

# HΦの演習問題 (問題)

三澤 貴宏、吉見一慶

東京大学物性研究所 特任研究員 (PCoMS PI)



例題1: spin 1/2 dimer (fulldiag)

例題2: spin 1/2 chain (Lanczos+LOBCG+Spectrum)

例題3: J1-J2 Heisenberg model(Lanczos,TPQ)

例題4: Kitaev model (Lanczos,TPQ)

例題5: Hubbard chain (Lanczos,TPQ)

例題6: Kitaev model (LOBCG, for parallel computer)

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

(スパコンでプロセス数依存性を見してみるなど)

# 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

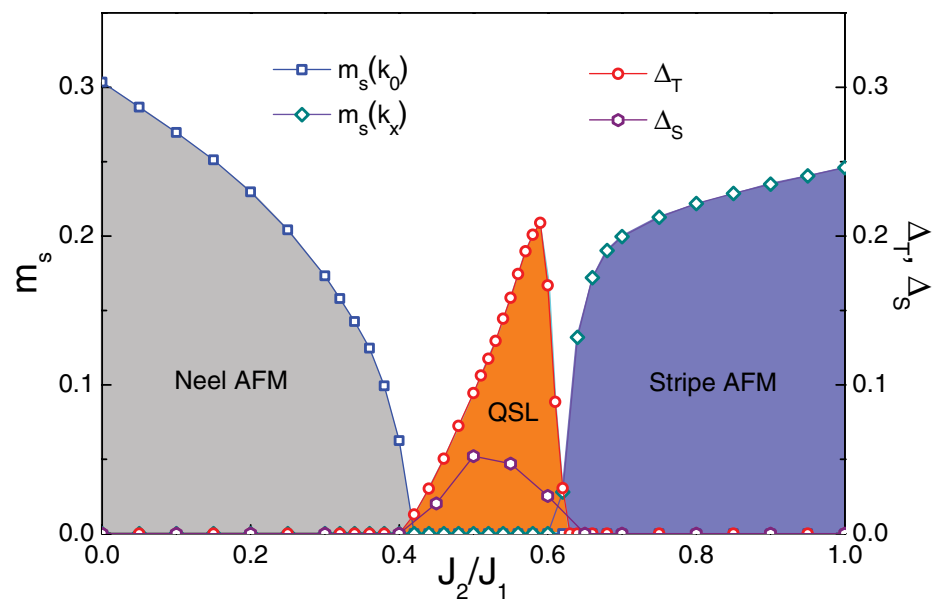
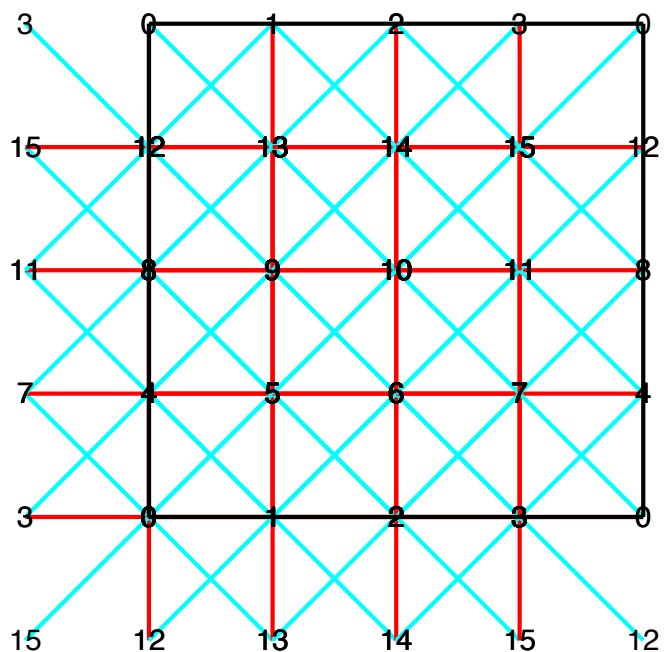
$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j$$

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

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

## 最近接 J1, 次最近接 J2



PRB 86, 024424(2012)

lattice.gpで描画可能

J2/J1~0.5で非磁性の  
基底状態(スピン液体?)

# 例題3: J1-J2ハイゼンベルグ模型

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

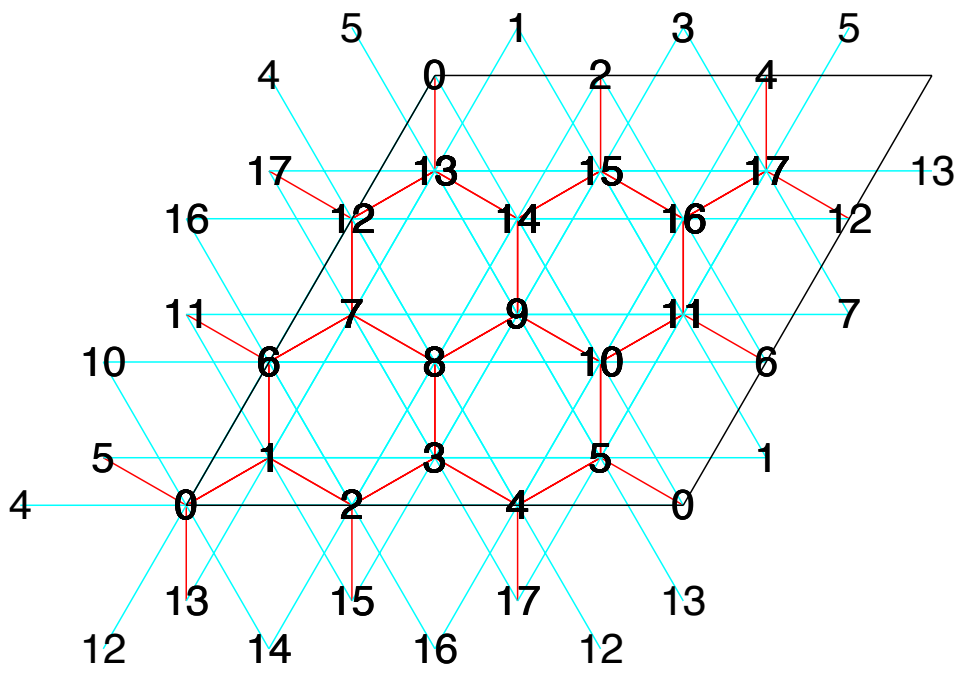
1. Lanczosでエネルギーを計算 (サイズ4×4位)
2. TPQで比熱を計算(J2/J1~0.5でどうなるか?)
3. (発展)余裕があればスピン相関も計算してみましよう



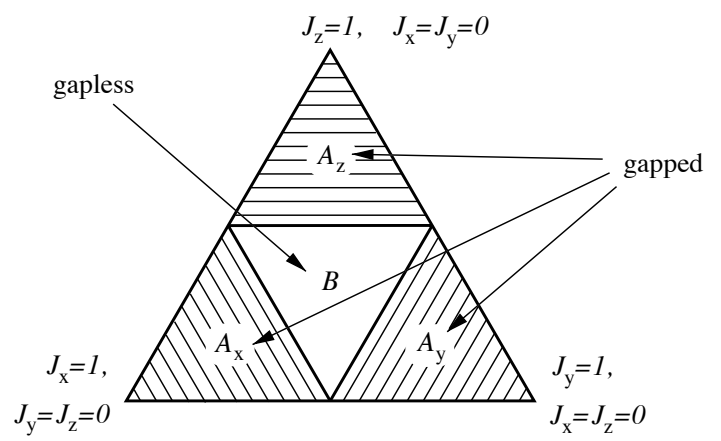
# 例題4: Kitaev model

$$H = -J_x \sum_{x\text{-bond}} S_i^x S_j^x - J_y \sum_{y\text{-bond}} S_i^y S_j^y - J_z \sum_{z\text{-bond}} S_i^z S_j^z$$

3方向のそれぞれが  
Jx, Jy, Jzで相互作用



## 相図



Annals of Physics 321, 2-111 (2016)

lattice.jpで描画可能

可解模型→スピン液体

## 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)次近接のスピンの相関が厳密に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



# 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





## 例題6: 並列計算によるキタエフ模型

$$H = -J_x \sum_{x\text{-bond}} S_i^x S_j^x - J_y \sum_{y\text{-bond}} S_i^y S_j^y - J_z \sum_{z\text{-bond}} S_i^z S_j^z$$

並列計算機を使って基底状態の縮退度を求めてみましょう。

1. 24サイト ( $a0w = 2, a0l = 2, a1w = 4, a1l = -2$ )の基底状態の縮退度をCG計算で求めてみましょう。
2. (i18では難しいです) 32サイト ( $W=4, L=4$ )の縮退度は？

ヒント: 基底状態から4つ目まで(exct=4)の固有値をmethod="CG"で計算してみてください。