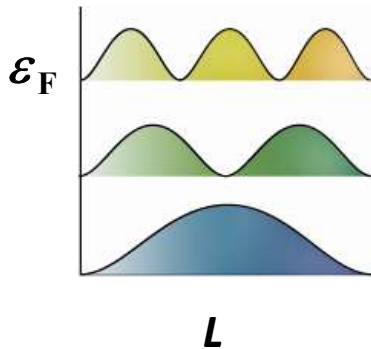


波動方程式と確率解釈

シュレディンガー方程式 1926年 Schrödinger

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right\} \Psi(t, x) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, x)$$

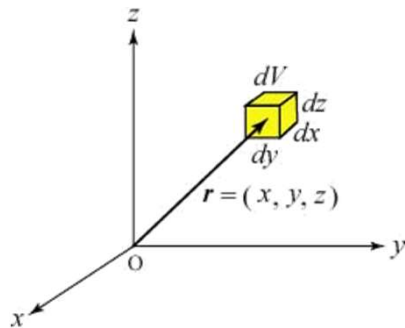
$$V(x) = 0 \quad \downarrow \quad \Psi_n(t, x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp(ik_n x - i\omega_n t)$$



エネルギーの量子化

$$\frac{\hbar^2}{2m} k_n^2 = \frac{p^2}{2m} = E = \hbar\omega_n$$

波動関数 Ψ の確率解釈



粒子の存在確率 P

$$P(x, y, z, t) dx dy dz = |\Psi(x, y, z, t)|^2 dx dy dz$$

量子多体問題の解法

対角項

$$H_D = J \sum_i S_i^z S_{i+1}^z$$

$$\langle \uparrow\uparrow | S_i^z S_{i+1}^z | \uparrow\uparrow \rangle = 1/4$$

$$\langle \uparrow\downarrow | S_i^z S_{i+1}^z | \uparrow\downarrow \rangle = -1/4$$

$$\langle \downarrow\uparrow | S_i^z S_{i+1}^z | \downarrow\uparrow \rangle = -1/4$$

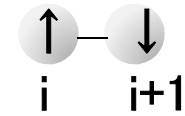
$$\langle \downarrow\downarrow | S_i^z S_{i+1}^z | \downarrow\downarrow \rangle = 1/4$$

S = 1/2 Heisenberg model

$$H = J \sum_i S_i \cdot S_{i+1}$$

$$= J \sum_i \left(S_i^z S_{i+1}^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+) \right)$$

ハミルトニアン of 行列表現



非対角項

$$H' = J \frac{1}{2} \sum_i (S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+)$$

$$\langle \downarrow\uparrow | S_i^- S_{i+1}^+ | \uparrow\downarrow \rangle = 1$$

$$\langle \uparrow\downarrow | S_i^+ S_{i+1}^- | \downarrow\uparrow \rangle = 1$$

	↑↑	↑↓	↓↑	↓↓
↑↑	$J/4$	0	0	0
↑↓	0	$-J/4$	$J/2$	0
↓↑	0	$J/2$	$-J/4$	0
↓↓	0	0	0	$J/4$

基底の構成

4-spin system

1	2	3	4
↑	↓	↑	↓
8	4	2	1

十進数

スピン状態の基底

$S^z = 2$ $\begin{matrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow \end{matrix}$

$S^z = 1$ $\begin{matrix} \uparrow & \uparrow & \uparrow & \downarrow \\ \uparrow & \downarrow & \uparrow & \uparrow \end{matrix}$ $\begin{matrix} \uparrow & \uparrow & \downarrow & \uparrow \\ \downarrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow \end{matrix}$

$S^z = 0$ $\begin{matrix} \uparrow & \uparrow & \downarrow & \downarrow \\ \uparrow & \downarrow & \downarrow & \uparrow \\ \downarrow & \uparrow & \downarrow & \uparrow \end{matrix}$ $\begin{matrix} \downarrow & \downarrow & \uparrow & \uparrow \\ \uparrow & \downarrow & \uparrow & \downarrow \\ \downarrow & \uparrow & \uparrow & \downarrow \end{matrix}$

Hamiltonian for $S^z=1$				
	14	13	11	7
	↑↑↑↓	↑↑↓↑	↑↓↑↑	↓↑↑↑
14 ↑↑↑↓	$J/4$	$J/2$	0	0
13 ↑↑↓↑	$J/2$	$-J/4$	$J/2$	0
11 ↑↓↑↑	0	$J/2$	$-J/4$	$J/2$
7 ↓↑↑↑	0	0	$J/2$	$J/4$

基底関数を2進数で表現してビット演算により
行列要素の位置を求める

$\begin{matrix} 8 & 4 & 2 & 1 \\ \uparrow & \uparrow & \downarrow & \uparrow \end{matrix} \rightarrow 1101$
 $\begin{matrix} 8 & 4 & 2 & 1 \\ \uparrow & \downarrow & \uparrow & \uparrow \end{matrix} \rightarrow 1011$

$(8+4+1) - 4+2$

ハミルトニアンの対角化

$H |\psi_i\rangle = E_i |\psi_i\rangle$

H の固有状態で表現

ベキ乗法による対角化

$$|v\rangle = a_0 |\psi_0\rangle + a_1 |\psi_1\rangle + a_2 |\psi_2\rangle + \dots \quad \leftarrow \text{任意の初期ベクトル}$$

$$H^n |v\rangle = a_0 (E_0)^n |\psi_0\rangle + a_1 (E_1)^n |\psi_1\rangle + a_2 (E_2)^n |\psi_2\rangle + \dots$$

$$\left(\frac{1}{E_0}\right)^n H^n |v\rangle = a_0 |\psi_0\rangle + a_1 \left(\frac{E_1}{E_0}\right)^n |\psi_1\rangle + a_2 \left(\frac{E_2}{E_0}\right)^n |\psi_2\rangle + \dots$$

$\uparrow$
 基底状態の波動関数

$\downarrow$
 0

$\downarrow$
 0

$$H |\psi_0\rangle = E_0 |\psi_0\rangle$$

$\uparrow$
基底状態のエネルギー

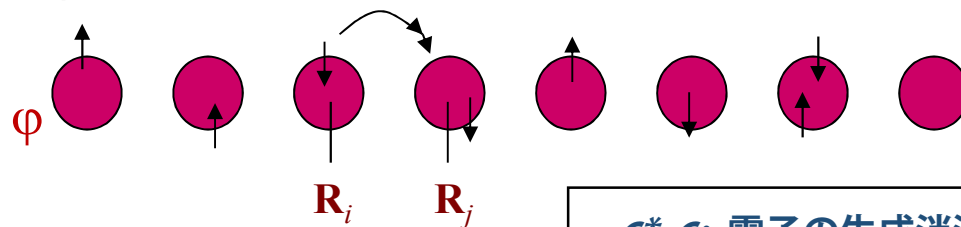
$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{E_1}{E_0}\right)^n = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{E_2}{E_0}\right)^n = 0$$

$$|E_0| > |E_1| \geq |E_2|$$

絶対値最大の固有値と固有ベクトルが得られる

量子多体問題 ハバード模型

直交する単一原子軌道 φ の格子



$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{j\sigma}^* c_{i\sigma} + U \sum_j n_{j\uparrow} n_{j\downarrow}$$

i, j : 原子軌道の指標 (site index)

s : スピン自由度 ($\uparrow$ or $\downarrow$)

飛び移り積分(transfer integral)

$$t_{ij} = \int d\mathbf{r} \varphi^*(\mathbf{r} + \mathbf{d}_{ij}) H \varphi(\mathbf{r})$$

$$\mathbf{d}_{ij} = \mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j$$

c^*, c : 電子の生成消滅演算子

$$\{c_{i\sigma}^*, c_{j\sigma'}\} = c_{i\sigma}^* c_{j\sigma'} + c_{j\sigma'} c_{i\sigma}^* = \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'}$$

$$\{c_{i\sigma}^*, c_{j\sigma'}^*\} = 0$$

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

フェルミオンの反交換関係

$$n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^* c_{i\sigma} \text{ : 数演算子}$$

H : 系の本来のハミルトニアン

(運動エネルギー+原子核からのクーロン+etc)

原子内電子間クーロン相互作用

$$U = \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \varphi^*(\mathbf{r}_1) \varphi^*(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \varphi(\mathbf{r}_2) \varphi(\mathbf{r}_1)$$

ハバード模型 $U=0$

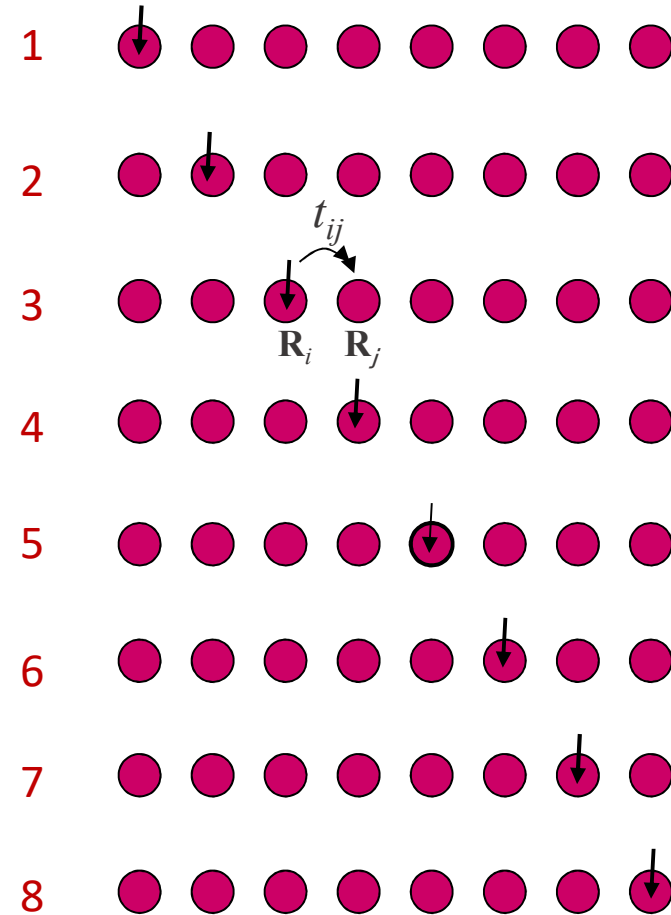
t_{ij} : 最隣接原子間遷移

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} t_{ij} c_j^* c_i$$

ハミルトニアン行列

$$H = \begin{array}{c} \begin{array}{cccccccc} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 \end{array} \\ \left[\begin{array}{cccccccc} 0 & t & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ t & 0 & t & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t & 0 & t & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t & 0 & t & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & t & 0 & t & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & t & 0 & t & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t & 0 & t \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t & 0 \end{array} \right] \begin{array}{c} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \\ 7 \\ 8 \end{array} \end{array}$$

基底の番号 i, j : 原子軌道の指標 (site index)



ハバード模型

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{j\sigma}^* c_{i\sigma} + U \sum_j n_{j\uparrow} n_{j\downarrow}$$

$G=0$ でない散乱過程をウムクラップ散乱という

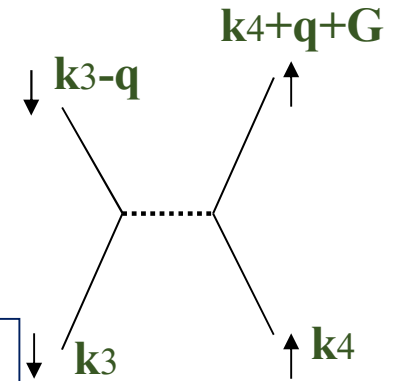
並進対称 (t_{ij} は $|i-j|$ の関数)



$$c_{i\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k}\sigma}$$

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^* c_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}1, \mathbf{k}2, \mathbf{k}3, \mathbf{k}4} c_{\mathbf{k}1\uparrow}^* c_{\mathbf{k}2\downarrow}^* c_{\mathbf{k}3\downarrow} c_{\mathbf{k}4\uparrow} \delta_{\mathbf{k}1+\mathbf{k}2, \mathbf{k}3+\mathbf{k}4+\mathbf{G}}$$

$$\frac{1}{N} \sum_{ij} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} t_{ij} e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{R}_j} e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{R}_i} = \sum_{(j-i)\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} t_{ij} e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)} \frac{1}{N} \sum_i e^{i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{R}_i} = \sum_{(j-i)\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} t_{ij} e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)} \delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}$$

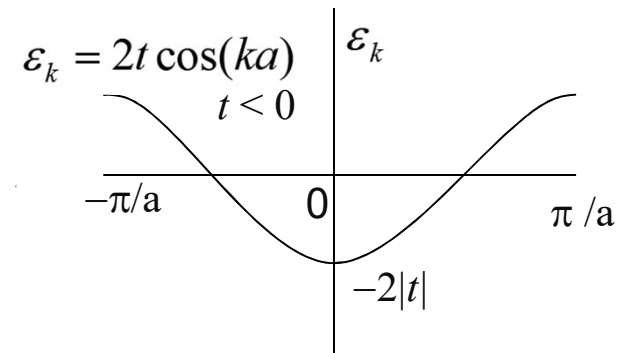


$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{1}{N} \sum_{\langle ij \rangle} (t_{ij} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} + c.c.)$$

一次元 最近接ホッピング t の場合

$$\varepsilon_k = 2t \cos(ka) \quad G = \frac{2\pi}{a}$$

一次元 最近接ホッピングの場合のバンド分散



パラメータ : U/t (相互作用の強さ)

N_e/N (電子密度) N_e : 電子数

ハミルトニアンに対角化

ベキ乗法による対角化

$$H|\psi_i\rangle = E_i|\psi_i\rangle$$

$$|v\rangle = a_0|\psi_0\rangle + a_1|\psi_1\rangle + a_2|\psi_2\rangle + \dots$$

$$H^n|v\rangle = a_0(E_0)^n|\psi_0\rangle + a_1(E_1)^n|\psi_1\rangle + a_2(E_2)^n|\psi_2\rangle + \dots$$

$$\left(\frac{1}{E_0}\right)^n H^n|v\rangle = a_0|\psi_0\rangle + a_1\left(\frac{E_1}{E_0}\right)^n|\psi_1\rangle + a_2\left(\frac{E_2}{E_0}\right)^n|\psi_2\rangle + \dots$$



↓
0

↓
0

基底状態の波動関数

$$H|\psi_0\rangle = E_0|\psi_0\rangle$$



基底状態のエネルギー

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{E_1}{E_0}\right)^n = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{E_2}{E_0}\right)^n = 0$$

$$|E_0| > |E_1| \geq |E_2|$$

励起状態の求め方

$$|v\rangle = a_0|\psi_0\rangle + a_1|\psi_1\rangle + a_2|\psi_2\rangle + \dots$$

$$|v_1\rangle = |v\rangle - a_0|\psi_0\rangle \quad a_0 = \langle\psi_0|v\rangle$$

$$H^n|v_1\rangle \rightarrow |\psi_1\rangle$$

$$n \rightarrow \infty$$

$$H|\psi_1\rangle = E_1|\psi_1\rangle$$



励起状態のエネルギー