

# 博士論文

一次元少数不純物近藤系における  
量子多体状態とその制御

東北大学大学院 理学研究科  
物理学専攻

紅林 遊野

令和3年



# 目次

<b>第 1 章</b>	<b>研究背景</b>	<b>1</b>
1.1	本章の構成	1
1.2	局在・遍歴電子系の理論	1
1.3	局在・遍歴電子系の人工的实现	10
1.4	局在・遍歴電子系における理論研究の現状	18
1.5	少数量子ドット系の理論模型	21
1.6	本研究の目的	22
<b>第 2 章</b>	<b>計算手法</b>	<b>23</b>
2.1	密度行列くりこみ群法	23
2.2	正弦二乗変形	40
<b>第 3 章</b>	<b>少数不純物近藤系の局在スピン構造</b>	<b>43</b>
3.1	取り扱う模型と計算条件	43
3.2	1 スピン系	43
3.3	隣接スピン系の磁気転移	45
3.4	任意距離の 2 スピン系	62
3.5	正弦二乗変形による端効果抑制	66
<b>第 4 章</b>	<b>近藤雲に対する複数スピン効果と電子間反発効果</b>	<b>69</b>
4.1	近藤長さと局在・伝導電子スピン相関のスケーリング	69
4.2	本章の目的	70
4.3	1 局在スピン系	71
4.4	2 局在スピン系	74
4.5	伝導電子間反発の効果	81
<b>第 5 章</b>	<b>結論</b>	<b>85</b>

---

5.1	局在スピン磁気構造 . . . . .	85
5.2	近藤雲の解析 . . . . .	86
5.3	今後の課題 . . . . .	86
付録 A	DMRG におけるフェルミオンサインの取り扱い	87
A.1	基本事項 . . . . .	87
A.2	DMRG におけるフェルミオンサインの取り扱い . . . . .	88
A.3	スピンプルな電子系における適用 . . . . .	89
	参考文献	93
	謝辞	97

# 第 1 章

## 研究背景

### 1.1 本章の構成

本章の構成は以下のとおりである：はじめに，局在・遍歴電子系のモデル化について概略を説明し，そこで生じる主要な効果である「近藤効果」と「RKKY 相互作用」，そしてこれらの効果の競合関係について述べる．続いて，少数の局在スピンを持つ局在・遍歴電子系の実験における現状として，量子ドットを用いた局在・遍歴電子系の人工的実現とそこで観測されている物理現象について述べる．その後，局在・遍歴電子系の理論研究の現状と課題について整理し，最後に本研究の目的を述べる．

### 1.2 局在・遍歴電子系の理論

本節では，局在・遍歴電子系の理論について概略を説明する．局在・遍歴電子系は，空間的に局在した準位（局在電子）と遍歴電子（伝導電子）が混成しているという自然かつ単純な設定が出発点になるにも関わらず，量子多体効果が本質的に寄与するという特異な性質を持っている．本節では，この特異性を強調するとともに，局在・遍歴電子系における主要な 2 つの効果である「近藤効果」と「RKKY 相互作用」について概観することを目的とする．なお，入門的な教科書としては，文献 [1-4] を挙げておく．

#### 1.2.1 $c$ - $f$ 相互作用

局在・遍歴電子系のモデル化の出発点は，以下の Anderson 模型である：

$$\mathcal{H}_{\text{Anderson}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} \tilde{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \tilde{c}_{\mathbf{k}\sigma} + E_f \sum_{\sigma} f_{\sigma}^\dagger f_{\sigma} + U_f f_{\uparrow}^\dagger f_{\uparrow} f_{\downarrow}^\dagger f_{\downarrow} + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}\sigma} (V_{\mathbf{k}} f_{\sigma}^\dagger \tilde{c}_{\mathbf{k}\sigma} + \text{h.c.}) \quad (1.1)$$

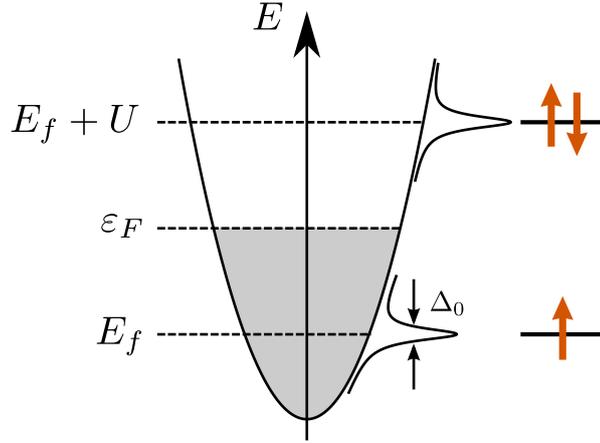


図 1.1 局在スピンの実現する条件. Fermi 面以下に局所準位が存在し、局所準位  $f$  に電子が 1 つだけ占有することでエネルギーが低下する条件となっている.

本模型は、伝導電子（第一項）と空間的に局在した準位  $f$  からなる模型であり、伝導電子と準位  $f$  は強さ  $V_{\mathbf{k}}$  で混成している（第四項）。また、第二項の  $E_f$  は準位  $f$  のエネルギーを、第三項の  $U_f$  は準位  $f$  の電子間に働く Coulomb 相互作用を表す。通常物質においては、準位  $f$  として  $d$  軌道や  $f$  軌道が対応するが、本研究では後の節で述べる量子ドットを念頭に置き、ここでの準位  $f$  はあくまで局在した準位であるという以上の制約は設けないこととする。また、以降では混成  $V_{\mathbf{k}}$  の波数依存性がないものとして  $V_{\mathbf{k}} = V$  とする（これは混成が実空間描像において局所的であると仮定することに等しい）。

準位  $f$  の一体波動関数が空間的に強く局在していること仮定すると、強い Coulomb 反発  $U_f$  が働くことが期待される。さらに、Fermi エネルギー  $\varepsilon_F$  との位置関係に関する条件：

$$\varepsilon_F - E_f \gg \Delta_0 \quad (1.2)$$

$$E_f + U - \varepsilon_F \gg \Delta_0 \quad (1.3)$$

$$\Delta_0 = \pi V^2 \rho \quad (\text{混成 } V \text{ による共鳴準位幅}) \quad (1.4)$$

$$\rho: \text{Fermi 面の状態密度} \quad (1.5)$$

(図 1.1) を満たす場合を考えると、準位  $f$  に存在する電子数はほとんど常に 1 となり、準位  $f$  の持つ自由度はスピン自由度のみとなる。このとき、このスピン自由度と伝導電子の間に働く有効相互作用は、混成項  $V_{\mathbf{k}}$  に対する二次摂動により計算することができ以下の形となる：

$$\mathcal{H}^{(2)} = \mathcal{H}_{\text{imp}} + \mathcal{H}_{\text{cf}}, \quad (1.6)$$

$$\mathcal{H}_{\text{imp}} = \frac{V^2}{2} \left( \frac{1}{\varepsilon_F - E_f} - \frac{1}{E_f + U - \varepsilon_F} \right) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} \tilde{c}_{\mathbf{k}'\sigma}^\dagger \tilde{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (1.7)$$

$$\mathcal{H}_{\text{cf}} = 2V^2 \left( \frac{1}{\varepsilon_F - E_f} + \frac{1}{E_f + U - \varepsilon_F} \right) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma\sigma'} \frac{1}{2} \tilde{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} \tilde{c}_{\mathbf{k}'\sigma'} \cdot \mathbf{S}, \quad (1.8)$$

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} f_\sigma^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} f_{\sigma'}. \quad (1.9)$$

ここで、 $\boldsymbol{\sigma}$  は Pauli 行列である。なお、Fermi 面近傍への励起を考えることで  $\varepsilon_{\mathbf{k}} \approx \varepsilon_F$  とした。 $\mathcal{H}_{\text{imp}}$  は、 $\sigma$  に依存しないことから単純なポテンシャル散乱である。一方、 $\mathcal{H}_{\text{cf}}$  は準位  $f$  と伝導電子の間に働くスピン間相互作用であり、その大きさは

$$J = 2V^2 \left( \frac{1}{\varepsilon_F - E_f} + \frac{1}{E_f + U - \varepsilon_F} \right) \quad (1.10)$$

で与えられる。図 1.1 の各エネルギーの大小関係から明らかなように、一般に  $J > 0$  (反強磁性相互作用) である。特に、摂動の中間状態において準位  $f$  を占める電子数が 0 個の場合と 2 個の場合で等しいエネルギーを持つ条件、すなわち、

$$\varepsilon_F - E_f = E_f - \varepsilon_F + U \iff \varepsilon_F - E_f = \frac{U}{2} \quad (1.11)$$

が成り立つ条件下(「対称な場合」と呼ばれる)においては、ポテンシャル散乱項  $\mathcal{H}_{\text{imp}} = 0$  となり、交換相互作用は

$$J = \frac{8V^2}{U} \quad (\text{対称な場合}) \quad (1.12)$$

と単純な形となる。本相互作用は、 $d$  電子磁性不純物の振る舞いを説明するために導入されたことから、「 $s$ - $d$  相互作用」、また後に  $f$  電子化合物に対して適用されたことから「 $c$ - $f$  相互作用」と呼ばれる。

以上により得られた模型：

$$\mathcal{H}_{\text{Kondo}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} \tilde{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \tilde{c}_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{J}{2N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma\sigma'} \frac{1}{2} \tilde{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} \tilde{c}_{\mathbf{k}'\sigma'} \cdot \mathbf{S} \quad (1.13)$$

は近藤(不純物)模型と呼ばれる。

混成の強さ  $V_{\mathbf{k}}$  の波数依存性がないとする取り扱い、実空間表示において局所的な相互作用を仮定することに等しい。したがって、交換相互作用  $\mathcal{H}_{\text{cf}}$  は、局所準位  $f$  と同位

置における伝導電子の生成演算子  $c_{0\sigma}^\dagger$  を用いると,

$$\mathcal{H}_{\text{cf}} = J \mathbf{s}_0 \cdot \mathbf{S} \quad (1.14)$$

$$\mathbf{s}_0 = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} c_{0\sigma}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} c_{0\sigma'} \quad (1.15)$$

と表すことができる。以上の議論は、複数の局在準位が空間上の各所に存在する系に拡張することができる、この場合のハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} \tilde{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \tilde{c}_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_j J_j \mathbf{s}_j \cdot \mathbf{S}_j \quad (1.16)$$

となる。

本模型は非常に単純な形を持つものの、摂動をはじめとした近似計算での解析が困難であるという特徴がある。次節以降では、この模型において生じる2つの主要な効果である「近藤効果」と「RKKY相互作用」、そしてこれらの競合関係について述べる。

## 1.2.2 近藤効果

### 1.2.2.1 近藤効果の端緒

1930年代に発見された、磁性不純物を希薄に含む金属における電気抵抗の特異な振る舞い [5] は、近藤による解析 [6] を理論的解明への端緒としており、この解析に付随した現象は「近藤効果」と呼ばれている。近藤は、式 (1.13) の模型を二次の摂動により解析することで以下の結果を得た：

$$R(T) = R_B \left( 1 + 2J\rho \log \frac{D_0}{k_B T} \right). \quad (1.17)$$

ここで、 $T$  は温度であり、 $R_B$  は一次近似における電気抵抗、 $\rho$  は Fermi 面におけるスピンあたりの状態密度、 $D_0$  はバンドカットオフを表す。また、 $J$  は前節で述べた交換相互作用の大きさである。この結果から、第二項が  $O(1)$  程度になる温度として「近藤温度」 $T_K$ ：

$$J\rho \log \frac{D_0}{k_B T_K} = 1 \iff k_B T_K = D_0 \exp \left( -\frac{1}{J\rho} \right) \quad (1.18)$$

が定義できる。<sup>\*1</sup>

<sup>\*1</sup> 文献によっては、式 (1.14) の相互作用強度を  $2J$  で定義する場合があります、この場合は  $k_B T_K = D_0 \exp \left( -\frac{1}{2J\rho} \right)$  となるため注意を要する。

### 1.2.2.2 近藤効果における摂動の破綻とくりこみ

近藤による結果 (1.17) は、温度  $T \rightarrow 0$  において無限大に発散しており、電気抵抗が一定値となる実験結果を説明できなかったことから、低エネルギーにおける記述が破綻していることが予想された。この問題は、Anderson により提示された “Poor man’s scaling” によって定性的な理由付けがなされた [7]。Poor man’s scaling では、平坦な状態密度を持つエネルギーバンド  $[-D, D] = [-D_0, D_0]$  を出発点とし、以下の手続きを行う：

1. バンド端付近における状態  $[D - \delta D, D]$  および  $[-D, -(D - \delta D)]$  を相互作用の二次摂動における中間状態としてのみ取り扱うことで、バンド幅が  $[-(D - \delta D), D - \delta D]$  へと縮小された低エネルギー有効ハミルトニアンを得る
2. この有効ハミルトニアンの効果を元のハミルトニアンにおける相互作用の大きさ  $J$  へとくりこむ

以上の操作を微小なバンド幅変化  $\delta D$  に対して繰り返し行うことは、バンド幅の変化に対する相互作用  $J$  の変化をくりこみ群方程式として表現することを意味し、その結果

$$\frac{\partial J}{\partial D} = -\frac{\rho J^2}{D} + O(J^3) \quad (1.19)$$

を得る。これを結合定数  $g = \rho J$  を定義した上で書き直すと、

$$\frac{\partial g}{\partial(\ln D)} = -g^2 + O(g^2) \quad (1.20)$$

となる。この方程式から以下の帰結が導かれる：

- $g = 0$  はくりこみの固定点である。
- $g < 0$  すなわち  $J < 0$  (強磁性相互作用) のときは、バンド幅の減少に伴って  $|g|$  が小さくなることから、低エネルギーにおいて相互作用の効果は無視できるようになる。
- $g > 0$  すなわち  $J > 0$  (反強磁性相互作用) のときは、バンド幅の減少に伴って  $g$  がより大きくなるという正のフィードバックが働く。したがって、摂動論が破綻する。

すなわち、 $c$ - $f$  相互作用が強磁性、反強磁性であるという違いは系の低エネルギーにおける現象を決定的に変えることがわかる。特に反強磁性相互作用においては相互作用の効果が発散的に増大するため、式 (1.17) を導出した際に用いた二次摂動による取り扱いは妥当ではなかったことがわかる。実際に、式 (1.20) の解は、元のバンド幅  $D_0$  のときの結合

定数 (bare coupling constant) を  $g_0$  として

$$g = \frac{g_0}{1 - g_0 \ln(D_0/D)} = \frac{1}{\ln(D/k_B T_K)} \quad (1.21)$$

となっており、バンドカットオフ  $D$  が式 (1.18) で定義した  $k_B T_K$  となる点で結合定数が発散することがわかる。

### 1.2.2.3 近藤効果の普遍性

以上までに示した温度スケール  $T_K$  は、二次摂動の範囲で得られるエネルギースケールに過ぎなかったが、無限次までを考慮した摂動においても全く同様のエネルギースケールが出現する [8]。さらに、数値くりこみ群による解析 [9] や厳密解 [10, 11] においても出現する普遍的なエネルギースケールであることが現在では示されており、近藤効果を支配する唯一のエネルギースケールであることがわかっている。

また、 $J \rightarrow \infty$  の極限を考えると一つの伝導電子と局在スピンの一重項を形成した状態が自明な基底状態となる。この事実と、近藤効果の唯一のエネルギースケールが  $k_B T_K$  であるという事実から、一般の  $J$  における基底状態は局在スピンの多数の伝導電子が形成する多体一重項状態であり、この状態は  $J \rightarrow \infty$  の極限と連続的に接続しているといえる。実際に、局在スピンの多数の伝導電子により形成される一重項状態を仮定して固有状態を構成することにより、Fermi 球と局在スピンの独立に存在する状態を出発点とした摂動論よりも  $k_B T_K$  だけエネルギーが低い状態が得られることが示されている [2, 12, 13]。この状態  $|\text{KS}\rangle$  は、図 1.2 に示すように局在スピンの周りに分布した多数の伝導電子が作る多体一重項状態 (近藤一重項状態) であることも示されており、 $k_B T_K$  はこの多体一重項状態の束縛エネルギーとみなすことができる。このとき多数の伝導電子が  $S = 1/2$  スピン一個分のスピン自由度を形成している。

以上のように、近藤効果の基底状態は本質的には  $J$  によらない量子多体状態であり、そのエネルギースケールのみが  $T_K$  を通じて変化するという極めて普遍的な状態になっているといえる。

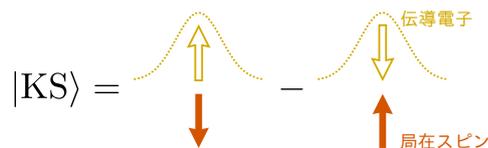


図 1.2 近藤効果の基底状態として実現する多体一重項状態の概念図。局在スピンの周りに分布した多数の伝導電子 (点線) が多体一重項を形成することで安定状態を作り出す。このとき束縛している伝導電子数は 1 になっており、 $J \rightarrow \infty$  において局在スピンと一つの伝導電子からなる一重項状態へと連続的に接続している。

## 1.2.2.4 高次の補正を考慮した近藤温度と実験パラメータの関係

本節では後の節への準備として、より高次の補正を考慮した近藤温度の表式を導出するとともに、近藤温度を量子ドット系と比較する際に有用な式を導出する。

式 (1.20) において、より高次の摂動まで考慮した場合のくりこみ群方程式は以下のようになる [14][15]：

$$\frac{\partial g}{\partial \ln D} = -g^2 + \frac{1}{2}g^3 + O(g^4) \quad (1.22)$$

ここでは、弱い結合定数  $g_0 \ll 1$  をスタート地点として、結合定数  $g$  が  $O(1)$  程度以下の範囲をくりこみ群方程式が有効な範囲であると考ええる。この仮定を用いると、結合定数  $g = O(1)$  となる有効バンドカットオフを  $k_B T_K$  として、

$$\begin{aligned} \ln \frac{k_B T_K}{D_0} &\approx -\frac{1}{g_0} + \frac{1}{2} \ln \frac{g_0}{2} \\ k_B T_K &= D_0 \sqrt{\frac{g_0}{2}} \exp\left(-\frac{1}{g_0}\right) \end{aligned} \quad (1.23)$$

となる。係数  $1/\sqrt{2}$  はバンドカットオフ  $D_0$  に含めることで、最終的に

$$k_B T_K \sim D_0 \sqrt{J\rho} \exp\left(-\frac{1}{J\rho}\right) \quad (1.24)$$

を得る。式 (1.18) と比べると、 $\sqrt{J\rho}$  の因子だけ近藤温度が補正されていることがわかる。

さらに以下では実験的に決定可能なパラメータと比較可能な形に近藤温度を書き直す：式 (1.24) に式 (1.4), (1.10) を代入すると、

$$k_B T_K = D_0 \sqrt{\frac{2\Delta_0 U}{-\pi E_f(E_f + U)}} \exp\left(\frac{\pi E_f(E_f + U)}{2\Delta_0 U}\right) \quad (1.25)$$

を得る。ここではエネルギーの基準を Fermi 面  $\varepsilon_F = 0$  にとった。これに、バンド幅を無限にとったときの結果 [16] を用いると、

$$k_B T_K \sim \sqrt{\frac{2\Delta_0 U}{\pi}} \exp\left(\frac{\pi E_f(E_f + U)}{2\Delta_0 U}\right) \quad (1.26)$$

となる。さらに、 $\Gamma = 2\Delta_0$  を定義すると

$$k_B T_K \sim \frac{\sqrt{\Gamma U}}{2} \exp\left(\frac{\pi E_f(E_f + U)}{\Gamma U}\right) \quad (1.27)$$

を得る [16]。この式は後述する量子ドット系とのパラメータ比較において有用である。

### 1.2.3 RKKY 相互作用

前節で述べた近藤効果は、局在スピンの一つだけ存在する場合に生じる物理現象であった。近藤効果のみを考慮すると、局在スピンの複数存在する場合には各局在スピンのそれぞれ伝導電子と一重項を形成することで、磁気モーメントが各々消失すると予想される。しかし、局在スピンの複数存在する場合には、以下で述べるように二次の摂動から局在スピン間の相互作用が有効的に働くことが示される。この有効相互作用は、「Ruderman Kittel Kasuya Yosida (RKKY) 相互作用」[17–19] と呼ばれる。この相互作用の存在は前節で述べたくりこみ群方程式に対して変更を加えることから、複数の局在スピンの存在する場合の基底状態は、近藤効果による一重項状態とは接続しない状態になることが予想される。

以下では、RKKY 相互作用の詳細について述べる。RKKY 相互作用を説明する最小のハミルトニアンは以下のように、2つの局在スピンのそれぞれ伝導電子と  $c$ - $f$  相互作用しているモデルである：

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{int}} \quad (1.28)$$

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} \tilde{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \tilde{c}_{\mathbf{k}\sigma} \quad (1.29)$$

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = J \mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{S}_1 + J \mathbf{s}_2 \cdot \mathbf{S}_2 \quad (1.30)$$

ここで、 $\mathbf{s}_i$  は位置  $\mathbf{R}_i$  における伝導電子のスピン演算子であり、 $|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2| = r$  とする。このとき、 $J$  が小さい領域における有効ハミルトニアンは  $\mathcal{H}_{\text{int}}$  を摂動項とする二次摂動により計算することができる。自由電子分散を仮定した3次元系に対しては、この計算を解析的に実行することができる：

$$\mathcal{H}_{\text{RKKY}}^{3\text{D}} \propto k_F^3 \rho J^2 F^{3\text{D}}(2k_F r) \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \quad (1.31)$$

$$F^{3\text{D}}(x) = \frac{\cos x - \sin x/x}{x^3} \sim \frac{\cos x}{x^3} \quad (x \rightarrow \infty) \quad (1.32)$$

となる。ここで  $k_F$  は伝導電子の Fermi 波数である。一方、本研究で取り扱う1次元系に対しては、 $k = 0$  における特異性に注意が必要なものの、

$$\mathcal{H}_{\text{RKKY}}^{1\text{D}} \propto k_F \rho J^2 F^{1\text{D}}(2k_F r) \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \quad (1.33)$$

$$F^{1\text{D}}(x) = \text{Si}(x) - \frac{\pi}{2} = \int_0^x \frac{\sin z}{z} dz - \frac{\pi}{2} \sim -\frac{\cos x}{x} \quad (x \rightarrow \infty) \quad (1.34)$$

となることが示されている [20, 21]。一般に  $d$  次元の RKKY 相互作用は、 $r^{-d}$  の漸近形で減衰する長距離相互作用であり、強磁性・反強磁性が波数  $2k_F$  で入れ替わるという特徴がある。

### 1.2.4 近藤効果と RKKY 相互作用の競合・協調

近藤効果のエネルギースケール  $k_B T_K$  は、式 (1.24) に示したように  $k_B T_K \sim \sqrt{J\rho} \exp(-1/J\rho)$  という、 $J$  に対して特異な指数依存性を持っている。一方で、RKKY 相互作用のエネルギースケールは式 (1.31) に示したように  $k_B T_{\text{RKKY}} \sim J^2 \rho$  であり、 $J$  に対して冪的な増大を示す。したがって、 $J$  が弱い領域では RKKY 相互作用が支配的であり、 $J$  が大きい領域では近藤効果が支配的になると考えられる。この競合関係は、 $f$  電子化合物の基底状態における量子臨界点の存在について提唱され [22]、Doniach 相図と呼ばれている (図 1.3)。

Doniach 相図は  $f$  電子系を対象として近藤効果と RKKY 相互作用の競合関係を指摘したものであった。一方、同様の競合関係は局在スピンの数が 2 つ以上存在しさえすれば生じうることから、局在スピンの数が少数存在する局在・遍歴電子系を解析することで、一般の局在・遍歴電子系における多体基底状態の形成に対して何らかの示唆を与えることができると考えられる。しかしながら、局在スピンの数が少数存在する系の研究は  $f$  電子系の研究に比べると少数であった。この点について、実験的、理論的な背景を次節以降で解説する。

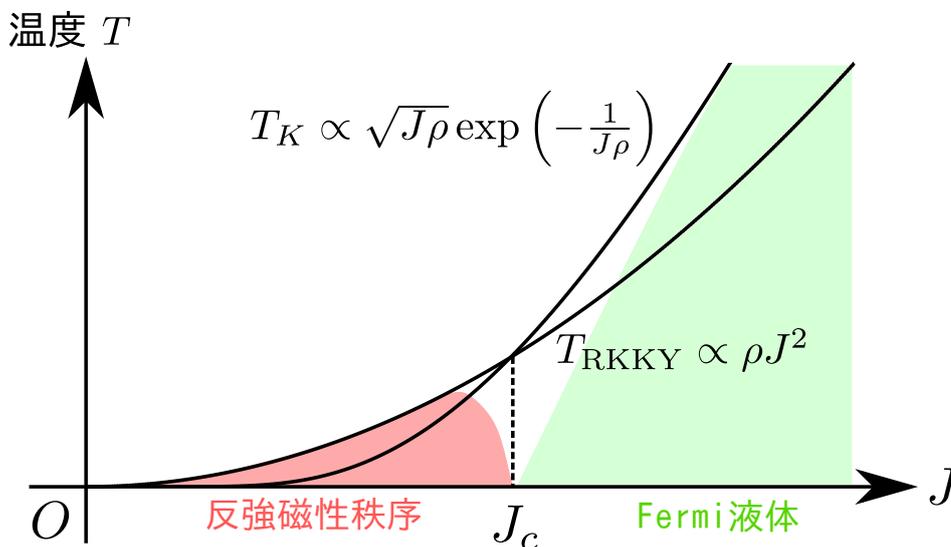


図 1.3 Doniach により指摘された [22] 量子臨界点の概念図. RKKY 相互作用と近藤効果の競合により、 $T = 0$ ,  $J = J_c$  において量子臨界点が実現することが期待されている。

## 1.3 局在・遍歴電子系の人工的実現

### 1.3.1 局在・遍歴電子系研究のこれまで

局在・遍歴電子系の研究はこれまで、表 1.1 に示す 2 つが特に中心的な研究対象となってきた：

表 1.1 局在・遍歴電子系の中心的な研究対象

	一不純物問題	周期 Anderson ・ 近藤格子系
伝導電子数 $N$ に対する 局在スピンの数	1	$O(N)$
実験対象	磁性不純物を 希薄に含む金属	$f$ 電子化合物

一不純物問題については、数値くりこみ群による解析により問題の大部分が解明され、さらに厳密解が得られているなど、その全容のほとんどが明らかになっている。その理由は、1.2.2.3 節でも解説した近藤効果の持つ普遍性に由来している。一方、一不純物問題に続いて研究対象となったのは、 $f$  電子系と呼ばれるランタノイド、アクチノイド化合物である [23]。この系は、結晶構造の形で周期的に局在スピンの存在する系になっており、「近藤格子模型」や「周期 Anderson 模型」と呼ばれる、伝導電子数  $N$  に対して  $O(N)$  の局在スピンを持つ数理模型により記述されている。

近藤効果と RKKY 相互作用の共存系という意味では、局在スピンの存在する系が最小の構成であるにも関わらず、これまで積極的な研究は行われてこなかった。この理由としては、1.4 節に述べる理論解析の現状に加えて、2 つの不純物だけが存在する実験系を構成することが困難であったことが挙げられる。また、仮に磁性不純物の濃度を制御するなどして物質中において少数の局在スピンの相互作用する状況を作ることができたとしても、少数のスピンは熱力学的な相を作り得ないため、スピン構造の観測が困難であることも一つの要因である。

以上のように、実在物質における少数不純物系の実現には困難が伴う。一方で、近年の半導体加工技術の進展により局在・遍歴電子系を人工的に作製することが可能になりつつある。次節では、この人工的な局在・遍歴電子系について述べる。

### 1.3.2 半導体量子ドットによる局在・遍歴電子系の実現

原子における局在スピンの発現機構は、1.2.1 節で述べたように Fermi 面以下に存在する局所準位と、局所準位における強い Coulomb 反発により説明された。したがって、ごく狭い領域の井戸型ポテンシャルを人工的に形成することができれば、局在スピンの実現できるといえる。このようなポテンシャルを半導体により人工的に実現した構造は「量子ドット (quantum dot)」と呼ばれ、局在スピンの実現するという文脈における「人工原子」ともいふべき構造である [24]。局所ポテンシャルは 3 次元空間中において「0 次元的」な構造であることが要求されるため、実際の量子ドットは 2 次元的な半導体構造をベースに実現されている。

図 1.4 に「縦型量子ドット (vertical —)」の概略図を示す [25]。「縦型」は半導体二次元面に対して垂直な方向 (縦方向) にソース (Source)・量子ドット (Dot)・ドレイン (Drain) が並んだ構造をしていることに由来しており、この例では AlGaAs で挟まれた領域 (Dot) に局所準位を形成している。また、ソース・ドレインが量子ドットと結合する伝導帯に相当しており、これらの電極を通じて伝導特性の測定を行う (同図 (b))。ドットを取り巻くように配置されたゲート電極 (Side gate) に負電圧を印加することで量子ドットの直径を実効的に減少させることができ (点線)、その結果量子ドット内の局所準位 ( $E_f$  に相当) を動的に変化させることができる。(c) は縦型量子ドットの SEM 写真であり様々な断面形状が作製できることを示している。

縦型量子ドットに対して、図 1.5 に示した構造は「横型量子ドット (lateral —)」と呼ばれる [24]。横型量子ドットは、ソース・量子ドット・ドレインが半導体二次元面に対して平行 (横方向) に並んだ構造を持っており、GaAs/AlGaAs ヘテロ接合により形成された二次元面に束縛された電子に対して、半導体表面に配置したゲート電極に負電圧を印加することでポテンシャル障壁を形成し量子ドットを実現している。横型量子ドットは、ゲート電極により局所準位  $E_f$  のみならず式 (1.27) における混成  $\Gamma$  を制御可能であることから、 $c$ - $f$  相互作用  $J$  の大きさを動的に制御できるという特徴があり、局在・遍歴電子系で生じる量子多体状態を能動的に制御可能な環境を実現できるといえる。

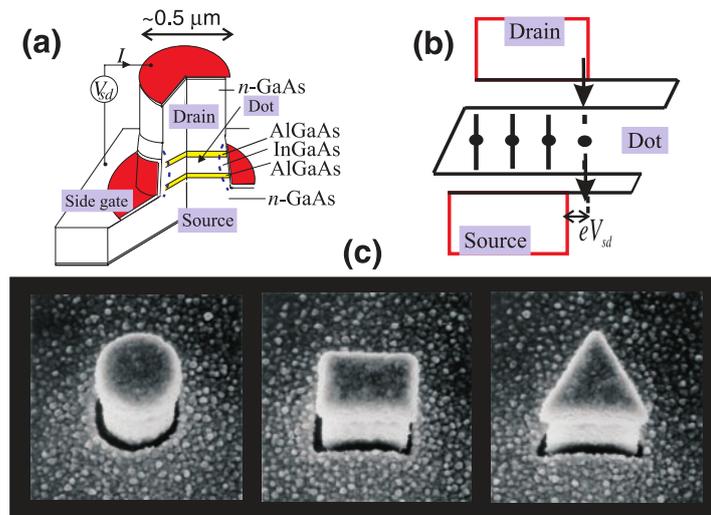


図 1.4 縦型量子ドットの概略図 (画像は [25] より引用). AlGaAs の層がポテンシャル障壁となることで電子の閉じ込めを行う.

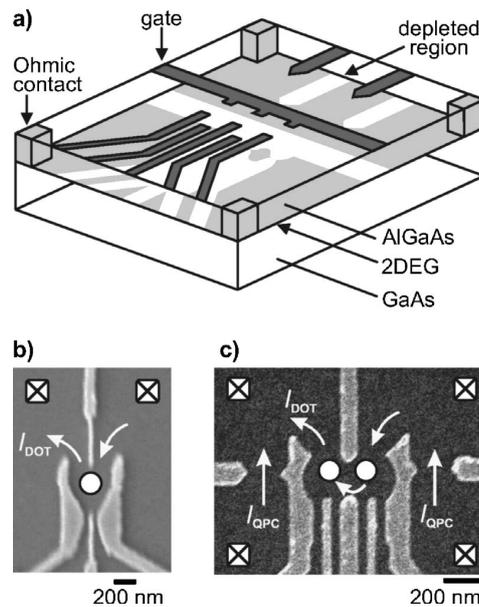


図 1.5 横型量子ドットの概略図 (画像は [24] より引用). (a) 黒色で示されているゲート電極に負電圧を印加することで, GaAs/AlGaAs ヘテロ接合面にポテンシャル (白色) を形成し量子ドットを実現する (図中央, 灰色の島状の部分). (b)(c) は SEM 写真であり, 白丸でマークされた位置が量子ドットである.

本研究では, 量子ドットにより実現可能な局在・遍歴電子系を想定しているが, 量子ドット以外にも基板表面の単原子を用いた複数不純物近藤効果の実験が行われているほか [26], 冷却原子系による局在・遍歴フェルミオン系の実現なども模索されており [27-29], これまで  $d$  電子,  $f$  電子を持つ実在物質が対象であった局在・遍歴系の物理に人工的な量

子系からアプローチする試みが数多くなされている。

### 1.3.3 量子ドット系におけるパラメータの実験的推定

前節で述べた半導体量子ドットにおいては、実際に近藤効果の実験的検証が行われている。近藤効果のエネルギースケールは式 (1.27) に示したように  $U$ ,  $E_f$ ,  $\Gamma$  で決定され、これらは量子ドットにおける

- ドット内の Coulomb 反発力 (単電子エネルギー)  $U$
- Fermi 準位と量子ドット内局所準位の差  $E_f$
- 量子ドットとリード線 (ソースおよびドレイン) 間の共鳴準位幅  $\Gamma$

に対応する。このうち  $U$ ,  $E_f$  については以下で解説するように「Coulomb 振動」と呼ばれる現象を測定することで決定できる [30].

量子ドット内の  $N$  番目のエネルギー準位は、電子間の Coulomb 相互作用を古典的に取り扱うことで以下のように表すことができる：

$$\mu_N = \varepsilon_N + (N - 1)U \quad (1.35)$$

ここで、 $\varepsilon_N$  は相互作用を考慮しない一体準位である。ここで  $\mu_N$  の定義はスピン自由度の違いも考慮されており  $\mu_N$  には 1 つの電子しか占有できないことに注意する。このような準位を仮定した上で、量子ドット系のセットアップを図式化したものが図 1.6 である。同図では、ソース・ドレイン間にバイアス電圧 ( $\propto \mu_S - \mu_D$ ) を印加した状況を考えている。(a) で示した状況においては、ソース電極の化学ポテンシャル  $\mu_S$  とドレイン電極の化学ポテンシャル  $\mu_D$  の間に量子ドット準位が存在しないことから、ソース・ドレイン間に流れる電流  $I$  は 0 となる (Coulomb ブロッキング)。一方 (b) で示した状況においては、 $\mu_S$  と  $\mu_D$  の間に量子ドット準位が存在することで量子ドットを介在した電気伝導が可能となり有限の電流が流れる。ゲート電圧  $V_G$  を印加すると量子ドット準位  $\mu_N$  全体をシフトすることが可能であるため、(c) に示したように  $V_G$  の変化に対して Coulomb ブロッキングの状態と伝導状態が交互に出現することになり電流の振動を観測することができる。この現象は Coulomb 振動と呼ばれる。電流ピークの振動間隔  $\Delta V_G^{(N)}$  は、

$$\Delta V_G^{(N)} = \frac{\mu_N - \mu_{N-1}}{e\alpha} = \frac{\varepsilon_N - \varepsilon_{N-1} + U}{e\alpha} \quad (1.36)$$

により関連づけることができ、これにより  $U$  および  $E_f$  が算定できる (ただし  $\alpha$  は量子ドットの静電容量から決定されるレバーアームと呼ばれる因子である)。

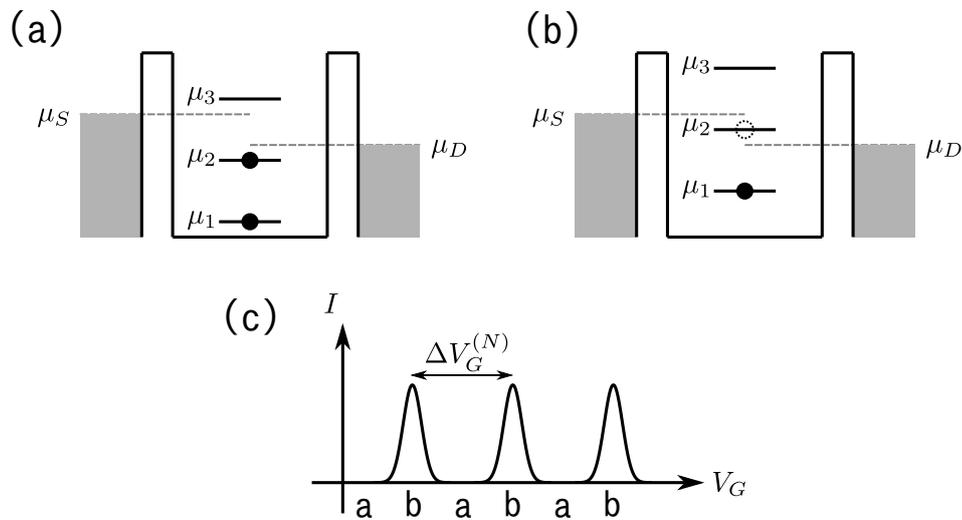


図 1.6 Coulomb 振動のメカニズム. (a) : Coulomb ブロケード. (b) : 伝導状態. (c) : Coulomb 振動. ゲート電圧  $V_G$  を変化させることで量子ドット準位  $\mu_N$  全体を上下にシフトすると (a) と (b) の状況が交互に出現することになり電流に振動が観測される (対応する領域を横軸下の a, b で示した). この振動の間隔から量子ドット準位の情報を算定できる. なお (a) に示した準位のセットアップが図 1.1 と類似していることにも注意.

以上では、ソース・ドレインバイアスが量子ドット準位間隔よりも小さい状況を作った上でゲート電圧を変えることで Coulomb 振動を観測した. これ以外にも、ゲート電圧を固定した上でソース・ドレインバイアスを変化させることで生じる「Coulomb 階段」や両者を共に変化させることで生じる「Coulomb ダイヤモンド」が観測可能であり、いずれの現象も  $U$  や  $E_f$  を算定に用いられている. 残るパラメータは  $\Gamma$  であるが、これは Coulomb 振動のピーク (Coulomb ピーク) の絶対零度におけるピーク幅から算出することができる [31, 32].

実際の実験研究におけるパラメータを表 1.2 に示す. 概ね  $10^{-7}\text{m}$  オーダーの量子ドットに対して  $10^{-3}\text{eV}$  の物理現象が実現していることがわかる. これは原子のエネルギースケール  $10^{-10}\text{m}$  の物理が  $10^0\text{eV}$  オーダーで生じることと大雑把には対応した比になっているといえる.

表 1.2 先行研究において測定された各種パラメータ. 表示している値は参考値として丸めたものを記載している.

	ドットサイズ [nm]	$U$ [meV]	$\Gamma$ [meV]	ドット内準位幅 $\Delta$ [meV]
[32]	100	1.9	0.3	0.4
[33](1)	170	1	$\Delta$ 程度	0.1
[33](2)	130	1.3	$\Delta$ 程度	0.15

### 1.3.4 量子ドットにおける近藤効果の観測

本節では、量子ドット実験系における近藤効果の観測について述べる。

#### 1.3.4.1 伝導度測定を通じた観測

近藤効果の端緒は、希薄な磁性不純物を含んだ金属の電気抵抗が温度の減少に対して上昇に転じる現象の発見であった。この現象は、磁性不純物により金属中で伝導を担っている電子が量子的に散乱されることが原因である。一方で量子ドット系においては、これとは異なった現象を通じて近藤効果が観測される。図 1.6 にも示したように、量子ドット系における伝導は局在準位の存在により担われている。Coulomb ブロッキングの状態では量子ドットを介した電流が生じないことを前節で述べたが、近藤効果により局在準位の電子とリード線中の電子が一重項を形成すると、共鳴的な伝導状態が許されるようになる。これは、温度の減少によって近藤効果が生じると電気抵抗が減少（＝電気伝導度が增大）することを意味し、金属の場合とは逆の振る舞いとなっている。近藤効果が生じるためには、量子ドット内にスピン自由度が残っている必要があることから、量子ドット内の電子数が奇数のときのみ、この近藤効果による電気伝導度の増大が観測される [30]。この様子を図 1.7 に示した。

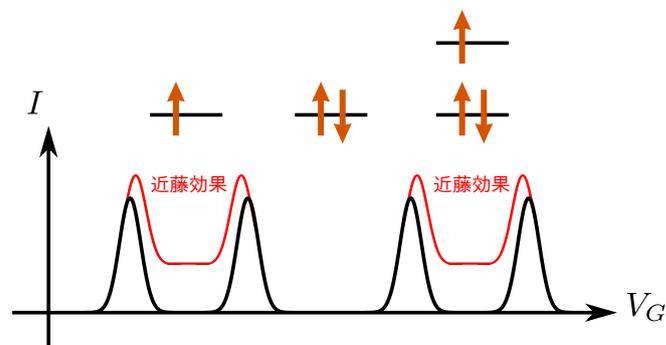


図 1.7 近藤効果による、Coulomb ブロッキング領域における伝導度の増大。黒線が通常の Coulomb 振動であり、近藤効果が生じる場合の Coulomb 振動を赤で示している。また、各谷の位置における電子準位の占め方を上部に示した。量子ドット中の電子数が奇数の場合のみ近藤共鳴が生じ、Coulomb ブロッキングの谷においても伝導が可能になる [30]。

この電気伝導度の振る舞いは近藤効果の温度に対する対数依存性 (c.f. 式 (1.17)) を反映するため、温度に対する伝導度の変化から  $T_K$  を見積もることができる。実際の実験データを図 1.8 に示す [34]。高温（赤線、800mK）において生じている Coulomb ピークの間の谷が、低温（黒線、15mK）において増大する谷と減少する谷へと交互に変化して

いることが確認できる．伝導度が増大している谷が量子ドット内電子数が奇数であること，すなわち近藤効果に対応する．同図右下の挿入図はゲート電圧  $V_{gl} = -413\text{mV}$  の谷における伝導度の温度依存性を横軸を対数としてプロットした結果であり，伝導度が温度に対して対数的に振る舞っていることを示している．

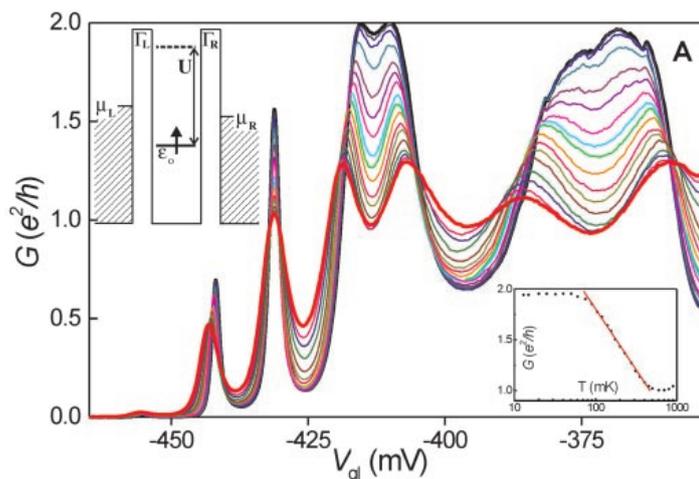


図 1.8 量子ドット系における近藤効果の実験的観測（画像は [34] より引用）．図 1.7 と同様に，Coulomb 振動の谷が，温度の低下に伴って伝導度が増大するものと減少するものにわかれていることがわかる．

図 1.8 に示した実験においては，ゲート電圧を制御することで量子ドットと伝導帯の間のトンネル確率  $\Gamma$  を制御しており，近藤温度を  $T_K = 0.4 - 1\text{K}$  範囲で実現している [34]．このエネルギースケールは，半導体を想定した RKKY 相互作用の見積もり [35] と同程度になっており，量子ドット系においても近藤効果と RKKY 相互作用の競合関係が実現しうると期待できる．

#### 1.3.4.2 近藤雲とその観測

前述した伝導度の測定に加えて，局在スピン周辺の伝導電子状態を直接観測しようという試みも行われている．近藤効果は，1.2.2 節で述べたように，局在スピンと多数の伝導電子が一重項状態を形成する現象であった．このとき，図 1.2 にも示したように伝導電子は局在スピンの周辺に“雲”状に分布すると考えられることから，この伝導電子状態は「近藤雲 (Kondo screening cloud)」と呼ばれている [13, 36]．

この近藤雲は，上述の考察によりその存在が予測されているものの，既に得られている近藤効果の厳密解では伝導電子の波動関数を記述できないことから，一不純物の系においても残された数少ない謎の一つとなっている．そのため，1.4 節で述べる数値計算からのアプローチと共に，近藤雲を実験的に観測しようという試みが行われている．近藤雲そのものを直接的に観測することは難しいものの，近藤雲と有限長の構造との干渉効果を通じ

た観測が行われており [37, 38], 近藤温度  $T_K$  から導出される長さスケールとの一致が確認されている。

量子ドット系における典型的な近藤雲の大きさは  $\sim 0.1 - 1\mu\text{m}$  であり [36], これは量子ドット系の構造長と同程度である。そのため, 量子ドット系は近藤雲の観測において最適な系であると同時に, 量子ドットを応用したデバイスを実現する上でその存在を無視することはできないといえる。

### 1.3.5 量子ドットの量子計算への応用

本節では, 量子ドットの応用例として量子ゲート型計算機のハードウェアとしての応用を紹介する。量子ドットは, すでに述べたように局在スピンを実現可能であることから, このスピン自由度を量子ビット (qubit) として利用することが模索されている。

量子ゲート計算の基本原理は, 多数の量子ビットに対して適当な初期状態  $|\text{in}\rangle$  を用意し, この量子ビット列に対して計算処理に対応するユニタリ変換  $U$  を作用することで終状態  $|\text{out}\rangle = U|\text{in}\rangle$  として答えを計算することである\*2。  $U$  は一般に  $N$  個の qubit で作られる Hilbert 空間に作用するが, 一般に任意の  $N$ -qubit ユニタリ変換は Hadamard ゲート (1-qubit ゲート),  $\pi/4$  位相ゲート (1-qubit ゲート), CNOT ゲート (2-qubit ゲート) の3つのユニタリ変換を組み合わせることで実現できることが知られている (万能ゲート集合 [39])。物理的には, これらのゲートを1スピンまたは2スピンの作用する制御可能なハミルトニアン  $\mathcal{H}(t)$  により時間発展することで実現される:  $U = T \left[ \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \int \mathcal{H}(t) dt \right) \right]$ 。このうち, 1-qubit ゲートについては単一スピンに対して磁場を印加するなどして歳差運動を誘発することで実現可能である。一方, CNOT ゲートについては2スピン間の相互作用を制御する必要があるが, これは Heisenberg 型相互作用

$$\mathcal{H} = J(t) \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \quad (1.37)$$

を制御することで実現可能であり [40], 実際に直接的に相互作用する2つの量子ドットを用いた実験が行われている [41]。一方, 距離を隔てた2つの量子ドットに作用するゲートを実現することはスケラブルな量子ゲート計算機を実現するための課題となっている。距離を隔てた量子ドットの結合に対しては, 量子細線中の伝導電子を用いた遠隔相互作用が候補となり, これは少数の局在スピンを持つ次元局在・遍歴電子系そのものであるが, 次節で述べるようにそこで起きる物理現象について未解明な部分が多いという現状がある。

---

\*2 実際にはその後測定が必要である。

## 1.4 局在・遍歴電子系における理論研究の現状

本節では、局在・遍歴電子系における理論研究の現状について概観する。前節で述べたように、量子ドットは量子計算などへの応用が期待されていることから、量子ドット系において実現する量子状態を平均場近似などに頼ることなく解析することが必要である。そのため本節では、この制約を満たすことのできる代表的な 2 つの手法である数値くりこみ群法と密度行列くりこみ群法による理論研究の現状について述べる。

### 1.4.1 数値くりこみ群法

数値くりこみ群 (Numerical Renormalization Group; NRG) 法は、1 局在スピン系の問題をほぼ完全に解明したといえる手法であり [9]、近藤効果の解析に対して有力な手法である。数値くりこみ群法の処方は、波数空間において表示したハミルトニアンを、状態密度の平坦化などの単純化により以下のような入れ子構造を持つ実空間ハミルトニアンに変換することである：

$$H_{n+1} = \Lambda^{1/2} H_n + \sum_{\sigma} (c_{n\sigma}^{\dagger} c_{n+1,\sigma} + \text{h.c.}) \quad (1.38)$$

$$H_0 = \mathbf{S} \cdot \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} c_{0\sigma}^{\dagger} \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} c_{0\sigma'}. \quad (1.39)$$

ここで  $\Lambda$  は  $\Lambda > 1$  なる定数である。この入れ子構造を用いた反復処理を行うことで、NRG 法は  $\Lambda^{-n/2}$  という小さなエネルギースケールを表現することができ (対数離散化)、小さいエネルギースケール (1.18) を正確に取り扱う必要がある近藤効果の解析に適している。

NRG 法は 1 局在スピン系に対するアルゴリズムとして考案されたが、さらに以下のような拡張がなされている：

- 1 局在スピン系における局在スピン周辺と任意の位置  $x$  における電子場をくりこむもの [42]
- 任意の距離  $r$  だけ離れた 2 不純物系における 2 つ局在スピン周辺の電子場をくりこむもの [43]

いずれの手法も空間上の 2 点における電子場を有効的な 2 本の実空間格子に変換することで NRG 法のアルゴリズムを適用している。特に、1 局在スピン系の任意位置の電子場をくりこむものについては、近藤雲に関連した物理量の計算が可能になっており、近藤温度  $T_K$  から得られる長さスケールにおけるクロスオーバーが報告されている [42]。

NRG 法は波数空間の情報を用いる手法であることから稠密な空間における波動関数を表現できるという利点がある。一方で以下に示す問題が挙げられる：

- 3 局在スピン系以上への拡張が難しい。
- 2 局在スピン系において存在する RKKY 相互作用を、局在スピン周辺の電子場の低エネルギー状態で記述できる保証がない。
- 入れ子構造を持つハミルトニアンへの変形に際して、バンドの平坦化といった仮定が必要である。

したがって、特に多スピン問題の解析においては次節に示す密度行列くりこみ群法が候補として挙げられる。

### 1.4.2 密度行列くりこみ群法

密度行列くりこみ群 (Density Matrix Renormalization Group; DMRG) 法は、実空間格子ハミルトニアンの基底状態を数値的に計算する手法である。本手法の詳細については次章で解説するため、本節では DMRG 法による局在・遍歴系解析の現状について述べる。

DMRG 法は開放端条件における一次元実空間格子ハミルトニアンの解析に有用なアルゴリズムであることから、先行研究 [44] により 2 局在スピン系への適用が行われている。ただし、この解析は伝導電子間反発力  $U_c$  を導入しており、近藤効果と RKKY 相互作用の競合そのものを捉えることができているかが不明である。また、局在・遍歴電子系は後述するように有限サイズ効果による影響が極めて大きいことが知られているが、有限サイズ効果については本先行研究では言及されていない。なお、反発力  $U_c$  は電子相関を短距離化することから、サイズ効果の影響を受けにくくなる点も強調しておく。

DMRG 法はさらに 3 局在スピン系への適用が行われている [45]。しかしながら、図 1.9 に示すようにその解析には有限長  $L$  の格子系を解析することによる影響 (有限サイズ効果) が強く現れることがわかっている。このサイズ効果は特に相互作用  $J$  が小さい領域で顕著である。その理由は、伝導電子の運動エネルギーの離散化幅が  $\sim 1/L$  であり、これを近藤温度  $k_B T_K$  が下回ることで近藤効果を正確に表現できなくなることが一因である。さらに、 $J$  が大きい領域についても開放端条件が大きな影響を与えうる： $J$  が大きくなり伝導電子が局在スピンに束縛されると、局在スピンサイトが実質的に境界として振る舞う。その結果、真の境界 (開放端) と擬の境界 (局在スピン) の両者が系の状態に同等の影響を持ってしまい、開放端による影響が排除できないという問題が生じる。以上の困難さから、少数不純物近藤系の DMRG 法による先行研究 [45, 46] では有限長  $L$  の箱 (Kondo box, quantum box) を人工的に作製した場合における物理現象を扱うという想定を採用したうえで、電子・正孔対称性が存在する half filling を対象とした解析が行われている。

近藤雲の DMRG 法による解析については、局在スピン一つを系の端に配置した場合に対して行われている [47]. こちらについてもサイズ効果による影響が指摘されているのに加えて、やはり half filling の場合のみの解析に留まっているのが現状である.

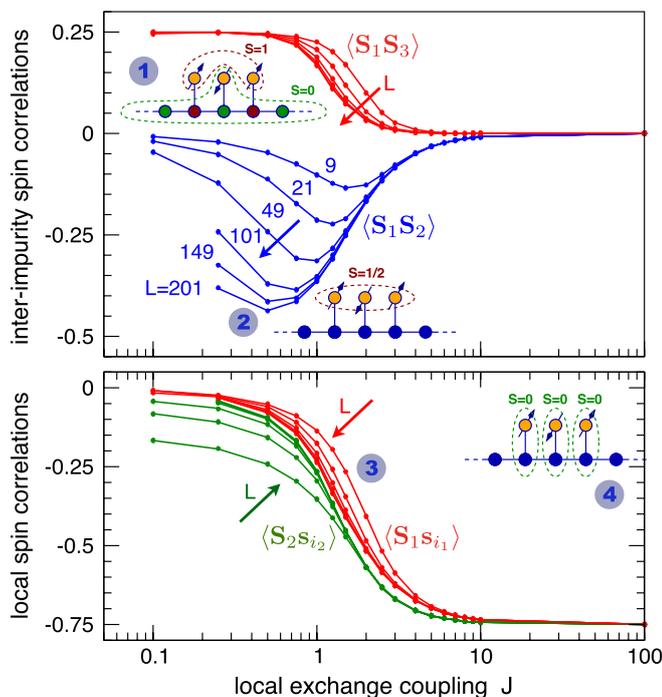
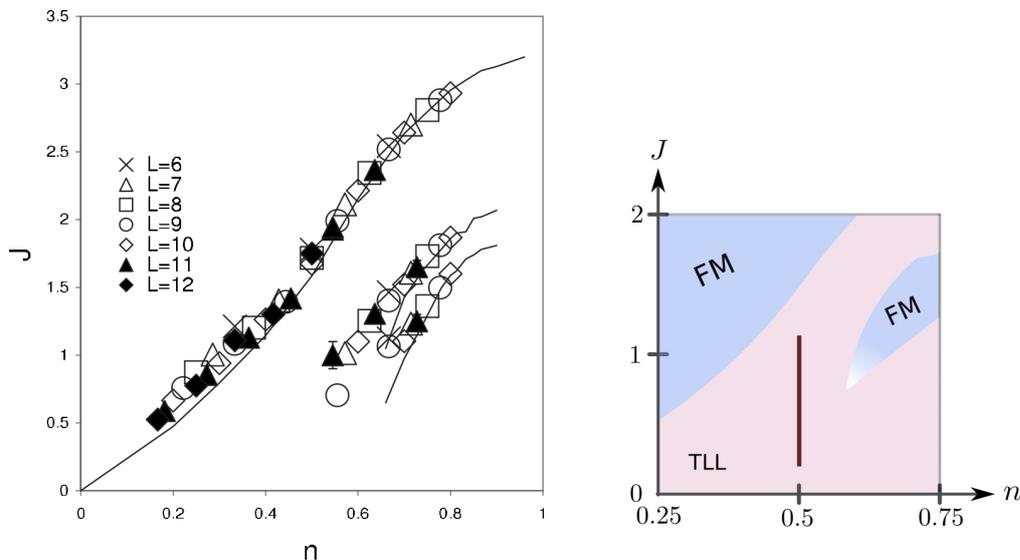


図 1.9 3 局在スピン系に対する先行研究 (画像は [45] より引用). 相互作用  $J$  が弱い領域において、各種のスピン間相関関数が系のサイズ  $L$  に大きく依存していることがわかる.

DMRG 法は、 $f$  電子系の数理模型である一次元近藤格子模型に対しても適用が行われている. 図 1.10 に示すように強磁性相・常磁性相の間の相境界については厳密対角化法により取り扱えるサイズの結果と相違ない結果が得られている [48, 49]. 一方で、伝導電子密度が  $n_c = 1/2$  という整合フィリングの条件下で実現する絶縁相の存在が DMRG 法により示されているが [50–52], 厳密対角化法ではこの絶縁相は得られていない. これは、系のサイズ効果が相図の決定における困難を招くことを示している. さらに、DMRG 法は厳密対角化をはるかに超えるシステムサイズを取り扱えるにも関わらず、相互作用  $J$  が弱い領域についてはサイズ効果による影響が依然として顕著であることが指摘されており [53], 前述した少数不純物系と同様得られた結果が熱力学極限においても実現する相なのかを判断することが困難になっている.



(a) 厳密対角化法 [48]

(b) DMRG 法 [52]

図 1.10 (a) 厳密対角化法および (b) DMRG 法による 一次元近藤格子模型の基底状態相図 (画像はそれぞれ [48] および [52] より引用). 横軸は伝導電子密度  $n$  であり縦軸は相互作用  $J$  である.  $J$  の大きい領域における強磁性相や  $n \approx 0.7, J \approx 1.5$  に存在する強磁性相がいずれの手法でも確認されている. 一方で,  $n = 1/2$  の絶縁相 (図 (b) 実線) は DMRG 法でのみ指摘されている.

## 1.5 少数量子ドット系の理論模型

以上の量子ドット系における実験および理論研究の現状を踏まえて, 本研究では量子ドットが量子細線中の伝導電子と相互作用している状況を想定し, 以下の「一次元少数不純物近藤系」:

$$\mathcal{H} = -t \sum_{i=0}^{L-2} \sum_{\sigma=\{\uparrow,\downarrow\}} \left( c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + \text{h.c.} \right) + \sum_{j \in I} \frac{J_j}{2} \sum_{\sigma\sigma'} c_{x_j\sigma}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} c_{x_j\sigma'} \cdot \mathbf{S}_j \quad (1.40)$$

を理論模型として用いる. ここで,  $\mathbf{S}_j$  が位置  $x_j$  に配置された量子ドット中の局在スピン ( $S = 1/2$ ) に対応し, 同位置に存在する伝導電子と強さ  $J_j$  の交換相互作用により結合している. また,  $I$  は局在スピンのラベルの集合であり, 本研究では“少数”不純物を対象とすることから,  $|I| \ll L$  とする.

本模型で想定する量子ドットと量子細線が結合した系は, 図 1.11 に示すように 2 量子ドットに対しては実現されていることから [54], より複雑な系についても作製は現実的であるといえる.

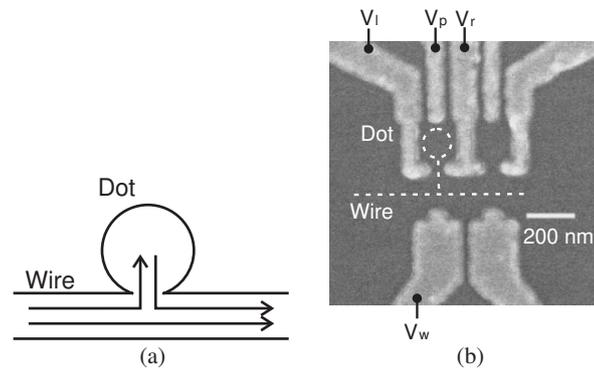


図 1.11 2つの横型量子ドットと量子細線が結合した系 (画像は [54] より引用).

## 1.6 本研究の目的

これまでの局在・遍歴電子系の中心的な研究対象は、 $f$ 電子系をはじめとする実在物質であった。一方で、半導体加工技術の進展により、量子ドットを用いて少数の局在スピンの伝導電子が相互作用する系（少数不純物近藤系）を人工的に実現することが可能になっている。

少数不純物近藤系は、量子ドットを用いた量子デバイスを想定することで自然に現れるにも関わらず、境界条件がもたらす困難さによって、量子相関を正確に取り扱った解析が系統的には行われていない。そこで本研究では、境界条件の影響を考慮しつつ少数不純物近藤系の実空間解析を行うことで、少数不純物近藤系において実現する局在スピン構造を広く調べるとともに、一不純物系を特徴づけていた近藤一重項状態とは異なる、新たな量子多体状態の存在を明らかにすることを第一の目的とする。

局在スピン構造そのものに加えて、近藤効果により生じる伝導電子状態（近藤雲）は、局在・遍歴電子系の基礎物理学に残された未解明な問題の一つである。加えて、近藤雲の大きさは量子ドットの構造長と同程度になることから、そのミクロスコピックな理解は量子ドットの応用においても必要不可欠になると考えられる。近藤雲は一不純物においても未解明な点が多いが、複数の局在スピが存在する系における近藤雲については、RKKY相互作用の存在によりその詳細が全く未解明である。そこで本研究では、実空間解析により一不純物の近藤雲を解析しその結果を先行研究と比較するとともに、少数不純物近藤系における近藤雲を解析することで、複数の局在スピが近藤雲へ与える影響を明らかにすることを第二の目的とする。

## 第 2 章

# 計算手法

### 2.1 密度行列くりこみ群法

#### 2.1.1 量子多体問題の数値的取り扱いにおける困難さ

電子物性の理論研究においては、物理系を格子系のハミルトニアン  $\mathcal{H}$  としてモデル化したうえで問題を考察するという方法が広く用いられている。物理系の平衡状態における性質は、ハミルトニアンの固有状態を知ることができれば平衡統計力学の手続きにより計算することができる。そこで、ハミルトニアンを適当な多体基底  $|i\rangle$  により表現することで行列：

$$H_{ij} = \langle i | \mathcal{H} | j \rangle \quad (2.1)$$

を構成し、 $H_{ij}$  の固有値問題を解くことが目的となる。典型的な例として、一つの格子点（サイト）あたり 2 自由度を持つサイト数  $L$  の物理系（例： $S = 1/2$  スピン系）を考えると、多体基底  $|i\rangle$  は  $2^L$  次元となり、長さ  $L$  に対して次元が指数関数的に増大する。そのため、行列  $H_{ij}$  を数値計算により対角化する「厳密対角化法」による計算は、スーパーコンピュータを用いたうえで低エネルギーの固有状態に限ったとしても  $L < 50$  程度が限界である [55]。

以上の問題から、量子モンテカルロ法などをはじめとして、厳密対角化法によらない数値計算手法が開発されている。それらの手法の一つが本章で解説する密度行列くりこみ群法である。

#### 2.1.2 密度行列くりこみ群法（DMRG 法）の概要

密度行列くりこみ群（Density Matrix Renormalization Group; DMRG）法は、格子系のハミルトニアンに対する基底状態を数値計算するアルゴリズムである [56, 57]。歴史

的には、数値くりこみ群 (Numerical Renormalization Group; NRG) 法が、近藤効果をほぼ完全に解決したといえるほど劇的な成功を収めたが [9], NRG 法を一般の格子系に対して適用する試みは困難を伴うことが指摘された [58]. この問題を密度行列の視点から解決したのが DMRG 法である.

次節以降にその原理や詳細な手続きを解説するが、以下に DMRG 法の特徴についてまとめしておく:

#### 利点

- $L \sim 10^3$  といった大きな系を取り扱うことができる
- 計算において恣意的な近似や波動関数の選択が存在しない
- 計算精度を客観的な指標により評価できる

#### 欠点

- 1次元系が主な対象であり、2次元以上の系は計算が困難
- 励起状態の取り扱いが困難

### 2.1.3 DMRG 法の基本原理

DMRG 法の中心となる原理は、多体波動関数の情報圧縮にある. この点を説明する準備として、まず、考えている量子系を部分系  $A$ ,  $B$  に分割する. 全系における任意の波動関数  $|\psi\rangle$  は、各部分系における完全正規直交系  $|i_A\rangle$ ,  $|i_B\rangle$  を用いて、

$$|\psi\rangle = \sum_{i_A=1}^{n_A} \sum_{i_B=1}^{n_B} \psi_{i_A i_B} |i_A\rangle \otimes |i_B\rangle \quad (2.2)$$

と書ける (Schmidt 分解). 係数  $\psi_{i_A i_B}$  は、 $n_A \times n_B$  個の自由度を持っているが、これを極力情報を失うことなくより小さな自由度で表現したい.  $\psi_{i_A i_B}$  は  $n_A \times n_B$  行列とみなせるが、一般の行列に対して次に示す Eckart-Young の定理が成り立つ [59]:

**定理.** 行列  $A$  の特異値分解を

$$A = U \Sigma V^\dagger = \sum_{i=1}^{\text{rank}(A)} \mathbf{u}_i \sigma_i \mathbf{v}_i^\dagger$$

とする ( $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots$ ). また右辺の和を  $\chi$  で打ち切った行列を

$$A_\chi = \sum_{i=1}^{\chi} \mathbf{u}_i \sigma_i \mathbf{v}_i^\dagger$$

で定義する。このとき、

$$\min_{Z \text{ s.t. } \text{rank}(Z) \leq \chi} \|A - Z\|_F = \|A - A_\chi\|_F$$

が成り立つ。ここで  $\|A\|_F = \sum_{ij} |A_{ij}|^2$  (Frobenius ノルム) である。

この定理により、波動関数  $\psi_{i_A i_B}$  を次元  $\chi < \text{rank}(\psi)$  で表現するとき、(Frobenius ノルムの意味で) 最良の近似は特異値分解を途中で打ち切ることで

$$\psi_{i_A i_B} \approx \tilde{\psi}_{i_A i_B} = \sum_{\alpha=1}^{\chi} U_{i_A \alpha} \sigma_\alpha V_{i_B \alpha} \quad (2.3)$$

となる (行列の低ランク近似)。基底を陽に書けば、

$$\begin{aligned} |\psi\rangle \approx |\tilde{\psi}\rangle &= \sum_{i_A=1}^{n_A} \sum_{i_B=1}^{n_B} \sum_{\alpha=1}^{\chi} U_{i_A \alpha} \sigma_\alpha V_{i_B \alpha} |i_A\rangle \otimes |i_B\rangle \\ &= \sum_{\alpha=1}^{\chi} \sigma_\alpha \left( \sum_{i_A=1}^{n_A} U_{i_A \alpha} |i_A\rangle \right) \otimes \left( \sum_{i_B=1}^{n_B} V_{i_B \alpha} |i_B\rangle \right) \\ &= \sum_{\alpha=1}^{\chi} \sigma_\alpha |\alpha\rangle_A \otimes |\alpha\rangle_B \end{aligned} \quad (2.4)$$

となる。最後の行で各部分系における基底  $|\alpha\rangle_A, |\alpha\rangle_B$  を定義した。

以上により、多体波動関数を2つの部分系に分けた場合の情報圧縮が可能であることがわかった。この時点では既知の波動関数を情報圧縮しただけに過ぎないが、「各部分系における基底をより少ない基底に線形変換する」という発想は DMRG 法の基本原理になっている。

### 2.1.4 特異値分解と縮約密度行列

前節で述べた特異値分解による圧縮は Frobenius ノルムの意味での情報圧縮であった。本節では、この圧縮の物理的意味について述べる。

系の密度行列：

$$\rho_{i_A i_B, i'_A i'_B} = \psi_{i_A i_B} \psi_{i'_A i'_B}^* \quad (2.5)$$

を定義し、部分系  $B$  についてのみ対角和をとる (部分系  $B$  を trace out する) ことで得られる部分系  $A$  の縮約密度行列：

$$\rho_{i_A i'_A}^{(A)} = \text{Tr}_B[\rho] = \sum_{i_B} \rho_{i_A i_B, i'_A i_B} \quad (2.6)$$

を考える．これに波動関数の特異値分解を代入すると，

$$\begin{aligned}
 \rho_{i_A i'_A}^{(A)} &= \sum_{i_B} \rho_{i_A i_B, i'_A i_B} \\
 &= \sum_{i_B} \left( \sum_{\alpha} U_{i_A \alpha} \sigma_{\alpha} V_{i_B \alpha} \right) \left( \sum_{\alpha'} U_{i'_A \alpha'}^* \sigma_{\alpha'} V_{i_B \alpha'}^* \right) \\
 &= \sum_{\alpha} U_{i_A \alpha} \sigma_{\alpha}^2 U_{i'_A \alpha}^* \tag{2.7}
 \end{aligned}$$

を得る．ここで，ユニタリ変換の性質  $\sum_{i_B} V_{i_B \alpha} V_{i_B \alpha'}^* = \delta_{\alpha \alpha'}$  を用いた．この式は，行列  $\rho_{i_A i'_A}^{(A)}$  の対角化そのものであり，基底を陽に書けば，

$$\rho^{(A)} = \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha}^2 |\alpha\rangle_A \langle \alpha|_A \tag{2.8}$$

となる．すなわち，特異値分解により得られる重みの二乗  $\sigma_{\alpha}^2$  は，縮約密度行列の文脈では「部分系  $A$  における基底  $|\alpha\rangle_A$  の出現確率を混合状態として評価した際の重み」であるといえる．したがって，特異値分解の後に  $\sigma_{\alpha}$  の大きなものから  $\chi$  個のみ和を取るという操作は，部分系  $A$  の基底のうち出現確率が大きなものから順に情報を残すことに等しく，波動関数の最良の近似として妥当であることがわかる．なお，部分系  $B$  に対しても全く同様の議論ができ，その際重み  $\sigma_{\alpha}^2$  は部分系  $A, B$  に共通である．

### 2.1.5 テンソルネットワークによる波動関数・演算子の記述

以上までに DMRG 法の中心となる原理について解説したが，これまでの式変形でも明らかのように，DMRG 法に関連した多体波動関数の取り扱いにおいてはテンソルの縮約が多数現れる．そこで本節では，テンソルの縮約により記述されるオブジェクト（テンソルネットワーク）の記述に便利であるダイアグラム記法について解説する．

テンソルネットワークのダイアグラム表記におけるルールは以下のとおりである：

1. テンソル変数を好みの図形により表し，添字（足）を図形から突き出た線（外線）として表現する
2. 添字の縮約は，添字に対応する線同士を結ぶことで表現する．これは Einstein の縮約記法に対応する．

図 2.1 に例を示す．(a) はベクトル  $v_i$  および行列  $A_{jk}$  を表す．(b) は行列積  $\sum_l A_{jl} B_{lk}$  であり，図形全体もやはり外線が 2 本になっていることから行列積の結果が行列になることがわかる．(c) は Kronecker のデルタ（点線部）との縮約であるが， $\sum_l A_{jl} \delta_{lk} = A_{jk}$  の関係から Kronecker のデルタは単なる線として表記すれば良いことがわかる．(d) は特

異値分解  $A = U\Sigma V$  を図形的に表したものである。テンソルネットワークにおける図形は任意に設定できるが、対角行列については小さい黒丸として表現することが多い。前節で述べた行列の低ランク近似は  $\Sigma$  へとつながっている線の和を制限することに相当するが、このときに情報が欠落することをわかりやすく表示するために  $U, V$  はあえて非対称な図形として表している。

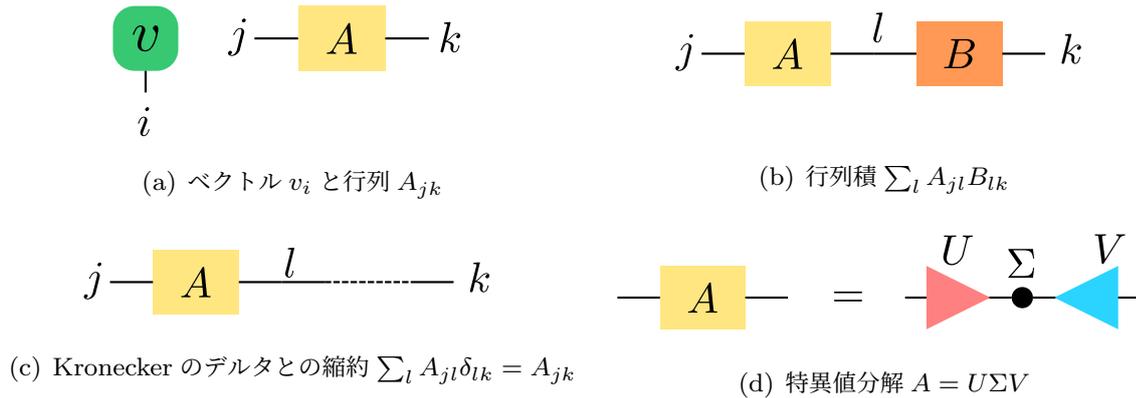


図 2.1 テンソルネットワークの例.

以降では、このテンソルネットワークのダイアグラム記法を用いて DMRG 法を解説していく。なお、テンソルネットワークに関するさらなる解説としては文献 [60] を挙げておく。

### 2.1.6 DMRG 法 - 無限系法

無限系法は、小さなサイズの系から出発し系のサイズを順次拡大しながら基底状態を計算する手法である。具体的には、図 2.2 に示すように、サイト数  $2k$  の系の中央部分に 2 つのサイトを挿入することでサイト数  $2k + 2$  の系に拡大するという操作を繰り返す。

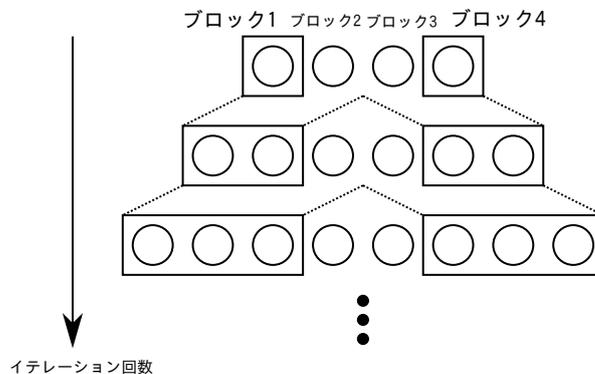


図 2.2 無限系法概念図。系の中央に 2 サイトを挿入するという操作を繰り返すことで系を拡大していく。

ブロック 1, ブロック 4 はいずれもサイト数  $k$  の部分系であり, ブロック 2, ブロック 3 はいずれも 1 サイトである. また, ブロック 1~ブロック 4 を合わせた全系を「スーパーブロック」と呼称する. 各ブロックにおける基底を用いると, スーパーブロックにおける波動関数は一般に

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1 i_2 i_3 i_4} \psi_{i_1 i_2 i_3 i_4} |i_1\rangle |i_2\rangle |i_3\rangle |i_4\rangle \quad (2.9)$$

と記述でき,  $\psi_{i_1 i_2 i_3 i_4}$  に対応するダイアグラムは図 2.3 のように表現できる.

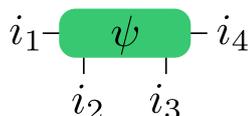


図 2.3 波動関数  $\psi_{i_1 i_2 i_3 i_4}$  のダイアグラム表現

以降では, White により考案された“伝統的な”DMRG の手続きをテンソルネットワークを用いて解説する. 現在では, Matrix Product Operator (MPO) と呼ばれる方法によりハミルトニアンを表現する手法も広く用いられている [61]. MPO による記述は, ハミルトニアンをテンソルの縮約により機械的に生成できるなどいくつかのメリットもあるが, 本節ではハミルトニアンの各項との対応関係が明確な伝統的な DMRG による解説を行う. 伝統的な DMRG の実装方法を具体的について解説した文献としては [62] を, MPO について解説した文献としては [60, 63] を挙げておく.

本解説では, DMRG の原理の解説を目的として, 少数不純物近藤系よりも単純な最隣接ホッピング  $-t$  を持つスピンレスタイトバインディングフェルミオン模型を対象とする:

$$H = -t \sum_{i=1}^{L-1} \left( c_i^\dagger c_{i+1} + \text{h.c.} \right). \quad (2.10)$$

この模型の 1 サイト状態は次の 2 つである:

$$\text{粒子がある状態: } \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \text{粒子がない状態: } \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.11)$$

なお, 少数不純物近藤系をはじめとして, 一般のフェルミオン系についてはフェルミオンの交換関係から生じる符号を取り扱う必要がある. この点については, 付録 A を参照のこと.

本節の解説では無限系法の具体的な手続きのみを記し, その意味については次節において述べる. また, 2.1.6.2~2.1.6.7 の一連の手続きを「イテレーション」という単位で呼称する. 無限系法の各イテレーションでは, 系の拡大, 基底状態の計算, 次のイテレーションへの準備が行われる.

## 2.1.6.1 無限系法の開始

無限系法の最初のステップは  $k = 1$  から開始する. このとき, ブロック 1 およびブロック 4 に含まれるサイト数はいずれも 1 サイトであり, 各ブロックの内側端における消滅演算子  $c_1$  および  $c_4$  の表現は自明である. また, 1 サイトのみに作用するハミルトニアンもないため, それぞれの表現は以下ようになる:

$$c_1 = c_4 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad H_1 = H_4 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.12)$$

## 2.1.6.2 スーパーブロックハミルトニアンの構築

このステップでは, ブロック 1 およびブロック 4 のハミルトニアンの圧縮表現および各演算子の表現からスーパーブロックのハミルトニアンを構築する. ハミルトニアンの表現行列は,  $H_{i_1 i_2 i_3 i_4, i'_1 i'_2 i'_3 i'_4}$  のように各ブロックの基底に対応する添字の自由度を持っている. この計算は図 2.4, 図 2.5 として表現できる.

$$\begin{array}{c} i'_1 \left( \begin{array}{cc} i'_2 & i'_3 \\ \hline \end{array} \right) i'_4 \\ \boxed{H} \\ i_1 \left( \begin{array}{cc} i_2 & i_3 \\ \hline \end{array} \right) i_4 \end{array} = \begin{array}{c} \boxed{H_1} \left| \begin{array}{c} | \\ | \end{array} \right\rangle \\ + \boxed{H_{12}} \left| \begin{array}{c} | \\ | \end{array} \right\rangle \\ + \left( \boxed{H_{23}} \right) \\ + \left( \left| \begin{array}{c} | \\ | \end{array} \right\rangle \boxed{H_{34}} \right) \\ + \left( \left| \begin{array}{c} | \\ | \end{array} \right\rangle \boxed{H_4} \right) \end{array}$$

図 2.4 スーパーブロックハミルトニアンの行列要素  $H_{i_1 i_2 i_3 i_4, i'_1 i'_2 i'_3 i'_4}$  の構築. 右辺の項は順に  $(H_1)_{i_1 i'_1} \delta_{i_2 i'_2} \delta_{i_3 i'_3} \delta_{i_4 i'_4}$ ,  $(H_{12})_{i_1 i_2, i'_1 i'_2} \delta_{i_3 i'_3} \delta_{i_4 i'_4}$  などに対応する. また  $H_{12}$ ,  $H_{23}$ ,  $H_{34}$  はブロック間のホッピングを表し, 図 2.5 に示すように構築する.

$$\left( \boxed{H_{12}} \left| \begin{array}{c} | \\ | \end{array} \right\rangle \right) = -t \left( \begin{array}{c} \boxed{c_1^\dagger} \boxed{c_2} \\ \left| \begin{array}{c} | \\ | \end{array} \right\rangle \end{array} \right) + \text{h.c.}$$

図 2.5 ブロック間ホッピング要素の構築.  $(c_1^\dagger)_{i_1 i'_1}$  は一回前のイテレーションで生成したものを利用する.  $(c_2)_{i_2 i'_2}$  は自明な表現を利用すれば良い.  $H_{23}$ ,  $H_{34}$  も同様に構築する.

## 2.1.6.3 基底状態の計算

構築したスーパーブロックハミルトニアンを Lanczos 法などを用いて数値対角化し, 基底状態を得る. 固有方程式に対応するダイアグラムを図 2.6 に示す.

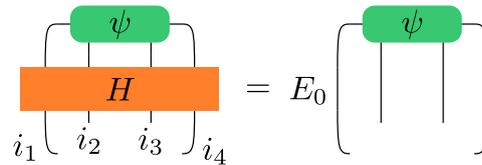


図 2.6 固有方程式  $H|\psi\rangle = E_0|\psi\rangle$  のダイアグラム表現.

#### 2.1.6.4 縮約密度行列の作成

2.1.4 節で述べた基底の変換行列を得るために、ブロック 1 と 2 からなる「左部分系」、ブロック 3 と 4 からなる「右部分系」それぞれに対する縮約密度行列  $\rho_L$ ,  $\rho_R$  を作成する。これは式 (2.6) に相当し、ダイアグラムでは図 2.7 のようになる。



図 2.7 左系 (ブロック 1, 2), 右系 (ブロック 3, 4) に対する縮約密度行列  $\rho_L$ ,  $\rho_R$ .

#### 2.1.6.5 縮約密度行列の対角化と基底変換行列

式 (2.7) と同様に各縮約密度行列を対角化する (Householder+QR 法などが用いられる)。縮約密度行列  $\rho$  を対角化する行列を  $U$ , 固有値を対角成分に並べた行列を  $\text{diag}(w_1, w_2, \dots)$  ( $w_1 \geq w_2 \geq \dots$ ) とすると,

$$U^\dagger \rho U = \text{diag}(w_1, w_2, \dots) \iff \rho = U \text{diag}(w_1, w_2, \dots) U^\dagger \quad (2.13)$$

であることから、対応するダイアグラムは図 2.8 のようになる。



図 2.8 縮約密度行列  $\rho_L$ ,  $\rho_R$  の対角化. 左, 右部分系を対角化する行列がそれぞれ  $U$ ,  $V$  である. また黒丸は対角行列  $\text{diag}(w_1, w_2, \dots)$  であり, 左系, 右系に共通である.

以上得られたテンソル  $U$ ,  $V$  が, それぞれ左系, 右系に対する基底変換を担う. 各添字からも明らかのように, テンソル  $U$  はブロック 1, ブロック 2 の直積空間における基底

$|i_1\rangle \otimes |i_2\rangle$  から基底  $|\alpha\rangle$  へと変換を行う。同様に  $V$  はブロック 3, ブロック 4 の直積空間における基底  $|i_3\rangle \otimes |i_4\rangle$  から基底  $|\beta\rangle$  への変換である。この関係を図 2.9 に示す。



図 2.9 基底変換テンソル.  $U$  は左系において, 基底変換  $|i_1\rangle \otimes |i_2\rangle \rightarrow |\alpha\rangle$  を行う.  $V$  は右系において, 基底変換  $|i_3\rangle \otimes |i_4\rangle \rightarrow |\beta\rangle$  を行う.

この時点ではまだ情報の圧縮は行われていない。しかし, 2.1.4 節でも述べたように, 添字  $\alpha$  (および  $\beta$ ) に対する和を固有値  $w_\alpha$  の大きいものから  $\chi$  個に対応するものだけに制限することで, 情報の圧縮を行うことができる。圧縮により失った情報量の尺度は truncation error と呼ばれており, 失った Frobenius ノルムにより定義される:

$$\text{Truncation error} = 1 - \sum_{\alpha=1}^{\chi} w_\alpha. \tag{2.14}$$

この基底の削減により,  $U, V$  はユニタリ変換 (正方行列) ではなく, 等長変換 (isometry; 長方形列) となる。そのため, 図 2.10 に示すように, 圧縮後の基底は直交するが, 圧縮前の基底に対する直交性は復元できないことに注意が必要である。

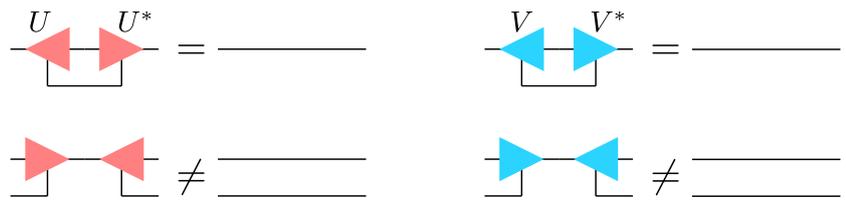


図 2.10 等長変換における基底の直交性. 上段は圧縮後の基底に対する直交性があることを示している。一方で, 下段に示したように圧縮前の基底の直交性は失われる。これらの差は「どちらの転置をとるか (どの添字の縮約をとるか)」によるものであり, 「どちらの複素共役をとるか」によるものではないことに注意。

### 2.1.6.6 ブロックハミルトニアンおよび演算子の生成

次のイテレーションにおいてスーパーブロックハミルトニアンを構成する際に必要となる演算子を準備する。該当する演算子は, 左, 右部分系の各ブロックハミルトニアン  $H_L, H_R$ , および, 左, 右部分系の内側端 (ブロック 2, ブロック 3 の位置に相当) の各消滅演算子  $c_L, c_R$  である (生成演算子は消滅演算子のエルミート共役として得られるので別途計算する必要はない)。具体的には図 2.11 の計算を行えばよい。

$$\begin{array}{cc}
 \begin{array}{c} i'_1 \quad i'_2 \\ \boxed{H_L} \\ i_1 \quad i_2 \end{array} = \begin{array}{c} \boxed{H_1} \\ | \\ \boxed{H_{12}} \end{array} + \begin{array}{c} \boxed{H_{12}} \\ | \\ \boxed{H_1} \end{array} & 
 \begin{array}{c} i'_3 \quad i'_4 \\ \boxed{H_R} \\ i_3 \quad i_4 \end{array} = \begin{array}{c} \boxed{H_4} \\ | \\ \boxed{H_{34}} \end{array} + \begin{array}{c} \boxed{H_{34}} \\ | \\ \boxed{H_4} \end{array} \\
 \begin{array}{c} i'_1 \quad i'_2 \\ \boxed{c_L} \\ i_1 \quad i_2 \end{array} = \begin{array}{c} \boxed{c_2} \\ | \\ \boxed{c_2} \end{array} & 
 \begin{array}{c} i'_3 \quad i'_4 \\ \boxed{c_R} \\ i_3 \quad i_4 \end{array} = \begin{array}{c} \boxed{c_3} \\ | \\ \boxed{c_3} \end{array}
 \end{array}$$

図 2.11 次のイテレーションに必要な演算子の生成. なお,  $c^\dagger$  は  $c$  のエルミート共役として得られるので別途計算する必要はない.

### 2.1.6.7 演算子の基底変換

基底変換行列を用いて, 次のイテレーションで使用する演算子を新たな基底へと変換する. これを図 2.12 に示す.

$$\begin{array}{cc}
 \begin{array}{c} i_1^{\text{next}} \\ \boxed{H_1^{\text{next}}} \\ i_1^{\text{next}} \end{array} = \begin{array}{c} \boxed{H_L} \\ \begin{array}{c} \xrightarrow{U} \\ \xleftarrow{U^*} \end{array} \end{array} & 
 \begin{array}{c} i_4^{\text{next}} \\ \boxed{H_4^{\text{next}}} \\ i_4^{\text{next}} \end{array} = \begin{array}{c} \boxed{H_R} \\ \begin{array}{c} \xleftarrow{V} \\ \xrightarrow{V^*} \end{array} \end{array} \\
 \begin{array}{c} i_1^{\text{next}} \\ \boxed{c_1^{\text{next}}} \\ i_1^{\text{next}} \end{array} = \begin{array}{c} \boxed{c_L} \\ \begin{array}{c} \xrightarrow{U} \\ \xleftarrow{U^*} \end{array} \end{array} & 
 \begin{array}{c} i_4^{\text{next}} \\ \boxed{c_4^{\text{next}}} \\ i_4^{\text{next}} \end{array} = \begin{array}{c} \boxed{c_R} \\ \begin{array}{c} \xleftarrow{V} \\ \xrightarrow{V^*} \end{array} \end{array}
 \end{array}$$

図 2.12 次のイテレーションに必要な演算子の基底変換.

以上により, 次のイテレーションに必要な情報が構築できた. したがって,  $H_1^{\text{next}} \rightarrow H_1$ ,  $H_4^{\text{next}} \rightarrow H_4$ ,  $c_1^{\text{next}} \rightarrow c_1$ ,  $c_4^{\text{next}} \rightarrow c_4$  とし, 系のサイズを  $k \rightarrow k+1$  とすれば, 無限系法の手続きを繰り返すことができる (手順 2.1.6.2 に戻る).

### 2.1.7 無限系法は何をしているか

前節で解説したように, 無限系法は系の漸次的拡大と基底状態の計算を繰り返す手法である. このプロセスを注意深く追跡すると, スーパーブロックのサイズが  $L$  まで拡大されたときのスーパーブロックハミルトニアンは, 図 2.13 に示すように, 全系のハミルトニアンの圧縮表現に等しい.

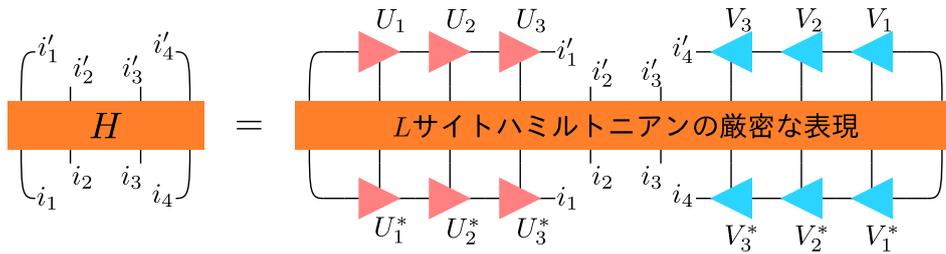


図 2.13 スーパーブロックが  $L = 10$  になったときのハミルトニアン表現. 左辺は図 2.4 であり, それが構築されるまでのプロセスを追跡すると,  $L$  サイトハミルトニアンの表現を圧縮したものと等価であることがわかる. なお  $U_k, V_k$  は  $k$  ステップ目で得られた基底変換テンソルである.

したがって, 無限系法は

**$L$  サイトハミルトニアンを中央 2 サイトにおける  
有効ハミルトニアンへと射影するアルゴリズム**

という見方ができる. 一方で, このハミルトニアンに対する基底状態を計算し,  $\langle \psi | H | \psi \rangle = E_0$  に相当するダイアグラムを書くと図 2.14 のようになる.

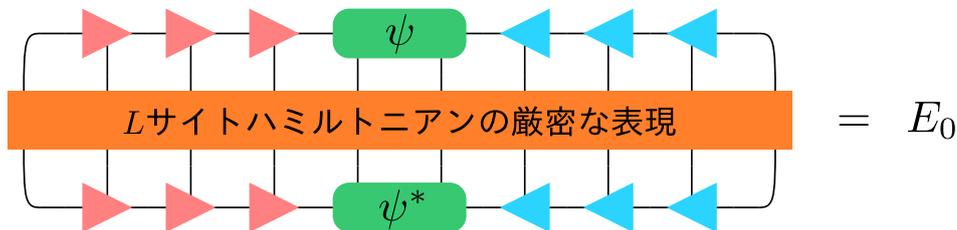


図 2.14 基底状態  $|\psi\rangle$  に対する式  $\langle \psi | H | \psi \rangle = E_0$  のダイアグラム表現.

図 2.14 より, 図 2.15 に示したダイアグラムが全系における波動関数に対応することがわかる.

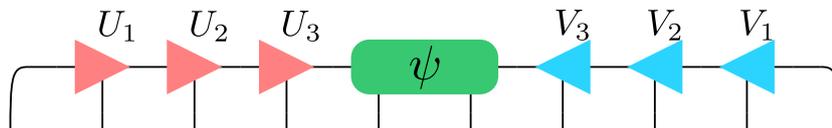


図 2.15 DMRG により生成された全系の行列積型波動関数 (Matrix Product State; MPS)

このように, 複数のテンソルを縮約することで表現された波動関数は行列積状態 (Matrix Product State; MPS) やテンソル積状態 (TPS) と呼ばれる. したがって, 無限系法のもう一つの見方は

**$L$  サイト系の MPS 型波動関数を**

### 系の漸次的拡大により構成していくアルゴリズム

といえる。

無限系法では、 $2k$  サイト系の基底状態から得られる基底を用いて  $2k + 2$  サイト系の Hilbert 空間を表現しており、これがうまく機能するという保証はない。それにもかかわらず無限系法が実用上問題なく機能するのは以下の 2 点によると考えられる：

- $k$  が小さい間はそれほど基底を削減する必要がないため、厳密な (= 情報圧縮をしない) 計算に近いことが期待できる
- $k$  が大きくなると、部分系の大きさの相対的な変化  $(k + 1)/k$  が小さくなるため、採用すべき基底の構造が近くなることが期待できる

特に、基底状態 (またはサイトあたりの平均エネルギー) が変化しなくなるまで無限系法を繰り返したとすると、これはサイトを付け加えても系の状態が変化しない「固定点」に収束したとみなせる。すなわち、この収束をもって無限系の波動関数が得られたと考えることができ、これが「無限系法」と呼ばれる所以である。

一方、目的のサイト数  $L$  の系における波動関数を MPS の範囲でなるべく正確に表現したい場合には、上述したように基底選択の良し悪しの保証がないという点が精度を低下させる要因になりうる。この問題を解決するのが、次節で解説する「有限系法」である。

#### 2.1.8 DMRG 法 - 有限系法

無限系法による MPS の構成手順を顧みると、 $U_k, V_k$  は全系の長さが  $2k + 2$  のときの基底状態を最適化するように選択されており、最終的に得られた長さ  $L$  の系の基底状態を表現するテンソルとして最適である保証はない。そこで、長さ  $L$  の有限系に対して各テンソル  $U_k, V_k$  を最適化するアルゴリズムが本節で解説する「有限系法」である。

有限系法ではスーパーブロックの長さを  $L$  に固定した上で、ブロック 2, 3 の位置を一つずつずらしながら基底状態を計算することで  $U_k, V_k$  を更新していく (図 2.16)。この処理は、系全体を掃引するよう見えることから sweep とも呼ばれる。各イテレーションで行う具体的な処理は無限系法とほとんど同一である。有限系法では、無限系法が終了した後、 $k = L/2 + 1$  として以下の処理を行う：

1. ブロック 1 の長さを  $k$ , ブロック 4 の長さを  $L - k - 2$  としたスーパーブロックハミルトニアンを構成と対角化を行う。
2. 縮約密度行列の生成・対角化を行い、テンソル  $U_k, V_k$  を求める。
3. 次のイテレーションに必要な演算子の表現を求める。右方向に sweep 中であれば  $H_1$  と  $c_1$  を、左方向に sweep 中であれば  $H_4$  と  $c_4$  を構成すればよい。

4. 右方向に sweep 中であれば,  $k \rightarrow k + 1$  として手順 1 に戻る. 左方向に sweep 中であれば  $k \rightarrow k - 1$  として手順 1 に戻る. また, 系の端に到達したら, 進行方向を反転し手順 1 に戻る.

以上の処理を基底状態 (基底エネルギー) が収束するまで繰り返すことで, 長さ  $L$  の系の基底状態を表現するテンソル  $U_k, V_k$  を構成することができる.

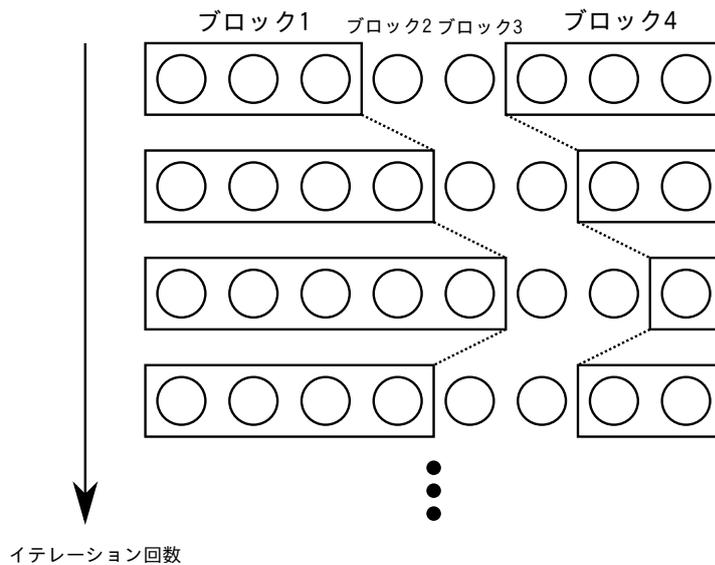


図 2.16 有限系法の概念図. 最上段は無限系法の最後のイテレーションによりスーパーブロックの長さが  $L$  となった時点を表す. そこから, ブロック 2, 3 の位置をずらしながら系全体を掃引することで MPS を最適化していく.

有限系法の各イテレーションにおける処理は, 図 2.17 に示すように, 中央以外の場所における 2 サイト有効ハミルトニアンを計算していると見る事ができる. また, このとき対応する MPS は図 2.18 のようになる.

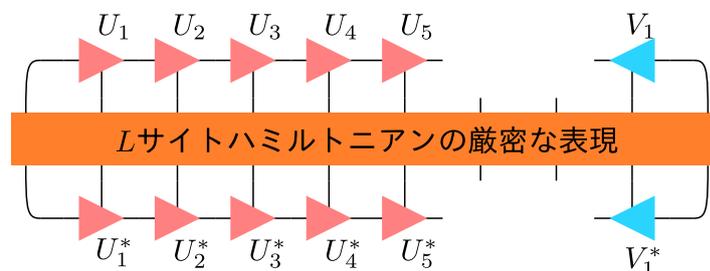


図 2.17 有限系法におけるスーパーブロックハミルトニアン of 例 ( $L = 10, k = 5$ ). 図 2.13 とは異なり, 系の中央以外の 2 サイトに対する有効ハミルトニアンとなっている.

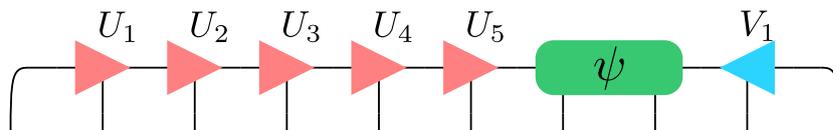


図 2.18 有限系法における MPS ( $L = 10, k = 5$ ).  $\psi$  で示したテンソルの位置が動いていくことで、すべての  $U_k, V_k$  を最適化していく。

以上までに述べたように、有限系法は各テンソル  $U_k, V_k$  を  $L$  サイトハミルトニアン基底状態に近づくよう最適化していくアルゴリズムである。すなわち、有限系法は

### MPS 型波動関数を試行関数とする変分法

であるということができる。変分法と呼ばれるアルゴリズムの多くは試行関数を主観的に選択する余地があるが、DMRG 法における試行関数は、情報圧縮で残す基底の数  $\chi$  が唯一のハイパーパラメータになっており、試行関数の恣意性がほとんどないという特徴がある。

#### 2.1.9 DMRG 法における物理量の計算

有限系法を繰り返し行うことで基底エネルギー（基底状態）が収束した後、物理量の計算を行う。例えば  $L = 10$  の系で 7 番目のサイトの電荷密度を求めたい場合には、電荷密度演算子の表現：

$$n^{(7)} = n = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.15)$$

を用いて図 2.19 の物理量を計算することになる。左辺が MPS により表現した期待値  $\langle \psi | n^{(7)} | \psi \rangle$  であるが、図 2.10 の関係を繰り返し用いて系の両端から“ジッパーを閉じていく”ことで、結局右辺の量を計算するだけで良いことがわかる。

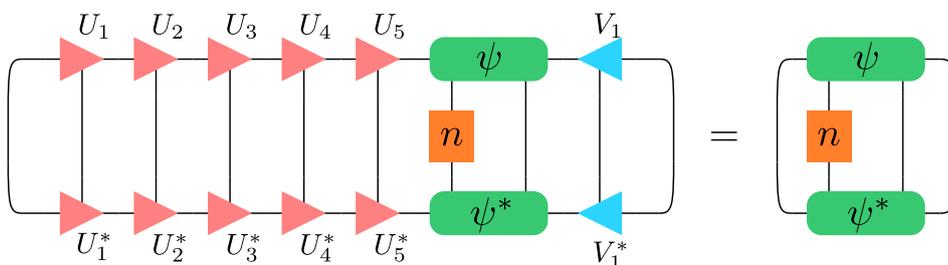


図 2.19 7 番目のサイトにおける電荷期待値に対応するダイアグラム。図 2.10 の関係を繰り返し用いて“ジッパーを閉じていく”ことで右辺の表現を得る。

したがって 1 サイト演算子の期待値は、有限系法の sweep をしながら期待値を計算した

いサイトとブロック 2 が一致したところで図 2.19 右辺の量を計算すればよい。同様に最近接サイト相関についても同じ方法により計算できる。

一方、長距離の相関関数の計算はより複雑である。例として 3 番目のサイトと 7 番目のサイトの電荷相関  $\langle \psi | n^{(3)} n^{(7)} | \psi \rangle$  を考える。対応するダイアグラムは図 2.20 のようになり“ジッパーを閉じきる”ことができない。そのため、図 2.21 に示す演算子の表現を追跡する必要がある。

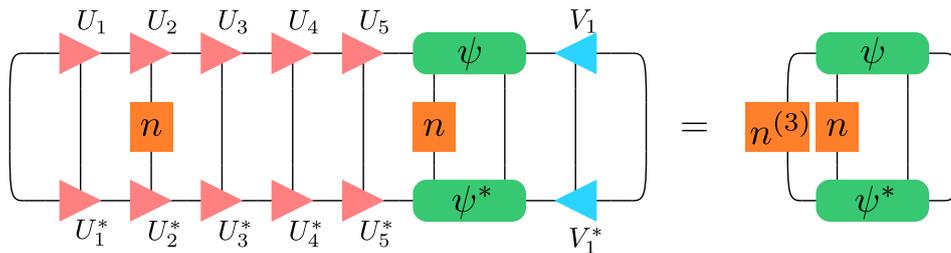


図 2.20 長距離の電荷相関  $\langle \psi | n^{(3)} n^{(7)} | \psi \rangle$  に対応するダイアグラム。長距離相関を計算するために、右辺における演算子  $n^{(3)}$  (図 2.21) が必要になる。

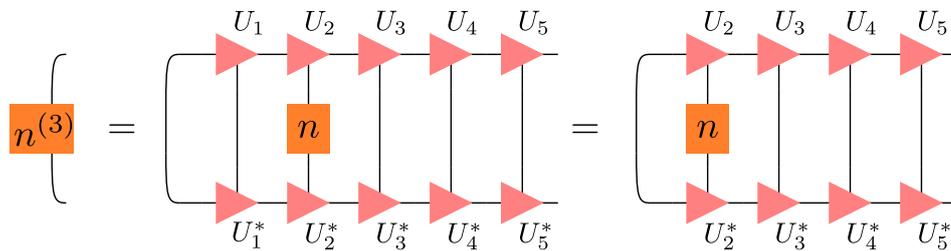


図 2.21 長距離の電荷相関の計算に必要な電荷演算子  $n^{(3)}$  の表現。

この演算子の追跡は以下の手順で行うことができる。

1. sweep 中に 3 番目のサイトとブロック 2 が一致した時点で、 $c_2 = c_L$  を作成するときと同様に  $n^{(3)}$  の表現を作成する (図 2.11 に対応)。
2. 作成した表現を  $c_L$  と同様に基底変換することで新しいブロック 1 における表現に変換する (図 2.12 に対応)。
3. その後の sweep の過程では、組み込んだ演算子の基底変換を繰り返す。
4. 7 番目のサイトとブロック 2 が一致した段階で、図 2.20 右辺の量を計算し結果を得る。

### 2.1.10 初期波動関数の類推 (canonical center の移動)

既に述べたように、有限系法の過程においては図 2.17 に示した有効ハミルトニアンに対する対角化を行う。この数値対角化では Lanczos 法を用いることができるが、Lanczos 法の初期ベクトルを基底状態に近い状態に選ぶことで速やかな収束が期待できる [64]。本節ではこれをテンソルネットワークを用いて解説する。

有限系法の sweep は、基底状態の計算と着目するサイトを一つずらすという処理の繰り返しであった。ここでは右向きに sweep している状況を仮定すると、図 2.22 に示すように、基底状態  $\psi$  を次のステップにおける基底による表現に変換することで  $\psi'$  とし、この  $\psi'$  を Lanczos 法の初期ベクトルとして用いることで収束を速めることができると考えられる。

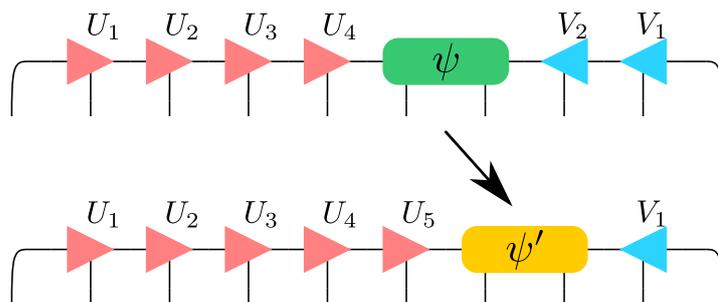


図 2.22 基底状態の基底変換。図は右向きに sweep している状況を示している。 $k=4$  のステップで得られた基底状態  $\psi$  を  $k=5$  における基底による表現へと変換し  $\psi'$  を得ることができれば、この  $\psi'$  を Lanczos 法の初期ベクトルとして用いることができる。

ここで、2.1.4 節で触れたように波動関数  $\psi$  は縮約密度行列を対角化する行列  $U, V$  により特異値分解できることを用いると、いま求めたいテンソル  $\psi'$  を図 2.23 の一点鎖線部のように表すことができる。

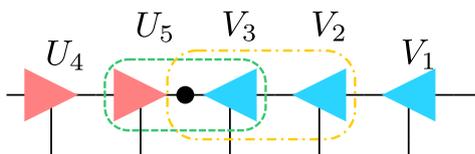


図 2.23 基底変換を行いたい部分の詳細。縮約密度行列を対角化する行列  $U, V$  を用いて  $\psi$  を特異値分解により表す (点線)。ここで黒丸は対角行列  $\text{diag}(\sqrt{w_1}, \sqrt{w_2}, \dots)$  である。点線が  $\psi$  であり、一点鎖線がいま求めたい  $\psi'$  となる。

この図から、求めたい  $\psi'$  は図 2.24 のように計算すれば良いことがわかる。

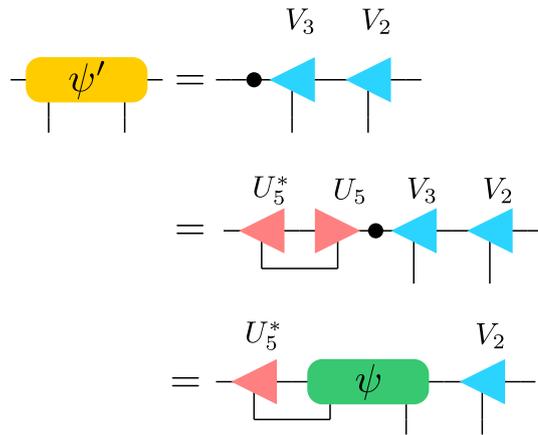


図 2.24  $\psi'$  の計算. 図 2.10 の関係を用いることで結局最右辺のテンソル縮約を行えば良いことがわかる.

ここで 2 段目への変形で図 2.10 の直交関係を用いた. なお, 1 段目右辺の量を直接計算しても特に問題はない. ここで,  $\psi$  と縮約をとる  $U_5^*$  については  $\psi$  から作成した縮約密度行列を対角化することで得られるが,  $V_2$  については“一周前”に左向きに sweep していた際に計算したテンソルを用いる必要があることに注意を要する. なお,  $\psi$  が存在する位置は通例“canonical center”と呼ばれており, 本節で解説した計算は canonical center の移動を行っているといえる.

以上の方法により  $\psi'$  が得られることがわかった. この手法を用いることで Lanczos 法を速やかに収束させることができるが, さらに  $\psi'$  は  $\psi$  を基底変換したものであることから,  $\psi'$  と Lanczos 法により得られた基底状態  $\psi_{GS}$  の内積を取ることで波動関数の収束を評価することができる. すなわち, 図 2.25 に示すように内積を計算することで,  $|\langle \psi | \psi_{GS} \rangle| \approx 1$  となれば全系の基底状態を単一の MPS として表現できたことになる.

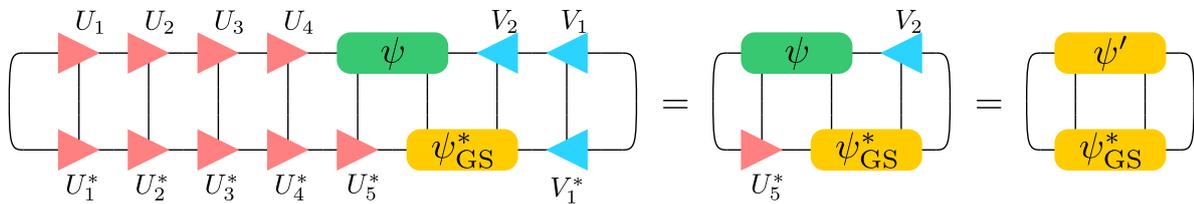


図 2.25 内積  $\langle \psi_{GS} | \psi \rangle$  の計算. この計算は右辺に示すように  $\psi'$  がわかっているならば計算可能であり,  $|\langle \psi_{GS} | \psi \rangle| \approx 1$  となれば全系の波動関数が単一の MPS で表現できたことになる.

## 2.2 正弦二乗変形

DMRG 法により数百サイトを越える大きな系を扱えるようになると、開放端条件により生じる影響を極力抑えるために、系の端に向かって滑らかに 0 になる境界条件を適用しようという試みが行われた [65, 66]. 正弦二乗変形 (Sine Square Deformation; SSD) は、このような滑らかな境界条件の一種である [67]. 具体的には、長さ  $L$  の一次元格子系に対して以下の式:

$$f_{\delta}(i) = \sin^2 \left[ \frac{\pi}{L} \left( i + \frac{\delta - 1}{2} \right) \right] \quad (2.16)$$

で定義される因子をハミルトニアン各項にかけることでハミルトニアンエネルギースケールを空間的に変調する. ただし、ここでは系の左端のサイトを  $i = 1$ , 右端のサイトを  $i = L$  としている. また、 $\delta$  は

$$\delta = \begin{cases} 0 & (\text{第 } i \text{ サイトのオンサイトハミルトニアン}) \\ 1 & (\text{第 } i \text{ サイトと第 } i+1 \text{ サイトをつなぐボンドハミルトニアン}) \end{cases} \quad (2.17)$$

であり、ボンドハミルトニアンについてはボンドの中央における  $\sin^2$  の値を用いることを表している. 図 2.26 に  $f_{\delta}(i)$  のグラフを示した. 同図では  $L = 10$  の系における例を示しているが、 $f_{\delta}(i)$  の定義から、系の両端サイト ( $i = 1, 10$ ) ではなく、系の両端を仮想的につなぐボンド上で 0 となることに注意が必要である.

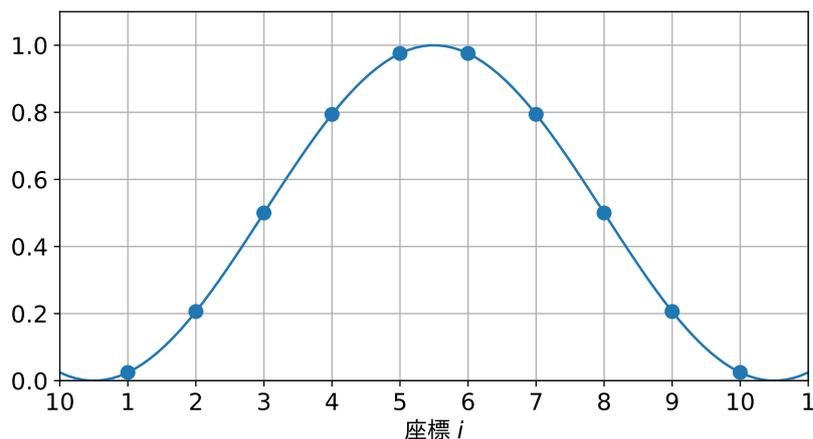


図 2.26  $L = 10$  における  $f_{\delta}(i)$ . プロット点が格子点であり、系の左端サイトが  $i = 1$ , 系の右端のサイトが  $i = L = 10$  である.  $f_{\delta}(i)$  は、系を周期境界条件と見たときに系の両端をつなぐボンド上で 0 になるように定義されていることに注意.

相互作用のないタイトバインディングスピンレスフェルミオン模型 (XY 模型) に対しては、正弦二乗変形を適用した場合の基底状態が周期境界条件を課した場合と一致するこ

とが解析的に証明されている [69, 70]. 加えて, 同様の証明が共形場で記述される系や稠密な系に対して行われている [71, 72]. さらに, 数値計算の立場からの検証も行われており [73, 74], 一般の格子系に対して SSD が境界の影響を効果的に抑制することが数値的に確認されている.

以上では, 滑らかな境界条件という観点から SSD が開放端条件の効果を抑制する点について触れた. 一方で, 自由粒子系に SSD を適用した際の数値的な解析から, SSD を適用したハミルトニアン基底状態が, 与えた外場に対する無限系の応答を系の中央付近で再現する “グランドカノニカル的” 振る舞いをすることが確認されている [75, 76]. このとき系の中央で実現される状態は, 有限系の長さ  $L$  で定義されるエネルギー・量子数の解像度  $\sim 1/L$  よりも細かい  $\sim 1/L^2$  のスケールで記述されることがわかっている. これは, 無限系の外場応答を系の中央領域で再現するために必要になる  $1/L$  のサイズ効果に対する補正が系の端近傍に局在した低エネルギー状態の励起によって自発的に行われることに起因している. 以上の特徴は, 系の端近傍が系の中央に対する粒子浴として振る舞っていると考えることができる. この結果は並進対称な一次元系に対して得られているものであるため, 本研究で取り扱うような少数不純物系においても同様に正しい結果を与えるかどうかは非自明である. しかしながら, 系の中央付近に配置した局在スピンは, SSD により Fermi 面近傍の低エネルギー励起が稠密かつ正しい状態密度で再現される伝導電子系と相互作用しているため, 少数不純物系に対しても SSD が有効に機能することが期待できる. 先行研究 [76] でも述べられているように, この SSD によるアプローチは, NRG における対数離散化に類似したエネルギー準位の稠密化を, DMRG 法による実空間解析において実現していると捉えることもでき, 実空間解析の汎用性と NRG の利点の両者を取り入れた解析として位置づけられる.



## 第 3 章

# 少数不純物近藤系の局在スピン構造

### 3.1 取り扱う模型と計算条件

本研究で取り扱う一次元少数不純物近藤系のハミルトニアンを再掲する：

$$\mathcal{H} = -t \sum_{i=0}^{L-2} \sum_{\sigma=\{\uparrow,\downarrow\}} \left( c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + \text{h.c.} \right) + \sum_{j \in I} \frac{J_j}{2} \sum_{\sigma\sigma'} c_{x_j\sigma}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} c_{x_j\sigma'} \cdot \mathbf{S}_j \quad (3.1)$$

ここで、 $\mathbf{S}_j$  が位置  $x_j$  に配置された量子ドット中の局在スピンに対応し、同位置に存在する伝導電子と強さ  $J_j$  の交換相互作用により結合している。相互作用  $J_j$  は局在スピンごとに異なった値を取りうるが、本研究では局在スピン相互作用はいずれも等しく  $J_j = J$  であるとする。本系のパラメータについて以下にまとめておく：

- 相互作用の大きさ  $J/t$  (以後、 $t$  をエネルギーの単位とするため  $t = 1$  とする)
- 伝導電子フィリング  $n_c$
- 局在スピンの個数と配置
- 格子定数  $a = 1$

以降では、特記しない限り DMRG 法と SSD の両者を用いることで得られた基底状態の解析結果を示す。取り扱う系の大きさ (サイト数) は  $L = 200 - 400$  であり、DMRG 法の精度を表す truncation error (式 (2.14)) は最大でも  $10^{-5}$  としている。また、端効果を最小限に抑えるために局在スピンは系の中央に配置している。

### 3.2 1 スピン系

本節では、局在スピンを一つだけ持つ系の計算結果を通じて、局在スピンの周辺で生じる物理を概観する。図 3.1 に、 $n_c = 1/2$  (quarter filling) における、相互作用  $J$  に対する電荷密度空間分布  $\langle n_i \rangle = \sum_{\sigma} \langle c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle$  の変化を示した。相互作用  $J$  は、局在スピンと

の間に働く「反強磁性的引力」とみなせることから、 $J$ の増大に対して局在スピン直上の電荷密度が増大する。特に、 $J \rightarrow \infty$ の極限においては、局在スピン直上にちょうど1個の電子を束縛することで局所的なスピン一重項を形成する。しかしながら、有限の $J$ においては、局在スピンからの相関は伝導電子のギャップレス性を反映して相関は長距離相関（べき減衰）となっており、「近藤雲」の内と外という境界は明確ではない（近藤雲については、第4章で詳細に議論する）。また、局在スピンを不純物としたFriedel振動に対応して、波数 $2k_F$ （ $n_c = 1/2$ では4サイト周期、 $n_c = 1/4$ では8サイト周期）の振動が生じていることがわかる。

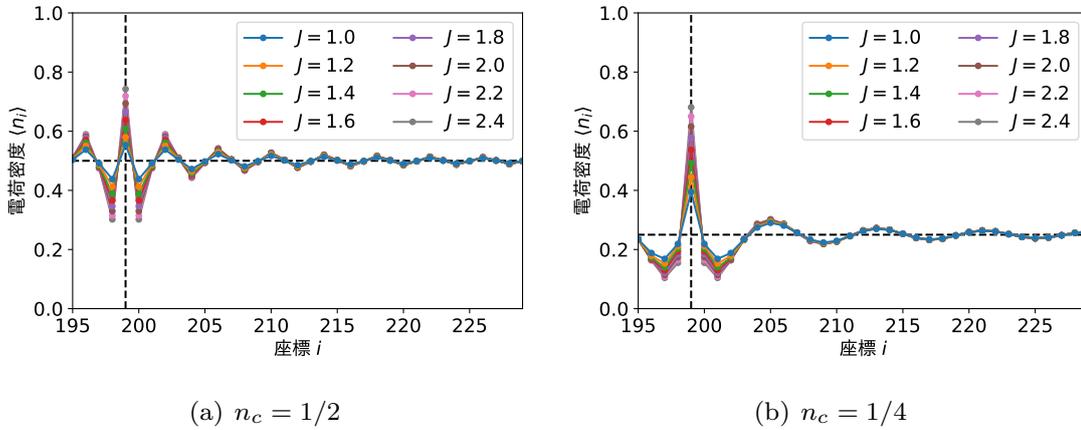


図 3.1 1 局在スピン系における電荷密度. 左右対称な系の中央（縦点線）に局在スピンが存在している. 局在スピン直上の電子密度は交換相互作用により増大するが、遠方においては波数  $2k_F$ （周期  $2/n_c$  サイト）で伝導電子のフィリング  $n_c$ （横点線）に漸近していく.

一方、スピン自由度については基底状態が一重項、すなわちスピン量子数が  $S^{\text{total}} = 0$  となることを反映して、スピン密度に Friedel 振動は生じない。しかしながら、局在スピン直上における伝導電子スピン  $s_0$  と局在スピンから距離  $r$  だけ離れた伝導電子スピン  $s_r$  の間の相関  $\langle s_0 \cdot s_r \rangle$  には局在スピンとの相互作用の効果が反映される。この様子を、図 3.2 に示す。図から明らかなように、スピン間相関は  $2k_F$ （ $n_c = 1/2$ では4サイト周期、 $n_c = 1/4$ では8サイト周期）の振動となっている。この振動は  $J$  が大きいほど小さくなっているが、これは近藤効果による一重項が空間的により局所的になることで、他の電子との相関が弱められるためである。なお、相関は全体として正の側に偏っているが、これは以下に示すように、局在スピン  $S$  と伝導電子によって形成される基底状態  $|KS\rangle$  が一

重項（スピン量子数  $S^{\text{total}} = 0$ ）となることを反映している：

$$\begin{aligned}
 \mathbf{S}^{\text{total}} |\text{KS}\rangle &= \mathbf{0} \\
 \left( \mathbf{S} + \sum_r \mathbf{s}_r \right) |\text{KS}\rangle &= \mathbf{0} \\
 \mathbf{s}_0 \cdot \left( \mathbf{S} + \sum_r \mathbf{s}_r \right) |\text{KS}\rangle &= 0 \\
 \sum_r \langle \mathbf{s}_0 \cdot \mathbf{s}_r \rangle &= -\langle \mathbf{s}_0 \cdot \mathbf{S} \rangle > 0
 \end{aligned} \tag{3.2}$$

最後の部分で、 $J > 0$  より  $\langle \mathbf{s}_0 \cdot \mathbf{S} \rangle < 0$  となることを用いた。

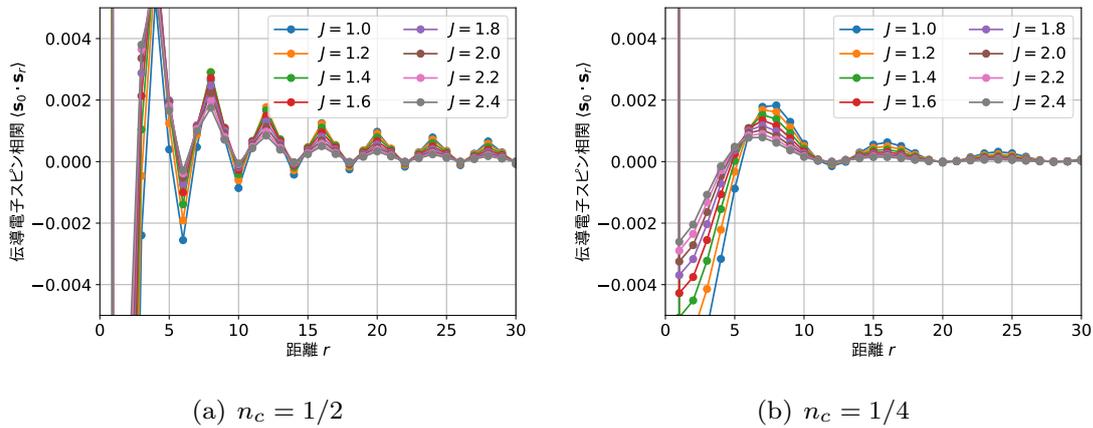


図 3.2 1 局在スピン系における伝導電子スピン相関．局在スピンは系の中央に配置し，横軸を局在スピンからの距離  $r$  としている．波数  $2k_F$ （周期  $2/n_c$  サイト）の振動が現れる．

### 3.3 隣接スピン系の磁気転移

本節では，隣接する格子点に局在スピンを配置した場合（隣接スピン系）において実現する局在スピン間相関について述べる．隣接スピン系は，量子ドット間距離が Fermi 波数の逆数  $k_F^{-1}$  と同程度からより短い条件に対応している．

#### 3.3.1 隣接 2 スピン系

はじめに，近藤効果と RKKY 相互作用の競合が生じる最も単純なケースである，隣接した 2 局在スピン系の結果について述べる．図 3.3 にその模式図を示す．

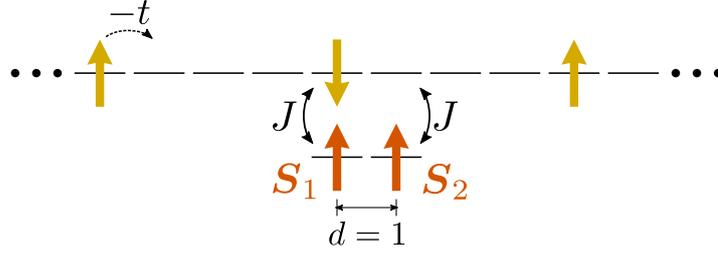


図 3.3 隣接 2 スピン系の模式図. 本図は  $n_c = 1/4$  と対応するよう伝導電子間距離を 4 として描いている. 局在スピン間距離は  $d = 1$  であり, 格子系で実現できる 2 局在スピン系の最も単純な場合といえる.

図 3.4 に  $n_c = 2/3, 1/2, 1/4$  における, 局在スピン相関  $\langle \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \rangle$ , 局在スピン直上における電荷密度  $\langle n_i \rangle$ , 局在スピン直上における局在スピン・伝導電子スピン相関 (オンサイトスピン相関)  $\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s}_i \rangle$  の相互作用依存性を示す. 取り扱っている系は, 2 つの局在スピンについて対称であることから,  $\langle n_1 \rangle = \langle n_2 \rangle$ ,  $\langle \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{s}_1 \rangle = \langle \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{s}_2 \rangle$  である.

$n_c = 2/3$  における局在スピン間相関  $\langle \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \rangle$  は, 相互作用  $J$  に依らず反強磁性的な相関が実現していることがわかる. 一方,  $n_c = 1/4$  においては,  $J \approx 2.0$  において強磁性・反強磁性転移が起きているものの, その相関は  $J$  に対して連続的に遷移している ( $n_c = 1/2$  においては不連続的な転移が見られるが, これは局在スピン直上の電子密度と  $n_c$  との整合性に関係していると考えられ, 詳細は 3.3.4 節で述べる). また,  $J \rightarrow \infty$  においては, いずれのフィリングに対しても  $\langle \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \rangle \rightarrow 0$  へと漸近している.

このような局在スピン間相関の多様な変化が見られる一方で, 電荷密度  $\langle n_i \rangle$  およびオンサイトスピン相関  $\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s}_i \rangle$  は単調に変化している. 電荷密度  $\langle n_i \rangle$  のおおまかな振る舞いは,  $J \rightarrow 0$  においては無限遠方における電荷密度  $n_c$  (点線) に漸近し,  $J \rightarrow \infty$  においては, 局在スピン直上でスピン一重項を形成することを反映して  $\langle n_i \rangle \rightarrow 1$  に漸近する振る舞いが確認できる. 局在・伝導スピン相関  $\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s}_i \rangle$  については,  $J \rightarrow 0$  において 0 に,  $J \rightarrow \infty$  において  $-3/4$  (局所一重項の値) に漸近していくことがわかる. これらの振る舞いから,  $J \rightarrow \infty$  では, 2 つの局在スピンのそれぞれ一重項を形成することで局在スピンモーメントが消失することになるため,  $\langle \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \rangle \rightarrow 0$  となることがわかる.

以上の結果を総合することで, 隣接 2 スピン系における物理を次のように説明することができる: 相互作用  $J$  は, 伝導電子を局在スピン直上へと誘引する引力として働くため,  $J$  の増大に対して電荷密度  $\langle n_i \rangle$  は 1 に向かって増大していく.  $J$  が弱い領域においては, 局在スピン間相関  $\langle \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \rangle$  は  $J$  についての低次の有効相互作用である RKKY 相互作用により支配されていると予想される. この RKKY 相互作用は, 元の伝導電子密度  $n_c$  ではなく局在スピン間の局所電荷密度  $\langle n_i \rangle$  に依存していると期待されるため, その波数は  $2k'_F = \pi \langle n_i \rangle$  になると考えられる. 今, 局在スピン間距離は  $d = 1$  であることから, RKKY 相互作用は  $\langle n_i \rangle < 1/2$  においては強磁性的,  $\langle n_i \rangle > 1/2$  においては反強磁性的

になることが予想できる．実際， $n_c = 1/4$  の磁気転移は概ね  $\langle n_i \rangle \approx 1/2$  となる  $J$  と整合しており，この説明を裏付けているといえる．この考察を踏まえると， $n_c = 2/3$  においては  $J = 0$  においても  $\langle n_i \rangle = n_c = 2/3$  となっており， $J$  の値によらず反強磁性的な RKKY 相互作用が働くことから，局在スピン間相関  $\langle \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \rangle$  が  $J$  によらず反強磁性的になったといえる．

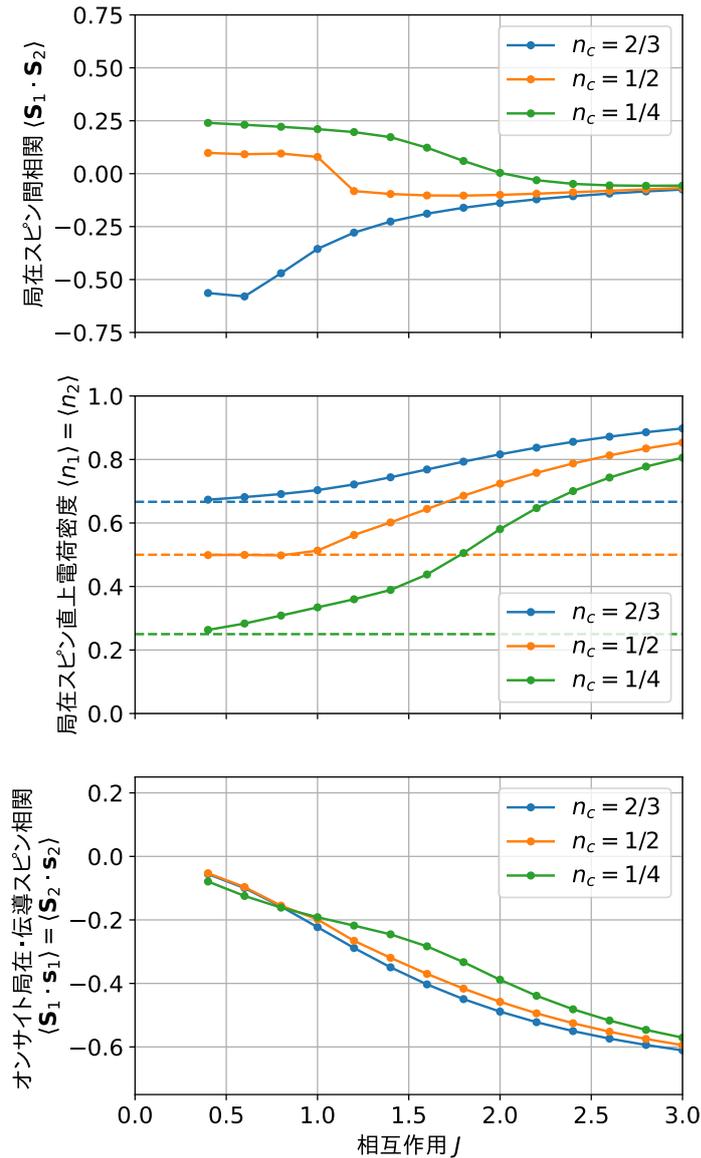


図 3.4 隣接 2 スピン系における局在スピン間相関  $\langle \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \rangle$ ，局在スピン直上電荷密度  $\langle n_i \rangle$ ，局在スピン直上における局在・伝導スピン相関  $\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s}_i \rangle$  の相互作用依存性．点線は，伝導電子の無限遠方における電荷密度（フィリング）を表す． $n_c = 2/3$  では  $J$  に依らず反強磁性的な相関となるが， $n_c = 1/2, 1/4$  では，それぞれ  $J \approx 1.1, 2.0$  において強磁性・反強磁性転移が見られる．なお，系は 2 つのスピンについて対称であるため  $\langle n_1 \rangle = \langle n_2 \rangle$ ， $\langle \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{s}_1 \rangle = \langle \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{s}_2 \rangle$  である．

以上の解釈は、 $J$ が弱い側からの考察であった。一方で、 $J \rightarrow \infty$ では各局在スピンの伝導電子と一重項を形成した状態が基底状態となり、近藤効果が支配的な極限であるといえる。この状態に対してホッピング項  $-t$  が摂動として導入されると、Pauli 排他原理の下でエネルギーを低下させるために、2つの局在スピンの直上に存在する2つの伝導電子はそれぞれ反平行な配置となる。その結果、局在スピン間相関についても反強磁性的となる。RKKY 相互作用による反強磁性と近藤効果の極限からの反強磁性が連続的に接続している必然性はないものの、図 3.4 の結果はこれらが連続的に接続していることを示している。以上をまとめると、 $J$ が弱い領域は RKKY 相互作用により特徴づけられる「RKKY 領域」、 $J$ が強い領域は近藤効果により特徴づけられる「近藤領域」であるといえる。この解釈を模式的に表すと図 3.5 のようになる。

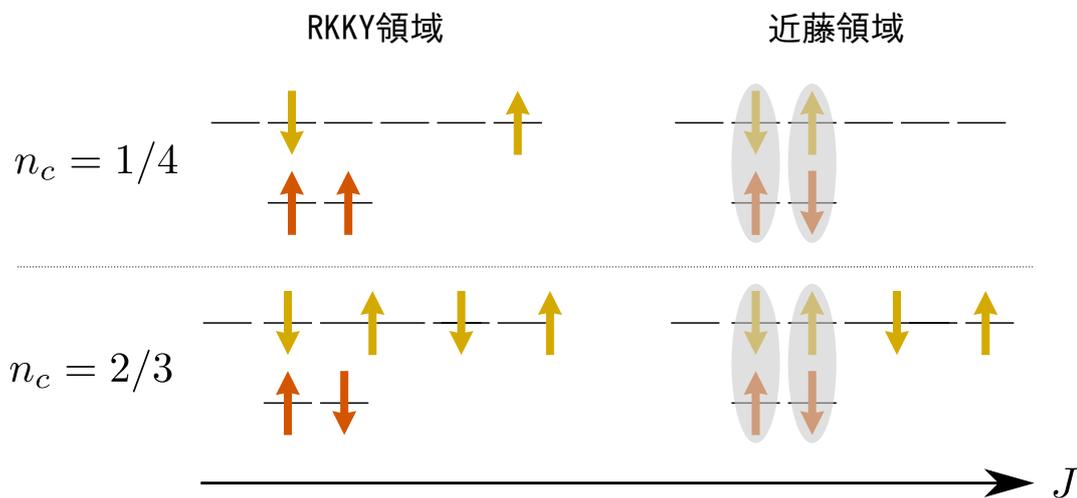


図 3.5 隣接 2 局在スピン系の物理. 相互作用  $J$  が小さい「RKKY 領域」では、局所電子密度が決める波数による RKKY 相互作用により局在スピン間相関が説明される。一方、 $J$  が大きい「近藤領域」では、局在スピン直上における局所一重項に対してホッピングが導入されることで、局在スピン間相関は反強磁性的となる。

### 3.3.2 隣接 3 スピン系

前節で示した隣接 2 スピン系における磁気転移は、局在スピン直上における伝導電子密度により説明された。この振る舞いが一般的なものであるかを検証するため、本節では隣接した 3 スピン系において生じる磁気構造の転移について述べる。

図 3.6 に、 $n_c = 1/4$  における、局在スピン間  $\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle$ 、局在スピン直上の電荷密度  $\langle n_i \rangle$ 、局在スピン直上における伝導電子とのオンサイトスピン相関  $\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s}_i \rangle$  の相互作用  $J$  依存性を示す。本系は、左右対称であることから、内側のスピン (“Inn.”) および外側のスピン (“Out.”) の 2 種類のスピンの存在し、局在スピン間相関は、内側・外側と外側・

外側の 2 通りの組み合わせがある。図 3.6 から明らかなように、 $J \approx 1.0$  において外側・外側の相関が強磁性から反強磁性に連続的に変化する転移が存在しており、これは隣接 2 スピン系と共通である。このとき、内側・外側の相関は変化していない。一方で、 $J \approx 2.8$  においては、局在スピン間相関が急峻に変化し、内側・外側および外側・外側の相関がいずれも強磁性から反強磁性（およびその逆）へと転移していることがわかる。また、このとき局在スピン直上の電荷密度  $\langle n_i \rangle$  とオンサイトスピン相関  $\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s}_i \rangle$  も急峻に変化している。

以下で詳細に述べるように、各領域は RKKY 相互作用と近藤効果により特徴づけられる。そこで以下では、 $J \lesssim 1.0$  の領域を「RKKY 領域」、 $1.0 \lesssim J \lesssim 2.8$  の領域を「中間領域」、 $2.8 \lesssim J$  の領域を「近藤領域」と呼称し、各領域について解説していく。

### 3.3.2.1 RKKY 領域

$J \lesssim 1.0$  の弱相関領域においては、3 つの局在スピン直上に存在している電荷の総数がおよそ 0 から 1 程度になっており、3 つの局在スピンの 1 つの伝導電子を共有している描像として捉えることができる。この状態は、隣接 2 スピン系における RKKY 領域と対応しているといえる。

局在スピンの数に対して伝導電子数が十分少ない状況は近藤格子模型において伝導電子が低密度の領域に対応しており、このとき実現する基底状態は強磁性相 [77][78] になることがわかっている。特に、複数の局在スピンに対して 1 つだけ伝導電子が存在している状態に対しては、長岡強磁性 [79] と類似した強磁性状態が実現することが厳密に示されており [80]、本 RKKY 領域についても、概ねこの描像が適用できると考えられる。

### 3.3.2.2 中間領域

$1.0 \lesssim J \lesssim 2.8$  の中間領域においては、3 つの局在スピン直上に存在している電荷の総数がおよそ 1 から 2 程度になっている。また、この領域の特徴として、内側のスピン直上における電荷密度よりも外側のスピン直上における電荷密度が大きくなっていることが挙げられる。仮に開放端 3 サイトの相互作用のない電子系に 2 電子が存在する状況を考えてみると、その系における基底状態は中央サイトに大きな電荷密度を持つことから、本中間領域における電荷密度の振る舞いは多体効果によるものであるといえる。

この多体効果の具体的なメカニズムについては、強結合領域から考察することができる：局在スピンを持つ 3 サイトのみが孤立した系を考え、そこに伝導電子が 2 つ存在する状況を考える。このとき  $J \rightarrow \infty$  における基底は、3 つある局在スピンのうちの 2 つが一重項を形成するかの組み合わせによって決まるため、(Kramers 縮退を除いて) 図 3.7 に示す 3 つで記述される。

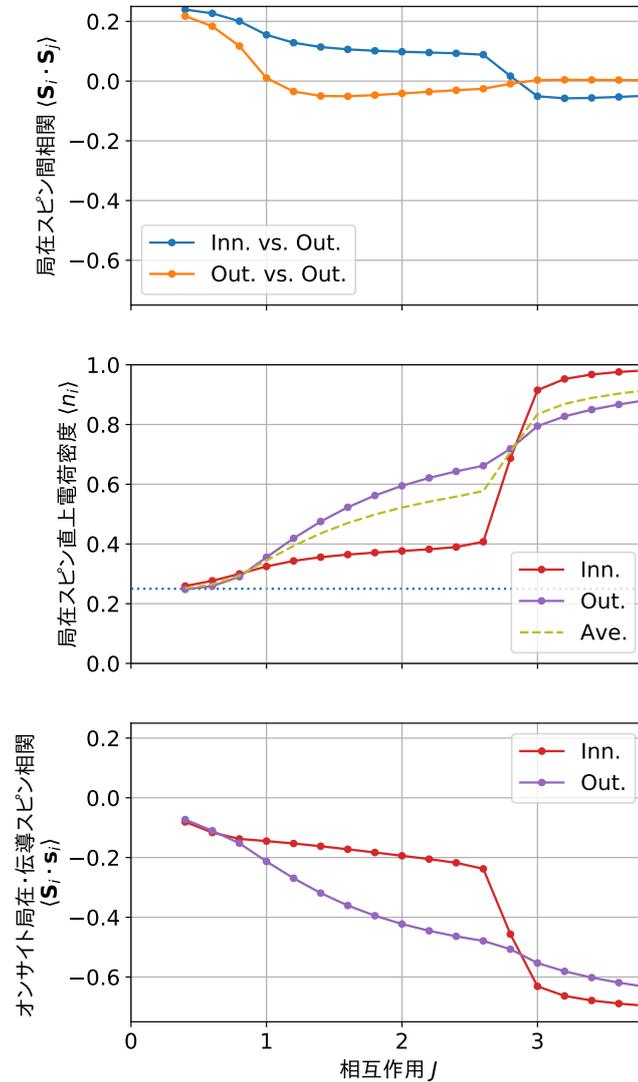


図 3.6  $n_c = 1/4$  隣接 3 スピン系における各種物理量. 系の左右対称性から, 独立なスピンは内側 (Inn.) と外側 (Out.) の 2 種である. 電荷密度については 3 サイトの平均値も点線 (Ave.) で示した.  $J \approx 1.0, 2.8$  において磁気構造が変化していることが確認できる.

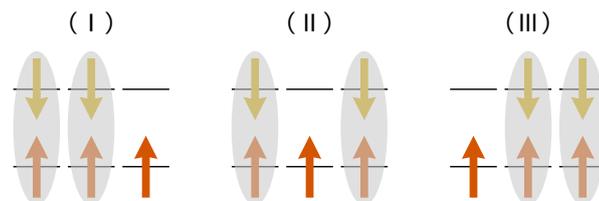


図 3.7 2 つの伝導電子が局在スピン直上に存在する場合の, 強結合領域における基底.  $J \rightarrow \infty$  ではこれらの基底は縮退しているが, 1 次摂動としてこれらの基底の間に遷移要素が導入されることで縮退が解かれる.

図 3.7 の 3 つの基底をそれぞれ  $|I\rangle$ ,  $|II\rangle$ ,  $|III\rangle$  と書くことにすると, これらの基底は  $J \rightarrow \infty$  の極限においては縮退している. 有限かつ大きい  $J$  においては, これらの基底の間にホッピング項による一次摂動が導入され縮退が解かれる. この一次摂動の表現行列は,

$$\langle i|H_t|j\rangle = \begin{pmatrix} 0 & t/2 & 0 \\ t/2 & 0 & t/2 \\ 0 & t/2 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

$$H_t = -t \sum_{i\sigma} \left( c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + \text{h.c.} \right) \quad (3.4)$$

となる. このハミルトニアンは, ホッピング  $t/2$  により運動するスピンレス粒子の表現になっており, 図 3.7 から, 伝導電子のいないサイトの運動を表しているといえる. したがって縮退が解かれた基底状態は,

伝導電子のいないサイト (ホール) 1 個が 3 サイトを自由に運動する状態

または, 別の表現として

ハードコア粒子である一重項粒子 2 個が 3 サイトを自由に運動する状態

のうち最もエネルギーの低い状態となる. この基底状態は, 中央サイトの「ホールの存在確率」が大きいことから, 「伝導電子の存在確率」は外側サイトの方が大きくなることがわかる. したがって, 中間領域の電荷分布は局所的な一重項を出発点とした描像によりよく説明できると考えられる.

このような伝導電子密度の振る舞いは, 実際に開放端条件の「3 サイト近藤格子模型」:

$$\mathcal{H}_{KL} = -t \sum_{i=0}^{M-2} \sum_{\sigma} \left( c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + \text{h.c.} \right) + J \sum_{i=0}^{M-1} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s}_i \quad (3.5)$$

( $M = 3$ ) においても確認することができる. 図 3.8 に, 厳密対角化により得られた 3 サイト近藤格子模型の基底状態における電荷密度分布を示す. (b) に示したように伝導電子数が 2 の場合,  $J$  が弱い領域においては運動エネルギーが支配的であり電荷密度は系の中央に大きな振幅を持つが,  $J$  が強い領域においては上述した一重項基底による表現が有効になり 3 サイトのうち外側のサイトにおける電荷密度が高くなるのがわかる.

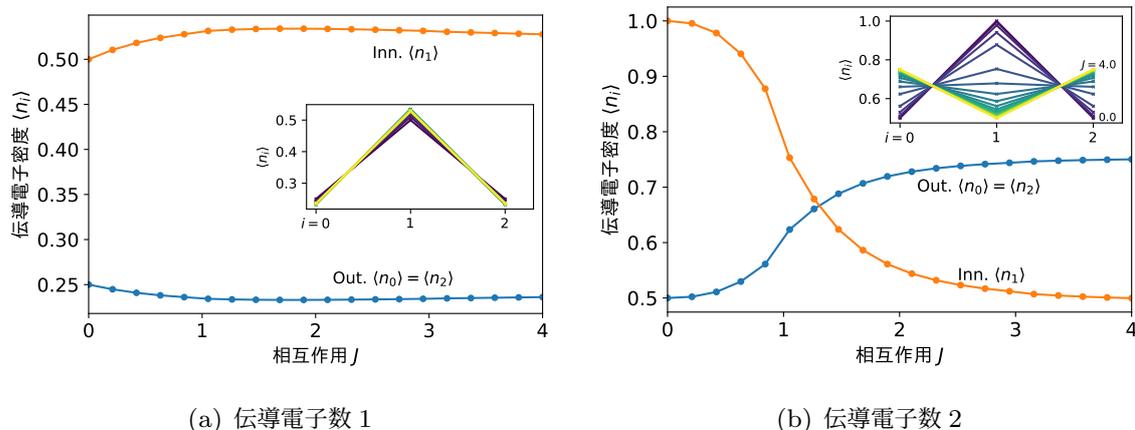


図 3.8 3 サイト近藤格子模型の基底状態における電荷分布の  $J$  依存性 (インセットは各サイトの電荷密度の実空間分布). (a): 伝導電子数が 1 の場合は, 相互作用する他の一重項が存在しないことから,  $J$  に依らず中央サイトの電荷密度が常に高い. (b): 伝導電子数が 2 の場合は,  $J$  が大きい領域において一重項粒子が 2 つ形成され外側のサイトの方が電荷密度が大きくなる. なお, 伝導電子数が 3 の場合は, 伝導電子の電子・正孔対称性により,  $J$  に対して電荷密度は変化しない.

電荷密度分布については一次摂動により理解できる一方で, 一次摂動によるスピン間相関はいずれも 0 となることから, スピン間相関の説明にはより高次の摂動が必要である. まず, 内側・外側の相関 (Inn. vs Out.) について考察する. 一次摂動により得られる基底状態は, 上で述べた理由から基底 (II) の重みが最も大きいと考えられる. このとき, ホッピング項による二次の摂動でエネルギーの利得が得られる状態を考えると, 内側・外側のスピンの向きが平行な向きになる状態が低エネルギーとなる. したがって, 最隣接間の相関 (Inn. vs Out.) は強磁性的となる. 次に, 外側・外側の相関 (Out. vs Out.) について考える. 外側・外側の相関についてはより高次のプロセスによる有効相互作用を考慮する必要があるものの, 各外側スピン直上の伝導電子が反平行なスピン配置を持つことで, 4 次の摂動においてエネルギーを下げるのが可能である. したがって, 外側・外側の相関については反強磁性相関になると考えられる.

以上の考察は,  $J \rightarrow \infty$  (近藤極限) からの考察であった. 一方で, RKKY 相互作用的な描像を適用すると次のように局在スピン間相関を解釈することもできる: 内側・外側スピンの間には伝導電子が 1 個程度存在していることから, 隣接 2 スピン系における RKKY 領域と同様に強磁性的な相関となる. 一方で, 外側・外側スピンの間には伝導電子が 2 個程度存在していることから, RKKY 相互作用による相関は反強磁性的となる.

以上のように, 本中間領域における描像は RKKY 相互作用と近藤効果の描像を独立に用いるよりも, 「相互作用  $J$  により誘引された伝導電子の存在によるスピン位相の反転」という見方により統一的な説明が可能であると考えられる.

## 3.3.2.3 近藤領域

$2.8 \lesssim J$  の強結合領域においては、3つの局在スピン直上に存在している電荷の総数がおおよそ2から3程度になっている。 $J \rightarrow \infty$  の極限では、各局在スピンがそれぞれ伝導電子と一重項すると考えられることから、この極限においては、 $\langle n_i \rangle \rightarrow 1$ 、 $\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s}_i \rangle \rightarrow -3/4$  が期待される。同時に、各スピンが完全に遮蔽されることで、 $\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle \rightarrow 0$  ( $i \neq j$ ) となる。強結合領域においては、この極限に対してホッピングが摂動項として導入されると考えることができ、このとき、Pauli 排他原理の下でエネルギーを低下させるために、隣接サイトの伝導電子は反平行なスピン配置を取ると考えられる。その結果、隣接した局在スピン間は反強磁性的な相関を持つことになる。同様のメカニズムで、外側・外側の局在スピン相関については強磁性となるが、内側サイトによるスピン遮蔽により、その相関はごく弱いものとなっている。強結合領域における描像を図 3.9 に示した。

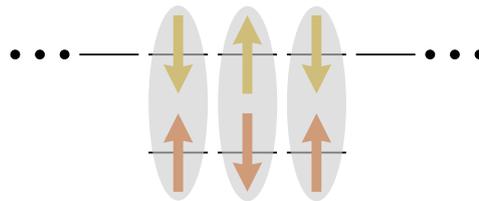


図 3.9 隣接 3 局在スピン系における強結合領域の描像。 $J \rightarrow \infty$  においては、各局在スピンが直上の伝導電子と局所一重項を形成する。その状態にホッピングが摂動として導入されることで、内側・外側の相関は反強磁性的に、外側・外側の相関は強磁性的となる。

## 3.3.2.4 フィリングの変化について

以上までに述べた磁気転移は、局在スピンに誘引された伝導電子数によりおおよそ理解できることがわかった。したがって、 $n_c < 1/3$  までのフィリングについては、同様の転移が実現すると考えられる。一方で、 $1/3 < n_c$  においては、 $J = 0$  においても局在スピン直上に存在する電荷の総数が 1 を超えることから、伝導電子数が 1 – 2 の領域と 2 – 3 の領域の間の転移のみが実現すると予想できる。実際に、 $n_c = 1/2$  における隣接 3 スピン系の磁気転移を図 3.10 に示す。 $n_c = 1/2$  においては、磁気構造の転移は  $J \approx 2.0$  の一か所のみであることがわかる。 $J \lesssim 2.0$  の領域は、外側・外側の相関は反強磁性、内側・外側の相関は強磁性となっており、これは  $n_c = 1/2$  における RKKY 相互作用の波数  $2k_F = \pi/2$  (4 サイト周期) と一致している。この相関は、前節で述べた  $n_c = 1/4$  における中間領域において生じている相関と同様であることから、 $J \lesssim 2.0$  においては、RKKY 相互作用による相関と近藤一重項描像により説明される相関が連続的に接続していると考え

えられる。

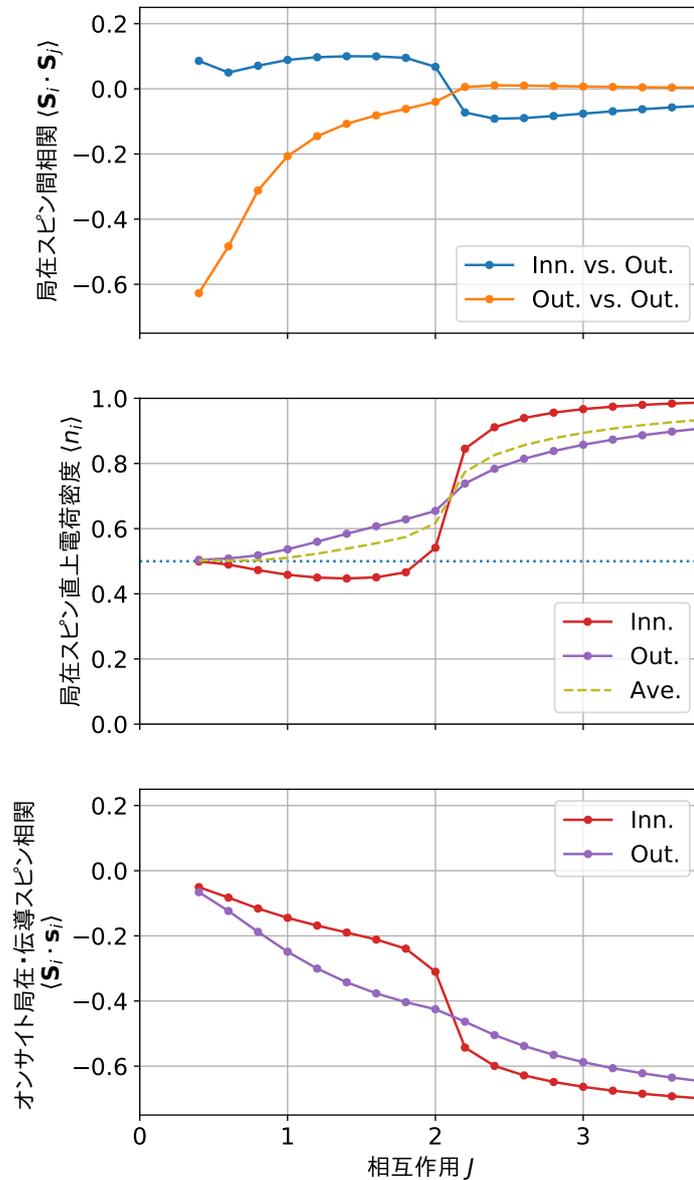


図 3.10  $n_c = 1/2$  隣接 3 スピン系における各種物理量.  $n_c = 1/4$  の場合 (図 3.6) と異なり, 磁気転移が  $J \approx 2.0$  のみになっていることがわかる.

### 3.3.3 隣接 4 スピン系

本節では, これまでに述べた磁気転移の一般性について確認するため, 隣接 4 スピンの結果を示す.

図 3.11 に  $n_c = 1/5$  における隣接 4 スピン系の局在スピン間相関を示す. 同図では, 各スピンを系の左から順に, I, II, III, IV のラベルにより表している. また, 局在スピン

間相関のうち独立なものは同図に示した4つである。

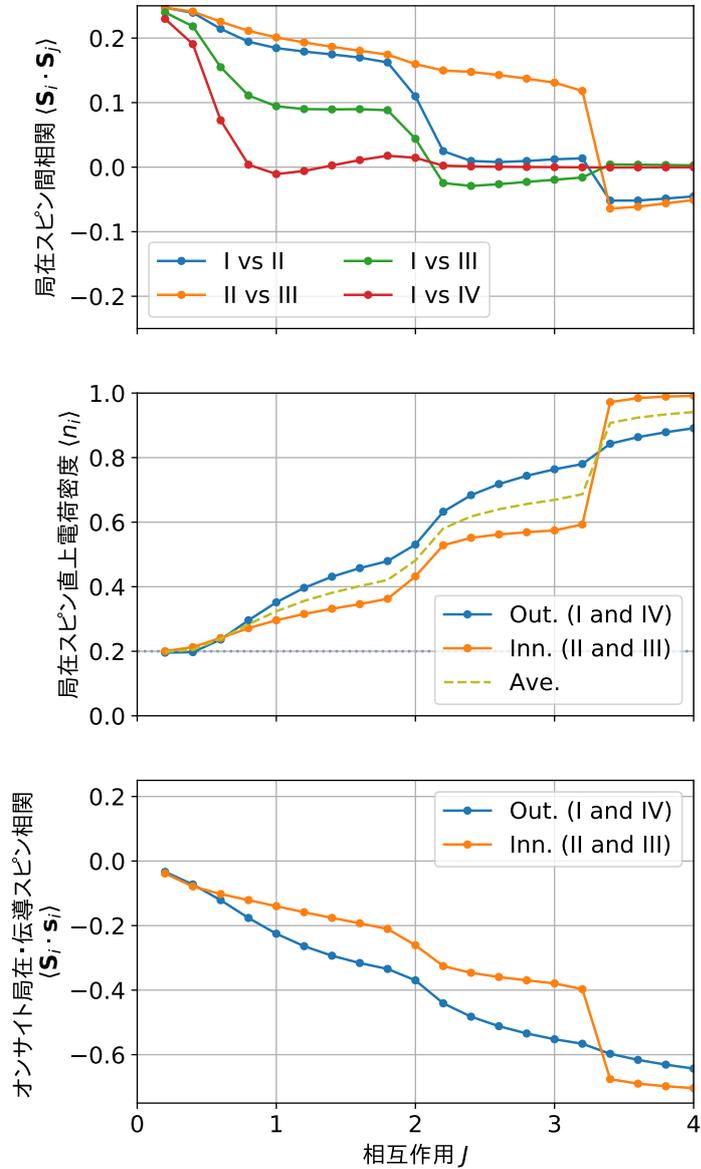


図 3.11  $n_c = 1/5$  隣接 4 スピン系における各種物理量. 隣接 4 スピン系の反転対称性から, 独立な局在スピン間相関は 4 種類となる.  $J \approx 1.0, 2.0, 3.2$  において電荷密度の変化を伴う磁気構造が変化していることが確認できる. 加えて  $J \approx 1.4$  において最も外側同士の相関 (I vs IV) の構造も変化している.

局在スピン間相関と伝導電子密度の変化から, 隣接 4 スピン系は以下の 4 つの領域に分けることができる:

領域 A  $J \lesssim 1.0$

領域 B  $1.0 \lesssim J \lesssim 2.0$

領域 C  $2.0 \lesssim J \lesssim 3.4$

領域 D  $3.4 \lesssim J$

ここで、領域 A から領域 B への転移は連続的に生じているものの、それ以外の転移はより急峻となっていることが確認できる。このうち領域 A は、2 スピン系・3 スピン系における「RKKY 領域」と同様なメカニズムで説明できる領域であり、各スピンは強磁性相関となっている。また、領域 D は、2 スピン系・3 スピン系における「近藤領域」と同様なメカニズムで説明できる領域である。隣接 3 スピン系における「中間領域」に対応する領域は領域 B, C となるが、隣接 3 スピン系までの考察を踏まえると、領域 B は伝導電子数が 1 から 2 の領域、領域 C は伝導電子数が 2 から 3 の領域として特徴付けることができると考えられる。以下ではこの領域 B, C について分析する。

### 3.3.3.1 領域 B (伝導電子数 1 から 2)

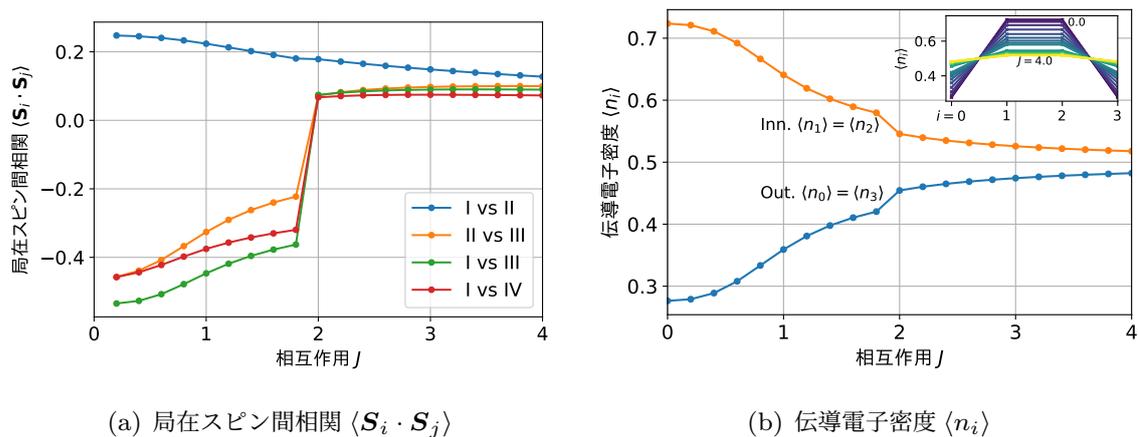


図 3.12 4 サイト近藤格子模型 (伝導電子数 2) の各種物理量. I vs IV を含む 3 種の局在スピン間相関が  $J \approx 2.0$  において反強磁性から強磁性に転移している. 電荷密度については常に内側の方が大きくなっており, これは図 3.11 とは逆の振る舞いであることに注意.

この領域に特有の振る舞いとして、最も外側同士の局在スピン間相関 (I vs IV) が  $J \approx 1.4$  において反強磁性から強磁性に転移していることが挙げられる。この転移は、局在スピン直上に存在する総伝導電子数の変化によるものではないことから、局在スピン直上の伝導電子の中で波動関数の組み換えが起きていると考えられる。そこで、隣接 3 スピン系のときと同様に式 (3.5) において  $M = 4$  とした「4 サイト近藤格子模型」を厳密対角化した結果と比較することで本領域を考察する。

図 3.12 に、厳密対角化により得られた、伝導電子数 2 の 4 サイト近藤格子模型に対する局在スピン間相関の変化および局在スピン直上の電荷密度を示す。4 サイト近藤格子模

型の局在スピン間相関は、 $J$  が大きい領域においていずれも強磁性的になっており、領域 B の  $1.4 \lesssim J$  における相関と一致している。一方、 $J$  が小さい領域は、隣接 4 スピン系においては最も外側の相関 (I vs IV) のみが反強磁性的になっているのに対して、4 サイト近藤格子模型においては II vs III および I vs III についても反強磁性となっている。この差については、局在スピン直上における電荷密度分布の違いから次のように説明できると考えられる：図 3.11, 3.12 の電荷分布を比較すると、隣接 4 スピン系においては外側スピン直上に存在する電荷密度の方が内側よりも大きいのに対して、4 サイト近藤格子模型では内側スピン直上の方が電荷密度が大きくなっている。これは、隣接 4 スピン系には左右に伝導電子鎖が存在しており、局在スピン直上の伝導電子が外側に存在確率を広げることで運動エネルギーによる利得を得られるのに対して、4 サイト近藤格子模型は開放端条件になっていることから系の中央に存在確率を大きくしたほうがエネルギーが小さくなるためである (図 3.13)。この点を踏まえると、隣接 4 スピン系の内側 2 サイト直上において存在する電荷が相対的に小さくなることで、II vs III および I vs III の相関が領域 A に類似したものになっていると考えられる。このとき、最も外側同士の相関 (I vs IV) については、スピン I と IV の間に存在している伝導電子数は変わらないことから、4 サイト近藤格子模型と同様の反強磁性・強磁性転移が実現したと考えられる。なお、4 サイト近藤格子模型における転移が不連続であるのに対して隣接 4 スピン系は連続的な変化となっている点については、局在スピン直上における総電荷密度の連続的な変化が同時に起きることでクロスオーバー的に変化しているためであると考えられる。



図 3.13 隣接 4 スピン系 (領域 B) と 4 サイト近藤格子模型の比較. (a) は左右に伝導電子がホッピング可能な鎖が接続されているため、電荷密度は外側が大きくなる. (b) は開放端条件のため、系の外側は無限大のポテンシャルと等価であり、電荷密度は内側が大きくなる. いずれの場合も、最も外側のスピン I, IV の間に存在する伝導電子数は変わらないことに注意. また、実際に生じているスピン間相関は古典的には表現できないため、本図の矢印は参考として示しているだけであることに注意.

### 3.3.3.2 領域 C (伝導電子数 2 から 3)

領域 C は隣接 3 スピン系における中間領域に類似した領域である。本領域においても、隣接 3 スピン系の中間領域と同様に外側 2 サイトの伝導電子密度が高くなっていることから、隣接 3 スピン系における考察を概ね援用できると考えられる。実際に、隣接した相関

(I vs II および II vs III) については強磁性的な相関となっており、一つ隔てた局在スピン間の相関 (I vs III) については反強磁性相関が実現していることがわかる。最も外側同士の間 (I vs IV) は非常に弱く図からは判断できないものの、データ上は強磁性的な相関が実現している。これは、最も外側のスピン I, IV の間に 3 個の程度の電子が存在することから、奇数回のスピン位相の反転により強磁性的な相関になることと整合している。

### 3.3.4 整合フィリングにおける安定状態

3.3.1 節で示した  $n_c = 1/2$  の結果 (図 3.4) では、 $J$  の弱い領域において、 $J$  の変化に対して局在スピン直上における伝導電子密度が応答しないという結果が得られている。同様の振る舞いは、隣接  $N$  スピン系において  $n_c = 1/N$  とした場合に確認できる。これは、 $J = 0$  においても  $N$  個の局在スピン直上にちょうど 1 つの伝導電子が存在する電子密度であり、整合フィリング (commensurate filling) の状況である。図 3.14 に  $n_c = 1/N$  フィリングの隣接  $N$  スピン系における、局在スピン直上の平均電荷密度  $\overline{\langle n_i \rangle}$  の相互作用  $J$  依存性を示す。

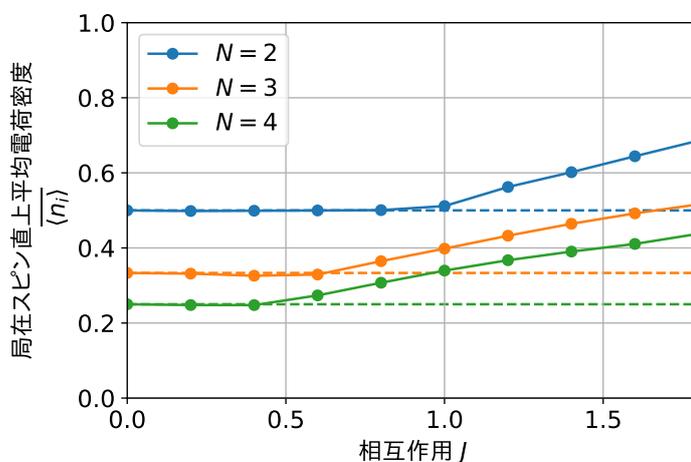


図 3.14  $n_c = 1/N$  フィリングの隣接  $N$  スピン系における、局在スピン直上の平均電荷密度  $\overline{\langle n_i \rangle}$  の相互作用  $J$  依存性。点線は  $J = 0$  における電荷密度  $n_c$  であり、 $J$  が弱い領域で電荷密度が  $J$  に対して変化しない領域が存在することがわかる。

この結果から  $J$  の変化に対して電子密度  $\overline{\langle n_i \rangle}$  が変化しない領域が存在していることがわかる。また、図 3.15 に局在スピン直上における最隣接電荷相関  $\langle n_i n_{i+1} \rangle$  を示す。同図から、図 3.14 に示した電荷密度が変化しない領域において、相関の値が  $J = 0$  における値 (点線) に比べて減少していることがわかる。

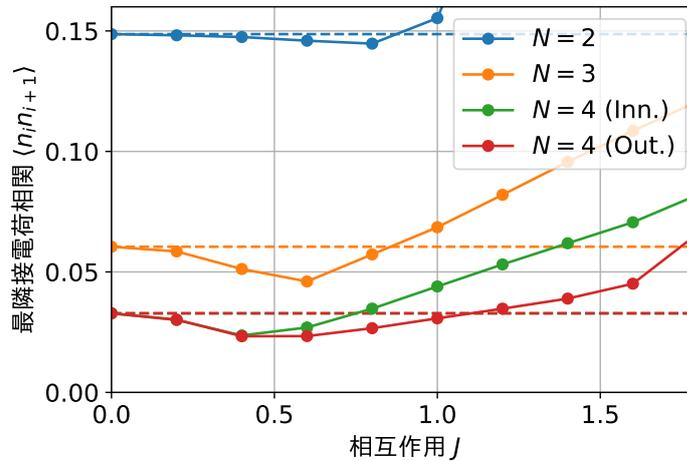


図 3.15  $n_c = 1/N$  フィリングの隣接  $N$  スピン系における，最隣接電荷相関  $\langle n_i n_{i+1} \rangle$  の相互作用  $J$  依存性．図 3.14 に示した電荷密度が変化しない領域において，相関の値が  $J = 0$  における値（点線）よりも減少している．なお， $N = 4$  については，内側 2 サイト，外側 2 サイトの相関をそれぞれ Inn., Out. としている．

これらの結果から，相互作用  $J$  の増大に対して電荷密度が変化しない領域においては，伝導電子を誘引する効果を持つ  $J$  に対してギャップを形成していると考えられる．すなわち，2 個目の伝導電子が局在スピン直上へと誘引されることを妨げていると考えられることができ， $N$  個の局在スピンと 1 つの伝導電子により構成される局所安定状態が実現しているといえる．この安定状態は，1 つの局在電子と 1 つの伝導電子スピンの一重項状態を形成する近藤効果（1.2.2.3 節）を多局在スピンへと拡張した「複合粒子安定状態」とみなせると考えられる（図 3.16）．

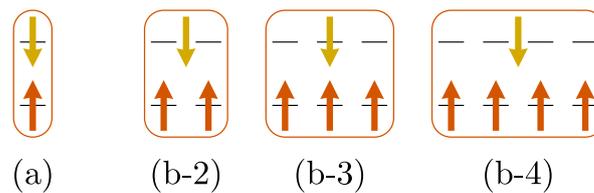


図 3.16 複合粒子安定状態の概念図．(a) は通常の近藤効果であり，1 つの局在スピンの 1 つの伝導電子を束縛する．(b- $N$ ) が  $N$  隣接スピン系の整合フィリングにおいて生じる， $N$  個の局在スピンと 1 つの伝導電子による安定状態である．

本節に述べた結果は，いずれも隣接した  $N$  スピンからなる“クラスター”が 1 つだけ存在する系におけるものであった．一方，このクラスターを空間的に敷き詰めた系は次元近藤格子模型：

$$H_{\text{KLM}} = \sum_{i=0}^{L-2} \left( c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + \text{h.c.} \right) + J \sum_{i=0}^{L-1} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s}_i \quad (3.6)$$

と等価である。一次元近藤格子模型においては、図 1.10 にも示したように  $n_c = 1/2$  の  $J$  が弱い領域において絶縁相の存在が示されている [50, 51]。この絶縁相の描像については先行研究 [52] により、隣接局在スピン相関  $\langle D_i \rangle = \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} \rangle$  が並進対称性を破ったダイマー相であることが示されており、局在スピンの配置が  $|\cdots \uparrow\downarrow \uparrow\downarrow \cdots\rangle$  となった状態の量子力学的対応物 (SU(2) 対称性あり) として 2 サイト周期の超格子構造となることがわかっている。

本研究で得られた複合粒子安定状態から、近藤格子模型の  $n_c = 1/2$  における絶縁相に対して次のような新しい解釈を与えることができる： $n_c = 1/2$  における複合粒子は、図 3.16 (b-2) に示したように局在スピン 2 個と伝導電子 1 個から構成されていた。 $n_c = 1/2$  近藤格子模型の  $J$  が弱い領域においてもこの複合粒子安定状態が実現すると仮定すると、そこで実現する状態はこの複合粒子により記述されると考えられる。このとき、 $n_c = 1/2$  の近藤格子系は、複合粒子フィリング  $n_{cp} = 1$  (half filling) の粒子系とみなせると考えることができる。ここで、複合粒子の安定性の起源が、2 つの局在スピン直上に 2 つ目の伝導電子を導入する際のエネルギーギャップであったことを鑑みると、 $n_c = 1/2$  の近藤格子系を記述している複合粒子間には反発力が働くことが期待される。すなわち、 $n_c = 1/2$  の近藤格子系が  $n_{cp} = 1$  (half filling) の一次元 Hubbard 模型により記述されると考えることができる。Half filling の一次元 Hubbard 模型は非零の反発力に対して電荷ギャップを持つ Mott 絶縁相となることが知られている [81, 82]。したがって、以上の解釈を総合すると、

一次元近藤格子模型の  $n_c = 1/2$  における絶縁相は、「局在スピン 2 個と伝導電子 1 個からなる複合粒子」が構成する Hubbard 模型の Mott 絶縁相である

とまとめることができる (図 3.17(b) および (b'))。以上の複合粒子による考察はあくまで一つの解釈に過ぎないものの、この解釈は近藤格子模型の  $n_c = 1/2$  における絶縁相と以下の共通点を持っている。

- 近藤格子模型の絶縁相において、隣接局在スピン相関  $\langle D_i \rangle$  が 2 サイト周期の超格子構造となること。この点は、複合粒子の内部における相関と複合粒子の間を跨ぐ相関の差に対応していると考えられる。
- 近藤格子模型の絶縁相が消失する  $J$  の値 (図 1.10) と、図 3.14 の電荷密度が上昇に転じる  $J$  (=複合粒子が安定性を失う  $J$ ) が、いずれも  $J \approx 1.0$  であること
- 近藤格子模型の  $n_c = 1/2$  における絶縁相は、電荷ギャップが非零である一方でスピングャップは 0 であること [52]。これは、Hubbard 模型の Mott 絶縁相が有効的に  $S = 1/2$  反強磁性 Heisenberg 模型で記述され、スピングャップは 0 であることと一致する。

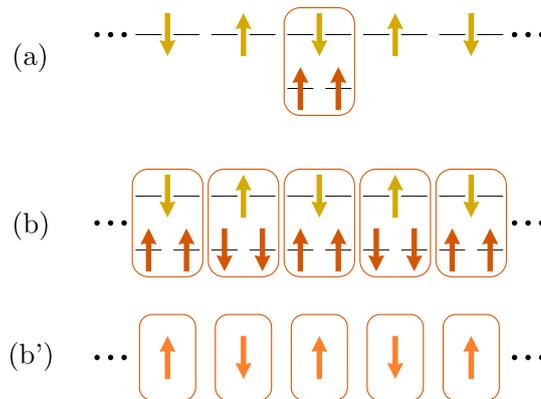


図 3.17  $n_c = 1/2$  において形成されると考えられる複合粒子. (a) は本研究で得られている  $n_c = 1/2$  隣接 2 スピン系における安定状態を表す. (b) は, この複合粒子描像を  $n_c = 1/2$  の近藤格子模型に適用した様子を示す. (b') はこの複合粒子が有効的に  $n_{cp} = 1$  (half filling) の Hubbard 模型になることで絶縁相を構成する様子を示す.

以上は  $n_c = 1/2$  における絶縁相に対する議論であった. 本研究の結果からは,  $n_c = 1/3, 1/4$  においても同様の複合粒子描像による絶縁相の存在が期待できる. 実際, 一次元近藤格子模型に対する数値計算において,  $n_c = 1/3, 1/4$  に存在する絶縁相が確認されている [83]. また, 一次元近藤格子を半古典的に取り扱う解析計算においても整合フィリングにおける絶縁相実現のメカニズムが提案されている [84]. したがって本研究により示された少数不純物近藤系の整合フィリングにおける安定状態は, 近藤格子模型の整合フィリングにおける絶縁相に対して, 複合粒子の形成による階層的な多体状態という新しい解釈を提示するものであると考えられる.

### 3.3.5 $N$ 隣接スピン系の総括

以上までに示した  $N$  隣接スピン系における局在スピン磁気構造の転移は,  $J$  が小さい側から順に以下のようにまとめることができる:

- 局在スピン直上の電子数が 0 から 2 の範囲では, 電荷密度が連続的に変化することで磁気構造も連続的に変化する (整合フィリングを除く).
- 局在スピン直上の電子数が 2, 3, ... を超える点では急峻な電荷密度の変化とともに磁気構造の転移が現れる.
- 局在スピン直上の電子数が  $N - 1$  から  $N$  の範囲では各局在スピンの 1 つずつ伝導電子を束縛することで各々近藤一重項を形成する.

1 局在スピン系における近藤効果は, 相互作用  $J$  に本質的に依存しない普遍的な基底状態により理解されているが, 本研究で得られた基底状態は局在スピンの束縛される電子数に

依存した磁気構造の転移を示しており、近藤効果だけでは理解できない量子多体状態が実現しているといえる。電子数が0から2の範囲における連続的な変化については、伝導電子鎖を局在スピクラスタに対する粒子浴とみなし、この粒子浴との接続が左右2ヶ所存在することで、2個の伝導電子までは連続的に電荷を誘引できるためであると考えられる。これは逆説的に、整合フィリングの条件下においては、伝導電子1つだけを束縛した状態と1つ以上束縛する状態との間にギャップを作り出し安定状態を作っていることを表しているといえる。

以上により、本系で実現する局在スピン磁気構造が、局在スピンに束縛される電子数およびその電子が作る局所的なRKKY相互作用・近藤効果により概ね説明できることがわかった。一方、これら2つの効果はいずれも $J$ が弱い極限と強い極限における摂動により得られる描像であり、中間領域でその描像が適用できるという保証はない。しかしながらこれまでの考察を俯瞰すると、いずれのスピン間相関も「相互作用 $J$ により誘引された伝導電子によるスピン位相の反転」により極めて多くの相関を説明できていることがわかる。RKKY相互作用は自由電子を仮定した場合の摂動であったが、本研究の結果は、RKKY相互作用を伝導電子によるスピン位相の反転による相互作用として捉え直すことで、多くのスピン相関を説明できることを示していると考えられる。

### 3.4 任意距離の2スピン系

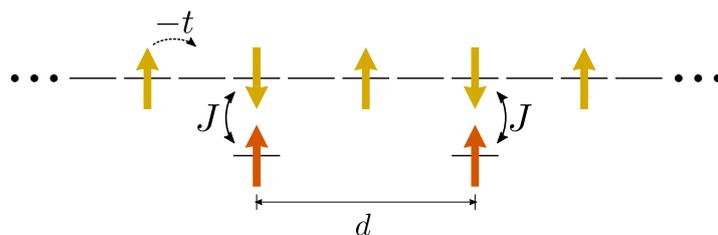


図 3.18 距離  $d$  を隔てた 2 局在スピン系。局在スピンは系の中央から等距離になるよう配置している。本図は  $d = 4$ ,  $n_c = 1/2$  としたものを描いている。

前節で述べた隣接スピン系は、量子ドット間距離が Fermi 波数の逆数  $k_F^{-1}$  と同程度からより短い条件下を想定していた。そこで、本節ではドット間距離がより大きい状況を想定して、任意の距離  $d$  だけ離れた 2 スピン系 (図 3.18) における磁気構造について解析結果を示す。

図 3.19 に、 $n_c = 2/3, 1/2, 1/4$  における局在スピン間相関の相互作用  $J$  およびスピン間距離  $d$  に対する依存性を示す。同図 (a) は横軸を相互作用  $J$ , 同図 (b) は横軸をスピン

間距離  $d$  とした. いずれのフィリングに対しても, 距離:

$$d_{\text{FM}} = \frac{2\pi}{2k_F}l = \frac{2}{n_c}l \quad (l \in \mathbb{N}) \quad (3.7)$$

を満たす場合には, 強磁性の相関が実現しているが, この相関は十分大きい  $J$  において反強磁性へと転移している ( $n_c = 1/4$  については  $d = 9$  も一部強磁性である). また, 距離  $d = 1$  において強磁性が生じている部分は, 前節で述べた隣接スピン系における磁気構造である. 一方で, その他の相関については相互作用  $J$ , 距離  $d$  によらず反強磁性相関が実現している. 全体として  $J$  が大きくなるほど相関が 0 に近づいている点については, 各局在スピン直上で近藤効果による一重項が形成されることで局在スピンモーメントが消失するためであると考えられる.

以上の磁気構造は次のように解釈できる: まず,  $J$  の弱い領域については, RKKY 相互作用を反映し,  $2k_F$  周期で距離に対する磁気構造が決定されている. 強磁性が生じている距離  $d_{\text{FM}} = \frac{2}{n_c}l$  は RKKY 相互作用が強磁性的になるピーク距離と一致していることから, RKKY 相互作用に由来する強磁性である. また,  $n_c = 1/4$ ,  $d = 9$  において実現している強磁性については, RKKY 相互作用の波長が長いことにより強磁性のピーク近傍においても強磁性が生じているとためであると考えられる.

一方で, 距離  $d_{\text{FM}}$  の  $J$  が大きい領域における反強磁性への転移は RKKY 相互作用からは予想できない現象であるが, この転移は次のように考察できる:  $J$  が大きい領域においては近藤効果が支配的となり, 局在スピンとその直上の伝導電子がスピン一重項を形成する. 局在スピン直上における伝導電子のホッピングは, この一重項を壊すことになるため  $J$  のエネルギー上昇を生じることになり, 結果としてこの一重項が他の伝導電子に対するポテンシャル障壁として働く. 2つの局在スピン直上に形成されたこのポテンシャル障壁は井戸型ポテンシャルを形成するため, 局在スピんに挟まれた領域においては局在スピン間距離という有限の井戸長によって生じる離散化されたエネルギー準位が形成されることになる. スピン縮退を考慮すると, この離散化された準位には常に偶数個の電子が占有することで系全体のエネルギーを下げることができる. その結果, 局在スピン間に存在する伝導電子数はスピン間距離によらず偶数個となり, RKKY 相互作用の位相が反強磁性に固定されることとなる. したがって,  $J$  が強い領域では局在スピン間相関が常に反強磁性になると考えられる. この様子を模式的に表したものを図 3.20 に示す. この離散準位が形成されたことを反映して, 図 3.21 に示すように, 強磁性・反強磁性転移に伴い局在スピんに挟まれた領域における電荷密度が大きく減少することが確認できる.

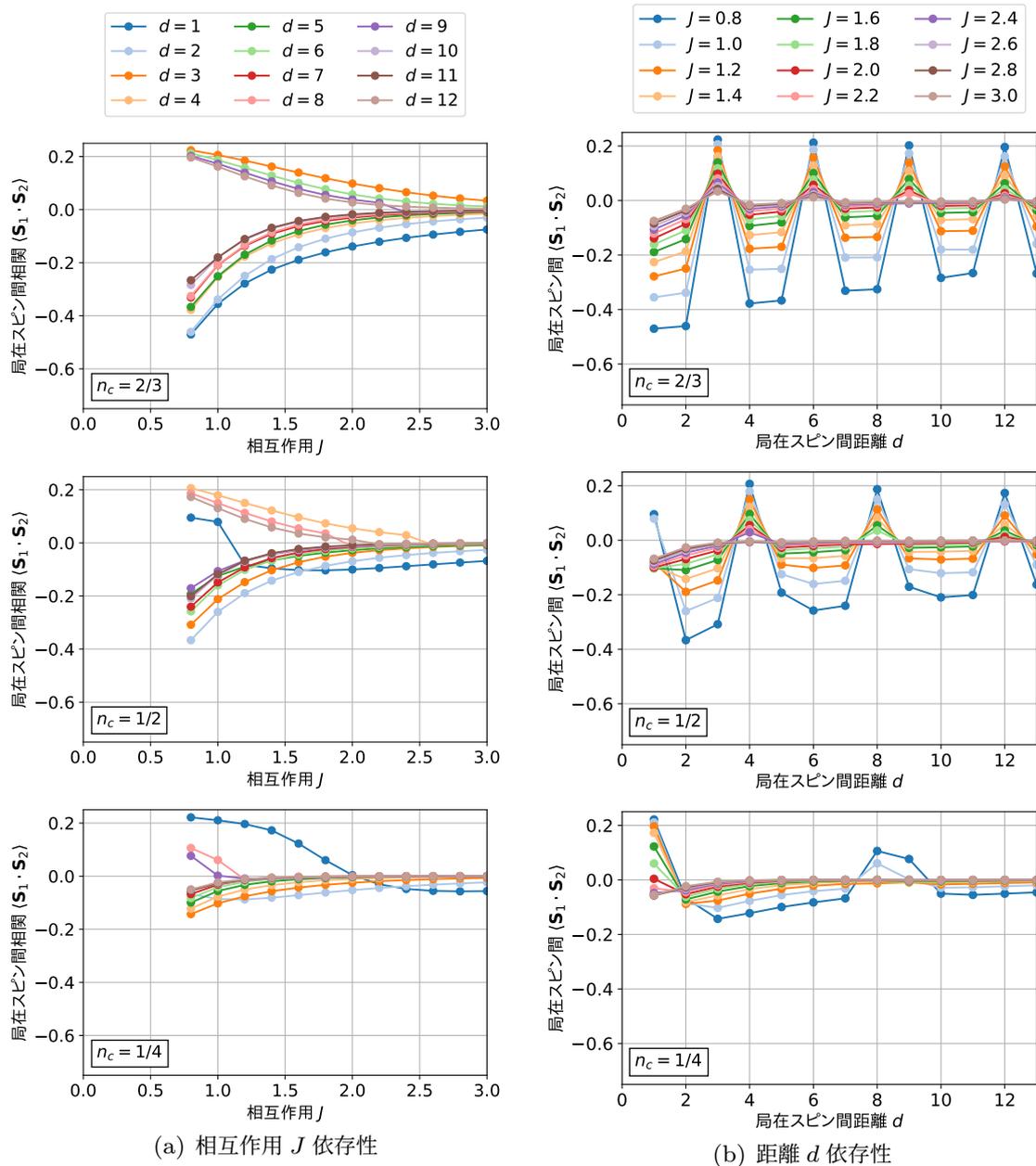


図 3.19 任意距離の 2 スピン系における局在スピン間相関. (a) は横軸を相互作用  $J$  にとっており, (b) は同じデータに対して横軸を局在スピン間距離  $d$  にとったものである. またフィンリングは上から順に  $n_c = 2/3, 1/2, 1/4$  である. 局在スピン間距離が  $\frac{2}{n_c}l$  ( $l \in \mathbb{N}$ ) では, 強磁性的な相関が生じているが, この相関は十分大きい  $J$  において反強磁性へと変化している.

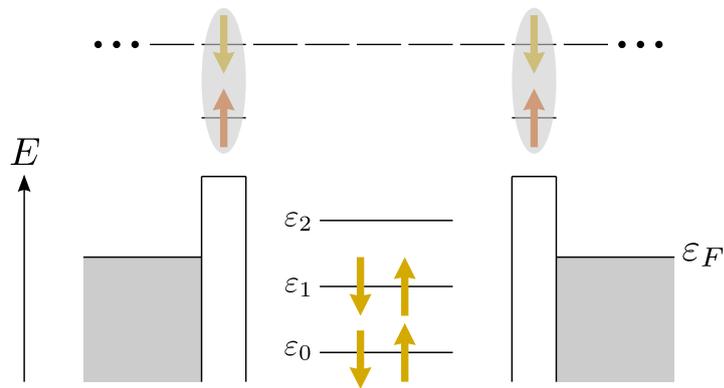


図 3.20  $J$  が大きい領域における普遍的な反強磁性相関のメカニズム。下部は局在スピンにより隔てられた各空間領域におけるエネルギー準位を表している。局在スピン直上で形成された局所一重項が他の伝導電子に対するポテンシャル障壁として働き、この障壁により局在スピンの間の領域に離散化された準位が形成されることで、局在スピン間に存在する伝導電子数が常に偶数個となり RKKY 相互作用が反強磁性的になる。

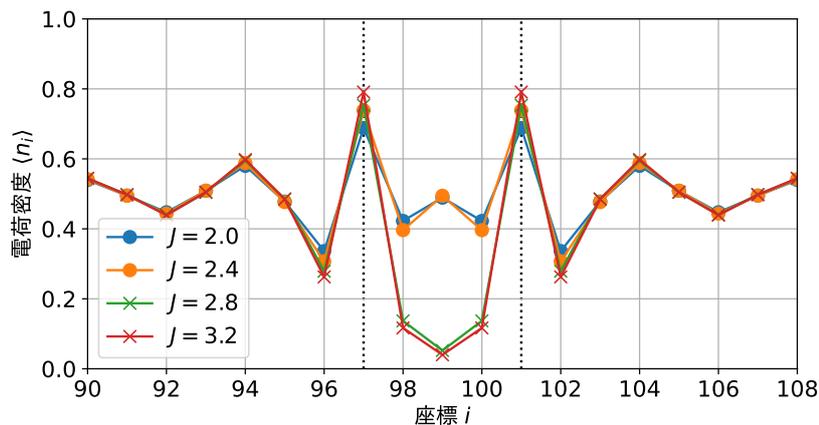


図 3.21  $n_c = 1/2$ ,  $d = 4$  における電荷密度  $\langle n_i \rangle$  の変化。点線で示した位置 ( $i = 97, 101$ ) に局在スピンが存在する。図 3.19 に示した強磁性が実現する領域 ( $J < 2.5$ ) から反強磁性が実現する領域 ( $2.5 < J$ ) への遷移に伴い、局在スピんに挟まれた領域における電荷密度が大きく減少していることがわかる。

### 先行研究 (数値くりこみ群法) との比較

2 局在スピン系については、数値くりこみ群法 (NRG 法) による先行研究 [43] が行われている。図 3.22 に先行研究で得られた局在スピン間相関  $\langle \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \rangle$  を示す。NRG 法は実空間格子の離散化幅によらない滑らかな曲線が得られるという利点がある。本研究と同様に、NRG 法による先行研究においても RKKY 相互作用による強磁性相関が反強磁性相関よりも抑制されていることが確認できる。相互作用  $J$  が大きくなるほど相関が弱く

なる点も同様であるが、強磁性から反強磁性への転移は確認されていない。これは、先行研究におけるパラメータ  $J$  が弱い領域を対象としたものであるためであると考えられる（一例として  $n_c = 1/2$  の  $d = 4$  で生じている転移は  $J \approx 2.5$  で生じているが、これは  $\rho J \approx 0.56$  である）。

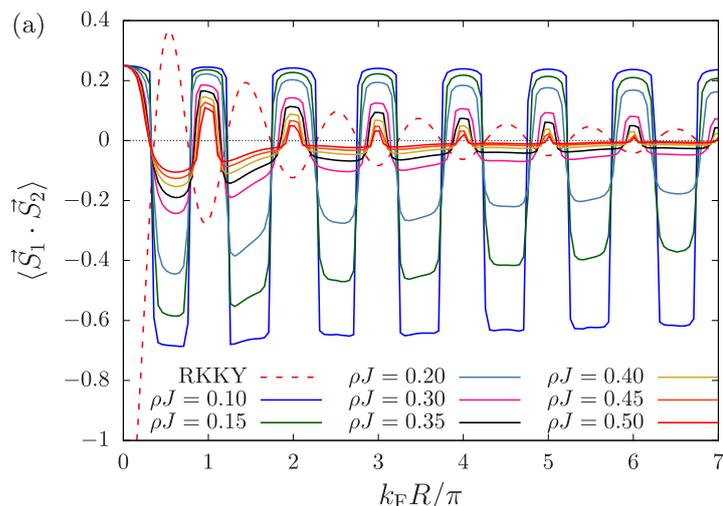


図 3.22 数値くりこみ群を用いた先行研究による局在スピン間相関（画像は [43] より引用）。本研究で得られた局在スピン間相関（図 3.19(b)）と同様に、RKKY 相互作用による相関が局在スピンの遮蔽（近藤効果）により抑制される様子が確認できる。

### 3.5 正弦二乗変形による端効果抑制

本節では、正弦二乗変形（SSD）による有限サイズ効果の抑制効果について、いくつかの結果を紹介する。図 3.23 に、隣接 2 スピン系の  $n_c = 1/4$  における磁気構造の変化について、SSD の有無による比較を示す。SSD を適用した場合には、系のサイズ  $L$  に依存しないスピン構造が得られており、有限サイズ効果を有効に抑制できていることがわかる。また隣接 3 スピン系に対する先行研究と同様の設定で SSD を適用した場合の結果を図 3.24 に示す。先行研究の結果（図 1.9）と比較して、SSD がサイズ効果を極めて有効に抑制していることがわかる。

最後に、本研究で新たに得られた、RKKY 相互作用が強磁性的になる距離において存在する強磁性・反強磁性転移のサイズ依存性についての検証を図 3.25 に示す。この転移についても系の大きさによらない結果が得られていることから、有限サイズによる影響を抑えた結果が得られているといえる。

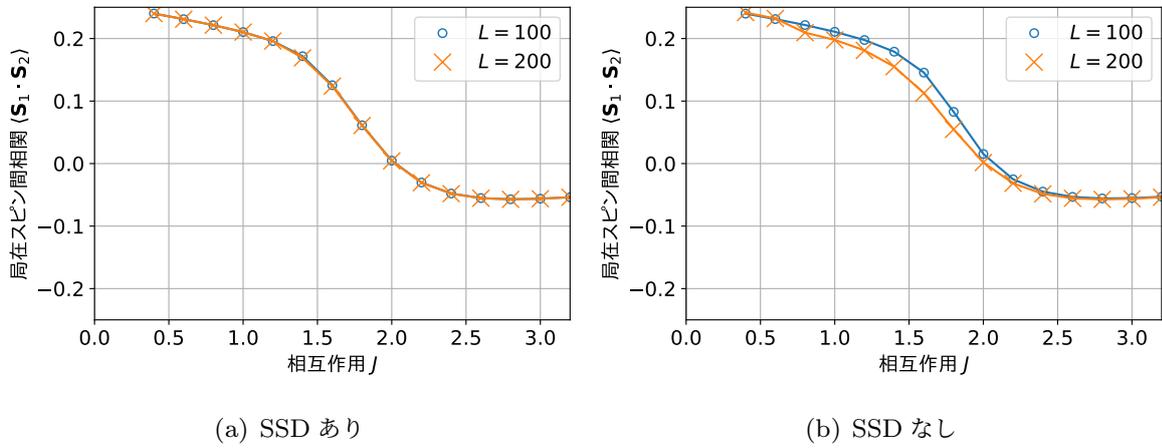


図 3.23  $n_c = 1/4$  隣接 2 スピン系における SSD の効果. SSD を適用した場合には系のサイズ  $L$  に依存しない曲線が得られていることがわかる.

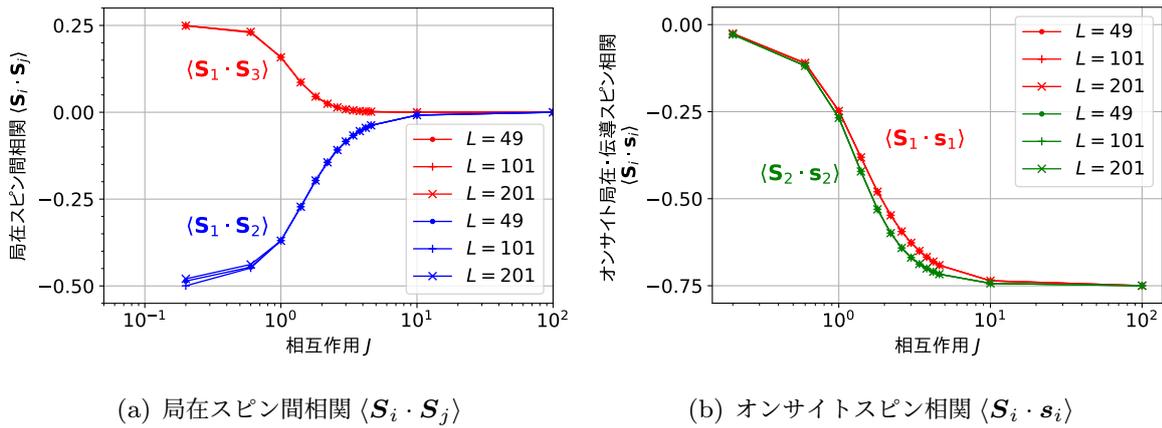


図 3.24  $n_c = 1$  隣接 3 スピン系における相関. SSD を用いることで、先行研究で得られている結果 (図 1.9) と比べてサイズ効果を抑制することができていることがわかる.

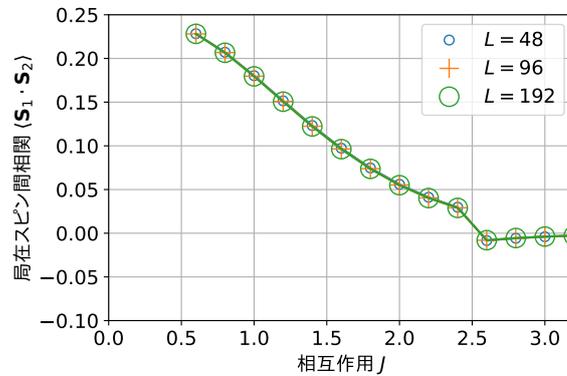


図 3.25  $n_c = 1/2$ ,  $d = 4$  の 2 スピン系において存在する強磁性・反強磁性転移のサイズ依存性. 系のサイズ  $L$  によらないスピン相関が得られており,  $J \approx 2.5$  に存在する転移もサイズによらず確認できる.



## 第 4 章

# 近藤雲に対する複数スピン効果と電子間反発効果

### 4.1 近藤長さとは局在・伝導電子スピン相関のスケーリング

本章では、実空間解析による近藤雲の検証について述べる。近藤雲は、1.3.4.2 節でも述べたように、局在スピンの遮蔽に寄与している伝導電子が作り出す多体状態である。一方で、3.2 節でも述べたように、実際の伝導電子スピン相関は冪的な減衰となっており、“雲”の内と外の境界は明確ではない。しかしながら、近藤効果に寄与する伝導電子状態の範囲に関する考察から、近藤効果の及ぶ範囲の指標として近藤長さ (Kondo length)  $\xi_K$  が提案されている [85]。近藤長さは超伝導におけるコヒーレンス長に相当する長さスケールであり、以下のように得られる [36]：近藤効果のエネルギースケールは  $k_B T_K$  であることから、近藤効果は Fermi 面近傍のエネルギー幅  $\Delta E = k_B T_K$  に含まれる電子により構成されていると考えることができる。このとき図 4.1 に示すように、このエネルギー幅  $\Delta E$  と Fermi 面近傍の波数幅  $\Delta k$  を、分散関係を線形近似することで関連付けることができる：

$$\Delta E = k_B T_K = \left. \frac{\partial E}{\partial k} \right|_{k=k_F} \Delta k = \hbar v_F \Delta k. \quad (4.1)$$

$\Delta k$  は、エネルギースケールが  $k_B T_K$  程度の物理現象における波数のスケールを表していると考えられる。したがって、近藤効果に対応する長さスケール (近藤長さ)  $\xi_K$  を、

$$\xi_K = \frac{1}{\Delta k} = \frac{\hbar v_F}{k_B T_K} \quad (4.2)$$

と見積もることができる。近藤長さは、近藤効果による局在スピンの遮蔽がどの程度の範囲まで及んでいるかを表していると考えられるため、局在スピン  $S_0$  とそこから

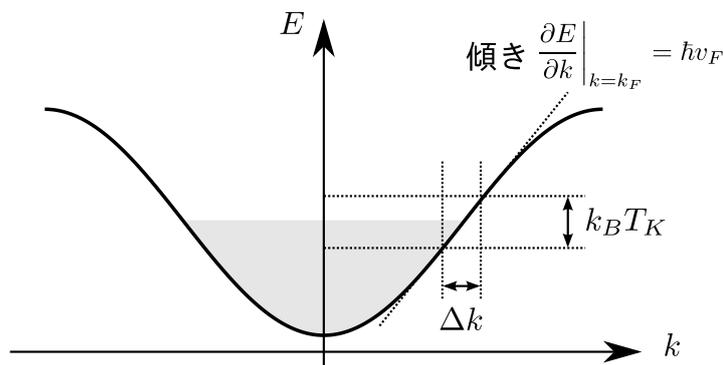


図 4.1 近藤効果のエネルギースケール  $k_B T_K$  と波数幅  $\Delta k$  の関連付け.

距離  $r$  だけ離れた伝導電子スピン  $\mathbf{s}_r$  の間のスピン相関  $\langle \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{s}_r \rangle$  に  $\xi_K$  が反映されると考えるのが自然である. 実際, 摂動論による解析により, 近藤長さ  $\xi_K$  に対して局在・伝導スピン相関  $\langle \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{s}_r \rangle$  が以下のように振る舞うことが示されている [85][15]:

$$\langle \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{s}_r \rangle \propto \begin{cases} r^{-1} & (r \ll \xi_K) \\ r^{-2} & (r \gg \xi_K) \end{cases} \quad (4.3)$$

ただし, いずれも  $r \gg k_F^{-1}$  で成り立つ漸近形であり, ここで示した冪は一次元系に対するものである.  $r^{-2}$  の冪は局在スピンが存在しない自由電子系におけるスピン相関が持つ冪と等しいことから, 局在スピンの影響を受けなくなった距離において自由電子の冪が実現することに対応している. これらの中間領域  $r \sim \xi_K$  においては解析的な結果は得られていないものの, 数値くりこみ群法により  $r^{-1}$  から  $r^{-2}$  へのクロスオーバーが報告されている [42].

## 4.2 本章の目的

数値くりこみ群法は, 近藤効果に関連した低エネルギーの物理現象を格子のスケールに依らず解析できる点で強力な手法であるものの, バンド構造を単純化するなどの仮定が必要である. そのため, 格子系のモデルハミルトニアンを“第一原理的”に取り扱った場合でも, このクロスオーバーが実現するかは未解明である. また, 数値くりこみ群による近藤雲の解析は, 複数の局在スピンが存在する系への拡張が困難である. そこで, 本研究では, DMRG+SSD を用いた実空間解析による, 1 局在スピン系および 2 局在スピン系における近藤雲の解析を実施した. また, モデルハミルトニアンを直接的に解析できる副産物として, 伝導電子間の反発力を考慮した解析が可能であり, この結果についても述べる.

### 4.3 1局在スピン系

図 4.2 に 1 局在スピン系における局在・伝導スピン相関関数を示す．解析した系は  $L = 400$  サイトの系であり，系の中央に局在スピンを配置している．また，伝導電子フィリングについては  $n_c = 1, 2/3, 1/2, 1/4$  の結果を示している．同図の横軸は局在スピンから測った距離  $r$  であり，縦軸には  $r = 0$  に存在する局在スピンと距離  $r$  に存在する伝導電子のスピン相関（の絶対値） $|\langle \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{s}_r \rangle|$  を示している．まず， $n_c = 1$  の相関については，近距離では  $r^{-1}$  の冪が見られるものの，遠距離においては傾きがより急峻に変化していることがわかる．加えて，この冪の変化は  $J$  が大きいほど近距離で起きていることもわかる．同様の冪の変化は他の  $n_c$  においても確認できるが， $n_c$  が大きくなるほど冪が変化する点が近距離になっていることがわかり， $n_c = 1/4$  ではほとんど  $r^{-2}$  の冪のみが確認できる．これは，近藤効果が結合定数  $g = J\rho$  で決定されており，相互作用のない場合のバンド（cosine バンド）の Fermi 面における状態密度は  $n_c (< 1)$  に対して単調減少であることから， $n_c$  が小さいほど近藤効果が強調されるためである．

以上の相関関数の振る舞いは，4.1 節で述べた近藤雲の長さ  $\xi_K$  によるクロスオーバーによるものと考えられる．図 4.3 に横軸を  $r/\xi_K$ ，縦軸を  $|\langle \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{s}_r \rangle| \xi_K$  とした両対数プロットを示す．ここで，縦軸のスケーリングについては次元解析により決定されるものを用いている．また，プロット点については図 4.2 のピーク位置を取り出したものを用いている．同図で使用している  $\xi_K$  は，式 (1.24), (4.2) および以下の式：

$$E = -2t \cos(k) \quad (4.4)$$

$$v_F = \left. \frac{\partial E}{\partial k} \right|_{k=k_F} = 2t \sin\left(\frac{\pi n_c}{2}\right) \quad (4.5)$$

$$\rho = \frac{1}{\pi v_F} \quad (4.6)$$

$$D_0 = 1 \quad (4.7)$$

から導出した．なお，バンドカットオフ  $D_0$  は cosine バンドの立場では  $2t$  を用いるべきだが， $\xi_K$  の係数自身が大まかな解析により得られたものであるため，ここでは  $D_0 = 1$  としている（ $D_0$  の値は図 4.3 全体を平行移動するだけであることに注意）．図 4.3 に示した結果から，いずれの相互作用  $J$ ，伝導電子密度  $n_c$  に対する相関関数も概ね同一の曲線に一致していることがわかる．これは  $(r/\xi_K)^{-1}$  から  $(r/\xi_K)^{-2}$  へとクロスオーバーするユニバーサルな曲線  $F(r/\xi_K)$  により

$$\langle \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{s}_r \rangle \propto \frac{1}{\xi_K} F\left(\frac{r}{\xi_K}\right) \quad (4.8)$$

と表されることを示している．

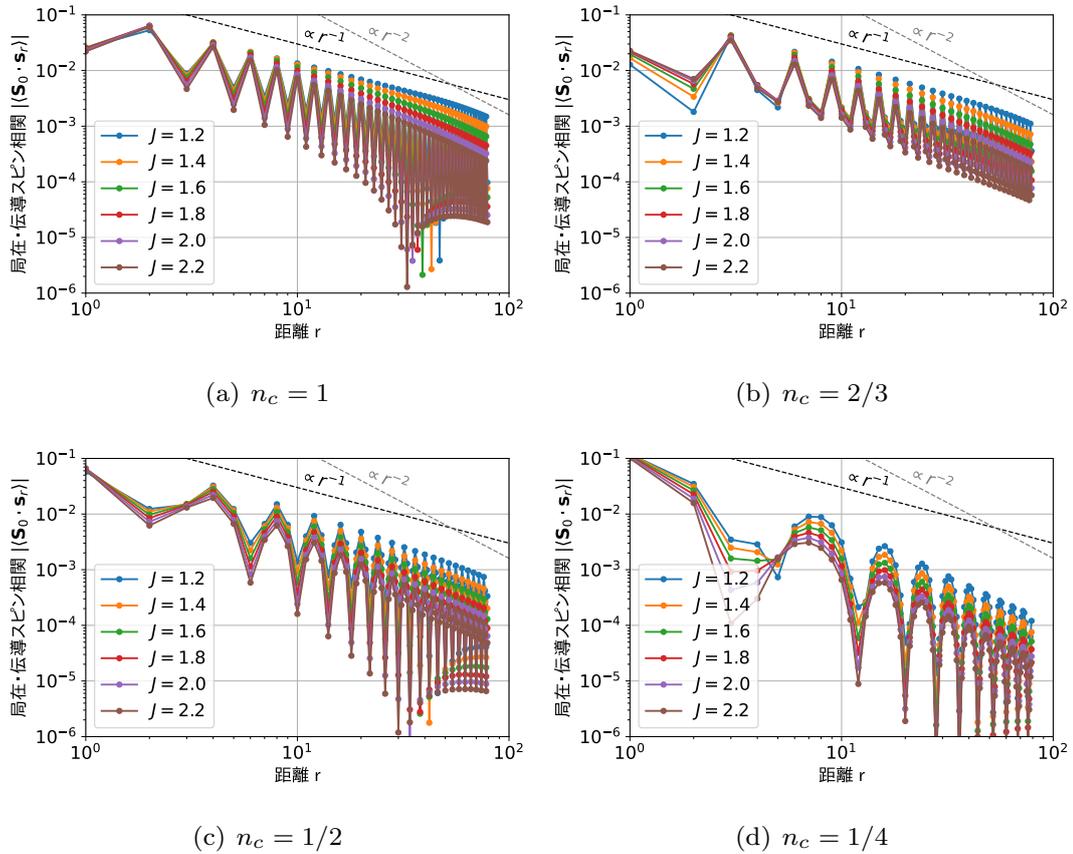


図4.2 局在・伝導電子スピン相関  $\langle S_0 \cdot s_r \rangle$ . 点線は冪の比較のためのガイドラインであり係数に意味はない. 相互作用  $J$  の増大およびフィリング  $n_c$  の減少に対して  $r^{-1}$  から  $r^{-2}$  へ冪が変化していることが確認できる.

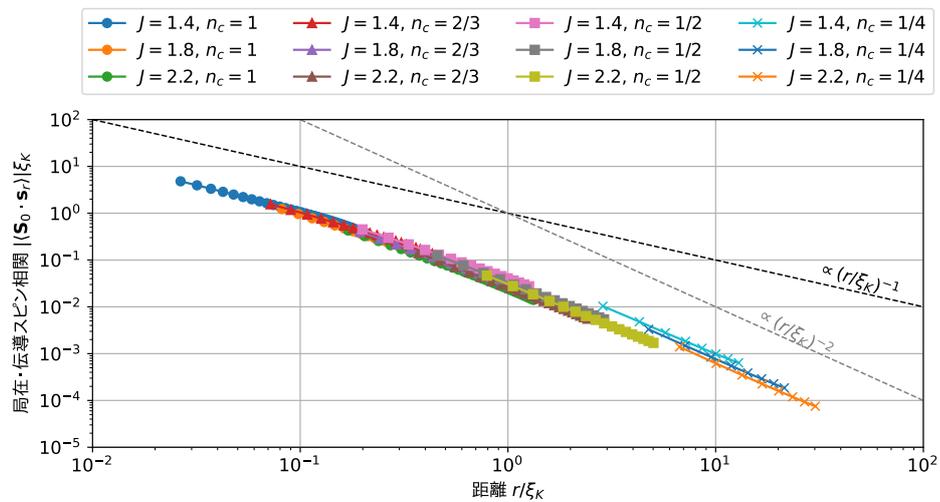


図4.3 局在・伝導電子スピン相関関数  $\langle S_0 \cdot s_r \rangle$  のスケーリング. いずれの相互作用  $J$ , 伝導電子密度  $n_c$  の結果も  $(r/\xi_K)^{-1}$  から  $(r/\xi_K)^{-2}$  へとクロスオーバーするユニバーサルな曲線に一致していることが確認できる.

## 先行研究（数値くりこみ群法）との比較

図 4.3 で得られたスケーリングと同様の振る舞いは、数値くりこみ群法（NRG 法）による先行研究においても報告されている [42]。先行研究の結果を図 4.4 に引用する\*1 同図における相互作用パラメータは  $j = \rho J$  であるため、本研究との比較のための換算表を表 4.1 に示した。  $\xi_K$  を導出する際に先行研究で用いている定数倍のパラメータが不明なため、定数倍の差については考察が難しいものの、クロスオーバーの振る舞いやオーダーについては良い一致を見ているといえる。

本研究で実施した DMRG 法による実空間解析では、相互作用  $J$ 、状態密度  $\rho$  はそれぞれ独立に与えることができ、モデルハミルトニアンを設定する以外に仮定は用いていない。一方、有限サイズの実空間格子を取り扱う場合にはバンドの離散化が存在するため、低エネルギーの物理現象である近藤効果が正しく表現できるかは非自明であった。本研究による DMRG+SSD による解析は低エネルギーの物理現象を正確に表現できる NRG 法とよい一致を見ていることから、低エネルギーにおける現象を正しく取り扱うことができていると考えられる。

NRG 法では、Fermi 面近傍におけるバンドを線形近似した上で Fermi 面近傍の状態密度を一定とみなすなどの仮定が必要である（その帰結として独立な相互作用パラメータは  $j = \rho J$  となる）。そのため、これら両手法の結果が良い一致を見ていることは、局在・伝導電子スピン相関関数の近藤長さ  $\xi_K$  によるスケーリングが、解析手法によらない普遍的な結果であることを示しているといえる。

表 4.1 パラメータ  $j = \rho J$  の換算表.

$n_c$	1	2/3	1/2	1/4
$j$ ( $J = 1.4$ )	0.223	0.257	0.315	0.582
$j$ ( $J = 1.8$ )	0.286	0.331	0.405	0.749
$j$ ( $J = 2.2$ )	0.350	0.404	0.495	0.915

\*1 同図では縦軸のスケーリングが  $T_K$  となっているが、同著者の後続研究 [86] では  $\xi_K$  となっており誤植と思われる。

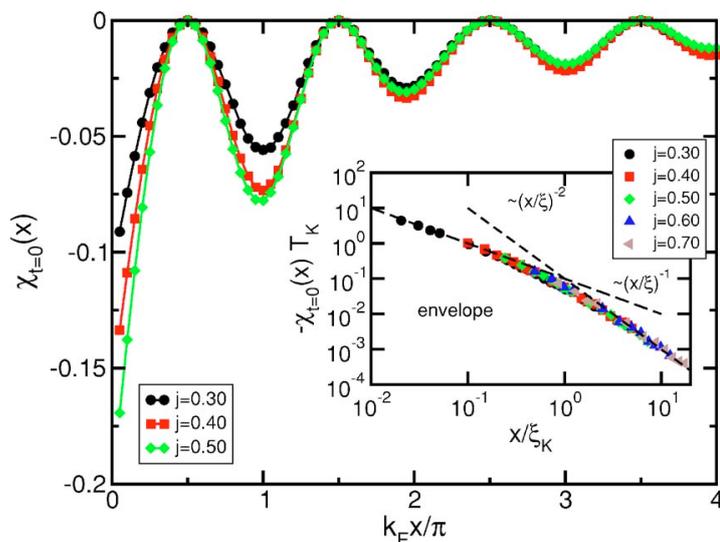


図 4.4 NRG 法を用いた先行研究により示されているスケーリング（画像は [42] より引用）.  $\chi_{t=0}(x)$  が本研究における  $\langle \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{s}_x \rangle$  に対応する. 相互作用パラメータの換算については表 4.1 に示した. 挿入図に示されているように,  $(x/\xi_K)^{-1}$  から  $(x/\xi_K)^{-2}$  へのスケーリングが示されている. なお縦軸のスケーリングについては脚注 \*1 を参照.

## 4.4 2 局在スピン系

前節に示した 1 局在スピン系に対する結果は, DMRG+SSD 法により近藤雲を適切に扱うことができることを示している. そこで, 本研究では RKKY 相互作用と近藤効果の両者が存在する系における近藤雲の解析を目的として, NRG 法では解析が困難である 2 局在スピン系における近藤雲の解析を実施した.

### 4.4.1 電子・正孔対称な系 ( $n_c = 1$ ) における検証

本節では,  $n_c = 1$  における 2 局在スピン系の近藤雲について述べる.  $n_c = 1$  の系は電子・正孔対称性により,  $J$  を大きくしても局在スピン直上の電子数は常に 1 となる. そのため, 局在スピン間距離  $d = 1, 3$  では反強磁性的な RKKY 相互作用が,  $d = 2, 4$  では強磁性的な RKKY 相互作用が  $J$  の値によらず働いている.

図 4.5 – 4.8 に  $n_c = 1$  の 2 局在スピン系における局在・伝導電子スピン相関  $g_i(r) = \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s}_r \rangle$  を示す. 局在スピンは  $\mathbf{S}_0$  および  $\mathbf{S}_1$  の 2 つ存在することから相関は 2 種類存在し, もう一方のスピンを“跨ぐ”ものを  $g_0(r)$ , “跨がない”ものを  $g_1(r)$  とし, 距離  $r$  はそれぞれのスピンの位置から測ったものを用いている. また, プロット点は  $2k_F$  で振動する相関関数のピーク位置だけを取り出したものである. 同図にはマーカー付きの実線と

して計算結果を示したが、図 4.2(a) で得られた 1 局在スピン系の結果を比較のために同色の点線で表示している。

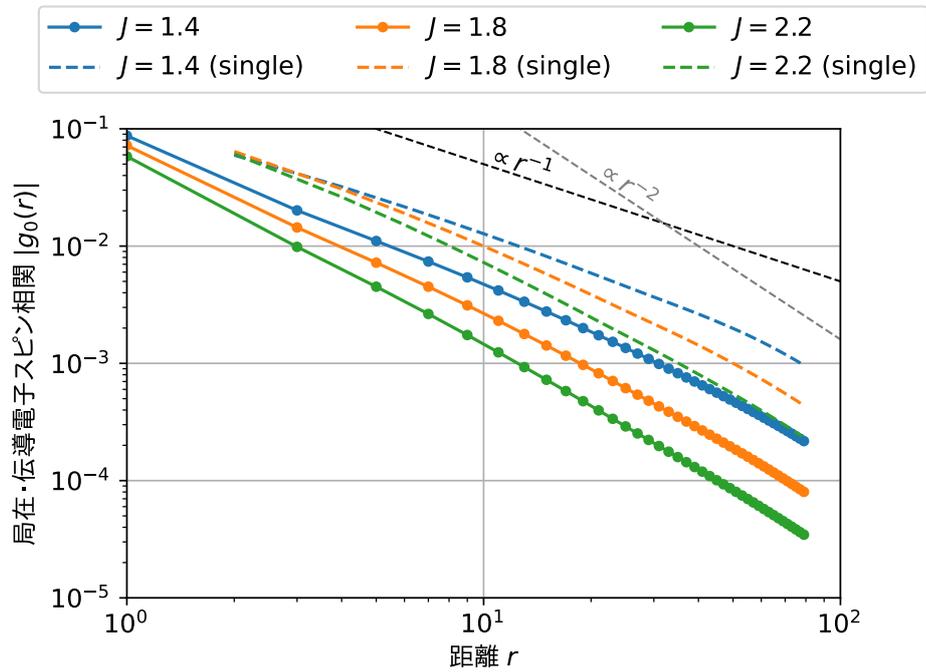
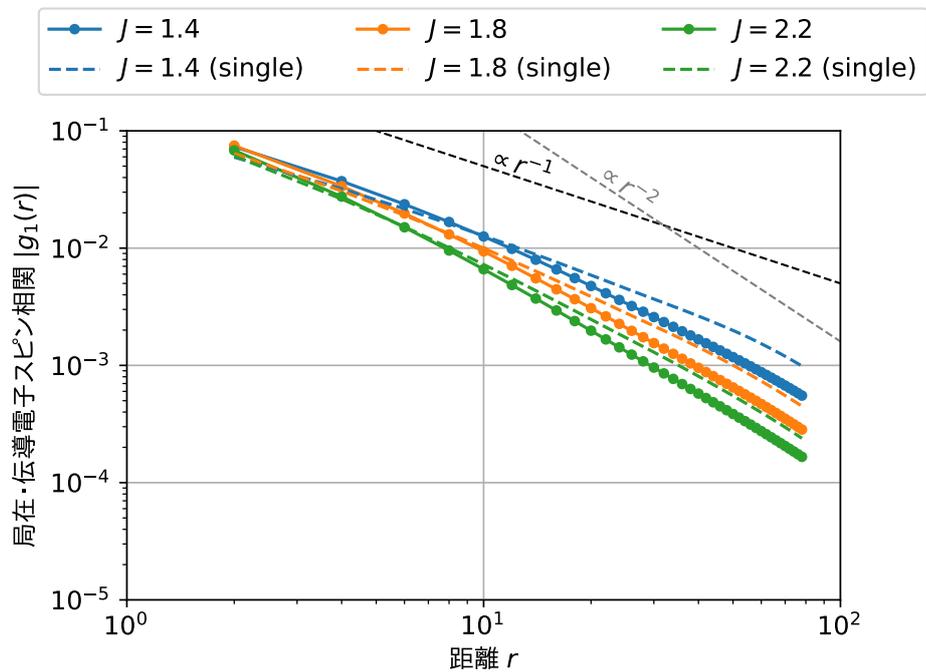
以下では、反強磁性的な RKKY 相互作用が働く場合 ( $d = 1, 3$ )、および強磁性的な RKKY 相互作用が働く場合 ( $d = 2, 4$ ) の結果についてそれぞれ考察する。

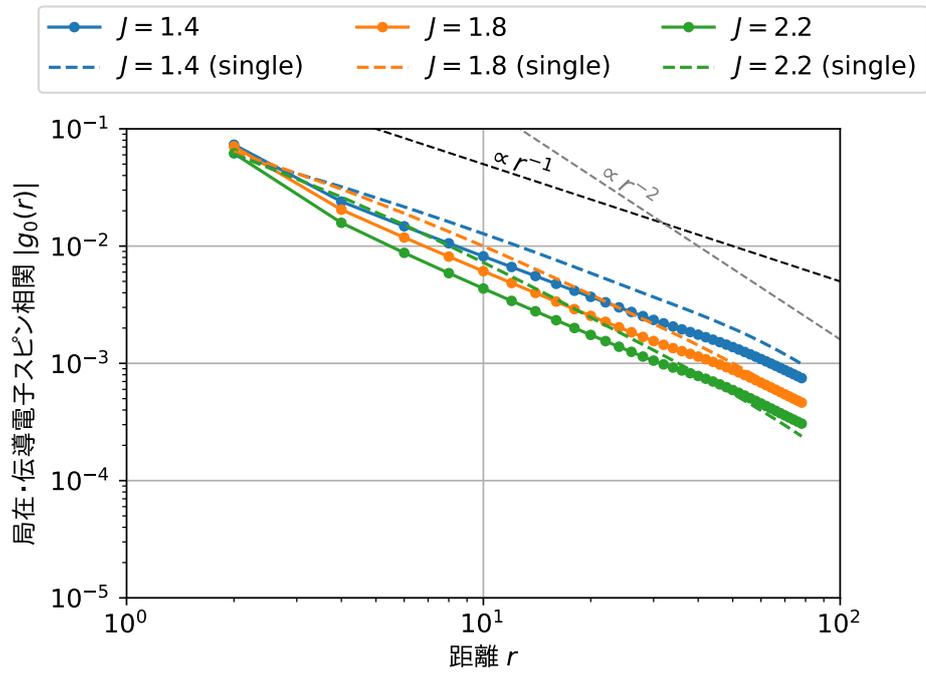
#### 反強磁性 RKKY 的な相互作用の場合 ( $d = 1, 3$ )

はじめに  $d = 1$ 、すなわち 2 局在スピン間に反強磁性的な RKKY 相互作用が働いている場合の結果 (図 4.5) について考察する。相関の絶対値については  $g_0(r)$  が  $g_1(r)$  に対して小さい値を示していることがわかる。これは、 $g_0(r)$  がもう一方のスピンを“跨ぐ”際に反強磁性的な RKKY 相互作用による遮蔽を受けるためである。 $g_0(r)$ 、 $g_1(r)$  の冪についてはいずれも同様の傾向を示しているが、1 局在スピン系の結果 (点線) との比較から、冪が  $r^{-1}$  から  $r^{-2}$  に変化する点が近距離側に移動していることがわかる。これは、近藤雲の大きさ  $\xi_K$  が小さくなっていることを示しており、反強磁性的な RKKY 相互作用が近藤効果を増強することを示唆している。この結果はまた、反強磁性的な RKKY 相互作用で縮んだモーメントを伝導電子が遮蔽するという描像から見ても妥当であると考えられる。同様に反強磁性的な RKKY 相互作用が働く、 $d = 3$  (図 4.7) においても、やはり冪が変化する点が近距離側に移動していることがわかるが、その移動量は  $d = 1$  の場合と比べて小さくなっている。これは RKKY 相互作用が局在スピン間距離に対する減衰関数になっていることから、距離が離れるほど 1 局在スピン系の結果に近づくという点から考えても自然である。

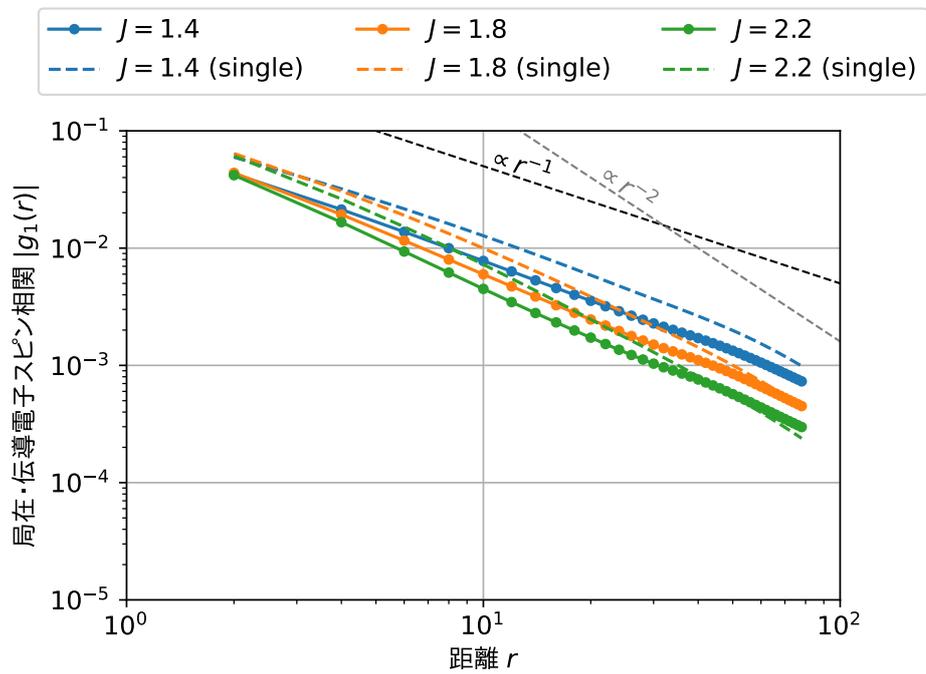
#### 強磁性的な RKKY 相互作用の場合 ( $d = 2, 4$ )

続いて  $d = 2$ 、すなわち 2 局在スピン間に強磁性的な RKKY 相互作用が働いている場合の結果 (図 4.6) について考察する。前節の反強磁性的な RKKY の場合と比べると、 $g_0(r)$ 、 $g_1(r)$  の絶対値がほとんど同程度のオーダーになっていることがわかる。これは、強磁性的な RKKY 相互作用はスピンを遮蔽する効果を持たないためであると考えられる。また、冪についても  $g_0(r)$ 、 $g_1(r)$  の差は見られない。一方、1 局在スピン系の結果 (点線) と比較すると、 $r = \xi_K$  で見られていた  $r^{-1}$  から  $r^{-2}$  へのクロスオーバーが見られなくなっていることがわかる。これは、強磁性的な RKKY 相互作用の存在により近藤効果が抑制されることで、近藤雲の大きさ  $\xi_K$  が実効的に増大したためであると考えられる。また、同様の傾向は  $d = 4$  (図 4.8) においても確認できる。ただし、本結果は  $r^{-2}$  の冪を部分的にしか示すことができず、この結果だけから結論を出すのは難しいといえる。この点については次節において、 $r^{-2}$  の冪がより明瞭な部分における比較を行う。

(a) 局在スピンを跨ぐ相関  $g_0(r)$ (b) 局在スピンを跨がない相関  $g_1(r)$ 図 4.5  $n_c = 1$ ,  $d = 1$  における局在・伝導スピン相関関数.

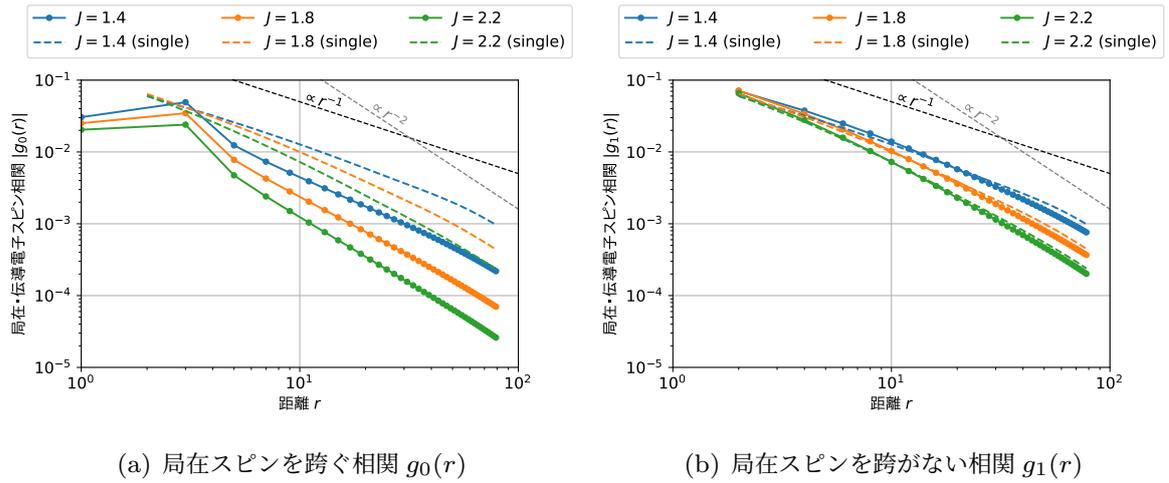
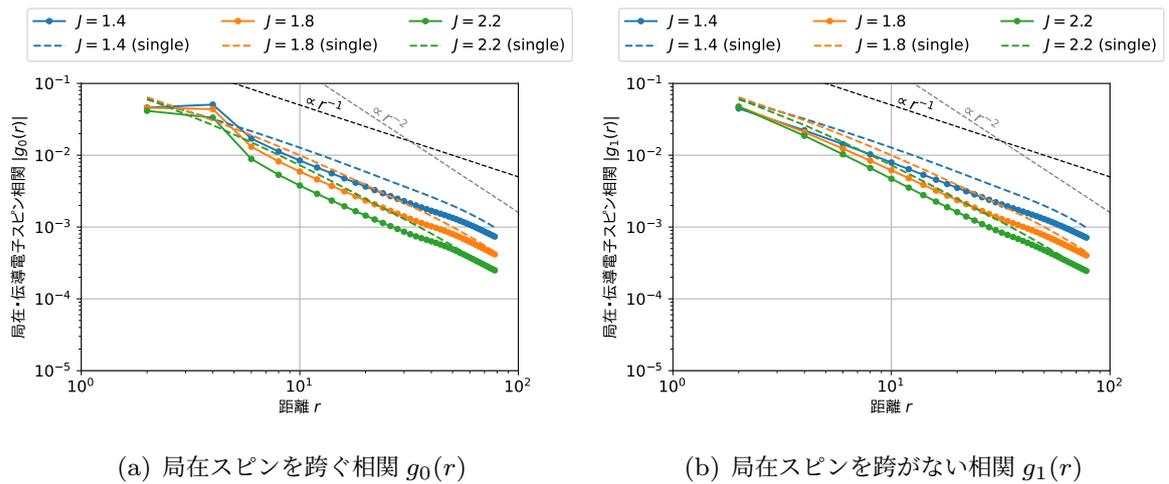


(a) 局在スピンを跨ぐ相関  $g_0(r)$



(b) 局在スピンを跨がない相関  $g_1(r)$

図 4.6  $n_c = 1, d = 2$  における局在・伝導スピンス相関関数.

図 4.7  $n_c = 1, d = 3$  における局在・伝導スピン相関関数.図 4.8  $n_c = 1, d = 4$  における局在・伝導スピン相関関数.

### 4.4.2 単一距離における検証

前節で述べた  $n_c = 1$  における結果は、電子・正孔対称性が存在するため、相互作用  $J$  の大きさによって局在スピ間に働く RKKY 相互作用の符号（強磁性・反強磁性）が変化することはなかった。一方、第3章で示した隣接2スピンスの結果から、 $n_c < 1$  では相互作用  $J$  の大きさの変化に対して局在スピ間相関が強磁性から反強磁性へと変化することがわかっているため、 $n_c < 1$  の状況では相互作用  $J$  の大きさによって近藤雲の拡大・縮小の変化が生じると予想できる。

実際に、図4.9に  $n_c = 1/4$ ,  $d = 1$  における局在・伝導電子スピ相関関数を示す。各パラメータにおける局在スピ間相関は図3.4に示した通りであり、 $J = 1.4, 1.8$  は強磁性、 $J = 2.2$  は反強磁性となっている。前節で示した強磁性の局在スピ相関による冪の変化は不明瞭であったが、図4.9の  $J = 1.4, 1.8$  の結果から、1局在スピンの場合の冪  $\sim r^{-2}$  (点線) と比較して明らかに  $\sim r^{-1}$  の冪へと変化していることがわかる。したがって、強磁性的な局在スピ間相関は近藤雲の領域を拡大することがより明確に示されたといえる。一方、局在スピ間相関が反強磁性となる  $J = 2.2$  については  $\sim r^{-2}$  の冪となっており、1局在スピンの場合とほとんど変化がない。これは、1局在スピンの場合の  $\xi_K$  が既に小さいことから、反強磁性の局在スピ間相関による  $\xi_K$  の減少を捉えることができていないためである。可能であれば1局在スピンスで  $r^{-1}$  の冪を示しているパラメータにおいて単一距離における比較を行うべきであるが、これは以下の2点を同時に満たすことができないことから大きな困難を伴う：

- 局在スピ間相関が強磁性・反強磁性転移しうる条件  $n_c < 1/2$  において  $r^{-1}$  の冪を実現するためには  $J$  が非常に小さい必要がある。
- 反強磁性の局在スピ間相関は  $J$  の大きい領域で生じる。

以上から、単一距離においての検証は完全ではないものの、前節の結果と矛盾する結果は得られていないことから、強磁性的な局在スピ間相関（RKKY相互作用）は近藤雲を拡大し、反強磁性的な局在スピ間相関（RKKY相互作用）は近藤雲を縮小するという結果は一般に成り立つと考えられる。

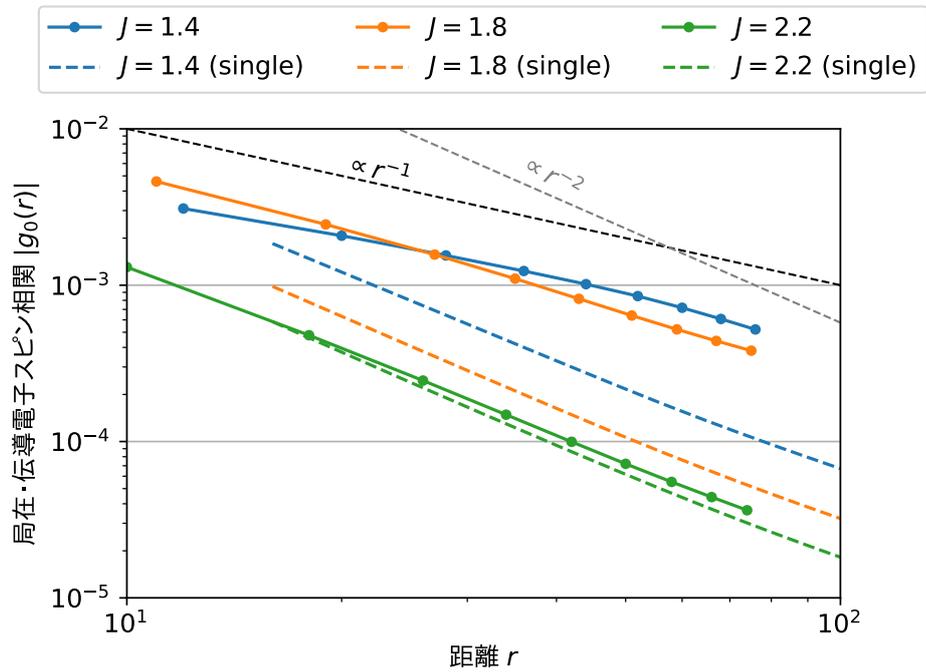
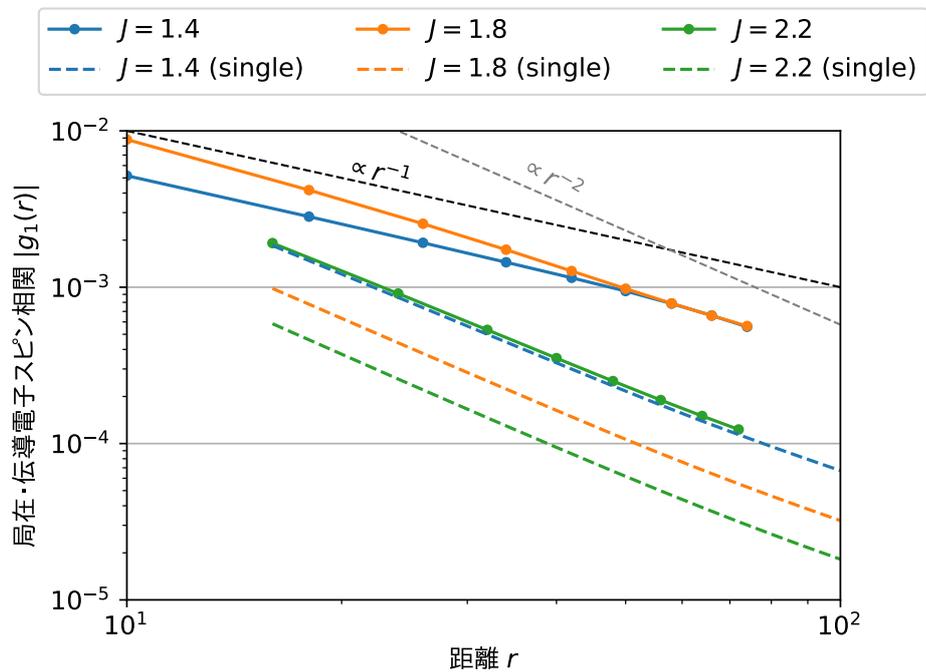
(a) 局在スピンを跨ぐ相関  $g_0(r)$ (b) 局在スピンを跨がない相関  $g_1(r)$ 

図 4.9  $n_c = 1/4$ ,  $d = 1$  における局在・伝導スピン相関関数. 局在スピン間の相関は図 3.4 より,  $J = 1.4, 1.8$  は強磁性,  $J = 2.2$  は反強磁性となっている. 強磁性となる  $J$  に対しては, 1 局在スピン系における  $r^{-2}$  の冪 (点線) と比較して  $r^{-1}$  に近い冪への明らかな変化が見られる.

## 4.5 伝導電子間反発の効果

DMRG+SSD による実空間解析の利点として、格子系のハミルトニアンを直接的に取り扱うことができる点が挙げられる。そのため、複数の局在スピンによる近藤雲の変化と同様に、伝導電子間に本来働いている反発力が近藤雲に与える影響を解析することが可能である。そこで本節では、伝導電子間に働いている反発力  $U_c$  を考慮した系：

$$\mathcal{H}' = \mathcal{H} + U_c \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (4.9)$$

$$n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \quad (4.10)$$

を考え、そこで得られる近藤雲の解析結果について述べる。ただし、通常の近藤効果との比較を目的とし本節では 1 局在スピン系を対象とする。

電子間反発力が働く場合の近藤長さ  $\xi_K$  は非自明であることから、ここでは局在スピン間相関関数の冪の変化について解析を行う。伝導電子間反発力がない場合に近藤雲の内外を特徴づける冪はそれぞれ  $r^{-1}$  と  $r^{-2}$  であったことから、 $U_c = 0$  においてこれらの冪が見られる領域に対して  $U_c$  を変化させることで、伝導電子間反発力の効果を評価することができると考えられる。そこで、図 4.2 に示した結果のうち、近距離において  $r^{-1}$  に近い冪が見られている  $J = 1.4$  ( $n_c = 2/3$ )、および近距離において  $r^{-2}$  に近い冪が見られている  $J = 2.2$  ( $n_c = 1/4$ ) に対して、反発力  $U_c$  を変化させる解析を実施した\*2。

図 4.10 に、 $J = 1.4$  ( $n_c = 2/3$ ) および  $J = 2.2$  ( $n_c = 1/4$ ) における局在・伝導電子スピン間相関関数を示す。また、同データについて、 $J = 1.4$  については近距離（距離 10 から 40）、 $J = 2.2$  については遠距離（距離 40 から 80）における冪  $r^\alpha$  をフィッティングした結果を図 4.11 示す。図 4.11 より、近距離部分 (a) については冪が  $-1$  から  $-3/2$  へ、遠距離部分 (b) については冪が  $-2$  から  $-3/2$  へとそれぞれ変化していることがわかる。この変化は図 4.12 に示すように、 $U_c = 0$  において冪がそれぞれ  $-1$ 、 $-2$  だった領域が一つの冪へと近づいていくことを意味している。

以上の変化は次のように考察することができる：まず、 $U_c = 0$  における通常の近藤効果を  $J \rightarrow \infty$  からの摂動として考える。このとき、局在スピンと相互作用しているサイトの最隣接サイトにおいて、Hubbard 型の相互作用：

$$H' = U' n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \sim \frac{t^4}{J^3} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (4.11)$$

\*2 最も  $r^{-1}$  に近い冪となっているのは  $n_c = 1$  であるが、 $n_c = 1$  は非零の反発力  $U_c$  によって Mott 転移を生じる [81, 82] ため、 $n_c = 1$  は除いている。

が働くことがホッピング項に対する 4 次の摂動から示される [87]. 同様の反発力は、局在スピンからさらに離れたサイトにおいても弱く生じると考えられることから、局在スピンの周辺はわずかに反発力が働く「局所 Fermi 液体」になっていると考えられており、これが近藤雲に対応しているといえる. この状態に対して伝導電子間反発力  $U_c$  が働くと、近藤雲を特徴づけていた反発力  $U'$  の寄与が相対的に弱くなることから、 $U_c$  が大きい状況においては近藤雲の内外の区別がつかなくなることが予想される. 実際、図 4.11 に示した冪はいずれも  $-3/2$  へと漸近しており、近藤雲の描像が消失していく様子を表していると考えられる.

以上に述べた局在・伝導電子スピン相関関数は、局在スピンの影響を受けた伝導電子波動関数の性質を反映したものであるため、その冪には伝導電子の性質が反映されているはずである. 伝導電子間反発力  $U_c$  が働いた伝導電子模型 (Hubbard 模型) は厳密解が存在しており、そこで実現する状態は ( $n_c = 1$  を除いて) 朝永-Luttinger 液体と呼ばれる一次元液体になることがわかっている [81]. 朝永-Luttinger 液体の性質は、Luttinger パラメータ  $K_\rho$  および  $K_\sigma$  により記述され、朝永-Luttinger 液体のスピン相関関数の冪はこれらのパラメータを用いて  $\alpha = -K_\sigma^{-1} - K_\rho$  となる [88]. スピン空間の対称性が成り立つ場合には  $K_\sigma = 1$  であり、さらに  $U_c \rightarrow \infty$  の Hubbard 模型は  $K_\rho = 1/2$  となること [89] を用いると、スピン相関関数の冪は  $\alpha = -3/2$  となる. これは、図 4.11 の  $U_c \rightarrow \infty$  における漸近値に一致していることから、 $U_c$  が大きい場合の冪は距離によらず Hubbard 模型と同様になり、局在スピンの影響を受けなくなる (近藤雲が消失する) といえる.

以上までの議論では、近藤雲が消失するという立場での考察を行ったが、実際には冪の変化と同時に近藤雲のサイズ  $\xi_K$  が変化している可能性は否定できない. この点については、 $U_c = 0$  において  $-3/2$  の冪を示している領域に対して冪の変化を調べることで  $\xi_K$  の変化を捉えることができると考えられる: すなわち可能なシナリオは、 $U_c$  の増大に対して、

- 冪は常に  $-3/2 \implies \xi_K$  が変化しない
- 冪が  $-1$  の側に変化  $\implies \xi_K$  が増大
- 冪が  $-2$  の側に変化  $\implies \xi_K$  が減少

のいずれかとなる. 実際に、 $J = 1.4$  ( $n_c = 2/3$ ) の長距離領域における冪の変化を図 4.13 に示す. この結果から、冪は  $-2$  の側に向かって変化しているため、 $U_c$  の増大に対して  $\xi_K$  は減少しているといえる. この結果を用いて近距離・遠距離における冪の変化を再度考察すると、 $U_c$  の増大により生じている現象は図 4.14 に示すように、近藤雲の外部における冪の変化と  $\xi_K$  の減少が同時に生じているという描像がより妥当であると考えられる.

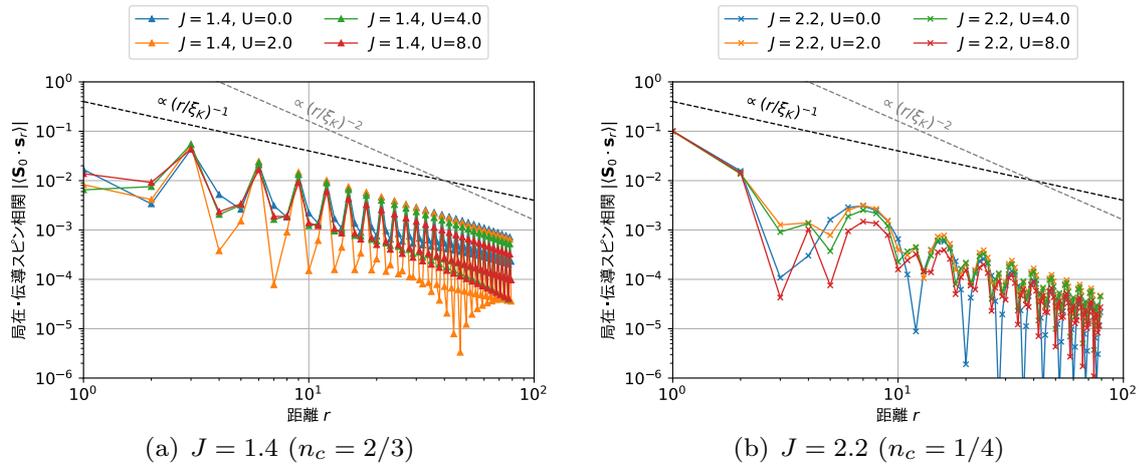


図 4.10 伝導電子間反発力  $U_c$  が働く場合の局在・伝導電子スピン相関関数. この図では明瞭ではないが, 図 4.11 に示すように冪が変化している.

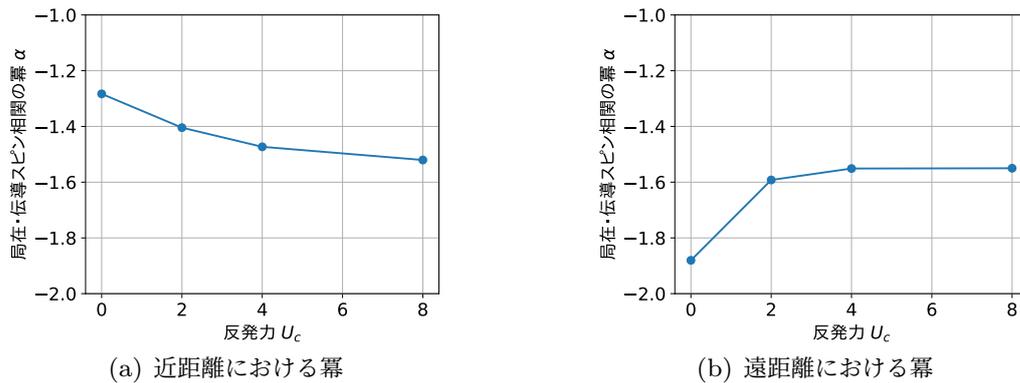


図 4.11 相関関数の冪の変化.  $U_c$  の増加に対して, (a) の近距離部分では冪が  $-1$  から  $-3/2$  へ, (b) の遠距離部分では冪が  $-2$  から  $-3/2$  へそれぞれ変化していることがわかる.

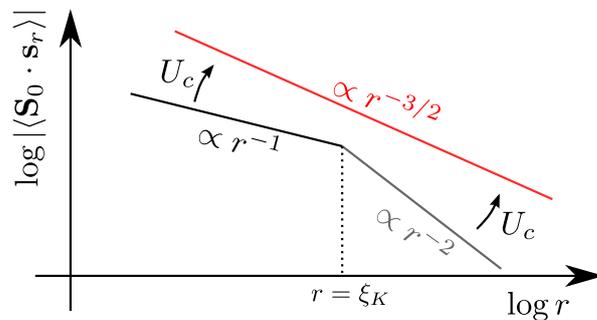


図 4.12 図 4.11 に示した冪の変化の概略図.  $U_c = 0$  において冪がそれぞれ  $-1$ ,  $-2$  だった領域が,  $U_c$  の増大に伴っていずれも  $-3/2$  の冪へ近づいていく.

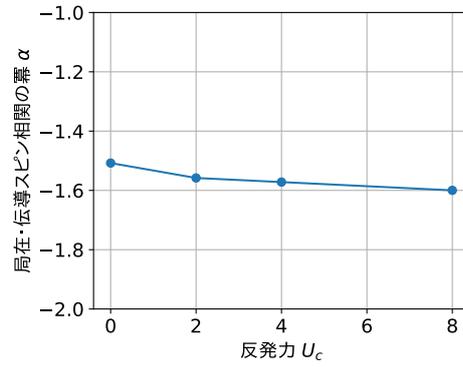


図 4.13  $J = 1.4$  の長距離における冪. この冪は  $U_c = 0$  においておよそ  $-3/2$  になっており,  $U_c$  の増大に対して冪が  $-2$  の側に変化していることがわかる.

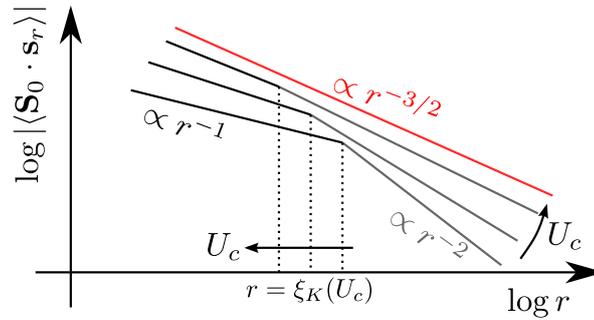


図 4.14 図 4.11, 4.13 から帰結される近藤雲の変化.  $U_c$  の増大によって近藤雲の外 ( $r > \xi_K$ ) における冪が  $-3/2$  へと近づいていくとともに  $\xi_K$  が減少することで, 相関全体が  $-3/2$  の冪へと漸近していく.

## 第 5 章

# 結論

本研究では、半導体量子ドットにより実現可能であると考えられる「一次元少数不純物近藤系」の基底状態を、DMRG+SSD 法を用いることで解析した。得られた結論と残された課題を以下に示す。

### 5.1 局在スピン磁気構造

- 隣接した 2, 3, 4 スピン系の磁気構造を網羅的に解析した。その結果、近藤効果により局在スピンへと伝導電子が誘引され、この伝導電子が作り出すスピン位相の反転により局在スピン磁気構造が段階的に変化することを示した。
- 整合フィリングに対する解析により、複数の局在電子と 1 つの伝導電子が形成する複合粒子的安定状態の存在を明らかにした。また、1 次元近藤格子模型の整合フィリングにおいて存在している絶縁相が、この複合粒子描像による階層的な量子多体状態であるという新しい解釈を提示した。
- 任意距離の 2 スピン系を解析することで、近藤効果と RKKY 相互作用の両者を考慮することで説明可能な強磁性・反強磁性転移の存在を明らかにした。

本研究では、相互作用  $J$ 、およびフィリング  $n_c$  の変化による転移を広く明らかにした。これらのパラメータは、量子ドット系におけるゲート電圧により変更できるため、本研究の結果は、局在スピン間相関を能動的に制御する上で最も基本的な情報になると考えられる。特に、スピン相関の位相を局所電子密度により制御できる点は、伝導電子を用いた長距離の局在スピン間相関の制御に対して新しい可能性を与えるものになると考えている。また、本研究で得られた複数の局在スピンと伝導電子による量子多体状態は、一つの局在スピンと伝導電子による一重項状態として理解されている近藤効果を、複数局在スピンへと拡張した状態の存在を示していると考えられる。

## 5.2 近藤雲の解析

- 一不純物系の近藤雲の解析を通じて、数値くりこみ群法で指摘されている相関関数のクロスオーバーが、DMRG+SSDによる実空間解析においても確認できることを検証した。
- 2局在スピン系の近藤雲を解析することで、RKKY相互作用が強磁性的に働く場合には近藤雲の領域が拡大し、反強磁性的に働く場合には縮小することを示した。
- 伝導電子間反発力による近藤雲の変化を解析し、伝導電子間反発力により近藤雲が縮小することを示した。

## 5.3 今後の課題

本研究では、各局在スピンの相互作用  $J$  をいずれも同じ値とした解析を実施したが、量子ドットにおいては各ドットの相互作用を異なる値に設定することが容易であるため、局在スピン毎に異なる  $J$  を持つ場合のスピン構造の解析が次のステップとして挙げられる。また、定量的な比較という点では量子ドットの電荷自由度を残した「少数不純物 Anderson 模型」の解析も必要になると考えられる。

本研究で得られた局在スピン間相関の変化はあくまで基底状態に対するものであることから、量子ゲートなどへの応用を想定してダイナミクスを制御可能であるかを検証する必要がある。ただし、本研究で用いた SSD はダイナミクスに対する適用が不可能（ないし可能であるとしても限定的）であることから、境界条件によらない解析には困難が伴うと予想される。

近藤雲については、複数スピン及び伝導電子間反発による近藤効果の増強・抑制の傾向が本研究で明らかになったものの、定量的な比較までは踏み込むことができていない。この点については、単一パラメータに対して非常に長距離の相関関数を計算することで検証可能であると考えられるものの、DMRG法で長距離の相関を計算する際には、精度の保証に大きな努力を要する点に注意が必要である。

## 付録 A

# DMRG におけるフェルミオンサインの取り扱い

### A.1 基本事項

フェルミオンサインはフェルミオンの交換関係から生じる，多体基底間の遷移要素で加味なくてはならない符号のことである．例として，長距離ホッピングを持つスピンレスフェルミオン系を考える．多体基底を定義する際は，生成演算子の順番が一意になるよう定める必要がある．ここでは，この順番をサイト番号順に定めることにする．このとき，適当な状態  $|\psi\rangle, |\varphi\rangle$  は，

$$|\psi\rangle = c_1^\dagger c_2^\dagger c_3^\dagger c_4^\dagger c_5^\dagger c_9^\dagger |0\rangle \quad (\text{A.1})$$

$$|\varphi\rangle = c_1^\dagger c_3^\dagger c_4^\dagger c_5^\dagger c_8^\dagger c_9^\dagger |0\rangle \quad (\text{A.2})$$

として表すことができる．これらの間における，第2サイトから第8サイトへのホッピング遷移要素は

$$\begin{aligned} \langle \varphi | c_8^\dagger c_2 | \psi \rangle &= \langle 0 | (c_9 c_8 c_5 c_4 c_3 c_1) c_8^\dagger c_2 (c_1^\dagger c_2^\dagger c_3^\dagger c_4^\dagger c_5^\dagger c_9^\dagger) | 0 \rangle \\ &= \langle 0 | c_9 c_8 c_5 c_4 c_3 c_8^\dagger c_1 c_1^\dagger c_2 c_2^\dagger c_3^\dagger c_4^\dagger c_5^\dagger c_9^\dagger | 0 \rangle \\ &= (-1)^3 \langle 0 | c_9 c_8 c_8^\dagger c_5 c_4 c_3 c_1 c_1^\dagger c_2 c_2^\dagger c_3^\dagger c_4^\dagger c_5^\dagger c_9^\dagger | 0 \rangle \\ &= -1 \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

となる．ここで，2段目では  $c_2$  が  $c_2^\dagger$  の左隣になるまで右方向に交換を行い，同時に  $c_8$  を同じ回数だけ左方向に交換した状況を表している．このとき，演算子の交換は偶数回行っているため符号は生じない．さらに3段目では， $c_8^\dagger$  が  $c_8$  の右隣になるまで  $c_3, c_4, c_5$  と交換を行っている．この交換回数は3回であるため，符号が  $(-1)^3$  という形で現れることになる．この議論を一般化すると，第  $i$  サイトから第  $j$  サイトへのホッピング遷移要素に

は、第  $i$  サイトと第  $j$  サイトの間に存在する電子数に依存した符号が付くことになる。具体的には、

$$(-1)^{n_{i+1}+n_{i+2}+\dots+n_{j-1}} = (-1)^{n_{i+1}}(-1)^{n_{i+2}}\dots(-1)^{n_{j-2}}(-1)^{n_{j-1}} \quad (\text{A.4})$$

なる符号を付ければよい ( $i < j$ )。

## A.2 DMRG におけるフェルミオンサインの取り扱い

続いて以上の議論を DMRG 法に対して適用する。テンソルネットワークのダイアグラム記法を用いると、フェルミオンサインを含めたホッピング項は図 A.1 のように表現できる。

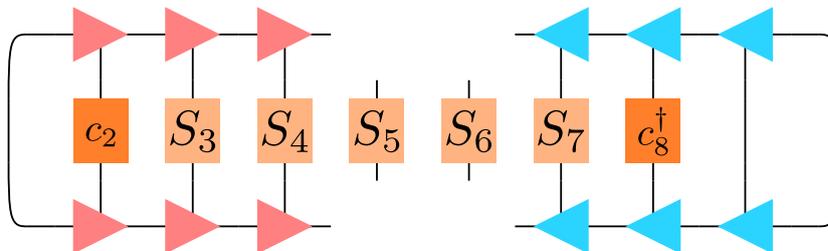


図 A.1 DMRG における長距離ホッピング項  $c_8^\dagger c_2$  の表現.

ただし、各テンソルは式 (2.11) で定義した基底に対して以下のように表現される：

$$c_i = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.5})$$

$$S_k = (-1)^{n_k} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.6})$$

したがって、DMRG 法において具体的に行う手順は以下の通りとなる：

1. 2 番目のサイトとブロック 2 が一致した時点で  $c_2$  の表現を作成し基底変換を行う。また、8 番目のサイトとブロック 3 が一致した時点で  $c_8^\dagger$  の表現を作成し基底変換を行う。(図 A.2(a)).
2. 次以降の DMRG のイテレーションでは、図 A.2(b) に示すように  $S_k$  を含めた表現を作成し基底変換を行うことで、演算子の表現を追跡していく。



図 A.2 符号付きの生成消滅演算子の追跡. (a) によりブロック 1 への組み込みを行い, 以降 (b) により符号付きの表現を作成していく.

### A.3 スピングルな電子系における適用

スピン自由度をもつ電子系においても基本的な考え方は全く同様である. 1 サイトあたり 1 軌道の電子系については, 例えば生成演算子の順番を

$$c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger \cdots c_{8\uparrow}^\dagger c_{8\downarrow}^\dagger \cdots \quad (\text{A.7})$$

のように定義することができる. このときホッピング項  $c_{8\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow}$  を表現するダイアグラムは図 A.3 のようになる.

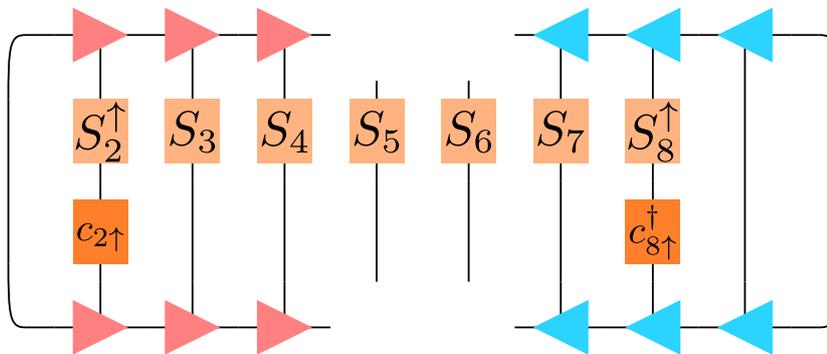


図 A.3 DMRG における長距離ホッピング項  $c_{8\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow}$  の表現.

ただし各テンソルは基底を順に  $|\uparrow\downarrow\rangle, |\uparrow-\rangle, |-\downarrow\rangle, |--\rangle$  としたときに以下のように表現

される：

$$c_{i\uparrow} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.8})$$

$$S_k = (-1)^{n_{k\uparrow} + n_{k\downarrow}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.9})$$

$$S_2^\uparrow = S_i^\uparrow = (-1)^{n_{i\downarrow}} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.10})$$

$$S_8^\uparrow = S_j^\uparrow = \mathbf{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.11})$$

ここで、式 (A.7) で定義した順番において  $c_{2\uparrow}^\dagger$  と  $c_{8\uparrow}^\dagger$  の間に  $c_{2\downarrow}^\dagger$  が位置していることを考慮するよう  $S_2^\uparrow$ ,  $S_8^\uparrow$  を定義している．一般の  $i < j$  においても同じ表現を用いることができる．またダウンスピンに対するホッピング  $c_{j\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow}$  ( $i < j$ ) については、 $S_i^\downarrow = \mathbf{1}$ ,  $S_j^\downarrow = (-1)^{n_{j\uparrow}}$  を考慮する必要がある．

以上の考えをさらに局在・遍歴電子系（2 軌道模型）に対して拡張する．演算子の並べ方は自由に選べるが、ここでは

$$c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger f_{1\uparrow}^\dagger f_{1\downarrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger f_{2\uparrow}^\dagger f_{2\downarrow}^\dagger \cdots \quad (\text{A.12})$$

のように並べることとする ( $c^\dagger$ : 伝導電子の生成演算子,  $f^\dagger$ : 局在電子の生成演算子)．このとき、伝導電子のホッピング項で考慮しなければならない符号は

$$S_k = (-1)^{n_{k\uparrow}^c + n_{k\downarrow}^c + n_{k\uparrow}^f + n_{k\downarrow}^f} \quad (\text{A.13})$$

$$S_i^\uparrow = (-1)^{n_{i\downarrow}^c + n_{i\uparrow}^f + n_{i\downarrow}^f} \quad (\text{A.14})$$

$$S_j^\uparrow = \mathbf{1} \quad (\text{A.15})$$

$$S_i^\downarrow = (-1)^{n_{i\uparrow}^f + n_{i\downarrow}^f} \quad (\text{A.16})$$

$$S_j^\downarrow = (-1)^{n_{j\uparrow}^c} \quad (\text{A.17})$$

となる ( $i < j$ )\*<sup>1</sup>．本研究で取り扱った少数不純物近藤系については、局在スピンの存在するサイトは  $n_{k\uparrow}^f + n_{k\downarrow}^f = 1$ 、局在スピンの存在しないサイトは  $n_{k\uparrow}^f + n_{k\downarrow}^f = 0$  として符号

\*<sup>1</sup> 一見すると複雑に見えるが、 $S_i^\sigma S_{i+1}^\sigma \cdots S_{j-1}^\sigma S_j^\sigma$  のように組み合わせると式 (A.12) において  $c_{i\sigma}^\dagger$  と  $c_{j\sigma}^\dagger$  の間の演算子を数えていることがわかる．

を決めれば十分である。また、ホッピング項が最隣接に限られるハミルトニアンについては、図 A.3 から明らかなように  $S_k$  を考慮する必要はない。そのため、式 (A.14)–(A.17) に対応する新しい演算子：

- 「右にホッピングする際の消滅演算子（または右からホッピングしてくる際の生成演算子）」  $c_{i\sigma}^{(R)}$
- 「左にホッピングする際の消滅演算子（または左からホッピングしてくる際の生成演算子）」  $c_{i\sigma}^{(L)}$

を

$$c_{i\uparrow}^{(R)} = c_{i\uparrow} (-1)^{n_{i\downarrow}^c + n_{i\uparrow}^f + n_{i\downarrow}^f} \quad (\text{A.18})$$

$$c_{i\uparrow}^{(L)} = c_{i\uparrow} \quad (\text{A.19})$$

$$c_{i\downarrow}^{(R)} = c_{i\downarrow} (-1)^{n_{i\uparrow}^f + n_{i\downarrow}^f} \quad (\text{A.20})$$

$$c_{i\downarrow}^{(L)} = c_{i\downarrow} (-1)^{n_{i\uparrow}^c} \quad (\text{A.21})$$

のように定義し、ホッピング項を常に  $c_{i\sigma}^{(R)\dagger} c_{i+1,\sigma}^{(L)}$  と構成することで、実質的にフェルミオンサインを消去して DMRG を実装することができる。このとき、ブロック 1 で追跡する演算子は  $c_{i\uparrow}^{(R)}, c_{i\downarrow}^{(R)}$ 、ブロック 4 で追跡する演算子は  $c_{i\uparrow}^{(L)}, c_{i\downarrow}^{(L)}$  となる。

なお一次元 Hubbard 模型：

$$H = -t \sum_i \left( c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + \text{h.c.} \right) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (\text{A.22})$$

のようなハミルトニアンについては、生成演算子の順番を  $c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\uparrow}^\dagger \cdots c_{1\downarrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger \cdots$  のように定義することで、フェルミオンサインを消去できることも記しておく。



## 参考文献

- [1] 近藤淳, 「金属電子論」 (裳華房, 1983).
- [2] 芳田奎, 「磁性」 (朝倉書店, 1972).
- [3] 上田和夫 大貫惇睦, 「重い電子系の物理」 (裳華房, 1998).
- [4] A. C. Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions* (Cambridge University Press, 1993).
- [5] W. de Haas, J. de Boer, and G. van den Berg, *Physica* **1**, 1115 (1934).
- [6] J. Kondo, *Prog. Theo. Phys.* **32**, 37 (1964).
- [7] P. W. Anderson, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **3**, 2436 (1970).
- [8] A. A. Abrikosov, *Physics* **2**, 5 (1965).
- [9] K. G. Wilson, *Rev. Mod. Phys.* **47**, 773 (1975).
- [10] P. B. Wiegmann, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **14**, 1463 (1981).
- [11] N. Andrei, K. Furuya, and J. H. Lowenstein, *Rev. Mod. Phys.* **55**, 331 (1983).
- [12] K. Yosida, *Phys. Rev.* **147**, 223 (1966).
- [13] K. Yosida and A. Yoshimori, *Prog. Theor. Phys.* **42**, 753 (1969).
- [14] P. Nozières and A. Blandin, *J. Phys. France* **41**, 193 (1980).
- [15] V. Barzykin and I. Affleck, *Phys. Rev. B* **57**, 432 (1998).
- [16] F. D. M. Haldane, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **11**, 5015 (1978).
- [17] M. A. Ruderman and C. Kittel, *Phys. Rev.* **96**, 99 (1954).
- [18] T. Kasuya, *Prog. Theor. Phys.* **16**, 45 (1956).
- [19] K. Yosida, *Phys. Rev.* **106**, 893 (1957).
- [20] Y. Yafet, *Phys. Rev. B* **36**, 3948 (1987).
- [21] T. M. Rusin and W. Zawadzki, *J. Magn. Magn. Mater.* **441**, 387 (2017).
- [22] S. Doniach, *Physica B+C* **91**, 231 (1977).
- [23] Q. Si and F. Steglich, *Science* **329**, 1161 (2010).
- [24] R. Hanson, L. P. Kouwenhoven, J. R. Petta, S. Tarucha, and L. M. K. Vandersypen, *Rev. Mod. Phys.* **79**, 1217 (2007).

- [25] L. P. Kouwenhoven, D. G. Austing, and S. Tarucha, Rep. Prog. Phys. **64**, 701 (2001).
- [26] A. Spinelli, M. Gerrits, R. Toskovic, B. Bryant, M. Ternes, and A. F. Otte, Nat. Commun. **6**, 10046 (2015).
- [27] I. Bloch, J. Dalibard, and S. Nascimbène, Nat. Phys. **8**, 267 (2012).
- [28] M. Nakagawa and N. Kawakami, Phys. Rev. Lett. **115**, 165303 (2015).
- [29] K. Ono, Y. Amano, T. Higomoto, Y. Saito, and Y. Takahashi, Phys. Rev. A **103**, L041303 (2021).
- [30] 江藤幹雄, 物性研究 **85**, 853 (2006).
- [31] C. W. J. Beenakker, Phys. Rev. B **44**, 1646 (1991).
- [32] D. Goldhaber-Gordon, J. Göres, M. A. Kastner, H. Shtrikman, D. Mahalu, and U. Meirav, Phys. Rev. Lett. **81**, 5225 (1998).
- [33] S. M. Cronenwett, T. H. Oosterkamp, and L. P. Kouwenhoven, Science **281**, 540 (1998).
- [34] W. G. van der Wiel, S. D. Franceschi, T. Fujisawa, J. M. Elzerman, S. Tarucha, and L. P. Kouwenhoven, Science **289**, 2105 (2000).
- [35] H. Tamura, K. Shiraishi, and H. Takayanagi, Jpn. J. Appl. Phys. **43**, L691 (2004).
- [36] I. Affleck, *Perspectives of Mesoscopic Physics*, 1 (2010).
- [37] I. V. Borzenets, J. Shim, J. C. H. Chen, A. Ludwig, A. D. Wieck, S. Tarucha, H.-S. Sim, and M. Yamamoto, Nature **579**, 210 (2020).
- [38] P. Simon and I. Affleck, Phys. Rev. Lett. **89**, 206602 (2002).
- [39] A. Barenco, C. H. Bennett, R. Cleve, D. P. DiVincenzo, N. Margolus, P. Shor, T. Sleator, J. A. Smolin, and H. Weinfurter, Phys. Rev. A **52**, 3457 (1995).
- [40] N. Schuch and J. Siewert, Phys. Rev. A **67**, 032301 (2003).
- [41] J. R. Petta, A. C. Johnson, J. M. Taylor, E. A. Laird, A. Yacoby, M. D. Lukin, C. M. Marcus, M. P. Hanson, and A. C. Gossard, Science **309**, 2180 (2005).
- [42] L. Borda, Phys. Rev. B **75**, 041307(R) (2007).
- [43] B. Lechtenberg and F. B. Anders, Phys. Rev. B **98**, 035109 (2018).
- [44] K. Hallberg and R. Egger, Phys. Rev. B **55**, R8646 (1997).
- [45] A. Schwabe, D. Gütersloh, and M. Potthoff, Phys. Rev. Lett. **109**, 257202 (2012).
- [46] A. Schwabe, M. Hänsel, M. Potthoff, and A. K. Mitchell, Phys. Rev. B **92**, 155104 (2015).
- [47] A. Holzner, I. P. McCulloch, U. Schollwöck, J. von Delft, and F. Heidrich-Meisner, Phys. Rev. B **80**, 205114 (2009).
- [48] S. A. Basylko, P. H. Lundow, and A. Rosengren, Phys. Rev. B **77**, 073103 (2008).

- [49] I. P. McCulloch, A. Juozapavicius, A. Rosengren, and M. Gulacsi, *Phys. Rev. B* **65**, 052410 (2002).
- [50] J. C. Xavier, R. G. Pereira, E. Miranda, and I. Affleck, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 247204 (2003).
- [51] J. C. Xavier and E. Miranda, *Phys. Rev. B* **78**, 144406 (2008).
- [52] Y. Huang, D. N. Sheng, and C. S. Ting, *Phys. Rev. B* **102**, 245143 (2020).
- [53] N. Shibata and C. Hotta, *Phys. Rev. B* **84**, 115116 (2011).
- [54] T. Otsuka, E. Abe, S. Katsumoto, Y. Iye, G. L. Khym, and K. Kang, *J. Phys. Soc. Jpn* **76**, 084706 (2007).
- [55] A. M. Läuchli, J. Sudan, and R. Moessner, *Phys. Rev. B* **100**, 155142 (2019).
- [56] S. R. White, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2863 (1992).
- [57] S. R. White, *Phys. Rev. B* **48**, 10345 (1993).
- [58] S. R. White and R. M. Noack, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 3487 (1992).
- [59] C. Eckart and G. Young, *Psychometrika* **1**, 211 (1936).
- [60] 西野友年, 「テンソルネットワークの基礎と応用 (SGC ライブラリ 169)」 (サイエンス社, 2021).
- [61] I. P. McCulloch, *J. Stat. Mech. Theory and Exp.* **2007**, P10014 (2007).
- [62] 成島毅, *物性研究* **69**, 702 (1998).
- [63] U. Schollwöck, *Ann. Phys.* **326**, 96 (2011).
- [64] S. R. White, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3633 (1996).
- [65] M. Vekić and S. R. White, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 4283 (1993).
- [66] M. Vekić and S. R. White, *Phys. Rev. B* **53**, 14552 (1996).
- [67] A. Gendiar, R. Krčmar, and T. Nishino, *Prog. Theor. Phys.* **122**, 953 (2009),  
**Erratum:** [68].
- [68] A. Gendiar, R. Krčmar, and T. Nishino, *Prog. Theor. Phys.* **123**, 393 (2010).
- [69] H. Katsura, *J. Phys. A: Math. Theor.* **44**, 252001 (2011).
- [70] I. Maruyama, H. Katsura, and T. Hikihara, *Phys. Rev. B* **84**, 165132 (2011).
- [71] H. Katsura, *J. Phys. A: Math. Theor.* **45**, 115003 (2012).
- [72] K. Okunishi and H. Katsura, *J. Phys. A: Math. Theor.* **48**, 445208 (2015).
- [73] T. Hikihara and T. Nishino, *Phys. Rev. B* **83**, 060414 (2011).
- [74] K. Yonaga and N. Shibata, *J. Phys. Soc. Jpn* **84**, 094706 (2015).
- [75] C. Hotta and N. Shibata, *Phys. Rev. B* **86**, 041108(R) (2012).
- [76] C. Hotta, S. Nishimoto, and N. Shibata, *Phys. Rev. B* **87**, 115128 (2013).
- [77] M. Gulácsi, *Adv. Phys.* **53**, 769 (2004).
- [78] R. Peters and N. Kawakami, *Phys. Rev. B* **86**, 165107 (2012).

- [79] Y. Nagaoka, Phys. Rev. **147**, 392 (1966).
- [80] M. Sigrist, H. Tsunetsuga, and K. Ueda, Phys. Rev. Lett. **67**, 2211 (1991).
- [81] E. H. Lieb and F. Y. Wu, Phys. Rev. Lett. **20**, 1445 (1968).
- [82] F. H. L. Essler, *The One-Dimensional Hubbard Model* (Cambridge University Press, 2005).
- [83] 若目田寛, 東北大学理学研究科 博士論文 (2016).
- [84] A. M. Tsvelik and O. M. Yevtushenko, Phys. Rev. B **100**, 165110 (2019).
- [85] H. Ishii, J. Low Temp. Phys. **32**, 457 (1978).
- [86] L. Borda, M. Garst, and J. Kroha, Phys. Rev. B **79**, 100408 (2009).
- [87] P. Nozières, J. Low Temp. Phys. **17**, 31 (1974).
- [88] J. Voit, Rep. Prog. Phys. **58**, 977 (1995).
- [89] H. J. Schulz, Phys. Rev. Lett. **64**, 2831 (1990).

# 謝辞

本研究を実施するにあたり、多くの方々からご指導、ご協力をいただきました。この場を借りて感謝申し上げます。

本博士論文の審査を引き受けてくださった是常隆先生（東北大学理学研究科准教授）をはじめ、木村憲彰先生（東北大学理学研究科教授）、遊佐剛先生（東北大学理学研究科教授）、那須謙治先生（東北大学理学研究科准教授）に御礼申し上げます。

本研究の指導教官である柴田尚和先生（東北大学理学研究科教授）には、計算機の管理や研究結果についての議論をはじめとして、学部4年生より6年間もの間大変お世話になりました。また物理学によらないお話についても数多くのお時間をいただき、学問だけにとどまらない多様な価値観を得ることができました。

押山広樹先生（東北大学情報科学研究科特任助教）には、修士課程より引き続き物性物理学についての議論を多数いただくとともに、情報科学の視点からの新しい話題に触れることのできる機会をいただきました。また、大関真之先生（東北大学情報科学研究科教授）、張山昌論先生（東北大学情報科学研究科教授）、ウィッデヤスーリヤ ハシタ ムトゥマラ先生（東北大学情報科学研究科准教授）からは、セミナーを通じて異分野の研究に触れることのできる貴重な機会をいただきました。

柴田グループの飯野千尋さん、北川皓也さん、芦原洋平さん、佐藤香介さん、秋山和範さん、小田中謙太さん、長谷川博紀さん、皆川幸穂さんからは、グループセミナーを通じて研究に対する数多くの議論やご意見をいただきました。中でも、同期である北川皓也さんとは、物理学やプログラミングをはじめとした議論をするとともに、日頃の雑談に至るまで数多くの時間を共にしていただき、研究生活を非常に有意義に過ごすことができました。また、北川皓也さんと共に、同期の廣部麻衣さん、伊東直洋さんには、研究の話題に限らない様々な相談に乗っていただくなど、同期の皆様の存在はときに厳しい博士課程の中で大きな支えとなりました。

物性理論研究室秘書の若生洋子様、山本直美様には、日頃から多数のご助力をいただきました。お二人のお力添えなくしては研究もままならなかったと言っても過言ではありません。

キャンパスライフ支援室の岩淵将士様，菊地幸恵様，またスタッフの皆様につきましては，TA 活動をはじめとして大変お世話になりました。TA 活動により教育に関する知見を得られただけでなく，“ほっと一息”できる空間を提供いただいたことは，忙しい研究生活の中で大きな心の支えとなりました。

本研究は，以上に挙げた多くの方々のご指導，ご協力により成し遂げることができました。心より感謝申し上げます。最後に，私の学生生活を支え，学問を志す機会を与えてくれた両親をはじめとする家族に感謝いたします。

# 研究成果

## 出版論文

- Y. Kurebayashi, H. Oshiyama, and N. Shibata, *Ground-state phase diagram of the one-dimensional  $t$ - $J_s$ - $J_\tau$  model at quarter filling*, Phys. Rev. B **103**, 165115 (2021).

## 学会発表

- 紅林遊野・柴田尚和, 「1次元少数不純物近藤系における階層的多体状態の形成」, 日本物理学会 2021 年秋季大会, 2021 年 9 月.
- 紅林遊野・柴田尚和, 「1次元少数不純物近藤系における近藤効果と RKKY 相互作用」, 日本物理学会第 76 回年次大会, 2021 年 3 月.
- 紅林遊野・柴田尚和, 「1次元少数不純物近藤系の量子相転移と基底状態」, 日本物理学会 2020 年秋季大会, 2020 年 9 月.
- 紅林遊野・柴田尚和, 「正弦二乗変形による 1次元少数不純物近藤系の実空間解析」, 日本物理学会第 75 回年次大会, 2020 年 3 月 (開催中止に伴う講演資料公開).

ほか修士課程までに 5 件.

## その他の活動

- 本研究で開発した Lanczos 法プログラムのオープンソースソフトウェアとしての公開およびこれによるオープンソースプロジェクト LAMMPS への貢献  
<https://github.com/mrcdr/lambda-lanczos>  
<https://github.com/lammps/lammps/pull/2314> (J. Gissinger, A. Jewett, and Y. Kurebayashi)