

Bulk Property on Cayley Tree with Smooth Boundary Condition

堀田 弘明 (Hotta, Hiro-Aki)

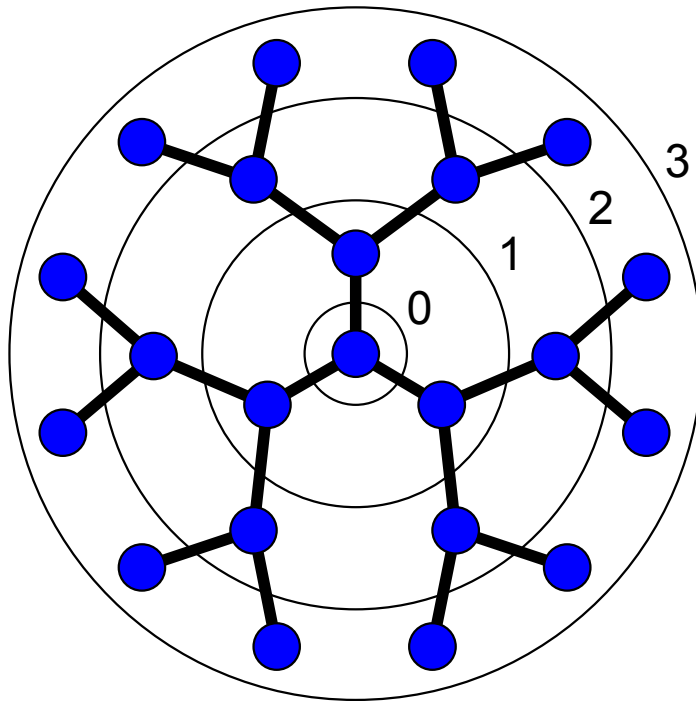
神戸大学大学院理学研究科

H.-A. H, arXiv: 1412.3053

概要

- Cayley樹上の再近接ホッピング模型に
スムーズ境界条件を課した
- 粒子数密度とボンドエネルギーを計算した
- 樹の中心ではそれらの物理量は
Bethe格子における解とよく一致した

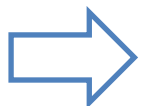
Cayley樹



$z=3$, $M=3$ のCayley樹

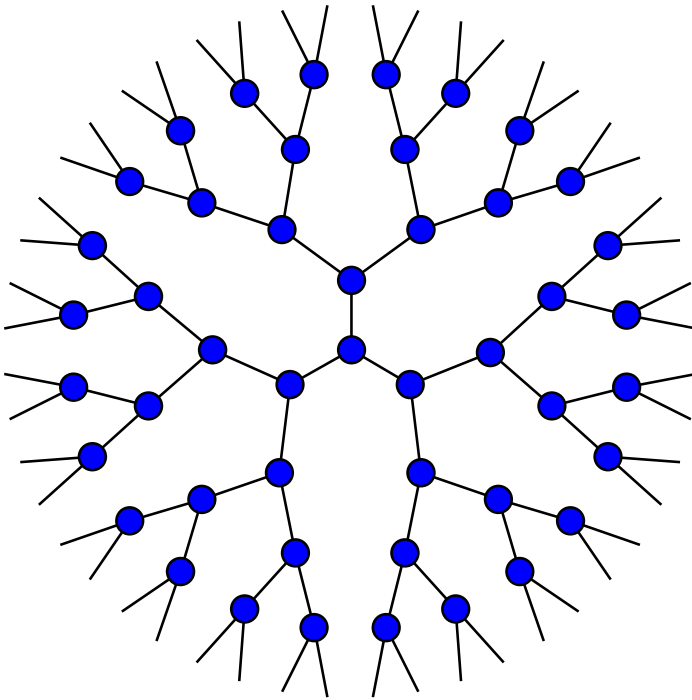
- 境界以外で配位数 z が一定の木グラフ
- Site-Centered の樹を考える
- 中心サイトの周りに M 個の層

境界上のサイト数は M 対して指数的に増加



Cayley樹では境界の効果が支配的

Bethe格子



内部の**深い**ところではバルクの性質

Bethe格子で記述可能



配位数一定の一樣な無限木
(境界のない無限サイズのCayley樹)

比較的小さな系で
バルクの性質を見るには？

境界効果の大きさは境界条件に依存する

開放的境界条件 (OBC)

- フリーデル振動がバルク量を乱す

周期的境界条件 (PBC)

- 端をなくすことでフリーデル振動を抑える
- Cayley樹に課すのは非自明な問題

スムーズ境界条件 (SBC)

M. Vekić, and S. R. White,
PRL **71**, 4283 (1993); PRB **53**, 14552 (1996).

- 境界近傍のエネルギースケールを小さくする

再近接ホッピング模型

スピンレス・フェルミオン系

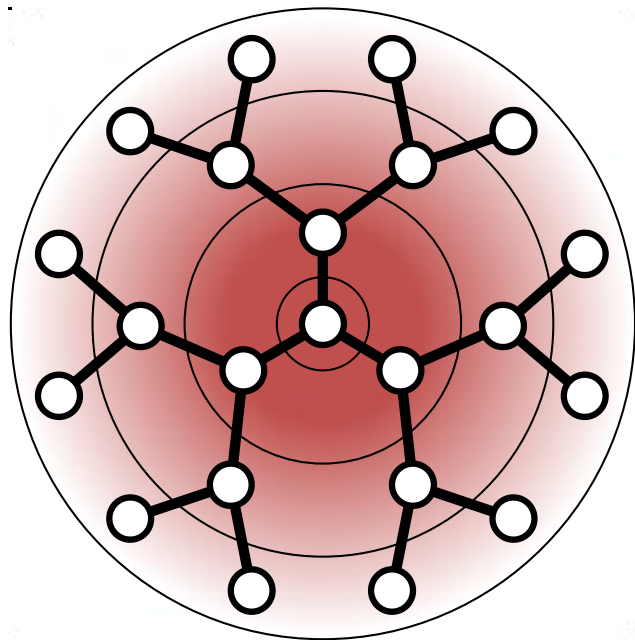
$$H = -t \sum_{\langle R, R' \rangle} (c_R^\dagger c_{R'} + \text{h.c.}) - \mu \sum_R c_R^\dagger c_R$$

再近接サイト間のホッピング

化学ポテンシャル

スムーズ境界条件

外側へ行くほど
エネルギースケールを小さく



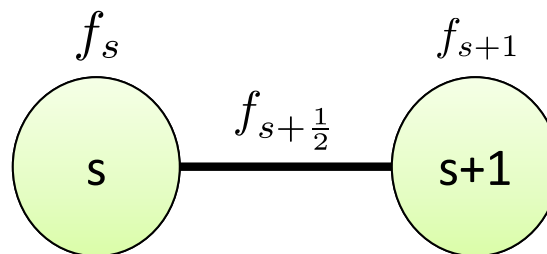
第 s 層の化学ポテンシャル

$$\mu \rightarrow \mu f_s$$

第 s 層と第 $s+1$ 層との間の
ホッピング

$$t \rightarrow t f_{s+\frac{1}{2}}$$

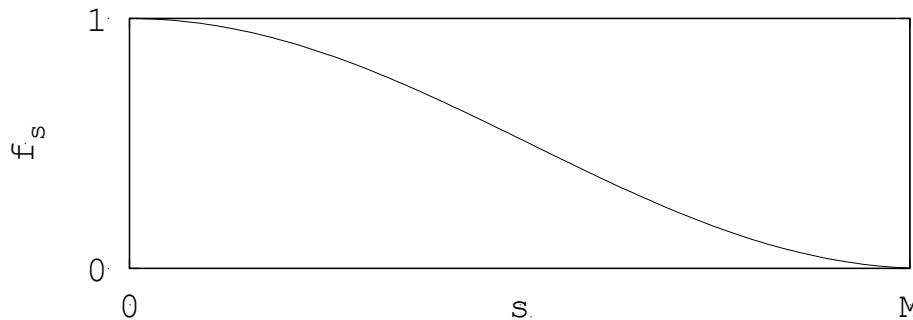
f_s : s に関して単調減少する連続関数



サイン二乗変形 (Sine-Square Deformation; SSD)

A. Gendiar, R. Krcmar, and T. Nishino,
PTP **122**, 953 (2009); **123**, 393 (2011).

$$f_s = \sin^2 \left[\frac{\pi}{2M+1} \left(s + M + \frac{1}{2} \right) \right]$$



1次元系では

- フリーデル振動を効果的に抑えることができる
- いくつかの系で、基底状態はPBCのそれと一致

2次元系でも有効

物理量の計算方法

ハミルトニアンには粒子間相互作用がない

粒子密度 $n_R \equiv \langle c_R^\dagger c_R \rangle$

ボンドエネルギー $\epsilon_{R,R'} \equiv -t \langle c_R^\dagger c_{R'} + c_{R'}^\dagger c_R \rangle$

R, R'
再近接サイト

などの局所量は1粒子波動関数で計算できる

次の固有値問題を解けばよい

$$H \left(\sum_R \psi_i(R) c_R^\dagger |0\rangle \right) = E_i \left(\sum_R \psi_i(R) c_R^\dagger |0\rangle \right)$$

1粒子波動関数

1粒子に関するハミルトニアン

- 行列のサイズはMに対して指数的

ブロック対角化を經由

- T. Ogawa, PTP **54**, 1028 (1975).
- M.-B. Lepetit, M. Cousy, & G.M. Pastor, EPJB 13, 421 (2000).
- 開放的境界、スムーズ境界の両方で適用可
- 各ブロックの行列は三重対角
- 大きさは高々 $(M+1) \times (M+1)$

化学ポテンシャル μ は 基底状態が縮退しないように調節

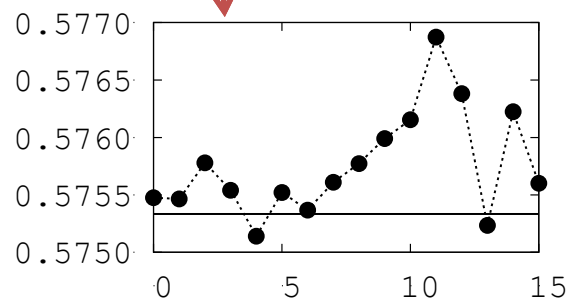
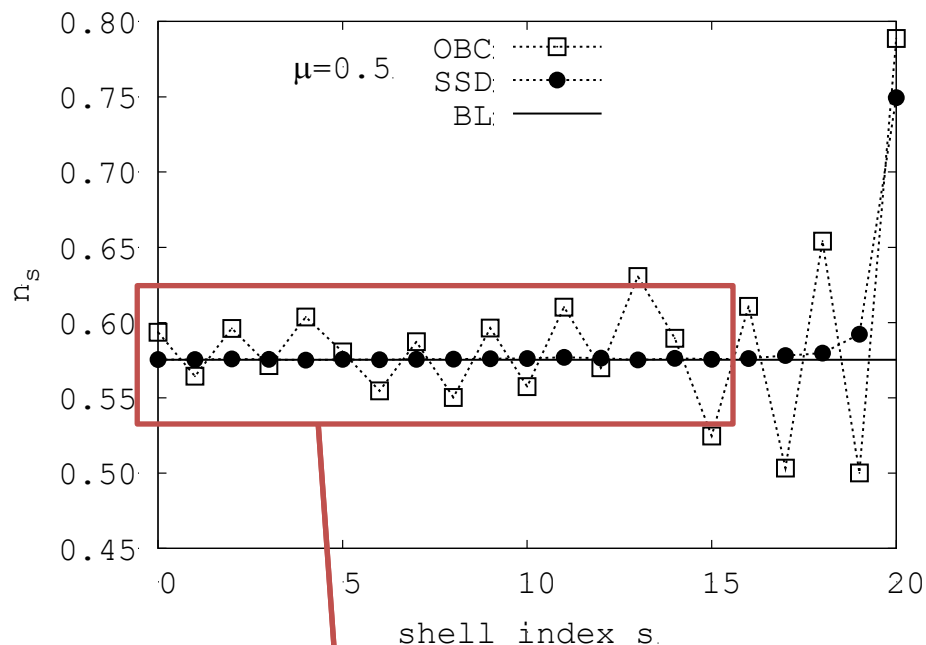
- 基底状態において、密度、ボンドエネルギーは
系の中心からの距離 s の関数

$$n_R \rightarrow n_s \quad \epsilon_{R,R'} \rightarrow \epsilon_s$$

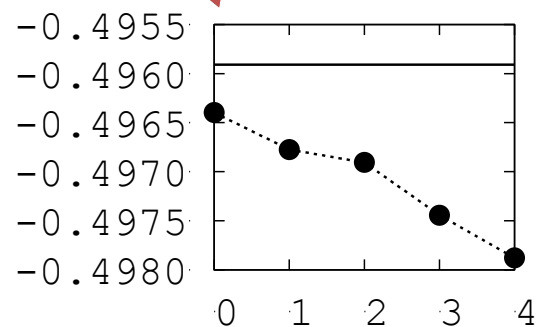
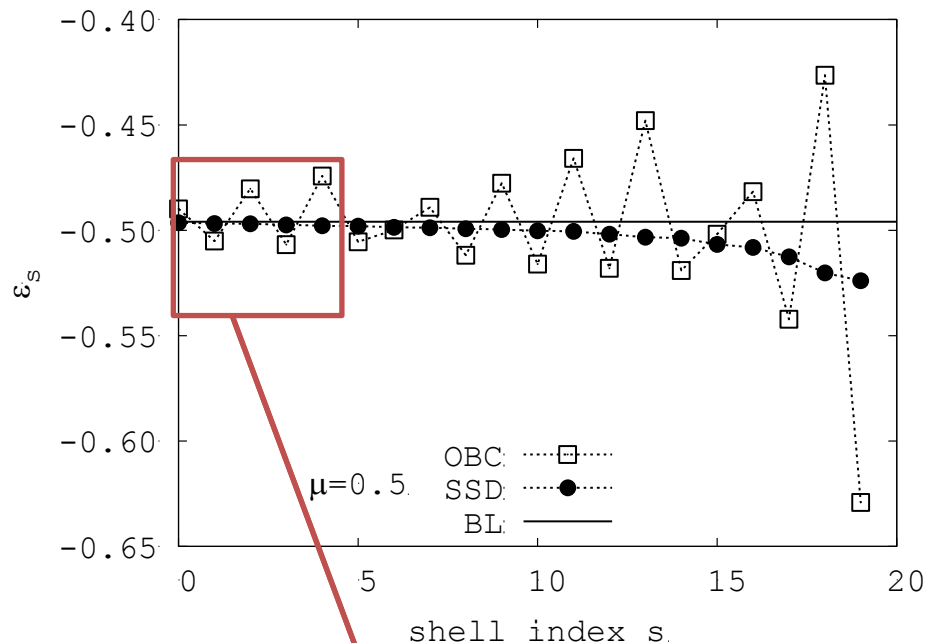
物理量の空間的依存性 (基底状態)

$$z = 3, M = 20$$

粒子密度



bondエネルギー



バルク量の推定

グランドカノニカル解析

SSDを使った推定法

C. Hotta and N. Shibata, PRB **86**, 041108(R) (2012).

C. Hotta, S. Nishimoto, and N. Shibata, PRB **87**, 115128 (2013).

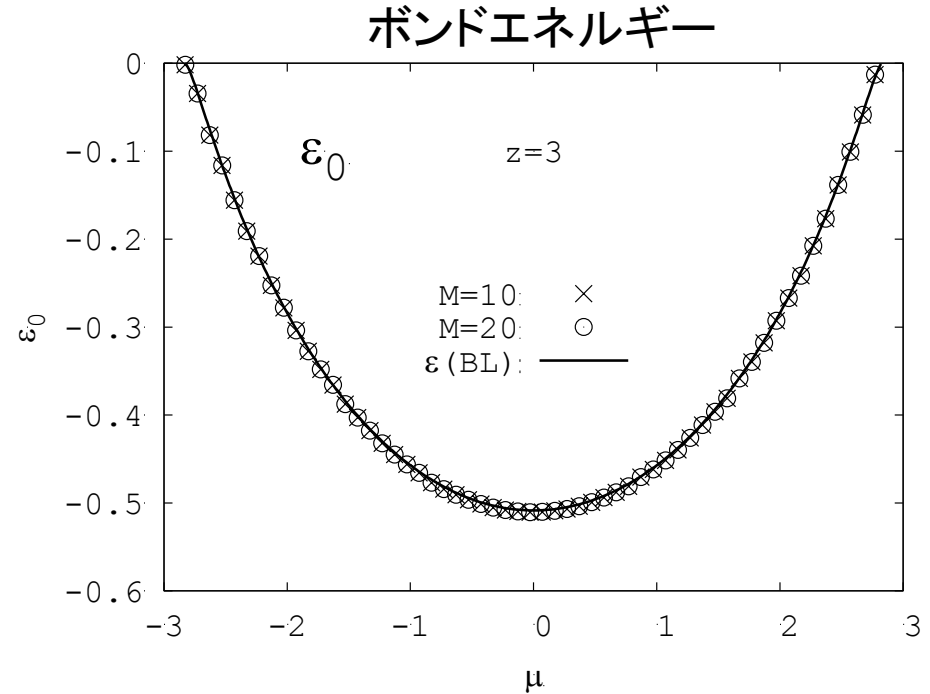
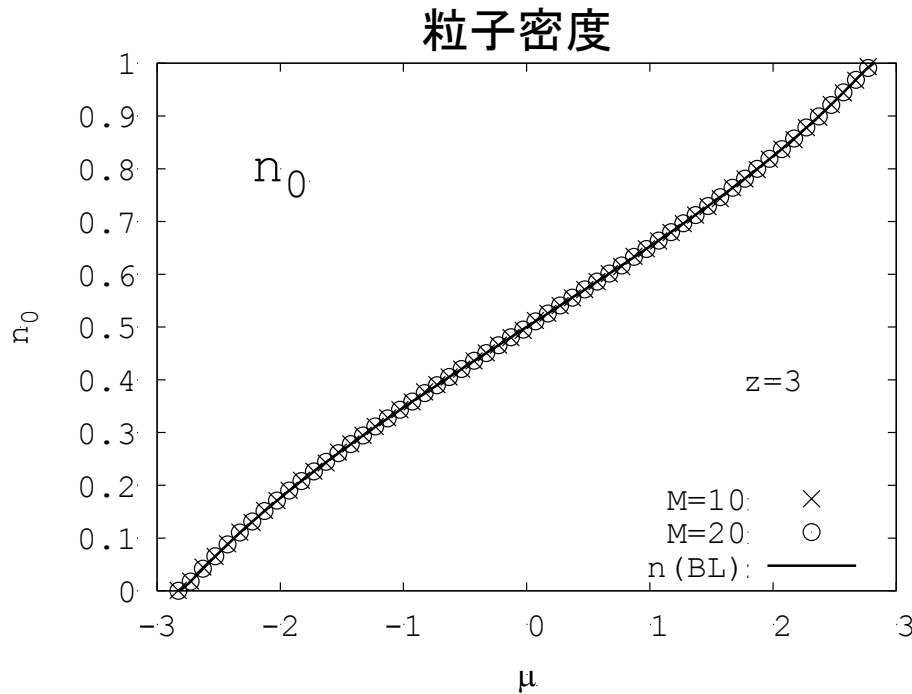
バルク中央での振動を平坦化した後、
多項式関数でフィッティングして推定

今の場合、バルク中央では振動が小さい。



系の中心での値をそのまま推定値とする

化学ポテンシャル依存性



Bethe格子上の結果とよい一致

$$|n_0 - n_{\text{BL}}|, |\epsilon_0 - \epsilon_{\text{BL}}| \lesssim O(10^{-3})$$

今後の課題

他の変調方法

- サイン n 乗変形、指数変形、双曲変形など

量子多体系への拡張

- Cayley樹上の系に対する数値計算手法は？

エネルギーギャップのある場合

- 低次元のギャップ系ではSSDは一般に機能しない