

レポート課題(3)

① 2電子演算子

$$\hat{S}_{jz} = \frac{1}{2} (C_{j\uparrow}^\dagger C_{j\uparrow} - C_{j\downarrow}^\dagger C_{j\downarrow}) \quad S_j^+ = C_{j\uparrow}^\dagger C_{j\downarrow} \quad S_j^- = C_{j\downarrow}^\dagger C_{j\uparrow}$$

$$\hat{S}_{jx} = \frac{1}{2} (S_j^+ + S_j^-) = \frac{1}{2} (C_{j\uparrow}^\dagger C_{j\downarrow} + C_{j\downarrow}^\dagger C_{j\uparrow})$$

$$\hat{S}_{jy} = \frac{1}{2i} (S_j^+ - S_j^-) = \frac{1}{2i} (C_{j\uparrow}^\dagger C_{j\downarrow} - C_{j\downarrow}^\dagger C_{j\uparrow}) \quad (= \gamma \text{ i } \gamma)$$

反交換関係

$$\{C_{j\sigma}, C_{j\sigma'}^\dagger\} = C_{j\sigma} C_{j\sigma'}^\dagger + C_{j\sigma'}^\dagger C_{j\sigma} = \delta_{\sigma\sigma'} \quad \{C_{j\sigma}, C_{j\sigma'}\} = 0$$

から、交換関係

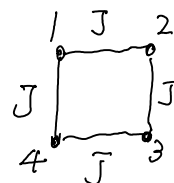
$$[S_x, S_y] = S_x S_y - S_y S_x = i S_z, \quad [S_y, S_z] = i S_x, \quad [S_z, S_x] = i S_y$$

を示せ。

② 4サイト周期的ハイゼンベルグモデル

* $t=t'$ $j=5$ は $j=1$

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= J \sum_{j=1}^4 S_j \cdot S_{j+1} = J \sum_{j=1}^4 (S_{jx} S_{j+1x} + S_{jy} S_{j+1y} + S_{jz} S_{j+1z}) \\ &= J \sum_{j=1}^4 \left\{ \frac{1}{2} (S_{j\uparrow} S_{j+1\downarrow} + S_{j\downarrow} S_{j+1\uparrow}) + S_{jz} S_{j+1z} \right\} \end{aligned}$$



を考える。全状態数は $2^4 = 16$ 、

$$\begin{matrix} 4 & 3 & 2 & 1 \\ | \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow \rangle, | \downarrow & \downarrow & \downarrow & \uparrow \rangle, | \downarrow & \downarrow & \uparrow & \downarrow \rangle, \dots | \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow \rangle \end{matrix}$$

②-1

全 $S_z = 0$ の状態 $\uparrow 2$ 個、 $\downarrow 2$ 個は $4C_2 = 6$ 状態ある

上の様な記法で全を書き出せ。 例 / $| \uparrow \uparrow \downarrow \downarrow \rangle$

②-2

その6状態がブロック対角化されたハミルトニアンの行列要素を書き出せ。ヒント: ハミルトニアンは

$$S_{1\uparrow} S_{2\downarrow} |\overset{4}{\downarrow} \overset{3}{\uparrow} \overset{2}{\uparrow} \overset{1}{\downarrow}\rangle = |\uparrow \downarrow \downarrow \uparrow\rangle$$

$$S_{1\uparrow} S_{2\downarrow} |\uparrow \downarrow \downarrow \uparrow\rangle = 0$$

$$S_{1\downarrow} S_{2\uparrow} |\uparrow \downarrow \downarrow \uparrow\rangle = \frac{1}{2} \times \left(-\frac{1}{2}\right) |\uparrow \downarrow \downarrow \uparrow\rangle$$

の様に作用する。
