

京都大学 集中講義 (量子多体系入門) レポート (2016/10/5 出題)

以下の大問 1~6 から 3 題を選択して解答せよ。文献等を参照した場合は、そのことを明記せよ。

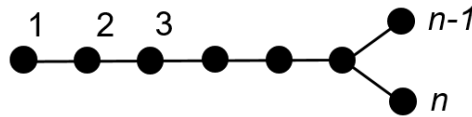
1. グラフと行列

位数 p のグラフ G のラプラシアンを L とする。

(a) L は、適当な行列 Q を用いて、 $L = QQ^T$ と書けることを示せ。

(b) L の固有値 λ は不等式、 $0 \leq \lambda \leq p$ を満たすことを証明せよ。(ヒント：完全グラフのラプラシアンの性質をうまく利用する。)

n 個の頂点からなる D 型ディンキン図形の隣接行列を A とする。(頂点のラベル付けは、下図を参照せよ。) A の固有値・固有ベクトルを以下の手順にしたがって求めよ。



(c) 次のベクトルが、 A の 0 固有値に対応する固有ベクトルであることを確認せよ。

$$\mathbf{v}_n = \frac{1}{\sqrt{2}}(0, \dots, 0, 1, -1)^T \quad (1)$$

(d) \mathbf{v}_n と直交する、以下の $n-1$ 個のベクトルを考える。

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_1 &= (1, 0, 0, \dots, 0, 0, 0)^T \\ \mathbf{v}_2 &= (0, 1, 0, \dots, 0, 0, 0)^T \\ &\vdots \\ \mathbf{v}_{n-2} &= (0, 0, 0, \dots, 1, 0, 0)^T \\ \mathbf{v}_{n-1} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(0, 0, 0, \dots, 0, 1, 1)^T \end{aligned} \quad (2)$$

これらを用いて、行列 $T = (t_{i,j})$, $t_{i,j} = \langle \mathbf{v}_i, A\mathbf{v}_j \rangle$ ($1 \leq i, j \leq n-1$) を定義する。 T の固有値・固有ベクトルを求めよ。(ヒント：固有ベクトルとして、 $\mathbf{u} = (u_j)$, $u_j = Ae^{ipj} + Be^{-ipj}$ の形を仮定して、境界条件から波数 p を求める。)

2. 自由ボゾン系と二次形式

ペアリング項を含む、ボゾン系の二次形式のハミルトニアンを具体例を作成し、固有エネルギー・固有状態を全て求めよ。自分で作成することが難しい場合は、論文などに載っている例を具体的な計算も含めて紹介せよ。(またその場合は、必ず参照した文献を明記すること。)

3. 量子 Ising 模型と Majorana フェルミオン

講義で扱った Kitaev chain(周期的境界条件を課した場合)について、以下の問いに答えよ。

(a) ハミルトニアンを、

$$H = \sum_{k \in \mathcal{K}} \epsilon(k) \left(d_k^\dagger d_k - \frac{1}{2} \right) \quad (3)$$

の形に書き直せ。ただし、 \mathcal{K} は許される波数の集合、 d_k は $\psi_k, \psi_{-k}^\dagger$ の線形結合で表される。

(b) $|\mu|$ と $|2w|$ の大小関係に注意して、基底状態のフェルミオン数のパリティ $(-1)^F$ を答えよ。

1次元量子 Ising 模型 (開放境界条件) のハミルトニアンは、以下で与えられる。

$$H = -J \sum_{j=1}^{N-1} \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z - \Gamma \sum_{j=1}^N \sigma_j^x. \quad (4)$$

このハミルトニアンは、Majorana フェルミオンの演算子を用いると、

$$H = -i\Gamma \sum_{j=1}^N \gamma_{2j-1} \gamma_{2j} - iJ \sum_{j=1}^{N-1} \gamma_{2j} \gamma_{2j+1} \quad (5)$$

と書き換えられる。以下では、 H が gapless となる $\Gamma = J$ の場合について調べる。

(c) H は、通常のフェルミオン演算子 d_k, d_k^\dagger を用いて、

$$H = \sum_{k=1}^N \epsilon_k \left(d_k^\dagger d_k - \frac{1}{2} \right) \quad (6)$$

の形に書くことができる。 $\epsilon_k > 0$ ($k = 1, 2, \dots, N$) を求めよ。

(d) H の基底状態エネルギー E_0 を求めよ。

(e) 基底状態におけるエネルギー密度は、 N が十分大きい場合、

$$\frac{E_0}{N} = e_0 + \frac{e_1}{N} + \frac{e_2}{N^2} + O(N^{-3}) \quad (7)$$

と書ける。定数 e_0, e_1, e_2 を求めよ。(興味のある人は、この結果と共形場理論や有限サイズ・スケーリングとの関係を調べ議論せよ。)

4. フラストレーション・フリー系

講義で扱った例以外の、フラストレーション・フリー系のハミルトニアンの具体例を作成し、その基底状態について議論せよ。自分で作成することが難しい場合は、論文などに載っている例を具体的な計算も含めて紹介せよ。(またその場合は、必ず参照した文献を明記すること。)

5. Hubbard 模型

2 サイトの Hubbard 模型のハミルトニアンは、以下で与えられる。

$$H_2 = -t \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} (c_{1,\sigma}^\dagger c_{2,\sigma} + c_{2,\sigma}^\dagger c_{1,\sigma}) + U \sum_{i=1}^2 n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}. \quad (8)$$

ただし、 $t > 0$, $U > 0$ とする。次の基底

$$|n_{1,\uparrow}, n_{1,\downarrow}, n_{2,\uparrow}, n_{2,\downarrow}\rangle := (c_{1,\uparrow}^\dagger)^{n_{1,\uparrow}} (c_{1,\downarrow}^\dagger)^{n_{1,\downarrow}} (c_{2,\uparrow}^\dagger)^{n_{2,\uparrow}} (c_{2,\downarrow}^\dagger)^{n_{2,\downarrow}} |\text{vac}\rangle, \quad n_{i,\sigma} = \uparrow \text{ or } \downarrow \quad (9)$$

で、 H_2 を行列として表すと 16×16 行列となる。これを直接対角化するのは難しいので、次のように部分空間ごとに分けて考える。以下の全電子数 N_e と全スピン $\mathbf{S}_{\text{tot}} = (S_{\text{tot}}^x, S_{\text{tot}}^y, S_{\text{tot}}^z)$ は、 H_2 と交換する保存量である。

$$N_e = \sum_{i=1}^2 \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} n_{i,\sigma}, \quad S_{\text{tot}}^\alpha = \sum_{i=1}^2 \sum_{\mu,\nu=\uparrow,\downarrow} c_{i,\mu}^\dagger \frac{\sigma_{\mu,\nu}^\alpha}{2} c_{i,\nu} \quad (\alpha = x, y, z) \quad (10)$$

したがって、 $N_e, S_{\text{tot}}^z, (\mathbf{S}_{\text{tot}})^2$ の固有値で指定される部分空間ごとに H_2 を対角化すればよい。

- (a) \mathbf{S}_{tot} が、 H_2 と交換することを示せ。
- (b) $N_e = 2$ である独立な状態は、全部で何個あるか？また、このうちさらに $(\mathbf{S}_{\text{tot}})^2 = 0$ (singlet) の部分空間における基底状態のエネルギー、 $(\mathbf{S}_{\text{tot}})^2 = 2$ (triplet) の部分空間における基底状態のエネルギーを求めよ。
- (c) (b) で求めた singlet と triplet の基底状態エネルギーの差が $t \ll U$ のとき、どのように振る舞うか議論せよ。また、2 サイトの Heisenberg 模型との関係も議論せよ。

次に 4 サイトの Hubbard 模型を考えよう。ハミルトニアンは以下で与えられる。

$$H_4 = -t \sum_{i=1}^4 \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + c_{i+1,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) + U \sum_{i=1}^4 n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}. \quad (11)$$

ただし、 $t > 0$, $U > 0$ とし、周期的境界条件 ($c_{5,\sigma} = c_{1,\sigma}$) を課す。 H_4 を行列として表すと、256 次元となる。以下では、強相関極限を考え、 $U \rightarrow \infty$ とする。この極限では、有限のエネルギーの (二重占有のない) 状態の空間の中だけで、 H_4 を対角化してやればよい。

- (d) 全電子数が 3 の部分空間における基底状態のエネルギーを求めよ。また、その状態の全スピンの大きさを決定せよ。[数式処理ソフトなどを適宜用いても構わない。]
- (e) 上の結果と長岡強磁性との関係を議論せよ。

6. Heisenberg 模型

$S = 1/2$ Heisenberg スピン鎖のハミルトニアンは、以下で与えられる。

$$H = J \sum_{j=1}^L \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_{j+1}. \quad (12)$$

ここで、 $\mathbf{S}_j = (S_j^x, S_j^y, S_j^z)$ は、サイト j のスピン演算子で、 $S_j^\alpha = \sigma_j^\alpha/2$ ($\alpha = x, y, z$) で定義される。また、周期的境界条件 $\mathbf{S}_{L+1} = \mathbf{S}_1$ が課されている。全スピン演算子 $\mathbf{S}_{\text{tot}} := \sum_{j=1}^N \mathbf{S}_j$ は、ハミルトニアン H と交換する保存量である。以下では、 $L = 6$ の場合について具体的に調べる。

- (a) $J < 0$ の場合を考える。このとき H の基底状態および第一励起状態の固有エネルギーの表式を求めよ。また、それらの状態における $S_{\text{tot}}^z, (\mathbf{S}_{\text{tot}})^2$ の値を答えよ。
- (b) $J > 0$ の場合を考える。このとき H の基底状態および第一励起状態の固有エネルギーの表式を求めよ。また、それらの状態における $S_{\text{tot}}^z, (\mathbf{S}_{\text{tot}})^2$ の値を答えよ。

[対称性をうまく利用するとよい。また、数式処理ソフトなどを適宜用いても構わない。]