

## 测量

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^n}{n!} \langle \alpha | H^n A | \alpha \rangle, \quad Z = \sum_{\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^n}{n!} \langle \alpha | H^n | \alpha \rangle$$

在截断下：

$$A_{\alpha} = \sum_{n=0}^M \frac{(-\beta)^n}{n!} \langle \alpha | H^n A | \alpha \rangle$$

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\alpha} A_{\alpha}$$

$$Z = \sum_{\alpha} \sum_{S_M} \frac{(-\beta)^n (M-n)!}{M!}$$

在获得稳定的态之后，相当于是一个稳定的构型（抑或是接近我们想要的一个构型）

$$\langle O \rangle = \frac{1}{M} \sum_{\alpha} \langle \alpha(p) | O | \alpha(p) \rangle$$

这是可以直接理解的。

在主程序中，我们已经通过更新获取了一个接近的构型：

```
1      do i=1,isteps
2          call diagonalupdate()
3          call loopupdate()
4          call adjustcutoff(i)
5      enddo
```

然后，在进行测量采样的过程中，我们依然通过蒙卡步进行移动：

```

1      do j=1,nbins
2          do i=1,msteps
3              call diagonalupdate()
4              call loopupdate()
5              ...
6          enddo
7          ...
8      enddo

```

经过移动后，当下是一个可采样的构型，我们进行测量：

```

1      call measureobservables()

```

在测量时，我们现在的构型相当于一个 $p$ 层序列的很多投影态 $|\alpha(p)\rangle$ ，对于每个态都要获取测量物理量，as  $\langle O \rangle = \frac{1}{M} \sum_{\alpha}^M \langle \alpha(p) | O | \alpha(p) \rangle$ .

我们利用遍历 $p$ ，遇到算符做相应的更新以抵达下一个态的做法，来实现从一个投影态到下一个投影态并计算 $O(p)$ 的值

因此，在测量的内部，包含了 **遍历 $p$  -> 遇到算符 -> check算符类型 -> 局部更新** 来实现态的“跳跃”

一个大致的测量主要为：

```

1      初始化
2      do i=1,nn
3          物理量在第一个态上的值
4      enddo
5
6      do i=0,mm-1
7          op=opstring(i) 获得该层算符
8          check算符类型
9          if (op==0) then 如果是单位算符
10
11              cycle 跳出check, 不做测量
12
13          elseif (mod(op,2)==1) then 如果是非对角算符
14              b=op/2 获得该层非对角算符的坐标
15              s1=bsites(1,b) 相应更新
16              s2=bsites(2,b) 相应局部更新

```

```

17         此时为下一个态
18
19         测量物理量的值
20
21     endif  否则为对角算符
22     不用做局部更新也可以当作是下一个态，因为态相同
23
24     测量物理量的值
25 enddo
26
27 计算之后为物理量在离散虚时间上的总和，且计算的时候不计算单位算符连接的态，只计算了通过非
    单位算符连接的态
28
29  if (nh/=0) then  如果非单位算符的数量nh不等于0
30     物理量的值/nh
31 else  否则为0
32     保持值
33 endif

```

## 交错磁化 staggered magnetization

示例：

$$\begin{aligned}
 M_{\text{stag}} = & +m_{1,1} - m_{1,2} + m_{1,3} - m_{1,4} \\
 & -m_{2,1} + m_{2,2} - m_{2,3} + m_{2,4} \\
 & +m_{3,1} - m_{3,2} + m_{3,3} - m_{3,4} \\
 & -m_{4,1} + m_{4,2} - m_{4,3} + m_{4,4}
 \end{aligned}$$

交错磁化， $m_s = (m_A - m_B)/2$ ，以及均匀磁化， $m_f = (m_A + m_B)/2$ 。

$$m = \frac{1}{2} \sum_i \phi_i \sigma(i)$$

交错相位因子  $\phi_i$  在每个格点  $i$  处交替取 +1 和 -1 的值，对应于反铁磁序中邻近自旋相反的排列。当在  $i$  和  $j$  位置上的两个反平行自旋翻转时， $m$  的变化可以表示为  $2\phi_i\sigma(i(b))$ ，因为第二个自旋的相位因子  $\phi_j$  等于第一个相位因子  $\phi_i$  的相反数，而且由于反平行排列， $\sigma(j(b)) = -\sigma(i(b))$

**staggered magnetization** from an SSE configuration can be computed as follows:

$$\begin{aligned}
 &m = (1/2) \sum_i \phi_i \sigma(i); \quad m_{s2} = 0 \\
 &\text{do } p = 0 \text{ to } L-1 \\
 &\quad \text{if } (\text{mod}(s(p), 2) = 1) \text{ then} \\
 &\quad \quad b = s(p)/2; \quad \sigma(i(b)) = -\sigma(i(b)); \quad \sigma(j(b)) = -\sigma(j(b)) \\
 &\quad \quad m = m + 2\phi_i \sigma(i(b)) \\
 &\quad \text{endif} \\
 &\quad \text{if } (s(p) \neq 0) \quad m_{s2} = m_{s2} + m^2 \\
 &\text{enddo} \\
 &m_{s2} = m_{s2} / (nN^2)
 \end{aligned} \tag{33}$$

```

1  am=0
2  !-----第一层
3      do i=1,nn
4          am=am+spin(i)*(-1)**(mod(i-1,lx)+(i-1)/lx)
5      enddo
6  !-----!
7      am=am/2
8      !-----!
9      am1=0.d0
10     am2=0.d0
11     do i=0,mm-1
12         op=opstring(i)
13         if (op==0) then
14             cycle
15         elseif (mod(op,2)=1) then
16             b=op/2
17             s1=bsites(1,b)
18             s2=bsites(2,b)
19             spin(s1)=-spin(s1)
20             spin(s2)=-spin(s2)
21             am=am+2*spin(s1)*(-1)**(mod(s1-1,lx)+(s1-1)/lx)
22         endif
23         am1=am1+dfloat(abs(am))
24         am2=am2+dfloat(am)**2
25     enddo
26     if (nh/=0) then
27         am1=am1/nh
28         am2=am2/nh
29     else
30         am1=dfloat(abs(am))

```

```

31         am2=dfloat(am)**2
32     endif
33
34
35     amag1=amag1+am1
36     amag2=amag2+am2

```

$$am = \sum_i^N 2 * \sigma_i * (-1)^n, n \text{ depends on site}$$

ax1 = am: staggered magnetization

am1 = |am| abs of staggered magnetization

am2 = am<sup>2</sup> staggered magnetization

在每一步扫描下获得了物理值，扫描 msteps 步进行累加，

最后的值要/msteps

要计算平均磁化，最后的值要/nn

```

1     amag1=amag1/msteps
2     amag2=amag2/msteps
3
4     amag1=amag1/nn
5     amag2=amag2/nn

```

在每个bin下执行的这些操作，要对bin进行累加：

```

1     data1(1)=data1(1)+amag1
2     data1(2)=data1(2)+amag2

```

可以顺便记录平方的数据：

```

1     data2(1)=data2(1)+amag1**2
2     data2(2)=data2(2)+amag2**2

```

对这个累加数据要除以bin值

```

1  do i=1,4
2      wdata1(i)=data1(i)/bins
3      wdata2(i)=data2(i)/bins
4      wdata2(i)=sqrt(abs(wdata2(i)-wdata1(i)**2)/bins)
5  enddo

```

并计算标准差改为保存到wdata2数据：

交错磁化是反铁磁材料研究中的一个重要物理量，它描述了磁矩（自旋）按照交替模式排列的现象。

## Susceptibilities 磁化率

S=1/2 Heisenberg Model:

$$\chi = \frac{\beta}{N} (\langle M_z^2 \rangle - \langle M_z \rangle^2)$$

no magnetic field :  $\langle M_z \rangle \rightarrow 0$

$$\chi = \chi(0) = \frac{\beta}{N} (\langle M_z^2 \rangle)$$

因为标准的海森堡模型哈密顿量中不包含外部磁场，因此，在温度比较高的情况下系统是顺磁，也就是无序的（对于反铁磁海森堡，低温下也比较无序，怎么理解），因此， $M_z$ 统计上趋于0.

```

1  ax1=ax1+dfloat(am)

```

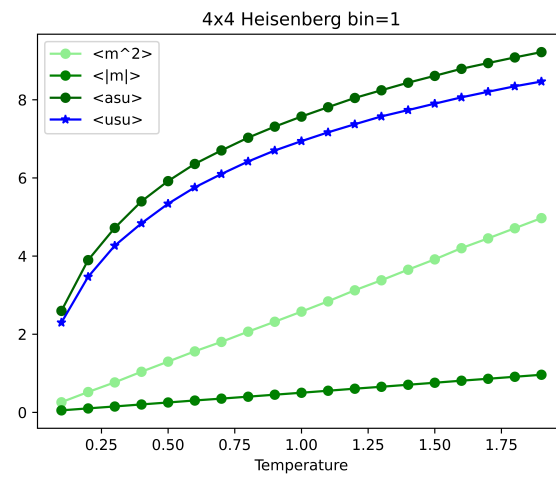
```

1  if (nh/=0) then
2      ax1=(ax1**2+am2)/(dfloat(nh)*dfloat(nh+1))
3  else
4      ax1=am2
5  endif

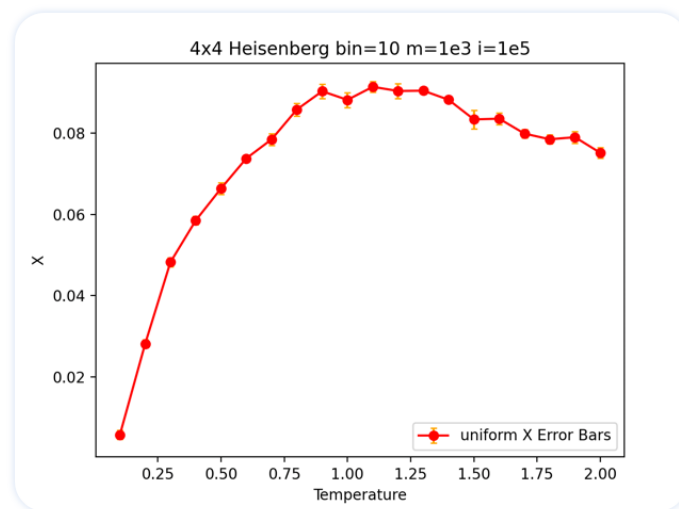
```

$$ax1 = \frac{ax1^2 + am^2}{nh \times (nh + 1)}$$

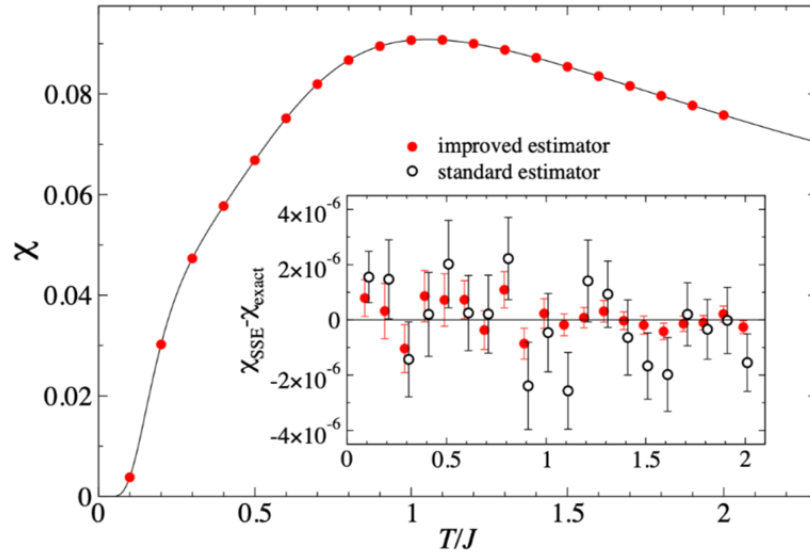
底下这个分母似乎不是简单求和平均而来，博后师兄说是虚时间的积分，计算出来的公式是这样，改天看看。



以上这个图是错误的，数据我不保留了。



Compare:



**FIGURE 64.** The uniform susceptibility of a  $4 \times 4$  Heisenberg system versus the temperature. The curve is the exact result from a full diagonalization. The points are SSE results based on  $10^{10}$  updating sweeps for each  $T$ . The error bars cannot be resolved on this scale. The inset shows the deviation of  $\chi$  from the exact result with error bars, for both simple and improved (loop) estimators. The data points have been slightly shifted off their actual  $T$  values in order for the error bars of the two estimators not to overlap.

Fig 64 P162