

HΦの演習問題 (問題)

三澤 貴宏

東京大学物性研究所 特任研究員 (PCoMS PI)



例題1: spin 1/2 dimer (fulldiag)

例題2: spin 1/2 chain (Lanczos)

例題3: J1-J2 Heisenberg model(Lanczos,TPQ)

例題4: Kitaev model (Lanczos,TPQ)

例題5: Hubbard chain (Lanczos,TPQ)

好きなものからやって下さい

ほとんどlaptop PCでできるはずですが(TPQはちょっと重いですが...)

もちろん、自分のやりたい別の課題もやっても OKです

例題1: Heisenberg dimer, Hubbard dimer

$$H = J \vec{S}_0 \vec{S}_1$$

$$H = -t(c_{0\sigma}^\dagger c_{1\sigma} + \text{h.c.}) + U(n_{0\uparrow}n_{0\downarrow} + n_{1\uparrow}n_{1\downarrow})$$

1. 全対角化でエネルギー固有値を求めましょう。

$E_{\min} = -3/4$ (1重), $E_{\max} = 1/4$ (3重縮退) となるはず

2. $S=1, 2/3, 2 \dots$ として同じことをやりましょう

$E_{\min} = -S(S+1)$, $E_{\max} = S^2$ となるはず

3. Hubbard 模型でも同じことをやってみましょう

(half filling, $S_z=0$)

$$E = 0, U, \frac{U}{2} \times (1 \pm \sqrt{1 + (4t/U)^2})$$

例題2: Heisenberg chain

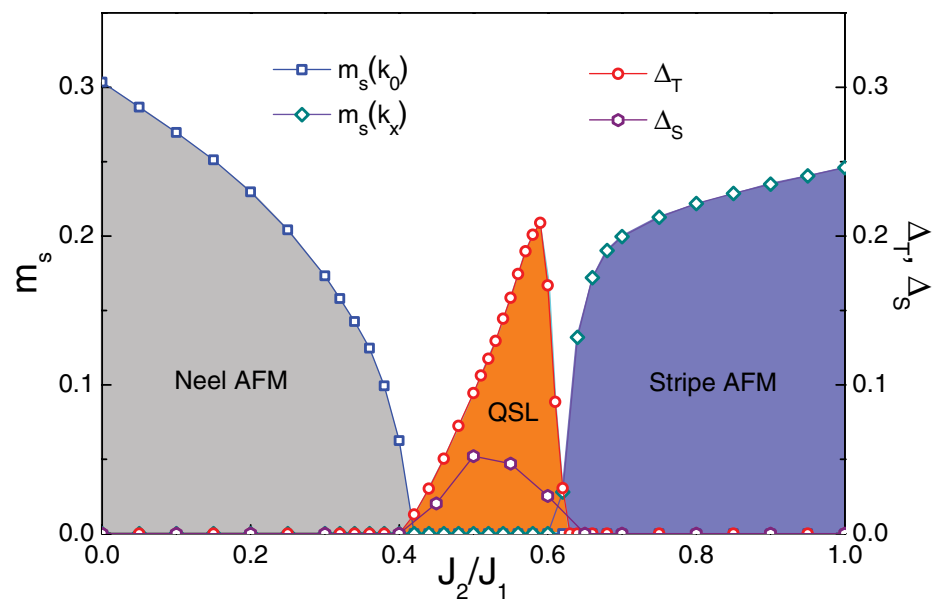
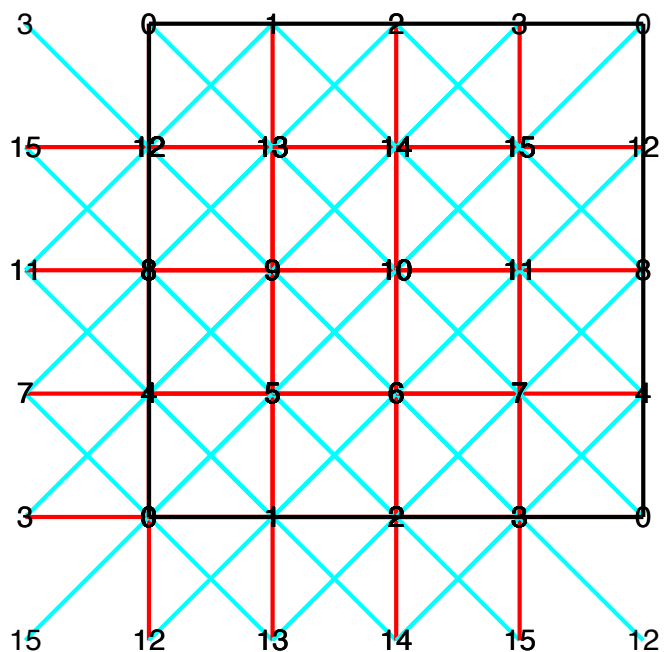
$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j$$

1. Lanczosでエネルギーを計算 (サイズ $L=20$ 位まで)
→基底状態と第一励起状態のエネルギー差(ギャップ)を計算
→ギャップの大きさを $1/L$ でプロットしてみましょう
2. XY模型でも同じことをやってみましょう
3. $S=1$ のハイゼンベルク模型でも同じことをやってみましょう
(Haldane gap)

例題3: J1-J2ハイゼンベルク模型

$$H = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} S_i S_j$$

最近接 J1, 次最近接 J2



PRB 86, 024424(2012)

lattice.gpで描画可能

J2/J1~0.5で非磁性の
基底状態(スピン液体?)

例題3: J1-J2ハイゼンベルグ模型

$$H = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} S_i S_j$$

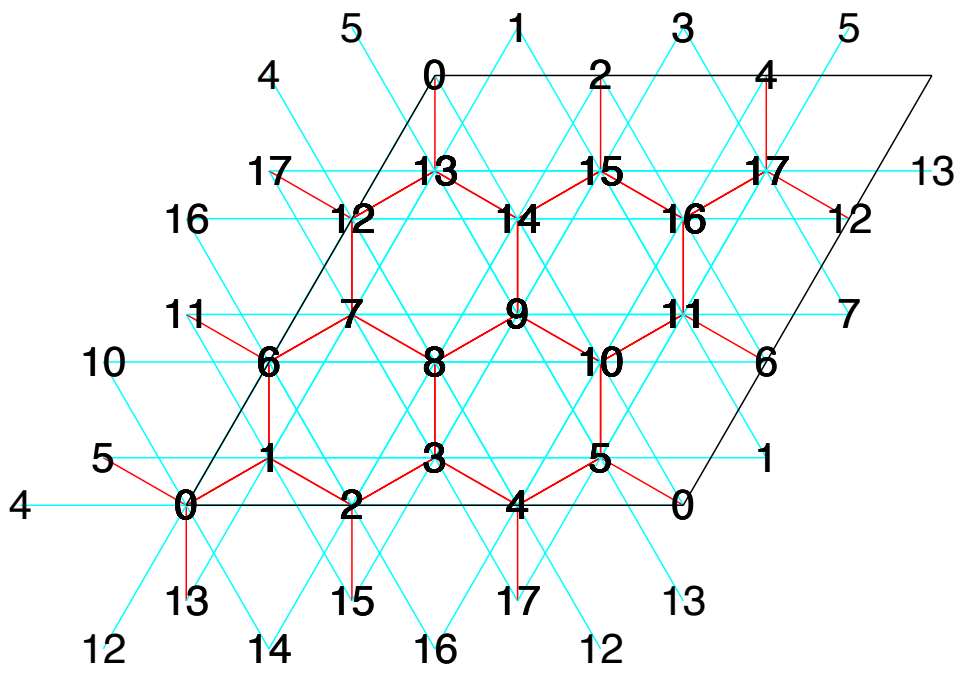
1. Lanczosでエネルギーを計算 (サイズ4×4位)
2. TPQで比熱を計算(J2/J1~0.5でどうなるか?)
3. (発展)余裕があればスピン相関も計算してみましよう



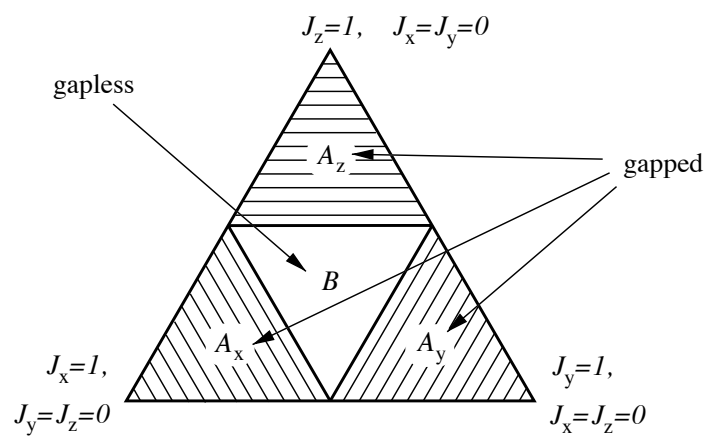
例題4: Kitaev model

$$H = -J_x \sum_{x\text{-bond}} S_i^x S_j^x - J_y \sum_{y\text{-bond}} S_i^y S_j^y - J_z \sum_{z\text{-bond}} S_i^z S_j^z$$

3方向のそれぞれが
Jx, Jy, Jzで相互作用



相図



Annals of Physics 321, 2-111 (2016)

lattice.jpで描画可能

可解模型→スピン液体

例題4: Kitaev model

$$H = -J_x \sum_{x\text{-bond}} S_i^x S_j^x - J_y \sum_{y\text{-bond}} S_i^y S_j^y - J_z \sum_{z\text{-bond}} S_i^z S_j^z$$

1. Lanczosでエネルギーを計算 (サイズ18サイト位)
2. TPQで比熱を計算: マヨラナ粒子の兆候がみえるか?
3. (発展)次近接のスピンの相関が厳密に0を確認
4. (発展)ハイゼンベルク項をたすとどうなるか?
5. (発展)磁場をかけて磁化の温度依存性から帯磁率が計算可能



例題5: Hubbard chain

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{h.c.}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

1. Lanczosでエネルギー・二重占有度を計算 (サイズ8サイト位)
2. TPQで比熱・二重占有度を計算:
3. (発展) 全対角化でアンサンブル平均を計算してTPQと比較

