

動的密度行列繰り込み群法¹

— 低次元強相関電子系の励起スペクトル —

仙台電波工業高等専門学校 総合科学科 松枝 宏明²

(2007 年 6 月 28 日受理)

密度行列繰り込み群法 (Density Matrix Renormalization Group method, DMRG) は、低次元量子系の基底状態を精密に求める数値計算方法です。これまで様々な系に適用され、その有効性が実証されています。一方、DMRG を駆使して種々の励起スペクトルを計算することも可能です。この方法を動的密度行列繰り込み群法 (Dynamical DMRG, DDMRG) と呼びます。とりわけ強相関電子系では励起スペクトルの解析が物性の理解に必要不可欠ですが、基底状態の DMRG に比べると DDMRG の応用例は極めて限られているようです。そこで本稿では低次元強相関電子系に対するスペクトロスコピーの現状から始めて、DDMRG の原理及び具体的な数値計算方法を詳しく解説します。DDMRG の理解が深まることによって、より詳細に物性研究を遂行できる手段を提供することが本稿の狙いです。

1 強相関電子系のスペクトロスコピー

強相関電子系の実験研究では、様々な分光学的手法が威力を発揮しています。この背景として、SPring-8, 原研東海地区, KEK など、高輝度の放射光源や中性子源などが適用可能となってきたことが挙げられます。また、レーザー励起光電子分光やフェムト秒ポンプ・プローブ分光などのように、超高分解能分光法や時間分解分光法が盛んに行われていることも重要な発展と考えられます。これらによって最近活発に研究されている具体的項目としては、(1) 共鳴非弾性 X 線散乱法の開発と強相関電子系の電荷励起の観測、(2) 中性子散乱による高温超伝導体の磁気励起の研究、(3) レーザー励起光電子分光法によるフェルミ準位近傍の超微細構造の観測、(4) 軟 X 線を用いたバルク敏感光電子分光法、(5) ポンプ・プローブ分光法による強相関電子系・電子格子結合系のダイナミクスの実時間観測、などが挙げられます (各研究項目にご興味のある方は、それぞれの解説を参考にして下さい。これらの一部は文献 [1] に紹介されています)。

これらのプローブには、輸送特性を決めるフェルミ準位近傍のコヒーレントな状態と、光学ギャップを超えるエネルギーの局在的な状態が共に反映されています。強相関電子系

¹本稿は、編集部の方から特にお願いして執筆していただいた記事である。

²E-mail: matsueda@cc.sendai-ct.ac.jp

Homepage: <http://www.sendai-ct.ac.jp/~matsueda/index.html>

では、これらエネルギースケールの異なる状態が密接に関わりを持っているということが大きな特徴です。そのため、これらのプローブが電子状態の理解に非常に重要な役割を果たします。例えば、 $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ を始めとした銅酸化物高温超伝導体の研究では、初期の段階からこの関わり合いが議論されてきました。この物質の光吸収スペクトルでは、 $x = 0$ のときに光学ギャップ（ $\sim 2\text{eV}$ ）より高エネルギーにあった状態がキャリアドーピングと共に中赤外領域に移動し、 $x \sim 0.15$ で Drude 的な挙動に移行することが示されています [2]。この結果は、強相関効果に伴うバンド構造の大域的な変化を表しており、rigid-band 描像が適切ではないことを示しています。

またスペクトロスコピーに対する信頼性の向上は、これまで純理論的な考察から得られていた結果が実験的に再現されるようになってきたことにも要因があると思われます。この背景には、スペクトル形状の励起エネルギー依存性やプローブ光の元素選択性、侵入長などの認識が深まったことがあると思われます。典型例が角度分解光電子分光（Angle Resolved Photoemission Spectroscopy, ARPES）です。ARPES は高温超伝導の研究で目覚ましい発展を遂げましたが、同時に相互作用する一次元電子系の研究においても非常に重要な成果を挙げています。一次元電子系の素励起は、スピノン・ホロンと呼ばれるスピンと電荷自由度の集団励起で、これらの自由度が分離しています。スピノン・ホロン励起はバンド端の特異的発散で特徴づけられます。10 年前の ARPES ではこのような特徴は明確に観測されていませんでしたが、最近の実験では非常に明確なスピノン・ホロン分散が確認されています [3]。

一方、理論的な観点からは、金属絶縁体転移（Mott 転移）に関連して研究の歴史があります。有名な J. Hubbard の論文、コヒーレントポテンシャル近似や Green 関数に対する運動方程式の方法、それらと Gutzwiller 近似との関連性などは読者の方もよくご承知のことと思います [4, 5]。また、これらを包括した見方として非常に有効なものは、動的平均場理論（Dynamical Mean Field Theory, DMFT）です。DMFT の代表的な成果は、固体物理の標準的な学習課題として、最近のテキストでは必ず取り上げられています [6]。その一方で、実験で得られるようになってきた極めて高精度の分光データは、そのような簡便な近似法や概念では必ずしも十分な理解が得られません。何故ならば、解析的な理論はエネルギースケールを疎視化する場合が多く、系の磁性に関わる低エネルギーの物理が正しく記述できません。また DMFT では局所的な電子相関効果が正確に扱われていますが、本質的に空間次元 ∞ の場合の理論であり、系の次元性に依存する現象の研究はできません。最近注目されている物質には、一次元鎖・層構造・スピネル構造・パイロクロア構造などの複雑な結晶構造と電子軌道を持つものが多くあります。そこでは、電子軌道の次元性や幾何学的構造が物性に大きく影響してくることが考えられます。そこで上記と相補的な方法も必要です。

このような背景から、理論的研究としては有限サイズクラスターに対する数値的厳密な方法が威力を発揮しています。方法としては数値対角化（Lanczos 法）や量子モンテカル

口法 (Quantum Monte Carlo, QMC) が挙げられます。これらの方法が機能すると考えられる物理的理由は、遷移金属酸化物に代表される強相関電子系の母物質が絶縁体であることに起因しています。そこでの基本的な立場としては、イオン結晶性が強く、遷移金属と酸素で作られるユニットクラスターの性質が大雑把な電子状態を決めるというものです。また技術的には、コンピュータの性能向上や、研究室レベルで並列計算がスタンダードになりつつあること、また色々な大規模並列計算プロジェクトが進行していることも、数値計算の隆盛に拍車をかけていると思います。しかしながら数値的手法では、有限サイズに起因するエネルギーギャップ以下の低エネルギー励起を直接取り扱うことはできません。そこで詳細なサイズスケーリングが極めて重要になります。

ここで解説する DDMRG は、Lanczos 法や QMC と同様の立場に立脚しており、そこからどれだけ低エネルギー励起の集団的性格を捉えられるかということを念頭に置いています。実際に DDMRG では、系統的なスケーリング可能な程度までサイズを大きくできるということがポイントです。

2 密度行列繰り込み群法

密度行列繰り込み群法 (Density Matrix Renormalization Group method, DMRG) の解説には優れたものが多くあります。特に、開発者である S. R. White の原著論文 [7] は、教育的にも配慮の行きとどいたものです。また専門家による総合報告においても、DMRG の原理がコンパクトにまとめられています。特に初期の発展をまとめたレビューは文献 [8]、丁寧な記述で実際の数値計算に役立つのは文献 [9] です。また K. Hallberg による最新の解説もあります [10]。日本語解説で手に入れやすいもの、使いやすいものとしては、文献 [11, 12] が挙げられます。詳細はこれらも参考にして頂くのが望ましいと思います。本節では、DDMRG を理解する上で最低限必要な DMRG の原理について解説します。

2.1 繰り込みの指導原理

我々の目的は、Lanczos 対角化と同程度の精度を保って、大規模な系の物理的性質を調べることです。数値計算で扱える情報量には限界がありますから、適切な情報圧縮操作を行う必要があります。そのような情報圧縮を行う場合にも、我々が扱うことができるのは基本的には有限系です。考えるべき有限系は、本来であれば環境と結合しています。従って、環境（或いは有限系の端）からの影響を正しく取り込むことが必要です。今考えているシステムと環境をまとめて「スーパースブロック」と呼びます。スーパースブロックという視点に立って、システムの（情報圧縮された）最適な基底を求めることが以下での目的です。以下で説明するように、最適な基底はシステムの密度行列の固有状態のうちその固有値の大きいものです。そのため、この方法は密度行列繰り込みの方法と呼ばれます。なお、

システムと環境という視点は、R. P. Feynman の統計力学の教科書で丁寧に説明されています [13]。また、境界条件の違いが有限系での計算結果にどのような影響を及ぼすかは、DMRG の論文が出版される前後に幾つかのグループで研究されています [14, 15, 16, 17]。これらの研究は DMRG と直接の関係はありませんが、有限サイズ効果の物理的な意味合いを考えてみるうえで参考になるかもしれません。

初めにスーパーブロックの基底状態を $|\psi\rangle$ とします。システムを記述する完全系を $|i\rangle$ ($i = 1, \dots, l$)、環境を記述する完全系を $|j\rangle$ ($j = 1, \dots, J$) とします。このとき $|\psi\rangle$ は

$$|\psi\rangle = \sum_{i,j} \psi_{ij} |i\rangle |j\rangle, \quad (1)$$

と表現できます。以降、システムを l より少ない m 状態 $|u^\alpha\rangle$ ($\alpha = 1, \dots, m < l$) で近似することを考えます。 m を truncation number と呼びます。 $|u^\alpha\rangle$ はシステムの完全系で

$$|u^\alpha\rangle = \sum_i u_i^\alpha |i\rangle, \quad (2)$$

と展開できます。これより

$$|\tilde{\psi}\rangle = \sum_{\alpha,j} a_{\alpha,j} |u^\alpha\rangle |j\rangle, \quad (3)$$

という近似的波動関数を導入し

$$S = \left\| |\psi\rangle - |\tilde{\psi}\rangle \right\|^2, \quad (4)$$

を最小にすることを目指します。従って DMRG は変分原理に基づいています。 $|\tilde{\psi}\rangle$ は一般性を失うことなく

$$|\tilde{\psi}\rangle = \sum_\alpha |u^\alpha\rangle \left(\sum_j a_{\alpha,j} |j\rangle \right) = \sum_\alpha a_\alpha |u^\alpha\rangle |v^\alpha\rangle = \sum_{i,j} \sum_\alpha a_\alpha u_i^\alpha v_j^\alpha |i\rangle |j\rangle, \quad (5)$$

と書くことができます。ここで $|u^\alpha\rangle$ との対称性を考慮して $|v^\alpha\rangle = \sum_j v_j^\alpha |j\rangle$ 及び $a_{\alpha,j} = a_\alpha v_j^\alpha$ を導入しました。この結果、式 (4) は

$$S = \sum_{ij} \left(\psi_{ij} - \sum_{\alpha=1}^m a_\alpha u_i^\alpha v_j^\alpha \right)^2, \quad (6)$$

と表されます。この最小化問題は、特異値分解（特異値標準化）と密接な関係があります。なぜならば、厳密な波動関数の係数 ψ_{ij} を $l \times J$ 行列の (i, j) 成分とすると ($l < J$)、行列 $\psi = \{\psi_{ij}\}$ は

$$\psi = UDV^*, \quad (7)$$

と特異値分解できるからです。ここで U は $l \times l$ ユニタリー行列、 V は $l \times J$ 列直交行列、 D は $l \times l$ 対角行列です。 D の対角成分が ψ の特異値となります。変分関数と特異値分

解の対応関係から、 D の対角成分のうち値の大きな m 個を a_α とし、対応する U と V の列を u^α と v^α とすることが最適の近似であることが分かります。ここで最も重要な物理量は、「環境を縮約したシステムの密度行列」

$$\rho = \psi\psi^* = UD(V^*V)DU^* = UD^2U^*, \quad (8)$$

です。即ち U が ρ を対角化し、その固有値の正の平方根が D の成分となります。常に $(D^2)_{ii} \geq 0$ であるため、近似の精神が明確です。式 (8) の形から分かるように、実際の数値計算では特異値分解を行う必要はなく、密度行列の対角化を行うことが重要になります。以降では、式 (8) を「密度行列に ψ をターゲットする」という呼び方をします。この密度行列は、システムの状態ベクトルについての部分対角和 Tr を取ると

$$\text{Tr } \rho = \sum_i \rho_{ii} = \sum_{i,j} \psi_{ij} \psi_{ij}^* = 1, \quad (9)$$

という関係を満たしています。密度行列の部分対角和は、式 (8) から

$$\text{Tr } (UD^2U^*) = \text{Tr } (D^2U^*U) = \text{Tr } (D^2), \quad (10)$$

と書き直すことができます。従って、近似の精度は

$$P_m = 1 - \sum_{i=1}^m (D^2)_{ii}, \quad (11)$$

によって評価できます。これを truncation error と呼びます。

以上をまとめると、「近似で残すべき最適な m 状態は、スーパースブロックの基底状態から作られるシステムの密度行列の固有状態のうち、対応する固有値が大きいもの m 個」となります。

2.2 数値計算アルゴリズムの概要

2.1 節の定式化では、初めにスーパースブロックの厳密な基底状態を仮定しています。この時に近似で残すべき最適な m 状態について議論しました。実際にはスーパースブロックの厳密な基底状態が分からないのですから、この原理を数値計算に応用する工夫が必要です。計算手法として、無限系アルゴリズムと有限系（スイープ）アルゴリズムが知られています [7]。具体的に一次元 Hubbard 模型

$$H = -t \sum_{i,\sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + \text{H.c.}) + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}, \quad (12)$$

に基づいて、最も基本となる無限系アルゴリズムの流れについて紹介します。

1. 始めにスーパーブロックが厳密対角化できるような小さい系を設定します. スーパーブロックは $B_k^L \bullet \bullet B_{k'}^R$ という構造を持っているとします. $\bullet$ はシングルサイト, B_k^L ($B_{k'}^R$) は k サイト (k' サイト) のブロックを表します. $B_k^L \bullet$ をシステム, $\bullet B_{k'}^R$ を環境とよびます. 以降, シングルサイト $\bullet$ は厳密に取り扱います. システム内の k サイトのブロック B_k^L は l 状態で記述されているとし, 出発点では $l < m$ です. システム内のブロック B_k^L と環境内のブロック $B_{k'}^R$ は個別に作るのが望ましいですが, フェルミオンサインの問題が出ない模型では, $B_k^L = B_{k'}^R$ とすることができます. このスーパーブロックを対角化して, 基底状態を求めます (ここで示したスーパーブロックは一次元的ですが, 二次元の場合にも拡張できます).
2. (1) の基底状態から環境 $\bullet B_{k'}^R$ を縮約したシステム $B_k^L \bullet$ の密度行列を導入し, 密度行列の固有値及び固有状態を求めます (環境内のブロックを個別に作る場合には, システム $B_k^L \bullet$ を縮約した環境 $\bullet B_{k'}^R$ の密度行列を導入します).
3. システム $B_k^L \bullet$ のハミルトニアン H 及びシングルサイト $\bullet$ における電子の生成演算子 $c_{\bullet,\sigma}^\dagger$ の行列要素を, (2) における密度行列の固有状態を基底として表現します. Hubbard 模型の場合には, 行列次元は $4l$ になります (4 はシングルサイトの状態数). $4l > m$ の場合には, (2) で求めた固有状態が小さい基底を捨てます. ここで行列次元が m に圧縮されます.
4. 元のシステム $B_k^L \bullet$ を新たなシステム内ブロック B_{k+1}^L とし, 新しいスーパーブロック $B_{k+1}^L \bullet \bullet B_{k+1}^R$ に対して (1) から (3) のステップを行います. ここで例えば B_{k+1}^L の端と $\bullet$ の間の電子のホッピングに関する行列要素を作るためには, 前のステップ (3) で求めた $c_{\bullet,\sigma}^\dagger$ を B_{k+1}^L の端における電子の生成演算子として用います. 以上のステップを繰り返し, 目的のシステムサイズに到達したら計算を終了します.

以上が無限系アルゴリズムの概要です. 通常は, 始めに無限系アルゴリズムで目的のサイズ (左右対称の場合には $B_{L/2-1}^L \bullet \bullet B_{L/2-1}^R$) までサイズを拡大します. しかしながら, 無限系アルゴリズムの $B_{L/2-1}^L$ と $B_{L/2-1}^R$ は, それより小さなスーパーブロックの波動関数から作られます. 従って, 電子数がシステムサイズと整合していないような場合には, 十分な精度が出ない場合があります. そこで, この後にスイープアルゴリズムで精度を高めます. スイープアルゴリズムでは, スーパーブロックのサイズ L を一定とし, シングルサイト $\bullet \bullet$ の位置を $B_{L/2}^L \bullet \bullet B_{L/2-2}^R, B_{L/2+1}^L \bullet \bullet B_{L/2-3}^R, \dots$ と動かして (スイープして), 色々なスーパーブロック配置で繰り込みを行います. スイープアルゴリズムのスーパーブロックは, システムサイズが小さい時に環境の影響が大きく, 逆にシステムサイズが大きい時には環境の影響が比較的小さいという構造を持っています. 従って, 無限系アルゴリズムの弱点がカバーされています.

3 動的密度行列繰り込み群法

3.1 繰り込みの指導原理

基底状態を求める DMRG において、スーパーブロックを最適に近似する基底は、環境が縮約されたシステムの密度行列の固有状態でした。この密度行列は、スーパーブロックの基底状態の波動関数から構成されます。したがって、スーパーブロックの励起状態の情報を含んでいません。そこで励起状態を計算するためには、基底状態に加えて励起状態も密度行列にターゲットすることが DMRG の自然な拡張として考えられます。このときには、混合アンサンブルに対する密度行列を導入することになります（通常は混合状態と呼ばれますが、J. J. Sakurai の量子力学のテキスト [18] では、混合アンサンブルと呼んでいます。この方が「異なる純粋状態の集合に対する統計的性質」という意味合いが明確です）。混合アンサンブルの密度行列の固有状態を用いて基底変換する方法を動的密度行列繰り込み群法（Dynamical DMRG, DDMRG）と呼びます³。この考えかたは、有限温度における密度行列（この場合には環境の縮約などの概念は入っていません）

$$\rho = \sum_{\alpha} p_{\alpha} |\alpha\rangle \langle \alpha|, \quad (13)$$

と対応しています。ここで $p_{\alpha} = e^{-\beta E_{\alpha}} / \sum_{\alpha} e^{-\beta E_{\alpha}} \geq 0$ は Boltzmann 因子で、状態 $|\alpha\rangle$ の実現確率を表します。また $H|\alpha\rangle = E_{\alpha}|\alpha\rangle$ です。DDMRG では $|\alpha\rangle$ に対応する部分の意味合いがもう少し積極的で、ズバリ「計算で知りたい励起状態」となります。また p_{α} に対応する部分は、 $|\alpha\rangle$ をどのぐらい精度よく計算したいかの目安を与えます。3.3 節で詳しく説明しますが、例えば一粒子励起スペクトル

$$A(k, \omega) = -\frac{1}{\pi} \Im \langle 0 | c_{k,\sigma}^{\dagger} \frac{1}{E_0 - \omega - H + i\gamma} c_{k,\sigma} | 0 \rangle, \quad (14)$$

を計算する場合には、

$$\{|\alpha\rangle\} = \{|0\rangle, c_{k,\sigma} | 0 \rangle, (E_0 - \omega - H + i\gamma)^{-1} c_{k,\sigma} | 0 \rangle\}, \quad (15)$$

を各々規格化した状態がターゲットとなります。

規格化された各ターゲットを、行列 ψ_{α} （システムの自由度が行成分、環境の自由度が列成分）で表すと、混合アンサンブルの密度行列は

$$\rho = \sum_{\alpha} p_{\alpha} \psi_{\alpha} \psi_{\alpha}^*, \quad (16)$$

で与えられます。ここで環境の自由度は、 ψ_{α} と ψ_{α}^* の積をとる過程で縮約されています。また ψ_{α} が規格化されていれば、システムの状態ベクトルについての部分対角和に対し

$$\text{Tr } \rho = \sum_{\alpha} p_{\alpha} \text{Tr } (\psi_{\alpha} \psi_{\alpha}^*) = \sum_{\alpha} p_{\alpha} \sum_{i,j} (\psi_{\alpha})_{i,j} (\psi_{\alpha}^*)_{ij} = \sum_{\alpha} p_{\alpha}, \quad (17)$$

³DDMRG という呼び方は、厳密には励起スペクトルを計算する或る特定の方法に対するものですが、本稿では励起スペクトルを計算できる方法で指導原理の同じものをこのように呼ぶことにします。

となるので,

$$\sum_{\alpha} p_{\alpha} = 1, \quad (18)$$

を満たすように正の実数の組 $\{p_{\alpha}\}$ を決めます. この範囲では, まだ $\{p_{\alpha}\}$ には任意性が残っています. この問題については 3.2 節で議論します.

DDMRG における近似としては, 式 (16) をユニタリ行列 U で対角化し, その固有値が大きな固有状態を残します. この手順は基底状態の DMRG と同じです. 但し実際の数値計算の範囲では, ρ を対角化するユニタリ行列 U で, α の異なる行列 $\psi_{\alpha}\psi_{\alpha}^*$ は必ずしも同時対角化されません [19]. この事情は, 特異値分解の性質だけからは, α に依存しない U を導入して $\psi_{\alpha} = U D_{\alpha} V_{\alpha}^*$ とできる保障がないことに関係しているようです [7].

混合アンサンブルの形式は

$$\psi = \sum_{\alpha} \sqrt{p_{\alpha}} e^{i\theta_{\alpha}} \psi_{\alpha}, \quad (19)$$

という位相コヒーレント状態 (純粋状態) と区別する必要があります. なぜならば, ここから作られるシステムの密度行列

$$\tilde{\rho} = \psi\psi^* = \rho + \sum_{\alpha \neq \beta} \sqrt{p_{\alpha} p_{\beta}} e^{i(\theta_{\alpha} - \theta_{\beta})} \psi_{\alpha}\psi_{\beta}^*, \quad (20)$$

は, 異なる状態間の量子力学的干渉を含んでいるからです. 今の場合には環境を縮約するという付加的条件が付いていますが, 縮約によって干渉が消えるかどうかは自明ではありません (量子力学の観測問題やマクロ系の量子力学に関連した話題ですね).

以上を考慮すると, DDMRG の場合には, 状態ベクトルを扱うタイプの変分原理よりは, むしろ式 (16) を出発点とすることが本質的であると考えられます.

なお有限温度においてスペクトルを計算する方法もありますが, この原理は DDMRG と異なります. ご興味のある方は文献 [9] を御覧下さい.

3.2 カレント 相関関数の計算のためのターゲットと Kramers-Krönig 関係

以下では幾つかの物理量を例にとって計算の流れを紹介します. 簡単のため, 物理量の定義は一次元系のものとします. まずこの節ではカレント相関関数

$$\chi(\omega) = \langle 0 | j \frac{1}{\omega + E_0 - H + i\gamma} j^{\dagger} | 0 \rangle, \quad (21)$$

を対象とします. $|0\rangle$ と E_0 はそれぞれ基底状態と基底エネルギーです. また $\gamma \rightarrow 0+$ です. ここでカレント演算子 j は

$$j = -\frac{ita}{\hbar} \sum_{i,\sigma} (c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{i+1,\sigma} - \text{H.c.}), \quad (22)$$

で定義されます。 $c_{i,\sigma}^\dagger, c_{i,\sigma}$ は電子（サイト i , スピン σ ）の生成消滅演算子、 t は電子のホッピング、 a は格子定数です。以降では、 $\chi(\omega)$ の実部 $\chi'(\omega)$ と虚部 $\chi''(\omega)$ を導入して、 $\chi(\omega) = \chi'(\omega) + i\chi''(\omega)$ と書くことにします。カレント相関関数は系の光物性を調べる基本的な物理量で、 $-e^2\chi''(\omega)/L\omega$ が複素光学伝導度の実部の正則部分 $\sigma'_{reg}(\omega)$ となります。ここで L はシステムサイズです。基底状態が絶縁体の場合には、これがそのまま光学伝導度になります。基底状態が金属の場合には、 $\sigma'_{reg}(\omega)$ に加えて特異部分

$$\sigma'_{sing}(\omega) = -\frac{e^2\pi}{L}(\langle\tau\rangle + \chi'(\omega))\delta(\omega) = 2\pi e^2 D\delta(\omega), \quad (23)$$

があります。 D は Drude 重みと呼ばれ、金属を特徴付ける量です。また

$$\tau = -t \left(\frac{a}{\hbar}\right)^2 \sum_{i,\sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + \text{H.c.}), \quad (24)$$

はストレステンソル演算子と呼ばれます。有限サイズにおける数値計算の場合、 D の値は境界条件に非常に敏感です。従って熱力学極限での D を見積もるには注意が必要です。

$\chi(\omega)$ は以下の状態

$$|\psi_1\rangle = |0\rangle, \quad (25)$$

$$|\psi_2\rangle = j^\dagger |0\rangle, \quad (26)$$

$$|\Psi_\gamma(\omega)\rangle = (\omega + E_0 - H + i\gamma)^{-1} j^\dagger |0\rangle, \quad (27)$$

からなっています。そこでこれらを密度行列にターゲットします。即ち、計算で求めたい状態をターゲットします。 $|\psi_1\rangle$ は Lanczos 法で作ったスーパースペクトルの基底状態です。次に $j^\dagger |0\rangle$ は、 j の始状態と終状態で量子数の変化がないため、 $|0\rangle$ と同じ基底で作れます（従って j はスーパースペクトルのハミルトニアンにおけるホッピング項の符号を変えれば OK）。 $|\Psi_\gamma(\omega)\rangle$ の形のベクトルを補正ベクトル（correction vector）と呼びます。補正ベクトルを求めるためには

$$(\omega + E_0 - H + i\gamma) |\Psi_\gamma(\omega)\rangle = j^\dagger |0\rangle, \quad (28)$$

という線形方程式を解く必要があります（詳細は 3.6 節で説明します）。注意事項としては、 $|\Psi_\gamma(\omega)\rangle$ は実部も虚部も取り扱う必要があるという点です。 $\chi'(\omega)$ と $\chi''(\omega)$ の間には Kramers-Krönig の関係

$$\chi''(\omega) = -\frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\chi'(\omega')}{\omega' - \omega} \quad (29)$$

$$\chi'(\omega) = \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\chi''(\omega')}{\omega' - \omega}, \quad (30)$$

が成立しています。線形応答理論に従うと、この関係は外場がかかって初めて系が応答するという因果律を表しており、物理的に極めて重要です。従って、計算したい量が $\chi''(\omega)$

のみであっても、 $\Im |\Psi_\gamma(\omega)\rangle$ だけをターゲットすることは（特に高エネルギー領域において）精度を著しく落とす原因となります。虚数を扱うことを避けるために、都合 $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, |\psi_3\rangle = \Re |\Psi_\gamma(\omega)\rangle, |\psi_4\rangle = \Im |\Psi_\gamma(\omega)\rangle$ の 4 状態を密度行列にターゲットします。この定式化の範囲では、各状態の重み p_α の選び方に任意性があります。 p_α の選び方に関しては、Kühner らによる解析があります [20]。しかしながら著者らの経験では、極端に偏った重みづけをしなければ計算結果は選び方にそれほど強くは依存しないようです。それよりも重要なことは、むしろ α の数に対応するだけの m を取るということではないかと感じています。但し全てのターゲットは基底状態に適当な演算子を作用して生成されるため、基底状態はある程度の精度で求めておく必要があります。そこで著者らは通常 $p_1 = 0.5$ とし、残りの p_α は均等割りにすることが多いです。エネルギー ω に対するスペクトル強度は、内積 $\langle \psi_2 | \psi_4 \rangle$ で与えられます。実際の数値計算では、スペクトル強度が収束するまでスイープを続けますが、DDMRG 特有の収束判定条件は 3.5 節で述べます。

ここまでの流れで明らかのように、スペクトル強度はある特定の ω に対してのみ計算されます。従って調べたいエネルギー領域が (ω_1, ω_2) である場合、この範囲で ω を変化させて計算を繰り返す必要があります。今の計算でエネルギーの分解能は γ 程度ですから、少なくとも $(\omega_2 - \omega_1)/\gamma$ 回程度の計算が必要になります。この繰り返し計算が DDMRG の欠点であることは否めません。この煩雑さを改善する方法としては、上記の状態に加えて $|\Psi_\gamma(\omega + 2\gamma)\rangle$ も同時にターゲットすることです。この場合、 $|\Psi_\gamma(\omega)\rangle$ と $|\Psi_\gamma(\omega + 2\gamma)\rangle$ を同時に取り扱うことによって、 $(\omega, \omega + 2\gamma)$ の領域に含まれる励起状態がうまくターゲットされます。これは 2 つの補正ベクトルをターゲットすることで、 $\omega + \gamma$ 周辺の状態の重みが高まるためです。これを利用して、 $|\Psi_\gamma(\omega + 4\gamma)\rangle, \dots$ などとターゲットを増やしていけば、一回の DMRG 計算で広い領域のスペクトルが取れることになります。当然のことながら、ターゲットを増やせば計算精度を保つために m も増やす必要があります。また線形方程式を解く回数も増加します。計算時間と精度を最適化するターゲット数は、一般には問題に依存します。

3.3 一粒子励起スペクトルの計算のためのターゲットと開放端条件での運動量の定義

ARPES は、一粒子励起スペクトル $A(k, \omega)$ (に双極子遷移行列要素の振幅の 2 乗と Fermi 分布をかけたもの) を直接観測する方法です。 $A(k, \omega)$ を精密に計算する方法は、近年の高精度分光データから物理を引き出すために不可欠のものです⁴。この節では $A(k, \omega)$ の計算方法を紹介します。 $A(k, \omega)$ は一粒子グリーン関数 $G_\sigma(k, \omega)$ と $A(k, \omega) = (-1/\pi)\text{Im}G_\sigma(k, \omega)$

⁴実験と理論を比較する場合には、光電子分光の表面敏感性に注意を払う必要があります。それは光電効果で試料から出てくる光電子は、平均自由行程程度の厚さの表面層から出てくるためです。電子の平均自由行程は、入射光のエネルギーに強く依存します。実際にスペクトル形状の入射エネルギー依存性は現在議論の焦点となっています。

の関係にありますので、以下では $G_\sigma(k, \omega)$ を計算します。絶対零度の $G_\sigma(k, \omega)$ は

$$G_\sigma(k, \omega) = \langle 0 | c_{k,\sigma}^\dagger \frac{1}{E_0 - \omega - H + i\gamma} c_{k,\sigma} | 0 \rangle, \quad (31)$$

で与えられます。密度行列へターゲットする状態は

$$|\psi_1\rangle = |0\rangle, \quad (32)$$

$$|\psi_2\rangle = c_{k,\sigma} |0\rangle, \quad (33)$$

$$|\Psi_\gamma(\omega)\rangle = (E_0 - \omega - H + i\gamma)^{-1} c_{k,\sigma} |0\rangle, \quad (34)$$

となります。この場合、 $c_{k,\sigma} |0\rangle$ という状態を生成する必要があります。電子（波数 k ，スピン σ ）の消滅演算子を作用していますので、基底状態 $|0\rangle$ と量子数が違います。 $|0\rangle$ は電子数 N を固定した Hilbert 空間で求めていますので、この変化を正確に取り扱うには多少の注意が必要です。 $|0\rangle$ の電子数 N は Lanczos 法を行う際に固定されるのですが、もともとスーパーブロック $B_k^L \bullet \bullet B_{L-k-2}^R$ が取れる全状態数は $n^2 m^2$ あります。ここで m はブロック B_k^L 及び B_{L-k-2}^R の状態数、 n はシングルサイト $\bullet$ の状態数です。 $n^2 m^2$ 個の状態の中には、電子数個分揺らいだ状態がかなり多く含まれています。そこで DMRG の場合には、 $n^2 m^2$ の基底から N 電子系の状態と $N-1$ 電子系の状態を同時に作ることが許されます。このような計算が可能となる背景は以下の通りです。一般にシステムブロック B_k^L における物理量の行列要素は、無限系アルゴリズム或いはスワイプアルゴリズムで、一つ前のシステムブロック $B_k^L = B_{k-1}^L \bullet$ に対する密度行列の固有状態で表現されています。スーパーブロックは粒子数の決まった状態のみ考えますが、部分系である B_k^L は様々な量子数をとって構いません。従って、密度行列が異なる量子数でブロック対角化されます。通常は、特定の量子数のブロックの固有値だけが大きくなるということはないので、色々な量子数を持った固有ベクトルで行列要素の基底変換が行われます。Hubbard 模型などではこの固有状態には電子数 3～5 個分揺らいだ状態がかなり多く含まれており、また繰り込みが進んでもこの揺らぎの影響は残ります。

粒子数の異なる状態 $|0\rangle$ 及び $c_{k,\sigma} |0\rangle$ を同じ密度行列上で扱うためには、初めにこれらの基底を「 N 粒子の状態 + $(N-1)$ 粒子の状態」で書き直すのが簡便です。書き直した後の新たな $|0\rangle$ では、 $(N-1)$ 粒子状態に対応する成分に 0 を入力します。

最後に運動量の定義についてコメントします。DMRG は開放端の場合に最も精度が高くなります。そのため通常は開放端条件を採用します。この場合には、周期境界条件における通常の運動量が良い量子数にはなりません。そこで今考えている系を一次元井戸型ポテンシャルと見なして、その状態を識別する量子数（これを擬運動量と呼ぶ）を導入します。サイト 1 から L ではポテンシャルが 0，その外（便宜的に 0 番目と $L+1$ 番目と呼びます）で電子は無限大のポテンシャルを感じることにすると、擬運動量は

$$k = \frac{n\pi}{L+1}, n = 1, 2, \dots, L, \quad (35)$$

となります。このとき $c_{k,\sigma}$ は、実空間表示の電子の消滅演算子 $c_{l,\sigma}$ を用いて

$$c_{k,\sigma} = \sqrt{\frac{2}{L+1}} \sum_l \sin(kl) c_{l,\sigma}, \quad (36)$$

と表わされます。あとは全てのサイトの消滅演算子 $c_{i,\sigma}$ が計算できればよいことになります。各サイトのフェルミオン演算子を繰り込む場合、フェルミオンサインをどう取るかが問題となります。詳細は文献 [9] を参考に検討して下さい。

3.4 動的スピン相関関数の計算（縮約された密度行列の対称性に関するコメント）

中性子散乱実験を解析するためには、動的スピン相関関数を計算する必要があります。動的スピン相関関数は

$$S^\alpha(q, \omega) = \langle 0 | (S_q^\alpha)^\dagger \frac{1}{\omega + E_0 - H + i\gamma} S_q^\alpha | 0 \rangle, \quad (37)$$

で定義されます。ここで $\alpha = \pm, z$, $S_q^z = \frac{1}{L} \sum_i e^{iqR_i} \frac{1}{2}(n_{i,\uparrow} - n_{i,\downarrow})$, $S_q^+ = \frac{1}{L} \sum_i e^{iqR_i} c_{i,\uparrow}^\dagger c_{i,\downarrow}$, $S_{-q}^- = (S_q^+)^\dagger$ です。混合アンサンブルの密度行列に対するターゲットは

$$|\psi_1\rangle = |0\rangle, \quad (38)$$

$$|\psi_2\rangle = S_q^\alpha |0\rangle, \quad (39)$$

$$|\Psi_\gamma(\omega)\rangle = (\omega + E_0 - H + i\gamma)^{-1} S_q^\alpha |0\rangle, \quad (40)$$

となります。この場合、基底状態 $|0\rangle$ に比べると $S_q^\pm |0\rangle$ では全スピンの ± 1 だけ変化していますが、このスピン揺らぎの効果もスーパーブロックが取れる全状態の中には充分含まれています。従って同じ基底から上記の状態を作ることができます。

$S^\alpha(q, \omega)$ の計算を精密に行うには、 $\sigma(\omega)$ や $A(k, \omega)$ の場合以上に、スピン空間における対称性に配慮する必要があります⁵。具体的には、環境（或いはシステム）が縮約された密度行列において、異なる量子数の間のブロック対角化条件を数値的に満たすようにします。仮に非ブロック対角部分に 10^{-15} 程度の小さな値が入っていても、莫大な m 状態を用いた計算ではこの数値誤差が累積して、異なる量子数の空間を僅かに混合してしまいます。この結果として、例えばスパイラルスピン状態のように非常に低エネルギーの励起が許される場合には問題が起きます。スピン空間の対称性を考慮した場合、ブロック端の演算子の変換はやや複雑です。ブロックの端の演算子は、 $c_{k,\sigma}$, $S_q^\pm$ などのように量子数が増えるものもありますから、演算子毎に異なる変換を行う必要があります。

⁵一方、プログラミングの簡便さという点では、ブロック対角化を行った後にブロック対角行列を結合して、 $nm \times nm$ 次元の変換行列を扱う方が都合がよいです。このときには、ブロック端の演算子や模型が変わっても同じサブルーチンが使えるためです。非ブロック対角化部分はゼロですので、一見すると無駄な演算を行っているように見えますが、高速化 BLAS (Basic Linear Algebra Subprograms) ライブラリーなどを使うと、スピン空間の対称性を考慮して計算した場合よりも圧倒的にスピードアップします。単純なスピン構造を持つ系の $\sigma(\omega)$ や $A(k, \omega)$ の計算であればこの方法も有効です。

3.5 計算アルゴリズム

以下に示すようなアルゴリズムに従って実際の数値計算を進めます。以下はあくまで基本的な方法であって、問題に応じて色々な方法を試されるとよいと思います。モデルは一次元 Hubbard 模型を想定しています。

1. 初めに無限系アルゴリズムで通常の DMRG 計算を行います。ここでターゲットは基底状態のみとします。励起状態を計算する場合においても、基底状態が精度よく計算されていることは極めて重要です。対象としている励起状態は、基底状態の波動関数に適当な演算子を作用して生成されますので、励起状態の精度と基底状態の精度は不可分の問題です。無限系アルゴリズムで得られた基底エネルギーは、この後の計算精度を測る目安の一つにもなります。
2. (1) が終了したら、スweepアルゴリズムに移ります。ここから密度行列に励起状態をターゲットします。スweepアルゴリズムの各ステップ（ある特定のスーパーブロックでの計算）では、初めに Lanczos 法でスーパーブロックの基底状態 $|0\rangle$ を計算します。Lanczos 法の基底ベクトルは、全状態数 n^2m^2 (m はブロック B_k^L 及び B_{L-k-2}^R の状態数, n はシングルサイト $\bullet$ の状態数) から今考えている量子数の状態のみを抽出します。ここで得られた基底状態に適当な演算子 A を作用して、励起状態 $A^\dagger|0\rangle$ を作ります。演算子 A は $j, c_{k,\sigma}, S_i^+$ などを念頭に置くと、始状態と終状態で量子数が変化する場合があります。この場合には、始状態の基底と終状態の基底を個別に用意する必要があります。このあと 3.6 節の方法に従って補正ベクトル $|\Psi_\gamma(\omega)\rangle$ を計算します。得られた $|0\rangle, A^\dagger|0\rangle$, 及び $|\Psi_\gamma(\omega)\rangle$ から混合アンサンブルの密度行列を作り、Householder 法で各量子数の空間毎に対角化を行います。密度行列を対角化する行列を用いて、システム $B_k^L\bullet$ のハミルトニアン H , システムに含まれるシングルサイト $\bullet$ における電子の生成演算子 $c_{\bullet,\sigma}^\dagger$ 及び粒子数演算子 $n_{\bullet,\sigma}$ の基底変換を行い、この時にシステムの状態数を nm から m に圧縮します。
3. 新しいスーパーブロック $B_{k+1}^L\bullet\bullet B_{L-k-1}^R$ を作り、(2) を繰り返します。ここまでの段階では、励起状態計算の出発点はあくまで Lanczos 法で得られた基底状態です。そのため、 $A^\dagger|0\rangle$ 及び $|\Psi_\gamma(\omega)\rangle$ は最適化されていません。そのようないわば中途半端な状態を密度行列にターゲットしているため、スweepの一回目では基底エネルギーが僅かに増加します。そこでスweepを続けることで基底状態と励起状態の双方を最適化します。基底エネルギーの値が無限系アルゴリズムで得られた値よりも低くなり始めたら、計算精度はある程度取れてきたとみてよいと思います。 $\langle 0|AS|\Psi_\gamma(\omega)\rangle$ が目的の収束度に達したら計算を終了します。
4. 目的の収束度に達したら、 (ω_1, ω_2) の範囲でスペクトルを計算します。この場合、共役勾配法を使うことは勿論可能です。しかし既に最適化された基底が得られている

ため、連分数展開でスペクトルを計算することができます。

3.6 補正ベクトルの計算方法

DDMRG では、補正ベクトル $|\Psi_\gamma(\omega)\rangle$ を求めることが最も重要です。前述のように、補正ベクトルを求めるためには

$$(\omega + E_0 - H + i\gamma) |\Psi_\gamma(\omega)\rangle = A^\dagger |0\rangle, \quad (41)$$

を解くことが必要です。DDMRG で情報を圧縮している場合にも H は莫大な次元を持っていますので、 $(\omega + E_0 - H + i\gamma)^{-1}$ を掃き出し法などで直接求めることは現実的ではありません。大規模線形方程式を解く標準的な方法として、共役勾配法 (conjugate gradient method, CG 法) がよく知られています [21, 22]。一方、計算精度を考慮すると、E. Jeckelmann によって提案された方法が優れています [23]。DDMRG という呼び方は彼が始めました。狭い意味では彼の計算方法を DDMRG と呼ぶべきかと思います。彼の方法は以下の通りです。

始めに式 (41) の両辺の虚部を取ります。 $|\psi\rangle = \Im |\Psi_\gamma(\omega)\rangle$ と書くと、

$$\{(\omega + E_0 - H)^2 + \gamma^2\} |\psi\rangle = -\gamma A^\dagger |0\rangle. \quad (42)$$

が成り立ちます。この式は、以下の汎関数

$$W_{A,\gamma}(\omega, \psi) = \langle \psi | \{(\omega + E_0 - H)^2 + \gamma^2\} |\psi\rangle + \gamma \langle 0 | A |\psi\rangle + \gamma \langle \psi | A^\dagger |0\rangle, \quad (43)$$

に対する停留条件

$$\left. \frac{\delta W_{A,\gamma}(\omega, \psi)}{\delta \psi^*} \right|_{\psi=\psi_{min}} = 0, \quad (44)$$

となっています。この停留値から、スペクトル関数

$$I(\omega) = -\frac{1}{\pi} \Im \langle 0 | A |\psi\rangle = -\frac{1}{\pi\gamma} W_{A,\gamma}(\omega, \psi_{min}), \quad (45)$$

が得られます。汎関数による方法の精度を調べるために、求める解が

$$|\psi_{min}\rangle = \Im \frac{1}{\omega + E_0 - H + i\gamma} A^\dagger |0\rangle + \epsilon |\phi\rangle, \quad (46)$$

であると仮定します。ここで $\epsilon \ll 1$, $\langle \phi | \phi \rangle = 1$ とします。このとき

$$W_{A,\gamma}(\omega, \psi_{min}) = -\pi\gamma I(\omega) + \epsilon^2 \langle \phi | \{(\omega + E_0 - H)^2 + \gamma^2\} |\phi\rangle, \quad (47)$$

となり、誤差は ϵ^2 程度に抑えられます。 $|\psi\rangle$ から直接 $I(\omega)$ を計算するタイプの方法では ϵ のオーダーの誤差を生じますので、汎関数による方法は精度が高いことが分かります。

実際の密度行列へのターゲットには実部も必要です. これは以前に説明したように, 吸収スペクトルの計算などで Kramers-Krönig 関係を成り立たせるためです. 汎関数による方法での実部は

$$\Re \frac{1}{\omega + E_0 - H + i\gamma} A^\dagger |0\rangle = \frac{1}{\gamma} (H - E_0 - \omega) |\psi\rangle, \quad (48)$$

となり, ϵ のオーダーの誤差を含んでいます.

具体的な計算では, 変分関数を Lanczos 法と同じように部分空間の Krylov 列で行列表現し, 対角化を行います. 但し γ 項があるため, $A^\dagger |0\rangle$ も列に入れておきます. 展開は対角化の最低固有値が目的の収束度になるまで行いますが, これも Lanczos 法と同様です. 実際の計算では, $H|\psi\rangle, H^2|\psi\rangle$ などの代わりに $(\omega + E_0 - H)|\psi\rangle, (\omega + E_0 - H)^2|\psi\rangle$ などを用いるほうが安定性が高いようです [24].

計算の精度や効率は γ の大きさに非常に強く依存します. 特に γ が小さくなると計算効率が落ちます. Hubbard 模型などの典型的な強相関模型では, $\gamma = 0.05t$ 程度が現実的な時間スケールで計算できる限界です (t は電子のホッピングで, この場合にスペクトルにおいて有限サイズ効果が目立たなくなるのは $L\gamma \sim 10t$ 程度です).

計算を更に加速させるために, 通常の DMRG 法における波動関数変換を応用することができます [25]. 即ち, 1 ステップ前のスーパーブロックにおける線形方程式 (41) の解を今のスーパーブロックの基底に変換し, それを新しい線形方程式の初期値として用います. うまく扱えば, 通常の DMRG 法での波動関数変換に匹敵する高速化が可能です. 基底状態に対する波動関数変換では, よほど基底エネルギーの精度が取れていないと演算の高速化には至りません. 従ってこの方法で励起状態に対する計算が加速するということは, 励起状態の精度も十分に取れることを意味していると考えられます.

3.7 連分数展開による方法

DDMRG の指導原理は, 混合アンサンブルに対する密度行列による繰り込みでした. この概念は, 既に S. R. White の論文で述べられています [7]. 一方, 混合アンサンブルの概念を実際の励起スペクトル計算に応用したのは K. Hallberg が最初です [26]. K. Hallberg の研究では Lanczos 法の連分数展開を念頭に置いて, Lanczos ベクトルの幾つかをターゲット状態とする方法が試みられています. この方法では, 一回の DMRG で全エネルギー領域のスペクトルを計算することができ, 非常に簡便です. また非常に小さな γ でスペクトルを計算することが可能です. その一方, 精度の高い計算を行うためには, 状態 ψ_α の数 α に対して $m \gg \alpha$ とする必要があります. 基底状態の DMRG 法 ($\alpha = 1$) であっても, 通常は数百のオーダーの m を取りますから, この場合には極めて大きな m を取らないと収束性が保障されません. この背景としては, 補正ベクトルがほぼ固有状態 (γ の影響があるため厳密ではないが) であるのに対して, Lanczos ベクトルは必ずしも

固有状態に近いとは言えないことが影響しています。ある固有状態に近い状態を作るためには、様々な Lanczos ベクトルの線形結合が必要です。これを全ての励起状態について行わなければならないので、 m が増加するということです。但し、励起子的な状態が形成されている場合には、この方法は非常に効果的であることが分かっています [26, 27]。またあまり定量性を要しないような大掴みの議論には非常に適しています。この精度の範囲であれば、スペクトルだけではなく時間発展や有限温度の物理量の計算にも容易に拡張できます。補正ベクトルの計算に進む前に勉強して有益な方法だと思います。

3.8 エッジポテンシャルの導入による励起スペクトルに対する有限サイズ効果の緩和

Mott 絶縁体からの励起状態を考える場合、周囲に比べて電荷の異なる素励起が生じます。一粒子励起の場合には、電子がいないサイトが生じ、この励起をホロンと呼びます。また光励起の場合には、電子がいないサイトと電子が二重占有したサイトが生じ、これらの励起を各々ホロン・ダブロンと呼びます。これらの素励起は、開放端条件で端に局在する傾向があります。例えば長距離 Coulomb 斥力 V が電子の運動エネルギーより大きい場合、 V の損を避けるためにダブロンは端に局在します（ダブロンが運動していれば $4V$ のエネルギー損がありますが、端に局在した場合には $2V$ の損で済みます）。素励起が局在した状態は、スペクトルにおいて余分なピークとして現れます。あるいは本来ならば一本であるべきピークが状態の異なる二つに分裂するといつてよいかもしれません。ダブロンが端に局在することを避けるために、端のサイトに電子が来るとエネルギーが高くなるような一体ポテンシャルを導入するのが簡単でしかも効果的です。即ち H の代わりに $H + V(n_1 + n_L)$ を新たなハミルトニアンと考えて計算を行います。ここでポテンシャルの大きさや符号は、素励起の局在効果なるべく小さくなるように決めます。但しハミルトニアン自身に変更を加えているため、運動している素励起のピークエネルギーやスペクトル形状を僅かに変えてしまうのがこの方法の欠点です。しかしながらポテンシャルの寄与は H 項に比べて $1/L$ 程度ですので、本質的な問題にはなりません。いずれにしても周期境界条件の結果などとの比較が必要です。

3.9 時間依存 DMRG のフーリエ変換から導出したスペクトルとの関連性

DMRG の最近の展開で注目されているのは、系の長時間発展を DMRG により系統的に計算することです。この問題に関して最初に手法の提案を行ったのは M. A. Cazalilla ですが、S. R. White らは通常の DMRG コードに整合する形に拡張しました [28, 29]。S. R. White の研究の動機としては、実時間 Green 関数の応答が長時間に渡って計算でき

れば、その Fourier 変換によってスペクトル関数を得ることができることだと伺っています。前節までで述べてきたように、一回の DDMRG では限られたエネルギー区間のスペクトルしか計算できません。従って全エネルギー領域のスペクトルを得るためには、異なるエネルギー区間に対して何度も DMRG を行う必要があります。この煩雑さを緩和できるというのが Fourier 変換をする利点です。しかしながら Fourier 変換の方法では、バンド端のスペクトル形状に影響がでます。一次元系の一粒子励起スペクトルのように、バンド端に発散が現れる場合には注意が必要かと思われます。

3.10 Deconvolution

DDMRG により得られるスペクトルには、人為的につけたブロードニング γ の影響があります。この影響を調べるために、以下の関係

$$\tilde{\chi}(\omega) = \frac{\gamma}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\chi(\omega')}{(\omega' - \omega)^2 + \gamma^2}, \quad (49)$$

の逆変換を考えます。ここで $\chi(\omega)$ は真のスペクトル関数 (即ち $\gamma \rightarrow 0$), $\tilde{\chi}(\omega)$ は DDMRG で得られるブロードニング γ のついたスペクトルです。ここで $L_\gamma(\omega) = (\gamma/\pi)/(\omega^2 + \gamma^2)$ を導入し、エネルギーを離散化すると、

$$\tilde{\chi}(\omega_i) \sim \frac{\gamma \Delta\omega}{\pi} \sum_j L_\gamma(\omega_i - \omega_j) \chi(\omega_j), \quad (50)$$

が得られます。ここで $\Delta\omega = |\omega_{i+1} - \omega_i|$ です。従って $\tilde{\chi}(\omega_i), \chi(\omega_i)$ をベクトル $\vec{\tilde{\chi}}, \vec{\chi}$ の i 成分, $L_\gamma(\omega_i - \omega_j)$ を行列 $\hat{L}$ の (i, j) 成分とすると、逆行列による変換

$$\vec{\chi} = \frac{\pi}{\gamma \Delta\omega} \hat{L}^{-1} \vec{\tilde{\chi}}, \quad (51)$$

で真のスペクトルの近似式が得られます。このあと γ よりも小さなブロードニング因子で再度コンボリューションします。この計算では、あらかじめ十分に広い ω の範囲を精度よく計算しておかないと、変換後のスペクトル端が僅かに負になってしまいます。この問題を処理するような手法も色々ありますが、かなり技術的です。

3.11 励起状態を ” 意図的に ” ターゲット 状態に混ぜる

基底状態の精度が充分には取れないような複雑なモデルでは、適当な励起状態を意図的にターゲットとすると基底エネルギーの収束性が改善される場合が稀にあります。一般には、基底状態の精度が充分でなければ、励起状態の精度も悪いことは既に述べてきました。しかしながら発想を変えると、励起状態の精度が良くないということは、その励起状態には他の励起状態や基底状態の成分も混ざっているということではないでしょうか？

現状では制御可能な方法ではありませんのでお勧めできません。DMRG 計算を色々試みた結果としてこのような可能性もありうるという意見に留めたいと思います。関連あると思われる研究としては、文献 [30] を参照して下さい。

3.12 MPI 並列化による DDMRG の高速化・大規模化

Message Passing Interface (MPI) は、分散メモリ型並列コンピュータ上でのプログラミングの規格のことです。最近は並列計算機がスタンダードになりつつありますので、MPI を効果的に用いることができれば計算の高速化・大規模化が望めます。DDMRG の原理とは直接の関係はありませんので詳細は述べませんが、使用例を簡単に紹介します。DDMRG の欠点は、各 ω で独立にスペクトル強度を計算しなければならないことでした。そこで ω のイタレーションを並列化します（これはジョブ投入の労力を厭わなければ手動でも可能）。低エネルギー領域のスペクトルと高エネルギー領域のスペクトルでは、計算時間にかかなりの開きがあります。従って、エネルギー領域を区切って各ノードに計算させる場合、低エネルギー側ほど広くしておくほうがノード間のバランスがとれるということになります。また計算でネックとなるのは Lanczos 対角化や補正ベクトルの計算です。これらの部分を以下のように並列処理することができます。

1. ハミルトニアン H のノンゼロ部分をメモリーに貯めることで、Lanczos 法や補正ベクトル計算の各ステップで H を作り直すことを避けます。これによって演算回数は劇的に減ります。但し、 H はノンゼロ要素だけでも莫大なメモリーを要します。これを幾つかのメモリーに分散して記憶させます。あまり複雑なモデルでなければ、 $m \leq 600$ ではこの方法がベストです。
2. H をメモリーに格納せずに、Lanczos 法や補正ベクトル計算の各ステップで生成します。この場合、 m は数千のオーダーまで大きくできますが、演算時間がかかります。そこで H を p 個の行ベクトルの束 H_α ($\alpha = 1, 2, \dots, p$) に分解し、各 H_α と Lanczos ベクトルの積を異なる計算機上で演算します。これで原理的には並列ノード数 p におよそ比例した速度アップが見込めます（ノード間でデータの送受信が必要になりますので、完全に比例するわけではありません）。
3. CG 法では、ベクトルの内積を何度も計算する必要があります。これに対しても (2) 同様の並列化が可能です。二つのベクトルを $|a\rangle = (a_1, a_2, \dots, a_n)$, $|b\rangle = (b_1, b_2, \dots, b_n)$ とするとき、 $\langle a|b\rangle = \sum_{i=1}^n a_i b_i = \sum_{\alpha=1}^p \sum_{i=i_\alpha^s}^{i_\alpha^e} a_i b_i$ と分解して、異なる α に対する i の和を異なる計算機上で実行します。ここで i_α^s 及び i_α^e は、各ノードの演算量なるべく均等になるように選びます。

4 計算例

以下では具体的に計算例を紹介します（初めて DDMRG プログラムが動くようになった当時のデータもありますので，グラフに荒い部分があることはご容赦下さい）．「4.1 Lanczos 法との比較」の項及び「4.2 スペクトル形状のサイズ依存性」の項は，東北大学大学院理学研究科の金森悠君（M2）に手伝ってもらいました．力のある学生には，修論前のウォーミングアップとしてちょうど良い課題だと思います．

4.1 Lanczos 法との比較

初めにスペクトルの計算精度について議論します．ここで問題は，（１）Lanczos 法が可能なサイズでは繰り込みをする必要がないが，その場合でもどれほど小さな m で正確なスペクトル形状を再現できるか，（２）ある有限の m に対してどこまでシステムサイズを大きくすることが可能か，の二点です．（１）に関しては，Lanczos 法で得られる固有状態の性質と DDMRG の m の大きさから，DDMRG においてどのような状態を記述しているか推測できます．（２）は計算機の最大メモリに相当する m で到達できる最大システムサイズを見積もる基準となります．対象とするモデルは，以下に掲げる一次元 $V-t$ モデル

$$H = V \sum_i n_i n_{i+1} - t \sum_i (c_i^\dagger c_{i+1} + \text{H.c.}), \quad (52)$$

です．ここで V は隣接サイト間のクーロン斥力， t は電子のホッピングの大きさ， $c_i^\dagger, c_i$ はスピンレスフェルミオンの生成消滅演算子， n_i は粒子数演算子を表します．以降 $V = 6t$ とします．このモデルにおいて，1/2-filling, $V \geq 2t$ であれば電荷秩序状態 (101010...) が基底状態となります．但し，本来は絶縁体である電荷秩序状態を偶数サイトかつ開放端条件で扱くと，金属的になってしまいます．この理由は， V によるエネルギー損を避けるために，両端がフェルミオンで占有されることに起因していると考えられます．このとき，異なる位相を持つ電荷秩序ドメイン間にウォール (1010101001010101) が生成し，ウォールが運動してエネルギーを下げるのが金属的状态を表しています．有限サイズ効果を避けるためには，サイト数を $L = 2l + 1$ ，キャリア数を $N = l + 1$ (l は整数) とするか，或いは偶数サイトでかつ端に人為的なポテンシャルを導入して，有限サイズ効果を抑える工夫が必要です．本稿では，奇数サイトで $l = 13$ を用いています．この場合，正確な Hilbert 空間は 20058300 次元となります．系の対称性を考慮しない場合，この程度まではメモリ 2GB の計算機で Lanczos 法が可能です．

そこでカレント相関関数を Lanczos 法と DDMRG の結果 ($m = 40$) で比較したものが図 1(a) です．ブロードニング因子は $\gamma = 0.2t$ としています．ここで広いエネルギー領域を一度にスキャンするために，基底状態を含めて 8 個の状態を密度行列にターゲットしています．また本稿の計算ではスイープを 3 回繰り返していますが，2 回で十分な精度

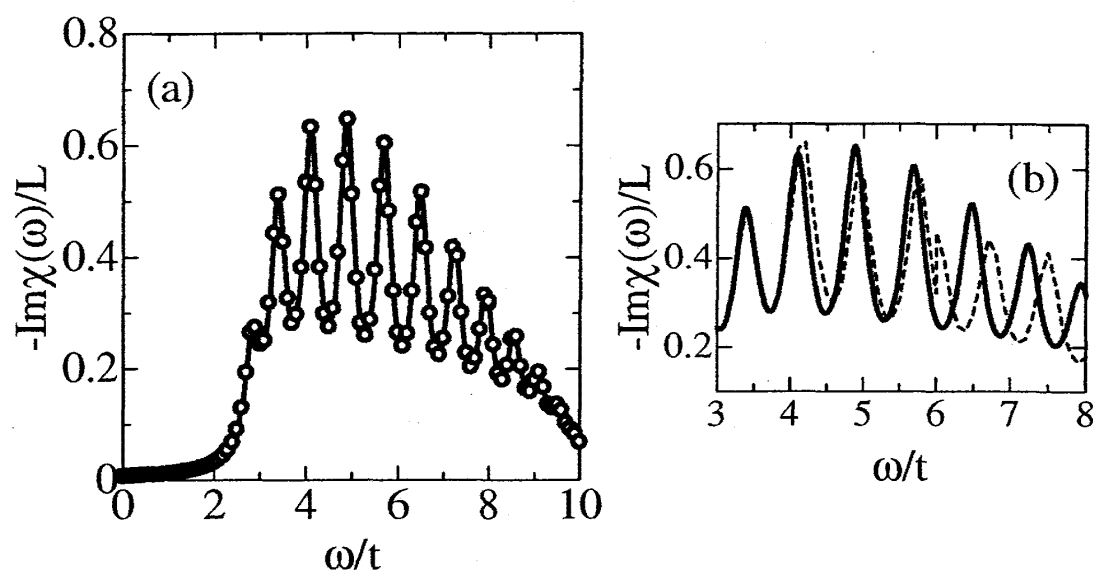


図 1: 一次元 $V-t$ 模型のカレント相関関数. (a) 数値厳密対角化 (実線) と DMRG (○) におけるスペクトルの比較. 計算条件は $m = 40$. (b) $m = 20$ での結果 (破線) を対角化 (実線) と比べたもの.

が得られます. DDMRG において考えている Hilbert 空間は高々 4000 次元です. そのような大幅な縮約にも関わらず, スペクトル形状は数値対角化と完全に一致しています. これは基底状態において $(101010\dots10101)$ という状態の重みが圧倒的に大きいため, この状態が極めて少ない DMRG 基底で表現されており, m 状態のほとんどを励起状態の記述に費やすことができるためと考えられます. 更に m を減らして $m = 20$ とすると, 図 1(b) に見られるように, $\omega \geq 4t$ において対角化と DDMRG の結果に差が見られます. 誤差の振る舞いに関して特徴的なことが $\omega = 6t$ の部分の不連続性に現れています. この計算では $\omega \geq 6t$ と $\omega < 6t$ は別のターゲットによって独立に計算が行われています. 計算精度が悪くなれば, 自然にこのような「継ぎ目」が現れます. 逆にこれを積極的に計算精度の保障に使うこともできます.

4.2 スペクトル形状のサイズ依存性

図 2(a) は, $V-t$ 模型において $L\gamma$ を一定にして, L を増やした場合のカレント相関関数です. ここでも $V = 6t$ としています. 例えば Boson 化法の定式化から明らかなように, 一次元系では系のエネルギーが L^{-1} でスケールされます. 即ち, この程度の狭さのブロードニングを取ると, サイズ効果が明らかに見えてきます. 従って $L\gamma$ が一定という条件は, サイズスケーリングに有効であると考えられます. この場合の特徴は, 光学ギャップ程度のエネルギーで, 色々な大きさの γ を持つスペクトルが一点で交わるように見えることです. ここから熱力学極限での光学ギャップを見積もることができます.

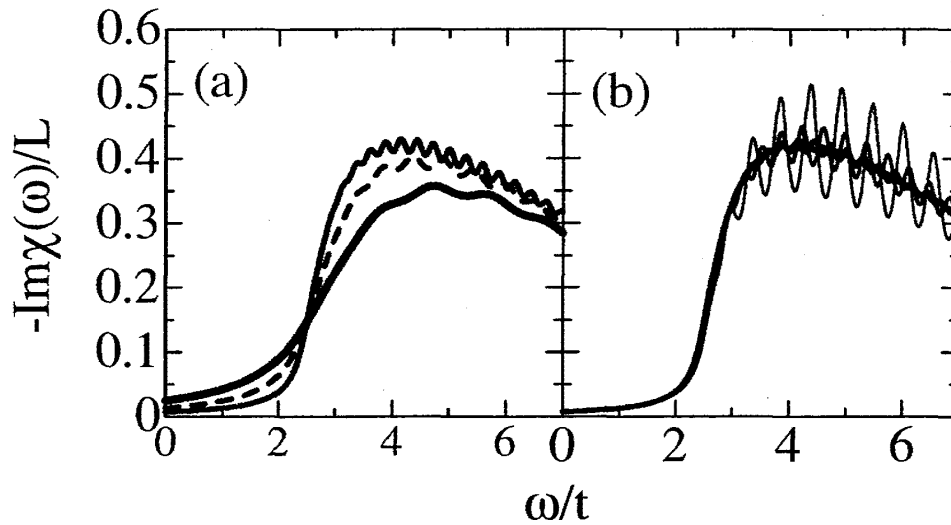


図 2: 一次元 $V-t$ 模型におけるカレント相関関数のサイズ依存性: (a) $L\gamma \simeq 16$ で $L = 21, 41, 81$ とした場合, (b) $\gamma = 0.2t$ で $L = 41, 61, 81, 101$ とした場合.

参考のために, γ を一定にして L を増やした場合のカレント相関関数の変化を図 2(b) に挙げます. 吸収の概形は変わらずに, 有限サイズピークがサイズの増加と共に滑らかになります. 図では明確ではありませんが, 最低エネルギーピークの位置はサイズを増加すると共に低エネルギー側にシフトしています. これを正しく見積もるには, ピーク位置を L^{-1} でスケールリングする必要があります.

4.3 有限サイズ効果の緩和

この節では, 有限サイズ効果について議論します. 対象は一次元拡張 Hubbard 模型

$$H = -t \sum_{i,\sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + \text{H.c.}) + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} + V \sum_i n_i n_{i+1}, \quad (53)$$

です. キャリア濃度は $1/2$ -filling とします. この模型において, カレント相関関数を計算した結果が図 3 です. 図 3(a) では破線が開放端条件での結果で, $\omega \sim 14t$ にサイズ効果に起因したピークが見られます. そこでポテンシャル $V(n_1 + n_L)$ を導入した結果が実線です. 単純にサイズ効果のピークが消えており, またメインピークの位置もほとんど変化ありません. この場合には, 端を操作する方法はうまく機能しているように見えます. 図 3(b) では開放端条件のままでサイズを変化させた結果を示しています. 実線に着目すると, $\omega \sim 6t$ にあるメインピークに加えて, $\omega \sim 4.7t$ に小さなピークが見られます. 小さなピークのほうが有限サイズ効果で現れたものです. 挿入図は, $L\gamma = 12.8t$ を一定にして L を変えた場合の, 小さなピークの変化を示しています. サイズの増加と共にピークが小さくなりますが, $L = 256$ までサイズを増加してもまだピーク構造が残っています. このように, サイズを増加させるだけで端の効果を取り除くのは簡単ではありません.

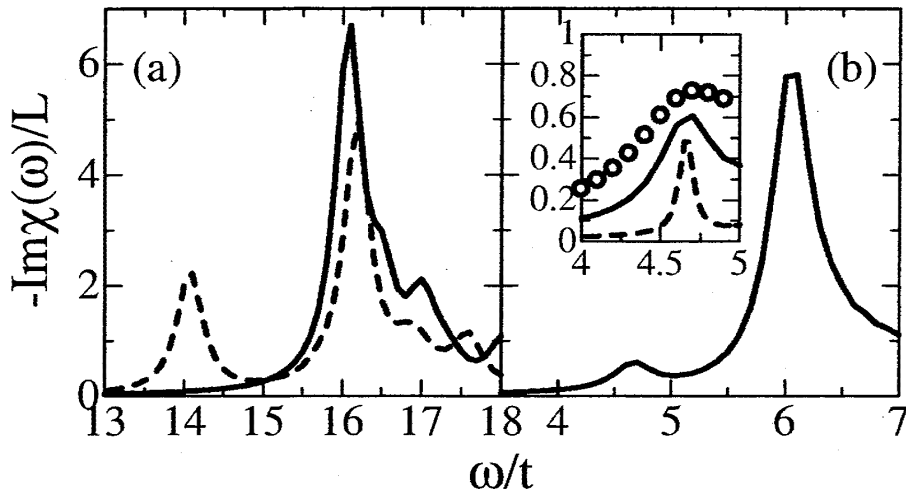


図 3: 一次元拡張 Hubbard 模型のカレント相関関数. (a) $L = 10, U = 20t, V = 3t$ のスペクトル (DDMRG, $m = 180, \gamma = 0.2t$). 破線が開放端条件, 実線が端にポテンシャルを導入した場合の結果. (b) 端に局在したダブロンに起因するピークをサイズ外挿した結果. メインのグラフは $L = 64$ のスペクトルで, $\omega \sim 4.7t$ のピークが有限サイズによる影響. 計算条件は $U = 10t, V = 3t, L\gamma = 12.8t, m = 180$. 挿入図は $L = 32$ (○), 64 (実線), 256 (破線).

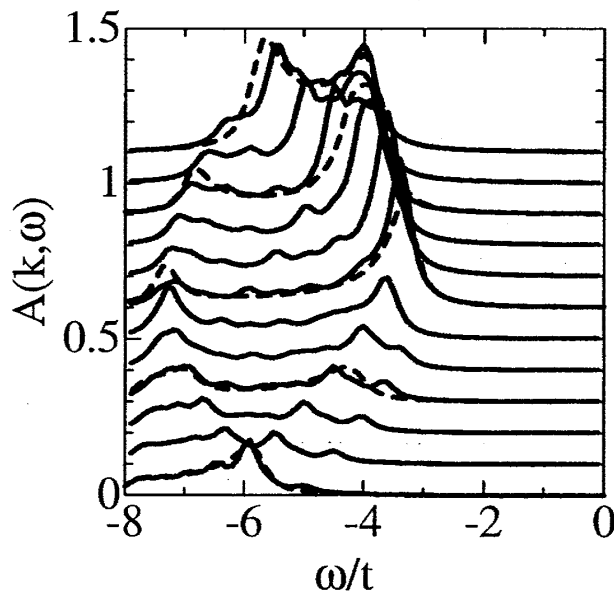


図 4: 一次元 Hubbard 模型の $A(k, \omega)$ (上から $k = \pi/13, 2\pi/13, \dots, 12\pi/13$). 実線が開放端条件での結果, 破線が端にポテンシャルを導入した場合の結果.

参考までに、一次元 Hubbard 模型 ($V = 0$) における一粒子励起スペクトルのサイズ効果とその緩和結果も図 4 に示します。計算条件は $U = 10t$, $L = 12$, $\gamma = 0.2t$, $m = 120$ です。この場合にはホロンが端に局在しやすく、二本のピークに分裂していますが、ポテンシャル $-t(n_1 + n_L)$ の導入によってそれが抑えられています。

以降では、なるべく大きな L , 小さなポテンシャルで計算を行っています。

4.4 一次元 Mott 絶縁体の光励起状態 (光吸収スペクトル)

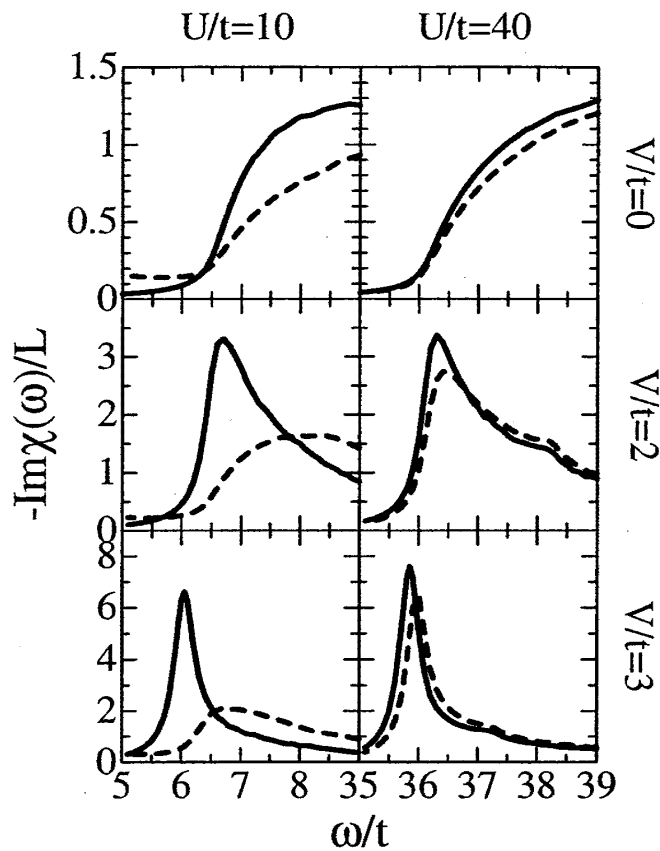


図 5: 一次元拡張 Hubbard 模型のカレント相関関数 (実線) とストレステンソル相関関数 (破線)。

図 5 に示したのは、一次元拡張 Hubbard 模型に対するカレント相関関数 (実線) とストレステンソル相関関数 (破線, 図では $\tau - \langle 0 | \tau | 0 \rangle$ の相関関数を計算) です。計算では U, V をパラメータとして変化させています。ここで計算条件は、キャリア濃度 1/2-filling, $L = 64$, $\gamma = 0.2t$, $m = 180$ です。境界条件としては、前節で述べた一体ポテンシャルを両端に導入しています。これらの相関関数は、光に対する電子の線形応答関数です。そのため、カレント演算子やストレステンソル演算子は、光のゲージ不変なベクトルポテンシ

ルを Peierls 位相として電子のホッピングに取り込んだときの展開係数です。即ち

$$-t \sum_{i,\sigma} e^{-i\phi(t)} c_{i,\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + \text{H.c.} \simeq -t \sum_{i,\sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + \text{H.c.}) - \frac{e}{c} j A(t) - \frac{1}{2} \left(\frac{e}{c} \right)^2 \tau A^2(t), \quad (54)$$

但し

$$\phi(t) = \frac{e}{c\hbar} \int_i^{i+1} \vec{A}(t) \cdot d\vec{x} \simeq \frac{ea}{c\hbar} A(t), \quad (55)$$

で、 $A(t)$ は格子定数 a に比べて空間的に緩やかに変化すると仮定しています。光学遷移は双極子遷移であるため、 $A(t)$ のべきの違いで光励起状態の対称性が変化します。カレント（ストレステンソル）相関関数は基底状態と異なる（同じ）パリティを持つ光励起状態の分布を与えます。

一次元拡張 Hubbard 模型では、 $V \sim 2t$ で励起子束縛状態が形成されることが知られています。図 5 の DDMRG によるカレント相関関数の計算結果も、 $V = 2t$ で励起子に対応する鋭い吸収を示しています。特に $V = 3t$ の結果はブロードニング γ のローレンツ関数で非常によくフィットでき、励起子束縛状態を表しています。このように励起状態の性質が変化しても（連続スペクトルか或いはエキシトン吸収かの違い）、広いパラメータ領域で精度の高い計算をすることができます。図 5 から明らかのように、パリティの異なる光励起状態の分布は、電子相関の大きさ U や V に非常に強く依存しています。特に $U = 40t$ では、実線と破線がほぼ縮退しています。この縮退傾向が実際の強相関一次元物質の光物性に影響していることが明らかとなっています [31, 32]。参考文献では、この縮退傾向を詳細に調べるために、最低エネルギーを持つ光励起状態のピーク位置をサイズスケールリングしています。このスケールリングでは、厳密対角化で計算できないような大きなサイト数を扱って初めて正確な議論が可能です。

4.5 相関電子系の一粒子励起スペクトル

4.5.1 一次元 Mott 絶縁体におけるスピン・電荷分離のダイナミクス

相互作用する一次元電子系では、スピンと電荷の自由度が分離した励起が良い素励起となります。スピンと電荷の集団運動をそれぞれスピノン・ホロンと呼びます。一粒子励起スペクトル $A(k, \omega)$ においては、これらの励起はバンド端の発散的振舞いで特徴づけられます。図 6, 7 は一次元 Hubbard 模型の $A(k, \omega)$ です。図 6 のモデルパラメータは、一次元銅酸化物 Sr_2CuO_3 に対して見積もられている値 $t = 0.65(\text{eV})$, $J = 0.23(\text{eV})$ （このとき $U/t = 11.3$ ）を用いています。また $L = 64, m = 300$, キャリア濃度は $1/2$ -filling です。DDMRG の計算結果はバンドの発散傾向をよく再現しています。数値計算では有限サイト系しか取り扱うことができませんので、このように低エネルギー集団励起を正しく記述できることは必ずしも自明ではありません。このことから、DDMRG で取り扱える

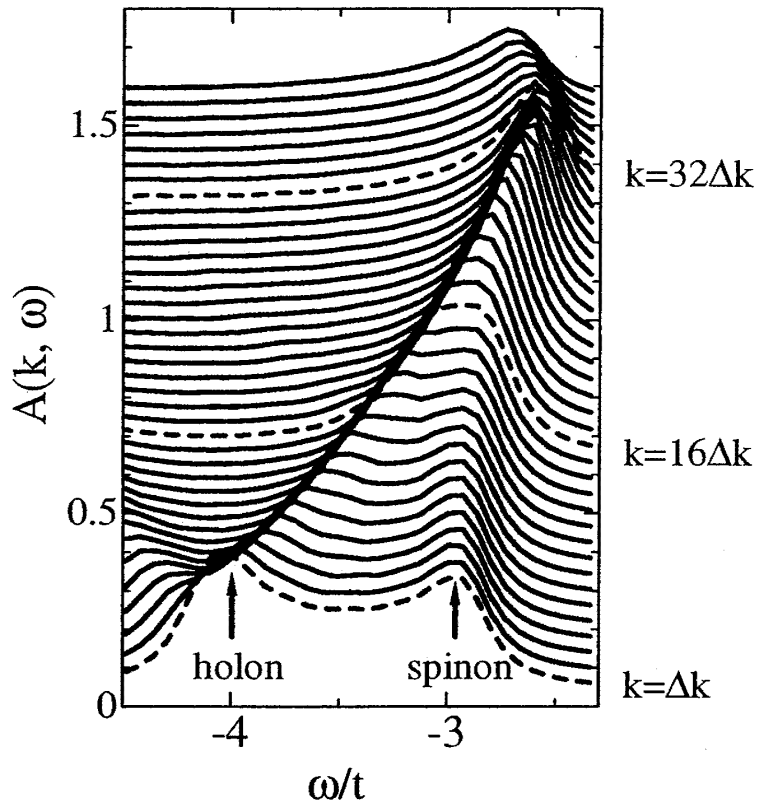


図 6: 一次元 Hubbard 模型における $A(k, \omega)$ の k 依存性 (スピノン・ホロンのバンド分散). 擬運動量は $k = \Delta k = \pi/65$ から $k = 39\Delta k = 0.6\pi$ まで. $\gamma = 0.2t$.

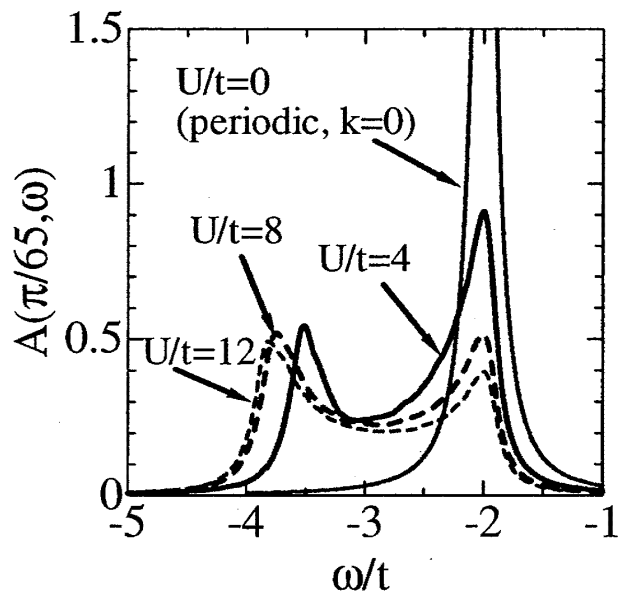


図 7: 一次元 Hubbard 模型における $A(k_{min} = \pi/65, \omega)$ の U 依存性. $\gamma = 0.1t$. $U \neq 0$ に対する各スペクトルは, スピノンピークが自由電子のピーク位置 $\omega = -2t$ に合うようにシフトしています.

システムサイズは、集団励起の性質を理解するのに十分なものであることが分かります。この結果は、最近の ARPES スペクトルと極めてよい一致を示しています [3]。また図 7 において $A(k, \omega)$ の U 依存性から分かるように、スピノンに対応する構造（低結合エネルギー側のピーク）は、 U の大きさに強く依存しています。これは系の反強磁性的相互作用 $J = 4t^2/U$ と関係しているものと思われます。

DDMRG で計算できる物理量は、絶対零度のスペクトル計算です。一方、電子相関を正確に扱って有限温度のスペクトルを計算するには、QMC 法が非常に有効です。両者の計算結果を比較することで、スペクトルの温度変化の情報を抽出することができます。このような解析から、スピノンとホロンでは温度変化する温度スケールが異なるということが分かっています [33]。

4.5.2 ポーラロン問題

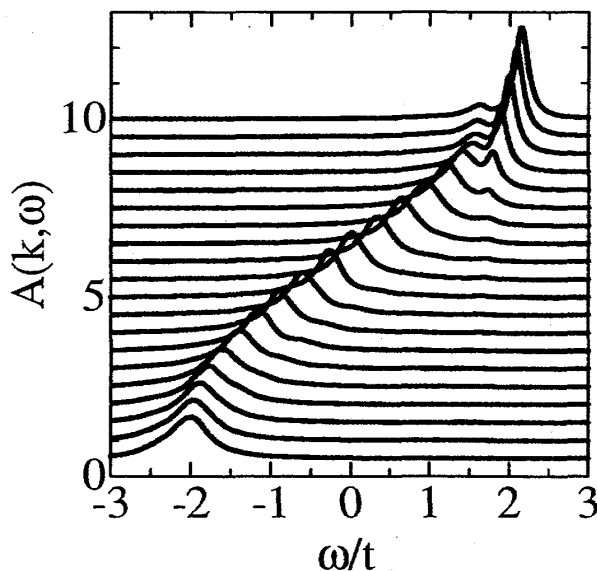


図 8: Holstein 模型の $A(k, \omega)$ (上から $k = \pi/21, 2\pi/21, \dots, 20\pi/21 \sim \pi$)。

電子格子相互作用の効果は、固体物性の様々な側面に現れます。また理論的にも、摂動法や Lee-Low-Pines の理論（ユニタリー変換と変分原理に基づく）、Feynman の経路積分法など、場の量子論の手法を勉強する格好の問題でもあります。しかしながら、種々のスペクトルへの量子効果が明らかになってきたのは、最近の数値計算の進歩によるところが大きいと思います。特にボゾンであるフォノンの無限自由度をどのように数値的に扱うかという理解が深まったことがポイントです。大自由度の系で直接対角化を行うことは困難ですが、DMRG による繰り込みなどを駆使して物理を議論できるシステムサイズが扱えるようになりつつあります。ポーラロン問題で基本となる模型は、以下に示す Holstein

模型です.

$$H = -t \sum_{i,\sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + \text{H.c.}) + \omega_0 \sum_i b_i^\dagger b_i - g \sum_i (b_i^\dagger + b_i) n_i. \quad (56)$$

ここで $b_i^\dagger, b_i$ は Einstein フォノンの生成消滅演算子, ω_0 はフォノンのエネルギー, g は電子格子相互作用の大きさです. ボゾン自由度は以下のようにして系統的に取り扱うことができます. まず励起されるボゾンの個数がサイト当たり最大 2^M であるとします. このとき, b_i は M 個のハードコアボゾン演算子で厳密に展開できます [34]. このハードコアボゾンをサイトに見立てて, 少しずつボゾンの自由度を繰り込むことができます. この方法を用い, $L = 20$ での一粒子 (1 ホール) 励起スペクトルを DMRG で計算した結果が図 8 です. モデルパラメータは $g = \omega_0 = 0.5t$, $m = 400$ です. 相互作用のない cosine バンドと, そのバンドトップから ω_0 にあるフォノンモードとの混成が見られます. 特徴的なことは, ω_0 よりも高エネルギー領域の電子が非常に強いダンピングを受けていることです. 有限のブロードニングのために結果が明瞭ではありませんが, バンドトップから測って $2\omega_0, 3\omega_0, \dots$, でも異常が認められます. このことは, 高エネルギー領域ほど電子が多くフォノンと結合していることを直接示しています.

本稿で紹介した方法以外にも, 電子格子相互作用を取り扱う方法は幾つか試みられています. DMRG の原理と直接関係あるものは文献 [35, 36, 37], これと物理的にほぼ等価な方法は文献 [38] で取り扱われています.

4.5.3 スピン・電荷分離と電子格子相互作用の協調・競合

強相関電子系の典型的な舞台である遷移金属酸化物は, イオン結晶的な性格を持っています. 従って, 伝導電子は結晶格子の歪みを引きずりながら運動します. Mott 絶縁体の場合を考えると, 電子は各サイトに局在し, グローバルに見れば電子は均一に分布しています. 従ってどの電子も同じように電子格子相互作用を受けています. 一方, 元素置換や光励起によってキャリアがドーピングされると, そのキャリアは周りに比べて電荷の揺らぎがあるために, 余分にフォノンの雲をまとって運動することになります.

そこで強相関電子系特有の問題としては, 電子相関と電子格子相互作用の協調・競合が挙げられます. そこでは, 電子格子相互作用が電子相関効果を強めるか弱めるか理解することは非常に重要です. これまでのところ, 二次元系に関しては高温超伝導体の ARPES スペクトルに関連して詳細な研究が行われています [39]. 一方, 一次元系においては, 電子格子相互作用があってもスピン・電荷分離が保たれるかということが問題です. 理論的には, 一次元系の興味深い電子状態の一部はスピン・電荷分離から生じます. 従って, 電子格子相互作用が強く効く現実の物質で, スピン・電荷分離が実現しうるか調べることに意義があると思います.

遷移金属酸化物の場合, 質量の軽い酸素のブリージングモードなどが電子と結合します. この場合, 遷移金属の d 軌道と酸素の p 軌道間のホッピングが影響を受けます. こ

の結果として、模型を低エネルギーの有効ハミルトニアンにマップした時には、電子系のオンサイトポテンシャルが強く影響を受けます [40]. このとき, Hubbard-Holstein 模型

$$H = -t \sum_{i,\sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + \text{H.c.}) + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} + \omega_0 \sum_i b_i^\dagger b_i - g \sum_i (b_i^\dagger + b_i) n_{i,\uparrow}. \quad (57)$$

が基本的な模型となります.

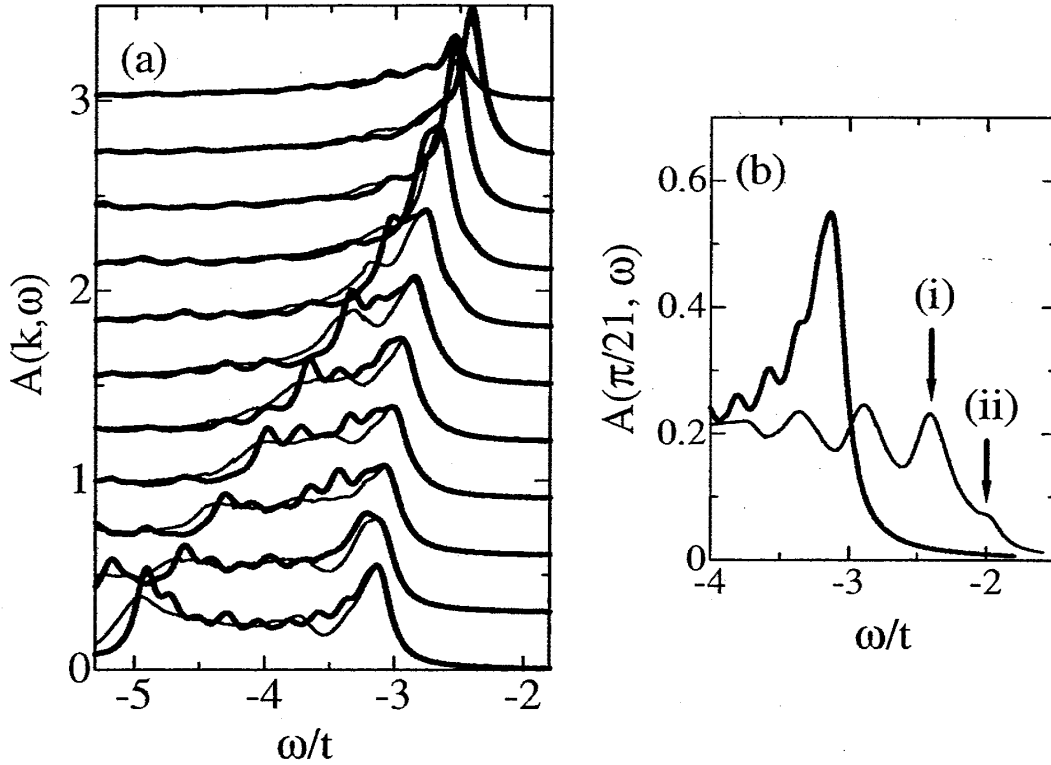


図 9: (a) 一次元 Hubbard-Holstein 模型の $A(k, \omega)$ ($k = \pi/21, 2\pi/21, \dots, 11\pi/21 \sim \pi/2$). 細線 (太線) が $g = 0.5t$ ($g = 0$) の場合. $g = 0.5t$ のスペクトルは, スピノン励起に対応するピーク (低結合エネルギー側のピーク) を合わせるために $-0.76t$ だけシフトしています. (b) $A(k_{\min} = \pi/21, \omega)$. 細線 (太線) が $g = t$ ($g = 0$) の場合 (この図ではシフトしていません). (i) がスピノンに対応します.

一次元 Hubbard-Holstein 模型に対する $A(k, \omega)$ の計算結果が図 9(a) です. $g = 0.5t$ は電子格子相互作用が比較的弱い場合に対応します. 計算は $L = 20, m = 400$ の条件で行っています. この結果は, ホロン励起だけが強いダンピングを受けており, スピン・電荷分離が成り立っていることを示唆しています. 但し, 電子とフォノンモードの混成と思われるディップ構造, 例えば $A(k \sim 0, \omega)$ での $\omega \sim 3.5t$ の構造が k 依存性を持っており, スピノンと同じ分散を示しています. この点は単純ではありません. 数値的に得た結果は,

$$A_{\text{eff}}(k, \omega) = \sum_{q=-\pi/2}^{\pi/2} A_h \left(k - q, \omega + 2t + \epsilon_s \left(q + \frac{\pi}{2} \right) \right), \quad (58)$$

という形にまとめることができます [41]. ここで $\epsilon_s(q) = -(\pi J/2)|\sin q|$ は Heisenberg 模型の励起である des Cloizeaux-Pearson モード, $A_h(k, \omega)$ はスピン自由度を持たない Holstein 模型に対するスペクトルです. 即ち, スピンレス模型のスペクトルを単純に重ね合わせたものになっています. 式 (58) は強相関極限の Hubbard 模型で Bethe 仮説法の結果を解釈する時に使われる式と対応しています (このときは $A_h(p, \epsilon) = \delta(\epsilon - 2t \cos p)$ となります).

一方, 電子格子相互作用を大きくしていくと, 図 9(b) に示すように, スピノン励起も影響を受け始めます. 一次元系ではスピン・電荷分離は普遍的な現象ですから, この変化は非常に興味深いものです. 我々の解析では, スペクトル上でスピノン・ホロンのエッジ異常が失われるぐらいに大きな g の場合であっても, 式 (58) が良い見方であるというのが結論です [41]. 図 9(b) のピーク (ii) は, 式 (58) に従うと, フォノンの分枝からの寄与であることが分かります. 従って, 通常はゼロフォノン線 (この場合スピノンピークに対応) よりも低エネルギーに励起が現れないことと異なっています.

電子格子相互作用としては次の Peierls 型

$$\begin{aligned}
 H = & -t \sum_{i,\sigma} \left\{ 1 - \alpha(b_{i+1/2}^\dagger + b_{i+1/2}) \right\} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + \text{H.c.}) \\
 & + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} + \omega_0 \sum_i b_i^\dagger b_i,
 \end{aligned} \tag{59}$$

もよく知られています. この相互作用はスペクトルのダンピングだけではなく, バンド分散にも大きな影響を及ぼすと考えられます [42]. そのため, スピン・電荷分離にも直接的な影響を与える可能性があります. しかし Holstein 型に比べると取扱いが難しく, 特にダイナミクスに関してはチャレンジングな課題です.

4.6 DDMRG の応用

ここまで何度か述べてきたように, 補正ベクトルはほとんど固有状態であるために, DDMRG が比較的小さい m でも機能すると考えられます. 一方, 時間発展演算子 $\exp(-iHt)$ や統計演算子 $\exp(-\beta H)$ の場合, H の全ての固有状態が混成します. 但し, 短時間の時間発展では, 時間発展する前の状態の性質が残っていると考えられます. この場合には DDMRG の原理が適用できる可能性があります. このような試みは, フェムト秒パルス光照射による強相関系の超高速ダイナミクスが精力的に研究されていることに刺激を受けてのことです [43]. 実験的には, 光励起後の非常に初期の応答や緩和現象を, 過渡反射スペクトルや磁気光学 Kerr 効果などのプローブで調べます. 特に, ピコ秒スケールの緩和過程におけるスピン自由度の役割を明らかにすることが主要な目的です. DMRG 計算としては, $|0\rangle, j^\dagger|0\rangle, |\tau\rangle \sim \exp(-iH\tau)j^\dagger|0\rangle$ などが混合アンサンブルの密度行列に対するターゲットとなります. 現状では計算精度が十分ではありませんが, 観測する電子系と環

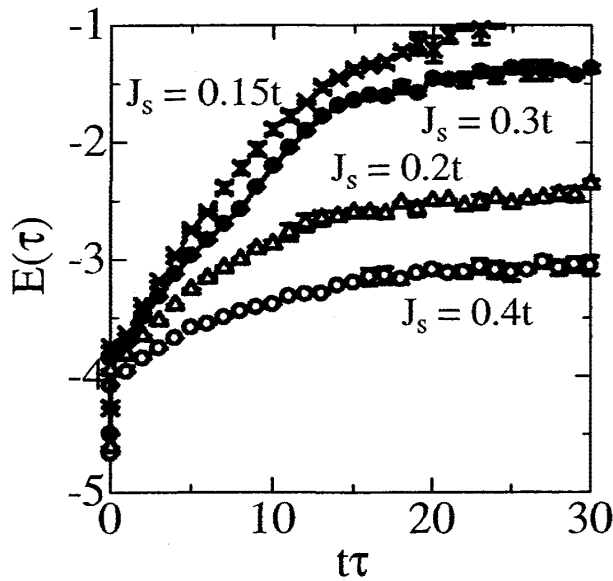


図 10: ペロブスカイト型マンガン酸化物において、電荷秩序相に光照射した後の t_{2g} スピン系のエネルギー変化 $E(\tau) = \langle \tau | \sum_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j | \tau \rangle$ のシミュレーション。光照射後に強磁性的な相関が誘起されること、それが相境界で顕著であることを示しています。

境を加えた系を直接扱って、仮想的な非平衡緩和過程が計算できるようになりつつあります (図 10) [44]。ここでも次元性とスピン・電荷分離或いは結合といった強相関固有の性質が議論の焦点となりそうです。

5 まとめ

強相関電子系ではエネルギースケールの異なった状態が密接に関わりあいを持っています。従って電子状態を詳細に理解する上で、様々な励起スペクトルを調べることは極めて重要です。本稿では DDMRG でスペクトルを計算する方法について紹介しました。ポイントは計算したい状態を密度行列にターゲットするということです。利点としては、Lanczos 法などの数値厳密対角化法と比較すると、5～10 倍程度大きなシステムを数値的厳密に計算できることです。これによってサイズ効果が抑えられ、無限系への外挿の精度が格段に向上します。また有限温度効果や系の時間発展など、Lanczos 法では計算の難しい物理量にも適用可能です。これは強相関電子系の研究手段としては極めて重要なことだと思います。その一方で、DDMRG による処方箋に上記ポイント以上の一般性はありません。問題に応じてどのようなターゲットが適切か物理的な考察が必要です。励起状態に関わる物理現象や実験手段は非常に多岐に渡っています。本稿を参考にされて、興味ある物理の研究成果が現れれば、著者としては非常に喜ばしいことです。

謝辞

本誌で取り上げた内容は、遠山貴己（京大基研）、前川禎通（東北大金研）、Nejat Bulut（東北大金研）、石原純夫（東北大院理）、安藤彰祐、金森悠（東北大院理）の諸氏との共同研究によるものです。日頃の議論に深く感謝致します。また柴田尚和氏（東北大院理）及び筒井健二氏（SPring-8）には対角化及び DMRG の技術的な部分に関して多くの助言を頂きました。この場を借りて感謝致します。

参考文献

- [1] S. Maekawa, T. Tohyama, S. E. Barnes, S. Ishihara, W. Koshibae, and G. Khaliullin, "Physics of Transition Metal Oxides", Springer (2004).
- [2] S. Uchida, T. Ido, H. Takagi, T. Arima, Y. Tokura, and S. Tajima, Phys. Rev. **B43** (1991) 7942.
- [3] C. Kim, A. Y. Matsuura, Z. X. Shen, N. Motoyama, H. Eisaki, S. Uchida, T. Tohyama, and S. Maekawa, Phys. Rev. Lett. **77** (1996) 4054; C. Kim, Z. X. Shen, N. Motoyama, H. Eisaki, S. Uchida, T. Tohyama, and S. Maekawa, Phys. Rev. **B56** (1997) 15589; B. J. Kim, H. Koh, E. Rotenberg, S.-J. Oh, H. Eisaki, N. Motoyama, S. Uchida, T. Tohyama, S. Maekawa, Z.-X. Shen, and C. Kim, Nat. Phys. **2** (2006) 397.
- [4] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. **A276** (1963) 238; **A277** (1964) 237; **A281** (1964) 401; A. Kawabata, Prog. Theor. Phys. **48** (1972) 1793.
- [5] P. Soven, Phys. Rev. **156** (1967) 809; D. W. Taylor, Phys. Rev. **156** (1967) 1017.
- [6] M. J. Rozenberg, X. Y. Zhang, and G. Kotliar, Phys. Rev. Lett. **69** (1992) 1236; A. Georges and G. Kotliar, Phys. Rev. **B45** (1992) 6479.
- [7] S. R. White, Phys. Rev. Lett. **69** (1992) 2863; Phys. Rev. **B48** (1993) 10345.
- [8] I. Peschel, X. Wang, M. Kaulke, and K. Hallberg, eds., "Density Matrix Renormalization: A New Numerical Method in Physics" (Springer, 1999).
- [9] N. Shibata, J. Phys. A: Math. Gen. **36** (2003) R381; N. Shibata and H. Tsunetsugu, J. Phys. Soc. Jpn. **68** (1999) 744, 3138.
- [10] K. Hallberg, Adv. Phys. **55** (2006) 477.

- [11] 成島 毅, 物性研究 **69-5** (1998) 702.
- [12] 夏目雄平・小川建吾・鈴木敏彦共著, 「計算物理学 III」(朝倉書店, 2002 年).
- [13] R. P. Feynman, "Statistical Mechanics: A Set of Lectures", W. A. Benjamin (1972).
- [14] J. A. Riera, Phys. Rev. **B43** (1991) 3681.
- [15] D. Poilblanc, Phys. Rev. **B44** (1991) 9562.
- [16] R. M. Noack and S. R. White, Phys. Rev. **B47** (1993) 9243.
- [17] K. Tsutsui, Y. Ohta, R. Eder, S. Maekawa, E. Dagotto, and J. Riera, Phys. Rev. Lett. **76** (1996) 279.
- [18] J. J. Sakurai, 「現代の量子力学 (上)」(吉岡書店, 1989 年).
- [19] Y. Kanamori, private communications.
- [20] T. D. Kühner and S. R. White, Phys. Rev. **B60** (1999) 335.
- [21] 森正武著「FORTRAN77 数値計算プログラミング 増補版」(岩波書店, 1987 年); 「共立数学講座 12 数値解析 第 2 版」(共立出版, 2002 年).
- [22] S. Ramasesha, J. Comput. Chem. **11** (1990) 545.
- [23] E. Jeckelmann, Phys. Rev. **B66** (2002) 045114.
- [24] E. Jeckelmann, private communications.
- [25] S. R. White, Phys. Rev. Lett. **77** (1996) 3633.
- [26] K. Hallberg, Phys. Rev. **B52** (1995) R9827.
- [27] S. S. Kancharla and C. J. Bolech, Phys. Rev. **B64** (2001) 085119.
- [28] M. A. Cazalilla and J. B. Marston, Phys. Rev. Lett. **88** (2002) 256403; **91** (2003) 049702.
- [29] S. R. White and A. E. Feiguin, Phys. Rev. Lett. **93** (2004) 076401; A. E. Feiguin and S. R. White, Phys. Rev. **B72** (2005) 020404(R).
- [30] S. R. White, Phys. Rev. **B72** (2005) 180403(R).
- [31] Y. Mizuno, K. Tsutsui, T. Tohyama, and S. Maekawa, Phys. Rev. **B62** (2000) R4769.

- [32] H. Matsueda, T. Tohyama, and S. Maekawa, Phys. Rev. **B70** (2004) 033102; **B71** (2005) 153106.
- [33] H. Matsueda, N. Bulut, T. Tohyama, and S. Maekawa, Phys. Rev. **B72** (2005) 075136; AIP conference proceedings, **816** (2006) 66; N. Bulut, H. Matsueda, T. Tohyama, and S. Maekawa, Phys. Rev. **B74** (2006) 113106.
- [34] E. Jeckelmann and S. R. White, Phys. Rev. **B57** (1998) 6376.
- [35] C. Zhang, E. Jeckelmann, and S. R. White, Phys. Rev. Lett. **80** (1998) 2661; Phys. Rev. **B60** (1999) 14092.
- [36] A. Weiße, H. Fehske, G. Wellein, and A. R. Bishop, Phys. Rev. **B62** (2000) R747.
- [37] Hui Zhao, C. Q. Wu, and H. Q. Lin, Phys. Rev. **B71** (2005) 115201.
- [38] V. Cataudella, G. De Filippis, F. Martone, and C. A. Perroni, Phys. Rev. **B70** (2004) 193105; G. De. Filippis, V. Cataudella, V. Marigliano Ramaglia, and C. A. Perroni, Phys. Rev. **B72** (2005) 014307.
- [39] A. S. Mishchenko and N. Nagaosa, Phys. Rev. Lett. **93** (2004) 036402.
- [40] O. Rösch and O. Gunnarsson, Phys. Rev. Lett. **92** (2004) 146403; Phys. Rev. **B70** (2004) 224518.
- [41] H. Matsueda, T. Tohyama, and S. Maekawa, Phys. Rev. **B74** (2006) 241103(R); J. Magn. Magn. Mater., **310** (2007) 975.
- [42] K. Tsutsui, T. Tohyama, and S. Maekawa, Physica **C392** (2003) 199; J. Low. Temp. Phys. **131** (2003) 257.
- [43] M. Kuwata-Gonokami and S. Koshihara, eds., "SPECIAL TOPICS Photo-Induced Phase Transitions and their Dynamics", J. Phys. Soc. Jpn. **75** (2006) 011001-011008.
- [44] H. Matsueda and S. Ishihara, cond-mat/0612540, to be published to J. Phys. Soc. Jpn. **76** (2007).