

(千葉大学審査学位論文)

密度行列繰り込み群法による
1次元量子スピン系の不純物効果と
2次元量子系の境界条件に関する研究

2023年1月提出

千葉大学大学院 融合理工学府
先進理化学専攻 物理学コース

廉澤 誠大

目次

第 1 章	序論	3
第 2 章	計算手法	5
2.1	密度行列繰り込み群法 (DMRG)	5
2.1.1	波動関数の最適化	5
2.1.2	DMRG の計算手順	6
2.1.3	行列積状態による定式化	8
2.1.4	周期境界条件を適用する場合の注意点	12
第 3 章	スピン $\frac{1}{2}$ 反強磁性 Heisenberg 鎖における異方的スピン S 不純物の効果	13
3.1	研究の背景	13
3.1.1	磁性不純物の効果に関する先行研究	13
3.1.2	1 次元スピン $\frac{1}{2}$ XXZ 模型の性質	16
3.2	模型と計算手法	19
3.2.1	不純物をドーピングしたスピン $\frac{1}{2}$ 反強磁性 Heisenberg 鎖	19
3.2.2	DMRG	19
3.2.3	クラスター平均場理論 (CMFT)	20
3.3	基底状態に関する計算結果	20
3.3.1	スピン相関に対する単一不純物の効果	20
3.3.2	Néel 秩序の不安定性	23
3.3.3	局所スピン感受率と NMR スペクトル	26
3.3.4	スタッガード磁化	31
3.3.5	磁化曲線	32
3.4	有限温度に関する計算結果	35
3.4.1	比熱と磁化率の温度依存性	35
3.5	結論	38
第 4 章	スパイラル境界条件を用いた 2 次元格子系の 1 次元格子系へのマッピング	40
4.1	研究の背景	40
4.1.1	2 次元系の数値計算における問題点	40
4.2	模型と計算手法	42
4.2.1	2 次元正方格子 tight-binding 模型	42
4.2.2	八二カム格子 tight-binding 模型	43
4.2.3	2 次元正方格子 Hubbard 模型	46
4.2.4	2 次元正方格子 XXZ 模型	47
4.2.5	スパイラル境界条件 (SBC)	48
4.2.6	DMRG	54
4.3	DMRG による計算結果	54
4.3.1	2 次元正方格子 Hubbard 模型の基底状態エネルギー	55
4.3.2	2 次元正方格子 XXZ 模型のスタッガード磁化	56
4.4	Open chain を用いた秩序変数の計算	58

4.4.1	2次元正方格子スピン S XXZ 模型	59
4.4.2	秩序変数の計算方法	59
4.4.3	計算結果	61
4.5	他の境界条件と比較した SBC の優位性	66
4.5.1	基底状態エネルギーの有限サイズスケーリング	66
4.5.2	相関関数の振舞	67
4.6	結論	68
第 5 章	総括	70
付録 A	スピン $\frac{1}{2}$ 反強磁性 Heisenberg 鎖における異方的スピン S 不純物の効果の研究に関する補遺	72
A.1	不純物サイトでの交換相互作用の値を変えた場合の結果	72
A.2	$S_{\text{imp}} > 1$ の不純物近傍に局在する $S = \frac{1}{2}$ 状態	74
A.3	DMRG 計算での不純物分布のランダムサンプリングと有限サイズスケーリング	75
A.4	CMFT 計算での不純物分布のランダムサンプリング	76
A.5	CMFT 計算での有限サイズ効果	77
付録 B	スパイラル境界条件に関する補足資料	78
B.1	スパイラル境界条件による縮退したエネルギー準位の分裂	78
B.2	スパイラル境界条件でのクラスターのとりの柔軟性	79
B.3	DMRG 計算の収束に関するデータ	80
B.4	スパイラル境界条件の利点	82
B.5	2次元正方格子 tight-binding 模型の密度相関の振舞	83
	謝辞	87
	出版論文のリスト	88
	参考文献	89

第1章 序論

物性物理学の理論研究においては、物質の微視的な構造を記述する連続体模型や格子模型を解析することが、しばしば有効な手段となる。よく用いられる格子模型としては、Heisenberg 模型 [1] や Kitaev 模型 [2] 等の量子スピン系や Hubbard 模型 [3] に代表される電子系等がある。物質は非常に多数の粒子で構成される量子多体系であるため、系のサイズを無限に大きくした熱力学極限での性質を調べることが重要になる。有限系の基底状態を計算する代表的な手法としては、ハミルトニアン of 行列要素を計算して粗行列の対角化手法を用いて基底状態を厳密に計算する厳密対角化法がある。しかし、厳密対角化法では計算コストが系のサイズに対して指数関数的に増大するために、サイト数を熱力学極限での性質を議論するのに十分な程度まで大きくすることが難しいという問題がある。それに対して、White によって考案された密度行列繰り込み群法 (DMRG) [4, 5] は、1 次元量子系の基底状態を厳密に計算することができる手法であり、1 次元の量子スピン系や電子系では数百サイトから数千サイトの系を扱うことができる。したがって、有限系の計算結果を適切にサイズスケーリングすることで、熱力学極限での物理量の評価を行うことも可能になる。

DMRG による解析が特に有効である 1 次元量子スピン系で記述される物質について、これまでに磁性不純物に関する実験結果が多く報告されている。特に、スピン $\frac{1}{2}$ 反強磁性 Heisenberg 鎖で記述される Sr_2CuO_3 と SrCuO_2 においても、不純物スピンによる物性の変化が確認されている。例えば、 Sr_2CuO_3 に非磁性不純物である Pd^{2+} イオンや Zn^{2+} をドーピングすることで、Néel 温度が減少することが分かっている [6, 7]。また、 SrCuO_2 にスピン $\frac{1}{2}$ 不純物である Co^{2+} イオンをドーピングした場合には、バルクの相互作用が Ising 型に変化し磁気秩序が形成される温度が上昇する一方で、スピン励起のギャップレス性は保たれること等が知られている [8]。また、理論的な研究としては反強磁性 Heisenberg 鎖に非磁性不純物や $S = 1$ の不純物をドーピングした場合の効果や、反強磁性鎖に等方的な $S = \frac{1}{2}$ の不純物をドーピングした場合の効果場の理論や繰り込み群、数値計算を用いた解析 [9, 10, 11, 12, 13] で調べられている。しかし、スピン $\frac{1}{2}$ 不純物をドーピングした場合の実験結果は不純物スピンの異方性の効果の重要性を示しており、 $S > 1$ の不純物や異方性をもつ磁性不純物の効果については理論的な研究がまだ十分に行われていない。

また、2 次元以上の量子系に対する DMRG の効率的な適用も課題の一つである。2 次元以上の量子系では、系の総自由度が系のサイズに対して急激に増大するため、系のサイズやクラスタの形状が大きく制限される。また、有限系の計算結果を用いて熱力学極限へのサイズスケーリングを行う際にも x 方向と y 方向の 2 段階のサイズスケーリングを行う必要があるため、安定したスケーリングを行うことが難しい。こうした系では、周期境界条件やシリンダー境界条件がよく用いられるが、境界条件をうまく設定しないと少数サイト系の最低エネルギー状態が無限系での基底状態と異なった状態になるような状況が起こりうる。

以上を踏まえ本研究では DMRG を用いて、1 次元量子スピン系における異方的な磁性不純物の効果と 2 次元量子系の境界条件に関する研究を行った。本論文の構成は以下のようになっている。

第 2 章では、本研究において用いた計算手法である DMRG について説明を行う。まず、DMRG における波動関数の最適化の原理について確認し、系を考えたいサイズまで拡張しながら基底状態の計算を行う無限系法と、無限系法によって得られた基底状態を最適化する有限系法の手続きについて説明する。さらに、行列の特異値分解を利用することで得られる行列積状態に対する変分法としての DMRG の定式化についても確認する。

第 3 章では、1 次元スピン $\frac{1}{2}$ 反強磁性 Heisenberg 模型に XXZ 型の異方性を持つスピン S 不純物をドーピングした場合の効果について、DMRG とクラスタ平均場理論 (CMFT) の手法を用いて研究した。まず、基底状態において単一のスピン S 不純物が存在する場合の効果反強磁性相関関数や局所スピン感受率

を DMRG を用いて計算することで調べた。それらの結果から、スピン S 不純物の効果が次の 2 種類に分類されることを確かめた。(i) 非磁性及び $S = 1$ の不純物: 短距離の反強磁性相関のみを増大させる。(ii) $S = \frac{1}{2}, S > 1$ の不純物: 長距離の反強磁性秩序を安定化させる。次に、(ii) の場合として特に $S = \frac{1}{2}$ の不純物の場合に、スタaggered 磁化の不純物の異方性の強さと不純物濃度に対する依存性を計算し、容易軸異方性を持つ磁性不純物のドーピングにより長距離の反強磁性秩序が実現することを確認した。また、磁化曲線についても同様の計算を行い、XXZ 異方性を持つ不純物によって磁化曲線にプラトーのような特徴や擬ギャップ的な構造が現れることを明らかにした。さらに、CMFT を用いて比熱と磁化率の温度依存性を計算し、XXZ 異方性を持つ不純物をドーピングすることで反強磁性相から常磁性相への転移温度が上昇することを確かめた。

第 4 章では、スパイラル境界条件 (SBC) を用いた 2 次元格子系の 1 次元格子系へのマッピングの方法についての研究を行った。SBC を用いることで、2 次元以上の格子系を周期的な 1 次元鎖に厳密にマップすることができる。したがって、このマップされた 1 次元系に対して DMRG やボソン化法、Jordan Wigner 変換等の 1 次元系に対する手法を用いることができる。まず、2 次元正方格子とハニカム格子上の tight-binding 模型について SBC による 1 次元的なマッピングの方法を示した。次に、基底状態のエネルギーと状態密度が熱力学極限で元の 2 次元格子の結果に近づいていく様子を確認した。また、SBC を用いた 2 次元量子系への DMRG の適用例として、2 次元正方格子上の Hubbard 模型の half filling での基底状態のエネルギーと XXZ 模型のスタaggered 磁化を計算し、熱力学極限への有限サイズスケールングを行った。そして、得られた結果を厳密解や先行研究の結果と比較することで、SBC と DMRG を用いた 2 次元量子系の計算の実用性を確認した。さらに、SBC によって得られる 1 次元鎖は 1 次元系としての並進対称性を持っているが、これを開境界で扱うことで DMRG で計算する際の計算コストを削減し、局所的な秩序変数を計算する方法も提案する。最後に、SBC と他の境界条件を適用した場合の物理量の有限サイズスケールングや相関関数の振舞を比較し、他の境界条件に対する SBC の優位性を明らかにする。

最後に、第 5 章において本研究の総括を行う。

第2章 計算手法

2.1 密度行列繰り込み群法 (DMRG)

ここでは、本研究で用いる計算手法である密度行列繰り込み群法 (density matrix renormalization group, DMRG) [4, 5] について説明する。DMRG は、1次元量子格子模型の基底状態を精度良く求めることができる強力な手法として広く用いられている。この章ではまず、2.1.1 節で DMRG における状態数の削減方法について確認する。次に、2.1.2 節で DMRG による基底状態の計算手順について説明する。さらに、2.1.3 節で行列積状態を使った DMRG の定式化について確認する。また、2.1.4 節で周期境界条件を用いる場合の注意点を説明する。DMRG についての分かり易い解説として [14, 15, 16, 17, 18] 等を挙げる。また、実装や数値計算パッケージについては [19, 20] 等を参考にされたい。

2.1.1 波動関数の最適化

DMRG では1次元の格子系を system と environment という2つの部分に分け、それぞれの状態数を削減しつつ系のサイズを大きくしながら波動関数の最適化を行う。system と environment を合わせた系全体を superblock と呼ぶ [図 2.1]。このような基底の削減を行うことで、厳密対角化では扱えないような大きな系で、精度の高い計算を行うことができる。この節では、DMRG で行われる波動関数の状態数の削減方法について確認する。

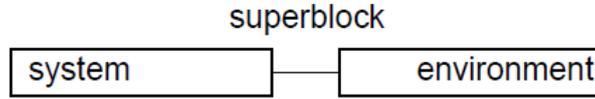


図 2.1: DMRG での superblock の構成

今、system block の Hilbert 空間の次元と基底をそれぞれ $N_S, \{|i\rangle\}$ とし、environment block の Hilbert 空間の次元と基底をそれぞれ $N_E, \{|j\rangle\}$ として、superblock の規格化された基底状態 $|\psi\rangle$ が

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{N_S} \sum_{j=1}^{N_E} \psi_{i,j} |i\rangle |j\rangle \quad (2.1)$$

として求められたとする。正規直交基底 $|\alpha\rangle = \sum_i u_{\alpha i} |i\rangle$ を用いて、system block の次元を N_S から m に削減した状態

$$|\tilde{\psi}\rangle = \sum_{\alpha=1}^m \sum_{j=1}^{N_E} a_{\alpha,j} |\alpha\rangle |j\rangle \quad (2.2)$$

を考え、真の基底状態との距離の2乗

$$S = ||\psi\rangle - |\tilde{\psi}\rangle|^2 = 1 - 2 \sum_{\alpha,i,j} \psi_{i,j} a_{\alpha j} u_{\alpha i} + \sum_{\alpha j} a_{\alpha j}^2 \quad (2.3)$$

を最小化する問題を考える。ここで簡単のため係数は全て実数であるとして計算している。 $a_{\alpha j}$ についての停留条件 $\frac{\delta S}{\delta a_{\alpha j}} = 0$ から、 $\sum_i \psi_{i,j} u_{\alpha i} = a_{\alpha j}$ であり

$$S = 1 - \sum_{\alpha,i,i'} u_{\alpha i} \rho_{i i'} u_{\alpha i'} \quad (2.4)$$

となる。ここで

$$\rho_{ii'} = \sum_j \psi_{ij} \psi_{i'j} \quad (2.5)$$

は、密度行列 $|\psi\rangle\langle\psi|$ を environment block の状態について対角和をとった縮約密度行列 $\hat{\rho} = \text{Tr}_E |\psi\rangle\langle\psi| = \sum_j |j\rangle\langle j| \psi\rangle\langle\psi| j\rangle\langle j|$ の成分 $\langle i|\hat{\rho}|i'\rangle$ である。したがって、 $|\alpha\rangle$ を縮約密度行列の固有状態にとれば、 S を最小にすることができることが分かる。縮約密度行列 $\hat{\rho}$ を対角化し、 N_S 個の固有値 $\{w_\alpha\}$ と固有ベクトル $\{|w_\alpha\rangle\}$ が得られたとする。

$$\hat{\rho}|w_\alpha\rangle = w_\alpha|w_\alpha\rangle \quad (2.6)$$

ここで固有状態は $w_1 \geq w_2 \geq \dots \geq w_{N_S}$ となるように並べられているとする。規格化条件 $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ より $\sum_\alpha w_\alpha = 1$ であり、 $\hat{\rho}$ は半正定値行列で $w_\alpha \geq 0$ であるから、固有値を大きいものから m 個残すことで真の基底状態との差を最小にすることができる

$$S = 1 - \sum_{\alpha=1}^m w_\alpha \quad (2.7)$$

となる。この量は discarded weight と呼ばれ、DMRG の計算精度の一つの指標になる。

2.1.2 DMRG の計算手順

ここでは、DMRG での基底状態の計算手順を説明する。DMRG による基底状態の計算方法には、大きく分けて無限系法 (Infinite system algorithm) と有限系法 (Finite system algorithm) の 2 つのアルゴリズムが存在する。以下でそれぞれの計算手順について確認する。

Infinite system algorithm

Infinite system algorithm は、系を望む大きさまで拡張するために用いる。Infinite system algorithm での手続きは以下の通りである [図 2.2]。

(1) l サイトの系を考え、system block S を構成する。 S の Hilbert 空間の次元を M_S 、基底を $\{|M_l^S\rangle\}$ として、 S に作用する演算子とハミルトニアン \hat{H}_l^S の基底 $\{|M_l^S\rangle\}$ での表現を求めておく。environment block についても同様に構成し、 $2l$ サイトの superblock を構成する。この最初のステップでの superblock 全体の大きさとしては 4 サイト等、厳密対角化等で基底状態が求められるサイズを考える。

(2) S にサイトを 1 つ加えて、 $l+1$ サイトの system block S' を構成する。加えたサイトの自由度を N_{site} 、基底を $\{|\sigma\rangle\}$ とすれば (例えば $S = \frac{1}{2}$ Heisenberg 模型なら $N_{\text{site}} = 2$, $|\sigma\rangle = |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ である)、 S' の Hilbert 空間の次元は $N^{S'} = M^S N_{\text{site}}$ となり、基底は $\{|M_l^{S'}\sigma\rangle = |M_l^S\rangle \otimes |\sigma\rangle\}$ となる。同様に $l+1$ サイトの environment block E' を構成する。

(3) S' と E' から $2l+2$ サイトの superblock を構成する。superblock の Hilbert 空間の次元は $N^{S'} N^{E'}$ となる。superblock のハミルトニアン \hat{H}_{2l+2} に Davidson 法や Lanczos 法等の疎行列の対角化法を用いて基底状態の固有値と固有ベクトル $|\psi\rangle$ を計算する。必要であれば、求められた基底状態を用いて物理量の期待値を計算する。

(4) 求められた superblock の基底状態 $|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{N^S} \sum_{j=1}^{N^{E'}} \psi_{ij} |i\rangle |j\rangle$, $i = (M_l^S, \sigma)$, $j = (M_l^{E'}, \sigma)$ から式 (2.5) にしたがって縮約密度行列 $\hat{\rho} = \text{Tr}_{E'} |\psi\rangle\langle\psi|$ を構成する。 $\hat{\rho}$ を対角化して固有値 $\{w_\alpha^S\}$ と固有ベクトル $\{|w_\alpha^S\rangle\}$ を求め、固有値の大きいものから m 個までの固有ベクトルを S' の新しい基底とする。この時、元の N^S 個の基底から m 個の基底への変換行列を \hat{T}_l^S とすると、その行列要素は $\langle i|w_\alpha^S\rangle$ で求められる。同様に environment block についても変換行列を構成する。

(5) system block のハミルトニアンについて、 $\hat{H}_{l+1}^{S,\text{tr}} = T_l^{S\dagger} \hat{H}_{l+1}^S T_l^S$, $\hat{H}_{l+1}^{S,\text{tr}} \rightarrow \hat{H}_{l+1}^S$ として基底の変換を行

う。system block の他の演算子についても同様の変換を行う。同様に environment block についても基底の変換を行い、系が望む大きさになるまで (2) から (5) までのステップを繰り返す。

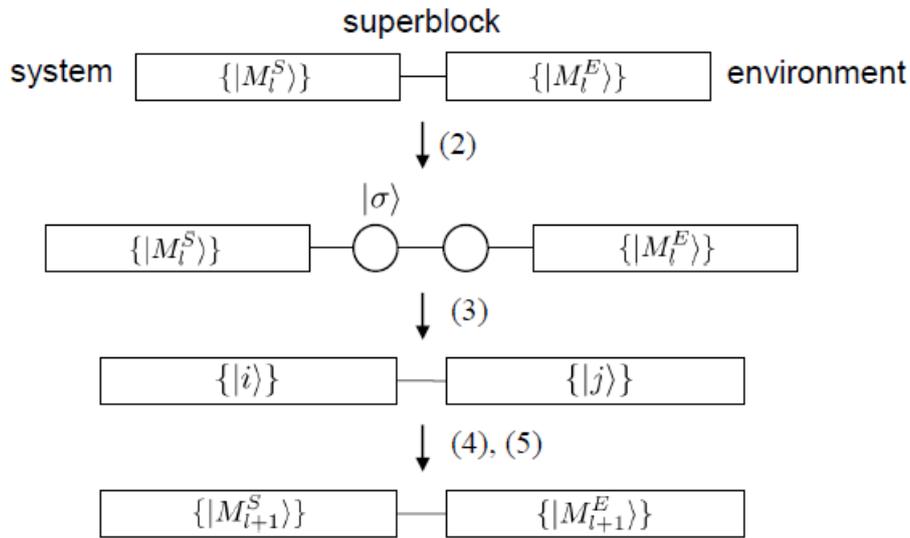


図 2.2: Infinite system algorithm における block の拡張

系に反転対称性がある場合には、environment block は system block を反転させることで構成することができ、environment block についての計算を別に行う必要はない。また、計算する状態は基底状態に限らず、疎行列の対角化法で可能であれば基底状態からいくつか上の固有状態を計算することも可能である。

Finite system algorithm

Finite system algorithm は、Infinite system algorithm で得られた有限系の基底状態を最適化するために用いる。Finite system algorithm での手続きは以下の通りである [図 2.3]。

- (1) Infinite system algorithm を superblock が考えたいサイト数 L になるまで実行する。このとき、各ステップで得られる system 及び environment のハミルトニアン \hat{H}_l^S, \hat{H}_l^E や端の演算子の行列を保存しておく。
- (2) 保存しておいた system 及び environment のハミルトニアンを用いて system block のサイズを l , environment block のサイズを $L - l - 2$ として super block を構成する。
- (3) Infinite system algorithm の (2)-(5) のステップを行い、 $\hat{H}_{l+1}^S, \hat{H}_{L-l-1}^E$ 等を更新する。
- (3) $l < L - 3$ であれば、 $l = l + 1$ として上記 (2)-(3) のステップを繰り返す。system block を拡大するこの一連の操作を左から右への sweep と呼ぶ。
- (4) 上記と同様のステップを environment に対して行う。すなわち、system block のサイズを $l (= L - 3)$, environment block のサイズを $L - l - 2 (= 1)$ として superblock を構成する。
- (5) Infinite system algorithm の (2)-(5) のステップを行い、 $\hat{H}_{l+1}^S, \hat{H}_{L-l-1}^E$ 等を更新する。
- (6) $l > 1$ であれば、 $l = l - 1$ として上記 (4)-(5) のステップを繰り返す。environment block を拡大するこの一連の操作を右から左への sweep と呼ぶ。
- (7) 上記 (2)-(6) の操作をエネルギー又は求めたい物理量の値が収束するまで繰り返す。

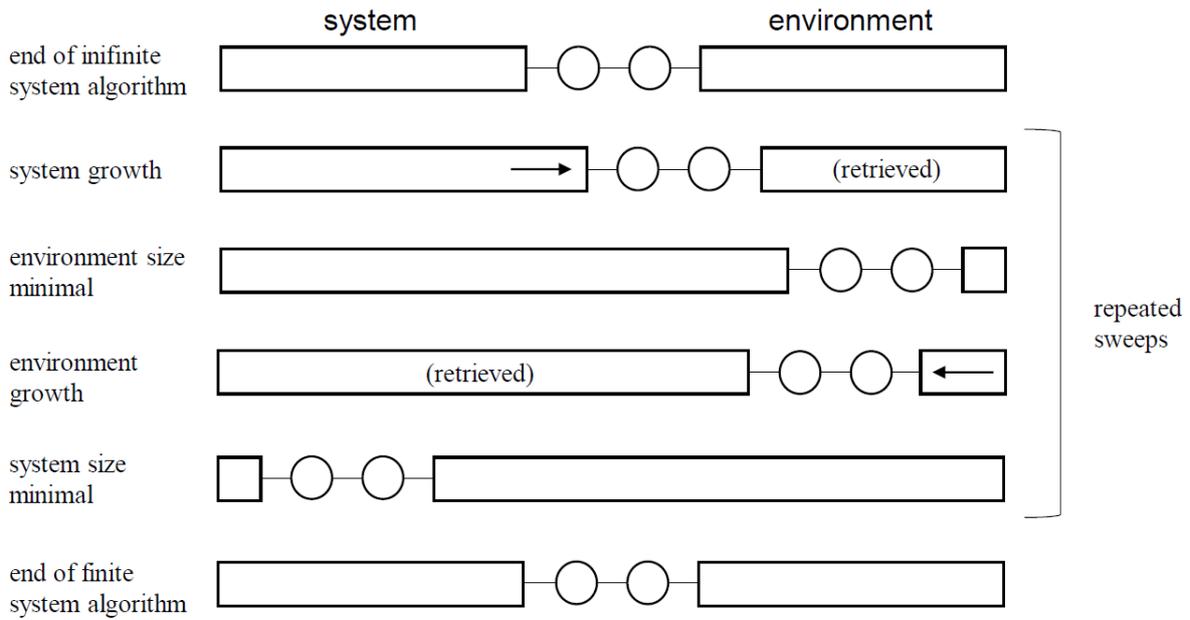


図 2.3: Finite system algorithm における block の拡張と縮小。retrieved と書かれた block では前の sweep で保存した block の情報を用いる。

各 sweep において残す縮約密度行列の固有値の数 m は、もちろん可能な限り大きい方が精度の良い計算ができるが、 m が大きいほど計算時間や計算に必要なメモリが増加するため、必要な計算精度に応じて小さくとる。 m を大きくすることが難しい場合には、大体の目安として discarded weight が 10^{-5} 以下になるように m をとれば、ある程度信頼性のある結果が得られる場合が多い。ただし、その場合も必要に応じて計算結果を $m \rightarrow \infty$ へ外挿することが重要である。

2.1.3 行列積状態による定式化

DMRG は行列積状態 (MPS) を用いた変分法という観点から定式化することもできる。ここでは、MPS を用いた DMRG の計算原理 [17, 18, 21, 22] について確認する。

行列積状態 (MPS)

1 次元 L サイトの格子系を考えると、その任意の状態 $|\Psi\rangle$ は各サイトの基底を表すインデックス $\sigma_1, \dots, \sigma_L$ を用いて

$$|\Psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} \Psi^{\sigma_1, \dots, \sigma_L} |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle \quad (2.8)$$

と書くことができる¹。例えば、1 次元スピン 1/2 Heisenberg 模型なら $|\sigma_i\rangle = |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ であり、ヒルベルト空間の次元は単純には 2^L となる。

行列の特異値分解 (singular value decomposition, SVD) を利用することで、この波動関数の状態数を削減することができる。SVD を用いると、任意の $m \times n$ 行列 M を

$$M_{ij} = \sum_{k=1}^{\min(m,n)} U_{ik} S_k V_{kj}^\dagger \quad (2.9)$$

と分解することができる。 S_k は行列 M の特異値で 0 以上の値である。また、行列 U と V は直交条件 $U^\dagger U = I, V^\dagger V = I$ を満たしている²。

¹ここで $|\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle = |\sigma_1\rangle |\sigma_2\rangle \dots |\sigma_L\rangle$.

² I は単位行列である。

波動関数 (2.8) の係数 $\Psi^{\sigma_1, \dots, \sigma_L}$ に対して SVD を行うと

$$\begin{aligned} \Psi^{\sigma_1, \dots, \sigma_L} &= \Psi_{\sigma_1, (\sigma_2, \dots, \sigma_L)} = \sum_{a_1} U_{\sigma_1, a_1} S_{a_1} V_{a_1, (\sigma_2, \dots, \sigma_L)}^\dagger \equiv \sum_{a_1} U_{\sigma_1, a_1} \Psi_{(a_1 \sigma_2), (\sigma_3, \dots, \sigma_L)} \\ &= \sum_{a_1} A_{a_1}^{\sigma_1} \Psi_{(a_1 \sigma_2), (\sigma_3, \dots, \sigma_L)} \end{aligned} \quad (2.10)$$

となる。ここで、 $A_{a_1}^{\sigma_1} = U_{\sigma_1, a_1}$ と表した。同様にして繰り返し SVD を行うと

$$\begin{aligned} \Psi^{\sigma_1, \dots, \sigma_L} &= \sum_{a_1} A_{a_1}^{\sigma_1} \Psi_{(a_1 \sigma_2), (\sigma_3, \dots, \sigma_L)} = \sum_{a_1} \sum_{a_2} A_{a_1}^{\sigma_1} U_{(a_1 \sigma_2), a_2} S_{a_2} V_{a_2, (\sigma_3, \dots, \sigma_L)}^\dagger \\ &= \sum_{a_1} \sum_{a_2} A_{a_1}^{\sigma_1} A_{a_1, a_2}^{\sigma_2} \Psi_{(a_2 \sigma_3), (\sigma_4, \dots, \sigma_L)} \\ &= \dots \\ &= \sum_{a_1, \dots, a_{L-1}} A_{a_1}^{\sigma_1} A_{a_1, a_2}^{\sigma_2} \dots A_{a_{L-2}, a_{L-1}}^{\sigma_{L-1}} A_{a_{L-1}}^{\sigma_L} \end{aligned} \quad (2.11)$$

のように行列 $A^{\sigma_1}, \dots, A^{\sigma_L}$ の積の形で書くことができる。したがって、波動関数 (2.8) は

$$|\Psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} A^{\sigma_1} A^{\sigma_2} \dots A^{\sigma_{L-1}} A^{\sigma_L} |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle \quad (2.12)$$

という形式で書くことができる。これを行列積状態 (matrix product state, MPS) と呼ぶ。

このように波動関数を表現すると、SVD において小さい特異値の切り捨てを行い、各行列 A^{σ_i} の次元をある値 m に制限することで、2.1.1 節で紹介したような状態数の削減を行うことができる。 m を MPS のボンド次元と呼ぶ。

ここで、SVD で現れる行列 U は $U^\dagger U = 1$ を満たしていることから

$$\delta_{a_l, a'_l} = \sum_{a_{l-1} \sigma_l} U_{a_l, (a_{l-1}, \sigma_l)}^\dagger U_{(a_{l-1}, \sigma_l), a'_l} = \sum_{a_{l-1} \sigma_l} A_{a_l, a_{l-1}}^{\sigma_l \dagger} A_{a_{l-1}, a'_l}^{\sigma_l} = \sum_{\sigma_l} (A^{\sigma_l \dagger} A^{\sigma_l})_{a_l, a'_l} \quad (2.13)$$

すなわち

$$\sum_{\sigma_l} A^{\sigma_l \dagger} A^{\sigma_l} = I \quad (2.14)$$

が成立する。このことから、特に系の左側から SVD を繰り返して得られた波動関数 (2.12) を左正準 (left canonical) であると言う。

上記の計算では、系の左側すなわちサイト 1 から SVD を実行したが、系の右側から SVD を実行すれば

$$\begin{aligned} \Psi^{\sigma_1, \dots, \sigma_L} &= \Psi_{(\sigma_1, \dots, \sigma_{L-1}), \sigma_L} = \sum_{a_{L-1}} U_{(\sigma_1, \dots, \sigma_{L-1}), a_{L-1}} S_{a_{L-1}} V_{a_{L-1}, \sigma_L}^\dagger \\ &\equiv \sum_{a_{L-1}} \Psi_{(\sigma_1, \dots, \sigma_{L-2}), (\sigma_{L-1} a_{L-1})} B_{a_{L-1}}^{\sigma_L} \\ &= \sum_{a_{L-2}, a_{L-1}} U_{(\sigma_1, \dots, \sigma_{L-2}), a_{L-2}} S_{a_{L-2}} V_{a_{L-2}, (\sigma_{L-1} a_{L-1})}^\dagger B_{a_{L-1}}^{\sigma_L} \\ &= \sum_{a_{L-2}, a_{L-1}} \Psi_{(\sigma_1, \dots, \sigma_{L-3}), (\sigma_{L-2} a_{L-2})} B_{a_{L-2}, a_{L-1}}^{\sigma_{L-1}} B_{a_{L-1}}^{\sigma_L} \\ &= \dots = \sum_{a_1, a_{L-1}} B_{a_1}^{\sigma_1} B_{a_1, a_2}^{\sigma_2} \dots B_{a_{L-2}, a_{L-1}}^{\sigma_{L-1}} B_{a_{L-1}}^{\sigma_L} \end{aligned} \quad (2.15)$$

となり、波動関数 (2.8) は

$$|\Psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} B^{\sigma_1} B^{\sigma_2} \dots B^{\sigma_{L-1}} B^{\sigma_L} |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle \quad (2.16)$$

という形式で書くことができる。

この場合も SVD で現れる行列 V^\dagger は $V^\dagger V = 1$ を満たすことから

$$\delta_{a_l, a'_l} = \sum_{\sigma_{l+1}^{a_{l+1}}} V_{a_l, (a_{l+1}, \sigma_{l+1})}^\dagger V_{(a_{l+1}, \sigma_{l+1}), a'_l} = \sum_{\sigma_{l+1}^{a_{l+1}}} B_{a_l, a_{l+1}}^{\sigma_{l+1}} B_{a_{l+1}, a'_l}^{\sigma_{l+1}^\dagger} = \sum_{\sigma_{l+1}} (B^{\sigma_{l+1}} B^{\sigma_{l+1}^\dagger})_{a_l, a'_l} \quad (2.17)$$

すなわち

$$\sum_{\sigma_l} B^{\sigma_l} B^{\sigma_l^\dagger} = I \quad (2.18)$$

が成立する。このことから、系の右側から SVD を繰り返して得られた波動関数 (2.16) を右正準 (right canonical) であると言う。

同様に、系の両側から SVD を実行すれば波動関数を

$$|\Psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} A^{\sigma_1} \dots A^{\sigma_{l-1}} M^{\sigma_l} B^{\sigma_{l+1}} \dots B^{\sigma_L} |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle \quad (2.19)$$

と表すこともできる。ここで行列 A, B はそれぞれ (2.14), (2.18) を満たしている。このような波動関数を混合正準 (mixed canonical) であると言う。

行列積演算子 (MPO)

上で考えた 1 次元 L サイトの量子系の波動関数に作用する任意の演算子 O は次のように表すことができる。

$$\begin{aligned} O &= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L, \sigma'_1, \dots, \sigma'_L} c_{\sigma_1, \dots, \sigma_L, \sigma'_1, \dots, \sigma'_L} |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle \langle \sigma'_1, \dots, \sigma'_L| \\ &= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L, \sigma'_1, \dots, \sigma'_L} c_{(\sigma_1, \sigma'_1), \dots, (\sigma_L, \sigma'_L)} |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle \langle \sigma'_1, \dots, \sigma'_L| \end{aligned} \quad (2.20)$$

MPS の場合と同様に SVD を用いて $c_{(\sigma_1, \sigma'_1), \dots, (\sigma_L, \sigma'_L)}$ を行列の積に分解することで

$$O = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L, \sigma'_1, \dots, \sigma'_L} W^{\sigma_1 \sigma'_1} W^{\sigma_2 \sigma'_2} \dots W^{\sigma_L \sigma'_L} |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle \langle \sigma'_1, \dots, \sigma'_L| \quad (2.21)$$

と書くことができる。これを行列積演算子 (matrix product operator, MPO) と呼ぶ。

MPS の最適化

基底状態の波動関数は、適当に初期化した MPS ($|\Psi\rangle$ とする) を規格化条件 $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$ の下で変分することで計算することができる。すなわち、Lagrange 未定乗数 λ を導入して

$$\langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle - \lambda \langle \Psi | \Psi \rangle \quad (2.22)$$

を最小化することになる。この最小化の手続きが終わった時点で $|\Psi\rangle$ は基底状態、 λ は基底状態のエネルギーとなる。

MPS として、混合正準な状態

$$|\Psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} A^{\sigma_1} \dots A^{\sigma_{l-1}} M^{\sigma_l} B^{\sigma_{l+1}} \dots B^{\sigma_L} |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle \quad (2.23)$$

を考えると

$$\begin{aligned}
\langle \Psi | \Psi \rangle &= \sum_{\sigma} (A^{\sigma_1} \dots A^{\sigma_{l-1}} M^{\sigma_l} B^{\sigma_{l+1}} \dots B^{\sigma_L})^* A^{\sigma_1} \dots A^{\sigma_{l-1}} M^{\sigma_l} B^{\sigma_{l+1}} \dots B^{\sigma_L} \\
&= \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{a}} \sum_{\mathbf{a}'} A_{a_1}^{\sigma_1*} A_{a_1, a_2}^{\sigma_2*} \dots A_{a_{l-2}, a_{l-1}}^{\sigma_{l-1}*} M_{a_{l-1}, a_l}^{\sigma_l*} B_{a_l, a_{l+1}}^{\sigma_{l+1}*} \dots B_{a_{L-1}}^{\sigma_L*} \\
&\quad \times A_{a'_1}^{\sigma_1} A_{a'_1, a'_2}^{\sigma_2} \dots A_{a'_{l-2}, a'_{l-1}}^{\sigma_{l-1}} M_{a'_{l-1}, a'_l}^{\sigma_l} B_{a'_l, a'_{l+1}}^{\sigma_{l+1}} \dots B_{a'_{L-1}}^{\sigma_L} \\
&= \sum_{\sigma_l} \sum_{a_{l-1}, a_l} M_{a_{l-1}, a_l}^{\sigma_l*} M_{a_{l-1}, a_l}^{\sigma_l}
\end{aligned} \tag{2.24}$$

となる³。ここで、行列 A, B が満たす性質 (2.14), (2.18) を繰り返し用いた。

また、ハミルトニアンが MPO を用いて

$$\mathcal{H} = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L, \sigma'_1, \dots, \sigma'_L} W^{\sigma_1 \sigma'_1} W^{\sigma_2 \sigma'_2} \dots W^{\sigma_L \sigma'_L} |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle \langle \sigma'_1, \dots, \sigma'_L| \tag{2.25}$$

と表されているとすると

$$\begin{aligned}
\langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle &= \sum_{\sigma, \sigma'} (A^{\sigma_1} \dots A^{\sigma_{l-1}} M^{\sigma_l} B^{\sigma_{l+1}} \dots B^{\sigma_L})^* W^{\sigma_1 \sigma'_1} \dots W^{\sigma_L \sigma'_L} A^{\sigma'_1} \dots A^{\sigma'_{l-1}} M^{\sigma'_l} B^{\sigma'_{l+1}} \dots B^{\sigma'_L} \\
&= \sum_{\sigma, \sigma'} \sum_{\mathbf{a}, \mathbf{a}', \mathbf{b}} A_{a_1}^{\sigma_1*} A_{a_1, a_2}^{\sigma_2*} \dots A_{a_{l-2}, a_{l-1}}^{\sigma_{l-1}*} M_{a_{l-1}, a_l}^{\sigma_l*} B_{a_l, a_{l+1}}^{\sigma_{l+1}*} \dots B_{a_{L-1}}^{\sigma_L*} W_{b_1}^{\sigma_1 \sigma'_1} W_{b_1, b_2}^{\sigma_2 \sigma'_2} \dots W_{b_{L-1}}^{\sigma_L \sigma'_L} \\
&\quad \times A_{a'_1}^{\sigma'_1} A_{a'_1, a'_2}^{\sigma'_2} \dots A_{a'_{l-2}, a'_{l-1}}^{\sigma'_{l-1}} M_{a'_{l-1}, a'_l}^{\sigma'_l} B_{a'_l, a'_{l+1}}^{\sigma'_{l+1}} \dots B_{a'_{L-1}}^{\sigma'_L} \\
&= \sum_{\sigma_l, \sigma'_l} \sum_{a_{l-1}, a_l} \sum_{a'_{l-1}, a'_l} \sum_{b_{l-1}, b_l} P_{b_{l-1}}^{a_{l-1}, a'_{l-1}} W_{b_{l-1}, b_l}^{\sigma_l \sigma'_l} Q_{b_l}^{a_l, a'_l} M_{a_{l-1}, a_l}^{\sigma_l*} M_{a'_{l-1}, a'_l}^{\sigma'_l}
\end{aligned} \tag{2.26}$$

と書くことができる。ここで

$$P_{b_{l-1}}^{a_{l-1}, a'_{l-1}} \equiv \sum_{a_1, \dots, a_{l-2}} \sum_{b_1, \dots, b_{l-2}} \sum_{a'_1, \dots, a'_{l-2}} \left(\sum_{\sigma_1, \sigma'_1} A_{a_1}^{\sigma_1*} W_{b_1}^{\sigma_1 \sigma'_1} A_{a'_1}^{\sigma'_1} \right) \dots \left(\sum_{\sigma_{l-1}, \sigma'_{l-1}} A_{a_{l-2}, a_{l-1}}^{\sigma_{l-1}*} W_{b_{l-2}, b_{l-1}}^{\sigma_{l-1} \sigma'_{l-1}} A_{a'_{l-2}, a'_{l-1}}^{\sigma'_{l-1}} \right) \tag{2.27}$$

$$Q_{b_l}^{a_l, a'_l} \equiv \sum_{a_{l+1}, \dots, a_{L-1}} \sum_{b_{l+1}, \dots, b_{L-1}} \sum_{a'_{l+1}, \dots, a'_{L-1}} \left(\sum_{\sigma_{l+1}, \sigma'_{l+1}} B_{a_l, a_{l+1}}^{\sigma_{l+1}*} W_{b_l, b_{l+1}}^{\sigma_{l+1} \sigma'_{l+1}} B_{a'_{l+1}}^{\sigma'_{l+1}} \right) \dots \left(\sum_{\sigma_L, \sigma'_L} B_{a_{L-1}}^{\sigma_L*} W_{b_{L-1}}^{\sigma_L \sigma'_L} B_{a'_{L-1}}^{\sigma'_L} \right) \tag{2.28}$$

とした。

したがって、(2.22) の $M_{a_{l-1}, a_l}^{\sigma_l*}$ に関する変分は

$$\begin{aligned}
&\frac{\delta}{\delta M_{a_{l-1}, a_l}^{\sigma_l*}} (\langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle - \lambda \langle \Psi | \Psi \rangle) \\
&= \sum_{\sigma'_l} \sum_{a'_{l-1}, a'_l} \sum_{b_{l-1}, b_l} P_{b_{l-1}}^{a_{l-1}, a'_{l-1}} W_{b_{l-1}, b_l}^{\sigma_l \sigma'_l} Q_{b_l}^{a_l, a'_l} M_{a'_{l-1}, a'_l}^{\sigma'_l} - \lambda M_{a_{l-1}, a_l}^{\sigma_l} = 0
\end{aligned} \tag{2.29}$$

となる。すなわち、固有方程式 (2.29) を解いて最小の固有値 λ と対応する”ベクトル”を求めることで、最小のエネルギー期待値を与える行列 M^{σ_l} を求めることができる。エネルギーや計算したい物理量の期待値が収束するまで、MPS の各サイトのテンソルについてこの固有値問題を繰り返し解くことにより、基底状態の波動関数を計算することができる。

以上は、MPS の行列を 1 サイトずつ最適化していく方法だが、例えば隣接する 2 サイトのテンソルについて同様に最適化を行うこともできる。この方法は、前節で見た DMRG の Finite system algorithm により近い方法である。

³ここで $\sum_{\sigma} \equiv \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L}$, $\sum_{\mathbf{a}} \equiv \sum_{a_1, \dots, a_{L-1}}$, $\sum_{\mathbf{a}'} \equiv \sum_{a'_1, \dots, a'_{L-1}}$.

2.1.4 周期境界条件を適用する場合の注意点

周期境界条件 (PBC) を適用して DMRG の計算を実行する場合には、サイト番号の採り方に注意が必要である。すなわち、なるべく長距離のボンドが生じないようにすることで、計算コストの増大を抑えることができる。例として最近接の相互作用しか存在しないような 1 次元の格子系を PBC で扱うことを考えると、8 サイトでのサイト番号の採り方は単純には図 2.4(a) のようになる。この場合には、サイト 1 とサイト 8 の間のボンドの距離が 7 となってしまう、長距離のボンドが生じてしまう。しかし、図 2.4(b) のようにサイト番号を採るとボンドの距離は最大でも 2 である。一般に L サイトの系で計算する場合には、図 2.4(a) の方法ではボンドの距離は最大で $L - 1$ となるため、系のサイズを大きくしていくとボンドの最大距離が更に大きくなっていくことが分かる。一方で、図 2.4(b) の方法ではボンドの最大距離は系のサイズに関係なく常に 2 である。本論文でも、PBC を適用して DMRG 計算を行う場合には、常に図 2.4(b) のようなサイト番号の採り方を用いている。

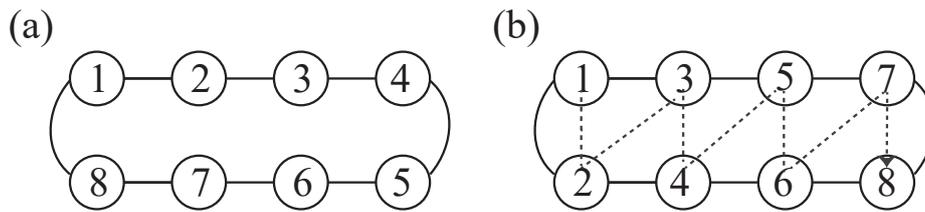


図 2.4: 8 サイトの周期的な 1 次元鎖の図。(a) ではボンドの距離は最大で 7 であるが、(b) のように矢印に沿ってサイト番号をつけた場合にはボンドの距離は最大でも 2 である。

第3章 スピン $\frac{1}{2}$ 反強磁性 Heisenberg 鎖における異方的スピン S 不純物の効果

3.1 研究の背景

3.1.1 磁性不純物の効果に関する先行研究

物質中における不純物の存在が、その物性を定量的に変化させることはよく知られている。例えば、不規則な金属は無欠陥の金属に比べ高い抵抗率を持つと考えられ [23]、超伝導状態への転移温度も不純物の存在によって変化することがある [24]。また、不純物によって系の定性的な性質が変化することもある。例えば、金属は Anderson 局在と呼ばれる無秩序性に伴った現象により絶縁体に変化することがある [25, 26]。不純物によるこうした定性的な性質の変化は、磁性体でも起こることがある。量子スピン系における不純物効果の例としては、ハルデン物質 $\text{Ni}(\text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2)_2\text{NO}_2(\text{ClO}_4)$ に Cu をドーブした時に、Cu イオンの両端に自由な $S = \frac{1}{2}$ スピンが現れることが知られている [27]。また、スピンパイエルス物質 CuGeO_3 に低濃度の非磁性不純物をドーブすることで、長距離の磁気秩序が誘起されることも分かっている [28, 29, 30]。同様の観測はスピン $\frac{1}{2}$ 梯子鎖物質 SrCu_2O_3 でも行われており、1% の Zn ($S_{\text{imp}} = 0$) をドーブすることで、反強磁性的な振る舞いが現れることが確認されている (以後、不純物スピンの大きさを S_{imp} と表すことにする。非磁性不純物の場合は $S_{\text{imp}} = 0$ と表す。)。さらにこの物質では、不純物濃度を増加させることで Néel 温度が上昇することが確認されている [31]。

こうした物質の中でも、スピン $\frac{1}{2}$ 物質である Sr_2CuO_3 と SrCuO_2 [図 3.1] は 1 次元 $S = \frac{1}{2}$ 反強磁性 Heisenberg 模型でよく記述される代表的な物質であり [32]、これらの物質についても実験による不純物効果の研究がいくつか行われている。交換相互作用の値はそれぞれ $J = 2200 \pm 200\text{K}$, $J = 2100 \pm 200\text{K}$ で、鎖間相互作用はそれぞれ $J_{\perp} \sim 10^{-5}J$, $J' = (0.1 - 0.2)|J|$ であり [図 3.2]、それぞれ $T_N = 5.4\text{K}$ と $T_N = 2\text{K}$ までは磁気秩序を生じないため、広い温度領域において理想的な 1 次元鎖とみなせることが知られている [32]。実験により、 Sr_2CuO_3 に Pd^{2+} イオン ($S_{\text{imp}} = 0$) をドーブすることで、Néel 温度が減少することが明らかにされている [6]。一方で、スピン $\frac{1}{2}$ Heisenberg 鎖に $S_{\text{imp}} = 1$ 不純物をドーブすると、不純物スピンの最近接の 2 つのスピンとシングレットを形成し、スピン自由度がスクリーンされることが知られている [9, 33]。非磁性不純物と同様に、 $S_{\text{imp}} = 1$ 不純物にシングレットが形成されることで、スピン $\frac{1}{2}$ Heisenberg 鎖の並進対称性が壊れ、有限長の鎖に切断される。これによってスピノンが閉じ込められ、低エネルギーの励起にスピンギャップが生じる。この効果は実験的にも確認されており、 SrCuO_2 に Ni ($S_{\text{imp}} = 1$) を低濃度ドーブすることで、大きなスピン擬ギャップが生じることが分かっている [34]。Ni ($S_{\text{imp}} = 1$) のドーブによるスピン擬ギャップは、 Sr_2CuO_3 においても観測されている [35]。一方で、実験によりスピン鎖物質に $S_{\text{imp}} = 0, 1$ 不純物をドーブすることで、長距離の磁気秩序が形成される温度が抑制されることが明らかにされている [7]。また、 SrCuO_2 のスピン $\frac{1}{2}$ 磁性イオン Cu^{2+} を別のスピン $\frac{1}{2}$ イオン Co^{2+} で置換することで、バルクでの振る舞いが Heisenberg から Ising 型へ変わることが確認されている [8]。これにより、Ising 型 (又は XXXZ 型) の異方性によって誘起される磁気秩序化温度が上昇するが、スピン励起のギャップレス性は変わらない。Co 系のスピン $\frac{1}{2}$ Ising 鎖物質である $\text{BaCo}_2\text{V}_2\text{O}_8$ [36] や $\text{SrCo}_2\text{V}_2\text{O}_8$ [37] でも Néel 型の秩序化と同様の振る舞いが確認されている。しかし、Co をドーブした SrCuO_2 では NMR 測定から、低温で頂点が凹んだ非常に幅の広いスペクトルが確認されており [図 3.3]、スピン格子緩和率 T_1^{-1} が低温でギャップ的な減少に従わず [図 3.4]、 Co^{2+} がスピン $\frac{3}{2}$ イオンとして振る舞う可能性も示唆されている [38]。

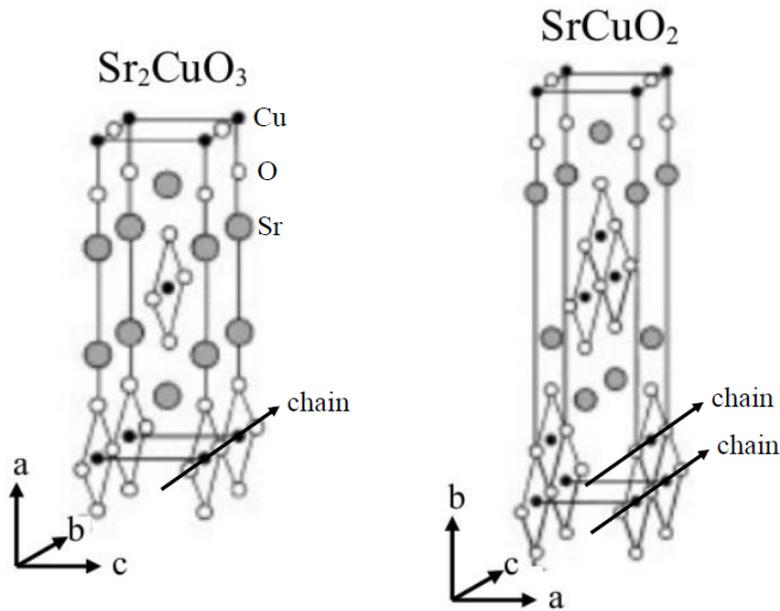


図 3.1: Sr_2CuO_3 と SrCuO_2 の結晶構造の模式図 [32]

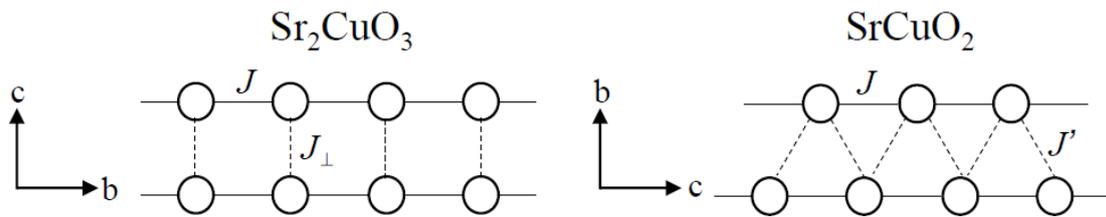


図 3.2: Sr_2CuO_3 と SrCuO_2 の Cu 鎖の模式図

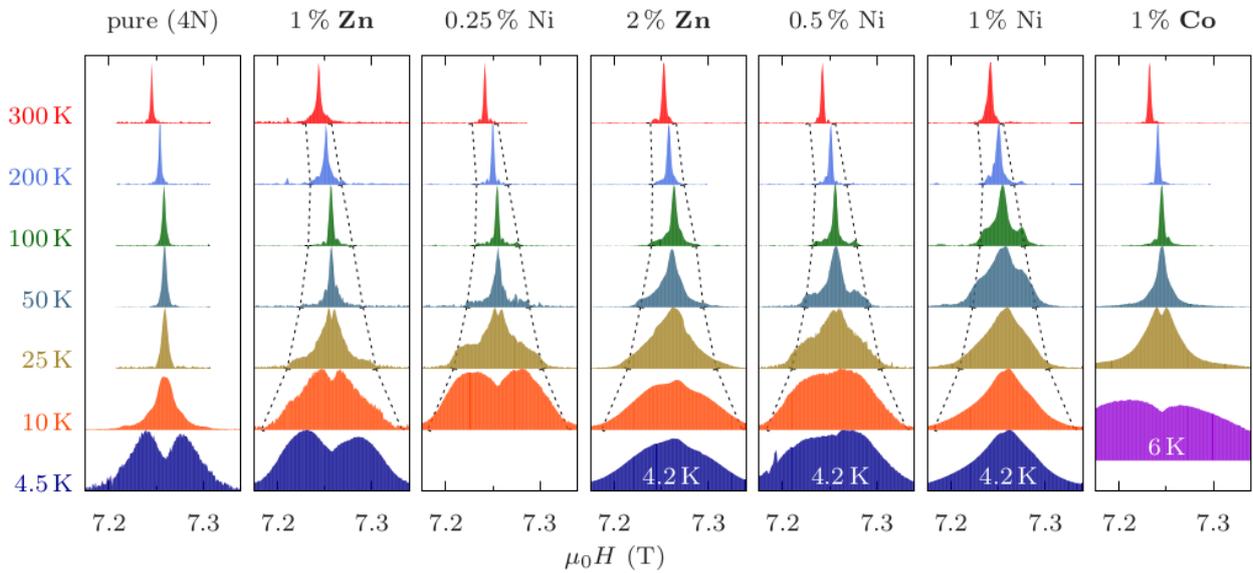


図 3.3: SrCuO_2 , $\text{SrCu}_{1-x}\text{Zn}_x\text{O}_2$, $\text{SrCu}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}_2$, $\text{SrCu}_{0.99}\text{Co}_{0.01}\text{O}_2$ の 80 MHz, $H \parallel b$ の磁場の高磁場側での ^{63}Cu NMR スペクトル [38]

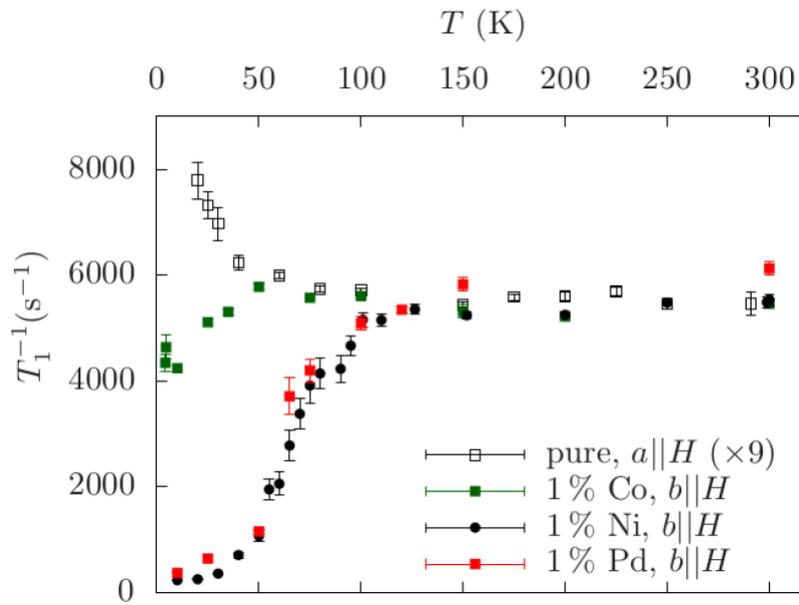


図 3.4: SrCuO_2 , $\text{SrCu}_{0.99}\text{Co}_{0.01}\text{O}_2$, $\text{SrCu}_{0.99}\text{Ni}_{0.01}\text{O}_2$, $\text{SrCu}_{0.99}\text{Pd}_{0.01}\text{O}_2$ のスピン格子緩和率 T_1^{-1} [38]

低次元物質に非磁性不純物や磁性不純物 (特に $S_{\text{imp}} = 1$) をドーブした場合の効果については、場の理論や繰り込み群による理論的な解析 [9, 10, 11] や量子モンテカルロ法等の数値的研究 [12, 13] がなされている。等方的なスピン $\frac{1}{2}$ 不純物をドーブしたスピン $\frac{1}{2}$ 鎖における場の理論や DMRG による数値的研究では、近藤効果に類似した不純物スピンのオーバースクリーニングが期待される [10, 39, 40]。しかし、 $S_{\text{imp}} = \frac{1}{2}$ 不純物についての実験結果は不純物スピンの異方性の効果の重要性を示している。また、 $S_{\text{imp}} > 1$ の磁性不純物の効果についてはほとんど理論的な研究が行われていない。

本章では以上を背景として、スピン $\frac{1}{2}$ 反強磁性 Heisenberg 鎖に XXZ 型の異方性を持つスピン S 不純物をドーブした場合の効果、DMRG とクラスター平均場理論 (CMFT) を用いた数値計算により研究した結果を述べる。まず、基底状態において単一のスピン S 不純物が存在する場合の効果、反強磁性スピン相関や Néel 秩序の不安定性、局所スピン感受率等を DMRG を用いて計算することで調べた。それらの結果から、スピン S 不純物が以下の 2 種類に分類されることを明らかにした。すなわち、(i) 非磁性 ($S = 0$) と $S = 1$ の不純物は短距離の反強磁性相関のみを増大させ、(ii) $S = \frac{1}{2}$ と $S > 1$ の不純物は長距離の反強磁性秩序を安定化させる。そこで、(ii) の不純物の例として $S = \frac{1}{2}$ 不純物の場合に着目し、反強磁性の秩序変数であるスタッガード磁化を計算することで、容易軸異方性を持つ $S = \frac{1}{2}$ 不純物が有限の濃度ドーブされることで、長距離の反強磁性秩序が安定化することを確かめた。さらに、磁化曲線を計算することで、不純物によって磁化曲線にプラトーのような構造や擬ギャップ的な構造が現れることを明らかにした。また、いくつかの結果について CMFT でも同様の結果が得られることを確認した。最後に、CMFT を用いて比熱や磁化率の温度依存性を計算した。それらの結果から、XXZ 不純物によって低温で実現した反強磁性状態が高温で常磁性状態へと転移する様子を確認し、不純物濃度の増加とともに転移温度が上昇することを確かめた。

3.1.2 1次元スピン $\frac{1}{2}$ XXZ 模型の性質

後の計算結果の理解のため、1次元スピン $\frac{1}{2}$ XXZ 模型について基本的な性質をまとめる [41, 42]。1次元スピン $\frac{1}{2}$ XXZ 模型のハミルトニアンは次のように表される。

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= J \sum_i (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + \Delta S_i^z S_{i+1}^z) \\ &= J \sum_i \left[\frac{1}{2} (S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+) + \Delta S_i^z S_{i+1}^z \right]\end{aligned}\quad (3.1)$$

ここで S_i^α ($\alpha = x, y, z$) はスピン $1/2$ の演算子、 S_i^\pm はスピンの昇降演算子で $S_i^\pm = S_i^x \pm i S_i^y$ である。このハミルトニアンは 1 サイト置きにスピンを z 軸の周りに π だけ回転させる正準変換 $S_l^x \rightarrow (-1)^l S_l^x, S_l^y \rightarrow (-1)^l S_l^y, S_l^z \rightarrow S_l^z$ によって $J \rightarrow -J, \Delta \rightarrow -\Delta$ と変換されるから、 $J > 0$ として全ての Δ の場合を調べれば、 $J < 0$ の場合についても分かる。以下では、 $J > 0$ とする。

基底状態

基底状態及び励起状態の性質は、Bethe 仮設や数値計算等の方法で調べられており、基底状態は Δ の値によって以下の性質を持つ。

・ $\Delta > 1$ (反強磁性相): 基底状態は容易軸に反強磁性の長距離秩序を持った状態であり、秩序変数であるスタガード磁化 $m_{\text{st}}^z = \frac{1}{L} |\sum_i (-1)^i \langle S_i^z \rangle|$ (L はサイト数) が熱力学極限 $L \rightarrow \infty$ で有限の値を持つ。スタガード磁化は $\Delta \rightarrow \infty$ で 0.5 であり、 Δ が 1 に近づくとき

$$m_{\text{st}}^z = \frac{\pi}{2(\Delta - 1)} e^{-\pi^2 / (2\sqrt{2(\Delta-1)})} \quad (3.2)$$

の形で 0 に近づく。 $\Delta = 1$ ではスタガード磁化が 0 から連続的に変化する連続相転移が起こる。また、無限系での基底状態は反強磁性の長距離秩序のため 2 重に縮退しており、有限のスピンギャップを持つ。ギャップは Δ が 1 に近づくとき

$$E_G \simeq 4\pi J e^{-\pi^2 / (2\sqrt{2(\Delta-1)})} \quad (3.3)$$

の形で 0 に近づく [43]。

・ $\Delta = 1$: 系は反強磁性 Heisenberg 模型 $\mathcal{H} = J \sum_i S_i \cdot S_{i+1}$ と同等である。この場合は任意の軸周りに全てのスピンを同じ角度だけ回転させてもハミルトニアンは変わらず、系は $SU(2)$ 対称性を持っているため、 $SU(2)$ Heisenberg 模型とも呼ばれる。基底状態は磁気秩序を持たず、縮退が無い。また、熱力学極限でスピンギャップは 0 となる。スピン相関関数は遠方で

$$\langle S_i^\alpha S_j^\alpha \rangle \sim \frac{(-1)^{i-j} (\log |i-j|)^{1/2}}{|i-j|} \quad (3.4)$$

の形で減衰する [44, 45]。熱力学極限での基底状態のエネルギーは Bethe 仮設により求められており [46, 47]、

$$\frac{E}{LJ} \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \frac{1}{4} - \log 2 \simeq -0.443 \quad (3.5)$$

である。

・ $|\Delta| < 1$ (XY 相): 基底状態は磁気秩序を持たず、縮退が無い。スピン相関関数は遠方で

$$\langle S_i^x S_j^x \rangle = \langle S_i^y S_j^y \rangle \sim \frac{(-1)^{i-j}}{|i-j|^\eta} \quad (3.6)$$

$$\langle S_i^z S_j^z \rangle \sim \frac{(-1)^{i-j}}{|i-j|^{1/\eta}} \quad (3.7)$$

の形で減衰し、 xy 面内での反強磁性相関が強くなっている。ここで指数 η は

$$\eta = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arcsin \Delta \quad (3.8)$$

と表される。また、熱力学極限でスピギャップは 0 である。

・ $\Delta < -1$ (強磁性相): 基底状態は全てのスピが S^z 方向を向いた強磁性状態であり、2重に縮退している。 $\Delta = -1$ では自発磁化 $m^z = \frac{1}{L} |\sum_i \langle S_i^z \rangle|$ が 0 から 0.5 に不連続に変化する相転移が起こる。また、スピンの励起にはエネルギーギャップ

$$E_G = -(1 + \Delta)J \quad (3.9)$$

が存在する。

磁化曲線

z 方向に一樣に磁場 h_z をかけた時の磁化 $m^z = \frac{1}{L} \sum_i \langle S_i^z \rangle$ を h_z に対してプロットしたものを磁化曲線と呼ぶ。このとき系のハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = J \sum_i \left[\frac{1}{2} (S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+) + \Delta S_i^z S_{i+1}^z \right] - h_z \sum_i S_i^z \quad (3.10)$$

である。 $\Delta > 1$ では、基底状態に反強磁性の長距離秩序が存在し、スピギャップに相当する h_z で磁化が有限になる。この h_z の値は、ベータ仮説により厳密解が得られており $\Delta = \cosh \gamma$ として

$$h_c = J \frac{2\pi \sinh \gamma}{\gamma} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\cosh[(2n+1)\pi^2/\gamma]} \quad (3.11)$$

である [43, 48]。 $\Delta = 1, |\Delta| < 1$ では、基底状態にスピギャップは存在せず無限小の h_z で磁化は有限になる。どちらの場合も h_z を大きくしていけばある $h_z = h_c$ で磁化が飽和し $m^z = 0.5$ となる。この飽和磁場の値は、 $h_c = J(1 + \Delta)$ で与えられる。また、 $\Delta < -1$ では $h_z \geq 0$ で常に $m^z = 0.5$ である。図 3.5 に磁場下での基底状態相図を示す。

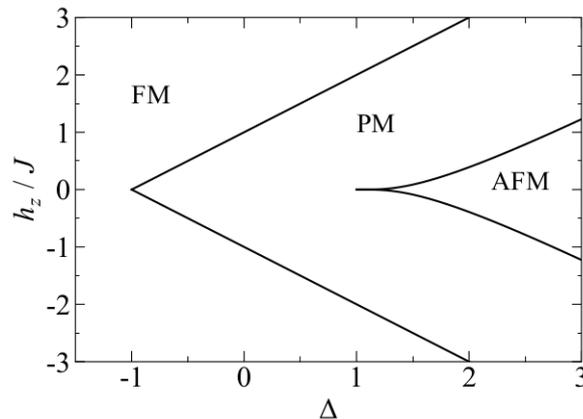


図 3.5: 1次元スピン $\frac{1}{2}$ XXZ 模型の磁場下での基底状態相図

磁化率

z 方向の磁場に対する磁化率の温度依存性も少数サイトでの数値計算、ベータ仮設やボソン化法等の方法で求められている [49, 50]。温度 T でのサイトあたりの磁化率は次式で与えられる。

$$\chi(T) = \frac{1}{T} \sum_i \langle S_i^z S_0^z \rangle \quad (3.12)$$

$\Delta > 1$ の場合は、スピンギャップ E_G が存在するため絶対零度での磁化率は 0 となるが、有限温度では熱励起により有限の磁化率を持つ。低温での磁化率は $\exp(-E_G/k_B T)$ に比例して急激に減少する。 $-1 < \Delta \leq 1$ では、系はギャップレスであり磁化率は $T = 0$ で有限の値を持つ。その値は $\Delta = \cos \theta$ として、

$$\chi(0) = \frac{\theta}{J\pi(\pi - \theta) \sin \theta} \quad (3.13)$$

で与えられる [50]。反強磁性 Heisenberg 模型 ($\Delta = 1$) では $\theta = 0$ で $\chi(0) = 1/J\pi^2$ となり、強磁性 Heisenberg 模型では発散する。また、反強磁性 Heisenberg 模型の場合の磁化率は、定数 T_0 を用いて低温で

$$\chi(T) \simeq \frac{1}{J\pi^2} \left(1 + \frac{1}{2 \log(T_0/T)} \right) \quad (3.14)$$

のように温度変化する [50]。図 3.6 に 1 次元反強磁性 Heisenberg 模型の磁化率の温度依存性を示す。

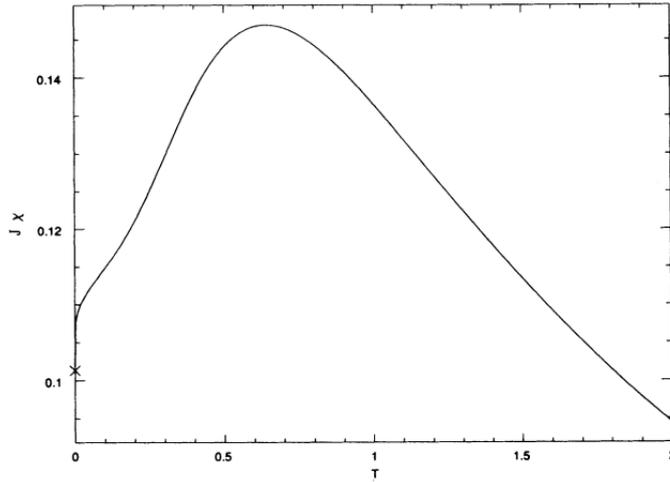


図 3.6: 1 次元反強磁性 Heisenberg 模型の磁化率の温度依存性 [50]。

比熱

低温での比熱の振る舞いは、Bethe 仮設により求められている [51]。 $|\Delta| < 1$ で、低温での比熱は $\Delta = \cos \theta$ として

$$C_v(T) = \frac{2\theta}{3J \sin \theta} T \quad (3.15)$$

のように振る舞う。 $|\Delta| > 1$ では、比熱は低温で

$$C_v(T) \propto T^{-3/2} \exp(-E_G/T) \quad (3.16)$$

の形で 0 に近づく。

3.2 模型と計算手法

3.2.1 不純物をドーブしたスピン $\frac{1}{2}$ 反強磁性 Heisenberg 鎖

本研究では、スピン $\frac{1}{2}$ 反強磁性 Heisenberg 鎖にスピン S の不純物をドーブした模型を考える。不純物は容易軸に対する異方性を持ち最近接サイトと XXZ 模型のように相互作用すると仮定する。系のハミルトニアンは、次のように表される。

$$\mathcal{H} = \sum_{i \notin \text{imp}} \left[\frac{1}{2} (S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+) + S_i^z S_{i+1}^z \right] + \sum_{j \in \text{imp}} \left[\frac{1}{2} (S_{j-1}^- + S_{j+1}^-) S_{\text{imp},j}^+ + \text{H.c.} + \Delta_{\text{imp}} (S_{j-1}^z + S_{j+1}^z) S_{\text{imp},j}^z \right] \quad (3.17)$$

ここで S_i は非不純物サイト i のスピン $\frac{1}{2}$ の演算子であり、 $S_{\text{imp},j}$ は不純物サイト j のスピン S の演算子、 Δ_{imp} は不純物サイトと最近接サイト間の交換相互作用の XXZ 異方性である。非不純物サイト間の交換相互作用は等方的である [3.7(a)]。また、隣接する不純物サイト間の XXZ 異方性も Δ_{imp} とする [3.7(b)]。不純物の濃度 n_{imp} は N_{imp}/N_c で定義される。ここで N_{imp} は不純物の数であり、 N_c はサイト数である。 $S_{\text{imp}} = 1/2$ の場合、系は $n_{\text{imp}} = 1$ で XXZ 異方性が Δ_{imp} のスピン $1/2$ XXZ 模型に対応する。

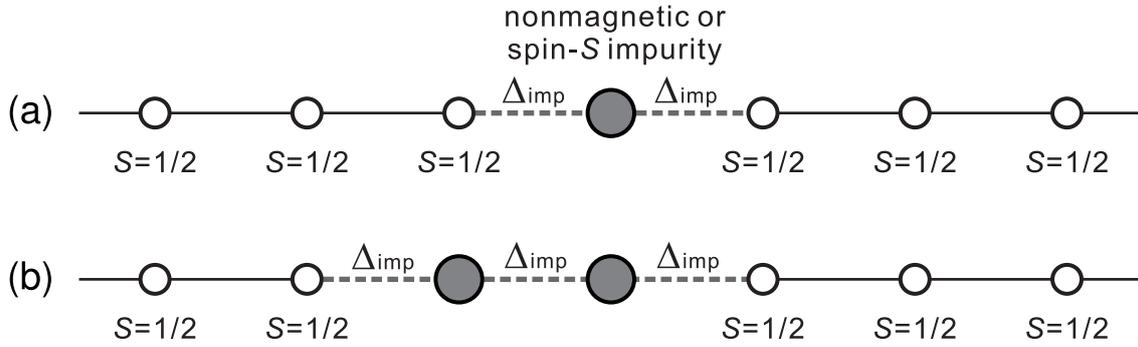


図 3.7: (a) 非磁性又はスピン S の不純物をドーブしたスピン $\frac{1}{2}$ 反強磁性 Heisenberg 鎖の模式図。不純物をドーブしたサイトは最近接サイトと XXZ 型の相互作用をする。(b) 不純物サイトが隣接する場合の模式図。隣接する不純物サイト間の交換相互作用の XXZ 異方性も Δ_{imp} である。

与えられた N_{imp}, N_c に対して、不純物はランダムに配置される。すなわち、系に不純物がドーブされていない長さ l の部分が存在する確率は、次の式で与えられる。

$$P(l) = n_{\text{imp}} \exp \left[-\frac{n_{\text{imp}}}{\sqrt{1 - n_{\text{imp}}}} l \right] \quad (3.18)$$

不純物がドーブされていない部分の長さの平均値は $\bar{l} = (1 - n_{\text{imp}})/n_{\text{imp}}$ となる。

3.2.2 DMRG

不純物をドーブした $S = 1/2$ Heisenberg 鎖の基底状態での性質を調べるため、DMRG [4] を用いた数値計算を行う。DMRG は 1 次元系の基底状態を厳密に計算するのに非常に適した手法であり、今回のような 1 次元スピン系では数千サイトの系を扱うことが可能であり、不純物がランダムにドーブされた系のバルクの性質を議論することが可能である。以下の計算では最大で $m = 6000$ までの状態数をとって計算を行い、discarded weight は 10^{-13} 未満である。また、計算する物理量によって開境界条件 (OBC) 又は周期境界条件 (PBC) を用いて計算している。

3.2.3 クラスタ平均場理論 (CMFT)

さらに有限温度における磁性不純物の効果を調べるため、クラスタ平均場理論 (cluster mean-field theory, CMFT) を用いた計算も行う。CMFT は、有限サイズのクラスタの相互作用の一部を平均場近似し、収束するまで秩序変数の値を繰り返し求める手法である [52]。この手法は通常平均場近似と異なり、平均場近似していない部分の相互作用は厳密に扱われるため、量子効果がある程度厳密に取り込めるという利点がある。本研究では、 N_c サイトのクラスタを用意し、両端のスピン S_1 と S_{N_c} の間の交換相互作用を平均場近似 $S_1 \cdot S_{N_c} \simeq \langle S_{N_c} \rangle \cdot S_1 + \langle S_1 \rangle \cdot S_{N_c} - \langle S_1 \rangle \cdot \langle S_{N_c} \rangle$ し、完全対角化を用いて秩序変数の計算を行った。この方法で、不純物濃度が最大 $n_{\text{imp}} = (N_c - 2)/N_c$ の場合まで計算することが可能である。また、物理量の計算については、不純物サイトの分布をランダムに N_{av} 通りとって計算し、計算結果の平均をとることで計算した。計算結果では基本的に $N_c = 10$ サイトでの結果を示しているが、有限サイズスケーリングを行う場合には、より大きなサイト数での計算を行っている。

CMFT では相互作用を一部平均場近似して扱うことで対称性の破れを導入しているため、有限温度での相転移を再現することができる。本来、純粋な 1 次元系においては連続対称性の破れた有限温度相転移は起こり得ないことが Mermin-Wagner の定理によって知られている [53, 54]。しかし、現実の物質系においては 1 次元のスピン鎖と他のスピン鎖の間に弱い交換相互作用が存在し、有限温度における相転移が実際に観測されるため、このような計算は物理的に意味を持っている。

3.3 基底状態に関する計算結果

スピン $1/2$ 反強磁性 Heisenberg 鎖における磁性不純物の効果を基底状態については DMRG、有限温度については完全対角化を用いたクラスタ平均場理論 (CMFT) による数値計算で解析する。

3.3.1 スピン相関に対する単一不純物の効果

まず、基底状態においてスピン $1/2$ Heisenberg 鎖にスピン S の XXZ 不純物を一つだけドープした場合の効果調べる。これは現実の物質において、磁性不純物の濃度が非常に低い場合に相当する。反強磁性 Heisenberg 鎖を考えているため、スピン相関として次式で定義される反強磁性のスピン相関関数について、不純物からの距離に対する依存性を DMRG を用いて計算する。

$$C_s(i, j) = (-1)^{|i-j|} \langle S_i^z S_j^z \rangle \quad (3.19)$$

ここで、 $\langle \mathcal{O} \rangle$ は演算子 \mathcal{O} の基底状態における期待値を表す。また、不純物の隣のサイトのサイト番号を 1 とする。

非磁性不純物

非磁性不純物 ($S_{\text{imp}} = 0$) をドープした場合には、不純物の近くの短距離の反強磁性スピン相関が増大することが理論的に示唆されている [55, 56]。ここでは、それを確かめるとともに長距離のスピン相関の振る舞いについても見ていく。非磁性不純物 ($S_{\text{imp}} = 0$) をドープすることは、そのドープしたサイトで 1 次元鎖を切ることに対応するため、非磁性不純物の両側のスピン間には相関は存在しない。したがって、開境界条件 (OBC) を用いて計算を行えば良い。

$S_{\text{imp}} = 0$ の場合の短距離でのスピン相関 $C_s(1, r)$ を不純物の無い $S = 1/2$ Heisenberg 鎖のバルクでの値と比較したのが、図 3.8(a) である。 $S_{\text{imp}} = 0$ の不純物によって、サイト 1 とサイト 2 間の反強磁性相関の値は $C_s(1, r) = 0.1456$ から $C_s(1, r) = 0.2172$ に増加する。これらの値は、ベータ仮設の結果ともよく一致している [46, 57]。このようなスピン相関の増大は、 r が偶数の場合に確認できるが、これは先行研究での数値計算の結果とも一致している [55]。そこで長距離でのスピン相関を対数プロットしたのが、図 3.8(b) である。 $C_s(1, r)$ は正の値を保ちながら漸近的に振る舞うため、このようなスピン相関の

振動は長距離でも維持されることが確認できる。また、 $S_{\text{imp}} = 0$ の場合に相関関数は $r^{-1.5}$ に比例して減衰することが分かる。一方で元の $S = 1/2$ Heisenberg 鎖の場合は r^{-1} に比例して減衰するため、非磁性不純物をドーピングした場合は、長距離でのスピン相関の減衰が速くなることが分かる。まとめると、非磁性不純物によって短距離の反強磁性相関は増大するが、長距離の反強磁性相関は抑制される。

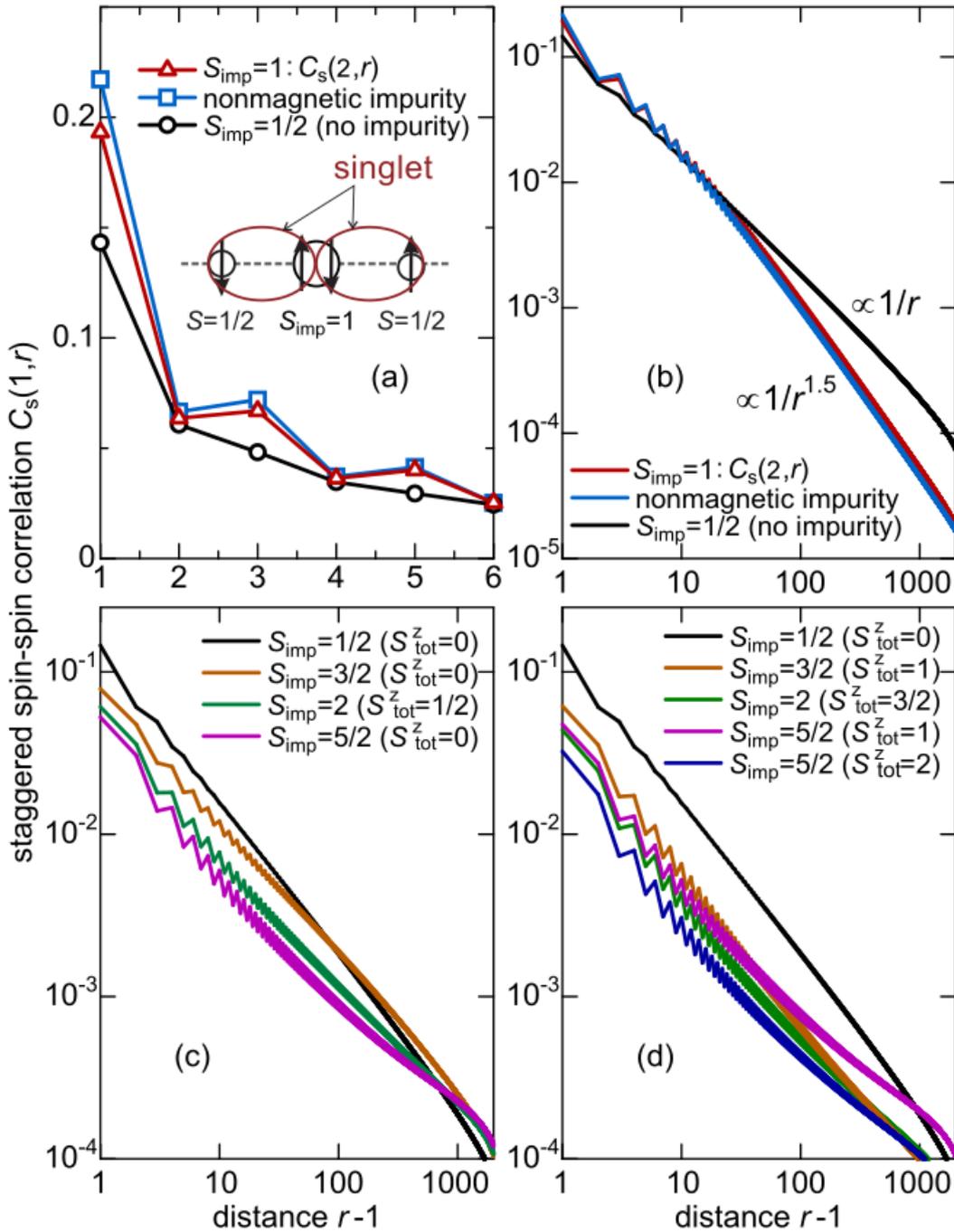


図 3.8: (a),(b) 非磁性不純物をドーピングした場合の短距離及び長距離での反強磁性スピン相関関数 $C_s(1, r)$ と、 $S_{\text{imp}} = 1$ の不純物をドーピングした場合の反強磁性スピン相関関数 $C_s(2, r)$ の DMRG による計算結果。(a) のインセット: $S_{\text{imp}} = 1$ の不純物が隣の $1/2$ スピンとシングレットを形成する。(c),(d) $S_{\text{imp}} > 1$ の不純物の場合の $C_s(1, r)$ の対数プロット。全ての図で比較のために元の $S = 1/2$ Heisenberg 鎖の結果を黒線でプロットしている。

$\Delta_{\text{imp}} = 1$ の磁性不純物

次に磁性不純物の効果について調べる。非磁性不純物の場合と異なり、磁性不純物の両側のスピンは相関が存在するため、open chain の端を磁性不純物で置き換えるのは適切ではない。したがって、次

のような方法で相関関数の計算を行う。まず $L = 2000 - 4000$ サイトの open chain を用意し片方の端から 500 番目のサイトを磁性不純物で置き換える。そして、501 番目のサイトを $i = 1$ とし、磁性不純物からの距離 r をもう片方の端の方向にとり、相関関数 $C_s(1, r+1)$ を計算する。これにより系の端に生じる Friedel 振動の影響を抑えることができる。この節では、 $\Delta_{\text{imp}} = 1$ の場合の磁性不純物の効果を確認する。

まず図 3.8(a) に示すように、 $S_{\text{imp}} = 1$ の場合は、反強磁性相関関数は非磁性不純物の場合と同様に振る舞う。スピン相関の値は $S_{\text{imp}} = 1$ 不純物の付近で増大し、元の $S = 1/2$ Heisenberg 鎖のバルクの値 $C_s(1, 2) = 0.1456$ から $C_s(2, 3) = 0.1933$ に増大する。ここで、 $S_{\text{imp}} = 1$ の場合には $C_s(1, j)$ ではなく $C_s(2, j)$ の結果を示している。これは $S_{\text{imp}} = 1$ の不純物が $1/2$ スピン 2 つに分解され、それぞれが隣の 2 サイトの $1/2$ スピンとシングレットを形成し、これら 3 つのサイトが非磁性不純物として振る舞うと考えることで説明できる [図 3.8(a) のインセット]。したがって、短距離において $S_{\text{imp}} = 1$ の場合の $C_s(2, j)$ は、非磁性不純物の場合の $C_s(1, j)$ とほぼ等しい値になることが確認できる。また、図 3.8(b) に示すように長距離においても非磁性不純物と同様に、 $S_{\text{imp}} = 1$ の場合に $C_s(2, j)$ は $r^{-1.5}$ に比例して減衰することが分かる。以上のことから、スピン相関に対する $S_{\text{imp}} = 1$ の不純物の効果は定性的・定量的に非磁性不純物とほぼ同等であり、 $S_{\text{imp}} = 1$ の不純物が隣の $1/2$ スピンとシングレットを形成することで、非磁性不純物として振る舞うことが示唆される。

次に、 $S_{\text{imp}} > 1$ の不純物の場合の反強磁性相関関数の計算結果を図 3.8(c), (d) に示す。ここで、 $\Delta_{\text{imp}} = 1$ の不純物をドーブした場合には、Marshall-Lieb-Mattis の定理 [58, 59] にしたがって基底状態は S_{imp} が半奇数の場合には $S_{\text{tot}}^z = 0, 1, \dots, S_{\text{imp}} - \frac{1}{2}$ セクターで、 S_{imp} が整数の場合には $S_{\text{tot}}^z = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots, S_{\text{imp}} - \frac{1}{2}$ セクターで縮退することに注意する。 S_{tot}^z が小さい場合を図 3.8(c) に、 S_{tot}^z が大きい場合を図 3.8(d) に示している。不純物スピン S_{imp} が大きくなるにしたがって、短距離の反強磁性相関の値は減少していることが分かる。これは S_{imp} が大きい場合には量子ゆらぎが小さく、不純物付近での反強磁性ゆらぎが抑えられるためだと考えられる。一方で短距離 ($r \lesssim 100$) でのスピン相関の振る舞いは、元の Heisenberg 鎖と同様に r^{-1} に比例している。また、中距離 ($100 \lesssim r \lesssim 1000$) では元の Heisenberg 鎖の相関関数の値に近づいていき、長距離 ($r \gtrsim 1000$) で再び r^{-1} に比例して減衰する。スピン相関がこのような振る舞いをする理由は不明であるが、有限サイズ効果によるものではなくサイト数に依らない振る舞いである。

まとめると、スピン相関における単一不純物の効果は次の 2 種類に分類できる。(i) $S_{\text{imp}} = 0, 1$ の不純物は短距離の反強磁性相関を増大させ、長距離では $C_s(1, r+1) \propto r^{-1.5}$ の形で減衰する。(ii) $S_{\text{imp}} > 1$ の不純物は短距離の反強磁性相関を抑制し、長距離では $C_s(1, r+1) \propto r^{-1}$ の形で減衰する。

$\Delta_{\text{imp}} \neq 1$ の磁性不純物

反強磁性相関関数に対する磁性不純物の XXZ 異方性 (Δ_{imp}) の効果について調べる。図 3.9(a) に $S_{\text{imp}} = \frac{1}{2}$ の場合の反強磁性相関 $C_s(1, r)$ の Δ_{imp} 依存性を示す。ここで、 $\Delta_{\text{imp}} = 1$ の場合は元の $S = 1/2$ Heisenberg 鎖のバルクでの結果に相当する。結果から短距離でのスピン相関 $C_s(1, r)$ の振る舞いは Δ_{imp} に大きくは依存せず、長距離での振る舞いも $\Delta_{\text{imp}} = 0$ で $C_s(1, r) \propto r^{-1.05}$ 、 $\Delta_{\text{imp}} = 2$ で $C_s(1, r) \propto r^{-0.95}$ と変化はわずかである。図 3.9(b) に示すように、 $S_{\text{imp}} = 1$ での反強磁性相関関数 $C_s(2, r)$ の振る舞いも $S_{\text{imp}} = \frac{1}{2}$ の場合と同様であり Δ_{imp} に大きく依存しない。 Δ_{imp} が大きいほど短距離でのスピン相関の値はわずかに大きくなるが、長距離でのスピン相関の減衰率は Δ_{imp} にほとんど依存せず、 $C_s(2, r) \propto r^{-1.5}$ である。これは、図 3.8(a) のインセットに示したように、 $S_{\text{imp}} = 1$ の不純物が Δ_{imp} の値に依らず非磁性不純物として振る舞うことを示唆している。

図 3.9(c)-3.9(f) に示すように $S_{\text{imp}} > 1$ の場合の反強磁性相関 $C_s(1, r)$ は Δ_{imp} に大きく依存する。 $C_s(1, r)$ は不純物からの距離 r に対して Δ_{imp} が小さいほど速く減衰し、 Δ_{imp} が大きいほど遅く減衰する。例外として、 $S_{\text{imp}} = \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$ については、 $\Delta_{\text{imp}} = 0$ ではなく、ある有限の Δ_{imp} においてスピン相関の減衰が最も早くなると考えられる。この振る舞いについては、次節において再度確認する。

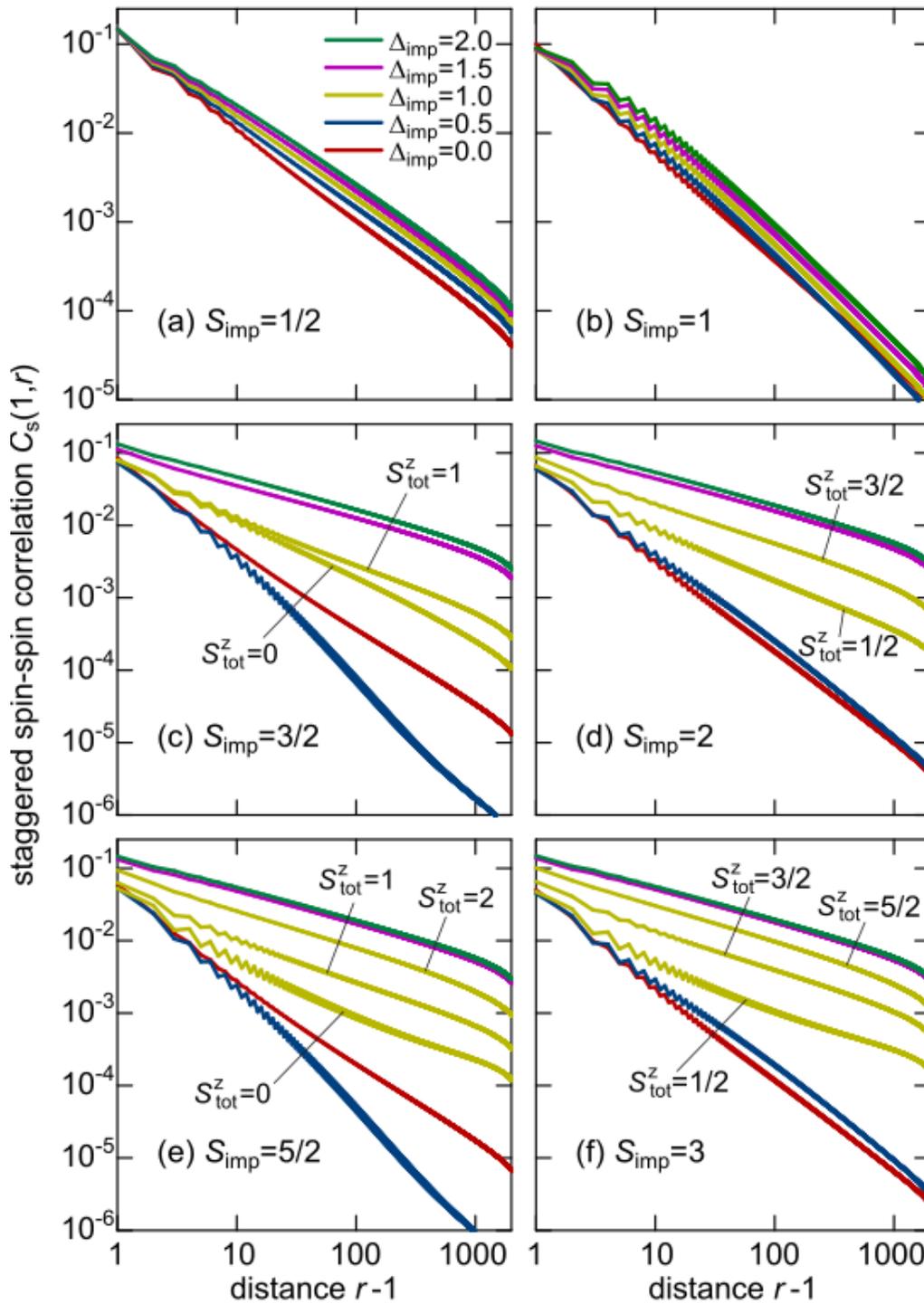


図 3.9: (a) $S_{\text{imp}} = \frac{1}{2}$, (b) $S_{\text{imp}} = 1$, (c) $S_{\text{imp}} = \frac{3}{2}$, (d) $S_{\text{imp}} = 2$, (e) $S_{\text{imp}} = \frac{5}{2}$, (f) $S_{\text{imp}} = 3$ の場合の反強磁性相関関数 $C_s(1, r)$ の対数プロット。それぞれについて $\Delta_{\text{imp}} = 0, 0.5, 1, 1.5, 2$ での結果を示している。また、 $S_{\text{imp}} > 1$ の $\Delta_{\text{imp}} = 1$ については、基底状態が縮退している全ての S_{tot}^z セクターに関する結果を示している。(a) の $\Delta_{\text{imp}} = 1$ の結果が元の $S = 1/2$ Heisenberg 鎖のバルクでの結果に相当する。

3.3.2 Néel 秩序の不安定性

前節では XXZ 磁性不純物の片側での反強磁性スピン相関の振る舞いについて調べたが、不純物の両側でのスピン相関についてはまだ調べられていない。例えば非磁性不純物は両側での反強磁性相関を増大させることが分かっているが、非磁性不純物のドーブは元の $SU(2)$ Heisenberg 鎖を切断することに相当し、切断されたスピン鎖の間には相関が存在しない。結果として、 $SU(2)$ Heisenberg 鎖に元々ある準長距離の Néel 秩序が非磁性不純物によって壊されることになる。したがって、非磁性不純物は長距離の

Néel 秩序を安定化させない。

この節では、SU(2) Heisenberg 鎖の準長距離の Néel 秩序が XXZ 磁性不純物によってどのように影響を受けるかを調べる。まず $S_{\text{imp}} = \frac{1}{2}$ の場合について調べる。ここで $\Delta_{\text{imp}} = 1$ の場合は不純物をドーブしない場合に相当する。計算には 200 サイトの SU(2) Heisenberg 鎖を用い、準長距離の Néel 秩序に対する効果を調べるために端のスピンを $\langle S_1^z \rangle = -\frac{1}{2}, \langle S_{200}^z \rangle = \frac{1}{2}$ に固定する。境界条件としては OBC を用いる。不純物をドーブしていない場合の各サイトでの $\langle S_i^z \rangle$ をプロットしたのが図 3.10(a) である。系の端からの Friedel 振動によって $\langle S_i^z \rangle$ は反強磁性的に振動し、系の端付近では $|\langle S_i^z \rangle|$ は $\sim 1/r$ の形で減衰する [44, 45]、系の中央ではほぼ一様な値となる。したがって、系の中央 (サイト $i = 100$) を不純物で置き換えることで、XXZ 磁性不純物の効果を調べることができる。

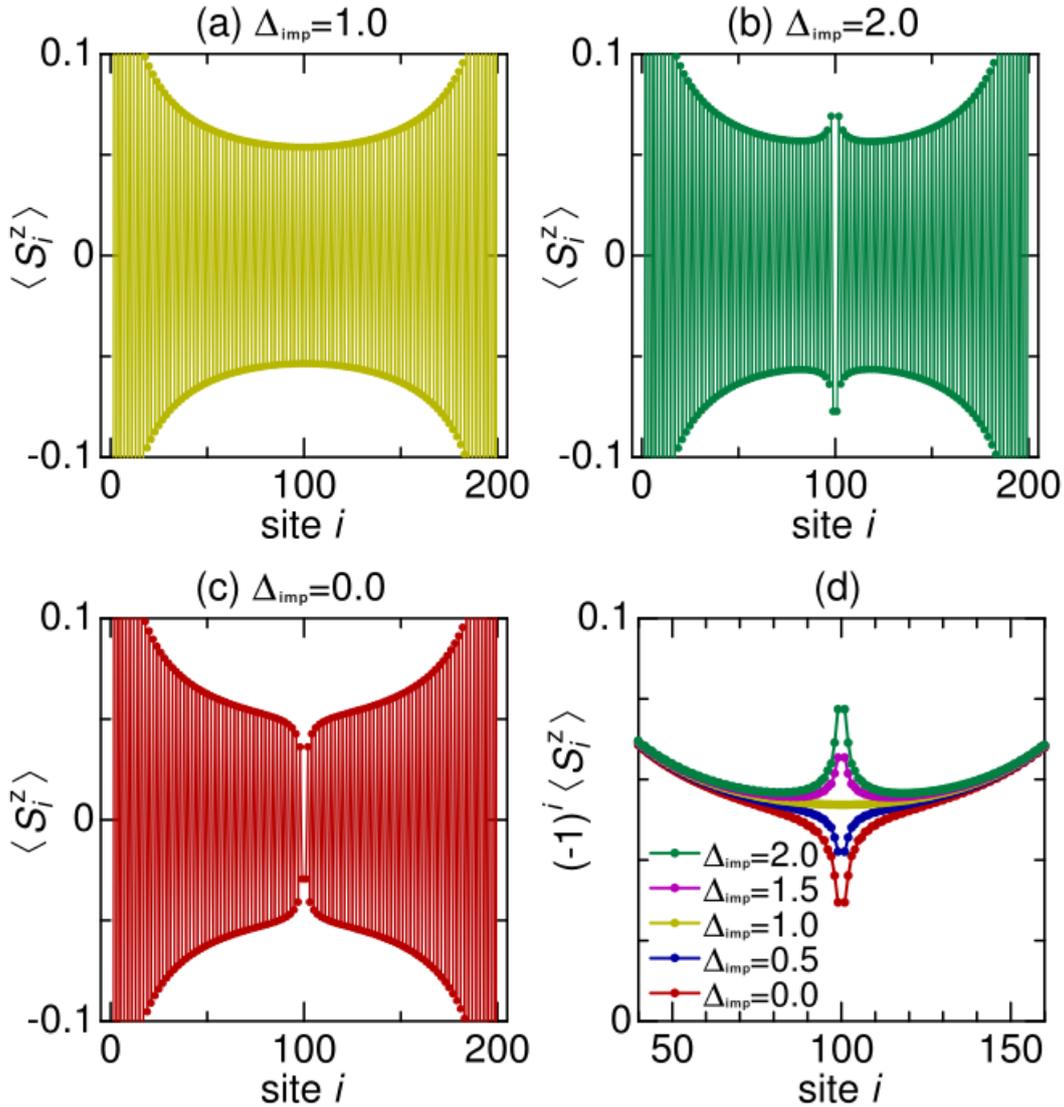


図 3.10: (a)-(c) 200 サイトの SU(2) Heisenberg 鎖で、系の中央に $S_{\text{imp}} = \frac{1}{2}$ の磁性不純物をドーブしたときの各サイトの $\langle S_i^z \rangle$ の値。(d) $(-1)^i \langle S_i^z \rangle$ の Δ_{imp} に対する依存性。

スピン $\frac{1}{2}$ XXZ Heisenberg 鎖では、容易軸異方性を持つ ($\Delta > 1$) ときに長距離の Néel 秩序を持ち、容易面内の異方性を持つ ($|\Delta| < 1$) ときにスピン相関はべき減衰 $\langle S_i^z S_{i+r}^z \rangle \sim 1/r^\eta$ ($\eta > 1$) する。このことから、 $\Delta_{\text{imp}} > 1$ ($\Delta_{\text{imp}} < 1$) の XXZ 不純物によって Néel 秩序の安定性は増大 (抑制) されると直感的に予想される。図 3.10(b), (c) に示すように、 $\langle S_i^z \rangle$ の振幅は $\Delta_{\text{imp}} = 2$ の場合に増大、 $\Delta_{\text{imp}} = 0$ の場合に抑制されており、この予想が正しいことが分かる。不純物のない SU(2) Heisenberg 鎖は臨界状態であるため、 $\Delta_{\text{imp}} > 1$ の不純物を有限の濃度ドーブすることで長距離の Néel 秩序が安定化すると考えられる。

つまり Néel 状態の秩序変数としてスタッガード磁化を

$$m_{\text{st}}^z = \frac{1}{N_c} \sum_{i=1}^{N_c} |(-1)^i \langle S_i^z \rangle| \quad (3.20)$$

と定義すると、 $\Delta_{\text{imp}} > 1$ の不純物を有限の濃度ドーブした場合に熱力学極限 ($N_c \rightarrow \infty$) で $m_{\text{st}}^z > 0$ が実現するはずである。3.3.4 節で詳しく見るが、 $n_{\text{imp}} = 0$ 又は $\Delta_{\text{imp}} \leq 1$ の場合には長距離の Néel 秩序は存在せず $m_{\text{st}}^z = 0$ となることが確認できる。また、容易面の異方性を持つ XXZ Heisenberg 鎖に $\Delta_{\text{imp}} > 1$ の不純物をドーブした場合でも、不純物がない場合のスピン相関はべき減衰であるため、長距離の Néel 秩序は同様に安定化すると考えられる。 $\langle S_i^z \rangle$ に対する XXZ 不純物の効果をまとめて示すため、図 3.10(d) に $(-1)^i \langle S_i^z \rangle$ の Δ_{imp} 依存性をプロットした。この結果から $\langle S_i^z \rangle$ の振幅はおおよそ $\Delta_{\text{imp}} - 1$ に比例していることが分かる。

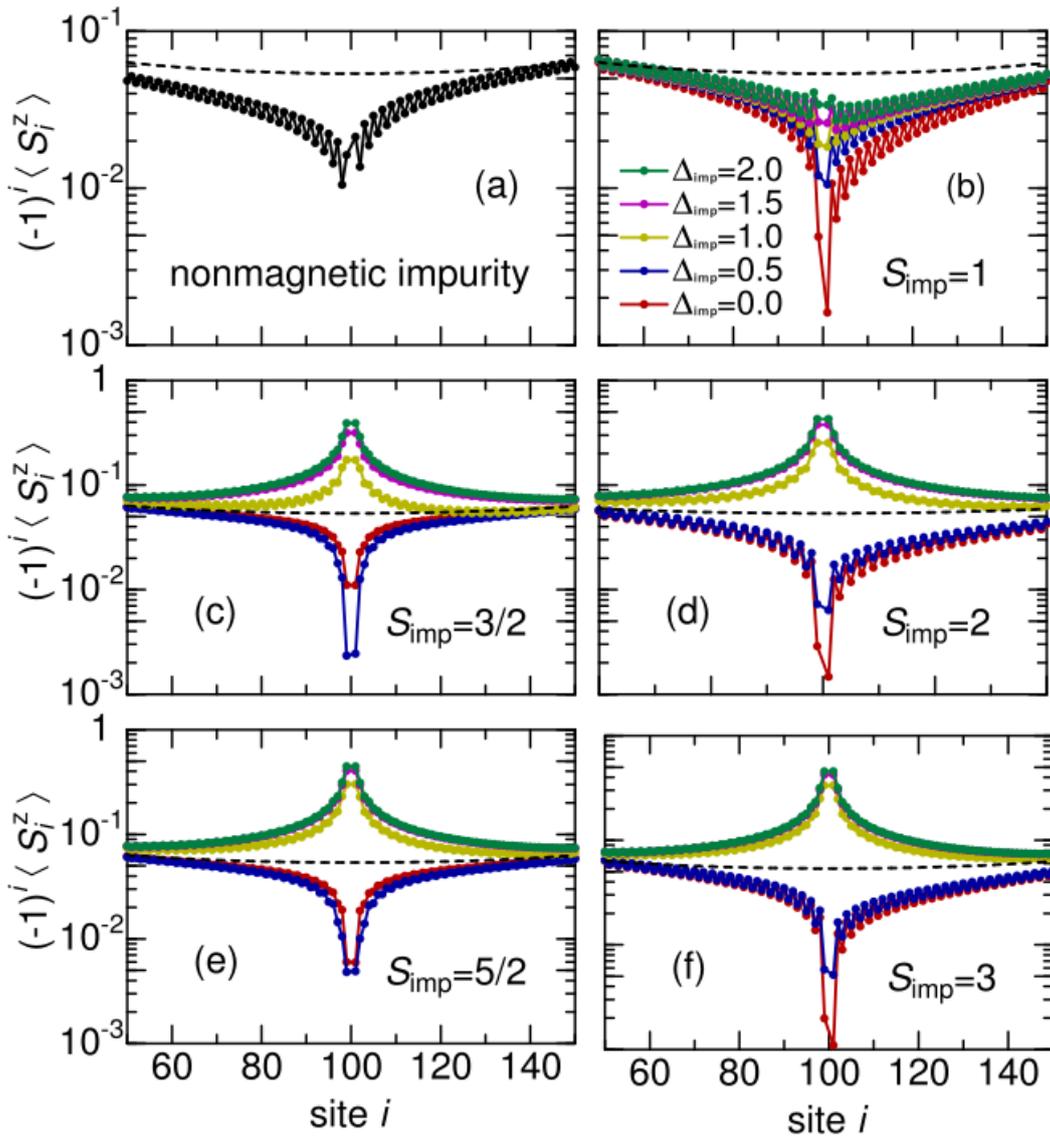


図 3.11: (a) $S_{\text{imp}} = 0$, (b) $S_{\text{imp}} = 1$, (c) $S_{\text{imp}} = \frac{3}{2}$, (d) $S_{\text{imp}} = 2$, (e) $S_{\text{imp}} = \frac{5}{2}$, (f) $S_{\text{imp}} = 3$ の場合の $(-1)^i \langle S_i^z \rangle$ の Δ_{imp} 依存性。

次に、 $S_{\text{imp}} = \frac{1}{2}$ 以外の不純物の場合についても調べる。結論から言えば、 $S_{\text{imp}} > 1$ の不純物の場合の効果は $S_{\text{imp}} = \frac{1}{2}$ の場合と定量的に同様であり、 $S_{\text{imp}} = 1$ の不純物の効果は非磁性不純物と同様である。 $S_{\text{imp}} = \frac{1}{2}$ の場合と同様に、反強磁性の準長距離秩序のある 200 サイトの SU(2) Heisenberg 鎖の中央 ($i = 100$ サイト) に非磁性不純物又は XXZ 不純物をドーブした場合の $(-1)^i \langle S_i^z \rangle$ の値を計算する。図 3.11(a) に非磁性不純物の場合の $(-1)^i \langle S_i^z \rangle$ の計算結果を示す。非磁性不純物によって元の SU(2)

Heisenberg 鎖は切断されるため、 $\langle S_i^z \rangle$ の振動は非磁性不純物の周りで抑制される。前節のスピン相関についての結果から予想できるように、 $S_{\text{imp}} = 1$ の不純物の場合の結果も同様である。図 3.11(b) に示すように、XXZ 異方性の大きい $\Delta_{\text{imp}} = 2$ の場合でも $S_{\text{imp}} = 1$ の不純物の周りで $\langle S_i^z \rangle$ の振動は抑制される。この結果から $S_{\text{imp}} = 1$ の不純物は Δ_{imp} に依らず非磁性不純物のように振る舞うことが分かる。したがって、非磁性不純物と $S_{\text{imp}} = 1$ の不純物は Néel 秩序の安定性に対して負の寄与しかせず、SU(2) Heisenberg 鎖に非磁性不純物と $S_{\text{imp}} = 1$ の不純物をいくらドーブしても $m_{\text{st}}^z = 0$ になると結論付けられる。

一方で、図 3.11(c)-3.11(f) に示すように、 $S_{\text{imp}} > 1$ の不純物の場合は Δ_{imp} がある値 $\Delta_{\text{imp},c}$ より大きい場合には $\langle S_i^z \rangle$ の振動は増大されることが分かる。結果は定性的には $S_{\text{imp}} = \frac{1}{2}$ の不純物の場合 [図 3.10(d)] と同様である。しかし、 $S_{\text{imp}} = \frac{1}{2}$ の場合と異なり $S_{\text{imp}} > 1$ の場合は、相互作用が等方的な $\Delta_{\text{imp}} = 1$ の場合でも反強磁性的な振動が増大するのは興味深い。これは S_{imp} が大きい不純物の方が $S_{\text{imp}} = \frac{1}{2}$ の不純物よりも、より古典的な性質を持ち Ising 異方性が大きいためであると推測される。 $\langle S_i^z \rangle$ の振動が増大する臨界的な Δ_{imp} の値は $S_{\text{imp}} = \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, 3$ の場合でそれぞれ $\Delta_{\text{imp},c} = 0.918, 0.997, 0.994, 0.998$ となる。したがって、SU(2) Heisenberg 鎖に $\Delta_{\text{imp}} \gtrsim 1$ の $S_{\text{imp}} > 1$ 不純物をドーブすることで、長距離の Néel 秩序が安定化することが確認できる。

3.3.3 局所スピン感受率と NMR スペクトル

局所スピン感受率

局所スピン感受率を計算することで、NMR スペクトルの測定結果に対する理論的な示唆を与えることができる [55, 60]。温度 T での局所スピン感受率は次のように定義される。

$$\chi_i(T) = \frac{1}{T} \sum_j \langle S_i^z S_j^z \rangle \quad (3.21)$$

分母と分子はともに $T \rightarrow 0$ の極限で 0 になるから、 $\chi_i(T=0)$ を計算するためにはこの式を変形する必要がある。低温における局所スピン感受率は [56] より次の式で計算できる。

$$\chi_i = \sum_j \langle \phi_S | S_i^z S_j^z | \phi_S \rangle = S \langle \phi_S | S_i^z | \phi_S \rangle \quad (3.22)$$

ここで $|\phi_S\rangle$ は全スピンの z 成分が $S > 0$ である第一励起状態である。典型的には S は偶数サイトの系で 1 であり、奇数サイトの系で $\frac{1}{2}$ となる。両端に不純物をドーブした開境界の系において、局所スピン感受率は系の中央に関して反転対称となる。

S_i^z の反強磁性的な振動のみを考えるので、 χ_i は定義

$$\chi_i = \chi_i^u - (-1)^i \chi_i^a \quad (3.23)$$

を用いて、一様成分 χ_i^u とスタッガード成分 χ_i^a に分けられる。一様成分とスタッガード成分はそれぞれ

$$\chi_i^u = \chi_i/2 + (\chi_{i-1} + \chi_{i+1})/4 \quad (3.24)$$

$$\chi_i^a = -(-1)^i (\chi_i - \chi_i^u) \quad (3.25)$$

から得られる。

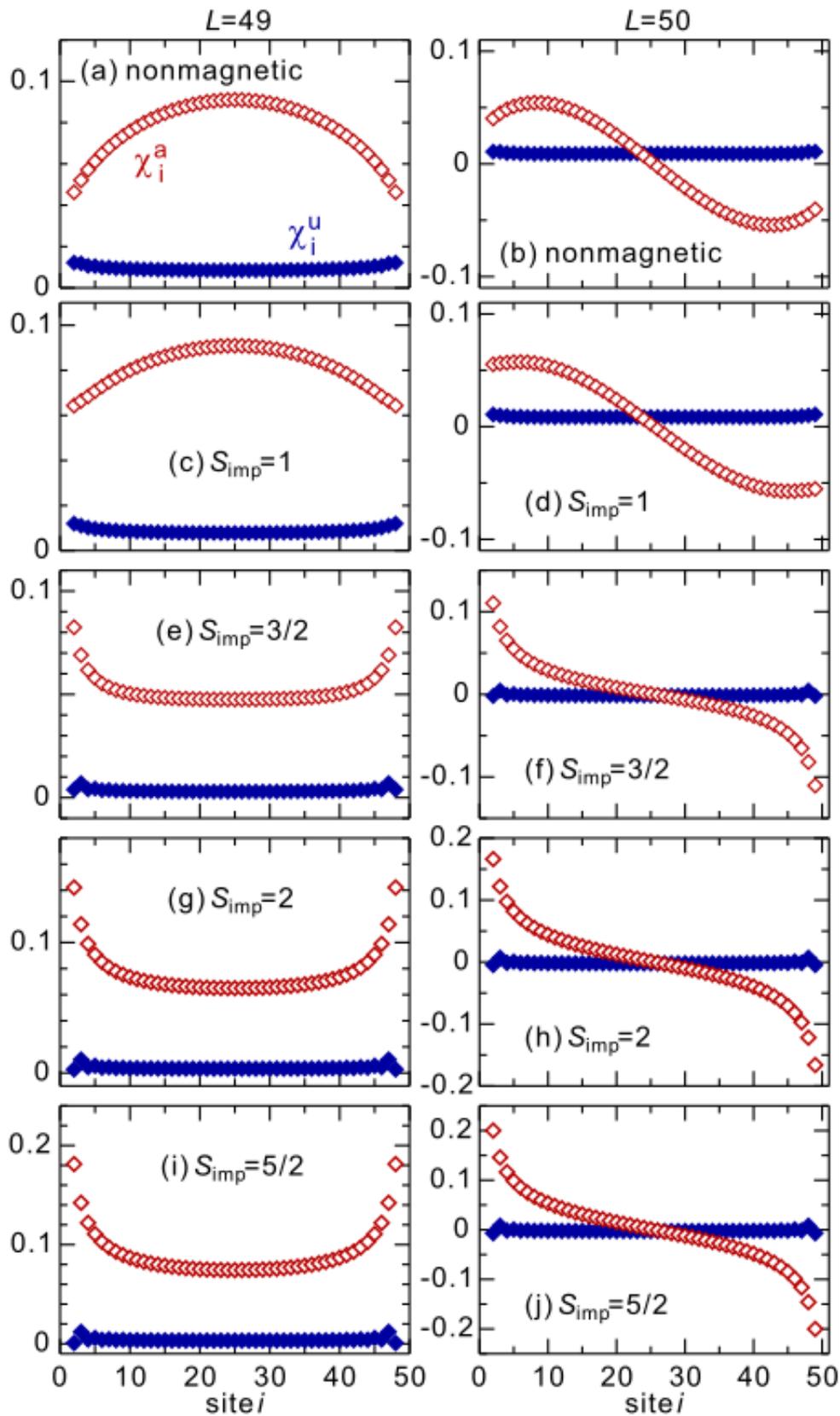


図 3.12: (a), (b) $S_{\text{imp}} = 0$, (c), (d) $S_{\text{imp}} = 1$, (e), (f) $S_{\text{imp}} = \frac{3}{2}$, (g), (h) $S_{\text{imp}} = 2$, (i), (j) $S_{\text{imp}} = \frac{5}{2}$ の場合の局所スピン感受率 χ_i の一様成分とスタッガード成分の DMRG による計算結果。左側が 49 サイト、右側が 50 サイトの計算結果。

図 3.12(a), 3.12(b) にそれぞれ $L = 49$ サイトと $L = 50$ サイトの開境界の $SU(2)$ Heisenberg 鎖についての、局所スピン感受率の一様成分 χ_i^u とスタッガード成分 χ_i^a の DMRG による計算結果を示す。これは

SU(2) Heisenberg 鎖の両端に非磁性不純物をドープした場合の結果に対応する。有限サイズ効果によってスタッガード成分 χ_i^a は L が奇数のとき系の中央に関して対称で、 L が偶数のときは反対称である。 χ_i^a は系の端から可能な限り離れたところで最大となっており、[56] の結果とも整合している。また、これは半無限の SU(2) Heisenberg 鎖において χ_i^a が非磁性不純物からの距離に対して単調に増加するという予測 [55] とも整合している。

次に磁性不純物の場合を考える。まず $\Delta_{\text{imp}} = 1$ の場合で計算する。同様に、SU(2) Heisenberg 鎖の両端に不純物をドープした系を考える必要があるので、100 サイトと 102 サイトの周期的な SU(2) Heisenberg 鎖を用意し、向かい合う 2 サイトを不純物で置き換えることでそれぞれ 49 サイトと 50 サイトの部分を作成する。図 3.12(c), 3.12(d) に $S_{\text{imp}} = 1$ の不純物の場合の χ_i^u と χ_i^a の計算結果を示す。これまでの結果から期待されるように、結果は非磁性不純物の場合 [図 3.12(a), 3.12(b)] と定量的にも同様である。この結果からも $S_{\text{imp}} = 1$ の不純物が非磁性不純物として振る舞うことを再確認できる。一方で、図 3.12(e)-3.12(j) に示すように $S_{\text{imp}} > 1$ の不純物の場合の局所スピン感受率はかなり異なった特徴を示す。 χ_i^u と χ_i^a の計算結果は $S_{\text{imp}} = \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}$ の不純物で定性的に同様である。偶数サイトと奇数サイトの両方で、 χ_i^a は磁性不純物の近くで最大になっている。ここで、磁性不純物の周りのスピン状態を説明するため、中央の $S = \frac{3}{2}$ スピン 1 つとその隣の $S = \frac{1}{2}$ スピン 2 つからなる 3 サイトの Heisenberg 模型を考える。 $S^z = \frac{1}{2}$ セクターでの基底状態の主要な成分は次のように表される¹。

$$\psi \approx \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (3.26)$$

つまり $S = \frac{1}{2}$ の状態は $S_{\text{imp}} = \frac{3}{2}$ の不純物に局在しやすいため、 $|\chi_i^a|$ は $S_{\text{imp}} = \frac{3}{2}$ の不純物付近で最大となる。それに関わらず、 $L = 49$ の場合の χ_i^a は $S_{\text{imp}} = \frac{3}{2}$ の不純物からの距離とともに有限の飽和値に減少する。これは $\Delta_{\text{imp}} = 1$ の場合には $S_{\text{imp}} > 1$ の不純物の近くでの $S = \frac{1}{2}$ 状態の局在性はそこまで強くないことを意味している。

さらに χ_i^a の Δ_{imp} 依存性を調べる。図 3.13(a) に $S_{\text{imp}} = 1$ 不純物の場合の χ_i^a の Δ_{imp} 依存性の計算結果を示す。 Δ_{imp} を増加 (減少) させると χ_i^a は系全体で増大 (抑制) するが、全体的な傾向は Δ_{imp} によって変わらない。これは $S_{\text{imp}} = 1$ の不純物が Δ_{imp} の値に依らず非磁性不純物として振る舞うことから予想できる。一方で、図 3.13(b)-3.13(d) に示すように、 $S_{\text{imp}} > 1$ の不純物の場合には χ_i^a は Δ_{imp} に大きく影響を受ける。 Δ_{imp} が増加すると、 χ_i^a は磁性不純物の近傍で著しく増大し、鎖の中央で非常に小さくなる。これは Δ_{imp} が大きくなると式 (3.26) で表される状態が徐々に支配的になるために、 $S = \frac{1}{2}$ の状態が $S_{\text{imp}} > 1$ 不純物の近傍に強く局在することを意味している。 $\Delta_{\text{imp}} < 1$ では磁性不純物近傍での $S = \frac{1}{2}$ 状態の局在は弱まるが、 χ_i^a は非磁性不純物と $S_{\text{imp}} = 1$ 不純物の場合と同様に鎖の中央で最大になる。この効果は $S_{\text{imp}} = 2$ の場合に最も顕著である。ちなみに、 $S_{\text{imp}} = \frac{1}{2}$ 不純物の場合は、 $0 < \Delta_{\text{imp}} < 5$ で常に局所スピン感受率は非常に小さくなり、 $|\chi_i^a| \lesssim 0.01$ となる。

¹詳細は付録 A.2 を参照

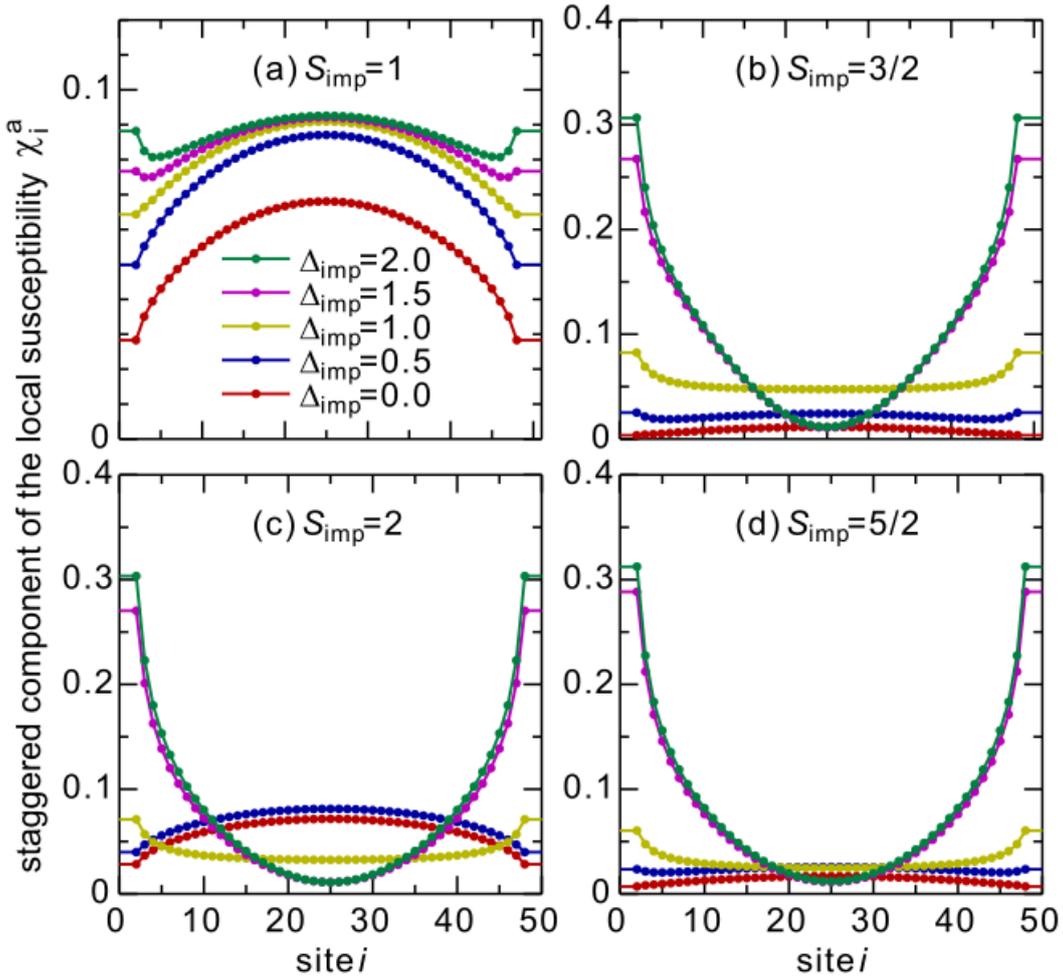


図 3.13: (a) $S_{\text{imp}} = 1$, (b) $S_{\text{imp}} = \frac{3}{2}$, (c) $S_{\text{imp}} = 2$, (d) $S_{\text{imp}} = \frac{5}{2}$ の不純物の場合の局所スピン感受率 χ_i の Δ_{imp} 依存性。 $L = 49$ サイトで計算している。

NMR スペクトル

局所スピン感受率のスタガード成分を計算することにより、その振幅の分布として NMR スペクトルが得られる [55, 60]。すなわち、 f をローレンチアンとして

$$g(\chi) = \sum_i f(\chi - (-1)^i \chi_i^a) \quad (3.27)$$

で NMR スペクトルを計算することができる [60]。以下の計算ではローレンチアンの広がりを 0.01 としている。図 3.14(a)-3.14(c) に非磁性不純物と $S_{\text{imp}} = 1$ 不純物の場合の NMR スペクトルを示す。この場合は、スピノン励起の非局在性により χ_i^a の最大位置が不純物から遠ざかるため、ピーク間の距離が χ_i の振幅にほぼ対応する 2 ピーク構造が得られる。図 3.14(d)-3.14(f) に示すように、 $S_{\text{imp}} = \frac{1}{2}$ 不純物の場合は、どの Δ_{imp} でも $|\chi_i^a| \lesssim 0.01$ となるため、NMR スペクトルは常に単一の鋭いピーク構造を持つ。 $S_{\text{imp}} > 1$ 不純物の場合には、NMR スペクトルは Δ_{imp} に強く依存することが χ_i^a の計算結果から予想される。 $S_{\text{imp}} = \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}$ の不純物の場合の NMR スペクトルを図 3.14(g)-3.14(o) に示す。この 3 つの場合の NMR スペクトルは定性的に同様である。すなわち、 $\Delta_{\text{imp}} = 1$ では $L = 50$ の NMR スペクトルは、磁性不純物近傍での $S = \frac{1}{2}$ 状態の局在性を反映して、 $\chi = 0$ を中心とした広いピークを持つ。 $\Delta_{\text{imp}} = 2$ では磁性不純物近傍の $S = \frac{1}{2}$ 状態の局在性が強く増大し、NMR スペクトルの幅はより広くなる。 $\Delta_{\text{imp}} = 0$ では χ_i^a の振幅が $S = \frac{1}{2}$ の場合と同様に非常に小さくなるため、NMR スペクトルはやや狭いピークを示す。

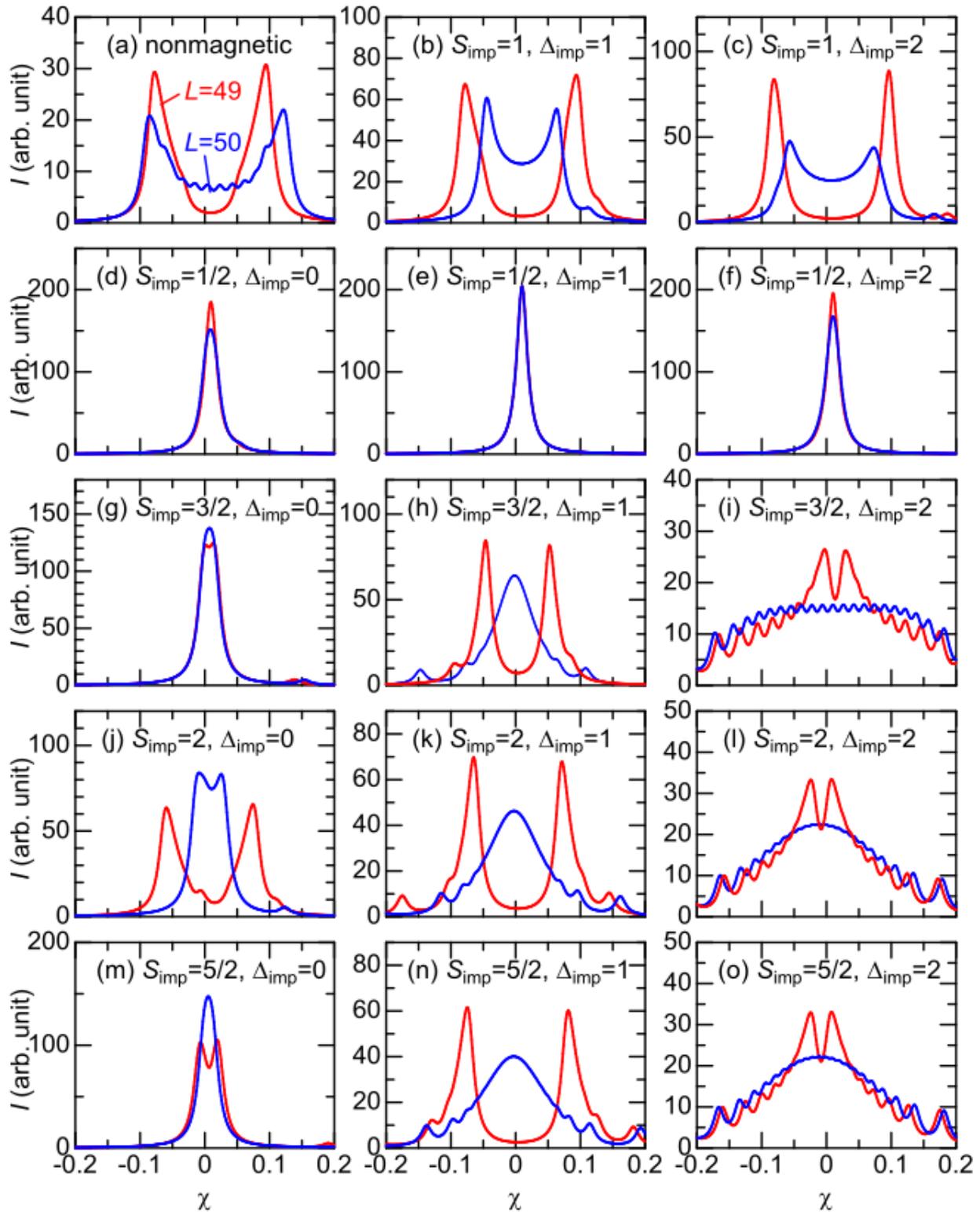


図 3.14: (a) $S_{\text{imp}} = 0$, (b),(c) $S_{\text{imp}} = 1$, (d)-(f) $S_{\text{imp}} = \frac{1}{2}$, (g)-(i) $S_{\text{imp}} = \frac{3}{2}$, (j)-(l) $S_{\text{imp}} = 2$, (m)-(o) $S_{\text{imp}} = \frac{5}{2}$ の不純物の場合の NMR スペクトルの Δ_{imp} 依存性。

次に、 SrCuO_2 に Co をドーピングした $\text{SrCu}_{0.99}\text{Co}_{0.01}\text{O}_2$ の NMR スペクトルの測定結果 [38] について考える。問題は Co イオンのスピン状態が $S = \frac{3}{2}$ であるか $S = \frac{1}{2}$ であるかがこれまで特定されていないことである。先行研究 [38] では、低温で中央に小さな凹みを持つ非常に幅の広いピークが観測されており [図 3.3]、これは $S_{\text{imp}} > 1$ の $\Delta_{\text{imp}} = 2$ での NMR スペクトルの特徴と一致している [図 3.14(i), 3.14(l), 3.14(o)]。 $L = 49$ と $L = 50$ の結果は $\sim 2\%$ ドーピングでの典型的な特徴を示している可能性もあり、定量的な解析には $n_{\text{imp}} = 0.01$ で式 (3.18) を用いて L についての平均を取る必要があるが、NMR スペクトルの計算

結果からこの問いに対する答えを得ることができる。すなわち、 $\text{SrCu}_{0.99}\text{Co}_{0.01}\text{O}_2$ の低温での幅の広い NMR スペクトルは、Co イオンのスピン状態が $S = \frac{3}{2}$ であり、スピン異方性を $\Delta_{\text{imp}} > 1$ と仮定した場合にのみ説明できる。

3.3.4 スタッガード磁化

この節では、式 (3.20) で定義されるスタッガード磁化について、不純物の XXZ 異方性 Δ_{imp} と不純物濃度 n_{imp} に対する依存性を調べる。これまでの結果で確認したように、SU(2) Heisenberg 鎖の Néel 秩序の安定性に対する磁性不純物の効果は以下の 2 種類に分類することができる。一つは非磁性不純物と $S_{\text{imp}} = 1$ の不純物であり、これらは単純に Néel 秩序の安定性を抑制する。もう一つは $S_{\text{imp}} = \frac{1}{2}$ と $S_{\text{imp}} > 1$ の不純物で、これらは $\Delta_{\text{imp}} \gtrsim 1$ の場合に長距離の Néel 秩序の発達に寄与する。したがって、 $S_{\text{imp}} > 1$ の場合と定量的な違いはあるかもしれないが、 $S_{\text{imp}} = \frac{1}{2}$ の場合を後者の代表例としても妥当である。そこで以下では、 $S_{\text{imp}} = \frac{1}{2}$ の不純物の場合に注目する。

SU(2) Heisenberg 鎖に $\Delta_{\text{imp}} > 1$ の $S_{\text{imp}} = \frac{1}{2}$ 不純物をドーピングすると、不純物からの Friedel 振動として $\langle S_i^z \rangle$ のスタッガード振動が生じる。この Friedel 振動の振幅は、SU(2) Heisenberg 鎖のスピン相関関数の減衰を模倣して $\langle S_r^z \rangle \sim 1/r^\eta$ で減衰する [61]。図 3.9(a) での $C_s(1, r)$ の傾きから η の値は ~ 1 と評価できる。これは、SU(2) Heisenberg 鎖に複数の不純物をドーピングすると、 $C_s(1, 1)/l \approx 0.2n_{\text{imp}}/(1 - n_{\text{imp}})$ のオーダーの振幅を保ったままスタッガード振動が次の不純物に到達することを意味する。図 3.10(d) に示すように、このスタッガード振動は次の不純物でさらに増大する。したがって、 $n_{\text{imp}} > 0$ かつ $\Delta_{\text{imp}} > 1$ であれば、 $m_{\text{st}}^z > 0$ となることが期待される。言い換えれば、SU(2) Heisenberg 鎖に $\Delta_{\text{imp}} > 1$ の XXZ 不純物を有限の量ドーピングすることで、長距離の Néel 秩序が誘起される。

これを数値的に確認するため、様々な Δ_{imp} と n_{imp} について m_{st}^z を DMRG を用いて計算する。 $N_c = 40 - 800$ サイトの開境界の系を用いて計算し、各 N_c について不純物の分布を $10000/N_c$ 通りとって m_{st}^z の値を平均し、熱力学極限 $N_c \rightarrow \infty$ への有限サイズスケーリングを行う。図 3.15 にいくつかの Δ_{imp} について、熱力学極限での m_{st}^z の値を n_{imp} の関数として示している。この結果から、 m_{st}^z は $n_{\text{imp}} > 0$ かつ $\Delta_{\text{imp}} > 1$ の場合に常に有限となることが確認できる。 m_{st}^z と n_{imp} の定性的な傾向は、あらゆる $\Delta_{\text{imp}} (> 1)$ について共通で、 n_{imp} が低ければ m_{st}^z は小さく、ある中間の n_{imp} で急激に増加し、 n_{imp} が高いところである値に飽和する。この m_{st}^z の飽和値は、XXZ Heisenberg 鎖の自発磁化の値と完璧に一致する [62, 63]。 $n_{\text{imp}} (> 0)$ を固定すると、 m_{st}^z は Δ_{imp} の増加とともに増加する。これは、 Δ_{imp} が大きいほど誘起されるスタッガード振動の振幅が大きくなること自然な帰結である。また、傾き $\partial m_{\text{st}}^z / \partial n_{\text{imp}}$ の最大値が、 Δ_{imp} が大きいほど小さい n_{imp} で与えられるのは興味深い。

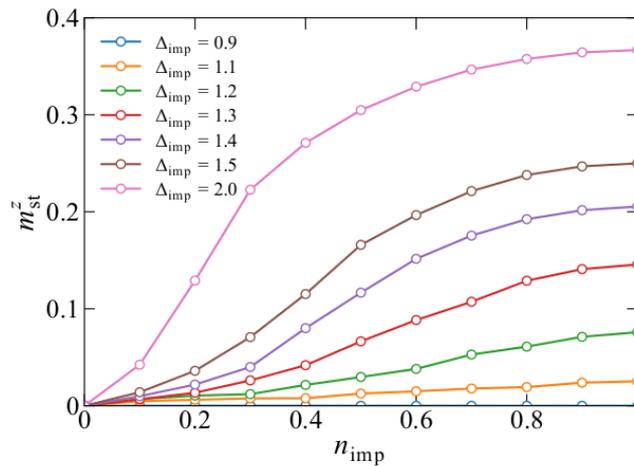


図 3.15: m_{st}^z の不純物濃度 n_{imp} に対する依存性の DMRG による計算結果。

また、CMFT を用いて m_{st}^z を計算することで、上記の DMRG の結果に対してクロスチェックを行うことができる。CMFT で得られた SU(2) Heisenberg 鎖の基底状態は、非常に小さいが有限のスタッガー

ド磁化 (スピンの大きさの 10% 未満) を持ち、1 サイト置きに valence bond が形成された混合状態となっている。不純物をドーピングすることで、不純物サイトと最近接サイト間に Δ_{imp} が導入される。図 3.16(a) に $N_c = 10$ サイト (実線) と $N_c = 12$ サイト (破線) について、不純物の分布をランダムに 20 通りとって平均をとることで計算した、 m_{st}^z の n_{imp} 依存性を示す。各 Δ_{imp} について、不純物濃度が増加することで m_{st}^z が増加し、より強く Néel 秩序が形成されることが分かる。また、異方性が低い $n_{\text{imp}} = 0.1$ の場合でも秩序状態が引き起こされているというのは興味深い。 $N_c = 12$ サイトの場合でも $N_c = 10$ サイトの結果と定性的な違いは見られないため、以降の解析は $N_c = 10$ サイトのクラスターに限定して行うことにする。

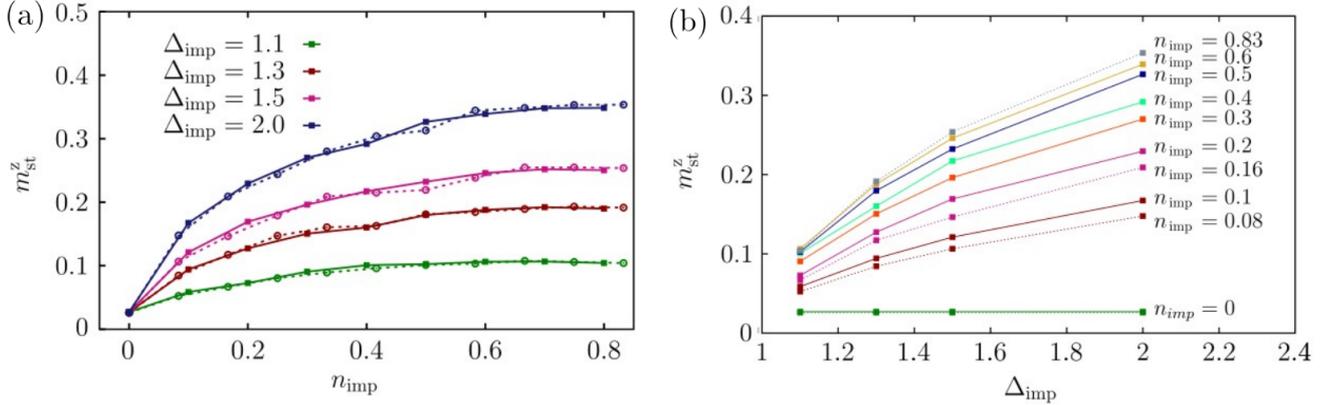


図 3.16: (a) m_{st}^z の不純物濃度 n_{imp} に対する依存性の CMFT による計算結果。(b) n_{imp} を固定したときの、 m_{st}^z の Δ_{imp} に対する依存性の CMFT による計算結果。それぞれの図で実線は $N_c = 10$ サイト、破線は $N_c = 12$ サイトでの結果を表している。

図 3.16(b) に、 Δ_{imp} の増加とともに m_{st}^z が増加する様子を異なる n_{imp} について示した。この結果は、1 つの不純物スピンをドーピングすること ($N_c = 10$ では $n_{\text{imp}} = 0.1$, $N_c = 12$ では $n_{\text{imp}} = 0.08$) が系全体の秩序に影響を与えることを示唆している。この効果は Δ_{imp} を大きくすることでさらに大きくなる。ここで、端のスピンは不純物をドーピングしないため平均場近似されたボンドには異方性はない。CMFT の結果は DMRG で得られた結果と定性的にはよく一致しているが、有限サイズ効果により CMFT では DMRG と比較して m_{st}^z の値が大きくなっている。この効果は n_{imp} が小さい場合により顕著であるが、それは n_{imp} が小さいと等方的なボンドの数が多くなり、CMFT はハミルトニアン回転対称性を壊してしまうためである。CMFT の結果はクラスターのサイズを大きくすることで改善するが、有限サイズ効果に関する詳しい議論は付録 A.5 に示す。

3.3.5 磁化曲線

この節では、外部磁場 h_z 下での磁化の Δ_{imp} と n_{imp} に対する依存性を調べる。磁化は次のように定義される。

$$m^z = \frac{1}{N_c} \sum_{i=1}^{N_c} \langle S_i^z \rangle \quad (3.28)$$

まず、XXZ 異方性が Δ の XXZ Heisenberg 鎖の一樣磁化 m^z の振る舞いを h_z の関数として調べる。外部磁場 h_z 下での系のハミルトニアンは、 $\mathcal{H} = \sum_i [(S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+)/2 + \Delta S_i^z S_{i+1}^z] - h_z \sum_i S_i^z$ と表される。図 3.17(a) に XXZ Heisenberg 鎖の磁化曲線の DMRG による計算結果を示す。 $\Delta \leq 1$ では、 h_z を増加させると m^z は h_z が小さいところでほぼ線形に増加し、強い量子ゆらぎを反映して発散的に飽和する。 $\Delta > 1$ では、長距離の Néel 秩序があるために m^z は有限の h_z ($\equiv h_{z,\text{cr}}$) まで 0 であり、 $h_z = h_{z,\text{cr}}$ で垂直に上昇し、 h_z が大きいところでの振る舞いは $\Delta \leq 1$ と定性的に同様である。また、飽和磁場は任意の Δ で $h_{\text{sat}} = 1 + \Delta$ となる。次に、 $S_{\text{imp}} = \frac{1}{2}$ 不純物をドーピングした SU(2) Heisenberg 鎖の磁化曲線の

n_{imp} 依存性を調べる。すなわち、 n_{imp} の増加とともに磁化曲線が $\Delta = 1$ のものから $\Delta = \Delta_{\text{imp}}$ のものにどのように変化するかを調べる。

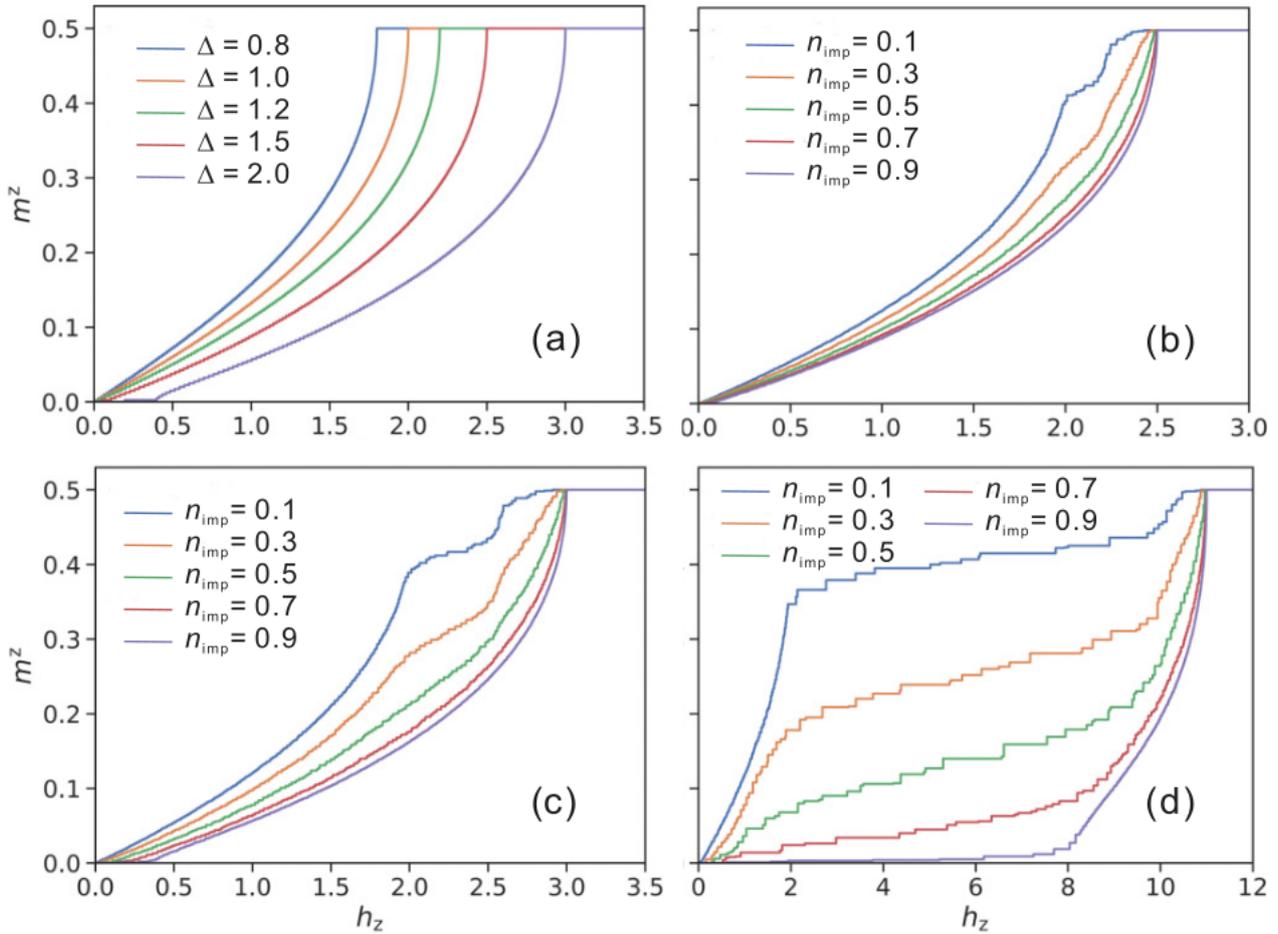


図 3.17: (a) XXZ Heisenberg 鎖の磁化曲線。(b-d) $S_{\text{imp}} = \frac{1}{2}$ の XXZ 不純物をドーピングした SU(2) Heisenberg 鎖の磁化曲線を $n_{\text{imp}} = 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9$ についてプロットした。それぞれ (b) $\Delta_{\text{imp}} = 1.5$, (c) $\Delta_{\text{imp}} = 2$, (d) $\Delta_{\text{imp}} = 10$ の結果を示している。

図 3.17(b)-3.17(d) にそれぞれ $\Delta_{\text{imp}} = 1.5, 2, 10$ の場合の磁化曲線をいくつかの n_{imp} について示す。それぞれの磁化曲線について、 $N_c = 1000$ サイトの開境界の鎖を用い、ランダムな 10 通りの不純物分布について平均をとることで m^z を計算した。全ての Δ_{imp} で磁化曲線の n_{imp} 依存性は定性的に同様であるが、その特徴は Δ_{imp} が大きいほど顕著である。磁化曲線に現れる特徴は、非不純物サイトの XXX スピンが容易軸異方性を持つ ($\Delta_{\text{imp}} > 1$) 不純物サイトの XXZ スピンよりも磁化しやすいということで説明できる。

不純物濃度が低い ($n_{\text{imp}} \sim 0$) ときには、飽和磁化 $m^z \sim \frac{1}{2}$ 付近にプラトーのような特徴が見られる。不純物が希薄な場合には、飽和磁場から磁場を減少させると XXZ 不純物のスピンの最初が反転するため、高磁場では磁場により偏極したスピンと孤立したマグノンが存在している。この場合のスピンの状態を模式的に表したのが、図 3.18(a) のインセットの I である。XXZ 不純物スピンとそれ以外のスピンを分極させる磁場の強さにはギャップが存在するため、 $m^z \approx (1 - n_{\text{imp}})/2$ にプラトーができる。 n_{imp} が増加すると、2 つ以上の XXZ 不純物が並ぶ確率が増加するため、プラトーができる h_z の領域が広がる。例えば、図 3.18(a) のインセットの II のように 2 つの XXZ 不純物が隣り合っている場合、4 つのスピンの XXZ 結合で繋がった 4 量体シングレット ($S^z = 0$) ができる (この場合の 4 量体シングレットのような鎖の部分に XXZ 鎖セグメントと呼ぶことにする)。そのため、 $S^z = 1$ への有限のギャップによってプラトーが形成される。同様に、3 つの XXZ 不純物が並んでいる場合には図 3.18(a) のインセットの III のような 5 量体が形成される。5 量体の両側に偏極したスピンがあるため、 $S^z = -\frac{1}{2}$ 状態と $S^z = \frac{1}{2}$ 状態にギャップが開き、プラトーが形成される。一般的に偶数 (奇数) 個の XXZ 不純物からなる XXZ 鎖セグメ

ントは、 $S^z = 0$ 状態と $S^z = 1$ 状態 ($S^z = -\frac{1}{2}$ 状態と $S^z = \frac{1}{2}$ 状態) 間にギャップを示す。このギャップの値は XXZ 鎖セグメントの長さによって異なるため、プラトーは有限の傾きを持つ。基本的に奇数長の XXZ 鎖セグメントは偶数長のものよりギャップが大きく、短い XXZ 鎖セグメントほど大きなギャップを持つ。また、様々な長さの XXZ 鎖セグメントが存在するほど、プラトーの傾きはより急になる。実際に図 3.17(b)-3.17(d) から、 n_{imp} の増加とともにプラトーの傾きが大きくなっていることが、 $n_{\text{imp}} = 0.3$ まで確認することができる。

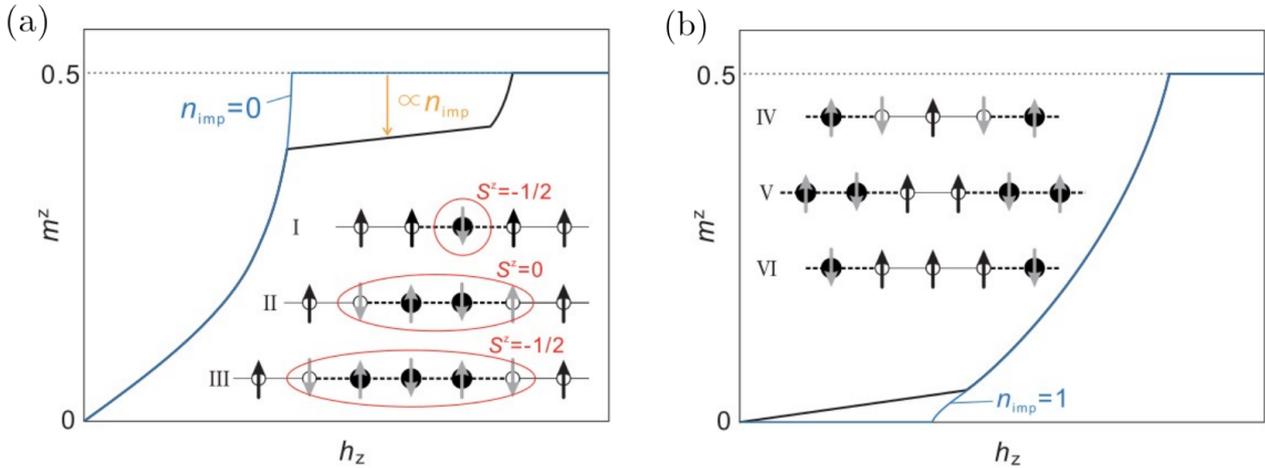


図 3.18: 不純物濃度が (a) $n_{\text{imp}} = 0$, (b) $n_{\text{imp}} = 1$ に近い場合の磁化曲線の模式図。(a) と (b) のインセットは、それぞれ $n_{\text{imp}} \sim 0$ の場合の高磁場での典型的なスピンの状態と、 $n_{\text{imp}} \sim 1$ の場合の低磁場での典型的なスピンの状態を表している。また、インセットにおいて実線は等方的な XXX 結合を、破線は異方的な XXZ 結合を表している。

不純物濃度が高い ($n_{\text{imp}} \sim 1$) 場合には、系のほとんどが Δ_{imp} の XXZ 鎖セグメントで形成されるため、磁化曲線の全体的な形状は $\Delta = \Delta_{\text{imp}}$ の XXZ Heisenberg 鎖のものと同様である。しかし、XXZ Heisenberg 鎖で見られるギャップの代わりに、 h_z が低いところで m^z がゆっくりと増加していることが確認できる。これは、図 3.18(b) のインセットに示すように、不純物のドーピングされていない XXX 鎖セグメントが散らばっているためである。XXX 鎖セグメントは XXZ 鎖セグメントよりも偏極しやすく、IV, V, VI の状態を示す典型的な磁場の強さは $h_z(\text{VI}) > h_z(\text{V}) > h_z(\text{IV})$ のように異なるため、 h_z が低いところで m^z は緩やかに増加している。

次に CMFT による磁化曲線の計算結果を DMRG の結果と比較する。図 3.19 に CMFT を用いて計算した $\Delta_{\text{imp}} = 2$ の場合の磁化曲線の計算結果を示す。図 3.19(a) に示すように、DMRG の結果と同様に $n_{\text{imp}} = 0$ では、全スピンの向きに揃った飽和磁場まで磁化は磁場に対して連続的に増加する。磁化曲線に小さな階段上の特徴が見られるのは CMFT の有限サイズ効果によるものであり、これはクラスターのサイズを大きくすることで減少する。数値的に厳密である DMRG の計算結果では、1 次元反強磁性 Heisenberg 模型がギャップレスであることを反映して、磁化は 0 から飽和磁場まで連続的に増加する。CMFT で得られた m^z の中間的な振る舞いは DMRG の結果とは一致しないが、飽和磁場の値が非常によく一致しているのは興味深い。

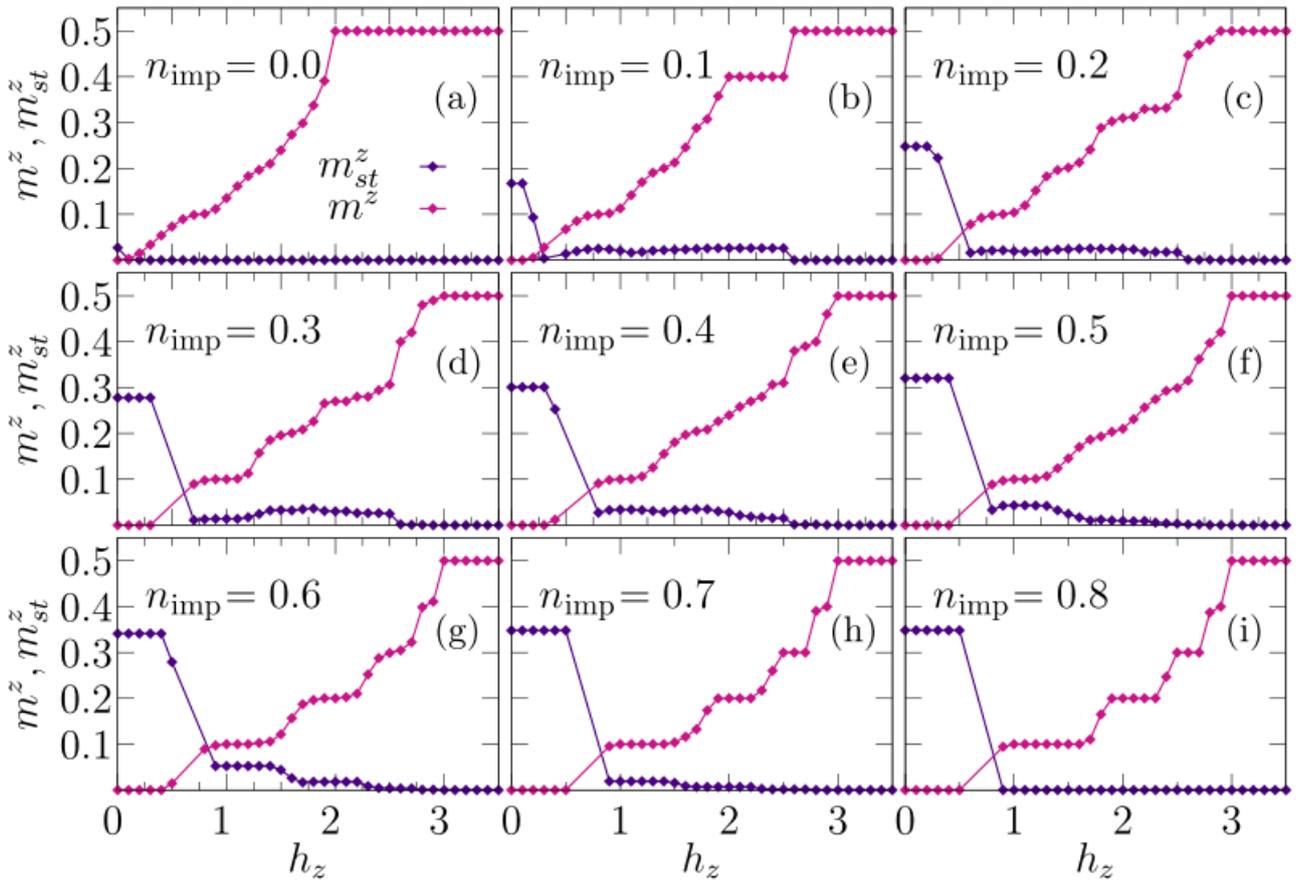


図 3.19: CMFT を用いて計算した磁化 m^z (赤) とスタaggerド磁化 m_{st}^z (青) の磁場 h_z に対する依存性。 $\Delta_{\text{imp}} = 2$ とし、 $N_{\text{av}} = 10$ 通り不純物分布について平均をとっている。

図 3.19(b)-3.19(i) に、磁化 m^z (赤) とスタaggerド磁化 m_{st}^z (青) の磁場 h_z に対する依存性を、異なる n_{imp} について示す。不純物のドーピングによって形成された Néel 秩序は有限の磁場以上で消失し、 n_{imp} の増加とともに Néel 秩序が消失する磁場の値も上昇する。これは基底状態の上に存在するギャップが閉じたと理解することができる。この特徴は基底状態の上のエネルギーギャップに等しい有限の磁場の強さまで m^z が 0 であることを反映している。XXZ 極限 ($n_{\text{imp}} = 1$) では、このギャップはハミルトニアン の異方性と関係している [43, 64]。ここで、いくつかの磁場の値については、ランダムな不純物分布のいくつかで CMFT の計算が収束しなかったために、結果を除いている。不純物濃度を増加させると、飽和磁場の値も増加していく。極端な例として、 $n_{\text{imp}} = 0.8$ の場合は平均場近似されたボンド以外の全てのボンドが異方的である。磁化とスタaggerド磁化の振る舞いから、低磁場では Néel 秩序が形成され、高磁場の極限では磁化が完全に飽和した状態であることが分かる。磁化曲線の結果は $\text{BaCo}_2\text{V}_2\text{O}_8$ で得られた結果と一致している [65]。この物質は $\Delta_{\text{imp}} = 2$ の準 1 次元 XXZ 模型で説明されると期待されている。理想的な XXZ 鎖は高磁場で Néel 秩序相から朝長 Luttinger 液体そして飽和状態への量子相転移を示すであろう。CMFT を用いて磁場下でのこの中間的な秩序を理解するためには、さらなる研究が必要である。

3.4 有限温度に関する計算結果

3.4.1 比熱と磁化率の温度依存性

前節まで、XXZ 異方性を持つスピン $\frac{1}{2}$ 不純物によって、等方的なスピン鎖に反強磁性秩序が誘起されることを明らかにした。そこでこの節では、不純物濃度 n_{imp} と異方性 Δ_{imp} の値を変えて、比熱 (C_v) と磁化率 (χ) の温度依存性に現れる相転移の特徴について議論する。

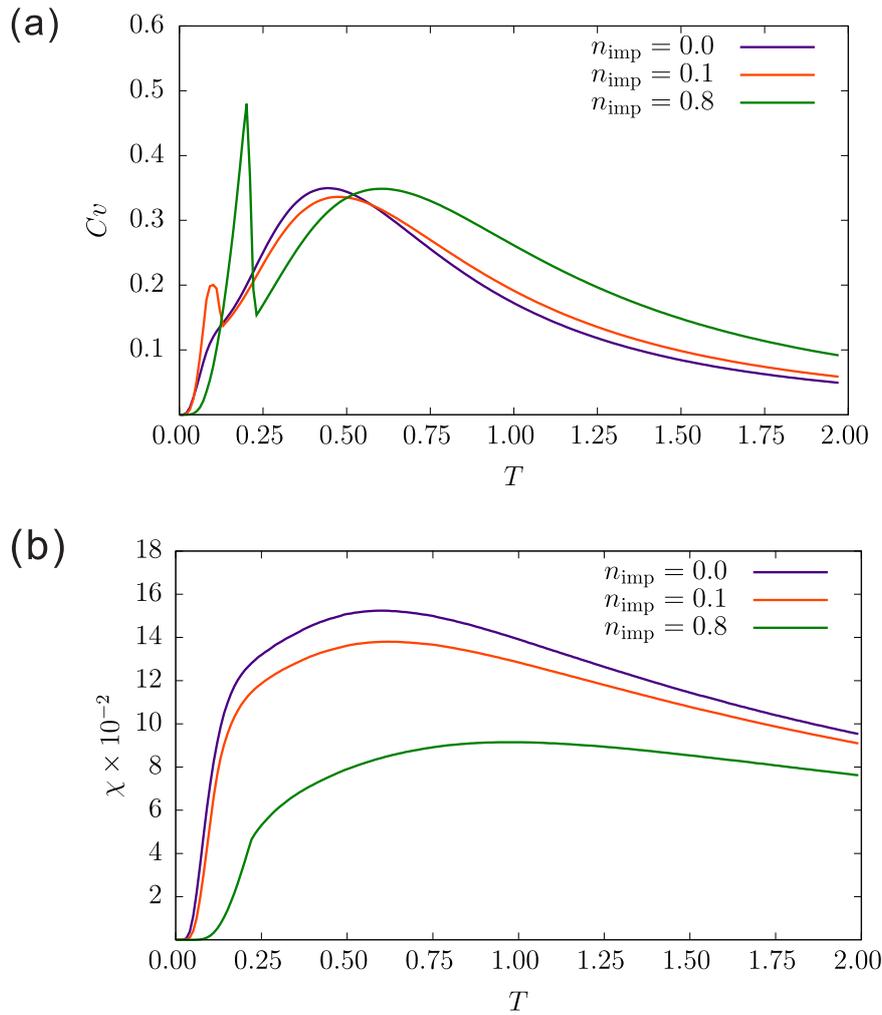


図 3.20: CMFT を用いて計算した $\Delta_{\text{imp}} = 2$ の場合の (a) 比熱と (b) 磁化率の温度依存性。

図 3.20(a) に CMFT を用いて計算した、 $\Delta_{\text{imp}} = 2$ での比熱 C_v の温度依存性を異なる n_{imp} について示す。不純物の無い $n_{\text{imp}} = 0$ では、比熱は $T = 0.4$ 付近に広いピークを持ち、滑らかに変化する。不純物濃度が低い $n_{\text{imp}} = 0.1$ では、Néel 状態から常磁性状態への相転移の結果として比熱に小さなピークが現れる。比熱 C_v に現れるピークは n_{imp} の増加とともに鋭くなる。また、高温に大きな山が現れるのはスピン間の相関が連続的に減少しているためである。図 3.20(b) には、不純物濃度の増加とともに磁化率 χ が減少する様子を示している。Heisenberg 極限である $n_{\text{imp}} = 0$ での磁化率の結果は、 $T < 0.25$ で異常な曲率を持ち、理想的な反強磁性 Heisenberg 鎖で期待される振る舞いとは異なっている。これは CMFT によって得られた状態が、ダイマー相関を持つ混合 Néel 状態になっているためであり、磁化率は反強磁性結合交替鎖 (弱く結合したダイマー) から予想されるものと一致している [66]。また、 χ の低温での振る舞いは n_{imp} が高い場合に差が見られるが、高温での振る舞いは定性的に同じである。

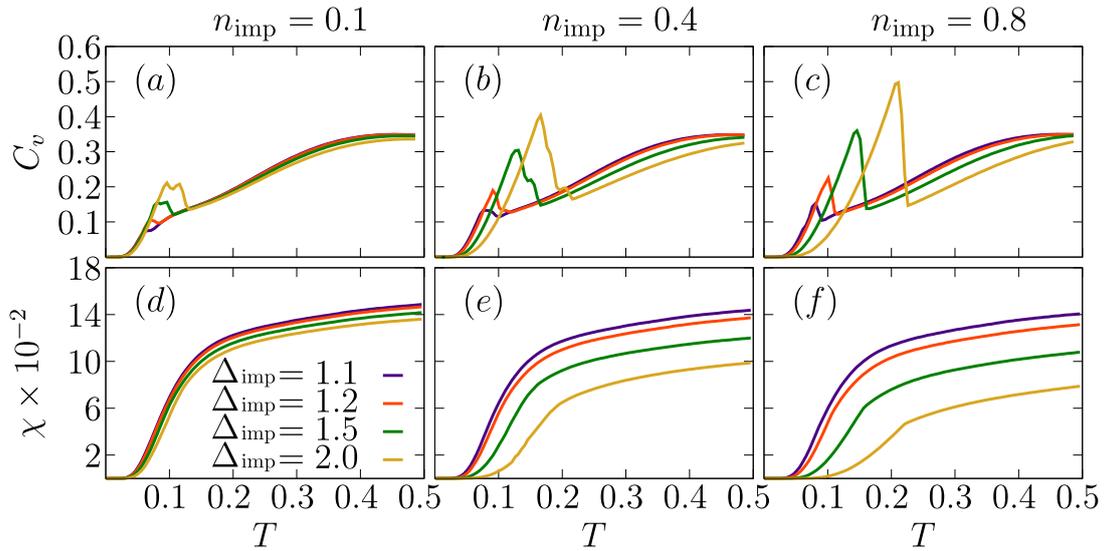


図 3.21: CMFT を用いて計算した異なる Δ_{imp} についての比熱と磁化率の温度依存性。それぞれ (a),(d) $n_{\text{imp}} = 0.1$, (b),(e) $n_{\text{imp}} = 0.4$, (c),(f) $n_{\text{imp}} = 0.8$ の場合の結果を示している。

図 3.21 に、比熱と磁化率の Δ_{imp} に対する依存性を異なる不純物密度について示す。比熱の計算結果から、不純物の XXZ 異方性 Δ_{imp} の増加とともに転移温度と比熱のピークが上昇することが分かる。図 3.21(a)-3.21(c) に示すように、この効果は $n_{\text{imp}} = 0.1, 0.4, 0.8$ の全ての不純物濃度で一貫している。 $n_{\text{imp}} = 0$ での磁化率の結果は、反強磁性ダイマー鎖から得られるものと同様である [66]。不純物濃度を増加させると χ は減少するが、この効果は Δ_{imp} が大きいほど顕著である。

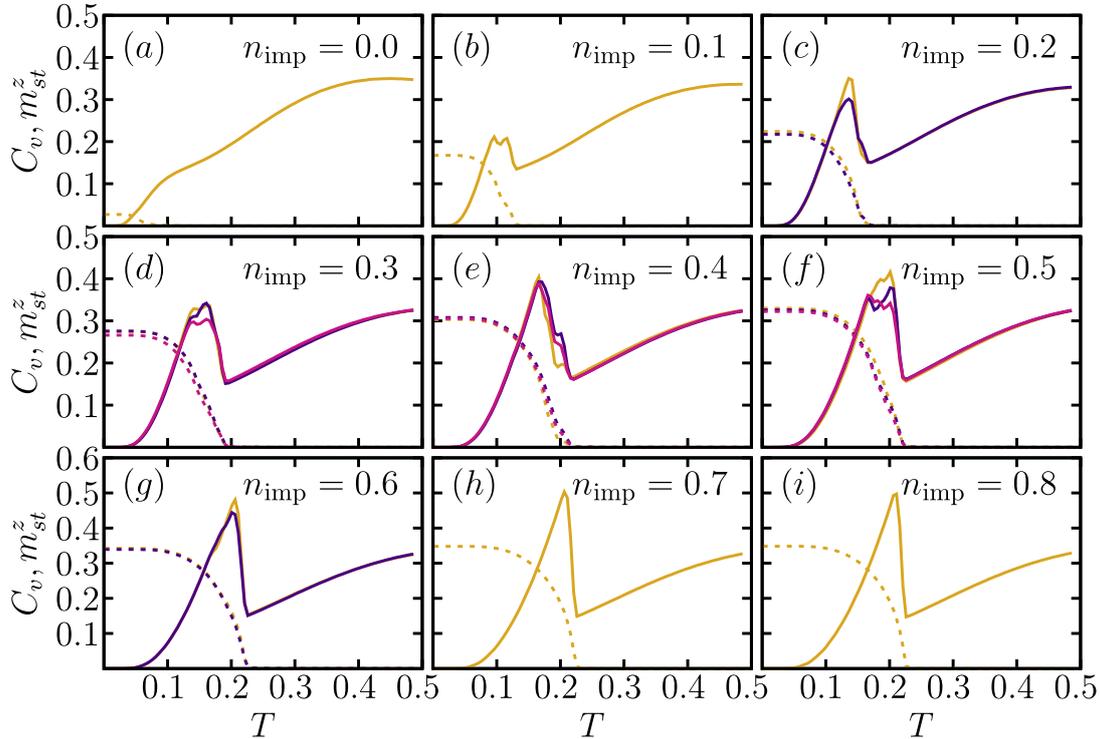


図 3.22: CMFT を用いて計算した $\Delta_{\text{imp}} = 2$ での比熱 C_v とスタッガード磁化 m_{st}^z の温度依存性。10 サイトのクラスタを用いて計算している。不純物の分布をランダムに $N_{\text{av}} = 10$ (黄), 20 (青), 40 (赤) 通りとって計算している。

図 3.22 に異なる n_{imp} について、 $\Delta_{\text{imp}} = 2$ の場合の比熱 C_v とスタッガード磁化 m_{st}^z の温度依存性を示す。Néel 状態から常磁性状態への転移温度は、 n_{imp} の増加とともに上昇することが確認できる。この研究では鎖間相互作用を平均場として取り入れているが、系に鎖間相互作用をあらわに取り入れてもこ

の傾向は変わらないと考えられる。 n_{imp} が高い場合には、相互作用のほとんどが Ising 的であるため、比熱のピークは非常に鋭くなる。中間的な不純物濃度では、不純物スピンのランダムな配置方法が膨大になるため、磁気秩序に違いが現れる。図 3.22 の色の違いは不純物分布のサンプル数 N_{av} の違いに対応している。 n_{imp} が中間の値の場合は、比熱は幅の広いピークを示し、そのピークは N_{av} を増加させることで滑らかになる。中間的な n_{imp} で C_v が非単調な振る舞いをするのは、不純物分布の影響が直接現れているためである。これらの特異性は、有限サイズ効果によるものであり、熱力学極限においては明確な相転移を示すと考えられる。

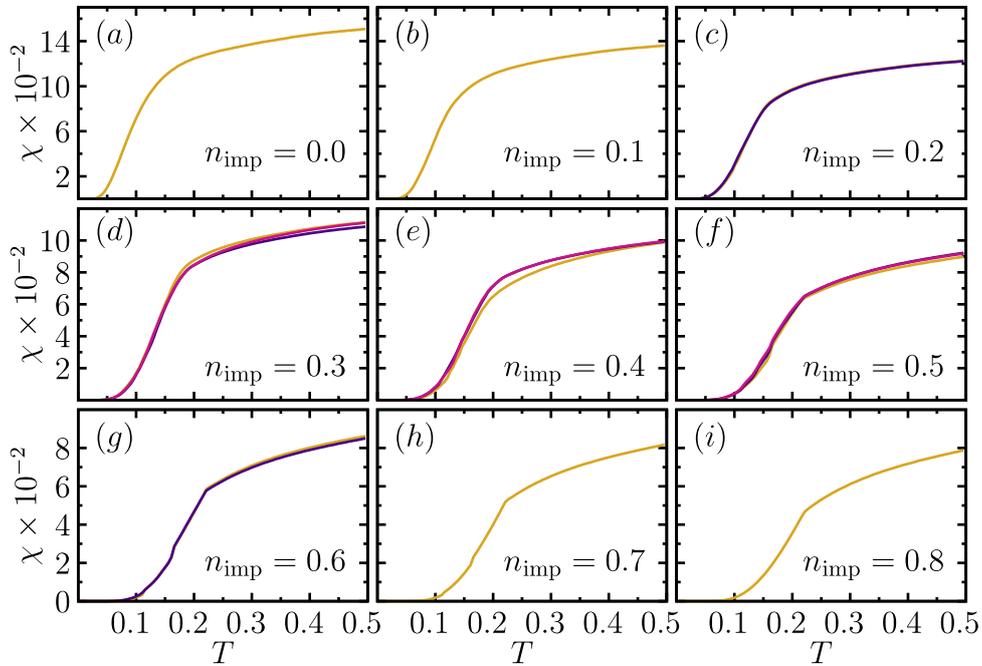


図 3.23: CMFT を用いて計算した $\Delta_{\text{imp}} = 2$ での磁化率 χ の温度依存性。10 サイトのクラスターを用いて計算している。不純物の分布をランダムに $N_{av} = 10$ (黄), 20(青), 40(赤) 通りとって計算している。

図 3.23 に $\Delta_{\text{imp}} = 2$ の場合の磁化率 χ の温度依存性を示す。不純物濃度の増加とともに磁化率は減少しているが、これは不純物濃度が高いほどより Néel 秩序が安定化するためであると考えられる。磁化率における不純物の効果は n_{imp} が大きいほど顕著であり、 $T \sim 0.25$ で不連続性を示す [図 3.23(g)-3.23(i)]。SrCo₂V₂O₈ の磁化率の結果 [37] は、 n_{imp} が高い場合の χ と同様の特徴を示す。SrCo₂V₂O₈ は XXZ 模型で記述されると予想されるが、低温では鎖間相互作用によって秩序化する。 χ に見られる不連続性は Néel 秩序の消失による結果である。

3.5 結論

本章では DMRG と CMFT を用いて、XXZ 異方性を持つスピン S 不純物をドーピングしたスピン $\frac{1}{2}$ 反強磁性 Heisenberg 鎖について研究した。ここで不純物は XXZ 異方性 Δ_{imp} を持ち、最近接サイトと XXZ 型の相互作用をすとした。まず基底状態での単一不純物の効果を調べるため、スピン相関関数、Néel 秩序の不安定性、局所スピン感受率の計算を行った。その結果スピン S 不純物の効果は以下の 2 種類に分類されることが分かった。(i) 非磁性不純物と $S = 1$ の不純物: 短距離の反強磁性相関は増大するが、長距離でのスピン相関は不純物をドーピングしていないスピン $\frac{1}{2}$ Heisenberg 鎖よりも早く減衰する。これらの不純物は磁気欠陥すなわち空孔として振る舞うため、長距離の Néel 秩序を安定化させない。(ii) $S = \frac{1}{2}$ と $S > 1$ の不純物: スピン相関の減衰率は大きくは変化しないが、XXZ 異方的 ($\Delta_{\text{imp}} \gtrsim 1$) な不純物の周りで反強磁性ゆらぎが増大し、長距離の Néel 秩序が安定化する。また、局所スピン感受率から NMR スペクトルを計算することで、実験的に観測されている SrCu_{0.99}Co_{0.01}O₂ の幅の広い NMR スペクトルが Δ_{imp} の大きい $S = 3/2$ の不純物に起因することを示唆した。

次に、(ii) の不純物の例として $S = \frac{1}{2}$ の不純物の場合について計算を行った。Néel 状態の秩序変数であるスタガード磁化 m_{st}^z の不純物濃度に対する依存性を計算し、XXZ 異方性を持つ $S = \frac{1}{2}$ 不純物を有限の濃度ドーピングすることで長距離の Néel 秩序が実現し、 m_{st}^z は n_{imp} と Δ_{imp} とともに増大することを確かめた。さらに、一様磁場 h_z の下で磁化 m_z が h_z の小さい領域で擬ギャップ的な構造を持つことを確認した。この特徴は、不純物濃度が $n_{\text{imp}} = 1$ の完全な XXZ Heisenberg 鎖に近いところでより顕著に現れる。また n_{imp} が小さい場合には、 $m^z \sim (1 - n_{\text{imp}})/2$ でプラトーのような構造が現れることも明らかにした。

さらに、CMFT を用いて比熱や磁化率等を計算することで、有限温度での Néel 秩序から常磁性相への相転移を確認し、転移温度や比熱のピークの大きさが n_{imp} と Δ_{imp} とともに増大することを確かめた。この不純物濃度やその異方性の強さに対する転移温度の依存性は、鎖間相互作用によって有限温度の相転移が可能となる現実の物質系と定性的に関係している。

また、強磁性鎖におけるスピン S 不純物の効果も自明でない問題である。最近では、異方的な強磁性鎖において、スピン S 不純物として振る舞う、相互作用によって束縛されたマグノンのエッジ状態についての研究が行われており [67]、強磁性鎖の場合にも本研究と同様の研究が期待される。

第4章 スパイラル境界条件を用いた2次元格子系の1次元格子系へのマッピング

4.1 研究の背景

4.1.1 2次元系の数値計算における問題点

量子格子模型を数値計算により解析する際には、通常は有限系で計算を行い、必要に応じて計算結果を熱力学極限へと外挿する。しかし、2次元以上の系においては系の総自由度がサイト数に対して指数関数的に増大し、サイト数やクラスターの形状が大きく制限されるため、熱力学極限での物理量を評価することが難しい。こうした系では、周期境界条件やシリンダー境界条件が用いられることが多いが、境界条件を上手く選択しないと有限系の最低エネルギー状態が無限系の基底状態と異なった状態になる等の問題が起こりうる。ここでは、2次元系に対して既存の境界条件を適用して数値計算を行う場合に生じる具体的な問題点を見ていく。

周期境界条件 (PBC)

周期境界条件 (PBC) はクラスターの端のサイト同士を繋げるような境界条件であり、例えば 4×4 サイトでのクラスターのとり方は図 4.1(a) のようになる。DMRG で計算する場合には、長距離のボンドが生じてしまうために計算のコストが著しく増大し、サイト数を大きくすることが非常に難しい。DMRG と厳密対角化法 (ED) で取り得るサイト数は、正方格子の場合にスピン系でそれぞれ 10×10 , 6×6 サイト、電子系でそれぞれ 6×6 , 4×4 サイト程度である。

また、PBC ではサイト数が小さい場合に有限系での最低エネルギー状態が熱力学極限での状態と大きく異なった状態になっていることが多いという問題もある。具体的な例として、 4×4 サイトの2次元正方格子上の反強磁性 Heisenberg 模型の基底状態を PBC を用いて計算すると、本来熱力学極限では Néel 状態になることが期待される。しかし、実際に得られる基底状態は縦の4列でそれぞれ形成されているブラケットシングレット (それぞれ $|P_{v1}\rangle, |P_{v2}\rangle, |P_{v3}\rangle, |P_{v4}\rangle$ とする) と横の4列でそれぞれ形成されているブラケットシングレット (それぞれ $|P_{h1}\rangle, |P_{h2}\rangle, |P_{h3}\rangle, |P_{h4}\rangle$ とする) の直積の和で表されるような $|\Psi_0\rangle \simeq |P_{h1}\rangle \otimes \cdots \otimes |P_{h4}\rangle + |P_{v1}\rangle \otimes \cdots \otimes |P_{v4}\rangle$ という状態に近い状態になっている。このような問題が起こるのは、正方格子の PBC の場合には縦と横に小さなボンドのループができてしまっているためである。例外として、図 4.1(b) に示すような10サイトのクラスターではこうした問題は発生しない。これは10サイトのクラスターの場合には、サイト番号が横に1から10まで通しで並んでおり、 4×4 サイトのような小さなループができないためである。

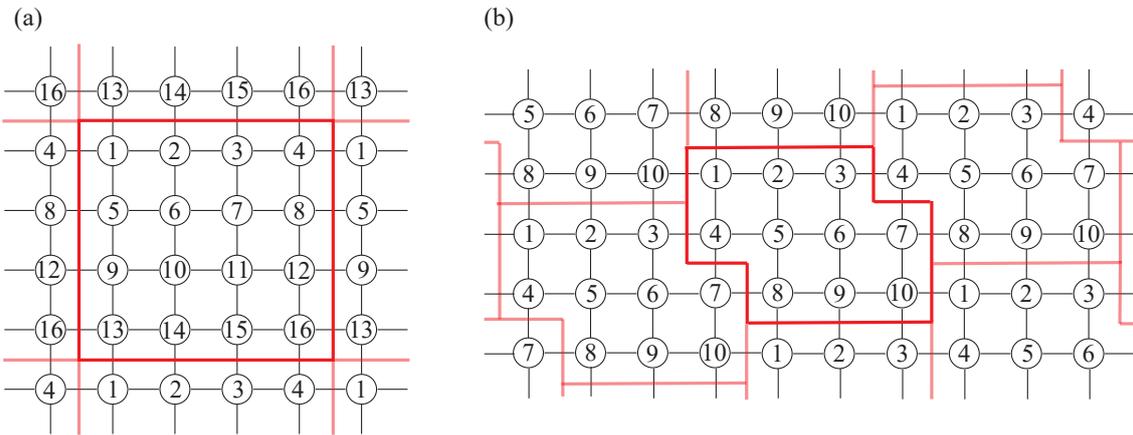


図 4.1: PBC 下での 2 次元正方格子 (a) 4×4 サイト, (b) 10 サイトのクラスター。赤で囲まれた部分が独立なクラスターを表している。

シリンダー境界条件

シリンダー境界条件は x 方向に開境界条件, y 方向に周期境界条件を課するような境界条件であり、DMRG で 2 次元系の計算を行う際によく用いられる。DMRG では円周の長さが ~ 10 程度しかとれないため、PBC を用いた場合と似たような問題が生じる。例えば、シリンダー境界条件を用いて反強磁性 Heisenberg 模型の基底状態を計算した場合には、円周の長さが偶数の時には円周上にシングレットができ、円周の長さが奇数の時にはフラストレーションが起こる。また、シリンダー境界条件では熱力学極限での物理量の値を得るために、軸方向について $L_x \rightarrow \infty$ への外挿を行った後に円周の長さについて $L_y \rightarrow \infty$ への外挿を行うという方法がよく採られる。この場合には 2 段階のサイズスケリングが必要となる上に、円周の長さを大きくすることが難しいため、安定した有限サイズスケリングを行うことが難しい。

開境界条件 (OBC)

まず開境界条件の問題としては、端のボンドが切断されているために Friedel 振動等の有限サイズ効果が現れる点が挙げられる。また、熱力学極限へのサイズスケリングを行う際にも x 方向と y 方向の 2 方向のサイズスケリングが必要となる。

既存の境界条件を用いた場合に生じる上記のような問題は、レベルスペクトロスコピーで行われているように量子数や運動量、パリティ等で状態を選別したり [68]、系の端の状態を特定の状態に固定する [69] ことで解決することができるが、こうした方法は常に上手くいくわけではない。

そこで本章では、2 次元格子系の数値計算における以上のような問題を解決する方法としてスパイラル境界条件 (SBC) [70] を導入する。後で見ると、スパイラル境界条件を用いることで、2 次元以上の格子系のサイトを 1 次元的に並べることができる。この方法は、元々モンテカルロ法において計算コストを削減する目的で使われていた [71] が、DMRG [4] やボソン化法 [72]、Jordan-Wigner 変換 [73] 等の既存の 1 次元系に対する手法を効率的に適用することも可能である。まず、具体例として 2 次元正方格子と八二カム格子の tight-binding 模型について SBC による 1 次元的なマッピングの方法を示し、状態密度や基底状態のエネルギーが熱力学極限へ近づく様子を確認する。次に、SBC の適用例として 2 次元正方格子の Hubbard 模型の half filling での基底状態のエネルギーと XXZ 模型のスタaggered 磁化の計算を行う。さらに、SBC で得られる 1 次元鎖を開境界で扱うことで、2 次元系の秩序変数を効率的に計算する方法を提案する。最後に、他の境界条件に対する SBC の優位性を物理量の有限サイズスケリングと相関関数の振舞を比較することで明らかにする。

4.2 模型と計算手法

ここでは、本章において扱う 2 次元の模型についてその性質を確認する。また、本章で用いるスパイラル境界条件 (SBC) と DMRG 計算の詳細についてもまとめる。

4.2.1 2 次元正方格子 tight-binding 模型

ここでは、2 次元正方格子 tight-binding 模型の基底状態についてまとめる。系のハミルトニアンは

$$\mathcal{H}_{0,\text{sq}} = -t \sum_{x,y,\sigma} (c_{(x,y),\sigma}^\dagger c_{(x+1,y),\sigma} + c_{(x,y),\sigma}^\dagger c_{(x,y+1),\sigma} + \text{H.c.}) \quad (4.1)$$

と表される。ここで、 $c_{(x,y),\sigma}^\dagger, c_{(x,y),\sigma}$ は、それぞれサイト (x, y) のスピン σ の電子の生成・消滅演算子であり、 t は最近接のホッピングである。

分散関係

まず、分散関係について確認する。周期境界条件を課し、フーリエ変換: $c_{\mathbf{k},\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x,y} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} c_{(x,y),\sigma}$, $\mathbf{r} = (x, y)$ を行うと、

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{0,\text{sq}} &= -t \sum_{x,y,\sigma} (c_{(x,y),\sigma}^\dagger c_{(x+1,y),\sigma} + c_{(x,y),\sigma}^\dagger c_{(x,y+1),\sigma} + \text{H.c.}) \\ &= -t \frac{1}{N} \sum_{x,y,\sigma} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \left\{ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} \left(e^{-ik'_x} + e^{-ik'_y} \right) c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}',\sigma} + \text{H.c.} \right\} \\ &= -t \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \left\{ \left(e^{-ik_x} + e^{-ik_y} \right) c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} + \text{H.c.} \right\} \\ &= -t \sum_{\mathbf{k},\sigma} \left\{ \left(e^{-ik_x} + e^{-ik_y} \right) c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} + \text{H.c.} \right\} \\ &= -2t \sum_{\mathbf{k},\sigma} (\cos k_x + \cos k_y) c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} \end{aligned} \quad (4.2)$$

となるので、分散関係は

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = -2t(\cos k_x + \cos k_y) \quad (4.3)$$

である。half filling の場合には、 $\varepsilon(\mathbf{k}) \leq 0$ の状態を電子が占有し、その波数領域は $|k_x| + |k_y| \leq \pi$ で与えられる [図 4.2(a)]。また、分散関係 (4.3) を図 4.2(b) にプロットした。

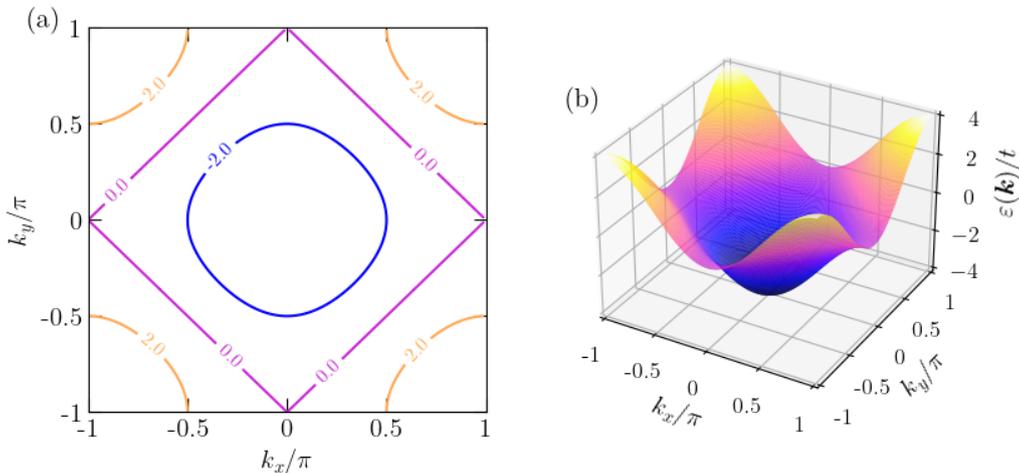


図 4.2: 2 次元正方格子 tight-binding 模型の分散関係: (a) 等高線プロット, (b) 3 次元プロット

基底状態のエネルギー

熱力学極限において、half filling での基底状態のエネルギーは、 $\varepsilon(\mathbf{k}) \leq 0$ を満たすような波数領域: $|k_x| + |k_y| \leq \pi$ での積分を実行することで計算でき、

$$\begin{aligned} e_0 &\equiv \frac{E_0}{N} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{-4t}{(2\pi)^2} \int \int_{\varepsilon(\mathbf{k}) < 0} dk_x dk_y (\cos k_x + \cos k_y) \\ &= \frac{-4t}{\pi^2} \int_0^\pi dk_x \int_0^{\pi-k_x} dk_y (\cos k_x + \cos k_y) \\ &= \frac{-4t}{\pi^2} \int_0^\pi dk_x \{(\pi - k_x) \cos k_x + \sin(\pi - k_x)\} = -\frac{16}{\pi^2} t \end{aligned} \quad (4.4)$$

となる。

状態密度

状態密度は [74] において導出されており、

$$D(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi^2 t} K \left(\sqrt{1 - \frac{\varepsilon^2}{16t^2}} \right) \quad (4.5)$$

となる。ここで、 $K(k)$ は第一種完全楕円積分で

$$K(k) = \int_0^{\pi/2} \frac{1}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \theta}} d\theta \quad (4.6)$$

である。図 4.3 に、この状態密度をプロットした。

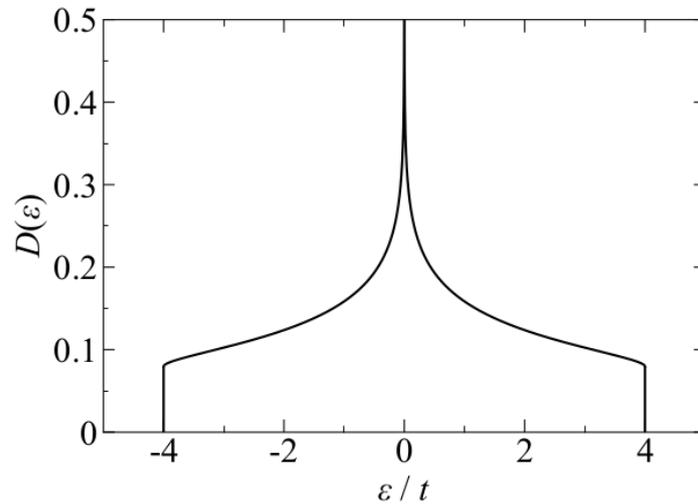


図 4.3: 2 次元正方格子 tight-binding 模型の状態密度

4.2.2 ハニカム格子 tight-binding 模型

系のハミルトニアンは

$$\mathcal{H}_{0,\text{hon}} = -t \sum_{r,\sigma} a_{r,\sigma}^\dagger (b_{r+\delta_1,\sigma} + b_{r+\delta_2,\sigma} + b_{r+\delta_3,\sigma}) + \text{H.c.} \quad (4.7)$$

と表される。ここで、 $a_{r,\sigma}$ と $b_{r,\sigma}$ はそれぞれ副格子 A, B の位置 r , スピン σ の電子の消滅演算子であり、 $\delta_1, \delta_2, \delta_3$ はハニカム格子の最近接サイトを結ぶベクトルである。図 4.4 のように、基本並進ベクトルを

$\mathbf{a}_1 = (1, 0)$, $\mathbf{a}_2 = \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right)$ とすると, $\delta_1 = \left(0, \frac{1}{\sqrt{3}}\right)$, $\delta_2 = \left(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2\sqrt{3}}\right)$, $\delta_3 = \left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2\sqrt{3}}\right)$ である。また、逆格子ベクトルは $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{i,j}$ を満たすように $\mathbf{b}_1 = \frac{4\pi}{\sqrt{3}} \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}\right)$, $\mathbf{b}_2 = \frac{4\pi}{\sqrt{3}} (0, 1)$ と定義できる。この逆格子ベクトルから決まるブリルアンゾーンを図 4.5 に示す。ブリルアンゾーンの対称点の座標は、それぞれ $\Gamma: (0,0)$, $M: \frac{2\pi}{\sqrt{3}} \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}\right)$, $K: \left(\frac{4\pi}{3}, 0\right)$ である。

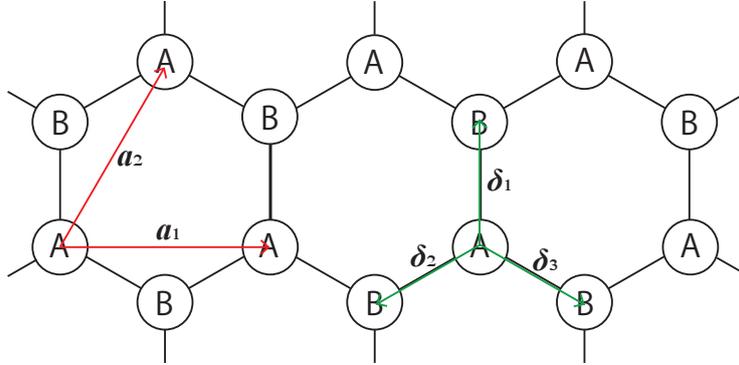


図 4.4: ハニカム格子の基本並進ベクトル $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ と最近接サイトを結ぶベクトル $\delta_1, \delta_2, \delta_3$.

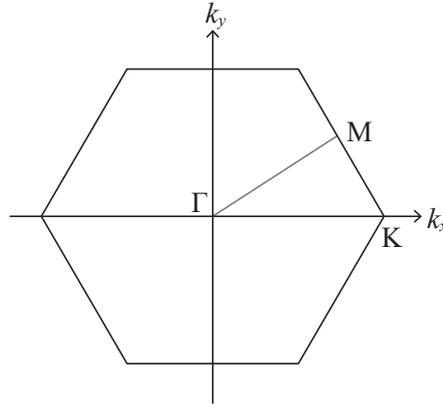


図 4.5: ハニカム格子のブリルアンゾーン

分散関係

分散関係について考える。フーリエ変換: $c_{\mathbf{k},\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} c_{\mathbf{r},\sigma}$ ($c = a, b$) を行くと

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_{0,\text{hon}} &= -t \sum_{\mathbf{r},\sigma} a_{\mathbf{r},\sigma}^\dagger (b_{\mathbf{r}+\delta_1,\sigma} + b_{\mathbf{r}+\delta_2,\sigma} + b_{\mathbf{r}+\delta_3,\sigma}) + \text{H.c.} \\
 &= -\frac{t}{N} \sum_{\mathbf{r},\sigma} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger (e^{-i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{r}+\delta_1)} + e^{-i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{r}+\delta_2)} + e^{-i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{r}+\delta_3)}) b_{\mathbf{k}',\sigma} + \text{H.c.} \\
 &= -t \sum_{\mathbf{k}\sigma} a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger (e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta_1} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta_2} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta_3}) b_{\mathbf{k},\sigma} + \text{H.c.} \\
 &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger b_{\mathbf{k},\sigma} + \text{H.c.} \\
 &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger & b_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon_{\mathbf{k}} \\ \varepsilon_{\mathbf{k}}^* & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k},\sigma} \\ b_{\mathbf{k},\sigma} \end{pmatrix} \tag{4.8}
 \end{aligned}$$

となる。ここで

$$\begin{aligned}\varepsilon_{\mathbf{k}} &\equiv -t \sum_{i=1}^3 e^{-i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_i} = -t \left(e^{-i\frac{k_y}{\sqrt{3}}} + e^{i\frac{k_x}{2} + i\frac{k_y}{2\sqrt{3}}} + e^{-i\frac{k_x}{2} + i\frac{k_y}{2\sqrt{3}}} \right) \\ &= -t \left\{ \cos \frac{k_y}{\sqrt{3}} - i \sin \frac{k_y}{\sqrt{3}} + 2 \cos \frac{k_x}{2} \left(\cos \frac{k_y}{2\sqrt{3}} + i \sin \frac{k_y}{2\sqrt{3}} \right) \right\}\end{aligned}\quad (4.9)$$

である。したがって、分散関係は式 (4.8) の行列を対角化することで得られ

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \pm|\varepsilon_{\mathbf{k}}| = \pm t \sqrt{1 + 4 \cos^2 \frac{k_x}{2} + 4 \cos \frac{k_x}{2} \cos \frac{\sqrt{3}k_y}{2}}\quad (4.10)$$

となる。この分散関係の 3 次元プロットを図 4.6(a) に、ブリルアンゾーンの Γ M K Γ の経路に沿ったプロットを図 4.6(b) に示す。ブリルアンゾーンの K 点では上下のバンドが接し、この点を Dirac 点と呼ぶ。

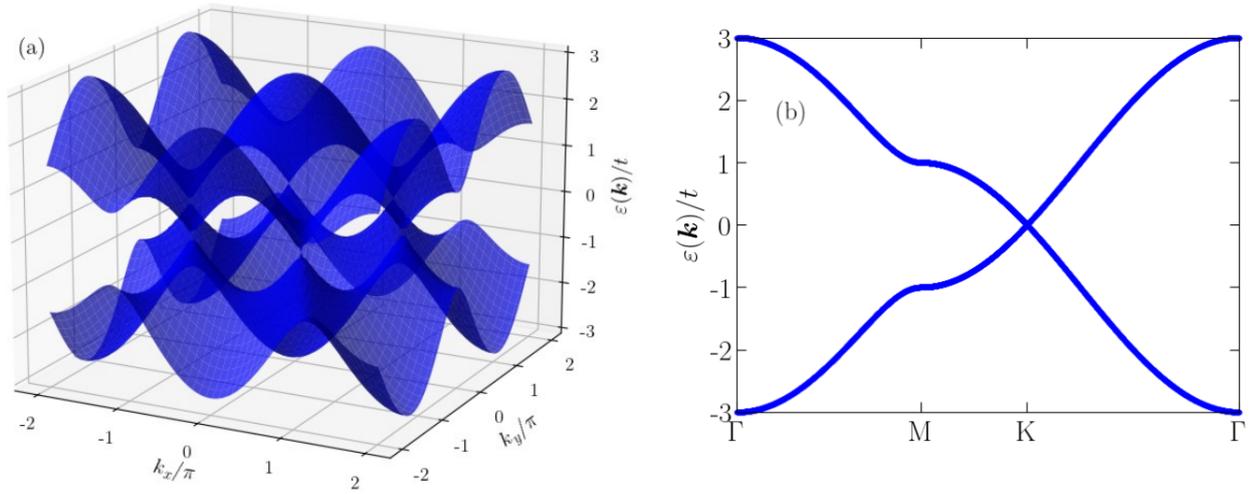


図 4.6: 八ニカム格子 tight-binding 模型の分散関係: (a)3 次元プロット, (b) Γ M K Γ の経路に沿ったプロット

状態密度

状態密度は [74] において導出されており、

$$D(\varepsilon) = |\varepsilon| D_t(\varepsilon^2 - 3)\quad (4.11)$$

となる。ここで、 $D_t(\varepsilon)$ は三角格子上の tight-binding 模型の状態密度であり、 $r = \sqrt{3 + \varepsilon/t}$, $z_1 = 4r$, $z_2 = (3 - r)(r + 1)^3/4$ として

$$D_t(\varepsilon) = \begin{cases} \frac{1}{\pi^2 \sqrt{z_2}} K \left(\sqrt{\frac{z_1}{z_2}} \right) & (-3 \leq \varepsilon/t \leq -2) \\ \frac{1}{\pi^2 \sqrt{z_1}} K \left(\sqrt{\frac{z_2}{z_1}} \right) & (-2 \leq \varepsilon/t \leq 6) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}\quad (4.12)$$

である。図 4.7 に状態密度 (4.11) をプロットした。

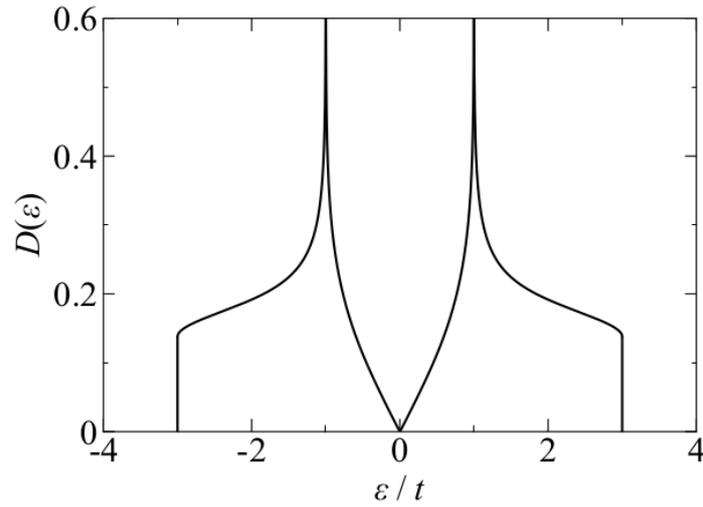


図 4.7: ハニカム格子 tight-binding 模型の状態密度

4.2.3 2次元正方格子 Hubbard 模型

系のハミルトニアンは次のように表される。

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (c_{i, \sigma}^\dagger c_{j, \sigma} + c_{j, \sigma}^\dagger c_{i, \sigma}) + U \sum_i n_{i, \uparrow} n_{i, \downarrow} \quad (4.13)$$

ここで、 U はオンサイトのクーロン斥力であり、 $n_{i, \sigma} = c_{i, \sigma}^\dagger c_{i, \sigma}$ はサイト i のスピン σ の電子数の演算子である。また、 $\langle ij \rangle$ についての和は全ての最近接のペアについてとる。この系は、 $U = 0$ の場合には 2 次元正方格子 tight-binding 模型となる。

基底状態のエネルギー

この系は 2 次元の電子系であり、 $U > 0$ の場合に熱力学極限での基底状態のエネルギーを正確に評価することは難しい。図 4.8 に、シリンダー境界条件と DMRG を用いて計算された $U/t = 8$ での half filling の基底状態のエネルギーの有限サイズスケールリングの結果 [75] を示した。

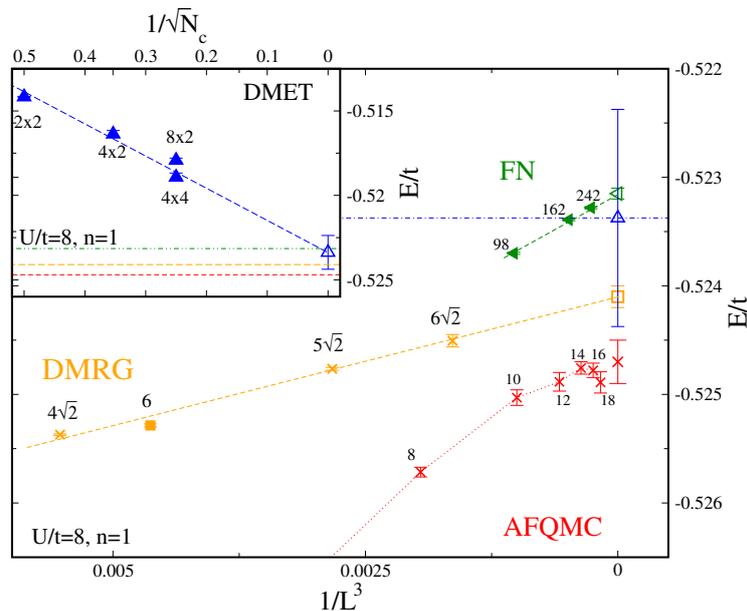


図 4.8: 2 次元正方格子 Hubbard 模型の $U/t = 8$ での基底状態のエネルギーの有限サイズスケールリングの様子 [75]。

図 4.8 では量子モンテカルロ法や DMRG による計算結果の外挿の様子が示されているが、DMRG では円周の長さが $6\sqrt{2}$ までの外挿で、熱力学極限でのサイト当りのエネルギーが $E/t = -0.5241$ と求められている。また、他の手法による外挿値を見ると、熱力学極限での基底状態エネルギーの値は大体 $E/t = -0.522 \sim -0.525$ 程度であることが分かる。

4.2.4 2次元正方格子 XXZ 模型

ここでは、本章で計算する 2 次元正方格子 XXZ 模型の基底状態の性質についてまとめる。系のハミルトニアンは次のように表される。

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + \Delta S_i^z S_j^z) \quad (4.14)$$

ここで、 S_i^γ ($\gamma = x, y, z$) はスピン S の演算子であり、 Δ は異方性を表すパラメータである。また、 $\langle ij \rangle$ についての和は全ての最近接のペアについてとる。

基底状態での自発磁化

第 3 章の 3.1.2 節で確認した 1 次元の $S = 1/2$ XXZ 模型の場合とは異なり、この系は全ての S 及び Δ で磁気的な長距離秩序を持つことが知られている [76, 77]。基底状態には Δ の値により以下の 3 つの相が現れる [76, 77, 78, 79, 80]。

(i) $\Delta > 1$ のとき、 z 方向に反強磁性的にスピンの並んだ容易軸の Néel 相となる。すなわち、熱力学極限において容易軸のスタッガード磁化 $m_{\text{st}}^z = \frac{1}{N} \sum_i |(-1)^i \langle S_i^z \rangle|$ が有限となる。

(ii) $-1 < \Delta < 1$ のとき、 xy 面内の任意の方向に反強磁性的にスピンの並んだ容易面の Néel 相となる。すなわち、熱力学極限において容易面内のスタッガード磁化 $m_{\text{st}}^x = \frac{1}{N} \sum_i |(-1)^i \langle S_i^x \rangle|$ (磁化が x 方向を向いているとした場合) が有限となる。

(iii) $\Delta < -1$ のとき、 z 方向に完全にスピンの偏極した強磁性相となる。すなわち、有限の磁化 $m^z = \frac{1}{N} \sum_i |\langle S_i^z \rangle| = S$ を持つ。

また、 $\Delta = \pm 1$ での相転移はともに 1 次転移である。図 4.9 に $S = 1/2$ の場合の自発磁化の Δ 依存性を模式的に示す。 $\Delta = 1$ での熱力学極限でのスタッガード磁化の値は様々な方法で計算されており [81, 82, 83, 84, 85]、 $m_{\text{st}}^z \simeq 0.307$ 程度であることが分かっている。

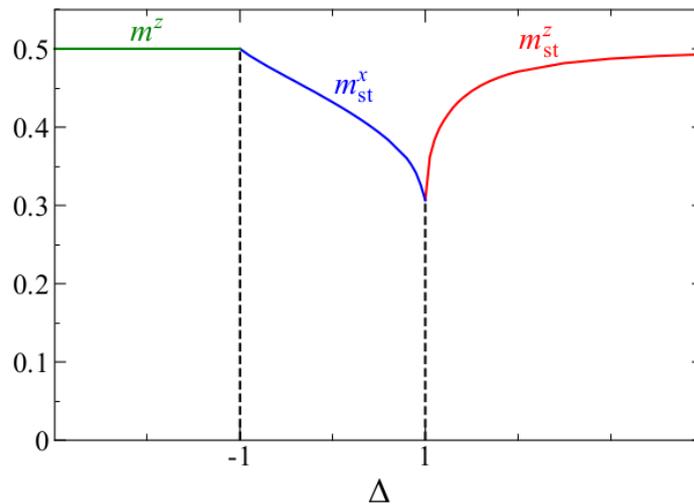


図 4.9: 2次元正方格子 $S = 1/2$ XXZ 模型の自発磁化の Δ 依存性の模式図。

$\Delta = -1$ での基底状態

$\Delta = -1$ ではこの系を厳密に解くことができ、基底状態はサイト数を N としてエネルギー $E_0 = -2NS^2$ を持ち、2 重に縮退している。1 つ目の状態は $\Delta < -1$ 側の、単純な強磁性状態で

$$|\Psi_0(\text{FM})\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \quad (4.15)$$

と表される。ここで、 $|\uparrow\rangle$ と $|\downarrow\rangle$ は z 方向と $-z$ 方向に全てのスピンの向きが揃った状態を表している。もう一つの状態は $\Delta > -1$ 側の、スピンの向きが xy 面内に反強磁性的に並んだ状態である。磁化の向きは xy 面内の任意の方向で、大きさは S である。この状態は

$$|\Psi_0(\text{XY})\rangle = \lambda_m |\psi_m\rangle \quad (4.16)$$

と表される。ここで、 $|\psi_m\rangle$ は $S_{\text{tot}}^z = \sum_{i=1}^{L^2} S_i^z = 0$ の部分空間に制限した基底であり、 m は可能なスピンの配置全てについて和をとる。 $|\Psi_0(\text{FM})\rangle$ と $|\Psi_0(\text{XY})\rangle$ は直交しており、 $\Delta \rightarrow \infty$ の極限で系は Ising 模型に単純化される。基底 $|\psi_m\rangle$ が他の基底 $|\psi'_m\rangle$ から n 回の交換操作で得られるとき、これらの基底の係数には $\lambda_m = (-1)^n \lambda'_m$ という関係が成り立つ。以下に、 $S = 1/2$ と $S = 1$ の場合の具体的な係数の値を示す。

$S = 1/2$

この場合には、各サイトの状態はスピン up ($|\uparrow\rangle$) とスピン down ($|\downarrow\rangle$) のいずれかである。 $S_{\text{tot}}^z = 0$ の空間で考えているので、 N サイトの系は $\frac{N}{2}$ 個の up スピンと $\frac{N}{2}$ 個の down スピンで構成される。各サイトには 2 種類の状態しかないため、係数 λ_m は、スピン配置の総数 $\mathcal{P} = \frac{N!}{(N/2)!(N/2)!}$ を用いて、 $\frac{1}{\sqrt{\mathcal{P}}}$ か $-\frac{1}{\sqrt{\mathcal{P}}}$ の値をとる。

$S = 1$

この場合には、各サイトの状態はスピン up ($|\uparrow\rangle$)、スピン down ($|\downarrow\rangle$)、スピン 0 ($|0\rangle$) のいずれかである。 $S_{\text{tot}}^z = 0$ の空間で考えているので、up スピンと down スピンのサイトの数は等しくなる。この個数を $r/2$ とおくと、 N サイトの系ではスピン 0 のサイトの数は $N - r$ となる。係数の絶対値は $|\lambda_m| = 2^{N-2r} |a|$ のように r に依存する。ここで、 a の値は条件

$$|a|^2 \sum_{r=0}^{N/2} N C_{2r} C_r 2^{N-2r} = 1 \quad (4.17)$$

によって決まる。

4.2.5 スパイラル境界条件 (SBC)

スパイラル境界条件 (SBC) [70] を用いることで、2 次元以上の任意の格子系を並進対称性を持つ周期的な 1 次元格子系にマップすることができる。したがって、DMRG 等の 1 次元系に適用される手法をこの 1 次元格子系に適用することができる。ここでは、例として 2 次元正方格子と八二カム格子上の tight-binding 模型を考えて SBC による 1 次元鎖へのマッピングの方法を示し、基底状態のエネルギーと状態密度が熱力学極限へ近づいていく様子を確認する。

2 次元正方格子

最初の例として、2 次元正方格子上的 tight-binding 模型を考える。図 4.10 に 2 次元正方格子 4×4 サイトでの SBC を示す。ここに示しているのは、Néel 状態のような $k = (\pi, \pi)$ の周期性を持つ状態と整合するような格子の採り方であり、SBC では図 4.10 に示した以外にも想定する秩序によって格子の形状を柔軟に採ることができる [70]。このような格子の採り方については、付録 B.2 で詳しく説明している。サイトを図 4.10 の緑の破線に沿って付けると、これは最近接と第 3 近接のボンドを持つ周期的な 1 次元鎖と等価であることが分かる [図 4.11]。

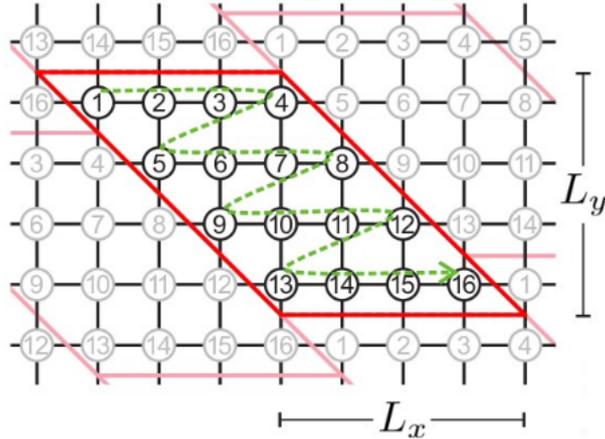


図 4.10: 2 次元正方格子 4×4 サイトの SBC

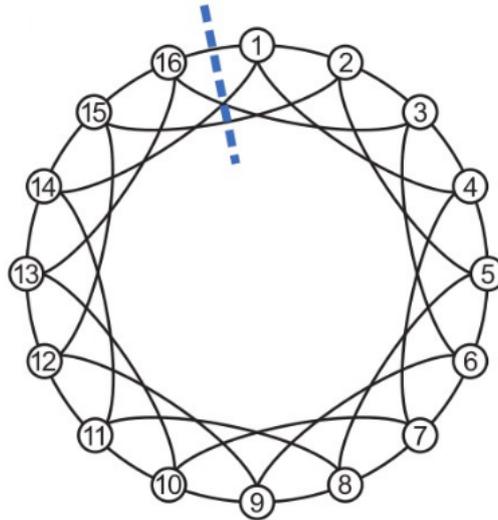


図 4.11: 図 4.10 のクラスターにおいて、緑の線に沿ってサイトを付けることで得られる 1 次元鎖。open chain は破線に示すように、2 サイト間の L_x 個のボンドを切断することで得られる。

一般的に $L_x \times L_y$ サイトの正方格子は、最近接と $L_x - 1$ 次近接のボンドを持つ周期的な 1 次元鎖にマップできる。この 1 次元鎖でのハミルトニアンは次のように書ける。

$$\mathcal{H}_{\text{sq},0} = -t \sum_{\sigma} \sum_{i=1}^{L_x L_y} (c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{i+1,\sigma} + c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{i+(L_x-1),\sigma} + \text{H.c.}) \quad (4.18)$$

フーリエ変換: $c_{K,\sigma} = (1/\sqrt{L_x L_y}) \sum_i \exp(iK r_i) c_{i,\sigma}$ を代入すると、

$$\mathcal{H}_{\text{sq},K} = -2t \sum_{K,\sigma} (\cos K + \cos(L_x - 1)K) c_{K,\sigma}^{\dagger} c_{K,\sigma} \quad (4.19)$$

となり、分散関係は $\varepsilon(K) = -2t(\cos K + \cos(L_x - 1)K)$ となる。ここで、 K は元の正方格子の波数を 1 次元系の波数 $K = \frac{2\pi}{L_x L_y} n$, $n = n_x + L_x n_y = 0, 1, \dots, L_x L_y - 1$ に変換したものである。

$L_y \rightarrow \infty$ として、この分散関係の L_x 依存性をプロットしたのが、図 4.12 である。元の 2 次元格子の構造を反映して、分散関係は K の関数として振動することが分かる。また、 $L_x \rightarrow \infty$ の極限で帯状のバンド構造になり、これが正方格子を 1 次元格子へマップした場合の分散関係であると解釈できる。

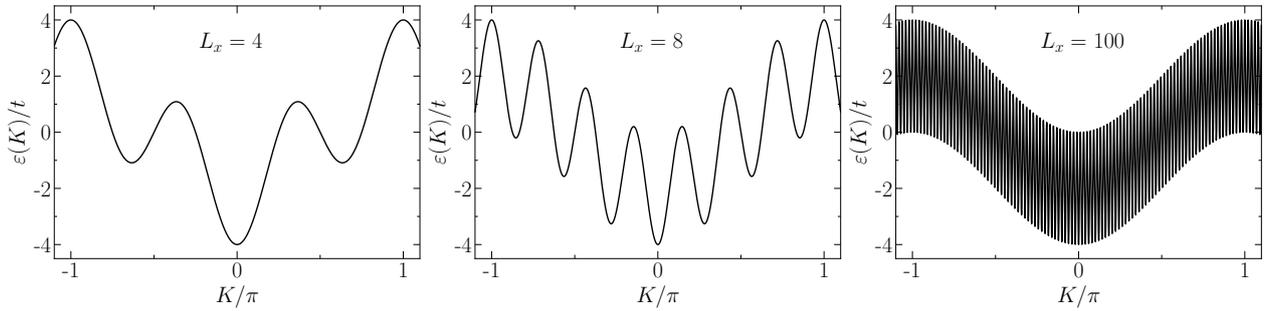


図 4.12: $\varepsilon(K)$ の L_x 依存性

図 4.10 のクラスターで 2 次元平面を覆い尽くすことができるため、熱力学極限において物理量の値は元の正方格子と一致するはずである。half filling の場合にこの 1 次元格子の基底状態のエネルギーが、熱力学極限で正方格子の場合と一致することを確認する。 $L_x = 8, L_y \rightarrow \infty$ での分散関係を図 4.13 に示す。half filling の場合は影のついた $\varepsilon(K) < 0$ の領域を積分することになる。

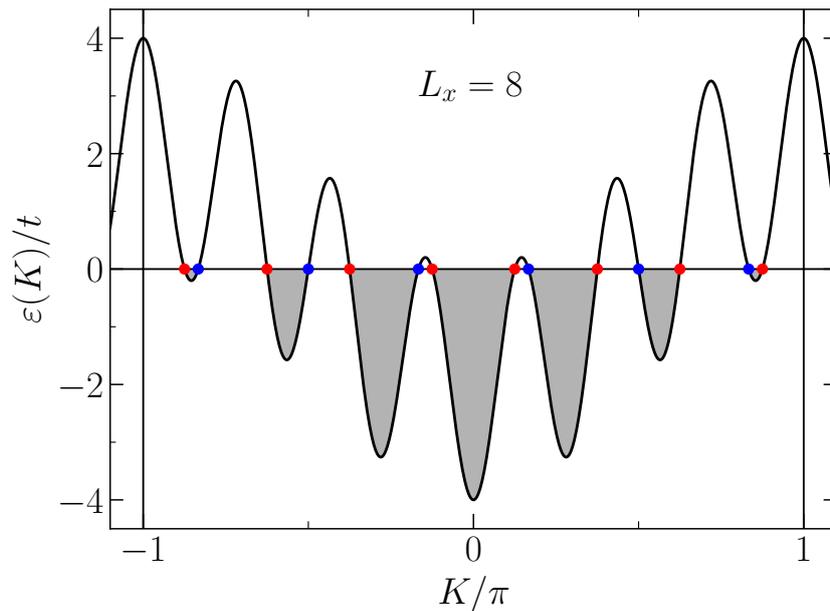


図 4.13: SBC を適用した正方格子の $L_x = 8, L_y \rightarrow \infty$ での分散関係。half filling では影のついた領域を電子が占有する。

$\cos K + \cos(L_x - 1)K = 2 \cos \frac{L_x K}{2} \cos \frac{(L_x - 2)K}{2}$ であるから、図 4.13 で赤丸、青丸で示したフェルミ点はそれぞれ

$$\frac{L_x K_r}{2} = \frac{\pi}{2} + n_r \pi \rightarrow K_r = \frac{\pi}{L_x} (2n_r - 1) \quad (4.20)$$

$$\frac{(L_x - 2)K_b}{2} = \frac{\pi}{2} + n_b \pi \rightarrow K_b = \frac{\pi}{L_x - 2} (2n_b - 1), \quad (4.21)$$

で与えられる。ここで、 $n_r, n_b = 1, 2, \dots$ である。したがって、基底状態のエネルギーは熱力学極限で

$$\begin{aligned}
e_0 &= \frac{-2t}{\pi} \int_{\varepsilon(K) < 0} dK (\cos K + \cos(L_x - 1)K) \\
&= \frac{-4t}{\pi} \int_0^\pi dK (\cos K + \cos(L_x - 1)K) \theta(-\varepsilon(K)) \\
&= \frac{-4t}{\pi} \left(\left[\sin K + \frac{\sin[(L_x - 1)K]}{L_x - 1} \right]_0^{\frac{\pi}{L_x}} + \left[\sin K + \frac{\sin[(L_x - 1)K]}{L_x - 1} \right]_{\frac{\pi}{L_x}}^{\frac{3\pi}{L_x}} \right. \\
&\quad \left. + \dots + \left[\sin K + \frac{\sin[(L_x - 1)K]}{L_x - 1} \right]_{\frac{(L_x-1)\pi}{L_x}}^{\frac{(L_x-3)\pi}{L_x}} \right) \\
&= \frac{-4t}{\pi} \left[\left(\sin \frac{\pi}{L_x} + \sin \frac{3\pi}{L_x} + \dots + \sin \frac{(L_x - 1)\pi}{L_x} \right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{L_x - 1} \left(\sin \frac{(L_x - 1)\pi}{L_x} + \sin \frac{3(L_x - 1)\pi}{L_x} + \dots + \sin \frac{(L_x - 1)^2\pi}{L_x} \right) \right. \\
&\quad \left. - \left(\sin \frac{\pi}{L_x - 2} + \sin \frac{3\pi}{L_x - 2} + \dots + \sin \frac{(L_x - 3)\pi}{L_x - 2} \right) \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{L_x - 1} \left(\sin \frac{(L_x - 1)\pi}{L_x - 2} + \sin \frac{3(L_x - 1)\pi}{L_x - 2} + \dots + \sin \frac{(L_x - 3)(L_x - 1)\pi}{L_x - 2} \right) \right]. \quad (4.22)
\end{aligned}$$

ここで $\sin x + \sin(3x) + \dots + \sin[(2n - 1)x] = \frac{1 - \cos(2nx)}{2 \sin x}$ が成り立つことを用いると

$$\begin{aligned}
e_0 &= \frac{-4t}{\pi} \left(\frac{1}{\sin \frac{\pi}{L_x}} + \frac{1}{(L_x - 1) \sin \left(\frac{L_x - 1}{L_x} \pi \right)} - \frac{1}{\sin \frac{\pi}{L_x - 2}} - \frac{1}{(L_x - 1) \sin \left(\frac{L_x - 1}{L_x - 2} \pi \right)} \right) \\
&\xrightarrow{L_x \gg 1} \frac{-4t}{\pi} \left(\frac{L_x}{\pi} + \frac{L_x}{\pi(L_x - 1)} - \frac{L_x - 2}{\pi} + \frac{L_x - 2}{\pi(L_x - 1)} \right) \xrightarrow{L_x \rightarrow \infty} -\frac{16}{\pi^2} t \quad (4.23)
\end{aligned}$$

となり、元の正方格子の無限系での基底状態エネルギー [式 (4.4)] と一致することが分かる。したがって、SBC 下での有限系は熱力学極限に断熱的に接続されていることが確かめられた。

八ニカム格子

もう一つの例として八ニカム格子上の tight-binding 模型を考える。八ニカム格子での SBC と対応する 1 次元鎖をそれぞれ図 4.14 と 4.15 に示す。

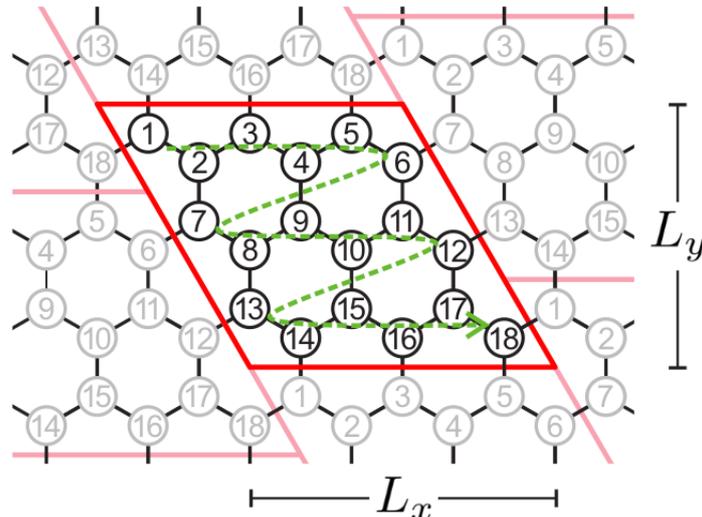


図 4.14: 3×3 のユニットセルの八ニカム格子

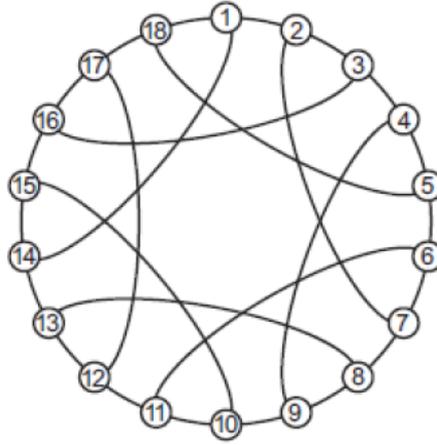


図 4.15: 図 4.14 のクラスターにおいて、緑の矢印にそってサイト番号を付けることで得られる 1 次元鎖

$2L_x \times L_y$ サイトのハニカム格子は、最近接と $2L_x - 1$ 次近接のボンドを持つ 1 次元格子と等価であり、対応する 1 次元格子でのハミルトニアンは

$$\mathcal{H}_{\text{hon},0} = -t \sum_{i=1}^{L_x L_y} \sum_{\sigma} (c_{2i-1,\sigma}^{\dagger} c_{2i,\sigma} + c_{2i,\sigma}^{\dagger} c_{2i+1,\sigma} + c_{2i,\sigma}^{\dagger} c_{2i+(2L_x-1),\sigma} + \text{H.c.}) \quad (4.24)$$

と書ける。正方格子の場合と同様にフーリエ変換を行うと、 $L_y \rightarrow \infty$ の極限で分散関係は

$$\varepsilon(K) = \pm t \sqrt{1 + 4 \cos^2 \frac{K}{2} + 4 \cos \frac{K}{2} \cos \frac{(2L_x - 1)K}{2}} \quad (4.25)$$

と書ける。 $\varepsilon(K)$ の L_x 依存性を図 4.16, 4.17, 4.18 に示す。

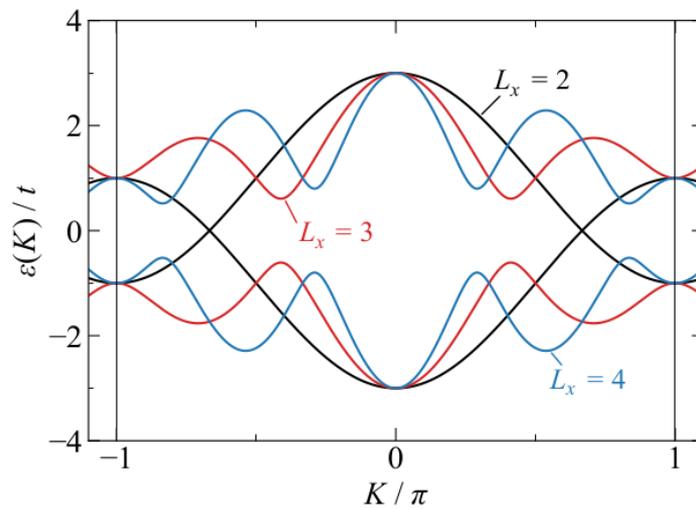
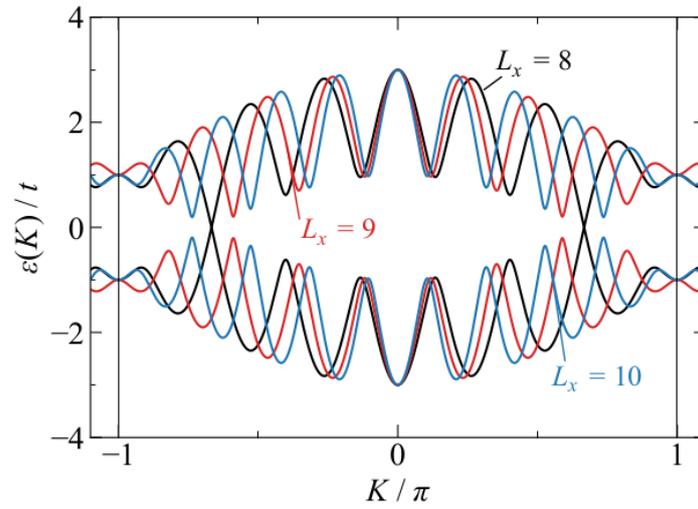
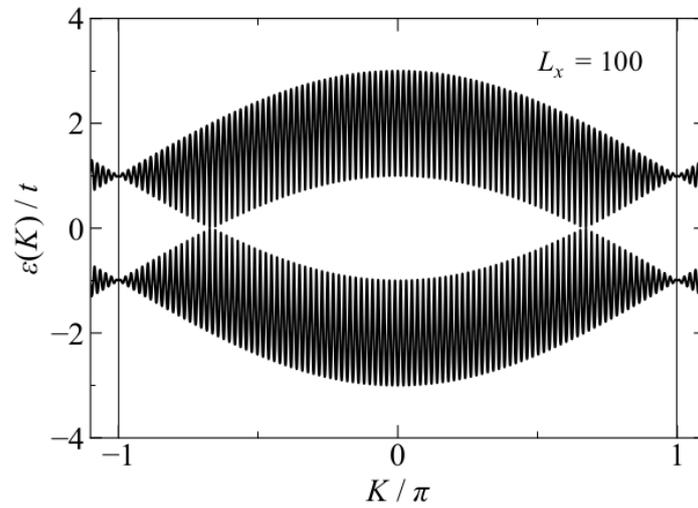


図 4.16: $L_y \rightarrow \infty$ での分散関係 $\varepsilon(K)$ の L_x 依存性 ($L_x = 2 - 4$)


 図 4.17: $L_y \rightarrow \infty$ での分散関係 $\varepsilon(K)$ の L_x 依存性 ($L_x = 8 - 10$)

 図 4.18: $L_y \rightarrow \infty$ での分散関係 $\varepsilon(K)$ の L_x 依存性 ($L_x = 100$)

$2L_x - 1 = 3M$ (M は整数) の時のみ、 $K = \pm \frac{2}{3}\pi$ で上下のバンドが接することが分かる。 $L_x, L_y \rightarrow \infty$ の極限でバンドの構造は 2 次元のグラフェンをジグザグの 1 次元軸に投影したものと等価になる [86]。したがって、元のハニカム格子の Dirac 点が $K = \pm \frac{2}{3}\pi$ に再現される。

状態密度

ここでは、SBC で得られる 1 次元系の状態密度がどのように熱力学極限へ近づくのかを確認する。簡単のため、以降では $L_x = L_y = L$ の場合を考える。正方格子とハニカム格子上の tight-binding 模型の状態密度の L 依存性を図 4.19(a), (b) に示す。どちらの格子でも、 L を大きくすることで熱力学極限での状態密度 [図 4.3, 4.7] に滑らかに繋がっていることが分かる。また、van Hove 特異点を含めた全体的な形状も比較的小さなクラスターで大体再現されている。これは、PBC での有限サイズクラスターのエネルギー準位の縮退が、SBC によって回転対称性が部分的に壊されることによって解けるためである。 $L \times L$ サイトの正方格子のクラスターでは、独立な波数の数は SBC で $\frac{L^2}{2} + 1$, PBC で $\frac{L^2}{8} + \frac{3L}{4} + 1$ である。詳細は付録 B.1 に記述する。

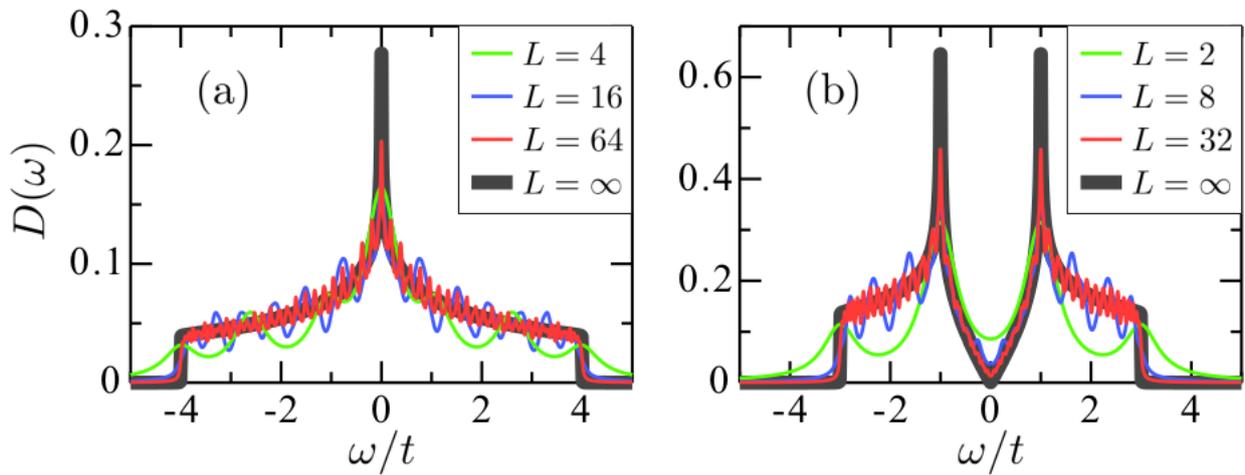


図 4.19: (a) 正方格子と (b) ハニカム格子上の tight-binding 模型の状態密度の L 依存性。 δ 関数のピークの広がりはいずれもそれぞれ $1.6/L$, $0.8/L$ としている。

4.2.6 DMRG

本章では、SBC を用いた 2 次元量子系への DMRG の適用例として、2 次元正方格子上的 Hubbard 模型と XXZ Heisenberg 模型について、それぞれ half filling での基底状態エネルギーとスタaggered 磁化の値を計算する。DMRG は本来 1 次元系の基底状態を正確に計算するのに適した手法であるが、SBC を用いることで 2 次元系においても精度の高い計算ができることを確認する。

2 次元正方格子 Hubbard 模型の基底状態エネルギーの計算では、SBC で得られる周期的 1 次元鎖を開境界で扱った open chain を用い、 $N = L^2 = 144$ サイトまでの系で計算を行った。 $m = 12000$ までの状態数で計算し、discarded weight は最大で $\sim 10^{-5}$ 程度である。2 次元正方格子 XXZ Heisenberg 模型のスタaggered 磁化の計算では、SBC で得られる周期的 1 次元鎖を周期境界のまま扱った periodic chain を主に用い、 $N = L^2 = 100$ サイトまでの系で計算を行った。 $m = 12000$ までの状態数で計算し、discarded weight は最大で 10^{-6} のオーダーである。この discarded weight の値は、2 次元量子系の DMRG 計算としては十分な精度が得られる値と考えられる。また、計算結果は全て $m \rightarrow \infty$ への外挿を行っている。DMRG の計算精度についての詳細は付録 B.3 に示している。

4.3 DMRG による計算結果

2 次元系に対して DMRG を適用し熱力学極限での物理量を得ることは、単に有限サイズクラスターでの計算が難しいだけでなく、計算結果を熱力学極限へ外挿する際にも x 方向と y 方向の 2 方向に有限サイズスケリングを行う必要があるため容易ではない。この問題は、SBC を用いて 2 次元系を 1 次元格子系にマッピングすることで改善することができる。SBC で得られる 1 次元鎖は 1 次元系としての並進対称性を持っているため、DMRG で計算する際にも discarded weight の偏りが生じにくいと考えられる。ここでは SBC を利用した 2 次元系への DMRG の適用例として 2 次元正方格子上的 Hubbard 模型と XXZ 模型の 2 種類の模型について、それぞれ基底状態のエネルギーとスタaggered 磁化を計算し、熱力学極限へ外挿した結果を示す。これらの問題は 2 次元量子系の数値計算における長年の問題であり、近年決着がついたばかりのものである [75, 85]。

4.3.1 2 次元正方格子 Hubbard 模型の基底状態エネルギー

最初の例として、2 次元正方格子 Hubbard 模型の half filling での基底状態エネルギーの計算を行う。SBC を用いると、 $L \times L$ サイトでの系のハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = -t \sum_{i\sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + c_{i,\sigma}^\dagger c_{i+(L-1),\sigma} + \text{H.c.}) + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} \quad (4.26)$$

と表される。ここで $n_{i,\sigma} = c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}$ である。

まず、 $U = 0$ の場合の基底状態エネルギーは open chain を用いる場合でもサイズ毎に厳密に計算することができる¹。 $U = 0$ の場合のハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \sum_{\sigma} \sum_{\alpha=1}^{L^2} \sum_{\beta=1}^{L^2} c_{\alpha,\sigma}^\dagger h_{\alpha\beta} c_{\beta,\sigma}, \quad h_{\alpha\beta} = \begin{cases} -t & (\text{for } |\beta - \alpha| = 1, L - 1) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (4.27)$$

と書けるので、生成消滅演算子のある $L^2 \times L^2$ のユニタリ行列 U を用いて

$$c_{\alpha,\sigma} \rightarrow \sum_j U_{\alpha j} c_{j,\sigma}, \quad c_{\alpha,\sigma}^\dagger \rightarrow \sum_j U_{j\alpha}^\dagger c_{j,\sigma}^\dagger \quad (4.28)$$

と変換すれば

$$\mathcal{H} = \sum_{\sigma} \sum_{jj'} \sum_{\alpha\beta} c_{j,\sigma}^\dagger U_{j\alpha}^\dagger h_{\alpha\beta} U_{\beta j'} c_{j',\sigma} = \sum_{j\sigma} \Lambda_{jj} c_{j,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} \quad (4.29)$$

となる。ここで、 $\Lambda_{jj'} \equiv \sum_{\alpha\beta} U_{j\alpha}^\dagger h_{\alpha\beta} U_{\beta j'}$ が対角行列となるように行列 U を選んだ。したがって行列 $h_{\alpha\beta}$ を対角化し、その固有値を小さいものから $L^2/2$ 個足して 2 倍することで、half filling での基底状態エネルギーを正確に計算できる。

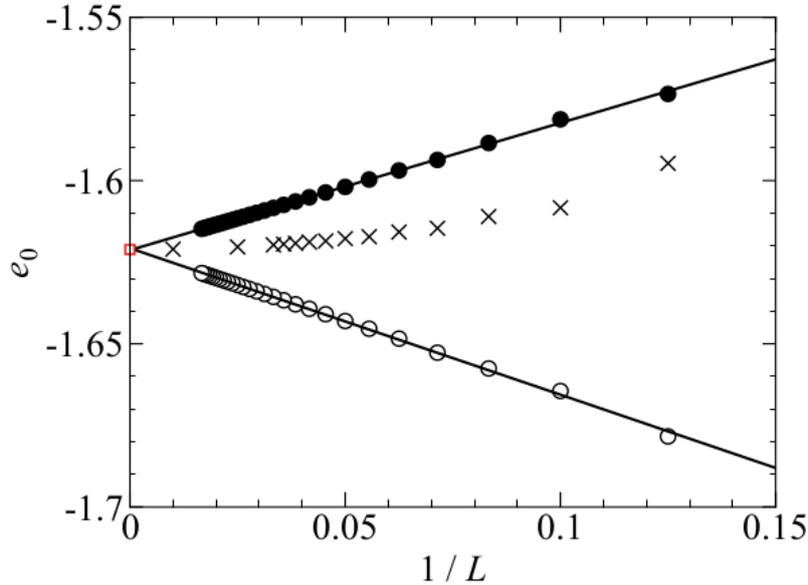


図 4.20: $U = 0$ の half filling での基底状態エネルギーの有限サイズスケールリング。黒丸は open chain で計算した 2 ボンド当りのエネルギーであり、白丸は 1 サイト当りのエネルギーである。× は periodic chain で計算した 1 サイト当りのエネルギーを示している。また、赤の点は熱力学極限での厳密なエネルギー $-16/\pi^2$ である。

図 4.20 に $U = 0$ の half filling での基底状態エネルギーの有限サイズスケールリングの様子を示す。periodic chain を使った場合は、サイト当りのエネルギー e_0 は $1/L$ の 2 次関数的に $-\frac{16}{\pi^2}$ に近づいていくことが分

¹periodic chain の場合はフーリエ変換を利用できる。

かる。open chain を使ってサイズスケーリングを行う場合には興味深い振舞が見られる。open chain は periodic chain の隣接する 2 サイトの L 個のボンドを切ることによって得られる [図 4.11]。この場合でも切れてしまうボンドの数は、元の 2 次元格子の場合の $2L$ から L に減らすことができる。それでも open chain の場合は 1 サイト当りのボンドの数が 2 からずれてしまうため、基底状態のエネルギーをサイト当りのエネルギーと 2 ボンド当りのエネルギーの 2 通りの方法で評価する。図 4.20 に示すように、どちらの方法でもエネルギーはほぼ $1/L$ の 1 次関数で熱力学極限に外挿されることが分かる。片方はエネルギーの高い方から、もう片方はエネルギーの低い方から熱力学極限に近づいていくため、この方法でスケールリングの信頼性を高めることができる。結局、open chain を使った場合の有限サイズスケールリングは periodic chain を用いる場合よりも単純になることが分かる。

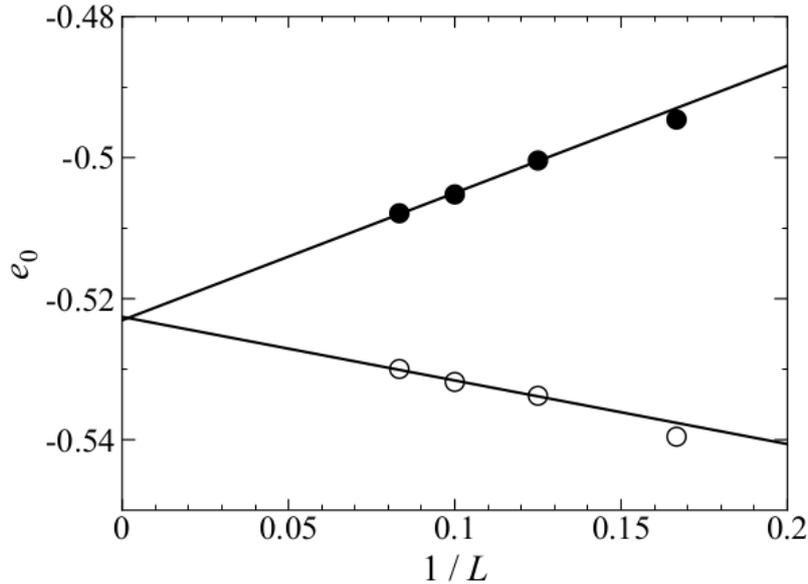


図 4.21: DMRG を用いて計算した $U/t = 8$ の half filling での基底状態エネルギーの有限サイズスケールリング。黒丸は 2 ボンド当たりのエネルギーであり、白丸は 1 サイト当たりのエネルギーである。

図 4.21 に、DMRG を用いて計算した $U/t = 8$ の half filling での基底状態エネルギーの有限サイズスケールリングを示す。 $N = L^2 = 144$ サイトまでの open chain を用いて計算しており、 $U = 0$ の tight-binding 模型の基底状態エネルギー同様に直線で外挿を行っている。サイズ毎の基底状態エネルギーの DMRG の状態数 m に関する依存性や discarded weight の値、また $m \rightarrow \infty$ への外挿値は付録 B.3 の表 B.1 に示している。熱力学極限での値は $e_0 = -0.5228$ であり、シリンダー境界条件を用いた DMRG での先行研究の値 $e_0 = -0.5241$ [75] と整合するが、わずかに高い値が得られた。これはおそらくシリンダー境界条件の外挿では、円周の長さが十分に採れないために、円周の長さについてのスケールリングが不安定であるためと考えられる。

4.3.2 2 次元正方格子 XXZ 模型のスタッガード磁化

2 つ目の例として 2 次元正方格子 XXZ 模型のスタッガード磁化の計算を行う。系のハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + \Delta S_i^z S_j^z) \quad (4.30)$$

で表される。ここで、 S_i^γ はサイト i のスピン $\frac{1}{2}$ 演算子の γ ($\gamma = x, y, z$) 成分であり、 Δ は異方性を表すパラメータである。また、 $\langle i, j \rangle$ に関する和は全ての最近接ペアについての和を表している。この系は、1 次元と異なり $\Delta = 1$ においても熱力学極限で有限のスタッガード磁化 $m_z^{\text{st}} \sim 0.307$ を持つことが知られており、様々な手法で計算が行われている。ここでは 1 次元鎖に周期境界条件を課して計算を行う。

系の並進対称性を破るため、図 4.22(a) に示すように、周期的 1 次元鎖のサイト i とサイト $i+1$ に磁場をかけることでスピンの z 成分を $\langle S_i^z \rangle = -\langle S_{i+1}^z \rangle = \frac{1}{2}$ と固定し、この 2 サイトから最も離れたサイトのスピンモーメントを計算することで、 $m_z^{\text{st}} = \langle S_{i+1+\frac{N}{2}}^z \rangle = -\langle S_{i+\frac{N}{2}+1}^z \rangle$ としてスタaggerド磁化 m_z^{st} を計算する。

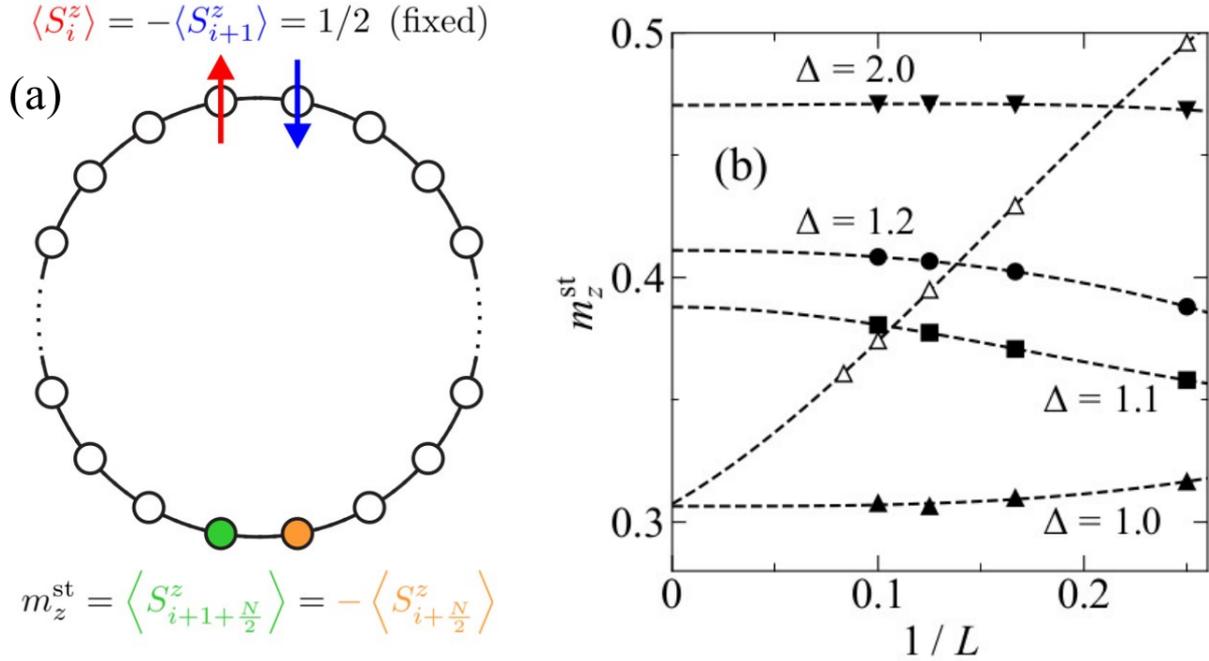


図 4.22: (a) スタaggerド磁化 m_z^{st} の計算に用いた周期的な 1 次元鎖の模式図。(b) m_z^{st} の有限サイズスケーリング。黒の点は周期的 1 次元鎖を用いて $\Delta = 1.0, 1.1, 1.2, 2.0$ での m_z^{st} を DMRG で計算した結果であり、白の点は開境界の 1 次元鎖で静的構造因子を用いて $\Delta = 1.0$ での m_z^{st} を DMRG で計算した結果を表している。

いくつかの Δ について、DMRG を用いて $N = L^2 = 100$ サイトまでで m_z^{st} を計算し、熱力学極限への有限サイズスケーリングを行った結果を図 4.22(b) に示す。スケーリングには、 $m_z^{\text{st}}(L) = a/L^3 + b/L^2 + c$ として 3 次関数でのフィッティングを行っている。 $\Delta = 1$ の等方的な場合においては、熱力学極限で $m_z^{\text{st}} = 0.3071 \pm 0.0005$ を得た。この値は、シリンダー境界条件を用いた DMRG による先行研究の結果 ($m_z^{\text{st}} = 0.3067$) [84] 及び量子モンテカルロ法による先行研究の結果 ($m_z^{\text{st}} = 0.30743$) [85] と十分に近い値になっている。

Δ の増加とともに m_z^{st} は増加し、Ising 極限 ($\Delta \rightarrow \infty$) で 0.5 に近づく。図 4.23(a) に、熱力学極限に外挿した m_z^{st} の値を Δ の関数としてプロットした。 m_z^{st} の全体的な振る舞いは先行研究 [81, 82, 83, 87] の結果と同様である。スピン波理論によれば $\Delta = 1$ の近傍で $m_z^{\text{st}} = \sum_{n=0}^{\infty} \mu_n (1 - \Delta^{-2})^{n/2}$ すなわち $\frac{dm_z^{\text{st}}}{d\Delta} \xrightarrow{\Delta \rightarrow 1} \infty$ となり、 $\Delta = 1$ が特異点となることが示唆されている [81, 88, 89]。しかし、図 4.23(a) のインセットに示すように、我々の計算結果ではこのような振る舞いは確認できない。これは結合クラスタ法による先行研究 [87] の結果とも整合している。また、図 4.23(b) に示すように、 Δ が大きい領域 ($0 \geq 1/\Delta \geq 0.05$) の結果を $2m_z^{\text{st}} = 1 + m_2/\Delta^2 + m_4/\Delta^4 + m_6/\Delta^6$ でフィッティングすると、 $m_2 = -0.222222225$, $m_4 = -0.0355542736$, $m_6 = -0.0189663810$ となった。これは、級数展開による結果 $2m_z^{\text{st}} = 1 - (2/9)/\Delta^2 - (8/225)/\Delta^4 - 0.01894258/\Delta^6 + \mathcal{O}(1/\Delta^8)$ [$2/9 = 0.22222222 \dots$, $8/225 = 0.0355555 \dots$] [81] とよく一致している。

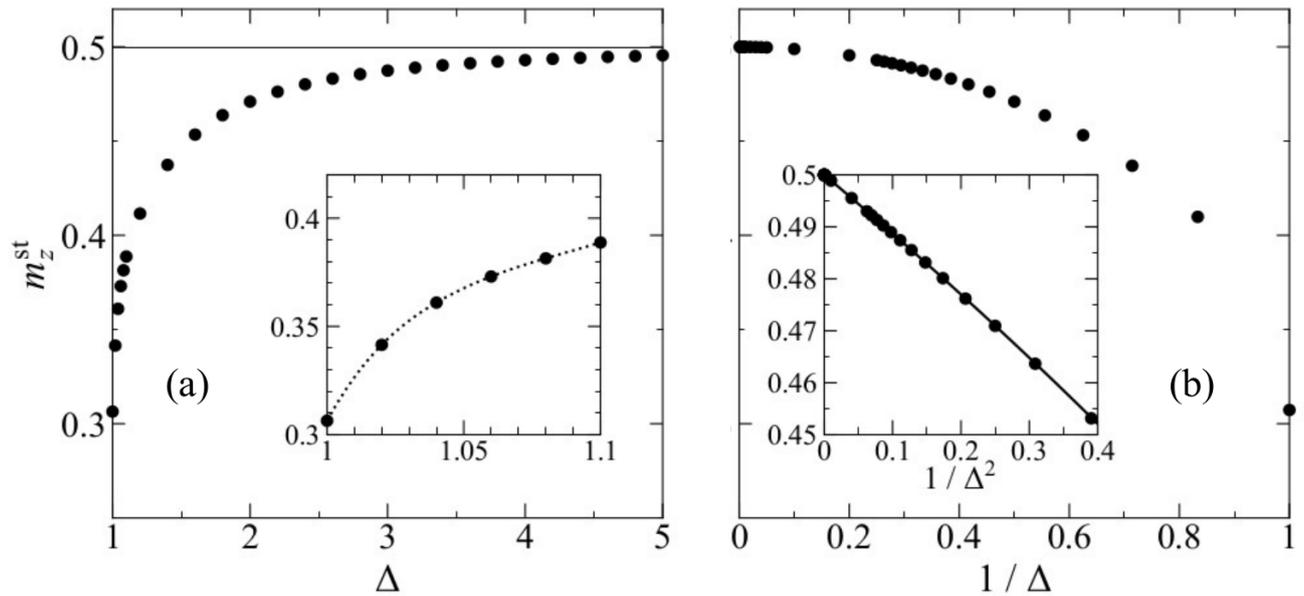


図 4.23: (a) m_z^{st} の熱力学極限への外挿値を Δ の関数としてプロットした図。インセットは $\Delta = 1$ 近傍での m_z^{st} を拡大して示している。(b) m_z^{st} の熱力学極限への外挿値を $1/\Delta$ の関数としてプロットした図。インセットは $1/\Delta = 0$ 近傍での m_z^{st} を $1/\Delta$ の多項式でフィッティングした図である。

上記の計算では周期的な 1 次元鎖を用い、スピンの回転対称性を意図的に破ることでスタッガード磁化を計算した。この方法では DMRG 計算をより安定的にすることができるが、このように対称性を意図的に破らなくても m_z^{st} の値を正確に評価することは可能である。すなわち、開境界の 1 次元鎖を用いて静的構造因子から $(m_z^{\text{st}})^2 = \lim_{L \rightarrow \infty} (1/L^2) \sum_{i,j} (-1)^{i-j} \langle S_i \cdot S_j \rangle$ として m_z^{st} の値を計算することができる。ここで、和は 1 次元鎖の全サイトに渡ってとる。この方法で $N = L^2 = 144$ サイトまでの系を用いて $\Delta = 1$ での m_z^{st} を計算し、有限サイズスケーリングを行った結果を図 4.22(b) に白の点で示している。 $1/L$ の 3 次関数でフィッティングを行い、熱力学極限で $m_z^{\text{st}} = 0.30762 \pm 0.0032$ を得た。

4.4 Open chain を用いた秩序変数の計算

4.3.2 節では、主に周期的な 1 次元鎖 [図 4.22(a)] を用いてスタッガード磁化の計算を行った。しかし、DMRG を用いて計算する場合には 1 次元鎖を開境界で扱った方が計算がしやすい。ここでは、SBC によって得られる 1 次元鎖を open chain として扱うことで、2 次元系の局所的な秩序変数を計算する方法を提案する。具体例として、2 次元正方格子スピン S XXZ 模型について、Néel 状態の秩序変数であるスタッガード磁化を DMRG を用いて計算する。open chain を用いることで、状態数や基底の数が増えるために DMRG では計算が難しい、XY 相やスピンの大きい ($S \geq 1$) 場合にも熱力学極限でのスタッガード磁化の値を評価することができることを示す。

最近でも、 $\text{Ba}_2\text{FeSi}_2\text{O}_7$ ($S = 2$) [90, 91, 92], NaMnSbO_4 ($S = 5/2$) [93] 等の正方格子や PbMnTeO_6 ($S = 3/2$) [94], AgCrSe_2 ($S = 3/2$) [95], $\alpha\text{-CrOO}(\text{H}, \text{D})$ ($S = 3/2$) [96], $\text{Ba}_8\text{MnNb}_6\text{O}_{24}$ ($S = 5/2$) [97], Ag_2FeO_2 ($S = 5/2$) [98] 等の三角格子、 CoPS_3 ($S = 3/2$) [99] 等の八二カム格子、 $\text{Cs}_2(\text{K}, \text{Na})\text{Cr}_3\text{F}_{12}$ ($S = 3/2$) [100], $\text{Li}_9\text{Fe}_3(\text{P}_2\text{O}_7)_3(\text{PO}_4)_2$ ($S = 5/2$) [101], $\text{PbFe}_3(\text{PO}_4)(\text{SO}_4)(\text{OH})_6$ ($S = 5/2$) [102] 等のカゴメ格子上の高スピンの磁性体についての研究が報告されており、こうした高スピンの 2 次元量子スピン系の精確な数値計算の必要性が高まっていると言える。

4.4.1 2 次元正方格子スピン S XXZ 模型

系のハミルトニアンは次のように表される。

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + \Delta S_i^z S_j^z) \quad (4.31)$$

ここで、 S_i^γ ($\gamma = x, y, z$) はスピン S の演算子、 Δ は交換相互作用の異方性を表すパラメータであり、 $\langle ij \rangle$ についての和は全ての最近接サイトのペアについてとる。4.2.4 節で述べたように、この系は全ての S の場合に $\Delta \geq -1$ の範囲で有限のスタグガード磁化を持つことが分かっている [76, 77]。

4.4.2 秩序変数の計算方法

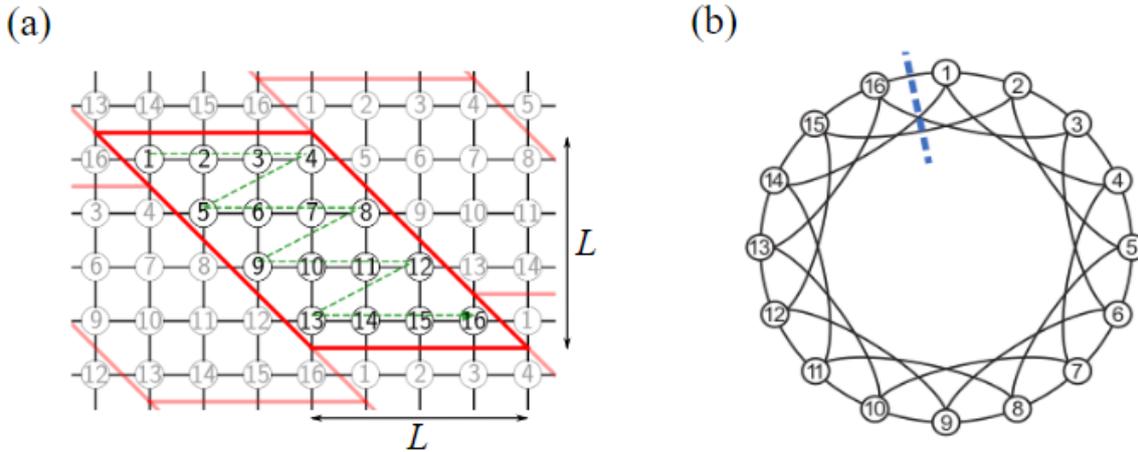


図 4.24: (a) $L = 4$ の 2 次元正方格子のクラスター。赤線で囲まれた部分が独立なクラスターを示している。(b) (a) の緑の線に沿ってサイト番号をつけることで得られる周期的な 1 次元格子。open chain は、2 サイト間の L 本のボンドを切断することで得られる (破線)。

ここでは、秩序変数の計算方法について説明する。4.2.5 節で述べたように、SBC を用いることで $L \times L$ サイトの 2 次元正方格子は最近接と $(L - 1)$ 次近接のボンドを持つ 1 次元鎖にマップされる。図 4.24(a), (b) に、 4×4 サイトの場合のマッピングの例を示す。したがって、この 1 次元格子での系のハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{L^2} (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + \Delta S_i^z S_{i+1}^z) + \sum_{i=1}^{L^2} (S_i^x S_{i+(L-1)}^x + S_i^y S_{i+(L-1)}^y + \Delta S_i^z S_{i+(L-1)}^z) \quad (4.32)$$

と表される。SBC を適用した場合の DMRG 計算における利点として、周期的な 1 次元鎖にマップされるためエンタングルメントの度合いが一樣になり、discarded weight の偏りが生じにくいことが考えられる。また、元の 2 次元正方格子と比較してボンドの最大距離を $L - 1$ に減らすことができる点も重要である。さらに、1 次元系にマップされるため 2 次元格子の場合と異なり、1 回の有限サイズスケールリングで熱力学極限での物理量を得ることができる。

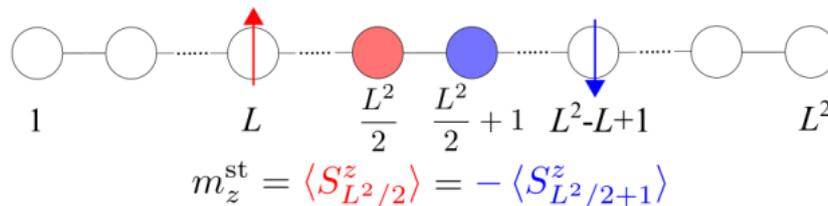


図 4.25: スタグガード磁化 m_z^{st} を計算するために用いる 1 次元の open chain. 矢印は磁場によってピン止めされたスピンを表し、 m_z^{st} は塗りつぶされたサイトで計算する。

元の 2 次元正方格子での $k = (\pi, \pi)$ の Néel 秩序は、マップされた 1 次元鎖においては $k = \pi$ の秩序となる。したがって、open chain を用いた場合には、Néel 状態の秩序変数であるスタaggerド磁化は、系の端から中央に向かって減衰するスピンモーメント $\langle S_i^\alpha \rangle$ ($\alpha = x, y, z$) の Friedel 振動の振幅から計算することができる。スタaggerド磁化の計算に用いる open chain を図 4.25 に示す。スタaggerド磁化を計算するために、容易軸と容易面内の Néel 状態に対して、系の端の近くの 2 サイトのスピンをそれぞれ $\langle S_L^z \rangle = 1/2, \langle S_{L^2-L+1}^z \rangle = -1/2$ ($\langle S_L^x \rangle = 1/2, \langle S_{L^2-L+1}^x \rangle = -1/2$) と磁場によってピン止めし、系の中央でのスピンモーメント $\langle S_{L^2/2}^z \rangle, \langle S_{L^2+1}^z \rangle$ ($\langle S_{L^2/2}^x \rangle, \langle S_{L^2+1}^x \rangle$) を計算する。この方法で、容易軸と容易面内の Néel 状態の秩序変数はそれぞれ $m_z^{\text{st}} = |\langle S_{L^2/2}^z \rangle - \langle S_{L^2/2+1}^z \rangle|/2$, $m_x^{\text{st}} = |\langle S_{L^2/2}^x \rangle - \langle S_{L^2/2+1}^x \rangle|/2$ と定義される。1 次元系でスタaggerド磁化を計算する場合は、典型的にスピンのピン止めは系の端すなわちサイト $i = 1, i = L^2$ に対して行う。しかし、系の両端から $L - 1$ サイトでは元の周期的 1 次元鎖のボンドが切断されているため、ピン止めをサイト $i = L, i = L^2 - L + 1$ に対して行うことで、秩序変数の過小評価を避けることができる。

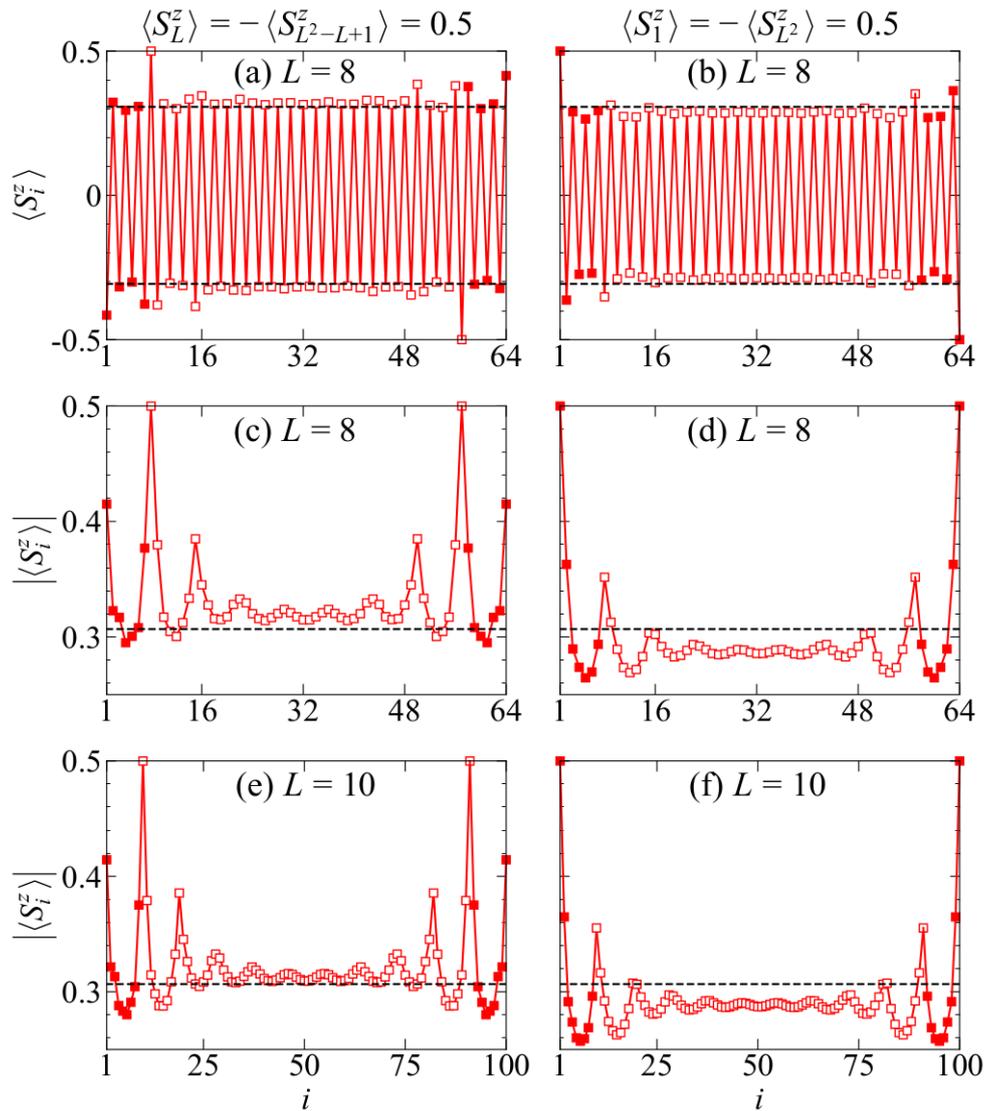


図 4.26: (a,c,e) サイト $i = L, i = L^2 - L + 1$ のスピンをピン止めした場合の局所スピンモーメント (a) $\langle S_i^z \rangle$ とその絶対値 (c,e) $|\langle S_i^z \rangle|$. (b,d,f) サイト $i = 1, i = L^2$ のスピンをピン止めした場合の局所スピンモーメント (b) $\langle S_i^z \rangle$ とその絶対値 (d,f) $|\langle S_i^z \rangle|$. 破線は先行研究の値 $m_z^{\text{st}} = 0.3067$ を比較のために示している。塗りつぶしの点は元のボンドが切断されているサイトを示している。

ピン止めの位置によるスピンモーメントの振動の違いを示すため、図 4.26(a) に $S = 1/2, \Delta = 1$ の場合に $L = 8$ の系で、サイト $i = L, i = L^2 - L + 1$ のスピンをピン止めした場合の $\langle S_i^z \rangle$ の Friedel 振動の様子

を示す。1次元鎖において実際に、スピンモーメントが $k = \pi$ で振動している様子が確認できる。また、図 4.26(c),(e) に示すように、 $\langle S_i^z \rangle$ の振動は系の中央に向かってよく収束していることが分かる。サイト $i = 1, i = L^2$ のスピンをピン止めした場合の結果を図 4.26(b) に示す。ピン止めされたスピン付近での振幅は系の中央付近での振幅よりも明らかに小さくなっていることが分かる。結果として、図 4.26(d),(f) に示すように L を固定した場合の振幅はかなり小さくなる。したがって、秩序変数の値は過小評価されるか、熱力学極限への収束が遅くなると考えられる。外側の $L - 1$ サイトは元の周期的 1 次元鎖のボンドが切断されているため、外側の $2(L - 1)$ 個のスピンをまとめて端のスピンとみなすのが、妥当であると考えられる。以上から、内側のサイト $i = L, i = L^2 - L + 1$ のスピンをピン止めするのが良い選択であるといえる。

以下の計算では、 $N = L^2 = 196$ サイトまでの open chain を用いてスタッガード磁化を DMRG で計算する。DMRG の状態数は最大で $m = 8000$ とし、discarded weight は最大で 10^{-5} のオーダーである。計算結果は、必要であれば $m \rightarrow \infty$ への外挿を行っている。

4.4.3 計算結果

$$S = 1/2, \Delta \geq 1$$

最初に $S = 1/2$ の場合に、容易軸内の Néel 相と XY 相の境界である $\Delta = 1$ での計算結果を確認する。これは量子揺らぎが最も大きい場合であり、熱力学極限でのスタッガード磁化を数値的に評価するのが最も難しい。したがって、この方法の有効性を検証するのに最も適していると考えられる。 $\Delta = 1$ において磁化の方向は任意であるため、 z 軸に平行であるとして m_z^{st} を計算する。これにより、 $S_{\text{tot}}^z = \sum_i S_i^z = 0$ の空間に限定して計算を実行することができる。

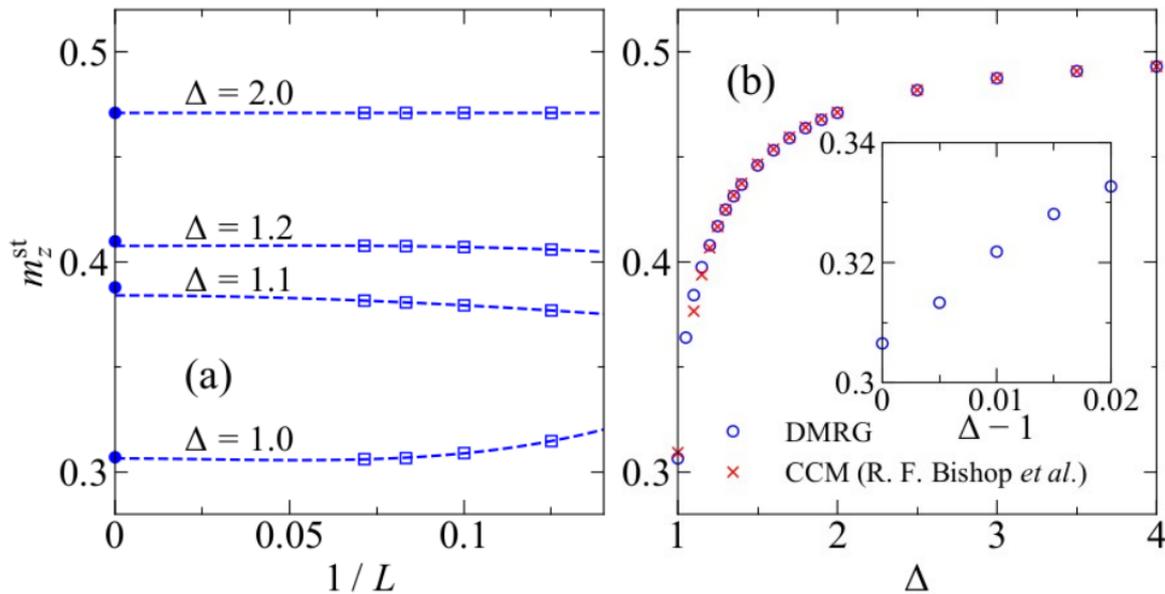


図 4.27: (a) $S = 1/2, \Delta \geq 1$ での m_z^{st} の有限サイズスケーリング。 $1/L$ での塗りつぶしの点は periodic chain を用いた場合の外挿値 [図 4.22(b)] を表している。(b) m_z^{st} の外挿値の Δ 依存性。比較のために、結合クラスター法 (CCM) による先行研究の結果 [87] を \times で示している。インセットは $\Delta = 1$ の近傍での m_z^{st} の外挿値を $\Delta - 1$ の関数として示している。

図 4.27(a) に m_z^{st} の有限サイズスケーリングの様子を示している。計算には $N = L^2 = 196$ サイトまでの系を用いており、DMRG の状態数は最大で $m = 8000$ である。前節の periodic chain を用いた計算では $N = L^2 = 100$ サイトまでの系を用いており、open chain を用いることでおよそ倍程度の系での計算を実行することができている。 $1/L$ に対する m_z^{st} の収束は、安定したスケーリングを行うのに十分に速いことが確認できる。 $1/L$ の 3 次関数 $m_z^{\text{st}}(L) = m_z^{\text{st}} + a/L^2 + b/L^3$ を用いてフィッティングを行い、 $\Delta = 1$ での熱力学極限の値として $m_z^{\text{st}} = 0.3065$ が得られた。この値は先行研究の結果:

DMRG ($m_z^{\text{st}} = 0.3067$), QMC ($m_z^{\text{st}} = 0.30743$), CCM ($m_z^{\text{st}} = 0.3093$) とよく一致しているが、periodic chain を用いた結果 ($m_z^{\text{st}} = 0.3071 \pm 0.0005$) よりも若干小さい値が得られている。これは、open chain を用いた場合の方がより大きなサイズでの計算を行うことができ、安定した有限サイズスケーリングを実行できるためと考えられる。

表 4.1: $S = 1/2$ の場合の容易軸の Néel 相 ($\Delta \geq 1$) での m_z^{st} の外挿値。 $\delta = m_z^{\text{st}}(\text{CCM}) - m_z^{\text{st}}(\text{DMRG})$ は DMRG による計算結果と CCM による結果 [87] の差である。

Δ	$m_z^{\text{st}}(\text{DMRG})$	$m_z^{\text{st}}(\text{CCM})$	δ
1.0	0.3065	0.3093	0.0028
1.2	0.4079	0.4067	-0.0012
1.5	0.4459	0.4466	0.0007
2.0	0.4709	0.4712	0.0003
3.0	0.4874	0.4875	0.0001
4.0	0.4930	0.4930	<0.0001

$\Delta = 1$ では系はギャップレスであるが、 $\Delta > 1$ では $S_{\text{tot}}^z = 0$ の基底状態と $S_{\text{tot}}^z = 1$ の励起状態との間にギャップが開く。これはスタッガード磁化の方向が z 軸に並行に固定されることを示唆している。次に、 $\Delta > 1$ の場合での m_z^{st} を評価する。図 4.27(a) にいくつかの Δ について、 m_z^{st} の有限サイズスケーリングの様子を示している。 Δ が大きい場合には、量子揺らぎが減少することにより m_z^{st} のサイズ依存性は小さくなる。 m_z^{st} の外挿値の Δ 依存性を図 4.27(b) に示す。 Δ を大きくすることで急激に Ising 極限での値 0.5 に近づいていくことが分かる。比較のために、結合クラスター法 (CCM) による結果 [87] を \times で示している。全体的に CCM の結果 [87] との一致は非常に良いことが分かる。いくつかの Δ について、 m_z^{st} の値を表 4.1 に示している。結果の差が最も大きくなるのは $\Delta = 1$ の場合である。DMRG の計算結果の熱力学極限 $L \rightarrow \infty$ への外挿と、CCM の LSUB_m レベルでの $m \rightarrow \infty$ への外挿は $\Delta = 1$ の場合に最も大きくなると考えられるが、その場合でも m_z^{st} のずれは 0.9% 程度である。次に、 $\Delta = 1$ の近傍での m_z^{st} の特異的な振舞いについて確認する。スピン波理論 (SWT) [81, 88, 89] によって、 $m_z^{\text{st}} = \sum_{n=0}^{\infty} m_n (\Delta - 1)^{n/2}$ の形で $\Delta = 1$ に特異点が現れることが示唆されている。しかし、図 4.27(b) のインセットに示すように、 $1 \leq \Delta \lesssim 1.01$ で m_z^{st} は $\Delta - 1$ にほぼ比例しており、SWT で予想されるような特異的な振舞いは確認できない。これは CCM による結果 [87] とも整合している。

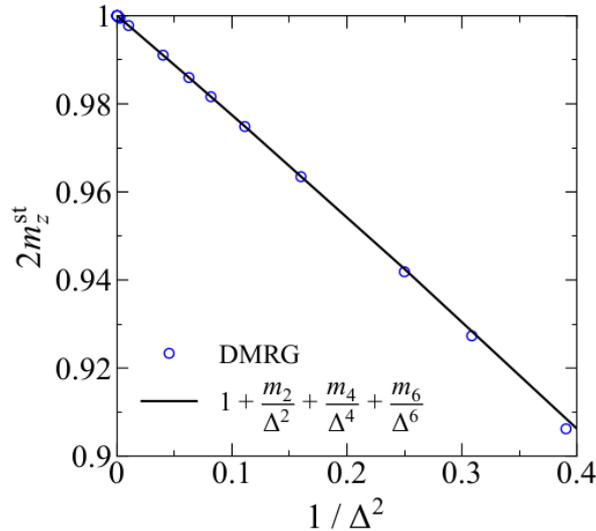


図 4.28: 正格子 $S = 1/2$ XXZ 模型のスタッガード磁化 m_z^{st} を $1/\Delta^2$ の関数としてプロットした図。実線は多項式 $2m_z^{\text{st}} = 1 + m_2/\Delta^2 + m_4/\Delta^4 + m_6/\Delta^6$ でのフィッティングを示している。

計算結果の正確性を更に確かめるため、 Δ の大きい場合の結果を $1/\Delta$ の級数展開 (SE) による結果と比較する。 $0 \leq 1/\Delta \leq 0.05$ での計算結果を多項式 $2m_{st}^z = 1 + m_2/\Delta^2 + m_4/\Delta^4 + m_6/\Delta^6$ でフィッティングすると、 $m_2 = -0.222222225$, $m_4 = -0.0355542736$, $m_6 = -0.0189663810$ となった [図 4.28]。これらの値は SE による結果: $m_2 = -2/9 = -0.222222\dots$, $m_4 = -0.0355555\dots$, $m_6 = -0.01894258$ [81, 89, 103] とほぼ完璧に一致している。

$$S = 1/2, -1 < \Delta < 1$$

次に、XY 相 ($-1 < \Delta < 1$) でのスタッガード磁化を計算する。XY 相での磁化は xy 面内の任意の方向に並行であるため、 $\langle S_L^x \rangle = 1/2$, $\langle S_{L^2-L+1}^x \rangle = -1/2$ と 2 サイトのスピンをピン止めし、 x 軸に並行なスタッガード磁化 m_x^{st} を計算する。この場合は系に横磁場をかけることになり S_{tot}^z が保存しないため、先程の m_z^{st} の場合に比べて DMRG での計算が難しくなる。しかし、この場合も安定した有限サイズスケールリングを行うのに十分なデータを得ることができる。図 4.29(a) に m_x^{st} の有限サイズスケールリングの様子をいくつかの Δ について示した。ここで、 $N = L^2 = 144$ サイトまでの open chain を用いて計算を行っており、DMRG の状態数は最大で $m = 4000$ である。期待されるように m_x^{st} のサイズ依存性は、スピンの等方的な $\Delta = 1$ から古典的な極限である $\Delta = -1$ に近づくにつれ小さくなる。図 4.29(b) に m_x^{st} の外挿値を Δ の関数としてプロットした。比較のため、CCM による結果 [87] も一緒に示している。 m_x^{st} は Δ の減少とともに増加し、 $\Delta \rightarrow -1$ で $1/2$ に近づくことが確認できる。したがって、この系の量子揺らぎは $\Delta = 1$ のときに最も強いことが分かる。XY 相についても全体的に CCM の結果との一致は良いことが確認できる。表 4.2 で、いくつかの Δ について DMRG での外挿値と CCM の結果を比較している。各 Δ について、DMRG での値は CCM での値に比べて若干小さくなっていることが分かる。これは、DMRG の方が CCM に比べてより量子揺らぎを取り込んでいるからかもしれない。また、XY 模型に相当する $\Delta = 0$ での外挿値 $m_x^{st} = 0.4331$ は SE による結果 $m_x^{st} = 0.43548$ [104] や QMC による結果 $m_x^{st} = 0.437$ [105] と十分に整合している。

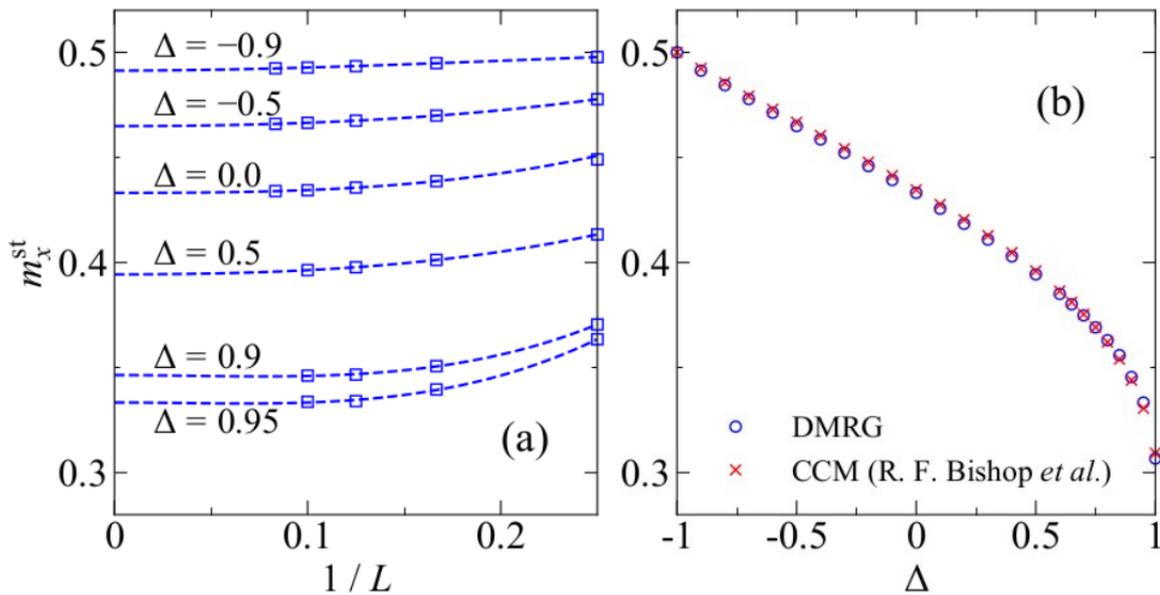


図 4.29: (a) $S = 1/2$, $|\Delta| < 1$ での m_x^{st} の有限サイズスケールリング。(b) m_x^{st} の外挿値の Δ 依存性。比較のために、CCM による結果 [87] を \times で示している。

これまでの結果で、open chain を用いたスタッガード磁化の計算が $S = 1/2$ の場合に有効であることが確かめられた。実際に、 m_α^{st} ($\alpha = x, z$) の有限サイズスケールリングには困難はなく、先行研究の結果と比較する限り熱力学極限での外挿値は Δ 全体で極めて正確であるといえる。そこで、数値計算が困難である $S = 1$ から $S = 6$ までの S が大きい場合についても同じ方法で m_z^{st} の評価を行う。

表 4.2: $S = 1/2$ の場合の XY 相 ($-1 < \Delta \leq 1$) での m_x^{st} の外挿値。 $\delta = m_x^{\text{st}}(\text{CCM}) - m_x^{\text{st}}(\text{DMRG})$ は DMRG による計算結果と CCM による結果 [87] の差である。

Δ	$m_x^{\text{st}}(\text{DMRG})$	$m_x^{\text{st}}(\text{CCM})$	δ
-1.0	0.5000	0.5000	0.0000
-0.8	0.4844	0.4856	0.0012
-0.5	0.4649	0.4667	0.0018
0.0	0.4331	0.4346	0.0015
0.5	0.3943	0.3960	0.0017
1.0	0.3065	0.3093	0.0028

$S = 1, \Delta \geq 1$

まず、 $S = 1$ の場合の計算を行う。 $S \geq 1$ の場合でも系は $\Delta \geq -1$ のとき、Néel 秩序を持つことが分かっている [76, 77]。ここでも、 $S = 1/2$ の場合と同様に $\Delta \geq 1$ での m_z^{st} の計算を行うことができる。図 4.30(a) にいくつかの Δ での m_z^{st} の有限サイズスケリングの様子を示す。 $\Delta = 1$ での熱力学極限の値として、 $m_z^{\text{st}} = 0.8017$ が得られた。この値は iPEPS による先行研究の結果 $m_z^{\text{st}} = 0.802$ [106] と非常によく一致している。図 4.30(b) には、 m_z^{st} の外挿値の Δ 依存性をプロットしている。比較のために、SE による結果 [81, 107] を一緒にプロットしている。図 4.30(b) のインセットに示しているのは、 $0 \leq 1/\Delta \leq 0.03$ での計算結果を多項式 $m_z^{\text{st}} = 1 + m_2/\Delta^2 + m_4/\Delta^4 + m_6/\Delta^6$ でフィッティングした様子である。フィッティングの結果は、 $m_2 = -0.081632653$, $m_4 = -0.026959397$, $m_6 = -0.013867377$ となった。これらの値は SE での結果 $m_2 = -4/49 = -0.081632653\dots$, $m_4 = -0.026959397$, $m_6 = -0.013867377$ [81, 107] と非常によく一致している。

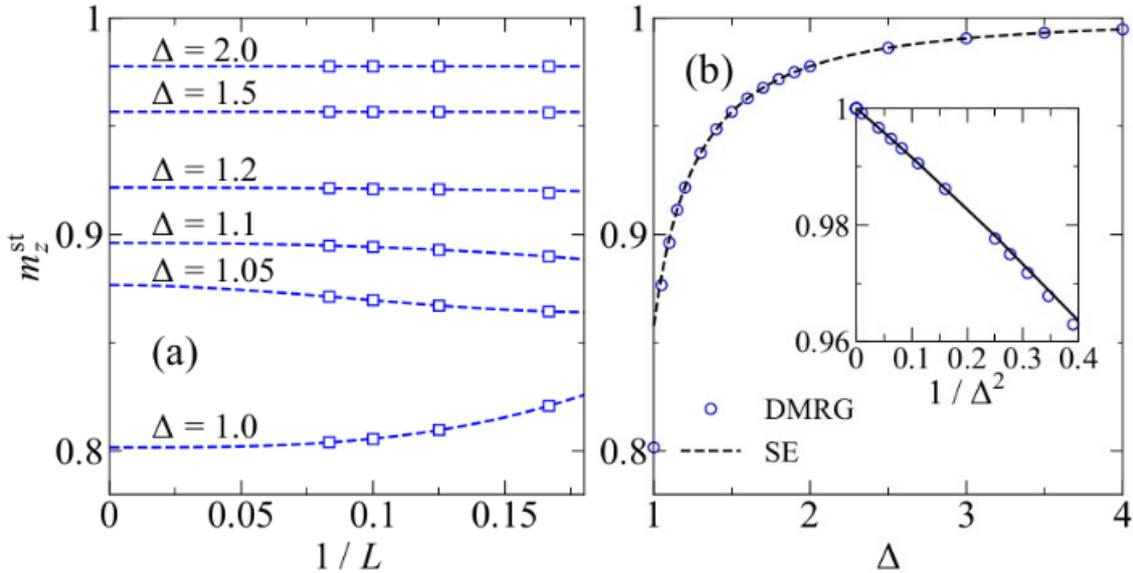


図 4.30: $S = 1, \Delta \geq 1$ での (a) m_z^{st} の有限サイズスケリングと、(b) m_z^{st} の外挿値の Δ 依存性。インセットに Δ の大きい領域での m_z^{st} を $1/\Delta^2$ に対してプロットした。破線は SE [81, 107] による結果を示している。

$S > 1, \Delta = 1$

次に、 $S > 1$ の場合の計算を行う。図 4.31(a) に $S \geq 1, \Delta = 1$ の場合の m_z^{st} の有限サイズスケリングを示す。ここで、 $N = L^2 = 144$ サイトまでの open chain を用いて計算を行っている。DMRG の状態数は最大で $m = 5000$ であり、discarded weight は最大でも 2×10^{-6} 程度である。 S が大きいほど量子揺らぎの効

果が小さくなることから予想されるように、 m_z^{st} のサイズ依存性は S の増加とともに小さくなる。しかし、最も S が小さい $S = 1$ の場合でも有限サイズスケリングは容易である。図 4.31(b) に m_z^{st}/S の外挿値を S の関数として示している。古典的な極限 $S \rightarrow \infty$ において m_z^{st}/S は滑らかに 1 に収束することが確認できる。 m_z^{st}/S の S 依存性は、3 次までのスピン波理論 (SWT) で $m_z^{\text{st}}/S = 1 - 0.19895398S^{-1} + 0.00136057S^{-3}$ と求められている [82, 108, 109]。この表式は、 $1/S$ より高次の項の係数が非常に小さいため、広い範囲の S で上手く機能すると考えられる。実際に、図 4.31(b) のインセットに示すように、各 S での我々の計算結果と SWT の結果との差 $\Delta m_z^{\text{st}}/S$ は常に 3×10^{-3} よりも小さい。

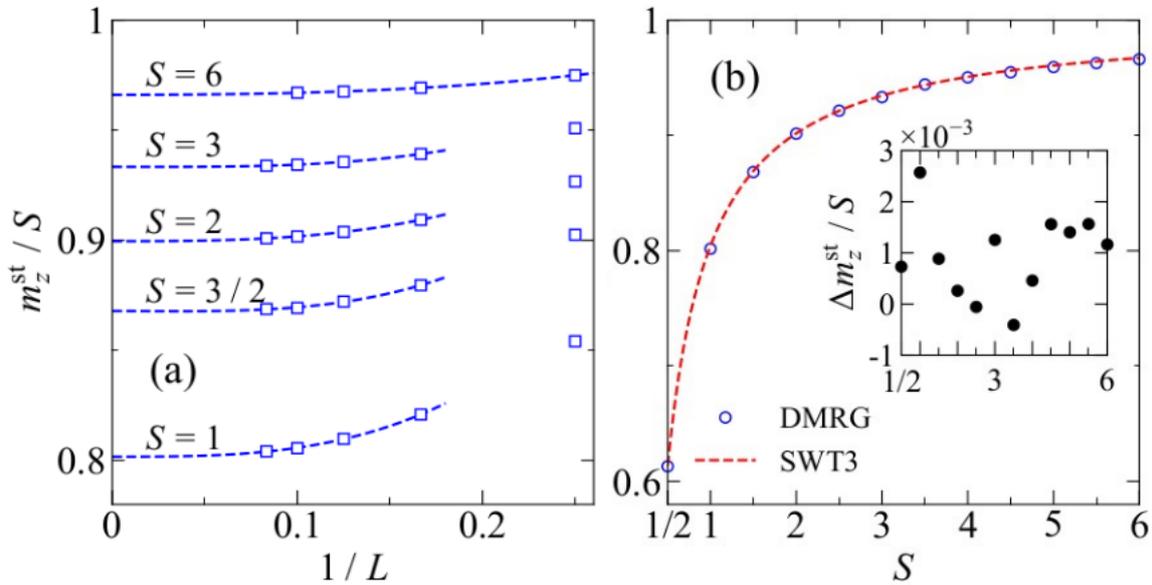


図 4.31: (a) $S \geq 1$, $\Delta = 1$ での m_z^{st} の有限サイズスケリング。(b) $\Delta = 1$ での m_z^{st} の外挿値の S 依存性。破線は SWT での結果 [82, 108, 109] を表している。インセットは、DMRG での計算結果と SWT での結果 [82, 108, 109] の差 $\Delta m_z^{\text{st}}/S$ をプロットしている。

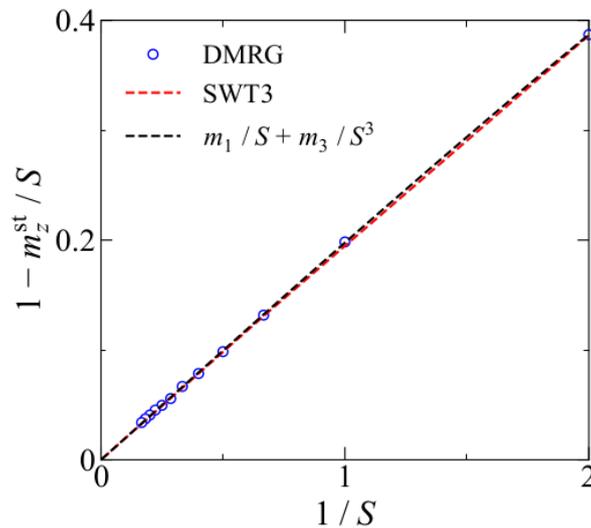


図 4.32: 正方格子 Heisenberg 模型のスタッガード磁化を $1/S$ の関数としてプロットした図。赤と黒の破線は、それぞれ SWT の結果 [82, 108, 109] と多項式 $m_z^{\text{st}}/S = 1 + m_1S^{-1} + m_3S^{-3}$ でのフィッティングである。

また、 $S = 1/2$ から $S = 6$ での外挿値を $m_z^{\text{st}}/S = 1 + m_1S^{-1} + m_3S^{-3}$ でフィッティングした結果、 $m_1 = -0.19895398$, $m_3 = 0.00136057$ となった [図 4.32]。これらの値は SWT の結果とも整合している。したがって、open chain を使った方法は少なくとも $S = 6$ の場合まで有効であることが確かめられた。また、 $S = 2, 4, 6$ の場合でも各ボンドでシングレットのペアを形成するようなハルデン状態は存在しない [76, 77] ことが数値的に確かめられた。

4.5 他の境界条件と比較した SBC の優位性

ここまでで、SBC による 2 次元格子系の周期的 1 次元鎖へのマッピング方法と、SBC を利用した 2 次元量子系への DMRG の適用について示した。この節では、物理量の有限サイズスケールと相関関数の振舞という観点から、他の境界条件と比較した SBC の優位性を明らかにする。ここでは、厳密に計算することができる 2 次元正方格子上的 tight-binding 模型を考え、境界条件毎の half filling の基底状態のエネルギーの有限サイズスケールと密度相関関数の振舞を比較する。

4.5.1 基底状態エネルギーの有限サイズスケール

ここでは、境界条件毎の基底状態エネルギーの有限サイズスケールの様子を比較する。図 4.33 に、2 次元正方格子 tight-binding 模型の half filling での基底状態エネルギーの有限サイズスケールを、様々な境界条件で行った様子を示す。ここで、SBC についての結果 [図 4.33(c)] は図 4.20 と同じである。まず、OBC での有限サイズスケール [図 4.33(a)] は SBC でマップした 1 次元鎖に開境界条件を適用した場合 [図 4.33(c)] と同様に $1/L$ の 1 次関数で外挿可能であることが分かる。一方、PBC では基底状態エネルギーは $1/L^2$ で熱力学極限へ近づいていくことが分かる。DMRG を用いる場合は、2 次元の周期的なクラスターでは基底状態は $L \lesssim 10$ 程度までしか計算できないため、PBC で基底状態エネルギーの有限サイズスケールを行うのは困難である。

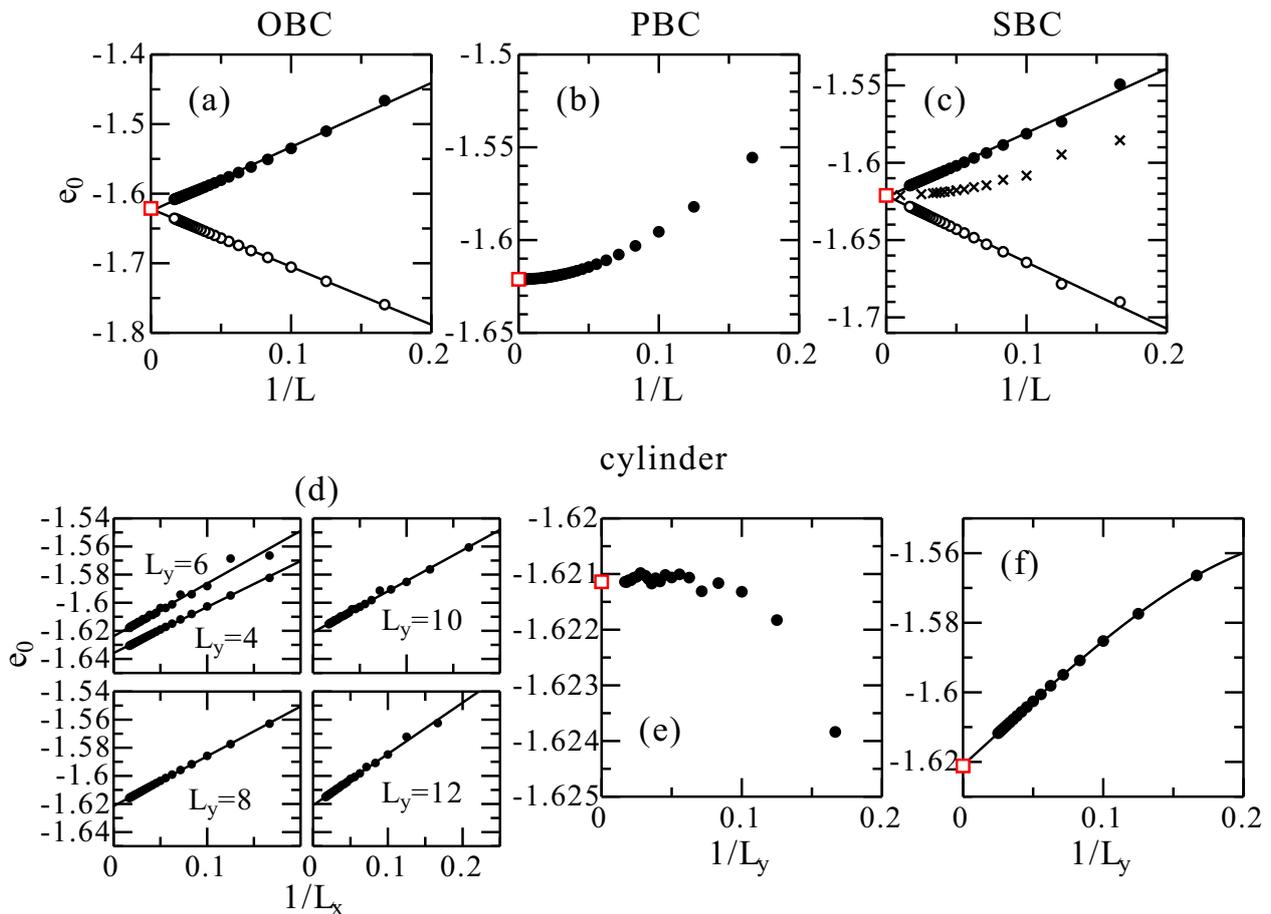


図 4.33: (a) OBC, (b) PBC, (c) SBC, (d-f) シリンダー境界条件下での 2 次元正方格子上的 tight-binding 模型の half filling での基底状態エネルギーの有限サイズスケール。熱力学極限での厳密なエネルギー $e_0 = -16/\pi^2$ を赤の点で示している。黒丸と白丸はそれぞれサイト毎のエネルギーと 2 ボンド当りのエネルギーである。シリンダーの場合に、円周の長さ L_y を固定して $L_x \rightarrow \infty$ に外挿した様子を (d) に、得られた $L_x \rightarrow \infty$ の外挿値を $L_y \rightarrow \infty$ に外挿した様子を (e) に示している。さらに、縦横の長さの比を $L_x = L_y$ に保って無限系に外挿した様子を (f) に示している。

シリンダー境界条件を用いる場合は x 方向と y 方向の 2 方向に有限サイズスケリングを行う必要がある。まず図 4.33(d) に示すように、与えられた円周の長さ L_y に対して軸の長さ L_x についてのスケリングを行い、 L_y 毎に $L_x \rightarrow \infty$ での基底状態エネルギーを求める。次に、得られた $L_x \rightarrow \infty$ での値をさらに L_y についてスケリングする [図 4.33(e)]。PBC の場合と同様に、 $e_0 = -16/\pi^2 + \alpha/L_y^\beta$ ($\alpha < 0, \beta > 2$) のようなスケリング挙動を示していることが分かる。また、 L_x についての外挿値の L_y 依存性も他の境界条件と比較してあまり滑らかでないことが分かる。したがって、シリンダー境界条件を用いて DMRG で 2 次元の遍歴系の熱力学極限での基底状態エネルギーを正確に評価することは、 $L_x \rightarrow \infty$ への外挿に不確実性があることや外挿値が $L_y \lesssim 10$ までしか得られないことを考えれば、あまり現実的ではないと言える。また、図 4.33(f) に $L_x = L_y$ を保って有限サイズスケリングを行った様子を示す。スケリングの様子は単純に見えるが、OBC や SBC 下での open chain の場合の 1 次関数的な振舞からは外れていることが分かる。

以上の理由から、2 次元系の熱力学極限での基底状態エネルギーを評価する場合には、OBC か SBC が最適な選択であると言える。

4.5.2 相関関数の振舞

ここでは、境界条件による相関関数の影響を調べる。相関関数の長距離での振舞を調べるため、厳密に計算することができる 2 次元正方格子上の tight-binding 模型の密度相関関数

$$C(r) = 1 - \langle n_i n_{i+r} \rangle \quad (4.33)$$

を考える。

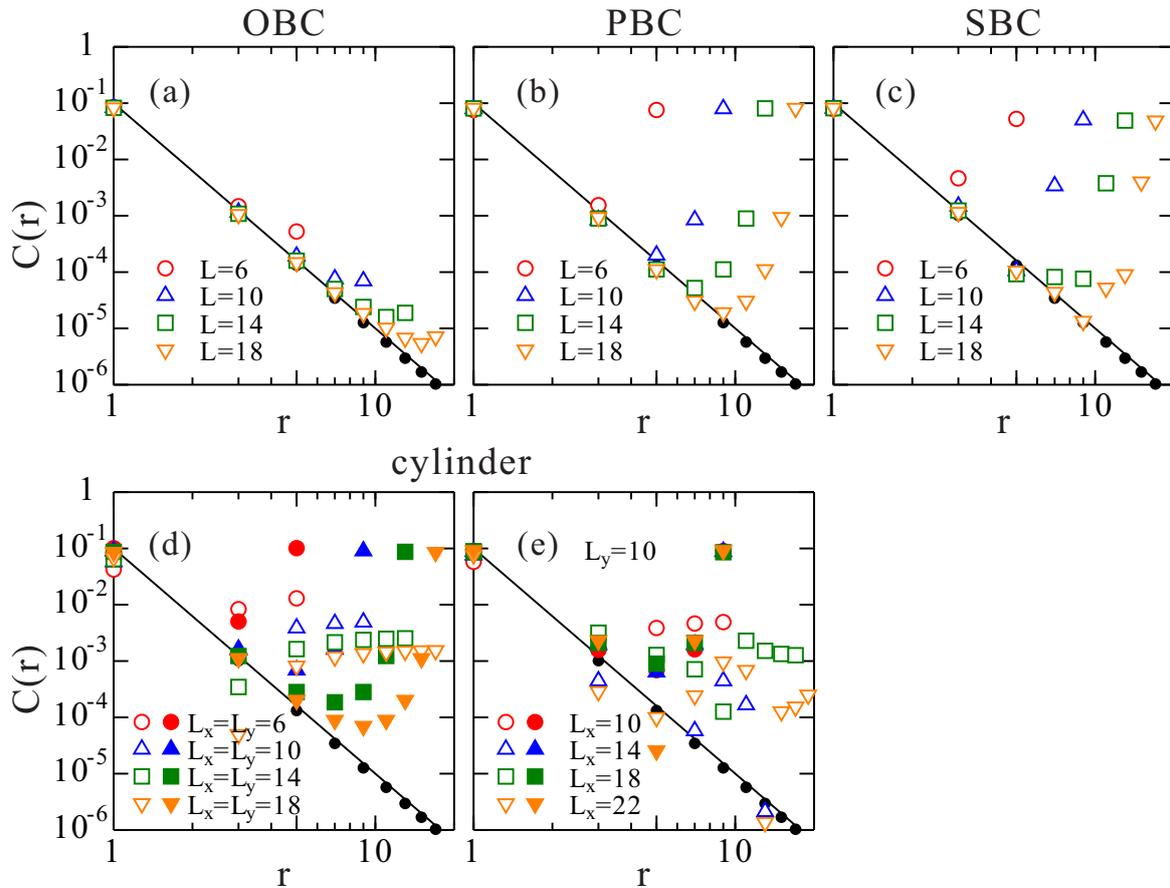


図 4.34: 2 次元正方格子 tight-binding 模型の half filling での密度相関関数 $C(r)$ のボンドの方向、すなわち $(1,0)$, $(0,1)$ 方向に沿った距離 r に対する依存性。それぞれ (a) OBC, (b) PBC, (c) SBC, (d,e) シリンダー境界条件での結果を示している。シリンダーについては、 $(1,0)$ 方向と $(0,1)$ 方向の両方の結果をプロットしている。参考として、OBC での 100×100 サイトの系での結果を黒の点でプロットしている。解析計算から期待されるように、 $C(r) \propto 1/r^4$ で減衰する。

図 4.34 に、各境界条件下の half filling での $C(r)$ をボンドの方向すなわち (1,0), (0,1) 方向の距離 r の関数としてプロットした。OBC, PBC, SBC を用いた場合には、結果は同程度に良いことが分かる。例えば、 $L = 18$ の系において $r \sim 9$ の点まで、解析的な結果 $C(r) \propto 1/r^4$ に乗っていることが確認できる²。一方で、シリンダー境界条件を用いた場合の結果は明らかに悪く、 $C(r) \propto 1/r^4$ からのずれが最も大きい。先行研究でも報告されているように [110]、シリンダーの場合は縦と横の比を一定に保って系のサイズを大きくすることで結果を改善できるようである。それでも、図 4.33(d) に示すように、 $L_x = L_y = 18$ の場合でも $C(r) \propto 1/r^4$ の振舞は $r \sim 5$ までしか確認できない。これは、シリンダー境界条件では元の等方的な 2 次元正方格子のクラスターに、一種の空間的な異方性を課しているためである。さらに、図 4.33(e) に示すように、円周の長さを固定して軸の長さを増加させても結果は改善されないことが分かる。

以上から、2 次元系の相関関数を計算する場合には OBC か SBC のいずれかを選択することができる。しかし、OBC 下での 2 次元系はドーブされたり何らかの相互作用を導入すると、Friedel 振動によって簡単に乱される。したがって、2 次元系の相関関数を DMRG で計算する場合には SBC が最初の選択肢となりうる。

4.6 結論

本章では、2 次元格子系の境界条件としてスパイラル境界条件 (SBC) を導入した。SBC を適用することで、周期境界条件 (PBC) 下の 2 次元以上の格子系は、並進対称性を持つ周期的な 1 次元鎖に厳密にマップできる。したがって、SBC によってマップされた 1 次元格子系に対して DMRG 等の 1 次元量子系に用いられる手法を適用することが可能になる。また、熱力学極限での物理量を得るために、2 次元格子の場合は通常 x 方向と y 方向の 2 段階のサイズスケーリングを行う必要があるが、1 次元方向のサイズスケーリングのみで良いという利点がある。

まず 4.2.5 節では、具体例として 2 次元正方格子とハニカム格子上の tight-binding 模型について、SBC を用いた 1 次元格子へのマッピングを実空間と波数空間の両方で示した。次に、状態密度と基底状態のエネルギーのクラスターサイズに対する依存性を示し、それらが熱力学極限へ近づいていく様子を確認した。そして 4.3 節では、SBC による 1 次元鎖へのマッピングを利用した 2 次元量子系への DMRG の適用例として、2 次元正方格子 Hubbard 模型の基底状態エネルギーと 2 次元正方格子 XXZ 模型のスタaggered 磁化の計算を行った。結果を厳密解や先行研究の結果と比較することで、SBC を用いて十分な精度で 2 次元量子系の DMRG 計算を行えることを確認した。

また 4.4 節では、SBC で得られた 1 次元鎖を open chain で扱うことで 2 次元量子系の秩序変数を DMRG で計算する方法を提案した。この方法のベンチマークとして、まず 2 次元正方格子 $S = \frac{1}{2}$ XXZ 模型のスタaggered 磁化の評価をあらゆる範囲の XXZ 異方性について行った。結果を先行研究での解析的・数値的な結果と比較し、計算結果の信頼性を確かめた。さらに、スピンの大きい $S = 1$ から $S = 6$ の場合にも、この方法を用いてスタaggered 磁化の計算が行えることを確認した。

最後に 4.5 節において、他の境界条件と比較した SBC の優位性を物理量の有限サイズスケーリングと、相関関数の振舞の観点から明らかにした。2 次元正方格子上の tight-binding 模型について、half filling での基底状態のエネルギーの有限サイズスケーリングの様子と、密度相関関数の振舞を比較した。基底状態のエネルギーについては、OBC と SBC が計算コストや有限サイズスケーリングの容易さの観点から適していることが分かった。また、密度相関関数の振舞については SBC が OBC 及び PBC と同程度に熱力学極限での振舞を再現しており、シリンダー境界条件の場合には熱力学極限での振舞を上手く再現できないことを確認した。いずれの場合も、ドーブした場合や相互作用を導入した場合の Friedel 振動による影響や計算コストを考慮すると、SBC が良い選択肢となると考えられる。

SBC を用いた 1 次元系へのマッピングは、さらなる研究に応用可能である。例えば、SBC によって得られる 1 次元鎖は 1 次元系としての並進対称性を保っているため、MPS に基づいた DMRG や iDMRG [111] 等を用いた無限系の DMRG 計算にも適している。また 2 次元系における長距離の相関関数を 1 次元鎖に沿って計算することで体系的に研究することも可能である。そして、本章では 2 次元正方格子とハニ

²導出は付録 B.5 を参照。

カム格子の 2 種類の格子を考えているが、同様の 1 次元的なマッピングは 2 次元以上のあらゆる周期的格子に対して可能である [71]。

第5章 総括

本論文では密度行列繰り込み群法 (DMRG) を用いて、1次元量子スピン系における異方的な磁性不純物の効果と2次元量子系の境界条件に関する研究を行った。

まず、1次元のスピン $\frac{1}{2}$ 反強磁性 Heisenberg 模型に XXZ 型の異方性を持つスピン S 不純物をドーブした場合の効果について調べた。基底状態において、単一の不純物をドーブした場合の反強磁性相関関数と不純物付近でのスピンモーメントの振動を計算することで、 $S = 1$ 不純物が有効的に非磁性不純物として振る舞うことと、スピン S 不純物の効果が以下の2種類に分類できることが分かった。(i) 非磁性不純物及び $S = 1$ の不純物: 短距離の反強磁性相関は増大するが、長距離の反強磁性相関は元の Heisenberg 鎖よりも速く減衰する。(ii) $S = \frac{1}{2}$, $S > 1$ の不純物: 長距離の反強磁性秩序を安定化させる。また、局所スピン感受率と NMR スペクトルを計算し実験結果との比較を行うことで、 $\text{SrCu}_{0.99}\text{Co}_{0.01}\text{O}_2$ における Co イオンのスピン状態が $S = 3/2$ であり容易軸異方性を持つ場合に相当することを確かめた。

次に、(ii) の場合の不純物の代表例として $S = \frac{1}{2}$ 不純物をドーブした場合の、スタッガード磁化の不純物の異方性の強さと不純物濃度に対する依存性を計算し、容易軸異方性を持つ不純物を有限の濃度ドーブすることで長距離の反強磁性秩序が安定化することを確かめた。また、容易軸異方性を持つ不純物をドーブした場合に、磁化曲線にプラトーのような構造が現れることを明らかにした。この結果は Ising 型の異方性を持つ不純物サイトが等方的な非不純物サイトよりも磁場によって偏極しにくいことから、直感的に理解することができる。

さらに、完全対角化を用いたクラスター平均場近似により、 $S = \frac{1}{2}$ 不純物をドーブした場合の比熱と磁化率の温度依存性を計算した。その結果、異方的な不純物のドーブによって反強磁性秩序が安定化することにより、反強磁性相から常磁性相への転移温度が不純物濃度とともに上昇することを明らかにした。

次に、スパイラル境界条件 (SBC) を用いた2次元格子系の1次元格子系へのマッピングの方法について研究した。SBC を用いることで、2次元格子系を周期的な1次元鎖に厳密にマップすることができるため、DMRG 等の既存の1次元系に対する手法を効率的に適用することが可能になる。また、熱力学極限の物理量を得る場合にも通常は x 方向と y 方向の2段階のサイズスケーリングを行う必要があるが、1段階のサイズスケーリングのみで良い。さらに、SBC では従来の境界条件に比べてボンドの距離を短くすることができるため計算コストを削減できることや、open chain として扱う場合でも切断されるボンドの数が少ないため Friedel 振動等の有限サイズ効果を抑えることができると考えられる。

まず具体例として、2次元正方格子とハニカム格子上の tight-binding 模型について、SBC による1次元的なマッピングの方法を示した。次に、基底状態のエネルギーと状態密度が熱力学極限で元の2次元格子の結果に一致することを解析的及び数値的に確認した。そして、SBC による1次元的なマッピングの手法を用いた2次元量子系への DMRG の適用例として、2次元正方格子上の Hubbard 模型の half filling での基底状態のエネルギーと XXZ 模型のスタッガード磁化を計算し、熱力学極限への有限サイズスケーリングを行った。前者については、open chain で計算した基底状態のエネルギーが $1/L$ の1次関数でフィッティングできることを確認し、熱力学極限での外挿値もシリンダー境界条件による先行研究の結果と整合することを確かめた。後者についても、 $\Delta = 1$ でのスタッガード磁化の外挿値が先行研究による結果と十分一致することを確かめた。また、 Δ の大きい領域で計算結果が級数展開による結果と非常に良く一致することが確かめられた。

さらに、SBC で得られた1次元格子を open chain で扱うことで秩序変数を計算する方法についても提案した。open chain を用いることで、periodic chain を用いる場合よりも DMRG の計算コストを大きく抑えることができ、更に大きなサイズの系での計算を実行することができるため、計算精度の向上やより安定した有限サイズスケーリングが期待される。ベンチマークとして、2次元正方格子 $S = \frac{1}{2}$ XXZ 模型

の熱力学極限でのスタaggered磁化の評価をあらゆる範囲の異方性について行い、先行研究と比較することで計算結果の信頼性を確かめた。さらなる応用として、基底の数が増大するためにDMRGでの計算が難しい、スピンの大きい($1 \leq S \leq 6$) 場合についてもスタaggered磁化の評価を行った。

最後に、2次元正方格子上的 tight-binding 模型について、half filling での基底状態のエネルギーの有限サイズスケールリングの様子と密度相関関数の振舞を様々な境界条件で計算することで、他の境界条件と比較したSBCの優位性を調べた。いずれの場合も有限サイズスケールリングの容易さや、計算コスト等を考慮するとSBCが良い選択肢となることを明らかにした。

以上の研究は、1次元反強磁性スピン鎖において磁性不純物のスピンの大きさと異方性が反強磁性秩序の安定化に与える影響について詳細に明らかにするとともに、2次元量子系におけるDMRGの効率的な適用や既存の境界条件における問題の改善に繋がると考えられる。さらなる研究として、強磁性のスピン鎖における不純物効果についても同様の研究を行うことが考えられる。また、SBCにより得られる1次元鎖は並進対称性を保っているため、iDMRG等を用いて無限系の物理量の計算を行うことも可能であると考えられる。

付録A スピン $\frac{1}{2}$ 反強磁性Heisenberg鎖における異方的スピン S 不純物の効果の研究に関する補遺

A.1 不純物サイトでの交換相互作用の値を変えた場合の結果

本文では、不純物ドーピングによって交換相互作用の値が変化しない場合を考えたが、現実の物質では不純物ドーピングによって交換相互作用の値が変わることも考え得る。ここでは、図 A.1 のように不純物サイトでの交換相互作用の値 J_{imp} を変えた場合について、3.3.2 節で計算した局所スピンモーメントの計算結果を示す。

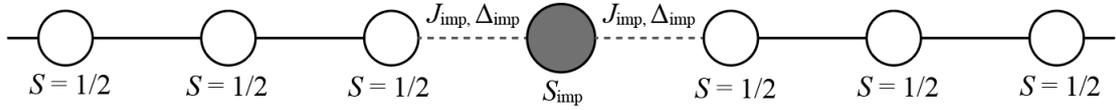


図 A.1: 不純物スピンをドーピングしたスピン $\frac{1}{2}$ 反強磁性 Heisenberg 鎖の模式図。不純物スピンと最近接サイトの交換相互作用の値を J_{imp} , XXZ 異方性を Δ_{imp} としている。

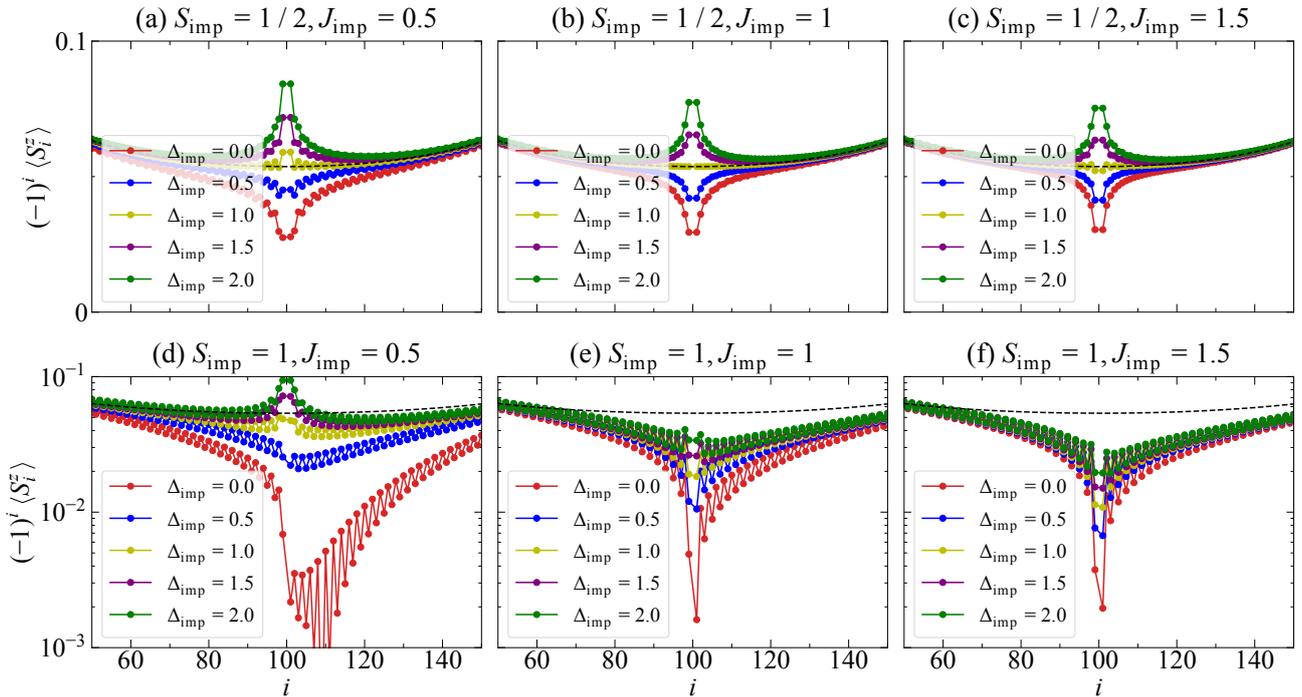


図 A.2: (a)-(c) $S_{\text{imp}} = \frac{1}{2}, J_{\text{imp}} = 0.5, 1, 1.5$, (d)-(f) $S_{\text{imp}} = 1, J_{\text{imp}} = 0.5, 1, 1.5$ の場合の $(-1)^i \langle S_i^z \rangle$ の Δ_{imp} 依存性。破線は不純物をドーピングしていない場合の結果である。

まず、 $S = 1/2, 1$ の不純物をドーピングした場合の結果を図 A.2 に示す。3.3.2 節と同様に、200 サイトの開境界の系のサイト $i = 100$ に不純物スピンをドーピングした時の局所スピンモーメントを DMRG を用いて計算している。不純物サイトでの交換相互作用の値は $J_{\text{imp}} = 0.5, 1, 1.5$ として計算している。 $S = 1/2$ の不純物をドーピングした場合は、 $\Delta_{\text{imp}} > 1$ であれば不純物付近で反強磁性の振動が増大し、 $\Delta_{\text{imp}} < 1$ であれば抑制されるという効果が J_{imp} の値にほぼ依らず確認できる。

また、 $S = 1$ の不純物をドーブした場合は、 $J_{\text{imp}} = 1, 1.5$ では Δ_{imp} の値に依らず反強磁性の振動は抑制されるが、 $J_{\text{imp}} = 0.5$ では $\Delta_{\text{imp}} > 1$ の場合に反強磁性の振動が増大していることが分かる。本文で述べたように不純物ドーブにより交換相互作用の値が変化しない場合には、 $S = 1$ の不純物は両隣の $\frac{1}{2}$ スピンとシングレットを形成し有効的に非磁性不純物として振る舞うために、不純物付近での反強磁性の振動は抑制される。図 A.2(d) の結果は、 $S = 1$ 不純物のドーブによって交換相互作用の値が小さくなる場合には、 $S = 1$ 不純物が両隣の $\frac{1}{2}$ スピンとシングレットを形成しにくくなるために、 Δ_{imp} が大きい場合に反強磁性秩序が安定化され得ることを示唆している。

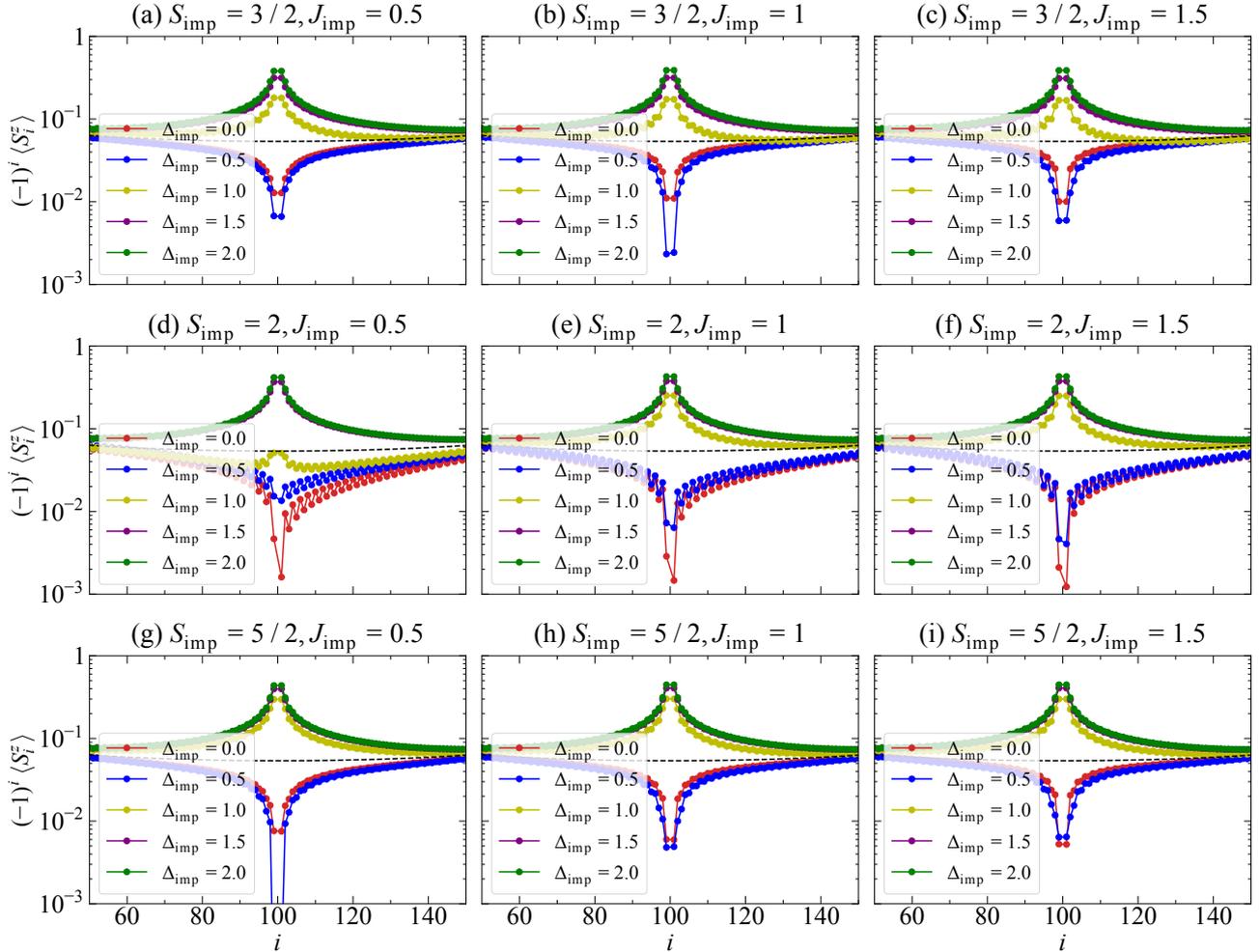


図 A.3: (a)-(c) $S_{\text{imp}} = \frac{3}{2}$, $J_{\text{imp}} = 0.5, 1, 1.5$, (d)-(f) $S_{\text{imp}} = 2$, $J_{\text{imp}} = 0.5, 1, 1.5$, (g)-(i) $S_{\text{imp}} = \frac{5}{2}$, $J_{\text{imp}} = 0.5, 1, 1.5$ の場合の $(-1)^i \langle S_i^z \rangle$ の Δ_{imp} 依存性。

次に、 $S = 3/2, 2, 5/2$ の不純物をドーブした場合の結果を図 A.3 に示す。 $S > 1$ の不純物をドーブした場合には $S = \frac{1}{2}$ の不純物をドーブした場合と同様に、 $\Delta_{\text{imp}} \gtrsim 1$ であれば不純物付近で反強磁性の振動が増大し、 $\Delta_{\text{imp}} \lesssim 1$ では抑制されるという効果が $J_{\text{imp}} = 0.5, 1, 1.5$ のいずれの場合も確認できる。

以上の結果から、不純物サイトでの交換相互作用の値を変えたとしても 3.3.2 節で確認したように、(i) 非磁性と $S = 1$ の不純物では Δ_{imp} に依らず反強磁性の振動が減衰し、(ii) $S = 1/2, S > 1$ の不純物では $\Delta_{\text{imp}} \gtrsim 1$ の場合に反強磁性振動が増大するという傾向は変わらないと言える。しかし、 $S = 1$ の不純物では $J_{\text{imp}} < 1$ とすると、 $\Delta_{\text{imp}} > 1$ の場合に反強磁性振動が増大することが確認できた。これは、交換相互作用の値を小さくすることで $S = 1$ の不純物スピンの隣接する $\frac{1}{2}$ スピンとシングレットを形成しにくくなるためだと考えられる。

A.2 $S_{\text{imp}} > 1$ の不純物近傍に局在する $S = \frac{1}{2}$ 状態

3.3.3 節で、 $S^z = \frac{1}{2}$ セクターにおいて $S = \frac{1}{2}$ の状態が $S_{\text{imp}} > 1$ 不純物の近傍に局在すると主張した。これを説明するため、 $S_{\text{imp}} = \frac{T}{2}$ の不純物サイトとその両隣の $S = \frac{1}{2}$ のサイトから成る 3 サイトの Heisenberg 鎖を考える。系のハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}(S_1^+ S_{\text{imp},2}^- + S_1^- S_{\text{imp},2}^+) + \Delta_{\text{imp}} S_1^z S_{\text{imp},2}^z + \frac{1}{2}(S_{\text{imp},2}^+ S_3^- + S_{\text{imp},2}^- S_3^+) + \Delta_{\text{imp}} S_{\text{imp},2}^z S_3^z \quad (\text{A.1})$$

と表される。

$S^z = \frac{1}{2}$ セクターでの基底は

$$\phi_1 = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{T}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \quad (\text{A.2})$$

$$\phi_2 = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{T}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (\text{A.3})$$

$$\phi_3 = \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{T}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \quad (\text{A.4})$$

$$\phi_4 = \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{T}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (\text{A.5})$$

の 4 つである。ここで $|jm\rangle$ はスピンの大きさが j でスピンの z 成分の固有値が m の状態を表す。したがって、 $S^z = \frac{1}{2}$ セクターでのハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} -\frac{\Delta_{\text{imp}}}{2} & \frac{\sqrt{T(T+2)+1}}{4} & \frac{\sqrt{T(T+2)+1}}{4} & 0 \\ \frac{\sqrt{T(T+2)+1}}{4} & 0 & 0 & \frac{\sqrt{T(T+2)-3}}{4} \\ \frac{\sqrt{T(T+2)+1}}{4} & 0 & 0 & \frac{\sqrt{T(T+2)-3}}{4} \\ 0 & \frac{\sqrt{T(T+2)-3}}{4} & \frac{\sqrt{T(T+2)-3}}{4} & -\frac{3}{2}\Delta_{\text{imp}} \end{pmatrix} \quad (\text{A.6})$$

と書ける。

$\Delta_{\text{imp}} = 1$ の場合にこの行列を対角化すると、基底状態のエネルギーは $\varepsilon_0 = -(T+2)/2$ と求められ、その波動関数は

$$\psi_{\text{g.s.}}(\Delta_{\text{imp}} = 1) = A \left(\phi_1 - \phi_2 - \phi_3 + \sqrt{\frac{T+3}{T-1}} \phi_4 \right) \quad (\text{A.7})$$

となる。ここで $A = \sqrt{\frac{T-1}{4T}}$ である。 T が十分小さい場合には基底状態の主要な成分は

$$\psi_{\text{g.s.}}(\Delta_{\text{imp}} = 1) \approx \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{T}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle \otimes \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (\text{A.8})$$

と書ける。これは S^z が不純物サイトで最大になることを意味しており、 $S = \frac{1}{2}$ の状態が $S_{\text{imp}} > 1$ の不純物の近傍に局在することが結論付けられる。また、(A.8) は Δ_{imp} を大きくすると厳密な基底状態に近づいていくため、 $S = \frac{1}{2}$ 状態の局在化は Δ_{imp} が大きいほど強くなる。

$\Delta_{\text{imp}} = 0$ の極限では、基底状態は

$$\psi_{\text{g.s.}}(\Delta_{\text{imp}} = 0) = \frac{1}{2} \left(\frac{T+1}{\sqrt{T^2-2T-1}} \phi_1 - \phi_2 - \phi_3 + \sqrt{\frac{T^2+2T-3}{T^2+2T-1}} \phi_4 \right) \quad (\text{A.9})$$

となり、基底 (A.3) と (A.4) の係数が大きくなる。したがって、 Δ_{imp} が小さいほど $S = \frac{1}{2}$ 状態の局在化は弱くなる。

A.3 DMRG 計算での不純物分布のランダムサンプリングと有限サイズスケールリング

図 A.4(a) に、DMRG を用いて計算した $\Delta_{\text{imp}} = 1.1$, $n_{\text{imp}} = 0.1$ でのスタッガード磁化 m_{st}^z の有限サイズスケールリングの様子を示す。これは熱力学極限 $L \rightarrow \infty$ での外挿値が小さいため最もサイズスケールリングが難しい場合である。 $l = \sqrt{L}$ の 3 次関数と 4 次関数での fitting で、 $L \rightarrow \infty$ の極限でそれぞれ $m_{\text{st}}^z = 2.617 \times 10^{-3}$ と $m_{\text{st}}^z = 2.270 \times 10^{-3}$ が得られた。この外挿値は十分に近い値であり、図 A.4(a) に示すように fitting の曲線も妥当であるため、 m_{st}^z の有限サイズスケールリングの妥当性が確認できる。

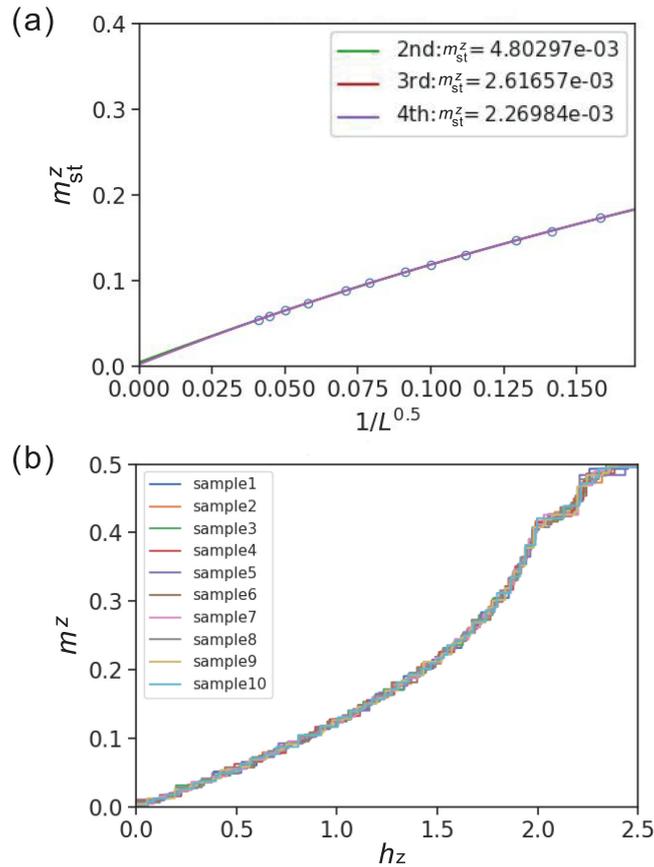


図 A.4: (a) DMRG で計算したスタッガード磁化 m_{st}^z の $\Delta_{\text{imp}} = 1.1$, $n_{\text{imp}} = 0.1$ での有限サイズスケールリング。(b) $\Delta_{\text{imp}} = 1.5$, $n_{\text{imp}} = 0.1$ での磁化曲線の DMRG での計算結果。 $L = 1000$ サイトでランダムな 10 個の不純物分布について結果を示している。

また、図 A.4(b) に $\Delta_{\text{imp}} = 1.5$, $n_{\text{imp}} = 0.1$ での磁化曲線の DMRG の計算結果を示す。 $L = 1000$ サイトでランダムに 10 サンプル採った不純物分布それぞれについて、計算結果を示している。不純物分布のランダムサンプリングの違いによる磁化曲線のずれは小さいため、 $L = 1000$ サイトの系は不純物ドープによるあらゆる現象を再現するのに十分な大きさであると考えられる。より正確な結果を得るため、図 3.17 に示す磁化曲線では 10 個のランダムサンプリングについて平均をとっている。

A.4 CMFT 計算での不純物分布のランダムサンプリング

図 A.5 は不純物分布のサンプル数の増加に対する m_{st}^z の依存性を示している。クラスターのサイズが小さいため、 $n_{imp} = 0.1, 0.8$ についてはサンプル数を増やすことができない。図 A.5(a) から、不純物分布のサンプル数を増やすことで m_{st}^z のずれを小さくできることが確認できる。図 A.5(b) に異なる Δ_{imp} についての m_{st}^z のサンプル数依存性を示す。不純物濃度の低い $n_{imp} = 0.2, 0.4$ において m_{st}^z のサンプル数 N_{av} に対する依存性が顕著であることが確認できる。

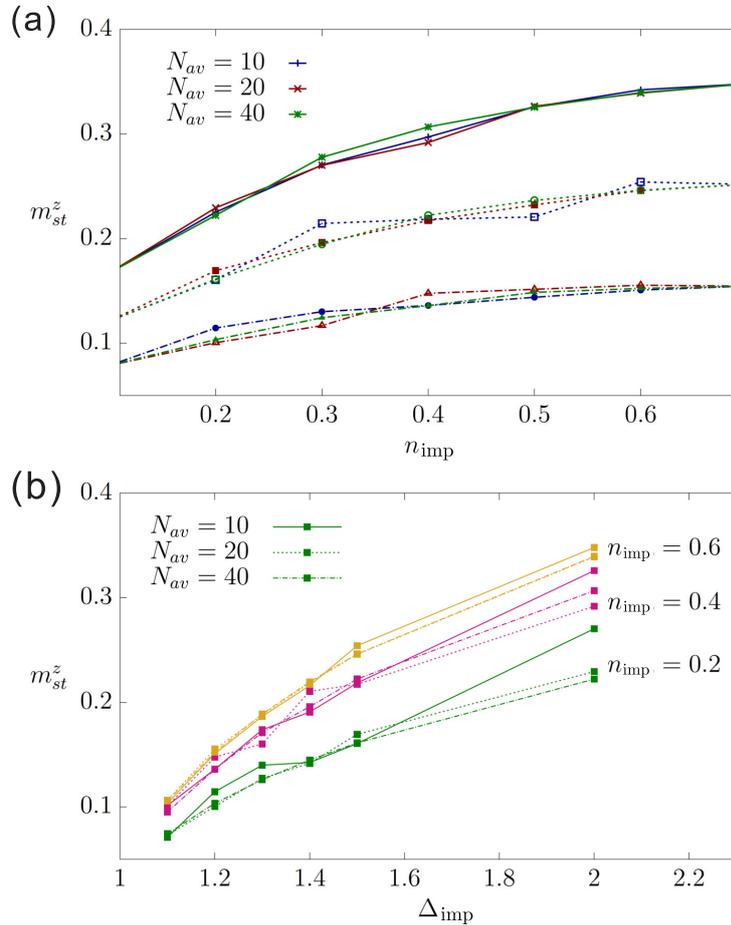


図 A.5: (a) $\Delta_{imp} = 1.2$ (点線), $\Delta_{imp} = 1.5$ (破線), $\Delta_{imp} = 2.0$ (実線) での、 N_{av} 通りの不純物分布について平均をとった m_{st}^z の n_{imp} 依存性。 (b) $n_{imp} = 0.2, 0.4, 0.6$ での m_{st}^z の Δ_{imp} 依存性。

A.5 CMFT 計算での有限サイズ効果

図 A.6 に、不純物の数 N_i を $N_c/2$ と $N_c - 2$ に固定したときの m_{st}^z のクラスターサイズに対する依存性を示す。 $N_i = N_c/2$ の場合はごく少数 ($N_{av} = 10$) の不純物分布について平均をとるため、サイズ依存性には揺らぎが見られる。サイズを大きくすると m_{st}^z はあるサイズまでは増加し、それ以降は減少し始めることが分かる。べき関数による fitting から、クラスターサイズを更に大きくすると m_{st}^z は DMRG により得られた値と近い値に外挿されることが分かる [図 A.6(a) の丸印]。 $N_i = N_c - 2$ の場合には N_c を大きくすると m_{st}^z の値も増加することが分かる。この振舞は、系のサイズを大きくすると m_{st}^z が減少する完全に等方的な Ising ($\Delta \rightarrow \infty$) や Heisenberg ($\Delta = 1$) 鎖の場合と比べて直感に反する。しかし、我々の CMFT 計算では平均場近似するボンドの相互作用は Heisenberg 型であり、不純物サイトの個数を $N_i = N_c - 2$ に保ってクラスターサイズを増やすと、等方的なボンドの数に比べて異方的なボンドの数の割合が増加していく。この Heisenberg 型のボンドと Ising 型 (XXZ 型) のボンドの競合によって m_{st}^z は系のサイズとともに増加し、最大値に収束する。図 A.6(b) の丸印は $n_{imp} = 0.8$ での DMRG による結果である。べき関数による fitting から、異方性が $\Delta_{imp} = 1.1$ に比べて大きいほど DMRG の結果との一致が良いことが分かる。

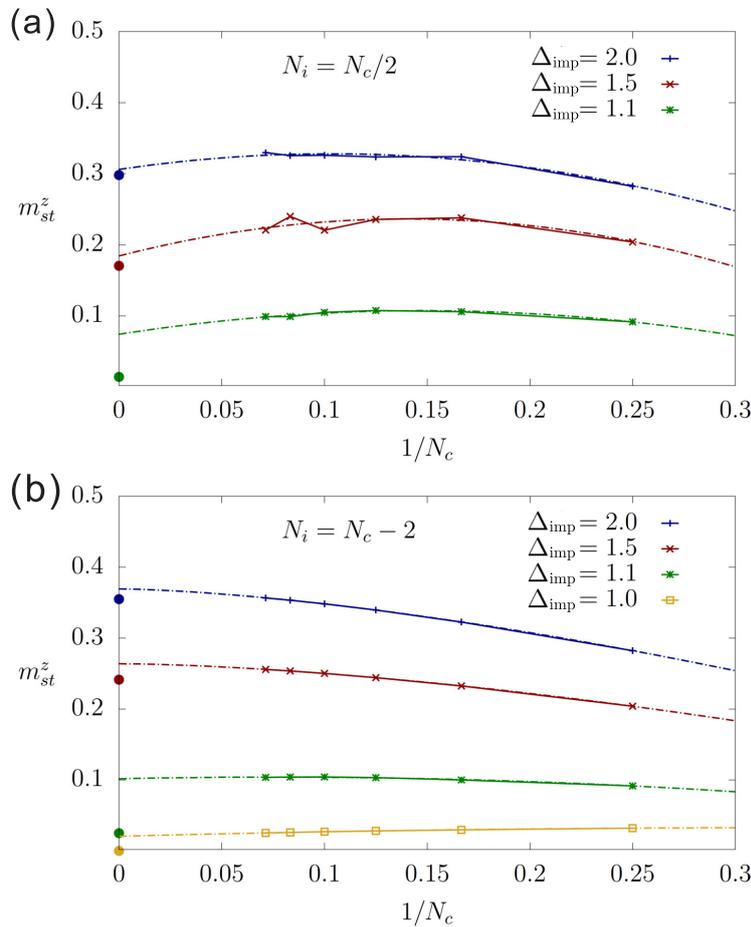


図 A.6: 不純物の個数が (a) $N_i = N_c/2$ と (b) $N_i = N_c - 2$ の場合の m_{st}^z のクラスターサイズによるスケーリング。最大で 10 通りのランダムな不純物分布について平均をとっている。鎖線はべき関数による fitting を示している。また、丸印は DMRG の計算結果の外挿値である。

付録B スパイラル境界条件に関する補足資料

B.1 スパイラル境界条件による縮退したエネルギー準位の分裂

PBC と SBC を用いた場合ではクラスターの対称性が異なる。ここでは正方格子の場合を例にとって説明する。PBC の下で $L \times L$ サイトのクラスターは C_4 回転対称性を持つ。結果として、独立な波数の数は $\frac{L^2}{8} + \frac{3L}{4} + 1$ となる。一方で SBC を適用した場合は、縮退したエネルギー準位が分裂することにより回転対称性は C_4 から C_2 に減少する。したがって、独立な波数の数は $\frac{L^2}{2} + 1$ に増加する。

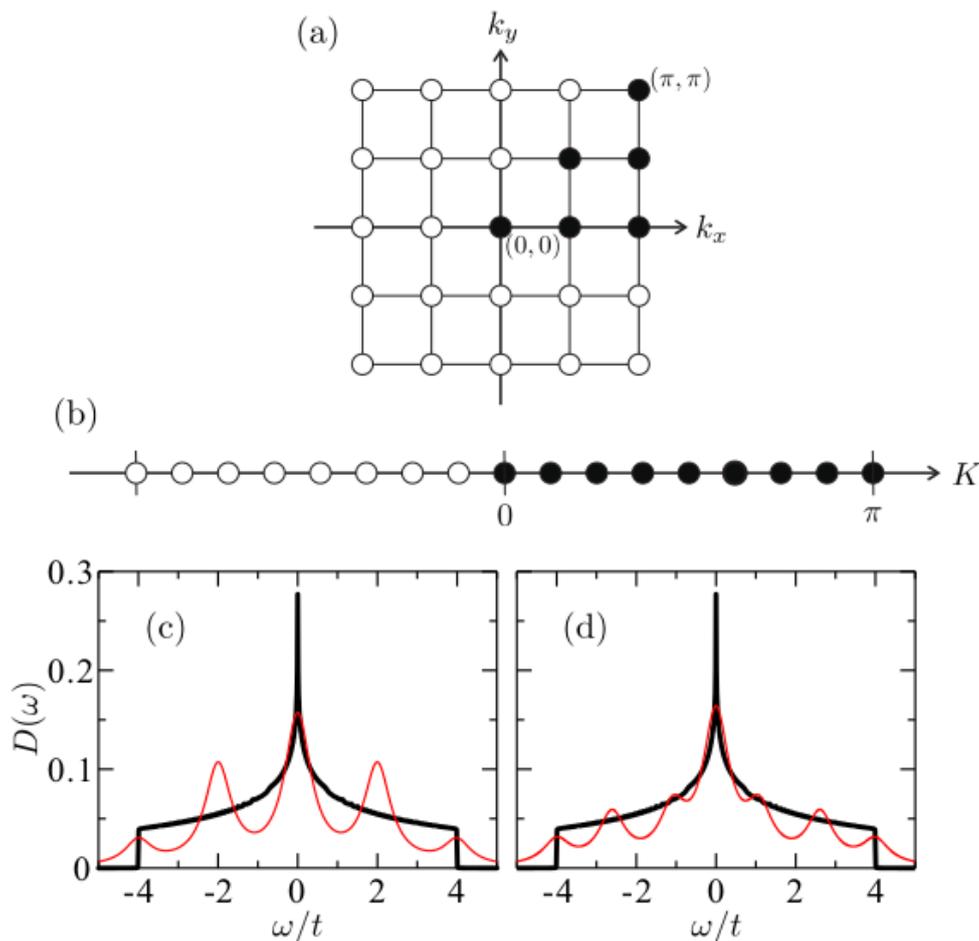


図 B.1: (a,b) それぞれ周期境界条件とスパイラル境界条件下の 4×4 正方格子クラスターでの取り得る波数点。黒丸は独立な波数点の組の一例を示している。(c,d) それぞれ周期境界条件とスパイラル境界条件下の 4×4 サイトの正方格子 tight-binding 模型の状態密度 (赤線)。黒線は熱力学極限での状態密度である。

図 B.1(a, b) に PBC と SBC 下での 4×4 クラスターの取り得る波数点を示す。黒丸で示した独立な波数点の数はそれぞれ 6 と 9 である。結果として、図 B.1(c, d) に示すように、SBC での状態密度は熱力学極限での状態密度により近くなっている。

B.2 スパイラル境界条件でのクラスターのとり方の柔軟性

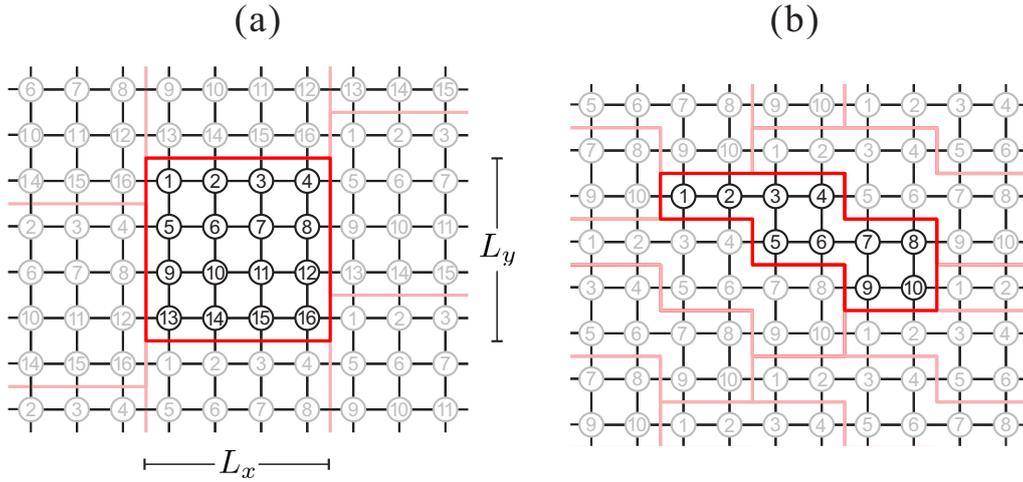


図 B.2: (a) $k = (\pi, 0)$ の周期性を持つ状態に対応する SBC 下での 2 次元正方格子のクラスター。(b) SBC でとり得る 10 サイトの非長方形のクラスター。

本文でも言及したように、SBC を用いた 1 次元系へのマッピング方法はただ一つではない [70]。すなわち、波動関数の周期性を PBC よりも柔軟に設定することができる。本研究で 2 次元正方格子に対して用いたのは、Néel 状態のような $k = (\pi, \pi)$ の周期性を持つ状態を計算するのに適した方法である。しかし、もし $k = (\pi, 0)$ の周期性を持つ状態を計算する場合には、図 B.2(a) のように SBC を適用するのが適している。この場合には、 $L_x \times L_y$ サイトの 2 次元正方格子のクラスターは、最近接と L_x 次近接のボンドを持つ並進対称な 1 次元鎖に厳密にマップされる。この格子上的 tight-binding 模型のハミルトニアンは

$$\mathcal{H}_{\text{sq},0} = -t \sum_{\sigma} \sum_{i=1}^{L_x L_y} (c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{i+1,\sigma} + c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{i+L_x,\sigma} + \text{H.c.}) \quad (\text{B.1})$$

と書け、フーリエ変換すると

$$\mathcal{H}_{\text{sq},K} = -2t \sum_{K,\sigma} (\cos K + \cos L_x K) c_{K,\sigma}^{\dagger} c_{K,\sigma}, \quad (\text{B.2})$$

となる。図 4.10 での $k = (\pi, \pi)$ と図 B.2(a) での $k = (\pi, 0)$ の周期性は共に、マップされた 1 次元鎖では $k = \pi$ の周期性で表される。

また、SBC を適用する場合には一般的に、格子の形状を正方形や長方形または平行四辺形等することに拘る必要はない。クラスターの形状やサイト数は、SBC 下では比較的柔軟に選ぶことができる。例えば、図 B.2(b) に示すように 10 サイトのクラスターを構成することができる。この場合、マップされた 1 次元鎖は最近接と次近接のボンドを持ち、並進対称性も保たれていることが分かる。したがって、考えている物理に応じて SBC の適用方法を変えることができる。

別の例として、三角格子反強磁性 Heisenberg 模型の 120° 構造で見られるような $k = (2\pi/3, 2\pi/3)$ の周期性を持つ状態を考えることもできる。この場合は、図 B.3 のように格子をとることで、並進対称性を持つ 1 次元鎖として表すことができる。すなわち、 $L_x \times L_y$ サイトの三角格子クラスターであれば、最近接と $(L_x - 2)$ 及び $(L_x - 1)$ 次近接のボンドを持つ周期的な 1 次元鎖に厳密にマップされる。

このように、SBC においてクラスターの周期性は柔軟に選択することができる。また、非整合の秩序を持つ状態を考える必要がある場合には、できる限り近い周期性を持つクラスターを用意することで、物理量の熱力学極限への収束を速くすることができると思われる。

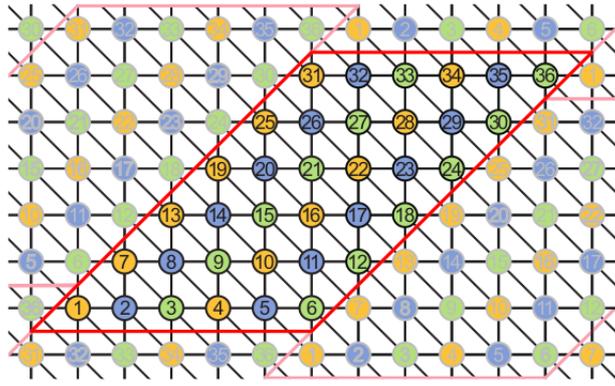


図 B.3: SBC 下での三角格子のクラスター。赤で囲まれた部分が独立なクラスターを表している。この格子のとり方は $k = (2\pi/3, 2\pi/3)$ の周期に対応している。異なる副格子に属するサイトは色を分けて示している。

B.3 DMRG 計算の収束に関するデータ

ここでは、SBC を適用した場合の DMRG 計算の精度を確認する。表 B.1 に、2 次元正方格子 Hubbard 模型の half filling, $U/t = 8$ での基底状態エネルギー $E_0(m)$ と discarded weight w_d の DMRG の状態数 m に対する依存性を、各サイト数 $L \times L$ について示す。全てのサイト数について、 $m \rightarrow \infty$ ($w_d \rightarrow 0$) での基底状態エネルギーは、 $E_0(m)$ を w_d の 1 次関数で外挿することで得られる。discarded weight はおよそ L に比例しているが、 12×12 の場合でも $\sim 10^{-5}$ 程度のオーダーである。これは、2 次元の電子系の DMRG 計算としては十分精確であると考えられる。

表 B.1: SBC を適用して計算した 2 次元正方格子 $L \times L$ サイトの Hubbard 模型の half filling, $U/t = 8$ での基底状態エネルギー $E_0(m)$ と discarded weight w_d の DMRG の状態数 m に対する依存性。 $m \rightarrow \infty$ でのエネルギーの外挿値は $E_0(m)$ を w_d の 1 次関数で外挿することで得た。

$L = 6$				$L = 8$			
m	w_d	$E_0(m)$	$E_0(m) - E_0(\infty)$	m	w_d	$E_0(m)$	$E_0(m) - E_0(\infty)$
2000	3.432e-06	-17.79364790	0.01227902	2000	1.286e-05	-31.76311291	0.26322934
4000	7.856e-07	-17.80326286	0.00266406	4000	8.420e-06	-31.87302879	0.15331346
6000	3.052e-07	-17.80489349	0.00103344	6000	5.681e-06	-31.91448613	0.11185612
8000	1.516e-07	-17.80541043	0.00051649	8000	4.550e-06	-31.93686464	0.08947761
10000	8.614e-08	-17.80563244	0.00029448	10000	4.165e-06	-31.95093410	0.07540815
12000	5.332e-08	-17.80574150	0.00018542	12000	3.815e-06	-31.96253340	0.06380885
∞		-17.80592692		∞		-32.02634225	

$L = 10$				$L = 12$			
m	w_d	$E_0(m)$	$E_0(m) - E_0(\infty)$	m	w_d	$E_0(m)$	$E_0(m) - E_0(\infty)$
2000	2.119e-05	-49.50077175	1.02132882	2000	-	-	-
4000	1.379e-05	-49.84727132	0.67482925	4000	1.840e-05	-71.40452905	1.73164686
6000	1.198e-05	-49.99628942	0.52581115	6000	1.486e-05	-71.71734724	1.41882867
8000	9.848e-06	-50.09485526	0.42724531	8000	1.365e-05	-71.91712273	1.21905318
10000	7.774e-06	-50.15642914	0.36567143	10000	1.224e-05	-72.06942431	1.06675160
12000	5.854e-06	-50.19615496	0.32594561	12000	9.293e-06	-72.19219444	0.94398147
∞		-50.52210057		∞		-73.13617591	

また、表 B.2 に 2 次元正方格子 Heisenberg 模型の基底状態エネルギーの DMRG 計算について、各境界条件での基底状態エネルギーと discarded weight の値を示す。discarded weight は OBC とシリンダー境界条件の場合に同程度で、SBC でマップした periodic chain の場合に若干大きい。驚くべきことに、SBC でマップした open chain を用いた場合には discarded weight はさらに小さくなる。したがって、discarded weight の観点からは 2 次元系の DMRG 計算において、OBC と SBC 及びシリンダー境界条件は同程度に良い選択肢であると言える。

表 B.2: 各境界条件での、2次元正方格子 Heisenberg 模型の基底状態エネルギー $E_0(m)$ と discarded weight w_d の DMRG の状態数 m に対する依存性。 6×6 ($L = 6$) サイトと 8×8 ($L = 8$) サイトの結果を示している。 $m \rightarrow \infty$ での基底状態エネルギーは $E_0(m)$ を w_d の 1 次関数で外挿することで得られる。

OBC

m	$L = 6$			$L = 8$		
	w_d	$E_0(m)$	$E_0(m) - E_0(\infty)$	w_d	$E_0(m)$	$E_0(m) - E_0(\infty)$
1000	1.100e-07	-21.72673267	0.00005340	8.166e-06	-39.60759545	0.01078493
2000	6.466e-09	-21.72678301	0.00000307	1.587e-06	-39.61627493	0.00210544
3000	9.883e-10	-21.72678556	0.00000051	5.714e-07	-39.61762743	0.00075294
4000	2.279e-10	-21.72678592	0.00000015	2.636e-07	-39.61803809	0.00034228
		-21.72678607			-39.61838038	

PBC

m	$L = 6$			$L = 8$		
	w_d	$E_0(m)$	$E_0(m) - E_0(\infty)$	w_d	$E_0(m)$	$E_0(m) - E_0(\infty)$
1000	2.981e-05	-24.40302953	0.03665799	-	-	-
2000	9.188e-06	-24.42949472	0.01019281	-	-	-
3000	3.938e-06	-24.43541285	0.00427468	-	-	-
4000	1.982e-06	-24.43743236	0.00225516	-	-	-
		-24.43968752				

SBC (periodic chain)

m	$L = 6$			$L = 8$		
	w_d	$E_0(m)$	$E_0(m) - E_0(\infty)$	w_d	$E_0(m)$	$E_0(m) - E_0(\infty)$
1000	9.130e-06	-24.45300594	0.00801971	9.025e-05	-42.79118365	0.32899812
2000	1.661e-06	-24.45965335	0.00137230	4.565e-05	-42.96307806	0.15710371
3000	5.365e-07	-24.46058729	0.00043835	2.898e-05	-43.02157949	0.09860228
4000	2.260e-07	-24.46083548	0.00019017	1.973e-05	-43.05183014	0.06835163
∞		-24.46102565			-43.12018177	

SBC (open chain)

m	$L = 6$			$L = 8$		
	w_d	$E_0(m)$	$E_0(m) - E_0(\infty)$	w_d	$E_0(m)$	$E_0(m) - E_0(\infty)$
1000	1.037e-09	-23.07464567	0.00000050	9.819e-07	-41.31375095	0.00116164
2000	2.447e-11	-23.07464616	0.00000001	1.161e-07	-41.31476448	0.00014811
3000	2.351e-12	-23.07464617	$< 10^{-8}$	2.987e-08	-41.31487486	0.00003773
4000	3.837e-13	-23.07464618	$< 10^{-8}$	1.058e-08	-41.31489881	0.00001379
∞		-23.07464618			-41.31491259	

cylinder

m	$L = 6$			$L = 8$		
	w_d	$E_0(m)$	$E_0(m) - E_0(\infty)$	w_d	$E_0(m)$	$E_0(m) - E_0(\infty)$
1000	3.349e-08	-23.09009340	0.00001678	4.299e-06	-41.34358356	0.00569929
2000	1.512e-09	-23.09010942	0.00000076	7.206e-07	-41.34831869	0.00096415
3000	2.012e-10	-23.09011008	0.00000010	2.330e-07	-41.34898086	0.00030198
4000	4.556e-11	-23.09011016	0.00000002	9.196e-08	-41.34916154	0.00012131
∞		-23.09011018			-41.34928284	

B.4 スパイラル境界条件の利点

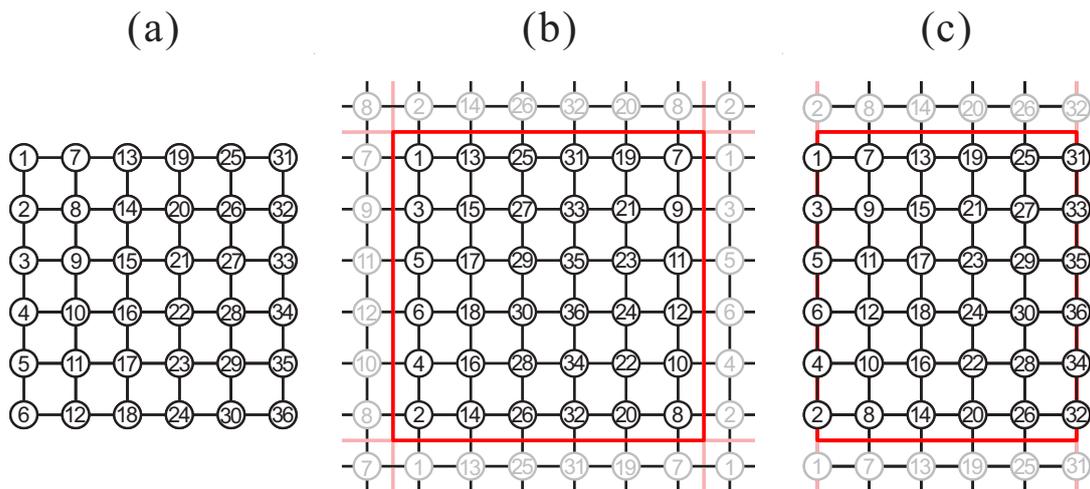


図 B.4: (a) OBC, (b) PBC, (c) シリンダー境界条件下での 6×6 サイトの 2 次元正方格子クラスター。それぞれのクラスターについて、DMRG 計算に適したサイト番号の採り方を示している。

DMRG 計算においては、考えている系や物理量に応じて適切な境界条件を選択する必要がある。格子系に対する DMRG の適用性は最も長距離の項で繋がっている 2 サイト間の距離で大まかに判断することができる。ここではその距離を d と表す。一般的には DMRG では、 d が ~ 10 より大きいと計算が難しくなる。そこで、各境界条件での d の値を評価する。図 B.4 に、各境界条件下の 2 次元正方格子のクラスターで d を最小にするようなサイト番号の採り方を示している。OBC がシリンダーを用いた場合には、 $L \times L$ サイトのクラスターに対して d は L であり、これは SBC の場合の $d = L - 1$ または $d = L$ と同程度である。しかし、PBC を用いる場合には d は $2L$ に急増し、DMRG で扱うには当然都合が悪い。例えば、Heisenberg 模型の場合は系のサイズは $L \sim 6$ まで制限される。したがって、PBC は数値計算では万能な境界条件と思われがちではあるものの、最初に選択肢から外れる。

実際、これまでの DMRG 計算では OBC がシリンダーが典型的に用いられてきた。これらの境界条件では、サイト番号を最適に採れば d の値を L まで減らせるため、DMRG 計算においてはかなり都合が良い。しかし、物理的性質に関してはいくつかの問題を生じることがしばしばある。問題点の例としては以下のようなことが挙げられる。OBC では、外側のボンドが切断されているためにバルクの状態が Friedel 振動によって大きく乱されたり、バルクと端の状態の性質が完全に異なったりすることが起こりうる。こうした問題は端の状態をコントロールすることで解決できることもあるが、必ずしもうまくいく訳ではない。また、シリンダー境界条件では元の等方的な 2 次元正方格子のクラスターに一種の空間的な異方性が導入される。問題は円周方向に沿ってボンドの短いループが形成されることである。これにより、波動関数に不自然な周期性が生じ、起こり得ない粒子とスピンのプラケット的な制限が起こりうる。結果として 4.5.2 節で示したように、シリンダー境界条件では密度相関関数は大きく乱されることになる。

SBC では、Friedel 振動を避けることができ、ボンドの短いループは一切生じない。また、 d も L または $L - 1$ である。さらに、前節で示したように SBC でマップした 1 次元鎖に開境界条件を課した場合には、OBC とシリンダー境界条件を用いた場合よりもさらに DMRG 計算の精度が良くなる。したがって、SBC では OBC やシリンダー境界条件の場合に現れる有限サイズ効果を回避して、正確な DMRG 計算を行うことができる。しかし、SBC で常に良い結果が得られるとは限らない。例えば、プラケット秩序やボンド秩序のような valence-bond solid 状態を示す系を研究する場合には OBC がより適切な可能性もあり、空間的な回転対称性が破れた磁気秩序や電荷秩序、ボンド秩序状態を示す系を研究する場合にはシリンダーのクラスターを用いるのが適切な場合もある。

したがって、以上のような技術的な理由や物理的な理由から、DMRG 計算での境界条件として SBC は主要な選択肢になり得ると考えられる。

B.5 2次元正方格子 tight-binding 模型の密度相関の振舞

ここでは、2次元正方格子 tight-binding 模型の half filling での密度相関を厳密に計算する。周期境界条件を課し、フーリエ変換:

$$c_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} c_{\mathbf{r}\sigma}, \quad c_{\mathbf{r}\sigma} = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} c_{\mathbf{k}\sigma}, \quad \mathbf{k} = \frac{2\pi}{L}(n_x, n_y) \quad (\text{B.3})$$

を行うと、ハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}, \quad \varepsilon(\mathbf{k}) = -2t(\cos k_x + \cos k_y) \quad (\text{B.4})$$

となり、密度相関は

$$\langle n(\mathbf{0})n(\mathbf{r}) \rangle = \sum_{\sigma, \sigma'} \left\langle c_{\mathbf{0}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{0}\sigma} c_{\mathbf{r}\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{r}\sigma'} \right\rangle = \frac{1}{L^4} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4} \sum_{\sigma\sigma'} e^{i(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4)\cdot\mathbf{r}} \left\langle c_{\mathbf{k}_1\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}_2\sigma} c_{\mathbf{k}_3\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}_4\sigma'} \right\rangle. \quad (\text{B.5})$$

と書ける。Wick の定理を使えば、最右辺の期待値の部分は half filling の場合に

$$\begin{aligned} \left\langle c_{\mathbf{k}_1\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}_2\sigma} c_{\mathbf{k}_3\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}_4\sigma'} \right\rangle &= \left\langle c_{\mathbf{k}_1\sigma}^\dagger (\delta_{\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3} \delta_{\sigma\sigma'} - c_{\mathbf{k}_3\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}_2\sigma}) c_{\mathbf{k}_4\sigma'} \right\rangle \\ &= \delta_{\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3} \delta_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_4} \delta_{\sigma\sigma'} \langle n_{\mathbf{k}_1\sigma} \rangle - \left\langle c_{\mathbf{k}_1\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}_3\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}_2\sigma} c_{\mathbf{k}_4\sigma'} \right\rangle \\ &= \delta_{\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3} \delta_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_4} \delta_{\sigma\sigma'} \langle n_{\mathbf{k}_1\sigma} \rangle + \delta_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} \delta_{\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4} \langle n_{\mathbf{k}_1\sigma} \rangle \langle n_{\mathbf{k}_3\sigma'} \rangle - \delta_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3} \delta_{\sigma\sigma'} \langle n_{\mathbf{k}_1\sigma} \rangle \langle n_{\mathbf{k}_3\sigma'} \rangle \\ &= \delta_{\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3} \delta_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_4} \delta_{\sigma\sigma'} \theta(-\varepsilon(\mathbf{k}_1)) + \delta_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2} \delta_{\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4} \theta(-\varepsilon(\mathbf{k}_1)) \theta(-\varepsilon(\mathbf{k}_3)) \\ &\quad - \delta_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_4} \delta_{\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3} \delta_{\sigma\sigma'} \theta(-\varepsilon(\mathbf{k}_1)) \theta(-\varepsilon(\mathbf{k}_3)) \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

となるので、

$$\frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \delta(\mathbf{r}) \quad (\text{B.7})$$

を用いると

$$\begin{aligned} \langle n(\mathbf{0})n(\mathbf{r}) \rangle &= \frac{1}{L^4} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sum_{\sigma} e^{i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1)\cdot\mathbf{r}} \theta(-\varepsilon(\mathbf{k}_1)) + \frac{1}{L^4} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_3} \sum_{\sigma, \sigma'} \theta(-\varepsilon(\mathbf{k}_1)) \theta(-\varepsilon(\mathbf{k}_3)) \\ &\quad - \frac{1}{L^4} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sum_{\sigma} e^{i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1)\cdot\mathbf{r}} \theta(-\varepsilon(\mathbf{k}_1)) \theta(-\varepsilon(\mathbf{k}_2)) \\ &= \frac{2}{L^2} \sum_{\mathbf{k}_1} e^{-i\mathbf{k}_1\cdot\mathbf{r}} \delta(\mathbf{r}) \theta(-\varepsilon(\mathbf{k}_1)) + \left(\frac{2}{L^2} \sum_{\mathbf{k}_1} \theta(-\varepsilon(\mathbf{k}_1)) \right)^2 \\ &\quad - \frac{2}{L^4} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} e^{i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1)\cdot\mathbf{r}} \theta(-\varepsilon(\mathbf{k}_1)) \theta(-\varepsilon(\mathbf{k}_2)) \\ &= \delta(\mathbf{r}) + 1 - 2 \left| \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \theta(-\varepsilon(\mathbf{k})) \right|^2 \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

となる。 $r = 0$ のとき、 $\langle n(0)n(0) \rangle = 1 + 1 - 2 \times \frac{1}{4} = 1.5$ である。

以下、 $r \neq 0$ とする。絶対値の中身を計算すると

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \theta(-\varepsilon(\mathbf{k})) \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \theta(-\varepsilon(\mathbf{k})) \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2} \int \int_{|k_x|+|k_y| \leq \pi} e^{i(k_x x + k_y y)} dk_x dk_y \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2} \left[\int_0^\pi dk_x \int_0^{\pi-k_x} dk_y + \int_0^\pi dk_x \int_{k_x-\pi}^0 dk_y \right. \\
&\quad \left. + \int_{-\pi}^0 dk_x \int_0^{k_x+\pi} dk_y + \int_{-\pi}^0 dk_x \int_{-k_x-\pi}^0 dk_y \right] e^{i(k_x x + k_y y)}. \tag{B.9}
\end{aligned}$$

$x \neq y$ の場合に各項を計算すると

$$\begin{aligned}
(\text{第一項}) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\pi dk_x \int_0^{\pi-k_x} dk_y e^{i(k_x x + k_y y)} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\pi dk_x e^{ik_x x} \left[\frac{e^{ik_y y}}{iy} \right]_0^{\pi-k_x} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2 iy} \int_0^\pi dk_x e^{ik_x x} (e^{i(\pi-k_x)y} - 1) = \frac{1}{(2\pi)^2 iy} \left[\frac{(-1)^y e^{ik_x(x-y)}}{i(x-y)} - \frac{e^{ik_x x}}{ix} \right]_0^\pi \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2 iy} \left[(-1)^y \frac{(-1)^{x-y} - 1}{i(x-y)} - \frac{(-1)^x - 1}{ix} \right] \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2 y} \left[\frac{(-1)^x - 1}{x} - \frac{(-1)^x - (-1)^y}{x-y} \right] \tag{B.10}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(\text{第二項}) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\pi dk_x \int_{k_x-\pi}^0 dk_y e^{i(k_x x + k_y y)} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\pi dk_x e^{ik_x x} \left[\frac{e^{ik_y y}}{iy} \right]_{k_x-\pi}^0 \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2 iy} \int_0^\pi dk_x e^{ik_x x} (1 - e^{i(k_x-\pi)y}) = \frac{1}{(2\pi)^2 iy} \left[\frac{e^{ik_x x}}{ix} - \frac{(-1)^y e^{ik_x(x+y)}}{i(x+y)} \right]_0^\pi \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2 iy} \left[\frac{(-1)^x - 1}{ix} - (-1)^y \frac{(-1)^{x+y} - 1}{i(x+y)} \right] \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2 y} \left[\frac{(-1)^x - (-1)^y}{x+y} - \frac{(-1)^x - 1}{x} \right] \tag{B.11}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(\text{第三項}) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^0 dk_x \int_0^{k_x+\pi} dk_y e^{i(k_x x + k_y y)} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^0 dk_x e^{ik_x x} \left[\frac{e^{ik_y y}}{iy} \right]_0^{k_x+\pi} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2 iy} \int_{-\pi}^0 dk_x e^{ik_x x} (e^{i(k_x+\pi)y} - 1) = \frac{1}{(2\pi)^2 iy} \left[\frac{(-1)^y e^{ik_x(x+y)}}{i(x+y)} - \frac{e^{ik_x x}}{ix} \right]_{-\pi}^0 \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2 iy} \left[(-1)^y \frac{1 - (-1)^{x+y}}{i(x+y)} - \frac{1 - (-1)^x}{ix} \right] \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2 y} \left[\frac{(-1)^x - (-1)^y}{x+y} - \frac{(-1)^x - 1}{x} \right] = (\text{第二項}) \tag{B.12}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(\text{第四項}) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^0 dk_x \int_{-k_x-\pi}^0 dk_y e^{i(k_x x + k_y y)} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^0 dk_x e^{ik_x x} \left[\frac{e^{ik_y y}}{iy} \right]_{-k_x-\pi}^0 \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2 iy} \int_{-\pi}^0 dk_x e^{ik_x x} (1 - e^{i(-k_x-\pi)y}) = \frac{1}{(2\pi)^2 iy} \left[\frac{e^{ik_x x}}{ix} - \frac{(-1)^y e^{ik_x(x-y)}}{i(x-y)} \right]_{-\pi}^0 \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2 iy} \left[\frac{1 - (-1)^x}{ix} - (-1)^y \frac{1 - (-1)^{x-y}}{i(x-y)} \right] \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2 y} \left[\frac{(-1)^x - 1}{x} - \frac{(-1)^x - (-1)^y}{x-y} \right] = (\text{第一項})
\end{aligned} \tag{B.13}$$

となるので、 $x \neq y$ のとき

$$\begin{aligned}
\frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \theta(-\varepsilon(\mathbf{k})) &\xrightarrow{L \rightarrow \infty} \frac{2\{(-1)^x - (-1)^y\}}{(2\pi)^2 y} \left(\frac{1}{x+y} - \frac{1}{x-y} \right) \\
&= -\frac{(-1)^x - (-1)^y}{\pi^2(x^2 - y^2)}
\end{aligned} \tag{B.14}$$

である。また、 $x = y$ のときに各項を計算すると

$$\begin{aligned}
(\text{第一項}) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\pi dk_x \int_0^{\pi-k_x} dk_y e^{i(k_x x + k_y x)} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\pi dk_x e^{ik_x x} \left[\frac{e^{ik_y x}}{ix} \right]_0^{\pi-k_x} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2 ix} \int_0^\pi dk_x e^{ik_x x} (e^{i(\pi-k_x)x} - 1) = \frac{1}{(2\pi)^2 ix} \left[(-1)^x k_x - \frac{e^{ik_x x}}{ix} \right]_0^\pi \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2 ix} \left[(-1)^x \pi - \frac{(-1)^x - 1}{ix} \right]
\end{aligned} \tag{B.15}$$

$$\begin{aligned}
(\text{第二項}) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\pi dk_x \int_{k_x-\pi}^0 dk_y e^{i(k_x x + k_y x)} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\pi dk_x e^{ik_x x} \left[\frac{e^{ik_y x}}{ix} \right]_{k_x-\pi}^0 \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2 ix} \int_0^\pi dk_x e^{ik_x x} (1 - e^{i(k_x-\pi)x}) = \frac{1}{(2\pi)^2 ix} \left[\frac{e^{ik_x x}}{ix} - \frac{(-1)^x e^{2ik_x x}}{2ix} \right]_0^\pi \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2 ix} \frac{(-1)^x - 1}{ix}
\end{aligned} \tag{B.16}$$

$$\begin{aligned}
(\text{第三項}) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^0 dk_x \int_0^{k_x+\pi} dk_y e^{i(k_x x + k_y x)} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^0 dk_x e^{ik_x x} \left[\frac{e^{ik_y x}}{ix} \right]_0^{k_x+\pi} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2 ix} \int_{-\pi}^0 dk_x e^{ik_x x} (e^{i(k_x+\pi)x} - 1) = \frac{1}{(2\pi)^2 ix} \left[\frac{(-1)^x e^{2ik_x x}}{2ix} - \frac{e^{ik_x x}}{ix} \right]_{-\pi}^0 \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2 ix} \frac{(-1)^x - 1}{ix} = (\text{第二項})
\end{aligned} \tag{B.17}$$

$$\begin{aligned}
(\text{第四項}) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^0 dk_x \int_{-k_x-\pi}^0 dk_y e^{i(k_x x + k_y x)} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^0 dk_x e^{ik_x x} \left[\frac{e^{ik_y x}}{ix} \right]_{-k_x-\pi}^0 \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2 ix} \int_{-\pi}^0 dk_x e^{ik_x x} (1 - e^{i(-k_x-\pi)x}) = \frac{1}{(2\pi)^2 ix} \left[\frac{e^{ik_x x}}{ix} - (-1)^x k_x \right]_{-\pi}^0 \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2 ix} \left[\frac{1 - (-1)^x}{ix} + (-1)^x \pi \right] = (\text{第一項})
\end{aligned} \tag{B.18}$$

となるので、 $x = y$ のとき

$$\frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \theta(-\varepsilon(\mathbf{k})) \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \frac{2}{(2\pi)^2 ix} (-1)^x \pi = \frac{(-1)^x}{2\pi ix} \tag{B.19}$$

である。

したがって式 (B.8), (B.14), (B.19) から、(1,0) 方向は

$$\langle n(\mathbf{0})n(\mathbf{r}) \rangle \xrightarrow{L \rightarrow \infty} 1 - 2 \left| \frac{(-1)^x}{\pi^2 x^2} \right|^2 = 1 - \frac{2}{\pi^4 x^4} \quad (\text{B.20})$$

となって距離の 4 乗で減衰し、(1,1) 方向は

$$\langle n(\mathbf{0})n(\mathbf{r}) \rangle \xrightarrow{L \rightarrow \infty} 1 - 2 \left| \frac{(-1)^x}{2\pi i x} \right|^2 = 1 - \frac{1}{2\pi^2 x^2} \quad (\text{B.21})$$

となって距離の 2 乗で減衰する。

謝辞

本学位論文は太田幸則教授(現名誉教授)の指導の下まとめられたものです。太田名誉教授には、筆者の学部4年での研究室配属時から博士後期課程修了までの5年間にかけて、研究の進め方や論文、申請書の書き方、プレゼンテーションの仕方等について幅広く御指導頂きました。また、筆者の積極的な学会参加を促していただき、多くの研究発表の機会を得ることができました。そして、筆者の修士1年時のドイツ滞在の際にも様々なご尽力を頂きました。心より感謝申し上げます。

TU Dresden 及び IFW Dresden の西本理博士には、筆者の修士1年時の IFW Dresden での滞在を快く受け入れていただき、研究や現地での滞在について様々なサポートをして頂きました。またその後も多くの共同研究について、密度行列繰り込み群法を使った数値計算の詳細や論文執筆、学会発表等に関して多大なご指導を頂きました。心より感謝いたします。

愛媛大学の中村正明准教授には、スパイラル境界条件に関する共同研究について数値計算・解析計算の結果や学術論文の内容等を詳細にチェックして頂きました。心より感謝いたします。

慶應義塾大学の杉本高大講師には、学部4年時の輪読や研究、申請書の書き方等について様々な指導をして頂きました。また、密度行列繰り込み群法の数値計算パッケージの使い方等についても教えて頂きました。心より感謝いたします。

IFW Dresden の Grit Rötzer 氏と Ulrike Nitzsche 氏には、筆者の滞在時の宿泊先の手配や滞在時及び帰国後の計算機クラスターの利用等、様々なご支援を頂きました。心より感謝いたします。

本学位論文は主査として佐藤正寛教授、副査として柚木清司客員教授、北畑裕之教授、外部審査員として German Aerospace Center (DLR) の江島聡研究員、太田幸則名誉教授に審査して頂きました。審査員の皆様には本学位論文の内容に関して、様々なご助言を頂きました。心より感謝いたします。

太田研究室の山口さんには、筆者の学部4年時の卒業研究等に関して様々なご指導を頂き、筆者が密度行列繰り込み群法に興味を持つ大きなきっかけを作ってくださいました。また、西田さん、藤内さんには学部4年時の数値計算演習や輪読等に関して多くのご指導を頂きました。同期の小林君、山本君には講義や輪読、研究等に関する様々な相談や雑談に付き合ってくださいました。皆様に心より感謝いたします。

佐藤研究室の金賀さんには、研究室の計算機の増設、管理やネットワークの整備等多くのサポートをして頂きました。また同研究室の学生の皆様にも大変お世話になりました。ありがとうございました。

本研究は日本学術振興会特別研究員奨励費の支援を受けて行われました。また、修士1年時のドイツ滞在やオンラインでの国際学会の参加にかかった費用は、千葉大学大学院先進科学プログラムに支援して頂きました。心より感謝いたします。

そして、これまでの研究生活を支えてくれた家族に深く感謝いたします。筆者のこれまでの研究生活はここに名前を挙げきれなかった多くの方々を支えて頂いたものです。これまで関わってくださった皆様に感謝いたします。

出版論文のリスト

以下に出版した論文のリストをまとめる。論文 1 は参考論文である。本学位論文の第 3 章は論文 2 の内容を、第 4 章は論文 3, 4 の内容を元に行っている。

1. [Masahiro Kadosawa](#), Satoshi Nishimoto, Koudai Sugimoto, and Yukinori Ohta, "Finite-Temperature Properties of Excitonic Condensation in the Extended Falicov-Kimball Model: Cluster Mean-Field-Theory Approach", *J. Phys. Soc. Jpn.* **89**, 053706 (2020).
2. Ayushi Singhanian, [Masahiro Kadosawa](#), Yukinori Ohta, Sanjeev Kumar, and Satoshi Nishimoto, "Spin- S impurities with XXZ anisotropy in a spin- $\frac{1}{2}$ Heisenberg chain", *Phys. Rev. B* **104**, 224407 (2021).
3. [Masahiro Kadosawa](#), Masaaki Nakamura, Yukinori Ohta, and Satoshi Nishimoto, "One-dimensional projection of two-dimensional systems using spiral boundary conditions", *Phys. Rev. B* **107**, L081104 (2023).
4. [Masahiro Kadosawa](#), Masaaki Nakamura, Yukinori Ohta, and Satoshi Nishimoto, "Study of Staggered Magnetization in the Spin- S Square-Lattice Heisenberg Model Using Spiral Boundary Conditions", *J. Phys. Soc. Jpn.* **92**, 023701 (2023).

参考文献

- [1] W. Heisenberg, *Z. Phys.* **49**, 619 (1928).
- [2] A. Kitaev, *Annals of Physics* **321**, 2 (2006).
- [3] J. Hubbard, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* **276**, 238 (1963).
- [4] S. R. White, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2863 (1992).
- [5] S. R. White, *Phys. Rev. B* **48**, 10345 (1993).
- [6] K. M. Kojima, J. Yamanobe, H. Eisaki, S. Uchida, Y. Fudamoto, I. M. Gat, M. I. Larkin, A. Savici, Y. J. Uemura, P. P. Kyriakou, M. T. Rovers, and G. M. Luke, *Phys. Rev. B* **70**, 094402 (2004).
- [7] K. Karmakar, R. Bag, M. Skoulatos, C. Rüegg, and S. Singh, *Phys. Rev. B* **95**, 235154 (2017).
- [8] K. Karmakar, M. Skoulatos, G. Prando, B. Roessli, U. Stuhr, F. Hammerath, C. Rüegg, and S. Singh, *Phys. Rev. Lett.* **118**, 107201 (2017).
- [9] S. Eggert and I. Affleck, *Phys. Rev. B* **46**, 10866 (1992).
- [10] S. Eggert, D. P. Gustafsson, and S. Rommer, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 516 (2001).
- [11] S. Eggert, I. Affleck, and M. D. P. Horton, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 047202 (2002).
- [12] J. Bobroff, N. Laflorencie, L. K. Alexander, A. V. Mahajan, B. Koteswararao, and P. Mendels, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 047201 (2009).
- [13] L. K. Alexander, J. Bobroff, A. V. Mahajan, B. Koteswararao, N. Laflorencie, and F. Alet, *Phys. Rev. B* **81**, 054438 (2010).
- [14] 夏目雄平、小川建吾、鈴木敏彦, *計算物理 III* (朝倉書店, 2002).
- [15] A. Malvezzi, *Brazilian Journal of Physics* **33**, 55 (2003).
- [16] U. Schollwöck, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 259 (2005).
- [17] U. Schollwöck, *Annals of Physics* **326**, 96 (2011).
- [18] 西野友年, *テンソルネットワークの基礎と応用* (サイエンス社, 2021).
- [19] J. R. Garrison and R. V. Mishmash, *Simple dmrg* (2013).
- [20] M. Fishman, S. R. White, and E. M. Stoudenmire, *SciPost Phys. Codebases* , 4 (2022).
- [21] S. Östlund and S. Rommer, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3537 (1995).
- [22] S. Rommer and S. Östlund, *Phys. Rev. B* **55**, 2164 (1997).

-
- [23] J. S. Dugdale, [The Electrical Properties of Disordered Metals](#), Cambridge Solid State Science Series (Cambridge University Press, 1995).
- [24] A. Maeda, T. Yabe, S. Takebayashi, M. Hase, and K. Uchinokura, [Phys. Rev. B](#) **41**, 4112 (1990).
- [25] P. W. Anderson, [Phys. Rev.](#) **109**, 1492 (1958).
- [26] T. Ying, Y. Gu, X. Chen, X. Wang, S. Jin, L. Zhao, W. Zhang, and X. Chen, [Science Advances](#) **2**, e1501283 (2016).
- [27] M. Hagiwara, K. Katsumata, I. Affleck, B. I. Halperin, and J. P. Renard, [Phys. Rev. Lett.](#) **65**, 3181 (1990).
- [28] M. Hase, I. Terasaki, Y. Sasago, K. Uchinokura, and H. Obara, [Phys. Rev. Lett.](#) **71**, 4059 (1993).
- [29] B. Grenier, L. Regnault, J. Lorenzo, J. Bossy, J. Renard, G. Dhahlenne, and A. Revcolevschi, [Physica B: Condensed Matter](#) **234-236**, 534 (1997).
- [30] M. C. Martin, M. Hase, K. Hirota, G. Shirane, Y. Sasago, N. Koide, and K. Uchinokura, [Phys. Rev. B](#) **56**, 3173 (1997).
- [31] M. Azuma, Y. Fujishiro, M. Takano, M. Nohara, and H. Takagi, [Phys. Rev. B](#) **55**, R8658 (1997).
- [32] N. Motoyama, H. Eisaki, and S. Uchida, [Phys. Rev. Lett.](#) **76**, 3212 (1996).
- [33] K. Karmakar and S. Singh, [Phys. Rev. B](#) **91**, 224401 (2015).
- [34] G. Simutis, S. Gvasaliya, M. Månsson, A. L. Chernyshev, A. Mohan, S. Singh, C. Hess, A. T. Savici, A. I. Kolesnikov, A. Piovano, T. Perring, I. Zaliznyak, B. Büchner, and A. Zheludev, [Phys. Rev. Lett.](#) **111**, 067204 (2013).
- [35] Y. Utz, F. Hammerath, S. Nishimoto, C. Hess, N. S. Beesetty, R. Saint-Martin, A. Revcolevschi, B. Büchner, and H.-J. Grafe, [Phys. Rev. B](#) **92**, 060405 (2015).
- [36] S. Kimura, M. Matsuda, T. Masuda, S. Hondo, K. Kaneko, N. Metoki, M. Hagiwara, T. Takeuchi, K. Okunishi, Z. He, K. Kindo, T. Taniyama, and M. Itoh, [Phys. Rev. Lett.](#) **101**, 207201 (2008).
- [37] A. K. Bera, B. Lake, W.-D. Stein, and S. Zander, [Phys. Rev. B](#) **89**, 094402 (2014).
- [38] Y. Utz, F. Hammerath, R. Kraus, T. Ritschel, J. Geck, L. Hozoi, J. van den Brink, A. Mohan, C. Hess, K. Karmakar, S. Singh, D. Bounoua, R. Saint-Martin, L. Pinsard-Gaudart, A. Revcolevschi, B. Büchner, and H.-J. Grafe, [Phys. Rev. B](#) **96**, 115135 (2017).
- [39] W. Zhang, J.-i. Igarashi, and P. Fulde, [J. Phys. Soc. Jpn.](#) **66**, 1912 (1997).
- [40] W. Zhang, J. Igarashi, and P. Fulde, [Phys. Rev. B](#) **56**, 654 (1997).
- [41] 久保健、田中秀数, [磁性 I](#) (朝倉書店, 2008).
- [42] M. Takahashi, [Thermodynamics of One-Dimensional Solvable Models](#) (Cambridge University Press, 1999).
- [43] J. Des Cloizeaux and M. Gaudin, [Journal of Mathematical Physics](#) **7**, 1384 (1966).
- [44] I. Affleck, D. Gepner, H. J. Schulz, and T. Ziman, [Journal of Physics A: Mathematical and General](#) **22**, 511 (1989).
- [45] R. R. P. Singh, M. E. Fisher, and R. Shankar, [Phys. Rev. B](#) **39**, 2562 (1989).

-
- [46] L. Hulthén, *Arkiv Matematik Astronomi Fysik A* **26**, 106 (1938).
- [47] 南和彦, 格子模型の数理解物理 (サイエンス社, 2014).
- [48] D. C. Cabra, A. Honecker, and P. Pujol, *Phys. Rev. B* **58**, 6241 (1998).
- [49] J. C. Bonner and M. E. Fisher, *Phys. Rev.* **135**, A640 (1964).
- [50] S. Eggert, I. Affleck, and M. Takahashi, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 332 (1994).
- [51] M. Takahashi, *Progress of Theoretical Physics* **50**, 1519 (1973).
- [52] M. Kadosawa, S. Nishimoto, K. Sugimoto, and Y. Ohta, *J. Phys. Soc. Jpn.* **89**, 053706 (2020).
- [53] N. D. Mermin and H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (1966).
- [54] P. C. Hohenberg, *Phys. Rev.* **158**, 383 (1967).
- [55] S. Eggert and I. Affleck, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 934 (1995).
- [56] M. Laukamp, G. B. Martins, C. Gazza, A. L. Malvezzi, E. Dagotto, P. M. Hansen, A. C. López, and J. Riera, *Phys. Rev. B* **57**, 10755 (1998).
- [57] H. Frahm and A. A. Zvyagin, *Journal of Physics: Condensed Matter* **9**, 9939 (1997).
- [58] W. Marshall, *Proc. Roy. Soc. A* **232**, 48 (1955).
- [59] E. Lieb and D. Mattis, *J. Math. Phys.* **3**, 749 (1962).
- [60] M. Takigawa, N. Motoyama, H. Eisaki, and S. Uchida, *Phys. Rev. B* **55**, 14129 (1997).
- [61] S. R. White, I. Affleck, and D. J. Scalapino, *Phys. Rev. B* **65**, 165122 (2002).
- [62] C. N. Yang and C. P. Yang, *Phys. Rev.* **150**, 321 (1966).
- [63] C. N. Yang and C. P. Yang, *Phys. Rev.* **150**, 327 (1966).
- [64] S. Wessel and S. Haas, *Phys. Rev. B* **62**, 316 (2000).
- [65] S. Kimura, T. Takeuchi, K. Okunishi, M. Hagiwara, Z. He, K. Kindo, T. Taniyama, and M. Itoh, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 057202 (2008).
- [66] D. C. Johnston, R. K. Kremer, M. Troyer, X. Wang, A. Klümper, S. L. Bud'ko, A. F. Panchula, and P. C. Canfield, *Phys. Rev. B* **61**, 9558 (2000).
- [67] W. Liu, B. Zhu, L. Zhang, Y. Ke, and C. Lee, *Phys. Rev. A* **104**, 023305 (2021).
- [68] K. Okamoto and K. Nomura, *Phys. Lett. A* **169**, 433 (1992).
- [69] S. Nishimoto and M. Nakamura, *Phys. Rev. B* **92**, 140412 (2015).
- [70] M. Nakamura, S. Masuda, and S. Nishimoto, *Phys. Rev. B* **104**, L121114 (2021).
- [71] M. E. Newman and G. T. Barkema, Monte Carlo methods in statistical physics (Clarendon Press, 1999).
- [72] A. O. Gogolin, A. A. Nersisyan, and A. M. Tsvelik, Bosonization and strongly correlated systems (Cambridge university press, 2004).
- [73] H.-D. Chen and Z. Nussinov, *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **41**, 075001 (2008).

-
- [74] E. Kogan and G. Gumbs, *Graphene* **10**, 1 (2021).
- [75] J. P. F. LeBlanc, A. E. Antipov, F. Becca, I. W. Bulik, G. K.-L. Chan, C.-M. Chung, Y. Deng, M. Ferrero, T. M. Henderson, C. A. Jiménez-Hoyos, E. Kozik, X.-W. Liu, A. J. Millis, N. V. Prokof'ev, M. Qin, G. E. Scuseria, H. Shi, B. V. Svistunov, L. F. Tocchio, I. S. Tupitsyn, S. R. White, S. Zhang, B.-X. Zheng, Z. Zhu, and E. Gull (Simons Collaboration on the Many-Electron Problem), *Phys. Rev. X* **5**, 041041 (2015).
- [76] K. Kubo and T. Kishi, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2585 (1988).
- [77] Y. Ozeki, H. Nishimori, and Y. Tomita, *J. Phys. Soc. Jpn.* **58**, 82 (1989).
- [78] V. S. Viswanath, S. Zhang, J. Stolze, and G. Müller, *Phys. Rev. B* **49**, 9702 (1994).
- [79] S. Yunoki, *Phys. Rev. B* **65**, 092402 (2002).
- [80] B. Braiorn-Orrs, M. Weyrauch, and M. V. Rakov, *Ukrainian Journal of Physics* **61**, 613 (2019).
- [81] Z. Weihong, J. Oitmaa, and C. J. Hamer, *Phys. Rev. B* **43**, 8321 (1991).
- [82] C. J. Hamer, Z. Weihong, and P. Arndt, *Phys. Rev. B* **46**, 6276 (1992).
- [83] H.-Q. Lin, J. S. Flynn, and D. D. Betts, *Phys. Rev. B* **64**, 214411 (2001).
- [84] S. R. White and A. L. Chernyshev, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 127004 (2007).
- [85] A. W. Sandvik and H. G. Evertz, *Phys. Rev. B* **82**, 024407 (2010).
- [86] K. Nakada, M. Fujita, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus, *Phys. Rev. B* **54**, 17954 (1996).
- [87] R. Bishop, P. Li, R. Zinke, R. Darradi, J. Richter, D. Farnell, and J. Schulenburg, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **428**, 178 (2017).
- [88] Z. Weihong, J. Oitmaa, and C. J. Hamer, *Phys. Rev. B* **44**, 11869 (1991).
- [89] D. A. Huse, *Phys. Rev. B* **37**, 2380 (1988).
- [90] T.-H. Jang, S.-H. Do, M. Lee, H. Wu, C. M. Brown, A. D. Christianson, S.-W. Cheong, and J.-H. Park, *Phys. Rev. B* **104**, 214434 (2021).
- [91] S.-H. Do, H. Zhang, D. A. Dahlbom, T. J. Williams, V. O. Garlea, T. Hong, T.-H. Jang, S.-W. Cheong, J.-H. Park, K. Barros, C. D. Batista, and A. D. Christianson, [arXiv:2205.11770](https://arxiv.org/abs/2205.11770) (2022).
- [92] M. Lee, R. Schoenemann, H. Zhang, D. Dahlbom, T.-H. Jang, S.-H. Do, A. D. Christianson, S.-W. Cheong, J.-H. Park, E. Brosha, M. Jaime, K. Barros, C. D. Batista, and V. S. Zapf, [arXiv:2210.14323](https://arxiv.org/abs/2210.14323) (2022).
- [93] T. Vasilchikova, V. Nalbandyan, I. Shukaev, H.-J. Koo, M.-H. Whangbo, A. Lozitskiy, A. Bogaychuk, V. Kuzmin, M. Tagirov, E. Vavilova, A. Vasiliev, and E. Zvereva, *Phys. Rev. B* **101**, 054435 (2020).
- [94] M. D. Kuchugura, A. I. Kurbakov, E. A. Zvereva, T. M. Vasilchikova, G. V. Raganyan, A. N. Vasiliev, V. A. Barchuk, and V. B. Nalbandyan, *Dalton Trans.* **48**, 17070 (2019).
- [95] M. Baenitz, M. M. Piva, S. Luther, J. Sichelschmidt, K. M. Ranjith, H. Dawczak-Dębicki, M. O. Ajeesh, S.-J. Kim, G. Siemann, C. Bigi, P. Manuel, D. Khalyavin, D. A. Sokolov, P. Mokhtari, H. Zhang, H. Yasuoka, P. D. C. King, G. Vinai, V. Polewczyk, P. Torelli, J. Wosnitza, U. Burkhardt, B. Schmidt, H. Rosner, S. Wirth, H. Kühne, M. Nicklas, and M. Schmidt, *Phys. Rev. B* **104**, 134410 (2021).

-
- [96] J. Liu, B. Liu, L. Yuan, B. Li, L. Xie, X. Chen, H. Zhang, D. Xu, W. Tong, J. Wang, and Y. Li, *New Journal of Physics* **23**, 033040 (2021).
- [97] R. Rawl, L. Ge, Z. Lu, Z. Evenson, C. R. Dela Cruz, Q. Huang, M. Lee, E. S. Choi, M. Mourigal, H. D. Zhou, and J. Ma, *Phys. Rev. Materials* **3**, 054412 (2019).
- [98] H. K. Yoshida, M. Matsuda, M. B. Stone, C. R. dela Cruz, T. Furubayashi, M. Onoda, E. Takayama-Muromachi, and M. Isobe, *Phys. Rev. Research* **2**, 043211 (2020).
- [99] C. Kim, J. Jeong, P. Park, T. Masuda, S. Asai, S. Itoh, H.-S. Kim, A. Wildes, and J.-G. Park, *Phys. Rev. B* **102**, 184429 (2020).
- [100] M. Goto, H. Ueda, C. Michioka, A. Matsuo, K. Kindo, K. Sugawara, S. Kobayashi, N. Katayama, H. Sawa, and K. Yoshimura, *Phys. Rev. B* **97**, 224421 (2018).
- [101] E. Kermarrec, R. Kumar, G. Bernard, R. Hénaff, P. Mendels, F. Bert, P. L. Paulose, B. K. Hazra, and B. Koteswararao, *Phys. Rev. Lett.* **127**, 157202 (2021).
- [102] A. M. Ferrenti, V. Meschke, S. Ghosh, J. Davis, N. Drichko, E. S. Toberer, and T. M. McQueen, *Journal of Solid State Chemistry* **317**, 123620 (2023).
- [103] R. R. P. Singh, *Phys. Rev. B* **39**, 9760 (1989).
- [104] C. J. Hamer, J. Oitmaa, and Z. Weihong, *Phys. Rev. B* **43**, 10789 (1991).
- [105] A. W. Sandvik and C. J. Hamer, *Phys. Rev. B* **60**, 6588 (1999).
- [106] I. Niesen and P. Corboz, *Phys. Rev. B* **95**, 180404 (2017).
- [107] R. R. P. Singh, *Phys. Rev. B* **41**, 4873 (1990).
- [108] J.-i. Igarashi, *Phys. Rev. B* **46**, 10763 (1992).
- [109] C. M. Canali and M. Wallin, *Phys. Rev. B* **48**, 3264 (1993).
- [110] A. W. Sandvik, *Phys. Rev. B* **85**, 134407 (2012).
- [111] I. P. McCulloch, [arXiv:0804.2509](https://arxiv.org/abs/0804.2509) (2008).