

# 博士論文

## 1次元2軌道 Hubbard 模型の スピントロニクス領域における 励起子相関、スピン状態秩序と磁場効果

東北大学大学院理学研究科

物理学専攻

北川皓也

令和3年



# 目次

<b>第 1 章</b>	<b>序論</b>	<b>5</b>
1.1	はじめに . . . . .	5
1.2	ペロブスカイト型コバルト酸化物におけるスピン状態転移 . . . . .	6
1.3	近年におけるスピン状態転移の実験 . . . . .	10
1.4	励起子絶縁体 . . . . .	14
1.5	2 軌道 Hubbard 模型によるスピン状態転移と励起子絶縁体の先行研究 . . . . .	16
1.6	1 次元拡張 Falicov-Kimball 模型における励起子絶縁体と量子臨界性 . . . . .	17
1.7	1 次元拡張 Hubbard 模型における BOW 相とエンタングルメントエントロピー . . . . .	18
1.8	本研究の目的 . . . . .	20
<b>第 2 章</b>	<b>理論模型と計算手法</b>	<b>21</b>
2.1	2 軌道 Hubbard 模型と低エネルギー有効模型 . . . . .	21
2.2	密度行列くりこみ群法 . . . . .	33
<b>第 3 章</b>	<b>結果</b>	<b>51</b>
3.1	2 軌道 Hubbard 模型の低エネルギー有効模型の基底状態 . . . . .	51
3.2	2 軌道 Hubbard 模型の低エネルギー有効模型の磁場効果 . . . . .	60
3.3	相関関数の長距離構造とエンタングルメントエントロピー . . . . .	68
<b>第 4 章</b>	<b>総括</b>	<b>87</b>



# 第 1 章

## 序論

### 1.1 はじめに

強相関電子系では電子同士が強く相互作用している物質群である。電子が強く相互作用する物質では電子が局在することにより、電子の持つ電荷、スピン、軌道の自由度が顕在化し、それらが複雑に絡み合う。このような性質から、強相関電子系は、マルチフェロイクスやスピントロニクスにおける機能性材料開発の舞台として注目され、その物性が研究されてきた。

遷移金属酸化物は典型的な強相関電子系である。遷移金属酸化物では、強い電子相関の効果と  $d$  電子の軌道自由度を反映して、様々な現象が現れる [1]。マンガン酸化物における巨大磁気抵抗効果や銅酸化物における高温超伝導はその一例である。遷移金属酸化物のうち、特にペロブスカイト型コバルト酸化物  $R_{1-x}A_xCoO_3$  では、温度や圧力といった外的要因に応じて帯磁率や電気伝導性が変化する現象として、スピントロニクスオーバー現象やスピン状態転移が見られる [2]。ペロブスカイト型コバルト酸化物では、Co イオンにおける  $3d^6$  電子の電子配置がクーロン相互作用に由来する Hund 結合と結晶場分裂が競合している。これによって、低スピン状態、中間スピン状態、高スピン状態がエネルギー的に拮抗している。したがって、外的要因によって電子配置が容易に変化する。これは、帯磁率の大きな変化などの形で物性に現れる。

近年、スピン状態が競合する場合に、スピン状態がサイトごとに異なる状態をとることで超格子構造を示すスピン状態秩序や、異なるスピン状態が空間的にコヒーレントに揺らぐことで混成している状態である励起子絶縁体の実現する可能性が指摘されている [3, 4]。

一般に、各スピン状態がエネルギー的に拮抗する場合には、量子効果によりスピン状態が共存することで非自明な電子状態が実現する可能性がある。スピン状態転移近傍における励起子絶縁体相とスピン状態秩序はそのような例の 1 つとして捉えることができる。

近年の  $LaCoO_3$  を対象とした薄膜実験においては、多様な超格子構造を示すスピン状態

秩序が観測されている [5]. さらに,  $\text{LaCoO}_3$  の強磁場実験において観測された強磁場相に対してはスピン状態の超格子構造の実現が提案されている他, 磁場誘起の励起子絶縁体の実現が提案されている [6, 7].

このような背景のもと, 本研究では, スピン状態転移近傍における電子状態を理論的に明らかにすることを目的とする. 特に, 1 次元 2 軌道 Hubbard 模型の低エネルギー有効模型の数値解析を軸として, 励起子絶縁体と多様な超格子構造をもつスピン状態秩序の実現とその空間構造に注目する.

本章では, コバルト酸化物におけるスピン状態転移の導入を行った後, 励起子絶縁体とスピン状態秩序に関連する近年の実験的, 理論的な研究結果を説明する. 最後に, それらを踏まえて本研究の目的について述べる.

## 1.2 ペロブスカイト型コバルト酸化物におけるスピン状態転移

本節ではペロブスカイト型コバルト酸化物におけるスピン状態転移について説明する. まず, ペロブスカイト型コバルト酸化物における  $\text{Co}^{3+}$  イオンの電子状態とそのスピン状態自由度について説明する. 続いて, 主に  $\text{LaCoO}_3$  を対象とし, スピנקロスオーバーやスピン状態転移に関する実験結果と理論的知見を概観する.

### 1.2.1 ペロブスカイト型コバルト酸化物における $\text{Co}$ イオンのスピン状態

本項では, ペロブスカイト型コバルト酸化物における  $\text{Co}^{3+}$  イオンのスピン状態について説明する. スピנקロスオーバーとスピン状態転移を示すペロブスカイト型コバルト酸化物の代表例である  $\text{LaCoO}_3$  の結晶構造の模式図を図 1.1 に示す. ペロブスカイト型コバルト酸化物においては, 希土類イオン ( $\text{LaCoO}_3$  の場合は  $\text{La}^{3+}$ ) はイオン化傾向が強いため孤立原子として扱うことができる. この物質の磁性を担っているのは  $\text{Co}^{3+}$  イオンの  $3d$  電子である.  $\text{Co}^{3+}$  イオンの周囲には,  $\text{O}^{2-}$  イオンが八面体構造の頂点に隣接している.  $\text{Co}^{3+}$  イオンの  $3d$  電子は隣接している  $\text{O}^{2-}$  イオンの結晶場を受けてエネルギーの低い 3 重縮退した  $t_{2g}$  軌道と, エネルギーの高い 2 重縮退した  $e_g$  に結晶場分裂している (スピン自由度を含めるとそれぞれ 6 重縮退と 4 重縮退). 結晶場分裂と  $3d$  電子の各軌道の概形を図 1.2 に示す.

$3d$  電子の電子状態は, 結晶場分裂  $\Delta$  に加えて強い電子相関の効果を考える必要がある. 特に,  $3d$  電子では Hund 結合  $J$  が存在する. この効果により  $3d$  電子のスピンが揃うように電子が配置しようとする. しかし, ペロブスカイト型コバルト酸化物の場合, 電子のスピンを揃えようとする結晶場によりエネルギーの高い  $e_g$  軌道に電子を配置する必要があ

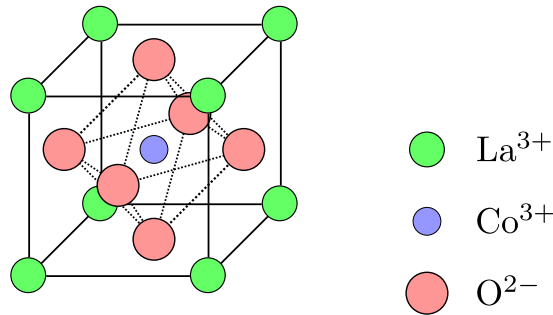


図 1.1 ペロブスカイト型コバルト酸化物 LaCoO3 の結晶構造の模式図.

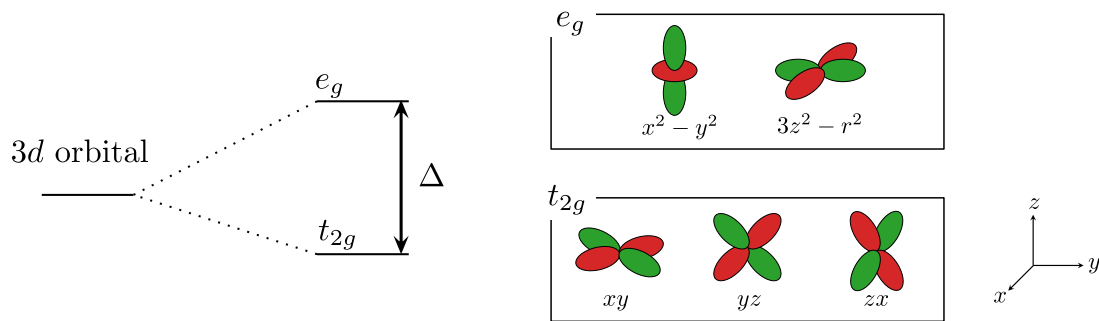


図 1.2 ペロブスカイト型コバルト酸化物における結晶場分裂.

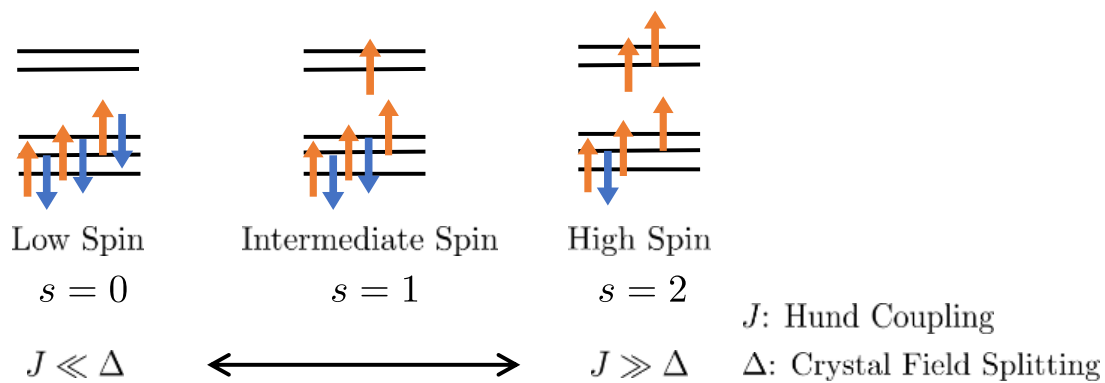


図 1.3 ペロブスカイト型コバルト酸化物におけるスピン状態の模式図.

る。ペロブスカイト型コバルト酸化物においては結晶場分裂  $\Delta$  と Hund 結合  $J$  の効果が拮抗することにより、スピンの大きさが温度、圧力などの外的要因により容易に変化する状況となっている。図 1.3 にペロブスカイト型コバルト酸化物においてとりうるスピン状態の模式図を示す。

図 1.3 にあるように  $\text{Co}^{3+}$  イオンは 3 通りの電子配置をとる。まず、結晶場分裂  $\Delta$  が大きい場合には、 $3d^6$  電子は全て  $t_{2g}$  軌道に占有することで、 $e_g^0 t_{2g}^6$  の電子配置となる。

このとき、スピンの大きさは  $s = 0$  となる。この状態は低スピン状態 (LS 状態: low-spin state) と呼ばれる。逆に、結晶場分裂  $\Delta$  が小さく、Hund 結合  $J$  が強い場合には、 $e_g^2 t_{2g}^4$  の電子配置となる。このとき、スピンの大きさは  $s = 2$  となる。この状態は高スピン状態 (HS 状態: high-spin state) と呼ばれる。また、中間領域では、電子配置が  $e_g^1 t_{2g}^5$  となる中間スピン状態 (IS 状態: intermediate-spin state) が実現する可能性が考えられる。このとき  $s = 1$  である。

これらのスピン状態自由度の中で、どの状態が安定となるかは古くから議論されている。結晶場中の  $3d$  電子における電子状態のエネルギーの系統的な計算は Tanabe, Sugano によりなされており、その結果は Tanabe - Sugano ダイアグラムとして知られている [8]。  $3d^6$  に対する Tanabe - Sugano ダイアグラムを図 1.4 に示す。図 1.4 によると、  $3d^6$  の電子では、パラメータ  $Dq/B$  に応じて、スピン状態が切り替わることがわかる。図 1.4 における  $Dq$  は  $e_g$  軌道と  $t_{2g}$  軌道間の結晶場分裂の大きさに対応する。  $B$  はラカーパラメータと呼ばれるクーロン相互作用の大きさを表すパラメータであり、Hund 結合の大きさに影響する。Tanabe - Sugano ダイアグラムによると  $Dq/B$  の小さい領域では HS 状態が基底状態となっており、  $Dq/B$  の大きい領域では LS 状態が安定となることがわかる。また、IS 状態は基底状態としては実現しないということが示されている。一方で、酸素イオンとの混成 (d-p 混成) や中間スピン状態の軌道秩序、後述する励起子絶縁体を考慮した場合には、IS 状態が安定となる可能性があることが指摘されている [9, 10]。

### 1.2.2 ペロブスカイト型コバルト酸化物におけるスピン状態転移

本項ではスピン状態転移を示すペロブスカイト型コバルト酸化物の中でも代表的な  $\text{LaCoO}_3$  を中心として、ペロブスカイト型コバルト酸化物におけるスピン状態転移について述べる。

前項までで述べてきたように、  $\text{LaCoO}_3$  の電子状態は結晶場分裂の効果と Hund 結合の効果が競合することによって、スピン状態に自由度が存在する。そのため、温度や圧力、磁場といった外的要因によってスピン状態が変化するスピン状態転移が見られる。

ペロブスカイト型コバルト酸化物のスピン状態転移の代表的な実験結果として  $\text{LaCoO}_3$  の温度変化によるスピncrossover現象が存在する。  $\text{LaCoO}_3$  の電気抵抗率と帯磁率温度依存性、光学電気伝導度の温度依存性の実験結果を図 1.5 に示す [12, 13]。図 1.5 では、温度の上昇とともに電気抵抗が小さくなるという特徴を見せている。  $T < 100\text{K}$  の温度領域では、温度の上昇とともに急激な電気抵抗の減少が見られており、この振る舞いは絶縁体的である。同じ温度領域では、温度の上昇とともにスピン帯磁率が急激に上昇しており、  $T = 100\text{K}$  付近でピークをとる。これらから、  $T < 100\text{K}$  の温度領域においては、基底状態 ( $T = 0\text{K}$ ) で非磁性な低スピン状態である  $\text{Co}^{3+}$  イオンが実現しており、温度効果



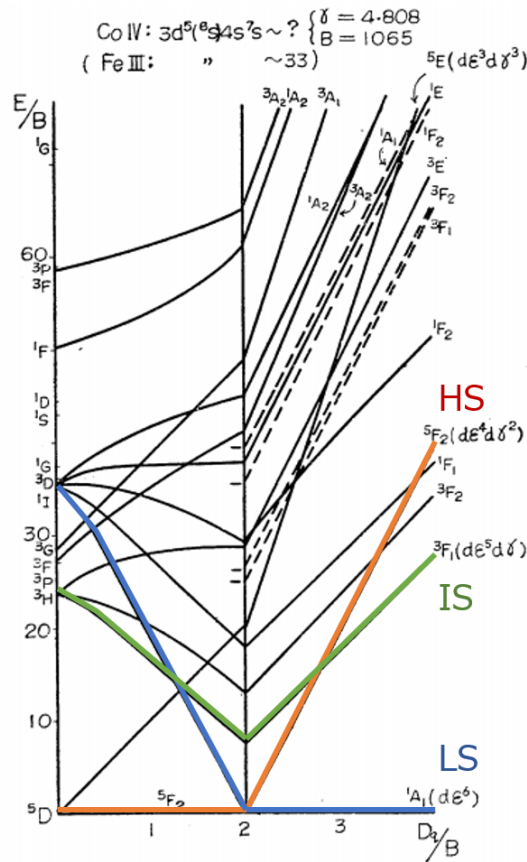


図 1.4  $3d^6$  における Tanabe - Sugano ダイアグラム. 横軸は結晶場分裂の大きさをラッカーパラメータで規格化したもの. LS 状態, IS 状態, HS 状態に対応するラインをそれぞれ着色した [11]

によって高スピン状態が励起されていると理解される. この特徴的な磁性の温度依存性はスピントロソオーバーと呼ばれる. また, 図 1.5 では,  $T \sim 500\text{K}$  においても急激な電気抵抗の低下がみられる. この温度領域では, 光学吸収スペクトルの実験結果において, 電荷ギャップが閉じていることから, Mott 絶縁体-金属転移であることが示されている. このような電気抵抗の温度依存性は様々な希土類イオンのコバルト酸化物  $R\text{CoO}_3$  ( $R=\text{Gd}, \text{Eu}, \text{Sm}, \text{Nd}, \text{Pr}, \text{La}$ ) について普遍的に得られている [12].

以下では,  $\text{LaCoO}_3$  の  $T = 100\text{K}$  付近で見られるスピン状態転移に関する理論, 実験について述べる. 前節までで述べたように,  $\text{LaCoO}_3$  は  $T = 0\text{K}$  の基底状態で非磁性な低スピン状態であり, 温度効果により高スピン状態が熱励起されることで, 急激な帯磁率の増大を示すという描像が得られている. しかしながら, 熱励起の寄与が単純に高スピン状態に由来していると考えた場合, 実験から見積もられる磁気モーメントの大きさが理論的予

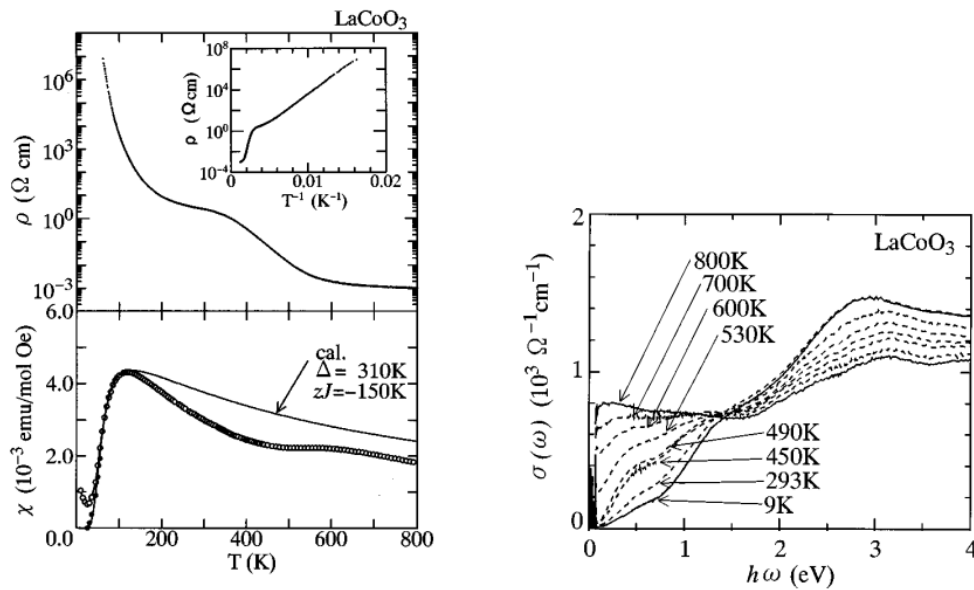


図 1.5 (左パネル)LaCoO<sub>3</sub> における電気伝導率の温度依存性と帯磁率の温度依存性 [12]. (右パネル)LaCoO<sub>3</sub> における光学電気伝導度の温度依存性 [13]. 帯磁率の温度依存性 (左下) における 100K 以下の黒丸は不純物効果を除いた帯磁率の値. 下図における実線は  $s = 0, s = 2$  の 2 順位系における Co イオンに反強磁性相互作用を仮定した場合の分子場近似をもとに計算した数値計算の結果.

測よりも小さくなる問題がある. この問題を解決する理論として, Goodenough 等は LS 状態と HS 状態が交互に配置したモデルを提案した [14]. これは, 実験値と整合する. 一方で, Potze らにより, HS 状態ではなく IS 状態が安定化することによっても, 帯磁率の実験値を再現できることも示されている [9, 10]. これらの描像には双方とも支持する実験結果が存在し, 現在においても, 統一的な理解には至っていない.

### 1.3 近年におけるスピン状態転移の実験

本節では, スピン状態転移に関する近年の実験結果として, LaCoO<sub>3</sub> の薄膜実験と強磁場実験に触れ, そこでのスピン状態秩序および励起子絶縁体との関連性について説明する.

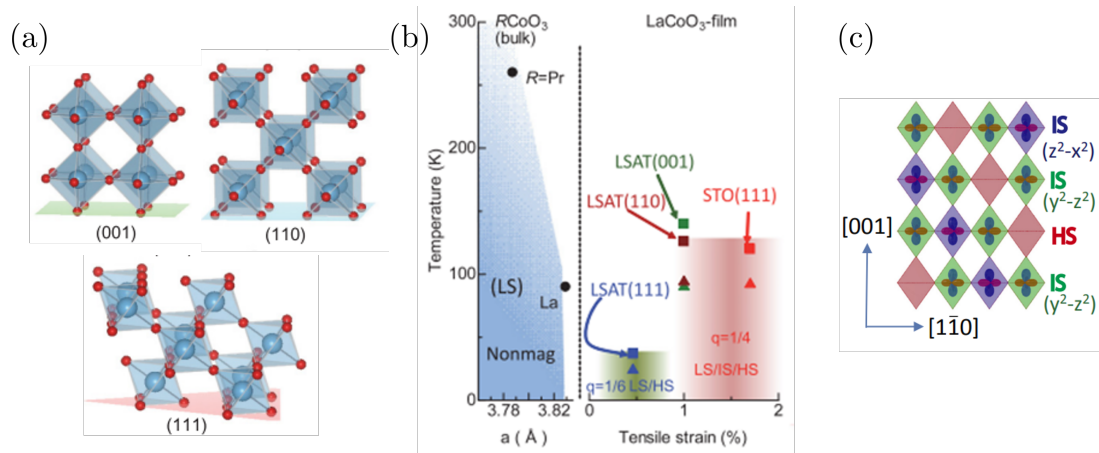


図 1.6 (a) 薄膜実験において基板上で様々な方向に伸長された  $\text{LaCoO}_3$  薄膜. (b) 薄膜上で伸長された際に現れる多様なスピン構造 [15]. (c) LSAT 基板上に (110) 面で成長させた  $\text{LaCoO}_3$  薄膜における電子状態の模式図 [5]

### 1.3.1 $\text{LaCoO}_3$ における薄膜実験

前節では温度に対するスピントロニクスを見てきたが、 $\text{LaCoO}_3$  のスピン状態は圧力によっても変化する。これは、LS, IS, HS の各状態におけるイオン半径が異なること ( $r_{\text{LS}} < r_{\text{IS}} < r_{\text{HS}}$ ) に起因する。HS 状態では  $\text{O}^{2-}$  方向に伸びた軌道 ( $x^2 - y^2, 3z^2 - r^2$ ) に電子が配置することで、クーロン反発により体積が大きくなる。この体積変化は、 $\text{LaCoO}_3$  のスピントロニクスでも見られる [16]。逆に圧力を印加することによって、結晶場分裂の大きさを制御することが可能である。実際に圧力印加によるペロブスカイト型コバルト酸化物のスピン状態の変化 (HS $\rightarrow$ LS) が実験的に確かめられている [17–19]。

$\text{LaCoO}_3$  の薄膜実験では、基板上に  $\text{LaCoO}_3$  の薄膜を成長させることによって、基盤の格子定数に合わせた異方的な圧力が加わる。これにより、結晶場パラメータが変化することで  $\text{Co}^{3+}$  イオンのスピン状態が変化する。 $\text{LaCoO}_3$  薄膜を LSAT:  $(\text{LaAlO}_3)_{0.3}(\text{SrAl}_{0.5}\text{Ta}_{0.5}\text{O}_3)_{0.7}$  基板上に成長させた際には、基盤の異方性や温度に応じて様々な超格子構造を持つスピン状態秩序が得られている [5]。LSAT 基盤は  $\text{LaCoO}_3$  の (001) 面と比べて格子定数が 1% 程度大きい。そのため、結晶場分裂が小さくなり、IS 状態や HS 状態のエネルギーが下がる。図 1.6 に  $\text{LaCoO}_3$  の薄膜実験における基板上での  $\text{LaCoO}_3$  の模式図と現れるスピン状態の超格子構造について示した。温度と成長させる結晶面に応じて、4 倍もしくは 6 倍周期のスピン状態 (LS/IS/HS) の結晶化が得られている。これらの構造は X 線散乱や電子線散乱によって検知されている。近年では、シンクロトロン放射光を利用した実験技術の発展により、共鳴軟 X 線散乱や共鳴非弾性 X 線散乱が Co

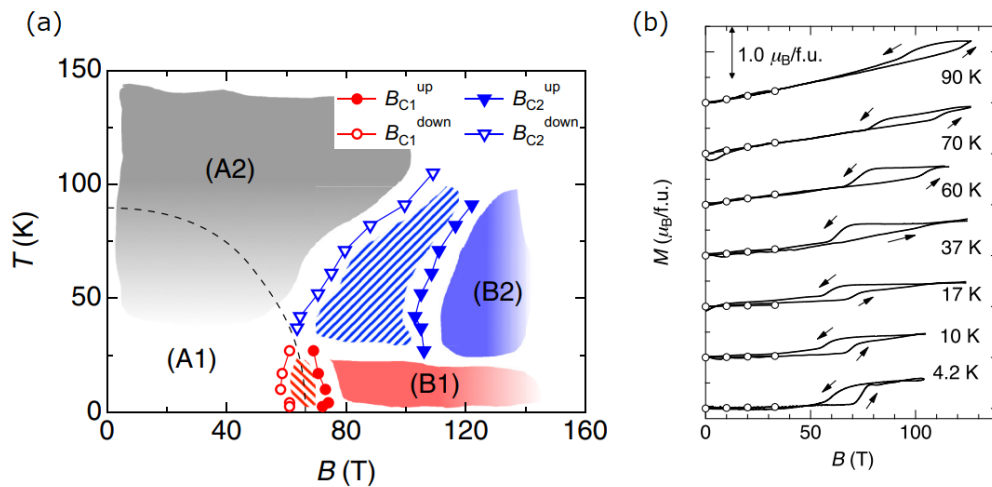


図 1.7 (a) 強磁場実験により (A1) は低スピン状態, (A2) は高スピン状態, (B1), (B2) は磁場により誘起された新規状態である. 影のついた領域は 1 次転移に伴うヒステリシスに対応している. (b) 強磁場実験により得られた磁化曲線 [6]. 高スピン状態の飽和磁化は  $4\mu_B$  であり, 磁場による 1 次転移後においても飽和磁化に達していない.

イオンの 3d 電子のスピン状態を検知する手段として利用されている [5, 20–23].

### 1.3.2 LaCoO<sub>3</sub> における強磁場実験

本項では, 近年の LaCoO<sub>3</sub> に対する強磁場実験の結果を述べる. LaCoO<sub>3</sub> のスピン状態のうち HS 状態は磁性をもつため, 磁場により HS 状態が誘起されると考えられる. LaCoO<sub>3</sub> に対して行われた強磁場実験によって得られた基底状態相図を図 1.7 に示した. 図 1.7(a) では強磁場下で温度に応じて (B1), (B2) で表した 2 通りの磁化相が得られている. 図 1.7(b) には磁化曲線を示しており, 明確なヒステリシスが見られる. 転移後の磁化の値は  $\text{Co}^{3+}$  イオンの飽和磁化の  $1/4$  程度であり, (B1), (B2) 相が単純な HS 状態ではないことを示唆している. また, 低温における磁化曲線については磁化曲線が段階的になるという報告もあり, こちらでは 100T 付近で飽和磁化の  $1/2$  の磁化プラトーが見られる [7]. この段階的な磁化については, スピンモデルの解析から LS 状態と HS 状態のスピン状態秩序が提案されているほか, 2 軌道 Hubbard 模型の数値解析により, 強磁場相が励起子絶縁体相である可能性が指摘されている [4, 24].

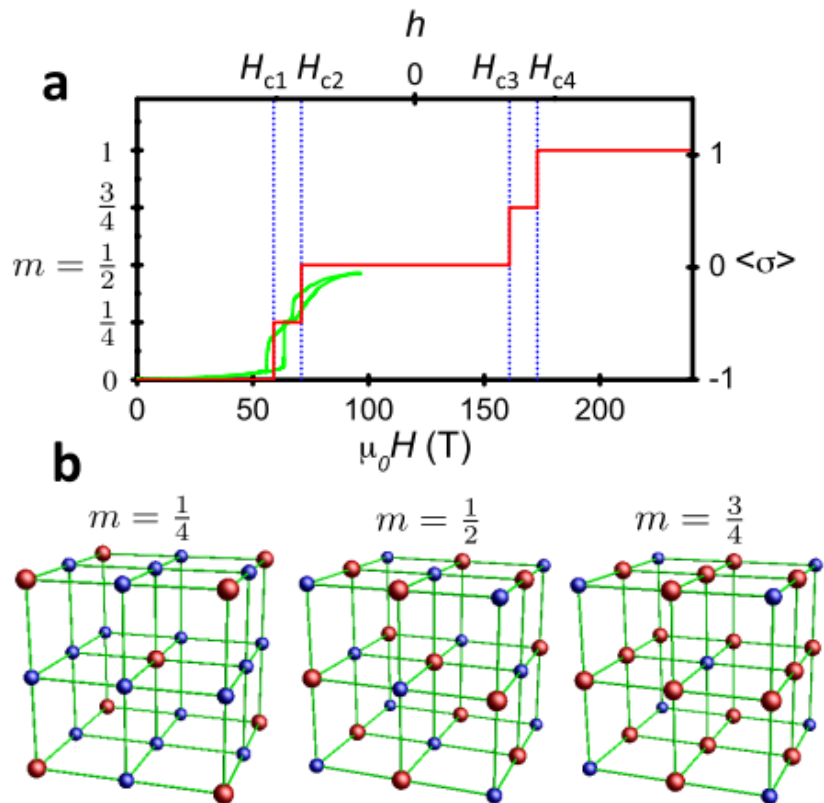


図 1.8 (a) 低温における  $\text{LaCoO}_3$  磁化曲線. 緑の実線は実験的に得られているものであり, 赤の実線はスピンモデルによる計算結果. 飽和磁化は 1 である. (b) スピンモデルによって提案されている磁化相におけるスピン状態秩序の空間構造. 青で示したサイトは LS 状態であり, 赤で示したサイトは HS 状態である.

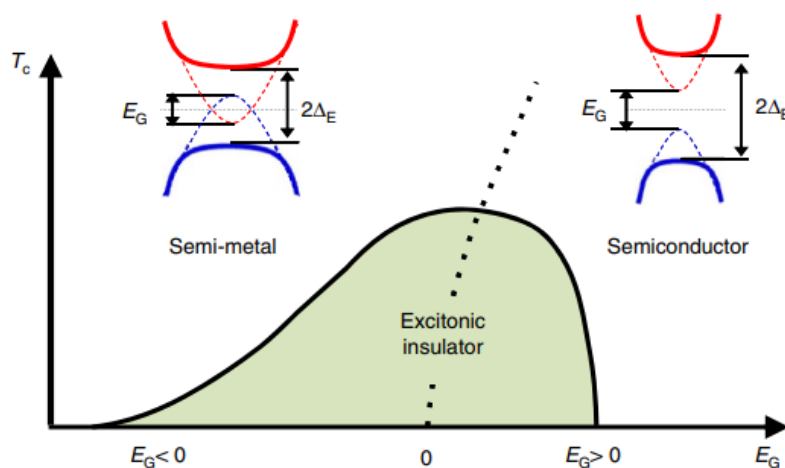


図 1.9 典型的な励起子絶縁体を含む相図 [25]. 横軸  $E_G$  はバンドギャップの大きさである. 同時に BCS 領域, BEC 領域における典型的なバンド構造を併記している.

## 1.4 励起子絶縁体

近年、ペロブスカイト型コバルト酸化物の  $\text{Pr}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{CoO}_3$  において、低温における絶縁体相が励起子絶縁体である可能性が示唆されている。これを踏まえ、本節では励起子絶縁体について、これまでの実験的、理論的な知見を説明する。

励起子とは物質中で電子と正孔がクーロン引力によって束縛されたペアのことを指す。半導体などに光を照射した場合には電子と正孔が生成され、両者が束縛状態を形成することがある。この束縛状態のエネルギー準位が、通常バンドギャップと比べ低いエネルギーに現れる。

励起子絶縁体は、半金属や狭ギャップ半導体において、電子正孔対の束縛エネルギーがバンドギャップを超えるような場合に、マクロな数の励起子が形成されることによって実現する状態である。励起子絶縁体において、励起子は空間的にコヒーレントに広がっているが、超伝導におけるクーパーペアと異なり、励起子は電子と正孔がペアを組むため、電荷を運ばない。そのため、励起子絶縁体は絶縁体である。励起子絶縁体の歴史は古く、1960年代に理論的な提案がなされている [26, 27]。励起子絶縁体の理論は、半金属においてはBCS理論との類似性があり、半導体においては、励起子の Bose-Einstein 凝縮 (BEC) として記述される。

励起子絶縁体では、価電子バンドの正孔と伝導バンドの電子がペアを組むことにより、伝導バンドと価電子バンドが自発的に混成する。これにより、半導体ではフェルミ準位付近の価電子、伝導バンドが平坦化する。図 1.9 に励起子絶縁体が現れる典型的な相図と各相における典型的な 1 電子励起スペクトルを示した。

励起子絶縁体は理論的予測が 1960 年代と古いにもかかわらず励起子絶縁体となる候補物質が挙げられ始めたのは比較的近年である。 $\text{Tm}(\text{Se}, \text{Te})$  は、高圧下で異常な電気抵抗の上昇と熱拡散率の上昇が見られており、この原因として励起子凝縮が挙げられている [28–30]。近年では、角度分解光電子分光の精度が向上したことにより、励起子絶縁体の候補物質が新しく見つかった。1- $T\text{TiSe}_2$  [31–34] と  $\text{Ta}_2\text{NiSe}_5$  [35–40] においては図 1.9 のような励起子絶縁体特有のバンド構造が観測されている。これらの候補物質が提案されたことを受けて、励起子絶縁体の物性が、再び注目されている。

ペロブスカイト型コバルト酸化物においては  $\text{Pr}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{CoO}_3$  (PCCO) における低温相がスピン状態転移近傍において励起子絶縁体の実現している可能性のある例として挙げられる。図 1.10(a)-(d) に PCCO の電気抵抗率、帯磁率、比熱、格子定数の温度依存性を示す [41]。電気抵抗率に注目すると、90K 付近で急激な変化が見られ、低温相が絶縁体となっていることがわかる。この変化に際して、比熱の発散や格子定数の飛びも得られていることから金属-絶縁体転移が生じていることがわかる。この相転移を特徴づける手がかりとし

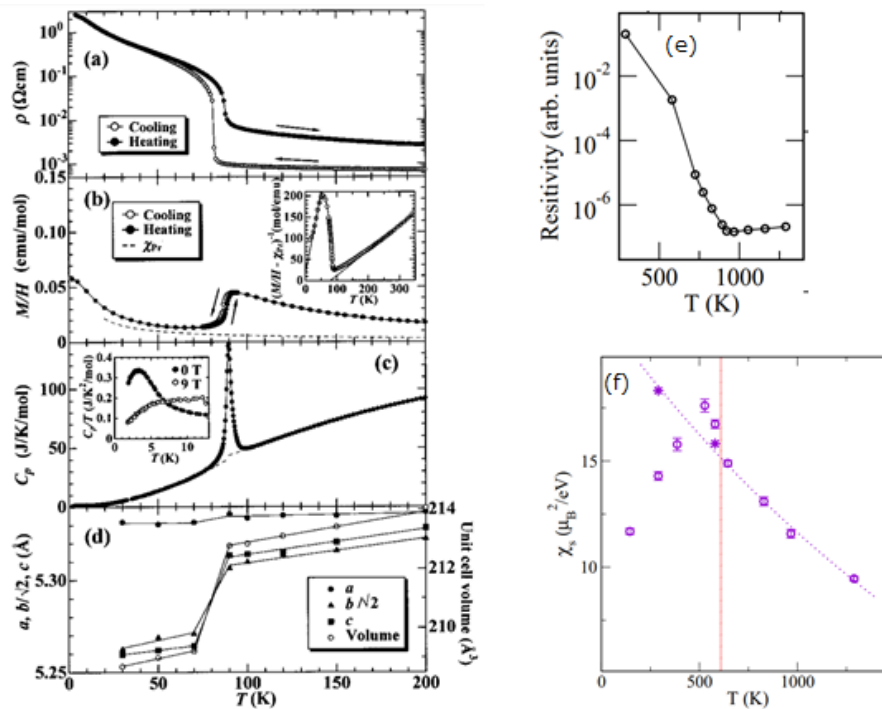


図 1.10  $\text{Pr}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{CoO}_3$  の各種物性の温度依存性. (a)-(d) は実験的に得られた (a) 電気抵抗率, (b) 帯磁率, (c) 比熱, (d) 格子定数 [41]. (e), (f) はそれぞれ励起子絶縁体を考慮した動的平均場近似による解析によって得られた (e) 電気抵抗率, (f) 帯磁率 [42].

て、以下に挙げられる実験結果が得られている。まず、低温相では磁気構造に超格子構造が得られていないため単純な Mott 絶縁体への金属-絶縁体転移ではない。また、相転移に際して、Pr の価数の変化 ( $\text{Pr}^{4+}$ (低温)  $\leftrightarrow$   $\text{Pr}^{3+}$ (高温)) が生じている [43, 44]。さらに、低温相では  $\text{Pr}^{4+}$  イオンの Kramers 縮退が破れていることから、Co イオンに中間スピン状態が混ざっていることによって、 $\text{Pr}^{4+}$  イオンにおけるスペクトルが分裂していることが示唆される [45]。Kuneš らは動的平均場近似と第一原理計算 (LDA+U) による解析により、スピントリプレットの励起子絶縁体を考えることで上記の各種実験結果を矛盾なく説明できることを示した [42]。実際に、図 1.10(e), (f) に示した解析結果として得られている電気抵抗率と帯磁率は実験結果と同様の傾向を示している。

PCCO の例から、ペロブスカイト型コバルト酸化物のようなスピン状態が拮抗している領域における励起子絶縁体の実現可能性が注目される。

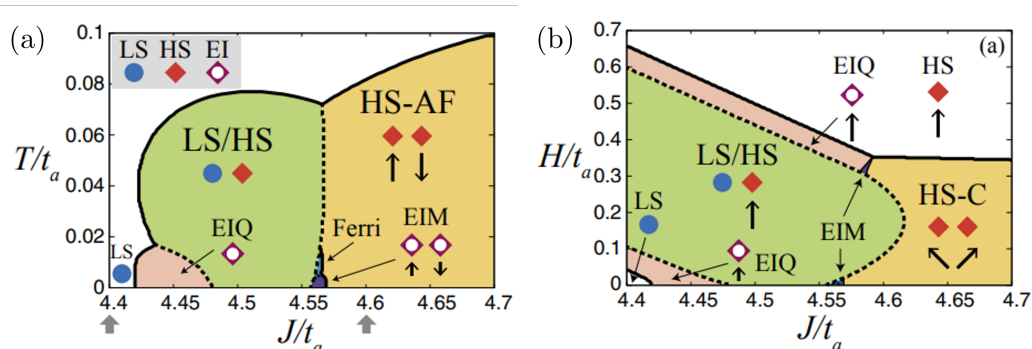


図 1.11 2 軌道 Hubbard 模型の有効模型平均場近似による相図 [4]. (a) 温度-Hund 結合 ( $T - J$ ) 相図, (b) 磁場-Hund 結合 ( $H - J$ ) 相図. LS は低スピン相, HS-AF は反強磁性秩序のある高スピン相, LS/HS は低スピン状態と高スピン状態が交互に配置したスピン状態秩序相, EIQ は励起子絶縁体相, EIM は反強磁性秩序を伴う励起子絶縁体相. HS-C は磁場により, スピンがキャントした高スピン相.

## 1.5 2 軌道 Hubbard 模型によるスピン状態転移と励起子絶縁体の先行研究

前節までで, ペロブスカイト型コバルト酸化物におけるスピン状態転移と励起子絶縁体について概観してきた. 本節では, スピン状態転移と励起子絶縁体を記述できるもっとも単純な模型である 2 軌道 Hubbard 模型について, 近年の理論研究の結果を紹介する.

スピン状態転移近傍における 2 軌道 Hubbard 模型の低エネルギー有効模型が金森らにより導出されており [46], この有効模型を平均場近似により解析した相図が, 那須, 辰野らにより得られている [3, 4]. この結果を図 1.11 に示す. 図 1.11(a) では Hund 結合を変化させた場合に LS 相と HS 相の中間相として, 励起子絶縁体相 (EIQ, EIM) および, 低スピン状態と高スピン状態が交互に配置したスピン状態秩序相 (LS/HS) が得られている. また, LS 状態に磁場を印加した場合に, その磁化過程にも励起子絶縁体相およびスピン状態秩序相が得られている. これらの結果は,  $\text{Pr}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{CoO}_3$  の低温相や  $\text{LaCoO}_3$  の強磁場実験で見られる 1 次転移を説明する理論として提案されている.



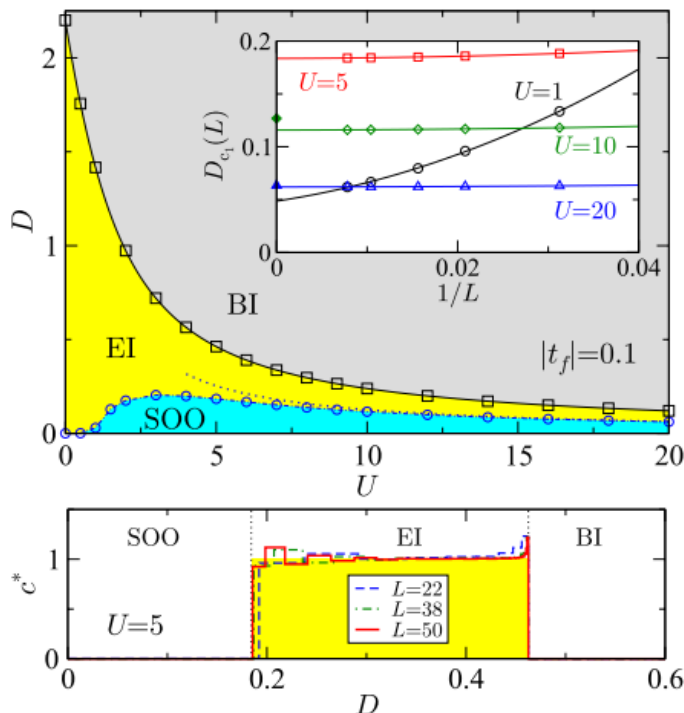


図 1.12 上図は 1 次元拡張 Falicov-Kimball 模型の基底状態相図 [47]. 下図は数値計算によるセントラルチャージの値. パラメータは  $|t_f/t_c| = 1$  と固定しており, 下図では, 更に  $U/t_c = 5$  としている.

## 1.6 1次元拡張 Falicov-Kimball 模型における励起子絶縁体と量子臨界性

拡張 Falicov-Kimball 模型 (EFK 模型)[48, 49] は, 励起子絶縁体を記述する最小の模型である. EFK 模型は以下で定義される.

$$\mathcal{H}_{\text{EFK}} = -t_c \sum_{\langle ij \rangle} (c_i^\dagger c_j + \text{H.c.}) - t_f \sum_{\langle ij \rangle} (f_i^\dagger f_j + \text{H.c.}) \quad (1.1)$$

$$+ U \sum_i c_i^\dagger c_i f_i^\dagger f_i + \frac{D}{2} \sum_i (c_i^\dagger c_i - f_i^\dagger f_i). \quad (1.2)$$

$c_i$  及び  $f_i$  はサイト  $i$  におけるスピンレスフェルミオンの消滅演算子である. EFK 模型はサイトあたりの粒子数が 1 の場合に,  $c$  のバンドの電子と  $f$  のバンドの正孔が束縛することで, 励起子絶縁体相が現れる [47, 50–52]. 1次元 EFK 模型の基底状態については, 密度行列くりこみ群法による解析がなされている [47]. 得られている基底状態相図と, セントラルチャージを図 1.12 に示す. 1次元系の場合は, 励起子に対する秩序変数  $\langle c_i^\dagger f_i \rangle$  がゼロ

となっており、代わりに、相関関数が冪則となり、セントラルチャージが  $c^* = 1$  と得られている。EFK 模型は強結合極限 ( $U \rightarrow \infty$ ) において XXZ 模型に帰着し、XY 面内の回転対称性がある。これにより、1次元系では強い量子揺らぎによって長距離秩序が現れず、相関関数が冪になっていると解釈されている。

1次元 EFK 模型と比較したとき、2軌道 Hubbard 模型の場合は、スピン自由度が存在し、スピン間の相互作用が入る。また、ペアホッピングの存在により、同じ軌道内の電子数の保存が破れている。この違いにより、EFK 模型での励起子絶縁体相に対応する相の描像は、1次元 2軌道 Hubbard 模型では異なるものになる可能性がある。

## 1.7 1次元拡張 Hubbard 模型における BOW 相とエンタングルメントエントロピー

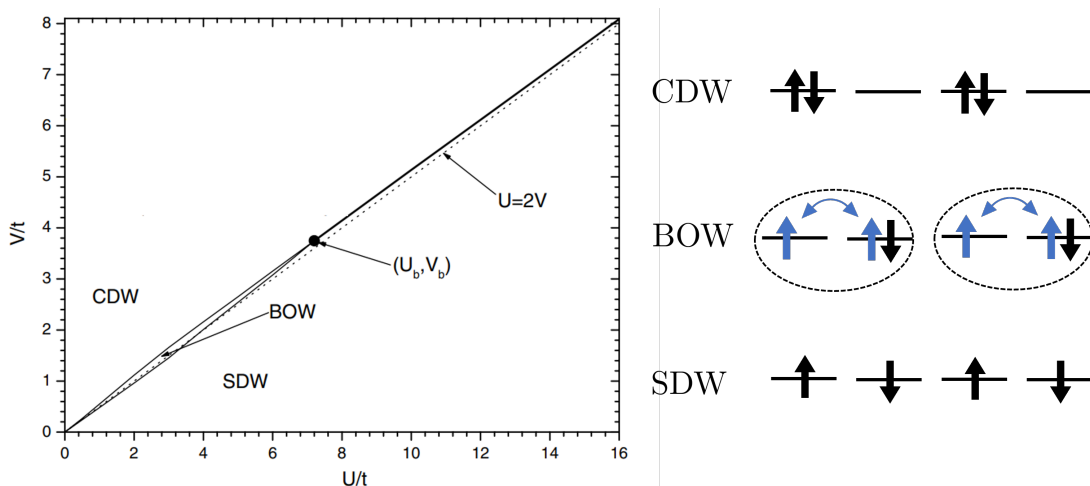


図 1.13 1次元拡張 Hubbard 模型の基底状態相図 [53]. 右に CDW 相, BOW 相, SDW 相におけるフェルミオンの典型的な描像を追記している。

スピン状態転移における励起子絶縁体相は、LS 状態と HS 状態という 2通りの安定相の間で HS 状態と LS 状態が混成することで安定化している相と捉えることができる。このような相は、励起子絶縁体相に限らず、よく見られる。

このような相の例として、本節では 1次元拡張 Hubbard 模型における BOW 相 (bond order wave phase) について説明する。1次元拡張 Hubbard 模型は次のハミルトニアンで記述される。

$$\mathcal{H}_{\text{EHM}} = -t \sum_{i\sigma} (c_{i+1,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} + \text{H.c.}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + V \sum_i n_{i+1} n_i. \quad (1.3)$$

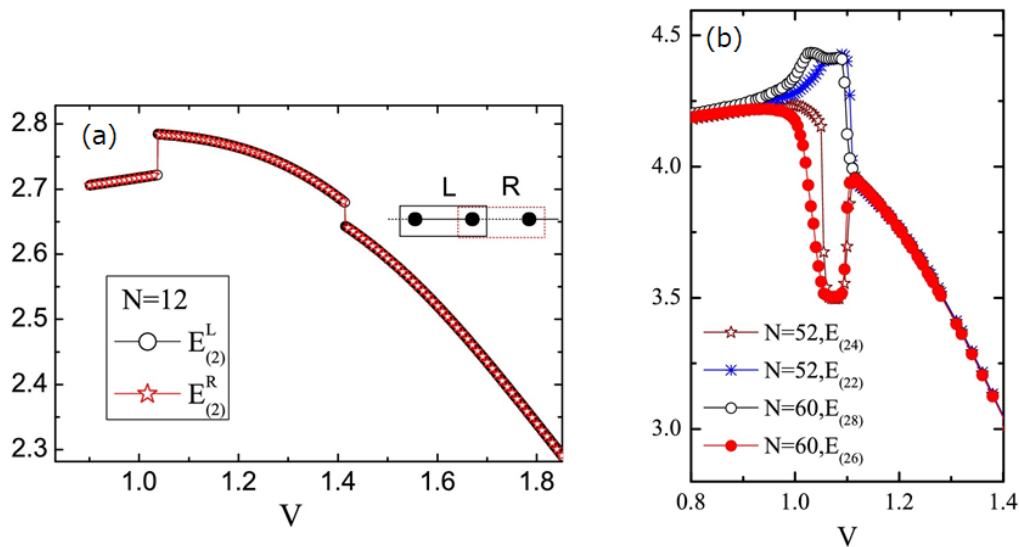


図 1.14 1次元拡張 Hubbard 模型の  $U/t = 2$  における CDW-BOW-SDW 転移におけるエンタングルメントエントロピー [54].  $E_{(l)}$  は  $l$  サイトの部分系のエンタングルメントエントロピーを表す. (a) は少数サイト  $N = 12$  の厳密対角化による結果であり, ここでは自発的な対称性の破れがない. (b) は密度行列くりこみ群法による結果であり, ここでは並進対称性が破れている.

ここで,  $c_{i\sigma}$  はサイト  $i$ , スピン  $\sigma$  のフェルミオンの場の演算子であり,  $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ ,  $n_i = n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}$  である. この基底状態相図を図 1.13 に示す. 図 1.13 には, 各相における粒子の模式図を併記している. この模型は  $U \ll 2V$  のときに CDW 相となり,  $U \gg 2V$  のときに SDW 相となる.  $U \sim 2V$  の領域では両方の状態が拮抗することで量子的な揺らぎの強い BOW 相が出現する [53, 55–57]. 相境界の判定をする手段として, 相関関数の長距離での振る舞いをみる方法が用いられてきた. しかし, BOW 相のような量子揺らぎが強い相の相境界を精度良く決定するためには大きいシステムサイズが必要である. 近年では, 系のエンタングルメントエントロピーの性質がこのような相転移に敏感であることを利用して, 比較的小さいシステムサイズ ( $L \lesssim 60$ ) でも相境界を精度良く決定できることが報告されている [54, 58–61]. 図 1.14 に CDW-BOW-SDW 転移におけるエンタングルメントエントロピーを示した. 図 1.14(a) では, 並進対称性の破れていない少数系  $N = 12$  において 2 サイトエンタングルメントエントロピーが不連続となることで, CDW-BOW-SDW 相境界を決定している. また, 図 1.14(b) では,  $N = 52, 60$  サイト系でのエンタングルメントエントロピーをプロットしており, エンタングルメントエントロピー急激な変化によって相境界を決定できることを示している.

本研究ではこれらの研究を踏まえ, 2 軌道 Hubbard 模型におけるエンタングルメント

エントロピーの性質にも注目する.

## 1.8 本研究の目的

前節までで述べてきたように, ペロブスカイト型コバルト酸化物では, 低スピン状態と高スピン状態がエネルギー的に拮抗しており, 温度や磁場, 圧力によって, 多様な状態をとる. 一般に, スピン状態転移のように異なる局所構造がエネルギー的に拮抗する場合には, 量子効果によってそれらが共存した状態が得られる場合がある. 特に,  $\text{Pr}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{CoO}_3$  の低温相では, 低スピン状態と高スピン状態が自発的に混成し, コヒーレントな状態となる励起子絶縁体を実現することが提案されている. また, 薄膜実験や強磁場実験においては, 圧力や磁場によりスピン状態が競合することで, 複数のスピン状態秩序が実現することが提案されている. このような背景の下, 励起子絶縁体と多様なスピン状態秩序を考慮した理論の構築が必要である.

スピン状態転移を記述することができるもっとも単純なモデルとして, 2 軌道 Hubbard 模型がある. 先行研究では, 2 軌道 Hubbard 模型に対して, 動的平均場近似や低エネルギー有効模型に対する平均場近似がなされており, 励起子絶縁体やチェッカーボード型の LS/HS のスピン状態秩序が確認されている. 一方でより大きい超格子構造に対する解析はなされていない. 本研究では, 1 次元 2 軌道 Hubbard 模型に対し, 低エネルギー有効模型の基底状態を密度行列くりこみ群法により解析することにより, より大きな系における多様な量子自由度を厳密に取り扱う. これにより, スピン状態転移近傍で実現する電子状態の正確な描像を明らかにする. 特に, 励起子絶縁体とスピン状態秩序に注目し, 励起子相関のとスピン状態秩序の空間構造について明らかにする.

さらに, 本研究では有効模型の基底状態に対しエンタングルメントエントロピーの性質に基づいた各相の特徴づけを試み, その可能性について提示する.

## 第 2 章

# 理論模型と計算手法

### 2.1 2 軌道 Hubbard 模型と低エネルギー有効模型

#### 2.1.1 ノーテーション

ここでは、場の演算子のインデックスにおけるノーテーションについて定める。以降では、特に触れない限り、以下のノーテーションで表記する。

- $i, j$  サイト
- $\gamma$  軌道 (2 軌道模型では  $a$  or  $b$ )
- $\sigma$  スピン ( $\uparrow, \downarrow$ )

場のインデックスは  $(i, \gamma, \sigma)$  の直積で表される。フェルミオンの場においては、反対称性を課するために順序を定義する必要がある。ここでは、フェルミオンの場の順序を 1 次元化したインデックス  $I = n_s n_\gamma j + n_s \gamma + \sigma$  によって定義する。ここで、 $n_s = 2$  は 1 軌道あたりのスピン自由度の数、 $n_\gamma$  は 1 サイトあたりの軌道の数であり、 $\gamma, \sigma$  は適当に対応する整数におきかえる。

#### 2.1.2 電子間相互作用

一般に電子間の Coulomb 相互作用は以下の形で書くことができる。

$$\mathcal{H}_{ee} = \sum_{\gamma_1 \gamma_2 \gamma_3 \gamma_4 \sigma_1 \sigma_2} \frac{1}{2} v_{\gamma_1 \gamma_2; \gamma_3 \gamma_4} c_{\gamma_1 \gamma_2 \sigma_1}^\dagger c_{\gamma_1 \gamma_2 \sigma_2}^\dagger c_{\gamma_3 \gamma_4 \sigma_2} c_{\gamma_3 \gamma_4 \sigma_1}, \quad (2.1)$$

$$v_{\gamma_1 \gamma_2; \gamma_3 \gamma_4} = \int dr_1 \int dr_2 \psi_{\gamma_1}(r_1)^* \psi_{\gamma_2}(r_2)^* \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} \psi_{\gamma_3}(r_2) \psi_{\gamma_4}(r_1). \quad (2.2)$$

ここで  $\psi_\gamma$  は軌道  $\gamma$  の波動関数である。また,  $|0\rangle$  は真空状態を表す。また,  $\psi(r_1)$  は位置  $r$  における電子の消滅演算子であり,  $c_\gamma$  は軌道  $\gamma$  における電子の消滅演算子である。Coulomb 相互作用の行列要素は, Coulomb 相互作用の対称性から以下のように表現できる。

$$\mathcal{H}_{ee} = \sum_{\gamma} U_{\gamma} n_{\gamma\uparrow} n_{\gamma\downarrow} \quad (2.3)$$

$$+ \sum_{\sigma\sigma'\gamma'>\gamma} U'_{\gamma,\gamma'} n_{\gamma\sigma} n_{\gamma'\sigma'} \quad (2.4)$$

$$+ \sum_{ss'\gamma'>\gamma} J_{\gamma,\gamma'} c_{\gamma\sigma}^{\dagger} c_{\gamma'\sigma'}^{\dagger} c_{\gamma'\sigma'} c_{\gamma\sigma} \quad (2.5)$$

$$+ \sum_{\gamma'\gamma} I_{\gamma,\gamma'} c_{\gamma\uparrow}^{\dagger} c_{\gamma\downarrow}^{\dagger} c_{\gamma'\downarrow} c_{\gamma'\uparrow}. \quad (2.6)$$

ここで  $n_{\gamma s} = c_{\gamma s}^{\dagger} c_{\gamma s}$ . 各パラメータは以下のように対応する。

$$U_{\gamma} = v_{\gamma\gamma;\gamma\gamma}, \quad (2.7)$$

$$U'_{\gamma,\gamma'} = v_{\gamma\gamma';\gamma'\gamma} \quad (\gamma \neq \gamma'), \quad (2.8)$$

$$J_{\gamma,\gamma'} = v_{\gamma\gamma';\gamma\gamma'} \quad (\gamma \neq \gamma'), \quad (2.9)$$

$$I_{\gamma,\gamma'} = v_{\gamma\gamma;\gamma'\gamma'} \quad (\gamma \neq \gamma'). \quad (2.10)$$

また,  $J_{\gamma,\gamma'} = I_{\gamma,\gamma'}$  の性質がある。特に,  $U$  を軌道内 Coulomb 相互作用,  $U'$  を軌道間 Coulomb 相互作用,  $J$  を Hund 結合,  $I$  をペアホッピングと呼ぶ。

特に, 軌道  $\gamma$  が  $d$  軌道で近似できる場合に以下が成立する。

$$U = U' + 2J, \quad (2.11)$$

$$J = I. \quad (2.12)$$

### 2.1.3 多軌道 Hubbard 模型

ここでは, 多軌道 Hubbard 模型を示す。多軌道 Hubbard 模型はサイト内のクーロン相互作用とサイト間の電子遷移を考慮した格子模型であり, 次のように構成される。

$$\mathcal{H}_{\text{MOHM}} = \mathcal{H}^t + \mathcal{H}^{\Delta} + \mathcal{H}^C, \quad (2.13)$$

$$\mathcal{H}^t = \sum_j \sum_{\delta} h_{j+\delta,j}^t, \quad (2.14)$$

$$\mathcal{H}^{\Delta} = \sum_j h_j^{\Delta}, \quad (2.15)$$

$$\mathcal{H}^C = \sum_j h_j^C. \quad (2.16)$$

ここで,  $h^t$  はサイト  $j$  からサイト  $j + \delta$  への電子遷移を表す項であり, 以下で定義される.

$$h_{j+\delta,j}^t = - \sum_j \sum_{\gamma\gamma'} \left( t_{\delta\gamma\gamma'} c_{j+\delta,\gamma,\sigma}^\dagger c_{j,\gamma,\sigma} + \text{H.c.} \right). \quad (2.17)$$

$h_j^\Delta$  はサイト  $j$  における, 配位子による結晶場分裂を表し, 以下で定義される.

$$h_j^\Delta = \sum_\gamma \Delta_\gamma (n_{j\gamma\uparrow} + n_{j\gamma\downarrow}). \quad (2.18)$$

$h_j^C$  は前節で示した Coulomb 相互作用を表す項であり, 以下で定義される.

$$h_j^C = \sum_\gamma U_\gamma n_{j\gamma\uparrow} n_{j\gamma\downarrow} \quad (2.19)$$

$$+ \sum_{\sigma\sigma'\gamma'>\gamma} U'_{\gamma,\gamma'} n_{j\gamma\sigma} n_{j\gamma'\sigma'} \quad (2.20)$$

$$+ \sum_{ss'\gamma'>\gamma} J_{\gamma,\gamma'} c_{j\gamma\sigma}^\dagger c_{j\gamma'\sigma'}^\dagger c_{j\gamma'\sigma'} c_{j\gamma\sigma} \quad (2.21)$$

$$+ \sum_{\gamma'\gamma} I_{\gamma,\gamma'} c_{j\gamma\uparrow}^\dagger c_{j\gamma\downarrow}^\dagger c_{j\gamma'\downarrow} c_{j\gamma'\uparrow}. \quad (2.22)$$

### 2.1.4 2 軌道 Hubbard モデル

前項まででは, 一般的な多軌道 Hubbard 模型を扱ってきた. しかし,  $d$  電子は 5 軌道あり, そのすべてを取り扱うのは煩雑である. そのため, 本研究では, スピン状態転移と励起子絶縁体を表現できる最小限の構成である 2 軌道 Hubbard 模型を扱う. 2 軌道 Hubbard 模型は以下のように書くことができる.

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{TOHM}} = & - \sum_{\langle ij \rangle \gamma\sigma} t_\gamma \left( c_{i\gamma\sigma}^\dagger c_{j\gamma\sigma} + \text{H.c.} \right) + \sum_i \sum_\gamma \Delta_\gamma n_{i\gamma} \\ & + U \sum_{i\gamma} n_{i\gamma\uparrow} n_{i\gamma\downarrow} + U' \sum_{i\sigma} n_{ia\sigma} n_{ib\sigma} \\ & + J \sum_{i\sigma\sigma'} c_{ia\sigma}^\dagger c_{ib\sigma'}^\dagger c_{ia\sigma'} c_{ib\sigma} + I \sum_{i\gamma \neq \gamma'} c_{i\gamma\uparrow}^\dagger c_{i\gamma\downarrow}^\dagger c_{i\gamma'\downarrow} c_{i\gamma'\uparrow}. \end{aligned} \quad (2.23)$$

ここで, 軌道  $\gamma$  の和は 2 軌道  $\gamma = a, b$  に対して取る. また,  $n_{i\gamma\sigma} = c_{i\gamma\sigma}^\dagger c_{i\gamma\sigma}$ ,  $n_{i\gamma} = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} n_{i\gamma\sigma}$ . クーロン相互作用の各項に対応する概念図を図 2.1 に示した.

### 2.1.5 2 軌道 Hubbard モデル, シングルサイトの固有状態

本項では, 電子遷移項  $h^t$  を除いた 1 原子に対する 2 軌道 Hubbard 模型の固有状態を求める.

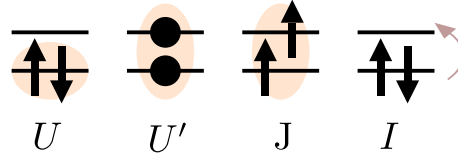


図 2.1 2 軌道 Hubbard 模型における各種クーロン相互作用の概念図.

2 軌道模型の 1 サイトの量子状態の自由度は, 16 である. 特に 1 サイトの電子数が 2 の場合にはクーロン相互作用により固有状態が非自明なものになる. 電子数が 2 の状態空間の次元は  ${}_4C_2 = 6$  である. 各基底を以下のようにとる.

$$|0011\rangle = c_{b\uparrow}^\dagger c_{b\downarrow}^\dagger |0\rangle, \quad (2.24)$$

$$|0101\rangle = c_{a\downarrow}^\dagger c_{b\downarrow}^\dagger |0\rangle, \quad (2.25)$$

$$|0110\rangle = c_{a\downarrow}^\dagger c_{b\uparrow}^\dagger |0\rangle, \quad (2.26)$$

$$|1001\rangle = c_{a\uparrow}^\dagger c_{b\downarrow}^\dagger |0\rangle, \quad (2.27)$$

$$|1010\rangle = c_{a\uparrow}^\dagger c_{b\uparrow}^\dagger |0\rangle, \quad (2.28)$$

$$|1100\rangle = c_{a\uparrow}^\dagger c_{a\downarrow}^\dagger |0\rangle. \quad (2.29)$$

このとき, ハミルトニアンは以下のようにかける.

$$\begin{aligned}
 H = & \Delta_b \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \Delta_a \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \\
 & + U \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + U' \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
 & + J \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + I \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$



$$= \begin{pmatrix} 2\Delta_b + U & 0 & 0 & 0 & 0 & I \\ 0 & \Delta_b + \Delta_a + U' - J & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Delta_b + \Delta_a + U' + J & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & J & \Delta_b + \Delta_a + U' + J & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \Delta_b + \Delta_a + U' - J & 0 \\ I & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\Delta_a + U \end{pmatrix} \quad (2.30)$$

これを対角化すると以下の固有エネルギー固有ベクトルが得られる。

index	eigen states	eigen energies	$s$	$n$
0	$ H_{+1}\rangle = c_{a\uparrow}^\dagger c_{b\uparrow}^\dagger  0\rangle$	$\Delta_a + \Delta_b + U' - J$	1	2
1	$ H_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(c_{a\uparrow}^\dagger c_{b\downarrow}^\dagger + c_{a\downarrow}^\dagger c_{b\uparrow}^\dagger)  0\rangle$	$\Delta_a + \Delta_b + U' - J$	1	2
2	$ H_{-1}\rangle = c_{a\downarrow}^\dagger c_{b\downarrow}^\dagger  0\rangle$	$\Delta_a + \Delta_b + U' - J$	1	2
3	$ L\rangle = (f_- c_{a\uparrow}^\dagger c_{a\downarrow}^\dagger + g_- c_{b\uparrow}^\dagger c_{b\downarrow}^\dagger)  0\rangle$	$\Delta_a + \Delta_b + U - \Delta'$	0	2
4	$ hL\rangle = (f_+ c_{a\uparrow}^\dagger c_{a\downarrow}^\dagger + g_+ c_{b\uparrow}^\dagger c_{b\downarrow}^\dagger)  0\rangle$	$\Delta_a + \Delta_b + U + \Delta'$	0	2
5	$ iL\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(c_{a\uparrow}^\dagger c_{b\downarrow}^\dagger - c_{a\downarrow}^\dagger c_{b\uparrow}^\dagger)  0\rangle$	$\Delta_a + \Delta_b + U' + J$	0	2

ここで

$$\Delta' = \sqrt{(\Delta_a - \Delta_b)^2 + I^2}, \quad (2.31)$$

$$f_{\pm} = \left[ 1 + \left( (\Delta_a - \Delta_b)/I \pm \sqrt{1 + ((\Delta_a - \Delta_b)/I)^2} \right)^2 \right]^{-1/2}, \quad (2.32)$$

$$g_{\pm} = [1 - f_{\pm}^2]^{1/2}. \quad (2.33)$$

1 サイトあたりの電子数が  $n = 0, 1, 3, 4$  の場合、固有状態は自明であり、以下で与えられる。

index	eigen states	eigen energies	$s$	$n$
6	$ S_{a,\uparrow}\rangle = c_{a\uparrow}^\dagger  0\rangle$	$\Delta_a$	1/2	1
7	$ S_{a,\downarrow}\rangle = c_{a\downarrow}^\dagger  0\rangle$	$\Delta_a$	1/2	1
8	$ S_{b,\uparrow}\rangle = c_{b\uparrow}^\dagger  0\rangle$	$\Delta_b$	1/2	1
9	$ S_{b,\downarrow}\rangle = c_{b\downarrow}^\dagger  0\rangle$	$\Delta_b$	1/2	1
10	$ T_{a,\uparrow}\rangle = c_{a\uparrow}^\dagger c_{b\uparrow}^\dagger c_{b\downarrow}^\dagger  0\rangle$	$\Delta_a + 2\Delta_b + U + 2U'$	1/2	3
11	$ T_{a,\downarrow}\rangle = c_{a\downarrow}^\dagger c_{b\uparrow}^\dagger c_{b\downarrow}^\dagger  0\rangle$	$\Delta_a + 2\Delta_b + U + 2U'$	1/2	3
12	$ T_{b,\uparrow}\rangle = c_{a\uparrow}^\dagger c_{a\downarrow}^\dagger c_{b\uparrow}^\dagger  0\rangle$	$2\Delta_a + \Delta_b + U + 2U'$	1/2	3
13	$ T_{b,\downarrow}\rangle = c_{a\uparrow}^\dagger c_{a\downarrow}^\dagger c_{b\downarrow}^\dagger  0\rangle$	$2\Delta_a + \Delta_b + U + 2U'$	1/2	3
14	$ 0\rangle$	0	0	0
15	$ F\rangle = c_{a\uparrow}^\dagger c_{a\downarrow}^\dagger c_{b\uparrow}^\dagger c_{b\downarrow}^\dagger  0\rangle$	$2\Delta_a + 2\Delta_b + 2U + 4U'$	0	4

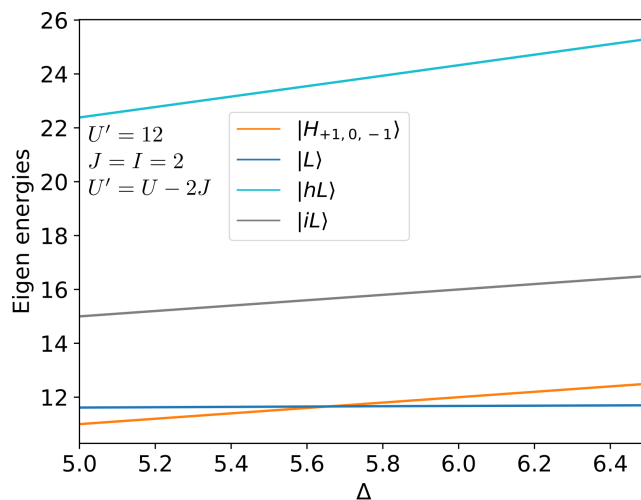


図 2.2  $n = 2$  における各固有エネルギーの結晶場分裂の大きさ  $\Delta$  依存性. 相互作用パラメータはそれぞれ,  $U' = 12$ ,  $J = I = 2$ ,  $U' = U - 2J = 8$ .

ここで,  $s$  はスピンの大きさを表し,  $n$  は電子数を表す. また,  $|0\rangle$  は真空を表す. 以下では,  $\Delta = \Delta_a - \Delta_b \geq 0$  とする. 固有状態  $|H_{s_z=-1,0,+1}\rangle$  は  $s = 1$  のトリプレットを表す.  $|L\rangle$  は, 低エネルギーである  $b$  軌道に電子 2 つが占有した状態が主要でありペアホッピング  $I$  が有限である場合には, 高エネルギーの  $a$  軌道が混成する. このときスピン状態は  $s = 0$  の低スピン状態である.  $|hL\rangle$  と  $|iL\rangle$  は  $s = 0$  の高エネルギー状態であり,  $|hL\rangle$  は高エネルギーである  $b$  軌道に電子 2 つが占有した状態が主要な状態である.  $|iL\rangle$  は,  $a$  軌道の電子 1 つと  $b$  軌道の電子 1 つがシングレットを組んだ状態である.

以下では,  $|H_{s_z}\rangle$  を高スピン状態 (HS 状態: high-spin state) と呼び,  $|L\rangle$  を低スピン状態 (LS 状態: low-spin state) と呼ぶ. 注意点として, 本模型では,  $3d$  軌道の 5 軌道ではなく 2 軌道に落としているため, 2 軌道模型における HS 状態 ( $s = 1$ ) と LS 状態 ( $s = 0$ ) は素直にコバルト酸化物の HS 状態 ( $s = 2$ ), IS 状態 ( $s = 1$ ), LS 状態 ( $s = 0$ ) に対応しない. しかし, 2 軌道模型の範囲であっても  $s = 0$  と  $s = 1$  の自由度が存在していることから, スピン状態転移の定性的な描像を捉えることができる.

1 サイトあたりの電子数  $n = 2$  における, 各固有エネルギーを図 2.2 に示した.  $\Delta = \sqrt{(U - U' + J)^2 - I^2} = 4\sqrt{2} = 5.65\dots$  で基底状態におけるスピンの大きさが  $s = 1$  から  $s = 0$  へと転移していることがわかる.

### 2.1.6 2 軌道 Hubbard 模型の低エネルギー有効模型

本節では, 2 軌道 Hubbard 模型において, サイトあたりの電子数が 2 の場合に, スピン状態転移近傍における低エネルギー有効模型を導出する. 具体的には 2 軌道 Hubbard 模

型 (式 (2.23)) において, 高エネルギーの基底を除いた上で, ホッピングに  $t_a, t_b$  を 2 次摂動として扱う. このような変換は, 一般に Schrieffer–Wolff transformation と呼ばれる.

ここではスピン状態転移を表現できる低エネルギーの 1 サイトの基底として, 以下を採用する.

$$|H_{+1}\rangle = c_{a\uparrow}^\dagger c_{b\uparrow}^\dagger |0\rangle, \quad (2.34)$$

$$|H_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(c_{a\uparrow}^\dagger c_{b\downarrow}^\dagger + c_{a\downarrow}^\dagger c_{b\uparrow}^\dagger) |0\rangle, \quad (2.35)$$

$$|H_{-1}\rangle = c_{a\downarrow}^\dagger c_{b\downarrow}^\dagger |0\rangle, \quad (2.36)$$

$$|L\rangle = (f_- c_{a\uparrow}^\dagger c_{a\downarrow}^\dagger + g_- c_{b\uparrow}^\dagger c_{b\downarrow}^\dagger) |0\rangle. \quad (2.37)$$

これらの基底は, 図 2.2 において基底状態となっている 2 通り (縮退を考慮すると 4 通り) の固有状態に対応している. 1 サイトの電子数が  $n = 0, 1, 3, 4$  の基底は, 1 サイトあたりの電子数が 2 となるようなフィリングにおいて, クーロン相互作用  $U, U'$  が  $t_a, t_b$  と比べて十分に大きい場合にはエネルギーが高くなる. そのため, 低エネルギー有効模型の基底としては採用しない. これらの状態は Schrieffer-Wolff transformation における摂動の中間状態としては考慮されている. このことは, クーロン相互作用が大きい場合に, 1 サイトあたり 2 電子の 2 軌道 Hubbard 模型の基底状態は電荷ギャップの存在する絶縁体になっていることを表している. 一方でスピン自由度は式 (2.34)-(2.37) における基底で残っているため, スピンギャップの有無は非自明であり, 低スピンから高スピンへの励起ギャップも非自明である.

低エネルギー有効模型は  $t$  が弱い強結合極限における模型といえる. これは励起子絶縁体における BCS-BEC クロスオーバーにおいては BEC の極限を考えていることに対応する.

低エネルギー有効ハミルトニアンは以下のように書き下すことができる.

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}^{\text{eff}} = & E_H \sum_i P_{Hi} \\
& + E_L \sum_i P_{Li} \\
& + \delta E_{LL} \sum_{\langle ij \rangle} P_{Li} P_{Lj} \\
& + \delta E_{HL} \sum_{\langle ij \rangle} (P_{Hi} P_{Lj} + P_{Li} P_{Hj}) \\
& + J_s \sum_{\langle ij \rangle} (\vec{s}_i \cdot \vec{s}_j - 1) P_{Hi} P_{Hj} \\
& + J' \sum_{\langle ij \rangle} [P_i^- (\vec{s}_i \cdot \vec{s}_j + 1) P_j^+ + \text{H.c.}] \\
& + I' \sum_{\langle ij \rangle} [(\vec{s}_i \cdot \vec{s}_j - 1) P_i^+ P_j^+ + \text{H.c.}]. \tag{2.38}
\end{aligned}$$

式 (2.38) において, 各種演算子は次のように定義されている.

$$P_{Li} = |L\rangle_i \langle L|_i, \tag{2.39}$$

$$P_{Hi} = \sum_{s^z=-1,0,1} |H_{s^z}\rangle_i \langle H_{s^z}|_i, \tag{2.40}$$

$$P_i^+ = |H_0\rangle_i \langle L|_i, \tag{2.41}$$

$$P_i^- = |L\rangle_i \langle H_0|_i. \tag{2.42}$$

また, スカラー量は以下で与えられる.

$$E_H = \Delta + U' - J, \tag{2.43}$$

$$E_L = \Delta + U - \Delta', \tag{2.44}$$

$$\delta E_{LL} = \frac{4f^2 g^2 (t_a^2 + t_b^2)}{2U' - U - J + 2\Delta'}, \tag{2.45}$$

$$\delta E_{HL} = (t_a^2 + t_b^2) \left[ \frac{f^2}{-\Delta + U' + \Delta'} + \frac{g^2}{\Delta + U' + \Delta'} \right], \tag{2.46}$$

$$J_s = \frac{t_a^2 + t_b^2}{U + J}, \tag{2.47}$$

$$J' = 2t_a t_b \left[ \frac{f^2}{-\Delta + U' + \Delta'} + \frac{g^2}{\Delta + U' + \Delta'} \right], \tag{2.48}$$

$$I' = 2t_a t_b f g \left[ \frac{1}{U + J} + \frac{1}{2U' - U - J + 2\Delta'} \right]. \tag{2.49}$$

ここで,

$$\Delta = \Delta_a - \Delta_b, \quad (2.50)$$

$$\Delta' = \sqrt{\Delta^2 + I^2} \quad (2.51)$$

とした.

式 (2.38) で定義される有効ハミルトニアンの見通しを良くするために, 以下では, スピン-擬スピンによる表現を導入する. はじめに,  $s = 1$  のトリプレットを 4 極子基底 ( $\Gamma = X, Y, Z$ ) で表現する.  $s = 0$  の低スピン状態と  $s = 1$  の高スピン状態の間の昇降演算子を以下で定義する

$$P_X^- = \frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle \langle H_{-1}| - |L\rangle \langle H_{+1}|), \quad (2.52)$$

$$P_Y^- = \frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle \langle H_{-1}| + |L\rangle \langle H_{+1}|), \quad (2.53)$$

$$P_Z^- = |L\rangle \langle H_0|, \quad (2.54)$$

$$P_\Gamma^+ = (P_\Gamma^-)^\dagger \quad (\Gamma = X, Y, Z). \quad (2.55)$$

これらの昇降演算子を用いて擬スピン  $\tau_\Gamma^\gamma$  は以下で定義される

$$\tau_\Gamma^x = P_\Gamma^- + P_\Gamma^+, \quad (2.56)$$

$$\tau_\Gamma^y = i(P_\Gamma^- - P_\Gamma^+), \quad (2.57)$$

$$\tau_\Gamma^z = P_\Gamma^+ P_\Gamma^- - P_\Gamma^L. \quad (2.58)$$

注意点として, 擬スピン演算子  $\tau_\Gamma$  は対応する  $1/2$  スピン演算子の 2 倍である. これらの演算子を用いて有効模型 (2.38) は次のスピン-擬スピン表現に書き換えられる.

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{\text{eff}} = & E_{0\tau} - h_{\tau z} \sum_i \tau_i^z + J_s \sum_{\langle ij \rangle} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j \\ & + J_z \sum_{\langle ij \rangle} \tau_i^z \tau_j^z + J_x \sum_{\Gamma=X,Y,Z} \sum_{\langle ij \rangle} \tau_{\Gamma i}^x \tau_{\Gamma j}^x + J_y \sum_{\Gamma=X,Y,Z} \sum_{\langle ij \rangle} \tau_{\Gamma i}^y \tau_{\Gamma j}^y, \end{aligned} \quad (2.59)$$

ここで,  $\vec{s}$  は  $s = 1$  のスピン演算子であり,  $\tau_i^z = \tau_{X i}^z + \tau_{Y i}^z + \tau_{Z i}^z$  である. 注意点として, スピン演算子  $\vec{s}$  は擬スピン演算子  $\tau_\Gamma$  と交換可能ではない. 式 (2.59) における各因子は,

次のように与えられる.

$$E_{0\tau} = NE_L - \frac{Nz\delta E_{LL}}{2} + \frac{3N\tilde{\Delta}}{4} + \frac{9NzJ_n}{32}, \quad (2.60)$$

$$-h_{\tau z} = -\left(\frac{\tilde{\Delta}}{4} + \frac{3zJ_n}{16}\right), \quad (2.61)$$

$$J_x = \frac{J' + I'}{2}, \quad (2.62)$$

$$J_y = \frac{J' - I'}{2}, \quad (2.63)$$

$$J_z = \frac{J_n}{16}, \quad (2.64)$$

ここで

$$\tilde{\Delta} = E_H - E_L + z(\delta E_{LL} - \delta E_{HL}), \quad (2.65)$$

$$J_n = 2\delta E_{HL} - \delta E_{LL} - J_s, \quad (2.66)$$

ここで,  $z$  は最近接サイト数であり, 特に 1 次元系においては  $z = 2$  である. 注意点として, 式 (2.59) の導出において, 格子構造が bipartite であることを仮定しているため, 1 次元鎖や 2 次元正方格子には適用できるが, 三角格子などの格子を考える場合には, 式 (2.38) を用いる必要がある.

最後に, 磁場を印加した場合のゼーマンエネルギーを次式で導入する.

$$\mathcal{H}_{\text{Zeeman}} = -H \sum_i s_i^z. \quad (2.67)$$

参考として, 有効模型のスピン-擬スピン表示におけるパラメータ  $J_x, J_y, J_z, J_s$  の 2 軌道 Hubbard 模型のパラメータへの依存性を示しておく. 以下では  $t_a^2 + t_b^2$  を固定して考える. 式 (2.59), において  $J_z \propto t_a^2 + t_b^2$  であり,  $J_x, J_y \propto 2t_a t_b$  である. ここで, 擬スピン間相互作用の異方性を表すパラメータとして

$$\eta = \frac{2t_a t_b}{t_a^2 + t_b^2} \quad (2.68)$$

を導入しておく.  $\eta$  は  $0 \leq \eta \leq 1$  の範囲で変化し,  $t_b/t_a = 0$  のとき  $\eta = 0$  となり,  $t_b/t_a = 1$  のとき  $\eta = 1$  となる. 有効模型のスピン-擬スピン表示におけるパラメータ  $J_x, J_y, J_z, J_s$  の 2 軌道 Hubbard 模型のパラメータ  $\Delta/\sqrt{t_a^2 + t_b^2}$  および  $\eta = 2t_a t_b/(t_a^2 + t_b^2)$  への依存性を図 2.3 に示した.

### 2.1.7 各パラメータ領域における基底状態の典型的な描像

有効模型 (2.59) の基底状態について, 数値解析の結果を示す前に, 典型的なパラメータ領域におけるスピン, 擬スピンの描像について述べておく.

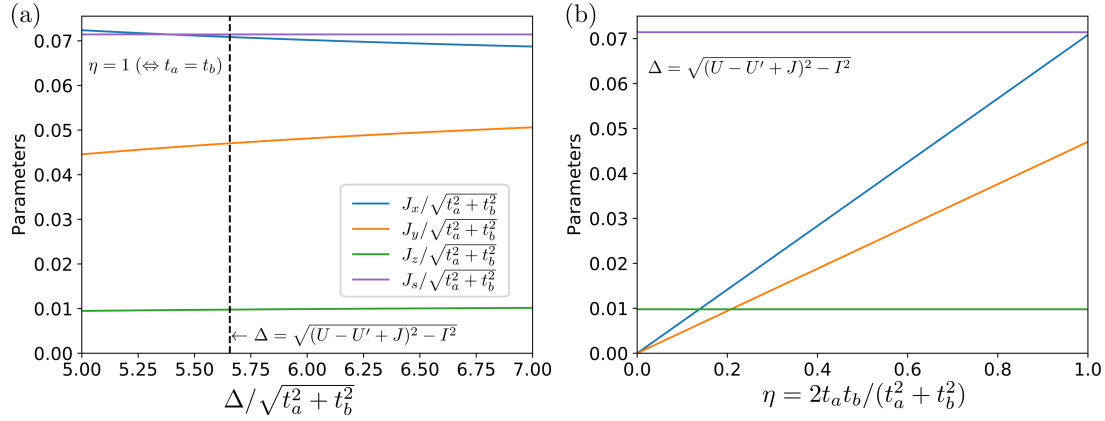


図 2.3 有効模型のスピン-擬スピン表示におけるパラメータ  $J_x, J_y, J_z, J_s$  の 2 軌道 Hubbard 模型のパラメータ  $\Delta/\sqrt{t_a^2 + t_b^2}$ ,  $\eta = 2t_a t_b / (t_a^2 + t_b^2)$  への依存性. (a) は  $\eta = 1$  ( $\Leftrightarrow t_a = t_b = 1/\sqrt{2}$ ) に固定した場合の結晶場分裂依存性. 破線は  $t_a = t_b = 0$  の場合のスピン状態転移点であり,  $\Delta = \sqrt{(U - U' + J)^2 - I^2}$ . (b) は, スピン状態転移点  $\Delta = \sqrt{(U - U' + J)^2 - I^2}$  における  $\eta = 2t_a t_b / (t_a^2 + t_b^2)$  依存性.

表 2.1 有効模型 (2.59) における典型的なパラメータ領域における擬スピンの描像

phase	$\tau_{\Gamma}$ configurations	parameter conditions
LS	$\downarrow \downarrow \downarrow \downarrow$	$h_{\tau z} \ll 0$ ( $\Leftrightarrow \Delta \gg U - U' + J$ )
HS	$\uparrow \uparrow \uparrow \uparrow$	$h_{\tau z} \gg 0$ ( $\Leftrightarrow \Delta \ll U - U' + J$ )
EI	$\rightarrow \leftarrow \rightarrow \leftarrow$	$h_{\tau z} \sim 0, J_x > J_y > J_z$ ( $\Leftrightarrow \Delta \sim U - U' + J, t_b/t_a \sim 1$ )
SSO	$\uparrow \downarrow \uparrow \downarrow$	$h_{\tau z} \sim 0, J_x, J_y \ll J_z$ ( $\Leftrightarrow \Delta \sim U - U' + J, t_b/t_a \sim 0$ )

以下では、「状態」と「相」という言葉を次のように使い分ける。「状態」は 1 サイトを見たときのローカルな性質を表すときに用いる. 例えば、「高スピン状態」, 「低スピン状態」. 一方で、「相」はマクロな性質を表すときに用いる. 例えば、「高スピン相」, 「低スピン相」, 「励起子絶縁体相」, 「スピン状態秩序相」.

表 2.1 に各パラメータ領域における擬スピンの描像をまとめた. しかし, ここでは HS 状態におけるスピンの向き自由度, スピン間の相互作用, 量子ゆらぎを考慮していないため, 実際の基底状態の描像は, これらの影響により変わりうる.

$\Delta \gg U - U' + J$  が成立する領域では, 結晶場分裂が大きく, 低エネルギーバンドに電子 2 つが占有した低スピン相 (LS: low-spin) が実現する. このとき, 有効模型では  $h_{\tau z} \ll 0$  となり, 基底状態は擬スピン表現で, ( $\tau_{\Gamma} : \downarrow \downarrow \dots \downarrow$ ) となる.

一方で,  $\Delta \ll U - U' + J$  の場合は, Hund 結合により  $s = 1$  の高スピン相が実現する.

このとき、有効模型では  $h_{\tau z} \ll 0$  となり、基底状態は擬スピン表現で、 $(\tau_T : \uparrow\uparrow \dots \uparrow)$  となる。高スピン相では、スピン間に反強磁性的な相互作用が働くため、スピンは反強磁性的となる。

$\Delta$  の大きさと  $U - U' + J$  の大きさが拮抗している場合、擬スピン間相互作用の  $J_\gamma$  とスピン間相互作用  $J_s$  が支配的となり、これらによって系の状態が決定する。

$\eta = 2t_a t_b / (t_a^2 + t_b^2) \ll 1$  のとき、電子と正孔のホッピングのうちいずれか片方が非常に小さくなる。そのため、HS 状態に対応する電子と正孔がペアを組んだ励起子としては動くことができなくなる。結果としてスピン状態が局在化し、超格子構造を示すスピン状態秩序相 (SSO 相) が安定化する。これは擬スピンの描像では、強い  $z$  軸異方性 ( $J_x, J_y \ll J_z$ ) により擬スピンは  $z$  軸上での反強磁性的な配置 ( $\tau_T : \uparrow\downarrow \dots \uparrow\downarrow$ ) をとることに対応する。

一方で、 $\eta \sim 1$  のときは、電子と正孔が同時にホッピングできることにより、それらがペアを組んだ励起子としても運動することができる。これにより、励起子がコヒーレントに運動することによって異なるスピン状態が混成している相が安定化する。この相は励起子絶縁体相 (EI 相) とみなすことができる。擬スピンの描像では、 $J_x > J_y > J_z$  となることによって、 $x$  軸上で HS 状態と LS 状態の混成の位相が反強磁性的に揃った配置 ( $\tau_T : \rightarrow \leftarrow \dots \rightarrow \leftarrow$ ) をとることに対応する。

EI 相について、ペアホッピング  $I$  が有限である場合には  $J_x > J_y$  と擬スピン間の反強磁性的な相互作用が異方的になるため、1次元においても励起子絶縁体に対応する擬スピンの長距離秩序は安定化するように思われる。しかし、実際の有効模型 (2.59) ではスピン間相互作用  $J_s$  が存在する他、擬スピンも  $\Gamma = X, Y, Z$  で識別されるスピントリプレットの3通りが存在する。これによって、各擬スピン間相互作用とスピン間相互作用の競合により、以上で述べてきた典型的な励起子絶縁体やスピン状態秩序の描像は実際にはより複雑となる可能性がある。



## 2.2 密度行列くりこみ群法

本研究では、前節で導入した 2 軌道 Hubbard 模型の有効模型を 1 次元の場合について、密度行列くりこみ群法 (DMRG: density matrix renormalization group)[62, 63] によって解析する。本模型の先行研究における解析結果としては平均場近似を用いて解析したものや、厳密対角化法を用いて解析したものが存在する。しかし、平均場近似においてはシステムの空間構造を仮定する必要がある、厳密対角化においては、計算機のメモリサイズの限界からシステムサイズを 10 サイト以下に限定する必要がある。本研究では 1 次元系に対して DMRG を用いることにより、より大きなクラスターサイズ ( $L = 60 \sim 190$ ) における解析を行う。これにより、インコメンシュレイトな長周期構造や、量子臨界的なふるまいを議論する。

DMRG は量子系の情報を効率的に圧縮することにより、比較的大きなシステムサイズの量子系を恣意的な近似なしに解析することができる。効率的に解析できる系は 1 次元系に限定されるものの、量子臨界性やエンタングルメントを解析することのできる手法の 1 つである。

本節では DMRG についてその原理と計算方法について説明する。特に、テンソルのダイアグラム表現を導入することで、DMRG のテンソルネットワーク法としての視点を示すようにしている。

### 2.2.1 歴史的なこと

DMRG は White により 1992 年に発表された数値計算手法であり、1 次元量子系の基底状態を求める上で強力な手法である [62–64]。DMRG は、もともとは、実空間くりこみによる量子系の基底状態の計算の改善の流れで導入された。くりこみという名前はここに由来する。DMRG は、現代では、テンソルネットワークによる表現が導入され、行列積状態の変分法としての理解もなされている。また、行列積状態の高次元への拡張として、multi-scale entanglement renormalization ansatz (MERA) や Projected entangled pair state (PEPS) が考案されている。

### 2.2.2 テンソルのダイアグラム表現

DMRG の導入を行うにあたって、テンソルのダイアグラム表現が便利である。ここでは、その導入を行う。テンソルのダイアグラム表現では次のようにテンソルを表現する。

$$\begin{array}{ccc} \bigcirc & \bigcirc - j & i - \bigcirc - j \\ c & v_j & a_{ij} \end{array}$$

ここで、 $c$  はスカラー、 $v_j$  は添字  $j$  で要素が識別されるベクトル、 $a_{ij}$  は添字  $i, j$  で要素が識別される行列を表す。これらはそれぞれ、ランク 0, 1, 2 のテンソルに対応している。図からわかるように、出ている足が添字に対応している。

添字の縮約は、ダイアグラムの足をつなげることで表現する。例として、行列-ベクトル積は次のように書くことができる。

$$\begin{aligned} i - \bigcirc^U &= i - \bigcirc^M - \bigcirc^V_j \\ U_i &= \sum_j M_{ij} V_j \end{aligned} \quad (2.69)$$

### 2.2.3 テンソルの特異値分解

DMRG などのテンソルネットワーク法において特異値分解 (SVD: singular value decomposition) は重要な役割を持つ。SVD を利用することにより、高ランクのテンソルの情報を圧縮して扱うことが可能となる。SVD は以下のようなテンソルの分解を表す。

$$\Theta_{ijkl} = \sum_a \Lambda_a U_{aij} V_{akl} \quad (2.70)$$

ここでは例としてランク 4 のテンソルの添字  $ijkl$  を  $ij$  と  $kl$  の 2 つずつに分解する SVD を示したが、一般には任意のランクのテンソルを任意の分け方で分解することができる。この SVD をダイアグラムで表現すると次のようになる。

$$\begin{array}{c} \Theta \\ \begin{array}{ccc} i & \text{---} & k \\ & \downarrow & \downarrow \\ & j & l \end{array} \end{array} = \begin{array}{c} U \quad \Lambda \quad V \\ \begin{array}{ccc} i & \text{---} & \bullet & \text{---} & k \\ & \downarrow & & & \downarrow \\ & j & & & l \end{array} \end{array} \quad (2.71)$$

ここで、式 (2.70) において  $\Lambda$  はランク 1 のテンソルだが、式 (2.71) においては、便宜上、対角要素のみ非ゼロの値を持つランク 2 のテンソルとして表現している。ここでは  $\Lambda$  を特

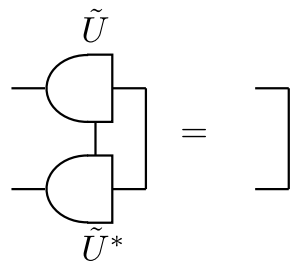
異ベクトルと呼ぶ。 $\Lambda$  の各要素は特異値と呼ばれ、全て正の実数に取ることができる。  $U$  および  $V$  は基底変換を表すテンソルであり、後で述べるようにユニタリ性をもつ。

特異ベクトル  $\Lambda$  の要素を  $\Lambda_0 \geq \Lambda_1 \geq \dots \geq \Lambda_{N-1} \geq 0$  となるように並び替えたとする。ここで、 $\chi$  番目以降の特異値を無視し、次元削減したものを  $\tilde{\Lambda}$  とする。以降ではこの  $\chi$  をトランケーション数とよぶ。同様に、テンソル  $U, V$  の対応する次元について、特異値と対応するように並び替え、次元削減をしたものをそれぞれ  $\tilde{U}, \tilde{V}$  とする。このとき、 $\tilde{\Lambda}, \tilde{U}, \tilde{V}$  によって復元されるテンソル  $\tilde{\Theta}$  はもとのテンソル  $\Theta$  の近似になっている。実際に  $\Theta$  と  $\tilde{\Theta}$  の差分のフロベニウスノルムの 2 乗  $\|\Theta - \tilde{\Theta}\|^2$  を計算すると

$$\sum_{ijkl} (\Theta - \tilde{\Theta})_{ijkl}^* (\Theta - \tilde{\Theta})_{ijkl} = \sum_{s=\chi}^{N-1} \Lambda_s^2 \quad (2.72)$$

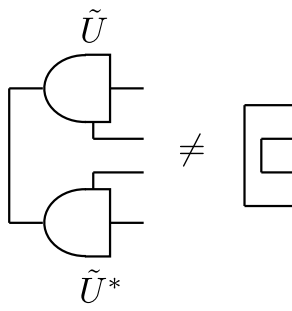
となることが証明できる。ここで、 $*$  は複素共役を表す。右辺  $\sum_{s=\chi}^{N-1} \Lambda_s^2$  は切り捨てた特異値の 2 乗和であり、トランケーションエラーと呼ばれる。式 (2.72) はトランケーションエラーが十分小さければ、 $\tilde{\Theta}$  は  $\Theta$  の良い近似であることを意味する。上記のような手続きにより、もとのテンソル  $\Theta$  をより少ない容量で近似するテンソルネットワーク  $\{\tilde{\Lambda}, \tilde{U}, \tilde{V}\}$  を構成することができる。

ここで、次元削減した基底変換テンソル  $\tilde{U}, \tilde{V}$  が以下の性質を持つことを述べておく。



$$(2.73)$$

この性質はもととなったテンソル  $U, V$  のもつユニタリ性に由来する。一方で、一般に



$$(2.74)$$

である。これは次元削減の結果、もとの完全系を張ることができていないことと対応する。トランケーション数  $\chi$  がもとの完全系の次元に一致する場合には、等号が成立する。これらのユニタリ性は DMRG において利用される。

## 2.2.4 行列積状態

前項では多ランクのテンソルを SVD で分解した. DMRG では, SVD 等を駆使して, 波動関数を行列積状態 (MPS: matrix product state) に分解して扱う. 具体的な MPS の構成手段は DMRG の手順を説明する項 2.2.6 で述べるとして, ここでは MPS の構造を先んじて示しておく.

$L$  サイトの多体波動関数は, ランク  $L$  のテンソルとして表現することができる. 1 サイトあたりのインデックスの次元を  $d$  とすると, 多体の波動関数を直接扱う場合, 全次元は  $d^L$  となる. これはシステムサイズ  $L$  とともに指数関数的に大きくなるため, 計算機で扱うことのできる  $L$  は小さい. そこで, 多体波動関数を次のようにテンソルネットワークに分解する.

$$\begin{aligned}
 \psi_{j_0 j_1 \dots j_{L-1}} &= \begin{array}{c} \psi \\ \hline \begin{array}{cccc} | & | & \dots & | \\ j_0 & j_1 & \dots & j_{L-1} \end{array} \end{array} \\
 &\simeq \begin{array}{c} U_0 \quad U_1 \quad \dots \quad U_{s_A-1} \quad \Theta \quad V_{L-s_A-3} \quad V_1 \quad V_0 \\ \begin{array}{cccccccc} \text{---} & \text{---} & \dots & \text{---} & \text{---} & \text{---} & \dots & \text{---} & \text{---} \\ | & | & \dots & | & | & | & \dots & | & | \\ j_0 & j_1 & \dots & j_{s_A-1} & j_{s_A} & j_{s_A+1} & j_{s_A+2} & \dots & j_{L-2} & j_{L-1} \end{array} \end{array} \\
 &\hspace{15em} (2.75)
 \end{aligned}$$

最後の行が MPS である.  $U_0 \dots U_{s_A-1}, V_0, \dots, V_{L-s_A-3}$  は基底変換テンソルである. 実用上は, 前項で行ったような次元削減を行うことで, コンピュータで扱える程度に基底変換テンソルの次元を減らす. トランケーション数を  $\chi$  に制限すると, 必要な容量は  $O(\max(Ld\chi^2, d^2\chi^2))$  となり,  $L$  に対して線形まで小さくなる.

DMRG は MPS を用いたエネルギーの変分法と捉えることができる. MPS を用いた量子系の手法は DMRG 以外にも, 時間発展を計算する tDMRG[65], TEBD[66] や無限系を扱う iDMRG[67], iTEBD[68, 69] などがある.

## 2.2.5 行列積演算子

MPS と同様に, ハミルトニアンなどの演算子を行列積演算子 (MPO: matrix product operator) の形式 [70] で表現すると 後述する DMRG の手順で便利である. ここでは MPO の導入を行った後, 具体的な MPO の構成例を示す. 本研究で扱った 2 軌道 Hubbard 模型の有効模型は複雑であり, 紙面に入らないので, 本質を失わない例として

$s = 1/2$  Heisenberg 模型と  $t_1 - t_2$  模型を扱う.

$L$  サイトの多体演算子は, ランク  $2L$  のテンソルとして表現される. 多体の演算子を次のように分解できたとする.

$$\begin{aligned}
 H_{i_0 i_1 \dots i_{L-1}; j_0 j_1 \dots j_{L-1}} &= H \begin{array}{c} j_0 \quad j_1 \quad \dots \quad j_{L-1} \\ \hline \dots \\ i_0 \quad i_1 \quad \dots \quad i_{L-1} \end{array} \\
 &= T_L \circ \begin{array}{c} j_0 \quad j_1 \quad \dots \quad j_{L-1} \\ | \quad | \quad \dots \quad | \\ \circ \quad \circ \quad \dots \quad \circ \\ | \quad | \quad \dots \quad | \\ W_0 \quad W_1 \quad \dots \quad W_{L-1} \\ i_0 \quad i_1 \quad \dots \quad i_{L-1} \end{array} T_R \tag{2.76}
 \end{aligned}$$

最後の行が MPO である. ここで,  $W_0, \dots, W_{L-1}$  はランク 4 のテンソルであり,  $T_L, T_R$  はターミネータと呼ばれるランク 1 のテンソルである. MPS と MPO を用いることで物理量の期待値は次のようなテンソルネットワークで計算できる.

$$\begin{aligned}
 \langle \psi | H | \psi \rangle &= \begin{array}{c} \psi \\ \hline H \\ \hline \psi^* \end{array} \\
 &= \begin{array}{c} U_0 \quad U_1 \quad \dots \quad U_{s_A-1} \quad \Theta \quad V_{L-s_A-3} \quad V_1 \quad V_0 \\ | \quad | \quad \dots \quad | \quad | \quad | \quad | \quad | \quad | \\ \circ \quad \circ \quad \dots \quad \circ \quad \circ \quad \circ \quad \circ \quad \circ \quad \circ \\ | \quad | \quad \dots \quad | \quad | \quad | \quad | \quad | \quad | \\ W_0 \quad W_1 \quad \dots \quad W_{s_A-1} \quad W_{s_A} \quad W_{s_A+1} \quad W_{s_A+2} \quad \dots \quad W_{L-2} \quad W_{L-1} \\ U_0^* \quad U_1^* \quad \dots \quad U_{s_A-1}^* \quad \Theta^* \quad V_{L-s_A-3}^* \quad V_1^* \quad V_0^* \end{array} T_L \circ T_R \tag{2.77}
 \end{aligned}$$

ここで, MPS を構成する  $U_0$  および  $V_0$  のテンソルのランクが式 (2.75) では 2 だったものを式 (2.77) では 3 に修正している. 式 (2.77) では,  $U_0, V_0$  と  $U_{s \neq 0}, V_{s \neq 0}$  のランクを合わせるために, 次元 1 のダミーの添字を追加している.

式 (2.76) のような演算子の MPO への分解は任意の演算子  $H$  に対して, 厳密かつ効率よく行うことができるわけではないが, 1 次元系の格子模型における多くのハミルトニアンは MPO で効率よく表現することができる. 以下では, いくつかの模型に対して MPO の具体形を示す.

### Heisenberg 模型

$s = 1/2$  の等方的 Heisenberg 模型の,  $L$  サイト開放端条件におけるハミルトニアンは以下で書かれる.

$$\hat{H} = \sum_{j=0}^{L-2} J \hat{s}_j^z \hat{s}_{j+1}^z + \frac{J}{2} (\hat{s}_j^+ \hat{s}_{j+1}^- + \hat{s}_j^- \hat{s}_{j+1}^+) + h \sum_{j=0}^{L-1} \hat{s}_j^z \quad (2.78)$$

ここで,  $\hat{s}_j$  はサイト  $j$  における  $s = 1/2$  のスピン演算子であり,  $\hat{s}^+$ ,  $\hat{s}^-$  はスピンの昇降演算子である. ここでは, 混同を避けるため, 一時的に演算子 (ランク 2 のテンソル) には  $\hat{\phantom{x}}$  をつけている. 対応する MPO は次のように書き下せる.

$$T_L = (1 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0) \quad (2.79)$$

$$T_R = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.80)$$

$$W_0 = \cdots = W_{L-1} = \begin{pmatrix} \hat{1} & \hat{s}^z & \hat{s}^+ & \hat{s}^- & h\hat{s}^z \\ \hat{0} & \hat{0} & \hat{0} & \hat{0} & J\hat{s}^z \\ \hat{0} & \hat{0} & \hat{0} & \hat{0} & (J/2)\hat{s}^- \\ \hat{0} & \hat{0} & \hat{0} & \hat{0} & (J/2)\hat{s}^+ \\ \hat{0} & \hat{0} & \hat{0} & \hat{0} & \hat{1} \end{pmatrix} \quad (2.81)$$

ここで  $W_s$  の行列表現のインデックスは式 (2.76) における左右の足に対応し, 行列内の要素の演算子は上下の足に対応する  $d \times d$  の行列表現を持つ. 特に,  $W_s$  の行列表現内の  $\hat{1}$  は  $d \times d$  の恒等演算子であることに注意. 実際に MPO 表現の縮約を実行することにより, 式 (2.78) のハミルトニアンが復元されることを確かめることができる.

式 (2.81) の MPO の表現からも, 見て取れるように MPO の表現はゼロが多く含まれる. コンピュータで計算する際には, このスパース性を利用して必要な要素のみ確保し, 縮約の計算を行うことが高速化の上で重要となる.

### $t_1 - t_2$ 模型

次に, スピンレスフェルミオンの次近接ホッピングが存在する模型を考える. ハミルトニアンは次のように書かれる.

$$H = -t_1 \sum_{j=0}^{L-2} (c_{j+1}^\dagger c_j + \text{H.c.}) - t_2 \sum_{j=0}^{L-3} (c_{j+2}^\dagger c_j + \text{H.c.}) \quad (2.82)$$

ここで,  $c_j$  はサイト  $j$  におけるフェルミオンの消滅演算子である. 簡単のため以降では演算子の  $\hat{\phantom{x}}$  は省略する. 対応する MPO は以下で与えられる.

$$T_L = (1 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0) \quad (2.83)$$

$$T_R = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.84)$$

$$W_0 = \cdots = W_{L-1} = \begin{pmatrix} 1 & s^+ & s^- & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2s^z & 0 & -t_1 s^- \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2s^z & -t_1 s^+ \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -t_2 s^- \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -t_2 s^+ \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.85)$$

$s^+, s^-, s^z$  はスピン  $1/2$  の演算子と同じ構造をもつ演算子である.  $2s^z$  はフェルミオンサインを考慮するための演算子であり, 次近接ホッピングにおいて間のフェルミオンの数に応じて符号を反転する効果がある. このように, 次近接が入るような模型やフェルミオン系であっても MPO を構成することができる.

### 周期系の MPO

本研究では周期系の DMRG も行っている. 本研究における模型は複雑であるため, ここでは,  $s = 1/2$  Heisenberg 模型について周期系の MPO を示す.

ハミルトニアンは次で定義される.

$$H = \sum_{j=0}^{L-1} J s_j^z s_{j+1}^z + \frac{J}{2} (s_j^+ s_{j+1}^- + s_j^- s_{j+1}^+) + h \sum_{j=0}^{L-1} s_j^z \quad (2.86)$$

ここで, 周期境界条件より  $L = 0$  である. 式 (2.79)-(2.81) で得られている開放端の場合の MPO を参照して, ここでは  $T_L^{(\text{open})}$ ,  $T_R^{(\text{open})}$ ,  $W^{(\text{open})}$  とする. また,  $W^{(\text{bond})}$  を  $W^{(\text{open})}$  において, オンサイトの演算子を  $h = 0$  とおいたものとする. また,

$$W^{(\text{trans})} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.87)$$

とおく. このとき周期系の MPO は以下で与えられる.

$$T_L^{(\text{periodic})} = \left( T_L^{(\text{open})} \mid T_L^{(\text{open})} \right) \quad (2.88)$$

$$T_R^{(\text{periodic})} = \left( \frac{T_R^{(\text{open})}}{T_R^{(\text{open})}} \right) \quad (2.89)$$

$$W_0^{(\text{periodic})} = W_{L-1}^{(\text{periodic})} = \left( \frac{W^{(\text{open})}}{0} \mid \frac{0}{W^{(\text{bond})}} \right) \quad (2.90)$$

$$W_1^{(\text{periodic})} = \dots = W_{L-2}^{(\text{periodic})} = \left( \frac{W^{(\text{open})}}{0} \mid \frac{0}{W^{(\text{trans})}} \right) \quad (2.91)$$

一般に MPO のとり方には任意性があるが, 上のように周期系の MPO を構成しておくことで, 後で述べる DMRG の手続きのひとつである infinite method において, 系の両端のエンタングルメントを保持した基底を残しながらサイズを大きくしていくことができる.

最後に, MPO の表現が簡単に構成できない演算子もあることを述べておく. 例えば,  $\exp(-\beta H)$  のような演算子は, 多くの場合, MPO の構成が自明ではなく, SVD による次元削減や鈴木-Trotter 分解が必要となる.

## 2.2.6 密度行列くりこみ群の手順

ここまでで MPS, MPO について述べてきた. ここでは, これらの表現を用いて DMRG の具体的な手続きを述べる. DMRG による解析の手続きは次の 3 ステップに大きく分かれる.

1. (Infinite method) MPS を 2 サイトずつ  $L$  サイトまで大きくしていく手順.
2. (Finite method)  $L$  サイトの MPS を最適化する手順.
3. (物理量の計算) 構成した MPS を使って各種物理量を計算する手順.

以下では, それぞれの手続きを説明する.

### Infinite method

Infinite method では基底状態を表現する MPS を 2 サイトずつ大きくしていき  $L$  サイトの MPS を構成する手続きである. 以下に具体的な手続きを示した.

1. 予め, 式 (2.76) のようなハミルトニアン of MPO 表現  $\{T_L, W_0, \dots, W_{L-1}, T_R\}$  を構成しておく.



2. 初期の両端テンソル  $L_0, R_0$  を次のように設定する.

$$L_0 = \begin{array}{|c} \hline \\ \hline \end{array} \begin{array}{l} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} = \begin{array}{|c|} \hline \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ \circ \\ \text{---} \end{array} \quad R_0 = \begin{array}{|c} \hline \\ \hline \end{array} \begin{array}{l} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} = \begin{array}{|c|} \hline \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ \circ \\ \text{---} \end{array} \quad (2.92)$$

ここで,  $T_L, T_R$  は MPO のターミネータであり, コの字型のテンソルは  $1 \times 1$  の単位行列である. また, 現在の左側のサイト数として

$$s = 0 \quad (2.93)$$

とおく.

3.  $2(s + 1)$  サイトのハミルトニアン  $\{L_s, W_s, W_{L-s-1}, R_s\}$  と状態ベクトル  $\Theta$  について, 行列-ベクトル積は以下のように表される.

$$\begin{array}{|c} \hline \\ \hline \end{array} \begin{array}{l} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{|c} \hline \\ \hline \end{array} \begin{array}{l} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{|c} \hline \\ \hline \end{array} \begin{array}{l} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \quad (2.94)$$

これを用いて, Lanczos 法などにより基底状態の  $\Theta$  を求める. 式 (2.94) において, 行列-ベクトル積に必要な縮約に数字を振っている. この数字は縮約を取る順番を表している. 数学的には縮約の順序は関係ないが, コンピュータ上で計算する際には, 順序をうまく取らないと計算時間や必要なメモリ容量が非常に大きくなってしまふ.

4. もし  $s = L/2 - 1$  なら, 終了する.

5. SVD により, 以下のように  $\Theta$  を  $\{U_s, \Lambda, V_s\}$  に分解する.

$$a \text{---} \begin{array}{|c|} \hline \\ \hline \end{array} \begin{array}{l} \text{---} \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \end{array} \text{---} b = a \text{---} \begin{array}{|c|} \hline \\ \hline \end{array} \begin{array}{l} \text{---} \\ \text{---} \end{array} \bullet \begin{array}{|c|} \hline \\ \hline \end{array} \begin{array}{l} \text{---} \\ \text{---} \end{array} \text{---} b \quad (2.95)$$

ここで,  $\Lambda$  および,  $U_s, V_s$  は, トランケーション数の制限  $\chi$  に応じて必要な次元に次元削減する.

ここでは,  $U_s, V_s$  を得るのに SVD を用いているが, SVD の代わりに縮約密度行列の対角化を用いる方法もある. この方法は, 励起状態も計算する DDMRG など, 同じ基底変換テンソルで複数の波動関数を表現したい場合には必須となる.

6.  $L_{s+1}$  および  $R_{s+1}$  を次のような縮約により設定する.

$$(2.96)$$

ここで,  $L_{s+1}$  の定義内の数字は縮約の順番を表す.

7. 現在の左側のサイト数  $s$  を

$$s = s + 1 \quad (2.97)$$

のように更新し, 3. に戻る.

以上の手続きにより, 式 (2.75) の MPS  $\{U_0, U_1 \dots U_{L/2-2}, \Theta, V_{L/2-2}, \dots, V_1, V_0\}$  および, MPO を縮約した表現として  $L_0, \dots, L_{L/2-1}, R_0, \dots, R_{L/2-1}$  を得た. これらは次の Finite method で使う.

### Finite method

次に, 系のサイト数  $L$  を固定しエネルギー及び, MPS を最適化する finite method の手順を説明する.

Finite method では MPS の回転 (rotation) と呼ばれる操作を行う. 次に MPS の右回転の手順を示す.

$$(2.98)$$

左辺から中辺にかけては, SVD により,  $\Theta \rightarrow \{U_{s_A}, \Lambda, V_{L-s_A-2}\}$  と分解している. このときトランケーション数に応じて適当に次元削減する. また, 中辺から右辺にかけては,  $\{\Lambda, V_{L-s_A-2}, V_{L-s_A-3}\}$  の縮約を取り, 右回転後の波動関数の表現  $\Theta'$  を取得している.

MPS の右回転にあわせて, ハミルトニアン<sup>1</sup>の縮約したテンソル表現  $L_{s_A+1}$  も設定する.

The diagram illustrates the contraction of the tensor  $L_{s_A+1}$  into a network of tensors. On the left, a vertical rectangle labeled  $L_{s_A+1}$  has three horizontal lines extending to the right. An equals sign follows. On the right, a vertical rectangle labeled  $L_{s_A}$  has three horizontal lines extending to the right. The top line connects to a semi-circular gate labeled  $U_{s_A}$ . The middle line connects to a circle labeled  $W_{s_A}$ . The bottom line connects to another semi-circular gate labeled  $U_{s_A}^*$ . The gates  $U_{s_A}$  and  $U_{s_A}^*$  are connected to the  $W_{s_A}$  circle. The entire network is labeled (2.99) on the right.

この回転後,  $R_{L-s_A-2}$  は使わないので破棄することになる. 左回転も右回転と同様に行うことができる.

Finite method では回転の後, 新しく得られた波動関数の表現  $\Theta'$  を更新する操作を行う. DMRG の場合は, infinite method における手順 3. と同様にして, Lanczos 法により, 基底状態を求める. このとき, Lanczos 法の初期ベクトルとして回転後の  $\Theta'$  を用いると収束が速くなる. この理由は, 回転後の  $\Theta'$  がすでに基底状態の良い近似となっており, SVD で落とした特異値程度の誤差しかないためである.

Finite method では, 回転と波動関数の更新を繰り返すことにより, MPS を最適化していく. Infinite method が終了した時点で  $\Theta$  は系の中央に位置するので, 続いて以下の操作を行う.

1. (左回転 + 更新) を  $L/2 - 1$  回繰り返すことにより,  $\Theta$  を左端に移動させる.
2. (右回転 + 更新) を  $L - 2$  回繰り返すことにより,  $\Theta$  を右端に移動させる.
3. (左回転 + 更新) を  $L/2 - 1$  回繰り返すことにより,  $\Theta$  を中央に戻す.

これを 1 スイープとして, スイープをエネルギーが十分収束するまで繰り返す.

DMRG では, 波動関数の更新の手続きを, Lanczos 法により求めた基底状態で波動関数を置き換えることで行っている. この波動関数の置き換えを時間発展に変えることで MPS の時間発展を計算することができる.  $\exp(-itH)$  の鈴木-Trotter 分解と MPS の回転を組み合わせて, MPS の時間発展を計算する手法は tDMRG 法と呼ばれている.

### 物理量の計算

以下では物理量の計算を行う. 式 (2.75) のような MPS 表現のままでも, 相関関数などの期待値の計算は行うことができるが, ここでは, 物理量の計算において, より便利な MPS の表現であるカノニカル形式を用いた方法を説明する.

式 (2.75) のような MPS をカノニカル形式の MPS に変換する手続きでは以下のような

テンソルネットワークの変換を行う。

$$\begin{aligned}
 & \Lambda_s V_{L-s-1} V_{L-s-2} \\
 & \begin{array}{c} \text{---} \bullet \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} = \begin{array}{c} \Theta' \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} \\
 & \begin{array}{c} U'_s \Lambda_{s+1} V'_{L-s-2} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} \\
 & \begin{array}{c} \Lambda_s \Lambda_s^{-1} U'_s \Lambda_{s+1} V'_{L-s-2} \\ \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} \\
 & \begin{array}{c} \Lambda_s \Gamma_s \Lambda_{s+1} V'_{L-s-2} \\ \text{---} \bullet \text{---} \circ \text{---} \bullet \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} \\
 & \hspace{25em} (2.100)
 \end{aligned}$$

ここで、式 (2.100) の 2 行目では SVD により  $\Theta'$  を分解し、適当に次元削減をしている。3 行目では  $\sum_b (\Lambda_s)_{ab} (\Lambda_s^{-1})_{bc} = \delta_{ac}$  となる特異ベクトルの行列の逆行列  $\Lambda_s^{-1}$  を導入している。4 行目では  $\{\Lambda_s^{-1}, U'_s\}$  の縮約を取り  $\Gamma_{s+1}$  を構成している。注意点として、 $\Lambda$  の要素には、しばしば、ゼロやゼロに非常に近い値が入るため、 $\Lambda_s^{-1}$  を構成する際にはそれらを除いて、対応する要素をゼロにしておく必要がある。

式 (2.75) のような形式の MPS において、 $\Theta$  を SVD で分解したのち、式 (2.100) の変換を繰り返すことにより MPS は最終的に次のカノニカル形式に変換できる。

$$\begin{array}{c}
 \Lambda_0 \quad \Gamma_0 \quad \Lambda_1 \quad \Gamma_1 \quad \Lambda_2 \quad \cdots \quad \Gamma_{L-1} \Lambda_0 \\
 \bullet \quad \circ \quad \bullet \quad \circ \quad \bullet \quad \cdots \quad \bullet \quad \circ \\
 \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\
 \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\
 \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\
 \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\
 j_0 \quad j_1 \quad \cdots \quad j_{L-1}
 \end{array} \quad (2.101)$$

ここで、 $\Gamma_0, \Gamma_{L-1}$  は、それぞれ  $U_0, V_0$  で設定しており、 $\Lambda_0$  は  $1 \times 1$  の単位行列の波動関数の絶対値倍 (規格化されていけば 1) である。式 (2.101) の良いところは任意の  $s$  に対して、

左カノニカル

$$\begin{array}{c} \Lambda_s \quad \Gamma_s \\ \bullet \quad \circ \\ | \quad | \\ \bullet \quad \circ \\ \Lambda_s \quad \Gamma_s^* \end{array} = \left[ \right. \quad (2.102)$$

および, 右カノニカル

$$\begin{array}{c} \Gamma_s \Lambda_{s+1} \\ \circ \quad \bullet \\ | \quad | \\ \circ \quad \bullet \\ \Gamma_s^* \Lambda_{s+1} \end{array} = \left[ \right. \quad (2.103)$$

が成立することである. この性質を用いることにより, 物理量は簡便に計算できる.

サイト  $s$  に対する 1 サイト演算子の期待値  $\langle A_s \rangle$  は, 次のように計算できることが示せる.

$$\begin{array}{c} \Lambda_s \quad \Gamma_s \Lambda_{s+1} \\ \bullet \quad \circ \\ | \quad | \\ \square A_s \\ | \quad | \\ \bullet \quad \circ \\ \Lambda_s \quad \Gamma_s^* \Lambda_{s+1} \end{array} \quad (2.104)$$

また, サイト  $s, s'$  に対する 2 サイト相関関数  $\langle A_s B_{s'} \rangle$  は次のように計算できることが示せる.

$$\begin{array}{c} \Lambda_s \quad \Gamma_s \Lambda_{s+1} \Gamma_{s+1} \Lambda_{s+2} \quad \dots \quad \Gamma_{s'-1} \Lambda_{s'} \quad \Gamma_{s'} \Lambda_{s'+1} \\ \bullet \quad \circ \quad \bullet \quad \circ \quad \bullet \quad \dots \quad \bullet \quad \circ \quad \bullet \\ | \quad | \quad | \quad | \quad | \quad \dots \quad | \quad | \quad | \\ \square A_s \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \square B_{s'} \\ | \quad | \quad | \quad | \quad | \quad \dots \quad | \quad | \quad | \\ \Lambda_s \quad \Gamma_s^* \Lambda_{s+1} \Gamma_{s+1}^* \Lambda_{s+2} \quad \dots \quad \Gamma_{s'-1}^* \Lambda_{s'} \Gamma_{s'}^* \Lambda_{s'+1} \end{array} \quad (2.105)$$

2 サイト相関関数  $\langle A_s B_{s'} \rangle$  の計算における実用上のテクニックとして,  $s$  を固定して, 縮約を取りつつ, 各  $s'$  について計算することによって, 効率的に多くの  $s'$  について,  $\langle A_s B_{s'} \rangle$  が計算できる.

### 2.2.7 縮約密度行列とエンタングルメントエントロピー

本項では, 縮約密度行列とエンタングルメントエントロピーについて, MPS による表現により, 説明する.

多体波動関数の密度行列は次のように表現される.

$$\rho = \begin{array}{c} i_0 \quad i_1 \quad \dots \quad i_{L-1} \\ | \quad | \quad \dots \quad | \\ \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\ | \quad | \quad \dots \quad | \\ j_0 \quad j_1 \quad \dots \quad j_{L-1} \end{array} = \begin{array}{c} i_0 \quad i_1 \quad \dots \quad i_{L-1} \\ | \quad | \quad \dots \quad | \\ \psi^* \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \psi \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\ | \quad | \quad \dots \quad | \\ j_0 \quad j_1 \quad \dots \quad j_{L-1} \end{array} \quad (2.106)$$

部分系の密度行列は, 縮約密度行列と呼ばれる. 部分系 A の縮約密度行列は全系から系 A を除いた  $\bar{A}$  をトレースアウトすることにより得られる.

$$\rho_A = \text{Tr}_{\bar{A}}(\rho) \quad (2.107)$$

$L$  サイトの全系を, サイト  $s = 0, \dots, l-1$  からなる  $l$  サイト系とサイト  $s = l, \dots, L-1$  からなる  $L-l$  サイト系に分解したとき, の  $l$  サイト系の密度行列  $\rho_l$  をダイアグラム表現すると次のようになる.

$$\rho_l = \begin{array}{c} i_0 \quad i_1 \quad \dots \quad i_{l-1} \\ | \quad | \quad \dots \quad | \\ \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\ | \quad | \quad \dots \quad | \\ j_0 \quad j_1 \quad \dots \quad j_{l-1} \end{array} = \begin{array}{c} i_0 \quad \dots \quad i_{l-1} \\ | \quad \dots \quad | \\ \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\ | \quad \dots \quad | \\ j_0 \quad \dots \quad j_{l-1} \end{array} \quad \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\ | \quad | \quad | \quad | \\ \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\ | \quad | \quad | \quad | \\ \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \end{array}$$

$$\equiv \begin{array}{c} i_0 \quad i_1 \quad \dots \quad i_{l-1} \\ | \quad | \quad \dots \quad | \\ \bullet \quad \circ \quad \bullet \quad \circ \quad \dots \quad \bullet \quad \circ \quad \bullet \\ \Lambda_0 \quad \Gamma_0^* \quad \Lambda_1 \quad \Gamma_1^* \quad \Lambda_2 \quad \dots \quad \Gamma_{l-1}^* \quad \Lambda_l \\ | \quad | \quad | \quad | \quad | \quad | \quad | \quad | \\ \Lambda_0 \quad \Gamma_0 \quad \Lambda_1 \quad \Gamma_1 \quad \Lambda_2 \quad \dots \quad \Gamma_{l-1} \quad \Lambda_l \\ | \quad | \quad | \quad | \quad | \quad | \quad | \quad | \\ j_0 \quad j_1 \quad \dots \quad j_{L-1} \end{array} \quad (2.108)$$

最後の行では MPS のカノニカル形式を導入しており, 右カノニカル性 (式 (2.103)) を用いて計算したものである.

最後にエンタングルメントエントロピーとその計算方法について説明する.

エンタングルメントエントロピー  $S$  は、部分系の密度行列を  $\rho$  とし、その固有値を  $p_i$  とするとき

$$S = - \sum_i p_i \log p_i \quad (2.109)$$

で定義される。式 (2.108) から、部分系  $\rho_l$  に対するエンタングルメントエントロピー  $S(l)$  は、特異ベクトル  $\Lambda_l$  を用いて次のように得られることが示せる。

$$S(l) = - \sum_i \Lambda_{li}^2 \log \Lambda_{li}^2 \quad (2.110)$$

### 2.2.8 量子数分割

本項では、ハミルトニアン  $\mathcal{H}$  の量子数分割により多体のハミルトニアン  $\mathcal{H}$  の対角化の計算コストを減らす方法について簡潔に述べる。

ハミルトニアン  $\mathcal{H}$  が演算子  $Q$  と可換である、すなわち

$$[Q, \mathcal{H}] = 0 \quad (2.111)$$

のとき、 $Q$  と  $\mathcal{H}$  は同時対角化可能である。従って、 $Q$  の固有値  $q$  に対するハミルトニアン  $\mathcal{H}$  のブロックを  $\mathcal{H}^{(q)}$  として、

$$\mathcal{H} = \bigoplus_q \mathcal{H}^{(q)} \quad (2.112)$$

のように書くことができる。これを量子数分割と呼ぶ。また、各スカラー値  $q$  を量子数と呼ぶ。 $\mathcal{H}^{(q)}$  の次元は  $\mathcal{H}$  の次元以下となる。そのため、 $Q$  を対角化する表現が既知である場合、 $\mathcal{H}^{(q)}$  を構成してそれを対角化することで計算コストが小さくなる。これにより、厳密対角化法や DMRG の計算速度を劇的に高速化することができる。

演算子  $Q$  としては、系の全粒子数の演算子  $N = \sum_i n_i$  や、系の全磁化  $m = \sum_i s_i^z$  のような  $Q = \sum_i q_i$  となるタイプの演算子が利用できる場合が多い。ここで  $i$  はサイトのインデックスである。以降では、このような量子数分割を DMRG で扱う方法について概略を述べる。並進演算子もハミルトニアンと可換になることが多いが、扱いが特殊であるためここでは扱わない。

DMRG においては、量子数分割はテンソルのブロック化という形で現れる。量子数を

考慮した場合の各テンソルのブロック性を次に示す.

$$\begin{array}{ccc}
 \begin{array}{c} \ominus \\ \tilde{q}_{s-1} \text{ --- } \boxed{\phantom{\Lambda}} \text{ --- } \tilde{q}_{s+2} \\ | \phantom{\tilde{q}_{s-1}} | \\ q_s q_{s+1} \end{array} & \tilde{q}_{s-1} + q_s + \tilde{q}_{s+2} + q_{s+1} = q_{\text{target}} & \\
 \\
 \begin{array}{c} \Lambda \\ \tilde{q}_s \text{ --- } \bullet \text{ --- } \tilde{q}_{s+1} \end{array} & \tilde{q}_s + \tilde{q}_{s+1} = q_{\text{target}} & \\
 \\
 \begin{array}{c} V \\ \tilde{q}_s \text{ --- } \bigcirc \text{ --- } \tilde{q}_{s-1} \\ | \\ q_s \end{array} & \tilde{q}_s = \tilde{q}_{s-1} + q_s & \\
 \end{array} \tag{2.113}$$

ここで、各テンソルの足のインデックスが所属する量子数を  $q$  で表した。各テンソルの成分は右側に示したの条件に一致するブロックに所属するときのみ非ゼロの要素を持つ。 $q_{\text{target}}$  は計算でターゲットとする量子数である。SVD や縮約、対角化の際に非ゼロとなりうるブロックのみを扱うことで効率的な計算プログラムを構築できる。

### 2.2.9 本研究における量子数分割と磁場効果の解析

本研究では、有効模型 (2.59) を DMRG により解析する。系は 1 次元系であり、必要に応じて開放端条件と周期境界条件を使いわけると。DMRG におけるトランケーション数は、相図の決定では  $\chi = 64$  とし、その他の物理量やエンタングルメントエントロピーの解析では、主に  $\chi = 256$  としている。

有効模型のハミルトニアン (2.59) は、次の 2 つの量子数が存在する。1 つは全磁化  $\sum_i s_i^z$  である。もう 1 つは高スピン状態の数を 2 で割った余り  $n_H^{(2)}$  が量子数となる。 $n_H^{(2)}$  の偶奇でハミルトニアンがブロック対角化される。本研究における DMRG では、これら 2 つの量子数の組み合わせによる量子数分割を適用した。

本研究では磁場効果の解析も行っている。DMRG の解析では、量子数分割により磁化を固定しているため、各磁化におけるエネルギーの値からその磁化に必要な磁場の大きさを求めている。この手順を示す。磁場中のハミルトニアンは次のように書くことができる。

$$\mathcal{H} = \bigoplus_{m=0}^{m=L} (\mathcal{H}_0^{(m)} - mH1^{(m)}) \tag{2.114}$$

ここで、 $\mathcal{H}_0^{(m)}$  は磁場がない場合におけるブロックの磁気量子数  $m$  におけるハミルトニアンである。各  $\mathcal{H}_0^{(m)}$  の基底状態のいずれかが磁場下において基底状態になるため、それら



の空間の直和に  $\mathcal{H}$  を射影すると次が得られる.

$$P\mathcal{H}P = \bigoplus_{m=0}^{m=L} (E_0^{(m)} - mH) |\phi_0^{(m)}\rangle \langle \phi_0^{(m)}| \quad (2.115)$$

ここで  $E_0^{(m)}$  は,  $\mathcal{H}_0^{(m)}$  の基底状態のエネルギーであり,  $|\phi_0^{(m)}\rangle$  は基底状態である. これらは DMRG により求める. 式 (2.115) より, 磁場下でのハミルトニアン  $\mathcal{H}$  の基底状態は,  $E_0^{(m)} - mH$  を最小化する  $m$  を求めればよい. これは

$$\frac{\partial E_0^{(m)}}{\partial m} = H \quad (2.116)$$

を解くことと同等であり,  $E_0^m$  を  $m$  に対してプロットした場合には, 傾きが磁場と対応している.



## 第 3 章

# 結果

### 3.1 2 軌道 Hubbard 模型の低エネルギー有効模型の基底状態

本節では、磁場のない場合について、DMRG により得られた 2 軌道 Hubbard 模型の低エネルギー有効模型 (2.59) の基底状態を示す。

本節における DMRG による解析では、システムサイズを  $L = 60$ 、トランケーション数を  $\chi = 256$  としている。以下ではエネルギーの単位として  $\sqrt{t_a^2 + t_b^2}$  を用いる。

#### 3.1.1 $J - \Delta$ 基底状態相図

擬スピン間相互作用の異方性に対応するパラメータとして、 $\eta = 1$  ( $\Leftrightarrow t_a = t_b$ ) と固定した場合を考える。Hund 結合の大きさ  $J$  と結晶場分裂の大きさ  $\Delta$  の張る平面上における基底状態相図を図 3.1 に示す。ここで、クーロン相互作用の大きさは以下のように固定している、 $U/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = 12$ ,  $U' = U - 2J$ ,  $J = I$ 。これらのパラメータはクーロン相互作用が強い強相関領域に対応する。図 3.1 において、相は結晶場分裂  $\Delta$  が増大するとともに HS  $\rightarrow$  EI  $\rightarrow$  LS と変化する。ここで、HS は高スピン相 (high-spin phase), EI は励起子絶縁体相 (excitonic-insulating phase), LS は低スピン相 (low-spin phase) をそれぞれ表す。図 3.1 における相境界はエンタングルメントエントロピーの不連続性によって決定している。エンタングルメントエントロピーの詳細については、節 3.3 で議論する。

図 3.2 に、図 3.1 において破線で示しているラインに沿ったパラメータにおける物理量を示す。図 3.2(a) では、サイトあたりの HS 状態の期待値  $\langle P_H \rangle$  および LS 状態の期待値  $\langle P_L \rangle$  を示している。ここで、 $\langle P_H \rangle + \langle P_L \rangle = 1$  が成立する。HS 相では  $\langle P_H \rangle \sim 1$  であり、LS 相  $\langle P_H \rangle \sim 0$  となっている。EI 相では、結晶場分裂  $\Delta$  の増大に従って  $\langle P_H \rangle$  がなめらかに減少する。HS-EI および EI-LS の相境界では、 $\langle P_H \rangle$  および  $\langle P_L \rangle$  は連続であるが、1 階微分が不連続となる。

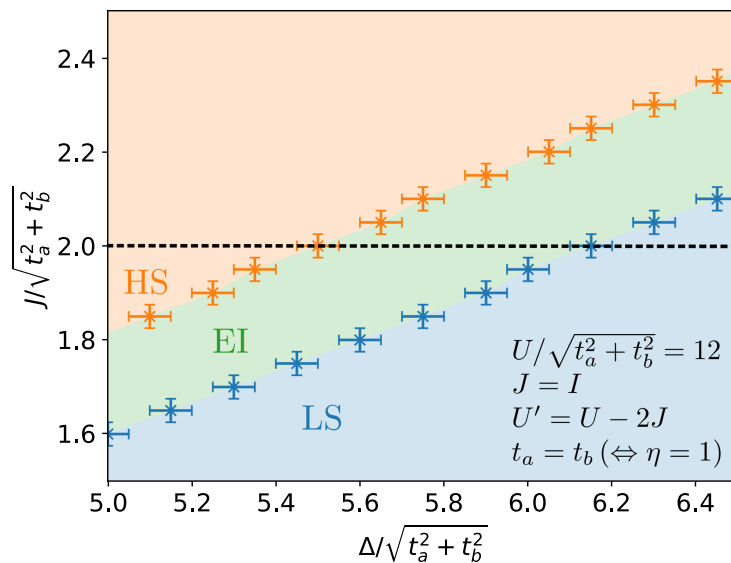


図 3.1 有効模型 (2.59) の  $J - \Delta$  基底状態相図. 他のパラメータは以下のように固定している.  $U/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = 12$ ,  $\eta = 1$  ( $\Leftrightarrow t_a = t_b$ ). エラーバーは数値解析における離散化幅.

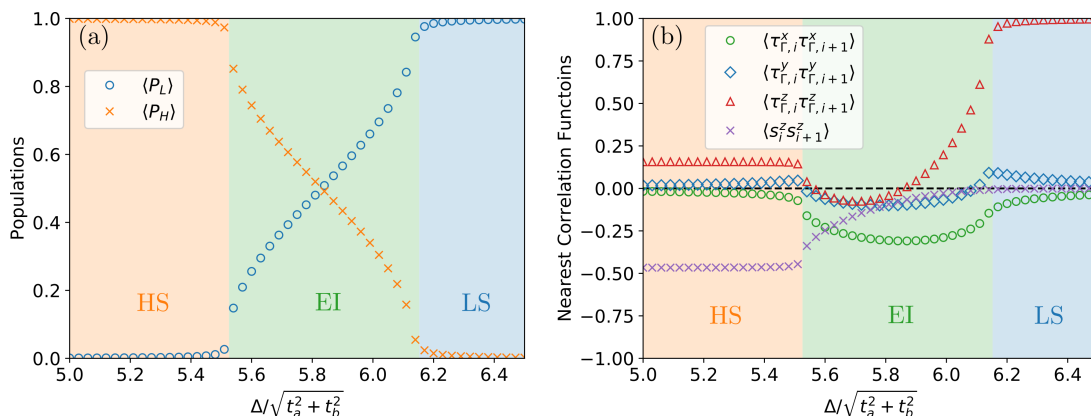


図 3.2 1 サイトあたりの各状態の期待値 (a) と最近接相関関数 (b). モデルパラメータは図 3.1 における破線と同一であり,  $U/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = 12$ ,  $J/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = I/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = 2$ ,  $\eta = 1$  ( $t_a = t_b$ ).

EI 相においては自発的な対称性の破れが得られていない. すなわち, 擬スピンに対して  $\langle \tau_{\Gamma,i}^x \rangle = \langle \tau_{\Gamma,i}^y \rangle = 0$  が任意の  $\Gamma, i$  に対して成立しており, スピンに対して  $\langle s^\gamma \rangle = 0$  が任意の  $\gamma$  に対して成立している. さらに並進対称性も存在しており, スピン状態の超格子構造は現れていない. EI 相の性質は, 最近接相関関数から理解することができる. 図 3.2(b) に最近接相関関数  $\langle \tau_{\Gamma,i}^x \tau_{\Gamma,i+1}^x \rangle$ ,  $\langle \tau_{\Gamma,i}^y \tau_{\Gamma,i+1}^y \rangle$ ,  $\langle \tau_{\Gamma,i}^z \tau_{\Gamma,i+1}^z \rangle$  および  $\langle s_i^z s_{i+1}^z \rangle$  を示す. これらは擬スピン間相互作用の局所的なエネルギーに対応する. 注意点として,  $\langle \tau_{\Gamma,i}^z \rangle$  は有限の

値を持つが、この値を相関関数から差し引いていない。図に示した最近接相関関数は 1 次元系の中央 2 サイト間のものである。また、系の回転対称性から擬スピン間の相関関数は  $\Gamma = X, Y, Z$  に依存せず、また、スピン相関関数は  $\gamma = x, y, z$  に依存しない。図 3.2(b) において、EI 相における最近接相関は  $\langle \tau_{\Gamma,i}^x \tau_{\Gamma,i+1}^x \rangle < \langle \tau_{\Gamma,i}^y \tau_{\Gamma,i+1}^y \rangle < \langle \tau_{\Gamma,i}^z \tau_{\Gamma,i+1}^z \rangle$  となっている。これは、擬スピン間の相互作用の異方性が  $\eta = 1$  においては  $J_x > J_z$  となるため、c 方向の擬スピンの反強磁性が強く得られていると解釈できる。更に、本模型ではペアホッピング  $I$  の存在により  $J_x > J_y$  である。これにより、 $x$  方向の擬スピンの反強磁性が  $y$  方向よりも強く現れる結果となったと考えられる。 $\langle \tau_{\Gamma,i}^x \tau_{\Gamma,i+1}^x \rangle$  が強い反強磁性を示すことは、EI 相が励起子の運動エネルギーによって安定化していることを示している。この性質をもって、本研究では、図 3.1 および 図 3.2 における中間相を EI 相と呼んでいる。最近接相関関数の結果から、EI 相において 励起子とみなせる HS 状態が局在化せず、量子揺らぎによってある程度遍歴的に存在していることがわかる。一方で、EI 相において、励起子絶縁体に対応する長距離秩序は得られていない。また、相関関数のスケージングについても指数関数的か冪的かの判定が本研究の範囲では十分な精度で得られていない。そのため、本研究においては励起子絶縁体相という言葉を用い、より広い意味で使っていることに注意が必要である。EI 相の非局所的な性質については、各種相関関数やスピンギャップを通して次節以降でより詳しく議論する。

図 3.2(b) において、最近接のスピン相関関数は HS 相と EI 相において反強磁性的である。特に EI 相では反強磁性的なスピン相関が HS 相に向けて連続的に発達している。

### 3.1.2 $\eta - \Delta$ 基底状態相図

次に、Hund 結合の大きさを  $J$  を固定し、縦軸に擬スピン感相互作用の異方性  $\eta = 2t_a t_b / (t_a^2 + t_b^2)$  をとり、横軸に結晶場分裂の大きさ  $\Delta$  をとった場合の基底状態相図を図 3.3 に示す。クーロン相互作用のパラメータは、それぞれ、 $U/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = 12$ ,  $U'/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = 8$ ,  $J/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = I/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = 2$  としている。 $\eta = 1$  の場合にも得られている HS 相, EI 相, LS 相に加えて、図 3.3 では、新たにスピン状態秩序相 (SSO 相: spin-state ordering phase) が得られている。SSO 相では、並進対象性が一部破れており、HS 状態の期待値  $\langle P_{Hi} \rangle$  がサイトごとに異なる値を取る。一般的に SSO の構造は  $\eta$  と  $\Delta$  に依存しており、様々な構造を取りうるが、特に安定な構造として 3 倍周期構造である LS/HS/HS 構造が得られている。SSO 相の空間構造の詳細については次節で焦点を当てる。

図 3.3 では、SSO 相を特徴づけるために、DMRG における解析でのスピン状態がサイトごとに異なる状態となることを参照している。具体的には、 $\max(\langle P_{Hi} \rangle)_i - \min(\langle P_{Hi} \rangle)_i > 10^{-2}$  のとき、SSO 相としている。ここで  $i$  は、システムサイズ  $L = 60$  の開放端条件を持

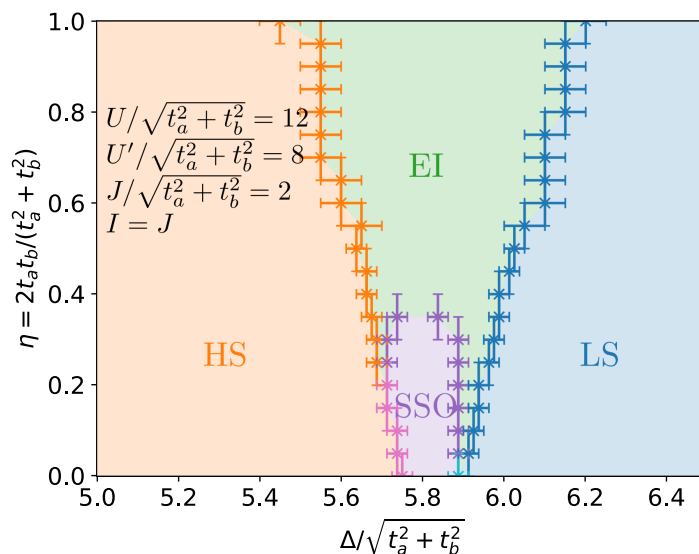


図 3.3  $\eta$ - $\Delta$  基底状態相図. モデルパラメータは,  $U/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = 12$ ,  $J/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = I/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = 2$ .

つ 1 次元系における中央 20 サイトを参照する.

本研究で得られた基底状態相図である図 3.1 および図 3.3 について, その概観は典型的な擬スピンの描像 (表 2.1) によって理解することが可能である. また, 基底状態相図の概形は先行研究における平均場近似を用いた解析結果 [3, 24] と整合している. しかしながら, HS 相と EI 相では, スピンと擬スピンの秩序化は見られていない. この結果は平均場近似の結果と異なる. これは, 1 次元系における強い量子揺らぎの効果を DMRG により取り入れたためと解釈される. また, DMRG により, 比較的大きな 1 次元クラスターを用いたことで多様なスピン状態秩序が新しく得られたと解釈される.

### 3.1.3 EI 相の空間構造

本項では, EI 相におけるスピン状態の空間構造を相関関数を通してみていく.

本項および次項における DMRG による解析では, システムサイズを  $L = 60$  とし, 周期境界条件を採用している. また, DMRG のトランケーション数を  $\chi = 256$  としている. 周期境界条件を採用している理由は以下である. EI 相や SSO 相ではインコメンシュレイトな波数で特徴づけられる長波長構造が現れる場合がある. そのため, ハミルトニアンに各波数に対応する並進対象性があり, 空間における有限サイズ効果を評価しやすい周期系を採用している. 一方で, 本来, DMRG における MPS の構造は周期系の解析に向かないため, これを補うために大きいトランケーション数を採用している. また, 開放端条件と周期境界条件で相図の変化は図 3.3 におけるエラーバーよりも小さいことが確認されている.

EI 相および SSO 相の空間構造を見るための相関関数として以下の相関関数の波数表示を導入する。

$$C_X(k) = \frac{1}{L} \sum_{ij} \langle X_i X_j \rangle \cos [k(i-j)]. \quad (3.1)$$

ここで、 $X_i$  はサイト  $i$  における 1 サイト演算子である。注意点として、 $C_X(k)$  では、1 サイト演算子の期待値の積が差し引かれていないことがある。これは、SSO 相において  $C_X(k)$  により空間構造を解析したいためである。

特に本項では、EI 相の相関関数の空間的な性質に注目する。クーロン相互作用のパラメータとしては、前節に引き続き  $U/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = 12$ ,  $J/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = I/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = 2$ ,  $U' = U - 2J$  を採用する。HS 相と LS 相の間の領域で EI 相が実現するパラメータとして  $\eta = 2t_a t_b / (t_a^2 + t_b^2)$  について、 $\eta = 1.0$  と  $\eta = 0.5$  のときを見ていく。

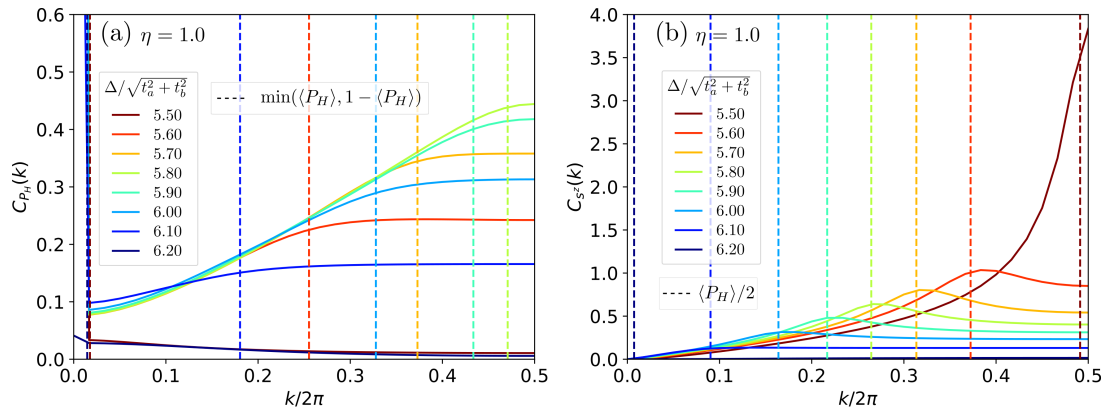


図 3.4  $\eta = 1.0$  における EI 相の相関関数の波数依存性. (a) に HS 状態の空間分布に関する相関関数  $C_{P_H}(k)$  について、(b) にスピン相関関数の波数依存性  $C_{s^z}(k)$  についてそれぞれ示している。破線は各色に対応する結晶場分裂の大きさ  $\Delta/\sqrt{t_a^2 + t_b^2}$  における HS 状態の空間平均期待値  $\langle P_H \rangle$  に対応する波数として、(a) では  $\min(\langle P_H \rangle, 1 - \langle P_H \rangle)$  を、(b) では  $\langle P_H \rangle / 2$  をそれぞれ示している。他のパラメータは、 $U/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = 12$ ,  $J/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = I/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = 2$ ,  $U' = U - 2J$  としている。

$\eta = 1$  ( $\Leftrightarrow t_a = t_b$ ) の場合には、結晶場分裂の大きさが  $5.55 \leq \Delta/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} \leq 6.15$  において EI 相が実現する。この周辺領域における相関関数の波数表示をいくつかの結晶場分裂の大きさ  $\Delta/\sqrt{t_a^2 + t_b^2}$  に対して図 3.4 に示す。図 3.4(a) には HS 状態の空間分布に関する相関関数  $C_{P_H}(k)$  を示している。EI 相においてはスピン状態の超格子構造は生じていないので、 $C_{P_H}(k \neq 0)$  の波数依存性は HS 状態の空間的な量子揺らぎを表している。一方で、 $C_{P_H}(k = 0)$  における強いピークは HS 状態の一様な期待値に由来している。 $C_{P_H}(k \neq 0)$  は LS 相と HS 相では小さい値を取り、EI 相では大きい値を取る。このことは EI 相では LS 状態と HS 状態が拮抗することで、ゆらぎが強い状態になっていること

を表している. EI 相において,  $C_{P_H}(k \neq 0)$  が強い波数依存性を持つことから, EI 相では励起子の運動により量子的なエンタングルメントが空間的に広がっていることを表している. EI 相では,  $C_{P_H}(k)$  は  $k/2\pi < \min(\langle P_H \rangle, 1 - \langle P_H \rangle)$  においては  $k$  とともに上昇し,  $k/2\pi > \min(\langle P_H \rangle, 1 - \langle P_H \rangle)$  においては一定となっていく. ここで,  $\langle P_H \rangle$  は結晶場分裂の大きさ  $\Delta/\sqrt{t_a^2 + t_b^2}$  によって決まる HS 状態 (励起子) の空間平均期待値であり,  $\Delta/\sqrt{t_a^2 + t_b^2}$  に対して単調に減少する. このような図 3.4(a) に見られる相関関数のふるまいは, 自由スピレスフェルミオンに見られる粒子数の相関関数のふるまい  $C_n(k)$  によく似ている. このことから, EI 相においては HS 状態が遍歴的なフェルミオンの準粒子のように振る舞っていることが示唆される. 一方で自由粒子の場合との大きな違いとして,  $C_{P_H}(k \rightarrow 0)$  が有限の値を持っている. これは, 本有効模型においては  $\sum_i P_{Hi}$  がハミルトニアンと交換しないことと対応している. これはペアホッピング  $I$  が有限に存在していることに由来しており, 人為的に  $I = 0$  とした場合には, 擬スピンに対する  $U(1)$  対称性が回復し,  $C_{P_H}(k \rightarrow 0) = 0$  となると予想される.

図 3.4(b) では, 図 3.4(a) と同じパラメータ領域におけるスピン相関関数  $C_{sz}(k)$  を示している.  $C_{sz}(k)$  は EI 相と HS 相で大きい値を持つ. 特に HS 相は有効的に  $s = 1$  の Heisenberg 模型となっており, 反強磁性的な相関が  $k = \pi$  に現れている. EI 相ではインコメンシュレイトな波数にピーク構造が現れる. この波数は  $k = \pi \langle P_H \rangle$  に位置しており, HS 状態の期待値に対応する磁気構造が現れていると解釈できる. この構造は, HS 状態の期待値  $\langle P_H \rangle$ , ひいては結晶場分裂の大きさ  $\Delta$  に依存して連続的に変化する.

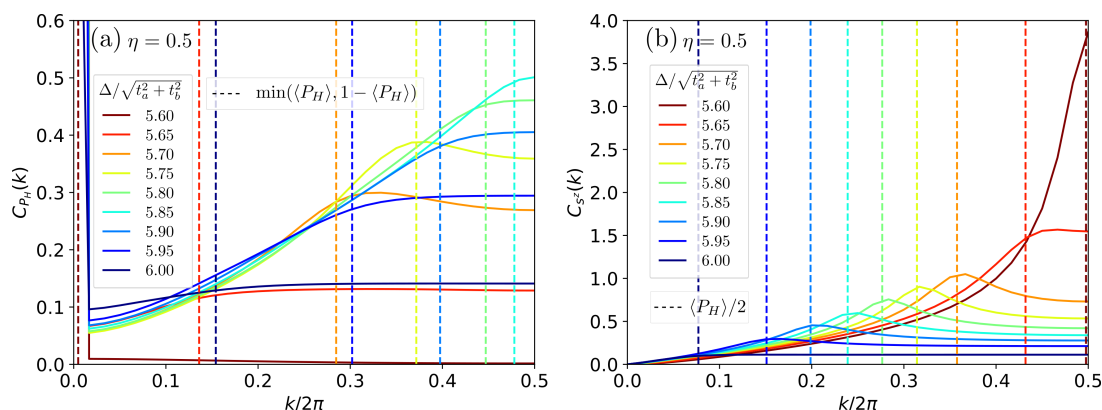


図 3.5  $\eta = 0.5$  における EI 相の相関関数の波数依存性. (a) に HS 状態の空間分布に関する相関関数  $C_{P_H}(k)$  について, (b) にスピン相関関数の波数依存性  $C_{sz}(k)$  についてそれぞれ示している.

続いて,  $\eta = 2t_a t_b / (t_a^2 + t_b^2) = 0.5$  におけるスピン状態の相関関数のフーリエ変換を見ていく.  $\eta = 0.5$  における  $C_{P_H}(k)$  および  $C_{sz}(k)$  を図 3.5(a) および 3.5(b) にそれぞれ示す.



特に, 図 3.5(a) に示した  $C_{P_H}(k)$  においては,  $\Delta/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = 5.70, 5.75$  において, ピーク構造が見られる. これは次節におけるスピン状態秩序の前兆として現れているゆらぎと解釈できる. 図 3.5(b) に示したスピン相関関数  $C_{s_z}(k)$  においては  $\eta = 1.0$  のときのふるまいと顕著な違いは見られない.

### 3.1.4 SSO 相の空間構造

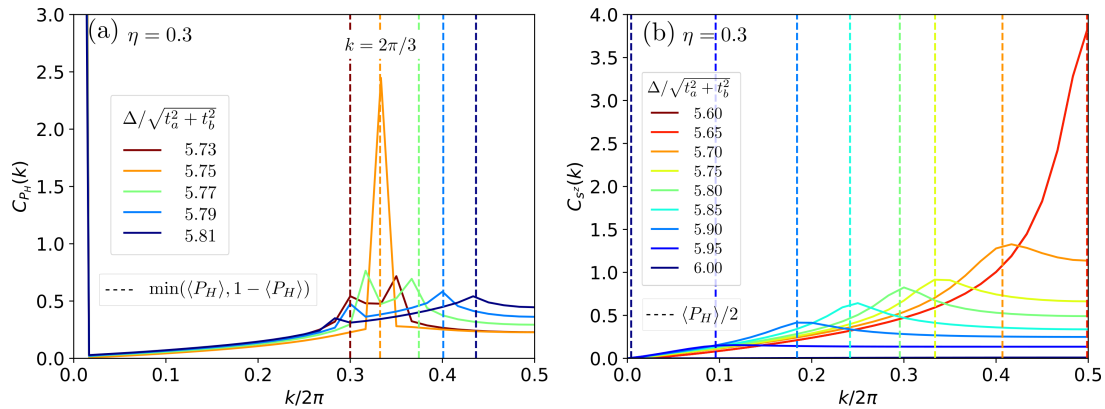


図 3.6  $\eta = 0.3$  における SSO 相の相関関数の波数依存性. (a) に HS 状態の空間分布に関する相関関数  $C_{P_H}(k)$  について, (b) にスピン相関関数の波数依存性  $C_{s_z}(k)$  についてそれぞれ示している.

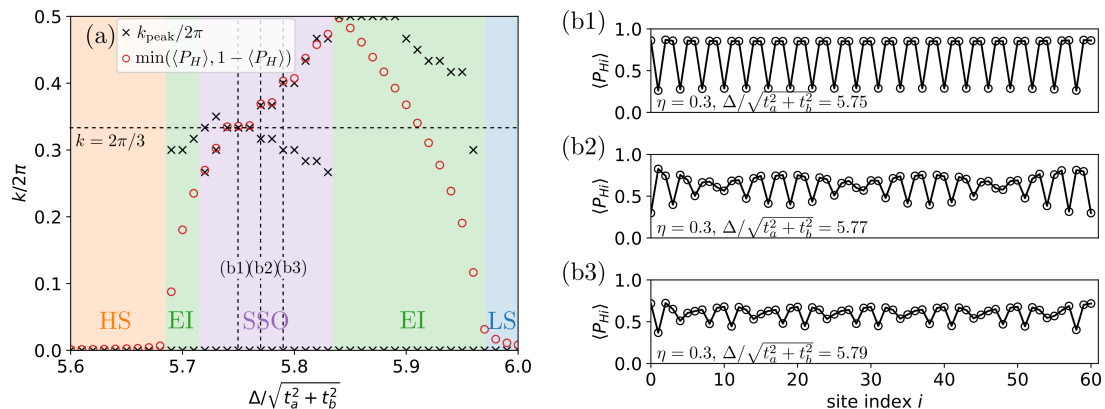


図 3.7 SSO 相におけるスピン状態秩序の結晶場分裂の大きさへの依存性. (a) に  $\eta = 0.3$  における SSO 相の相関関数のピーク位置と HS 状態の平均期待値  $\langle P_H \rangle$  の依存性を示している. (b1)-(b3) に, SSO 相におけるスピン状態秩序の実空間構造をいくつかの結晶場分裂の大きさ  $\Delta/\sqrt{t_a^2 + t_b^2}$  について示している. これに対応するパラメータを (a) に破線で示している. 他のパラメータは以下で固定している.  $U/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = 12$ ,  $J/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = I/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = 2$ ,  $U' = U - 2J$ .

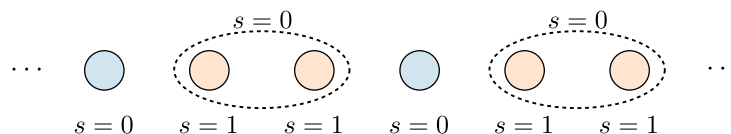


図 3.8 SSO 相における LS/HS/HS の 3-fold 構造の概念図.

続いて, SSO 相における空間構造に注目する. 擬スピン間の相互作用の異方性を  $\eta = 2t_a t_b / (t_a^2 + t_b^2) = 0.3$  と固定すると, 結晶場分裂の大きさ  $\Delta / \sqrt{t_a^2 + t_b^2}$  の増大に伴い, 相は  $\text{HS} \rightarrow \text{EI} \rightarrow \text{SSO} \rightarrow \text{EI} \rightarrow \text{LS}$  と相転移する. この過程のうち, 特に SSO 相における相関関数の波数依存性を図 3.6 に示す. 図 3.6(b) に示したスピン相関関数  $C_{s_z}(k)$  のふるまいでは,  $\eta = 1.0, 0.5$  における EI 相でのふるまいと顕著な違いは見られなかった. 一方で図 3.6(a) における HS 状態の空間分布に関する相関関数  $C_{P_H}(k)$  では SSO 相において特有のふるまいが見られた. 図 3.6(a) では,  $\Delta / \sqrt{t_a^2 + t_b^2} = 5.75$  において  $k = 2\pi/3$  に強いピークが見られ, その周辺のパラメータ領域ではこのピークが 2 つに分裂している様子が見られる. この  $k = 2\pi/3$  における強いピークは LS/HS/HS の 3-fold 構造に対応するものである. LS/HS/HS の構造の概念図を図 3.8 に示す. 本モデルの基底状態においてこのような LS/HS/HS 構造が現れることは,  $J_z$  と  $J_s$  の競合によるものと解釈できる.  $J_z$  と  $J_s$  はいずれも  $t_a^2 + t_b^2$  に比例するため,  $\eta$  が小さく, LS 状態と HS 状態のエネルギーが拮抗する領域ではこれら 2 項が支配的となる. LS/HS/HS 構造は, LS 状態と HS 状態が隣り合うことで  $J_z$  の項のエネルギーを下げており, また, HS 状態と HS 状態が隣り合い,  $s = 0$  の状態となることで  $J_s$  の項のエネルギーを下けている.

図 3.7(a) では, 横軸に結晶場分裂の大きさ  $\Delta / \sqrt{t_a^2 + t_b^2}$  をとり,  $C_{P_H}(k)$  においてピークを持つ波数  $k_{\text{peak}}$  をプロットしている. 図 3.7(a) にみられる  $k = 2\pi/3$  におけるプラトーから,  $k = 2\pi/3$  に対応する LS/HS/HS 構造が安定であることが示唆される. このプラトーの両側ではピークが 2 つに分裂していく様子が見られる. ピークの波数は  $\min(\langle P_H \rangle, 1 - \langle P_H \rangle)$  におよそ一致しており, 結晶場分裂の大きさ  $\Delta / \sqrt{t_a^2 + t_b^2}$  によって決まる HS 状態の期待値に応じた空間構造が実現している. ピークの分裂に従い, SSO 相の空間構造は変化していく. 図 3.7(a) におけるピーク位置の変化が有限サイズ ( $L = 60$ ) の範囲内で連続的であることから,  $L \rightarrow \infty$  ではインコメシュレイトな構造が実現すると予想される. ピークが分裂していく際の実空間構造のスナップショットを図 3.7(b1)-(b3) に示す. 図 3.7(b1) において実現している LS/HS/HS の 3 倍周期構造が,  $\Delta / \sqrt{t_a^2 + t_b^2}$  の増大によって, 図 3.7(b2) のようにキंक構造が挿入されていき, より離れると一般には図 3.7(b3) に見られるような複雑な構造を取る. 最後に SSO 相は  $\langle P_H \rangle > 0.5$  の範囲でのみ得られており,  $\langle P_H \rangle < 0.5$  では EI 相が実現している. このことは, 最近接 HS 状態間に働くスピンの交換相互作用が SSO 相におけるスピン状態秩序の安定化に寄与しているこ

とを示唆している.

### 3.1.5 結論

本節では, スピン状態転移近傍におけるスピン・軌道状態について, 1 次元 2 軌道 Hubbard 模型の有効模型に対する DMRG による解析によって, 基底状態相図を作成した. 結果として, 低スピン (LS) 相と高スピン (HS) 相の間に励起子絶縁体 (EI) 相とスピン状態秩序 (SSO) 相が得られた. EI 相は各軌道間のホッピングの比が 1 に近い領域で実現し, SSO 相はゼロに近い領域で実現する. EI 相では励起子が空間的に揺らぐことで, スピン状態の秩序化が見られない. 本研究においては, 励起子絶縁体に対応する秩序変数はゼロとなり, 対称性の破れは見られなかった. これは, スピン間相互作用により, 励起子秩序が乱された結果と解釈される. また, 1 次元系における強い量子揺らぎも寄与している可能性がある. SSO 相では, スピン状態が局在し, 超格子構造が現れる. 本研究では, DMRG により, 60 サイトクラスターでの厳密な解析を行ったことにより, LS/HS/HS の 3 倍周期構造を基本とし, その周辺でインコメンシュレイトな波数を持つ様々な構造が結晶場分裂の大きさに応じて実現することが示された.

## 3.2 2 軌道 Hubbard 模型の低エネルギー有効模型の磁場効果

本節では導出した 2 軌道 Hubbard 模型の有効模型について、その磁場効果の数値解析の結果を示す。

### 3.2.1 磁場中相図

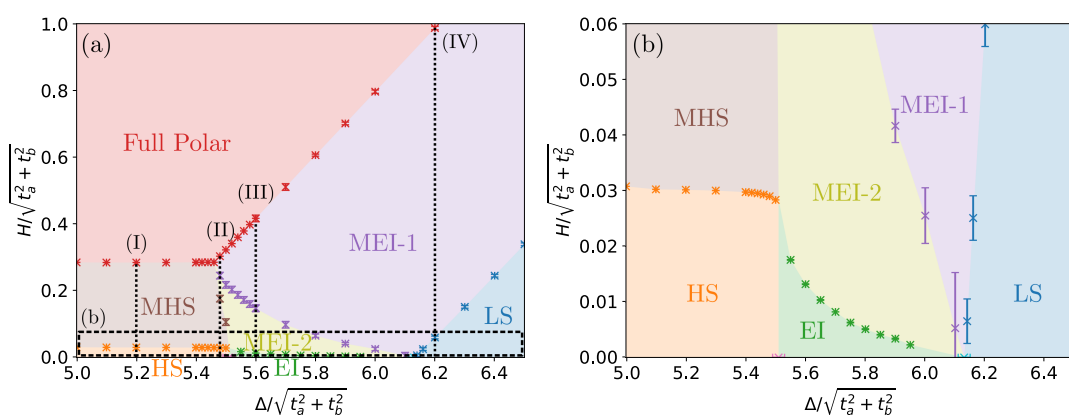


図 3.9 磁場中相図 ( $H$ - $\Delta$  相図). パネル (b) はパネル (a) の破線で囲まれた低磁場領域を拡大した相図. パネル (a) における (I)-(IV) の破線で示したラインは、次項以降で注目する磁化過程. ホッピングは  $\eta = 2t_a t_b / (t_a^2 + t_b^2) = 1$  であり、クーロン相互作用のパラメータは  $U/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = 12$ ,  $U'/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = 8$ ,  $J/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = I/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = 2$  としている.

本項では、EI 相が得られる領域における磁場中相図を示す.  $\eta = 1.0$  ( $\Leftrightarrow t_a = t_b$ ) と固定し、結晶場分裂の大きさ  $\Delta$  と磁場  $H$  に対する  $H - \Delta$  基底状態相図を図 3.9 に示す. クーロン相互作用のパラメータは  $U/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = 12$ ,  $U'/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = 8$ ,  $J/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = I/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = 2$  としている. これは図 3.3 における  $\eta = 1$  の領域に対応する. 図 3.3 では、HS 相、EI 相、LS 相に加えて、新たに、磁化した EI 相その 1 (MEI-1 相)、磁化した EI 相その 2 (MEI-2 相)、磁化した HS 相 (MHS 相)、完全偏極相 (Full-Polar 相) が得られた. 相境界は全て 2 次転移である. 各相境界は磁化曲線の微分の不連続性によって決定している.

基底状態相図の作成においては、基本的に、システムサイズを  $L = 60$ , DMRG のトランケーション数を  $\chi = 64$  としている. 例外として、HS 相及び EI 相におけるスピンギャップに対応する相境界はより精度の高い解析をしている. これは次項で述べる.

### 3.2.2 スピンギャップ

図 3.3(b) からわかるように, HS 相, EI 相, LS 相では, 弱い磁場に対しては磁化が応答せず, スピンギャップが存在する. スピンギャップを精密に決定するために, HS と MHS の相境界および EI と MEI-2 の相境界は有限サイズ外挿によって決定している. スピンギャップの外挿に用いるフィッティング関数は以下の関数形を用いている.

$$\Delta_s(1/L) = \Delta_s(0) + a/L + b/L^2. \quad (3.2)$$

ここで,  $L$  はシステムサイズ,  $\Delta_s(0)$ ,  $a$ ,  $b$  はフィッティングパラメータであり, 特に  $\Delta_s(0)$  は無限系におけるスピンギャップの大きさ. 外挿に用いるシステムサイズは  $L = 64, 128, 192, 256$  であり, 外挿においては DMRG のトランケーション数を  $\chi = 256$  としている. 有限サイズにおけるエネルギーギャップを DMRG により決定する際に, 式 (2.59) のハミルトニアンが  $m = \sum_i s_i^z$  と可換であることを用いた量子数分割を利用し,  $m = 0, 2$  における基底状態エネルギーの差  $E(m=2) - E(m=0)$  をスピンギャップとした.  $E(m=1) - E(m=0)$  を採用しない理由は以下である. 解析の結果, HS 相と EI 相においては  $m = 1$  の基底状態は  $m = 0$  の基底状態とほとんど縮退していることがわかっている. HS 相と EI 相では  $s = 1$  の HS 状態が存在するため, AKLT 模型 [71] における端状態の縮退に対応する縮退が予想される. 本研究で得られている  $m = 0$  と  $m = 1$  の縮退は, この端状態の自由な  $s = 1/2$  スピンに対応する縮退であると考えられる. この端の磁化の寄与は無限系では消えるため, ここでは  $m = 1$  の磁化は無視している.

いくつかの  $\Delta/\sqrt{t_a^2 + t_b^2}$  に対して, 外挿におけるスピンギャップのシステムサイズ依存性を図 3.10 に示す. 図 3.10 ではフィッティング関数 (3.2) がうまく機能していることが確かめられる.  $\Delta/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = 6.00$  は, EI-LS 相境界に近いパラメータであり, スピンギャップが非常に小さくなり, その値が正確に得られなくなる.

LS 相においては, LS 状態と HS 状態間のエネルギー差  $E_H - E_L$  に対応するスピンギャップが存在する. HS 相におけるスピンギャップは,  $s = 1$  の 1 次元 Heisenberg 模型における Haldane ギャップ [72] に対応する. HS 相においては LS 状態のエネルギーが高いため, この基底を切り捨てることによって, 有効模型 (2.59) は  $s = 1$  の Heisenberg 模型に帰着する. 実際に HS 相におけるスピンギャップの大きさは Haldane ギャップ  $\Delta \simeq 0.4105J_s = 0.02932$  とよく一致する [63]. EI 相におけるスピンギャップは HS 相との境界で HS 相の Haldane ギャップに接続している. また, LS 相に近づくにつれてスピンギャップは小さくなっていき, LS 相との相境界ではスピンギャップが閉じる. AKLT 模型におけるスピンギャップは基底状態に端状態に由来する 4 重縮退が見られるが, EI 相の基底状態にも端状態に由来する 4 重縮退が確認されている. 従って, EI 相におけるスピ

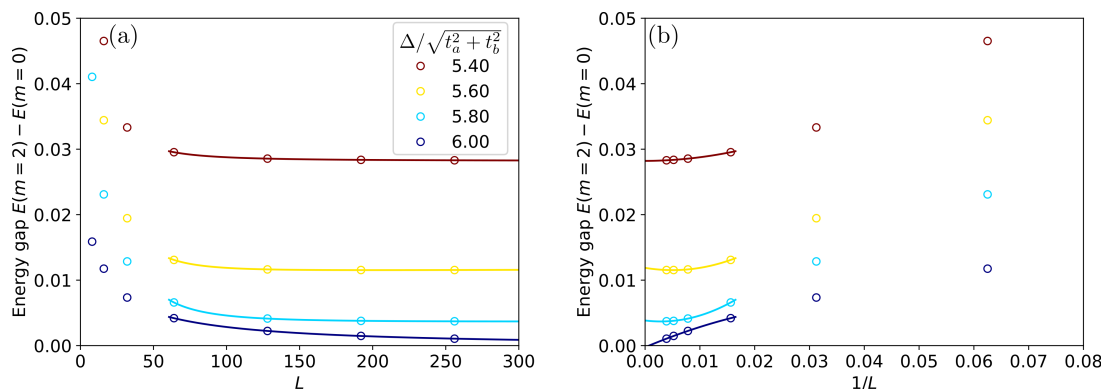


図 3.10 スピンギャップのシステムサイズ依存性. (a) では  $L$  に対して, (b) では  $1/L$  に対して示している. 各点は DMRG によって求めたスピンギャップであり, 実線は式 (3.2) によるフィッティングの結果である. フィッティングに用いた点は  $L = 64, 128, 192, 256$  である.  $\Delta/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = 5.40$  は HS 相であり,  $\Delta/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = 5.60, 5.80, 6.00$  は EI 相である.

の性質は AKLT 模型における valence bond solid (VBS) 状態と同種であることが予想される. また, EI 相のスピンギャップは 1 次元に特有であると考えられる.

### 3.2.3 HS 相の磁化過程

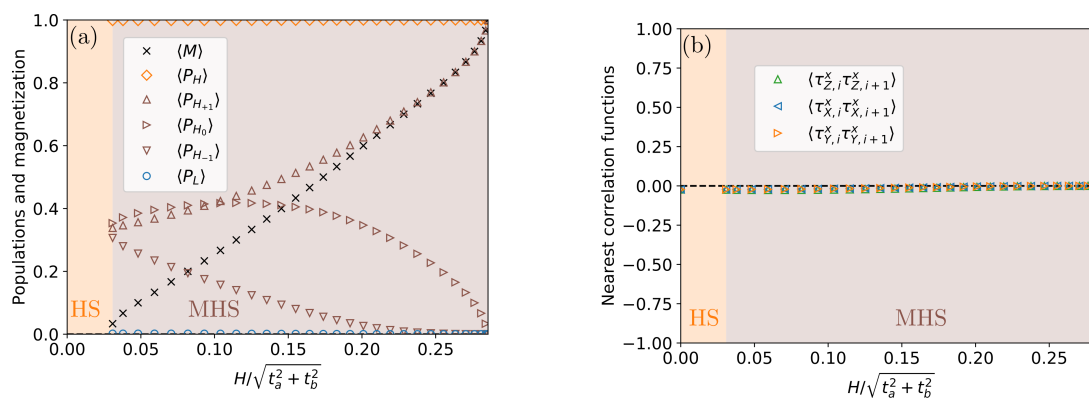


図 3.11 HS 相における磁化過程. この磁化過程は図 3.9(a) における破線 I に対応している. パネル (a) は磁化曲線と各状態の期待値を示しており, パネル (b) は最近接相関関数を示している.  $\langle M \rangle$  は磁化を表しており, 飽和磁化のとき  $\langle M \rangle = 1$  である.  $\langle P_{H_s^z=0,\pm 1} \rangle$  は HS 状態のトリプレットのそれぞれの空間平均期待値を表しており,  $\sum_{s^z=0,\pm 1} \langle P_{H_s^z} \rangle = \langle P_H \rangle$  が成立する.

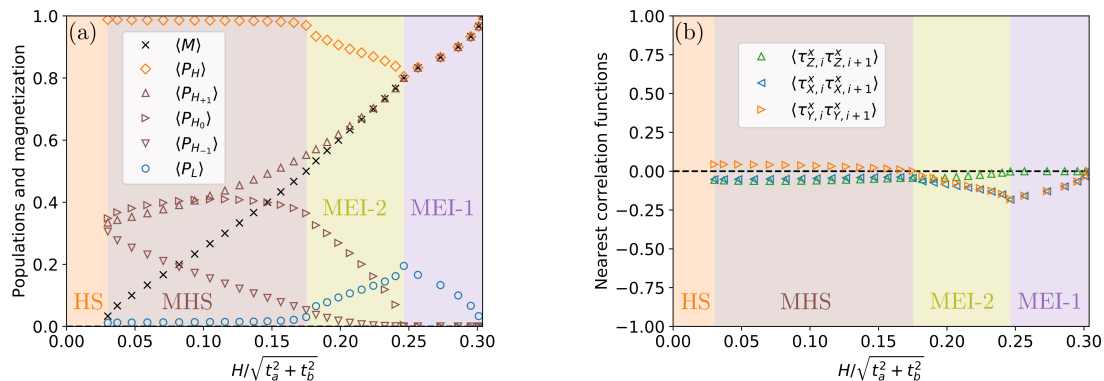


図 3.12 HS 相のうち, EI 相に近い領域における磁化過程. この磁化過程は図 3.9(a) における破線 II に対応している.

本項からは, HS 相, EI 相, LS 相の各相における磁化過程を示す.

HS 相の広い範囲では, 磁化過程に伴う相転移は, HS  $\rightarrow$  MHS  $\rightarrow$  Full Polar となる. 図 3.9(a) における磁化過程 (I) はそのひとつである. 図 3.11 に図 3.9(a)(I) に対応する磁化曲線と関連する物理量を示す. 図 3.11(a) において, HS 相の磁化過程に現れる MHS 相では, LS 状態の期待値がほとんどゼロとなっている. さらに, 図 3.11(b) では相関関数  $\langle \tau_{T,i}^x \tau_{T,i+1}^x \rangle$  がほとんどゼロとなっている. このことから, HS 状態の広い領域では, 磁場の印加により LS 状態が励起されず, 励起子相関も現れないことがわかる.

HS 相のうち, EI 相に近い領域では, 他の領域の HS 相とは異なる磁化過程が得られる. この磁化過程に伴う相転移は, HS  $\rightarrow$  MHS  $\rightarrow$  MEI-2  $\rightarrow$  MEI-1  $\rightarrow$  Full Polar となる. ここでは, HS 相において磁場誘起の励起子絶縁体相が得られている. 図 3.9(a) における磁化過程 (II) はそのような磁化過程を示す例である.

図 3.12 に図 3.9(a) における磁化過程 (II) に対応する磁化曲線と関連する物理量を示す. 図 3.12(a) から, MEI-2 相および MEI-1 相においては, LS 状態の期待値が非ゼロとなっている. EI 相に近い領域では LS 状態のエネルギーが HS 状態のエネルギー近くまで低くなる. さらに, HS 状態と LS 状態の両方が存在している場合には交換相互作用による HS 状態 (励起子) の運動エネルギーの利得が大きい. そのため, LS 状態を励起しても運動エネルギーが得する MEI 相へ転移したと解釈される. 2 種類の MEI 相の詳細は次項で述べる.

### 3.2.4 EI 相の磁化過程

EI 相の磁化過程に伴う相転移は, EI  $\rightarrow$  MEI-2  $\rightarrow$  MEI-1  $\rightarrow$  Full Polar となる. ここで, 特に低磁場における磁化した励起子絶縁体相を MEI-2 相, 高磁場における励起子絶縁体相を MEI-1 相と呼んでいる. このような磁化過程の例として, 図 3.13 に図 3.9(a) にお

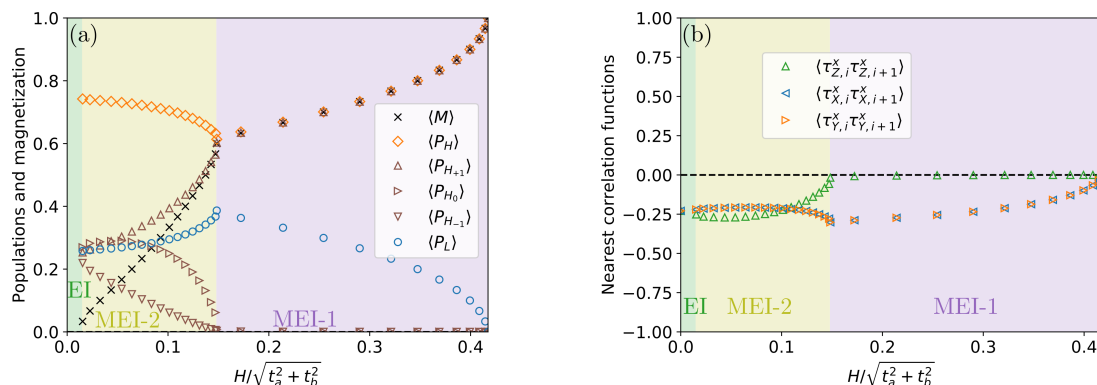


図 3.13 EI 相における磁化過程. この磁化過程は図 3.9(a) における破線 III に対応している.

ける磁化過程 (III) に対応する磁化曲線と関連する物理量を示す.

図 3.13(a) から, 低磁場領域の MEI-2 相では,  $\langle P_{H_{+1}} \rangle$ ,  $\langle P_{H_0} \rangle$ ,  $\langle P_{H_{-1}} \rangle$ ,  $\langle P_L \rangle$  の全てが非ゼロであるのに対し, 高磁場領域の MEI-1 相では,  $\langle P_{H_{+1}} \rangle$ ,  $\langle P_L \rangle$  のみが非ゼロであり,  $\langle P_{H_0} \rangle$  および  $\langle P_{H_{-1}} \rangle$  は MEI-2 相と MEI-1 相の相境界でゼロになることがわかる. このことから, MEI-2 相においては  $s = 1$  の HS 状態にスピンの向きが自由度が存在しているが, 強い磁場の印加により, スピンの向きが  $s^z = +1$  に固定されることが, MEI-2 相と MEI-1 相の相転移に対応していると解釈される. このことは, 図 3.13(b) に示した各四極子に対する最近接の励起子相関からも肯定される. MEI-2 相において,  $X$ ,  $Y$ ,  $Z$  の全方向の励起子相関が負の有限値を示しているのに対し, MEI-1 相においては,  $\langle \tau_{X,i}^x \tau_{X,i+1}^x \rangle$ ,  $\langle \tau_{Y,i}^y \tau_{Y,i+1}^y \rangle$  の励起子相関のみが有限であり,  $\langle \tau_{Z,i}^x \tau_{Z,i+1}^x \rangle$  はほとんどゼロとなる.  $|H_{s^z=+1}\rangle = -(P_{H_X}^+ |L\rangle + iP_{H_Y}^+ |L\rangle)/\sqrt{2}$  であるので,  $X$  と  $Y$  のスピン四極子に対応する励起子は  $z$  方向の磁化と共存する事ができる. 一方で  $|H_{s^z=0}\rangle = P_{H_Z}^+ |L\rangle$  なので  $Z$  のスピン四極子に対応する励起子は, 磁化と共存しない. 従って, 強い磁場の印加により, HS 状態のスピン自由度が固定されることで,  $Z$  の励起子が消失する. 以上より, MEI-1 相は  $(s = 1, s^z = 1)$  の HS 状態と  $(s = 0, s^z = 0)$  の LS 状態の間の交換相互作用により安定化している励起子絶縁体であると結論される.

本モデルでは  $s = 1$  の HS 状態内のスピンの向きに加えて,  $s = 0$  の LS 状態も存在するため, 図 3.13 のような 2 段階の磁化過程が得られたと考えられる. さらに, MEI-2 相においては磁場とともに  $\langle P_H \rangle$  が減少するが, MEI-1 相に入ると再び  $\langle P_H \rangle$  が増加するという非単調なふるまいが特徴として得られている. このような段階的な磁化過程やスピン状態の期待値の非単調性は, スピントリプレットの励起子絶縁体の特徴として, より高次元の系でも適用される可能性がある.



## 3.2.5 LS 相の磁化過程

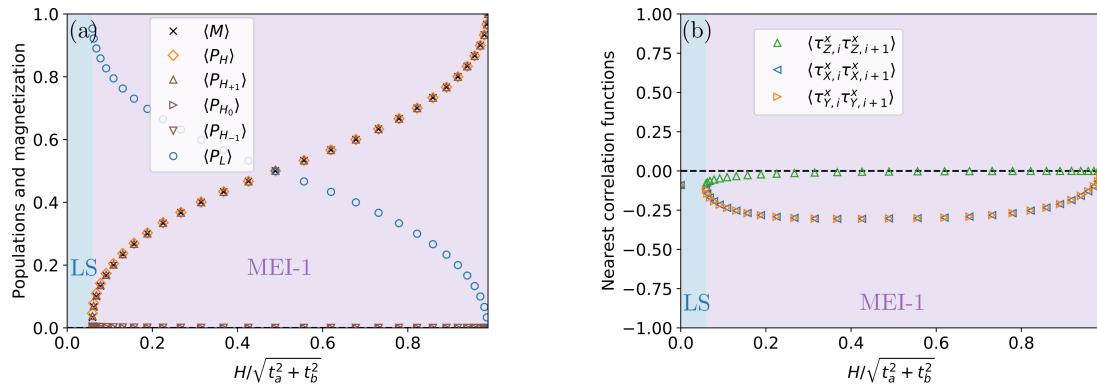


図 3.14 LS 相における磁化過程. この磁化過程は図 3.9(a) における破線 IV に対応している.

LS 相の磁化過程に伴う相転移は,  $LS \rightarrow MEI-1 \rightarrow Full Polar$  となる. 図 3.9(a) における磁化過程 (IV) はこの過程に対応している. 図 3.14 に図 3.9(a)(IV) に対応する磁化曲線と関連する物理量を示す. LS 相の磁化過程に見られる MEI-1 相は EI 相の磁化過程で見られた磁化した励起子絶縁体相のうち, 高磁場領域で見られた相と同一である. 実際に, 図 3.14(a) に示した図 3.9(a)(IV) における各状態の期待値では, MEI-1 相において  $\langle P_{H+1} \rangle$  と  $\langle P_L \rangle$  のみが有限となっている. また, 図 3.14(b) では  $\langle \tau_{X,i}^x \tau_{X,i+1}^x \rangle$ ,  $\langle \tau_{Y,i}^x \tau_{Y,i+1}^x \rangle$  のみが大きな絶対値をとり,  $\langle \tau_{Z,i}^x \tau_{Z,i+1}^x \rangle$  はゼロに近い値をとる. これは MEI-1 相の特徴に一致する. この結果は LS 相において磁場により, 励起子絶縁体が誘起されることを示唆している.

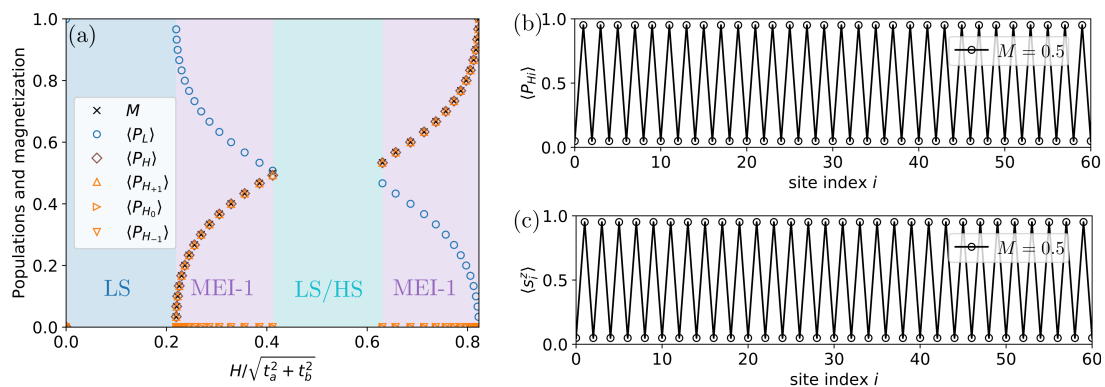


図 3.15 (a)LS 相における磁化過程.  $\eta = 0.3$ , 他のパラメータは図 3.14 に同じ. (b) $\langle M \rangle = 0.5$  における HS 状態の実空間分布. (c) $\langle M \rangle = 0.5$  における 1 サイトスピン期待値の実空間分布

...	<span style="color: lightblue;">●</span>	<span style="color: orange;">↑</span>	<span style="color: lightblue;">●</span>	<span style="color: orange;">↑</span>	...
	LS	HS	LS	HS	
$s$	0	1	0	1	
$s^z$	0	+1	0	+1	

図 3.16  $\eta = 0.3$  の場合の LS 相の磁化過程に現れる LS/HS 構造

図 3.9 の磁場中相図では,  $\eta = 2t_a t_b / (t_a^2 + t_b^2) = 1$  に固定している. この条件では, HS 相と LS 相の中間相として EI 相のみが実現する. 一方で,  $\eta$  がより小さい領域では SSO が実現しており, 磁化過程においてもスピン状態の超格子構造が現れることが予想される. そこで, LS 相において, より  $\eta$  が小さい領域である  $\eta = 0.3$ ,  $\Delta / \sqrt{t_a^2 + t_b^2} = 6.2$  の場合の磁化過程を解析した. これを図 3.15(a) に示す. 図 3.15(a) では磁化過程の途中の  $M = 0.5$  において磁化のプラトー構造が見られる. この磁化のプラトーでは, 図 3.15(b)(c) で示されるような磁気構造が現れる. このことから中間領域では LS/HS の 2 倍周期構造が現れていることがわかる. LS/HS 相では, HS 状態はほとんどが  $s^z = 1$  の状態となっている. この状態の模式図を図 3.16 に示す.

$\eta$  が小さい場合の LS 相の磁化過程で励起子絶縁体相の中間に, LS/HS 相が現れるという結果は, 先行研究における同じ模型の 2 倍周期構造を仮定した平均場による解析結果 [4] でも得られている. 本研究では更に 60 サイトの解析でも同様の 2 倍周期の構造が得られており, その他のより大きな構造が得られないことが示された.

### 3.2.6 3-fold SSO 相の磁化過程

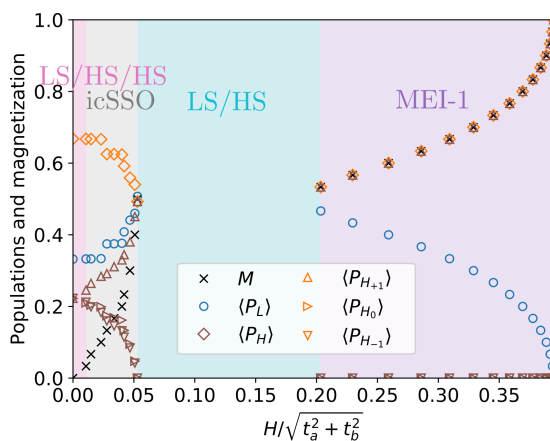


図 3.17 SSO 相における磁化過程.

最後に SSO 相における磁化過程を示す. 磁場のない場合,  $\eta = 0.3$ ,  $\Delta/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = 5.75$  では LS/HS/HS の 3 倍周期のスピンの状態秩序が得られている (図 3.3, 図 3.7). この場合の磁化過程を図 3.17 に示す. LS 相のときと同様に LS/HS の 2 倍周期構造が  $\langle M \rangle = 0.5$  に現れ, 更に磁場をかけると MEI-1 相へと転移する. LS/HS/HS 相と LS/HS 相の間には, 複雑なスピンの状態の秩序構造が現れるインコメンシュレイトスピンの状態秩序相 (icSSO) が得られている. この構造の安定化には, 結晶場分裂と Hund 結合の競合, 磁場による磁化, スピン間相互作用, 励起子の運動エネルギーが寄与していると考えられるが, その構造の煩雑さのため, 現在のところ, システムサイズの不足を主な原因として系統的な解析結果が得られていない.

磁場のない基底状態において LS/HS/HS の 3 倍周期構造 (図 3.8) が実現し, 磁場下で LS/HS の 2 倍周期構造 (図 3.16) が実現するという現象は次のように解釈できる. 磁場のない状況では, HS 状態として  $s^z = -1, 0, +1$  全てがエネルギー的に同等である. 従って, 最近接の HS 状態が  $s = 0$  となるようにペアを組むことによって, 反強磁性的なスピンの間相互作用相互作用の利得が得られる. これにより, LS/HS/HS 構造が安定化している. 一方で, 磁場下においては, HS 状態として  $s^z = +1$  がエネルギー的に安定であり,  $s^z = 0, -1$  はエネルギーが高い. 従って, 最近接の HS 状態を考えた場合に反強磁性的なスピンの間相互作用と競合し, エネルギーの安定化が得られにくくなる.

### 3.2.7 結論

本節では, 1 次元 2 軌道 Hubbard 模型の低エネルギー有効模型の磁場効果について, DMRG による解析を行った.

スピンのギャップの解析では HS 相のみならず, EI 相に Haldane ギャップと同様のスピンのギャップが存在することが示された.

また, 低スピン相 (LS 相) の磁化過程に磁場誘起の励起子絶縁体相 (MEI-1 相) が得られることが示された. また, 励起子絶縁体相 (EI 相) の磁化過程では磁化曲線が 2 段階に変化する様子が見られた. これは HS 状態のスピンの向きに対応する自由度が, 磁場により固定され, 消失することに対応している.

また, 各軌道間のホッピングの大きさの比が小さい領域では, 飽和磁化の半分の磁化の大きさで, LS/HS の 2 倍周期構造が安定化する磁化プラトーが得られた. この結果は, 先行研究における有効模型の平均場の結果 [4] と整合する.

### 3.3 相関関数の長距離構造とエンタングルメントエントロピー

#### 3.3.1 無磁場における基底状態の相関関数

本節では、有効模型の基底状態の解析で得られた各相における相関関数の長距離でのふるまいの解析結果を示す。

本節で行う解析においてはシステムサイズを  $L = 190$ , 境界条件を開放端, DMRG のトランケーション数を  $\chi = 256$  としている. この条件は, 相関関数の冪則と指数則を判定するには  $L, \chi$  ともに十分ではない可能性がある. したがって, 相関長が長距離になる場合に, それが冪か指数かかの判定を精度良く行うことが難しい.

しかしながら, 本解析の精度の範囲内でも, 相関長が短い場合においては比較的正確な結果が期待されることや, 相関長が長くなる傾向から, 量子臨界状態の可能性を示唆することが可能である. DMRG による解析によって得られた各相における各種相関関数の距離依存性を図 3.18 から図 3.22 に示す.

本項では, 相関関数として,

$\langle (P_{Hi} - \langle P_{Hi} \rangle)(P_{Hj} - \langle P_{Hi} \rangle) \rangle$ ,  $\langle (s_i^z - \langle s_i^z \rangle)(s_j^z - \langle s_j^z \rangle) \rangle$ ,  $\langle (\tau_{Zi}^x - \langle \tau_{Zi}^x \rangle)(\tau_{Zj}^x - \langle \tau_{Zj}^x \rangle) \rangle$ ,  $\langle (\tau_{Zi}^y - \langle \tau_{Zi}^y \rangle)(\tau_{Zj}^y - \langle \tau_{Zj}^y \rangle) \rangle$ ,  $\langle (\tau_{Zi}^z - \langle \tau_{Zi}^z \rangle)(\tau_{Zj}^z - \langle \tau_{Zj}^z \rangle) \rangle$  を対象とする. 解析に用いるパラメータは次のように固定する.  $U/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = 12$ ,  $U'/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = 8$ ,  $J/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = I/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = 2$ ,  $\eta = 2t_a t_b / (t_a^2 + t_b^2) = 1$ . また,  $\Delta/\sqrt{t_a^2 + t_b^2}$  を変化させる. これは  $\eta - \delta$  相図 3.3 において, 縦軸を  $\eta = 1$  に固定したカットライン上に対応する. 相関関数の解析結果をもととした各相関関数の長距離でのふるまいを次の表にまとめる.

表 3.1 各相関関数の揺らぎ成分の長距離でのふるまい. pow は冪則, exp は指数則を示す. ?がついているものは, 十分な精度で判定ができていないことを指す. LS-EI, EI-HS は相境界を表している. Figure 欄で参照しているインデックスに対応する図に, それぞれの相関関数の距離依存性のデータを示している.

	$P_{Hi}P_{Hj}$	$s_i^z s_j^z$	$\tau_{Zi}^x \tau_{Zj}^x$	$\tau_{Zi}^y \tau_{Zj}^y$	$\tau_{Zi}^z \tau_{Zj}^z$
Figure	3.18	3.19	3.20	3.21	3.22
LS	exp	exp	exp	exp	exp
LS-EI	pow?	pow?	pow?	pow?	pow?
EI	exp?	exp	exp?	exp?	exp?
EI-HS	pow?	exp	exp?	exp?	exp?
HS	exp	exp	exp	exp	exp

表 3.1 において, LS 相はバンド絶縁体になっており, スピン, 軌道ともに自明なギャップが空いている. 従って, 各相関関数は指数減衰するのは自然である. また, HS 相は強い Hund 結合により, 軌道自由度は固定されており, スピン自由度に関しては  $s = 1$  の 1 次元スピン系としての Haldane ギャップが存在する. 従って, ここでも各相関関数が指数減衰となることは明らかである.

一方で, EI 相においては, 相関関数のふるまいは自明ではなく, 冪則となる可能性がある. 本研究の範囲では冪則を判定することは難しいが, 少なくとも, LS-EI の相境界でスピン相関  $\langle s_i^z s_j^z \rangle$  と励起子相関  $\langle \tau_{Z_i}^x \tau_{Z_j}^x \rangle$  が長距離まで到達する傾向が見られた. EI 相では相関関数の長距離でのふるまいが変化しているように見える. LS 相付近では  $\langle s_i^z s_j^z \rangle$ ,  $\langle \tau_{Z_i}^x \tau_{Z_j}^x \rangle$  とともに冪的であり, HS 相に近い領域では, ともに指数的である. このふるまいは,  $s = 1$  の HS 状態が, スピンギャップをもつ状態を形成することにより, 励起子相関が乱されていることを示している. また,  $\langle P_{H_i} P_{H_j} \rangle$  は本研究の結果からは冪則と指数則の判別が難しい.  $\langle P_{H_i} P_{H_j} \rangle$  の解析においては, システムサイズと特異値の不足に加えて, 開放端の効果により対称性が敗れる演算子であるために, 有限サイズ効果が大きく影響してしまうことや, インコメンシュレイトな構造を持つために適切な関数形が不明であることも解析を難しくしている原因である.

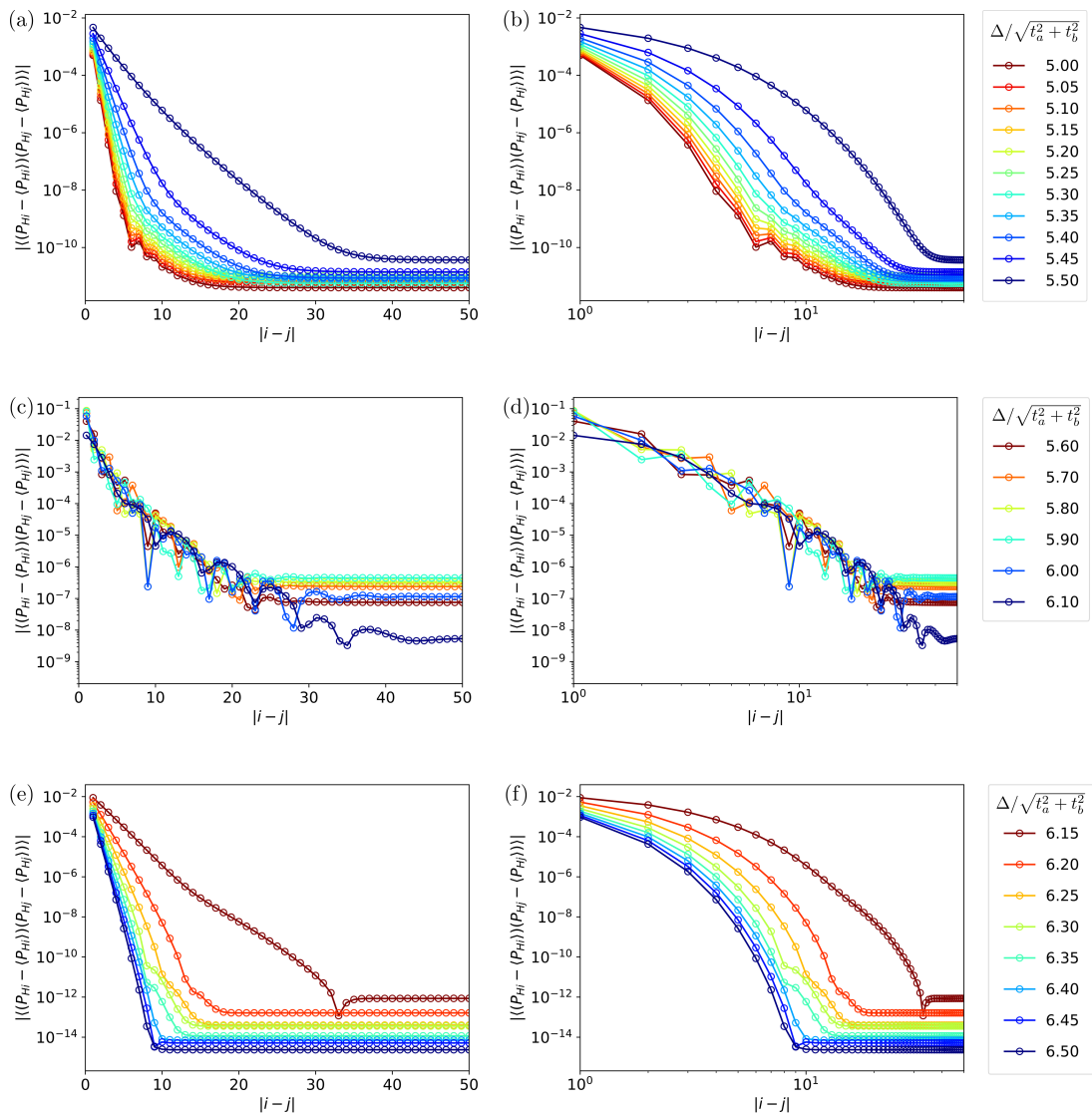


図 3.18 各相における HS 状態の空間分布に対応する相関関数  $\langle (P_{Hi} - \langle P_{Hi} \rangle) (P_{Hj} - \langle P_{Hj} \rangle) \rangle$  の距離依存性. (a)(b) は HS 相, (c)(d) は EI 相, (e)(f) は LS 相に対応する. (a)(c)(e) は片対数プロットであり, (b)(d)(f) は両対数プロットである.

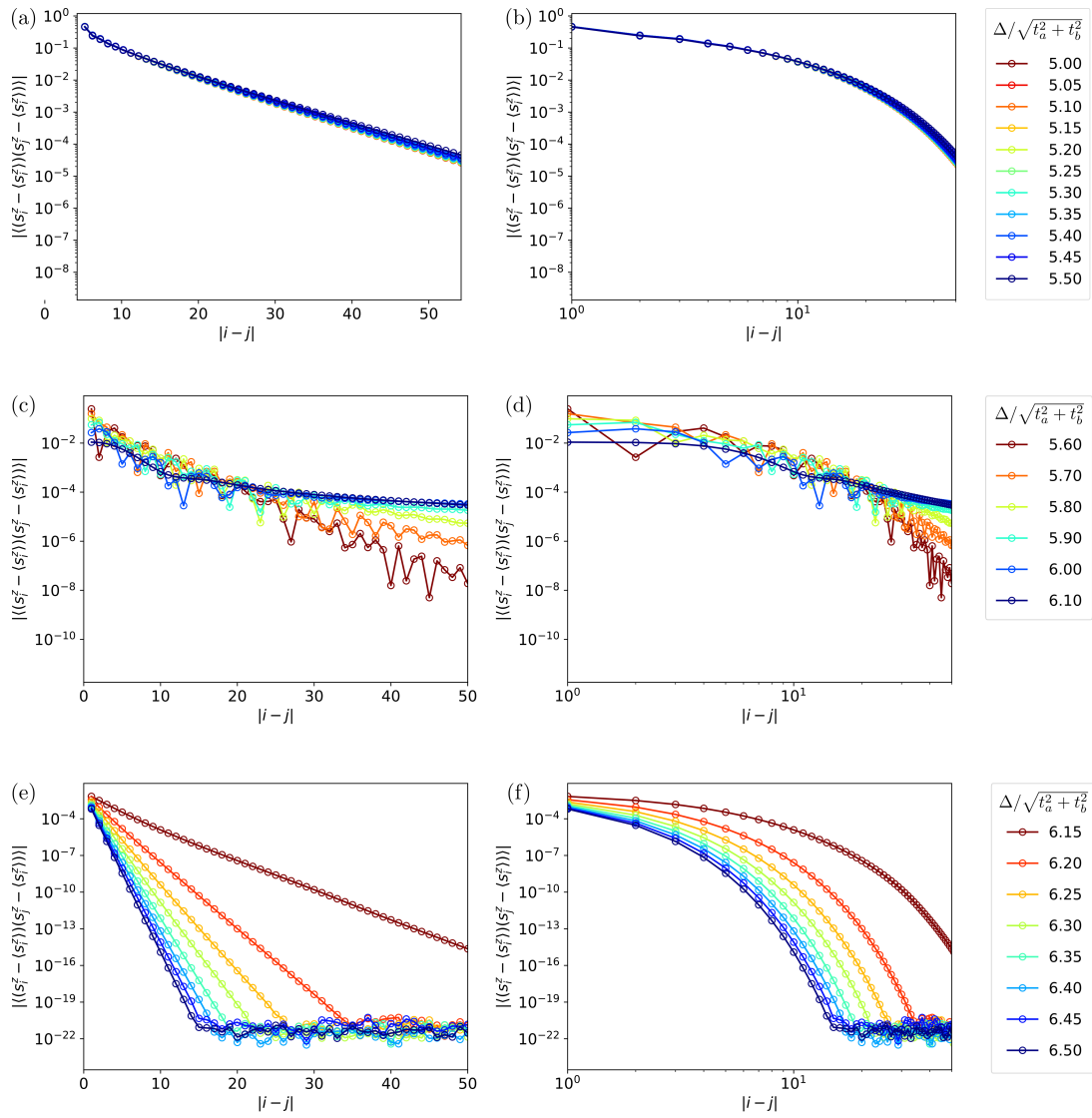


図 3.19 各相におけるスピン相関関数  $\langle (s_i^z - \langle s_i^z \rangle)(s_j^z - \langle s_j^z \rangle) \rangle$  の距離依存性. (a)(b) は HS 相, (c)(d) は EI 相, (e)(f) は LS 相に対応する. (a)(c)(e) は片対数プロットであり, (b)(d)(f) は両対数プロットである.

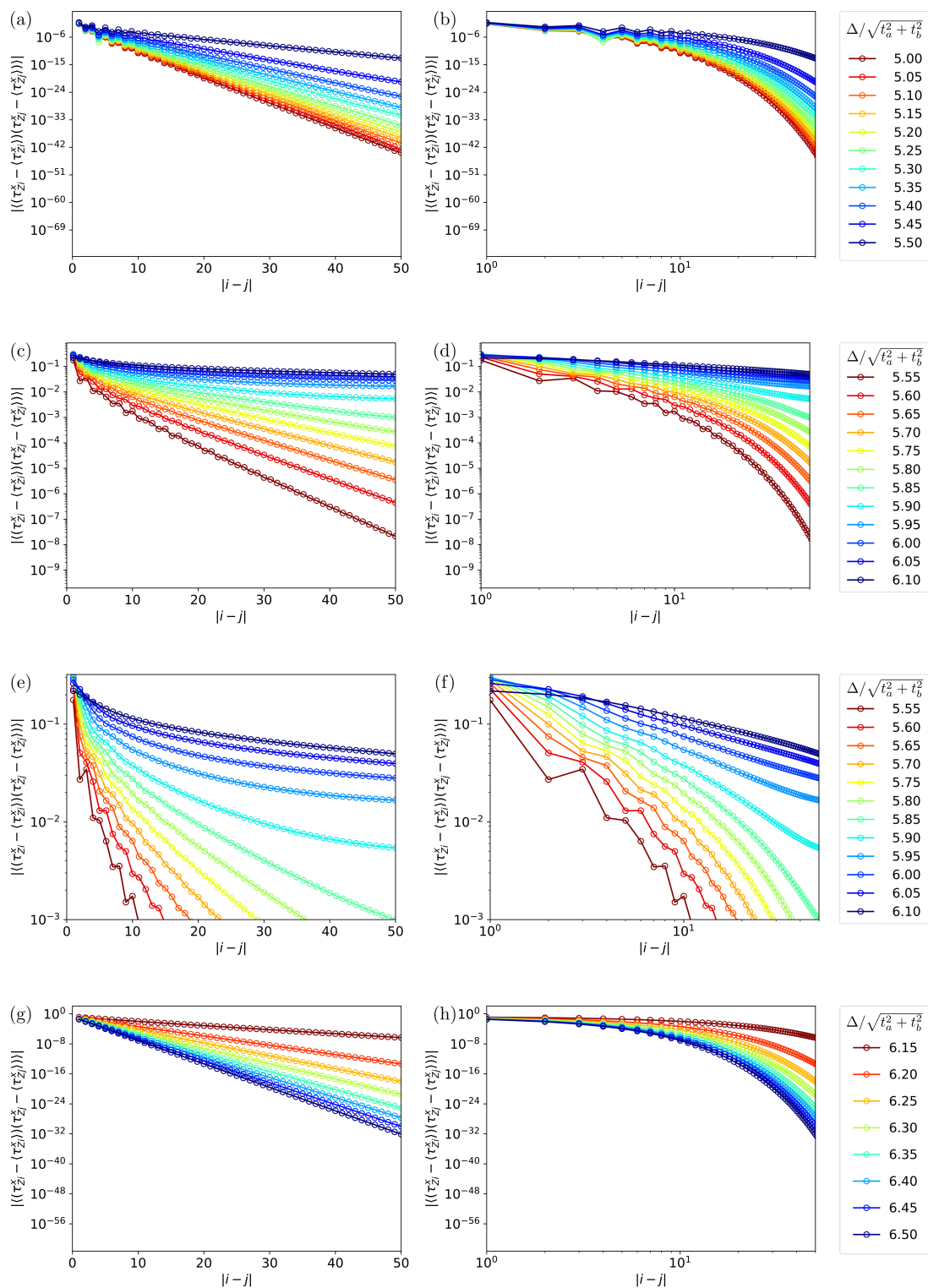


図 3.20 各相における励起子相関関数  $\langle (\tau_{Zi}^x - \langle \tau_{Zi}^x \rangle)(\tau_{Zj}^x - \langle \tau_{Zj}^x \rangle) \rangle$  の距離依存性. (a)(b) は HS 相, (c)(d)(e)(f) は EI 相, (g)(h) は LS 相に対応する. (a)(c)(e)(g) は片対数プロットであり, (b)(d)(f)(h) は両対数プロットである. (e)(f) はそれぞれ, (c)(d) の拡大図である.



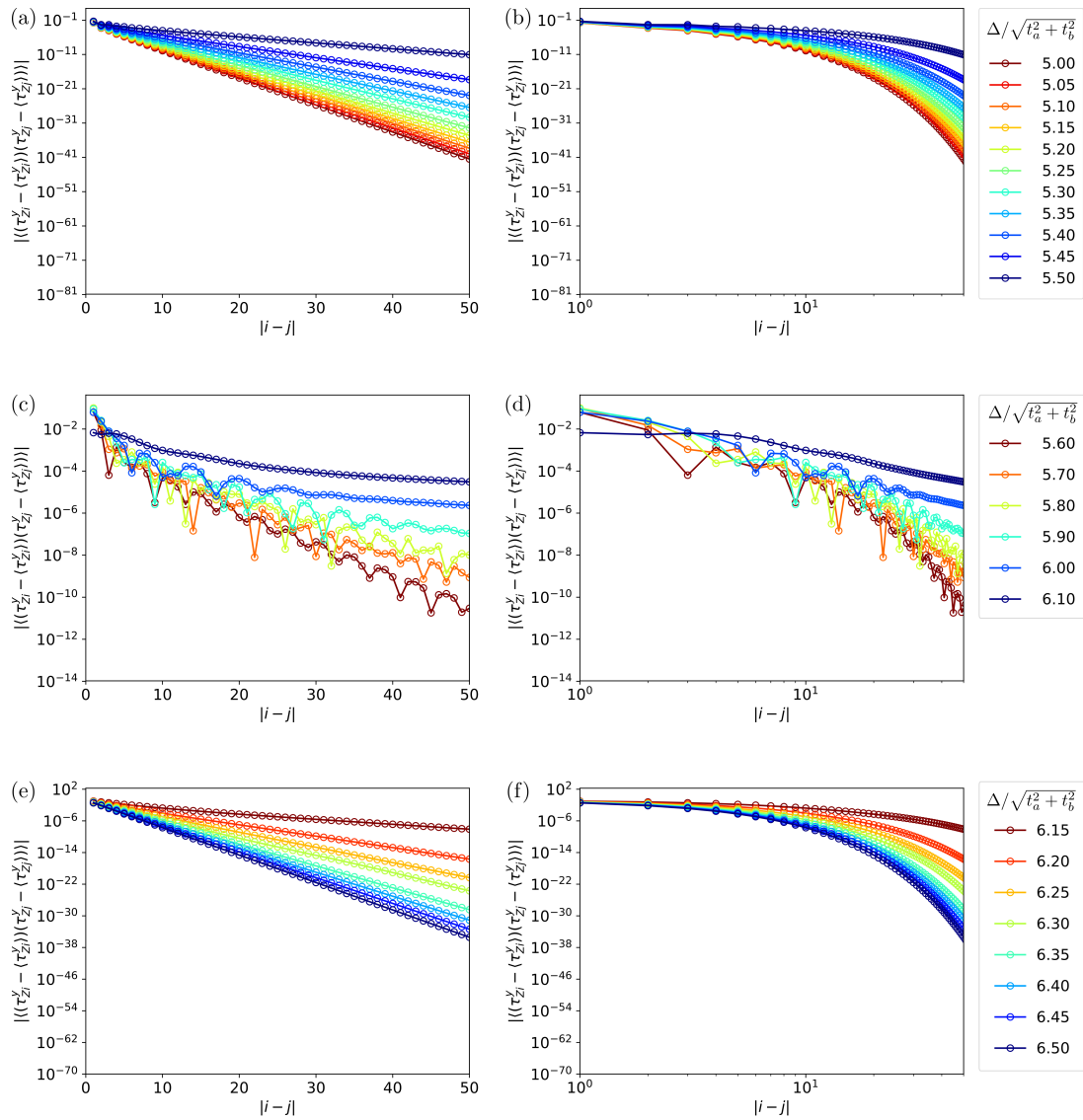


図 3.21 各相における相関関数  $\langle (\tau_{Zi}^y - \langle \tau_{Zi}^y \rangle)(\tau_{Zj}^y - \langle \tau_{Zj}^y \rangle) \rangle$  の距離依存性. (a)(b) は HS 相, (c)(d)(e)(f) は EI 相, (g)(h) は LS 相に対応する. (a)(c)(e)(g) は片対数プロットであり, (b)(d)(f)(h) は両対数プロットである. (e)(f) はそれぞれ, (c)(d) の拡大図である.

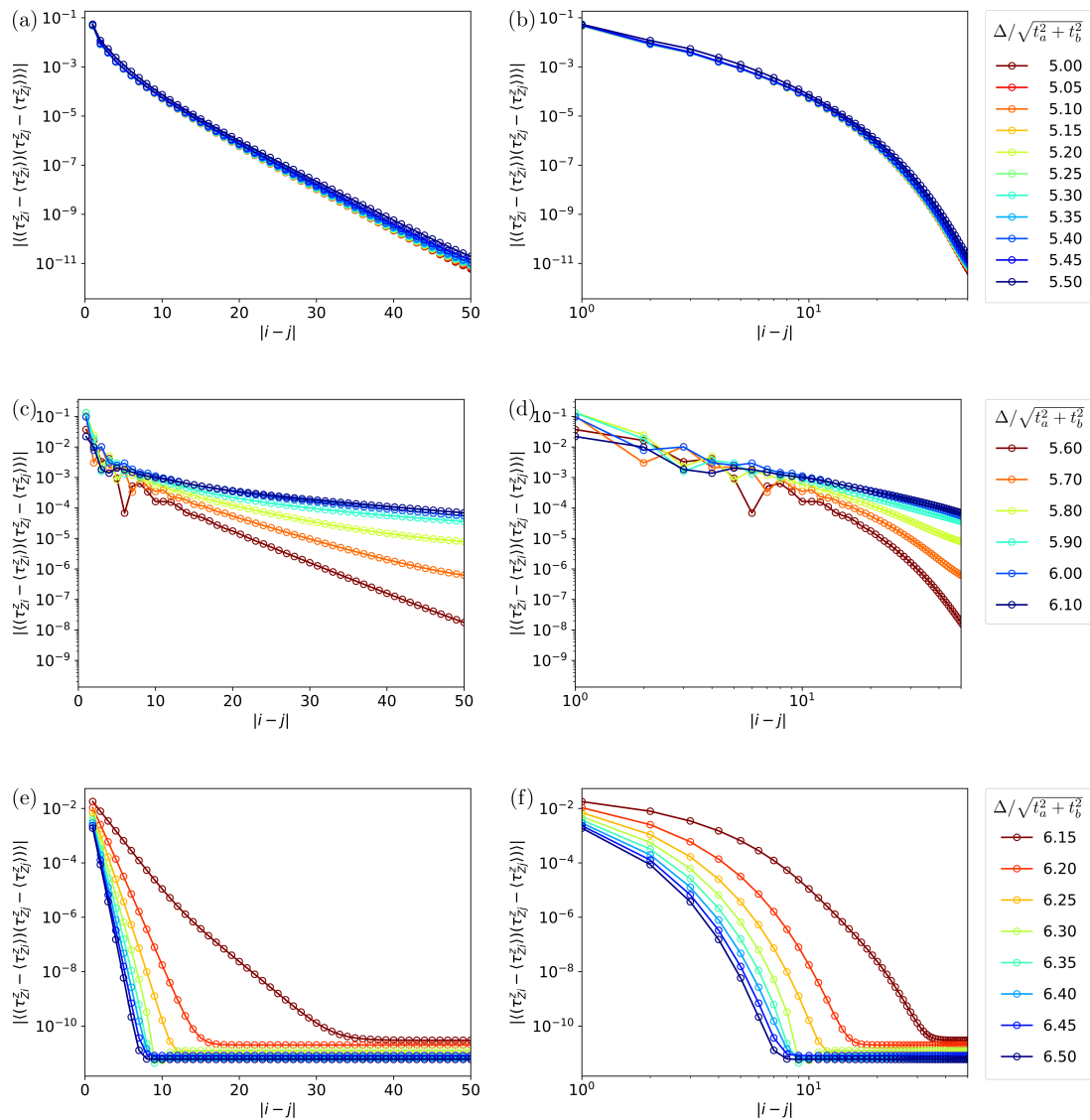


図 3.22 各相における相関関数  $\langle (\tau_{Z_i}^z - \langle \tau_{Z_i}^z \rangle) (\tau_{Z_j}^z - \langle \tau_{Z_j}^z \rangle) \rangle$  の距離依存性. (a)(b) は HS 相, (c)(d)(e)(f) は EI 相, (g)(h) は LS 相に対応する. (a)(c)(e)(g) は片対数プロットであり, (b)(d)(f)(h) は両対数プロットである. (e)(f) はそれぞれ, (c)(d) の拡大図である.

## 3.3.2 EI 相におけるエンタングルメントエントロピーの性質

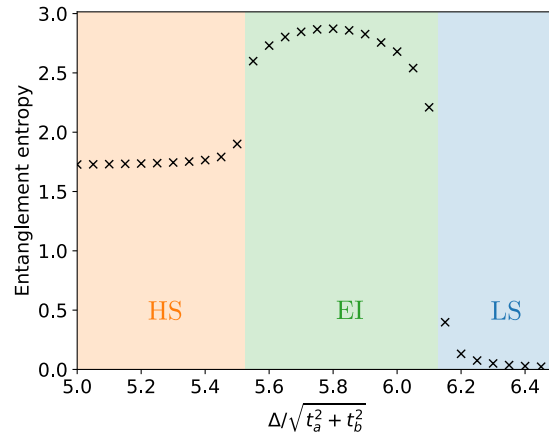


図 3.23 システムサイズ  $L = 60$  の系を中央で分断した場合のエンタングルメントエントロピー。

この項では、エンタングルメントエントロピーの性質を調べることによって、特に EI 相の性質を調べる。エンタングルメントエントロピーは相転移に敏感であり、各相の性質を反映することがわかっており、近年、相境界の決定などに用いられている。本研究では、特に秩序変数を定義できない EI 相と他の相との相境界を決定するために、エンタングルメントエントロピーの性質に注目している。

本項では、システムサイズ  $L$  の周期境界条件 ( $L = 0$ ) を持つ系を  $\{0, \dots, l\}$  の部分系と  $\{l, \dots, L - 1\}$  の環境に切り分けたときのエンタングルメントエントロピー  $S(l)$  に注目する。

エンタングルメントエントロピーの面積則 (の破れ) を用いて、系の量子臨界性を判断することができる。系が非臨界であるとき、エンタングルメントエントロピーの面積則が成立する。すなわち、 $l, L$  が十分大きいとき、

$$S(l) = \text{const.} \quad (3.3)$$

が成立する。これは、1次元系の場合には、全系を左右の部分系に切り分けたときの断面積が常に一定であり、量子もつれが断面付近にのみ存在していることと対応している。一方で、系が臨界であるときは  $l, L$  が十分大きいとき、

$$S(l) \propto (c/6) \log(l) \quad (3.4)$$

となり、面積則が敗れることが知られている。これは、量子臨界系では量子もつれが遠方まで到達することと対応している。

開放系の1次元系における、エンタングルメントエントロピーの表式は以下のように与えられる [73].

$$S(l) = (c/6) \log [(L/\pi) \sin(\pi l/L)] + \text{const.} \quad (3.5)$$

ここで、 $c$  はセントラルチャージと呼ばれる値であり、量子臨界系では非ゼロとなる。式 (3.5) は  $L \rightarrow \infty$  で  $S(l) = (c/6) \log(l)$  となり、量子臨界系での対数スケーリングに帰着する。

周期系では、式 (3.5) は  $(c/6) \rightarrow (c/3)$  の変更を受ける。これは周期系では系を2分した際の断面積が2倍になることと対応している。

図 3.23 には、1次元系を中心に2分した場合のエンタングルメントエントロピーとエンタングルメントエントロピーの対数スケーリングから得られたセントラルチャージについて、その結晶場分裂の大きさ  $\Delta/\sqrt{t_a^2 + t_b^2}$  への依存性を示す。ここでシステムサイズとして  $L = 60$  を用いており、トランケーション数は  $\chi = 256$  としている。擬スピン間の相互作用の異方性は、HS 相と LS 相の間に EI 相が現れる領域として  $\eta = 1$  ( $\Leftrightarrow t_a = t_b$ ) としている。クーロン相互作用のパラメータに関しては前節までと同様に、 $U/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = 12$ ,  $U'/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = 8$ ,  $J/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = I/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = 2$ ,  $\eta = 2t_a t_b / (t_a^2 + t_b^2) = 1$  とし、 $\Delta/\sqrt{t_a^2 + t_b^2}$  を変化させる。これは  $\eta - \delta$  相図 3.3 において、縦軸を  $\eta = 1$  に固定したカットライン上に対応する。

図 3.23(a) では、エンタングルメントエントロピーは、HS 相、EI 相、LS 相でそれぞれ異なるふるまいをする。HS 相においてエンタングルメントエントロピーの大きさは  $2 \log 2 \sim 1.386\dots$  から大きく離れていない。この値は大まかに、以下のように理解できる。HS 相は有効的に  $s = 1$  の Heisenberg 模型となっており、その基底状態は近似的に AKLT 模型の VBS 状態 [71] の描像を適用できる。valence bond を形成するスピン  $1/2$  のシングレットによって、 $\log 2$  のエンタングルメントエントロピーの寄与が現れる。本項では周期系を考えているため、系を2分したときに2つのシングレットを分離することになるため  $2 \log 2$  となる。

一方で LS 相のエンタングルメントエントロピーは非常に小さい、これは LS 相はバンド絶縁体になっており、電子遷移が Pauli の排他律によって禁止されているからである。

EI 相においてはエンタングルメントエントロピーが HS 相、LS 相と比べて大きい値をとっている。このことから EI 相においては HS 相や LS 相とは異なる低エネルギーの素励起が存在することが示唆される。

図 3.23(a) において、HS-EI 相境界および EI-LS 相境界で、エンタングルメントエントロピーは不連続に変化している。この不連続性は、秩序変数が定義しにくい本研究の対象領域において、相境界を明確に決定する手がかりとなる。図 3.1 や図 3.3 における相境界はこのエンタングルメントエントロピーの不連続性により決定している。

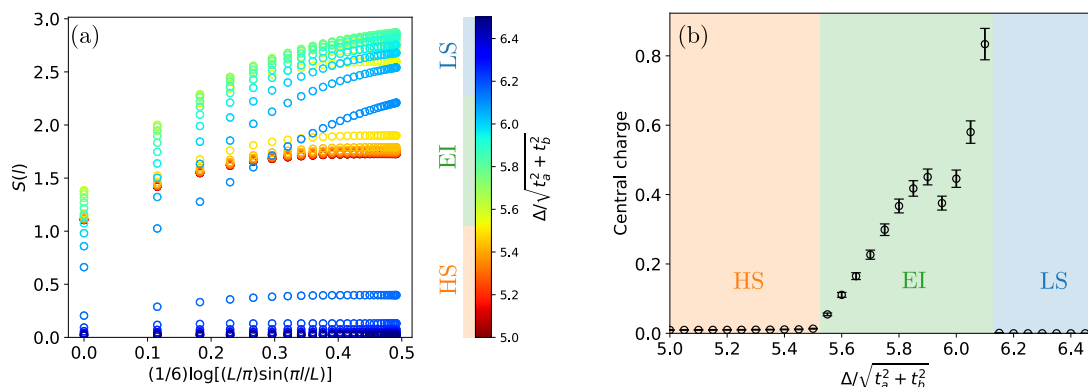


図 3.24 セントラルチャージの解析. 式 3.5 に基づくエンタングルメントエントロピーの面積則からのずれを HS 相について (a) に, EI 相について (b) に, LS 相について (c) にそれぞれ示す. (a)(b)(c) における  $25 \leq l \leq 35$  ( $\Leftrightarrow (1/6)\log[(L/\pi)\sin(\pi l/L)] > 0.485$ ) における傾きから推定したセントラルチャージを (d) に示す.

続いて, EI 相における量子臨界性を検討するためにエンタングルメントエントロピーの面積則 (の破れ) からセントラルチャージを推定する. セントラルチャージは式 (3.5) によって推定した.

図 3.24 では, HS 相, EI 相, LS 相におけるエンタングルメントエントロピーの面積則 (の破れ) とそれから推定したセントラルチャージを示す. 図 3.24(a) では, HS 相 (a) および LS 相においては, 系の中央付近 (図 3.24(a) においては右端) で傾きが 0 に近くなっており, エンタングルメントエントロピーの面積則が成立していることがわかる. これに対応して, 推定されたセントラルチャージはゼロに近い値をとっている. したがって, LS 相および, HS 相はエネルギーギャップの存在する非臨界系であると結論される. この結果は, HS 相が Haldane 系でありエネルギーギャップが存在することと, LS 相では LS 状態と HS 状態のエネルギー差に対応する自明なエネルギーギャップが存在することと整合する. 一方で, EI 相においては, 傾きが正となっており, 臨界的である可能性がある. セントラルチャージの推定値においても有限の値を示しており, ギャップレスの素励起が存在する可能性がある. 推定されたセントラルチャージは  $0 < c < 1$  の範囲内で変化している. しかしながら, 本解析では, システムサイズを  $L = 60$  としており, 相関長がこのシステムサイズと同等以上になる場合には非臨界状態であっても臨界状態との区別がつかない. 実際に, 図 3.24(a) では,  $l \sim L/2$  で傾きが 0 に近づいており,  $L \rightarrow \infty$  としたときに, 有限のセントラルチャージが得られるか不明である. また, DMRG のトランケーション数が  $\chi = 256$  あり, 長距離のエンタングルメントの性質を適切に表現できている保証が不十分である. これらは今後の課題であり, システムサイズとトランケーション数の外挿により, EI 相の臨界, 非臨界をより高い精度で決定できる可能性がある.

EI 相におけるエンタングルメントエントロピーのふるまいは、同じく励起子絶縁体相が得られる拡張 Falicov-Kimball 模型におけるセントラルチャージのふるまい [47] と異なる。拡張 Falicov-Kimball 模型においては EI 相においてセントラルチャージは  $c = 1$  で一定となる結果が得られている。一方で、2 軌道 Hubbard 模型の場合はスピン自由度が存在しており、そこでは、 $s = 1$  の励起子絶縁体の実現している。更に、反強磁性的なスピン間相互作用が  $s = 1$  の励起子の運動に干渉する。また、ペアホッピングにより、擬スピン間相互作用が  $xy$  面内で異方的になっている。これらの効果によって、励起子絶縁体における強距離の相関関数の振る舞いが変化していると考えられる。

### 3.3.3 磁場下における基底状態の相関関数

本研究では、磁場下において、MEI-1 相と MEI-2 相の 2 通りの励起子絶縁体相が得られた。前節と同様に、これらの相における各種相関関数の長距離でのふるまいを解析する。DMRG による解析によって得られた各相における各種相関関数の距離依存性を図 3.25 から図 3.32 に示す。本項では、相関関数として、 $\langle (P_{Hi} - \langle P_{Hi} \rangle)(P_{Hj} - \langle P_{Hi} \rangle) \rangle$ ,  $\langle (s_i^z - \langle s_i^z \rangle)(s_j^z - \langle s_j^z \rangle) \rangle$ ,  $\langle (\tau_{Xi}^x - \langle \tau_{Xi}^x \rangle)(\tau_{Xj}^x - \langle \tau_{Xj}^x \rangle) \rangle$ ,  $\langle (\tau_{Xi}^y - \langle \tau_{Xi}^y \rangle)(\tau_{Xj}^y - \langle \tau_{Xj}^y \rangle) \rangle$ ,  $\langle (\tau_{Zi}^z - \langle \tau_{Zi}^z \rangle)(\tau_{Zj}^z - \langle \tau_{Zj}^z \rangle) \rangle$ ,  $\langle (\tau_{Zi}^x - \langle \tau_{Zi}^x \rangle)(\tau_{Zj}^x - \langle \tau_{Zj}^x \rangle) \rangle$ ,  $\langle (\tau_{Zi}^y - \langle \tau_{Zi}^y \rangle)(\tau_{Zj}^y - \langle \tau_{Zj}^y \rangle) \rangle$ ,  $\langle (\tau_{Zi}^z - \langle \tau_{Zi}^z \rangle)(\tau_{Zj}^z - \langle \tau_{Zj}^z \rangle) \rangle$  を対象とする。解析に用いるパラメータは次のように固定する。  $U/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = 12$ ,  $U'/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = 8$ ,  $J/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = I/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = 2$ ,  $\eta = 2t_a t_b / (t_a^2 + t_b^2) = 1$ .  $\Delta/\sqrt{t_a^2 + t_b^2} = 5.6$  これは  $H - \delta$  相図 3.9 における破線 (III) に対応する。磁化過程のうち代表的な磁化  $\langle M \rangle$  の値に対して、相関関数を解析している。これらの解析結果をもととした各相関関数の長距離でのふるまいを次の表にまとめる。

表 3.2 各相関関数の揺らぎ成分の長距離でのふるまい。pow は冪則、exp は指数則を示す。?がついているものは、十分な精度で判定ができていないことを指す。Figure 欄で参照しているインデックスに対応する図に、それぞれの相関関数の距離依存性のデータを示している。

phase	$P_{Hi}P_{Hj}$	$s_i^z s_j^z$	$\tau_{Xi}^x \tau_{Xj}^x$	$\tau_{Xi}^y \tau_{Xj}^y$	$\tau_{Zi}^z \tau_{Zj}^z$	$\tau_{Zi}^x \tau_{Zj}^x$	$\tau_{Zi}^y \tau_{Zj}^y$	$\tau_{Zi}^z \tau_{Zj}^z$
Figure	3.25	3.26	3.27	3.28	3.29	3.30	3.31	3.32
MEI-1	pow	pow	pow	pow?	pow?	exp	exp	exp?
MEI-2	pow?	pow	exp?	exp?	exp?	pow?	pow?	pow?

$\langle s_i^z s_j^z \rangle$  の相関関数は、MEI-1 相及び MEI-2 相で冪則に従っている。これは磁化曲線が各相内で常に正であり、スピギャップが存在しないことと整合する。

$\langle P_{Hi}P_{Hj} \rangle$  は MEI-1 相及び MEI-2 相で冪的であり、HS 状態が遍歴的なふるまいをしている。

擬スピンの相関関数に関して, MEI-1 相では  $\tau_X$  に関する相関が冪的であり,  $\tau_Z$  に関する相関が指数的である. 逆に, MEI-2 相では,  $\tau_X$  に関する相関が指数的であり,  $\tau_Z$  に関する相関が冪的である. MEI-1 相では強い磁場により, 低エネルギーの 1 サイト基底が  $|L\rangle$  と  $(P_X^\dagger + iP_Y^\dagger)|L\rangle$  となるため,  $Z$  方向の励起子に関する相関は速やかに減衰すると考えられる. 一方で HS 状態のスピンの固定されたことで反強磁性的なスピン間相互作用による励起子のデコヒーレンスが抑制されたことにより, 相関長が長くなっていると考えられる.

MEI-2 相における擬スピンの相関関数のふるまいは EI 相のときと似ている. しかし, Haldane ギャップが存在しないことにより, スピン相関が冪的となっている.

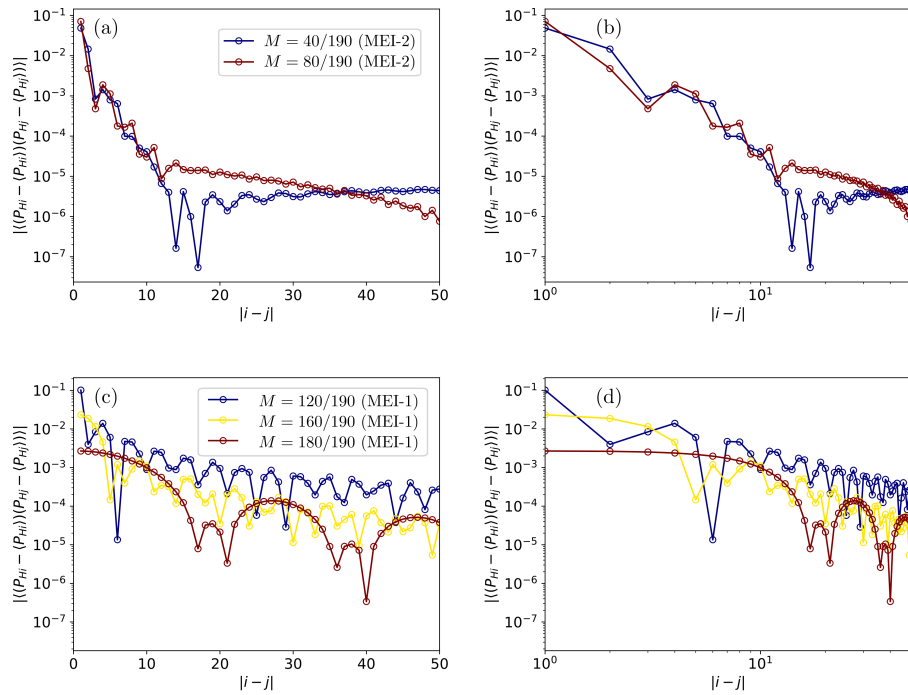


図 3.25 相関関数  $\langle (P_{Hi} - \langle P_{Hi} \rangle)(P_{Hj} - \langle P_{Hj} \rangle) \rangle$  の距離依存性. (a)(b) は MEI-2 相 (低磁場相), (c)(d) は MEI-1 相 (高磁場相) に対応しており, (a)(c) は片対数プロットであり, (b)(d) は両対数プロットである.

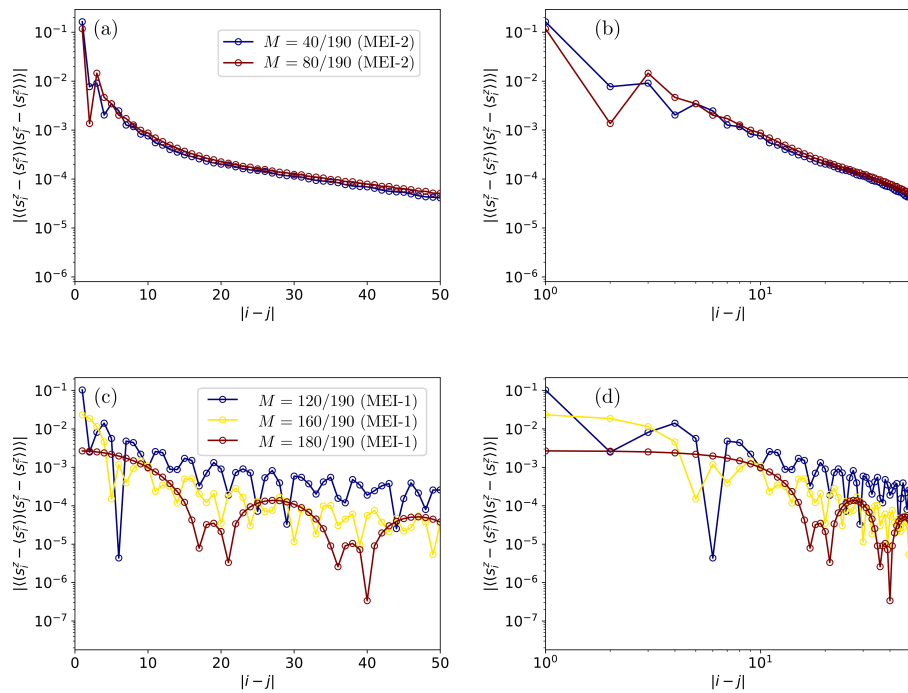


図 3.26 相関関数  $\langle (s_i^z - \langle s_i^z \rangle)(s_j^z - \langle s_j^z \rangle) \rangle$  の距離依存性. (a)(b) は MEI-2 相 (低磁場相), (c)(d) は MEI-1 相 (高磁場相) に対応しており, (a)(c) は片対数プロットであり, (b)(d) は両対数プロットである.



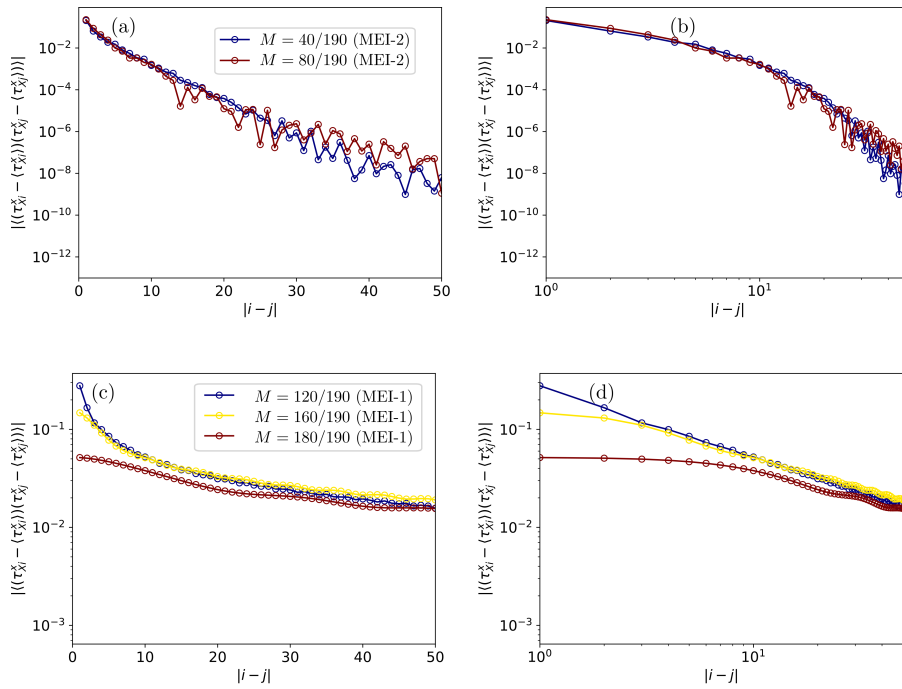


図 3.27 相関関数  $\langle (\tau_{X_i}^x - \langle \tau_{X_i}^x \rangle)(\tau_{X_j}^x - \langle \tau_{X_j}^x \rangle) \rangle$  の距離依存性. (a)(b) は MEI-2 相 (低磁場相), (c)(d) は MEI-1 相 (高磁場相) に対応しており, (a)(c) は片対数プロットであり, (b)(d) は両対数プロットである.

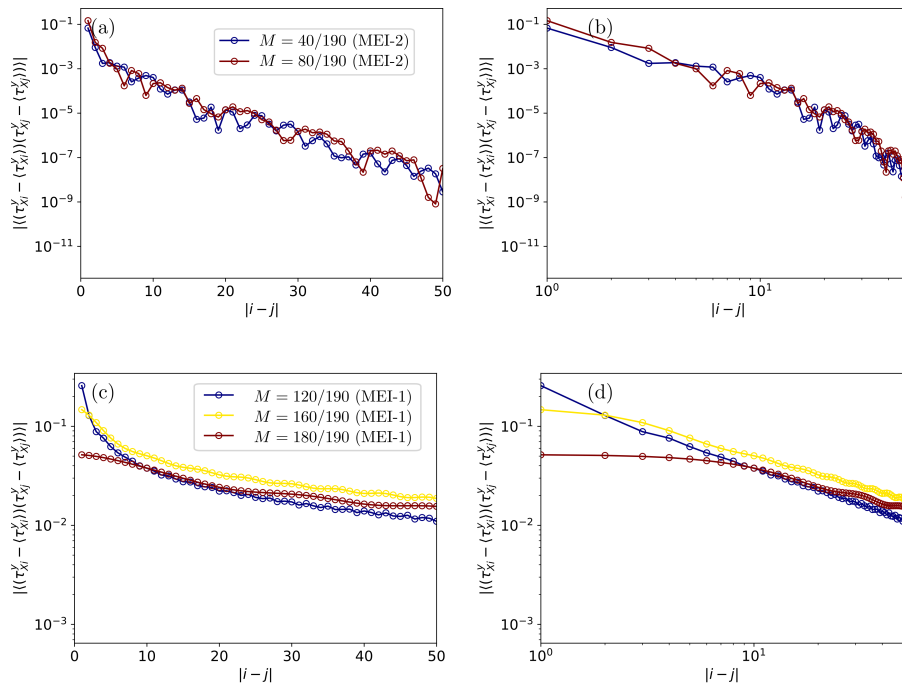


図 3.28 相関関数  $\langle (\tau_{X_i}^y - \langle \tau_{X_i}^y \rangle)(\tau_{X_j}^y - \langle \tau_{X_j}^y \rangle) \rangle$  の距離依存性. (a)(b) は MEI-2 相 (低磁場相), (c)(d) は MEI-1 相 (高磁場相) に対応しており, (a)(c) は片対数プロットであり, (b)(d) は両対数プロットである.

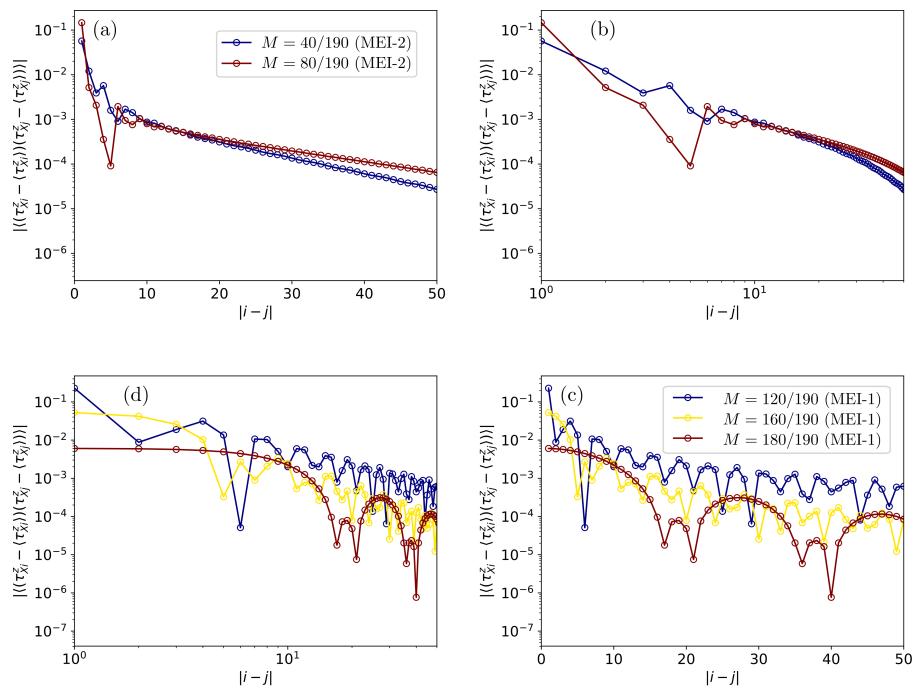


図 3.29 相関関数  $\langle (\tau_{X_i}^z - \langle \tau_{X_i}^z \rangle) (\tau_{X_j}^z - \langle \tau_{X_j}^z \rangle) \rangle$  の距離依存性. (a)(b) は MEI-2 相 (低磁場相), (c)(d) は MEI-1 相 (高磁場相) に対応しており, (a)(c) は片対数プロットであり, (b)(d) は両対数プロットである.

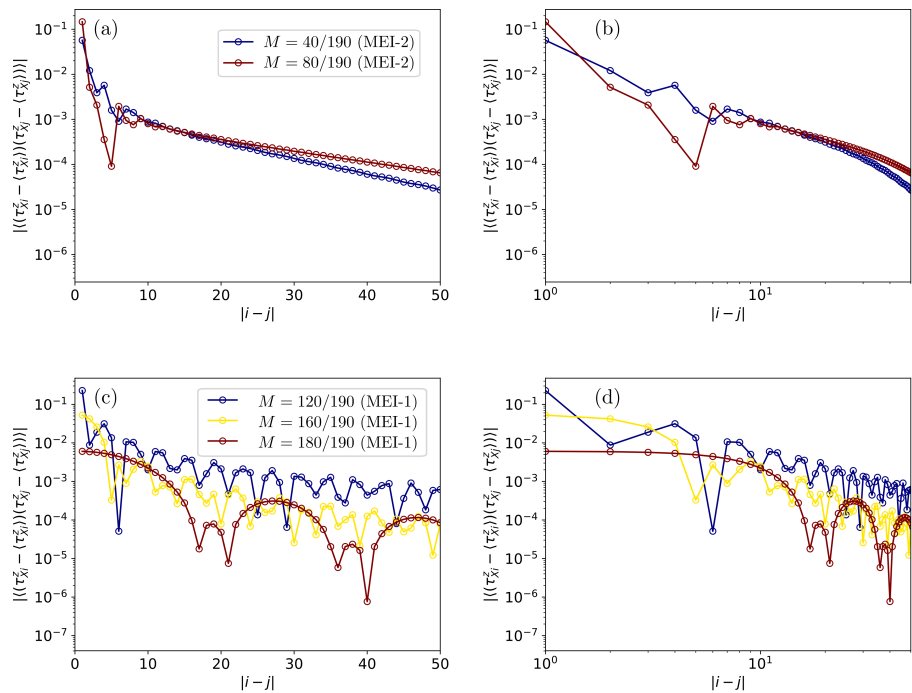


図 3.30 相関関数  $\langle (\tau_{Z_i}^x - \langle \tau_{Z_i}^x \rangle) (\tau_{Z_j}^x - \langle \tau_{Z_j}^x \rangle) \rangle$  の距離依存性. (a)(b) は MEI-2 相 (低磁場相), (c)(d) は MEI-1 相 (高磁場相) に対応しており, (a)(c) は片対数プロットであり, (b)(d) は両対数プロットである.

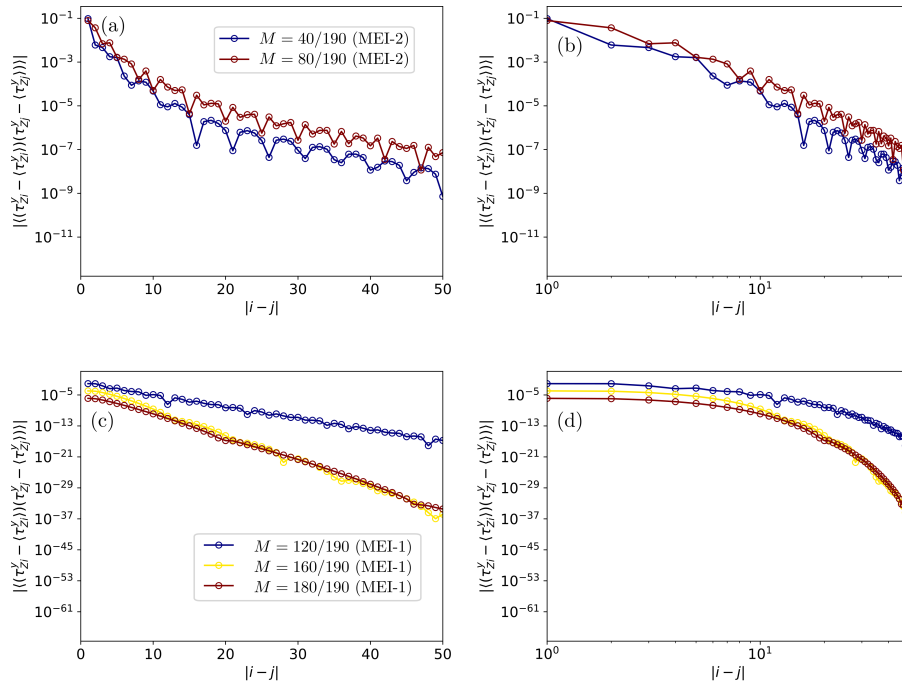


図 3.31 相関関数  $\langle(\tau_{Zi}^y - \langle\tau_{Zi}^y\rangle)(\tau_{Zj}^y - \langle\tau_{Zj}^y\rangle)\rangle$  の距離依存性. (a)(b) は MEI-2 相 (低磁場相), (c)(d) は MEI-1 相 (高磁場相) に対応しており, (a)(c) は片対数プロットであり, (b)(d) は両対数プロットである.

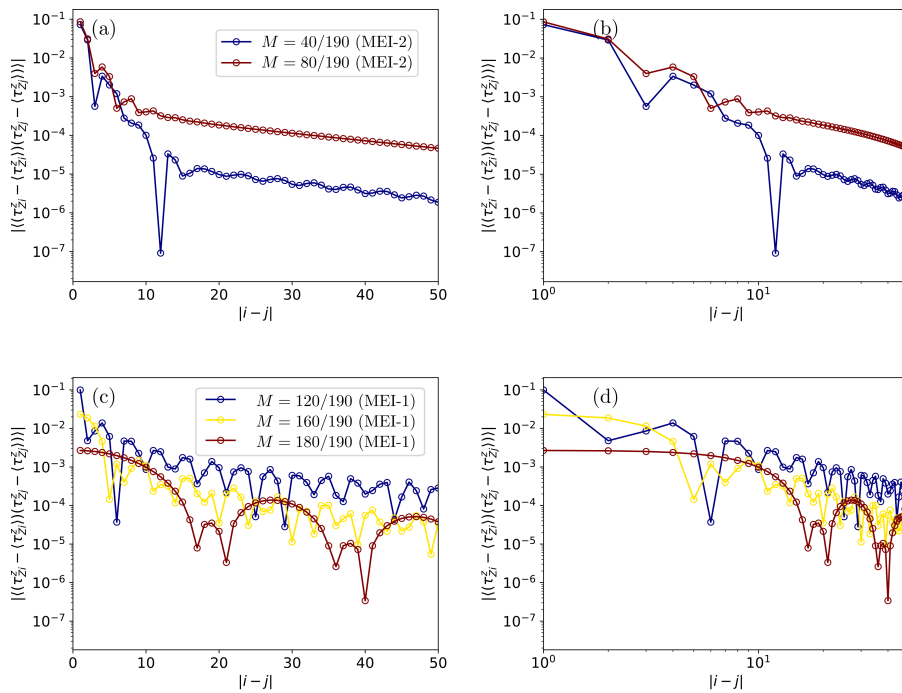


図 3.32 相関関数  $\langle(\tau_{Zi}^z - \langle\tau_{Zi}^z\rangle)(\tau_{Zj}^z - \langle\tau_{Zj}^z\rangle)\rangle$  の距離依存性. (a)(b) は MEI-2 相 (低磁場相), (c)(d) は MEI-1 相 (高磁場相) に対応しており, (a)(c) は片対数プロットであり, (b)(d) は両対数プロットである.

## 3.3.4 MEI-1 相におけるエンタングルメントエントロピー

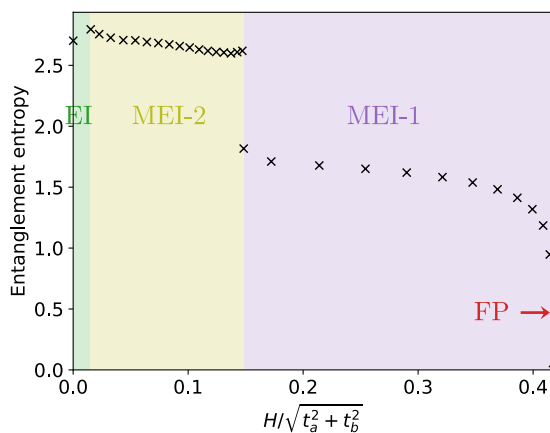


図 3.33 EI 相の磁化過程におけるエンタングルメントエントロピー  $S(L/2)$  の磁場依存性.

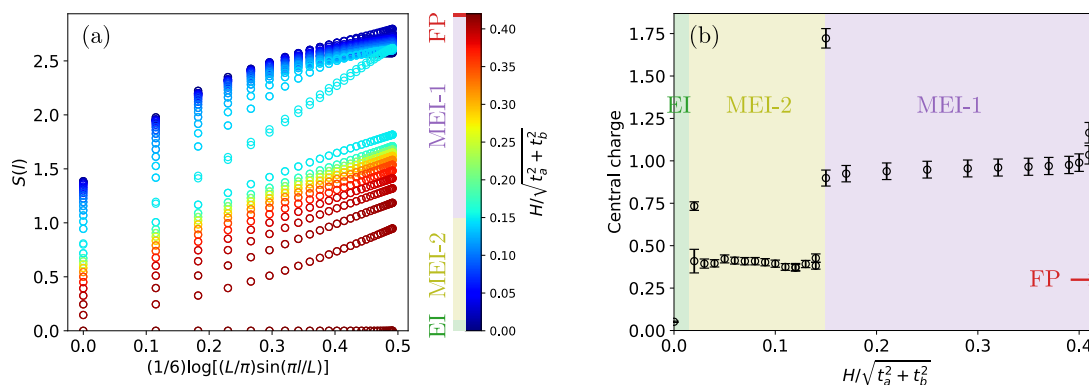


図 3.34 EI 相の磁化過程の MEI-2 相および MEI-1 相におけるセントラルチャージの解析. パネル (b) におけるセントラルチャージはパネル (a) における,  $(1/6) \log[(L/\pi) \sin(\pi l/L)] > 0.43 \Leftrightarrow 15 \leq l < 35$  の傾きをフィッティングすることにより求めた. FP はスピンの完全偏極相を表す.

本項では、磁場下において得られた MEI-1 相についてのエンタングルメントエントロピーのふるまいを示す.

システムサイズは  $L = 60$  であり、周期境界条件を用いている. また、DMRG におけるトランケーション数は  $\chi = 128$  としている. 系のパラメータは図 3.9 における磁化過程 (III) を採用しており、HS 相に近い EI 相からの磁化である.

系を 2 等分した場合のエンタングルメントエントロピー  $S(L/2)$  の磁場依存性を図 3.33 に示す. 図 3.33 では MEI-2 相と MEI-1 相の相境界でエンタングルメントエントロピー

が不連続となり、両者が明確に区別されることを示している。MEI-2 相におけるエンタングルメントエントロピーが MEI-1 相と比べて大きくなっているが、これは、MEI-2 相においては HS 状態内のスピン自由度が残っていることに対応していると解釈される。MEI-1 相では HS 状態のスピンが磁場により固定され、自由度が減っていることによりエントロピーが下がっていると解釈される。しかし、次に述べるようにセントラルチャージは MEI-1 相のほうが大きいため、システムサイズ  $L$  を大きくしていくと、長距離のエンタングルメントの寄与により大小関係が逆転すると考えられる。

続いて、エンタングルメントエントロピーの面積則の破れとそこから推定したセントラルチャージの値を図 3.34 に示す。図 3.34(a) では、MEI-1 相においては、広い領域で直線によく乗り、量子臨界的なふるまいが見られる。一方で MEI-2 相では、傾きが途中で変化しているように見えるが、 $L = 60, l = 30$  サイトまでの範囲では、有限の傾きが残っているように見える。

図 3.34(b) には (a) における傾きから求めたセントラルチャージを記している。セントラルチャージは大まかに、EI 相で  $c \sim 0$ 、MEI-2 相で  $c \sim 0.4$ 、MEI-1 相で  $c \sim 1$ 、FP 相で  $c = 0$  である。FP 相は完全偏極しているためエンタングルメントエントロピーはゼロである。また、相境界付近では、大きいセントラルチャージの値が得られているが、これは相境界で量子揺らぎが強くなることを反映していると考えられる。EI 相で  $c \sim 0$  となる結果は、注目している領域の EI 相が非臨界であることを示唆するものである。しかし、トランケーション数が小さいために、長距離のエンタングルメントを表現できず、非臨界的な結果となっている可能性もある。

MEI-1 相で  $c = 1$  となる結果は、磁場により、HS 状態のスピン自由度が固定されていたことにより、スピン自由度のない拡張 Falicov-Kimball 模型の励起子絶縁体相、ひいてはその強結合有効模型である XXZ 模型の臨界相と同じセントラルチャージを与えたと解釈できる。MEI-2 相で有限のセントラルチャージが得られることについては、連続で常に傾きが正の磁化曲線が得られていることから、量子臨界系であると考えられるので妥当である。しかし、図 3.34(a) で MEI-2 相における傾きが比較的大きい  $l$  でも変化していることから、有限サイズ効果が強い可能性があり、トランケーション数が小さいことから正確な値までは信用できない。

### 3.3.5 結論

本節では、相関関数の長距離構造とエンタングルメントエントロピーの面積則の破れに注目し、本研究で得られた各相の性質を解析した。結果として、EI 相において HS 状態が遍歴的に存在することで相関長が長くなる傾向が見られた。一方でスピン空間が Haldane ギャップを形成することにより、HS 状態 (励起子) のコヒーレントな運動が阻害され、相

関長が有限に抑えられているような傾向も見られた。本研究における解析の範囲内では、DMRG のトランケーション数とシステムサイズの制限から、相関関数の冪則の判定には決着がついていない。

磁化過程に現れる MEI-1 相についてはスピン自由度が磁場により固定されていることで、励起子絶縁体に対応する相関関数が冪的になる傾向が見られた。とくに、MEI-1 相ではセントラルチャージが 1 と推定されており、1 次元拡張 Falicov-Kimball 模型における先行研究 [47] の結果との類似性を示唆するものである。

## 第 4 章

# 総括

本研究では、ペロブスカイト型コバルト酸化物におけるスピン状態転移を念頭に、スピン状態が競合する場合における励起子絶縁体やスピン状態秩序の発現、それらの空間構造を理論の立場から理解することを目的として、1次元2軌道 Hubbard 模型の低エネルギー有効模型を解析した。本研究では、多様なスピン状態の実空間構造と、励起子絶縁体における励起子の局在-遍歴性を考慮するために、多様な量子自由度をバイアス無く考慮することのできる密度行列くりこみ群法 (DMRG) を用いて基底状態の数値解析を行った。以下にその結果得られた電子状態の描像をまとめる。

### 1 次元有効模型の基底状態

1次元2軌道 Hubbard 模型の低エネルギー有効模型に対し、スピン状態が競合するエネルギー領域における基底状態相図を作成した。その結果として以下の結論が得られた。

1. 各軌道間の電子遷移の比が1に近い場合、 $t_b/t_a \sim 1$  には、高スピン (HS) 相と低スピン (LS) 相の中間領域に、高スピン状態と低スピン状態が量子的に混成した相が得られた。この相は先行研究における励起子絶縁体に対応しており、反強磁性的なスピン間相互作用の影響を受けつつ HS 状態が遍歴的に存在している状況であることがわかった。
2. 各軌道間の電子遷移の比が0に近い場合、 $t_b/t_a = 0$  には、スピン状態秩序相が得られた。この相では結晶場分裂の大きさによって HS 状態の期待値が連続的に変化し、その期待値に応じて、一般にはインコメンシュレイトなスピン状態秩序構造が得られることが明らかとなった。また、特に安定な構造として LS/HS/HS の3倍周期の構造が得られており、これは、スピン状態間の交換相互作用の競合の結果として安定化していると解釈された。

### 1 次元有効模型の磁場効果

1 次元 2 軌道 Hubbard 模型の低エネルギー有効模型に対し、その基底状態における磁場効果の解析を行った。その結果として以下の結論が得られた。

1. LS 状態に磁場を印加した場合には、磁化相として励起子絶縁体に対応する相が得られた。EI 相に磁場を印加した場合には、磁化過程において、低磁場下と高磁場下で 2 通りの磁化した励起子絶縁体相が得られており、磁化曲線が折れ曲がる様子が見られた。これは HS 状態のスピンの向きの自由度が磁場により固定されたことに対応していることがわかった。
2. 特に励起子絶縁体相においては Haldane ギャップと同種のスピンギャップの存在が確認されており、AKLT 模型における VBS 状態と同様の状態が存在することが示唆された。
3. 電子遷移の比が小さい場合 ( $2t_a t_b / (t_a^2 + t_b^2) = 0.3$ ) においては LS 相および SSO 相の磁化過程の途中で、磁化が飽和磁化の  $1/2$  において磁化プラトーが得られた。ここでは LS/HS の 2 倍周期のスピン状態秩序が実現している。特に、基底状態においては LS/HS/HS の 3 倍周期が実現する場合に、磁場の印加によって構造が LS/HS の 2 倍周期に変化することがわかった。この変化は磁場により隣り合う HS 状態の反強磁性的なスピン配置が抑制された結果と理解された。

### 相関関数の長距離構造とエンタングルメントエントロピー

本研究で得られた各相に対し、相関関数の長距離構造とエンタングルメントエントロピーの解析を行った。その結果として以下の結論が得られた。

1. EI 相では、スピン間相互作用により、励起子相関が乱されることで長距離での相関が抑制されている傾向が見られた一方で、LS 相近くの EI 相では、HS 状態の期待値が小さいことで、長距離まで励起子相関が発達している傾向が得られた。
2. エンタングルメントエントロピーを解析することにより、 $L = 60$  程度の周期系において HS-EI 相境界と EI-LS 相境界が明確に得られることを示した。

以上の結果から、本研究では、1 次元 2 軌道 Hubbard 模型の DMRG による解析により、特にスピン状態が競合する領域における励起子絶縁体相とスピン状態秩序相の空間構造を与え、その微視的機構を明らかにした。

これらの知見は、量子揺らぎや多様な空間構造を無視する近似である小サイズクラスターを用いた平均場近似や動的平均場近似の 2 次元系での結果と相補的に、スピン状態転移を理解することに繋がる。



## 現状の課題と展望

現状における技術的課題として、励起子絶縁体相における量子臨界性の解析が十分な精度で行われていない事が挙げられる。これを決定することは、HS 状態のコヒーレンスに、スピン間相互作用が与える役割をより明確にする上で重要である。

また、本研究ではスピン空間が等方的な模型を用いた。しかし、ペロブスカイト型コバルト酸化物を記述する場合には、実際には、磁気異方性やスピン軌道相互作用の影響を考える必要がある。また、励起子絶縁体相におけるストリング秩序や LS/HS/HS 秩序など、1次元系に特有の効果についても、2次元以上でのふるまいが不明である。これらについては、個別の空間構造を仮定した近似手法を用いた解析や高次元テンソルネットワーク法を用いた解析による補完が期待される。



## 参考文献

- [1] S. Maekawa, T. Tohyama, E. Barnes, S., S. Ishihara, W. Koshibae, and G. Khalullin, *Physics of Transition Metal Oxides* (Springer, Berlin, Heidelberg, 2004).
- [2] Y. Okimoto, T. Saitoh, Y. Kobayashi, and S. Ishihara, *Spin-Crossover Cobaltite* (Springer, 2021).
- [3] J. Nasu, T. Watanabe, M. Naka, and S. Ishihara, *Phys. Rev. B* **93**, 205136 (2016).
- [4] T. Tatsuno, E. Mizoguchi, J. Nasu, M. Naka, and S. Ishihara, *J. Phys. Soc. Jpn.* **85**, 083706 (2016).
- [5] Y. Yamasaki, J. Fujioka, H. Nakao, J. Okamoto, T. Sudayama, Y. Murakami, M. Nakamura, M. Kawasaki, T. Arima, and Y. Tokura, *J. Phys. Soc. Jpn.* **85**, 023704 (2016).
- [6] A. Ikeda, T. Nomura, Y. H. Matsuda, A. Matsuo, K. Kindo, and K. Sato, *Phys. Rev. B* **93**, 220401 (2016).
- [7] M. M. Altarawneh, G.-W. Chern, N. Harrison, C. D. Batista, A. Uchida, M. Jaime, D. G. Rickel, S. A. Crooker, C. H. Mielke, J. B. Betts, J. F. Mitchell, and M. J. R. Hoch, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 037201 (2012).
- [8] Y. Tanabe and S. Sugano, *J. Phys. Soc. Jpn.* **11**, 864 (1956).
- [9] M. A. Korotin, S. Y. Ezhov, I. V. Solovyev, V. I. Anisimov, D. I. Khomskii, and G. A. Sawatzky, *Phys. Rev. B* **54**, 5309 (1996).
- [10] R. H. Potze, G. A. Sawatzky, and M. Abbate, *Phys. Rev. B* **51**, 11501 (1995).
- [11] 上村 洸, 菅野 暁, 田辺 行人, 「配位子場理論とその応用」 (裳華房, 1969).
- [12] S. Yamaguchi, Y. Okimoto, H. Taniguchi, and Y. Tokura, *Phys. Rev. B* **53**, R2926 (1996).
- [13] Y. Tokura, Y. Okimoto, S. Yamaguchi, H. Taniguchi, T. Kimura, and H. Takagi, *Phys. Rev. B* **58**, R1699 (1998).
- [14] J. B. Goodenough, *J. Phys. Chem. Solids* **6**, 287 (1958).
- [15] J. Fujioka, Y. Yamasaki, A. Doi, H. Nakao, R. Kumai, Y. Murakami, M. Naka-

- mura, M. Kawasaki, T. Arima, and Y. Tokura, *Phys. Rev. B* **92**, 195115 (2015).
- [16] K. Asai, A. Yoneda, O. Yokokura, J. Tranquada, G. Shirane, and K. Kohn, *J. Phys. Soc. Jpn.* **67**, 290 (1998).
- [17] K. Oka, M. Azuma, W.-t. Chen, H. Yusa, A. A. Belik, E. Takayama-Muromachi, M. Mizumaki, N. Ishimatsu, N. Hiraoka, M. Tsujimoto, M. G. Tucker, J. P. Attfield, and Y. Shimakawa, *J. Am. Chem. Soc.* **132**, 9438 (2010).
- [18] G. Vankó, J.-P. Rueff, A. Mattila, Z. Németh, and A. Shukla, *Phys. Rev. B* **73**, 024424 (2006).
- [19] R. Lengsdorf, J.-P. Rueff, G. Vankó, T. Lorenz, L. H. Tjeng, and M. M. Abd-Elmeguid, *Phys. Rev. B* **75**, 180401 (2007).
- [20] M. W. Haverkort, Z. Hu, J. C. Cezar, T. Burnus, H. Hartmann, M. Reuther, C. Zobel, T. Lorenz, A. Tanaka, N. B. Brookes, H. H. Hsieh, H.-J. Lin, C. T. Chen, and L. H. Tjeng, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 176405 (2006).
- [21] K. Tomiyasu, J. Okamoto, H. Y. Huang, Z. Y. Chen, E. P. Sinaga, W. B. Wu, Y. Y. Chu, A. Singh, R.-P. Wang, F. M. F. de Groot, A. Chainani, S. Ishihara, C. T. Chen, and D. J. Huang, *Phys. Rev. Lett.* **119**, 196402 (2017).
- [22] G. E. Sterbinsky, R. Nanguneri, J. X. Ma, J. Shi, E. Karapetrova, J. C. Woicik, H. Park, J.-W. Kim, and P. J. Ryan, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 197201 (2018).
- [23] Y. Yokoyama, Y. Yamasaki, M. Taguchi, Y. Hirata, K. Takubo, J. Miyawaki, Y. Harada, D. Asakura, J. Fujioka, M. Nakamura, H. Daimon, M. Kawasaki, Y. Tokura, and H. Wadati, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 206402 (2018).
- [24] A. Sotnikov and J. Kuneš, *Sci. Rep.* **6**, 30510 (2016).
- [25] Y. F. Lu, H. Kono, T. I. Larkin, A. W. Rost, T. Takayama, A. V. Boris, B. Keimer, and H. Takagi, *Nat. Commun.* **8**, 14408 (2017).
- [26] N. F. Mott, *J. Theor. Appl. Phys.* **6**, 287 (1961).
- [27] D. Jérôme, T. M. Rice, and W. Kohn, *Phys. Rev.* **158**, 462 (1967).
- [28] J. Neuenschwander and P. Wachter, *Phys. Rev. B* **41**, 12693 (1990).
- [29] B. Bucher, P. Steiner, and P. Wachter, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 2717 (1991).
- [30] P. Wachter, B. Bucher, and J. Malar, *Phys. Rev. B* **69**, 094502 (2004).
- [31] J. Ishioka, Y. H. Liu, K. Shimatake, T. Kurosawa, K. Ichimura, Y. Toda, M. Oda, and S. Tanda, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 176401 (2010).
- [32] H. Cercellier, C. Monney, F. Clerc, C. Battaglia, L. Despont, M. G. Garnier, H. Beck, P. Aebi, L. Patthey, H. Berger, and L. Forró, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 146403 (2007).
- [33] C. Monney, H. Cercellier, F. Clerc, C. Battaglia, E. F. Schwier, C. Didiot, M. G.

- Garnier, H. Beck, P. Aebi, H. Berger, L. Forró, and L. Patthey, *Phys. Rev. B* **79**, 045116 (2009).
- [34] C. Monney, E. F. Schwier, M. G. Garnier, N. Mariotti, C. Didiot, H. Beck, P. Aebi, H. Cercellier, J. Marcus, C. Battaglia, H. Berger, and A. N. Titov, *Phys. Rev. B* **81**, 155104 (2010).
- [35] Y. Wakisaka, T. Sudayama, K. Takubo, T. Mizokawa, M. Arita, H. Namatame, M. Taniguchi, N. Katayama, M. Nohara, and H. Takagi, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 026402 (2009).
- [36] H. Watanabe, K. Seki, and S. Yunoki, *Phys. Rev. B* **91**, 205135 (2015).
- [37] K. Seki, Y. Wakisaka, T. Kaneko, T. Toriyama, T. Konishi, T. Sudayama, N. L. Saini, M. Arita, H. Namatame, M. Taniguchi, N. Katayama, M. Nohara, H. Takagi, T. Mizokawa, and Y. Ohta, *Phys. Rev. B* **90**, 155116 (2014).
- [38] T. Kaneko, T. Toriyama, T. Konishi, and Y. Ohta, *Phys. Rev. B* **87**, 035121 (2013).
- [39] T. Kaneko, T. Toriyama, T. Konishi, and Y. Ohta, *Phys. Rev. B* **87**, 199902 (2013).
- [40] K. Sugimoto, T. Kaneko, and Y. Ohta, *Phys. Rev. B* **93**, 041105 (2016).
- [41] S. Tsubouchi, T. Kyômen, M. Itoh, P. Ganguly, M. Oguni, Y. Shimojo, Y. Morii, and Y. Ishii, *Phys. Rev. B* **66**, 052418 (2002).
- [42] J. Kuneš and P. Augustinský, *Phys. Rev. B* **90**, 235112 (2014).
- [43] J. Hejtmánek, Z. Jiráček, O. Kaman, K. Knížek, E. Šantavá, K. Nitta, T. Naito, and H. Fujishiro, *The European Physical Journal B* **86**, 305 (2013).
- [44] K. Knížek, J. Hejtmánek, P. Novák, and Z. Jiráček, *Phys. Rev. B* **81**, 155113 (2010).
- [45] J. Hejtmánek, E. Šantavá, K. Knížek, M. Maryško, Z. Jiráček, T. Naito, H. Sasaki, and H. Fujishiro, *Phys. Rev. B* **82**, 165107 (2010).
- [46] Y. Kanamori, H. Matsueda, and S. Ishihara, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 167403 (2011).
- [47] S. Ejima, T. Kaneko, Y. Ohta, and H. Fehske, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 026401 (2014).
- [48] L. M. Falicov and J. C. Kimball, *Phys. Rev. Lett.* **22**, 997 (1969).
- [49] C. D. Batista, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 166403 (2002).
- [50] B. Zenker, D. Ihle, F. X. Bronold, and H. Fehske, *Phys. Rev. B* **85**, 121102 (2012).
- [51] K. Seki, R. Eder, and Y. Ohta, *Phys. Rev. B* **84**, 245106 (2011).
- [52] T. Kaneko, S. Ejima, H. Fehske, and Y. Ohta, *Phys. Rev. B* **88**, 035312 (2013).
- [53] Y. Z. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 246404 (2004).

- [54] Y.-C. Li and Z.-G. Yuan, Phys. Lett. A **380**, 272 (2016).
- [55] M. Nakamura, J. Phys. Soc. Jpn. **68**, 3123 (1999).
- [56] P. Sengupta, A. W. Sandvik, and D. K. Campbell, Phys. Rev. B **65**, 155113 (2002).
- [57] S. Ejima and S. Nishimoto, Phys. Rev. Lett. **99**, 216403 (2007).
- [58] S.-S. Deng, S.-J. Gu, and H.-Q. Lin, Phys. Rev. B **74**, 045103 (2006).
- [59] J. Spalding, S.-W. Tsai, and D. K. Campbell, Phys. Rev. B **99**, 195445 (2019).
- [60] F. Iemini, T. O. Maciel, and R. O. Vianna, Phys. Rev. B **92**, 075423 (2015).
- [61] M.-C. Cha and M.-H. Chung, Physica B: Condensed Matter **536**, 701 (2018).
- [62] S. R. White, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992).
- [63] S. R. White, Phys. Rev. B **48**, 10345 (1993).
- [64] U. Schollwöck, Rev. Mod. Phys. **77**, 259 (2005).
- [65] S. R. White and A. E. Feiguin, Phys. Rev. Lett. **93**, 076401 (2004).
- [66] G. Vidal, Phys. Rev. Lett. **91**, 147902 (2003).
- [67] I. P. McCulloch, Infinite size density matrix renormalization group, revisited (2008), arXiv:0804.2509 .
- [68] R. Orús and G. Vidal, Phys. Rev. B **78**, 155117 (2008).
- [69] G. Vidal, Phys. Rev. Lett. **98**, 070201 (2007).
- [70] C. Hubig, I. P. McCulloch, and U. Schollwöck, Phys. Rev. B **95**, 035129 (2017).
- [71] I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb, and H. Tasaki, Phys. Rev. Lett. **59**, 799 (1987).
- [72] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **50**, 1153 (1983).
- [73] P. Calabrese and J. Cardy, J. Stat. Mech. **2004**, P06002 (2004).

# 業績リスト

## 学術論文

1. Koya Kitagawa, Hiroaki Matsueda, "Excitonic Correlations, Spin-State Ordering, and Magnetic-Field Effects in One-Dimensional Two-Orbital Hubbard Model for Spin-Crossover Region" arXiv:2111.00209 (J. Phys. Soc. Jpn. に投稿中)

## 学会発表

1. 北川皓也, 松枝宏明, "1次元2軌道 Hubbard 模型のスピンクロスオーバー領域における磁気構造と磁場効果" 日本物理学会 2021 年秋季大会 21aH2-6
2. 松枝宏明, 北川皓也, "拡張 Falicov-Kimball 模型の複合励起状態" 日本物理学会 2021 年秋季大会 20pH1-16
3. 北川皓也, 松枝宏明, "1次元2軌道 Hubbard 模型におけるスピンクロスオーバー現象に対するエンタングルメント解析" 日本物理学会 2022 年年次大会 (発表予定)





# 謝辞

本研究を行うに当たり多くの方々にご支援とご指導を賜りましたことを心より感謝致します。本博士論文の審査を引き受けてくださった那須讓治先生(東北大学理学研究科・准教授), 柴田尚和先生(東北大学理学研究科・教授), 松枝宏明先生(東北大学工学研究科・教授), 大串研也先生(東北大学理学研究科・教授), 藤田全基先生(東北大学金属材料研究所・教授)には, 重ねてお礼申し上げます。

松枝宏明先生と柴田尚和先生には指導教員として熱心に研究の指導をしていただき, 研究だけでなく, 学問に対する姿勢など, 多くのことを学ばせていただきました。皆様に支えられ, 私の東北大学での研究生活は充実したものとなりました。昨年度亡くなられた石原純夫先生(東北大学理学研究科・教授(当時))には, 私の修士課程と博士課程の計4年間にわたり, 指導教員としてご指導頂き, その過程で多くのことを学ばせていただきました。皆様のご指導に心より感謝申し上げます。

中惇先生(早稲田大学理工学術院総合研究所・准教授), 那須讓治先生, 小野淳先生(東北大学理学研究科・助教), 正木祐輔先生(東北大学工学研究科・助教)には, 実際の研究において, 大変有意義な議論をさせていただきました。皆様のお力添えにより, 研究活動がよりよいものになりました。

リーディング大学院マルチディメンジョン物質工学リーダー養成プログラムには, 大学院での研究生活の支援に加え, インターンシップなどの機会を設けていただきました。特に海外インターンシップでは, Janez Bonča 先生 (Professor, University of Ljubljana Faculty of Mathematics and Physics Department of Physics), Peter Prelovšek 先生 (Professor, Jozef Stefan Institute) にご指導頂きましたこと感謝申し上げます。

紅林遊野さん(博士課程後期3年), 伊東直洋さん(博士課程後期3年), 今井渉平さん(博士課程後期2年), 松林幸宏さん(博士課程後期1年)には研究に関する議論や相談, 進路の相談など多岐にわたりお世話になりました。また, 研究室の同室の方々との雑談により, 研究で大変な日々において, 楽しく過ごせました。深く感謝致します。

物性理論研究室の秘書の山本直美様, 若生洋子様には, 事務的な面で大変お世話になりました。

---

最後に, 大学院博士課程まで私の大学院生活を支え, 応援してくれた両親に感謝します.