

1次元周期的Anderson模型への繰り込み群の応用

阪大基礎工 馬越健次、古森昭夫

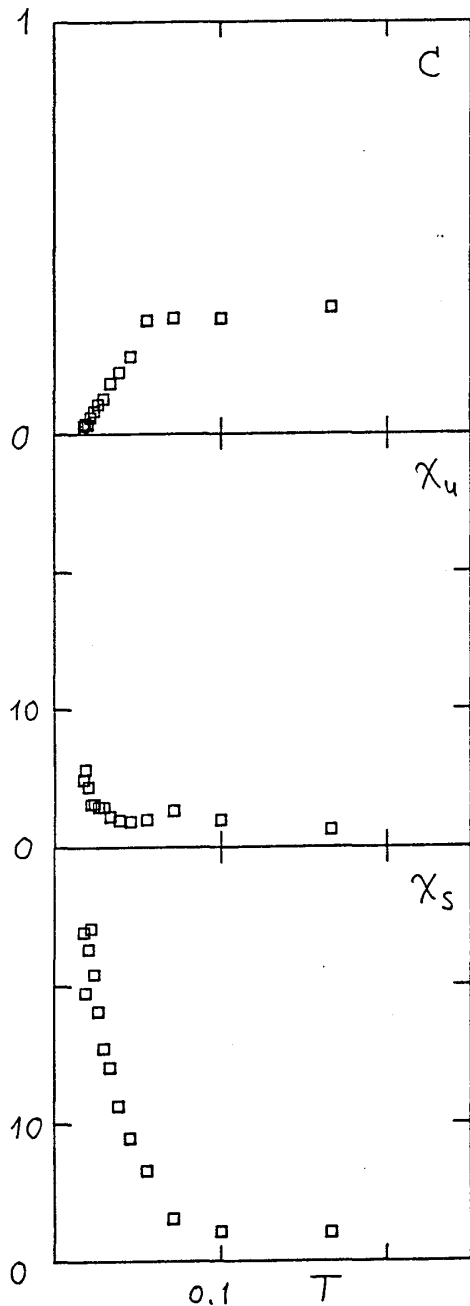
K.G. Wilsonによる数値的繰り込み群の方法を一様な系に拡張するのは種々の応用が考えられ非常に興味がある。近藤効果に対するWilsonの繰り込み群の計算は非常に巧みに作られていて、一様な系への応用は難しそうにみえる。ここでは1次元周期的Anderson模型を取り上げとにかくWilson流の繰り込み群の応用を試みる。

系の大きさを変えながら、最初系の大きさが小さい間は全部の多体の固有状態を、系の大きさが大きくなってからは一定の数の低励起の多体の固有状態を数値的に求める。系の大きさを変えるのに2つの方法を考慮する。1つは系の端に1つずつ格子点を付け加える方法で、もう1つはM格子点の系を端で2つ繋ぎ合わせて2M格子点の系を作る方法である。

先ず1つずつ付け加える方法で電子空孔対称の場合に試みた。系の固有状態は全電荷、全スピンの大きさ及びZ成分で指定されるが、全スピンのZ成分については最大のものを取ることにして、低励起の300個の状態を何時も取る。付け加えた1つの格子点の状態は可能な総ての状態(16状態)を考慮して300状態との合成系の固有状態を数値的に求め、改めて低励起の300個の状態を残す。これが計算の1つの単位過程で、これを繰り返して系の大きさを増やして行くわけである。

Wilsonに倣って、系の大きさ、即ち格子点の数(N)の逆数を温度に対応させ、系の比熱(C)、一様帯磁率($\chi(u)$)、スタッガード帯磁率($\chi(s)$)を温度の関数として計算してみた。エネルギーの単位として伝導電子の最近接トランスファー積分の値を取り(最近接のみを仮定する)、同じ格子点での混成のマトリックス成分(V)を0.5、原子内クーロン積分(U)を3, 4, 5の3つの場合に、N=30までの予備的な計算を行なった。そのうちU=3の場合の結果を以下に示す。

尚スタッガード帯磁率についてはスタッガード磁化の二乗の熱平均を計算する際に、計算された低励起の固有状態について対角要素のみを取る近似を採用した。この近似はこの系に於いて期待される低温でのスタッガード磁化の短距離秩序の発達を考慮すればそんなに悪くはないと思われる。

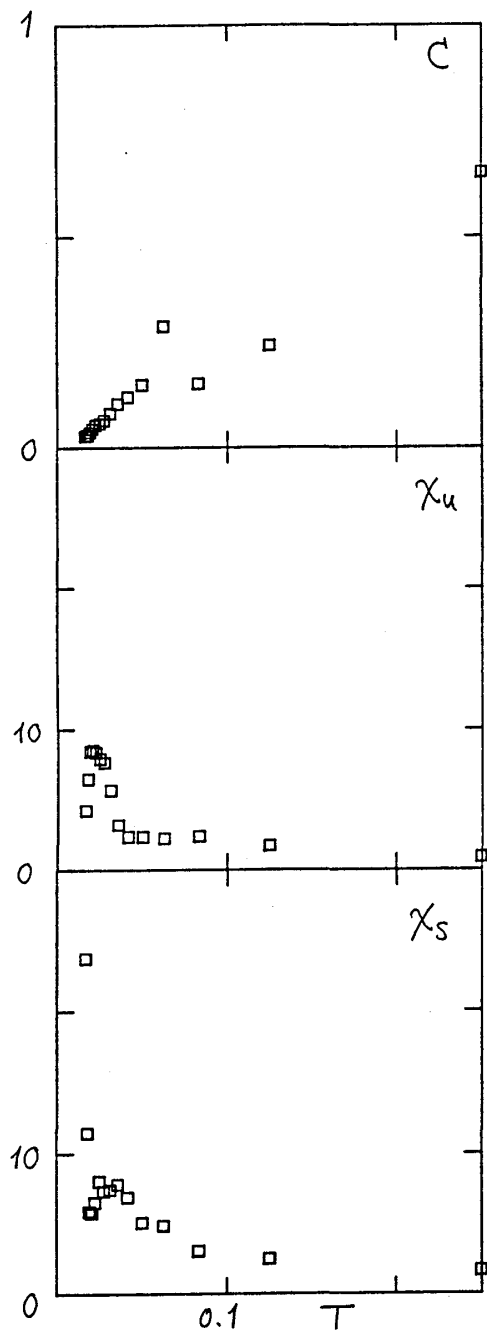


容易に予想されるように N の奇数の場合と偶数の場合は夫々異なった系列を作る。第1図に奇数系列の結果として比熱、一様帯磁率、スタッガード帯磁率の温度変化を示した。 N は3から29までで、もし伝導電子の最近接トランスファー積分を1 eVに取れば図に示した温度領域は約2000度以下ということになる。

第2図には偶数系列の結果を同様に比熱、一様帯磁率、スタッガード帯磁率の順に示した。 N は2から30までである。奇数系列と偶数系列の著しい違いは低温での一様帯磁率である。低温でのスタッガード帯磁率の増大にみられるように反強磁性的な相関が強くなると考えれば、1つ格子点が余分にある奇数系列の方が大きい一様帯磁率を持つのはよさそうな気がする。

両方の系列を通じて比熱には低温で直線的にみえる部分もあるが非常な低温で励起エネルギーにギャップがあるような傾向がある。又偶数系列の $T = 0.06$ 辺りのピーク及び奇数系列の $T = 0.05$ から 0.1 へかけてのプラトーは未だどの程度の意味があるかはわからぬものの、意味があると思いたい

第1図 奇数系列の系の比熱、一様帯磁率、スタッガード帯磁率。ボルツマン常数、ボア磁子は夫々1とした。



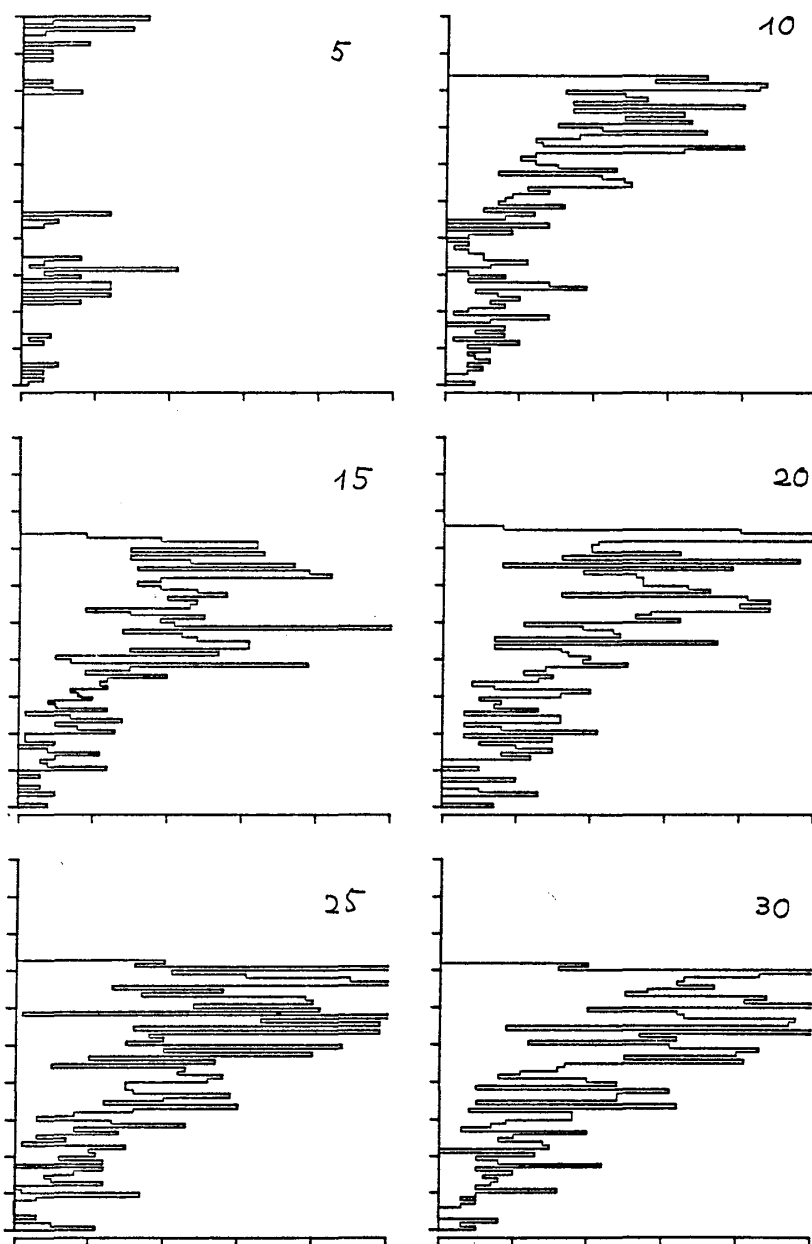
ところである。

既に述べたようにスタグガード帯磁率は低温に向かって著しく増加する。偶数系列にみられる $T = 0.02$ あたりの異常は一様帯磁率のピークと対応しているがどのような意味があるかはよくわからない。単に計算の精度がよくないことを示しているのかもしれない。

第3図に計算によって得られた多体の状態の状態密度を示した。 $N = 25$ 及び 30 の場合にみられるギャップが非常に低温での比熱に関係がありそうである。全スピンの Z 成分が全スピンの大きさ S に等しい低励起の状態を 300 計算しているが、縮退を考えると取っている全部の状態の数は約 1100 程度になる。

現在進めている計算を精度よく完成させること、系の大きさを倍倍でふやす方法でもやってみること、 U が 0 の場合に現在のやりかたで正しい答えが出ることを示すことなど多くの課題があるが、このような一定の数の低励起の固有状態のみを取りながら計算を進める過程についての吟味、系の大きさと温度を関係付ける尤もらしい方法を見いだすことなども必要である。

第2図 偶数系列の系の比熱、一様帯磁率、スタグガード帯磁率。



第3図 多体
状態の状態密
度のヒストグ
ラム。右肩の
数字はNの値、
縦軸はエネル
ギーで最大値
が1、ヒスト
グラムのカミ
は0.01、
横軸は状態の
数で1こまが
10、従って
最大値は50
である。