有限サイズモデルでバルクを扱う方法

永井佑紀

平成 23 年 12 月 29 日

ハミルトニアンが二次形式で表現される有限サイズモデルを使って、バルクの系を計算する方法について述べる。エネルギー解像度が欲しいときに使う方法である。簡単のため 1 次元を扱うが、議論は次元に依らない。

1　ハミルトニアン

長さ N で壁のある有限系のハミルトニアンを

$$H_W = \sum_{ij}^{N} c_i^\dagger H_{ij} c_j \tag{1}$$

とする。周期境界条件を課した有限系のハミルトニアンは

$$H_P = H_W + H_T + H_T^\dagger \tag{2}$$

$$H_T \equiv \sum_{ij}^{N} c_i^\dagger H_{Tij} c_j \tag{3}$$

と書くことができる。たとえば、最近接ホッピングのみの一次元単純正方格子ならば、

$$H_{Tij} = \delta_{i1}\delta_{jN} \tag{4}$$

である。

状態密度などの量は固有値 E_k を用いて

$$\rho(E) = \sum_{k=1}^{N} \delta(E - E_k) \tag{5}$$

と書ける。

2　等価なモデル

これらのハミルトニアンは、内部自由度が N ある一つの粒子が周期的に並んでいるモデルのハミルトニアンと見なすことができる。つまり、H_W は、内部自由度が N ある孤立粒子のハミルトニアン:

$$H'_W = \boldsymbol{c}^\dagger \hat{H} \boldsymbol{c} \tag{6}$$

と等価である。ここで、$\boldsymbol{c}$ は内部自由度を N 個もつ粒子の生成演算子である。H_P は、その孤立粒子が、自分自身とホッピングハミルトニアン H_T で結ばれたモデル：

$$H'_P = \boldsymbol{c}^\dagger \hat{H} \boldsymbol{c} + H'_T + H_T^{'\dagger} \tag{7}$$

$$H'_T \equiv \boldsymbol{c}^\dagger \hat{H}_T \boldsymbol{c} \tag{8}$$

と見なすことができる。

3　モデルの拡張

この N 内部自由度のあるモデルを拡張することを考える。ハミルトニアンを見てまず思いつくことは、この粒子の数を増やすことである。たとえば、2 つある場合のモデルは

$$H_{P,2} = \sum_{l=1}^{2} \boldsymbol{c}_l^\dagger \hat{H} \boldsymbol{c}_l + \boldsymbol{c}_1^\dagger \hat{H}_T \boldsymbol{c}_2 + \boldsymbol{c}_2^\dagger \hat{H}_T^\dagger \boldsymbol{c}_1 \tag{9}$$

となり、M 個あるモデルは

$$H_{P,M} = \sum_{l=1}^{M} \left(\boldsymbol{c}_l^\dagger \hat{H} \boldsymbol{c}_l + \boldsymbol{c}_l^\dagger \hat{H}_T \boldsymbol{c}_{l+1} + \boldsymbol{c}_{l+1}^\dagger \hat{H}_T^\dagger \boldsymbol{c}_l \right) + \boldsymbol{c}_1^\dagger \hat{H}_T \boldsymbol{c}_M + \boldsymbol{c}_M^\dagger \hat{H}_T^\dagger \boldsymbol{c}_1 \tag{10}$$

となる。このモデルは、周期が M の系なので、離散フーリエ変換

$$\boldsymbol{c}_l^\dagger = \sum_{n=0}^{M-1} \boldsymbol{c}_n^\dagger \exp\left[i \frac{2\pi}{M} nl \right] \tag{11}$$

を導入すると

$$H_{P,M} = \sum_{n=0}^{M-1} \left(\boldsymbol{c}_n^\dagger \hat{H} \boldsymbol{c}_n + \boldsymbol{c}_n^\dagger \hat{H}_T \boldsymbol{c}_n e^{-ik_n} \ + \boldsymbol{c}_n^\dagger \hat{H}_T^\dagger \boldsymbol{c}_n e^{ik_n} \right) \tag{12}$$

となる。ここで $k_n = 2\pi n/M$ である。このモデルは、$M \to \infty$ でバルク系となる。

4　元のモデルで考える

上で作ったモデルは、式 (7) とよく似ている。違いは和のみである。よって、元のモデルでのハミルトニアンは

$$H_{P,M} = \sum_{n=0}^{M-1} \left(H_W + H_T e^{-ik_n} + H_T^\dagger e^{ik_n} \right) \tag{13}$$

である。よって、長さ N の有限系を M 個コピーして作った系となっている。系のサイズは $N \times M$ である。

$M = 2$ のときを考える。このとき、

$$H_{P,2} = \sum_{n=0}^{M-1} \left(H_W + (-1)^n (H_T + H_T^\dagger) \right) \tag{14}$$

となる。つまり、通常の周期境界条件の系と端でホッピングを -1 してひねった境界条件の系の二つを考慮している。

状態密度はそれぞれの系の固有値 $E_{k,n}$ を用いて

$$\rho(E) = \sum_{n=1}^{M-1} \sum_{k=1}^{N} \delta(E - E_{k,n}) \tag{15}$$

と書ける。一般的に $E_{k,n} \neq E_{k,n'}$ $(n \neq n')$ が成り立つので、M 個コピーの効果はエネルギーの解像度を上げる効果となっている。

5　具体例

具体的に、4 サイトの最近接ホッピングのみの一次元単純正方格子のモデルを考える。壁ありのハミルトニアンは

$$H_W = \begin{pmatrix} c_1^\dagger & c_2^\dagger & c_3^\dagger & c_4^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{pmatrix} \tag{16}$$

となり、周期系のハミルトニアンは

$$H_P = H_W + H_T + H_T^\dagger \tag{17}$$

$$H_T \equiv \begin{pmatrix} c_1^\dagger & c_2^\dagger & c_3^\dagger & c_4^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{pmatrix} \tag{18}$$

となる。この行列の固有値は $E = -2, 0, 0, 2$ である。つぎに、ハミルトニアン

$$H_{P,2} = \sum_{n=0}^{M-1} H_W + H_T + H_T^\dagger \tag{19}$$

の場合は、$n = 0$ の固有値は上述した $E = -2, 0, 0, 2$ で、$n = 1$ の固有値は $E = -\sqrt{2}, -\sqrt{2}, \sqrt{2}, \sqrt{2}$ である。よって、エネルギー解像度が増えている。さらに、

$$H_W + H_T e^{-ik_n} + H_T^\dagger e^{ik_n} \tag{20}$$

の固有値は、

$$E = \pm\sqrt{2 \pm e^{-ik_n}\sqrt{e^{ik_n}(1 + e^{ik_n})^2}} \tag{21}$$

である。よって、M が大きくなっていけば異なる値の固有値がたくさん現れ、エネルギー解像度が大きくなることがわかる。

つまり、BdG 方程式などの二次形式のハミルトニアンの有限系を解く際には、通常の系と端で-1 かけたホッピングのある系を二回解くことで、エネルギー解像度を 2 倍にすることができる。M 回解けば M 倍である。そして、メモリなどは通常の系と同じだけであるので、本当に $N \times M$ の系を考えるよりは効率も良く速い。

参考文献

A. Himeda, M. Ogata, Y. Tanaka, S. Kashiwaya, J. Phys. Soc. Jpn. **66**, 3367 (1997).

M. Takigawa, M. Ichioka, K. Machida, J. Phys. Soc. Jpn. **69**, 3943 (2000).

Y. Yanase, J. Phys. Soc. Jpn. **75**, 124715 (2007).

T. Kariyado, and M. Ogata, J. Phys. Soc. **79**, 083704 (2010).