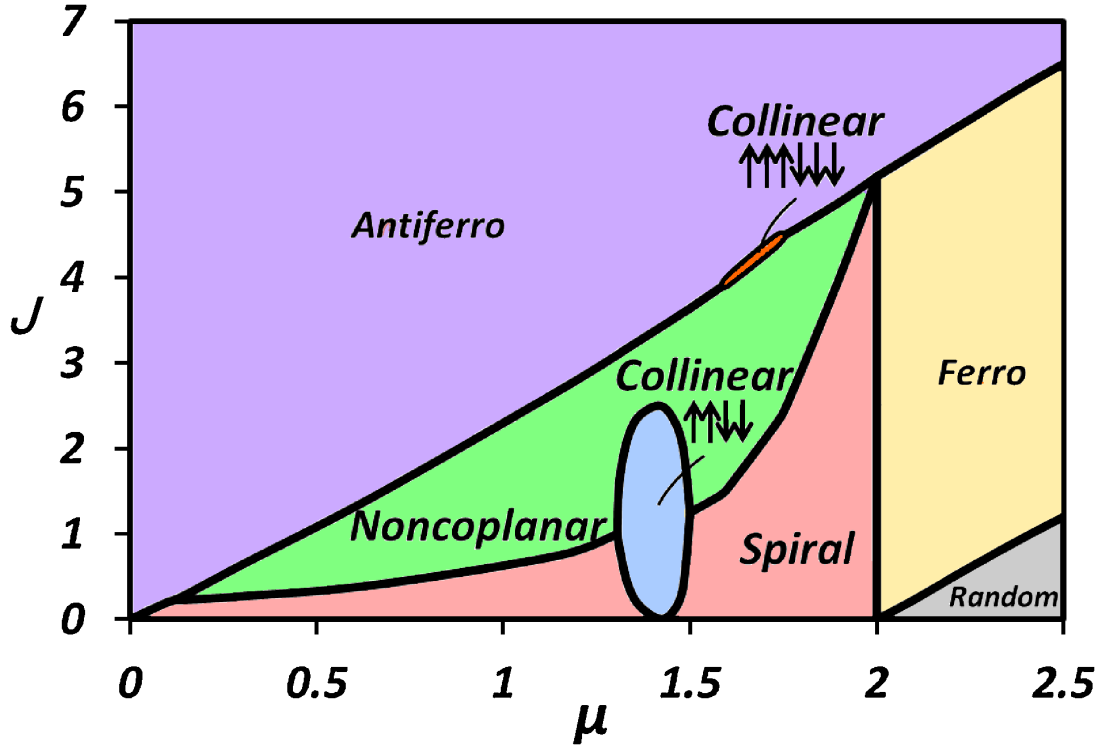


図 1.11 古典的な近藤格子模型の基底状態の相図 [25]

て J が小さい領域では局在スピンのある二次元平面内でらせん磁化をなす Spiral 状態が実現する。また J の中間領域では Noncoplanar という、局在スピンの 3 次元的に周期構造を作る状態が実現する。また、4 サイト周期、6 サイト周期でスピンのイジング的に並ぶ collinear 状態が一部の領域で実現する。

古典的次元近藤格子模型において non coplanar や collinear 状態が実現することは、古典的なスピン間に RKKY 相互作用の長距離相互作用を与えた RKKY Heisenberg 模型を考えた場合、spiral しか実現しない [25]。このことは、古典系において従来の 2 次摂動による RKKY 相互作用だけでは不十分であることを示唆するものである。また古典系における通常の RKKY 相互作用では考えられない磁化が量子系においてどのように実現するかは、興味のある問題である。

1.5 周期アンダーソン模型の基底状態

近藤格子模型における J と周期アンダーソン模型における U, V には

$$J = \frac{8V^2}{U} \quad (1.7)$$

という関係がある。ただし PAM から KL を導出する前提として、強相関極限 $U \gg V, t$ をとっているため、 U が小さいときの電子状態が近藤格子模型の基底状態とどのように接続されるかを考えることは、フェルミ面の大きさとも絡んだ非自明な問題 [26] となる。

強相関極限とは正反対の $U = 0$ における PAM は式 (1.1) にフーリエ変換を施すことによって

$$H_{PAM} = \sum_{k,\sigma} \left\{ (\mu - 2t \cos k) c_{k,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} + \epsilon_f f_{k,\sigma}^\dagger f_{k,\sigma} - V (c_{k,\sigma}^\dagger f_{k,\sigma} + h.c.) \right\} \quad (1.8)$$

と書ける。このハミルトニアンは k ごとにブロック対角化されており、 2×2 行列の対角化に帰着できる。

$$H_k = \begin{pmatrix} c_k^\dagger & f_k^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu - 2t \cos k & -V \\ -V & \epsilon_f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_k \\ f_k \end{pmatrix} \quad (1.9)$$

この行列の固有値固有ベクトルは

$$\lambda_{\pm} = \frac{1}{2} \left\{ (\mu - 2t \cos k + \epsilon_f) \pm \sqrt{(\mu - 2t \cos k - \epsilon_f)^2 + 4V^2} \right\} \quad (1.10)$$

$$\begin{aligned} v_{\pm} &= \frac{1}{\sqrt{2\sqrt{(\mu - 2t \cos k - \epsilon_f)^2 + 4V^2}}} \\ &\times \begin{pmatrix} \pm \sqrt{\pm(\mu - 2t \cos k - \epsilon_f) + \sqrt{(\mu - 2t \cos k - \epsilon_f)^2 + 4V^2}} \\ \sqrt{\mp(\mu - 2t \cos k - \epsilon_f) + \sqrt{(\mu - 2t \cos k - \epsilon_f)^2 + 4V^2}} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.11)$$

とかける。

このように、局在電子間の相互作用を考えない場合、混成項の存在によって 2 本の混成バンドが形成され、大きなフェルミ面が得られるが、この状況に U の効果を取り入れて、最終的に $U \gg V, t$ の極限に対応する近藤格子模型に近づけたとき、どのような量子多体状態が現れるのか、また、その発現機構がどのようなものであるかを明らかにすることも、本論文の目的の一つである。

周期アンダーソン模型の基底状態を決めるパラメータは、電子密度 n 、 f 準位のエネルギー ϵ_f 、 f 電子と伝導電子の混成の強さ V 、 f 電子間の斥力 U の 4 つのパラメータである。そのうち ϵ_f の自由度は f 準位の平均電子密度が 1 になる条件を課すことで消去できる。 V を固定し、 n と U の 2 つのパラメータによる研究が行われている。図 1.12 に DMRG による $V = 0.75$ における一次元周期アンダーソン模型の相図 [27] を示す。 $n = 1$ において U が小さい領域では混成バンドの描像からギャップは存在しない。しか

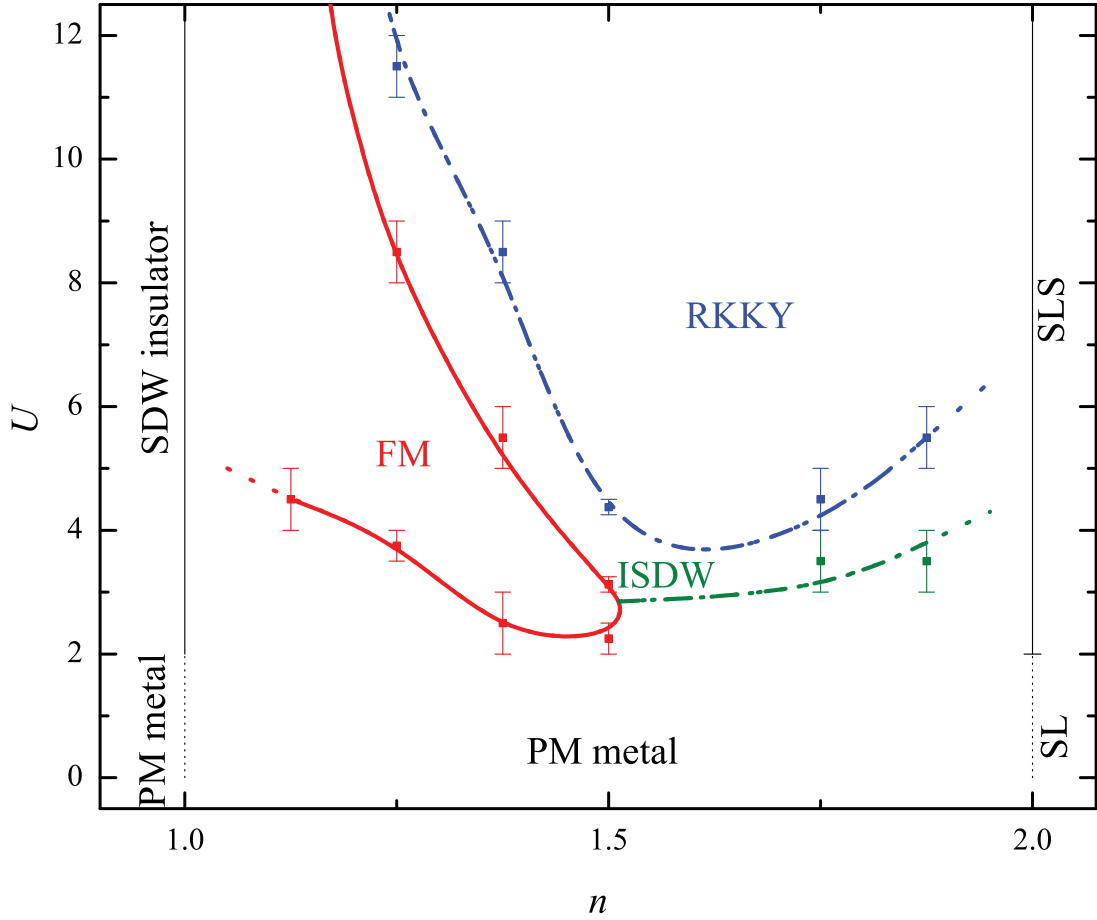


図 1.12 $V = 0.75$ における一次元周期アンダーソン模型の相図 [27]

し U が大きくなると 各 f 準位に電子を一つづ詰めた状態が基底状態となり f 準位のエネルギーと s 軌道が作るバンドの底のエネルギーの差に対応するギャップが生じる。また、ハーフフィリング $n = 2$ では常に電荷ギャップが生じるが、 U の大きさによって混成バンド由来のギャップか、近藤絶縁体に対応するギャップかという点が異なる。

一般の電子密度では $U = 5$ 以上では

$$J = \frac{8V^2}{U} \quad (1.12)$$

によって近藤格子模型と対応する強磁性相、小さなフェルミ面由来の局在スピンの構造が現れ、特に ISDW で示される領域で近藤格子模型で示したものと同様の局在スピンの波数の連続的な変化が見られる。 U が小さい領域では全面的に局在スピンの構造が消失した常磁性相が実現する。

このように、周期アンダーソン模型の U が大きい領域では近藤格子模型と整合する電子状態が実現し、一方で、 U が小さい領域では近藤格子模型の基底状態と異なるバンド理論で理解できる状態が得られる。近藤格子模型と周期アンダーソン模型が類似の性質を示

すパラメータ領域を明らかにすることで、 U が小さい場合に生じる f 電子の電荷揺らぎが果たす役割について理解することができる。

1.6 研究目的

以上の事柄を踏まえ、本論文の目的をまとめる。

一つ目の目的は一次元近藤格子模型の低電子密度領域における J の中間領域を包括的に調べることである。先行研究によって、 $n_c = 0.3, 0.5$ において局在スピンの構造の波数 k_S が連続的に変化することが指摘されているが、これはフェルミ波数 k_F が連続的に変化するラッティンジャーの定理を破るように見える。したがって新しい量子相が存在することが考えられる。より精度の良い計算を行うことでこの領域の包括的な理解を目指す。

二つ目の目的は一次元周期アンダーソン模型において、 $U = 0$ の自由電子の描像から $U = \infty$ の近藤格子模型へ、どのように接続するか明らかにすることである。特に一次元近藤格子模型において実現する新規量子相について、 U を小さくしていった場合、どのような変化が生じるかを明らかにすることでその量子相の普遍性について議論する。

第 2 章

密度行列くりこみ群と Sine Square Deformation

本研究では一次元電子系のハミルトニアン基底状態を求める手法として密度行列くりこみ群 (DMRG)[9, 28] を使用した。またその際に、境界条件として Sine Square Deformation (SSD) [29] を使用した。本章ではこの 2 つ方法についてまとめる。

2.1 密度行列くりこみ群

物性分野における理論研究の目的は、実際の物質系において起こることを理論的に理解することであるから、できるだけ簡単なハミルトニアンを設定し、有限サイズとは言ってもできるだけ大きな系の計算をする必要がある。有限サイトの計算において、多体の基底状態を求める方法として最も単純な方法は、厳密対角化である。しかしながら系の多体のヒルベルト空間は、指数関数的に増加する。そのため多体の模型として最も単純な Heisenberg 模型でさえ、厳密に計算できるのはせいぜい 40 数サイト程度である。そのため、より大きな系を計算するには厳密対角化を諦め、以下のように基底の情報を圧縮し系の大きさを少しずつ大きくしていくということを行う。

DMRG のアルゴリズムを簡単に記述すると

1. 小さな系で計算を行う。
2. 小さな系の基底状態から、重要な基底を m 個選び出し、残りの基底を捨てる
3. より大きな系の計算を 2 を繰り返しながら行う。

となる。

DMRG の肝は、重要な基底の選びかたにある。系を A ブロック (system) と B ブロック (bath) に分割する。system の次元を M , bath の次元を N とする。system と bath

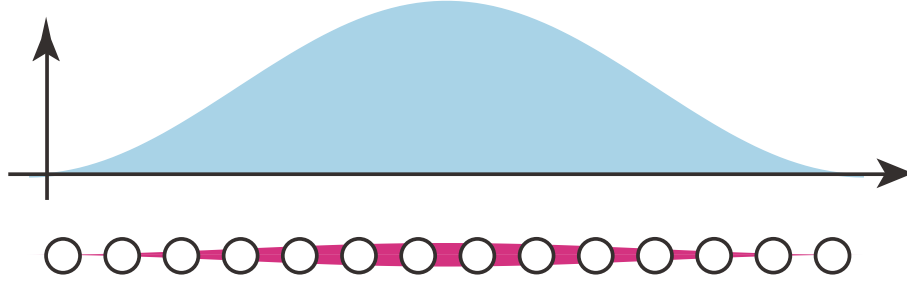


図 2.1

を合わせた全系 (superblock) の基底状態 $|GS\rangle$ を system の基底 $|i\rangle$ と bath の基底 $|j\rangle$ の線型結合によって

$$|GS\rangle = \sum_{i,j} \psi_{ij} |i\rangle |j\rangle \quad (2.1)$$

のように表す。この (M, N) 行列 ψ_{ij} を特異値分解することによって

$$U\psi V = \text{diag}\{\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n\} \quad (2.2)$$

を得る。ここで U は M 次元ユニタリ行列、 $V = \psi^T U^T$ 。 $n = \min(M, N)$ であり、 $\omega_i > 0$ であつ $\sum_i \omega_i = 1$ を満たす。よつて

$$|GS\rangle = \sum_{\alpha,i,j} U_{i,\alpha}^T \sqrt{\omega_\alpha} V_{\alpha,j}^T |i\rangle |j\rangle \quad (2.3)$$

のように表現することができる。したがつて ω_α のうち 大きい物から m 個選ぶことで $|GS\rangle$ を最もよく近似する波動関数が得られ、system の新しい m 次元の基底として $|\alpha\rangle = \sum_i U_{i,\alpha}^T |i\rangle$ が部分系の基底として最も良いものになる。このように、スーパーブロックの基底状態から、特異値分解を用いることで部分系の最も重要な基底を自動的に選び出すことができ、基底の数を制限しながら系を大きくすることができる。

2.2 Sine Square Deformation

系の境界条件は、一般的に系の外に架空のサイト (0 サイト) を付け加えて考えることができる。自由端境界条件 (OBC) とは 0 サイトと 1 サイト (0 サイトと L サイト) の結合が完全に切れてしまったもの。また周期境界条件 (PBC) とは 0 ($L+1$) サイトを $L(1)$ サイトとみなす境界条件であると言える。

以下では、一次元の再近接相互作用がある場合の Sine Square Deformation (SSD) について、タイトバイディング模型、近藤格子模型、周期アンダーソン模型に適用した例をあげ説明する。

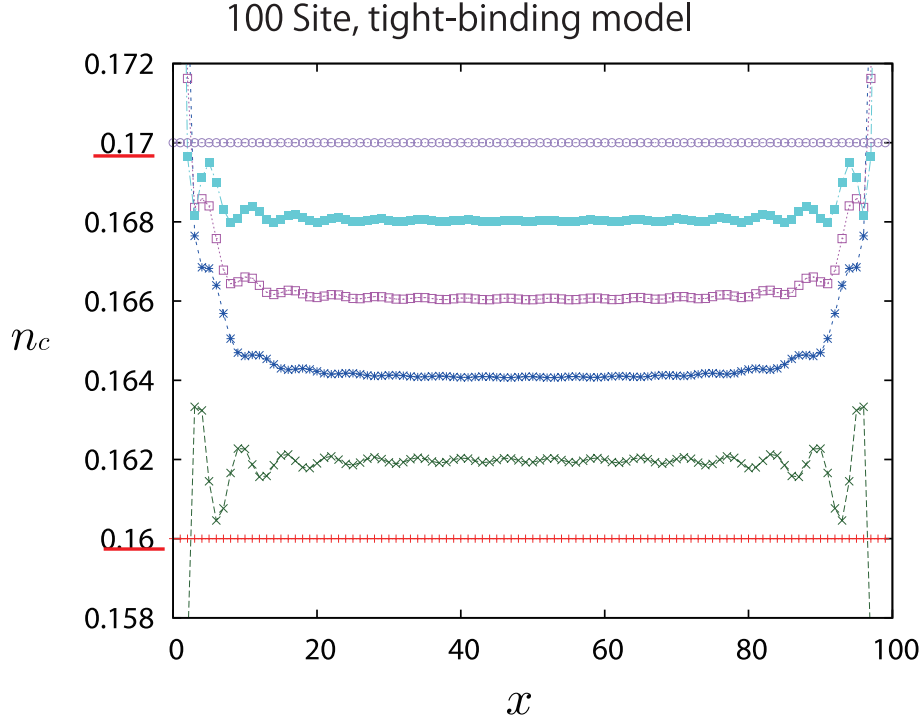


図 2.2 タイトバインディング模型について μ を連続的に変化させた場合の電子密度の分布。電子密度に赤い下線が引いてあるところが PBC と基底状態が一致する μ の結果。

2.2.1 Tight binding 模型における SSD

SSD の大きな特徴として、これまで知られている可解模型において、多体基底状態が周期境界条件 (PBC) における基底状態と一致することが示せることがある。ここでは tight binding 模型において SSD 多体の基底状態が PBC における基底状態と一致すること示す [29]。

$$H_0 = \sum_{r,\sigma} \left\{ \mu c_{r\sigma}^\dagger c_{r\sigma} - t(c_{r+1\sigma}^\dagger c_{r\sigma} + h.c) \right\} = \sum_{k\sigma} (\mu - 2t \cos k) c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \quad (2.4)$$

$$H_{SSD} = \sum_{r,\sigma} \left\{ \mu f(r) c_{r\sigma}^\dagger c_{r\sigma} - t f(r+1/2) (c_{r+1\sigma}^\dagger c_{r\sigma} + h.c) \right\} \quad (2.5)$$

ここで

$$\begin{aligned} f(r) &= \sin^2 \left(\frac{\pi}{L} (r - 1/2) \right) \\ &= \frac{1}{2} \left\{ 1 - \frac{1}{2} \left(e^{i\delta(r-1/2)} + e^{-i\delta(r-1/2)} \right) \right\} \end{aligned} \quad (2.6)$$

ここで $\delta = \frac{2\pi}{L}$ という L サイトの系における波数の離散単位を表す。式 (2.5) をフーリエ変換すると

$$H_{SSD} = \frac{1}{2}H - \frac{1}{4}(H_+ + H_-) \quad (2.7)$$

$$H_+ = e^{-i\delta/2} \sum_{k\sigma} (\mu - 2t \cos(k + \delta/2)) c_{k+\delta\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \quad (2.8)$$

$$H_- = H_+^\dagger$$

となる。式 (2.7) には $c_{k+\delta}^\dagger c_k$ という非対角項が含まれるが、フェルミ面をまたぐところで非対角項が 0 になるように、具体的には $\mu = 2t \cos(k + \delta/2)$ とすることでフェルミ面以下まで電子が詰まった PBC 多体基底状態が、 H_{SSD} の固有状態にすることができる。

ここで μ を $\mu = 2t \cos(k + \delta/2)$ から微小に変化させた場合の電子密度の空間分布を図 2.2 に示す。この計算は 100 サイトのスピンのスピンレスタイトバインディング模型の結果である。通常の L サイト有限サイズ計算では電子数は $0, 1, \dots$ と離散的な値を取るため、電子密度は $1/L$ の離散化された値を取る。今の場合電子密度は $1/100 = 0.01$ の整数倍を取る。そのような電子密度を取るようにケミカルポテンシャル μ を調整すると、今の場合 $n_c = 0.17, 0.16$ の状態はケミカルポテンシャル $\mu = -2 \cos(\frac{\pi n_c}{2})$ の条件で実現する。そこから μ を変化させることで、並進対称性な状態は実現しなくなるが、系の端数サイトに余分な電子やホールを押し付けることで $n_c = 0.162, 0.164, 0.166, 0.168$ と連続的に変化する。

このように、 μ を変化させることで、系の中心における電子密度を連続的に変化させることができる。これによって L サイトの系では $1/L$ で離散化されていた物理量をほぼ連続的に変化させることができる。

従来の有限サイズ計算において、チャージギャップの有無やその大きさの見積もりは

$$\Delta E = E(N+2) - E(N) \quad (2.9)$$

の L 依存性を調べ、サイズ外挿を行う必要があった。これはチャージギャップが小さくなるとギャップの有無の判定が非常に厳しくなる。SSD においてケミカルポテンシャル μ の微小変化による n_c が変化分を調べることによってギャップの有無を調べることができる。(図 2.3)

2.2.2 近藤格子模型における SSD

一次元近藤格子模型、特に J が小さい領域では RKKY 相互作用が支配的になる。そのため系の端の局在スピンの影響が系の中心に影響を及ぼす [31]。また、ハーフフィリン

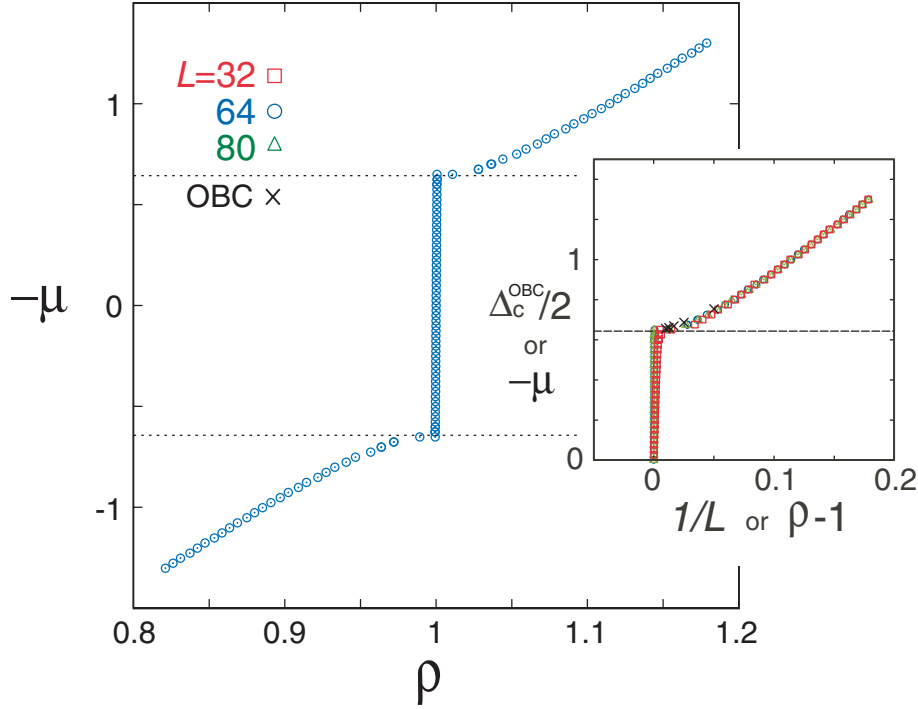


図 2.3 SSD による hubbard 模型のハーフフィリングのギャップの見積もり [30]。
点線は厳密解によるチャージギャップ。

グ以外の電子密度領域では、自由端ではホッピングによるエネルギーの利得がないため、端に電子が存在せず系の中央に電子密度が増大するという問題がある。

図 (2.4) に一次元近藤格子模型での OBC と SSD との比較の結果を示す。OBC では 60 サイトに 伝導電子を 20 個、すなわち伝導電子密度 $n_c = 1/3$ ではあるが、系の中心でそこからずれた値が得られる。一方 SSD では系の端数サイトで電子密度が多かったり少なかったりするが、中心では一様な振幅を持った電子密度の分布が得られる。それに加え 100 サイトに 伝導電子 34 個 という $n_c = 0.34$ となる電子数でも、ケミカルポテンシャル μ を調整することで $n_c = 1/3$ という結果を得ることができる。

ここで、伝導電子密度 n_c と局在スピンの構造の波数 k_S の決定方法について述べる。 k_S については局在スピンの S_z の空間分布に対し $\{a, b, c, d\}$ をフィッティングパラメータとする関数 $a \cos(b(x - c)) + d$ の最小二乗法によるフィッティングを行い、 b を k_S としている。 n_c についても同様のフィッティングを行い、 d を電子密度としている。

図 2.5 に例を示す。図 2.5 は 60 サイトの計算であるが、その結果のうち系の端 5 サイトを取り除いた領域で電子密度 n_c の分布と局在スピンの分布をフィッティングしている。 n_c については、フィッティング関数の平均がおおよそ 0.5015 にたいして、中心 2 サイトの密度が 0.5012 とフィッティングと実際の平均値が生じている。しかし、その誤差は 10^{-4} 程度であり、十分小さいと言える。

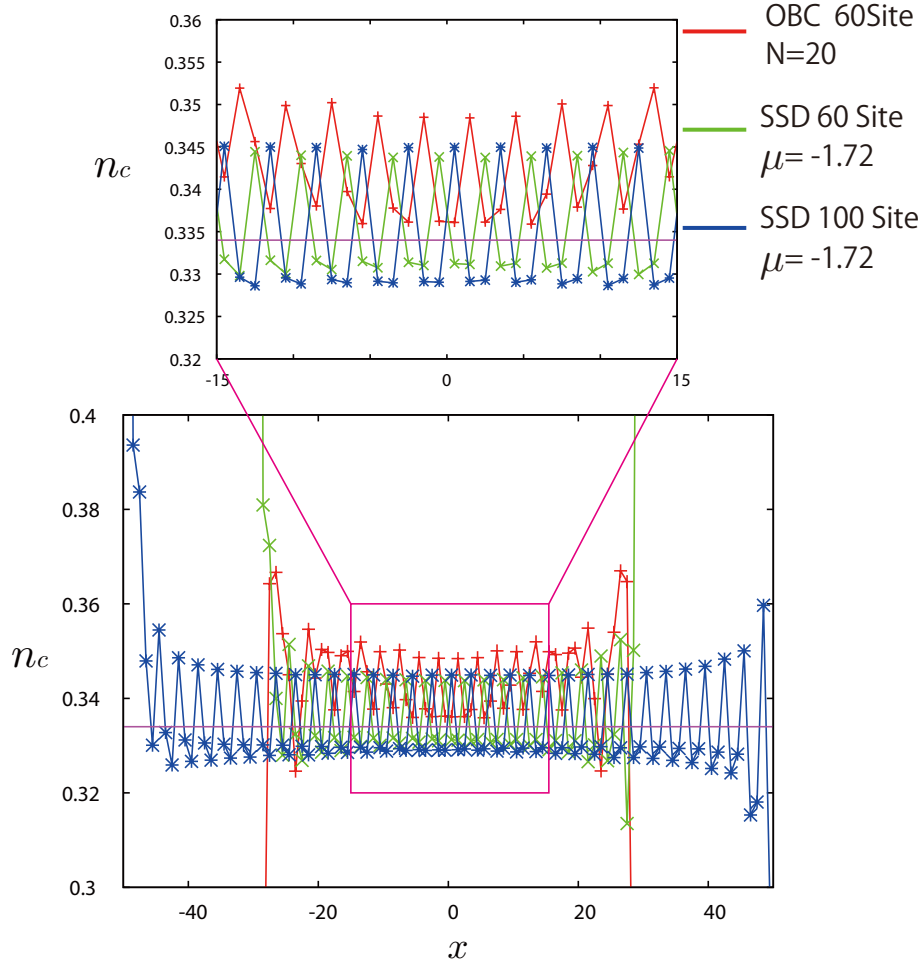


図 2.4 電子密度の境界条件依存性、紫の線は OBC のサイト数と粒子数から本来実現する電子密度 $n_c = 1/3 = 0.333 \dots$ 。

一般に DMRG は基底の数制限した中で元の基底状態を近似する手法である、そのため基底の数を大きくとればその分近似の精度が良くなる。図 2.6 に 局在スピンの分布の DMRG の基底数 m の依存性を示す。基底数を大きくすることによって、局在スピンの振幅は小さくなる。しかし、その波長は基底数数によらず一定でありそこから見積もられる局在スピンの構造の波数 k_S は基底数 200 程度で十分精度よく求められると考えられる。

2.2.3 周期アンダーソン模型における SSD

SSD の利点の一つに チャージギャップの見積もりが容易であることが挙げられる [33, 30]。従来の自由端境界条件の DMRG においてチャージギャップは N 粒子状態のエネルギー $E(N)$ とそこに一粒子加えたときのエネルギー $E(N+1)$ のエネルギーを比較し、そのサイズ依存性を調べる必要があった。しかし、SSD においては μ の変化による

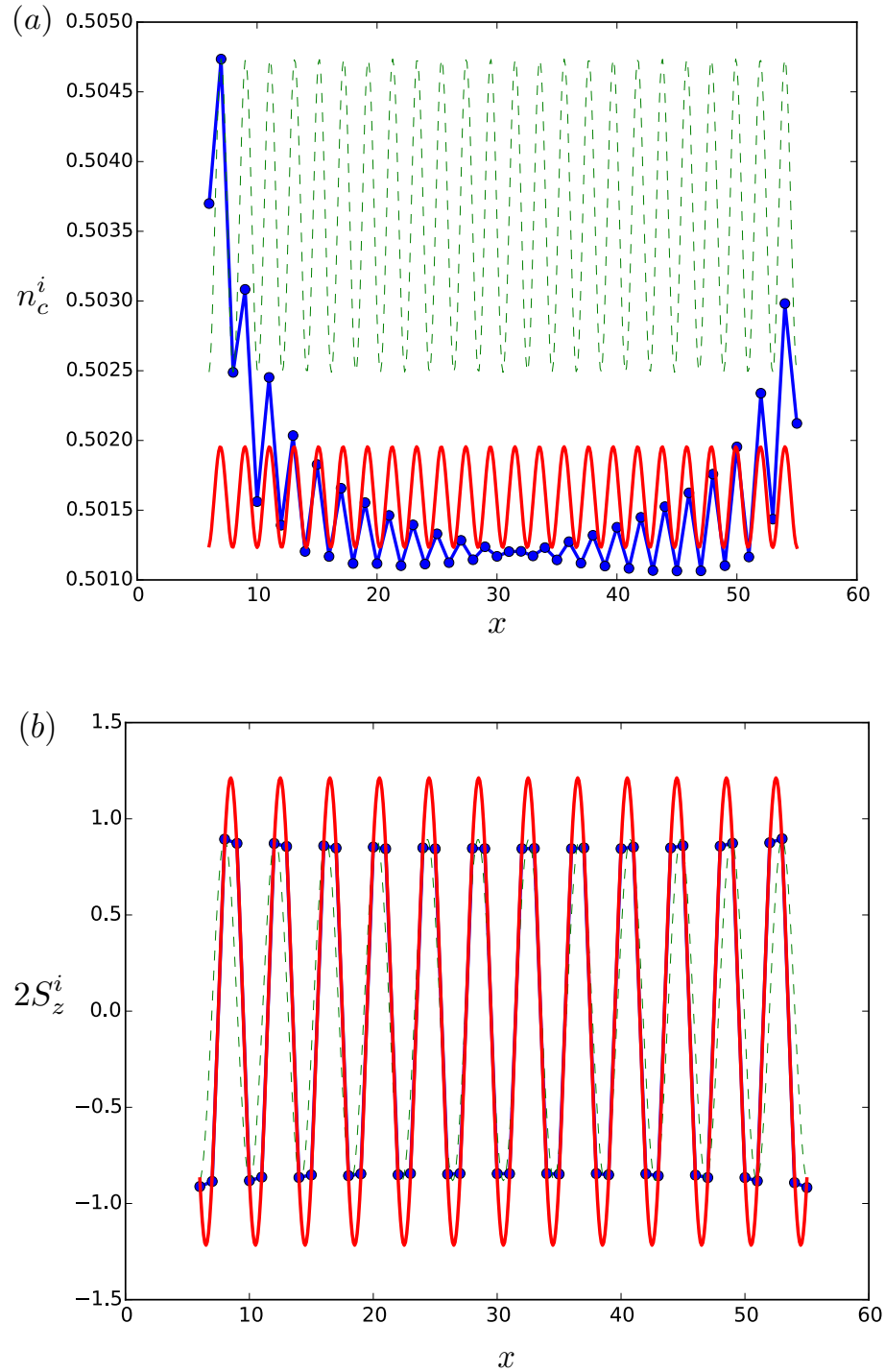


図 2.5 電子密度とスピン構造の波数の見積もりの例。サイト数 $L = 60$, $J = 0.4, \mu = -1.4$ としている。(a) 電子密度 n_c の分布 (b) S_z の分布。青の線が実際の分布、赤い線は最小二乗法によるフィッティングの結果、緑の点線は最小二乗法を行うための試行関数を示す。

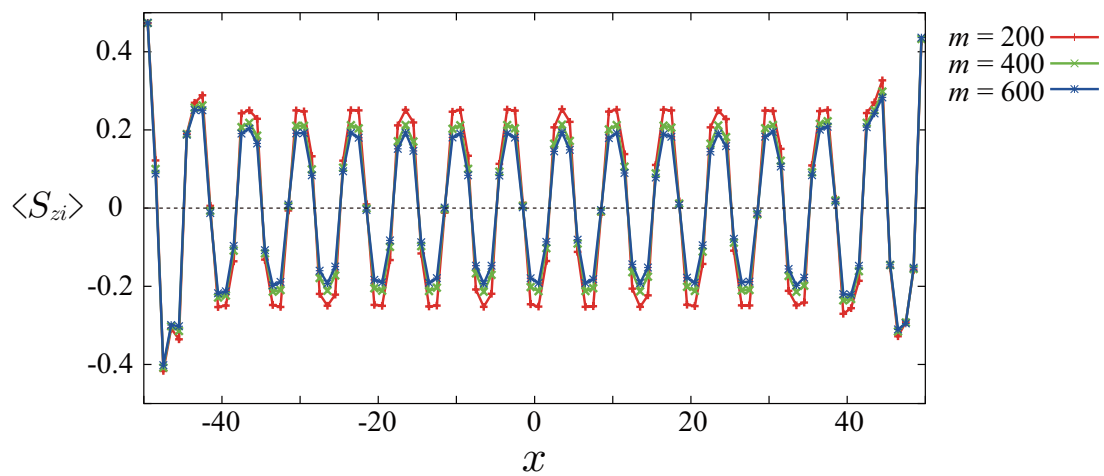


図 2.6 局在スピン分布の基底数 m 依存性。 $L = 100$ で $J = 0.9, n_c = 0.4$

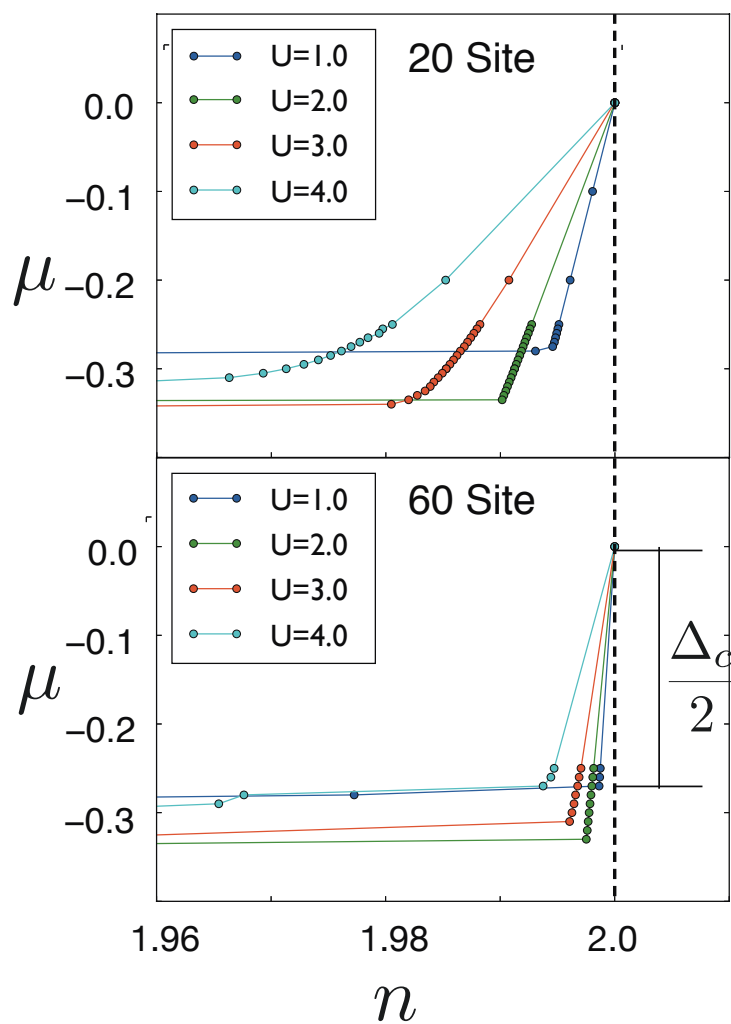


図 2.7 SSD による一次元周期アンダーソン模型のハーフフィリングにおけるチャージギャップの見積もり。

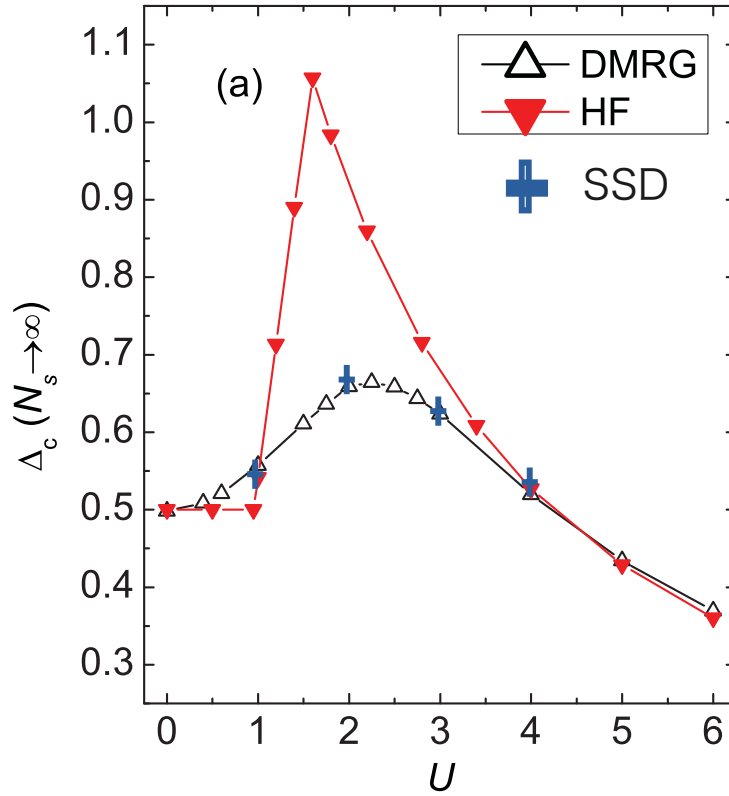


図 2.8 一次元周期アンダーソン模型の $V = 0.75$ のハーフフィリングにおけるチャージギャップの比較、HF はハートリーフォックによる結果、DMRG は [32] によるもの、SSD は本研究 (図 2.7) によるもの。

n_c の変化を調べることで容易にチャージギャップの有無を調べることができる。

図 2.7 にケミカルポテンシャル μ と n_c の関係を示す。その図によって得られたチャージギャップを従来の DMRG で得られたものと比較すると (図 2.8) 弱相関領域から強相関領域のすべての領域で、自由端境界とコンシステントな結果が得られる。

第 3 章

一次元近藤格子模型の低電子密度領域

近藤格子模型の低電子密度領域の基底状態についてまとめる。まず電子密度 n_c 、交換相互作用の大きさ J/t という基底状態を決めるパラメータを幅広い領域で調べ、先行研究で見られたような局在スピンの構造の波数 k_S が J/t の値によって連続的に変化するかどうかを確かめた。

3.1 局在スピンの構造の波数の J 依存性について

自由端境界条件のもとでの DMRG の先行研究によって局在スピンの構造の波数 k_S の大きさが J を増やすことによって連続的に変化する振る舞いが明らかにされた。そこで同様の k_S と J の関係をより多くの n_c について SSD 境界条件のもとで計算することで調べた。その結果と先行研究との比較を図 3.1 に示す。図 3.1 の J が 0 に近いところではすべての n_c において $k_S/\pi = n_c$ となっている。これは小さいフェルミ面描像に基づく局在スピン構造の波数が電子密度によって $k_S = \pi n_c$ となることから、 J が小さい領域では小さなフェルミ面描像が成り立ち、 J をある程度大きくしても k_S は変化しないことを示している。しかしそれぞれの n_c である J から k_S/π が n_c よりも小さくなる振る舞いが見られる。 $n_c = 0.3$ と $n_c = 0.5$ において先行研究との比較を見ても、その振る舞いは一致している。

$n_c = 0.5$ において、先行研究よりも J を細かく見ることで、 $J = 1.4$ から 1.6 にかけて k_S が J によらず一定になるプラトーが見られる。このプラトーは本研究で初めて計算された $n_c = 0.45, 0.42, 0.40, 0.37$ でも確認できる。また $n_c = 0.37$ では $J = 0.9$ から 1.0 の間にもう一段別のプラトーが現れる。また $n_c = 0.30, 0.25, 0.20$ においては、 k_S が J によって連続的に変化する振る舞いが見られるが、プラトーは現れなかった。また

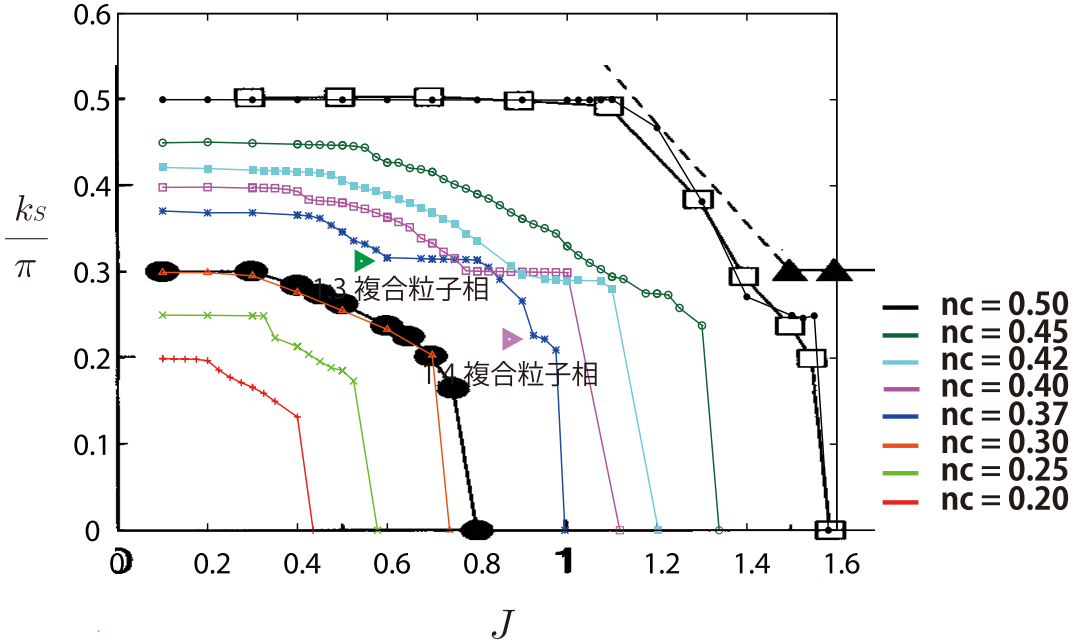


図 3.1 交換相互作用 J 局在スピンの波数 k_S の関係。黒丸と白抜きの方角は先行研究 [21] による。

すべての n_c において、 J が大きい極限では $k_S = 0$ となる。これは 局在スピンの向きが揃う強磁性金属相に対応している。 k_S が連続的に変化する領域と 強磁性の境界では k_S が急激に変化している。この領域では k_S が小さい、すなわち局在スピンの構造の波長が大きくなり今計算している系のサイズ程度になってしまうため k_S が連続的に変化するのか、どこかで飛びが現れるか確認することは難しい。

このプラトーはなぜ現れるのであろうか。まず断っておきたいのはこのプラトーが大きなフェルミ面によるものではないということである。図 1.8 から分かる通り、クォータフィリング以下領域では大きなフェルミ面描像による k_S は小さなフェルミ面描像による k_S よりも大きくなる。したがって 小さなフェルミ面描像による k_S よりも小さい波数においてプラトーが現れたということは、小さなフェルミ面とも大きなフェルミ面とも違う新しいフェルミ面描像をもつ量子相の出現を示唆するものである。そこで、以下ではこのプラトーの詳細を調べる。このプラトーにおいて図 3.1 から見て取れるように、電子密度 $n_c = 0.37, 0.40, 0.42, 0.45, 0.50$ と n_c を大きくするにつれて 局在スピンの構造の波数 k_S の大きさは小さくなっている、そのため k_S は n_c となんらかの関係で結ばれているはずである。その関係式を探るため、各 J において n_c と k_S の関係を調べた。

図 3.1 のうち $n_c = 0.4$ における $J = 0.3, 0.5, 0.7, 0.9$ の伝導電子密度の空間分布を図 3.2 から図 3.5 に、局在スピンの分布を 3.6 から図 3.9 に示す。図 3.1 から $J = 0.3$ は小さなフェルミ面に対応する k_S が実現する領域であり、 $J = 0.5, 0.7$ は k_S が変化する領域であり、 $J = 0.9$ は新しいプラトー領域に対応する。

まず伝導電子密度の空間分布について確認すると、各 J について 5 サイトの周期構造が見られる。また \sin 波のフィッティングから、系の周期は 2.5 サイト周期である。これは $n_c = 0.4$ のときの電荷のフリーデル振動の波数 $k_c = 4k_F = 2\pi n_c$ から予想される波長 $\lambda_c = 2\pi/k_c = 1/n_c = 1/0.4 = 2.5$ に一致する。このように電荷密度に対しては、特異な波数の変化というものは見られない。一方で伝導電子のフリーデル振動の振幅は J によって異なる。 $J = 0.3$ から $J = 0.7$ にかけて振幅は増大しており、 $J = 0.7$ と $J = 0.9$ の間にはほとんど差は見られない。

局在スピンの磁気構造は J ごとに差が見られる。まず図 3.6 に示す $J = 0.3$ において波長が 5 サイトとなる \sin 波でフィッティングできるスピン構造が見られる、この局在スピンの構造の波数 $k_S = 2\pi/5 = 0.4\pi$ は $n_c = 0.4$ における小さなフェルミ面描像の元での $2k_F = \pi n_c = 0.4\pi$ と一致する。 $J = 0.5, 0.7$ と J を大きくするにつれて、局在スピンの振幅は小さくなっていく。またそれぞれの J において局在スピンの構造を \sin でフィッティングでき、ほぼ一つの波数の波からなる周期構造を持っていることがわかる。

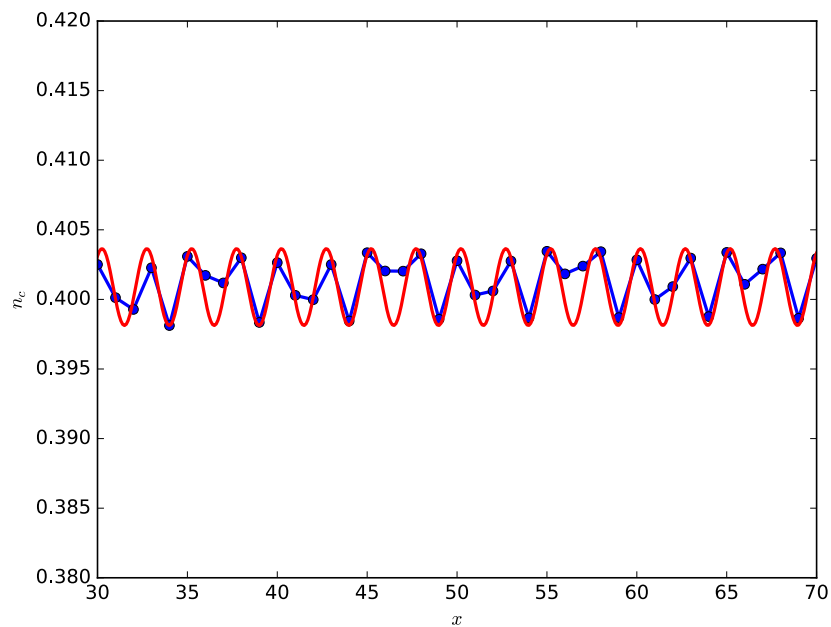


図 3.2 $n_c = 0.4$, $J = 0.3$ における電荷分布。振動の周期は 2.5 サイト周期であり、小さなフェルミ面における $4k_F$ に相当する。

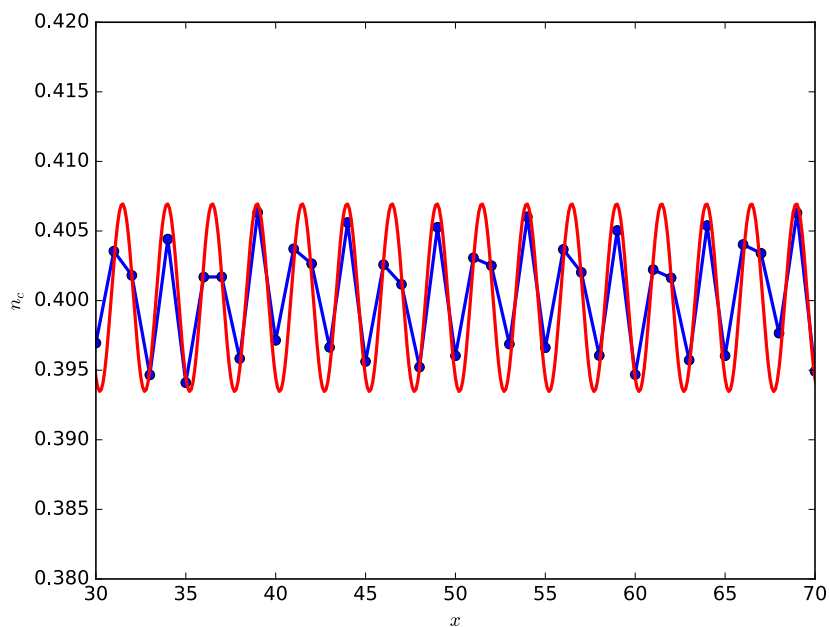


図 3.3 $n_c = 0.4$, $J = 0.5$ における電荷分布。振動の周期は 2.5 サイト周期であり、小さなフェルミ面における $4k_F$ に相当する。

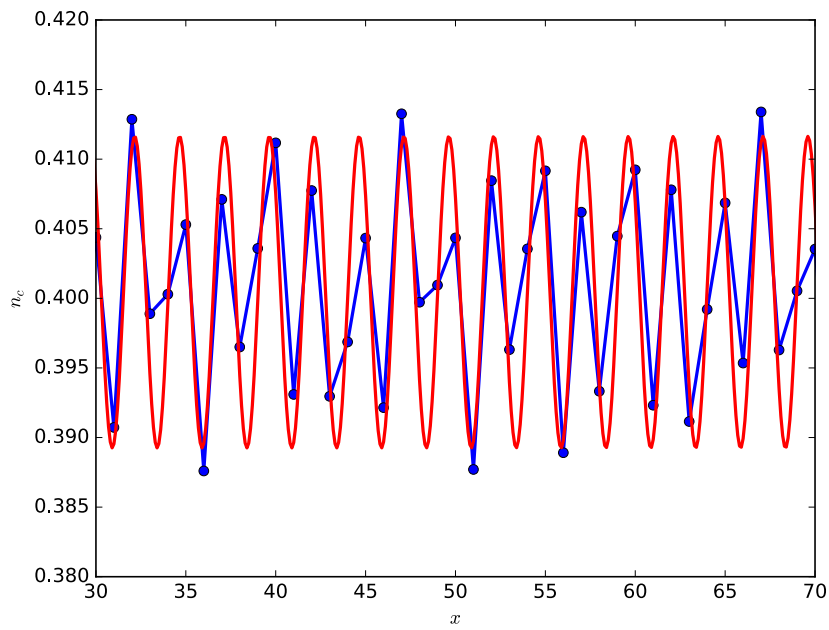


図 3.4 $n_c = 0.4$, $J = 0.7$ における電荷分布。振動の周期は 2.5 サイト周期であり、小さなフェルミ面における $4k_F$ に相当する。

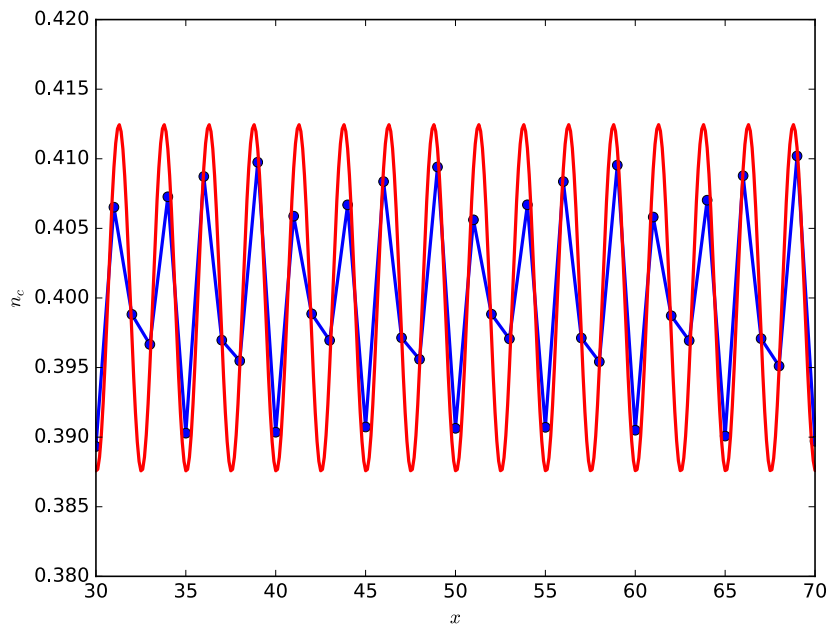


図 3.5 $n_c = 0.4$, $J = 0.9$ における電荷分布。振動の周期は 2.5 サイト周期であり、小さなフェルミ面における $4k_F$ に相当する。

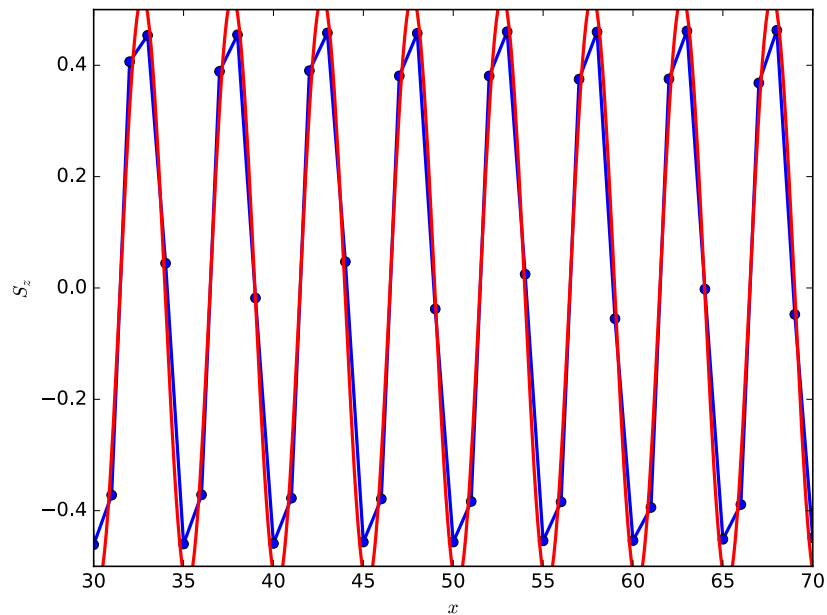


図 3.6 $n_c = 0.4$, $J = 0.3$ における局在スピン分布。振動の周期は 5 サイト周期であり、小さなフェルミ面における $2k_F$ に相当する。

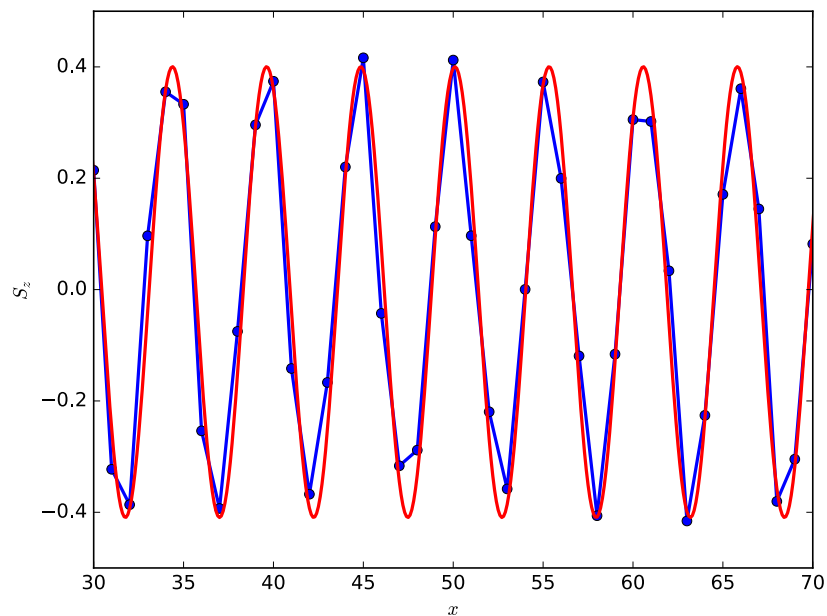


図 3.7 $n_c = 0.4$, $J = 0.5$ における局在スピン分布。振動の周期は $21/4$ サイト周期であり、小さなフェルミ面における $2k_F$ よりも小さい波数となっている。

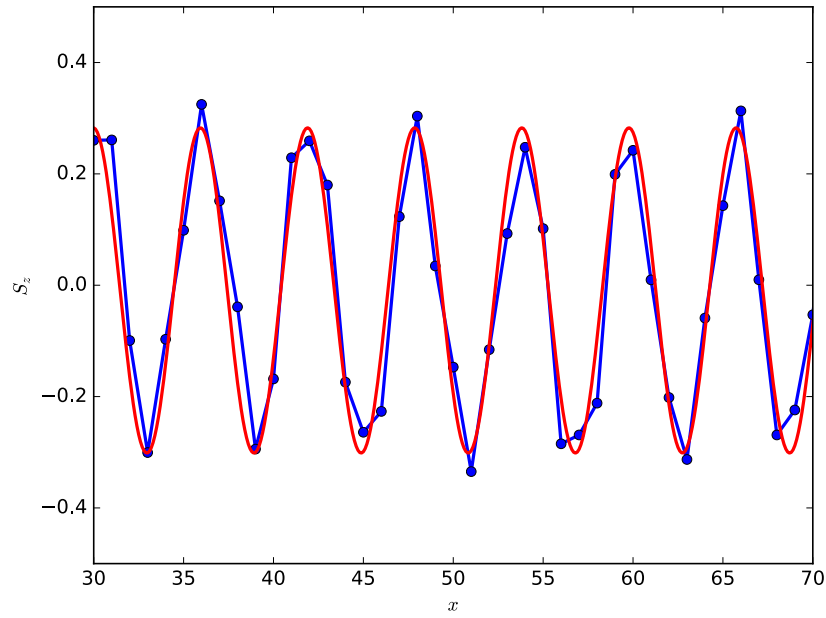


図 3.8 $n_c = 0.4$, $J = 0.7$ における局在スピン分布。振動の周期はほぼ 6 サイト周期であり、小さなフェルミ面における $2k_F$ よりも小さい波数となっている。

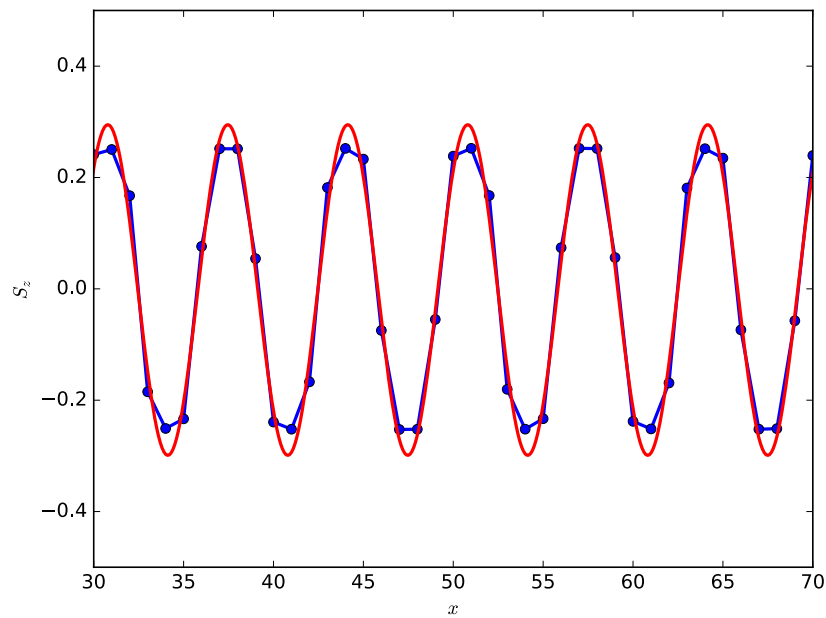


図 3.9 $n_c = 0.4$, $J = 0.9$ における局在スピン分布。振動の周期はほぼ $20/3$ サイト周期であり、小さなフェルミ面における $2k_F$ よりも小さい波数を取り。図 3.1 におけるプラトーに対応している。

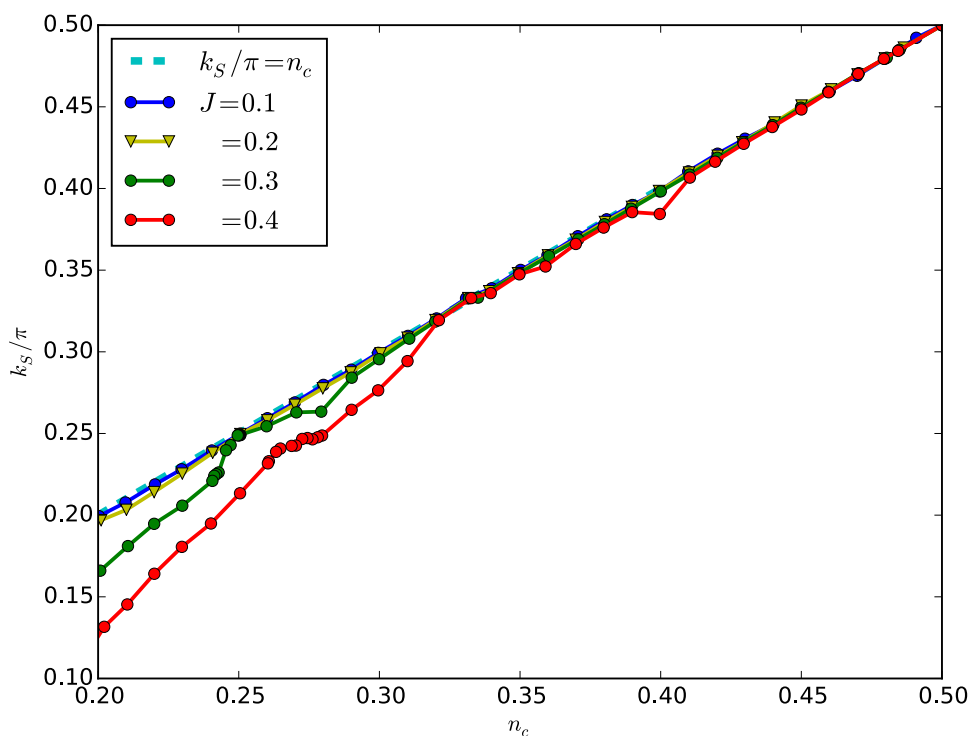


図 3.10 $J = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4$ における伝導電子密度 n_c と局在スピンの構造の波数 k_S の関係。補助線として小さなフェルミ面から予想される n_c と k_S の関係式 $k_S/\pi = n_c$ を示す。

3.2 局在スピンの構造の波数 k_S と電子密度 n_c

図 3.10 に示すように、 $J = 0.1, 0.2$ は $k_S/\pi = n_c$ という小さなフェルミ面に対応する直線に乗る。しかし $J = 0.3$ では $n_c = 0.3$ 以上の領域で小さなフェルミ面に対応する直線に乗るが、 $n_c = 0.25$ から $n_c = 0.3$ の間の領域で小さなフェルミ面の k_S よりも小さな k_S をとる。 $n_c = 0.25$ では再び小さなフェルミ面に対応する k_S となり、 $n_c = 0.25$ よりも低い電子密度の領域では再び k_S が小さなフェルミ面からずれる振る舞いを示す。 $J = 0.4$ では $n_c = 0.3$ 以上の領域で、直線 $k_S/\pi = n_c$ に従うが、 $n_c = 0.3$ 未満の領域ではその直線からずれる。またそのずれ幅は $J = 0.3$ よりも大きいものとなっている。図 3.11 に示すように $J = 0.5$ では小さなフェルミ面からなる直線 $k_S/\pi = n_c$ に従うのは $n_c = 0.33$ の付近のみで、それ以外では小さなフェルミ面からずれた振る舞いを示し、そのずれ幅も $J = 0.4$ よりも大きい。またこれまでの J では k_S は n_c に対して増加関数となる振る舞いを示したのに対し、 $J = 0.5$ では k_S が n_c に対して減少する領域が 2 箇

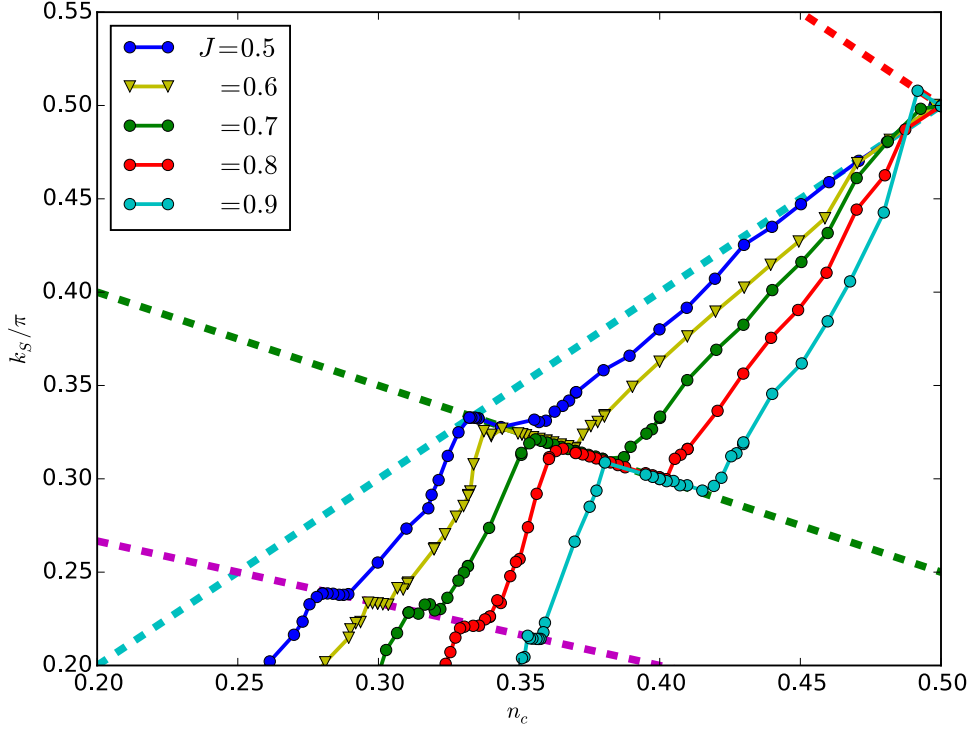


図 3.11 $J = 0.5$ から 0.9 における伝導電子密度 n_c と局在スピンの構造の波数 k_S の関係。補助線として小さなフェルミ面から予想される n_c と k_S の関係式 $k_S/\pi = n_c$ (水色の点線)、大きなフェルミ面から予想される n_c と k_S の関係式 $k_S/\pi = (1 - n_c)$ (赤色の点線)、 $k_S/\pi = (1 - n_c)/2$ (緑色の点線)、 $k_S/\pi = (1 - n_c)/4$ (紫色の点線) を示す。

所存在することが見て取れる。また減少関数となる領域は直線状になっている。 $J = 0.6$ から $J = 0.9$ の領域ではすべての n_c で小さなフェルミ面の直線 $k_S = \pi n_c$ からずれ、 J が大きくなるごとにずれ幅も大きくなっていく。またそれぞれの J で減少関数となる領域が2箇所存在する。これらの減少関数となる領域は図 3.1 のプラトーに対応している。図 3.11 に $k_S/\pi = (1 - n_c)/2$, $(1 - n_c)/3$ という直線を追加して比較している。これらの直線とプラトーに対応している領域の k_S は非常に良い一致を見せる。そのためこれらのプラトーの局在スピンの波数と電子密度の関係式が得られたといえる。

図 3.12 J を大きくすると n_c に対する k_S の傾きが徐々に大きくなっている。それに伴って J が 1.0 からは $J \leq 0.9$ まで見られた $k_S = \pi(1 - n_c)/3$ に乗る領域が見られなくなった。また $k_S = \pi(1 - n_c)/2$ となる領域も J を大きくするに連れて徐々に小さくなっており $J = 1.6$ となる領域ではほとんど見られなくなった。

最後に以上の $J = 0.1$ から $J = 1.6$ までの n_c と k_S の関係をまとめて図 3.13 に示す。グラフに補助線として $k_S/\pi = n_c$, $k_S/\pi = (1 - n_c)/2$, $k_S/\pi = (1 - n_c)/3$ を引い

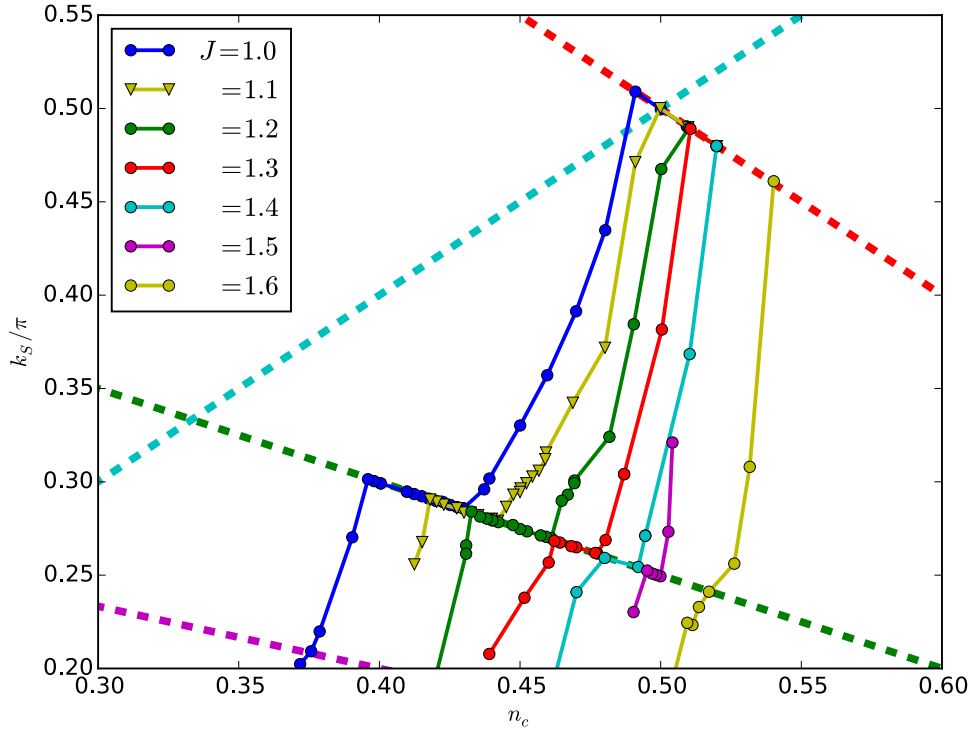


図 3.12 $J = 1.0$ から 1.6 における伝導電子密度 n_c と局在スピンの構造の波数 k_S の関係。補助線として小さなフェルミ面から予想される n_c と k_S の関係式 $k_S/\pi = n_c$ (水色の点線)、大きなフェルミ面から予想される n_c と k_S の関係式 $k_S/\pi = (1 - n_c)$ (赤色の点線)、 $k_S/\pi = (1 - n_c)/2$ (緑色の点線)、 $k_S/\pi = (1 - n_c)/4$ (紫色の点線) を示す。

た。小さいフェルミ面描像が成り立てば $k_S = \pi n_c$ の関係が得られる。その直線に全面的に乗っているのは $J = 0.1$ の赤のグラフと $J = 0.2$ の黄緑のデータである。 $J = 0.5$ から $J = 1.5$ の幅広い J では $k_S/\pi = (1 - n_c)/2$ に乗る領域が存在し、 $J = 0.5$ から $J = 0.9$ において $k_S/\pi = (1 - n_c)/3$ に乗る領域が存在する。

以上のように、図 3.1 でプラトーとなっている領域において局在スピンの構造の波数 k_S は $k_S/\pi = (1 - n_c)/2$, $(1 - n_c)/3$ と表すことができることが分かる。ではなぜこのような表式で表すことができるのだろうか。

大きなフェルミ面描像のもとでは局在スピンの構造の波数は系のホールの密度 $(1 - n_c)$ で記述される。一方で今ホールの密度が $1/2$, $1/3$ となっているということはホール 2 個、あるいは 3 個がそれぞれ塊になっていると考えられる。そこでホールが 2 個塊になる状態を解釈するために 1:3 複合粒子描像について考える。1:3 複合粒子描像は 伝導電子 1 個と局在スピン 3 個が塊となって準粒子として振る舞うという描像である。

大きなフェルミ面描像に対応する $k_S = \pi(1 - n_c)$ 波数はホールの密度によって決まっ

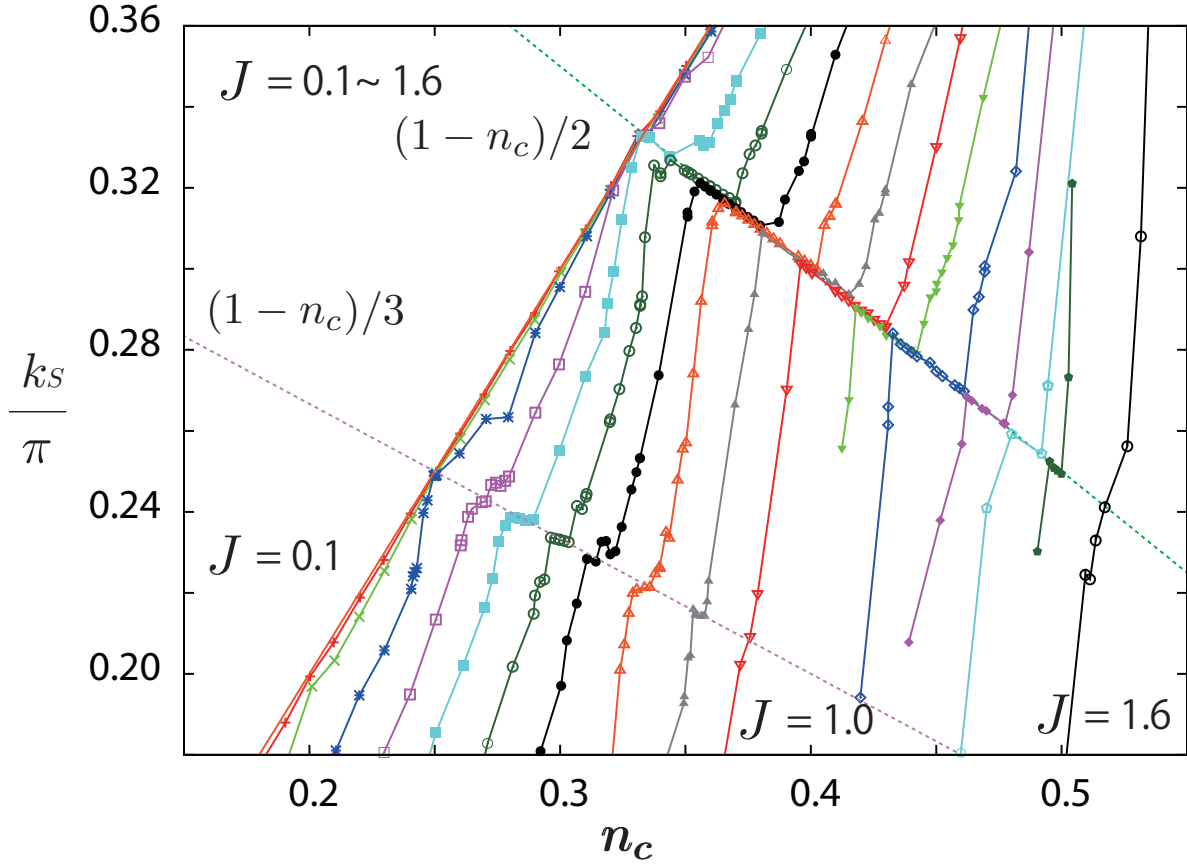


図 3.13 電子密度 n_c と局在スピンの波数の関係、赤い実線は小さなフェルミ面描像から想定されるもの、緑の点線は大きなフェルミ面の傾きと切片は半分になった直線、紫の点線は大きなフェルミ面の傾きと切片が $1/3$ になった直線。 J は 0.1 刻みで変化している。

ているため、 $k_S = \pi(1 - n_c)/2$ はホールの密度が半分になったと状態に対応していると考えることができる。ここで絶縁相における 局在スピンの構造と伝導電子の密度を見ると伝導電子一個に同じ向きの局在スピン 3 個という $1:3$ の構造が見え、その局所構造を単位として見るとその単位の中に ホールが 2 つ入っていることになる。そこで伝導電子と局在電子が $1:3$ の塊になったものを $1:3$ 複合粒子と呼ぶ。 $1:3$ の複合粒子が存在すると、複合粒子がサイトに隙間なく並ぶ 電子密度 $n_c = 1/3$ で絶縁相になること、またそこに伝導電子をドーピングすると、 $1:3$ の複合粒子と 1 サイトのシングレットが混在し、複合粒子の密度と局在スピンの波数が比例することが説明できる。

以上の複合粒子描像で 局在スピンの構造の波数 k_S の伝導電子密度 n_c の関係を説明できる。例として $1:3$ 複合粒子描像におけるスピン構造の波数 $k_S = \pi(1 - n_c)/2$ を説明する。局在スピン構造の波数の密度依存性は伝導電子と局在スピンの $1:3$ の塊となる複合粒子と $1:1$ のシングレットの 2 流体モデルによって説明できる。2 流体モデルとは複合粒子がスピンの反強磁性的に並び、その間にシングレットが挟まっているという描像である。

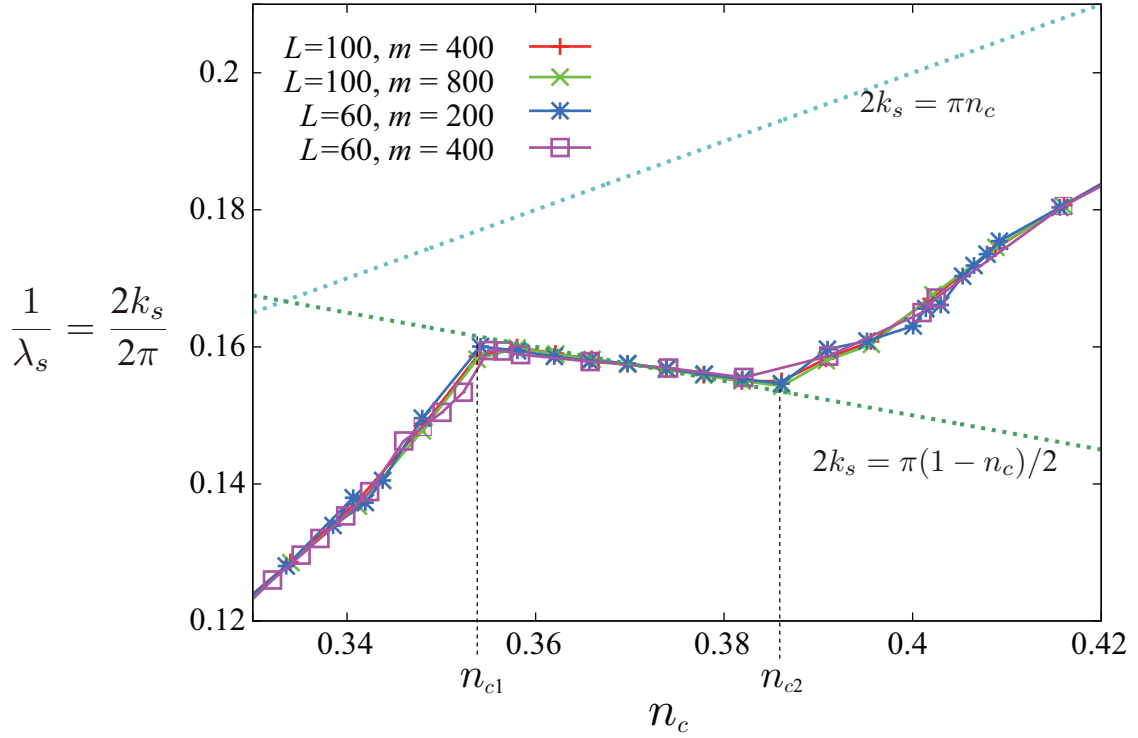


図 3.14 電子密度 n_c と局在スピンの構造の波数 k_s のサイト数と基底数の依存性。

今シングレットでは局在スピンを遮蔽しているため局在スピン構造に現れるのは複合粒子のスピンのみである。したがって複合粒子 2 個で、1 波長分の局在スピンの構造を作る。また系のホールはシングレットには存在せず、複合粒子一粒子に 2 つ含まれていることから、波長 λ_s あたりのホールの数は 4 つであり、局在スピン構造の波長とホールの密度の関係は

$$(1 - n_c) = \frac{4}{\lambda_s} \quad (3.1)$$

となる。ここで波長と波数の関係 $k_s = 2\pi/\lambda_s$ から

$$k_s = \frac{\pi}{2}(1 - n_c) \quad (3.2)$$

が導かれる。同様に、1:4 複合粒子描像からなる 2 流体モデルからは

$$k_s = \frac{\pi}{3}(1 - n_c) \quad (3.3)$$

が導かれる。

実際は J は t 程度であり、1 サイトで完全な局所スピンシングレットを作ることはない。しかし、大きなフェルミ面が成り立つ領域では、フェルミ波数の電子の位相は伝導電子と局在スピンの和に π を掛けたもので与えられるため、1 サイトあたり電子が 2 個あれ

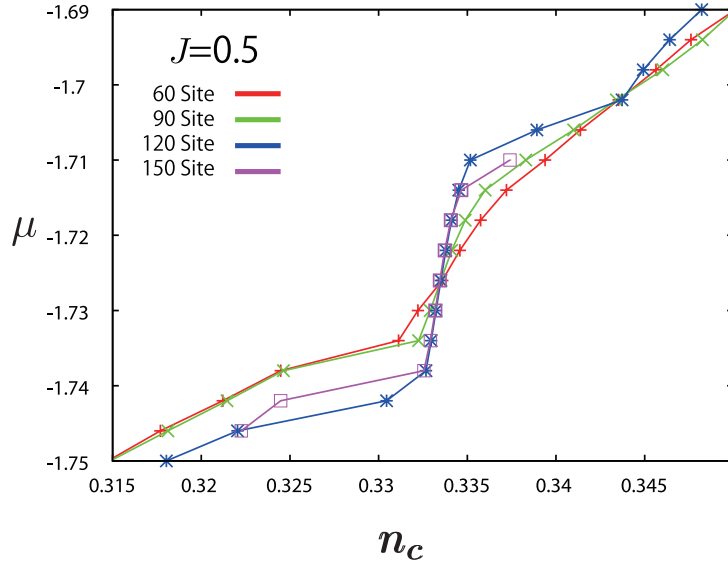


図 3.15 $n_c = 1/3$ 付近における 伝導電子密度 n_c とケミカルポテンシャル μ の関係のサイズ依存性。

ば局在スピンシングレットでなくてもフェルミ波数の伝導電子の位相は 1 サイトあたり 2π だけ変化する。この 2π の位相の変化は元の位相に戻るだけであるから、結局その両側にある局在スピンに作用する伝導電子の位相に変化を与えない。すなわち伝導電子と局在スピンがともに一つずつあるサイトを見捨て局在スピンの構造を考えることは大きなフェルミ面の描像が局所的に成り立つことを前提にしている。

3.3 絶縁相

1:3 複合粒子と 1:1 のシングレットから成る 2 流体モデルにおいて 1:1 のシングレットが消失する占有率 $n_c = 1/3$ では、1:3 複合粒子だけで基底状態が構成される。このとき複合粒子を構成する局在スピン同士は重なることはないため、この複合粒子だけで基底状態が形成されれば、複合粒子は互いに動くことができなくなり、絶縁体としての性質が現れると考えられる。

図 3.15 に伝導電子密度 n_c とケミカルポテンシャル μ の関係を示す。図には系のサイズを $L = 40$ から $L = 150$ まで 30 サイト刻みで大きくしたときの結果を載せているが、その全てで $n_c = 0.333$ 近傍で 電子密度の変化に対するケミカルポテンシャル変化量が周りに比べて大きくなっている。またそのサイズ依存性を見ると、サイズが大きくなるほど傾きが大きくなり、無限サイズの極限を取ると傾きが発散することが見て取れる。また、それぞれのサイズのグラフの線は $n_c = 0.33$ で交わっており、以上を踏まえると $J = 0.5$ の $n_c = 1/3$ においてチャージギャップが存在し、系が絶縁相になることがわ

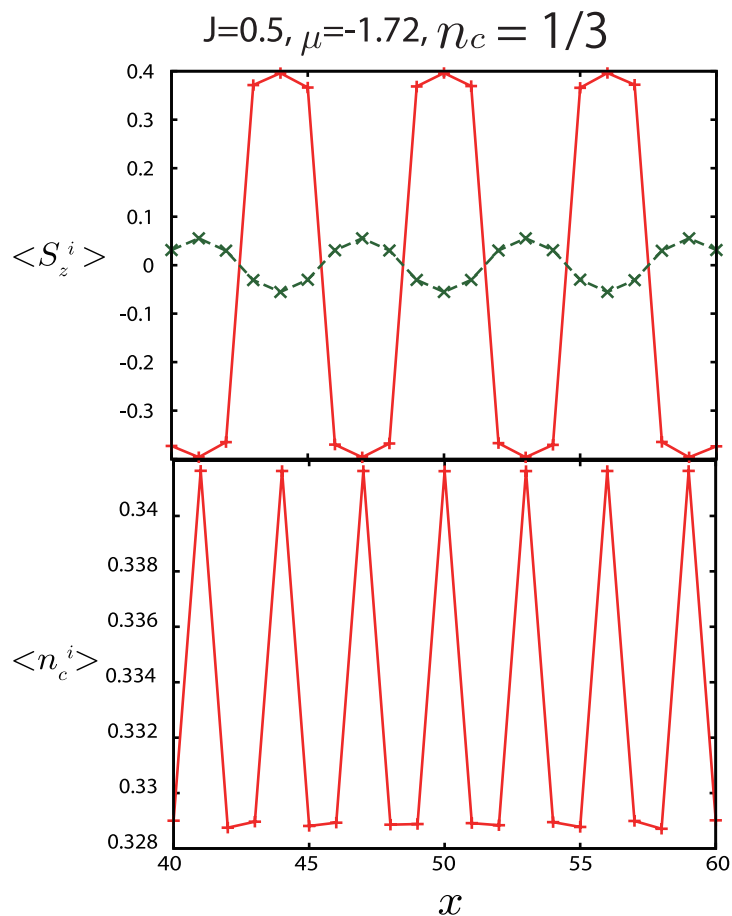


図 3.16 絶縁相における電子状態。上のグラフの赤線は局在スピンの分布を表す、緑線は伝導電子のスピンの分布を表す。

かる。

このときの局在電子のスピンの構造、伝導電子のスピンの構造、及び電子密度の分布を図 3.16 に示すが、局在スピンの構造が上上上下下の 6 サイト周期の構造を持ち、各 3 サイトの中心に伝導電子が高い確率で存在していることがわかる。ここで 同じ $n_c = 1/3$ における 絶縁相でない領域と、絶縁相となる領域の電子状態の比較を行う。図 3.17, 3.18 に絶縁相にならない、 $J = 0.7$ における $n_c = 1/3$ の電子状態を示した。伝導電子密度はほとんど絶縁相と同様の 3 サイト周期をとっているにもかかわらず、局在スピンの構造は sin 波でフィッティングでき、かつ 6 サイトよりも大きな周期構造をとっている。

一方で $J = 0.4, 0.3$ では $J = 0.5$ と同様の伝導電子密度の 3 サイト構造をとり、局在スピンの構造が 6 サイト周期の構造をとる。またその波形も sin 波というよりは Ising 的な方形磁化に近いものとなっており、 $n_c = 1/3$ において、局在スピンの構造の波形が電荷ギャップと密接に関係していることがわかる。

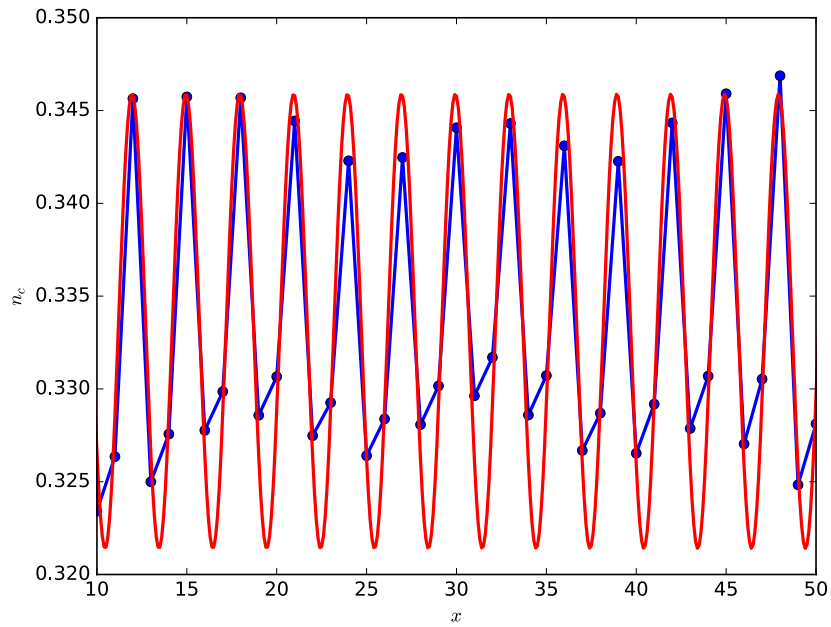


図 3.17 金属相となる $n_c = 1/3, J = 0.7$ における電子密度の分布。その周期は 3 サイトであり、小さなフェルミ面における $4k_F$ に相当する。

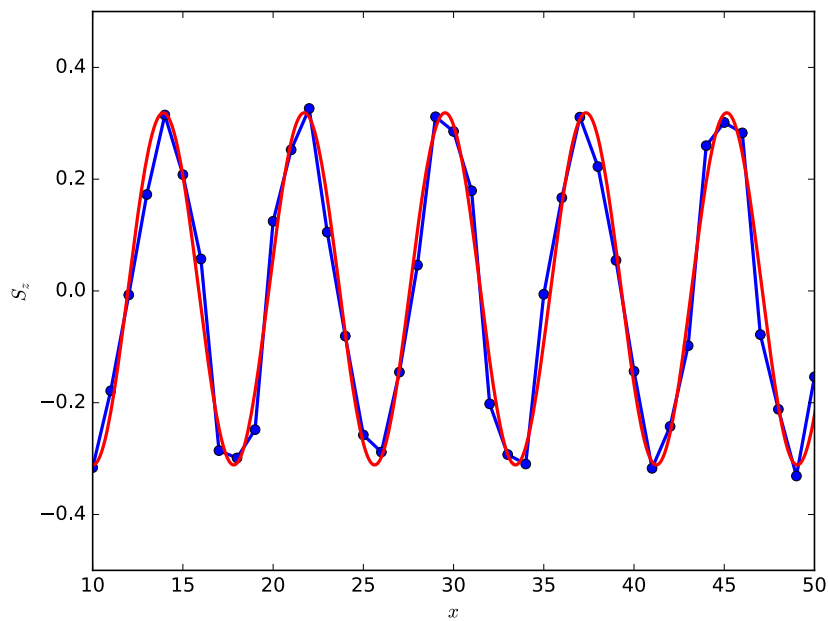


図 3.18 金属相となる $n_c = 1/3, J = 0.7$ における局在スピンの分布。その周期は $23/3$ サイト周期であり、小さなフェルミ面における $2k_F$ よりも小さいものになっている。

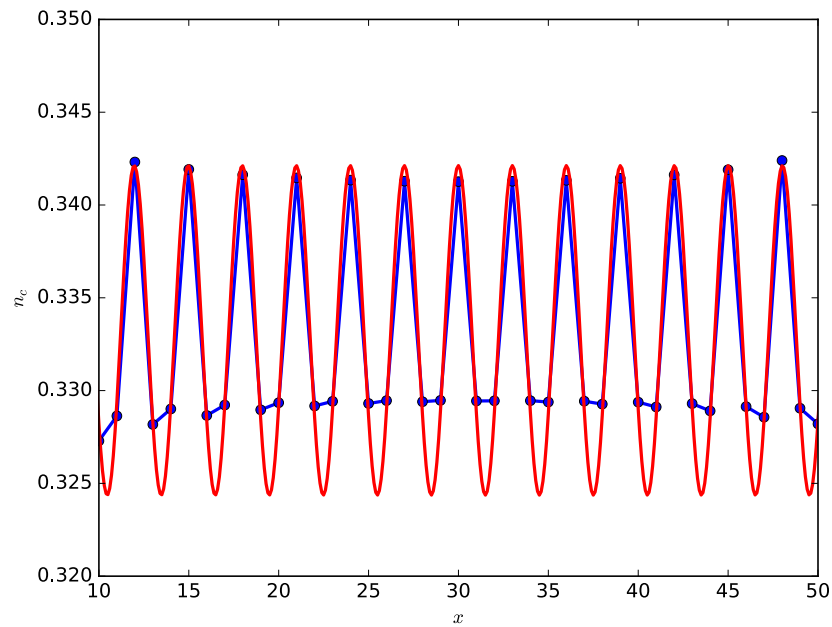


図 3.19 絶縁相となる $n_c = 1/3, J = 0.4$ における電子密度の分布。その周期は 3 サイトであり、小さなフェルミ面における $4k_F$ に相当する。

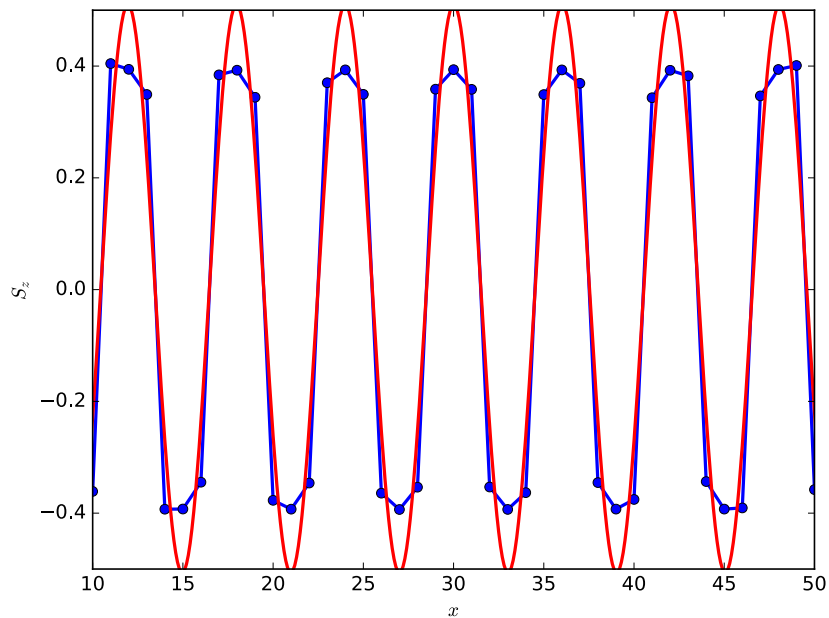


図 3.20 絶縁相となる $n_c = 1/3, J = 0.4$ における電子密度の分布。その周期は 6 サイトであり、小さなフェルミ面における $2k_F$ に相当する。

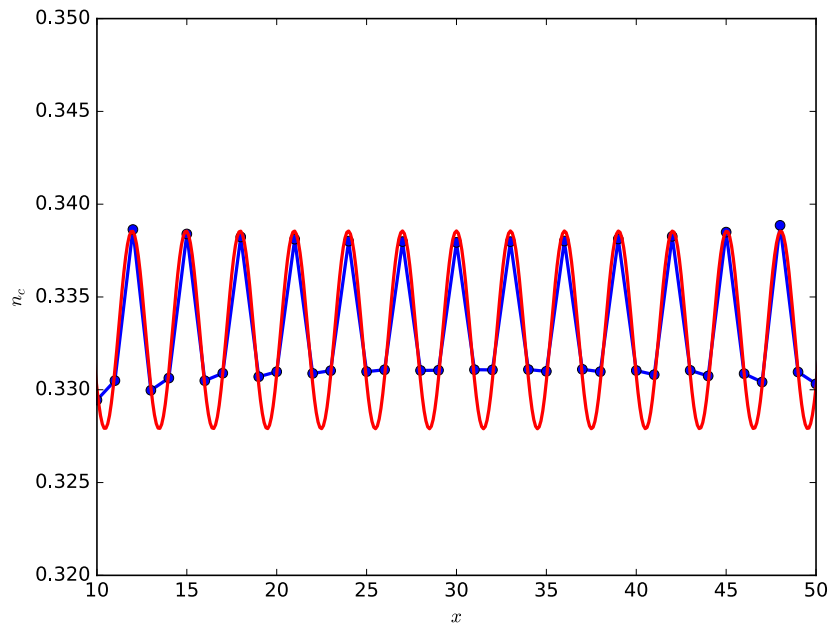


図 3.21 絶縁相となる $n_c = 1/3, J = 0.3$ における電子密度の分布。その周期は 3 サイトであり、小さなフェルミ面における $4k_F$ に相当する。

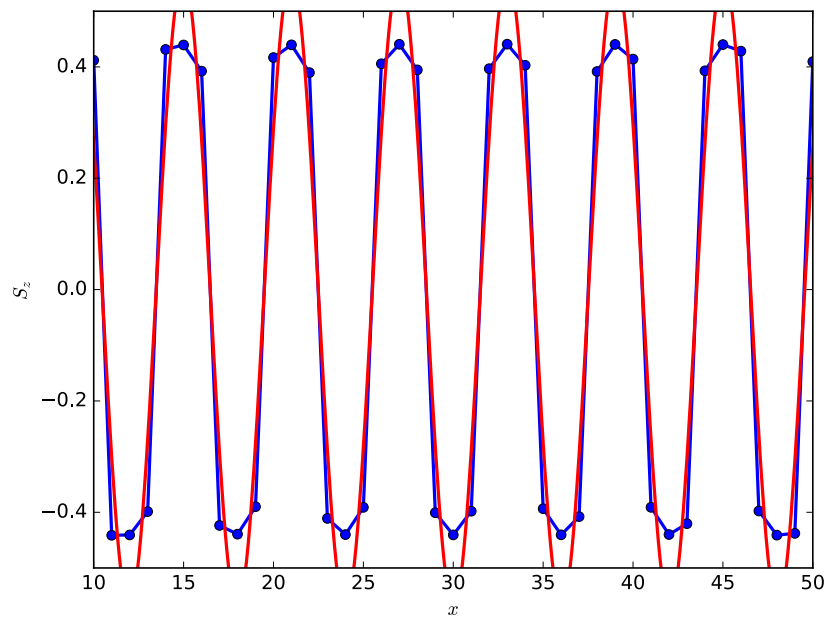


図 3.22 金属相となる $n_c = 1/3, J = 0.3$ における局在スピンの分布。その周期は 6 サイト周期であり、小さなフェルミ面における $2k_F$ に相当する。

3.4 複合粒子描像の直接的な確認

今までの結果で 1:3 複合粒子描像によって $n_c = 1/3$ における絶縁相。そして 局在スピンの構造の波数 k_S の密度依存性を説明できることを確認した。

オーダーパラメータとして、1:3 複合粒子の存在確率を見る。そのためにまず複合粒子の波動関数について考察する。複合粒子は 3 サイトに伝導電子が一個入るものである。その中では強磁性金属相が実現していると考えることができる。近藤格子模型の金属相は伝導電子と局在スピンのシングレットを組みその二次摂動を考えることで局在スピンの揃うというものである。その状態を近似するために 1:3 複合粒子を記述する波動関数としてある r サイトを中心とする 3 サイト内に シングレットと 2 つの同じ向きの局在スピンの存在するような状態

$$|s \uparrow \uparrow\rangle + |s \downarrow \downarrow\rangle + |\uparrow s \uparrow\rangle + |\downarrow s \downarrow\rangle + |\uparrow \uparrow s\rangle + |\downarrow \downarrow s\rangle \quad (3.4)$$

を仮定し、その存在確率をオーダーパラメータとする。

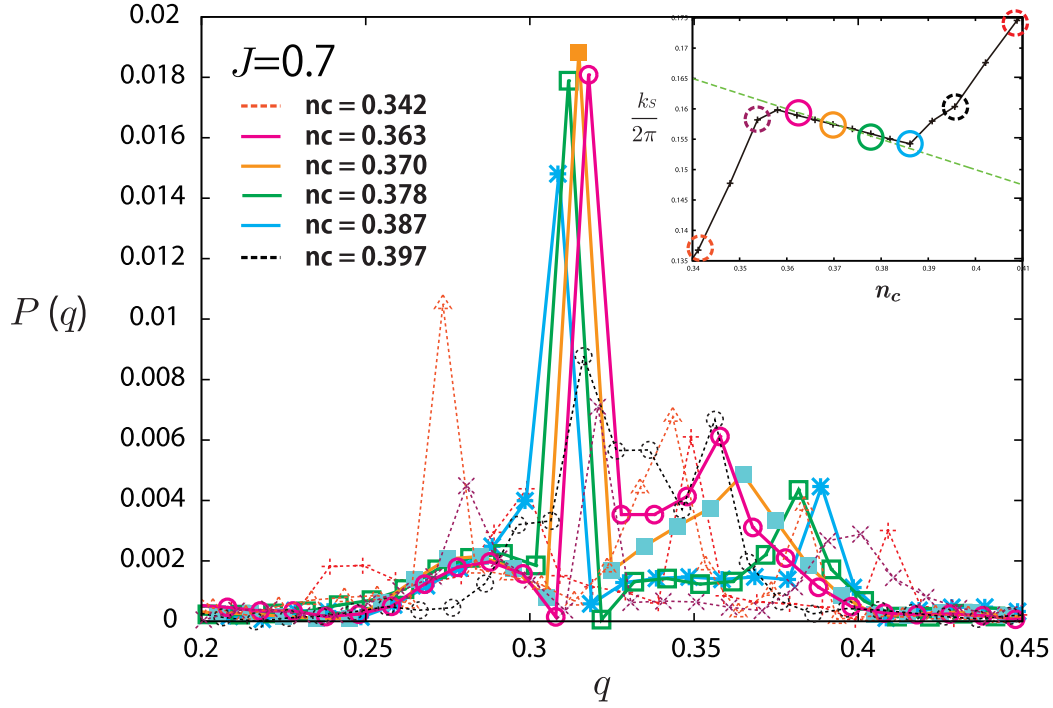
r サイトの周りで 状態 (3.4) が存在する確率を $P(r)$ としその空間分布のフーリエ成分 $P(q)$ を調べたものを 図 3.23 に示す。実線で示したデータは $k_S = \pi(1 - n_c)/2$ に従う領域での $P(q)$ 、点線で示したデータは それ以外の領域の $P(q)$ である。

まず図 3.23 によると $k_S = \pi(1 - n_c)/2$ に従う領域の実線のピークはすべて、それ以外の領域の点線のピークよりも大きな値を取る。特に $n_c = 0.355, 0.363, 0.397$ の 3 つはほぼ同じ k_S を持ち、 $P(q)$ も同じような q でピークを持つが、 $k_S = \pi(1 - n_c)/2$ に従う $n_c = 0.363$ が他の 2 つよりも $P(q)$ のピークの値が 2 倍ほども大きい結果となる。また式 3.4 で表されるような状態は、電子間の間隔が広がる低電子密度領域や、局在スピンの揃いやすくなる局在スピンの構造の波数 k_S が小さい領域で、自然に出やすくなると考えられる。実際に、点線のデータは低密度の結果ほどピークが大きくなっている。しかし、図に示した中で最も低電子密度である $n_c = 0.342$ のピークは $k_S = \pi(1 - n_c)/2$ に従う領域のどの状態のピークよりも小さいものとなっている。

以上のことから、式 (3.4) で記述される 3 サイトの構造をオーダーパラメータとすることで、 $k_S = \pi(1 - n_c)/2$ に従う状態を特徴づけられることがわかった。

同様に $k_S = \pi(1 - n_c)/3$ の直線に乗る領域は 伝導電子と局在電子が 1:4 のかたまりとなる複合粒子で説明できる。

このような複合粒子描像が 1 次元の金属相で成り立つということは、本研究によって初めて示されたものである。

図 3.23 複合粒子の存在確率 $P(r)$ のフーリエ成分。

3.5 古典的な近藤格子模型

これまで説明してきた複合粒子描像が成り立つのは $n_c = 1/3, 1/4$ の絶縁相、そして図 3.1 における k_S がプラトーになる領域であり、他の k_S が J に対して連続的に変化する領域はまだ未解明の状態である。同じことではあるが、図 3.13 において、直線に乗らない領域というのはまだ未解明である。

これらの領域の局在スピンの構造について考察するため、一次元近藤格子模型について、局在スピンを古典的に扱ったモデルについて計算を行う。局在スピンの周期構造を決める RKKY 相互作用は長距離で働く。そのため、古典的な描像が成り立つと考えられるためである。そこで、局在スピンの構造の波数が小さくなる現象が古典的に再現できるかどうかを調べる。一章に示したモンテカルロ法による先行研究からは基底状態としてらせん磁化と noncoplaner 状態が考えられるが、量子系の計算結果から z 方向について sin 波で近似できる局在スピンの状態を得ているため、本研究ではらせん磁化を仮定したハミルトニアン

$$H = \sum_{r\sigma} \left(-tc_{r+1,\sigma}^\dagger c_{r,\sigma} + \frac{J}{8} \left[(c_{r,\uparrow}^\dagger c_{r,\uparrow} - c_{r,\downarrow}^\dagger c_{r,\downarrow}) \cos(k_S r) + 2(c_{r,\uparrow}^\dagger c_{r,\downarrow} + h.c.) \sin(k_S r) \right] \right) \quad (3.5)$$

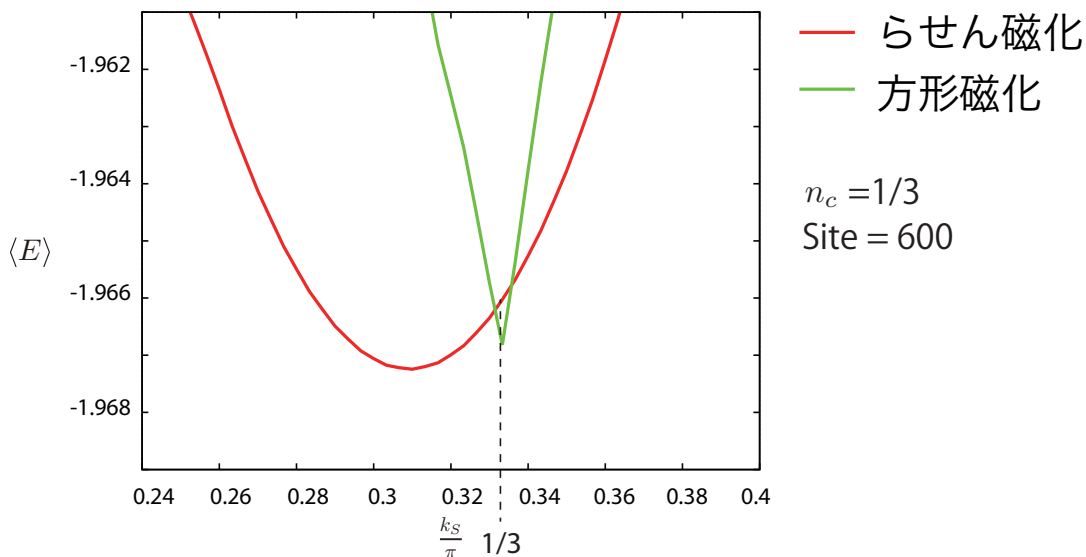


図 3.24 $J = 0.8$ におけるらせん磁化におけるエネルギー (赤線) と方形磁化 によるエネルギー (緑線) の比較。らせん磁化についてはらせんの波数依存性を示している。

を用いる。ここで k_S はらせん磁化の波数であるが、この k_S を変化させて一番エネルギーが低くなる状態を基底状態とする。また量子系の $n_c = 1/3$ における絶縁相の状態から、方形磁化状態ともエネルギーの比較を行った。 $J = 0.8$ 、サイト数 600 として電子密度 $n_c = 1/3$ となるときの図 3.24 に示す。まず基底状態のエネルギーのらせん磁化の波数 k_S 依存性を見ると、らせん磁化においては、小さなフェルミ面描像における $n_c = 1/3$ から予想されるフェルミ波数の 2 倍の局在スピンの構造の波数 $k_S/\pi = 1/3$ はエネルギーの最小値ではなく、 k_S が小さい状態のエネルギーが低くなることがわかった。また方形磁化状態よりもらせん磁化状態のほうがエネルギーが下がることがわかった。

らせん磁化のもとでのタイトバインディング模型を数値的に解いた時のバンド図を 3.25 に示す。らせん磁化のもとではバンドはギャップのあるバンドとギャップのないバンドの 2 本に分かれる。もともとらせん磁化には同じ波数でも右ねじの方向にらせんを組む状態と左ねじの方向にらせんを組む状態の 2 通りが考えられ、電子状態も同様である。ギャップのあるバンドの固有状態については通常の周期ポテンシャル下と同様である。一方ギャップのないバンドの固有状態はらせんと逆向きのカイラリティを持つ。このときらせん磁化が与えるゼーマンエネルギーは常に 0 になる。これによって、フェルミ波数 k_F が固有状態のらせんの向きによって異なるようになる。

もし 2 本のバンドが両方ともギャップをもつ場合、 k_S が小さくなると分裂した 2 本のバンドの高エネルギー側にも電子を詰めることによりエネルギーの利得がなくなるため k_S と $2k_F$ が一致する必要がある。しかし、今の場合分裂しないバンドがあるため分裂するバンドとしないバンドにつめる電子数を変化させることで系のエネルギーを下げるこ

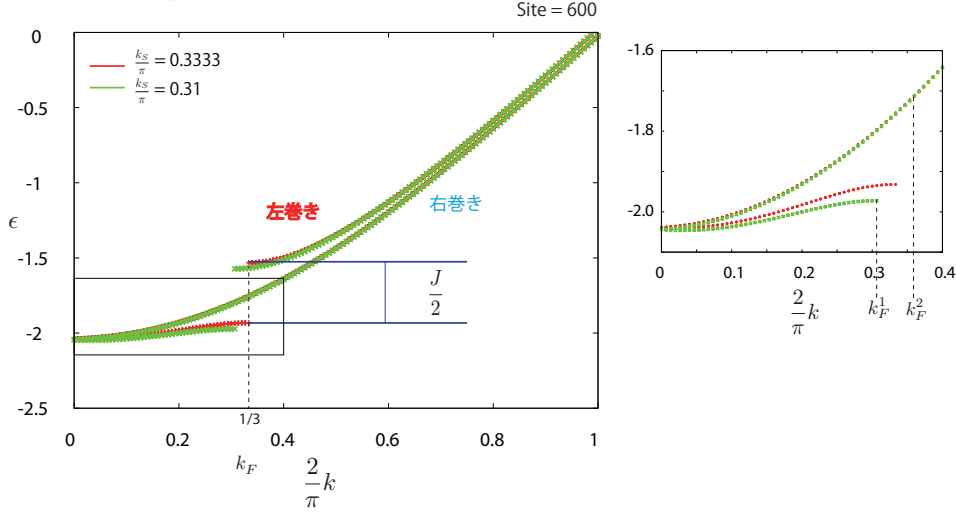


図 3.25 らせん磁場におけるバンド。

とができる。その結果 k_S が $2k_F$ よりも小さくなる状態が基底状態となる。また古典系では伝導電子のみでフェルミ面が決まる小さなフェルミ面描像しか存在しない。よって Luttinger の定理が満たされたまま、局在スピンの構造の波数 k_S が変化できることがわかる。

図 3.26 に 伝導電子密度 n_c とらせん磁化の波数 k_S の関係、及び量子系の計算における伝導電子密度 n_c スピン構造の波数 k_S の関係を示す。これによると 量子系における $J = 0.4$ と古典系における $J = 0.8$ が $n_c = 0.3$ 以下の k_S が連続的に変化する領域で定量的に一致する。また量子系の $J = 0.7$ と古典的の $J = 1.6$ も、 $k_S/\pi = 1 - n_c$ に従う複合粒子金属相以外ではよく一致する。したがって局在スピンの波数 k_S の連続的な変化はらせん磁化によるものであると考えられる。対応する J の違いは Neel 状態とスピンスグレットのエネルギーの違いから来ると考えられる。Neel 状態では $-J/4$ なのに対し、スピンスグレットは $-3J/4$ であるため量子系の J が有効的に大きくなると考えられる。

3.6 常磁性金属相と強磁性金属相の境界

SSD を用いて常磁性金属相と強磁性金属相の相境界を調べた結果を示す。常磁性金属相と強磁性金属相の区別は各 J でケミカルポテンシャル μ ごとに $S_z = 0$ または $S_z = 1/2$ となる非偏極状態 か $S_z = \frac{1}{2}(L - N)$ となるスピン偏極状態のどちらがエネル

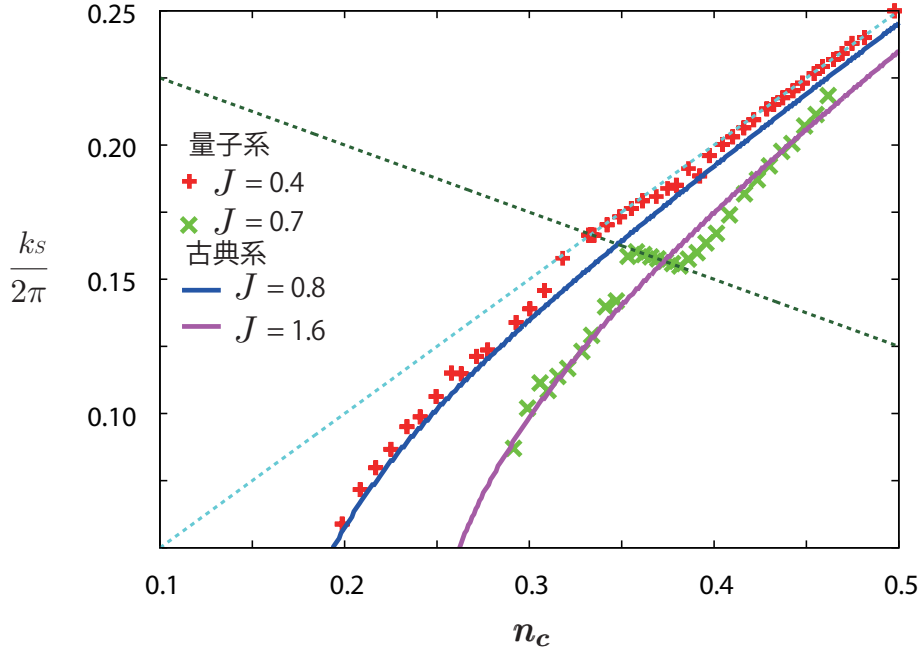


図 3.26 古典的 KL 量子的 KL の局在スピンの構造の波数 k_S の電子密度依存性。

ギーが低いかで判断した。

まず $J = 0.7$ について ケミカルポテンシャル μ ごとに 偏極状態のエネルギー E_{FM} と 非偏極状態のエネルギー E_{PM} を比較するため $E_{PM} - E_{FM}$ プロットした結果を図 3.27 に示す。 $E_{PM} - E_{FM}$ は系が強磁性金属相ならば正の値をとり、常磁性相ならば負の値をとる。このとき、 $E_{PM} - E_{FM}$ が 0 になる点が転移点となる。

ケミカルポテンシャル μ と伝導電子密度 n_c の関係を図 3.28 に示す。まず μ が小さい強磁性金属相の領域では偏極状態も非偏極状態も同じケミカルポテンシャルに対して同じ伝導電子密度を持つ。その時の電子状態を図 3.29, 3.30, 3.31, 3.32 に示す。まず電子密度に関してはその平均値と周期構造の波数は偏極状態と非偏極状態で等しい。しかし非偏極状態の電子密度は振幅が大きくなっている。また局在スピンの構造は偏極状態、非偏極状態、ともに一様な状態となっており、それぞれの全 S_z に対応する値を取る。今、系が強磁性金属相であることから、この 2つの状態は S_z の値は違うものの、同じ全スピン S の状態を表している考えられる。

また図 3.28 からは 強磁性常磁性転移点付近から上のケミカルポテンシャル μ における伝導電子密度 n_c の値が 偏極状態と非偏極状態で異なる値を取る。強磁性相における 転移点付近の電子状態の振るまいの典型例として $J = 0.7$, $\mu = -1.813$ における偏極状態、非偏極状態の電子状態を図 3.33, 3.34, 3.35, 3.36 に示す。電子密度の大きさ、その波数は 先ほどと同様に偏極状態と非偏極状態と同じである。しかし局在スピンの状態は偏極状態では一様な値を取るのに対し、非偏極状態は \sin でフィッティングされるスパイラル

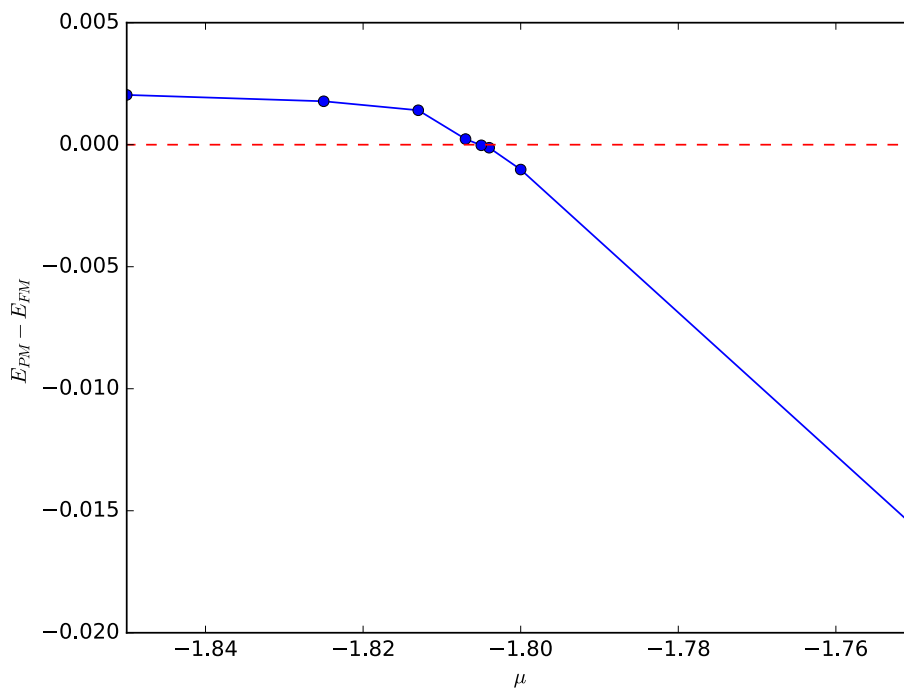


図 3.27 $J = 0.7$ における ケミカルポテンシャルごとの 偏極状態と $S_z = 0$ の状態の 全エネルギーの比較。

状態となっている。このとき実際にエネルギーを比べると偏極状態のほうがエネルギーは低くなっているが、スパイラル状態が準安定状態として出現することが示唆される。

そして、更にケミカルポテンシャルを大きくしていくと 同じケミカルポテンシャルなのにもかかわらず偏極状態と非偏極状態で電子密度が異なる。そのときの電子状態として典型的なものとして、 $\mu = -1.805$ における電子状態を図 3.37, 3.38, 3.39, 3.40 に示す。偏極状態と非偏局状態では電子密度が異なり、局在スピンの構造も一様な状態とらせん磁化のもので異なっている。

最後に強磁性常磁性転移における電荷圧縮率の発散について触れる。図 3.28 に、はケミカルポテンシャルと伝導電子密度 n_c の関係として偏極状態によるものと非偏局状態による 2 本のグラフを載せている。しかし、両者のエネルギーを比較すると実際の μ と n_c の関係は赤線で示したように、強磁性常磁性転点で急激に変化する。これは強磁性相において伝導電子のバンドがスプリットしており、ケミカルポテンシャルが上のバンドの底のエネルギーに等しくなったときに系が常磁性に転移し、そのときエネルギーの状態密度が発散していることから理解される。以上のような常磁性強磁性転移付近の電荷感受率の振る舞いは J の大きさによらず現れる。各 J における 伝導電子密度とケミカルポテンシャルの振る舞いを図 3.41 に示す。

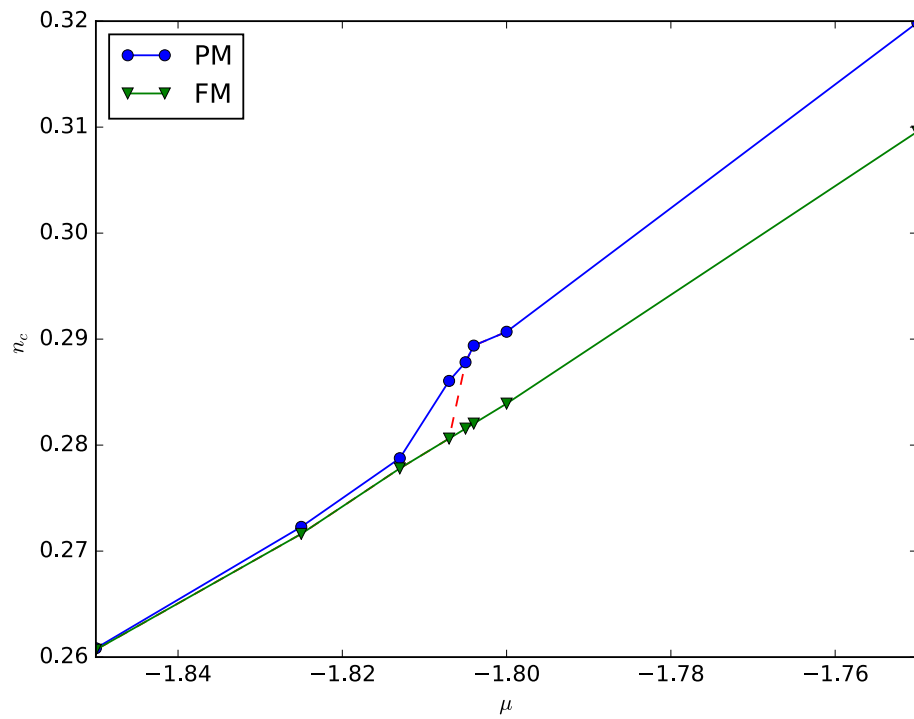


図 3.28 $J = 0.7$ における常磁性強磁性転移付近のケミカルポテンシャルごとの 偏極状態 (FM) と非偏極状態 (PM) の伝導電子密度 n_c 。赤い点線で実際のケミカルポテンシャルと伝導電子密度の関係を示す。

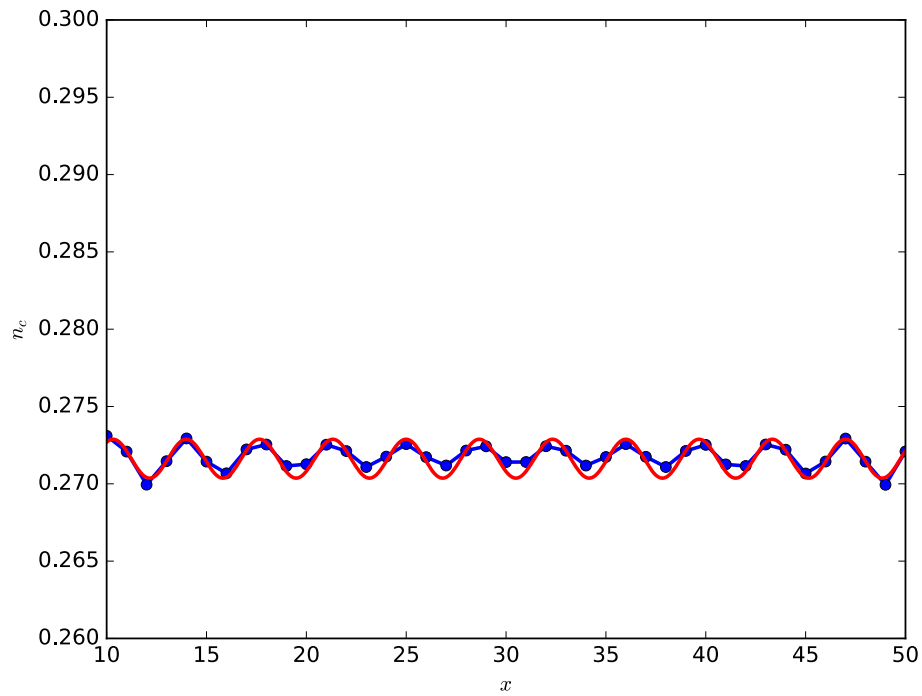


図 3.29 強磁性相に対応する $J = 0.7$, $\mu = -1.825$ の偏極状態 における伝導電子密度の分布。その平均値はおよそ 0.272 であり非偏極状態とほぼ等しい。またその周期は $11/3$ サイトであり、小さなフェルミ面に対応する $4k_F$ に等しい。

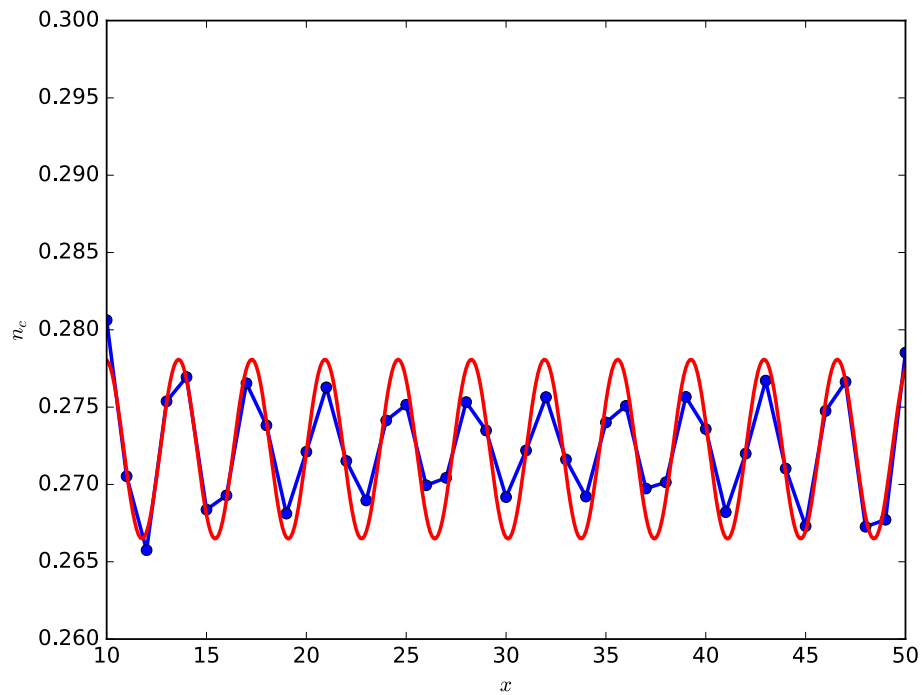


図 3.30 強磁性相に対応する $J = 0.7$, $\mu = -1.825$ の非偏極状態 における伝導電子分布。その平均値はおよそ 0.272 であり偏極状態とほぼ等しい。またその周期は $11/3$ サイトであり、小さなフェルミ面に対応する $4k_F$ に等しい。

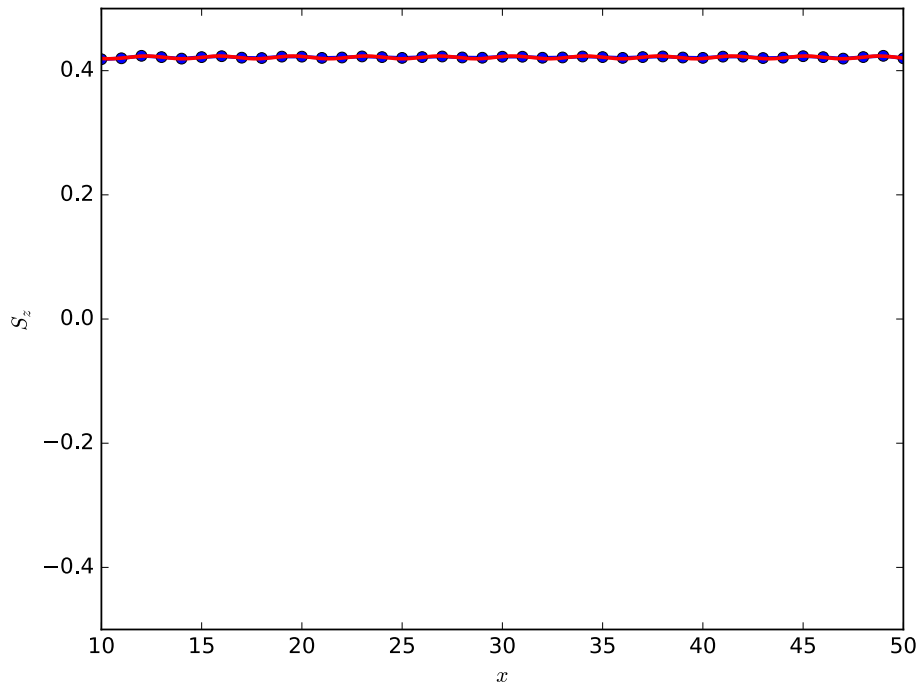


図 3.31 強磁性相に対応する $J = 0.7$, $\mu = -1.825$ の偏極状態 における局在スピン分布。ほぼ一様な分布となっている。

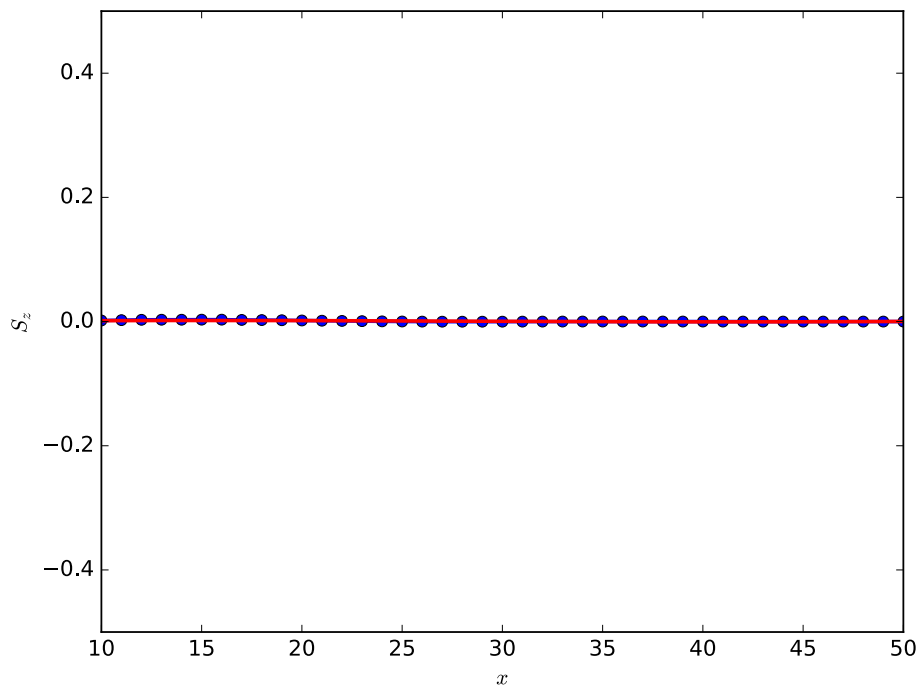


図 3.32 強磁性相に対応する $J = 0.7$, $\mu = -1.825$ の非偏極状態 における局在スピン分布。ほぼ一様な分布となっており、 xy 方向に磁化を持っていると考えられる。

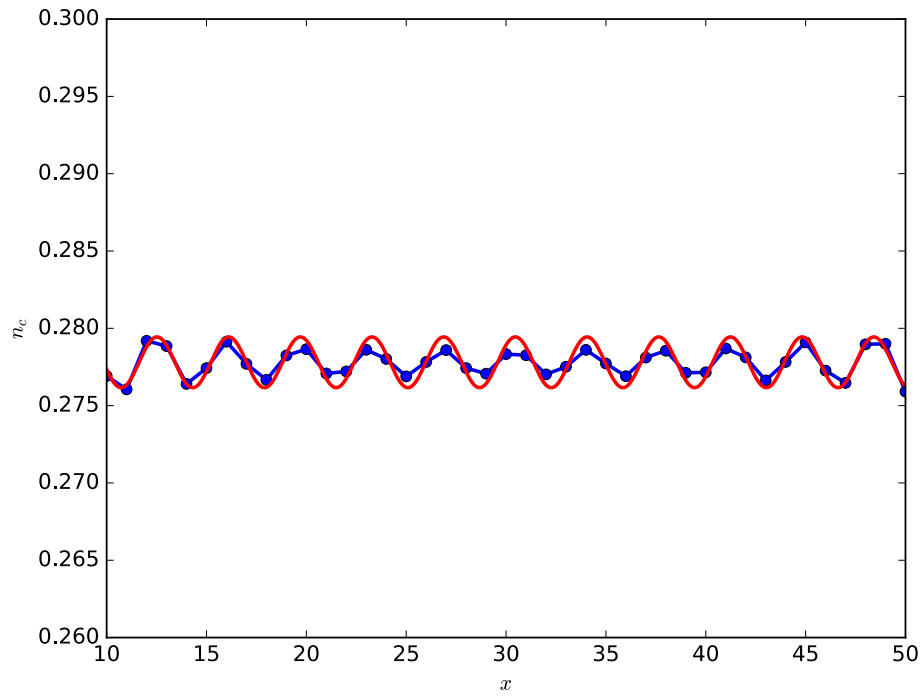


図 3.33 強磁性相に対応する $J = 0.7$, $\mu = -1.813$ の偏極状態 における伝導電子分布。平均値はおよそ 0.2775 程度で非偏極状態とほぼ同じ値を持つ。

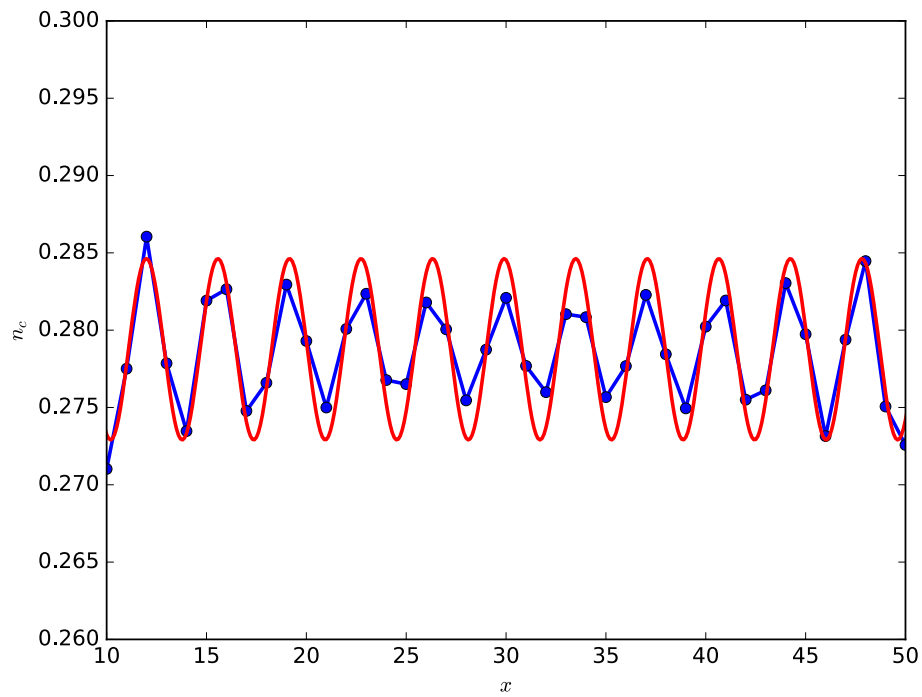


図 3.34 強磁性相に対応する $J = 0.7$, $\mu = -1.813$ の非偏極状態 における伝導電子分布。平均値はおよそ 0.2775 程度で偏極状態とほぼ同じ値を持つ。

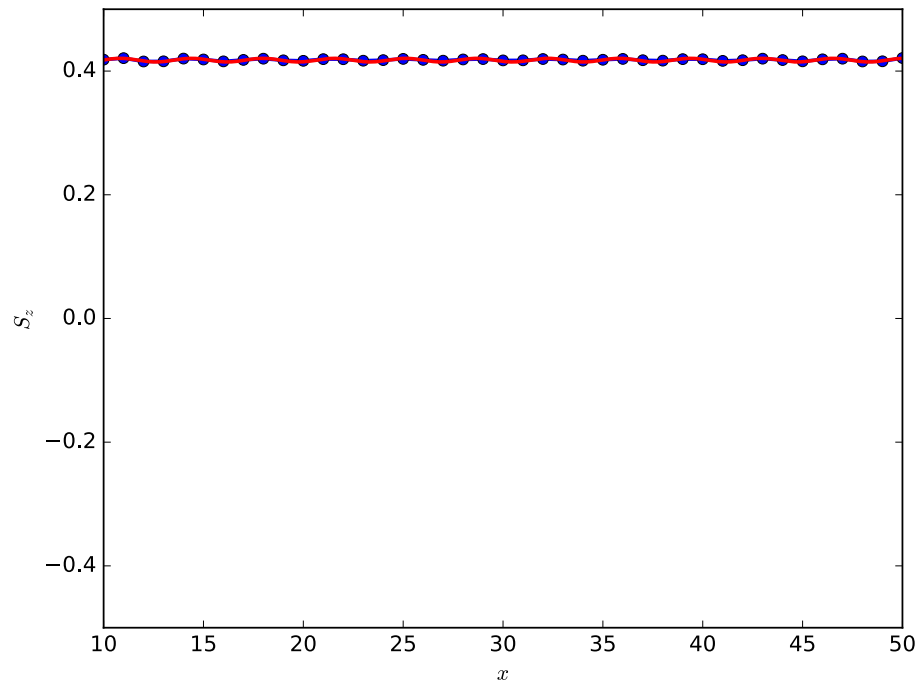


図 3.35 強磁性相に対応する $J = 0.7$, $\mu = -1.813$ の偏極状態 における局在スピン分布。ほぼ一様に偏極している。

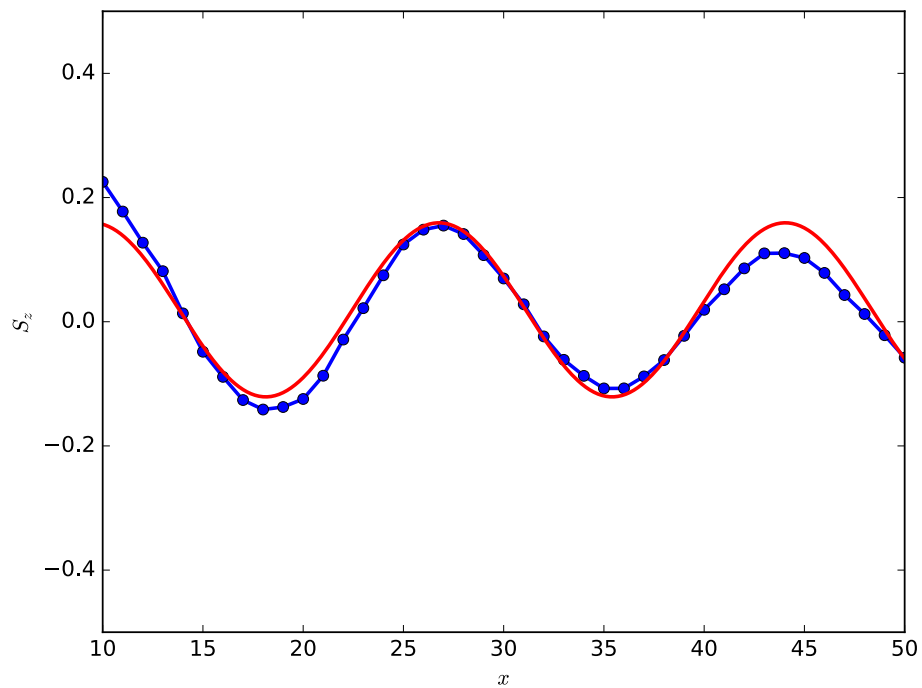


図 3.36 強磁性相に対応する $J = 0.7$, $\mu = -1.813$ の非偏極状態 における局在スピン分布。およそ 17 サイトの周期を持つ。

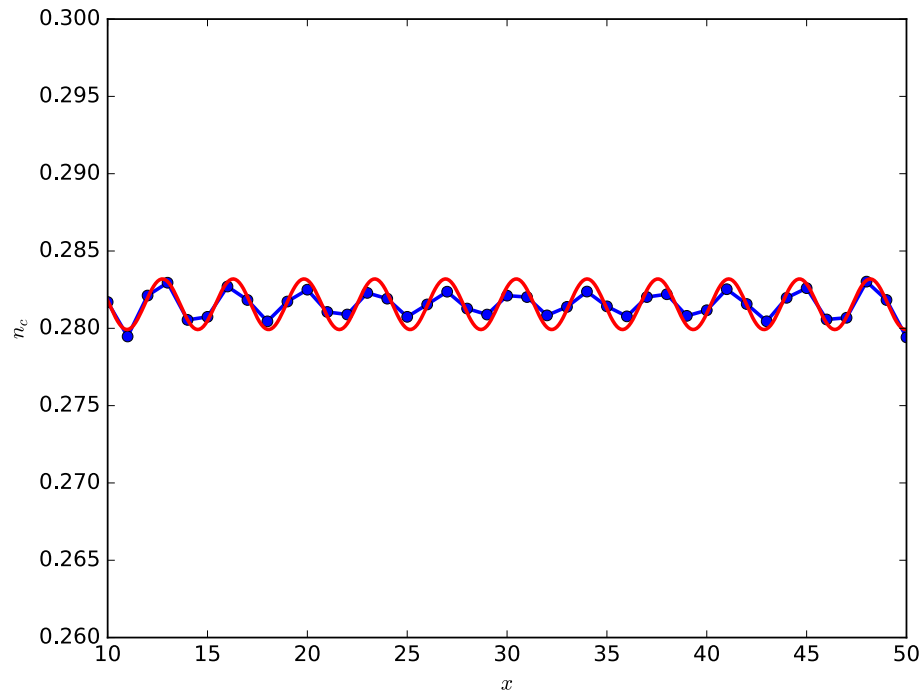


図 3.37 常磁性金相に対応する $J = 0.7$, $\mu = -1.805$ の偏極状態 における伝導電子分布。その平均値は 0.282 程度で非偏極状態よりも小さい値をとる。

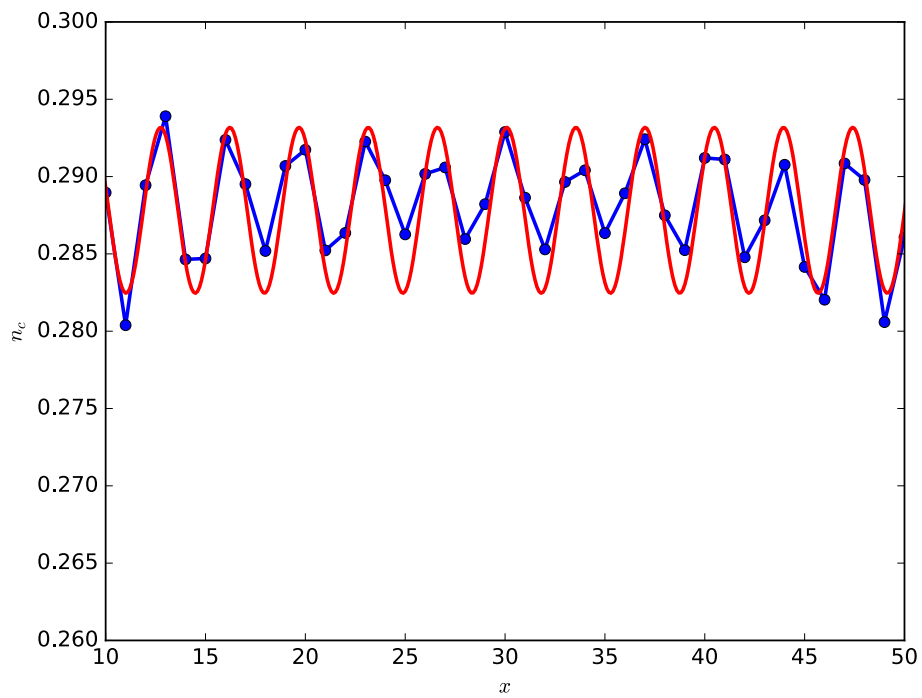


図 3.38 常磁性金属相に対応する $J = 0.7$, $\mu = -1.805$ の非偏極状態 における伝導電子分布。その平均値は 0.288 程度で偏極状態よりも大きな値をとる。

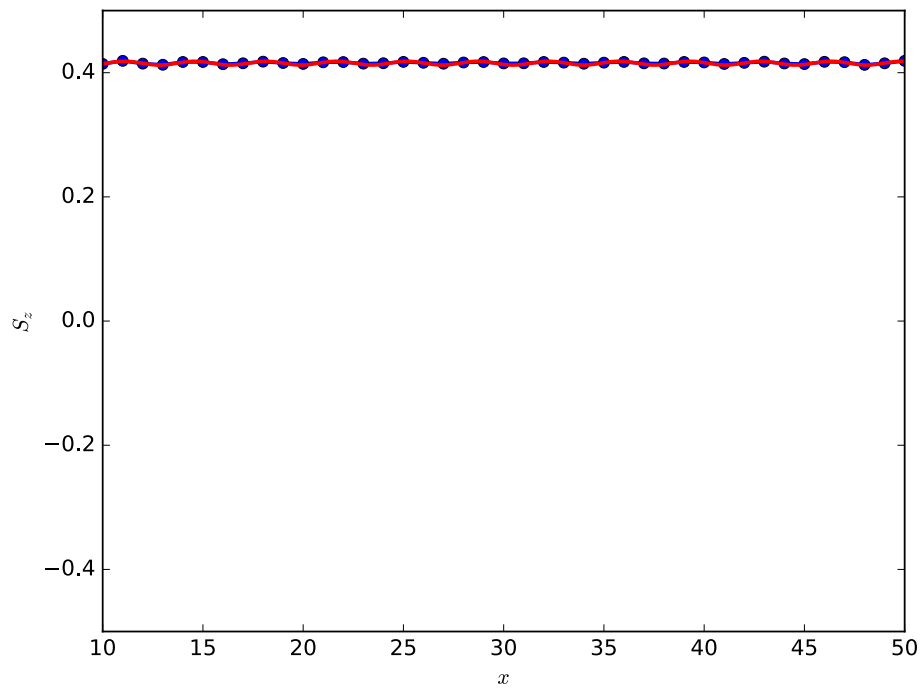


図 3.39 常磁性金属相に対応する $J = 0.7$, $\mu = -1.805$ の偏極状態 における局在スピン分布。ほぼ一様に偏極している。

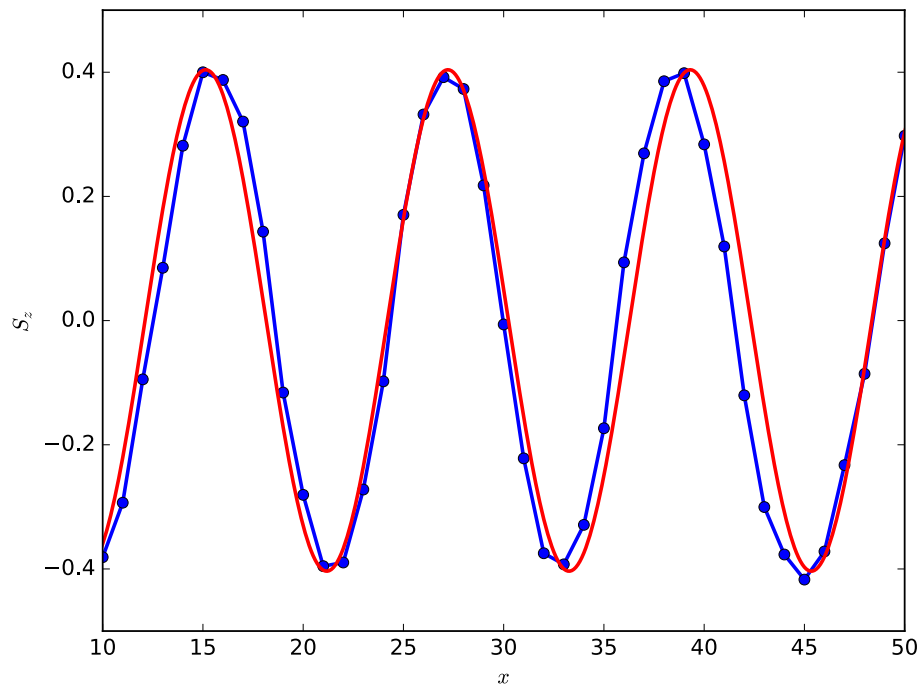


図 3.40 常磁性金属相に対応する $J = 0.7$, $\mu = -1.805$ の非偏極状態 における局在スピン分布。およそ 12 サイトの周期を持つ。

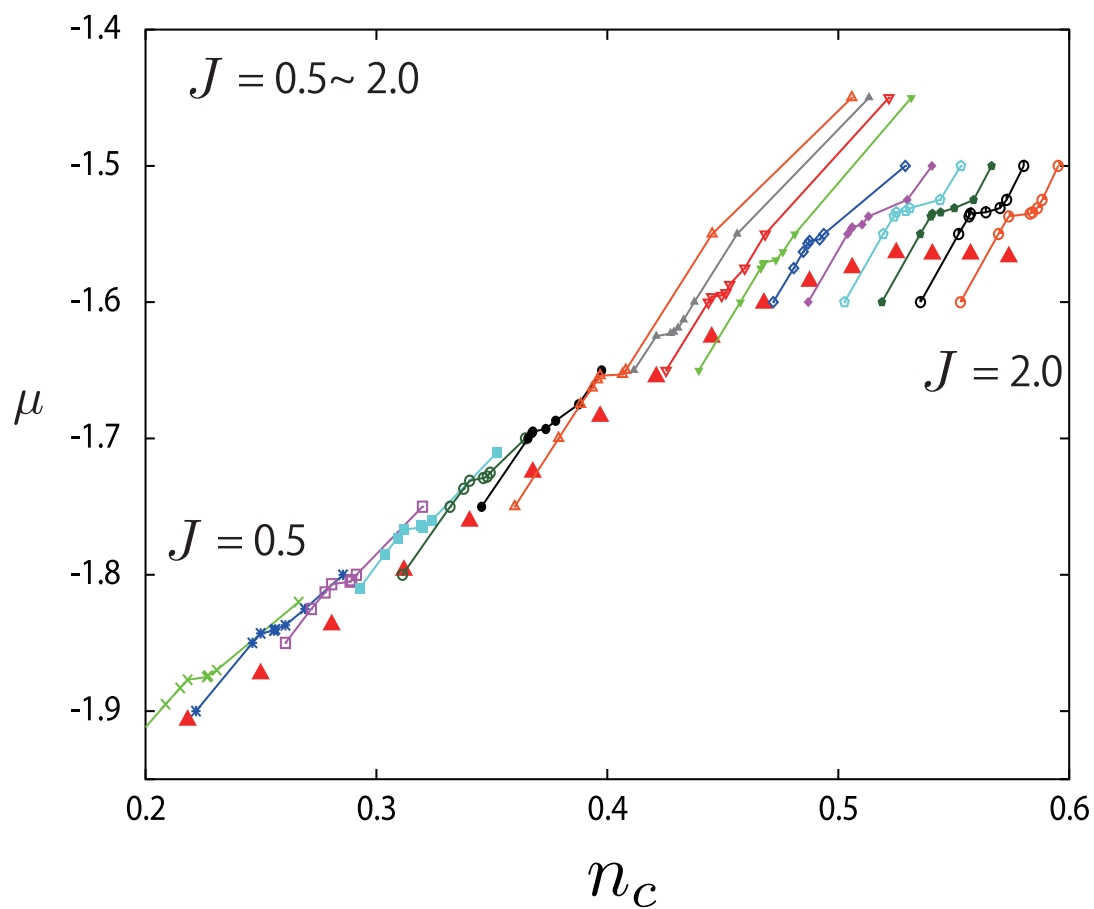


図 3.41 各 J ごとの常磁性と強磁性相の転移点周りの電子密度 n_c とケミカルポテンシャル μ の関係。転移点の密度を赤い三角で表している。

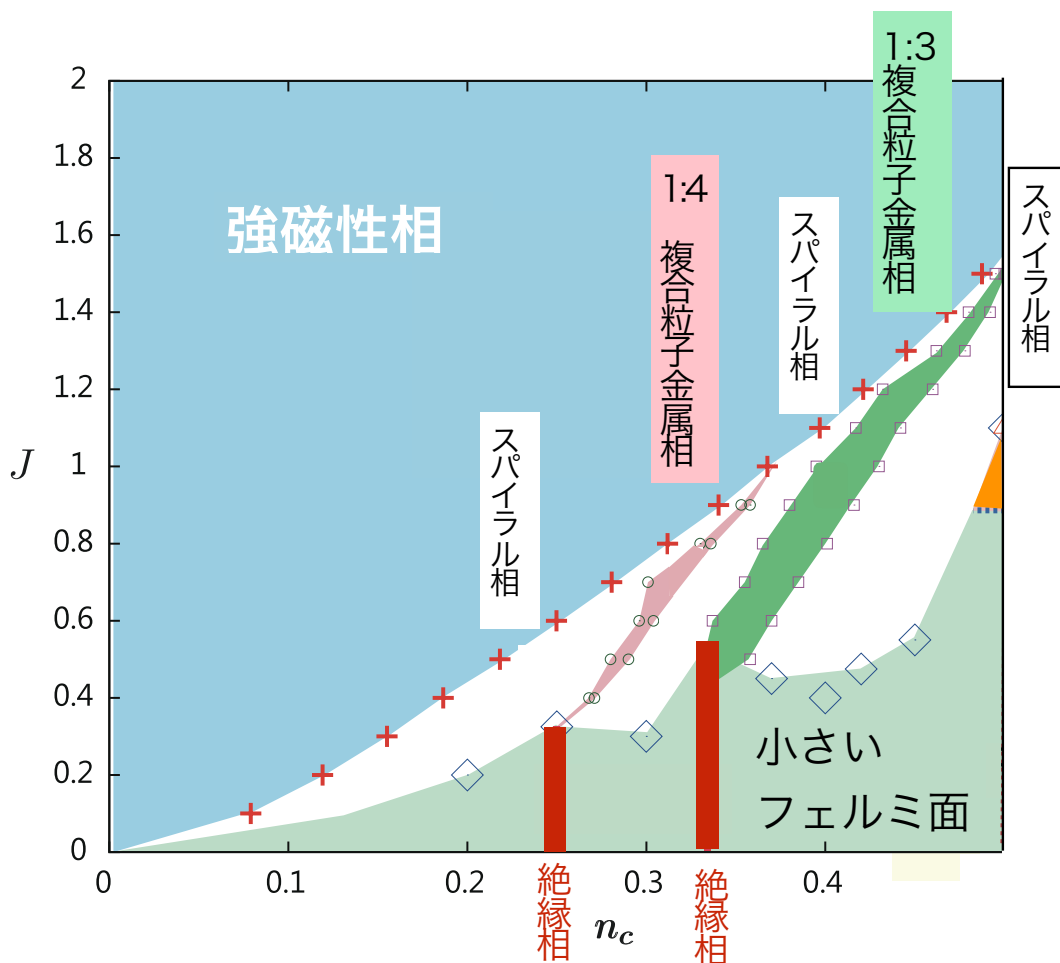


図 3.42 本研究で明らかになった、一次元近藤格子模型の 低電子密度領域における基底状態の相図。

3.7 一次元近藤格子模型の低電子密度領域の相図

以上の計算結果を元に相図を決定したを図 3.42 に示す。まず J が大きい領域で 強磁性金属相が実現すること、 J が小さい領域の大部分で小さなフェルミ面からなる局在スピン磁気構造が実現することは従来の 相図 1.3 と同様である。しかし、従来の小さなフェルミ面描像が成り立つ領域のうち $n_c = 1/3, 1/4$ で絶縁相が存在することが新たに明らかになった。また従来の相図でよく分かっていなかった空白の領域の中で複合粒子金属相が実現することを明らかにした他、従来の空白の領域は古典的に説明できるスパイラル相であることを明らかにした。

第 4 章

一次元周期アンダーソン模型における複合粒子相

周期アンダーソン模型は近藤格子模型より一般的な模型であり、その強相関極限において近藤格子模型を内包するものである。本章では一次元近藤格子模型の基底状態において見られた複合粒子由来の絶縁相、金属相が一次元周期アンダーソン模型においてどのような領域で見られるかを調べる。

4.1 一次元周期アンダーソンの計算のセットアップ

一次元周期アンダーソン模型の基底状態を決めるパラメータは近藤格子模型に比べて多い。一次元近藤格子模型においては、ケミカルポテンシャル μ と交換相互作用 J の 2 つのパラメータである。一方で一次元周期アンダーソン模型の基底状態を決めるパラメータはケミカルポテンシャル μ 局在電子のエネルギー ϵ_f 局在電子の軌道と伝導電子の軌道の混成の大きさ V と局在電子の軌道内で働くクーロン斥力のエネルギー U の 4 つとなる。

本研究では近藤格子模型と周期アンダーソン模型の関係を調べるためにいくつかパラメータに制限を加える、まずは局在電子の電子密度の期待値を 1 にするという条件である、これによって $\epsilon_f = \mu - U/2$ となる。このことからパラメータの数は 3 つに減らせる。また近藤格子模型の結果との対応を調べるために、 $J = \frac{8V^2}{U}$ を使う。したがって μ, J, U をもって基底状態を決定するパラメータとする。

また、一次元近藤格子模型では伝導電子密度 n_c 以下では、伝導電子密度と局在電子密度を合わせた電子密度 n を採用する、両者には $n = n_c + 1$ の関係がある。

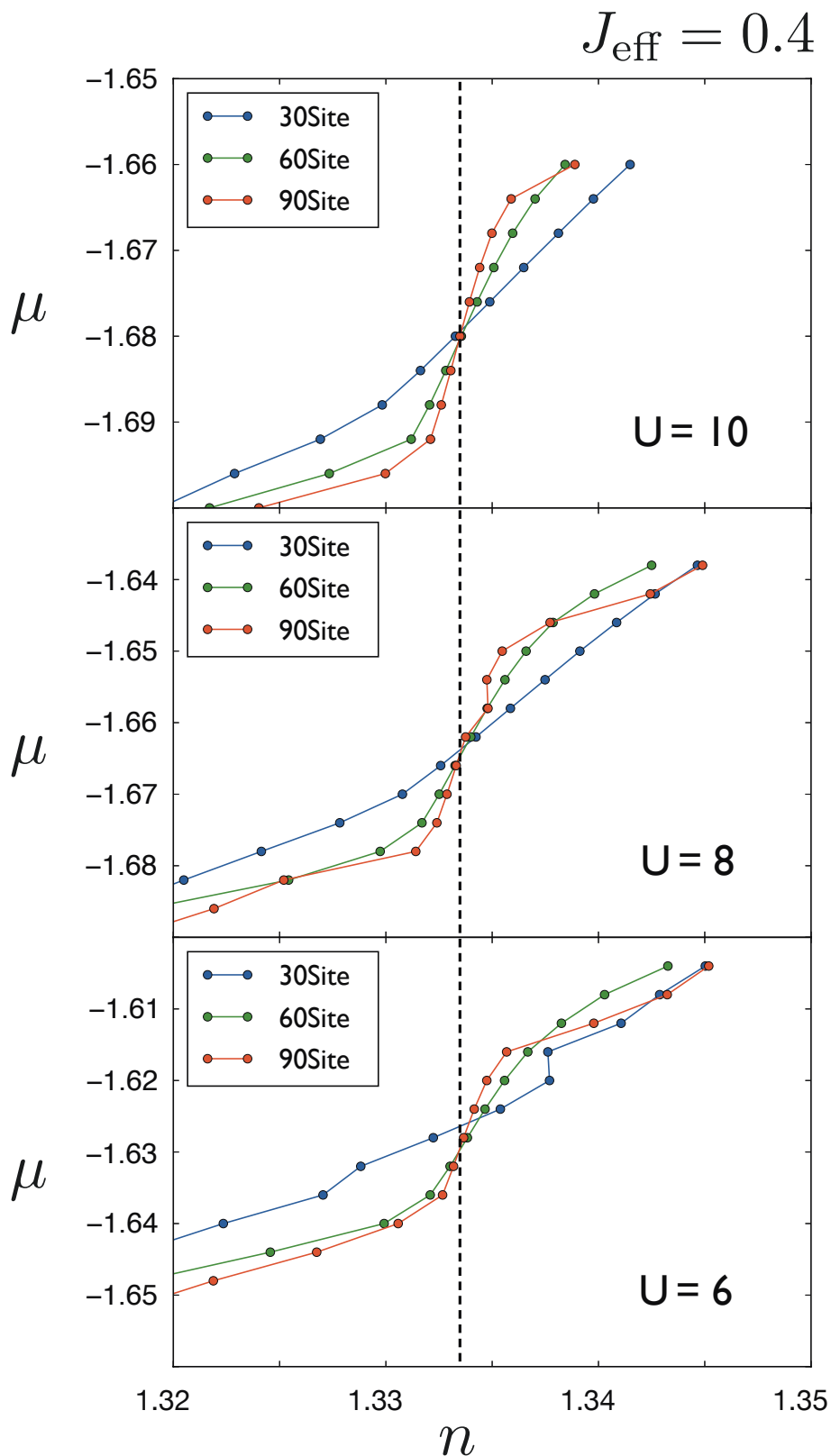


図 4.1 $J = 0.4$ における $n = 1.333\cdots$ の周辺における電子密度 n とケミカルポテンシャル μ の関係のサイズ依存。各 U において 無限系極限において、傾きが無限大に発散することが予想される。また U が小さくなるにつれて、ギャップも小さくなることが予想される。

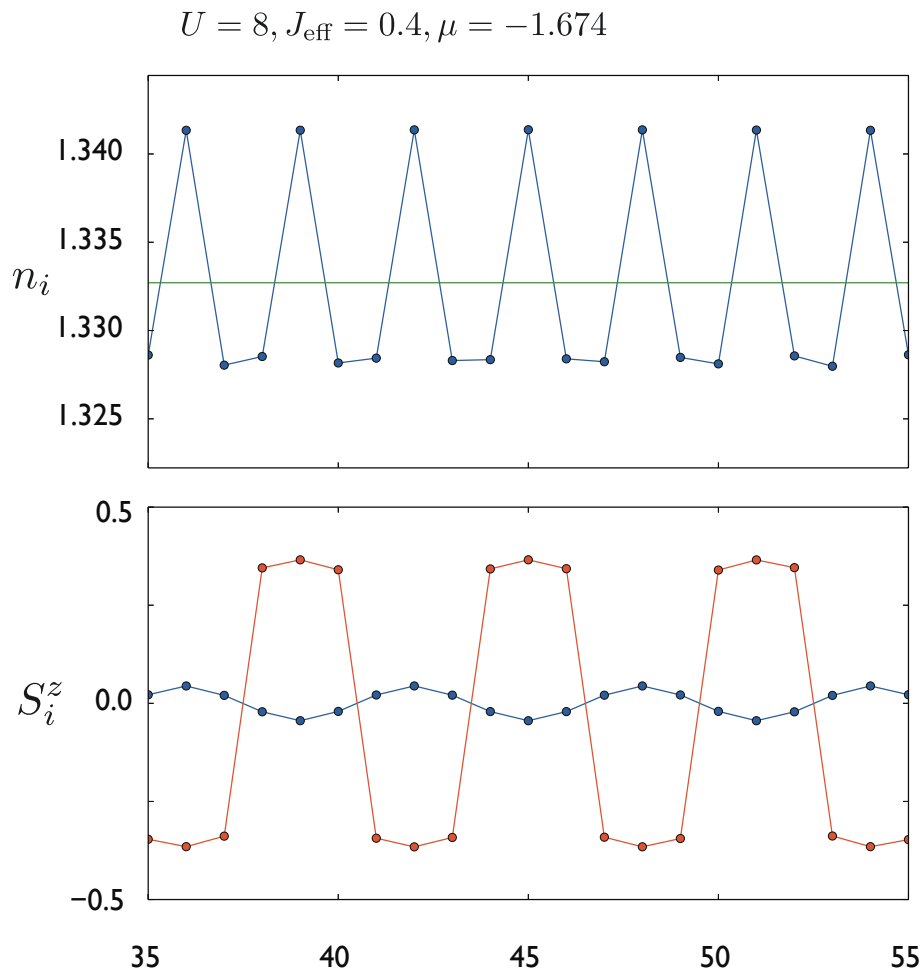


図 4.2 $J = 0.4, n = 1.333 \dots$ における電子状態、上のグラフの青線は電子密度の空間分布を表し、緑線はその空間平均値を表す。また下のグラフでは赤線で局在電子、青線で伝導電子のスピンの S_z 成分の分布を示している。

4.2 $n_c = 1/3$ における絶縁相

図 4.1 より $J = 0.4$ として、 $U = 6$ 程度までは絶縁相が存在することがわかる。そのときの局在電子のspin構造、伝導電子のspin構造、そして電子密度の分布を図 4.2 示した。これによると一次元近藤格子模型において見られた 6 サイト周期の局在電子のspin構造が見られる。したがって一次元周期アンダーソン模型においても一次元近藤格子模型と同様の機構による絶縁相が存在すると考えられる。

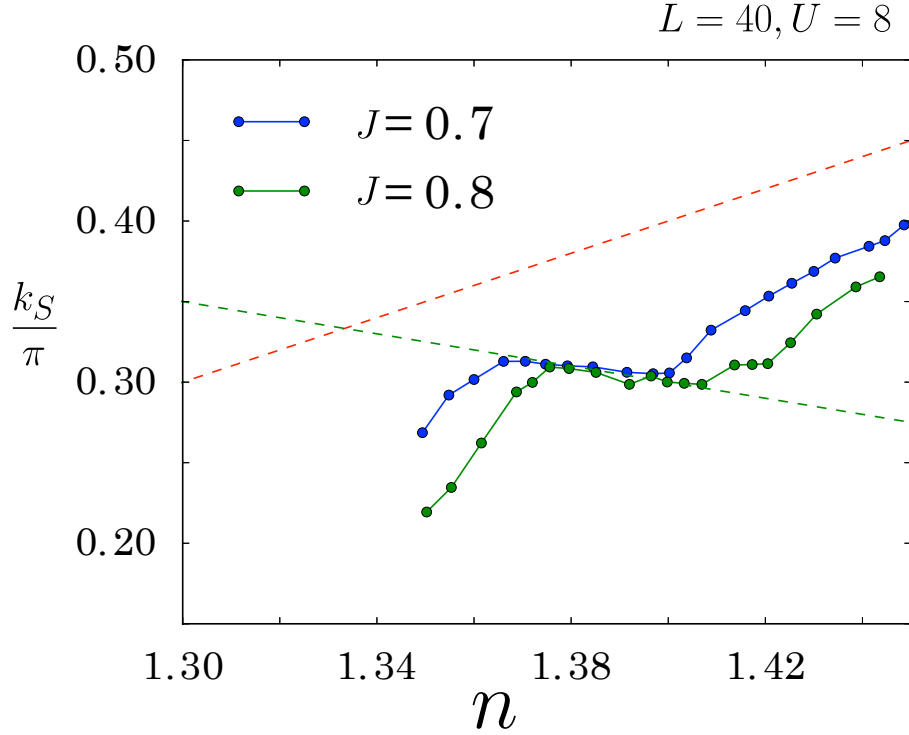


図 4.3 $U = 8$ における 電子密度 n と 局在スピンの構造の波数 k_S の関係の J 依存性。赤い点線は小さいフェルミ面描像から予想される直線、緑の点線は 1 : 3 複合粒子描像から予想される直線。

4.3 複合粒子金属相

図 4.3 に $U = 8$ における $J = 0.7, 0.8$ の場合の電子密度 n と 局在スピンの構造の波数 k_S の関係を示した。一次元近藤格子模型の場合と同様に $k_S = \pi(1 - n_c)/2$ の直線にのる構造が見られ、また J の大きさによる k_S の変化は 一次元近藤格子模型と同じである。

図 4.4 に $U = \infty$ 極限である 近藤格子模型と有限の U における 電子密度 n と 局在スピンの構造 k_S の関係を示す。 $U = 6$ 以上では、複合粒子金属相の領域は ほぼ変わらない。しかし、複合粒子金属相よりも低電子密度側の スピン構造の波数 k_S は $U = 10$ の時点で KL と異なる振る舞いを示している。また $U = 6$ 以下では U を小さくすると近藤格子模型における J を小さくしたような振る舞いが見られる。しかしながら複合粒子金属相に相当する振る舞い自体は $U = 1$ においても残っており、 $U \sim t$ 程度の弱相関に近い領域においても複合粒子金属相が存在していることが考えられる。

最後に $U = 0$ の極限でどうなるかについての考察を行う。本研究では $J = \frac{8V^2}{U}$ を固定して、 U を変化させているため、 $U \rightarrow 0$ において $V \rightarrow 0$ となる。これは伝導電子と局在電子との混成が完全になくなっており、伝導電子によってのみ フェルミ波数が決ま

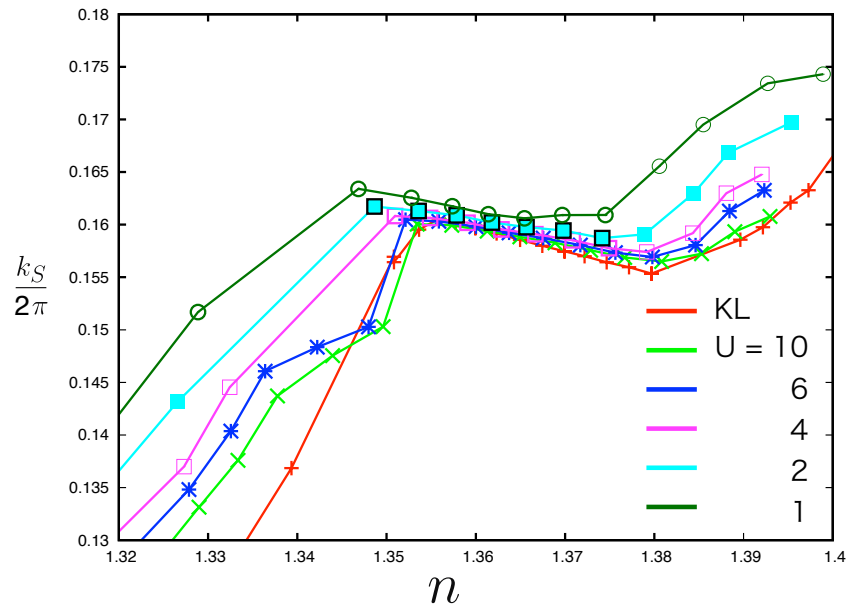


図 4.4 $L = 40, J = 0.7$ における 電子密度 n と 局在スピンの構造の波数 k_S の関係。 $U = \infty$ としての 近藤格子模型 (KL) と それぞれの U についての結果を載せている。

る極限に近づく。

第 5 章

結論

本研究では DMRG と SSD を用いて、一次元近藤格子模型と一次元周期アンダーソン模型の基底状態の解析を行った。以下にその結果をまとめる。

5.1 一次元近藤格子模型

先行研究において一次元近藤格子模型の低電子密度領域において、スピン構造の波数が、 $J = 0$ の小さなフェルミ面から強磁性の領域に連続的に変化することが指摘されていたが、その起源や、有限サイズ効果などについては明らかにされていなかった。本研究においては SSD を用いた有限サイズ効果を低減する手法を用いることで、この連続的な変化が実際に存在すること、またその変化の途中で 1:3、1:4 の複合粒子金属相に由来するスピン構造の波数が実現することを明らかにした。また、今まで知られていなかった電子密度 $n_c = 1/3, 1/4$ の領域で絶縁相が実現することを明らかにした。

また局在スピンの連続的な変化については、古典的らせん磁化によって定性的に説明できることを明らかにした。

以上の結果をふまえ、一次元近藤格子模型の低電子密度領域の基底状態の相図を明らかにした。

5.2 一次元周期アンダーソン模型

一次元近藤格子模型で実現した複合粒子金属相、複合粒子絶縁相がより一般的な一次元周期アンダーソン模型において安定に存在できるかどうかを調べた。

その結果 $J = \frac{8V^2}{U}$ を固定すれば、 $U \sim t$ 程度まで小さくしても $n_c = 1/3$ の絶縁相、及び 1:3 の複合粒子金属相が実現することがわかった。

謝辞

本研究を行うにあたり、多くの方々からの議論や指導など様々なご協力をいただきました。柴田尚和准教授には修士から博士過程の五年間にわたり研究の基礎から、博士論文の作成に至る研究の師としてだけでなく。人生における指針を示していただきました。

東達也氏、伊藤透氏には特に数値計算基礎から教えていただきました。

石山竜平氏、森田克洋氏、世永公輝氏をはじめとする研究室の方々との議論はとても有益なものでした。ここに深く感謝します。

最後に、私を産み育て大学院に進学し博士課程まで研究を行う機会をくれた両親に感謝します。

参考文献

- [1] J. Kondo, Resistance Minimum in Dilute Magnetic Alloys, Prog. Theor. Phys, Vol. 32, No. 1, pp. 37–49, 1964.
- [2] K. G. Wilson, The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem, Rev. Mod. Phys, Vol. 47, No. 4, pp. 773–840, 1975.
- [3] M. A. Ruderman and C. Kittel, Indirect exchange coupling of nuclear magnetic moments by conduction electrons, Phys. Rev, Vol. 96, No. 1, pp. 99–102, 1954.
- [4] T. Kasuya, A Theory of Metallic Ferro- and Antiferromagnetism on Zener's Model, Prog. Theor. Phys, Vol. 16, No. 1, pp. 45–57, 1956.
- [5] A. Sumiyama, Y. Oda, H. Nagano, Y. Onuki, K. Shibusaki, and T. Komatsubara, COHERENT KONDO STATE IN A DENSE KONDO SUBSTANCE: $\text{Ce}_x\text{La}_{1-x}\text{CeCu}_6$, J. Phys. Soc. Japan, Vol. 55, No. 4, pp. 1294–1304, 1986.
- [6] 上田和夫, 大貫惇睦, 重い電子系の物理, 裳華房, 1998.
- [7] S. Doniach, The Kondo lattice and weak antiferromagnetism, Phys. B+C, Vol. 91, pp. 231–234, 1977.
- [8] A. Juozapavicius, I. P. McCulloch, M. Gulácsi, and A. Rosengren, Ferromagnetic Phases in Kondo lattice models, Philos. Mag. B, No. 11, pp. 1211–1224.
- [9] S. R. White, Density matrix formulation for quantum renormalization groups, Phys. Rev. Lett, Vol. 69, No. 19, pp. 2863–2866, 1992.
- [10] J. Otsuki, H. Kusunose, and Y. Kuramoto, The Kondo Lattice Model in Infinite Dimensions II. Static Susceptibilities and Phase Diagram, J. Phys. Soc. Japan, Vol. 78, No. 3, p. 034719, 2009.
- [11] 菊地琢, 近藤格子模型における磁気・電荷相関の数値的研究, 博士論文, 東北大学, 2015 年度.
- [12] H. Tsunetsugu, M. Sigrist, and K. Ueda, The ground-state phase diagram of the one-dimensional Kondo lattice model, Rev. Mod. Phys, Vol. 69, No. 3, pp. 809–864, 1997.

- [13] H. Tsunetsugu, M. Sigrist, and K. Ueda, Phase diagram of the one-dimensional Kondo-lattice model, Phys. Rev. B, Vol. 47, No. 13, pp. 2–5, 1993.
- [14] M. Sigrist, H. Tsunetsugu, and K. Ueda, Rigorous results for the one-electron Kondo-lattice model, Phys. Rev. Lett, Vol. 67, No. 16, pp. 2211–2214, 1991.
- [15] M. Troyer and D. Würtz, Ferromagnetism of the One-Dimensional Kondo-Lattice Model - a Quantum Monte-Carlo Study, Phys. Rev. B, Vol. 47, No. 5, pp. 2886–2889, 1993.
- [16] N. Shibata, T. Nishino, K. Ueda, and C. Ishii, Spin and charge gaps in the one-dimensional Kondo-lattice model with Coulomb interaction between conduction electrons, Phys. Rev. B, Vol. 53, No. 14, p. 4, 1996.
- [17] M. Sigrist, H. Tsunetsugu, K. Ueda, and T. M. Rice, Ferromagnetism in the strong-coupling regime of the one-dimensional kondo-lattice model, Vol. 46, No. 21, p. 13838, 1992.
- [18] J. M. Luttinger, Fermi surface and some simple equilibrium properties of a system of interacting fermions, Phys. Rev, Vol. 119, No. 4, pp. 1153–1163, 1960.
- [19] N. Shibata, K. Ueda, T. Nishino, and C. Ishii, Friedel oscillations in the one-dimensional Kondo lattice model, Phys. Rev. B, Vol. 54, No. 19, p. 13495, 1996.
- [20] I. P. McCulloch, A. Juozapavicius, A. Rosengren, and M. Gulácsi, Ferromagnetism in Kondo lattice models, Philos. Mag. Lett, Vol. 81, No. 12, pp. 869–875, 2001.
- [21] I. P. McCulloch, A. Juozapavicius, A. Rosengren, and M. Gulacsi, Localized spin ordering in Kondo lattice models, Phys. Rev. B, Vol. 65, No. 5, p. 052410, 2002.
- [22] M. Matos, G. Bonfait, R. T. Henriques, and M. Almeida, Modification of the magnetic-field dependence of the Peierls transition by a magnetic chain, Phys. Rev. B, Vol. 54, No. 21, p. 15307, 1996.
- [23] J. C. Xavier, R. G. Pereira, E. Miranda, and I. Affleck, Dimerization Induced by the RKKY Interaction, Phys. Rev. Lett, Vol. 90, No. 24, p. 247204, 2003.
- [24] N. Shibata and C. Hotta, Boundary effects in the density-matrix renormalization group calculation, Phys. Rev. B, Vol. 84, No. 11, pp. 1–9, 2011.
- [25] S. Minami and H. Kawamura, Low-Temperature Magnetic Properties of the Kondo Lattice Model in One Dimension, J. Phys. Soc. Japan, Vol. 84, No. 4, p. 044702, 2015.
- [26] P. R. Bertussi, M. B Silva Neto, T. G. Rappoport, a. L. Malvezzi, and R. R. Dos Santos, Incommensurate spin-density-wave and metal-insulator transition in the one-dimensional periodic Anderson model, Phys. Rev. B, Vol. 84, No. 7, pp. 1–9,

-
- 2011.
- [27] P. R. Bertussi, M. B. Silva Neto, T. G. Rappoport, A. L. Malvezzi, and R. R. dos Santos, Incommensurate spin-density-wave and metal-insulator transition in the one-dimensional periodic Anderson model, Phys. Rev. B, Vol. 84, No. 7, pp. 1–9, 2011.
 - [28] S. R. White, Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups, Phys. Rev. B, Vol. 48, No. 14, pp. 10345–10356, 1993.
 - [29] I. Maruyama, H. Katsura, and T. Hikihara, Sine-square deformation of free fermion systems in one and higher dimensions, Phys. Rev. B, Vol. 84, No. 16, pp. 1–8, 2011.
 - [30] C. Hotta, S. Nishimoto, and N. Shibata, Grand canonical finite size numerical approaches in one and two dimensions: Real space energy renormalization and edge state generation, Phys. Rev. B, Vol. 87, No. 11, p. 115128, 2013.
 - [31] N. Shibata and C. Hotta, Boundary effects in the density-matrix renormalization group calculation, Phys. Rev. B, Vol. 84, No. 11, pp. 1–9, 2011.
 - [32] P. R. Bertussi, M. B Silva Neto, T. G. Rappoport, a. L. Malvezzi, and R. R. Dos Santos, Incommensurate spin-density-wave and metal-insulator transition in the one-dimensional periodic Anderson model, Phys. Rev. B, Vol. 84, No. 7, pp. 1–9, 2011.
 - [33] C. Hotta and N. Shibata, Grand canonical finite-size numerical approaches: A route to measuring bulk properties in an applied field, Phys. Rev. B, Vol. 86, No. 4, p. 041108, 2012.