

# 目次

概要	i
<b>第1章 序論</b>	<b>1</b>
1.1 近藤格子系における相競合	1
1.1.1 近藤格子系	1
1.1.2 RKKY 相互作用	4
1.1.3 近藤効果	4
1.1.4 Doniach 相図	5
1.2 幾何学的フラストレーション	7
1.2.1 幾何学的フラストレーション	7
1.2.2 局在スピン系における部分無秩序状態	8
1.3 本研究の目的	9
1.4 この論文の構成	9
<b>第2章 近藤格子系における部分無秩序化</b>	<b>11</b>
2.1 CePdAl	11
2.2 UNi <sub>4</sub> B	17
2.3 これまでの理論	20
<b>第3章 モデルと計算手法</b>	<b>23</b>
3.1 背景	23
3.2 近藤格子模型	24
3.3 近藤ネックレス模型	29
3.4 イジング異方性	29
3.5 本研究におけるハミルトニアン	30
3.6 計算手法	31
3.6.1 平均場近似	31
3.6.2 変分モンテカルロ法 (VMC)	32
3.7 計算詳細	36

3.7.1	格子構造 . . . . .	37
3.7.2	変分モンテカルロ法のベンチマーク . . . . .	43
<b>第 4 章</b>	<b>結果と議論：近藤ネックレス模型</b>	<b>45</b>
4.1	平均場近似による結果 . . . . .	45
4.2	変分モンテカルロ法による計算結果 . . . . .	50
4.2.1	部分近藤スクリーニング相 (PKS 相) の判定 . . .	50
4.2.2	三角格子 ( $I_z/W > 0$ ) . . . . .	51
4.2.3	三角格子 ( $I_z/W = 0$ ) . . . . .	64
4.2.4	相図 (三角格子) . . . . .	72
4.2.5	カゴメ格子 ( $I_z/W > 0$ ) . . . . .	74
4.2.6	カゴメ格子 ( $I_z/W = 0$ ) . . . . .	74
4.2.7	相図 (カゴメ格子) . . . . .	74
<b>第 5 章</b>	<b>結果と議論：近藤格子模型</b>	<b>79</b>
5.1	イジング相互作用のある場合 ( $I_z/t > 0$ ) . . . . .	79
5.2	イジング相互作用がない場合 ( $I_z = 0$ ) . . . . .	93
5.3	相図 . . . . .	96
5.4	近藤ネックレス模型の計算結果との比較 . . . . .	96
<b>第 6 章</b>	<b>まとめと展望</b>	<b>98</b>
	謝辞	104