计算物理导论 - Homework 9 : 精确对角化

A. 2×2 矩阵对角化

考虑一个二能级系统，其哈密顿量为：

$$H = \begin{bmatrix} a & c \\ c^* & -a \end{bmatrix},$$

其中 a 是实数， c 是复数。

1. 对角化哈密顿量，作分解 $H = Q\Lambda Q^{-1}$。其中 Λ 为特征值构成的对角矩阵， Q 为本征列向量构成的矩阵，且所有本征向量归一化。Q^{-1} 和 Q 有什么关系，为什么？（1分）
2. 证明公式：$e^{iHt} = Qe^{i\Lambda t}Q^{-1}$，并用这一公式计算出$e^{iHt}$ 的具体表达式。(1分)

B. 横场Ising模型

研究一个自旋1/2的横场Ising模型：

$$H = -J\sum_{i=1}^{L} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z - h\sum_{i=1}^{L} \hat{\sigma}_i^x.$$

取周期边界条件 （$\hat{\sigma}_{L+1}^z \equiv \hat{\sigma}_1^z$） 且固定 $J = 1.$

1. 取参数 $L = 12$， 对于不同的横场强度 $h = 0.5, 1.0, 2.0$， 分别对角化哈密顿量 H， 求得**基态**和**第一激发态**并列出其能量（2分）。 对于基态波函数，计算第一个格点上横场方向磁化强度的期望 $\langle \sigma_1^x \rangle$， 并一并列出。(1分)
2. $t = 0$ 时系统处于 $h = 0.5$ 的基态， $t = 0^+$ 的瞬间哈密顿量参数变为 $h = 3.0$，求在此哈密顿量下的时间演化，计算 $\langle \sigma_1^x(t) \rangle$ 在时间 $t \in [0, 20]$ 的变化情况，并画出来。 你需要给出精确的结果和Runge-Kutta方法的结果。验证两种方法的结果是一样的。(3分)
3. 取参数 $L = 18, h = 1$。从Neel态 $|\psi(0)\rangle = |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \cdots\rangle$ （奇数格点自旋朝上，偶数朝下）出发，求解波函数 $|\psi(t)\rangle$ 在区间 $t \in [0, 10]$ 上面的时间演化。 画出Fidelity $F(t) = |\langle \psi(0)|\psi(t)\rangle|^2$ 随时间的变化。(2分)