

## 精确对角化

## 一、文件说明

**Bit Function.py:** 包含课件中全部的位运算函数;

**Reuse\_Function.py:** 包含三个自定义函数，求矩阵对角元、求矩阵非零非对角元的矩阵行列指标、将 Numpy 二维数组写入文件；

**Direct\_Product.py:** 模仿第一节课后习题的做法, 直接使用 4 个二维矩阵的直积计算获得哈密顿量的矩阵表示

**No\_Symmetry.py:** 适用于求任意较少数量粒子的环状 Spin-1/2 反铁磁性海森堡模型的哈密顿量，并做精确对角化。文件中包含一段注释掉的代码，该方法需要计算每一个矩阵元的具体数值，时间复杂度为**状态数的平方**；正式使用的方法充分利用了稀疏矩阵的特性，首先求出每种状态（即每列）对应的非零对角元（数量不超过粒子数），时间复杂度为**状态数与粒子数的乘积**。

**U1\_Symmetry.py:** 构建 4 粒子 Spin-1/2 体系的 Lin 表, 按 U1 对称性直接构建出完整哈密顿量矩阵的所有对角块, 分别进行精确对角化并求特征值。可以通过 Python Scipy 模块的函数直接从对角块构造出完整哈密顿量矩阵。

## 二、结果说明

4 粒子 Spin-1/2 体系的海森堡模型，共有 16 个特征值，分别是：

E = -2, -1, -1, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1, 1, 1, 1

不考虑对称性求得哈密顿量矩阵  $H$  为:

[illegible]

考虑 U1 对称性求得哈密顿量矩阵 H 为：

1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0.5	0	0.5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0.5	0	0.5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0.5	0	0.5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0.5	0	0.5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0.5	0	0	0.5	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0.5	-1	0.5	0.5	0	0.5	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0.5	0	0	0.5	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0.5	0	0	0.5	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0.5	0	0.5	0.5	-1	0.5	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0.5	0	0	0.5	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.5	0	0.5
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.5	0	0.5	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.5	0	0.5
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.5	0	0.5	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1

三、附录：Lin Table

Up_spin	Part_a	J <sub>a</sub>	Part_b	J <sub>b</sub>	J <sub>a</sub> + J <sub>b</sub>
0	00	0	00	1	1
1	01	1	00	0	1
	10	2	00	0	2
	00	1	01	2	3
	00	1	10	3	4
2	11	1	00	0	1
	01	1	01	1	2
	10	2	01	1	3
	01	1	10	3	4
	10	2	10	3	5
	00	1	11	5	6
3	11	1	01	0	1
	11	1	10	1	2
	01	1	11	2	3
	10	2	11	2	4
4	11	0	11	1	1