

密度行列繰り込み群

西野友年, 日永田泰啓, 奥西巧一²⁾

〒 657-8501 神戸市灘区六甲台町 1-1 神戸大学理学部物理学科,
 2) 〒 565-0871 大阪府吹田市山田丘 2-1 大阪大学工学部応用物理学科
 (Received)

多粒子系の基底状態や素励起を観察したければ, 理論武装するの唯一法ですが, ともかく系のハミルトニアンを計算機で対角化して, まずは物理現象を目前で観察するのも賢明な選択肢です. しかし相手は天文学的な自由度を持つ問題だけに, 数値的対角化を適用できる系のサイズには強い制限があります. 約 10 年前のこと, S.R. White はこの制限をアツと驚く密度行列の使用法により取り払いました. 密度行列を介して出現頻度の低い状態を無視することによって, 系の物理的性質を高い精度で保ちつつ数値計算で取り扱うべき自由度を劇的に減らして見せたのです. この方法は密度行列繰り込み群と呼ばれ, 多粒子系の数値実験的解析に活躍しています.

§1. はじめに

物理の世界に入門すると, まず 1 体問題を学習し, 続いて 2 体問題を学習し, 次は 3 体問題を... と意気込んだ瞬間に 紙と鉛筆では解けません と宣告されます. そして 3 個以上の質点を扱うことは, 至難の題材として多体問題と称されることを知ります. 物理学者は数をひとつ, ふたつ, いっぱい ($N \geq 3$) と数える! と言われるのは無理ありません. ところが, 世の中そう甘くはなくて, ありふれた水分子 H_2O ですら 8 個もの電子を含んでいます. どないしてくれる ~! と叫びたいところですが, 幸いにも現代に生きる我々には超強力な味方がついてます. 紙と鉛筆よりもずっと高速かつ大容量なコンピューターが.

但し, いかに強力なコンピューターを駆使しても, 多粒子系の自由度を余すことなく完全に, 隅から隅まで取り扱おうと試みると, たちどころに容量オーバーしてしまいます. 例えば, 分子 1 個だけについて何らかの数値解析を行うにしても, 無限個ある励起状態を全ては取り扱えません. 高エネルギー励起は無視してしまうのが普通でしょう. このように計算結果にあまり影響のない自由度は捨てられるだけ捨てて, 重要な自由度のみをコンピューターの容量と速度が許す限り考慮する, これが多粒子系の量子状態を数値解析するための秘訣です. 計算対象の物理系をできるだけ損なわないようにコンピューターに圧縮して詰め込む, と言い換えても良いでしょう. 不要な自由度は捨て, 重要な自由度のみ残す とは, どこかで聞いたフレーズではありませんか? そう, 繰り込み群の思想そのものです. 多体問題の数値解析は, ほとんどの場合, 繰り込み群的な発想を暗黙の内に使用していると言っても過言ではないでしょう.

さて 1992 年に S.R. White が, それほど高価ではないワークステーションを用いて解析して見せたものは, それ以前の常識では想像もつかない, 途方もなく多自由度な系でした. 100 サイトを越える $S = 1$ 反強磁性ハイゼンベルグ模型について, 基底状態の相関関数と素励起エネルギーを高い精度で求めてみせたのです.¹⁾ これは, 1 次元量子スピン系の数値解析において画期的進歩でした. これがなぜ偉業なのでしょう? 磁性体の交換相互作用を記述するハイゼンベルグ模型のハミルトニアンは, スピン演算子

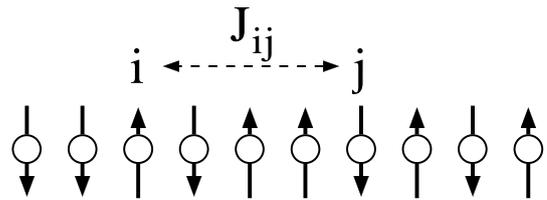


Fig. 1. 1 次元ハイゼンベルグ・スピン系. i 番目のスピンと j 番目のスピンは J_{ij} の強さの交換相互作用を持つ. (式 (1))

S_i を用いて

$$H = \sum_{ij} J_{ij} S_i \cdot S_j \quad (1.1)$$

と記述されます. ここで J_{ij} は図 1 に示すように距離に依存した相互作用定数で, 通常は i -サイトと j -サイトが離れるに従って急速に減衰します. H はこんなに単純な式なのですが, その行列次元は巨大なものです. 状態数の一番少ない $S = 1/2$ の場合ですら, 各スピンは上向き又は下向きの 2 状態を取り得ますから, スピンがたった 100 個並んでいるだけで, H の行列次元は $2^{100} \approx 10^{30}$ 次元, 行列要素の数はその 2 乗ですから 10^{60} 個というトンデモナイものになってしまいます. コンピューターの最大メモリー容量は, 現在せいぜい 1 テラバイト程度, 頑張っても 10^{12} 個の要素しか格納できませんから, 100 個ものスピンを含む系をまともに取り扱えるはずがないのです. ちなみに, White 以前の世界記録は 36 サイト程度でした.

このような多自由度系を相手にする為に, White は新しい自由度圧縮方法を計算物理の世界に導入しました: 密度行列繰り込み群 という名で呼ばれている強力な計算技法です.²⁾ そのおおまかな骨組みは

- 巨大な行列であるハミルトニアン H を, 繰り込み群変換 $\tilde{H} = \hat{T} H \hat{T}^*$ (但し \hat{T} は変換行列, \hat{T}^* はその共役) によって, 計算機で取り扱える行列次元まで落とす. そして \tilde{H} を対角化することによって, 系の基底状態や素励起など, 特に求めたい幾つかの固有状態を求める. [自由度圧縮]
- 繰り込み群変換 \hat{T} は (a) で求めようとしている幾つかの固有状態を精密に近似できるように, 重要な自由度のみ拾い, 残りの自由度を捨てるように決定する. [ターゲット]

という2つの柱から構成されています。(a)は昔から知られている実空間繰り込み群の処方そのものですから、特に目新しいことはないのですが、(b)はとても新鮮です。固有状態を知っていれば、それをういて繰り込み群変換 \hat{T} を得ることができるという、先に答えをカンニングするような逆転の発想だからです。(先に答えの存在を仮定する発想は、X線CTやMRIなど断層撮影のイメージングに似通っていますね?)モデルの詳細によらずにどんな物理系にも応用できるという密度行列繰り込み群の汎用性も(b)に起因しています。この記事の前半(2-4章)では、密度行列繰り込み群の本質である求めたい固有状態から繰り込み群変換 \hat{T} を得る考え方について解説します。

本稿の後半(5章)では、密度行列繰り込み群の応用範囲がどのように広がりがつつあるのか、最近の進展について紹介します。^{2,3)}前半を読んでいて眠たくなったら、後半に飛んで下さい。当初は1次元量子多体系の基底状態を求める数値計算法として登場した密度行列繰り込み群ですが、その後2次元古典系および1次元有限温度量子系の熱力学関数の計算や動的相関関数の解析などに応用され、最近では2次元量子系や3次元古典系など高次元格子系、更には3次元自由空間での量子化学計算への応用も進みつつあります。²⁾

§2. 密度行列を介した1体近似と自由度圧縮

密度行列繰り込み群という一風変わった名称は、この方法が系の密度行列を介して量子状態の自由度圧縮を行うことに由来しています。このような密度行列の使い方は、密度行列繰り込み群に限ったものではなく、ずいぶん昔から用いられていました。例えば、物性物理や量子化学には欠かせない1電子軌道というものを、相互作用している多電子状態から導き出す作業に1電子密度行列が登場します。密度行列の取り扱いに慣れる目的で、まずはこの例について考察してみましょう。

ある1個の原子又は分子の基底状態が厳密にわかっていると仮定したうえで、それより導かれるべき1電子軌道を教科書的に $\phi_1(x), \phi_2(x), \phi_3(x), \dots$ と書き表しましょう。以下の説明を単純にする為に、分子中の電子総数を N とし、 \uparrow スピン電子と \downarrow スピン電子は同数 $M = N/2$ であると仮定しましょう。通常は、軌道エネルギーの低い方から M 個の軌道 $\phi_1(x), \dots, \phi_M(x)$ は電子によりほぼ占有されていて、それより上の軌道 $\phi_{M+1}(x), \phi_{M+2}(x), \dots$ はほぼ空です。この状況をフェルミ演算子

$$\hat{c}_{\ell\sigma} \equiv \int \phi_{\ell}^*(x) \hat{c}_{\sigma}(x) dx \quad (2.1)$$

により整理すると、はじめの M 個の軌道の占拠数 $\langle \hat{n}_{1\sigma} \rangle = \langle \hat{c}_{1\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{1\sigma} \rangle, \langle \hat{n}_{2\sigma} \rangle, \dots, \langle \hat{n}_{M\sigma} \rangle$ が1に近く、それ以外の $\langle \hat{n}_{M+1\sigma} \rangle, \langle \hat{n}_{M+2\sigma} \rangle, \dots$ がほぼ0であるということになります。さて、ここで問題です、軌道 $\phi_{\ell}(x)$ はどうやって定めるのでしょうか?

電子同士はクーロン相互作用に起因する相関を持っていますから、 N 電子状態から1電子軌道 $\phi_{\ell}(x)$ を引き出すには何かしら工夫が必要です。ここでは、ほぼ占拠された軌道からまず探すという直感的方法で3次元空間中の関数 $\phi_{\ell}(x)$ を探してみましょう。お待たせしました、ここで(ゼロ温度の)1電子密度行列⁴⁾

$$\begin{aligned} \rho_{\sigma}(x, x') &= \text{Tr} \left\{ \hat{c}_{\sigma}(x) |N\rangle \langle N| \hat{c}_{\sigma}^{\dagger}(x') \right\} \\ &= \langle N | \hat{c}_{\sigma}^{\dagger}(x') \hat{c}_{\sigma}(x) |N\rangle \end{aligned} \quad (2.2)$$

が登場します。右辺に出て来る $|N\rangle$ は電子相関を完全に取り込んだ、厳密な N 電子状態を示します。

天下り式に結論から先に言ってしまうと $\rho_{\sigma}(x, x')$ を対角化して、その固有ベクトルに対応する固有値 λ_{ℓ} の大きな順に、求める1電子軌道 $\phi_{\ell}(x)$ と見なしてしまえば、一気に全ての軌道を求められます。なぜならば $\rho_{\sigma}(x, x')$ の対角表現

$$\rho_{\sigma}(x, x') = \sum_{\ell} \phi_{\ell}(x) \lambda_{\ell} \phi_{\ell}^*(x') \quad (2.3)$$

(但し $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots$) を $\rho_{\sigma}(x, x')$ の定義式(3)の左辺に代入し、次いで $\phi_{\ell}^*(x) \phi_{\ell}(x')$ を両辺にかけて積分すると

$$\begin{aligned} \int \langle N | \hat{c}_{\sigma}^{\dagger}(x') \phi_{\ell}(x') \phi_{\ell}^*(x) \hat{c}_{\sigma}(x) |N\rangle dx dx' \\ = \langle N | \hat{c}_{\ell\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\ell\sigma} |N\rangle = \langle \hat{n}_{\ell\sigma} \rangle = \lambda_{\ell} \end{aligned} \quad (2.4)$$

ですから $\rho_{\sigma}(x, x')$ の固有ベクトル $\phi_1(x)$ が最大の占拠数 λ_1 を持つ1粒子状態で、 $\phi_2(x)$ は $\phi_1(x)$ に直交して次に良く占拠された状態、etc. ということが明らかだからです。相関を持つ N 電子状態より1電子軌道 $\phi_{\ell}(x)$ を無理なく引き出せましたね?! (ちなみに $|N\rangle$ が単一のスレーター行列式で与えられる無相関な場合は、 $\lambda_1 = \lambda_2 = \dots = \lambda_M = 1, \lambda_{\ell > M} = 0$ となります。)

ところで、ある ℓ 番目の軌道がほぼ占有されている場合は $\lambda_{\ell} \sim 1$ ですから、次式

$$|N\rangle = \hat{c}_{\ell\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\ell\sigma} |N\rangle + \hat{c}_{\ell\sigma} \hat{c}_{\ell\sigma}^{\dagger} |N\rangle \quad (2.5)$$

の右辺第二項を無視して、第一項 $\hat{c}_{\ell\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\ell\sigma} |N\rangle$ を $|N\rangle$ の良い近似と考えることが可能です。 $\hat{c}_{\ell\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\ell\sigma} |N\rangle$ の自由度は、第二項を捨てた分だけ最初に与えられた状態 $|N\rangle$ の自由度よりも少ないですから、 $\hat{n}_{\ell\sigma}$ の $|N\rangle$ への作用を自由度圧縮操作とみなしても良いでしょう。この作業では N 体系 $|N\rangle$ をある軌道 $\phi_{\ell}(x)$ と、それ以外の部分に分けて考えていることを頭の隅に置いておいて下さい。 $\ell \leq M = N/2$ の軌道全てについて、この自由度圧縮を反復して行えば、最終的には1個のスレーター行列式

$$\hat{n}_{1\uparrow} \hat{n}_{1\downarrow} \dots \hat{n}_{M\uparrow} \hat{n}_{M\downarrow} |N\rangle \propto \hat{c}_{1\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{1\downarrow}^{\dagger} \dots \hat{c}_{M\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{M\downarrow}^{\dagger} |0\rangle \quad (2.6)$$

にたどり着きます。 N 電子状態を、わずか一個のスレーター行列式に置き換えて考えるハートリー・フォック近似の背景には、このような1電子密度行列 $\rho_{\sigma}(x, x')$ の対角化を介した自由度圧縮があるわけですが、この状況は次に示す密度行列繰り込み群の自由度圧縮にも受け継がれています。

§3. 密度行列を介した多自由度系の圧縮

密度行列繰り込み群は、与えられた量子多体系について基底状態や低エネルギー状態など、物理的に面白そうな幾つかの状態に白羽の矢を立てて、それらを選択的に精密計算する手法です。逆に、それ以外の状態については目もくれません。基底状態は物理的にとりわけ関心が高い状態ですから、これからは系の基底状態に白羽の矢を立てる場合について考えて行きます。業界用語ではこれを基底状態をターゲットすると表現します。

前章の式(6)-(7)では、電子状態をたった1個のスレーター行列式にまで圧縮する1体近似を考えましたが、これでは自由度が制限されすぎていて、電子相関が強い場合には良い近似とは言えません。そこで White は、密度行列の構成法を修正して、多粒子状態を(1体近似することな

く) 多粒子状態のまま圧縮する方法をあみ出しました。

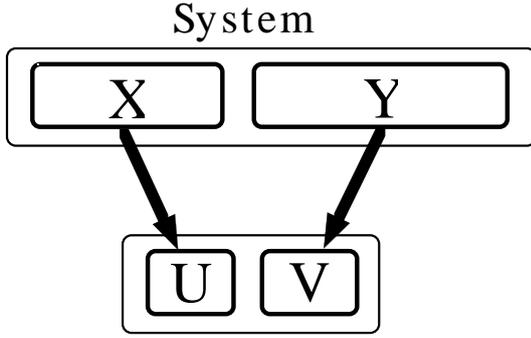


Fig. 2. 系の分割と圧縮. (式 (8), (18))

密度行列繰り込み群で用いられる形の密度行列を説明する準備として、まず図 2 の上部に示すように系を注目する部分 X とそれ以外の部分 Y に分割しましょう。例えば系を右半分と左半分に分けたり、原子の電子状態を内殻と外殻に分けたり、6 原子分子を 2 原子と 4 原子に分けて考えることなどが、この分割に相当しています。部分系 X の自由度を x 、 Y の自由度を y と書き表わすことにすれば、基底状態は波動関数 $\Psi(x, y)$ により

$$|\Psi\rangle = \sum_{xy} \Psi(x, y) |x\rangle |y\rangle \quad (3.1)$$

と表されます。 x と y が、座標のような連続自由度である場合は \sum_{xy} を積分 $\int dx dy$ に置き換えて下さい。

密度行列繰り込み群の特異な点は、全系のハミルトニアン H を対角化して基底状態 $|\Psi\rangle$ を求めようとする以前に、まず $|\Psi\rangle$ をなるべく少ない自由度を使って精密近似する方法から考え始めることです。その第一歩は、部分系 X に目をつけて出現頻度の高い状態を探し、頻度の低い状態を捨て去ることです。このように部分 X だけに注目する場合、波動関数 $\Psi(x, y)$ から Y の自由度 y を消去 (トレースアウト) して、 X のみについての密度行列

$$\rho_X(x, x') = \sum_y \Psi(x, y) \Psi^*(x', y) \quad (3.2)$$

を考えるのが妥当です。⁴⁾ このように定義された $\rho_X(x, x')$ は Y を通じた X から X への静的な自己応答に関する情報を持っています。前章にならって密度行列 ρ_X を対角化し、固有値 λ_ℓ と固有ベクトル U_ℓ を求めてみましょう。

$$\rho_X(x, x') = \sum_\ell U_\ell(x) \lambda_\ell U_\ell^*(x') \quad (3.3)$$

固有値 λ_ℓ は次式より正又はゼロであることがわかります。

$$\begin{aligned} \lambda_\ell &= \sum_{xx'} U_\ell^*(x) \rho_X(x, x') U_\ell(x') \\ &= \sum_y \left| \sum_x U_\ell^*(x) \Psi(x, y) \right|^2 \end{aligned} \quad (3.4)$$

固有ベクトル U_ℓ を用いて部分系 X の状態 $|x\rangle$ の線形結合 $|U_\ell\rangle = \sum_x U_\ell(x) |x\rangle$ を作ると、

$$\langle \Psi | \left(\sum_y |U_\ell\rangle |y\rangle \langle y| \langle U_\ell| \right) | \Psi \rangle = \lambda_\ell \quad (3.5)$$

が成立しますから、 λ_ℓ は $\Psi(x, y)$ で与えられる純粋状態についての $|U_\ell\rangle$ の出現確率になっています。 $|\Psi\rangle \langle \Psi|$ は純粋状態なのですが、系の一部分 X だけに目をつければ、混合状態に見えるわけです。式 (4) と式 (10) を比べてみるとわかる通り、前章の $\phi_\ell(x)$ は $U_\ell(x)$ の一例です。

これ以後 λ_ℓ を大きな順番に並べましょう。経験的に λ_ℓ は ℓ に対して指数関数的にゼロに収束することが知られていますので、^{1,2)} 大きい方から m 個の固有値の和 $\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_m$ は、 m が充分大きければ残りの合計 $\sum_{\ell > m} \lambda_\ell$ よりずっと大きくなります。このとき $|U_1\rangle, \dots, |U_m\rangle$ が部分系 X の性質を記述するのに主要な役割を果たす状態なので、それ以外の出現確率の低い状態 $|U_{m+1}\rangle, |U_{m+2}\rangle, \dots$ を無視しても良いでしょう。このような $U_\ell(x)$ (但し $1 \leq \ell \leq m$) による射影変換 $\{\text{全ての } |x\rangle\} \rightarrow \{|U_1\rangle, \dots, |U_m\rangle\}$ を \hat{U} と書きましょう。部分系 X に \hat{U} を作用させると、自由度が m にまで落ちるわけですから、変換 \hat{U} は繰り込み群変換の一種とみなせます。

少しだけ脱線して繰り込み群変換という用語について、注釈しておきます。 \hat{U} による変換は、その計算手順が従来から知られている実空間繰り込み群と同じなので繰り込み群変換という名称で呼ばれていますが、より実質的な意味においてウィルソンの繰り込み群と直接関係しているかどうかについては、まだ良くわかっていません。以下で繰り込み群変換という用語を何度も用いますが、それは不可逆な線形変換 (\sim 射影変換) という意味で使っていると解釈した方が安全でしょう。

他方、全系から X を除いた残りの部分 Y についての密度行列は、式 (9) と同様に

$$\rho_Y(y, y') = \sum_x \Psi(x, y) \Psi^*(x, y') \quad (3.6)$$

で与えられます。いま、天下一りに $\lambda_\ell \neq 0$ を満たす ℓ について

$$V_\ell(y) = \sum_x \Psi(x, y) U_\ell^*(x) \lambda_\ell^{-1/2} \quad (3.7)$$

を導入すると、ベクトル V_ℓ は式 (9)-(10) より規格直交条件 $\sum_y V_\ell^*(y) V_{\ell'}(y) = \delta_{\ell, \ell'}$ を満たします。また、 ρ_Y を V_ℓ に作用させると

$$\begin{aligned} &\sum_{y'} \rho_Y(y, y') V_\ell(y') \\ &= \sum_{xx'y'} \Psi(x', y) \Psi^*(x', y') \Psi(x, y') U_\ell^*(x) \lambda_\ell^{-1/2} \\ &= \sum_{xx'} \Psi(x', y) \rho_X^*(x', x) U_\ell^*(x) \lambda_\ell^{-1/2} \\ &= \sum_{x'} \Psi(x', y) \lambda_\ell U_\ell^*(x') \lambda_\ell^{-1/2} \end{aligned} \quad (3.8)$$

が成立しますから、 V_ℓ は固有値 λ_ℓ を持つ ρ_Y の固有ベクトルであることがわかります。あまり自明なことでは無いのですが、 ρ_X と ρ_Y の非ゼロ固有値は一致するのです。

部分系 X で繰り込み群変換を与えたのと同様に、 ρ_Y の固有ベクトル V_ℓ を用いて $|V_\ell\rangle = \sum_y V_\ell(y) |y\rangle$ を通じて Y についての繰り込み群変換 $\hat{V} : \{\text{全ての } |y\rangle\} \rightarrow \{|V_1\rangle, \dots, |V_m\rangle\}$ を得ることができます。さて、繰り込み群変換 \hat{U} と \hat{V} を、同時に状態 $|\Psi\rangle$ に作用させて、繰り込まれた状態 $|\tilde{\Psi}\rangle = \hat{V}\hat{U}|\Psi\rangle$ を求めてみましょう。これを要

素で表現すると

$$\begin{aligned} |\tilde{\Psi}\rangle &= \sum_{\ell\ell'=1}^m \left(|U_\ell\rangle |V_{\ell'}\rangle \langle V_{\ell'}| \langle U_\ell| \right) |\Psi\rangle \\ &= \sum_{\ell\ell'=1}^m \left(\sum_{xy} V_{\ell'}^*(y) U_\ell^*(x) \Psi(x, y) \right) |U_\ell\rangle |V_{\ell'}\rangle \end{aligned} \quad (3.9)$$

と射影変換の形に書けるのですが、式 (14) の右辺を代入すると

$$\sum_{xy} V_{\ell'}^*(y) U_\ell^*(x) \Psi(x, y) = \lambda_\ell^{1/2} \sum_y V_{\ell'}^*(y) V_\ell(y), \quad (3.10)$$

つまり式 (16) の右辺で残るのは $\ell = \ell'$ の項だけで、

$$|\tilde{\Psi}\rangle = \sum_{\ell=1}^m \lambda_\ell^{1/2} |U_\ell\rangle |V_\ell\rangle \quad (3.11)$$

という単純な形に帰着します。(図 2 下部) まとめて、 $|\Psi\rangle$ の部分系 X と Y について、同時に自由度を m にまで落として圧縮したものが $|\tilde{\Psi}\rangle$ なのです。 $m = 1$ の場合、 $|\Psi\rangle$ から $|\tilde{\Psi}\rangle$ への圧縮は 1 体近似のようなもので、 m を増やせば増やすほど、近似の精度がどんどん向上して行きます。通常は、数値解析に用いる計算機の容量に応じて m を数十から数百に設定します。

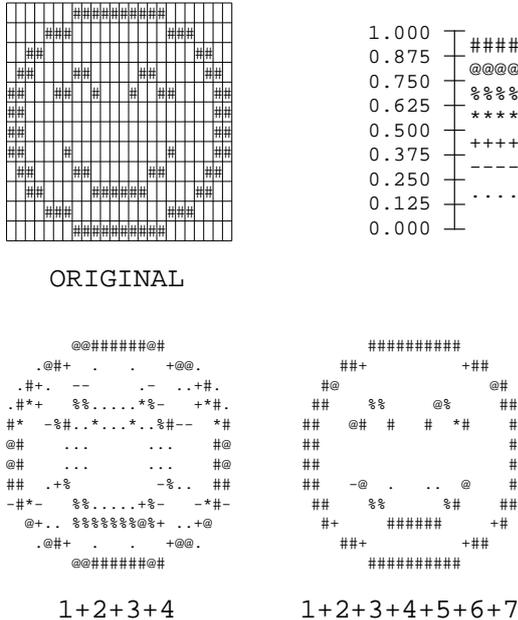


Fig. 3. 圧縮された 2 次元画像の復元. (式 (18))

自由度 m がかなり小さな場合でも $|\tilde{\Psi}\rangle$ が $|\Psi\rangle$ の良い近似になっているのが式 (18) の形に状態を自由度圧縮することの利点なのですが、疑われる方も居るでしょう。そこで百聞は一見にしかずと言えりような例をお見せしましょう。図 3 は X 方向に 24、Y 方向に 12 のマス目の中に 0 と 1 で描かれた 2 次元画像です。これを格子点上の波動関数 $\Psi(x, y)$ (但し $1 \leq x \leq 24, 1 \leq y \leq 12$) と見立て、式 (9)-(18) により自由度圧縮します。繰り込まれた状態 $|\tilde{\Psi}\rangle$ から元の波動関数を

$$\tilde{\Psi}(x, y) \equiv \langle x, y | \tilde{\Psi} \rangle$$

$$= \sum_{\ell=1}^m \lambda_\ell^{1/2} U_\ell(x) V_\ell(y) \quad (3.12)$$

により近似的に復元することができるのですが、12 個ある $\lambda_\ell^{1/2}$ から、はたして何個を採択すれば元の画像が見えて来るのでしょうか？ 結果は $m = 4$ くらいで原画像の判別が可能になり、 $m = 7$ まで取るとほぼ原画像を復元しています。

画像を持ち出したのは単なる例え話ではなくて、もともと実空間繰り込み群というものは画像圧縮の兄弟のようなものなのです。両者ともに、なるべく少ない情報量で、なるべく忠実に対象を記憶・再現するという目的のために自然発生的に得られたものですから。

§4. 密度行列繰り込み群の計算手順

前章では基底波動関数 $\Psi(x, y)$ が既知であることを仮定して、その自由度を m にまで圧縮する方法を考えました。もちろん、 $\Psi(x, y)$ の精密近似を求めることが数値計算の最終目的ですから、そんなものが最初からわかっていたら苦労しません。では密度行列繰り込み群は、どのような手法を使って基底状態を求めるのでしょうか？

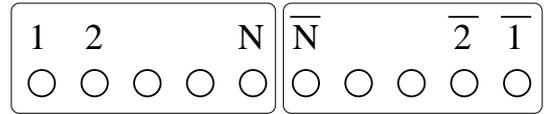


Fig. 4. 系の分割を反映したスピンの番号づけ. (式 (20))

一例として、1 次元ハイゼンベルグ・スピン系の基底波動関数を求める手順を見て行きましょう。系のハミルトニアンは、式 (1) の通りですが、議論をより簡単にする為に、交換相互作用定数を最近接スピン間に限定します： $J_{ij} = \delta_{i+1, j}$ 。また、スピンの大きさ $|S_i|$ は $1/2$ であるとしましょう。これらの条件の下で、長さ (= 格子点数) が $2N$ のスピン鎖を考え、図 4 に示すように左から N 個のスピンを部分系 X とみなして S_1, S_2, \dots, S_N と番号付けし、中央から右端にかけての残りの N 個を部分系 Y とみなして $S_{\bar{N}}, S_{\bar{N}-1}, \dots, S_{\bar{1}}$ と番号付けします。ついでにハミルトニアンも左右に分割した形で表しておきましょう：

$$\begin{aligned} H_{2N} &= \sum_{\ell=1}^{N-1} S_\ell \cdot S_{\ell+1} + S_N \cdot S_{\bar{N}} + \sum_{\ell=1}^{N-1} S_{\bar{\ell+1}} \cdot S_{\bar{\ell}} \\ &= h_N^X + S_N \cdot S_{\bar{N}} + h_N^Y. \end{aligned} \quad (4.1)$$

h_N^X は状態 $|x\rangle \equiv |S_1^Z \dots S_N^Z\rangle$ の線形結合に作用する 2^N 次元の演算子、 h_N^Y も同様に $|y\rangle \equiv |S_{\bar{N}}^Z \dots S_{\bar{1}}^Z\rangle$ の線形結合に作用する演算子です。記号が煩雑になって来ましたが、これからは各スピンの Z 成分を S_i という風に上付き添字 Z を取り去って表しましょう： $|x\rangle \equiv |S_1 \dots S_N\rangle$, $|y\rangle \equiv |S_{\bar{N}} \dots S_{\bar{1}}\rangle$ 、ちょっとスッキリしましたね。

任意のシステム・サイズ $2N$ について、ハミルトニアン H_{2N} の基底固有ベクトル Ψ_{2N} の精密な近似を求めることが最終目的なのですが、通常は $2N = 4$ から計算を開始します。(但し、以下の数式は一般性を失わないように、系のサイズを $2N$ と表記します。) $2N = 4$ の場合、 H_{2N} は $2^4 = 16$ 次元の行列ですから、固有方程式 $H_{2N} \Psi_{2N} = E_{2N}^0 \Psi_{2N}$ を満たす基底波動関数 $\Psi_{2N}(x, y) \equiv \Psi_{2N}(S_1 \dots S_N, S_{\bar{N}} \dots S_{\bar{1}})$ を難なく数値的に求められ

ます。これを式 (9) および式 (13) に代入すれば、密度行列

$$\begin{aligned}\rho_X(x, x') &\equiv \rho_X(S_1 \dots S_N, S'_1 \dots S'_N) \\ \rho_Y(y, y') &\equiv \rho_Y(S_{\bar{N}} \dots S_{\bar{1}}, S'_{\bar{N}} \dots S'_{\bar{1}})\end{aligned}\quad (4.2)$$

を算出できます。次に ρ_X を式 (10) の通り対角化することによって、固有ベクトル $U_\ell(x) \equiv U_\ell(S_1 \dots S_N)$ を固有値 λ_ℓ の大きな順に求めます。 ρ_Y の固有ベクトル $V_\ell(x) \equiv V_\ell(S_{\bar{N}} \dots S_{\bar{1}})$ は、式 (14) は使わずに、 ρ_Y を直接対角化することによって求めます。何故ならば式 (14) は λ_ℓ が小さな時に数値的に不安定だからです。こうして、繰り込み群変換

$$\begin{aligned}\hat{U} &: \{ \text{全ての } |S_1 \dots S_N\rangle \} \{ |U_1\rangle, \dots, |U_m\rangle \} \\ \hat{V} &: \{ \text{全ての } |S_{\bar{N}} \dots S_{\bar{1}}\rangle \} \{ |V_1\rangle, \dots, |V_m\rangle \}\end{aligned}\quad (4.3)$$

を得ることができました。残す状態の数 m の決定方法については、後程説明します。

密度行列繰り込み群の手品は、こうして得られた変換 $\hat{T} = \hat{V}\hat{U}$ を式 (20) の H_{2N} に作用させるのではなく、サイズ $2N+2$ の系のハミルトニアン H_{2N+2} に作用させる点にあります。そんなこと不可能やないか! そもそも H_{2N+2} は H_{2N} とは行列次元が違うやないか!! と思われるかもしれませんが、そのこの所は次のようにクリアします。まず H_{2N+2} に含まれる h_{N+1}^X は、 H_{2N} に含まれる h_N^X (式 (20)) を 1 サイト伸ばした形

$$h_{N+1}^X = h_N^X + S_N \cdot S_{N+1}\quad (4.4)$$

で表されますね。この h_{N+1}^X の行列要素を記号 $x \equiv S_1 \dots S_N$ を用いて $h_{N+1}^X(x S_{N+1}, x' S'_{N+1})$ と書くと、繰り込み群変換 \hat{U} の h_{N+1}^X への作用 $\tilde{h}_{N+1}^X = \hat{U} h_{N+1}^X \hat{U}^*$ を

$$\begin{aligned}\tilde{h}_{N+1}^X(\ell S_{N+1}, \ell' S'_{N+1}) \\ = \sum_{xx'} U_\ell^*(x) h_{N+1}^X(x S_{N+1}, x' S'_{N+1}) U_{\ell'}(x')\end{aligned}\quad (4.5)$$

と自然に定義することができます。 ℓ は m 以下でしたから、 \tilde{h}_{N+1}^X は $2m$ 次元になっています。全く同様に部分系 Y についても $\tilde{h}_{N+1}^Y = \hat{V} h_{N+1}^Y \hat{V}^*$ が定義できて、結局のところ変換 \hat{T} の H_{2N+2} への作用は

$$\begin{aligned}\tilde{H}_{2N+2} &= \hat{T} H_{2N+2} \hat{T}^* \\ &= \tilde{h}_{N+1}^X + S_{N+1} \cdot S_{N+1} + \tilde{h}_{N+1}^Y\end{aligned}\quad (4.6)$$

と書き下せます。かくして H_{2N} を数値対角化した情報を使って、 H_{2N+2} を $4m^2$ 次元行列 \tilde{H}_{2N+2} に圧縮できました。

そういえば、残すべき代表的状態の数 m を決定する方法が宿題として残っていました。図 3 で観察したように、 m を大きくすればする程、繰り込み群変換は正確になります。他方、計算機で (ランチョス法により) 対角化できる行列次元には限度 D_{\max} があります。相反する条件ですが、そこは妥協して m を次のように決定します。

- H_{2N+2} の行列次元 $D\{H_{2N+2}\}$ が D_{\max} 以下であれば m を $D\{h_N^X\} = D\{h_N^Y\}$ に一致させる。この場合、一つも状態を無視しないので、明らかに $\hat{T}\hat{T}^* = \hat{T}^*\hat{T} = 1$ 。
- $D\{H_{2N+2}\}$ が D_{\max} を超えていたら $4m^2 \leq D_{\max}$ となるように $m \leq \sqrt{D_{\max}}/2$ とする。その結果、 \tilde{H}_{2N+2} は対角化可能となる。

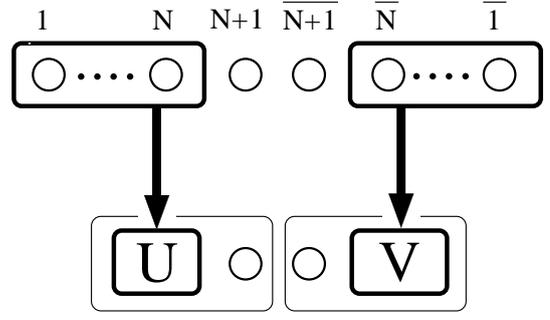


Fig. 5. 繰り込み群変換の作用. (式 (23)-(25))

勘のいい皆様は、もうお気づきと思いますがひとつ N をズラして繰り込み群変換を作用させる手品は、何度でもくり返し使えます。つまり \tilde{H}_{2N+2} を数値対角化した固有ベクトル $\tilde{\Psi}_{2N+2}(\ell S_{N+1}, S_{N+1} \bar{\ell})$ より新たに繰り込み群変換を求め、今度は図 5 下側に示したように $|x\rangle \equiv |\ell\rangle |S_{N+1}\rangle$, $|y\rangle \equiv |S_{N+1}\rangle |\bar{\ell}\rangle$ と系を X_{new} と Y_{new} に分割して密度行列 ρ_X および ρ_Y を作り、それらを対角化して繰り込み群変換 $U_n(\ell S_{N+1})$ と $V_{\bar{n}}(S_{N+1} \bar{\ell})$ を得て、部分系の拡大

$$\bar{h}_{N+2}^X = \tilde{h}_{N+1}^X + S_{N+1} \cdot S_{N+2}\quad (4.7)$$

(\bar{h}_{N+2}^Y についても同様) と繰り込み群変換

$$\begin{aligned}\tilde{h}_{N+2}^X(n S_{N+2}, n' S'_{N+2}) \\ = \sum_{xx'} U_n^*(x) \bar{h}_{N+2}^X(x S_{N+2}, x' S'_{N+2}) U_{n'}(x')\end{aligned}\quad (4.8)$$

(\tilde{h}_{N+2}^Y についても同様) を通じて、式 (25) の N を一つ増やした形で \tilde{H}_{2N+4} を得るのです。この \tilde{H}_{2N+4} もまた D_{\max} 次元以下の、数値的対角化可能な行列ですから.... 以下同様。まとめると、系のサイズを 2 だけ増やすこと (伸展) と、繰り込み群変換 \hat{T} を作用させること (圧縮) をくり返しなが、繰り込まれたハミルトニアン \tilde{H}_{2N} , \tilde{H}_{2N+2} , \tilde{H}_{2N+4}, \dots が常に D_{\max} 次元以下になるようにコントロールしているのです^{1,2)} スピンを増やしては、情報圧縮する、また増やしては圧縮、まるでゴミ箱に紙屑を入れては足で踏み固めることの反復のようですね。

以上の反復計算を続けることによって、(相関長よりも) 大きなサイズの系のサイト当たりのエネルギーなど、系の示量変数を得ることができます; この計算法は無限サイズ法と呼ばれていて、その名称には $2N$ サイトの系から得られた繰り込み群変換 \hat{T} を、 $2N+2$ サイトの系に適用するというインチキは、 $2N \rightarrow \infty$ の極限でのみ正当化されるという意味がこめられています。では密度行列繰り込み群はサイズが無限の系にしか適用出来ないのか? というと、実は有限サイズ法という計算法があって、有限の大きさの系について、ターゲットした状態を精密に求めることが可能です。残念ながら有限サイズ法を説明する紙面がありませんので、White の原論文など^{1,2,12,15)} を御覧下さい。

方法論のしめくりとして、密度行列繰り込み群の正体が 試行波動関数をテンソル積で表す変分法であることに触れておきましょう。⁵⁾ 無限サイズ法の反復計算で、あるサイズ $2N$ に到達した時の繰り込まれた波動関数 $\tilde{\Psi}_{2N}(\ell S_N, S_N \bar{\ell})$ が持つ意味を式 (19) に照らし合わせ

てよ～く考えると、式 (20) で与えられるハミルトニアン H_{2N} に対して精密な変分波動関数を

$$\Psi_{2N}(S_1 \dots S_N, S_{\bar{N}} \dots S_{\bar{1}}) \quad (4.9)$$

$$= \sum_{i=1}^{N-1} \prod_{i=1}^{N-1} U_{\ell_{i+1}}(\ell_i S_{i+1}) \lambda_{\ell_N}^{1/2} \prod_{i=1}^{N-1} V_{\ell_{i+1}}(\bar{\ell}_i S_{i+1})$$

(但し総和は全ての ℓ_i と $\bar{\ell}_i$ を $\ell_1 \equiv S_1, \bar{\ell}_1 \equiv S_{\bar{1}}, \ell_N = \bar{\ell}_N$ の条件の下で取る) という形の局所テンソルの積で与えていることが判明します。系のハミルトニアンが局所的な相互作用の和で与えられていて、かつ変分関数が局所的なテンソルの積になっている仕組みは、密度行列繰り込み群を数値計算技術の面から支えている重要なポイントです。なぜならば、繰り込まれたハミルトニアン $\tilde{H} = \hat{T} H \hat{T}^*$ を求める数値計算を非常に高速に行うことが可能だからです。この事情は量子計算機が高速に動作する理由の一部分に共通するものです。

§5. 広がりつつある応用

原理的な話は一段落して、これから先は密度行列繰り込み群によってどのような物理系の解析が進んでいるのかについて、その一部を紹介します。冒頭で取りあげた通り、White が最初に密度行列繰り込み群を使って挑んだ相手は 1 次元量子スピン系でした。そして、ハルデン・ギャップが $\Delta = 0.41050$ という高い精度で求められたのを皮切りに、スピン鎖の相関関数、基底状態の磁気構造因子、磁性不純物による束縛状態の発生、ダイマー転移など、従来のランチョス対角化法では解析不可能であった物理量や現象が次々と観察され、密度行列繰り込み群は強力な数値計算手法として一躍有名になったのです。²⁾ 例えば、無限に長い $S = 1$ ハイゼンベルグ・スピン鎖の磁化曲線を、絶対 0 度から任意の有限温度に渡って正確に求める計算も、図 6 の通り難なくこなせます。有限系を扱う他の数値的手法では、連続的な磁化曲線を精度良く描くのが難しいので、このような磁化過程の計算は無限系を取り扱える密度行列繰り込み群の特徴を最も生かした計算の一つと言えるでしょう。フラストレーションのあるスピン系でも基底状態の解析に威力を発揮し、計算結果と実験の定量的比較も始まりました。記憶に新しい所では、ここ数年の間に行われた、構造を持った量子スピン系 — 混合スピン系、梯子型スピン系、ダイマー系 — に現れる基底状態の量子相転移や、磁化プラトーの数値実験的探索などが注目されます。^{2,3)}

スピン系と同じく、1 次元電子系の解析もまた、密度行列繰り込み群が得意とするものです。スピン系に比べると、どちらかという息の長い仕事が多いのが電子系の特徴でしょうか、White らはドーピングされた Hubbard 梯子模型や $t-J$ 模型など、高温超伝導物質を念頭に置いた伝導模型の数値解析を一貫して進めています。柴田・上田らは重い電子系に関連した理論的モデルである近藤格子模型の磁氣的・熱力学的性質を明らかにして来ました。⁶⁾ 近年では理論的に予測されたスピン・電荷分離や軌道秩序などの実在証明にも、密度行列繰り込み群が一役買っていることを付け加えておきます。

以上のように、1 次元量子系の数値的解析手法として、密度行列繰り込み群は既に完成された道具として、日常的に使われているのですが、より広範囲な未解決の問題に適用するために計算技術面での進歩も続いています。最近の技術的な進展について、ここで列挙しておきましょう。

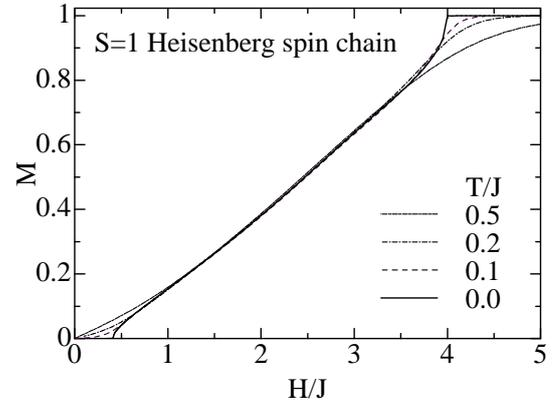


Fig. 6. $S = 1$ ハイゼンベルグ・スピン鎖の磁化過程。

(a) 1 次元ランダム量子系の取り扱いができるようになった。⁷⁾ (b) 有限温度量子系の熱力学関数とスペクトル密度の観測が可能になった。^{2,6)} (c) フォノン系や、その他のボソン系など、局所的に無限の自由度を含む系が取り扱い可能になった。²⁾ (d) 非エルミート系の取り扱い方法が確立した。²⁾ (e) 動的相関関数や交流伝導度など励起に関する情報が得られるようになった。⁸⁾ これらの進展は、互いに何の関係も無さそうに見えるのですが、すべて何をターゲットすれば良いかという問題をクリアして得られたという共通点を持っているのが、密度行列繰り込み群に特徴的なことです。

これだけ成功すれば、密度行列繰り込み群の適用範囲を 1 次元量子系だけに限定するのは勿体無いと誰もが考えるわけです。1 次元量子系以外ではどのような系の解析に密度行列繰り込み群が登場しつつあるのでしょうか？

5.1 量子化学計算への応用

格子系を離れて、連続空間中の物理現象を密度行列繰り込み群で精密解析できないか？ という希望的観測への最初のヒントを与えたのは Xiang でした。彼は、運動量空間で定義された模型について、運動量 p を離散的に取ることによって — つまり有限体積の連続空間を考えて — 系を 1 粒子運動量 $|p\rangle$ の小さい順に 1 次元格子系と見なせば密度行列繰り込み群が適用可能であると主張しました。^{2,9)} この発想は、金属中の近藤不純物の取り扱いに近いものがあります。量子多体系を運動量空間で表示すると、一般的には大きな運動量移行を伴う相互作用が多数現れてしまい、密度行列繰り込み群の適用は厄介だと感じられるのですが、Xiang は相互作用をうまくグループ化することによって、この問題を克服しました。

White は Xiang のアイデアを借りて、分子の完全 CI (Configuration Interaction) 計算に密度行列繰り込み群を使う道を切り開きました。その作戦は、ハートリー・フォック近似で求めた分子軌道 $\phi_\ell(x)$ を軌道エネルギー ϵ_ℓ の低い順番に番号づけすることによって、計算対象とする分子を 1 次元格子に乗せるというものです。2 章の式 (2) で定義した、軌道 $\phi_\ell(x)$ に対応するフェルミ演算子 $\hat{c}_{i\sigma}$ を使って、完全 CI のハミルトニアンを

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl\sigma\sigma'} V_{ijkl} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma'}^\dagger \hat{c}_{k\sigma'} \hat{c}_{l\sigma} \quad (5.1)$$

と表してしまえば、後は Xiang の処方せんに従って、基底状態を通常密度行列繰り込み群の手続きを経て求められ

ます。これまでに H_2O , CH_4 , HHeH など小さな分子の基底エネルギー計算が試験的に行われ、 $m = 64$ 程度の小規模計算であっても、正面切ってまともに完全 CI を行った場合と同程度の高いエネルギー精度を確保できることが明らかになりました。^{2,10)} このような量子化学方面での密度行列繰り込み群の応用はまだ始まったばかりで、より大規模かつ精密な計算を行う為に、分子軌道 $\phi_\ell(x)$ を (多参照 CI のように) 最適化する方法や、計算量が原子数程度にスケールするように $\phi_\ell(x)$ を局所化する努力が続けられています。今後は分子動力学 (多体版) の導入などに伴う量子化学・バンド計算の専門家からの寄与が重要になって来るでしょう。 $\phi_\ell(x)$ を求める手続きについては、密度汎関数法とのかかわりも気になるところです。

原子・分子よりも少し大きなスケールの有限体積系への適用例としては、Dukelsky と Sierra による微粒子のレベル間隔に対する超伝導・閉殻クロスオーバーの解析が目をひきます。¹¹⁾ フェルミ縮退した系の場合、Xiang の方法で捨てる自由度は、本質的にはフェルミ面付近のものだけです。数多くの電子を含む微粒子に対してであっても、十分な余裕を持って密度行列繰り込み群を適用できることが明らかになったからです。マイクロクラスターや原子核などの少数多体系の解析に密度行列繰り込み群が活躍する日も、そう遠くはないでしょう。

5.2 古典統計系への応用

我々著者は、密度行列繰り込み群の適用範囲を量子系だけに限定するのは勿体無い、統計物理系にも応用できないか? という動機に基づいて、古典格子模型の解析に密度行列繰り込み群を用いる方法論の研究を進めて来ました。^{2,12)} 1次元量子系の統計力学に登場する密度演算子 $\exp(-\beta\hat{H})$ を経路積分的に眺めると — 格子模型の場合は、鈴木-Trotter 分解により密度演算子を分解すると — それは 2次元古典系そのものです。この量子・古典対応を通じて、1次元量子系のハミルトニアンに対して繰り込み群変換を作用させたように 2次元古典系の転送行列に対して繰り込み群変換を作用させれば、たどころに密度行列繰り込み群の適用範囲を 2次元古典系へ拡張することができます。量子系では基底状態をターゲットしましたが、古典系では転送行列の固有ベクトル (= 熱的な固有状態) をターゲットしますから、転送行列が非対称である場合には、少しだけ量子系には無い注意を払う必要があります。

こうして得られた古典格子模型に対する密度行列繰り込み群の方法は、まず Carlon や Drzevinski らによりイジング模型やポッツ模型の有限サイズスケリングの補正項や表面相転移の数値的観測に用いられ、理論的予測を高い精度で検証しました。²⁾ また、古典系の密度行列繰り込み群の隠れた応用として、筒型の 2次元古典系にマップされた有限温度 1次元量子系の取り扱いを挙げることができます。^{2,6)}

ところで等方的な 2次元古典系を扱う場合、自由度圧縮を伴う転送行列の繰り込み群変換は、格子の縦と横の対称性を少しづつ崩して行きます。これはどうも気味が悪いことなので、できれば縦に行くことは同様に横にも行いたいものです。格子の縦と横を形式的に等しく扱う方法は 30 年も前に Baxter により開発され、角転送行列の方法として知られています。Baxter の方法は、もともと Kramers-Wannier 近似にヒントを得て作られたものなのですが、驚くべきことに密度行列繰り込み群と全く同じ形の変分原理に基づいています。角転送行列の方法を密

度行列繰り込み群に導入すると正方形 (または六角形) の有限系の分配関数を極めて高速に求めることが可能です。この計算方法は 角転送行列繰り込み群 と呼ばれています。^{12,13)}

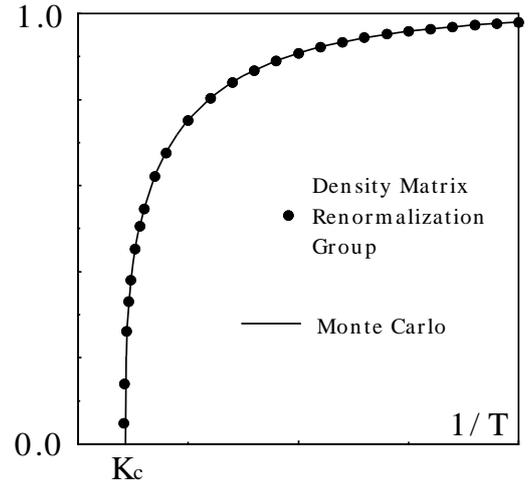


Fig. 7. 3次元イジング模型の自発磁化.

我々は現在、より高い次元の古典系の解析に密度行列繰り込み群を拡張する方法を模索しているところです。また、量子・古典対応を通じて 2次元量子系への拡張も視野に入れています。この拡張の手がかりの一つは古くから知られた Kramers-Wannier 近似です。同近似では 2次元イジング模型の転送行列の変分状態を 1次元古典系で与えますが、これをそのまま 1次元ずつ高次元化すると 3次元イジング模型の 2次元的に広がった層間転送行列に対して、変分状態を 2次元古典系で与える形式が得られます。この時、変分エネルギーは角転送行列繰り込み群で評価することができ、変分関数を最適化することによって、熱力学量が得られます。¹⁴⁾ この方向で、より高精度な計算を行うには変分関数を高次元化されたテンソル積状態で与える形式が有望です。まだまだ改善すべき点は多いのですが、図 7 に示すように、イジング模型を対象にしたテスト計算では、着実に計算の精度が向上しつつあります。

§6. おわりに

物理系の自由度圧縮をキーワードに、密度行列繰り込み群の原理と応用をながめて来ました。密度行列繰り込み群の根底にはなるべく少ない自由度でなるべく正確な答えを得るという思想が流れていて、それが故に実に様々な方面に関連して活躍しているわけです。本文中では触れませんでした。不可逆な量子情報圧縮との関連も指摘されています。密度行列繰り込み群は 1992 年に発明されてからまだ 10 年経っていません。今後、どのような進展があるのか、非常に興味深く感じるとともに、我々自らもそれに寄与したいと考えています。皆様も、お手元の問題に、密度行列繰り込み群を応用してみませんか?¹⁵⁾

§7. 著者紹介

西野友年氏: 専門は一応のところ磁性体の統計物理。数値解析の及ぶものなら何でも興味あり。

日永田泰啓氏: 研究対象は統計物理学。最近の興味を中心に、密度行列くりこみ群を拡張して 2次元非平衡統計力

学模型の研究を行う事.

奥西巧一氏: 専門は統計物理 & 物性理論数値計算も手計算も、面白そうなネタならなんでもやるつもり.

-
- 1) S.R. White: Phys. Rev. Lett. **69** (1992) 2863; Phys. Rev. **B48** (1993) 10345.
 - 2) I. Peschel, X. Wang, M. Kaulke, and K. Hallberg (Eds.), *Density-Matrix Renormalization — A New Numerical Method in Physics*, Springer LNP **528** (Springer Berlin 1999).
 - 3) 最近の論文 (プレプリント) を <http://quattro.phys.sci.kobe-u.ac.jp/dmrg/condmat.html> に一覧表示してありますので、御覧下さい.
 - 4) R.P. Feynman, *Statistical Mechanics*, (Addison Wesley, New York 1972).
 - 5) S. Östlund and S. Rommer, Phys. Rev. Lett **75** (1995) 3537; S. Rommer and S. Östlund, Phys. Rev. **B55** (1997) 2164.
 - 6) 柴田尚和: 物性研究 **70** (1998) 607; 柴田尚和, 上田和夫: 日本物理学会誌 **55**, No.2 (2000) 106.
 - 7) K. Hida, J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996) 895.
 - 8) T.D. Kuhner and S.R. White: Phys. Rev. **B60** (1999) 335; T.D. Kuhner, S.R. White, and H. Monien: Phys. Rev. **B61** (2000) 12474. W. Yu and S. Haas, cond-mat/0005526.
 - 9) T. Xiang: Phys. Rev. **B53** (1996) 10445.
 - 10) S. Daul, I. Ciofini, C. Daul, and S.R. White: preprint, <http://xxx.lanl.gov/abs/cond-mat/9912348>.
 - 11) J. Dukelsky and G. Sierra: Phys. Rev. **B61** (2000) 12302; G. Sierra, J. Dukelsky, G.G. Dussel, J. von Delft, F. Braun: Phys. Rev. **B61** (2000) R11890.
 - 12) T. Nishino, T. Hikihara, K. Okunishi, and Y. Hieida: Int. J. Mod. Phys. **B13** (1999) 1-24.
 - 13) T. Nishino and K. Okunishi: J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996) 891; J. Phys. Soc. Jpn. **66** (1997) 3040-3047.
 - 14) K. Okunishi and T. Nishino: Prog. Theor. Phys. **103** (2000) 541; T. Nishino, K. Okunishi, Y. Hieida, N. Maeshima, and Y. Akutsu: <http://xxx.lanl.gov/abs/cond-mat/0001083>.
 - 15) これから密度行列繰り込み群を学習される方には, White の原論文を初心者向けに解説した次の文献をお勧めします. 成島毅: 物性研究 **69** (1998) 702. また, 邦文解説としては文献 [6] 及び次のものがあります. 西野友年, 柴田尚和: 固体物理 **32** (1997) 12. 西野友年, 奥西巧一, 引原俊哉: 物性研究 **68** (1997) 133. なお, 御質問は, こちらまで: <http://quattro.phys.sci.kobe-u.ac.jp/dmrg/DMlistJ.html>