Hubbard 模型の厳密対角化

永井佑紀

平成 29 年 2 月 23 日

Hubbard 模型を厳密対角化で解く手法について述べる。簡単のため、一次元を考える。厳密対角化で重要なことは解くべきハミルトニアンを行列表示することである。このノートでは主に行列表示する方法について述べる。なお、対角化して固有値固有ベクトルを求める場合には、LOBPCG 法の解説をしている別のノートを参照すること。サンプルコードは気が向いた時に作る予定である。

1 モデル

一次元の Hubbard 模型のハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{i=1}^{N} (c_{i+1\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} + c_{i-1\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}) - \mu \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{i=1}^{N} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} + U \sum_{i=1}^{N} c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^{\dagger} c_{i\downarrow} \tag{1}$$

である。ここで i はサイトの index、N はサイトの数である。また、粒子はフェルミオンを考えており、反交換関係：

$$c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma'} + c_{j\sigma'} c_{i\sigma}^{\dagger} = \delta_{ij}\delta_{\sigma\sigma'}, \tag{2}$$

$$c_{i\sigma} c_{j\sigma'} + c_{j\sigma'} c_{i\sigma} = 0, \tag{3}$$

$$c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma'}^{\dagger} + c_{j\sigma'}^{\dagger} c_{i\sigma}^{\dagger} = 0 \tag{4}$$

が成り立っている。また、$|0\rangle$ は $c_{i\sigma}|0\rangle = 0$ を満たすフェルミオンの消滅演算子 $c_{i\sigma}$ に対する真空とする。この時、

$$c_{i\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} \prod_{i'\neq i} c_{i\uparrow}^{\dagger}|0\rangle = (1 - c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}) \prod_{i'\neq i} c_{i'\uparrow}^{\dagger}|0\rangle \tag{5}$$

$$= \prod_{i'\neq i} c_{i'\uparrow}^{\dagger}|0\rangle \tag{6}$$

という関係が成り立っている。また、

$$c_{i\sigma} \prod_{i''\neq i}^{m} c_{i''\uparrow}^{\dagger} c_{i\sigma}^{\dagger} \prod_{i'\neq i} c_{i\uparrow}^{\dagger}|0\rangle = (-1)^m \prod_{i''\neq i}^{m} c_{i''\uparrow}^{\dagger} (1 - c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}) \prod_{i'\neq i} c_{i\uparrow}^{\dagger}|0\rangle \tag{7}$$

$$= (-1)^m \prod_{i''\neq i}^{m} c_{i''\uparrow}^{\dagger} \prod_{i'\neq i} c_{i\uparrow}^{\dagger}|0\rangle \tag{8}$$

も有用な式である。

2　基底

2.1　一般

このハミルトニアンの基底状態を求めたいとする。この時、可能な全ての状態がどのようなものになっているかを調べる。まず、$N=1$ の孤立サイトを考えてみる。この時、可能な全ての状態は

$$|0\rangle,\ c_{1\uparrow}^{\dagger}|0\rangle,\ c_{1\downarrow}^{\dagger}|0\rangle,\ c_{1\downarrow}^{\dagger}c_{1\uparrow}^{\dagger}|0\rangle \tag{9}$$

の四つである。この四つを基底として考えてハミルトニアンを行列表示することを考える。この時、

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}|0\rangle &= 0, \qquad (10)\\
\mathcal{H}c_{1\uparrow}^{\dagger}|0\rangle &= -\mu c_{1\uparrow}^{\dagger}|0\rangle, \qquad (11)\\
\mathcal{H}c_{1\downarrow}^{\dagger}|0\rangle &= -\mu c_{1\downarrow}^{\dagger}|0\rangle, \qquad (12)\\
\mathcal{H}c_{1\downarrow}^{\dagger}c_{1\uparrow}^{\dagger}|0\rangle &= -\mu c_{1\uparrow}^{\dagger}c_{1\uparrow}c_{1\downarrow}^{\dagger}c_{1\uparrow}^{\dagger}|0\rangle - \mu c_{1\downarrow}^{\dagger}c_{1\downarrow}c_{1\downarrow}^{\dagger}c_{1\uparrow}^{\dagger}|0\rangle + U c_{1\uparrow}^{\dagger}c_{1\uparrow}c_{1\downarrow}^{\dagger}c_{1\downarrow}c_{1\downarrow}^{\dagger}c_{1\uparrow}^{\dagger}|0\rangle \qquad (13)\\
&= (-2\mu+U)c_{1\downarrow}^{\dagger}c_{1\uparrow}^{\dagger}|0\rangle \qquad (14)
\end{aligned}$$

となるので、この基底を使ったハミルトニアンの行列表示は

$$H = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2\mu+U \end{pmatrix} \tag{15}$$

である。このハミルトニアンはすでに対角行列なので、特に数値的対角化は必要ない。

サイト数が $2(N=2)$ のとき、ハミルトニアンを行列表示するための基底はいくつ必要だろうか。1 サイトには上述したように 4 つの取りうる状態が存在する。そして、1 つ目のサイトの状態を決めたとしても、もう一つのサイトの状態もやはり 4 通り存在する。つまり、$4\times4=16$ 通りである。N サイトある場合には、4^N 通りの状態が存在し、これはハミルトニアンを行列表示するためには 4^N 個の基底を用意しなければならない、ということになる。

さて、このようなハミルトニアンの基底を効率的に記述するにはどうすれば良いだろうか。$N=1$ の時を考える。考えている粒子はフェルミオンなので、あるスピンを持つ粒子は一つのサイトにしか入れない。これは、

$$\begin{aligned}
|0\rangle &\to |00\rangle, \qquad (16)\\
c_{1\uparrow}^{\dagger}|0\rangle &\to |01\rangle, \qquad (17)\\
c_{1\downarrow}^{\dagger}|0\rangle &\to |10\rangle, \qquad (18)\\
c_{1\downarrow}^{\dagger}c_{1\uparrow}^{\dagger}|0\rangle &\to |11\rangle \qquad (19)
\end{aligned}$$

のように、0 と 1 で表現することが可能であることを意味する。また、0 と 1 のみで表現することができる、ということは、この数字を二進法とみなすことができて、

$$\begin{aligned}
|0\rangle &\to |0\rangle, \qquad (20)\\
c_{1\uparrow}^{\dagger}|0\rangle &\to |1\rangle, \qquad (21)\\
c_{1\downarrow}^{\dagger}|0\rangle &\to |2\rangle, \qquad (22)\\
c_{1\downarrow}^{\dagger}c_{1\uparrow}^{\dagger}|0\rangle &\to |3\rangle \qquad (23)
\end{aligned}$$

のように十進法の数字を割り当てることで基底をナンバリングすることができる。

この記法がどのように効率的であるかを具体例を通じて見てみよう。$N=4$ のケースを考える。この時、二進法の桁数は、スピン成分があるので全部で 8 となる。例えば、基底の一つの $|52\rangle$ は

$$|52\rangle = |00110100\rangle = c^\dagger_{2\downarrow}c^\dagger_{1\downarrow}c^\dagger_{3\uparrow}|0\rangle \tag{24}$$

であるが、この状態に対して消滅演算子を作用させる場合、

$$c_{2\downarrow}|52\rangle = |00010100\rangle = |20\rangle, \tag{25}$$
$$c_{1\downarrow}|52\rangle = (-1)|00100100\rangle = (-1)|36\rangle, \tag{26}$$
$$c_{3\uparrow}|52\rangle = (-1)^2|00110000\rangle = |48\rangle, \tag{27}$$
$$c_{4\uparrow}|52\rangle = 0 \tag{28}$$

と簡単に計算することができる。ここで、消滅演算子は対応するサイトが 1 の時のみ別の状態となり、その際、作用させたサイトより左側にある 1 の数 m に応じて因子 $(-1)^m$ がつくことになる。生成演算子の場合は逆で、対応するサイトが 0 の時のみ別の状態となる。因子は同じようにつけることになる。つまり、生成あるいは消滅演算子をかける作業は、

1. 十進数から二進数への変換をする
2. 消滅演算子の場合は対応するサイトが 1 かどうか、生成演算子の場合は 0 かどうかを判別する
3. 演算子を作用できる場合、対応する 1 を 0、あるいは 0 を 1 にする
4. 生成あるいは消滅演算子をあるサイトに作用させるときに、それより左側の 1 の数を数えて因子を返す
5. 二進数から十進数への変換をする

というそれぞれの操作ができるようにしておけばよいことになる。

例として、$N=2$ を考える。基底は全部で 16 個ある。ここで、$|1111\rangle = c^\dagger_{2\downarrow}c^\dagger_{1\downarrow}c^\dagger_{2\uparrow}c^\dagger_{1\uparrow}|0\rangle$ とする。この時、全ての基底に対してハミルトニアンを作用させると、

$$\mathcal{H}|0\rangle = \mathcal{H}|0000\rangle = 0, \tag{29}$$
$$\mathcal{H}|1\rangle = \mathcal{H}|0001\rangle = -t|0010\rangle - \mu|0001\rangle, \tag{30}$$
$$= -t|2\rangle - \mu|1\rangle, \tag{31}$$
$$\mathcal{H}|2\rangle = \mathcal{H}|0010\rangle = -t|0001\rangle - \mu|0010\rangle, \tag{32}$$
$$= -t|1\rangle - \mu|2\rangle, \tag{33}$$
$$\mathcal{H}|3\rangle = \mathcal{H}|0011\rangle = -\mu|0011\rangle - \mu|0011\rangle, \tag{34}$$
$$= -2\mu|3\rangle, \tag{35}$$
$$\mathcal{H}|4\rangle = \mathcal{H}|0100\rangle = -t|1000\rangle - \mu|0100\rangle, \tag{36}$$
$$= -t|8\rangle - \mu|4\rangle, \tag{37}$$
$$\mathcal{H}|5\rangle = \mathcal{H}|0101\rangle = -t|1001\rangle - t(-1)|0110\rangle - \mu|0101\rangle - \mu|0101\rangle + U|0101\rangle, \tag{38}$$
$$= -t|9\rangle + t|6\rangle + (-2\mu + U)|5\rangle, \tag{39}$$
$$\mathcal{H}|6\rangle = \mathcal{H}|0110\rangle = -t|1010\rangle - t(-1)|0101\rangle - \mu|0110\rangle - \mu|0110\rangle, \tag{40}$$
$$= -t|10\rangle + t|5\rangle - 2\mu|6\rangle, \tag{41}$$
$$\mathcal{H}|7\rangle = \mathcal{H}|0111\rangle = -t|1011\rangle - 3\mu|0111\rangle + U|0111\rangle, \tag{42}$$
$$= -t|11\rangle + (-3\mu + U)|7\rangle, \tag{43}$$

$$
\begin{aligned}
\mathcal{H}|8\rangle &= \mathcal{H}|1000\rangle = -t|0100\rangle - \mu|1000\rangle, && (44)\\
&= -t|4\rangle - \mu|8\rangle, && (45)\\
\mathcal{H}|9\rangle &= \mathcal{H}|1001\rangle = -t|0101\rangle - t(-1)|1010\rangle - 2\mu|1001\rangle, && (46)\\
&= -t|5\rangle + t|10\rangle - 2\mu|9\rangle, && (47)\\
\mathcal{H}|10\rangle &= \mathcal{H}|1010\rangle = -t|0110\rangle - t(-1)|1001\rangle - 2\mu|1010\rangle + U|1010\rangle, && (48)\\
&= -t|6\rangle + t|9\rangle + (-2\mu + U)|10\rangle, && (49)\\
\mathcal{H}|11\rangle &= \mathcal{H}|1011\rangle = -t|0111\rangle - 3\mu|1011\rangle + U|1011\rangle, && (50)\\
&= -t|7\rangle + (-3\mu + U)|11\rangle, && (51)\\
\mathcal{H}|12\rangle &= \mathcal{H}|1100\rangle = -2\mu|1100\rangle, && (52)\\
&= -2\mu|12\rangle, && (53)\\
\mathcal{H}|13\rangle &= \mathcal{H}|1101\rangle = -t(-1)^2|1110\rangle - 3\mu|1101\rangle + U|1101\rangle, && (54)\\
&= -t|14\rangle + (-3\mu + U)|13\rangle, && (55)\\
\mathcal{H}|14\rangle &= \mathcal{H}|1110\rangle = -t(-1)^2|1101\rangle - 3\mu|1110\rangle + U|1110\rangle, && (56)\\
&= -t|13\rangle + (-3\mu + U)|14\rangle, && (57)\\
\mathcal{H}|15\rangle &= \mathcal{H}|1111\rangle = -4\mu|1111\rangle + 2U|1111\rangle, && (58)\\
&= (-4\mu + 2U)|1111\rangle. && (59)
\end{aligned}
$$

となり、ハミルトニアンを行列表示できるようになる。

これを数値計算としてプログラムする場合、

1. 状態数の数 i だけの回るループを用意する
2. ハミルトニアンを i に作用させ、出てきた状態 j が、ハミルトニアン行列の H_{ij} となる
3. 非ゼロの H_{ij} のみ保存しておき、疎行列を作る

とすればよい。ここで、状態にハミルトニアンを作用させるときは、二進数へ変換、因子の計算、1 を 0 に 0 を 1 に、十進数へ変換という一連の流れを行えばよい。出来上がった疎行列に対して、LOBPCG 法などの最小固有値を求める反復的解法を利用すれば、非常に高速に計算ができる。

2.2　粒子数が保存する場合

次に、粒子数が保存する場合を考える。サイト数が N のとき、粒子数が n であるとする。スピン自由度があるので、$2N$ 個のサイトに n 個の粒子をばらまく時の組み合わせの数と等しく、${}_{2N}C_n$ 個の基底を取る必要がある。

この場合でも上述したやり方とほぼ同じやり方で計算ができる。ここで、状態のラベルを k とする。そして、それぞれの k が上述した十進数のどれに対応するかの配列を作成しておく。以後は全く同じである。ハミルトニアンは粒子数を保存する演算子であるため、ハミルトニアンを作用させてできる状態は必ず元々の基底で表現できるため、作用させてできる状態のラベル k' を得ることができる。よって、$H_{kk'}$ を計算することができる。

例えば、$N = 2$ でハーフフィリング (粒子数 $n = 2$) のとき、基底の数は ${}_4C_2 = 6$ である。上述した 16 通りの基

底のうち、

$$|0011\rangle = |3\rangle, \tag{60}$$
$$|0101\rangle = |5\rangle, \tag{61}$$
$$|0110\rangle = |6\rangle, \tag{62}$$
$$|1001\rangle = |9\rangle, \tag{63}$$
$$|1010\rangle = |10\rangle, \tag{64}$$
$$|1100\rangle = |12\rangle \tag{65}$$

が対応する基底である。つまり、

1. 指定した粒子数を持つ状態数の数 i だけの回るループを用意する
2. ハミルトニアンを i に作用させ、出てきた状態 j が、ハミルトニアン行列の H_{ij} となる
3. 非ゼロの H_{ij} のみ保存しておき、疎行列を作る

とするだけで、粒子数が保存された計算を実行できる。

2.3 各スピンごとに粒子数が保存する場合

各スピンごとに粒子数が保存する場合を考える。この時、サイト数を N、アップスピンの数を $n_\uparrow$、ダウンスピンの数を $n_\downarrow$ とする。必要な基底の数は、${}_NC_{n_\uparrow}\,{}_NC_{n_\downarrow}$ である。例えば、$N=2$ で $n_\uparrow = n_\downarrow = 1$ のハーフフィリングの場合は、4 通り：

$$|0101\rangle = |5\rangle, \tag{66}$$
$$|0110\rangle = |6\rangle, \tag{67}$$
$$|1001\rangle = |9\rangle, \tag{68}$$
$$|1010\rangle = |10\rangle, \tag{69}$$

である。ハミルトニアンがスピンごとの粒子数を保存しているので、この場合も使う状態に対してハミルトニアンを作用させて非ゼロの行列要素を計算すればよい。つまり、指定した粒子数を持った状態 i に対するループを行えばハミルトニアンを作ることができる。