

HΦの演習問題 (解説)

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 (full diag)

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

4. Lanczos法, LOBCG法で計算してみましょう

例題1:解答 I

1-1. Heisenberg dimer の解答

```
L = 2
model = "Spin"
method = "FullDiag"
lattice = "chain"
J = 0.5
2Sz = 0
```

J=0.5なのは2サイトで
周期境界条件だとJ
を二回数えてしまうため

1-2. spin-S Heisenberg dimer の解答

```
L = 2
model = "Spin"
method = "FullDiag"
lattice = "chain"
J = 0.5
2Sz = 0
2S = 2
```

2S=2とするとS=1になります
(指定しなければ2S=1)。
2S=3, 2S=4などとすれば、
S=3/2, S=2の模型を取り扱えます。

例題1:解答 II

1-3. Hubbard dimer の解答

```
L = 2
model = "Hubbard"
method = "FullDiag"
lattice = "chain"
t = 0.5
U = 4
2Sz = 0
nelec = 2
```

これも、 $t=0.5$ なのは2サイトで
周期境界条件だと t
を二回数えてしまうため

1-4. Heisenberg dimer の解答

```
L = 2
model = "Spin"
method = "Lanczos"
lattice = "chain"
J = 0.5
2Sz = 0
```

```
L = 2
model = "Spin"
method = "CG"
lattice = "chain"
J = 0.5
2Sz = 0
```

method="Lanczos", "CG"とすることでLanczos,
LOBCGの計算ができます。

Lanczosは正しい値はでてききますが、
収束判定条件がヒルベルト空間が小さい場合に対応して
いないためエラーメッセージがでるので注意して下さい

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.高磁場をかけてLanczos、LOBCGで計算してみましょう
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)
4. (発展) $S(q, \omega)$ を計算してみましょう。

例題2:解答 I

1-1. Heisenberg chainの解答

```
L = 12
model = "Spin"
method = "Lanczos"
lattice = "chain"
J = 1.0
2Sz = 0
```

結果: output/zvo_Lanczos_Step.dat

$E_0 = -5.3873909174$, $E_1 = -5.0315434037$

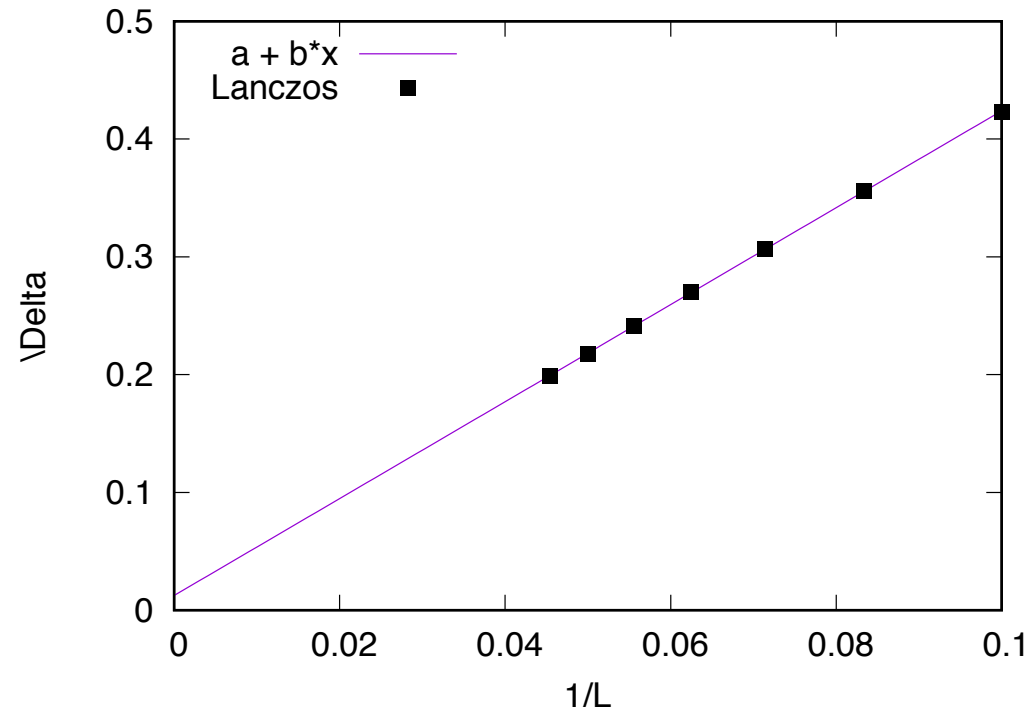
$\Delta E = E_1 - E_0 \sim 0.355$

L依存性は次のページ

例題 2: $S = 1/2$ Heisenberg chain

結果

- $S = 1/2$ Heisenberg chain はギャップの閉じるぎりぎりのところであり、 $\log L$ の対数補正が現れるので結構数値解析が難しい



- $S = 1/2$ XY chain ($J_z = 0, J_x = 1.0$) ではもっと綺麗にかける
 - → 練習問題
- $S=1$ Heisenberg chain にするとギャップが見えるはず (Haldane gap)
→ 練習問題 [input file で $2S=2$ とするだけ]

例題2:解答 II

1-2. Heisenberg chainの解答

```
L = 12
model = "SpinGC"
method = "Lanczos"
lattice = "chain"
J = 1.0
H = 10.0
```

```
L = 12
model = "SpinGC"
method = "CG"
lattice = "chain"
J = 1.0
H = 10.0
exct = 4
```

Hをかける→SpinGC (Sz非保存)

Lanczos→偽縮退が見える

```
stp = 74 -57.0000000000 -56.9998301292
stp = 76 -57.0000000000 -56.9999967206
stp = 78 -57.0000000000 -56.9999998797
```

CG→偽縮退はみえない

```
i= 0 Energy=-57.000000 N= 12.000000
i= 1 Energy=-49.000000 N= 12.000000
i= 2 Energy=-48.866025 N= 12.000000
i= 3 Energy=-48.866025 N= 12.000000
```


例題2:解答 III

1-3. Heisenberg chainの解答

```
L = 12  
model = "Spin"  
method = "Lanczos"  
lattice = "chain"  
J = 1.0  
2Sz = 0  
2S = 2
```

L依存性は各自の演習問題

1-4. $S(q, \omega)$

別ページにアップ予定

例題3: J1-J2ハイゼンベルク模型

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

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

スクリプトの例

```
L = 4  
W = 4  
model = "Spin"  
method = "Lanczos"  
lattice = "square lattice"  
J = 2.0  
J' = 1.0  
2Sz = 0
```

例題3: 基底状態の答え

J_1 - J_2 Heisenberg model, $N_s=4\times 4$, $J_1=2.0$

E. Dagotto and A. Moreo, PRB (R) 39 , 4744 (1989)

TABLE I. Ground-state energy (E_0) and first excited-state energy (E_1) per site (both singlets with zero momentum) of the 2D Heisenberg model with frustration as a function of J_2 on a 4×4 lattice. The error is in the last digit.

J_2	E_0	E_1
0.950	-1.065978	-1.0160
1.100	-1.047189	-1.0254
1.150	-1.047183	-1.0307
1.200	-1.051792	-1.0380
1.325	-1.089305	-1.0804
1.400	-1.127716	-1.1169
1.500	-1.188546	-1.1691
1.600	-1.254670	-1.2233
1.750	-1.358437	-1.3072

今ならPCで数秒で計算できる。

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

スクリプトの例

```
W = 3
L = 3
model = "SpinGC"
method = "Lanczos"
lattice = "Honeycomb"
J0x = -1.0
J0y = 0.0
J0z = 0.0
J1x = 0.0
J1y = -1.0
J1z = 0.0
J2x = 0.0
J2y = 0.0
J2z = -1.0
```

例題5: Hubbard chain

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

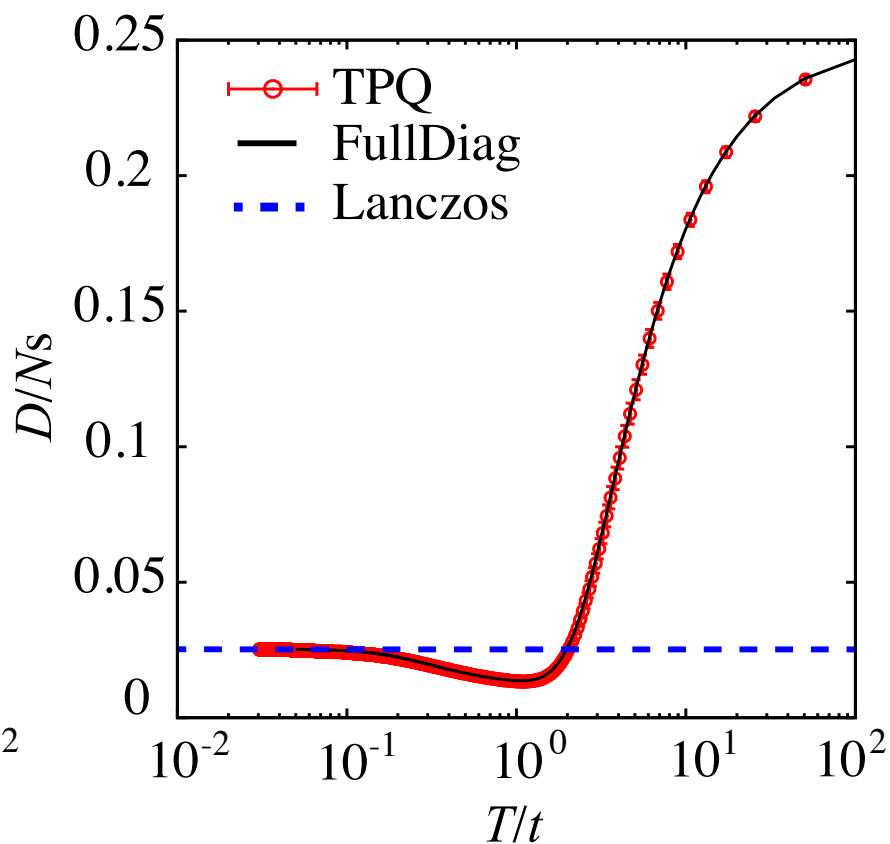
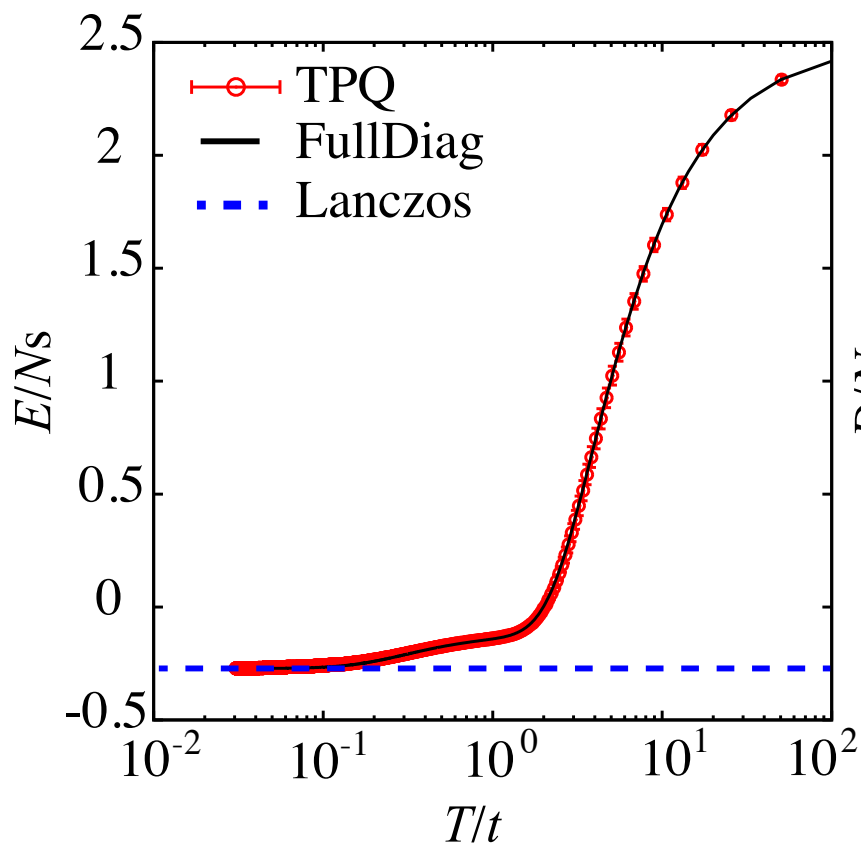
1. Lanczosでエネルギー・二重占有度を計算 (サイズ8サイト位)
2. TPQで比熱・二重占有度を計算:
3. (発展) 全対角化でアンサンブル平均を計算してTPQと比較

スクリプトの例

```
L = 8
model = "FermionHubbard"
method = "Lanczos"
lattice = "chain"
t = 1.0
U = 8.0
nelec = 8
2Sz = 0
```

例題5: 計算例

Comparison of FullDiag, TPQ, Lanczos method
Hubbard model, $L=8$, $U/t=8$, half filling, $S_z=0$



TPQ method works well !