カゴメ格子上の異方的スピン系の量子相と量子化ベリー位相

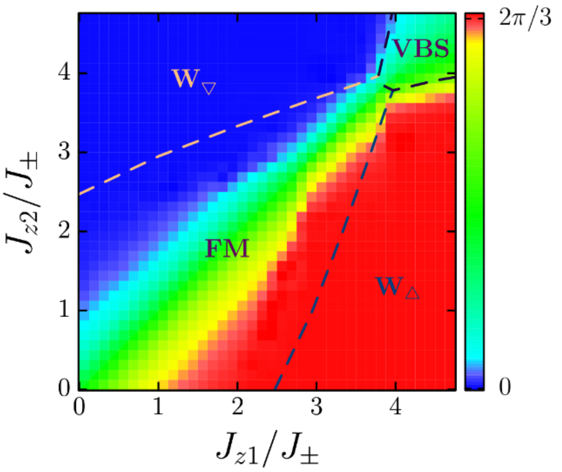
青柳 克（物性理論教室）

異方性をもつカゴメ格子上の $S = 1/2$ XXZ 模型には、強磁性（FM）相、バレンスボンド固体（VBS）相、W 相とよばれる 3 つの相が存在する。無限系での各相の相境界は、FM 相、VBS 相を特徴づける物理量によって得られているが、当時はトポロジカル相である W 相を特徴づける物理量は考案されていなかった。後に、W 相は、$\mathbb{Z}_3$ ベリー位相によって特徴づけられることが議論され、厳密対角化法を用いた数値計算によって検証されたが、そこでは無限系の相転移の臨界点と大きくずれ、定量的な一致が得られなかった。その原因として、系のサイズが小さいためであると考えられているが、厳密対角化法では十分大きなサイズの系にアプローチすることができない。

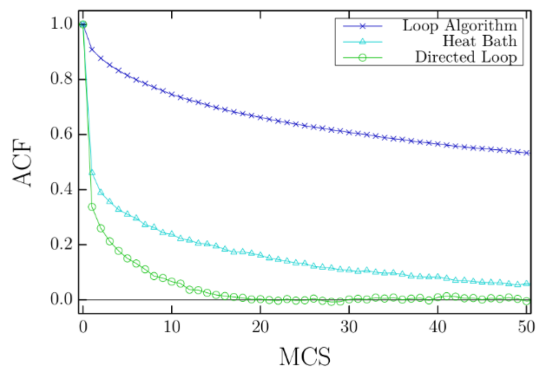
ループアルゴリズムを用いた量子モンテカルロ法による量子化ベリー位相の計算手法が考案された後、そのアルゴリズムによって本模型の $\mathbb{Z}_3$ ベリー位相の計算が行われたが、計算効率が著しく悪い場合があり、臨界点近傍の振る舞いが明快な計算結果は得られなかった。ゆえに、より計算効率の良い別のアルゴリズムを用いた量子化ベリー位相の計算手法が必要となる。

本論文では、オペレータループ更新を含むアルゴリズムによる量子化ベリー位相の計算手法の改善を行い、$\mathbb{Z}_3$ ベリー位相の計算効率をループアルゴリズムと比較した。結果、大幅な計算効率の向上が見られ、そのアルゴリズムの実効性を示すことができた。また、各相において、より高い精度での $\mathbb{Z}_3$ ベリー位相の計算を実行し、$24 \times 24 \times 3$ スピンを有する系でベリー位相を評価した。結果、W 相と VBS 相の臨界点近傍で、W 相で量子化した $\mathbb{Z}_3$ ベリー位相の定量的な変化から、相境界を定量的に評価可能であることを示した。

一方、$\mathbb{Z}_3$ ベリー位相は W 相と FM 相の相境界近傍では、本来 FM 相と予想されるところでも量子化した値となった領域が存在した。その理由を、FM 相が有限サイズの系でエネルギーギャップを持つためと考察し、そのような秩序相とトポロジカル相の相境界を評価する際にはギャップレス相を過小評価してしまう可能性があることが分かった。



$24 \times 24 \times 3$ スピンのある系における、推定量としての $\mathbb{Z}_3$ ベリー位相。



ループアルゴリズムとオペレータループ更新を含むアルゴリズム (Heat Bath および Directed Loop) の、量子化ベリー位相の計算効率の比較。自己相関関数 (ACF) が小さいほど効率が良い。

マルチバンド系におけるトポロジカル欠陥と非整数電荷

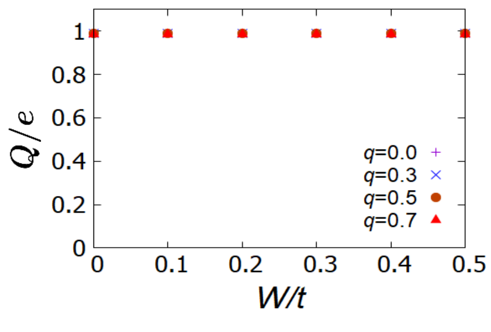
保 亮一朗（物性理論教室）

ディラック電子系は、波数に線形な分散関係を持つためにディラック・コーンと呼ばれる特徴的なエネルギー分散を持つ。ディラック電子系の代表例であるグラフェンでは $E=0$ ランダウ準位に起因する特異な量子ホール効果が観測されているが、トポロジカル欠陥に付随する分数電荷励起が存在する系としても知られている。実際、六角格子のケクレ構造において、秩序変数にトポロジカル欠陥であるvortexが存在する場合、分数電荷が現れることが理論的に示されており[1]、数値計算でも確認されている。

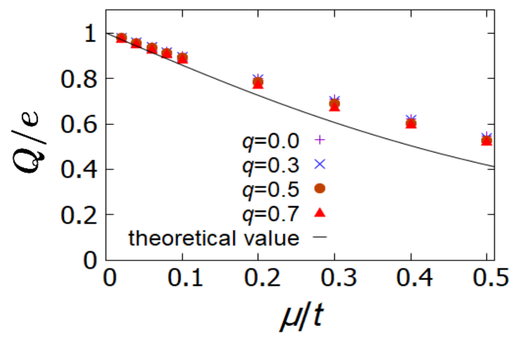
先行研究では、分数電荷はvortexの渦度に比例し、カイラル対称性を保存するようなランダムネスに対しては分数電荷が安定であること、staggered potentialと呼ばれるポテンシャルを加えたときの分数電荷の振る舞いが有効理論[2]と一致することが六角格子モデルで確認されている[3]。

本研究では、ディラック・コーンが傾いた場合にこれらの性質が普遍的に保たれるのかについて、精密な数値計算による検証を行った。六角格子モデルでは、ディラック・コーンを傾けようとすると同時にカイラル対称性が破れてしまうため、コーンの傾きとカイラル対称性を独立に議論することができない。そのため、本研究では非可換ゲージ場を導入した内部自由度のある 2 次元正方格子モデルを用いた。このモデルは、コーンを傾けた際にも内部自由度があるためにカイラル対称性が破られず、コーンの傾きと分数電荷の関係を独立に調べることができる。大規模系の局所状態密度計算に適した計算手法であるKernel Polynomial Method[4]などを用いて、vortexに伴う分数電荷とディラック・コーンの傾きの関係、傾けた場合のランダムネスや staggered potential に対する振る舞いを数値的に研究した。

その結果、分数電荷の値はコーンの傾きにほぼ影響を受けないことがわかった。また、コーンを傾けた場合でもカイラル対称性を保存するランダムネスに影響を受けないことがわかった。staggered potentialに対する分数電荷の変化についても、コーンの傾きに依らず有効理論と定性的には一致することがわかった。また、フラットバンドが存在しても、分数電荷に対しては寄与しないことを示唆する結果を得ることができた。



ランダムネスの強さ W/t と分数電荷の関係。q はコーンを傾ける強さに相当する。



staggered potential の強さ μ/t と分数電荷の関係。q はコーンを傾ける強さに相当する。

[1] C. -Y. Hou, C. Chamon, and C. Mudry, Phys. Rev. Lett. **98**, 186809 (2007).
[2] C. Chamon, C.-Y. Hou, R. Jackiw, C. Mudry, S.-Y. Pi, and A. P. Schnyder, Phys. Rev. Lett. **100**, 110405 (2008).
[3] T. Kawarabayashi, Y. Inoue, R. Itagaki, Y. Hatsugai, H. Aoki, Annals Phys. **435**, 168440 (2021).
[4] A. Weiβe, G. Wellein, A. Alvermann, H. Fehske, Rev. Mod. Phys. **78**, 275 (2006).