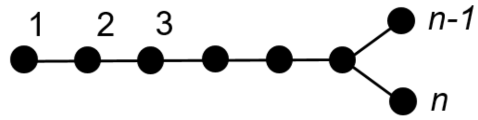
横浜国立大学 集中講義 (量子多体系入門)　　レポート (2018/12/7 出題)

以下の大問 **1**〜**4** から **2** 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。
2019 年 **1** 月 **7** 日（月）までに、総合研究 **W** 棟１階・学生用レポート提出棚６番ボックスに提出。

1. グラフと行列

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。



(a) 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。

$$\boldsymbol{v}_n = \frac{1}{\sqrt{2}}(0, ..., 0, 1, -1)^{\mathrm{T}} \tag{1}$$

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

$$\begin{aligned} \boldsymbol{v}_1 &= (1, 0, 0, ..., 0, 0, 0)^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{v}_2 &= (0, 1, 0, ..., 0, 0, 0)^{\mathrm{T}} \\ &\vdots \\ \boldsymbol{v}_{n-2} &= (0, 0, 0, ..., 1, 0, 0)^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{v}_{n-1} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(0, 0, 0, ..., 0, 1, 1)^{\mathrm{T}} \end{aligned} \tag{2}$$

これらを用いて、行列 $\mathsf{T} = (t_{i,j})$, $t_{i,j} = \langle \boldsymbol{v}_i, \mathsf{A}\boldsymbol{v}_j \rangle$ $(1 \leq i, j \leq n-1)$ を定義する。

(b) T の行列要素を求めよ。

(c) 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、$\boldsymbol{u} = (u_j)$, $u_j = Ae^{\mathbf{i}pj} + Be^{-\mathbf{i}pj}$ 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の具体例を作成し、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

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。

$$H = -J \sum_{j=1}^{N-1} \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z - \Gamma \sum_{j=1}^{N} \sigma_j^x. \tag{3}$$

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、

$$H = -\mathbf{i}\Gamma \sum_{j=1}^{N} \gamma_{2j-1}\gamma_{2j} - \mathbf{i}J \sum_{j=1}^{N-1} \gamma_{2j}\gamma_{2j+1} \tag{4}$$

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。

(a) H は、反交換関係

$$\{d_k, d_\ell^\dagger\} = \delta_{k,\ell}, \quad \{d_k, d_\ell\} = \{d_k^\dagger, d_\ell^\dagger\} = 0 \tag{5}$$

を満たすフェルミオン演算子 d_k, $d_k^\dagger$ を用いて、

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

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

(b) H の基底状態エネルギー E_0 を求めよ。

(c) 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、

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

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. Fermi-Hubbard 模型

２サイトの Fermi-Hubbard 模型のハミルトニアンは、以下で与えられる。

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

ただし、$t > 0, U > 0$ とする。真空状態を $|\mathrm{vac}\rangle$ とし、次の基底

$$|n_{1,\uparrow}, n_{1,\downarrow}, n_{2,\uparrow}, n_{2,\downarrow}\rangle := (c^\dagger_{1,\uparrow})^{n_{1,\uparrow}} (c^\dagger_{1,\downarrow})^{n_{1,\downarrow}} (c^\dagger_{2,\uparrow})^{n_{2,\uparrow}} (c^\dagger_{2,\downarrow})^{n_{2,\downarrow}} |\mathrm{vac}\rangle, \qquad n_{i,\sigma} = \uparrow \text{ or } \downarrow \tag{9}$$

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 $\boldsymbol{S}_\mathrm{tot} = (S^x_\mathrm{tot}, S^y_\mathrm{tot}, S^z_\mathrm{tot})$ は、H_2 と交換する保存量である。

$$N_\mathrm{e} = \sum_{i=1}^{2} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} n_{i,\sigma}, \qquad S^\alpha_\mathrm{tot} = \sum_{i=1}^{2} \sum_{\mu,\nu=\uparrow,\downarrow} c^\dagger_{i,\mu} \frac{\sigma^\alpha_{\mu,\nu}}{2} c_{i,\nu} \quad (\alpha = x, y, z) \tag{10}$$

したがって、N_e, S^z_tot, $(\boldsymbol{S}_\mathrm{tot})^2$ 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) $\boldsymbol{S}_\mathrm{tot}$ が、H_2 と交換することを示せ。

(b) $N_\mathrm{e} = 2$ 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 $(\boldsymbol{S}_\mathrm{tot})^2 = 0$ (singlet) の部分空間における基底状態のエネルギー、$(\boldsymbol{S}_\mathrm{tot})^2 = 2$ (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。