

課題名(タイトル):

テンソルネットワーク法による多体模型の解析

利用者氏名:

○上田 宏(1)

理研における所属研究室名:

(1)計算科学研究センター 量子系物質科学研究チーム

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

現実の物質の諸性質を説明しうる多体模型の解析は計算物理の分野において常に重要視されている。多体模型の解析手法として、近年、行列積状態に端を發したテンソルネットワーク法が注目を浴びており、多様な多体模型の低エネルギーの物理の理解に役立っている。

本研究課題では、テンソルネットワーク法の高度化ならびにそれらを利用して物性物理の理解に資する多体模型の解析を行う。実際の物理を説明しうる有効多体模型では、複数の相互作用変数を持つことが多々あり、それらの包括的な調査を効率的に実施するためにスーパーコンピュータの利用が必須となる。

2. 具体的な利用内容、計算方法

最近接強磁性的相互作用 J_1 と次近接反強磁性的相互作用 J_2 をもつスピン $S=1/2$ フラストレートスピン鎖は擬一次元エッジシェア型マルチフェロイック銅酸化物物質の磁性を表現する有効模型として近年興味を持たれている。等方的なハイゼンベルク相互作用の場合、非常に小さなスピギャップを持つハルデンダイマー相が發現し、弱い容易面異方性を導入するとマルチフェロイックスの發現機構をもたらすベクターカイラル秩序が發現する。この秩序は J_1 に弱いボンド交替が入ったとしても消失しないことが分かっている。本模型に多様な弱い摂動が導入されたときにこれらの性質がどのように変化するのか、特に実験的に観測される磁化率、スピギャップ、相関関数のピッチ等の摂動依存性を調査しておくことは、既存の／今後発見されうる擬一次元銅酸化物物質に現れる磁性をより正しく理解するために有用である。

そこで本課題ではフラストレートした J_1 - J_2 XXZ スピン鎖の特に容易軸における基底状態相図、スピギャップ、横

磁場に対する磁化率、相関関数のピッチにおける J_1 のボンド交替依存性をテンソルネットワークの法の一つである iTEBD 法と iDMRG 法を利用して調査した。

3. 結果

容易軸側での基底状態相図には既知の完全(部分)強磁性、4倍周期($\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$)反強磁性相に加えて、本課題の計算によって2種類の異なる性質を持つダイマー相が確認された。一つはハイゼンベルク相互作用の近傍で、小さなスピギャップと磁化率を持つ相で、そこから異方的相互作用を強めていくと、磁化率が大きくダイマー相が確認された。これらダイマー相では非整合周期の相関関数ピッチが現れるが、ボンド交替を大きくする、あるいは J_1/J_2 が0に近づくにつれて、急速に4倍周期に漸近する様子が確認された。

4. まとめ

最近接の強磁性的相互作用ボンド交替したフラストレート J_1 - J_2 XXZ スピン鎖に関して容易軸側も含めて広範囲なパラメータスペースで基底状態相図、スピギャップ磁化率、相関関数のピッチを調査し、容易軸側で対称性に守られたトポロジカル相転移で隔たれた異なる二つのダイマー相の発見に至った。

5. 今後の計画・展望

本模型解析の今度の展望としては、より多様な摂動(例えばXYZ異方性)に対してどのような基底状態相図等が現れるのかさらに調査を進めることが考えられる。

2019年度 利用研究成果リスト

【口頭発表】

上田 宏, 小野田繁樹, 「フラストレートした強磁性的スピン1/2鎖におけるXXZ容易軸/面異方性とボンド交替の役割」, 第14回量子スピン系研究会, 2020年1月8日, あきた芸術村.