九州大学学術情報リポジトリ
Kyushu University Institutional Repository

A New Method to Calculate Transition Lines near the Multicritical Point using Twisted Boundary Conditions

守屋, 俊志

https://hdl.handle.net/2324/4784403

出版情報：九州大学, 2021, 博士（理学）, 課程博士
バージョン：
権利関係：

（様式３）

氏　　名　：守屋　俊志

論 文 名　：　A New Method to Calculate Transition Lines near the Multicritical Point using Twisted Boundary Conditions

(ひねり境界条件を使った多重臨界点付近の相転移線の計算手法)

区　　分　：　甲

論　文　内　容　の　要　旨

相転移現象は相関長が発散するなどの特異な振る舞いが見られ、物性物理学における重要な研究課題の一つである。相転移現象を理解するためにはどこで相転移が起きるのかを明らかにすることが必要である。厳密解がなく相転移点が解析的にはわからないモデルの場合、数値計算を使って相転移点が求められる。数値計算においては有限系しか扱うことができないが、相転移現象は無限系でしか起こらない。そのため、数値計算結果に有限サイズ補正が現れる。特に複数の相転移線が 1 点で交わる多重臨界点付近では有限サイズ補正が非常に大きくなる。そのため先行研究において、多重臨界点付近での正確な相転移点は計算できていなかった。

本研究の目的は、1 次元量子スピンモデルの相転移点を多重臨界点付近でも精度良く計算する新しい方法を提案することである。また、臨界指数を計算することにより相転移のユニバーサリティクラスを確認する。実際に扱うモデルは、ボンド交代 XXZ 鎖であり、ハミルトニアンは以下で表される。

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^{N} [1 - (-1)^{j}\delta](\hat{S}_j^x \hat{S}_{j+1}^x + \hat{S}_j^y \hat{S}_{j+1}^y + \Delta \hat{S}_j^z \hat{S}_{j+1}^z)$$

このモデルの S = 1/2 での基底状態は、Neel 相（秩序相)、Dimer1 相、Dimer2 相（無秩序相）がある。それぞれの相転移のユニバーサリティクラスは、Neel 相と Dimer1,2 相との間が 2 次元イジングモデル、Dimer1 相と Dimer2 相との相転移が 2 次元ガウシアンモデルのものだと予想されている。それらの相転移線が交わる点が多重臨界点となる。その多重臨界点付近では 2 つの 2 次元イジングユニバーサリティの転移線が非常に近くなり、有限サイズ補正が非常に大きくなってしまう。

そこで我々は境界条件を取り入れた共形場理論を考察した結果、2 次元イジングユニバーサリティクラスでは y 軸ひねり境界条件の基底状態と z 軸ひねり境界条件の第 1 励起状態のエネルギーが等しくなり、2 次元ガウシアンユニバーサリティクラスでは y 軸ひねり境界条件の基底状態と第 1 励起状態のエネルギーが等しくなることがわかった。これらの性質を用いてそれぞれのユニバーサリティクラスの相転移点を計算するのが本研究の方法である。エネルギーの計算は、ランチョス法を用いた厳密対角化法により行う。また、ユニバーサリティクラスを確認するために、スケーリング次元とセントラルチャージと呼ばれる臨界指数を数値的に計算する。これらの量は固有エネルギーの有限サイズ補正の係数と関係があり、エネルギーを解析することによりもとめることができる。また、S>1/2 でも多重臨界点があることが知られており、S=1,3/2 でも同様の方法で相転移点を計算する。なお、S=1/2 では$\delta = 0$で Bethe 仮設法による厳密解があるが、S=1,3/2 では厳密解が知られている領域がない。

S=1/2 ボンド交代 XXZ 鎖について数値計算を行い得られた相図が図 1 である。対称性や双対性から期待されたように数値計算でも$\Delta = 1, \delta = 0$ の点が多重臨界点になっており、そこに近い領域でも有限サイズ補正が小さく相転移点を計算することができた。この結果は先行研究での結果と比べ非常に精度が高い。また、もとめた相境界でのスケーリング次元とセントラルチャージを計算し、ユニバーサリティクラスが予想と一致することを確かめることができた。さらに、S=1,3/2 についても本研究の方法を用い相図の計算を行い、同様に有限サイズ補正の小さい結果が得られた。

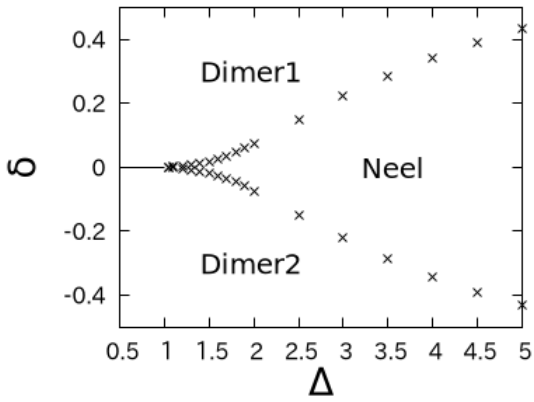

図 1: S=1/2 での相図

本研究の方法では、y 軸にひねる境界条件と z 軸にひねる境界条件を用いることにより多重臨界点の影響を弱め、有限サイズ補正の小さい計算をすることができる。実際に、ボンド交代 XXZ 鎖の S=1/2,1,3/2 の場合に適応した結果、多重臨界点付近でも精度のよい相図が得られた。さらに、ユニバーサリティクラスの確認のために臨界指数の計算を行い、予想と一致する結果が得られた。本研究の方法が適応できるモデルはボンド交代 XXZ 鎖だけではなく、さまざまなモデルへの応用が期待される。