

博士論文

一次元近藤格子模型における
磁場誘起相転移

石山竜平

平成27年

目次

第 1 章	背景	3
1.1	不純物模型	3
1.2	近藤効果	4
1.3	RKKY 相互作用	5
1.4	重い電子系	6
1.5	周期アンダーソン模型	7
1.6	近藤格子模型	9
1.7	1 次元近藤格子模型	10
1.8	1 次元近藤格子の基底状態の相図	11
1.9	1 次元近藤格子模型における磁化過程	14
1.10	研究目的	20
第 2 章	計算手法	23
2.1	密度行列繰り込み群法 (Density Matrix Renormalization Group)	23
2.2	サイン二乗変形法 (Sine-Square-Deformation) とその応用	27
第 3 章	計算結果	31
3.1	磁化過程	31
3.2	磁化分布	36
3.3	μ と伝導電子密度	46
3.4	第二強磁性金属相と磁化プラトーの起源について	54
第 4 章	まとめ	63
付録 A	DMRG のコーディングについて	65
A.1	Heisenberg model	65

A.2	fermion sign について	71
A.3	Kondo lattice model	74
A.4	相関関数のとりかた	77
A.5	計算結果の確認の仕方	79
A.6	SSD に関する諸計算	79
	参考文献	81

第 1 章

背景

本論文は、重い電子系の理論模型である近藤格子模型の磁場応答について述べたものである。強相関電子系の典型である重い電子系の研究は日本を中心に精力的に行われてきた。その重い電子の特徴は伝導電子と局在電子という性質が異なる 2 種類の電子が存在していることであり、それらの間の相互作用によって様々な物理現象が生じる。第 1 章ではこのような系の基になる不純物近藤模型を考え近藤効果と RKKY 相互作用を説明する。その後、重い電子系を記述する近藤格子模型について概観し、一次元近藤格子模型の相図と最近の研究に関して記述する。この章の最後で研究目的について述べる。

1.1 不純物模型

局在電子の準位 (f 準位) がフェルミエネルギーより下の深いところにあって、 f 準位に 2 個目の電子を入れるのに必要なエネルギーがフェルミエネルギーより十分高いときには、 f 準位にある電子は常にほぼ一個になる。したがって、 f 軌道の自由度は局在スピンの自由度で書き表されることになる。伝導電子 (c 電子) と局在スピン間に生じる交換相互作用 J により 2 つの現象が起きる。1 つは近藤効果である。この効果は伝導電子と局在スピンのシングレットを形成し局在スピンの磁気モーメントを消そうとする。もう 1 つは局在スピン間に働く交換相互作用の RKKY 相互作用である。この相互作用は伝導電子を媒介にして局在スピンの磁気モーメントを安定化しようとする。この 2 つはどちらも周期アンダーソン模型と呼ばれる次のハミルトニアン \mathcal{H} の混成項 V から生じており、互いに相反する働きのために競合している。

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{\sigma} E_f f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} + U n_{f\uparrow} n_{f\downarrow} + \frac{1}{\sqrt{N_0}} \sum_{\mathbf{k},\sigma} (V f_{\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k},\sigma} + \text{H.c.}) \quad (1.1.1)$$

1.2 近藤効果

電気抵抗の温度依存性は格子振動の影響がなくなる低温では、電子同士の散乱のみから生じることになる。格子欠陥や不純物が全くない場合、電気抵抗は最終的に0になるが、格子欠陥や不純物がある場合はその濃度に依存する残留抵抗値に落ち着く。しかし、磁性不純物がある場合には電気抵抗はある温度で最小値をとり、その後、降温とともに抵抗値が増加してある残留抵抗値に落ち着く。ここで磁性不純物とは d 軌道や f 軌道を電子が部分的に占有している元素である。このような抵抗極小現象は 1930 年代半ばには実験的に見出されていたが、その起源については 30 年以上の長い間解明されなかった。1964 年、近藤淳はこの問題を初めて理論的に解明した [1]。

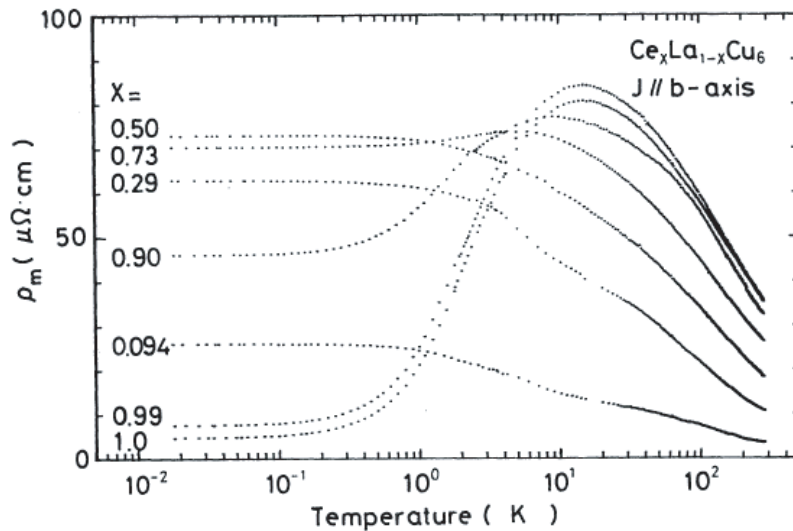


図 1.1 $Ce_xLa_{1-x}Cu_6$ の抵抗の温度依存性 [2]

抵抗極小現象は、非磁性金属に f 電子を含む希土類やアクチノイドなど磁性不純物を微量にドーブしたときに見られる。ここで、非磁性金属とは不完全閉殻を最外殻の s, p の軌道だけに持つ金属である。このような最外殻電子が伝導電子に、一方で磁性不純物の f 準位の電子が局在電子に相当する。

図 1.1 において x が小さく f 電子の濃度が低いときには、不純物効果である近藤効果が起きていると考えられる。この磁性不純物が低濃度の極限、つまり、(1.5.8) において f 電子が一つしかない場合の有効モデルは Kondo Model

$$\mathcal{H}_{\text{KM}} = -t \sum_{i\sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1\sigma} + \text{H.c.}) + JS \cdot s \quad (1.2.2)$$

で表され、 J を摂動とするボルン近似の二次まで求めることにより抵抗極小現象を導くこ

とができる [1]. 電気抵抗を $\rho(T)$ として, その温度依存性は

$$\rho(T) = \rho_0 \left(1 + 2JD_c(\varepsilon_F) \ln \left| \frac{W}{k_B T} \right| \right) \quad (1.2.3)$$

となる. ここで, k_B はボルツマン定数, T は温度, ρ_0 は電気抵抗の温度に依存しない部分であり, $D_c(\varepsilon_F)$ はフェルミエネルギーでの伝導電子の状態密度, W はそのバンド幅である. ポルン近似の二次まで求めることでスピン演算子の非可換性とフェルミ面の存在から電気抵抗に温度依存性が生じる. 式 (1.2.3) を見ると $T = 0$ で対数項が発散する. これは摂動計算の破綻を意味している. そこで, 摂動論がどこまで有効であるか確かめるために (1.2.3) の第 2 項が第 1 項と同じオーダーになる温度を考える.

$$1 \simeq JD_c(\varepsilon_F) \ln \left| \frac{W}{k_B T} \right| \quad (1.2.4)$$

が満たされる温度 T より高温側では摂動論が適用でき, その温度をこの系の特徴的な温度として近藤温度 T_K と呼ぶ. 近藤温度は (1.2.4) を T について解いて

$$k_B T_K = W \exp \left(-\frac{1}{JD_c(\varepsilon_F)} \right) \quad (1.2.5)$$

のように表される. Yosida は高温から温度が T_K に近づくにつれて J による摂動が破綻する振る舞いについて, 変分法を用いて基底状態の波動関数の考察を行い, 基底状態では局在スピンの伝導電子によって遮蔽され, スピンシングレットを形成することを示した [3]. したがって, この T_K よりも温度が高い場合は局在スピンは磁気モーメントを持っていて, T_K よりも温度が十分低い場合において局在スピンは伝導電子とスピンシングレットを作り, 局在スピンの磁気モーメントは消失すると考えることができる.

伝導電子の海に局在スピンの 1 つあるモデルによる問題は Wilson による繰り込み群の方法 [4] や厳密解が得られ, 理論的に解明された. 伝導電子の海に局在スピンの 2 つ以上ある場合どのような現象が起きるのか, 次節で記述する.

1.3 RKKY 相互作用

RKKY 相互作用は 1954 年に Ruderman と Kittel により金属中にある 2 つの核スピン間に働く有効相互作用として導出され [5], 後に, その議論は Kasuya, Yosida らによって金属中の局在スピン系の問題に適応された [6][7]. 彼らの頭文字をとりその相互作用は RKKY 相互作用と呼ばれる. RKKY 相互作用は伝導電子を媒介とした局在スピン間の相互作用であり, 局在スピンと伝導電子の間の交換相互作用 J の 2 次摂動によって得られる. 近藤効果と異なる点は, ある i サイトにある局在電子が伝導電子と相互作用したとき,

$i + x$ サイトの局在電子との有効相互作用が生じる点である. 3次元系の RKKY 相互作用はフェルミ波数を k_F として

$$\mathcal{H}_{\text{RKKY}}(i, j) = \frac{J^2}{(2k_F x)^4} \{2k_F x \cos(2k_F x) - \sin(2k_F x)\} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (1.3.6)$$

と与えられる. \mathbf{S}_i (\mathbf{S}_j) は i (j) サイトにおける局在電子のスピン演算子で, $j = i + x$ である. この相互作用は, 局在スピンの磁気モーメント S_i の存在によって生じるため, 局在スピンの磁気モーメントを安定化させる働きを持つ.

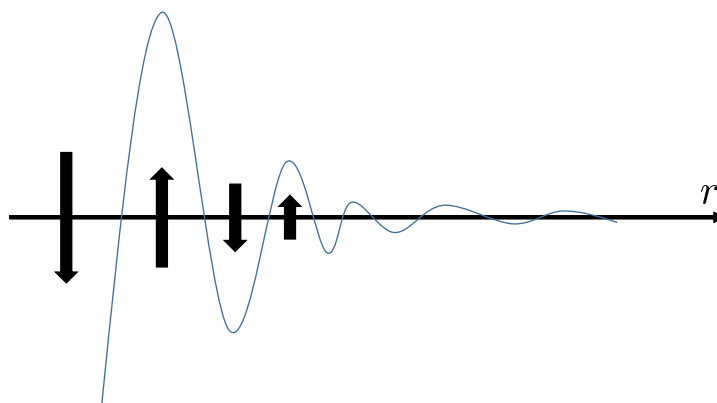


図 1.2 RKKY 相互作用の図

1.4 重い電子系

伝導電子の海の中に, 局在電子が 1 個だけあるときには近藤効果だけが生じる. しかし, そこに局在電子が 2 個以上ある場合は RKKY 相互作用が生じ, さらに局在電子が格子状に並んでいる場合は, 重い電子系としての特徴が現れる.

アルカリ金属やアルカリ土類金属は, 最外殻に s, p 軌道の電子を持ちその電子の運動は自由電子とみなす一帯近似でうまく記述できる. これに対して, 希土類金属やアクチノイド系の金属では f 軌道が閉殻にならないまま外殻に電子が存在する状況が実現し, その振る舞いは複雑になる. この複雑性の起源は, 伝導を担う遍歴的な s 軌道と局在性の強い f 軌道がともに不完全殻になっているところにあり, 言い換えれば電子の波動性と粒子性が同時に顕在化していることが原因と考えられる. 希土類やアクチノイドを含む金属化合物では電子比熱係数や帯磁率が通常の金属の 100 ~ 1000 倍ほど大きくなることが実験的に分かっている. これは, 局在した f 電子間のクーロン斥力が質量に繰り込まれることで有効質量の増した準粒子, すなわち重い電子状態が実現していることを示している. この事実から希土類やアクチノイドを含む金属化合物は重い電子系と呼ばれている. 重い電子系において低温の基底状態近傍で多彩な量子相転移現象が起きるのは局在している f 電子と

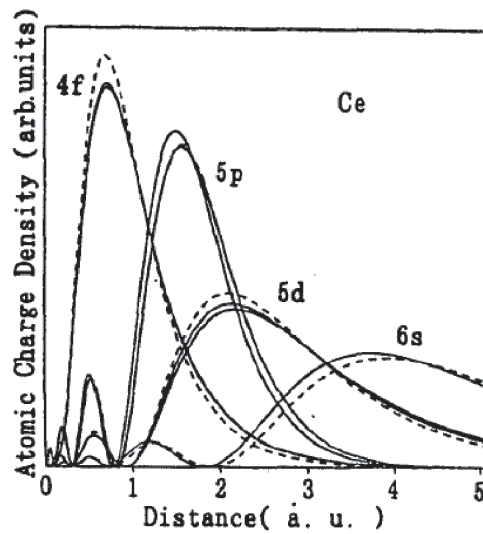


図 1.3 Ce 原子の電荷の動径分布. 距離の単位はボーア半径である [8].

遍歴している伝導電子の間の相互作用が原因であると考えられている. 以下では, 伝導電子と局在電子を含む基礎的な模型について記述し, その模型で生じる現象を解説する. そして, この章の最後に本研究の目的を述べる.

1.5 周期アンダーソン模型

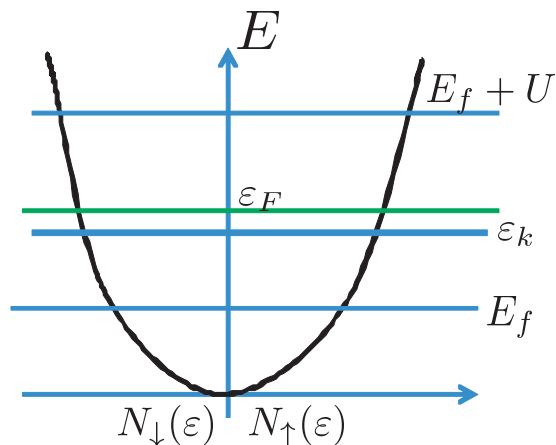


図 1.4 f 準位と伝導電子の準位の位置関係の概念図

重い電子系を理解するためには, 局在電子と遍歴電子の 2 種類を考えなければならない. このような系の中で最も簡単な模型は, 格子や軌道縮退の効果を見捨て電子相関のみを含むものである. 模型の要素としては, 伝導電子のホッピング t , 伝導電子間のクーロン相互作用 U_c , 局在電子のエネルギー E_f , 局在電子間のクーロン相互作用 U_f , 伝導電子と局在

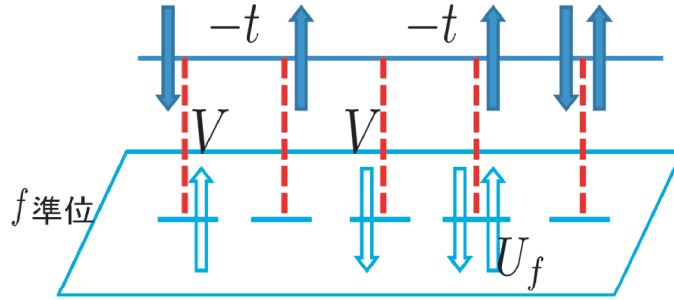


図 1.5 1次元周期アンダーソン模型

電子の混成 V が考えられる. ここで, 局在電子間のクーロン相互作用は伝導電子間のクーロン相互作用よりも大きいことを考慮して, 伝導電子間のクーロン相互作用を無視するという近似を行うと, 重い電子系の基礎的な模型としてよく知られた周期アンダーソン模型 (Periodic Anderson Model)

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{PAM}} = & -t \sum_{i\sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1\sigma} + \text{H.c.}) + V \sum_{i\sigma} (f_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + c_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma}) \\ & + E_f \sum_{i\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + \frac{U_f}{2} \sum_{i\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} f_{i-\sigma}^\dagger f_{i-\sigma} \quad (1.5.7) \end{aligned}$$

が得られる. $c_{i\sigma}^\dagger (c_{i\sigma})$ は伝導電子の生成 (消滅) 演算子, $f_{i\sigma}^\dagger (f_{i\sigma})$ は局在電子の生成 (消滅) 演算子である. このハミルトニアンは第 4 項の相互作用のために簡単には解けないので, 有効ハミルトニアンを求めることを考える. E_f と U_f には ε_F をフェルミエネルギーとして $E_f < \varepsilon_F < E_f + U_f$ という関係を想定し, f 軌道には電子が一つ入っているような場合を考える. アップスピンかダウンスピンの f 電子と伝導電子がある状態を考えて混成項 V の 2 次摂動を求めると, 結果として次の近藤格子模型 (Kondo Lattice Model) が得られる.

$$\mathcal{H}_{\text{KLM}} = -t \sum_{i\sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1\sigma} + \text{H.c.}) + J \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s}_i \quad (1.5.8)$$

J は正であり, 反強磁性的に働く. $c_{i\sigma}^\dagger (c_{i\sigma})$ は伝導電子の生成 (消滅) 演算子であり, 周期アンダーソン模型と変わらない. $\mathbf{S}_i (\mathbf{s}_i)$ は局在 (伝導) 電子のスピン演算子である. 近藤格子模型は周期アンダーソン模型において f 電子の準位がフェルミエネルギーより十分低く, f 電子同士のオンサイトクーロン相互作用 U_f が伝導電子と局在電子の混成によるエネルギーの利得よりも十分大きい強相関領域に対応する. 理論的に取り扱う上では自由度の少ない近藤格子模型の方が簡単であり解析しやすい. 伝導電子と局在電子間の相互作用は周期アンダーソン模型においては混成項 V による混成であったのに対し, 近藤格子模型では

交換相互作用 J となっている. これは周期アンダーソン模型では, 伝導電子との混成により f 電子の電荷の自由度は残っていたのに対し, 近藤格子模型では f 電子の局在性から電荷の自由度を凍結させ, 局在スピンのみを扱っていることを反映している. 以下では, 近藤格子模型を用いて議論するので, 局在電子のことを局在スピンと呼ぶ.

1.6 近藤格子模型

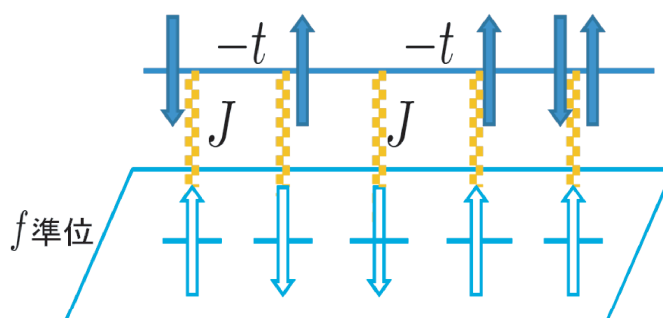


図 1.6 1次元近藤格子模型

近藤格子模型の \mathcal{H}_{KLM} は (1.5.8) で与えられる. この模型の性質を決める重要なパラメータは交換相互作用と運動エネルギーの比 J/t と, 伝導電子密度 n_c である. 伝導電子に関して1つのサイトに1つの軌道を考えると, 伝導電子の電子密度 n_c はサイト当たり0から2まで変化させることができる. 電子の代わりに正孔を考えると, 電子-正孔対称性から密度 n_c の系と $2 - n_c$ の系とは同等であることがわかる. したがって, $0 < n_c \leq 1$ の範囲で考えれば十分である. この近藤格子模型の基底状態の一例として, 近藤絶縁体に対応する $n_c = 1$ で J/t が大きいときの基底状態を以下で紹介する.

1.6.1 half-filling における強結合極限

各サイトに電子が半分詰まった half-filling の状態のとき, 局在スピン1個あたりの伝導電子はちょうど1個である. $J \gg t$ の極限では1つのサイトにおける局在スピンと1個の

伝導電子を考えればよい. そのエネルギー固有値, 波動関数は

$$\begin{aligned}
 S = 0(\text{singlet}) : E_s &= -\frac{3}{4}J, \psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(c_{\uparrow}^{\dagger} |\downarrow\rangle - c_{\downarrow}^{\dagger} |\uparrow\rangle \right) \\
 S = 1(\text{triplet}) : E_t &= \frac{1}{4}J, \psi(S_z = 1) = c_{\uparrow}^{\dagger} |\uparrow\rangle \\
 &\psi(S_z = 0) = \sqrt{2} \left(c_{\uparrow}^{\dagger} |\downarrow\rangle + c_{\downarrow}^{\dagger} |\uparrow\rangle \right) \\
 &\psi(S_z = -1) = c_{\downarrow}^{\dagger} |\downarrow\rangle
 \end{aligned} \tag{1.6.9}$$

である. $S = 0$ はシングレットを表しており, $c_{\downarrow}^{\dagger}(c_{\uparrow}^{\dagger})$ は伝導電子の生成演算子である. $|\uparrow\rangle(|\downarrow\rangle)$ は局在スピンのスピンの向きを表している. $S = 1$ はトリプレットを表している. すべてのサイトで局在スピンと伝導電子がシングレットを形成すればもっともエネルギーの利得が大きくなる. 全系の基底状態はこの局所シングレットの直積である. この基底状態からの励起を考えると, spin gap と charge gap はそれぞれ $\Delta_s = J$, $\Delta_c = 3J/2$ である. 詳しい導出に関しては次節の一次元近藤格子模型の基底状態の相図において述べる.

ここまで述べた重い電子系において近藤効果と RKKY 相互作用が競合するような領域では多彩な物理現象が現れる. 本研究では, 近藤効果と RKKY 相互作用が共に存在する最も基礎的な模型である 1 次元近藤格子模型を解析する.

1.7 1 次元近藤格子模型

1 次元近藤格子模型はすでに 30 年近く調べられている模型であるが, 未だにその全てが明らかになっていない.

近藤格子模型のハミルトニアンは (1.7.10) に示すように同じサイトの局在スピンと伝導電子の間の反強磁性的相互作用である近藤相互作用 $J(> 0)$ と隣接サイトへの伝導電子のホッピング $t(> 0)$ を含む項からなる. これは重い電子系を記述する最も基礎的な模型である

$$\mathcal{H}_{\text{KLM}} = -t \sum_{i\sigma} (c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i+1\sigma} + \text{H.c.}) + J \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s}_i \tag{1.7.10}$$

この模型の基底状態は近藤相互作用 J の大きさと 1 サイトあたりの平均電子数である伝導電子の電子密度 n_c によって決まる. ホッピングの大きさ t をエネルギーの単位と考え, 以下では $t = 1$ とすると, 2 つのパラメータ J/t と n_c によって基底状態の相図が決まる. $J \gg t$ の領域, また伝導電子の電子密度が 0 の極限の場合や half-filling の場合などの特定の電子密度の領域については, すでに詳しい数値計算と解析計算がされており, 理解が得られている [9]. これに対して $J \leq t$ の領域での数値計算はいくつか行われているが十分な理解には至っていない [10][11][12][13]. その大きな理由はこの領域では, RKKY 相互

作用により長距離の相関が発達することに起因する。このとき、解析が困難になる理由を2点述べる。1つは数値計算では有限サイズの系を対象としており、RKKY相互作用の到達距離が計算しているサイズよりも大きくなり正確に見積もれない状況が生じるからである。もう1つは、有限サイズによる系の端からの影響を受けて、RKKY相互作用自身の変調されてしまうからである。従来の数値計算手法を用いる場合、これらの影響を取り除くためにメモリや時間を大量に使用しなければならない。これらの理由により、 $J \leq t$ の領域については十分に解析されていない。

以下では先行研究による1次元近藤格子モデルの基底状態の相図および、磁化過程について解説する [14][15]。

1.8 1次元近藤格子の基底状態の相図

1次元近藤格子モデルの基底状態は主に強磁性金属相、常磁性金属相、スピン液体相からなる。その相図は、エネルギーの単位を $|t|$ として、近藤相互作用 J と伝導電子密度 n_c の2つのパラメータで記述される。密度行列繰り込み群を用いた研究 [10] により図 1.7 のように大方の境界は求められている。赤線は先行研究 [16] の結果である。青色の部分は強磁性金

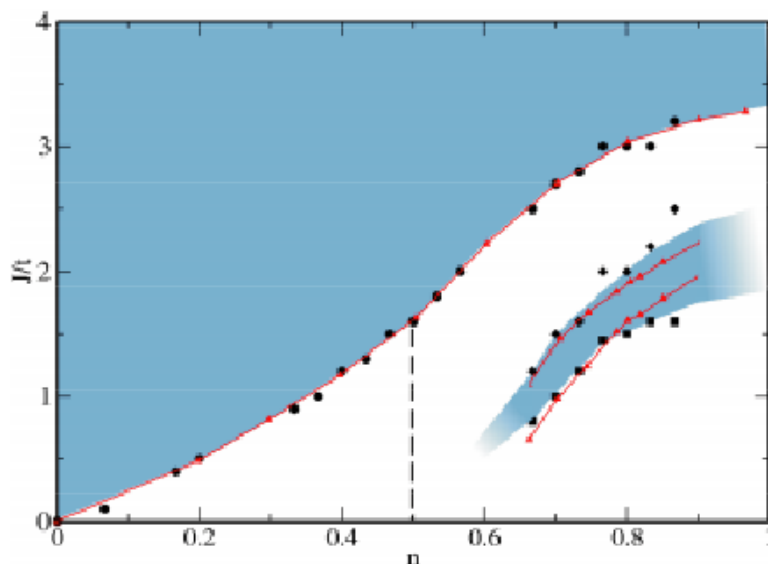


図 1.7 1次元近藤格子モデルの基底状態の相図 [10]

属相を、白色の部分は常磁性金属相を示している。電子正孔対称性があるため伝導電子の電子密度 n_c を $0 < n_c < 1$ に限っている。また half-filling においては、スピン励起と電荷励起の双方にギャップが存在するスピン液体相が実現している [17]。quarter-filling において charge gap があることが確認されている [11][18][19]。ここまでが現在理解されてい

る1次元近藤格子模型の相図における簡単な説明である。この節では、この相図について理解されていることを中心に解説し、どこまで理解されているのかを確認する。

1.8.1 half-filling における基底状態

まず始めに電子が半分詰まった状態 (half-filling) の基底状態について考える。これは相図 1.7 の右端に当たる。half-filling の強結合極限 $J \rightarrow \infty$ では、各サイトでシングレット

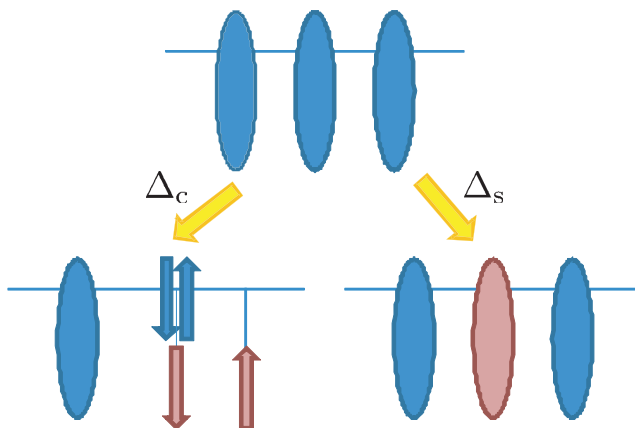


図 1.8 half-filling における charge gap と spin gap. 青色の楕円は局在スピンと伝導電子間のシングレットを表していて、赤色の楕円は局在スピンと伝導電子間のトリプレットを表している。青色の矢印は伝導電子のスピン、赤色の矢印は局在スピンを表している。

を形成し、基底状態は各サイトのシングレットの直積で表される。この基底状態に縮退はない。スピんに長距離秩序がないため、スピン液体相と呼ばれている [17]。このときの低エネルギー素励起を考える。低エネルギー励起は1つのサイトでシングレットを壊してトリプレットになる過程である。 $E(S=1)$ を $S_{\text{tot}}^z = 1$, $E(S=0)$ を $S_{\text{tot}}^z = 0$ の部分空間の最低エネルギーだとすると spin gap は

$$\begin{aligned} \Delta_s &= E(S=1) - E(S=0) \\ &= \frac{1}{4}J - \left(-\frac{3}{4}J\right) \\ &= J \end{aligned} \tag{1.8.11}$$

となる。また電荷の状態を変えるためには、2つの隣接サイトでシングレットを壊す必要がある。したがって charge gap は

$$\begin{aligned} \Delta_c &= 0 - \left(-\frac{3}{4}J - \frac{3}{4}J\right) \\ &= \frac{3}{2}J \end{aligned} \tag{1.8.12}$$

となる. このような大きさの gap はどの程度の相互作用の範囲まで有効なのか. それに対する解答は密度行列繰り込み群を用いて計算されている [20]. half-filling の弱結合極限ではそれぞれの gap は

$$\Delta_s \propto \exp\left(-\frac{1}{\alpha J D_c(\varepsilon_F)}\right) \quad (1.8.13)$$

$$\Delta_c = \frac{1}{2}J \quad (1.8.14)$$

と決定されている [20]. α は格子系における増強因子であり, 有限サイズスケールングを用いて調べられていて $\alpha \sim 1.41$ と求められている [17]. $D_c(\varepsilon_F)$ はフェルミエネルギーにおける伝導電子の状態密度である. $J = 0$ を除いて half-filling では絶縁体の実現される [17]. 近藤格子模型の近藤温度はこの spin gap に対応すると考えられる. 磁化過程において磁場の大きさが spin gap の大きさを超えれば, シングレットが壊れ, 磁化が急激に増大する.

1.8.2 強磁性金属相における基底状態

次に, 伝導電子の密度が小さい極限を考える. 伝導電子が1つしかない場合は, 次元によらず基底状態が強磁性金属状態になることが示されている [21].

一般の伝導電子密度の場合, 強結合極限では伝導電子とシングレットを形成できない局在スピンの存在する. $t = 0$ の場合には伝導電子とシングレットを形成できないサイト数 N の分だけ 2^N 重の縮退がスピン自由度に関して存在する. ここで t の二次摂動を考えると, 始状態と終状態において伝導電子が局在スピンとシングレットを組むには局在スピン同士が同じ向きを向いていなければシングレットを組むことができない. したがって, 任意の伝導電子密度において強結合極限では不対局在スピンのすべて揃った強磁性になる. このときの S_{tot} の値は, 系の長さを L とし, 電子数を N_c とすると

$$S_{\text{tot}} = \frac{1}{2}(L - N_c) \quad (1.8.15)$$

である. この J が大きい領域の強磁性状態は低密度極限から強結合領域にかけて連続的に広がっている [22][23][24].

図 1.7 において常磁性金属相の中に青く塗られた領域が, 第二強磁性金属相である. この第二強磁性金属相における磁化の値は

$$m = \frac{1}{2}(1 - n_c) \quad (1.8.16)$$

に従っており, 前述の強磁性金属相と同様である. J が t に比べて大きい領域の強磁性金属相の磁化の値は伝導電子によって遮蔽されていない局在スピンの数に一致しており, 摂

動計算からその理由は理解されている。これに対して、第二強磁性金属相の起源は明らかになっていない。

1.8.3 常磁性金属相を含む周辺領域の基底状態

一般の占有率において $J = 0$ の場合は、電子間の相互作用がないため任意の占有率で系は常磁性金属となる。常磁性金属相中の一般的な J については、ほとんどの領域は Tomonaga-Luttinger liquid に従うと思われていた [25]。しかし、一部のパラメータ領域に関して他の相が存在していることが明らかになった [10][11][12][13]。例えば、quarter filling において charge gap が存在している領域が常磁性金属相の中に存在している。密度行列繰り込み群を用いて計算を行った結果では、 $J = 0.5, 0.6$ において charge gap が存在している [11]、 $J = 1.0$ 以上において charge gap はなくなり Tomonaga-Luttinger liquid になることが示されている [18][19]。

この領域以外に関しては常磁性金属相領域の詳しい理解は得られていない。先行研究 [10] による第二強磁性金属相もどこまで続いているのか、どのような起源なのかということも明らかにされていない。第二強磁性金属相よりも J が小さい領域では、局在スピン相関が発達した RKKY liquid が実現していると考えられている [13]。その他、図 1.7 において確認されている第二強磁性金属相とは別の強磁性相の存在が示唆されている [13]。

一次元近藤格子模型の基底状態の相図の4つの端や強結合の強磁性相は理解されているが、第二強磁性金属相の起源や常磁性金属相のような $J \simeq t$ の領域の理解は進んでいない。前述の通り、この領域では近藤効果と RKKY 相互作用が競合している。したがって、この領域を十分に理解することは、自由電子系に周期的に配列した局在スピンを加えた模型である重い電子系の現象を理解するための一歩であると言える。

1.9 1次元近藤格子模型における磁化過程

一次元近藤格子模型の相図に関して前節で解説を行った。この相図の常磁性金属相は十分な理解に至っていないため、常磁性金属相の解析を行うことを考える。この相では、近藤効果と RKKY 相互作用が競合している。この2つの効果はどちらも伝導電子と局在スピン間の相互作用に起因しており、伝導電子と局在スピンの磁気モーメントの挙動が重要になってくる。そこで、この模型に磁場をかけて磁場応答から解析を行うことを考える。一次元近藤格子模型のハミルトニアンにゼーマン項を加えて

$$\mathcal{H}_{\text{KLM}} = -t \sum_{i=1, \sigma}^{L-1} (c_{i, \sigma}^\dagger c_{i+1, \sigma} + \text{H.c.}) + J \sum_{i=1}^L \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s}_i - \sum_{i=1}^L (h S_i^z + h s_i^z) \quad (1.9.17)$$

と記述する. 図 1.9 は無磁場で常磁性である $n_c = 4/5, J/t = 1, L = 40$ の磁化過程を計算したのものである [26]. (a) の $h_0 < h < h_1$ の間に plateau が存在しており, その後急に磁化が増加している. 図 1.9(b) は磁化の構成要素を見るために伝導電子, 局在スピンのそれぞれのスピンの z 成分の平均をとったものである. $0 < h < h_0$ の領域の磁化は主に局在スピンの由来しており, $h_0 < h < h_1$ は伝導電子とシングレットを形成していない局在スピンのすべてが偏極した磁化に等しい plateau の値になっている. つまり plateau の値は

$$2m = 1 - n_c \quad (1.9.18)$$

で与えられている. 今注目している $n_c = 4/5$ の場合は完全偏極を 1 としたとき $1/5$ の plateau である. また, h_1 はおよそ half-filling のときの spin gap に等しい. したがって,

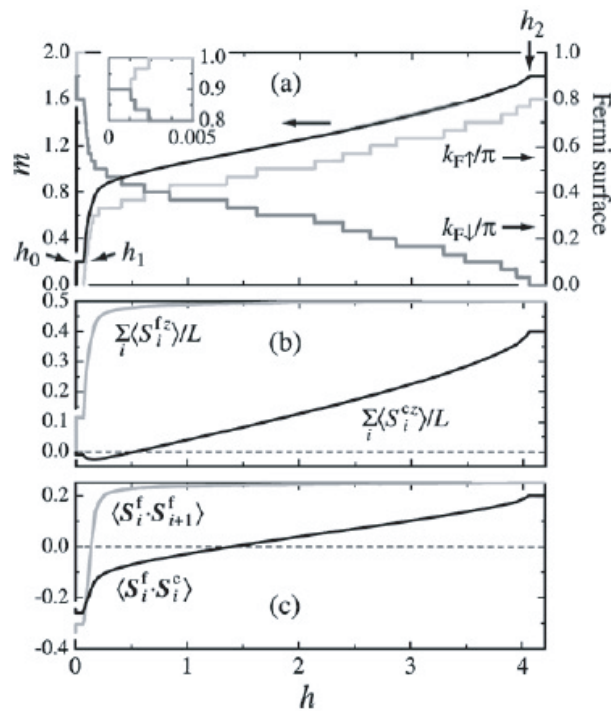


図 1.9 (a) フェルミ波数 k_F と磁化 m の磁場依存性. ただし磁化 m は系の磁化の 2 倍を定義 (b) 局在スピンの磁化と伝導電子の磁化 (c) 最近接サイト間の局在スピンのスピン相関と同サイトの局在スピンと伝導電子のスピン相関 [26]

磁場がその spin gap のエネルギーを超えていない $h < h_1$ ではシングレットは壊れずに残っている. この領域での磁化は伝導電子とシングレットを形成できない局在スピンの数が外部磁場によって磁場方向に偏極されたスピンの数に対応している. しかし, $J/t = 1$ であるから十分に強くシングレットを形成しているわけではない. したがって, 単純にこの描像が成り立つとは言えない. 実際, この plateau の磁気構造に対する理解は得られていない.

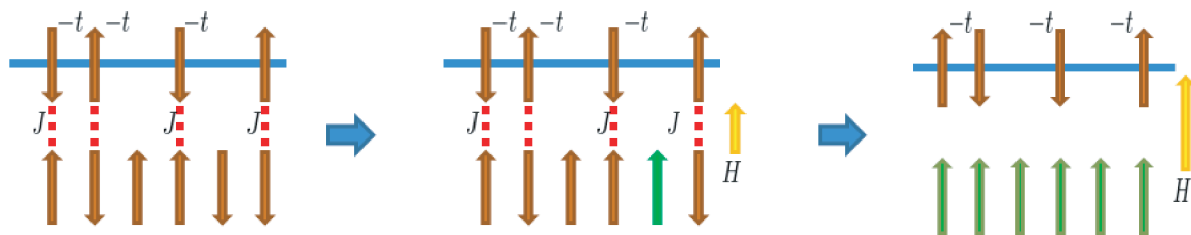


図 1.10 (a) ゼロ磁場状態. 伝導電子により遮蔽される局在スピンの存在とそうでないスピンの存在している描像. (b) 磁場を少し加えた描像. 伝導電子によって遮蔽されていない局在スピンは磁場によって偏極される. $m = 1 - n_c$ の磁化を持つプラトー状態. (c) 磁場を増加させ, 局所的なシングレットは壊れる描像. 局在スピンは磁場によって偏極される.

h_1 での磁化の急激な立ち上がりは主に局在スピンの成分からきている. 伝導電子が負の磁化を示しているのは反強磁性相互作用 J によるためである. このとき伝導電子は磁場が局在スピンと逆向きにかかっているように感じる. その後, 磁場が増大していくと, J による内部場よりも磁場の方が強く働くので, 局在スピンと同じ向きに偏極していく.

二次元の近藤格子模型の磁化過程では, 他の手法を用いて計算された結果がある. パラメータ $n_c = 0.9$, $J/t \geq 1.3$ において調べられており, そのプラトーの値は $(1 - 0.9)/2 = 0.05$ になっている [27].

1.9.1 修士論文から得られている結果

修士論文において, 一次元近藤格子模型の磁化過程の解析を行い以下の結果を得ている. n_c をサイトあたりの伝導電子密度として half-filling を $n_c = 1.0$ とする. グラフの横軸は外部磁場 H/t , 縦軸はサイトあたりの磁化の大きさ m である. 先行研究 [26] では $J/t = 1.0$ の磁化過程しか計算されておらず, それよりも J が小さい領域は明らかにされていない. 修士論文では $J/t = 1.0$ 未満の磁化過程を初めて明らかにしたものである.

各 J に対する局在スピンの磁化過程の n_c 依存性についての結果を図 1.11 から図 1.14 に示す. 磁化の計算は $n_c = 1.0, 0.8, 0.6$ についてそれぞれ行ったものである. 図 1.11 から図 1.14 までを見ると, half-filling 以外の $n_c \neq 1.0$ において磁化 m に $m = (1 - n_c)/2$ の plateau があることが J が大きい領域で明瞭に確認できる. この plateau は J の値を小さくしていくと低磁場側にシフトしていき, 図 1.11 の $J = 0.4$ ではかなり小さくなる. 図 1.11 から図 1.14 までの図を見ると, 絶縁相である half-filling とホールをドープした常

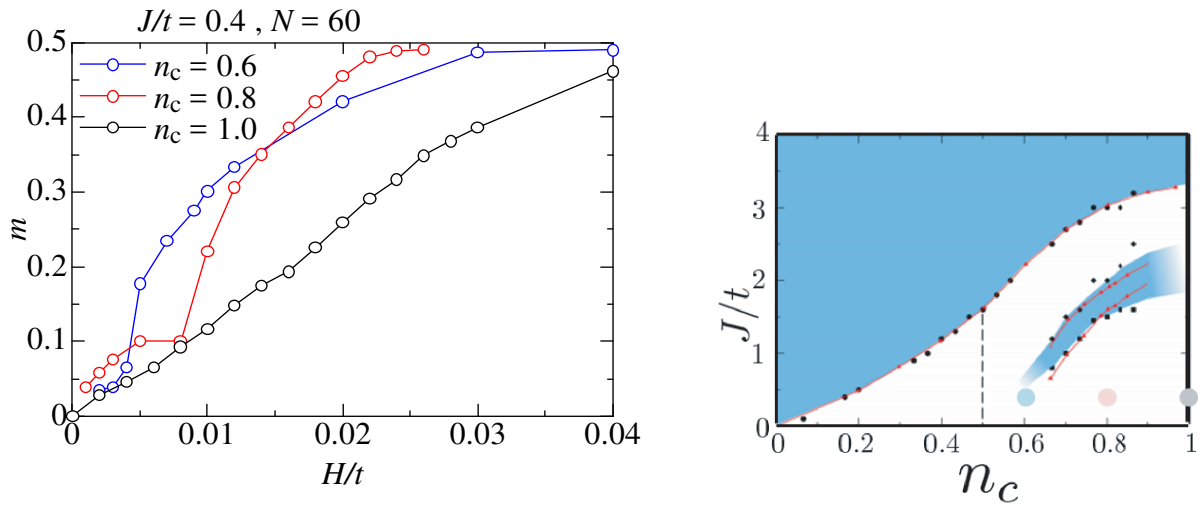


図 1.11 左図は $J/t = 0.4$ のときの局在スピンの磁化の n_c 依存性. 右図は磁化過程におけるパラメータが相図 [10] のどの部分と対応しているか示している.

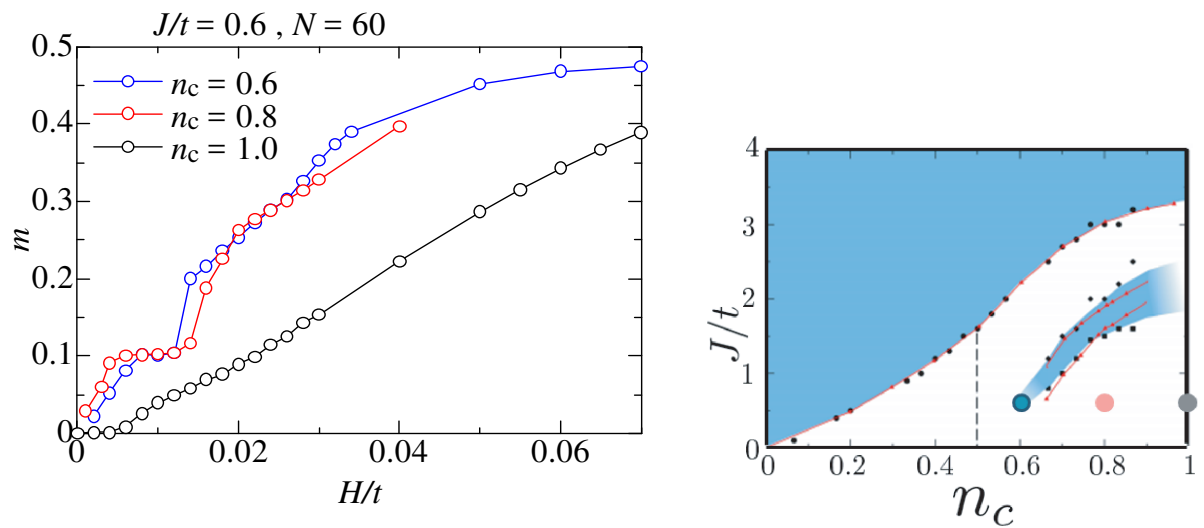


図 1.12 左図は $J/t = 0.6$ のときの局在スピンの磁化の n_c 依存性. 右図は磁化過程におけるパラメータが相図 [10] のどの部分と対応しているか示している.

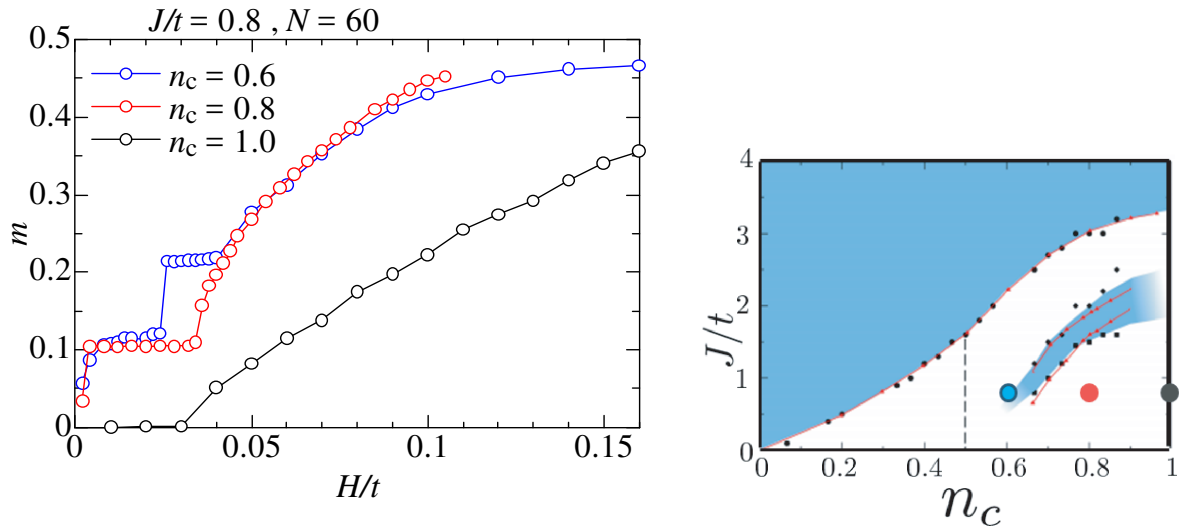


図 1.13 左図は $J/t = 0.8$ のときの局在スピンの磁化の n_c 依存性. 右図は磁化過程におけるパラメータが相図 [10] のどの部分と対応しているか示している.

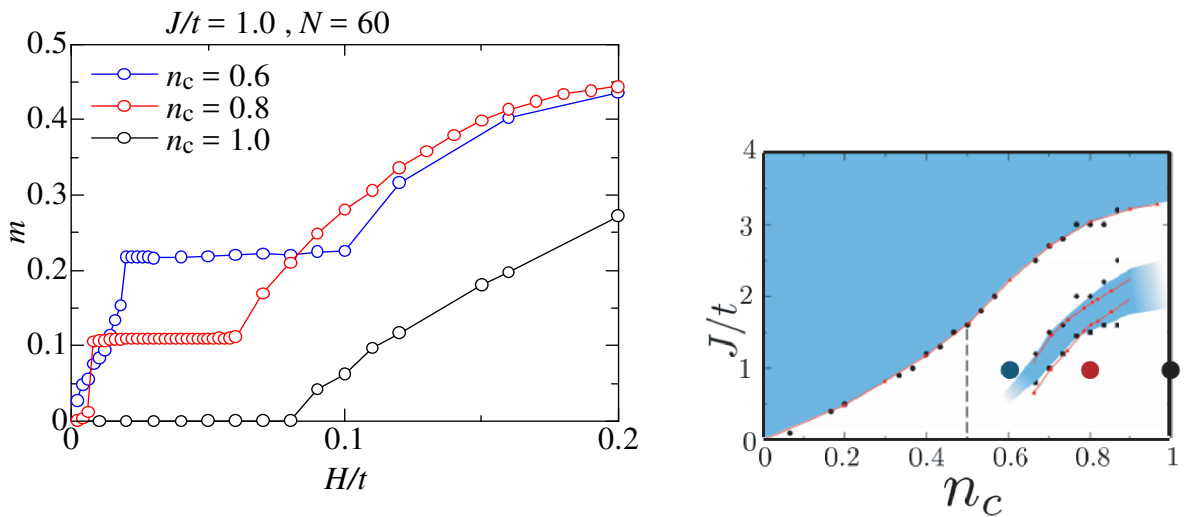


図 1.14 左図は $J/t = 1.0$ のときの局在スピンの磁化の n_c 依存性. 右図は磁化過程におけるパラメータが相図 [10] のどの部分と対応しているか示している.

磁性金属相では $m = 0.25$ 程度の磁化の値を得るのに必要な磁場の大きさを大雑把に見積もると 2:1 ほどの差があることがわかる. このことから, $J/t < 1$ で $n_c = 0.6 \sim 0.8$ の常磁性金属相では同じ J の絶縁相と比べて局在スピンの有効相互作用の大きさが実質的に半分程度になっていることが分かる.

$n_c = 0.8$ の磁化は外部磁場を加えると素早く応答し, $n_c = 0.6$ の場合よりも低磁場で plateau を形成する. 相互作用が弱い $J/t \sim 0.4$ の場合でも plateau が存在し, これは $n_c = 0.8$ において安定なスピン構造の存在を示唆していると考えられる. 一方, $n_c = 0.6$ の磁化は無磁場の状態から少し磁場を加えると $n_c = 0.8$ のときよりもゆっくりと応答する. さらに, J/t を小さくすると新たに plateau が出現したり, 消えたりする複雑な振る舞いを示す. $n_c = 0.8$ の安定な plateau の存在は, 同じ磁化の大きさを持つ常磁性金属相中にある強磁性相の島の存在を反映していると考えられる. $n_c = 0.8$ では, 無磁場の基底状態の相図の中に磁場中の plateau と同じ大きさの磁化を持つ強磁性相が $J \sim 1.8$ の領域に存在している. これに対して, $n_c = 0.6$ では, 強磁性相の島が無磁場の基底状態の相図の中に存在していない. 一方, $n_c = 0.6$ では 2 つの plateau が確認でき, これは無磁場の強磁性相とは別の安定な構造を形成していると考えられる.

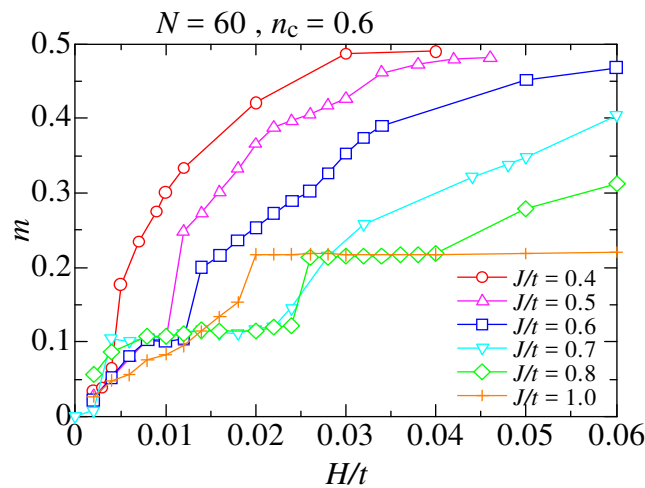


図 1.15 $n_c = 0.6$ のときの局在スピンの磁化 m

図 1.15 から $n_c = 0.6$ の場合には $J/t \sim 0.8$ で plateau が 2 つ存在する. ここでは $m = 0.1$ の plateau を第 1 plateau と呼び, $m = 0.2$ の plateau を第 2 plateau と呼ぶ. $J/t \sim 0.8$ よりも大きい J/t では第 1 plateau が消える. 逆に, J/t が小さくなると, 第 2 plateau が消える. そのまま J/t をより小さくすると第 1 plateau の長さが短くなり, やがて消える. $n_c = 0.6$ の場合, 伝導電子とシングレットを形成できない局在スピンは, 10 サイト中に 4 個存在しており, これは $m = (1 - n_c)/2$ に対応している. 第 2

plateau の磁化の大きさはこの局在スピンの全てが偏極している場合の磁化の大きさと一致する。しかし、第 1 plateau の磁化の大きさは第 2 plateau の半分の磁化になっており、 $m = (1 - n_c)/2$ ではなく $m = (1 - n_c)/4$ に対応している新たな plateau である。この plateau は、第 2 plateau とは異なった磁気構造により安定化していると考えられる。また、 $n_c = 0.6$ の第 1 plateau の磁化の大きさは $n_c = 0.8$ の plateau の磁化の大きさと一致している。 $n_c = 0.8$ の場合、伝導電子とシングレットを形成できない局在スピンは、10 サイト中に 2 個しか存在していない。したがって、磁化の大きさが同じでホールの濃度が異なるこの 2 つの plateau も磁気構造は異なっており、これらの 3 つの plateau はそれぞれ異なっている構造になっている。このように、これまでの研究から常磁性金属相の中に複数の安定相が存在することが明らかにされたが、個々の安定相の特徴や存在領域、起源といった重要な点は、明らかにされていない。

1.10 研究目的

自由電子系に局在スピンを 1 つ加えた不純物模型はよく理解されている。一方、自由電子系に局在スピンを周期的に配列した格子模型の理解は十分ではない。それは、近藤効果と RKKY 相互作用の 2 つが競合し、近藤効果が生み出す局所相関と RKKY 相互作用が作り出す長距離相関の両者の拮抗が生じるからである。この 2 つの効果の競合が生じる最も基礎的な模型が一次元近藤格子模型である。しかしながら、この模型においてもこの 2 つの効果の競合領域での数値計算は難しく、未だに十分な理解は得られていない。一次元近藤格子模型の磁化過程の先行研究 [26] では、近藤効果と磁化 plateau の関係が明らかにされたが、plateau が現れる前の低磁場側や磁化 plateau の形成と RKKY 相互作用の間関係など、RKKY 相互作用の効果については議論がなされていない。本研究の目的は、そのような領域においてどのような磁氣的性質や特徴が現れるか明らかにすることである。解析手段として 1 次元近藤格子模型に外部磁場を与えて、磁化過程を解析するという方法を用いる。この磁化過程から、外部磁場に対して電子スピンのどのように応答するか知ることができる。1 次元近藤格子模型において、近藤効果のエネルギースケールはよく理解されているが、近藤効果と競合する状況での RKKY 相互作用のエネルギースケールの理解は十分ではない。1 次元近藤格子模型の磁化過程において特に低磁場側を解析することで、磁氣的な励起のエネルギースケールを見積もり、RKKY 相互作用のエネルギースケールを確認する。また、磁化曲線の傾きが消失する plateau という領域も存在する。これは磁場を変化させても磁化が変わらない安定した領域である。このような磁化 plateau の存在から、spin 励起に gap のある安定した磁気秩序相の存在を明らかにすることができる。以下では、伝導電子と局在スピンの間の交換相互作用から生じる磁氣的安定相の解析を通して、近藤格子模型における新たな量子多体状態の存在および磁場中の磁気相図を明らかに

し,そこに現れる磁氣的安定相の出現機構を考察する.

第 2 章

計算手法

密度行列繰り込み群は, 1 次元の格子模型の基底状態を求めることができる強力な計算手法である. この計算手法を用いた 1 次元近藤格子模型の計算はすでに多く行われている [11][12][18][20][28][29][30]. しかしながらこの模型の常磁性金属相では長距離の有効相互作用が存在しているために解析が難しく, 系統的な計算はなされていない. この手法を用いてこの模型を調べるには, 状態数を増やし精度を向上させ長距離相互作用が解析できる程度にサイト数を増やす必要がある. しかし, この操作を行えば計算に費やす時間や必要となるメモリは非常に多くなる. この問題を解決するため, 本研究では密度行列繰り込み群にサイン二乗変形法を適用する. サイン二乗変形法はハミルトニアンのエネルギースケールにサイン二乗の関数を掛けることにより, 系の端の効果を抑制する手法である. 以下この章では, 本研究で使用する計算手法である密度行列繰り込み群とサイン二乗変形法の説明を行う. この計算手法のコーディングに関しては付録 A に記載した.

2.1 密度行列繰り込み群法 (Density Matrix Renormalization Group)

密度行列繰り込み群法 (以下 DMRG と略す)[31] は 1 次元量子多体系の問題を解析する上で最も強力な数値解析的手法として広く用いられている. 1 次元近藤格子模型へも DMRG が適用されてすでにいくつかの先行研究が行われており, 上記に参考文献をいくつか挙げた.

まず, この節では DMRG の基本的な方法について解説を行う. DMRG は, 全系をシステムと環境に分割し, 小さなシステムから出発し環境の影響を取り込む基底変換を行うことで基底状態に寄与しない自由度を消去しながらシステムを少しずつ大きくする. その特徴から従来の厳密対角化にはできないような大きな系を高い精度で扱える. 以下では, この計算法の詳細について説明する. まず, システムを大きくする過程で, 環境の自由度をト

レースアウトしたシステムの密度行列を計算し、対角化することで限られた基底で波動関数を高い精度で再現する基底変換を行う。さらに、その計算誤差をシステムに残す基底の数を変化させることで制御する。

2.1.1 密度行列による基底の選定

全系の基底状態を $|\text{GS}\rangle$ としてシステムブロックを $|i\rangle$ 、環境ブロックを $|j\rangle$ とする。基底状態の波動関数は

$$|\text{GS}\rangle = \sum_{i,j} \psi_{i,j} |i\rangle |j\rangle \quad (2.1.1)$$

である。環境ブロックをトレースアウトしたシステムの密度行列を $\rho_{i,i'}$ として

$$\rho_{i,i'} = \sum_j \psi_{i,j} \psi'_{i',j} \quad (2.1.2)$$

密度行列を対角化する直交行列 U を $|u_i\rangle$ を用いて

$$U = (|u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots, |u_k\rangle) \quad (2.1.3)$$

と表す。この行列によって密度行列を対角化すると

$$U\rho U^T = \omega_{ii} \quad (2.1.4)$$

となる。これを元に密度行列を表すと、

$$\begin{aligned} \rho &= U^T \omega_{ii} U \\ &= \sum_{i=1}^k \omega_i |u_i\rangle \langle u_i| \end{aligned} \quad (2.1.5)$$

となる。ここで密度行列の固有値 ω_i は

$$1 = \sum_{i=1}^k \omega_i \quad (2.1.6)$$

となり、固有値の大きさが確率になっており、固有値の値が大きいほどその固有ベクトルが実現されやすくなるということを表している。つまり、精度を上げるには、

$$P_M = \sum_{i=1}^M \omega_i \quad (2.1.7)$$

がなるべく1に近づくように M の数を選ばばよいことがわかる。そして1との差 $1 - P_M$ が *truncation error* を決める。

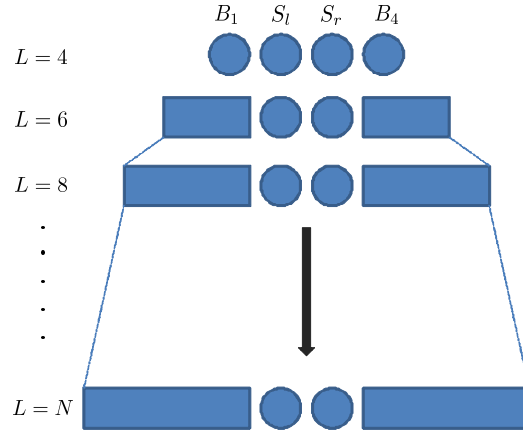


図 2.1 Infinite system method のブロックの配置とその拡張

2.1.2 DMRG(Infinite system Method)

Infinite system method では系を解析したい大きさ L まで拡張するとき使用する. 系を図 3.1 の左からブロック 1 を B_1 , 左側のシングルサイトを S_l , 右側のシングルサイトを S_r , ブロック 4 を B_4 とする. ブロック 1 をシステムブロックとして, ブロック 4 を環境ブロック, 真ん中の S_l, S_r は 1 サイトとして扱う. ブロック 1 から 4 まで合わせたものをスーパーブロックと呼ぶ.

はじめは $|B_1^1\rangle$ と $|B_4^1\rangle$ も 1 サイトであるとして 4 サイトの系から始める.

システムブロックの行列要素は

$$H_{\text{system}} = JS_1^f \cdot \mathbf{s}_1^c \quad (2.1.8)$$

と表せる.

step1: スーパーブロックのハミルトニアン行列要素を求め, 対角化を行う. スーパーブロックの基底状態の固有ベクトルを求める.

step2: ブロック 3,4 をトレースアウトしてブロック 1,2 の密度行列を求める. 密度行列を対角化してその固有値と固有ベクトルを求める.

step3: B_1^n と S_l を用いて B_1^{n+1} のブロック 1 のハミルトニアンを作る. 今, $n = 1$ として

$$\begin{aligned} \langle B_1^2 | H_{B_1^2} | B_1^2 \rangle &= \langle S_{l'} | \langle B_1^1 | H_{B_1^2} | B_1^1 \rangle | S_l \rangle = \langle B_1^1 | H_{B_1^1} | B_1^1 \rangle \delta_{S_l, S_{l'}} \\ &\quad - t(\langle B_1^1 | c_{l-1\alpha\beta}^\dagger | B_1^1 \rangle \langle S_{l'} | c_{l\alpha\beta} | S_l \rangle + \text{H.c.}) + J \langle S_{l'} | \mathbf{S}_l \cdot \mathbf{s}_l | S_l \rangle \delta_{B_1^1, B_1^1} \end{aligned} \quad (2.1.9)$$

step4: 密度行列の固有値をその値の大きいものを M までとる. B_1^{n+1} の基底を $|u\rangle$ へ基底変換する. また, B_4^{n+1} は B_1^{n+1} を代入して計算を行う.

$$\begin{aligned} |u\rangle &= \sum \langle \varphi' | H_{B_1^2} | \varphi \rangle \\ &= \sum \langle S_l' | \langle B_1^1 | H_{B_1^2} | B_1^1 \rangle | S_l \rangle \delta_{S_r', S_r} \delta_{B_4^1, B_4^1} \end{aligned} \quad (2.1.10)$$

step5: **step1** に戻る.

各ブロックの和が任意の L になるまでこのプロセスを繰り返す.

2.1.3 DMRG(Finite system Method)

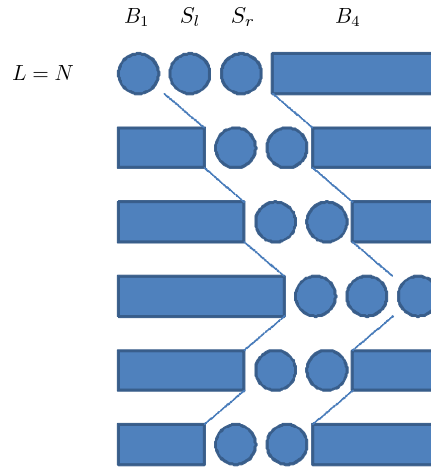


図 2.2 Finite system method の Block の配置と sweep

Finite system method では Infinite system method で作った全てのブロックを用いて sweep という操作を行い波動関数の精度を上げる. したがって, Infinite system method が終了した時点で全てのブロックが保存されていなければならない. 1 サイトとして扱っている S_l, S_r が図 2.2 のように左から右へ右から左へ移動していくように見えることから sweep と呼ばれている. Infinite system method で任意の大きさ L まで拡張された系に対して,

$$|B_1^i\rangle |S_l\rangle |S_r\rangle |B_4^{L/2-2-i}\rangle \quad (2.1.11)$$

と各ブロックのサイトの数の和が L になるように基底を取る. これを $i = 1, L/2 - 3$ になるまで繰り返し, 同様に

$$|B_1^{L/2-2-i}\rangle |S_l\rangle |S_r\rangle |B_4^i\rangle \quad (2.1.12)$$

と繰り返していくことで波動関数の精度を高められる. 各 sweep 毎のエネルギーを比較し,十分に計算が収束したことが確認できたならば, 計算を終了させる.

2.2 サイン二乗変形法 (Sine-Square-Deformation) とその応用

Sine-Square-Deformation(以下 SSD と略す) は初めスムーズな境界条件を導入するために研究された [32][33]. SSD とはハミルトニアンエネルギースケールに局所変換を施し, 系の中心から両端へいくにつれて相互作用の大きさを小さくすることで系の端の効果を抑制する手法である. この方法によって開放端境界条件 (Open Boundary Condition 以下 OBC と略す) のまま, 周期境界条件 (Periodic Boundary Condition 以下 PBC と略す) であるかのような波動関数が得られる [34][35][36]. この証明は付録 C に記載した. このスケール変換を DMRG に適用することで近藤格子模型における RKKY 相互作用が有効的になる $0 < J/t \leq 1$ である領域を調べることができる.

2.2.1 サイン二乗変形法 (SSD)

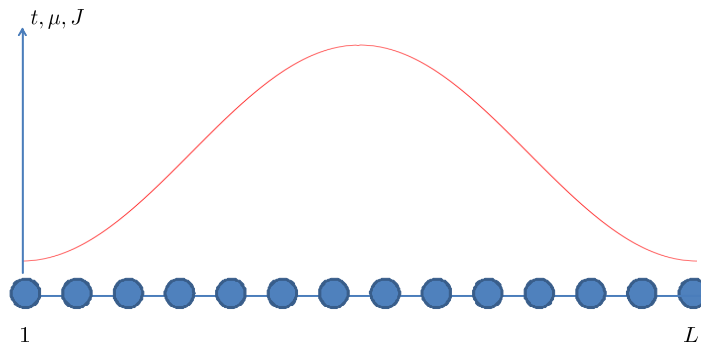


図 2.3 サイン二乗変形の概念図

ハミルトニアンエネルギー一定数にサイン二乗関数 $f_l(i)$ を掛けてスケール変換を行う.

$$f_l(i) = \sin^2 \left(\frac{\pi}{L} \left\{ i + \frac{l-1}{2} \right\} \right) \quad (2.2.13)$$

L は系の大きさを i はサイト座標, l は相互作用によって変わる変数であり, オンサイトの相互作用であれば $l = 0$, 最近接の相互作用であれば $l = 1$ となる. 図 2.3 に示しているよ

うに系の中心 $L/2$ から相互作用の大きさが徐々に小さくなっていき, $i = 1, L$ で相互作用の大きさは 0 になる. 具体的に近藤格子模型に適用すると,

$$\mathcal{H} = -t \sum_{i=1}^{L-1} \sum_{\sigma} f_1(i) (c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i+1\sigma} + \text{H.c.}) + \sum_{i=1}^L f_0(i) (J \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s}_i - \mu n_i) \quad (2.2.14)$$

と書くことができる. n_i は電子密度であり, $n_i = c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}$ である. オンサイトの J とケミカルポテンシャル μ は $f_0(i)$ の関数でスケール変換されて, 最近接のホッピング t は $f_1(i)$ の関数にスケール変換される.

2.2.2 磁場をかけたときの SSD

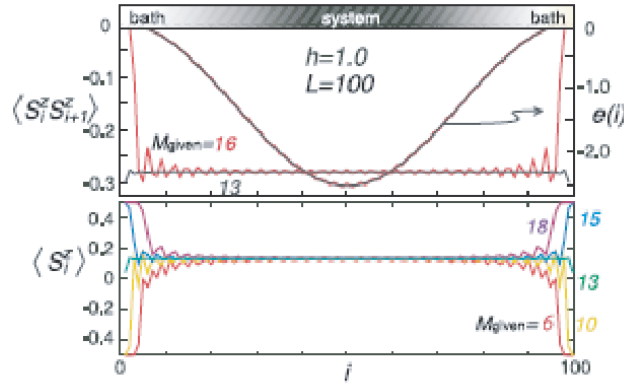


図 2.4 1次元ハイゼンベルグモデル. 上の図は最近接相関関数 $\langle S_i^z S_{i+1}^z \rangle$ と $h/J = 1$ のときの修正された結合エネルギー $e(i) = 3J f_0(i) \langle S_i^z S_{i+1}^z \rangle$. 下の図は与える S_z^{total} をいくつか変えたものを示す [37].

ゼーマン項を $-hS_z$ と定義する. この項を加えて近藤格子模型のハミルトニアンを

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -t \sum_{i=1}^{L-1} \sum_{\sigma} f_1(i) (c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i+1\sigma} + \text{H.c.}) + \sum_{i=1}^L f_0(i) (J \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s}_i - \mu n_i) \\ & + \sum_{i=1}^L f_0(i) (-hS_i^z - h s_i^z) \end{aligned} \quad (2.2.15)$$

と書きなおす. 磁場をかけると SSD の効果によって局在スピンの磁化分布は図 3.4 のようになる. 従来の並進対称な系では磁化分布を見るには $S_z \neq 0$ の空間を調べなければならなかったが, SSD を適用すると $S_z^{\text{tot}} = 0$ でも磁化分布をみることができる. 図 3.4 では $S_z^{\text{tot}} = 16$ のときに最適な S_z^{tot} になっており, 系の中央付近数サイトの磁化の平均値をとってその磁場に対する磁化とする. 最も適した S_z^{tot} を与えることにより高精度に磁化の値を求めることができる. また, 従来の並進対称な系における階段状の磁化過程と異なり,

無限系に対応するなめらかな磁化曲線を得ることができる. 図 2.5 をみると SSD を適用した磁化過程は滑らかな曲線になっており厳密解に一致する線に乗っていることがわかる [38].

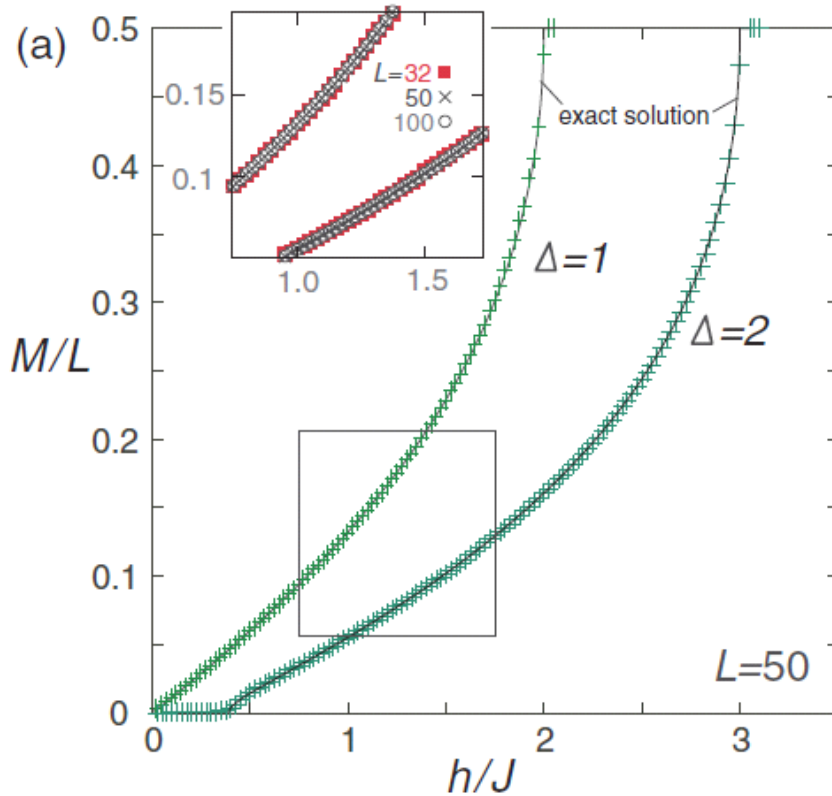


図 2.5 $S = 1/2$ ハイゼンベルグ ($\Delta = 1$) モデルと $XXZ(\Delta = 2)$ スピン鎖の磁化過程である. SSD を適用した DMRG の計算結果であり, 状態数 $m \leq 200$ である. 黒線は厳密解による結果である [37].

2.2.3 charge gap と chemical potential

SSD ではケミカルポテンシャルを変化させて電子密度を制御する. 与えるケミカルポテンシャルが図 2.6 のような gap のある系に与えられたときは, charge gap を解析することができる. SSD をかけていない有限サイズの数値計算では gap があると言っても有限サイズ効果によるものかどうなのかの評価が難しい. しかし SSD をかければ比較的小さいサイズであっても局所密度のケミカルポテンシャル依存性からそのモデルの charge gap を図 2.6 のように評価することができる. 図 2.6 は Hubbard model の DMRG+SSD による計算結果と OBC 下の DMRG による計算結果の比較である. SSD を用いると小さい系であっても charge gap があることがわかる.

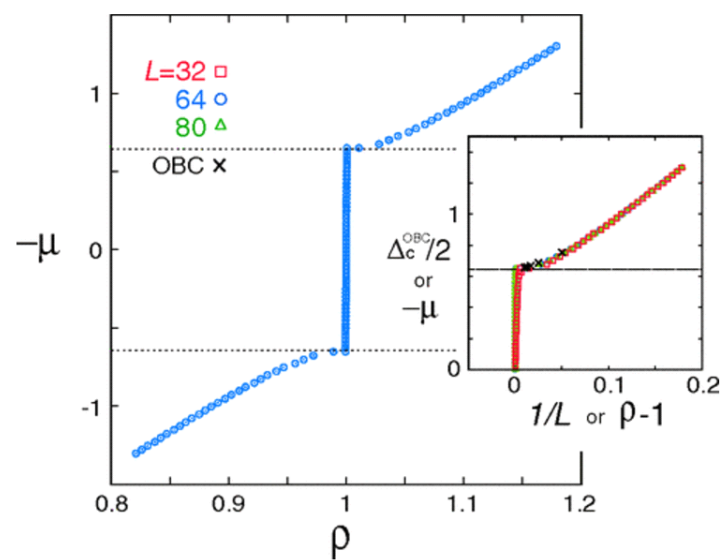


図 2.6 伝導電子密度 ρ と chemical potential μ の関係. Hubbard model に SSD をかけた DMRG の計算結果である. 状態数 $m \leq 300$, 白抜き青丸は $L = 64$, $U/t = 4$ である. Open Boundary Condition(OBC) による DMRG の結果と SSD をかけた DMRG の結果を比較したものである [37].

第 3 章

計算結果

この章では、これまでの研究で明らかにされてこなかった常磁性金属相領域の中に含まれる複数の安定相の存在を確認し、その特徴を明らかにするために行った DMRG+SSD を用いた計算結果を示す。一次元近藤格子模型の伝導電子密度について $n_c = 0.5 \sim 0.75$ までの結果を示す。まず、それぞれの磁化過程から得られる spin gap と plateau についての結果を示す。次に、ケミカルポテンシャルと伝導電子密度の関係から charge gap について示す。この 2 種類の結果および、ゼロ磁場状態と plateau 状態の磁化分布と伝導電子密度を解析することによりこの系の性質について考察を行う。

3.1 磁化過程

一次元近藤格子模型の磁化過程の計算結果を記載する。 n_c と J は各図に示す。 t は 1 に固定する。磁化過程の図の縦軸は伝導電子の磁化と局在スピンの磁化を合わせた合計の磁化の値で $\langle s_{c,i}^z + S_{f,i}^z \rangle = m$ と表す。横軸は磁場 h の値である。始めは一次元近藤格子模型の相図の横軸である伝導電子密度を $n_c = 2/3$ と固定し、同相図の縦軸の J をいくつか変えて計算した磁化過程の図 3.1 について解説する。続いて、 J を $J = 0.7$ と固定し、伝導電子密度を $1/2 \leq n_c \leq 2/3$ の範囲で変化させて求めた磁化過程の図 3.2 と伝導電子密度を $2/3 \leq n_c \leq 3/4$ の範囲で変化させて求めた磁化過程の図 3.3 について結果を解説していく。

図 3.1 は $n_c = 2/3$ における磁化過程のグラフである。特徴が似ている J について分けてそれぞれ見ていく。まずは $J = 0.8, 2.8$ である。続いて $J = 0.3, 1.2, J = 2.0 \sim 1.6$ の 3 つに分ける。 $J = 0.8, 2.8$ ではゼロ磁場から連続的に plateau 状態につながっていることがわかる。 $J = 2.8$ は強結合の強磁性金属相に対応する J の大きさであり、 $J = 0.8$ は第二強磁性金属相に対応する J の大きさであるため、ゼロ磁場と plateau 状態において同じ値の磁化を持っている。この 2 つの J はゼロ磁場の状態と plateau 状態が連続的につ

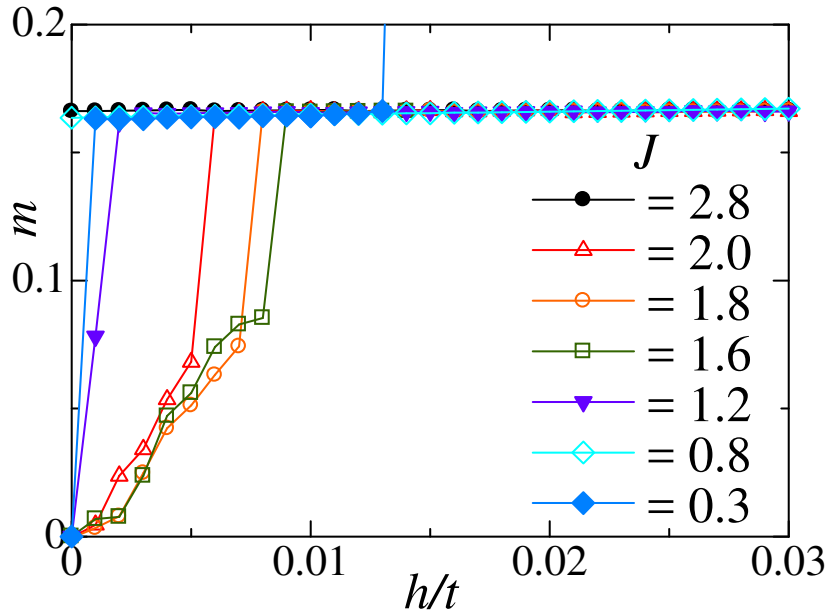


図 3.1 $n_c = 2/3$ における磁化過程の J 依存性

ながっており spin gap が存在している. 次に第二強磁性金属相周辺である $J = 0.3, 1.2$ では, 磁場を加えるとすぐに plateau になることがわかり, ゼロ磁場の状態が不安定であることがわかる. 強結合の強磁性金属相と第二強磁性金属相の間の $J = 2.0 \sim 1.6$ 程度の範囲では, 磁場を加えてもすぐに plateau にはならず, ある程度の傾きを持っていることがわかる. これにより RKKY 相互作用のエネルギースケールを確認することができる. $n_c = 2/3$ では, 第二強磁性金属相と強結合の強磁性相の 2 つの強磁性相が存在しており, 第二強磁性金属相より小さい J では常磁性金属相になっている.

次に $J = 0.7$ に固定し, 伝導電子密度を変化させたときの磁化過程のグラフがどうなるのか, 図 3.2 と図 3.3 から確認していく. 第二強磁性金属相が $n_c = 2/3$ 周辺の伝導電子密度で存在しているならば, この密度をずらした場合もゼロ磁場の状態と plateau 状態が連続的につながっているはずである. その場合, plateau の磁化の値は伝導電子に遮蔽されていない局在スピンの数だけ偏極した磁化

$$m_1 = \frac{1}{2}(1 - n_c) \quad (3.1.1)$$

の式に従う. この予想のもと, 図 3.2 を見る. 図 3.2 は $J = 0, 7$ $n_c = 1/2, 4/7, 5/8, 2/3$ の伝導電子密度の磁化過程である. $n_c = 2/3$ ではゼロ磁場と plateau 状態が連続的になっており, $J = 0.7$ において第二強磁性金属相になっていることが確認できる. $n_c = 1/2$ では磁場を加えても磁化が変化しない plateau 状態がゼロ磁場と連続的になっており,

その磁化の値は 0 である. この伝導電子密度では charge gap があることが先行研究 [11][19] から明らかになっているが, spin gap も存在していることがわかる. $n_c = 1/2$ と $n_c = 2/3$ の間である $n_c = 4/7, 5/8$ では plateau が二段になっていることがわかる. 下段の plateau は $n_c = 1/2$ から伝導電子を増やすと徐々に $n_c = 2/3$ の磁化の値へ上昇していく plateau である. これに対して, 上段の plateau は $n_c = 1/2$ から伝導電子を増やすと徐々に $n_c = 2/3$ の磁化の値へ下降していく plateau である. 上段の plateau は式 (3.1.1) で理解することができる. しかし下段の plateau は式 (3.1.1) で理解することはできない. 下段の plateau の磁化の値を図 3.4 へプロットするとある直線に乗ることがわかる. その直線は

$$m_2 = n_c - \frac{1}{2} \quad (3.1.2)$$

である. なぜ, この直線に乗るかについては後述する. 下段の plateau は式 (3.1.2) に従い, 2 つの plateau の磁化は徐々に近づき $n_c = 2/3$ において 1 つの plateau に融合する. $J = 0.7$, $n_c = 2/3$ よりも少ない伝導電子密度では第二強磁性金属相が存在せず, plateau は二段になる. plateau の 1 つは伝導電子に遮蔽されていない局在スピンの数だけ偏極した磁化 m_1 の値を持っている. もう 1 つの plateau は新たに明らかになった式 (3.1.2) の磁化 m_2 に従う.

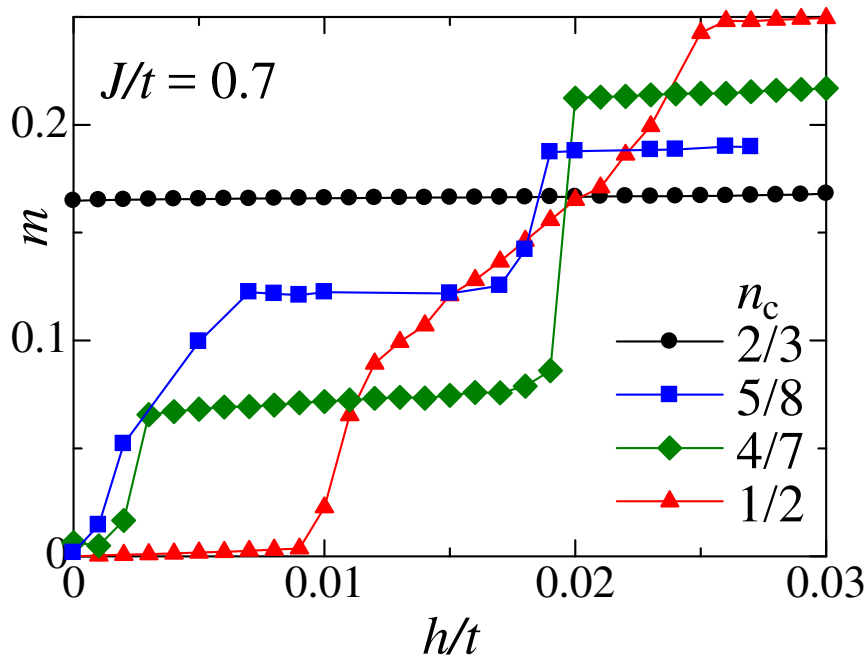


図 3.2 $n_c = 2/3$ から $n_c = 1/2$ における磁化過程の n_c 依存性

では次に、伝導電子密度が $n_c = 2/3$ よりも多い領域ではどうなるか、図 3.3 から確認する。図 3.2 と同様に考えて、第二強磁性金属相が存在しているならば、伝導電子密度をずらした場合もゼロ磁場の状態と plateau 状態が連続的につながっているはずである。その場合、plateau の磁化の値は伝導電子に遮蔽されていない局在スピンの数だけ偏極した磁化 m_1 の磁化を持つと予想できる。この予想を踏まえた上で図 3.3 を見る。図 3.3 は $J = 0.7$, $n_c = 2/3, 5/7, 8/11, 3/4$ の伝導電子密度の磁化過程である。 $n_c = 2/3$ は図 3.2 と同じである。 $n_c = 3/4$ では磁場を加えても磁化が変化しない plateau 状態がゼロ磁場状態から連続的に現れており、その磁化の値は 0 である。したがって、ゼロ磁場で spin gap が存在していることがわかる。 $n_c = 2/3$ と $n_c = 3/4$ の間である $n_c = 5/7, 8/11$ では plateau が二段になっていることがわかる。下段の plateau と上段の plateau どちらも伝導電子を増やすと $n_c = 2/3$ のプラトーの値から徐々に $n_c = 3/4$ のプラトーの値へ下降している。下段の plateau と上段の plateau で異なっているのは伝導電子密度を変化させたときに下降する下降量である。上段の plateau の磁化は式 (3.1.1) に従う。一方、下段の plateau の磁化の値は式 (3.1.1) から理解することはできない。下段の plateau の磁化の値を図 3.4 へプロットするとある直線に乗ることがわかる。その直線は

$$m_3 = 2 \left(\frac{3}{4} - n_c \right) \quad (3.1.3)$$

である。この直線に乗る理由については後で考察する。下段の plateau は式 (3.1.3) に従

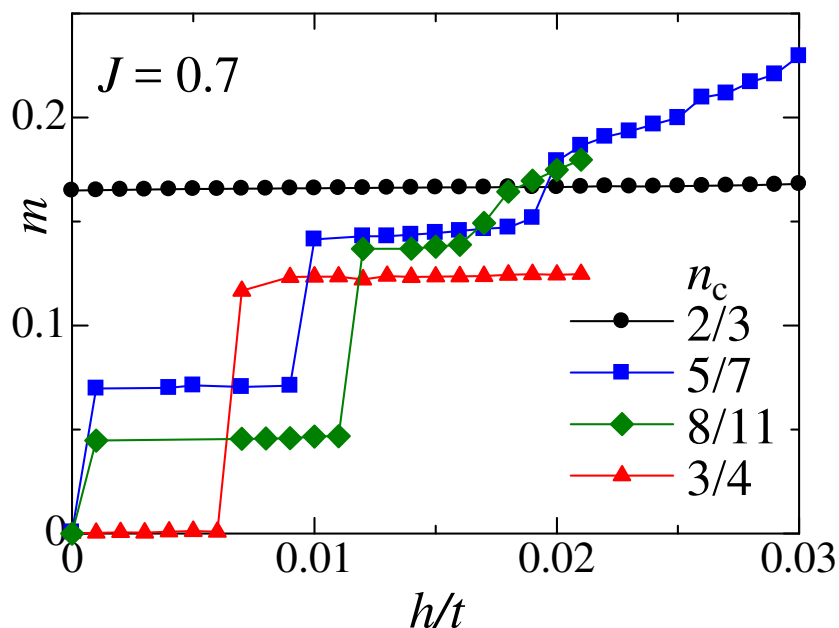


図 3.3 $n_c = 2/3$ から $n_c = 3/4$ における磁化過程の n_c 依存性

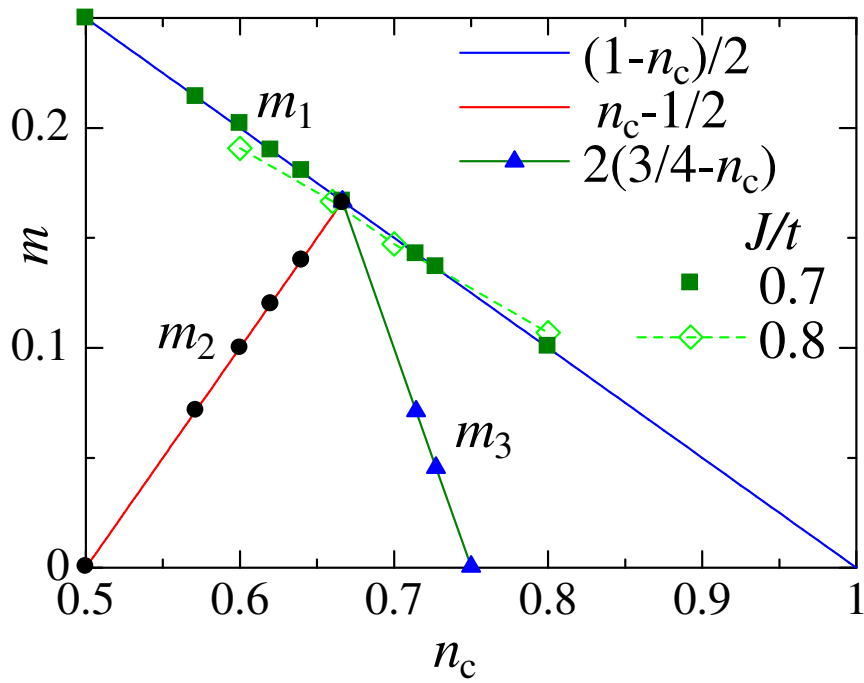


図 3.4 $n_c = 1/2 \sim 3/4$ における磁化プラトートの磁化 m の n_c 依存性

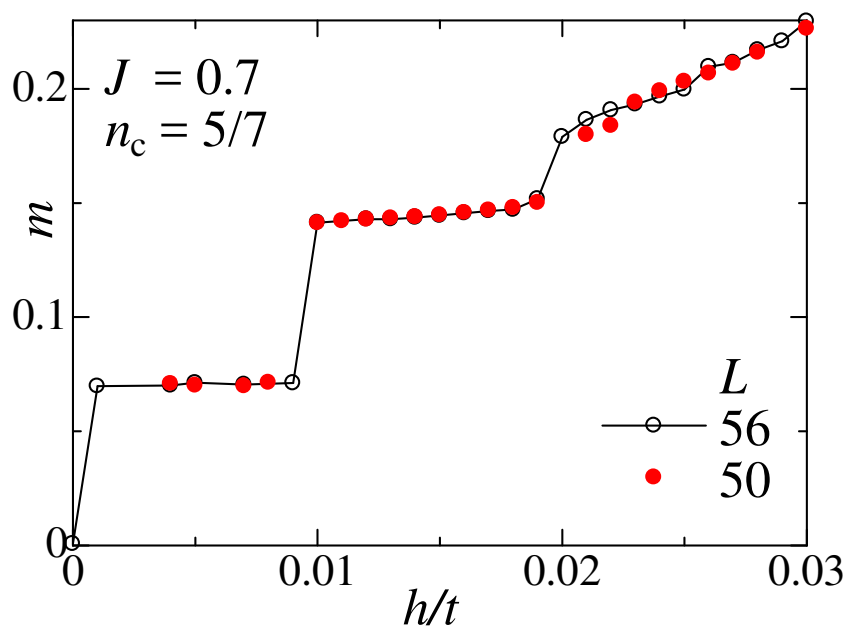


図 3.5 $J = 0.7$, $n_c = 5/7$ における磁化過程のサイズ依存性

い、電子密度を下げると2つの plateau の磁化は徐々に近づき $n_c = 2/3$ において1つの plateau に融合する. 以上をまとめると $J = 0.7$ では $n_c = 2/3$ よりも多い伝導電子密度では第二強磁性相は現れず, plateau は二段になる. plateau の1つは伝導電子に遮蔽されていない局在スピンの数だけ偏極した磁化 m_1 の値を持っている. もう1つの plateau は新たに明らかになった式 (3.1.3) の磁化 m_3 に従う.

図 3.2 と図 3.3 より, 予想していた磁化 m_1 を持つ plateau の他に磁化 m_2 や m_3 を持つ新たな plateau の存在が明らかになった. この plateau の安定化の機構については磁化分布を確認した後で考察する. 次の図 3.4 では plateau の磁化の n_c 依存性に関してまとめた. 伝導電子密度 $n_c = 1 \sim 1/2$ の間の青い直線が式 (3.1.1) に従う線である. $n_c = 1/2 \sim 2/3$ の間の赤い線が式 (3.1.2) に従う線, $n_c = 2/3 \sim 3/4$ の間の緑色の線が式 (3.1.3) に従う線である. 式 (3.1.2) と式 (3.1.3) はどちらも charge gap のある $n_c = 1/2, 3/4$ のゼロ磁場の plateau が, 第二強磁性相の $n_c = 2/3$ へ向かって移動することで生じており, $n_c = 2/3$ において1つの plateau に融合する.

最後に, 有限サイズの効果と計算結果の信頼性について確認する. 図 3.5 は $J = 0.7$, $n_c = 5/7$ における磁化過程のサイズ依存性である. 白抜き黒丸が $L = 56$ であり, 赤丸が $L = 50$ である. 伝導電子密度 $5/7$ に対してサイト数が 56 の場合, 系全体の伝導電子数は 40 であり整数である. 一方, サイト数が 50 の場合, 系全体の伝導電子数は 35.714... と整数にはならず, DMRG のみでは 56 サイトの磁化過程を再現することはできない. SSD を用いてケミカルポテンシャルを連続的に変更することで伝導電子密度を調整できていると言える. また, 系のサイズを変化させても2段の plateau が確認できることにより, この plateau がサイズ依存性によって生じたものではないことがわかる.

磁化過程から得られた結果をまとめると, $n_c = 1/2, 2/3, 3/4$ ではゼロ磁場で spin gap が存在する安定構造が現れ, その間の伝導電子密度では plateau が2段になるということが明らかになった.

3.2 磁化分布

前節において, 磁化過程を求めたが, $n_c = 2/3$ では, ゼロ磁場から plateau 状態へ連続的に接続する強磁性相と, 磁場をかけることで plateau 状態になる常磁性相が存在していた. また, $n_c = 1/2$ から $n_c = 3/4$ の間には, plateau が上段と下段の2つに分かれている領域があることを示した. この節では磁化分布を確認することで, 第二強磁性相と強結合の強磁性の構造の関係, および, 上段 plateau と下段 plateau の構造の違いを議論する.

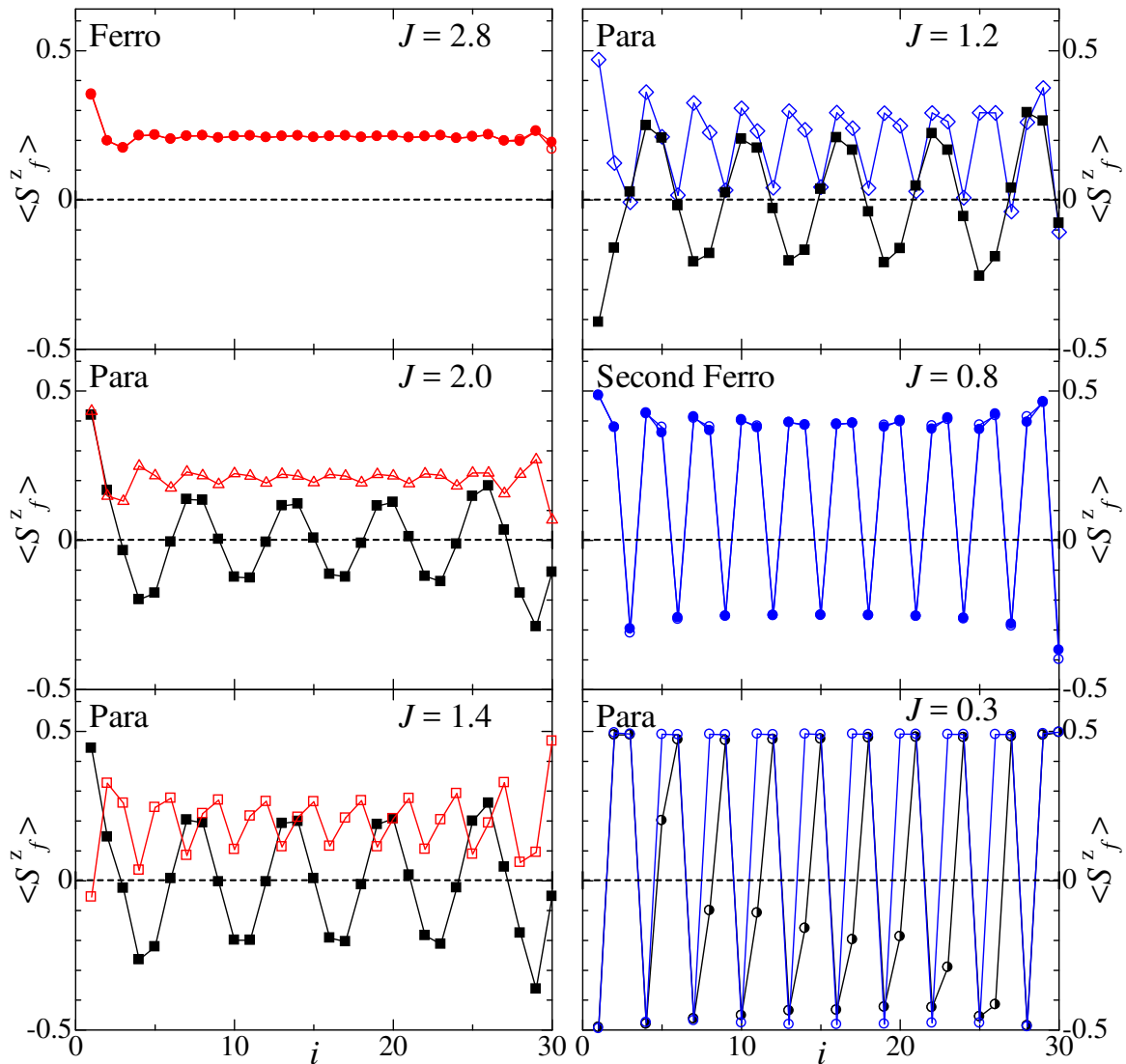


図 3.6 $n_c = 2/3$ における磁化分布の J 依存性. 白抜きラインは磁場 $h = 0.010$, 中塗りラインは磁場 $h = 0$ 赤いラインは強結合の強磁性相の磁化分布と同様の分布, 青いラインは第二強磁性相の磁化分布と同様の分布

3.2.1 $n_c = 2/3$ における磁化分布

図 3.6 は $n_c = 2/3$ の各 J における磁化分布である. 縦軸は, 局在スピンの磁化の大きさであり, 横軸はサイト座標である. 6 つのグラフはすべて同じ座標と磁化の範囲を表示させたものである. 白抜きのラインは磁場 $h = 0.010$ の値であり, 中塗りのラインはゼロ磁場の値である. $J = 0.8, 2.8$ では, 磁化分布と磁化の値からゼロ磁場で自発的に磁化が出ていることがわかり, 磁場を加えた状態もゼロ磁場の状態も同じ分布になっていることがわ

かる. $J = 2.8$ ではサイトに依存性がなく, フラットな構造になっていることがわかる. 一方で $J = 0.8$ では3サイトの周期構造が確認できる. 3サイトのうち2サイトは磁場方向に偏極されているが, 残りの1サイトは磁場とは反対の向きに向いているフェリ磁性の状態であることがわかる. この磁化分布の違いは, $J = 2.8$ の強結合の強磁性相と $J = 0.8$ の第二強磁性金属相の違いを明確に示している. $J = 2.0, 1.4$ はゼロ磁場の状態ではどちらも6サイト周期になっている. 磁場を加えた状態では, 全てのサイトで局在スピンの偏極されて強結合の強磁性金属相に近い磁化分布になっている. 一方 $J = 1.2$ では, ゼロ磁場の状態において $J = 2.0, 1.4$ と同様の6サイト周期になっているが, 磁場を加えると第二強磁性金属相に近い3サイトの磁化分布になっていることがわかる. $J = 0.3$ では, ゼロ磁場の状態は RKKY 相互作用によるスパイラルな磁化分布になっている. 磁場を加えると, 第二強磁性金属相に近い構造になっていることがわかる. 第二強磁性金属相の構造では磁場がかかっているにも関わらず, 磁場と逆向きの局在スピンの存在している. この逆向きのスピンの磁化と磁場と同方向に向いている局在スピンの磁化が部分的に, 打ち消し合い, $n_c = 2/3$ の $J = 2.8$ の強磁性金属相の磁化と同じ磁化が出ている. このように, 常

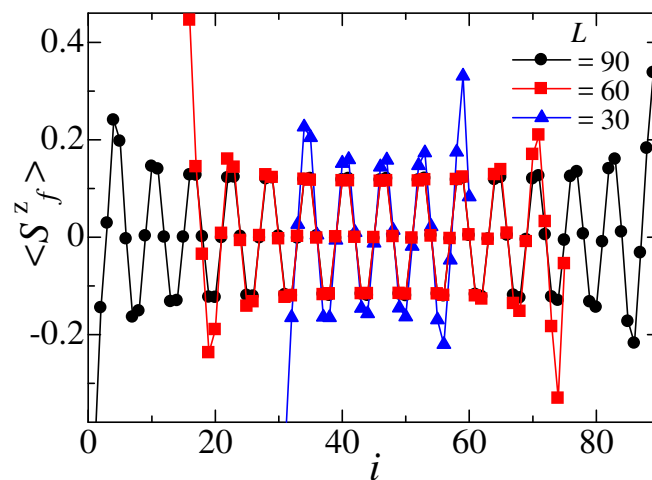


図 3.7 $n_c = 2/3$, $J = 1.6$, $h = 0$ における磁化分布のサイズ依存性

磁性金属相の中に現れる第二強磁性相の磁気構造は J が大きいときの強磁性相の磁気構造と異なっており, その安定化の機構が異なっていると考えられる. また, この第二強磁性相が現れる J の付近で現れる磁化 plateau の磁気構造は第二強磁性相の磁気構造と同じでありその安定機構が共通であることが予想できる.

最後に, 有限サイズの効果と計算結果の信頼性について確認する. 図 3.7 はゼロ磁場における磁化分布を示したものである. 縦軸は局在スピンの磁化の大きさであり, 横軸はサイト座標である. サイトを $L = 90, 60, 30$ と変化させても周期構造が変わることはなく, 有限サイズ効果によるものではないことがわかる.

$n_c = 2/3$ における強結合の強磁性金属相と第二強磁性金属相の磁気構造の違いは磁化分布に現れている. このような磁気構造の違いは 2 段の plateau の磁気構造ではどのようなになっているか, 2 段の plateau の磁気構造の違いを図 3.8, 図 3.9, 図 3.10 から確認する.

3.2.2 plateau が二段になる電子密度の磁化分布

$n_c = 2/3$ で見られた plateau の磁気構造の違いは 2 段の plateau が現れる領域においてどのように反映されるのか, それぞれの伝導電子密度における磁化分布を見ることで確かめる. 図 3.8 は $n_c = 1/2$ から $n_c = 2/3$ の間の伝導電子密度 $n_c = 5/8$ のときの磁気構造であり, plateau が二段になる J の大きさの結果である. 縦軸は局在スピンの磁化の値であり, 横軸はサイト座標 i であり 64 サイトの結果である. $h = 0$ はゼロ磁場, $h = 0.015$ は下段の plateau 状態の磁場, $h = 0.020$ は上段の plateau の磁場にそれぞれ対応している. $h = 0, 0.015$ ではどちらも 16 サイト周期となっているが, 磁場がかかっている方向に偏極されている局在スピンの数が異なっているために磁化の値が異なっている. しかし, 磁場がかかっているにも関わらず, 磁場と逆向きの局在スピンの存在している. この逆向きのスピンの磁化と磁場と同方向に向いている局在スピンの磁化が部分的に, 打ち消し合い, m_2 に従う磁化が生じている. これは図 3.6 と比較すると第二強磁性金属相の構造が plateau に反映されていると考えることができる. 一方, $h = 0.020$ では 8 サイト周期と $h = 0, 0.015$ の半分になっていることがわかり, 磁場と逆向きの局在スピンの存在していないことがわかる. これは図 3.6 と比較すると強結合の強磁性金属相の構造が plateau に反映されていると考えることができる. したがって, $n_c = 1/2$ から $n_c = 2/3$ の間の伝導電子密度では下段の plateau は第二強磁性金属相の構造を反映した構造であり, 上段の plateau は強結合の強磁性金属相を反映した構造であることがわかる.

図 3.9 は $n_c = 2/3$ から $n_c = 3/4$ の間の伝導電子密度 $n_c = 5/7$ のときの磁気構造であり, plateau が二段になるときの J の大きさの図である. 縦軸は局在スピンの磁化の値であり, 横軸はサイト座標 i であり 56 サイトの結果である. $h = 0$ はゼロ磁場, $h = 0.07$ は下段の plateau 状態の磁場, $h = 0.012$ は上段の plateau の磁場にそれぞれ対応している. $h = 0, 0.007$ ではどちらも 14 サイト周期となっているが, $n_c = 5/8$ のときと同様に磁場がかかっている方向に偏極されている局在スピンの数が異なっているために磁化の値が異なっている. しかし, 磁場がかかっているにも関わらず, 磁場と逆向きの局在スピンの存在している. この逆向きのスピンの磁化と磁場と同方向に向いている局在スピンの磁化が部分的に, 打ち消し合い, m_3 に従う磁化が生じている. したがって第二強磁性金属相の構造が plateau に反映されていると考えることができる. 一方, $h = 0.012$ では 7 サイト周期と $h = 0, 0.007$ の半分になっていることがわかり, 磁場と逆向きの局在スピンの存在していないことがわかる. これは強結合の強磁性金属相の構造が plateau に反映されていると

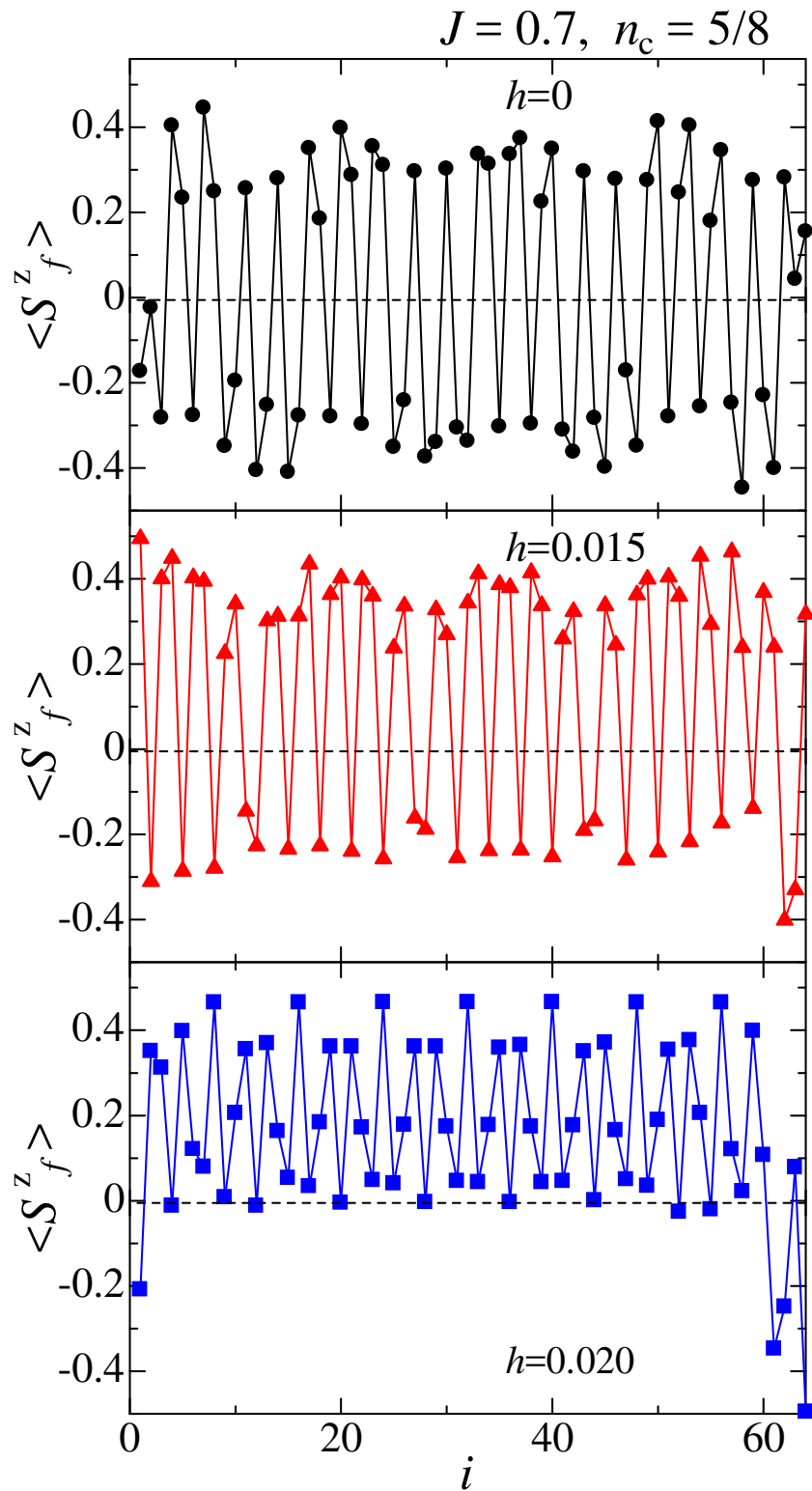


図 3.8 $J = 0.7, n_c = 5/8$ の各 plateau における磁化分布

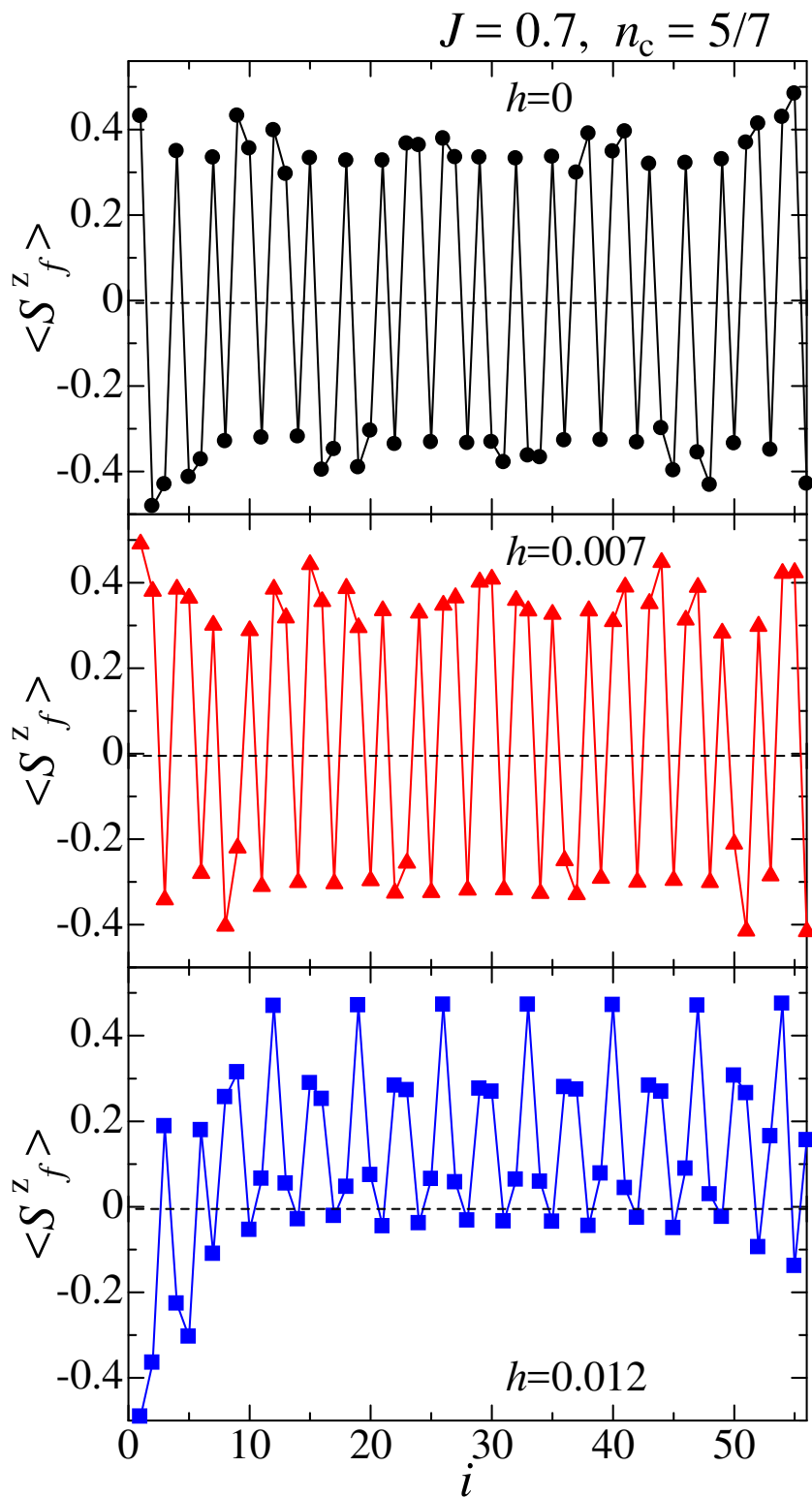


図 3.9 $J = 0.7, n_c = 5/7$ の各 plateau における磁化分布

考えることができる. したがって, $n_c = 5/7$ のときと同様に $n_c = 2/3$ から $n_c = 3/4$ の間の伝導電子密度でも下段の plateau は第二強磁性金属相の構造を反映した構造であり, 上段の plateau は強結合の強磁性金属相を反映した構造であることがわかる.

以上の結果から, $n_c = 1/2$ から $n_c = 3/4$ の間の伝導電子密度周辺に強結合の強磁性金属相と第二強磁性金属相の2つの安定相の存在を確認できた.

3.2.3 $n_c = 3/4$ における磁化分布

図 3.10 はゼロ磁場で安定構造が現れる $J = 0.7$, $n_c = 3/4$ の各 plateau における磁化分布である. 縦軸は局在スピンの磁化の値であり, 横軸はサイト座標 i であり 40 サイトの結果である. $h = 0$, $h = 0.005$ はどちらも下段の plateau であり, spin gap があるときの磁化分布である. どちらも 8 サイト周期になっており, 同じ構造になっていることがわかる. $h = 0.015$ は上段の plateau である. 周期は 8 サイト周期になっていることがわかる. 上段の plateau と下段の plateau はどちらも磁場がかかっているにもかかわらず, 磁場と逆向きの局在スピンの存在している. 下段の plateau は第二強磁性相の構造を反映したものである. 一方, 上段の plateau は図 3.9 の構造と比較すると全く異なった構造をしている. この上段の plateau は前に述べたもう一つの安定構造に対応している.

3.2.4 plateau の磁化と電子密度の関係

これら plateau がなぜ安定化するののかについてはこの章の最後で考え, ここでは各 plateau の特徴をまとめる. まず, plateau 磁化と n_c の関係を示す直線の伝導電子密度 n_c の係数を 1 に合わせ, 式全体の係数に着目する. m_1 の係数が $1/2$ であり, m_2 の係数は -1 , m_3 の係数は 2 となっている. m_1 から他の直線を比較すれば m_2 は -2 倍, m_3 は 4 倍になっている.

図 3.11 と図 3.12 を比較すると, m_1 に従う場合は強結合極限の強磁性金属相における理解と同様である. 伝導電子 1 つを取り去ると近藤シングレットが 1 つ壊れ, 局在スピン 1 つ分の磁化が増加する ($0 \Rightarrow \uparrow$). したがって, 傾きは $1/2$ である. これに対して, m_3 に従う場合は伝導電子 1 つを取り去ると局在スピンの数が 2 つ下向きから上向きに変わる ($\downarrow\downarrow \Rightarrow \uparrow\uparrow$). したがって, 傾きは 2 である. これは m_3 の傾きが m_1 の 4 倍であることに一致する. m_3 の式に従う領域 $2/3 \leq n_c \leq 3/4$ では, 上記の伝導電子 1 つの注入や除去によって局在スピン 2 つが向きを変えることにより磁化が変化し, この領域の伝導電子密度では m_3 の線に乗ることがわかる. ほぼ同様に図 3.13 と図 3.14 を比較すると, m_1 に従う場合は強結合極限の強磁性金属相における理解と同様である. 伝導電子 1 つを取り去ると近藤シングレットが 1 つ壊れ, 局在スピン 1 つ分の磁化が増加する ($0 \Rightarrow \uparrow$). したがって, 傾きは $1/2$

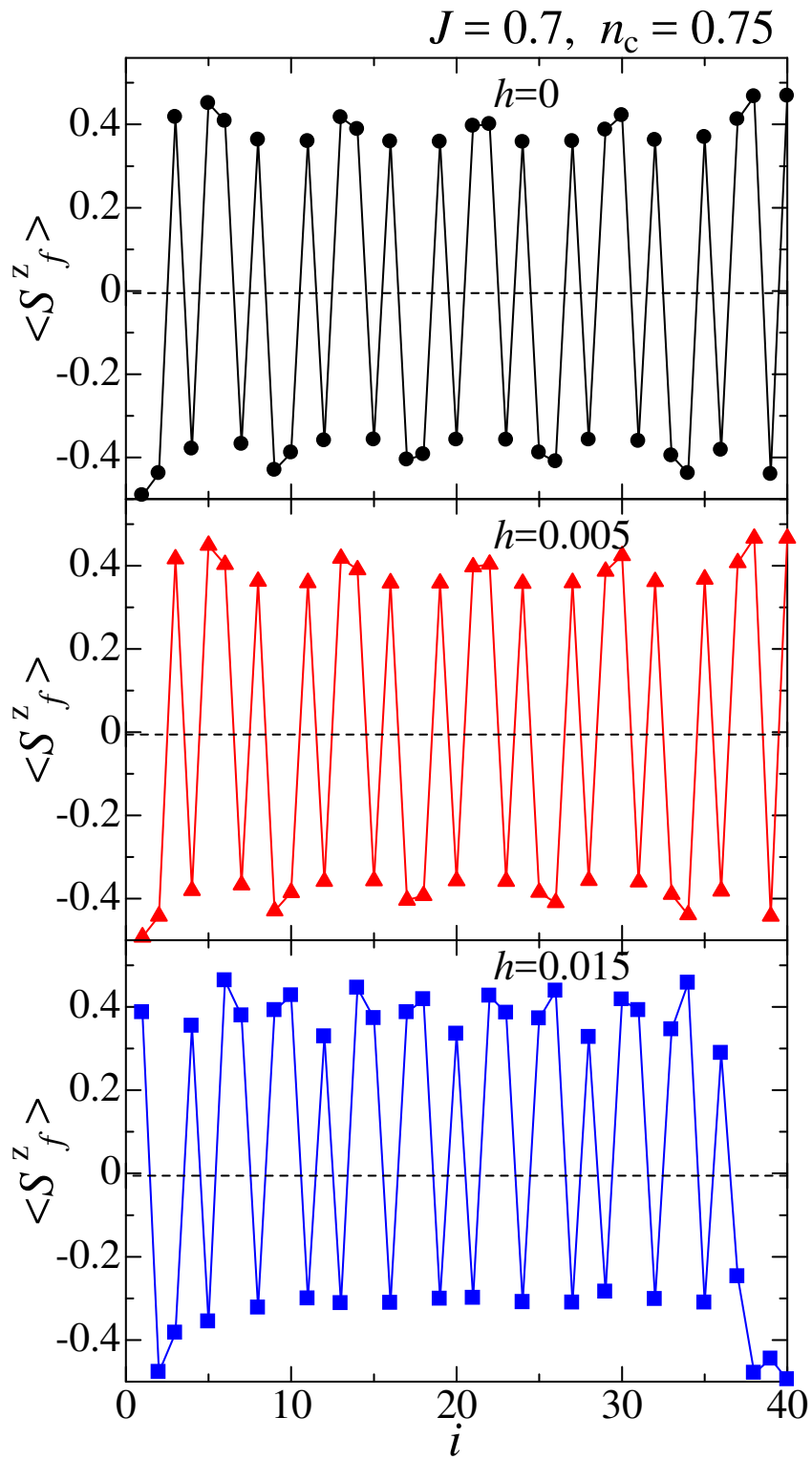


図 3.10 $J = 0.7, n_c = 3/4$ の各 plateau における磁化分布

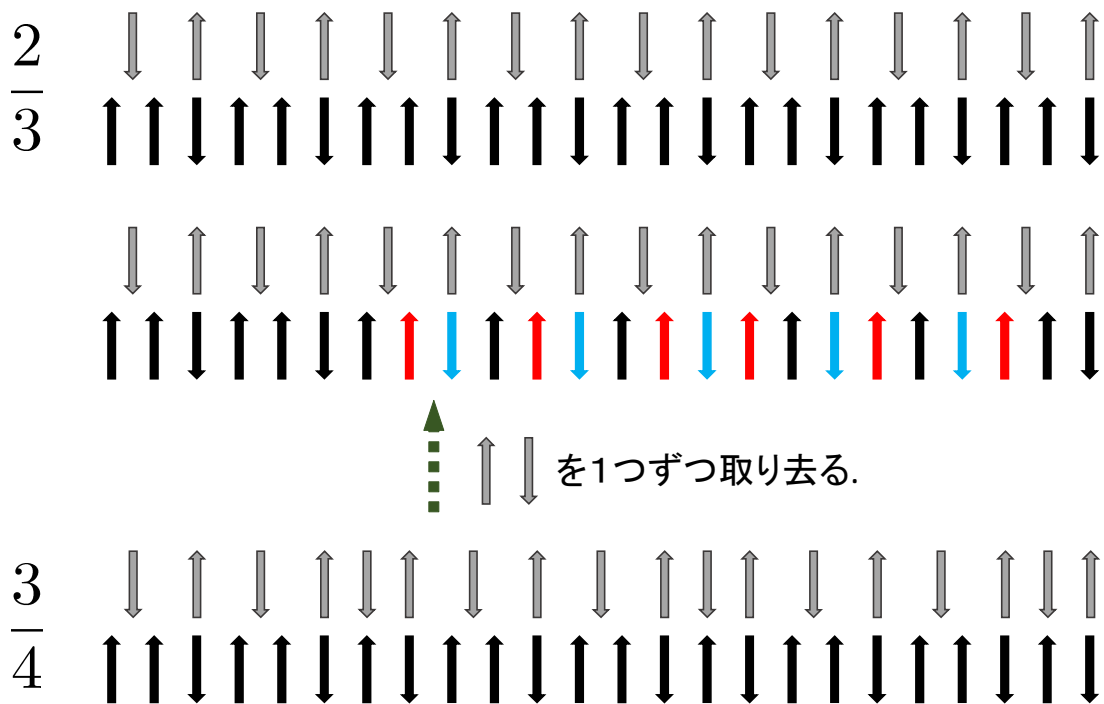


図 3.11 磁化 plateau の磁化 m が m_1 に従う場合において, $n_c = 3/4$ から $n_c = 2/3$ へ伝導電子密度が変化する場合の磁化分布の変化の模式図

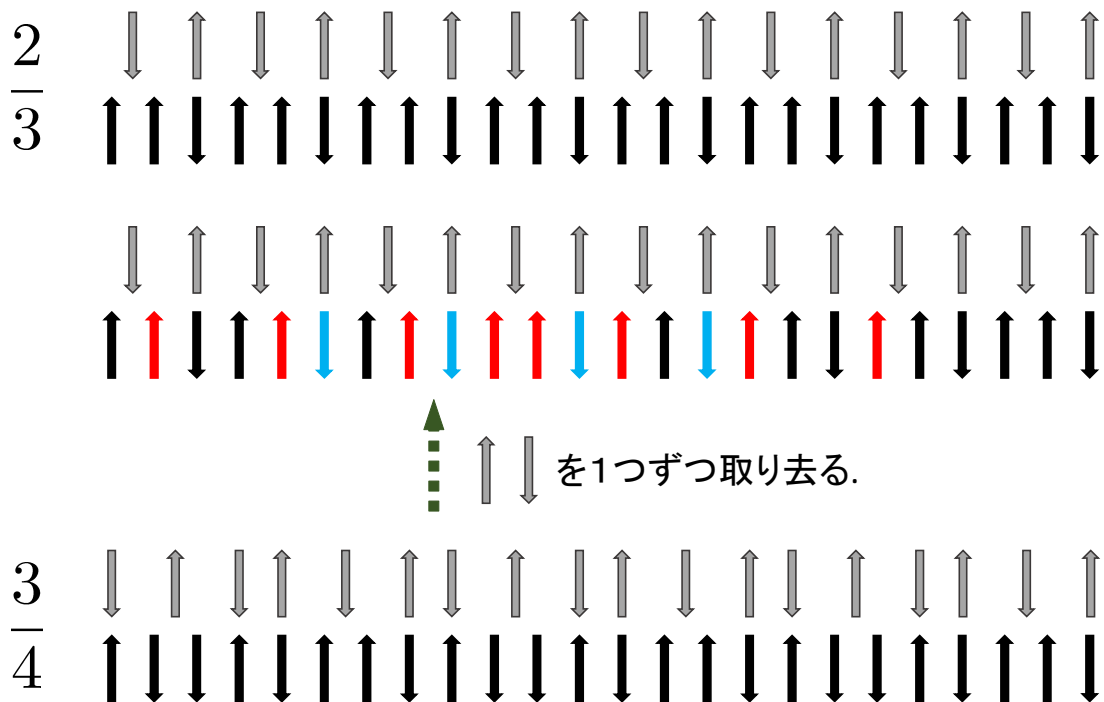


図 3.12 磁化 plateau の磁化 m が m_3 に従う場合において, $n_c = 3/4$ から $n_c = 2/3$ へ伝導電子密度が変化する場合の磁化分布の変化の模式図

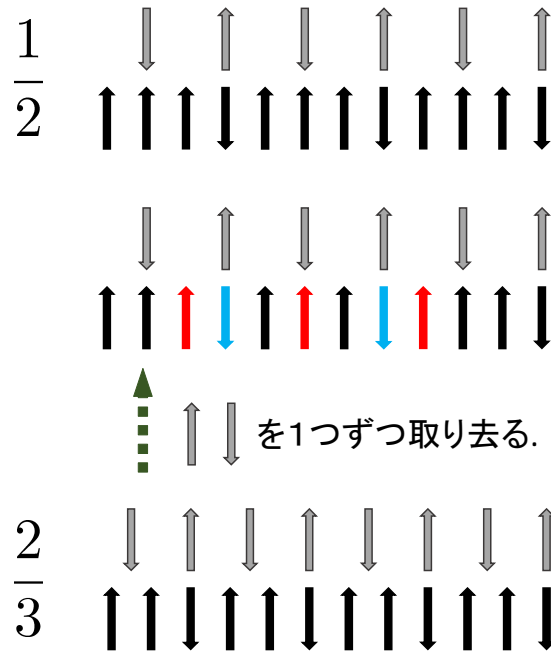


図 3.13 磁化 plateau の磁化 m が m_1 に従う場合において, $n_c = 2/3$ から $n_c = 1/2$ へ伝導電子密度が変化する際の磁化分布の変化の模式図

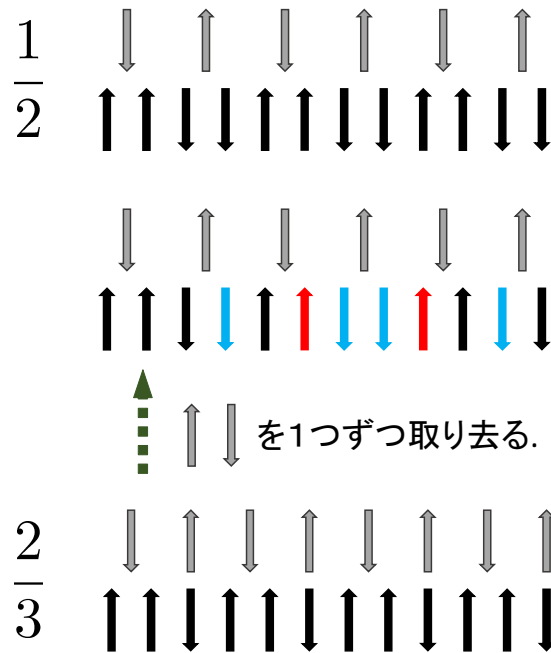


図 3.14 磁化 plateau の磁化 m が m_2 に従う場合において, $n_c = 2/3$ から $n_c = 1/2$ へ伝導電子密度が変化する際の磁化分布の変化の模式図

である. これに対して, m_2 に従う場合は伝導電子1つを取り去ると局在スピンの向きが1つ上向きから下向きに変わる ($\uparrow \Rightarrow \downarrow$). したがって, 傾きは m_1 と比較して -1 である. これは m_2 の傾きが m_1 の -2 倍であることに一致する. m_2 の式に従う領域 $1/2 \leq n_c \leq 2/3$ では, 上記の伝導電子1つの注入や除去によって1つの局在スピンの向きを変えることにより磁化が変化し, この領域の伝導電子密度では m_2 の線に乗ることがわかる.

3.3 μ と伝導電子密度

磁化過程と磁化分布の計算結果から, $n_c = 1/2, 2/3, 3/4$ には spin gap が存在していることが明らかになった. 一次元近藤格子模型の half-filling では spin gap と charge gap のどちらの存在も確認されていたが, quater-filling では, charge gap の存在のみが指摘されている. ゼロ磁場で spin gap の存在が明らかになった $n_c = 2/3, 3/4$ では, charge gap も共に存在しているのか確認するために, μ と伝導電子密度の関係から伝導電子の電荷自由度の振る舞いについて見ていく.

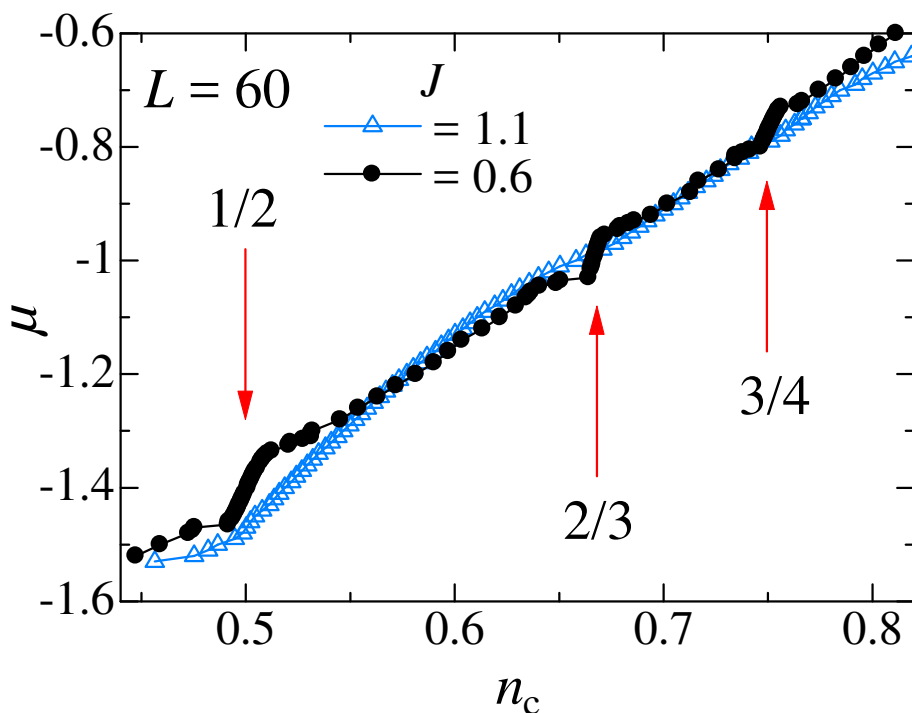


図 3.15 $J = 0.6, 1.1$ におけるケミカルポテンシャルと伝導電子密度. 特定の n_c におけるケミカルポテンシャルの飛び.

まずケミカルポテンシャル μ と伝導電子密度 n_c の図から charge gap が存在する領域の結果を示していく. DMRG+SSD を用いた場合に導入するケミカルポテンシャル μ と伝導電子密度 n_c の関係から charge gap が議論できる [37]. 図 3.15 は伝導電子密度が $n_c = 0.5 \sim 0.8$ における μ と n_c の関係を示している. $J = 0.6$ では, $n_c = 1/2, 2/3, 3/4$ に charge gap があることが予想できるが, $J = 1.1$ では charge gap はどの伝導電子密度でも見られないことがわかる. この振る舞いについて $n_c = 1/2, 3/4, 2/3$ という順で詳細をみていく.

3.3.1 $n_c = 1/2$ における charge gap

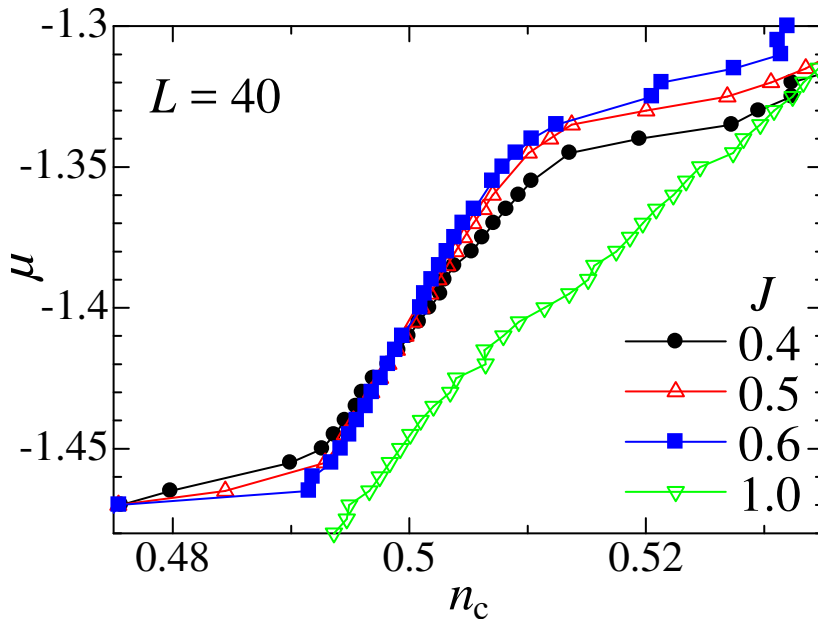


図 3.16 $n_c = 1/2$ におけるケミカルポテンシャルと伝導電子密度の J 依存性

先行研究において quarter-filling に charge gap があることが指摘されている [11][18]. 図 3.16 はケミカルポテンシャルと伝導電子密度の関係である. L はサイト数であり, $L = 40$ の計算結果である. 先行研究 [11][18] において確認されている $J = 0.5, 0.6$ において charge gap があることがわかる. しかし $J = 1.0$ においては charge gap がなくなっていることがわかる. 図 3.17 は $n_c = 1/2, J = 0.6$ における charge gap のサイズ依存性である. サイズを $L = 40, 60, 80, 100$ と増加させると 0.5 を中心に徐々に線が立ち上がっていることがわかる. $n_c = 1/2$ よりも低電子密度側ではサイズを増加させると $n_c = 1/2$ 側へシフトしていることがわかる. また $n_c = 1/2$ よりも高電子密度側ではサイズを増加

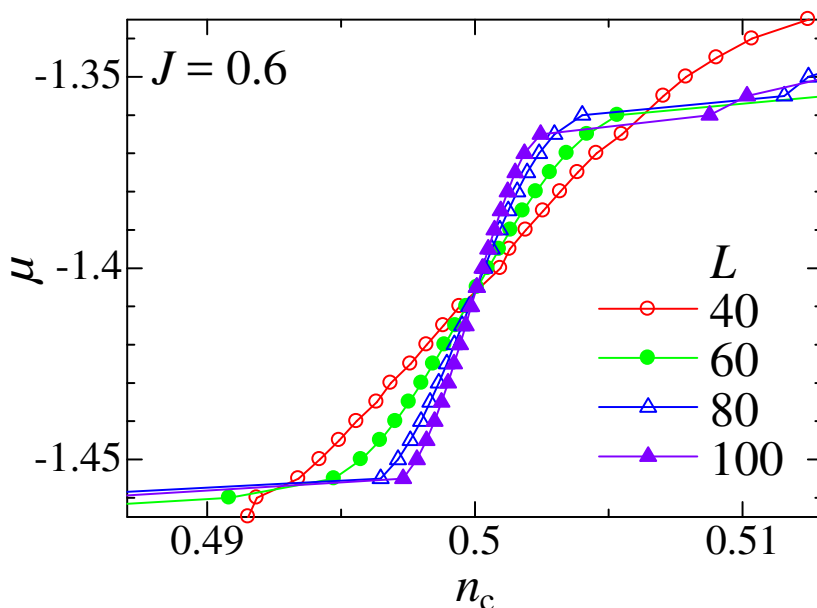


図 3.17 $n_c = 1/2$ におけるケミカルポテンシャルと伝導電子密度のサイズ依存性

させると $n_c = 1/2$ 側へシフトしていることがわかる. したがって, 無限系においてケミカルポテンシャルに飛びが生じ, charge gap が存在することが分かる.

3.3.2 $n_c = 3/4$ における charge gap

図 3.18 をみると, $n_c = 3/4$, $J = 0.4 \sim 0.8$ においても charge gap が存在していることがわかる. この gap は図をみると, 磁化分布は 8 サイトの周期になって安定した構造になっていることがわかる. $J = 1.0$ では charge gap がなくなり, それ以降では charge gap が出現しないことがわかった. J と t の比が $J/t \simeq 1$ よりも大きくなると $n_c = 0.5$ のときと同様に charge gap が消えるような振る舞いになっていることがわかる. 図 3.19 は $n_c = 3/4$ におけるケミカルポテンシャルと伝導電子密度のサイズ依存性の図である. $J = 0.7$ では, $L = 40, 56, 80$ とサイズを増やしていくと $n_c = 3/4$ を境にケミカルポテンシャルの飛びが徐々にたっていくような振る舞いになっていることがわかる. $n_c = 0.75$ よりも低電子密度側はサイズを $L = 40, 56, 80$ と増加させていくと $n_c = 0.75$ に近づいていくことがわかる. これに対して $n_c = 0.75$ よりも電子密度が高い方では, サイズを増加させると $n_c = 0.75$ に近づいていくことがわかる. このサイズ依存性によって, 無限系では $n_c = 0.75$ において charge gap が出現していることがわかる. また傾きは $J = 0.6, 0.7$ でも同様の傾きになっている.

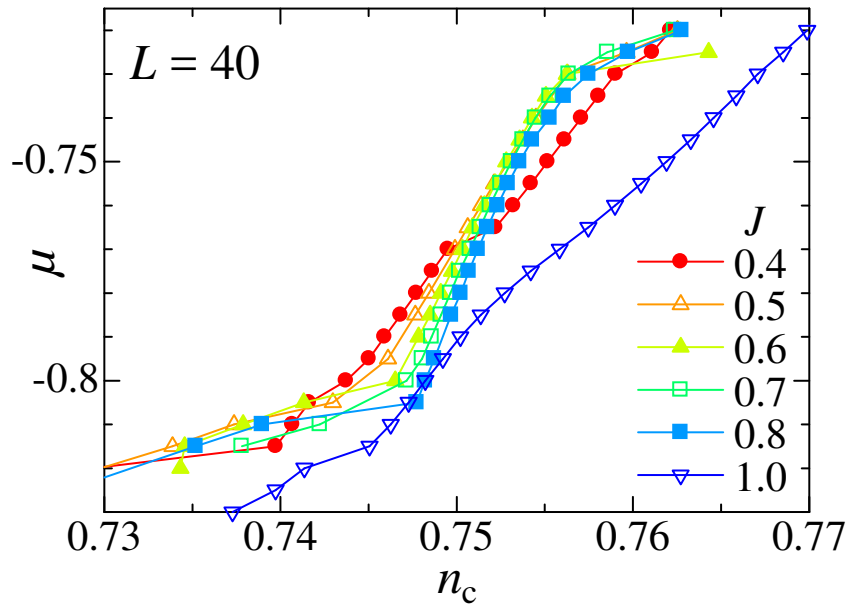


図 3.18 $n_c = 3/4$ におけるケミカルポテンシャルと伝導電子密度の J 依存性

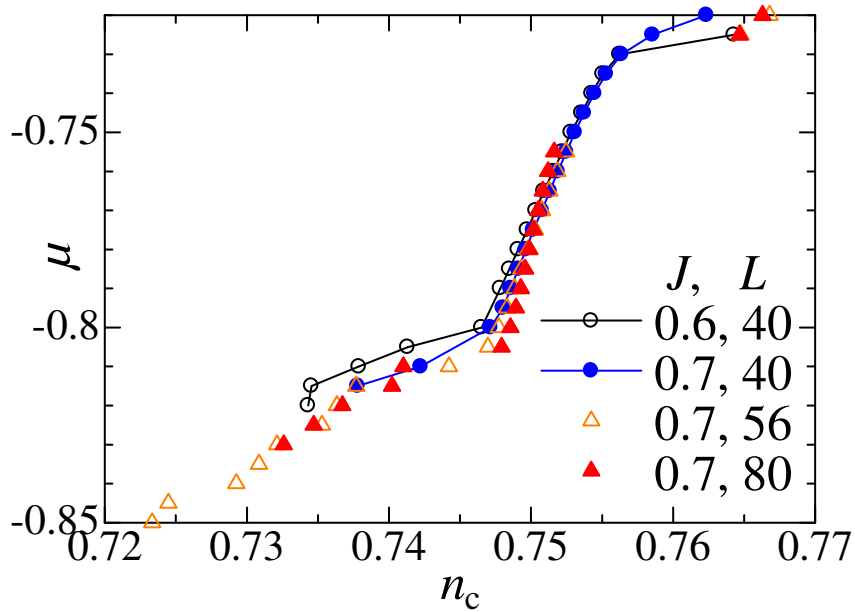
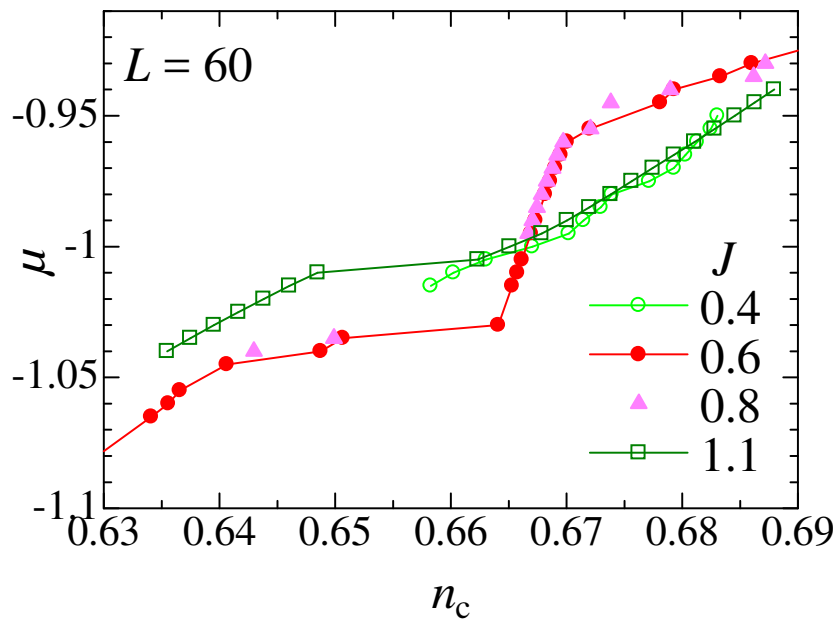


図 3.19 $n_c = 3/4$ におけるケミカルポテンシャルと伝導電子密度のサイズ依存性

3.3.3 $n_c = 2/3$ における charge gap図 3.20 $n_c = 2/3$ におけるケミカルポテンシャルと伝導電子密度の J 依存性

$n_c = 2/3$ では, $J = 0.6 \sim 0.9$ において $h = 0$ における charge gap が確認できる. 図 3.20 は $L = 60$ で $J = 0.4, 0.6, 0.8, 1.1$ と変えたときのケミカルポテンシャルの変化を表したものであるが, $J = 0.6, 0.8$ の傾きは $n_c = 2/3$ 周辺の領域において $J = 0.4, 1.1$ の傾きと異なっていることが明確にわかる. 一方, $n_c = 2/3$ 周辺の領域以外では, どの J であっても同様の傾きになっている. このように, J によって電荷応答が明確に変化していることがわかる. この異なる電荷応答が現れる領域は第二強磁性相が基底状態になっている領域に対応している. 図 3.21 は $n_c = 2/3$, $J = 0.6$ におけるケミカルポテンシャルと伝導電子密度のサイズ依存性である. サイズは $L = 30, 60$ についての計算結果である. 30 サイトと 60 サイトの 2 つの線はほぼ $n_c = 2/3$ で交わっている. 30 サイトの線と 60 サイトの線を比較すると低電子密度側では 60 サイトの方が $n_c = 2/3$ 側へシフトし, 高電子密度側でも $n_c = 2/3$ 側へシフトしていることがわかる. この計算結果から, 確かに $n_c = 2/3$ において, charge gap が出現していると判断できる. 次に, この charge gap の磁場依存性を考える. 図 3.22 は $n_c = 2/3$ における $J = 0.8$ のケミカルポテンシャルと伝導電子密度の磁場依存性を示したものである. $J = 0.8$ は $L = 30, 60$, 磁場の大きさは $h = 0, 0.01$ についての計算結果を載せた. $J = 0.8$ は第二強磁性相に対応しているパラメータであ

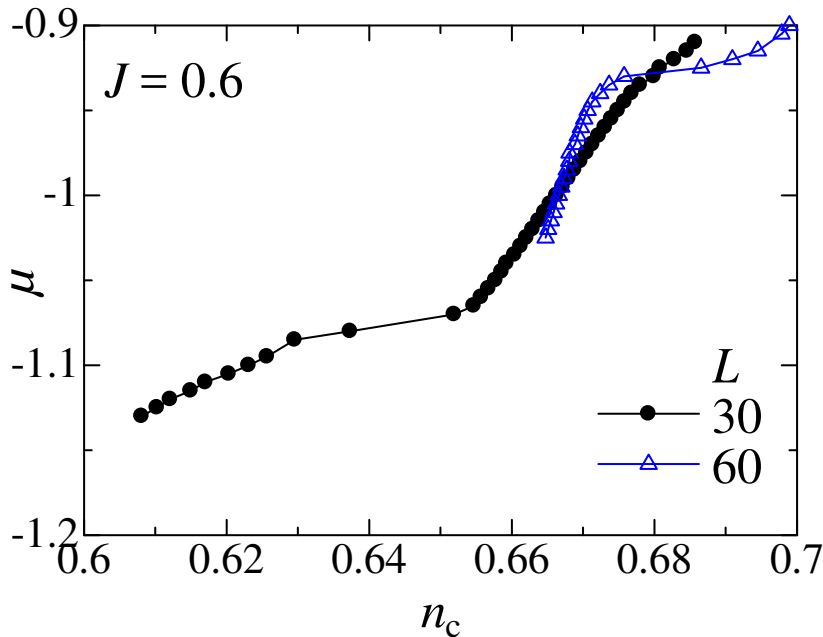


図 3.21 $J = 0.6, n_c = 2/3$ におけるケミカルポテンシャルと伝導電子密度のサイズ依存性

り、磁場がかかっていない状態から plateau 状態は連続的につながっている。したがって、ゼロ磁場であっても磁場をかけても charge gap はあると予想できる。 $J = 0.8$ ではサイズや磁場を変化させても傾きはほぼ変わっていないことがわかる。これはゼロ磁場であっても磁場をかけても charge gap は消えずに残っていることを示しており、charge gap と spin gap が共に存在していることがわかる。最後にこの charge gap と spin gap が第二強磁性相に関係して出現しているのかその関連を確かめる。図 3.23 は $J = 0.3$ におけるゼロ磁場を plateau が壊れている状態のケミカルポテンシャルと伝導電子密度の磁場依存性を示したものである。 $J = 0.3$ は第二強磁性金属相が現れる J よりも小さい J の常磁性金属相である。ゼロ磁場のときの結果と $h = 0.015, 0.020$ の磁場を加えたときの結果を比較する。この 2 つの磁場の値は、plateau が壊れている状態に対応するものである。これら 3 つの線を比較するとほぼ同様の傾きになっていることがわかる。加えて、 $L = 30, 60$ どちらであっても傾きに変化はなく、サイズ依存性もないことが確認できる。したがって、 $J = 0.3$ ではゼロ磁場の状態では charge gap は存在せず常磁性金属状態になっている。 plateau が壊れている状態も同様に常磁性金属状態になっていると判断できる。これらの間の plateau 状態については次の図 3.24 で確認する。

図 3.24 は $J = 0.3, n_c = 2/3$ における plateau 状態のケミカルポテンシャルと伝導電子密度のサイズ依存性である。サイズが大きくなると、 $n_c = 2/3$ を中心に線が徐々に立ち

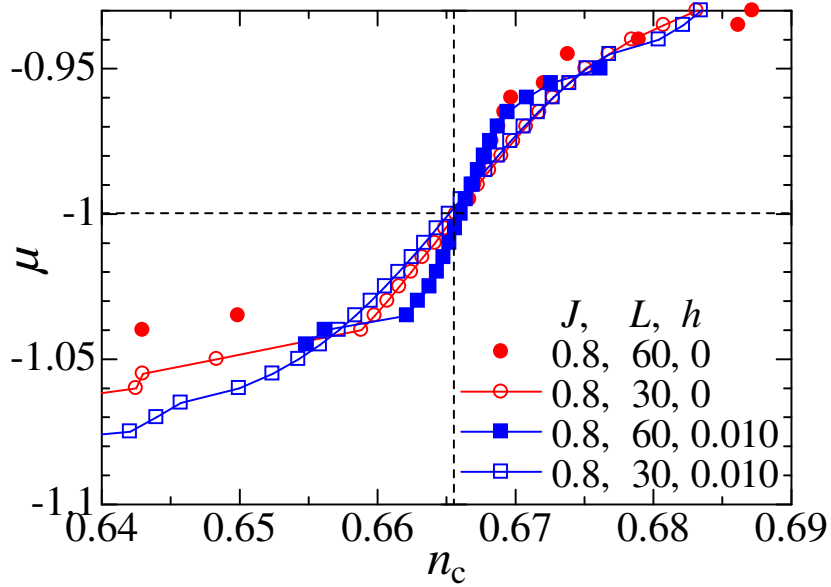


図 3.22 $J = 0.8, n_c = 2/3$ におけるケミカルポテンシャルと伝導電子密度の磁場依存性

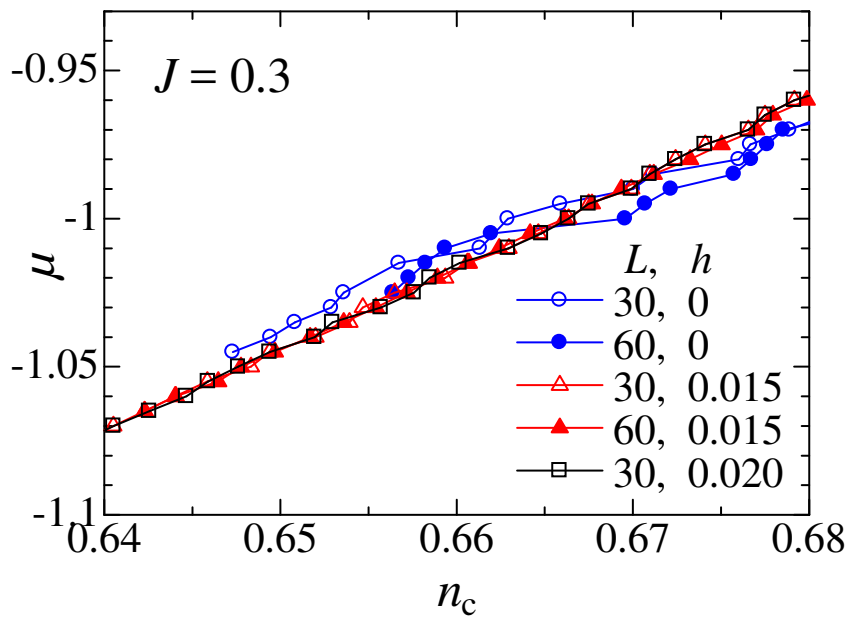


図 3.23 $J = 0.3, n_c = 2/3$ におけるゼロ磁場と plateau が壊れた状態のケミカルポテンシャルと伝導電子密度のサイズ依存性

上がることがわかり, charge gap の存在が確認できる $J = 0.8$ の plateau 状態のときの線と比較しても, $L = 120, h = 0.005$ の線では同程度の傾きになっていることがわかる. このサイズ依存性の結果より, $J = 0.3$ の plateau 状態では charge gap が存在しており, 絶縁体になっていることが確認できる. 以上の結果から, $J = 0.3$ ではゼロ磁場の状態では, RKKY 相互作用によるスパイラル状態が発達している一方で charge gap は存在せず, 磁場をかけて plateau 状態に入ると charge gap が出現し, 磁場をさらに加えて plateau が壊れると charge gap は再びなくなるということがわかる. これは磁場により, 金属 \rightarrow 絶縁体 \rightarrow 金属というように 2 度相転移が生じることを意味する. 次に, 第二強磁性金属相の

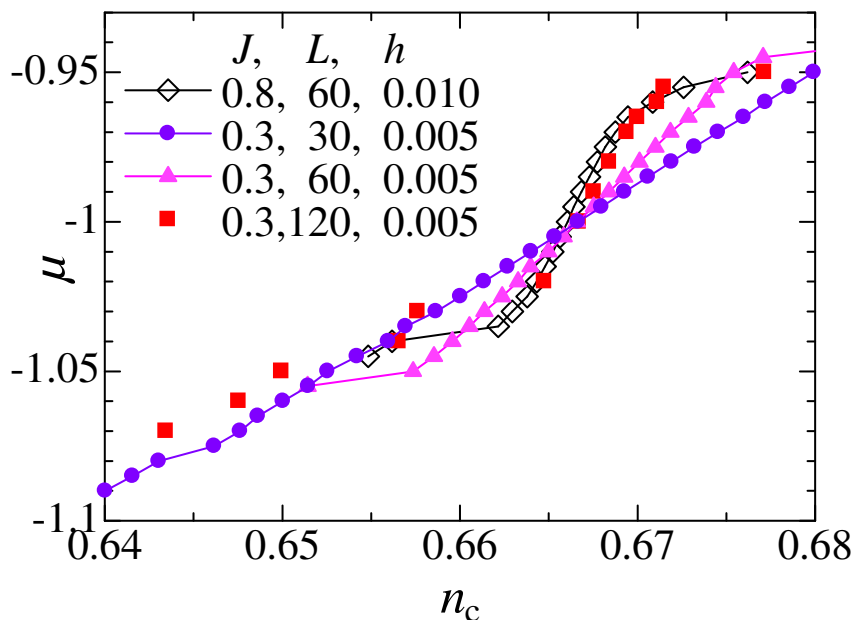


図 3.24 $J = 0.3, n_c = 2/3$ における plateau 状態のケミカルポテンシャルと伝導電子密度のサイズ依存性

J よりも大きい J の領域では charge gap は実現しているのか, 図 3.25 から確認する. 図 3.25 は $J = 0.8, 1.5, n_c = 2/3$ におけるケミカルポテンシャルと伝導電子密度の磁場依存性を示した図である. 青線はゼロ磁場の線であり, 赤線は $h = 0.02$ の線でありこの磁場は plateau 状態の磁場である. ゼロ磁場の線と plateau 状態の線を比較するとどちらも同じ傾きになっていることがわかる. この 2 本の線と charge gap が確認できる $J = 0.8$ の plateau 状態の線を比較すると $J = 1.5$ では charge gap は存在していないことがわかる. したがって $J = 1.5$ ではゼロ磁場であっても plateau 状態であっても charge gap は存在しない.

ケミカルポテンシャルと伝導電子密度の関係から得られた結果についてまとめる. ゼロ

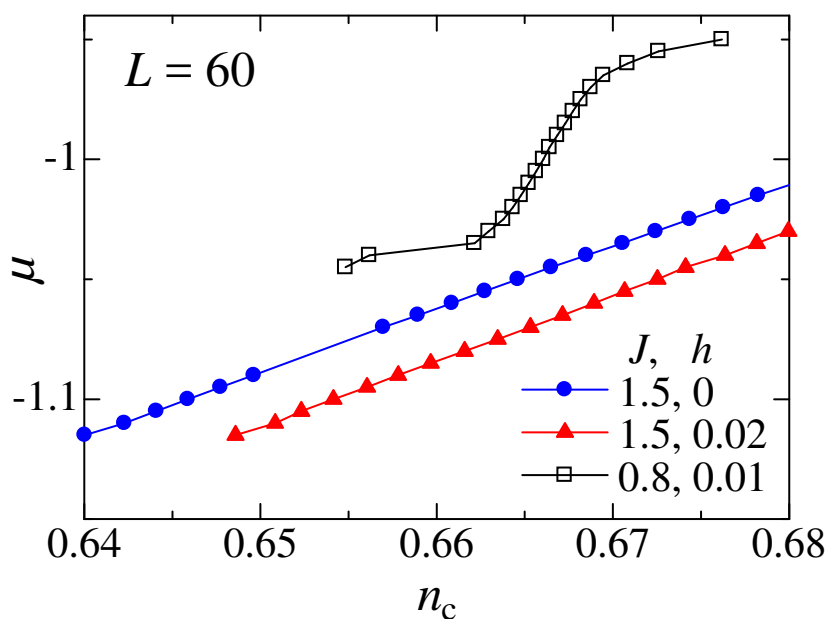


図 3.25 $J = 0.8, 1.5, n_c = 2/3$ におけるケミカルポテンシャルと伝導電子密度の磁場依存性

磁場で spin gap が存在していた $n_c = 2/3, 3/4$ では charge gap も存在していることを明らかにした. 磁場により誘起される金属絶縁体転移は $n_c = 2/3$ において第二強磁性相の J よりも小さい J の領域で出現している. 第二強磁性相が現れる J よりも大きい J の領域では磁場に誘起される金属-絶縁体転移は存在しない.

3.4 第二強磁性金属相と磁化プラトーの起源について

以上では磁化過程, 磁化分布, ケミカルポテンシャルと伝導電子密度の関係から安定相の存在を明らかにした. ここでは, なぜこのような安定相が存在しているのか. まず, 磁化分布を構成する伝導電子と局在スピンの密度に注目する. $J \simeq t$ の領域では, 伝導電子のホッピングと局所的なシングレットどちらも得になるような配置になることが期待できる. 伝導電子はパウリ原理からの制約を避けホッピングの利得を得るために $\uparrow\downarrow\uparrow$ と必ず互い違いに並ぶ. 図 3.26 の白抜きの赤線から, 電子密度 $1/2$ で 2 サイトに 1 つある伝導電子が互い違いに並んでいるということが確認できる. 次に, 伝導電子密度から RKKY 相互作用による結合が強い領域と近藤効果による結合が強い領域に分けることを考える. これらの領域をそれぞれ RKKY ブロック, 近藤ブロックと呼ぶことにする (図 3.27). このブロックが伝導電子の運動エネルギーを最小にする $2k_F$ の周期と整合する配列を形成することで安定相が形成されると考える. RKKY ブロックは局在スピン 2 つと伝導電子 1 つから構

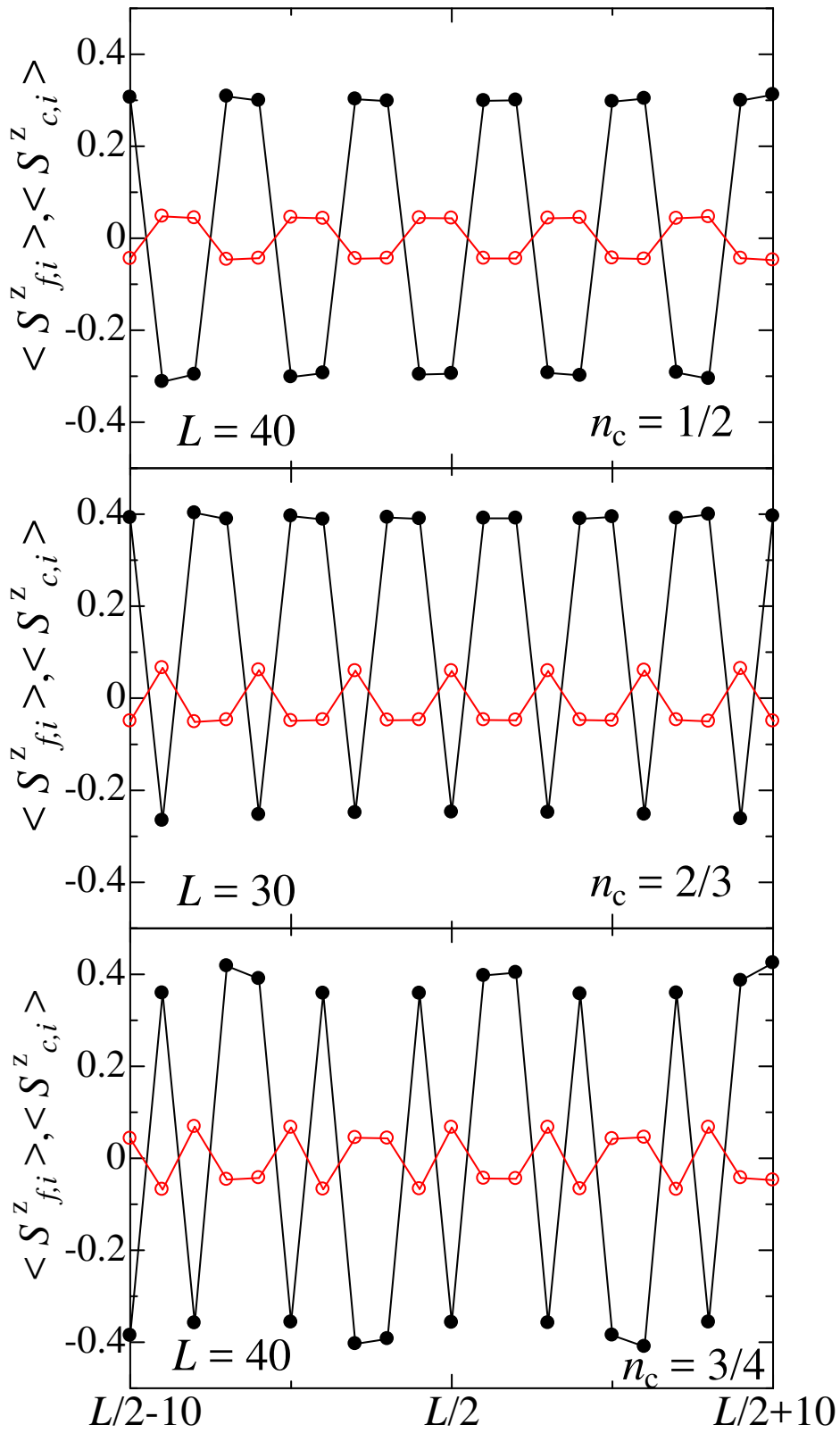


図 3.26 $n_c = 1/2, 2/3, 3/4$ における局在スピンの磁化分布と伝導電子の磁化分布



図 3.27 近藤ブロックと RKKY ブロック. 近藤ブロックは局在スピ1つと伝導電子1つから構成されるブロックである. RKKY ブロックは局在スピ2つと伝導電子1つから構成されるブロックである.

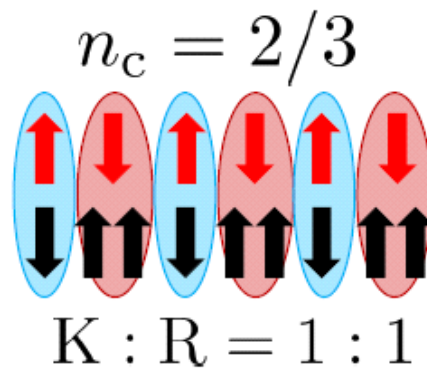


図 3.28 $n_c = 2/3$ における近藤ブロックと RKKY ブロックの模式図. 青丸は局在スピ1つと伝導電子1つによる近藤ブロック, 赤丸は局在スピ2つと伝導電子1つによる RKKY ブロック. $n_c = 2/3$ では近藤ブロック (K) と RKKY ブロック (R) の比は 1 : 1 である.

成され, 局在スピは伝導電子の運動エネルギーを下げ, さらに交換相互作用のエネルギーを得るために伝導電子のスピと反対向きに揃う. 一方, 近藤ブロックは局在スピ1つと伝導電子1つから構成されるブロックである. $n_c = 1$ では近藤ブロックのみで形成され, $n_c = 1/2$ では図 3.26 に示す黒線から分かるように RKKY ブロックのみで形成されている. 図 3.28 からわかるように, $n_c = 2/3$ では RKKY ブロックと近藤ブロックが 1 : 1 の比で形成されている. この伝導電子密度では, $2k_F$ の周期と整合する 1 : 1 構造をとることで安定相を形成するとともに第二強磁性相の自発磁化を発現させている. $n_c = 3/4$ の charge gap がある領域でも同様に考えることができる. $n_c = 3/4$ から伝導電子は 4 サイトに 3 個の割合となるが, 伝導電子が奇数のユニットは, ユニットの境界においてホッピングによる利得が小さくなる. 例えば, $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$ となり, 3 サイト目と 4 サイト目においてパ

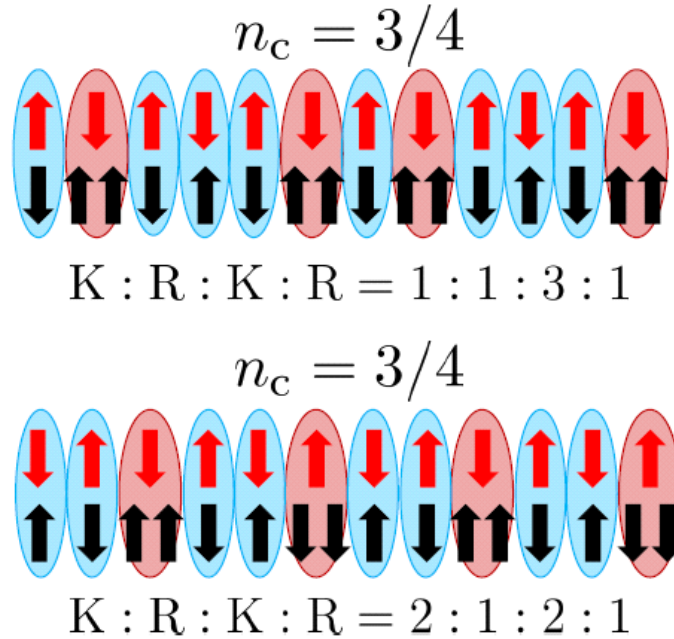


図 3.29 $n_c = 3/4$ における近藤ブロックと RKKY ブロックの模式図. 青丸は局在スピン 1 つと伝導電子 1 つによる近藤ブロック, 赤丸は局在スピン 2 つと伝導電子 1 つによる RKKY ブロック. $n_c = 3/4$ では近藤ブロック (K) と RKKY ブロック (R) の比は $1 : 1 : 3 : 1$ と $2 : 1 : 2 : 1$ の 2 通りである.

ウリ原理によるホッピングの損が生じる. したがって $J \simeq t$ の領域では伝導電子が 1 個以外の奇数のユニットは存在せず, 8 サイトに 6 個を最小単位とするべきである. このとき, 8 サイトの中には RKKY ブロックが 2 個近藤ブロックが 4 個含まれる. 電子密度を均一にして運動エネルギーを下げるために RKKY ブロックを隣り合わせないようにならべると, $x(K) : 1(R) : y(K) : 1(R)$ の組み合わせが考えられる. ここで RKKY ブロックを (R), 近藤ブロックを (K) と表記した. 足して 4 になる整数は, $(x, y) = (2, 2), (1, 3)$ である. したがって $2 : 1 : 2 : 1$ と, $1 : 1 : 3 : 1$ が該当し, その配置の仕方は図 3.29 に示している通りである. $2 : 1 : 2 : 1$ は charge gap がある磁化が 0 の状態であり, $1 : 1 : 3 : 1$ が $(1 - 3/4)/2$ に対応する plateau の磁化分布に対応している. この 2 通りの配置の仕方は, 図 3.30 から $2 : 1 : 2 : 1$ と $1 : 1 : 3 : 1$ の対応が理解できる. このように考えると, $n_c = 3/4$ では RKKY ブロックと近藤ブロックの並べ方が 2 通りあるので, plateau が 2 つになることがわかる. 一方, $n_c = 2/3$ では RKKY ブロックと近藤ブロックは $1 : 1$ の 1 通りしかないため plateau は 1 つしか出てこない. したがって, この周期構造が安定相に関係していると考えると, 得られた結果を自然に理解できる. $n_c = 5/7$ について考えてみる. 伝導電子は偶数のユニットであるから $10/14$ である. RKKY ブロックと近藤ブロックの数は伝導電子密度から決まり, RKKY ブロックが 4 つ近藤ブロックが 6 つである. RKKY ブロッ

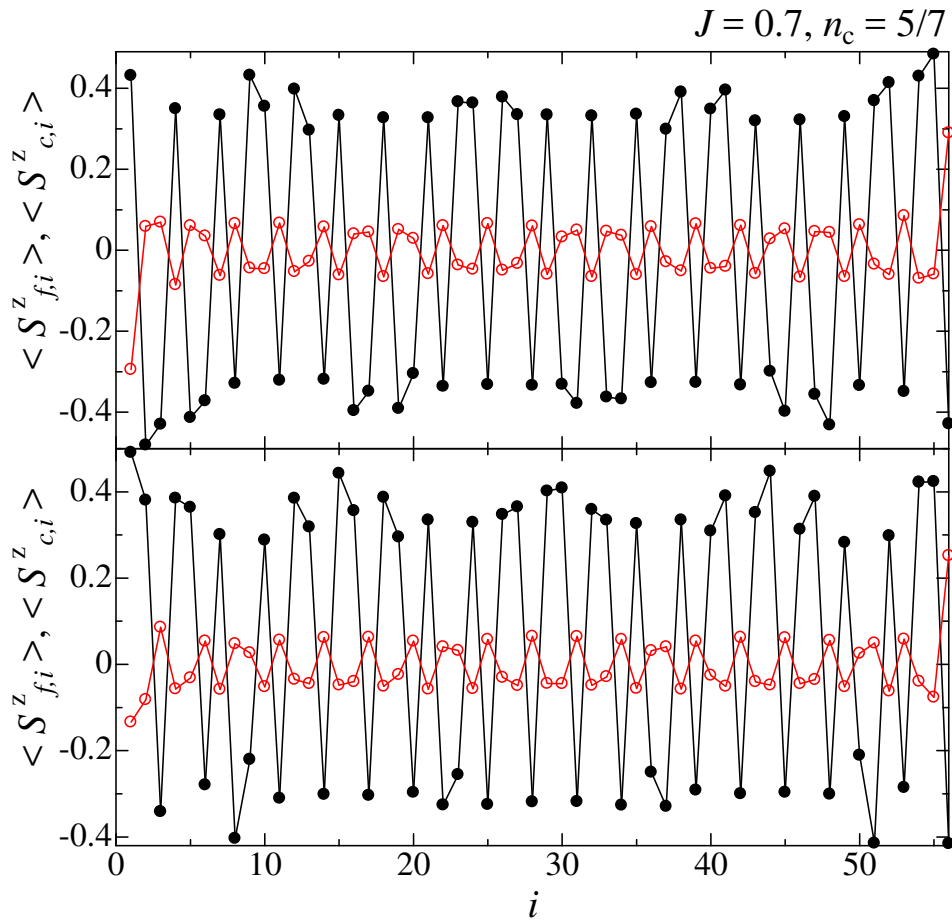


図 3.31 $n_c = 5/7$ における局在スピンの磁化分布

合わせをみると, $1(K) : 1(R)$ は $n_c = 2/3$ の安定構造であり, $2(K) : 1(R) : 2(K) : 1(R)$ は $n_c = 3/4$ の安定構造である. $n_c = 2/3$ と $n_c = 3/4$ の間の伝導電子密度ではこの 2 つの安定構造の混合比が調整されることで plateau が実現していると言える. $n_c = 1/2$ と $n_c = 2/3$ の間の伝導電子密度においても同様に考えることで, 磁化 plateau の構造を理解することができ, 2 つの伝導電子密度の安定構造が混合することにより plateau が実現していると考えられる.

本研究によって得られた結果をすべてまとめ, 一次元近藤格子模型の基底状態の相図と $n_c = 2/3$ における磁気相図を以下に示す. 図 3.32 は先行研究 [10] の一次元近藤格子模型の相図である. 本研究において新たに分かった点を追加した図である. 緑色の三角の点が $n_c = 2/3$ の第二強磁性相の始点であり charge gap が存在する点である. $n_c = 3/4$ における黒の点線が charge gap の存在するラインである. その他の黒点や赤い線は先行研究 [10] のプロット点である. 図 3.33 は $n_c = 2/3$ における磁気相図である. 下側の黒線と上

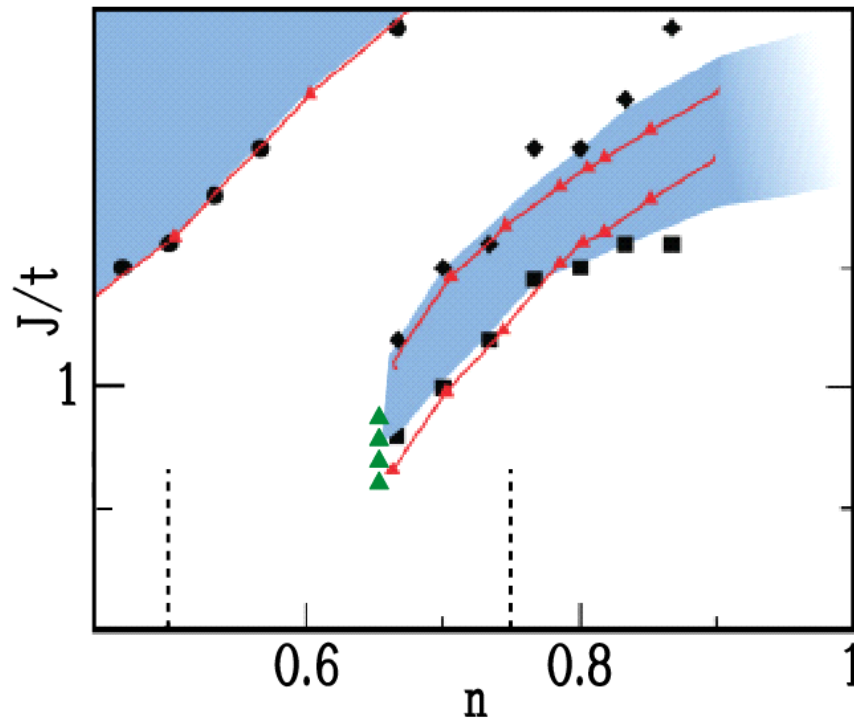


図 3.32 新たに分かったことを書き加えた一次元近藤格子模型の相図. 緑色の三角の点と $n_c = 3/4$ における charge gap を新たに書き加えた. 他の点は先行研究 [10] に依っている.

側の黒線の間領域が plateau 状態である. 下側の黒線よりも下の領域は plateau 状態になる前であり, 常磁性金属相である. $J \leq 0.55$ では RKKY 相互作用によるスパイラル状態が発達している. $0.9 \leq J \leq 2.6$ では大きい fermi 面に対応する常磁性金属相である. 上側の黒線は plateau 状態が壊れるラインである. この線よりも上では charge gap は存在せず常磁性になっている. 赤く塗られている領域では, charge gap が存在し, 黄色に塗られている領域では charge gap は存在しない. どちらも f スピンの磁化の値は飽和磁化の $1/3$ で同じである. この charge gap は RKKY 相互作用と近藤効果の共存によって安定化している. 図 3.34 は図 3.33 の plateau 状態における局在スピンの相関をとった図である. $n_c = 2/3$ は図 3.6 から 3 サイト周期になっている. したがって, スピンの相関は $(1/3) \langle S_{f,L/2-1}^z S_{f,L/2}^z + S_{f,L/2}^z S_{f,L/2+1}^z + S_{f,L/2+1}^z S_{f,L/2+2}^z \rangle$ から 3 サイトの平均を求めた. L はサイズの大きさであり, 60 サイトの結果である. 点線から左側の領域では charge gap が存在し, 右側では charge gap は存在していない. この点線の左右の点は直線で連続的につながっているため, この転移は 2 次転移であると言える.

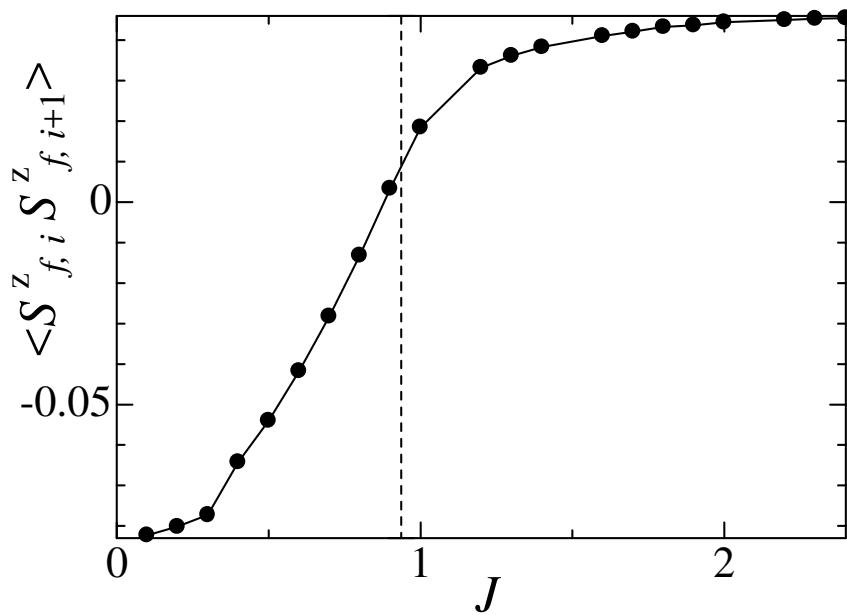


図 3.34 $n_c = 2/3$ において磁場をかけ plateau 状態のときの相関関数の J 依存性

第 4 章

まとめ

本研究では, 重い電子系の磁氣的性質を理解するためにその理論模型である近藤格子模型の磁氣的性質を磁化過程を計算することで解析した. 解析に用いた計算手法は DMRG に SSD を適用したもので, 一次元近藤格子模型の常磁性金属相における $J \leq 1$ の磁化過程の解析はこの手法によって可能になった.

本研究ではまず修士論文で明らかにしていた多段 plateau の存在について, その起源と特徴を明らかにするための計算を行った. それらの plateau は $n_c = 1/2, 3/4$ の charge gap がある状態から出現し $n_c = 2/3$ において一つに融合するという占有率依存性があることを示した. $n_c = 1/2$ から $n_c = 2/3$ の間の伝導電子密度と $n_c = 2/3$ から $n_c = 3/4$ の間の伝導電子密度では下段の plateau の磁化は異なる n_c 依存性で変化する. $n_c = 1/2$ から $n_c = 2/3$ の間の伝導電子密度では伝導電子 1 つの注入や除去によって 1 つ分の局在スピンの向きを変えることにより磁化が変化している. 一方, $n_c = 2/3$ から $n_c = 3/4$ の間の伝導電子密度では伝導電子 1 つの注入や除去によって局在スピン 2 つが向きを変えることにより磁化が変化している. 2 段の plateau が融合する $n_c = 2/3$ においてはゼロ磁場において強磁性が出現している部分で charge gap が存在していることを明らかにし, この強磁性は $n_c = 3/4$ の上段の plateau 状態に繋がる第二強磁性金属相の始点になっていることを示した. $n_c = 2/3$ では $J = 0.6 \sim 0.9$ において $R : K = 1 : 1$ の強磁性が出現し, ここから J/t を小さくしていくと近藤効果は弱くなり, $1 : 1$ 構造の安定性は低下し, 常磁性の金属状態に転移する. しかし, この常磁性領域では磁場をかけると $1 : 1$ 構造の安定性が回復し, 磁化 plateau 状態が形成されるとともに電荷ギャップが開く. しかし, さらに磁場を加えると, 今度は $1 : 1$ 構造を安定化させる近藤効果が磁場によって弱められ, 結果的に plateau が壊れ, 電荷ギャップは再び閉じて金属状態に戻る. したがって, J が小さい領域では金属 \rightarrow 絶縁体 \rightarrow 金属という磁場により誘起される金属絶縁体転移が生じる.

以上のような伝導電子の変化に対する plateau の磁化の変化や第二強磁性相, 磁場誘起金属絶縁体転移は近藤効果と RKKY 相互作用が共存していることが重要であると言える.

例えば, $n_c = 2/3$ から $n_c = 3/4$ の間の伝導電子密度では下段の plateau の磁化は伝導電子1つの変化に対して局在スピン2つが変化するが, これは伝導電子1つと局在スピン2つがユニットを作っているために生じる変化であると言える. その起源となるのが, 近藤効果によって局在スピンを遮蔽する1サイト, これを近藤ブロックと呼ぶことにする. もう一つ, RKKY 相互作用によって局在スピンを揃える2サイト, これを RKKY ブロックと呼ぶことにする. これらの2種類のブロックが存在していることが安定化の起源である. J が強すぎず弱すぎず, 近藤効果と RKKY 相互作用に起因する近藤ブロックと RKKY ブロック, どちらにとってもちょうどよい値になる領域においてこのような構造が安定になっていると考えられる. この伝導電子密度領域での上段の plateau は第二強磁性金属相の構造と接続するもので, $n_c = 2/3$ の plateau と $n_c = 3/4$ の上段の plateau を繋ぐ構造として得られる. したがって, 第二強磁性金属相においても2種類のユニットの存在が自発磁化の出現に寄与していると考えられることができる.

以上の通り, 一次元ではあるが, 近藤効果と RKKY 相互作用の双方が存在に起因する電荷とスピンの結合による磁氣的安定相の存在を明らかにし, f 電子系の常磁性金属相領域における新しい量子多体効果である磁場誘起の金属絶縁体転移および電子占有率によって系統的に変化する新しい磁化 plateau の存在を明らかにした.

付録 A

DMRG のコーディングについて

DMRG のコーディングの考え方について記述する. 数値計算手法の高速化は常に考えられているものであるから, 実際にはこの考え方を理解した上で, より高速になるような工夫を施している. ここでは, 例として heisenberg model について記述する. 文献 [47][48] を参考にした.

A.1 Heisenberg model

A.1.1 Infinite system method

Heisenberg model の Hamiltonian は

$$\mathcal{H} = J \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} \quad (\text{A.1.1})$$

である. parameter がひとつしかないので, DMRG を初めてコーディングするには適した系である.

Initial state

まずは, 交換相互作用の強さ J を決める. この model は電子が動かないスピン系であるので, 1 サイトあたりにとりうる状態数は 2 である. 今, up(down) の電子を \uparrow (\downarrow) と表記すれば, 1 サイトの状態は

$$|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$$

と表せる. DMRG において, 初期状態は全て生身のサイトであるので, system block, single site, environment block の各々をこの基底によって定義することができる. これらの S_z^{total} の値を保存しておく (初期状態であるので, 1 と -1). 初期状態の準備はまだ終わ

りではなく, system block , environment block の Hamiltonian とブロックの端と single site とのスピンの演算子を作成する.

$$H = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_l^+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, S_l^z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

environment block の Hamiltonian は system block を反転したものを使う. また, S_1^- は S_1^+ の転置行列になっているので, わざわざ作る必要はない. メモリをなるべく使わないように工夫する. したがって, S_z は S_z^{total} が保存する空間に値を持つので, S_z^{total} の保存していない空間を保存する必要はない.

Super block base

次に, Super block の基底を作る.

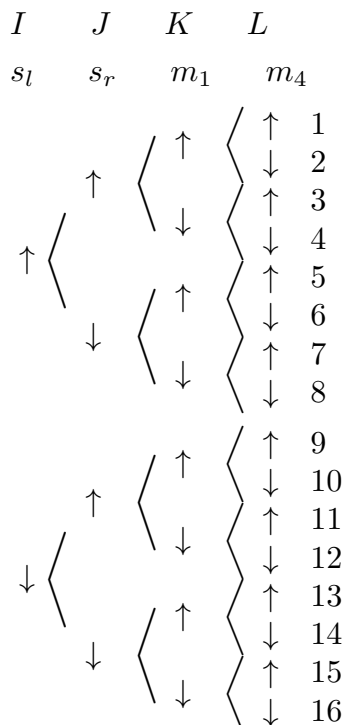
$$\begin{aligned} & \text{systemblock} \cdots m_1 \\ & \text{singlesite} \cdots s_l, s_r \\ & \text{environmentblock} \cdots m_4 \end{aligned}$$

として, Super block の基底は

$$N = 2(I - 1)m_1m_4 + (J - 1)m_1m_4 + L + (K - 1)m_4$$

というようにラベルする. ここで, I, J は 1 から 2 までのループであり, m_1, m_4 は各ブロックの基底の数だけのループになる. なぜ, このような順序にしたかというと, 下の場合分けをみたときに single site は自由度が増えたり減ったりはせずに, 2 通りで左右を合わせて Heisenberg model では 4 通りまでにしかならない. 一方, system block と environment block は繰り返されることで cut off される基底の数程度まで増加するので,

場合分けの表記では右側にもっていくことでうまく表せる.



Heisenberg model のときにはこの全基底から, $S_z^{\text{total}} = 0$ の部分空間を取りだしてくる. また, この全基底から, 取りだされた部分空間を張る基底は各 block の基底の何番目に相当するのか調べるための方法は, 非常に簡単であり

$$\begin{aligned}
 L &= \text{mod}(N, m_4) \\
 K &= \text{mod}(1 + (N - L)/m_4, m_1) \\
 I' &= N - L - (K - 1)m_4/(m_1 m_4) \\
 J &= \text{mod}(I, 2) \\
 I &= (I' - J)/2
 \end{aligned}$$

ここでの mod は $\text{mod}(x, y)$ としたとき x を y で割って余りを吐き出す fortran で用いる関数である. 割り切れた場合, この関数は 0 を吐き出すので注意が必要である.

Super block Hamiltonian

DMRG では最初は 4 site の Super block であるので, Hamiltonian は

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H} &= J \sum_i^3 \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} \\
 &= J (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3 + \mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_4)
 \end{aligned} \tag{A.1.2}$$

system block と environment block の Hamiltonian は 1 site であるので全要素 0 である. また, $\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_4$ はブロック端の演算子を用いて, $\mathbf{S}_2, \mathbf{S}_3$ は生身の演算子を用いる. 前節で,

Super block の基底が各 block の基底の何番目に対応しているのか、調べる方法も記述しているなのでこれで容易に Super block の Hamiltonian を作ることができる。Super block の基底を

$$|\phi\rangle = |M_1\rangle |S_l\rangle |S_r\rangle |M_4\rangle \quad (\text{A.1.3})$$

としたときに、

$$\begin{aligned} \langle\phi'|\mathcal{H}|\phi\rangle &= \langle M'_1|\mathbf{S}_1|M_1\rangle \langle S'_l|\mathbf{S}_2|S_l\rangle \delta_{S'_r,S_r} \delta_{M'_4,M_4} \\ &+ \langle S'_l|\mathbf{S}_2|S_l\rangle \langle S'_r|\mathbf{S}_3|S_r\rangle \delta_{M'_1,M_1} \delta_{M'_4,M_4} \\ &+ \langle S'_r|\mathbf{S}_3|S_r\rangle \langle M'_4|\mathbf{S}_4|M_4\rangle \delta_{S'_l,S_l} \delta_{M'_1,M_1} \end{aligned} \quad (\text{A.1.4})$$

また、6 site 以降は Super block の Hamiltonian の中に

$$\begin{aligned} &\langle M'_1|H_{\text{system}}|M'_1\rangle \delta_{S'_l,S_l} \delta_{S'_r,S_r} \delta_{M'_4,M_4} \\ &+ \langle M'_4|H_{\text{environment}}|M'_4\rangle \delta_{S'_l,S_l} \delta_{S'_r,S_r} \delta_{M'_1,M_1} \end{aligned} \quad (\text{A.1.5})$$

という要素もあるということに注意する。Super block の行列が完成したら対角化を行う。対角化に関しては、以下の本を挙げておく [44][45][46]。また、LAPACK や Math Kernel Library (MKL) といったライブラリもあるのでそちらを使った方がよい。

Density Matrix

Super block の半分から左 (system block と single site left) の密度行列を作ること考える。Super block の基底のラベルから、各 block の基底の何番目か調べることができる。密度行列の基底は $2m_1$ だけあるので、それらをすべて新しく保存する。その後、縮約をとる (system block と single site left の基底の番号を見たときに同じ組み合わせの番号の組みを捨て、全ての番号の組みが 1 種類しかないようにする)。それを密度行列の基底として定義する。同様に、environment block と single site right についても縮約を取る。続いて、次のループである 6 site で使う 2 site の system block の基底を定義しておく。密度行列の基底の single site の S_z の値を system block の S_z に足したものを新しく 2 site の system block の基底として保存しておく。このとき、後にブロック対角化をしやすくするために 2site の S_z^{total} で基底をソートしておく。Heisenberg model では S_z だが、近藤格子模型では S_z と n_c である。この基底を使って、このあとに 2 site の system block の Hamiltonian と ブロックの端と single site のスピン演算子を定義する。4 site の場合は

$S_z^{\text{total}} = 0$ の基底は 6 基底しかないので具体的に書き下すと

$$\begin{aligned} &1 |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle \\ &2 |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle \\ &3 |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle \\ &4 |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle \\ &5 |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle \\ &6 |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle \end{aligned}$$

このときの左側 2 site 密度行列の基底は

$$\begin{aligned} &1 |\uparrow\uparrow\rangle \\ &2 |\uparrow\downarrow\rangle \\ &3 |\downarrow\uparrow\rangle \\ &4 |\downarrow\downarrow\rangle \end{aligned}$$

である. 右側 2 site に関しても同様の操作を行い, 縮約を取られた右側の基底の数だけラベルする. DMRG の Infinite Method では single site を挟んだ左右の block は対称であるので, 左側の密度行列の基底と右側の縮約の基底を同じラベルにする. そのとき Super block の基底 ϕ は $\psi(i, j)$ を使って

$$\begin{aligned} &1 |\downarrow\uparrow\rangle |\downarrow\uparrow\rangle = \psi(3, 3) \\ &2 |\downarrow\uparrow\rangle |\uparrow\downarrow\rangle = \psi(3, 2) \\ &3 |\uparrow\uparrow\rangle |\downarrow\downarrow\rangle = \psi(1, 4) \\ &4 |\downarrow\downarrow\rangle |\uparrow\uparrow\rangle = \psi(4, 1) \\ &5 |\uparrow\downarrow\rangle |\downarrow\uparrow\rangle = \psi(2, 3) \\ &6 |\uparrow\downarrow\rangle |\uparrow\downarrow\rangle = \psi(2, 2) \end{aligned}$$

と表すことができる. ここで, environment block と single site right は system block と single site left の反転を使っているのでラベルと比較しやすくするため入れ替えた. $\psi_{i,j}$ 具体的な行列要素は

$$\psi_{i,j} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \phi_3 \\ 0 & \phi_6 & \phi_5 & 0 \\ 0 & \phi_2 & \phi_1 & 0 \\ \phi_4 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.1.6})$$

となる. 密度行列は以下によって求められる.

$$\rho_{i,i'} = \sum_{j,j'} \psi_{i,j} \psi_{i',j'} \quad (\text{A.1.7})$$

密度行列は保存量 (Heisenberg model の場合は S_z^{total}) によってブロック対角化されていて, 各ブロックの対角化を行う.

Cutoff

DMRG において, 密度行列の固有値 ω_i は確率となっている.

$$\mathcal{P} = \sum_{i=1}^{2m_1} \omega_i = 1 \quad (\text{A.1.8})$$

つまり, 今考えている系では固有値の大きい固有状態が実現されている割合が高いということである. 逆に, 固有値の小さい固有状態はほとんど実現されていないと考えてよいので, ある一定の数字よりも低い固有値の状態は落とすことができる. どの程度の数字で落とすのか, 基底はいくら残すのかというのは先行研究の論文等を参考にするとよい. 必要な基底を落とすほど多くの基底を落とすと, エネルギーの外挿や, 相関関数にゆがみがでてくるので, そうならない程度の基底を残すのがよい.

Unitary transformation

密度行列を対角化したときに得られる固有ベクトルを用いて, ユニタリ変換を行う. 固有ベクトルを $|\varphi\rangle$, system block を記述する新しい基底を $|u\rangle$ として

$$\begin{aligned} |u\rangle &= \sum \langle \varphi' | H_{\text{system}} | \varphi \rangle \\ &= \sum \langle M'_1 | H_{\text{system}} | M_1 \rangle \delta_{S'_l, S_l} \delta_{S'_r, S_r} \delta_{M'_4, M_4} \end{aligned} \quad (\text{A.1.9})$$

とユニタリ変換を行う. 同様に他の演算子についてもユニタリ変換を行う. 線形結合された基底によってユニタリ変換された H_{system} とブロックの端と single site とのスピン演算子を用いて次の 6 site を同様にループして, 8 site それ以降と Infinite Method を行っていく.

A.1.2 Finite system method

Infinite system method をある必要な系の大きさ L まで拡張したのちに Finite system method を行う. system block の大きさが $L/2+1$ とすると environment block の大きさは $L/2 - 3$ となる. これは Infinite system method のときに拡張していった system block をあらかじめ保存しておいてそれを用いて使う (運動量空間で計算する場合や, 系の反転対称性を用いない場合は environment block を system block とは別に保存しておいて使う). Finite system method では infinite system method において用いた関数を使うことで計算を行うことができるので, ここでの説明は省略する.

A.2 fermion sign について

DMRG に関してコーディングの簡単な説明は前述したとおりである. ここでは, DMRG を電子系に適用した場合に重要になる fermion sign について説明する. 厳密対角化では, 各サイトの電子は, $0, \uparrow, \downarrow, \uparrow\downarrow$ の 4 つの状態にわけることができるので, fermion sign を考慮することは容易である. しかし, DMRG では, 基底が繰り込まれて前述の 4 状態で表すことができない. たとえば,

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (C_{1\uparrow}^\dagger C_{2\downarrow}^\dagger - C_{1\downarrow}^\dagger C_{2\uparrow}^\dagger) |0\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.2.10})$$

という 1 サイトと 2 サイト間にシングレットが形成されている状態を考えたときに,

$$C_{3\uparrow}^\dagger C_{2\uparrow} \quad (\text{A.2.11})$$

という 2 サイト目のアップスピンを消滅させて, 3 サイト目に生成する演算子を作用させる. このようなとき, fermion sign をどのように入れたらいいのか, 決めることができない. DMRG では, 電子の配置の仕方を決めて電子の数を数えることによって, fermion sign を考慮する. system block を B_1 , environment block B_4 , single site B_2, B_3 とすると基底の並び方を

$$|\alpha\rangle = |B_2^\alpha\rangle |B_1^\alpha\rangle |B_3^\alpha\rangle |B_4^\alpha\rangle \quad (\text{A.2.12})$$

と定義する. これは single site と system block 間, single site と environment block 間の fermion sign を等しく定義できるためにこの並び方を選んだ. 左から 1,2,3,4 という並び方で定義しても fermion sign は定義できる. system block B_1 の大きさを l として, singlet site と system block 間のホッピングに関してである. system block から single site へ電子が飛び移る過程は

$$\begin{aligned} & \langle\alpha| \mathcal{H} |\beta\rangle \\ &= \langle B_4^\alpha | \langle B_3^\alpha | \langle B_1^\alpha | \langle B_2^\alpha | C_{l\sigma}^\dagger C_{l+1\sigma} | B_2^\beta \rangle | B_1^\beta \rangle | B_3^\beta \rangle | B_4^\beta \rangle \\ &= \langle B_4^\alpha | \langle B_3^\alpha | \langle B_1^\alpha | C_{l\sigma}^\dagger \langle B_2^\alpha | C_{l+1\sigma} | B_2^\beta \rangle | B_1^\beta \rangle | B_3^\beta \rangle | B_4^\beta \rangle (-1)^{N(|B_2^\alpha\rangle)} \\ &= \langle B_4^\alpha | \langle B_3^\alpha | \langle B_2^\alpha | C_{l+1\sigma} | B_2^\beta \rangle \langle B_1^\alpha | C_{l\sigma}^\dagger | B_1^\beta \rangle | B_3^\beta \rangle | B_4^\beta \rangle (-1)^{N(|B_2^\alpha\rangle)} \\ &= (-1)^{N(|B_2^\alpha\rangle)} \langle B_2^\alpha | C_{l+1\sigma} | B_2^\beta \rangle \langle B_1^\alpha | C_{l\sigma}^\dagger | B_1^\beta \rangle \delta_{B_3^\alpha, B_3^\beta} \delta_{B_4^\alpha, B_4^\beta} \end{aligned} \quad (\text{A.2.13})$$

と書くことができる. single site から system block へ電子が飛び移る過程は

$$\begin{aligned}
& \langle \alpha | \mathcal{H} | \beta \rangle \\
&= \langle B_4^\alpha | \langle B_3^\alpha | \langle B_1^\alpha | \langle B_2^\alpha | C_{l+1\sigma}^\dagger C_{l\sigma} | B_2^\beta \rangle | B_1^\beta \rangle | B_3^\beta \rangle | B_4^\beta \rangle \\
&= \langle B_4^\alpha | \langle B_3^\alpha | \langle B_1^\alpha | \langle B_2^\alpha | C_{l\sigma} C_{l+1\sigma}^\dagger | B_2^\beta \rangle | B_1^\beta \rangle | B_3^\beta \rangle | B_4^\beta \rangle (-1) \\
&= \langle B_4^\alpha | \langle B_3^\alpha | \langle B_1^\alpha | C_{l\sigma} \langle B_2^\alpha | C_{l+1\sigma}^\dagger | B_2^\beta \rangle | B_1^\beta \rangle | B_3^\beta \rangle | B_4^\beta \rangle (-1)^{N(|B_2^\alpha\rangle)+1} \\
&= \langle B_4^\alpha | \langle B_3^\alpha | \langle B_2^\alpha | C_{l+1\sigma}^\dagger | B_2^\beta \rangle \langle B_1^\alpha | C_{l\sigma} | B_1^\beta \rangle | B_3^\beta \rangle | B_4^\beta \rangle (-1)^{N(|B_2^\alpha\rangle)+1} \\
&= (-1)^{N(|B_2^\alpha\rangle)+1} \langle B_2^\alpha | C_{l+1\sigma}^\dagger | B_2^\beta \rangle \langle B_1^\alpha | C_{l\sigma} | B_1^\beta \rangle \delta_{B_3^\alpha, B_3^\beta} \delta_{B_4^\alpha, B_4^\beta} \quad (\text{A.2.14})
\end{aligned}$$

と書くことができる. 次に single site 間のホッピングに関してである. system block 側の single site から environment block 側の single site へ電子が飛び移る過程は

$$\begin{aligned}
& \langle \alpha | \mathcal{H} | \beta \rangle \\
&= \langle B_4^\alpha | \langle B_3^\alpha | \langle B_1^\alpha | \langle B_2^\alpha | C_{l+1\sigma}^\dagger C_{l+2\sigma} | B_2^\beta \rangle | B_1^\beta \rangle | B_3^\beta \rangle | B_4^\beta \rangle \\
&= \langle B_4^\alpha | \langle B_3^\alpha | \langle B_1^\alpha | C_{l+2\sigma} (-1)^{N(|B_2^\alpha\rangle)+1} \langle B_2^\alpha | C_{l+1\sigma}^\dagger | B_2^\beta \rangle | B_1^\beta \rangle | B_3^\beta \rangle | B_4^\beta \rangle \\
&= \langle B_4^\alpha | \langle B_3^\alpha | \delta_{B_1^\alpha, B_1^\beta} C_{l+2\sigma} (-1)^{N(|B_2^\alpha\rangle)+1+N(|B_1^\beta\rangle)} \langle B_2^\alpha | C_{l+1\sigma}^\dagger | B_2^\beta \rangle | B_3^\beta \rangle | B_4^\beta \rangle \\
&= \langle B_4^\alpha | \delta_{B_1^\alpha, B_1^\beta} (-1)^{N(|B_2^\alpha\rangle)+1+N(|B_1^\beta\rangle)} \langle B_2^\alpha | C_{l+1\sigma}^\dagger | B_2^\beta \rangle \langle B_3^\alpha | C_{l+2\sigma} | B_3^\beta \rangle | B_4^\beta \rangle \\
&= (-1)^{N(|B_2^\alpha\rangle)+1+N(|B_1^\beta\rangle)} \langle B_2^\alpha | C_{l+1\sigma}^\dagger | B_2^\beta \rangle \langle B_3^\alpha | C_{l+2\sigma} | B_3^\beta \rangle \delta_{B_1^\alpha, B_1^\beta} \delta_{B_4^\alpha, B_4^\beta} \quad (\text{A.2.15})
\end{aligned}$$

である. environment block 側の single site から system block 側の single site へ電子が飛び移る過程は

$$\begin{aligned}
& \langle \alpha | \mathcal{H} | \beta \rangle \\
&= \langle B_4^\alpha | \langle B_3^\alpha | \langle B_1^\alpha | \langle B_2^\alpha | C_{l+2\sigma}^\dagger C_{l+1\sigma} | B_2^\beta \rangle | B_1^\beta \rangle | B_3^\beta \rangle | B_4^\beta \rangle \\
&= \langle B_4^\alpha | \langle B_3^\alpha | \langle B_1^\alpha | C_{l+2\sigma}^\dagger (-1)^{N(|B_2^\alpha\rangle)} \langle B_2^\alpha | C_{l+1\sigma} | B_2^\beta \rangle | B_1^\beta \rangle | B_3^\beta \rangle | B_4^\beta \rangle \\
&= \langle B_4^\alpha | \langle B_3^\alpha | \delta_{B_1^\alpha, B_1^\beta} C_{l+2\sigma}^\dagger (-1)^{N(|B_2^\alpha\rangle)+N(|B_1^\beta\rangle)} \langle B_2^\alpha | C_{l+1\sigma} | B_2^\beta \rangle | B_3^\beta \rangle | B_4^\beta \rangle \\
&= \langle B_4^\alpha | \delta_{B_1^\alpha, B_1^\beta} (-1)^{N(|B_2^\alpha\rangle)+N(|B_1^\beta\rangle)} \langle B_2^\alpha | C_{l+1\sigma} | B_2^\beta \rangle \langle B_3^\alpha | C_{l+2\sigma}^\dagger | B_3^\beta \rangle | B_4^\beta \rangle \\
&= (-1)^{N(|B_2^\alpha\rangle)+N(|B_1^\beta\rangle)} \langle B_2^\alpha | C_{l+1\sigma} | B_2^\beta \rangle \langle B_3^\alpha | C_{l+2\sigma}^\dagger | B_3^\beta \rangle \delta_{B_1^\alpha, B_1^\beta} \delta_{B_4^\alpha, B_4^\beta} \quad (\text{A.2.16})
\end{aligned}$$

と書き下せる. そして, single site と environment block 間のホッピングも同様に, environment block から single site への電子の飛び移る過程と single site から environment

block への電子の飛び移る過程を記述すると,

$$\begin{aligned}
& \langle \alpha | \mathcal{H} | \beta \rangle \\
&= \langle B_4^\alpha | \langle B_3^\alpha | \langle B_1^\alpha | \langle B_2^\alpha | C_{l+2\sigma}^\dagger C_{l+3\sigma} | B_2^\beta \rangle | B_1^\beta \rangle | B_3^\beta \rangle | B_4^\beta \rangle \\
&= \langle B_4^\alpha | \langle B_3^\alpha | \delta_{B_1^\alpha, B_1^\beta} \delta_{B_2^\alpha, B_2^\beta} (-1) C_{l+3\sigma} C_{l+2\sigma}^\dagger | B_3^\beta \rangle | B_4^\beta \rangle \\
&= \langle B_4^\alpha | \delta_{B_1^\alpha, B_1^\beta} \delta_{B_2^\alpha, B_2^\beta} (-1)^{N(|B_3^\alpha\rangle)+1} C_{l+3\sigma} \langle B_3^\alpha | C_{l+2\sigma}^\dagger | B_3^\beta \rangle | B_4^\beta \rangle \\
&= (-1)^{N(|B_3^\alpha\rangle)+1} \delta_{B_1^\alpha, B_1^\beta} \delta_{B_2^\alpha, B_2^\beta} \langle B_4^\alpha | C_{l+3\sigma} | B_4^\beta \rangle \langle B_3^\alpha | C_{l+2\sigma}^\dagger | B_3^\beta \rangle
\end{aligned} \tag{A.2.17}$$

$$\begin{aligned}
& \langle \alpha | \mathcal{H} | \beta \rangle \\
&= \langle B_4^\alpha | \langle B_3^\alpha | \langle B_1^\alpha | \langle B_2^\alpha | C_{l+3\sigma}^\dagger C_{l+2\sigma} | B_2^\beta \rangle | B_1^\beta \rangle | B_3^\beta \rangle | B_4^\beta \rangle \\
&= \langle B_4^\alpha | \delta_{B_1^\alpha, B_1^\beta} \delta_{B_2^\alpha, B_2^\beta} (-1)^{N(|B_3^\alpha\rangle)} C_{l+3\sigma}^\dagger \langle B_3^\alpha | C_{l+2\sigma} | B_3^\beta \rangle | B_4^\beta \rangle \\
&= (-1)^{N(|B_3^\alpha\rangle)} \delta_{B_1^\alpha, B_1^\beta} \delta_{B_2^\alpha, B_2^\beta} \langle B_4^\alpha | C_{l+3\sigma}^\dagger | B_4^\beta \rangle \langle B_3^\alpha | C_{l+2\sigma} | B_3^\beta \rangle
\end{aligned} \tag{A.2.18}$$

である. 以上のように fermion sign を考慮する. まずは電子がどちら側に飛ぶのかにより -1 だけの違いがある. そして, 通り過ぎる基底に電子がいくつあるかわかればよいのである. その電子の数を数えて, 奇数であれば -1 がかかり偶数であれば 1 がかかる. サイト間の飛び移りのときに考慮する fermion sign は以上である. 次にサイト内において考慮する fermion sign について記述する. 例として Hubbard model について考える. この模型において, 1 サイトが取りうる状態は $0, \uparrow, \downarrow, \uparrow\downarrow$ の 4 つである. 1 サイトの電子の生成 (消滅) 演算子を定義することを考える. すべての組み合わせを書き下すと

- a) $0 \iff \uparrow$
- b) $0 \iff \downarrow$
- c) $\uparrow \iff \downarrow\uparrow$
- d) $\downarrow \iff \downarrow\uparrow$

である. a), b) では fermion sign を考慮する必要はない. c), d) は fermion sign を考慮する必要がある. 今, 重要なのは電子の並べ方を定義することである. ここでは電子の並べ方を \downarrow を左側に持ってくることを定義する. 書き下すと, $C_{i,\downarrow}^\dagger C_{i,\uparrow}^\dagger |0\rangle = |\downarrow, \uparrow\rangle$ である. c) は

$$\langle \uparrow\downarrow | C_\downarrow^\dagger | \uparrow \rangle = \langle 0 | C_\uparrow C_\downarrow C_\downarrow^\dagger C_\uparrow^\dagger | 0 \rangle$$

から -1 はかからない. 一方 d) は,

$$\begin{aligned}
\langle \uparrow\downarrow | C_\uparrow^\dagger | \downarrow \rangle &= \langle 0 | C_\uparrow C_\downarrow C_\uparrow^\dagger C_\downarrow^\dagger | 0 \rangle \\
&= \langle 0 | C_\uparrow C_\downarrow C_\downarrow^\dagger C_\uparrow^\dagger | 0 \rangle (-1)
\end{aligned}$$

となり, -1 の因子がつく. $|\downarrow\uparrow\rangle$ という配置にした場合は, 2 重占有の基底と電子が 1 つ入っている基底の電子の飛び移りにおいてアップスピンの動く場合に -1 の因子がつく. この fermion sign は定義を変えれば, 変わってくるので他の並べ方を定義する場合は同様に fermion sign を 1 つ 1 つ調べなければならない. サイト内において考慮する fermion sign は system block, single site, environment block すべてのブロックで同じ定義にし考慮する. このサイト内の fermion sign は繰り込むときにハミルトニアンに入れて繰り込むようにする.

A.3 Kondo lattice model

Kondo Lattice model の Hamiltonian は

$$\mathcal{H}_{\text{KLM}} = -t \sum_{i\sigma} \left(c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1\sigma} + \text{H.c.} \right) + J \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s}_i \quad (\text{A.3.19})$$

である. このとき, 各サイトにおける状態は 8 通りある. DMRG において中心の 2 サイトは繰り込まれていない状態数であるので, こちらから与えることができる. 8^2 の組み合わせを取りうるができるが, これらの組み合わせは, 保存する量子数によってわけることができ, 実際には大幅に情報量を減らすことができる. ハミルトニアンを 4 つの部分にわけて書くと,

$$\mathcal{H}_{\text{KLM}} = H_{B_1} + H_{B_2} + H_{B_3} + H_{B_4} \quad (\text{A.3.20})$$

B_1 は system block のハミルトニアン, B_2, B_3 は single site の演算子, B_4 は B_4 は environment block のハミルトニアンである. これらは, 全系の波動関数を同様の書き方で

$$|\psi\rangle = |B_1\rangle |B_2\rangle |B_3\rangle |B_4\rangle \quad (\text{A.3.21})$$

と書いたとき, 行列要素は

$$\begin{aligned} & \langle \psi' | \mathcal{H}_{\text{KLM}} | \psi \rangle \\ &= \langle B'_1 | H_{B_1} | B_1 \rangle \delta_{B'_2, B_2} \delta_{B'_3, B_3} \delta_{B'_4, B_4} \\ &+ \langle B'_2 | H_{B_2} | B_2 \rangle \delta_{B'_1, B_1} \delta_{B'_3, B_3} \delta_{B'_4, B_4} \\ &+ \langle B'_3 | H_{B_3} | B_3 \rangle \delta_{B'_1, B_1} \delta_{B'_2, B_2} \delta_{B'_4, B_4} \\ &+ \langle B'_4 | H_{B_4} | B_4 \rangle \delta_{B'_1, B_1} \delta_{B'_2, B_2} \delta_{B'_3, B_3} \\ &+ \langle B'_1 | H_{B_1} | B_1 \rangle \langle B'_2 | H_{B_2} | B_2 \rangle \delta_{B'_3, B_3} \delta_{B'_4, B_4} \\ &+ \langle B'_2 | H_{B_2} | B_2 \rangle \langle B'_3 | H_{B_3} | B_3 \rangle \delta_{B'_1, B_1} \delta_{B'_4, B_4} \\ &+ \langle B'_3 | H_{B_3} | B_3 \rangle \langle B'_4 | H_{B_4} | B_4 \rangle \delta_{B'_1, B_1} \delta_{B'_2, B_2} \end{aligned} \quad (\text{A.3.22})$$

と分けることができる. 上の 4 つはブロック内の行列要素であり, 下の 3 つはブロック間の行列要素である. このように \mathcal{H}_{KLM} を分ける考え方は近藤格子模型だけではなく, 1 サイトの状態が多い周期アンダーソン模型など他の模型においても役立つ考え方である.

次に保存する量子数でブロック内の基底を分けることを考える. 一次元近藤格子模型において, 保存する量子数は電子密度 n_c とスピン S_z^{total} の値である. しかし, これだけでは分け方としては十分ではない. たとえば, 伝導電子を n_c, s_z^c , 局在スピンの向きを S_z^f とし, 全スピンの合計を S_z^{total} とすると,

$$|n_c, S_z^{\text{total}}\rangle = |1, 0\rangle \quad (\text{A.3.23})$$

の場合,

$$\begin{aligned} |n_c, s_z^c, S_z^f\rangle &= |1, 1, -1\rangle \\ &= |1, -1, 1\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.3.24})$$

となり, 伝導電子のスピン向き, 局在スピンの向きについてまで場合分けを行わない限り, わけることができない. したがって, 伝導電子の電子数密度 n_c と全スピンの合計 S_z^{total} に加えて, 伝導電子の向き, 局在スピンの向きも必要な情報として保存しておく.

今, 中心の 2 サイトについて考える. 前述のとおり, 2 サイトの組み合わせは 64 通りある. 電子密度は 0,1,2,3,4 の 5 ブロックに分けることができる. さらに S_z で分けると,

$$\begin{aligned} n_c = 0, S_z &= 2, 0, -2 \\ n_c = 1, S_z &= 3, 1, -1, -3 \\ n_c = 2, S_z &= 4, 2, 0, -2, -4 \\ n_c = 3, S_z &= 3, 1, -1, -3 \\ n_c = 4, S_z &= 2, 0, -2 \end{aligned}$$

となる. これらをすべて $|n_c, S_z\rangle$ とわけてかくと

$$\begin{aligned} &|0, 2\rangle, |0, 0\rangle, |0, -2\rangle \\ &= |a_1\rangle, |a_2\rangle, |a_3\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.3.25})$$

$$\begin{aligned} &|1, 3\rangle, |1, 1\rangle, |1, -1\rangle, |1, -3\rangle \\ &= |b_1\rangle, |b_2\rangle, |b_3\rangle, |b_4\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.3.26})$$

$$\begin{aligned} &|2, 4\rangle, |2, 2\rangle, |2, 0\rangle, |2, -2\rangle, |2, -4\rangle \\ &= |c_1\rangle, |c_2\rangle, |c_3\rangle, |c_4\rangle, |c_5\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.3.27})$$

$$\begin{aligned} &|3, 3\rangle, |3, 1\rangle, |3, -1\rangle, |3, -3\rangle \\ &= |d_1\rangle, |d_2\rangle, |d_3\rangle, |d_4\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.3.28})$$

$$\begin{aligned} &|4, 2\rangle, |4, 0\rangle, |4, -2\rangle \\ &= |e_1\rangle, |e_2\rangle, |e_3\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.3.29})$$

とする. さらに, 2 サイトの局在スピンの向きを \uparrow, \downarrow の 2 通りでわけ.

$$\begin{aligned} |a_1\rangle &= |n_c, S_z, S_{\text{local}}^l, S_{\text{local}}^r\rangle \\ &= |0, 2, 1, 1\rangle \end{aligned} \tag{A.3.30}$$

$$|a_2\rangle = |0, 0, 1, -1\rangle, |0, 0, -1, 1\rangle \tag{A.3.31}$$

$$|a_3\rangle = |0, -2, -1, -1\rangle \tag{A.3.32}$$

$$|b_1\rangle = |1, 3, 1, 1\rangle \tag{A.3.33}$$

というように書くことができる. これらすべてを書き下すと, 保存する量子数からどのブロックとどのブロックの間で値を持つかがわかる. fermion sign の節において示した通り, 電子は 1 個ずつしか変化しない. 近藤格子模型において, 制約はさらに加わる. 電子間がホッピングできる基底は局在スピンの向きがホッピングの前後で変化していない基底だけである. これを基に, system block, environment block, single site のハミルトニアンとブロック間の演算子の定義を行う. コーディングに関する基本的な考え方と fermion sign については前に書いた通りである. 以上のことを考慮し, Kondo lattice model における DMRG のコーディングを行う.

A.4 相関関数のとりかた

A.4.1 短距離相関関数のとりかた

求められたスーパーブロックの波動関数 $|\psi\rangle = |B_1\rangle |B_2\rangle |B_3\rangle |B_4\rangle$ に対して, 短距離の波動関数を求める. system block $|B_1\rangle$, environment block $|B_4\rangle$ は, 状態が繰り込まれており, 各サイトが \uparrow, \downarrow というように純粋なスピンになっていない. そのため, 数値的な扱い方が異なってくる. 愚直に, 繰り込まれたブロック内のスピンの期待値をとるやり方もあるが, ここでは, 状態が繰り込まれていない中心の 2 サイト $|B_2\rangle, |B_3\rangle$ を用いて, 短距離相関関数を求める. たとえば, 中心 2 サイトの局在スピンの向き S_z^2, S_z^3 は

$$\begin{aligned} \langle \psi' | S_z^2 | \psi \rangle &= \langle B'_1 | \langle B'_2 | \langle B'_3 | \langle B'_4 | S_z^2 | B_1 \rangle | B_2 \rangle | B_3 \rangle | B_4 \rangle \\ &= \langle B'_2 | S_z^2 | B_2 \rangle \delta_{B'_1, B_1} \delta_{B'_3, B_3} \delta_{B'_4, B_4} \end{aligned} \quad (\text{A.4.34})$$

$$\begin{aligned} \langle \psi' | S_z^3 | \psi \rangle &= \langle B'_1 | \langle B'_2 | \langle B'_3 | \langle B'_4 | S_z^3 | B_1 \rangle | B_2 \rangle | B_3 \rangle | B_4 \rangle \\ &= \langle B'_3 | S_z^3 | B_3 \rangle \delta_{B'_1, B_1} \delta_{B'_2, B_2} \delta_{B'_4, B_4} \end{aligned} \quad (\text{A.4.35})$$

と求めることができる. また, 2 サイトにまたがる伝導電子の運動エネルギーは

$$\begin{aligned} \langle \psi' | c_{2\sigma} c_{3\sigma}^\dagger | \psi \rangle &= \langle B'_1 | \langle B'_2 | \langle B'_3 | \langle B'_4 | c_{2\sigma} c_{3\sigma}^\dagger | B_1 \rangle | B_2 \rangle | B_3 \rangle | B_4 \rangle \\ &= \langle B'_2 | c_{2\sigma} | B_2 \rangle \langle B'_3 | c_{3\sigma}^\dagger | B_3 \rangle \delta_{B'_1, B_1} \delta_{B'_4, B_4} \end{aligned} \quad (\text{A.4.36})$$

$$\begin{aligned} \langle \psi' | c_{2\sigma}^\dagger c_{3\sigma} | \psi \rangle &= \langle B'_1 | \langle B'_2 | \langle B'_3 | \langle B'_4 | c_{2\sigma}^\dagger c_{3\sigma} | B_1 \rangle | B_2 \rangle | B_3 \rangle | B_4 \rangle \\ &= \langle B'_2 | c_{2\sigma}^\dagger | B_2 \rangle \langle B'_3 | c_{3\sigma} | B_3 \rangle \delta_{B'_1, B_1} \delta_{B'_4, B_4} \end{aligned} \quad (\text{A.4.37})$$

と求めることができる. sweep をしていくと, 中心の 2 サイトは端から逆端まで移動する, その各行程で, 中心 2 サイトの相関関数を求めることで全サイトの短距離相関関数を求めることができる. 以上のようにして, 求めたい物理量を計算する.

A.4.2 長距離相関関数のとりかた

短距離相関関数を求めたときとほぼ同様にして, 長距離相関関数を求めることができる. たとえば, system block の局在スピンと中心の 2 サイトのうち, system block と隣接していないサイトの局在スピンのスピンスピン相関関数は

$$\begin{aligned} \langle \psi' | \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_3 | \psi \rangle &= \langle B'_1 | \langle B'_2 | \langle B'_3 | \langle B'_4 | \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_3 | B_1 \rangle | B_2 \rangle | B_3 \rangle | B_4 \rangle \\ &= \langle B'_1 | \mathbf{S}_1 | B_1 \rangle \langle B'_3 | \mathbf{S}_3 | B_3 \rangle \delta_{B'_2, B_2} \delta_{B'_4, B_4} \end{aligned} \quad (\text{A.4.38})$$

と求めることができる. 式として書くのは簡単であるが, 要は数値的にどのように扱うか, である. 前述したとおり, $|B_2\rangle, |B_3\rangle$ におけるスピンや電子数は量子化されており, 問題な

く扱うことができる. 長距離にわたる相互作用を計算する場合は 3 サイト以上の距離が必要になる. そのやり方に関して以下で説明する.

$$\begin{aligned} \langle B_1^{new} | H_{system}^{new} | B_1^{new'} \rangle &= \langle B_1^{old} | H_{system}^{old} | B_1^{old'} \rangle \delta_{B_2^{old}, B_2^{old'}} + \langle B_2^{old} | H_2^{old} | B_2^{old'} \rangle \delta_{B_1^{old}, B_1^{old'}} \\ &+ \left(\langle B_1^{old} | S_1^+ | B_1^{old'} \rangle \langle B_2^{old} | S_2^- | B_2^{old'} \rangle + \text{H.c.} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.4.39})$$

としたとき, system block と single site のスピン演算子は, それぞれ

$$\sum_{i=1}^n \langle B_1^{old} | \mathbf{S}_{1,i} | B_1^{old'} \rangle \langle B_2^{old} | B_2^{old'} \rangle \quad (\text{A.4.40})$$

$$\langle B_2^{old} | \mathbf{S}_2 | B_2^{old'} \rangle \langle B_1^{old} | B_1^{old'} \rangle \quad (\text{A.4.41})$$

と定義できる. i は 1 から system block のサイト数 n まで存在する. つまり, sweep が進むにつれて, system block に新たなサイトが繰り込まれてサイト数が増えていけば, 定義する演算子の数も増えていく. これらの演算子を用いて, 長距離の相関関数を計算する.

A.5 計算結果の確認の仕方

ケミカルポテンシャル μ が本当に正しいかの確認を行う。ケミカルポテンシャルの定義は

$$\frac{\partial E}{\partial N} = \mu \quad (\text{A.5.42})$$

である。SSD を用いて、数値解析を行う際に与えるケミカルポテンシャルはこちらの手で与える。弱相関電子系では、バンドからケミカルポテンシャルの物理的意味がわかりやすいが、強相関電子系では、単純なバンド構造ではないと考えられるので、ケミカルポテンシャルの値が、物理的な意味を持っているとは言えなくなる。したがって、解析している系の中心部分のエネルギーを求め、電子密度との関係式から、 μ を求めるのが妥当と考えられる。系の中心部分のエネルギーの平均の値を E_{average}^l とし、1 サイトあたりのエネルギーをサイト数で割ることで1 サイトあたりのエネルギー E_{average}^l/l を得る。電子密度も同様に求めるように決め、 n_c^l/l とする。l に関して何通りかサイト数をとることにし、傾きである μ がどのように変化するか解析する。この μ を SSD によって与えられた μ_{SSD} と比較することにより評価する。

次に、フーリエ変換を行って $n_k = \langle c_i^\dagger c_i \rangle$ を求め、 n_k , k の関係を求める。フーリエ変換の式は、

$$\langle c_k^\dagger c_k \rangle = \sum_{i,j} c_i^\dagger c_i \cos(kr(i-j)) \quad (\text{A.5.43})$$

と書くことができる。k の与え方は、 $k = 2\pi n/L$, ($n = 0, 1, 2 \dots L-1$) である。i, j は最近接以外もとるので、DMRG を用いて計算している最中に長距離の相関関数を計算しておく必要がある。n_k, k のグラフは電子密度と波数の関係に他ならない。したがって、このグラフにおいて k_F 付近に飛びがあれば、fermi 液体を形成していると考えることができる。それに対して、とびがなければ、非 fermi 液体的な振る舞いをしているということができる。また、大きい fermi 面や小さい fermi 面の議論もできるはずだと考えられる。

A.6 SSD に関する諸計算

ある \mathcal{H} に SSD の関数 $f_l(j)$ をかけたものを考える。ここでは、タイトバインディングモデルを考える。

$$\mathcal{H} = -t \sum_{j=1}^{L-1} (c_j^\dagger c_{j+1} + \text{H.c.}) - \mu \sum_{j=1}^L c_j^\dagger c_j \quad (\text{A.6.44})$$

第一項は伝導電子のホッピング項であり、最近接のホッピングしか考えないとする。第二項はケミカルポテンシャル項である。このハミルトニアンに以下の $f_l(j)$ の関数をかける。

$$f_l(j) = \sin^2 \left(\frac{\pi[j + (l-1)/2]}{L} \right) \quad (\text{A.6.45})$$

すると

$$\mathcal{H}_{\text{SSD}} = -t \sum_{j=1}^L f_1(j) (c_j^\dagger c_{j+1} + \text{H.c.}) - \mu \sum_{j=1}^L f_0(j) c_j^\dagger c_j \quad (\text{A.6.46})$$

と書ける。ここでオンサイトの相互作用がある項は $l=0$ 、最近接間の相互作用がある項は $l=1$ として、それぞれ $f_l(j)$ を定義する。ここで、 $\sin^2(\pi j/L)$ は以下のように $e^{\pm 2\pi j/L}$ で書き換えることができる。

$$\sin^2(\pi j/L) = 1/2 - (e^{i2\pi j/L} + e^{-i2\pi j/L})/4 \quad (\text{A.6.47})$$

(A.6.46),(A.6.47) を計算すると、 \mathcal{H}_{SSD} は以下の $\mathcal{H}_0, \mathcal{H}^{(\pm)}$ に分けることができる。

$$\mathcal{H}_0 = \sum (-2t \cos(k) - \mu) c_k^\dagger c_k \quad (\text{A.6.48})$$

$$\mathcal{H}^{(\pm)} = \sum_k e^{\mp i(\delta/2)} (-2t \cos(k \mp \delta/2) - \mu) c_k^\dagger c_{k \mp \delta} \quad (\text{A.6.49})$$

ここで $\delta = 2\pi/L$ である。 \mathcal{H}_0 は周期境界条件のタイトバインディングのハミルトニアンであり、 $\mathcal{H}^{(\pm)}$ は余剰項になっている。

$$\mathcal{H}_{\text{SSD}} = \frac{1}{2} \mathcal{H}_0 - \frac{1}{4} [\mathcal{H}^{(+)} + \mathcal{H}^{(-)}] \quad (\text{A.6.50})$$

ケミカルポテンシャルを人為的に入れ、 $\mathcal{H}^{(\pm)}$ 項をキャンセルすれば、ハミルトニアンは周期境界条件の \mathcal{H}_0 だけになることがわかる。SSD をかけた open boundary condition の \mathcal{H}_{SSD} はケミカルポテンシャルを変えることで、電子系のモデルにも適用できることがわかる。

参考文献

- [1] J. Kondo, Prog. Theor. Phys. **32**, 37 (1964).
- [2] A. Sumiyama, Y. Oda, H. Nagano, Y. Onuki, K. Shibusaki, and T. Komatsubara, J. Phys. Soc. Jpn. **55**, 1294 (1986).
- [3] K. Yosida, Phys. Rev. **147**(1966) 223; Prog. Theor. Phys. **36**, 875 (1966).
- [4] K. G. Wilson, Rev. Mod. Phys. **47**, 773 (1975).
- [5] M.A.Ruderman and C.Kittel, Phys. Rev. **96**, 99 (1954).
- [6] T.Kasuya, Prog. Theor. Phys. **16**, 45 (1956).
- [7] K.Yosida, Phys. Rev. **106**, 893 (1957).
- [8] 長谷川彰, 大貫惇睦, 固体物理, **58**, 867 (1991).
- [9] H. Tsunetsugu, M. Sigrist, and K. Ueda, Rev. Mod. Phys. **69**, 809 (1997).
- [10] R. Peters and N. Kawakami Phys. Rev. B **86**, 165107 (2012).
- [11] J. C. Xavier and E. Miranda, Phys. Rev. B **78**, 144406 (2008).
- [12] I. McCulloch, A. Juozapavicius, A. Rosengren, and M. Gulacsi, Phys. Rev. B **81**, 869 (2001).
- [13] A. Juozapavicius, I.P. McCulloch, M. Gulacsi, and A. Rosengren, Phil. Mag. B, **82**, 1211(2002).
- [14] 柴田尚和, 「近藤格子」(強相関伝導系の物理 若手夏の学校)-597 609-.
- [15] 上田和夫, 大貫惇睦, 重い電子系の物理 (裳華房, 1998).
- [16] I. P. McCulloch, A. Juozapavicius, A. Rosengren, and M.Gulacsi, Phys. Rev. B **65**, 052410 (2002).
- [17] H. Tsunetsugu, Y. Hatsugai, K. Ueda, and M. Sigrist, Phys. Rev. B **46**, 3175(1992).
- [18] N. Shibata and C. Hotta, Phys. Rev. B **84**, 115116 (2011).
- [19] C. Hotta and N. Shibata, Physica B: Cond. Mat. **378**, 1039 (2006).
- [20] N. Shibata, T. Nishino, K. Ueda, and C. Ishii, Phys. Rev. B **53**, 8828(R) (1996).
- [21] M. Sigrist, H. Tsunetsugu, and K. Ueda, Phys. Rev. Lett. **67**, 2211(1991).

- [22] M. Troyer and D. Wurtz, *Phys. Rev. B* **47**, 2886(1993).
- [23] M. Sigrist, H. Tsunetsugu, K. Ueda, and T.M. Rice, *Phys. Rev. B* **46**, 13838(1992).
- [24] H. Tsunetsugu, M. Sigrist, and K. Ueda, *Phys. Rev. B* **47**, 8345(1993).
- [25] N. Shibata, A. Tsvelik, and K. Ueda, *Phys. Rev. B* **56** 330(1997).
- [26] S. Watanabe, *J. Phys. Soc. Jpn.* **69**, 2947 (2000).
- [27] M. Bercx and F. F. Assaad, *Phys. Rev. B* **86**, 075108 (2012).
- [28] N. Shibata and K. Ueda, *J. Phys. Cond. Matt.* **11** R1(1999).
- [29] N. Shibata, K. Ueda, T. Nishino, and C. Ishii, *Phys. Rev. B* **54**, 13495 (1996).
- [30] R. Peters, N. Kawakami, and T. Pruschke, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 086402 (2012).
- [31] S.R. White, *Phys. Rev. Lett.* **69** (1992) 2863; S.R. White, *Phys. Rev. B* **48**, 10345 (1993).
- [32] M. Verić and S. R. White, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 4283 (1993).
- [33] M. Verić and S. R. White, *Phys. Rev. B* **53**, 14552 (1996).
- [34] A. Gendiar, R. Krmar, and T. Nishino, *Prog. Theor. Phys.* **122**, 953 (2009); **123**, 393 (2010).
- [35] T. Hikihara and T. Nishino, *Phys. Rev.* **83**, 060414(R) (2011).
- [36] I. Maruyama, H. Katsura, and T. Hikihara, *Phys. Rev. B* **84**, 165132 (2011).
- [37] C. Hotta and N. Shibata, *Phys. Rev. B* **86**, 041108(R) (2012).
- [38] C. Hotta, S. Nishimoto, and N. Shibata, *Phys. Rev. B* **87**, 115128 (2013).
- [39] R. Ishiyama and N. Shibata, *JPS Conf. Proc.* **3**, 011032 (2014).
- [40] 斯波弘行, 新版 固体の電子論 (和光システム研究所, 2010).
- [41] 阿部龍蔵, 電気伝導 (培風館, 1969).
- [42] 近藤淳, 金属電子論 (裳華房, 1983).
- [43] 永宮健夫, 磁性の理論 (吉岡書店, 1987).
- [44] 夏目雄平・小川建吾・鈴木敏彦, 計算物理 III (朝倉書店, 2002).
- [45] 森正武, 数値計算プログラミング (岩波書店, 1986).
- [46] 小国力, 新数値計算法 (サイエンス社, 1997).
- [47] 成島毅, 修士論文 (筑波大学 1995 年度).
- [48] T. Narushima, T. Nakashima, and, S. Takada, *J. Phys. Soc. Jpn.* **64**, 4322 (1995).

謝辞

この研究を遂行するにあたり、日常における心構えから発表に関する助言まで、終始熱心なご指導をいただいた柴田尚和准教授には修士の頃から含め5年間に渡りお世話になりました。本当にありがとうございました。加えて、主査を務めて頂いた石原純夫教授、副審査員、採点委員の皆様には感謝致します。

修士の頃からお世話になっている東達也さんには、DMRGに関するコーディングや研究に関して多くの助言をいただきました。同室である橋本博志氏、田村駿氏、遠藤謙光氏から日常会話を通して多くの刺激と示唆を得ることができました。同じグループの菊地琢さん、森田克洋さん、若目田寛氏、世永公輝くん、宮澤溪くん、牧野大介くん、中川歩くん、押山広樹くん、伊藤拓哉くんにはセミナーにおいて活発で刺激的な議論を頂き大変励みになりました。そして、物性理論研究室の先生、院生、学部生の皆様との日常会話や議論は非常に有益なものでした。ありがとうございました。

物理の議論や日常会話など様々な心配事について相談に乗って頂いた奈良壮くん、高橋佑生くん、大友優香さんらに深く感謝致します。ありがとうございました。向洋中女子バドミントン部の顧問瀬成田実先生、田代渉先生、生徒の皆さんの明るさと元気にはいつも励まされました。ありがとうございました。

最後に、大学院での生活を支え応援してくれた両親並びに石山家、鈴木家の皆様、齋藤家の皆様、親戚の清野裕靖さん、そして博士課程3年時に他界した祖母の石山恵子に心より感謝致します。

出版論文

1. "Magnetization plateaus in the one-dimensional Kondo lattice model"
Ryuhei Ishiyama and Naokazu Shibata, JPS Conf. Proc. **3**, 011032 (2014).