

低温領域に対応した密度行列繰り込み群法

京都大学 基礎物理学研究所 曾田 繁利, 遠山 貴己

1 次元 Mott 絶縁体は、巨大な非線形光学応答と超高速な緩和現象を示すことが知られている。さらに、この系を新しい光スイッチング素子として利用することが期待されており、そのためにこの特異な量子現象を解明することが望まれている。このような低次元強相関電子系の研究手法としては、密度行列繰り込み群法が挙げられる。特に絶対零度においては、この光学応答に対して動的密度行列繰り込み群法を適用した成果がいくつも報告されている。そこで、本研究では 1 次元 Mott 絶縁体の光学応答に対する温度効果を議論することを考え、そのために必要な研究手法の開発を行った [1]。したがって、本手法のポイントは、動的な物理量が算出可能であること、さらに低温側で効率的な適用が可能であることの 2 点である。

有限温度で適用される本手法は、ターゲット状態としてボルツマン分布に従った状態を採用する。しかしながら、この状態はすべてのハミルトニアン固有関数の線形結合で与えられるものであり、これらの固有関数をそれぞれ求めることは現実的ではない。そこで、本手法では直交多項式展開法を適用し、この状態を直接算出することを試みる。本手法では、ターゲット状態をハミルトニアン固有値を変数とするルジャンドル多項式で展開した。このとき、展開係数は逆温度を変数とする変形球ベッセル関数で与えられる。さらに、本手法では直交多項式展開法で問題となるギブス振動に対する処理も同時に行った [2]。密度行列繰り込み群法の過程を経た後、物理量の算出を行う。しかしながら、ハミルトニアン固有関数の線形結合で与えられた本手法のターゲット状態からは、ハミルトニアンと非可換な物理量をそのまま算出することはできない。そこで、本手法では計算のインプットとなるベクトルを正と負の値が等しい確率で現れる乱数により与え、これにより得られた物理量の期待値を平均化することによって、ハミルトニアンと非可換な物理量の算出を可能にした。簡便な手法である本手法は、動的な物理量に対する拡張も容易である。ここでは、絶対零度の動的密度行列繰り込み群法における基底状態を上で述べたターゲット状態に置き換えることで、動的な物理量の計算も可能となる。

本研究発表では、ハバードモデルの比熱と動的な物理量である電流-電流相関関数の結果を、直接対角化による厳密解と並べて示す。この結果から、より低温側では厳密解をより小さい打ち切り次元で再現できることが確認された。したがって、本手法は低温側で有効な手法であると考えられる。

参考文献

- [1] S. Sota and T. Tohyama, Phys. Rev. B **78**, 113101 (2008).
- [2] S. Sota and M. Itoh, J. Phys. Soc. Jpn. **76**, 054004 (2007).