

分类号 _____

密级 _____

UDC _____

编号 _____

中国科学院研究生院

博士学位论文

蒙特卡洛方法及其在磁性模型中的应用

郑睿

指导教师 _____ 刘邦贵 研究员

中国科学院物理研究所

申请学位级别 理学博士 学科专业名称 理论物理

论文提交日期 2011年5月 论文答辩日期 2011年5月

培养单位 _____ 中国科学院物理研究所

学位授予单位 _____ 中国科学院研究生院

答辩委员会主席 _____

Monte Carlo methods and its applications on magnetic models

Rui Zheng

Directed by
Prof. Bang-Gui Liu

Institute of Physics
Chinese Academy of Sciences
Beijing, P. R. China
May, 2011

摘要

随着计算机的不断普及，尤其是高性能计算机的不断发展，计算机模拟已经成为科学研究所中的一种重要手段。在材料科学中，计算机模拟在理论与实验之间架起了一座桥梁，同时还可以预言各种新型材料。蒙特卡洛方法作为各种数值计算方法中的一种，由于其计算复杂度与维度无关，所以被广泛地应用在多体问题的研究中。本文首先系统地介绍了蒙特卡洛方法，包括经典蒙特卡洛方法中的局域 Metropolis 算法以及非局域 Cluster 算法，量子蒙特卡洛方法中的随机级数展开算法、连续时间极限环算法、以及价键基矢投影算法，而后利用蒙特卡洛方法研究了两种磁性模型中的相变问题，主要研究成果如下：

根据 Mermin-Wagner 定理，由短程相互作用构成的二维系统在有限温度下不会发生连续对称性的自发对称破缺，即不具有长程序。结合经典蒙特卡洛方法中的 Metropolis 算法以及 Cluster 算法，我们研究了具有垂直单轴各向异性的分子磁体所构成的单层膜的磁性，并得到了其居里温度随各向异性参数的变化关系。计算结果表明，在合适的基底下，分子磁体构成的单层薄膜可以形成稳定的铁磁体。

最近有研究表明二维正方格子上的交错反铁磁模型可能具有退禁闭临界现象，利用 ALPS 软件包中量子蒙特卡洛模块的环算法，我们研究了一类拓展的交错反铁磁 Heisenberg 模型，我们称之为 J_0 - J_1 - J_2 模型。当 $J_1/J_0=0$ 和 1 时，这个模型分别转化为六角格子上和正方格子上的交错 J - J' 模型。我们得到了在 J_1/J_0 从 0 到 1 对应的所有模型的临界耦合强度 J_2/J_0 ，并且通过有限尺寸标度分析，我们得到了临界指数 ν ， β/ν 以及 $d - z - \eta$ 的值。用磁四极矩 Q_2 拟合得到的 ν 值显示这类模型中的 VBS-Neel 相变是属于传统 3 维经典 Heisenberg 普适类，而用自旋刚度 $\rho_s L$ 拟合得到的 ν 值，以及利用相关量拟合得到的 β/ν 、 $d - z - \eta$ ，和 Q_2 在临界点的值却是与 O(3) 普适类不符的。我们的结果显示，是否二维格子上耦合作用的交错排列方式会导致非常规的相变仍然需要更多工作来检验。

关键词：蒙特卡洛方法，分子磁体，相变，反铁磁，有限尺寸标度分析

Monte Carlo Methods and its applications on magnetic models

Rui Zheng

Directed by
Prof. Bang-Gui Liu

Abstract

With the prevalence of computer, especially the development of high performance computer clusters, computational simulations have become an important tool in scientific research. In material science, computational simulations build a bridge between theories and experiments, at the same time, we can also predict and design new materials by computational simulations. As one of the so many numerical calculation methods, Monte Carlo methods have been widely used on lots of many-body systems, because of its complexity independence of dimension. In this thesis, we first introduce some different monte carlo methods in detail, including Classical Monte Carlo method with two ways of updating ,the local Metropolis algorithm and the nonlocal Cluster algorithm, as well as Quantum Monte Carlo methods like Stochastic Series Expansion method, Loop Algorithm in Continuous Time Limit and Valence-bond basis Projected Quantum Monte Carlo, then we use these methods to study the phase transition in two magnetic models. The works we have done are as follows:

According to Mermin-Wagner theorem, for two dimensional systems which contain only short range interactions, there is no spontaneous breaking of continuous symmetries at finite temperature, in other words, there is no long range order at finite temperature. Using metropolis algorithm combined with cluster algorithm in classical monte carlo method, we study the magnetic properties of molecular magnetic film with vertical anisotropy, and we get the relation between Curie temperature and the anisotropic pa-

rameter. Our results show that, stable molecular magnetic film could be formed when being put on proper substrate.

Recently there are works showing that the staggered J - J' model on square lattice might have deconfined quantum critical point, using loop algorithm in the quantum monte carlo module of ALPS libraries, we study the quantum critical points for a generalized staggered Heisenberg dimer model, which we named J_0 - J_1 - J_2 model. For $J_1/J_0 = 1$, this model becomes the staggered J - J' model on square lattice, while for $J_1/J_0 = 0$, it becomes the staggered J - J' model on honeycomb lattice. We get all the the critical couplings of J_2/J_1 for a class of models with J_1/J_0 changed from 0 to 1, and by using finit size scaling we extract the values of critical exponents ν , β/ν , $d-z-\eta$. While ν extracted from Binder cumulant Q_2 indicates the VBS-Neel transition belongs to the conventional three dimensional classical Heisenberg universality class, ν extracted from spin stiffness $\rho_s L$, and β/ν , $d-z-\eta$ extracted from $|m_s^z|$, $L^2 m_s^2$ as well as the critical value of Q_2 are not in agreement with the O(3) universality class. Our results show that, whether a staggered arrangement of couplings in 2D lattices will lead to an unconventional phase transition is still controversial.

Keywords: Monte Carlo Methods, Molecular Magnet, Phase Transition, Antiferromagnet, Finit Size Scaling

目录

中文摘要	i
英文摘要	iii
第一章 绪论	1
1.1 蒙特卡洛方法介绍	1
1.2 蒙特卡洛方法的应用	2
1.3 蒙特卡洛方法优缺点分析	3
1.4 选题意义与文章结构	4
第二章 经典蒙特卡洛方法	7
2.1 理论背景	7
2.2 模拟经典自旋模型	9
第三章 量子蒙特卡洛方法	29
3.1 发展历史及理论基础	29
3.2 连续时间极限环算法	34
3.3 随机级数展开算法	46
3.4 价键基矢投影蒙特卡洛方法	57
3.5 ALPS软件包简介	66
第四章 具有垂直单轴各向异性的分子磁体单层膜磁性研究	75
4.1 研究背景	75
4.2 自旋模型与模拟细节	76
4.3 模拟结果	76
4.4 总结讨论	79

第五章 二维交错二聚物Heisenberg模型的量子蒙特卡洛研究	85
5.1 研究背景.....	85
5.2 计算细节.....	86
5.3 计算结果分析.....	88
5.4 总结讨论.....	91
攻读博士学位期间的研究成果	97
致谢	99

插图目录

1.1	Extract the value of π by monte carlo method	2
2.1	Uniform distribution on sphere surface(side view and vertical view)	11
2.2	Switch of magnetization in the process of simulation	13
2.3	Specific heat c_v and susceptibility χ for 2D Ising model with L varies from 30 to 100	14
2.4	Binder cumulant U_4 for 2D Ising model with L varies from 70 to 140	14
2.5	Swendsen-Wang Cluster Algorithm.....	17
2.6	Steps of labeling clusters.....	19
2.7	Generalized spin-flip operation.....	20
2.8	Wolff Cluster Algorithm	21
2.9	Extract values of critical exponent ν for 2D Ising model.....	23
2.10	Extract values of β/ν and γ/ν for 2D Ising model	23
2.11	Data collapsing of magnetization and susceptibility	24
3.1	World-lines Configuration.....	31
3.2	Plaquette weights for XXZ model	32
3.3	Local update algorithm for world-lines configuration	33
3.4	World-lines configurations with different winding number	34
3.5	Dual monte carlo.....	35
3.6	Steps of dual monte carlo	37
3.7	Graphs of possible plaquette	39
3.8	Graphs of possible break up	39
3.9	Loop algorithm for world-lines configuration.....	40
3.10	Uniform intervals(UI) in continuous time limit.....	41
3.11	Loop algorithm in continuous time limit	43

3.12	Graphic representation for SSE algorithm	48
3.13	Graphs of possible vertices	50
3.14	Reduced (α, S_n) pattern	51
3.15	Local update for SSE algorithm	52
3.16	4 possible processes of constructing operator loop	52
3.17	Deterministic operator loops for isotropic Heisenberg model	53
3.18	Detailed balance in extended configuration space.....	54
3.19	Possible $W(i, l_1, l_2)$ graphs(Fig.8 in [17])	55
3.20	Phase diagram corresponding to Table 3.1(Fig.9 in [17])	56
3.21	Valence bond basis pattern.....	58
3.22	Combined spin and valence bond basis pattern	59
3.23	Transposition graph of $\langle V_l V_r \rangle$	60
3.24	Variational amplitude product state	61
3.25	Two bond reconfiguration	61
3.26	Bond-loop updates	62
3.27	Graph of projection in valence bond basis	64
3.28	Graph of projection in combined basis(Adapted from Fig.4 in [39])	65
3.29	A sample python script for ALPS simulation.....	67
4.1	Normalized magnetization M as functions of temperature T (in JS^2)	77
4.2	Simulated results of U_4 (top), C_ν (middle), and χ (bottom) as functions of temperature.....	78
4.3	The D dependence of Curie temperature T_c	79
4.4	The temperature dependence of the deviation d_m of the spin vector from the easy axis	79
5.1	(a) The J_0 - J_1 - J_2 model simulated in this study. (b) For $J_1/J_0 = 1$, this model becomes the staggered J - J' model on square lattice. (c) For $J_1/J_0 = 1$, this model becomes the staggered J - J' model on honeycomb lattice.	87

5.2 The Binder cumulant Q_2 (top) and the multiplication of spin stiffness with lattice size $\rho_s L$ (middle) for various lattice sizes from $L=10$ to $L=80$ while J_1/J_0 is set to be 0.6, the lines are the fitting results with polynomial form expanded up to 8th order. Scaling of crossing points used to extract the critical coupling α_c (bottom), the lines are the fitting result according to Equ.(5.9).	89
5.3 Data collapsing of Q_2 (a) and $\rho_s L$ (b), the lines are the fitting results of the universal functions.	90
5.4 Extract values of β/ν and $d - z - \eta$	91

表 格 目 录

2.1 Comparision of the value of z for Ising model using different updating algorithms.....	18
3.1 Solution minimizing bounce weights(Table.I in [17]).....	57
5.1 Fitting results of α_c and ν	90

第一章 绪论

1.1 蒙特卡洛方法介绍

蒙特卡洛方法,也称统计模拟方法,是二十世纪四十年代中期由于科学技术的发展和电子计算机的发明,而被提出的一种以概率统计理论为指导的一类非常重要的数值计算方法,是指使用随机数(或更常见的伪随机数)来解决很多计算问题的方法。

早在17世纪,人们就知道用事件发生的频率来决定事件的概率。19世纪,Georges-Louis Leclerc和Comte de Buffon提出所谓的投针实验,假设地板由宽度为 t 的长木条间铺成,往地板上投递一些长为 l 的针,问针跨越两块木条之间的间隔线的概率是多少?可以计算得知,当 $l < t$ 时,这个概率是 $2l/t\pi$,通过这种大量随机投针的实验并统计某种特定事件出现概率的方法就是蒙特卡洛方法的原型。20世纪40年代,在John von Neumann, Stanislaw Ulam和Nicholas Metropolis在洛斯阿拉莫斯国家实验室处理中子实验后的数据时,发明了蒙特卡洛方法[1]。因为Ulam的叔叔经常在摩洛哥的蒙特卡洛赌场输钱,故起名蒙特卡洛方法,而蒙特卡洛方法正是以概率为基础的方法。尽管当时受到计算机资源的严重限制,蒙特卡洛方法在曼哈顿工程的计算机模拟工作中起到了核心作用,并在50年代应用于与氢弹相关的早期工作中,后来在物理[2-5]、化学、工程[6]以及金融中[7]都得到了广泛的应用。蒙特卡洛方法要求产生大量的随机数,而这也促进了伪随机数生成器的发展。

蒙特卡洛方法有很多种,但大致框架如下:

- 1, 定义一个问题所要求的输入的范围(如态空间)。
- 2, 在此范围内根据某个概率分布(如玻尔兹曼分布)随机产生输入。
- 3, 对输入进行某种运算(如计算物理量)。
- 4, 统计结果(如得到物理量平均值以及误差)。

下面是一个常用的介绍蒙特卡洛方法的求 π 值的例子,如图1.1:

- 1, 在一个正方形内画出一个 $1/4$ 圆形区域。
- 2, 往正方形内随机均匀地撒点。

3, 统计撒点的总数 n 以及落在圆形区域内的点的总数 n_0 。

4, 计算 $4n_0/n$ 的值我们就可以近似得到 π 值。

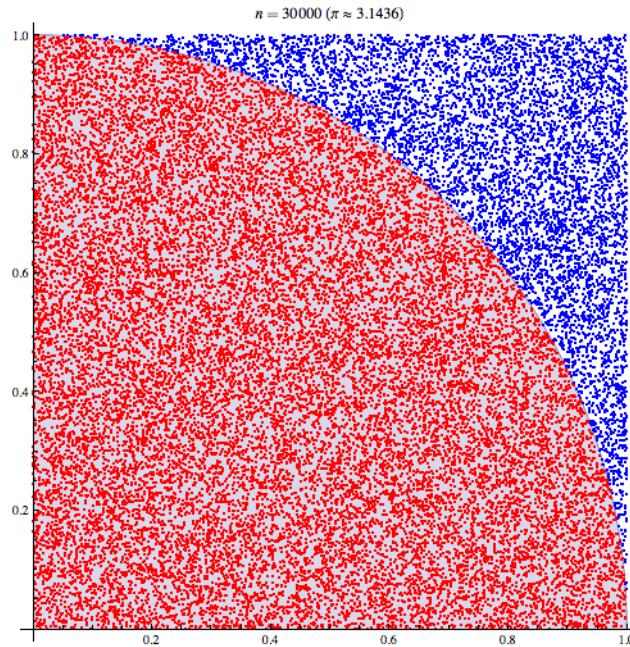


图 1.1 Extract the value of π by monte carlo method

1.2 蒙特卡洛方法的应用

蒙特卡洛方法特别适用于模拟具有不确定性输入的现象(如风险投资), 以及具有大量耦合在一起的自由度的系统(如统计物理), 下面列举一些其在不同学科中的应用:

物理学

蒙特卡洛方法在计算物理, 物理化学及相关应用领域发挥着至关重要的作用, 并且在复杂的量子色动力学的计算中具有广泛应用。在统计物理中, 蒙特卡洛分子建模方式是分子动力学的一种替代方法, 并且蒙特卡洛方法也应用在简单粒子以及聚合物系统[8]中的统计场论相关工作中。量子蒙特卡洛方法处理量子多体系统。在实验粒子物理中, 蒙特卡洛方法被用于设计探测器, 理解他们的行为并用于将实验数据与理论进行比较。在空间物理中, 蒙特卡洛方法被广泛地应用于模拟星系演化[9]以及行星表面微波辐射[10]的建模工作中。现代天气预测学也是从蒙特卡洛方法在系统模型中的应用发展而来的。

工程学

微电子工程学中的模拟与数字集成电路的关联与无关联变化分析；冶金学中的矿物加工工艺流程；统计学中的数量风险分析；风能领域的风场电能输出预估；环境污染的影响评估；自动控制领域机器人位置的定位等。

计算生物学

亲缘关系的贝叶斯推断；蛋白质膜的模拟以及癌症肿瘤的成像；生物分子对环境变化的响应模拟；同时可以做一些物理上无法实现的假象生物学实验，如破坏某些键，在特定位置引入杂质，改变局部或全局结构，引入外作用场等。

数学

数值积分；最优化问题；逆算问题；计算数学等。

金融与贸易

评估公司市值；评估投资风险；评估金融衍生品；也可以对某项金融工程进行建模，模拟最坏情况，最好情况，每项任务的持续时间，最终评估整个工程的结果。

蒙特卡洛方法还在人工智能游戏领域，设计与视觉效果领域，通信领域等都有广泛的应用。

1.3 蒙特卡洛方法优缺点分析

蒙特卡罗模拟是一种有效的统计实验计算法，即基本思想是当所求解问题是某种随机事件出现的概率，或者是某个随机变量的期望值时，通过某种“实验”的方法，以这种事件出现的频率估计这一随机事件的概率，或者得到这个随机变量的某些数字特征，并将其作为问题的解。蒙特卡洛方法的主要缺点是收敛速度慢，无论是理论上还是在实践中，传统的蒙特卡罗技术都存在工作量大的问题。从理论上来讲，蒙特卡罗方法需要大量的实验。实验次数越多，所得到的结果才越精确。而且实验表明，一直到公元20世纪初期，尽管实验次数数以千计，利用蒙特卡罗方法所得到的圆周率 π 值，还是达不到公元5世纪祖冲之的推算精度。这可能是传统蒙特卡罗方法长期得不到推广的主要原因。但计算机技术的发展使得蒙特卡罗方法在最近三十年得到快速的普及。现代的蒙特卡罗方法，已经不必亲自动手做实验，而是借助计算机的高速运转能力，使得原本费时费力的实验过程，变成了快速和轻而易举的事情。借助计算机技术，蒙特卡罗方法实现了两大优点：一是简单，省却了繁复

的数学推导和演算过程，使得一般人也能够理解和掌握；二是快速，这也是蒙特卡罗方法现在获得广泛应用的技术基础。

1.4 选题意义与文章结构

蒙特卡洛方法对研究多体问题的基态和相变问题具有十分重要的意义。通过利用不同蒙特卡洛方法来模拟磁性模型，我们希望能对各种材料或模型的基态及低温性质、外场下的动态性质、相变点的临界性质以及蒙特卡洛方法的理论基础有更深入地了解。长在合适基底下的单分子磁体构成的膜结构可以具有很强的垂直单轴各向异性，并且单分子磁体本身具有比较大的自旋值，这些令其成为重要的潜在磁存储材料，利用蒙特卡洛方法模拟这些单分子模型的磁性具有重要的验证和指导意义；退禁闭临界理论自从提出以来一直备受争议并且现在已经成为一个研究热点，有工作指出二维交错反铁磁模型可能存在这种临界现象，并且数值上有工作确实得到了非常规的临界指数值，利用量子蒙特卡洛方法来对这些二维交错反铁磁模型进行进一步地研究和拓展是十分必要的。

本文结构安排如下：第二章介绍了经典蒙特卡洛方法的数学基础以及两种实现随机抽样的算法，Metropolis算法以及团簇算法；第三章介绍了三种玻色型量子蒙特卡洛方法的发展历史、理论基础以及抽样过程的细节；第四章介绍了我们利用经典蒙特卡洛方法模拟单分子铁磁薄膜的研究工作；第五章给出了利用量子蒙特卡洛方法中的环算法研究二维交错反铁磁模型中VBS-Neel相变的计算结果。

参 考 文 献

- [1] N. Metropolis, *THE BEGINNING of the MONTE CARLO METHOD*, *Los Alamos Science*, Special Issue, 125 (1987)
- [2] K. Binder and D.W. Heermann, **Monte Carlo Simulation in Statistical Physics: An Introduction** (5th ed.) (Springer, 2010).
- [3] D.P. Landau and K. Binder, **A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics** (2nd ed.) (Cambridge University Press, 2005).
- [4] M.E.J. Newman and G.T. Barkema, **Monte Carlo Methods in Statistical Physics** (Oxford University Press, 1999).
- [5] J.M. Hammersley and D.C. Handscomb, **Monte Carlo Methods** (Halsted Press, New York, 1975).
- [6] J.G. Amar, *The Monte Carlo Method in Science and Engineering*, Computing in Science & Engineering, Vol.8, No.2.(March 2006), pp.9-19.
- [7] P. Glasserman, **Monte Carlo Methods in Financial Engineering** (Springer, 2003).
- [8] S.A. Baeurle, *Multiscale modeling of polymer materials using field-theoretic methodologies: A survey about recent developments*, Journal of Mathematical Chemistry, **46**,(2),363 (2009).
- [9] H.T. MacGillivray and R.J. Dodd, *Monte-Carlo simulations of galaxy systems*, Astrophysics and Space Science (Springer Netherlands) **82** (2) (1982)
- [10] L.M. Golden, *The Effect of Surface Roughness on the Transmission of Microwave Radiation Through a Planetary Surface*, Icarus **38** (3) 451 (1979)

第二章 经典蒙特卡洛方法

2.1 理论背景

蒙特卡洛方法的本质是通过随机抽样的方式来求积分，如求下式定积分

$$y = \frac{1}{b-a} \int_a^b f(x) dx \quad (2.1)$$

有两种方式来求这个积分，一种称为简单性抽样(simple sampling)，一种称为重要性抽样(importance sampling)。简单性抽样就是在 x 的参数空间 $[a, b]$ 内按均匀分布对 x 进行抽样，然后对相应的 $f(x)$ 进行统计平均，如

$$y_{est} = \frac{1}{N} \sum_i f(x_i) \quad (2.2)$$

y_{est} 是对 y 的估计值， N 是抽样的总次数，随着 $N \rightarrow \infty$ ， y_{est} 最终会收敛于 y 的正确值。但是当函数 $f(x)$ 在参数范围内变化很大时，这种简单性抽样方式的收敛速度是很慢的，因为很大的工作量放在了去统计一些对积分没太大贡献的参数点上，为了克服这种困难，我们在产生抽样点 x_i 的时候可以做一些优化。重要性抽样就是按照某种特定概率密度 $f'(x)$ 而不是不均匀分布来对 x 进行抽样的一种优化方式，这里的 $f'(x)$ 并不一定要求是归一化后的概率密度，假设归一化之后的概率密度函数为 $p(x) = \frac{f'(x)}{\int_a^b f'(x) dx}$ ，这时

$$y = \frac{\int_a^b f'(x) dx}{b-a} \frac{\int_a^b \frac{f(x)}{f'(x)} f'(x) dx}{\int_a^b f'(x) dx} = \frac{1}{b-a} \int_a^b \frac{f(x)}{p(x)} p(x) dx \quad (2.3)$$

与重要性抽样相对应的统计平均方法为

$$y_{est} = \frac{\int_a^b f'(x) dx}{b-a} \frac{1}{N} \sum_i \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} \quad (2.4)$$

或者

$$y_{est} = \frac{1}{b-a} \frac{1}{N} \sum_i \frac{f(x_i)}{p(x_i)} \equiv \frac{\int_a^b f'(x) dx}{b-a} \frac{1}{N} \sum_i \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} \quad (2.5)$$

可以看到，当 $f'(x) = 1$, $p(x) = \frac{1}{b-a}$ 时，就转化成了简单性抽样。当方程2.1中的积分很难求，而积分 $\int_a^b f'(x) dx$ 比较容易解析或数值求解，并且 $f'(x)$ 在大范围内都可以

近似 $f(x)$ 的时候，重要性抽样就体现出了优越性。并且大多数问题并不是求解如方程2.1中那样直接的积分问题，而是求解如下的一个平均值问题

$$\langle O(x) \rangle = \frac{\int_{x \in X} O(x) f'(x) dx}{\int_{x \in X} f'(x) dx} = \int_{x \in X} O(x) p(x) dx \quad (2.6)$$

这时可以很自然地按 $p(x)$ 对参数空间进行重要性抽样，得到平均值

$$\bar{O} = \frac{1}{N} \sum_i O(x_i) \quad (2.7)$$

蒙特卡罗方法的统计误差与维度无关，而只与抽样次数 N 有关系， $\sigma_{mc} \propto N^{-\frac{1}{2}}$ ，而通常的网格化数值积分方法在 d 维情况下的误差是 $\sigma_{net} \propto N^{-\frac{2}{d}}$ ，所以在高于4维的情况下蒙特卡洛方法更好。

统计物理的一个主要任务就是在给定哈密顿量 H 的情况下计算各物理量的平均值，如平均能量 E 和平均磁化强度 \vec{M} ，

$$E_{av} = \langle H \rangle / N \quad (2.8)$$

$$\vec{M} = \langle \sum_i \vec{S}_i \rangle / N \quad (2.9)$$

这里 N 是总自旋数， x 表征系统态空间的一组完备坐标，e.g.，对于Ising模型， $x = (S_1, S_2, \dots, S_N)$ ，对于Heisenberg模型， $x = (\vec{S}_1, \vec{S}_2, \dots, \vec{S}_N)$ ，正则系综下物理量 O 的平均值

$$\langle O(x) \rangle_T = \frac{1}{Z} \int O(x) \exp[-H(x)/k_B T] dx \quad (2.10)$$

$$Z = \int \exp(-H(x)/k_B T) dx \quad (2.11)$$

2.10正是2.6的形式， $p(x)$ 为归一化的Boltzmann因子，

$$p(x) = \frac{1}{Z} \exp[-H(x)/k_B T] \quad (2.12)$$

如何来实现按照 $p(x)$ 对态空间进行抽样，一种方式是求函数 $Y(x) = \int_0^x p(x') dx$ 的逆函数 $Y^{-1}(x)$ ，对 Y 随即均匀抽样通过逆函数求出来的 x 就是满足 $p(x)$ 分布的，但是很多情况求逆函数是十分困难的。Metropolis等人[1]提出在抽样得到一系列样

本 x_i 的过程中不要独立地进行，而是构造一个Markov链，链中下一个节点 x_j 是依赖于上一个节点 x_i 并按照一定的跃迁概率 $W(x_i \rightarrow x_j)$ 产生的，要使最终形成的Markov链上的节点满足 $p(x)$ 分布，这个跃迁概率需满足细致平衡方程(Detailed balance equation)

$$p(x_i)W(x_i \rightarrow x_j) = p(x_j)W(x_j \rightarrow x_i) \quad (2.13)$$

这个方程对跃迁概率提出了要求，

$$\frac{W(x_i \rightarrow x_j)}{W(x_j \rightarrow x_i)} = \frac{p(x_j)}{p(x_i)} = \exp\left(-\frac{\delta H}{k_B T}\right) \quad (2.14)$$

这里 $\delta H = H(x_j) - H(x_i)$ ，但跃迁概率的解不是唯一的，最常见的解有两种[2, 3]，一种是Metropolis解

$$W(x_i \rightarrow x_j) = \begin{cases} \frac{1}{\tau_0} \exp\left(-\frac{\delta H}{k_B T}\right) & \delta H > 0 \\ \frac{1}{\tau_0} & otherwise \end{cases} \quad (2.15)$$

还有一种解是

$$W(x_i \rightarrow x_j) = \frac{1}{2\tau_0} [1 - \tanh\left(\frac{\delta H}{2k_B T}\right)] \quad (2.16)$$

τ_0 是一个任意的因子，一般取为1。这种构造Markov链的抽样方式虽然实现方式非常普遍，但在前后两个节点之间产生了关联[2]，会使收敛速度变慢，蒙特卡洛方法很大工作在于构造高效的抽样方式以减少节点之间的关联，如后面将要讲到的团簇翻转方法，还有量子蒙卡中常见的环算法等。

2.2 模拟经典自旋模型

本节以Ising模型以及Heisenberg模型为例介绍下如何用蒙特卡洛方法来研究经典自旋模型及其相变问题。这两个模型的哈密顿量如下

$$H_{Ising} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \quad \sigma_i = \pm 1 \quad (2.17)$$

$$H_{Heisenberg} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad |\vec{S}_i| = 1 \quad (2.18)$$

当 $J > 0$ 时为铁磁模型， $J < 0$ 时为反铁磁模型。在低温时，他们都处于铁磁相(或Neel相)，温度升高时会发生铁磁顺磁相变(或Neel顺磁相变)，如二维铁

磁Ising模型[4]的相变温度 $\frac{J}{k_B T_c} = \frac{\log(1+\sqrt{2})}{2}$ ，而Mermin-Wagner定理[5, 6]指出，在一维或二维的情况下，由短程相互作用构成的系统不会发生连续对称性的自发破缺，所以2维Heisenberg模型相变温度为0，三维铁磁Heisenberg模型[7]的相变温度虽然无法解析求解，但是数值模拟仍然可以给出十分精确的值 $\frac{J}{k_B T_c} \simeq 0.6930$ 。Ising模型的相空间是离散的，包含 2^N 种态， N 为格点数，Heisenberg模型的相空间是连续的，蒙特卡洛模拟的任务就是要在抽样次数远小于相空间体积(如 2^N)的情况下精确得到物理量的平均值，虽然相空间的很多态或者区域在实际模拟中可能根本不会遍历到，但算法设计上还是要求对整个相空间都能够遍历到，即使某些区域访问的可能性很小，否则这种算法就是有偏见的(biased)，会带来系统误差。

利用Metropolis重要性抽样来模拟这些经典自旋模型及其相变问题的基本框架如下：

- (1) 在给定温度(或其他与相变相关的参数)下，为系统选择一个初始态，即为Markov链选择一个初始节点。
- (2) 选择一个格点*i*。
- (3) 计算能量差 ΔE ，对于Ising模型， ΔE 是将格点*i*的自旋翻转后($\sigma_i \rightarrow -\sigma_i$)所产生的系统的能量差，对于Heisenberg模型， ΔE 是将格点*i*的自旋翻转到一个新的3维单位矢量($\vec{S}_i \rightarrow \vec{S}'_i$)所产生的系统的能量差。
- (4) 如果 $\Delta E \leq 0$ ，将 σ_i 或 \vec{S}'_i 翻转到新的位置，否则在 [0,1] 之间产生一个均匀分布的随机数 r ，如果 $r < \exp(-\Delta E/k_B T)$ ，也将其翻转到新的位置，否则保持当前位置不变。
- (5) 按要求统计物理量，选择下一个格点并跳到第(3)步。
- (6) (3)至(5)循环一定步数后就可以得到当前温度(或其他参数条件)下各物理量的平均值，这时可以改变温度值(或其他参数值)并跳到第(2)步。

这里有一些概念和细节需要说明，首先是蒙特卡洛步(MCS)[8]的概念，一个蒙特卡洛步通常是指把系统所有格点都遍历一遍的这样一个循环过程，假设系统有 N 个自旋，则一个蒙特卡洛步就对应着Markov链上 N 个节点的长度，为了减少统计时的关联性，一般是隔几个蒙特卡洛步抽一次样(即对物理量进行一次统计)，比如隔 5 个蒙特卡洛步抽一次样，即代表着在Markov链上每隔 $5N$ 个节点统计一次物理量。还要注意的是，即使自旋的翻转没有被接受，Markov链上下一个节点仍然产生

了，只不过和上一个节点一样。由于初始态达到热平衡需要一定的时间，所以一般认为前面一定数目的蒙特卡洛步是用来达到热平衡的(包括改变温度(或其他参数)后也需要一段热平衡时间)，这些步数是不用于统计物理量的，达到热平衡之后才开始统计物理量。

对于Ising模型，在考虑当前格点*i*自旋翻转所带来的能量差时，

$$\Delta E = 2J\sigma_i \sum_{j \in \{nb\}} \sigma_j \quad (2.19)$$

其中*j*为*i*的最近邻格点，可以看到，因为 $\sigma_i = \pm 1$ ，根据最近邻状态的不同， ΔE 只可能取 $\{2d, 2d - 2, 2d - 4, \dots, -2d\}$ 中的值，所以我们可以先将这些不同的 ΔE 值对应的跃迁概率求出来并保存在表格中，在模拟过程中只需要查表就行了，而不需要每次重复计算 ΔE 所对应的跃迁概率。

对于Heisenberg模型，在单位球面上要生成均匀分布的矢量，可以有两种方式，

1，极坐标系(θ, ϕ)下，一个常犯的错误是在 $[0, 2\pi]$ 内均匀抽样 ϕ ，在 $[0, \pi]$ 内均匀抽样 θ ，这样抽样会导致两极的点密度大一些，如图2.1，因为 $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi = -d(\cos\theta)d\phi$ ，所以我们应该这样抽样，生成两个 $[0, 1]$ 内均匀分布的随机数, v，则 $\phi = 2\pi u$, $\theta = \cos^{-1}(2v - 1)$ 。

2，Marsaglia[9]于1972年提出另外一种有趣的在直角坐标系下的实现方式，先生

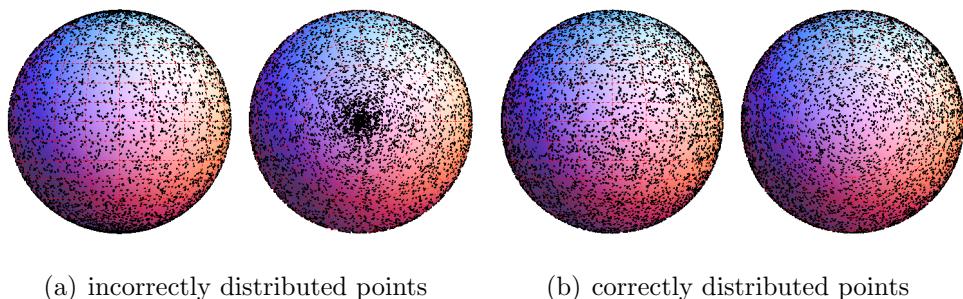


图 2.1 Uniform distribution on sphere surface(side view and vertical view)

成 $[0, 1]$ 内均匀分布的两个随机数 r_1, r_2 ，令 $\zeta_1 = 1 - 2r_1, \zeta_2 = 1 - 2r_2$ ， ζ_1 和 ζ_2 构成一矢量 ζ ， $\zeta^2 = \zeta_1^2 + \zeta_2^2$ ，如果 $\zeta^2 < 1$ ，我们就得到了球面上均分分布的一个点的直角坐标

$$S_x = 2\zeta_1(1 - \zeta^2)^{1/2}, \quad S_y = 2\zeta_2(1 - \zeta^2)^{1/2}, \quad S_z = 1 - 2\zeta^2. \quad (2.20)$$

除了平均能量 E_{av} (方程2.8)和磁化强度 M (方程2.9)之外，还有一些常用的物理量如比热 C ，磁化率 χ ，磁四极矩 U_4 (又称Binder Cumulant)，

$$\begin{aligned} C &= \frac{1}{N} \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial T} \\ &= \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial T} \frac{\sum_x H(x) \exp(-H(x)/k_B T)}{\sum_x \exp(-H(x)/k_B T)} \\ &= \frac{1}{N k_B T^2} \left(\frac{\sum_x H^2(x) \exp(-H(x)/k_B T)}{\sum_x \exp(-H(x)/k_B T)} - \left(\frac{\sum_x H(x) \exp(-H(x)/k_B T)}{\sum_x \exp(-H(x)/k_B T)} \right)^2 \right) \\ &= \frac{1}{N k_B T^2} (\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2) \end{aligned} \quad (2.21)$$

磁化率 χ 是考虑的系统对一个极小外场的响应，其定义如下，

$$\begin{aligned} \chi &= \frac{1}{N} \lim_{H \rightarrow 0} \frac{\partial \langle m \rangle}{\partial H} \quad (m \text{ is the total magnetization, } H \text{ is the external field}) \\ &= \frac{1}{N} \lim_{H \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial H} \frac{\sum_x m(x) \exp(-\frac{H(x)-m(x)H}{k_B T})}{\sum_x \exp(-\frac{H(x)-m(x)H}{k_B T})} \\ &= \frac{1}{N k_B T} \lim_{H \rightarrow 0} \left(\frac{\sum_x m^2(x) \exp(-\frac{H(x)-m(x)H}{k_B T})}{\sum_x \exp(-\frac{H(x)-m(x)H}{k_B T})} - \left(\frac{\sum_x m(x) \exp(-\frac{H(x)-m(x)H}{k_B T})}{\sum_x \exp(-\frac{H(x)-m(x)H}{k_B T})} \right)^2 \right) \\ &= \frac{1}{N k_B T} \left(\frac{\sum_x m^2(x) \exp(-H(x)/k_B T)}{\sum_x \exp(-H(x)/k_B T)} - \left(\frac{\sum_x m(x) \exp(-H(x)/k_B T)}{\sum_x \exp(-H(x)/k_B T)} \right)^2 \right) \\ &= \frac{1}{N k_B T} (\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2) \\ &= \frac{N}{k_B T} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) \end{aligned} \quad (2.22)$$

从以上两式可以看到比热 C 衡量了能量的涨落，而磁化率 χ 衡量了磁化强度的涨落，在相变点，因为关联长度 ξ 发散，涨落无穷大，所以 C 和 χ 在相变点也会发散，利用这一点我们可以估计出相变点的位置。在相变点附近这些物理量的临界关系[10, 11]如下，

$$M \propto t^\beta \quad (2.23)$$

$$\chi \propto t^{-\gamma} \quad (2.24)$$

$$C \propto t^{-\alpha} \quad (2.25)$$

$$\xi \propto t^{-\nu} \quad (2.26)$$

其中 $t = |1 - T/T_c|$ ， $\alpha, \beta, \gamma, \nu$ 为临界指数，根据相变所属普适类的不同，临界指数也会不同。还有一点需要指出的是，比如对于Ising模型，低温下的自发磁化可以向

上，也可以向下，对于理想无限体系，一旦选择了某个朝向后要越过无限高的势垒才有可能翻转到体系完全相反的状态，这个翻转时间是无穷长的，但对于有限体系，势垒高度有限，系统会在模拟的过程中一段时间处于某种朝向，一段时间又处于完全相反的状态，如图 2.2，所以在统计磁化强度 M 时，我们实际上统计的是 $|M|$ ，这样才能合理地反映无限体系在低温时的自发磁化。

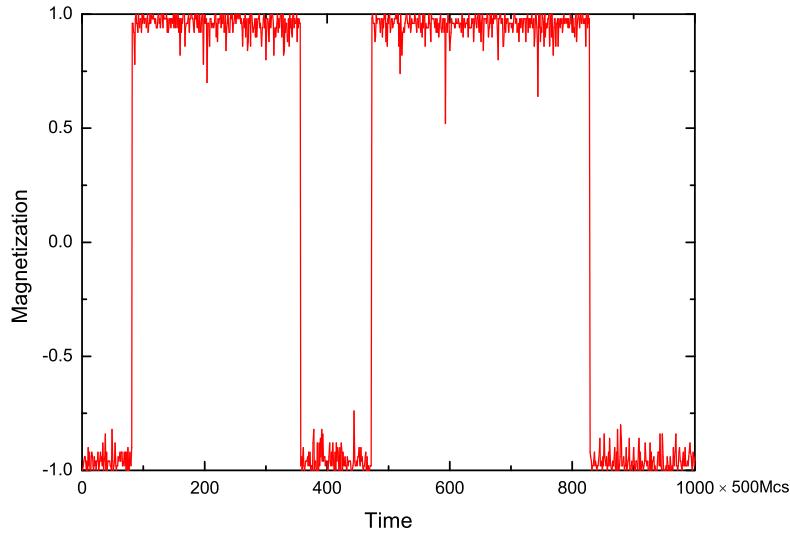


图 2.2 Switch of magnetization in the process of simulation

磁四极矩[12]的定义如下，

$$U_4 = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3\langle M^2 \rangle^2} \quad (2.27)$$

虽然通过比热或磁化率的峰值可以估计出相变点的位置，但随着体系尺寸的不断增长会发现相变点位置的漂移，如图2.3，这是因为我们模拟的始终是有限体系，存在有限尺度效应(finit size effect)，要想得到理想无限大体系的精确的相变点位置，就需要做有限尺度标度分析(finit size scaling)[13, 14]，重整化群理论结果表明，在临界点附近，各物理量存在如下标度关系，

$$M_L(t) = L^{-\beta/\nu} G_M(tL^{1/\nu}) \quad (2.28)$$

$$\chi_L(t) = L^{\gamma/\nu} G_\chi(tL^{1/\nu}) \quad (2.29)$$

$$C_L(t) = L^{\alpha/\nu} G_C(tL^{1/\nu}) \quad (2.30)$$

$$\xi_L(t) = LG_\xi(tL^{1/\nu}) \quad (2.31)$$

$$U_{4L}(t) = G_{U_4}(tL^{1/\nu}) \quad (2.32)$$

其中 L 衡量体系大小, G_O 是关于物理 O 的一个普适函数, 可以看到在临界点时, $t = 0$, 对于不同 L 的体系, U_4 都等于 $G_{U_4}(0)$, 这意味着我们可以通过寻找不同 L 体系 U_4 曲线的交点精确地得到相变点的位置, 如图 2.4。

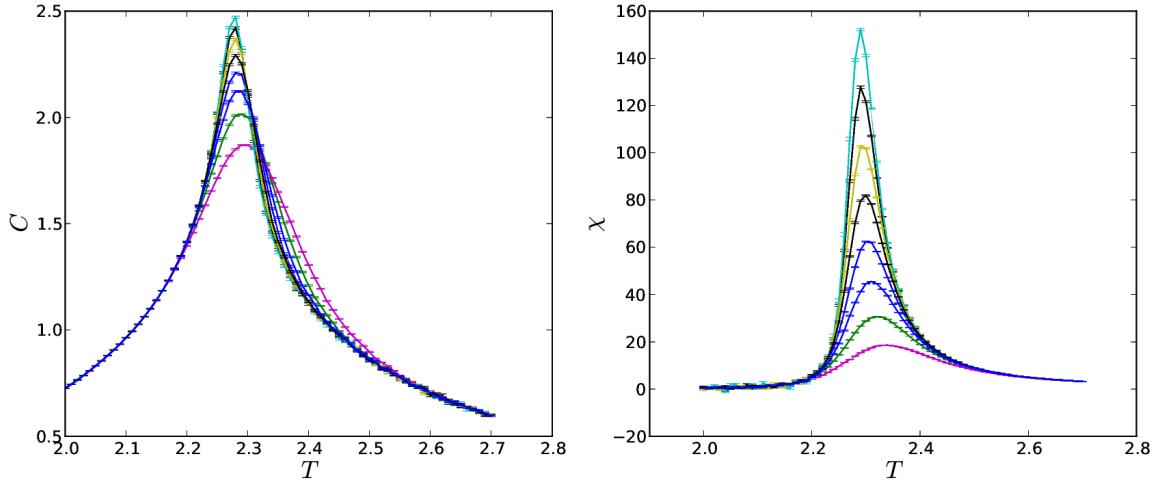


图 2.3 Specific heat c_v and susceptibility χ for 2D Ising model with L varies from 30 to 100

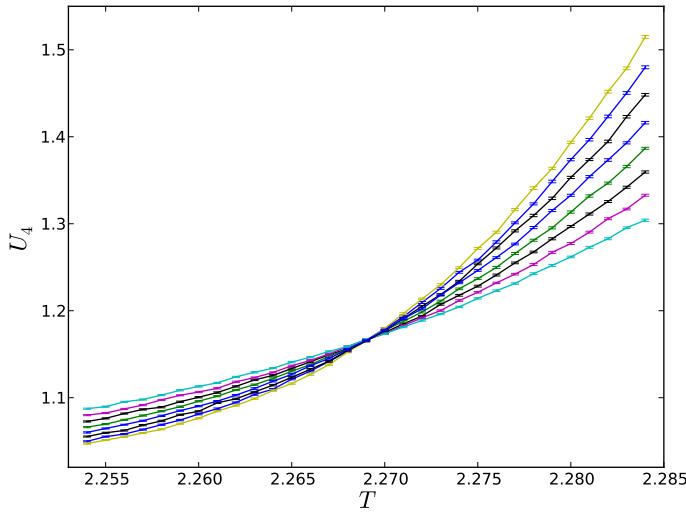


图 2.4 Binder cumulant U_4 for 2D Ising model with L varies from 70 to 140

在上节末尾我们提到过 Markov 链上节点之间的动态关联问题[15], 这里我们详细地讨论一下。对于前后无关联的统计方式, 即简单性抽样方式, 对物理量 O 的统

计误差为

$$\langle(\delta O)^2\rangle = \frac{1}{N}[\langle O^2 \rangle - \langle O \rangle^2] \quad (2.33)$$

其中 N 为统计的次数。而对于前述所讲的局域自旋反转形成 Markov 链的重要性抽样方式，假设我们抽样的时间间隔是 δt ，在统计了 N 次之后得到的统计误差为

$$\langle(\delta O)^2\rangle = \frac{1}{N}[\langle O^2 \rangle - \langle O \rangle^2](1 + 2\frac{\tau_O}{\delta t}) \quad (2.34)$$

其中 τ_O 为物理量 O 的内在自关联时间，可以看到，在 $\delta t \gg \tau_O$ 时，即我们统计时时间间隔取大一些，这个误差就变成了无关联简单性抽样的统计误差，是一个好的近似。当 $\delta t \ll \tau_O$ 时，令 $\tau_{obs} = N\delta t$ 为总的模拟时间，则有

$$\langle(\delta O)^2\rangle = 2\frac{\tau_O}{\tau_{obs}}[\langle O^2 \rangle - \langle O \rangle^2] \quad (2.35)$$

这表明此时统计误差与我们选的抽样时间间隔长度无关，而与总模拟时间有关， τ_{obs} 一定的情况下， δt 越小，虽然抽样次数 N 很多，但样本之间关联太强，导致结果并不会比 δt 大 N 小的情况好。在相变点附近，自关联时间

$$\tau \propto \xi^z \propto |1 - T/T_c|^{-\nu z} \quad (2.36)$$

z 是动力学临界指数[16]，对于有限体系， ξ 最大为表征系统大小的线性维度 L ，

$$\tau_{max} \propto L^z \quad (T = T_c) \quad (2.37)$$

以磁化强度 M 为例，这时它所对应的统计误差为

$$\begin{aligned} \langle(\delta M)^2\rangle_{T_c} &= \frac{2\tau_{max}}{t_{obs}}(\langle M^2 \rangle_{T_c} - \langle |M| \rangle_{T_c}^2) \\ &= \frac{2\tau_{max}\chi_L(T_c)k_B T}{t_{obs}L^d} \propto \frac{L^{z+\gamma/\nu-d}}{t_{obs}} \end{aligned} \quad (2.38)$$

其中 L^d 为自旋总数， d 为维度。可以看到在临界点由于自关联时间 τ 的发散导致的误差是很大的，这就是所谓的临界减速(Critical Slowing Down)问题[17]，对应于 Ising 模型，即是在相变点由于关联长度的发散，则大量由关联自旋形成的大团簇要想通过单自旋翻转的方式溶解掉是需要很长时间的。为了缓解相变点上的临界减速问题，需要设计算法尽量减少抽样过程中的关联性，降低动力学临界指数 z 的值。上世纪八十年代末，Swendsen、Wang、Wolff 等人提出了团簇算

法(Cluster Algorithm)，由于算法设计的精巧，使得我们可以在与自旋表象对偶的团簇表象里通过翻转团簇来得到Markov链，并且团簇的翻转之间不存在关联性，从而使得临界减速问题得到极大的缓解甚至完全解决，物理量的统计也可以完全在团簇表象里进行，利用对团簇特征如团簇大小等的统计来得到常用的物理量，精确度更高，这是一种优化统计方式(Improved Estimator)，下面我们详细介绍团簇算法的原理及其实现过程。

团簇算法的提出来源于Fortuin和Kasteleyn两人所做的工作[18]，他们发现了铁磁Potts模型是可以对应到一种键渗流模型(percolation model)，Potts模型用标准的蒙特卡罗方法模拟会存在临界减速的问题，而渗流模型中键的投掷是一个随机无关的过程，所以渗流模型不存在临界减速问题，Fortuin-Kasteleyn变换允许我们把一个存在临界减速现象的问题转化为一个临界减速现象可以得到极大缓解甚至完全消失的问题。

87年Swendsen和Wang基于此提出了Swendsen-Wang团簇算法[19]，以铁磁Ising模型为例，其基本框架与单自旋翻转方式类似，只是Markov链上新节点的产生是通过下面三个步骤来实现，

1，长团簇。如对于一个 4×4 的系统，考虑自由边界条件，假如当前态如图2.5(a)所示，蓝键表示相同自旋间的相互作用，红键表示相反自旋间的相互作用。依次考虑所有最近邻之间的相互作用，对于自旋相同的最近邻(蓝键)，以概率 $p = 1 - \exp(-2\beta J)$ 将两自旋连接起来(称为成键)，而对于自选相反的最近邻(红键)则不将它们连接起来，所有最近邻相互作用都考虑完后，连接起来的自旋就形成了团簇，如图2.5(b) 所示有7个团簇(C_1 至 C_7)，每个团簇都由指向相同的自旋构成，单自旋也可以构成团簇，如 C_2 , C_6 。

2，翻转团簇。对每个团簇以 $\frac{1}{2}$ 概率将其所包含的所有自旋翻转，得到如图2.5(c)所示结果(C_2 , C_4 , C_7 进行了翻转)。

3，撤销团簇得到新态。如图2.5(d)所示，再以此态为当前态继续循环操作从而形成Markov链。

本例中只有 C_2 , C_4 , C_7 翻转了，我们将这三个团簇所包含的所有自旋归为*interior*部分，其他团簇所包含的所有剩余自旋归为*exterior*部分， $|S\rangle$ 与 $|S'\rangle$ 的

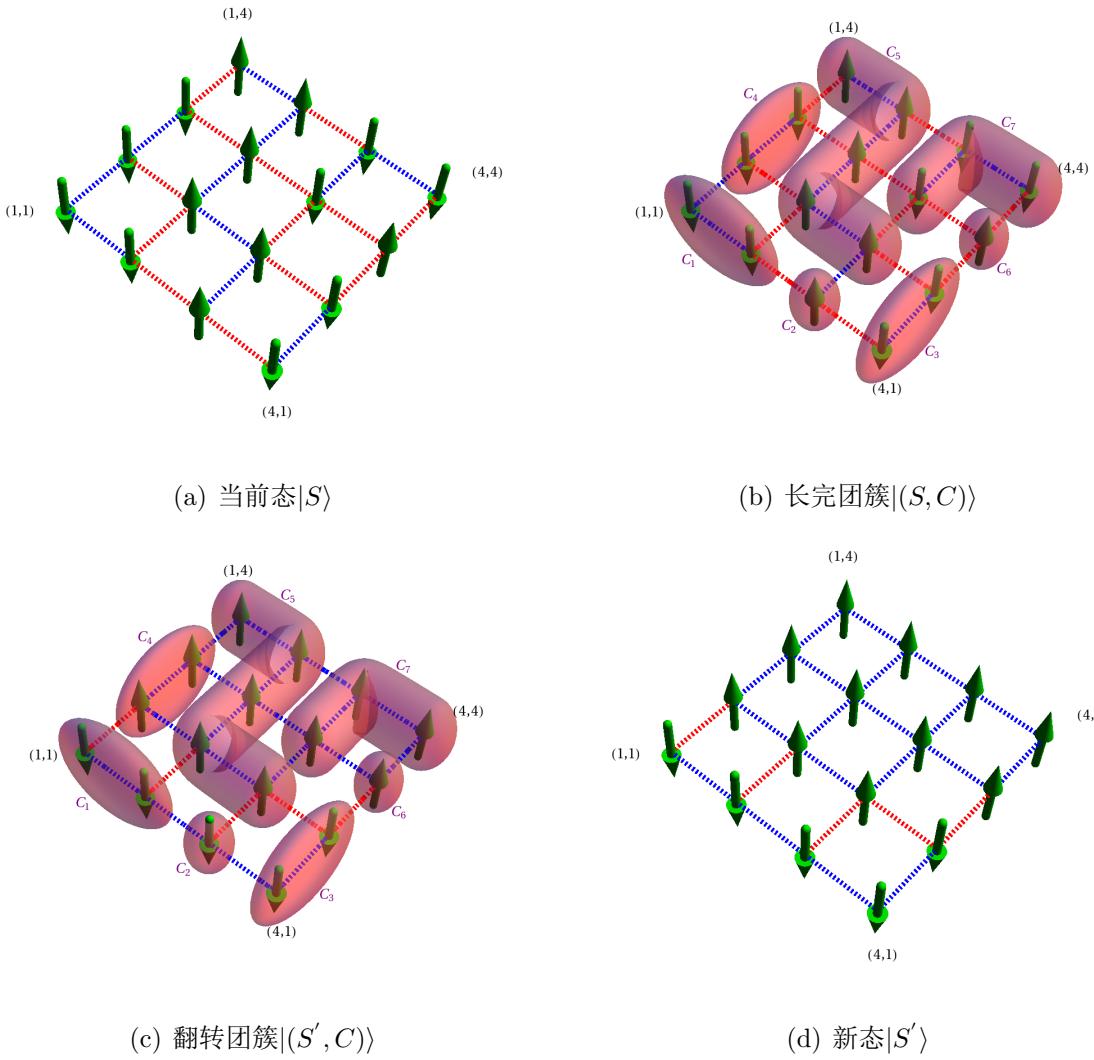


图 2.5 Swendsen-Wang Cluster Algorithm

区别在于 *interior* 部分的自旋得到了翻转，由于团簇在翻转前后内部能量不变，只有与其他团簇作用的边界作用能量会发生变化， C_2, C_4, C_7 这三个团簇的边界作用一共有 12 个，在 $|(S, C)\rangle$ 中这三个团簇的边界作用中相同自旋的相互作用总数(蓝键) $n_{same} = 2$ ，不同自旋的相互作用总数(红键) $n_{diff} = 10$ ，在 $|(S', C)\rangle$ 中 $n'_{same} = 10$ ， $n'_{diff} = 2$ ， $|(S, C)\rangle$ 与 $|(S', C)\rangle$ 中还有一些翻转前后没发生变化的 C_1, C_3, C_5, C_6 之间的边界作用，设为 *left* 部分，有

$$E_{|S\rangle} = E_{interior} + E_{exterior} + E_{left} - Jn_{same} + Jn_{diff} \quad (2.39)$$

$$E_{|S'\rangle} = E_{interior} + E_{exterior} + E_{left} - Jn'_{same} + Jn'_{diff} \quad (2.40)$$

$$W(|S\rangle \rightarrow |(S, C)\rangle) = (1-p)^{n_{same}} \quad (2.41)$$

$$W(|S'\rangle \rightarrow |S', C\rangle) = (1-p)^{n'_{same}} \quad (2.42)$$

$$p(|S, C\rangle) = p(|S\rangle)W(|S\rangle \rightarrow |(S, C)\rangle) \quad (2.43)$$

$$p(|S', C\rangle) = p(|S'\rangle)W(|S'\rangle \rightarrow |(S', C)\rangle) \quad (2.44)$$

要满足细致平衡方程

$$p(|S, C\rangle)W(|S, C\rangle \rightarrow |S', C\rangle) = p(|S', C\rangle)W(|S', C\rangle \rightarrow |S, C\rangle) \quad (2.45)$$

与方程2.13-2.54类似，我们可以选择从 $|S, C\rangle$ 到 $|S', C\rangle$ 的跃迁概率为

$$\begin{aligned} W(|S, C\rangle \rightarrow |S', C\rangle) &= \min\left\{1, \frac{p(|S', C\rangle)}{p(|S, C\rangle)}\right\} \\ &= \min\left\{1, \frac{\exp(-\beta(-Jn'_{same} + Jn'_{diff})) (1-p)^{n'_{same}}}{\exp(-\beta(-Jn_{same} + Jn_{diff})) (1-p)^{n_{same}}}\right\} \\ &= \min\left\{1, \left(\frac{\exp(-2\beta J)}{1-p}\right)^{n_{same}} \left(\frac{1-p}{\exp(-2\beta J)}\right)^{n_{diff}}\right\} \end{aligned} \quad (2.46)$$

可以看到当 $p = 1 - \exp(-2\beta J)$ 时， $W(|S, C\rangle \rightarrow |S', C\rangle) = 1$ ，同理我们可以证明不只是翻转 C_2, C_4, C_7 得到的 $|S', C\rangle$ ，而是任意翻转某些团簇得到的所有可能的 $|S', C\rangle$ (包括 $|S\rangle$ ，如果团簇都不翻转)的概率 $p(|S', C\rangle)$ 都是相等的，那么我们可以以 $\frac{1}{2}$ 的概率对每个团簇尝试翻转得到新态，以上我们简单证明了Swendsen-Wang算法是如何满足细致平衡的。

在高温时，成键概率小，团簇都很小，低温时，相反，团簇都很大，所以系统容易在两个态之间来回翻转，在临界点附近，各种大小的团簇都普遍存在，团簇翻转的结果就会形成完全不同的新态，这样临界减速的问题就会得到极大的缓解。不同算法的动力学指数 z 的数值结果如表2.1所示[20]，Wolff算法下面将会讲到。

表 2.1 Comparision of the value of z for Ising model using different updating algorithms

dimension d	Metropolis	Wolff	Swendsen Wang
2	2.167 ± 0.001	0.25 ± 0.01	0.25 ± 0.01
3	2.02 ± 0.02	0.33 ± 0.01	0.54 ± 0.02
4	-	0.25 ± 0.01	0.86 ± 0.02

这里还需要提及一下一个模拟细节的问题，即如何标记每个自旋所属的团簇序号的问题，如图2.6所示，实际上一共只有4个团簇，而我们从自旋(1, 1)开始标

记，到自旋(4, 1)我们并不知道它实际上和(1, 1)是属于同一个团簇的，只好暂时标记为3，这样到(4, 4)的时候就会发现与它已经成键的两个最近邻(3, 4)与(4, 3)标号不一样，这时才知道团簇1和3原来是同一个团簇，通常情况下我们只好返回去重新把标号为3的自旋改为标号1，这样就造成了算法的低效。Hoshen和Kopelman提出一种有效的算法可以只需遍历一次系统就可以正确标记每个自旋所属团簇序号[21]，他们主要是用到了“标号的标号(labels of the labels)”这样一个概念，每个团簇还有一个属性如用 N 来标识，它表示了当前团簇的大小，比如在遍历到(4, 4)的时候， $N_1 = 6$, $N_2 = 2$, $N_3 = 3$, $N_4 = 2$, $N_5 = 2$ ，考虑(4, 4)时，我们将其标记为1，并令 $N_1 = N_1 + N_3 + 1 = 10$, $N_3 = -1$ ，所以整个系统遍历完之后，我们可以通过属性 N 的正负以及它的取值知道当前自旋最终应该属于哪个团簇并且知道这个团簇的大小。

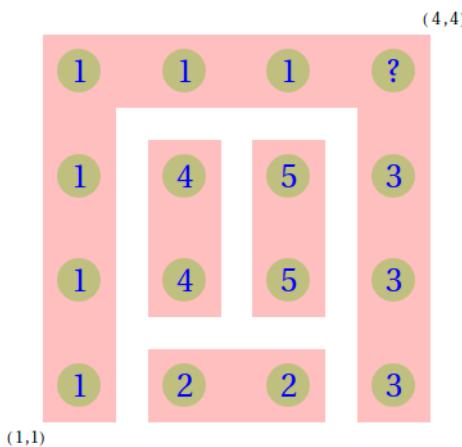


图 2.6 Steps of labeling clusters

前面介绍过，单自旋翻转方式的低效是因为大团簇很难通过这种方式溶解掉，从而造成临界减速。Swendsen-Wang算法的一个缺点是相当的工作量花在了形成和翻转对临界减速没有贡献的小团簇上，基于此89年Wolff提出了单团簇算法，下面以Heisenberg模型为例介绍Wolff算法[22]。

因为Heisenberg模型是 $O(3)$ 自旋模型，自旋不再只取 ± 1 两种可能取值，而是取 \mathbb{R}^3 上的一个单位矢量，所以我们要定义一种广义的翻转操作，如图2.7所示， \vec{r} 是 \mathbb{R}^3 上的一个任意单位矢量， \mathcal{P}_{r_\perp} 是与 \vec{r} 垂直的平面，自旋 S_i 的翻转操作相当于 S_i 做了一个关于 \mathcal{P}_{r_\perp} 的镜像操作，

$$S_i^{old} \rightarrow S_i^{new} = R(\vec{r})S_i^{old} = S_i^{old} - 2(S_i^{old} \cdot \vec{r})\vec{r} \quad (2.47)$$

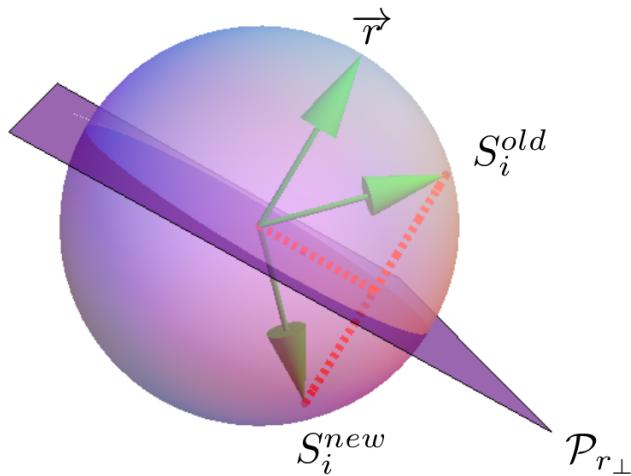


图 2.7 Generalized spin-flip operation

关于此操作还有如下关系式

$$R(\vec{r})^2 = 1 \quad (2.48)$$

$$[R(\vec{r})S_i] \cdot [R(\vec{r})S_j] = S_i \cdot S_j \quad (2.49)$$

$$S_i \cdot [1 - R(\vec{r})]S_j = 2(\vec{r} \cdot S_i)(\vec{r} \cdot S_j) \quad (2.50)$$

Wolff算法的具体步骤如下：

- 1, 选择一个随机矢量 \vec{r} 和随机格点 S_i 作为团簇的初始生长格点。
- 2, 将 S_i 翻转到 $S_i^{new} = R(\vec{r})S_i$ 。
- 3, 考虑*i*格点的所有最近邻, 以概率

$$p(S_i^{new}, S_j) = 1 - \exp\{\min[0, \beta JS_i^{new} \cdot [1 - R(\vec{r})]S_j]\} \quad (2.51)$$

$$= 1 - \exp\{\min[0, 2\beta J(\vec{r} \cdot S_i^{new})(\vec{r} \cdot S_j)]\} \quad (2.52)$$

决定*i*与某个最近邻*j*是否成键, 如果成键, 就将 S_j 翻转到 $S_j^{new} = R(\vec{r})S_j$, *i*的最近邻都考虑完后会形成一个小团簇, 与Swendsen-Wang算法不同的是, 这里团簇是边生长边翻转的。

- 4, 再循环考虑团簇边界点的最近邻, 对每个可能的自旋对以概率 p 决定最近邻点是否融入团簇(即是否成键), 直至团簇停止生长(可以是由于体系限制无法再长大, 也可以是某一次循环时团簇边界点的最近邻都没有融入团簇)。生成的团簇如图2.8所

示，粉色球表示团簇的边界点，蓝色球表示边界点的最近邻，红线表示团簇的边界。

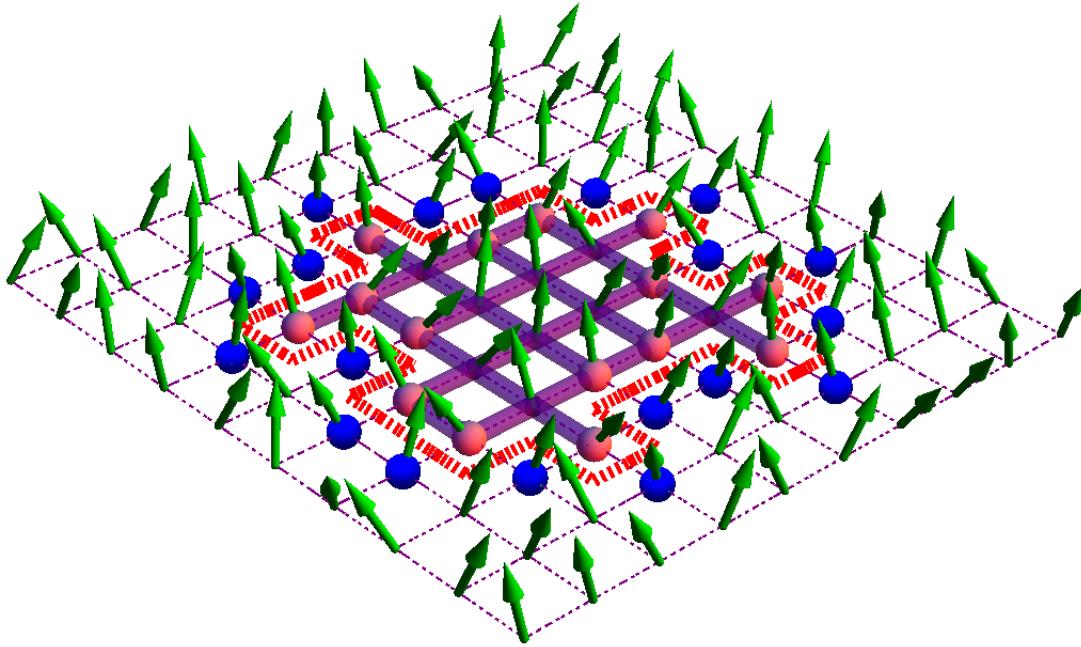


图 2.8 Wolff Cluster Algorithm

对于Ising模型， \vec{r} 只能在 z 轴上，翻转操作就变成了常见的Ising自旋翻转过程，并且成键概率也变成了对应于Ising模型的 $1 - \exp\{-2\beta J\}$ 。假设某个初始系统态 $|S\rangle$ 经过Wolff团簇生长和翻转过程后达到系统态 $|S'\rangle$ ，假设跨越团簇边界(上图中的红线)的自旋对集合为 ∂c ，格点 i 在团簇内部(粉球)，格点 j 在团簇外部(蓝球)，有 $S'_i = R(\vec{r})S_i$, $S'_j = S_j$ ，这个过程的跃迁概率为

$$\begin{aligned} \frac{W(|S\rangle \rightarrow |S'\rangle)}{W(|S'\rangle \rightarrow |S\rangle)} &= \frac{(V_c/N)P_{int}}{(V_c/N)P'_{int}} \prod_{\langle i,j \rangle \in \partial c} \frac{1 - P(R(\vec{r})S_i, S_j)}{1 - P(R(\vec{r})S'_i, S_j)} \\ &= \exp\left\{\sum_{\langle i,j \rangle \in \partial c} (\min\{0, -2\beta J(\vec{r} \cdot S_i)(\vec{r} \cdot S_j)\} - \min\{0, 2\beta J(\vec{r} \cdot S_i)(\vec{r} \cdot S_j)\})\right\} \\ &= \exp\left\{\sum_{\langle i,j \rangle \in \partial c} -2\beta J(\vec{r} \cdot S_i)(\vec{r} \cdot S_j)\right\} \\ &= \exp\left\{\beta J \sum_{\langle i,j \rangle \in \partial c} S_i \cdot [R(\vec{r}) - 1]S_j\right\} \end{aligned}$$

$$= \exp\{\beta J \sum_{\langle i,j \rangle} (S'_i \cdot S_j - S_i \cdot S_j)\} \quad (2.53)$$

上式中 V_c/N 为团簇初始生长点选在团簇内部的概率, V_c 为团簇 c 的体积(既包含的自旋数目), P_{int} 表示使团簇内部全部成键的概率, 因为 2.49, 所以有 $P_{int} = P'_{int}$ 。可以看到, Wolff 算法也是满足细致平衡条件的。

关于 Improved estimator, 这里简单说一下, 如对于 Ising 模型, 有

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \begin{cases} 1 & \text{if } i, j \text{ in the same cluster} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2.54)$$

如果是多团簇 Swendsen-Wang 算法, 磁化强度平方的平均值

$$\langle M^2 \rangle = \frac{1}{N^2} \sum_{i,j} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \frac{1}{N^2} \sum_c \langle V_c^2 \rangle \quad (2.55)$$

对于单团簇 Wolff 算法, 团簇大小的平均值为

$$\langle V_c \rangle = \langle \frac{V_c}{N} V_c \rangle = \frac{1}{N} \langle V_c^2 \rangle \quad (2.56)$$

所以磁化强度平方的平均值在单团簇算法下为 $\langle V_c \rangle / N$, 由此我们可以很方便地得到磁化率, 更多的在团簇表象下的 Improved estimator 可参考文献[23]。

得到模拟数据后, 通过前面已经介绍过的不同 L 系统 U_4 的交点我们可以精确地得到相变点位置, 由方程 2.32 可得

$$\left. \frac{dU_{4L}(t)}{dt} \right|_{t \rightarrow 0} = L^{1/\nu} G_{U_4}(0) \quad (2.57)$$

我们可以画出上式左边关于 L 的对数-对数图就可以得到临界指数 ν 了, 如图 2.9, 同理, 利用方程 2.28, 2.29, 2.30 画出相应的对数-对数图我们就可以确定出临界指数 α, β, γ , 如图 2.10, 对于二维 Ising 模型, $\nu=1$, $\beta/\nu=1/8$, $\gamma/\nu=7/4$, 而 $\alpha=0$, 在临界点附近比热虽然也是发散的, 但是对数发散的, $C \propto \ln(|T - T_c|)$, 更精确地得到临界指数的方法参考第 5 章。得到这些临界指数之后我们就可以通过做数据坍缩(data collapsing)图来看得到的相变点以及临界指数是否准确, 如果结果比较好的话, 不同尺寸的数据点就会重叠到一条曲线上, 如图 2.11, 曲线就代表着该物理量对应的普适函数关系 $G_O(x)$ 。

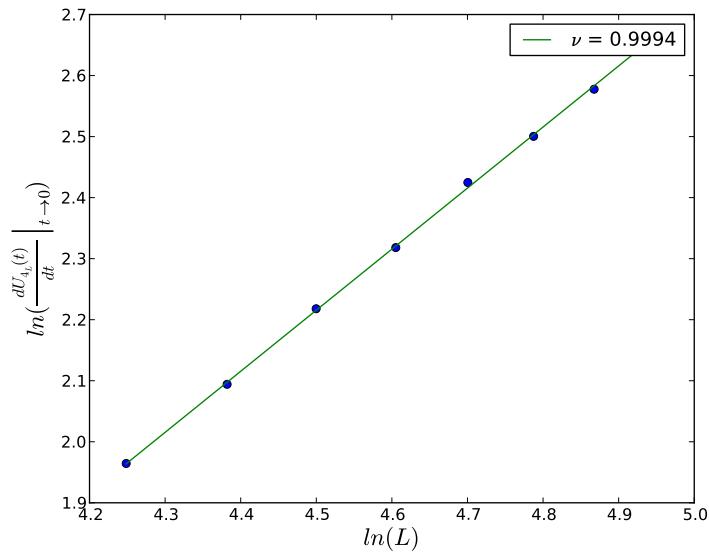


图 2.9 Extract values of critical exponent ν for 2D Ising model

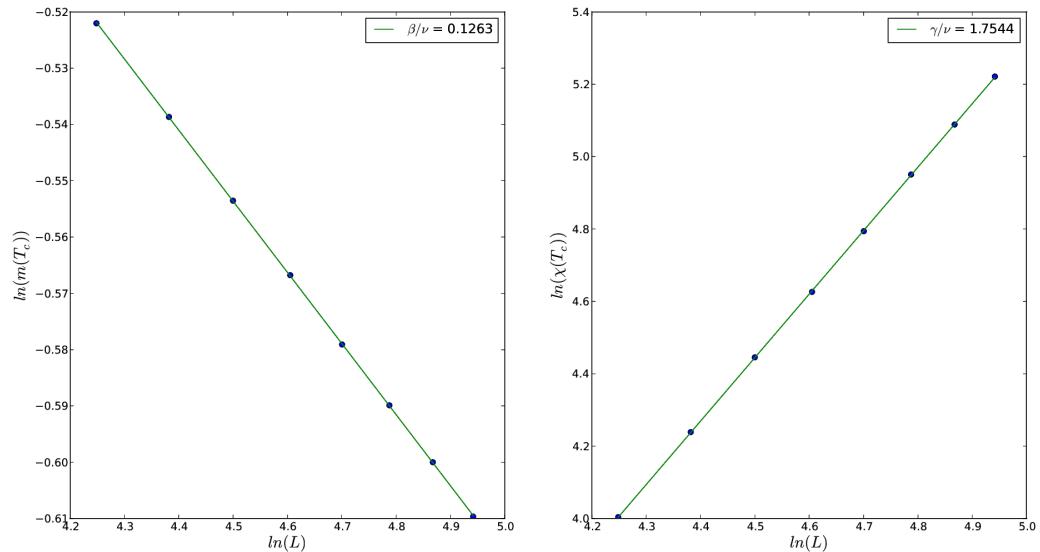


图 2.10 Extract values of β/ν and γ/ν for 2D Ising model

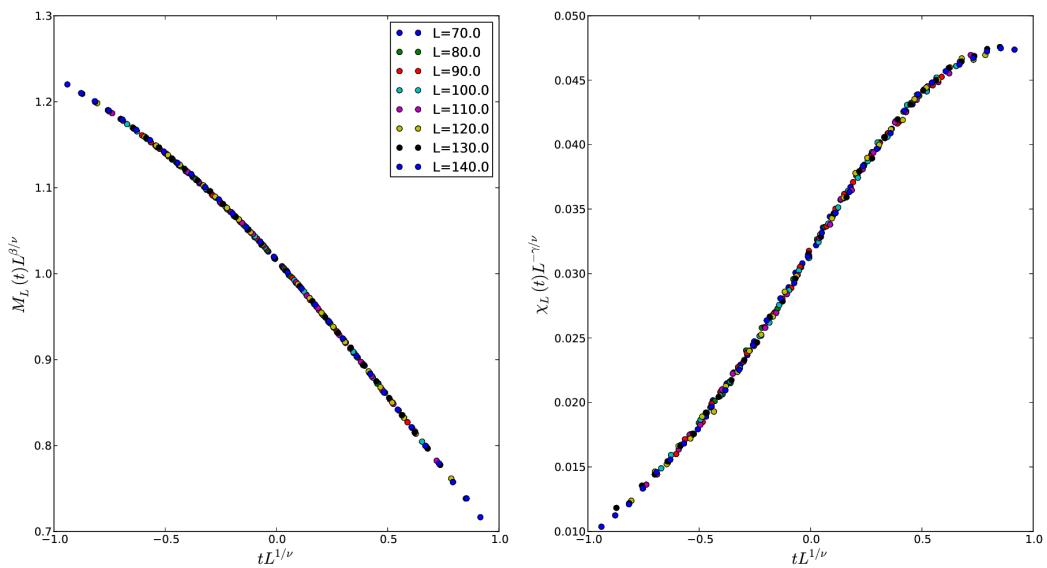


图 2.11 Data collapsing of magnetization and susceptibility

参 考 文 献

- [1] N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.H. Teller, and E. Teller, *Equations of State Calculations by Fast Computing Machines*, J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953).
- [2] H. M-Krumbhaar and K. Binder, *Dynamical Properties of the Monte Carlo Method in Statistical Mechanics*, J. Stat. Phys. **8**, 1 (1973).
- [3] S. Duane, A.D. Kennedy, B.J. Pendleton, and D. Roweth, *Hybrid Monte Carlo*, Phys. Lett. B **195**, 216 (1987);
D.W. Heermann, P. Nielaba, and M. Rovere, *Hybrid Molecular Dynamics*, Comput. Phys. Commun. **60**, 311 (1990);
B. Mehlig, D.W. Heermann, and B.M. Forrest, *Hybrid Monte Carlo method for condensed-matter systems*, Phys. Rev. B **45**, 679 (1992).
- [4] L. Onsager, *Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition*, Phys. Rev. **65**, 117 (1944).
- [5] N.D. Mermin and H. Wagner, *Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models*, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).
- [6] P.C. Hohenberg, *Existence of Long-Range Order in One and Two Dimensions*, Phys. Rev. **158**, 383 (1967).
- [7] K. Chen, A.M. Ferrenberg, and D.P. Landau, *Static critical behavior of three-dimensional classical Heisenberg models: A high-resolution Monte Carlo study*, Phys. Rev. B **48**, 3249 (1993).
- [8] K. Binder and D.W. Heermann, **Monte Carlo Simulation in Statistical Physics: An Introduction (5th ed.)** (Springer, 2010).

- [9] G. Marsaglia, *Choosing a Point from the Surface of a Sphere*, Ann. Math. Stat. **43**, 645-646 (1972).
- [10] H.E. Stanley, **An Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena** (Oxford University Press, 1987).
- [11] M.E. Fisher, *The renormalization group in the theory of critical behavior*, Rev. Mod. Phys. **46**, 597 (1974).
- [12] K. Binder, *Finite size scaling analysis of ising model block distribution functions*, Z. Phys. B **43**, 119 (1981);
K. Binder, *Critical Properties from Monte Carlo Coarse Graining and Renormalization*, Phys. Rev. Lett. **47**, 693 (1981).
- [13] V. Privman, **Finite Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems** (World Scientific, 1990).
- [14] K. Binder, **Computational Methods in Field Theory** edited by C.B.Lang and H.Gausterer (Springer, Berlin, 1992).
- [15] L. van Hove, *Time-Dependent Correlations between Spins and Neutron Scattering in Ferromagnetic Crystals*, Phys. Rev. **95**, 1374 (1954)
- [16] S. Wansleben and D.P. Landau, *Dynamical critical exponent of the 3D Ising model*, J. Appl. Phys. **61**, 3968 (1987);
D.P. Landau, S.Y. Tang, and S. Wansleben, J. Phys. (Paris) **49**, Colloq. **8**, 1525 (1989).
- [17] P.C. Hohenberg and B.I. Halperin, *Theory of dynamic critical phenomena*, Rev. Mod. Phys. **49**, 435 (1977).
- [18] P.W. Kasteleyn and C.M. Fortuin, J. Phys. Soc. Jpn. Suppl. **26**(Suppl.), 11 (1969);
C.M. Fortuin and P.W. Kasteleyn, *On the random-cluster model: I. Introduction and relation to other models*, Physica (Utrecht) **57**, 536 (1972).

-
- [19] R.H. Swendsen and J.-S. Wang, *Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations*, Phys. Rev. Lett. **58**, 86 (1987).
 - [20] M.E.J. Newman and G.T. Barkema, **Monte Carlo Methods in Statistical Physics** (Oxford University Press, 1999).
 - [21] J. Hoshen and R. Kopelman, *Percolation and cluster distribution. I. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm*, Phys. Rev. B **14**, 3438 (1976).
 - [22] U. Wolff, *Collective Monte Carlo Updating for Spin Systems*, Phys. Rev. Lett. **62**, 361 (1989).
 - [23] U. Wolff, *Lattice field theory as a percolation process*, Phys. Rev. Lett. **60**, 1461 (1988);
U. Wolff, *Monte Carlo simulation of a lattice field theory as correlation percolation*, Nucl. Phys. B **300**, 501 (1988).

第三章 量子蒙特卡洛方法

3.1 发展历史及理论基础

在处理经典自旋问题时，在以经典 $O(n)$ 单位矢量表示自旋的表象里，配分函数是求和形式

$$Z = \sum_x e^{-\beta E(x)} \quad (3.1)$$

这等于说任意的经典自旋态都是系统的本征态，在经典表象里不存在非对角元 $\langle x|H|x'\rangle$ ，配分函数就是对所有对角元 $e^{-\beta E(x)}$ 的求和，我们只需要以Boltzmann分布来对 x 进行重要性抽样就行了。对量子问题，配分函数写成

$$Z = Tr\{e^{-\beta H}\} = \sum_{\alpha} \langle \alpha | e^{-\beta H} | \alpha \rangle \quad (3.2)$$

我们可以很直观地在 S^z 表象下构造一组基矢，但是这组基矢一般不是系统的本征矢，哈密顿量在这组基矢下的矩阵不再是像经典情况下的对角矩阵，这就涉及到矩阵对角化的问题，当体系增大后，态空间以及计算量将呈指数级增长，大矩阵对角化可以说是各种数值计算方法要处理的核心问题。

由于哈密顿量通常可以写成一些互相不对易的算符 H_i 的和

$$H = \sum_{i=1}^M H_i \quad (3.3)$$

60年代Handscomb提出将配分函数写成Taylor展开的形式[1]，

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\{S_n\}} \frac{(-\beta)^n}{n!} Tr\left\{\prod_{j=1}^n H_{l_j}\right\} \quad (3.4)$$

其中 l_j 取1至 M 的某个值，所有 n 个算符 H_{l_j} 的乘积序列构成了 S_n ，对每个 n 我们都要对所有可能的乘积序列 S_n 求和，如果算符 A 满足

$$Tr\left\{A \prod_{j=1}^n H_{l_j}\right\} = 0, \quad if \quad Tr\left\{\prod_{j=1}^n H_{l_j}\right\} = 0 \quad (3.5)$$

那么 A 的热力学平均值可以写为

$$\langle A \rangle = Tr\{Ae^{-\beta H}\} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\{S_n\}} A(S_n) W(S_n) \quad (3.6)$$

其中

$$W(S_n) = \frac{1}{Z} \frac{(-\beta)^n}{n!} \text{Tr}\left\{\prod_{j=1}^n H_{l_j}\right\} \quad (3.7)$$

$$A(S_n) = \begin{cases} \text{Tr}\{A \prod_{j=1}^n H_{l_j}\} / \text{Tr}\{\prod_{j=1}^n H_{l_j}\} & \text{if } W(S_n) \neq 0 \\ 0 & \text{if } W(S_n) = 0 \end{cases} \quad (3.8)$$

方程3.6正是重要性抽样的形式，以方程3.7所示概率来对算符序列 S_n 进行抽样，在某个给定的算符序列下 A 对应的观测值通过方程3.8得到。而Handscomb方法的局限性是算符序列的手动求迹往往是很难求的。

70年代Suzuki意识到一个 d 维量子自旋 $1/2$ 系统的配分函数可以对应到一个 $d+1$ 维经典Ising模型的配分函数[2]，从而使应用蒙特卡洛方法研究量子系统得到极大地推广，其基本思想是利用Trotter分解

$$e^{-\beta H} = \lim_{L \rightarrow \infty} \left[\prod_{i=1}^M e^{-\Delta\tau H_i} \right]^L = \lim_{L \rightarrow \infty} \prod_{k=1}^L \prod_{i=1}^M e^{-\Delta\tau H_i} \quad (3.9)$$

并插入基矢将配分函数写成路径积分的形式，

$$\begin{aligned} Z &= \lim_{L \rightarrow \infty} \text{Tr}\left\{\prod_{k=1}^L \prod_{i=1}^M e^{-\Delta\tau H_i}\right\} \\ &= \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{\{\psi_i(k)\}} \prod_{k=1}^L \prod_{i=1}^M \langle \psi_{i+1}(k) | e^{-\Delta\tau H_i} | \psi_i(k) \rangle \end{aligned} \quad (3.10)$$

其中 $\psi_{M+1}(k) = \psi_1(k+1)$ ，我们可以用图形来表示这个路径积分的形式，比如对于1维周期边界条件下的4格子Heisenberg链，如图3.1 纵轴称为虚时方向，求迹意味着在这个方向上有周期边界条件 $\psi_1(1) = \psi_{M+1}(L) = \psi_1(L+1)$ ，每个矩阵元 $\langle \psi_{i+1}(k) | e^{-\Delta\tau H_i} | \psi_i(k) \rangle$ 可以理解为某种特定小方块出现的概率，更准确地说应该是权重(Weight)，因为还没有归一化。红线表示朝上自旋的运动轨迹，绿线是向下自旋的轨迹，这些运动轨迹被称为世界线(World-lines)，世界线来源于相对论中粒子在时空中的运动轨迹，整个图形就被称为一种世界线组态(World-lines Configuration)，量子问题就转化成了对所有可能的世界线组态进行重要性抽样的经典问题。对于 XXZ 模型，两自旋间相互作用形式为

$$H_{two_sites} = J_x(S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y) + J_z S_1^z S_2^z$$

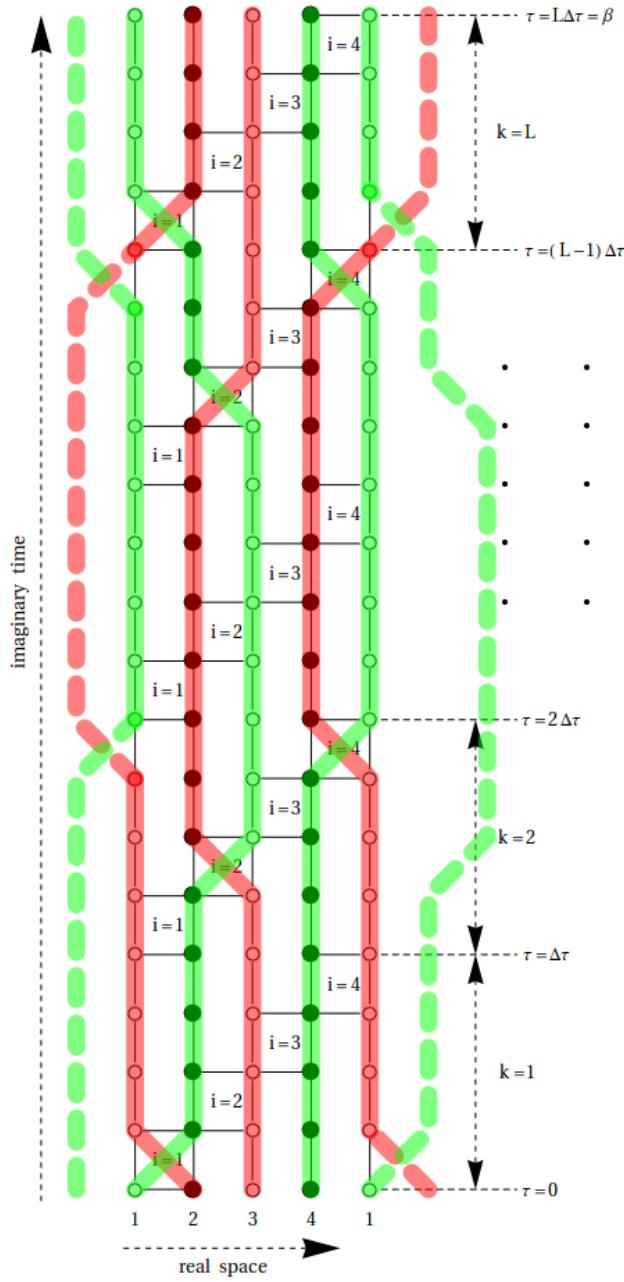


图 3.1 World-lines Configuration

$$= \frac{J_x}{2} (S_1^+ S_2^- + S_1^- S_2^+) + J_z S_1^z S_2^z \quad (3.11)$$

$H_{two\ sites}$ 的本征态即为自旋单重态和三重态，通过简单计算可以得到在这种相互作用形式下只可能有6种小方块，对应的权重如图3.2所示，注意到矩阵元 $\langle \uparrow_1 \downarrow_2 | H_{two\ sites} | \downarrow_1 \uparrow_2 \rangle$ 和 $\langle \downarrow_1 \uparrow_2 | H_{two\ sites} | \uparrow_1 \downarrow_2 \rangle$ 为负值，可是因为虚时方向上的周期边界条件限制，这些权重为负的矩阵元总是出现偶数次，所以把它们当作正的权

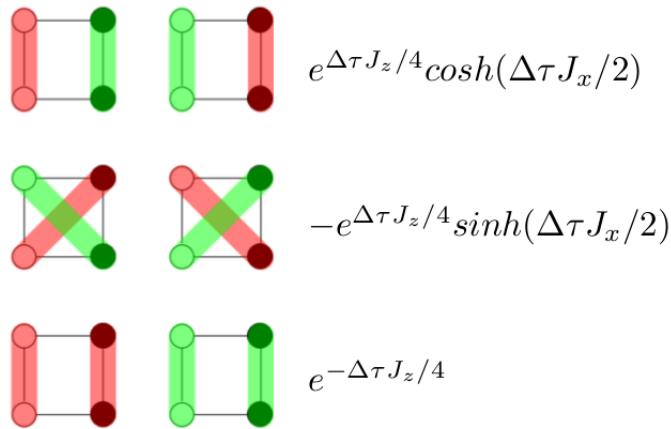


图 3.2 Plaquette weights for XXZ model

重来进行重要性抽样是没有问题的。在有些格子，比如三角格子，Kagome格子情况下，或者相互作用比较特殊比如包含次近邻相互作用，虚时方向的周期边界条件并不保证负矩阵元一定会出现偶数次，这时就会产生所谓的“符号问题”[3–5]，我们仍然可以先把这些负矩阵元当正值来进行抽样，物理量 A 的平均值为

$$\langle A \rangle = \frac{\langle sign[W(\{\psi_i(k)\})]A(\{\psi_i(k)\}) \rangle_{|W|}}{\langle sign[W(\{\psi_i(k)\})] \rangle_{|W|}} \quad (3.12)$$

$W(\{\psi_i(k)\})$ 即为某个确定的世界线组态 $\{\psi_i(k)\}$ 的权重， $A(\{\psi_i(k)\})$ 即为物理量在这个世界线组态中的平均值，如果负号问题严重，意味着 $\langle sign[W(\{\psi_i(k)\})] \rangle_{|W|}$ 很小，物理量就会具有很大的统计涨落，要达到确定精度所需要的计算量就会大大增加。

最简单的对世界线组态的重要性抽样方法也是一种局域的类似经典问题中单自旋翻转方式的方法，如图3.3所示，但是这种抽样方式存在诸多问题[6]：1，临界减速问题；2，遍历性问题，局域翻转方式不会改变一个世界线组态在空间和时间上的绕数(Winding number)[7]，沿某个方向的绕数即世界线投影在这个方向后沿此方向穿越整个体系的次数，如图3.4，从左至右在 $\vec{\tau}$ 方向的绕数为0, 1, 2, 2，它被用于统计自旋刚度(spin stiffness)[8, 9]；3，离散时间带来的系统误差，Trotter展开的误差为 $O(\Delta\tau^2)$ ，为消除离散时间带来的误差，一般需要对 $\Delta\tau$ 分别取不同值模拟一次，然后再插值到 $\Delta\tau \rightarrow 0$ 的极限；4，非对角算符的测量问题。从90年代初，量子蒙特卡洛方法取得了一系列进展，极大地克服了局域Metropolis框架所面临的困难，下面列出这些进展：

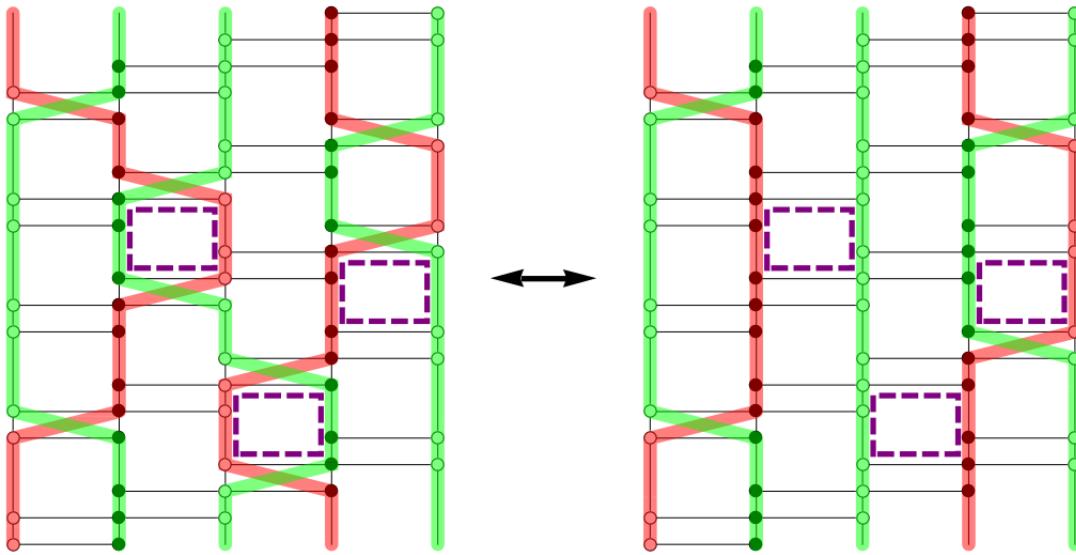


图 3.3 Local update algorithm for world-lines configuration

- 1993: Evertz, Lana和Marcu提出环算法[10]，他们在研究vertex model[11]的时候，对每个vertex以一定的概率分解(breakup)为某一种图形，相当于经典情况下以一定概率让最近邻成键，分解之后的小图形就会形成环结构，相当于经典情况下的由成键的自旋构成的团簇，然后对环进行反转，这种非局域环翻转方式能有效缓解临界减速问题。
- 1996: Beard和Wiese提出了连续时间极限下的环算法[12]，连续时间极限即 $L \rightarrow 0$ ，对世界线组态进行粗粒化操作后，在每个稳定间隔(uniform interval)内按特定正态分布在对世界线组态进行分解就可以形成环；Prokof'ev, Svistunov, Tupitsyn于同年也提出了局域Metropolis框架下的连续时间算法[13]。连续时间算法彻底消除了Trotter展开带来的系统误差。
- 从1998: Prokof'ev, Svistunov, Tupitsyn提出蠕虫算法(Worm algorithm)[14]，Sandvik继91年[15]提出了基于Handscomb展开的随机级数展开算法(SSE)后，又于99年[16]和02年[17]分别提出了基于SSE下的算符环算法以及方向性环算法。对于没有自旋翻转对称性(如加了外磁场)的系统，通常环算法在构造环时没有考虑外磁场的因素，外磁场的作用体现在环翻转的接受概率上，在低温时这个概率可能非常低，蠕虫算法以及方向性环算法就可以克服模拟这类系统时的低效问题。

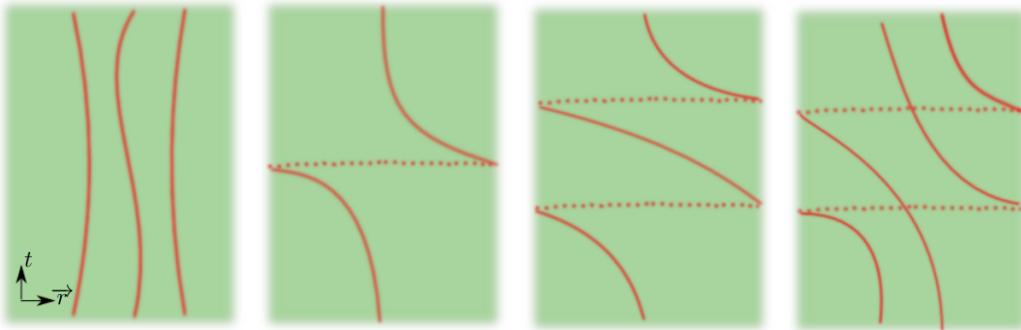


图 3.4 World-lines configurations with different winding number

以上这些量子蒙特卡洛方法都是有限温度下的玻色型量子蒙特卡洛方法，并且只能处理没有符号问题的体系，对于有阻错(frustration)的自旋和玻色子系统，以及多数费米子系统[18]都无法直接应用，还有其他的一些蒙特卡洛方法如基于Hubbard-Stratonovich变换的辅助场蒙特卡洛方法(AFQMC)[19]，以及由此衍生的行列式蒙特卡洛方法(DQMC)[20]，还有结合了格林函数蒙特卡洛方法(GFQMC)[21]与辅助场蒙特卡洛方法的约束路径蒙特卡洛方法(CPQMC)[22]，以及路径积分蒙特卡洛方法(PIQMC)[23] 和扩散蒙特卡洛方法(DQMC)[24]等，每种方法都有自己的优势，在研究某些特定问题时个别方法会体现出优越性，如对有些问题通常的环算法或随机级数展开的方法会有符号问题，而用辅助场方法就不会有问题。这些方法在处理费米子问题时通常会用到一些近似，如扩散蒙特卡洛方法中的固定节点近似(fixed-node approximation)，约束路径蒙特卡洛中的约束路径近似(constrained path approximation)，以缓解符号问题。零温下以研究基态和量子相变为目的的蒙特卡洛方法主要有变分和投影两种形式。本章将介绍三种玻色型的处理格子模型的算法，有限温度下的连续时间极限下的环算法，随机级数展开框架下的方向性环算法以及零温的在价键基矢表象下的投影算法。

3.2 连续时间极限环算法

经典情况下的Swendsen-Wang算法[25]以及量子情况下的环算法[6, 26]都是对偶蒙特卡洛方法(Dual Monte Carlo Algorithm)[27]的特例，对偶蒙特卡洛方法需要在两种对偶的表象中分别生成一条Markov链，如图3.5，比如对于方程2.17所定义

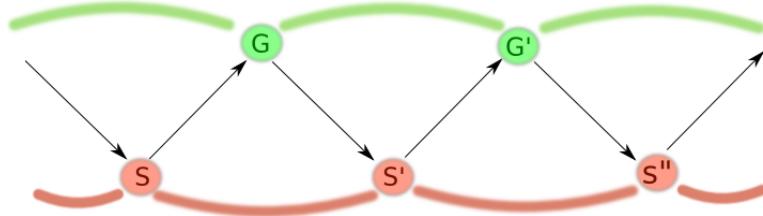


图 3.5 Dual monte carlo

的Ising模型，自旋表象下某个组态 S 的Boltzmann权重为

$$W(S) = \exp(K \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j) = \prod_u w(S_u) \quad (3.13)$$

其中 $K = \beta J$, u 表示一对最近邻, S_u 表示这对最近邻的自旋态 (σ_i, σ_j) , $w(S_u) \equiv \exp(K \sigma_i \sigma_j)$ 表示这对最近邻的权重, Fortuin和Kasteleyn[28]建议把这个权重在对偶表象中进行一下分配

$$w(S_u) = \sum_{G_u} w(S_u, G_u) \quad (3.14)$$

可以为 $w(S_u, G_u)$ 找到如下的一种解

$$w(S_u, G_u) = \begin{cases} e^{-K} & (G_u = 0) \\ e^K - e^{-K} & (\sigma_i = \sigma_j \text{ and } G_u = 1) \\ 0 & (\sigma_i \neq \sigma_j \text{ and } G_u = 1) \end{cases} \quad (3.15)$$

可以验证, 对所有 S_u 的可能状态, 这组解是可以保证方程3.14成立的。这时方程3.13可以改写为

$$W(S) = \sum_G W(S, G) \quad (3.16)$$

其中求和表示对 G 表象下的由各个 G_u 构成的所有可能的整体样式 $\{G_u\}$ (pattern)进行求和

$$W(S, G) = \prod_u w(S_u, G_u) \quad (3.17)$$

同理, 对一个确定的 G 样式的权重也可以写为

$$W(G) = \sum_S W(S, G) \quad (3.18)$$

那么 S 和 G 这两个对偶表象之间互相变换(或称为跃迁)的概率可以定义为

$$T(S \rightarrow (S, G)) = \frac{W(S, G)}{W(S)} \quad (3.19)$$

$$T(G \rightarrow (S, G)) = \frac{W(S, G)}{W(G)} \quad (3.20)$$

可以简单验证根据方程3.15和3.19得到的指向相同的自旋对成键概率就是 $1 - \exp(-2K)$ 。对于一个 G 样式，所有 $G_u = 1$ 的键构成了一个个团簇，而方程3.15表明团簇内的自旋指向必须相同，不同团簇之间由 $G_u = 0$ 的键连接起来，所以不同团簇之间的自旋指向可以相同也可以不同，故能与 G 样式匹配的 S 样式共有 $2_c^N(G)$ 个， $N_c(G)$ 为 G 样式中团簇数目，并且每个匹配的 (S, G) 样式的权重都是相等的， $W(S, G) = W(S', G)$ ，所以在匹配的 (S, G) 与 (S', G) 之间的跃迁概率可以用热泳概率(heat bath probability)

$$T((S, G) \rightarrow (S', G)) = \frac{1}{2^{N_c(G)}} \quad (3.21)$$

即每个团簇以 $1/2$ 概率翻转，细致平衡可以证明如下

$$\begin{aligned} W(S)T(S \rightarrow S') &= W(S) \sum_G T(S \rightarrow (S, G))T((S, G) \rightarrow (S', G)) \\ &= \sum_G W(S) \frac{W(S, G)}{W(S)} T((S, G) \rightarrow (S', G)) \\ &= \sum_G W(S') \frac{W(S', G)}{W(S')} T((S', G) \rightarrow (S, G)) \\ &= W(S')T(S' \rightarrow S) \end{aligned} \quad (3.22)$$

整个模拟过程就如图3.6所示。

量子情况下的配分函数如方程3.10所示，当我们把 (i, k) 视为 u ， $\psi_i(k)$ 视为 ψ_u ， $\psi_{i+1}(k)$ 视为 ψ'_u ，整个世界线组态视为 S ，我们可以将配分函数改写成如下形式

$$Z = \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_S W_L(S) \quad (3.23)$$

$$W_L(S) = \prod_u w(S_u) \quad (3.24)$$

$$w(S_u) = \langle \psi'_u | e^{-\Delta\tau H_u} | \psi_u \rangle$$

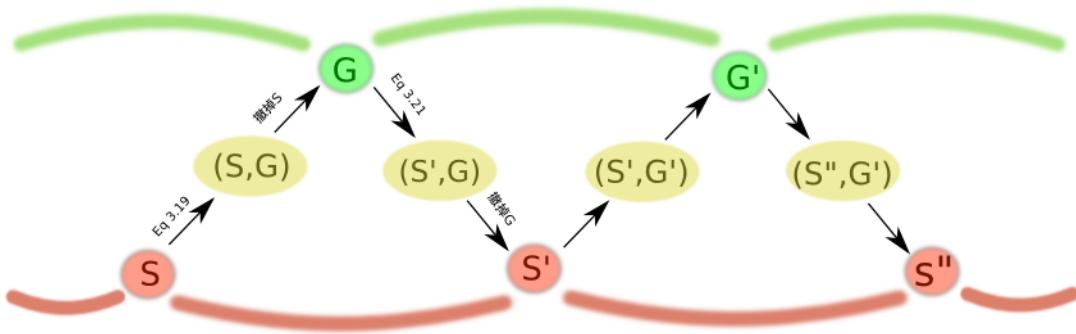


图 3.6 Steps of dual monte carlo

$$\begin{aligned}
 &= \langle \psi'_u | 1 - \Delta\tau H_u | \psi_u \rangle \\
 &= \sum_{G_u=0,1} \langle \psi'_u | (-\Delta\tau H_u)^{G_u} | \psi_u \rangle
 \end{aligned} \tag{3.25}$$

可以看到方程3.25与方程3.14具有相同的形式，依此我们也可以为世界线组态表象来设计一种非局域的翻转算法，一些对应的公式为

$$w(S_u, G_u) = \langle \psi'_u | (-\Delta\tau H_u)^{G_u} | \psi_u \rangle \tag{3.26}$$

$$\begin{aligned}
 W_L(S) &= \prod_u \sum_{G_u=0,1} w(S_u, G_u) \\
 &= \sum_G W(S, G)
 \end{aligned} \tag{3.27}$$

$$W(S, G) = \prod_u w(S_u, G_u) \tag{3.28}$$

我们知道，对于Swendsen-Wang算法， $G_u = 0$ 表示最近邻没有成键， $G_u = 1$ 表示最近邻成键了，当一个 G 样式选出来后，我们可以进行翻转操作，可现在对于方程3.25，我们并不知道 $G_u = 0$ 和 $G_u = 1$ 在图形上意味着什么，或者说方程3.26的含义还非常抽象，为此我们先以矩阵的形式来理解方程3.14和3.15，

$$\begin{aligned}
 \langle \Omega_1 | w(S_u) | \Omega_2 \rangle &= \begin{pmatrix} e^K & e^{-K} \\ e^{-K} & e^K \end{pmatrix} \\
 &= e^{-K} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} + (e^K - e^{-K}) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\
 &= w(S_u, G_u = 0) \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} + w(S_u, G_u = 1) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\
 &= w(S_u, G_u = 0) \hat{G}_0 + w(S_u, G_u = 1) \hat{G}_1
 \end{aligned} \tag{3.29}$$

其中 \hat{G}_0 矩阵四个矩阵元都为1，意思是这部分权重是所有四种情况 $\{\uparrow_1\uparrow_2, \uparrow_1\downarrow_2, \downarrow_1\uparrow_2, \downarrow_1\downarrow_2\}$ 所对应的 $w(S_u)$ 都会有的那部分权重，并且都是相等的，所以一旦选择了这部分权重(即 $G_u = 1$ ，或称选择了算符 \hat{G}_0)，自旋态可以任意翻转到四种态中的一种，即四种情况的这部分权重通过 \hat{G}_0 算符可以自由流动达到平衡；同理， \hat{G}_1 即表示只有 $\{\uparrow_1\uparrow_2, \downarrow_1\downarrow_2\}$ 这两种情况都会有的那部分权重，一旦选择了这部分权重，自旋态也只能翻转到这两种情况中的一种，正是在这种意义下才称算符 \hat{G}_1 表示一种绑定的作用，即成键，而 \hat{G}_0 相当于不做任何限制，所以 $\{\uparrow_1\uparrow_2\}$ 和 $\{\downarrow_1\downarrow_2\}$ 之间的权重流动既可以通过 \hat{G}_0 ，也可以通过 \hat{G}_1 ，而流向 $\{\uparrow_1\downarrow_2\}$ 和 $\{\downarrow_1\uparrow_2\}$ 以及从他们流出的路径就只能通过 \hat{G}_0 。

与方程3.29类似，我们需要把 $w(S_u)$ 写成矩阵形式进行分解，并对分解后的矩阵赋予图形上的意义，如对如下形式的Heisenberg模型，

$$H_{i,j} = -J(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + (\frac{1}{4} - S_i^z S_j^z)) \quad (3.30)$$

$w(S_u)$ 可以分解为

$$\begin{aligned} w(S_u) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 + \frac{J\Delta\tau}{2} & \frac{J\Delta\tau}{2} & 0 \\ 0 & \frac{J\Delta\tau}{2} & 1 + \frac{J\Delta\tau}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{J\Delta\tau}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \hat{g}_V + \frac{J\Delta\tau}{2} \hat{g}_H \end{aligned} \quad (3.31)$$

而由 ψ_u 以及 ψ'_u 构成的小方块理论上一共可能有16种情况(不管哈密顿量 H 的形式)，如图3.7所示，共分为5类，对于上式形式的哈密顿量，则只有I, II, III这三类方块，其中I的全部权重和II类的部分权重通过 \hat{g}_V 算符来互相流动，II类的剩余权重与III类的全部权重通过 \hat{g}_H 算符来互相流动，当 J_x 或 J_y 为负值时， $1 - \Delta\tau H_{i,j}$ 可能会出现负的非对角元，但是由于虚时方向上的周期边界条件，可以保证那些权重为负的方块出现次数为偶数次，所以它们的权重仍然可以视为正值，知道了 \hat{g}_V 和 \hat{g}_H 的作用之后我们就为它们赋予一种图形来表示它们的作用，常见的算符

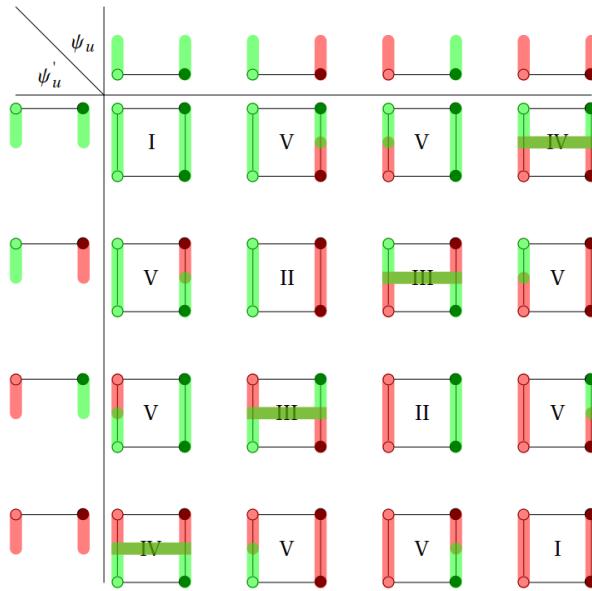


图 3.7 Graphs of possible plaquette

$$\hat{g}_C \quad \begin{array}{c} \text{graph} \\ \text{with} \\ \text{green} \\ \text{circles} \end{array} \quad \left(\begin{array}{cccc} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right) \quad \begin{array}{c} \text{graph} \\ \text{with} \\ \text{red} \\ \text{circles} \end{array} \quad \left(\begin{array}{cccc} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right)$$

$$\hat{g}_H \quad \begin{array}{c} \text{graph} \\ \text{with} \\ \text{green} \\ \text{circles} \end{array} \quad \left(\begin{array}{cccc} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right) \quad \begin{array}{c} \text{graph} \\ \text{with} \\ \text{red} \\ \text{circles} \end{array} \quad \left(\begin{array}{cccc} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right)$$

$$\hat{g}_B \quad \begin{array}{c} \text{graph} \\ \text{with} \\ \text{green} \\ \text{circles} \end{array} \quad \left(\begin{array}{cccc} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right) \quad \begin{array}{c} \text{graph} \\ \text{with} \\ \text{red} \\ \text{circles} \end{array} \quad \left(\begin{array}{cccc} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right)$$

图 3.8 Graphs of possible break up

矩阵以及它们对应的图形表示如图3.8所示[6]，每个图形中的实线表示被它连接的两自旋指向必须是一样的，虚线表示被它连接的两自旋指向必须相反，被线连在一起的自旋必须一起翻转，可以验证这些图形的确是表示了它所代表的矩阵的作用，其中 \hat{g}_V 称为垂直分裂方式(vertical break up)，即表示单位矩阵元1，图形

为两条竖直实线, \hat{g}_H 称为水平分裂方式(horizontal break up), \hat{g}_C 称为交叉分裂方式(cross break up), \hat{g}_B 称为绑定分裂方式(bind break up), 那么给定了一个世界线组态之后, 我们就需要对每个小方块进行分裂得到G样式, 比如当我们考虑第I类方块时, 它一定是垂直分列方式, 考虑III类方块时, 它一定是水平分列方式, 这类方块被称为kink(第IV类方块也称为kink), 意味朝上的自旋从一个格点跳到了它的最近邻, 而考虑第II类方块时, 即可能水平分裂也可能垂直分裂, 水平分裂的概率为 $J\Delta\tau/2/(1 + J\Delta\tau/2) = J\Delta\tau/2$, 分裂完后的算符图形就会形成一个一个的环, 每个环都可以独立翻转, 翻转完后我们就得到了新的世界线组态, 从而实现了非局域的翻转, 这个过程就称为环算法(loop algorithm), 与图3.3所示局域翻转方式不同的环翻转方式如图3.9所示。

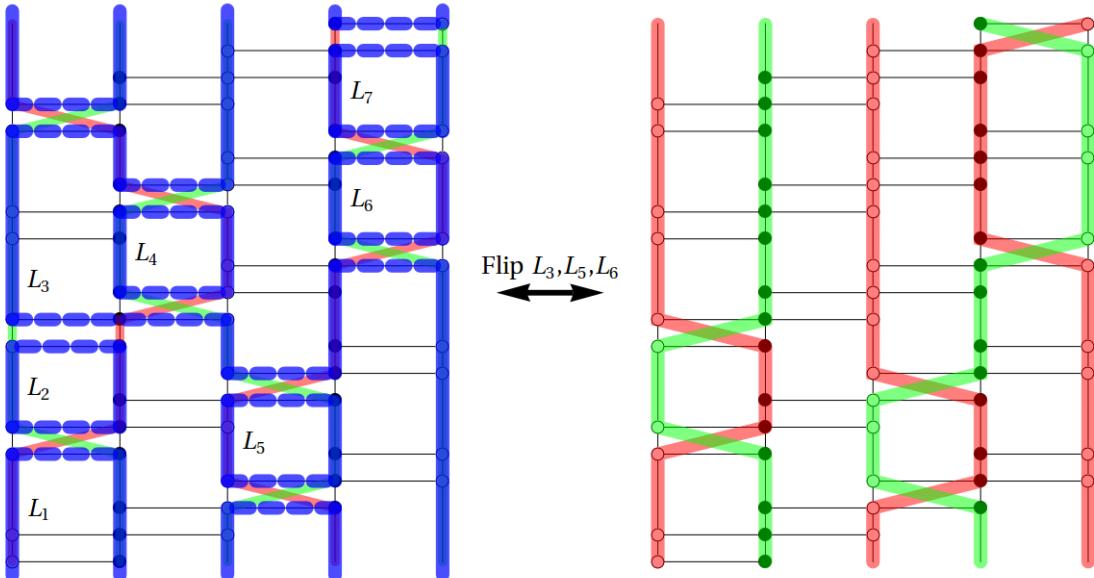


图 3.9 Loop algorithm for world-lines configuration

一般情况下最近邻相互作用可以写成

$$H_{ij} = \sum_{\hat{g}} H_{ij}(\hat{g}) = \sum_{\hat{g}} -a(\hat{g})\hat{g} \quad (3.32)$$

$$1 - \Delta\tau H_{ij} = \hat{g}_V + \sum_{\hat{g}} a(\hat{g})\Delta\tau\hat{g} \quad (3.33)$$

其中 \hat{g} 是图3.8中的某种分裂图形或是自己为某问题自定义的图形, 注意它的矩阵表示中矩阵元只能是0或1, 只有这样才能保证在分裂时可以独立翻转每个环。假

如某种方块的权重为 $W = A(\hat{g}_1) + A(\hat{g}_2) + A(\hat{g}_3) + \dots$, $A(\hat{g}_i)$ 等于1或者 $a(\hat{g}_i)\Delta\tau$, 权重 W 中的 $A(\hat{g}_i)$ 分给了算符 \hat{g}_i , 则在对这种方块进行分裂时选择第*i*种分裂方式的概率为 $A(\hat{g}_i)/W$, 对于第I类和第II类方块, 由于 \hat{g}_V 总为它们贡献了一部分权重(这部分取值1), 又由于 $\Delta\tau$ 是小量, 其它算符贡献的权重与1比起来很小, 所以对这两类方块选择第*i*种分裂方式的概率可以视为就是 $A(\hat{g}_i) = a(\hat{g}_i\Delta\tau)$, 由于 H_{ij} 中一般不含单粒子升降算符的项, 所以第V类方块通常是不会出现的。

在上面设计算法的过程中, 首先用到了Trotter展开(误差 $O(\Delta\tau^2)$), 然后又用 $1 - \Delta\tau H$ 代替了 $e^{-\Delta\tau H}$ (误差 $O(\Delta\tau^2)$), 并且在求第I, II类算符的分裂概率时, 用 $\Delta\tau a(\hat{g}_i)$ 来近似第*i*种分裂方式的概率(误差 $O(\Delta\tau^2)$)。为了消除这些误差, 可以在连续时间极限下来思考世界线组态的形式并设计相应的环算法。首先需要介绍稳定间隔(uniform interval)的概念, 考虑一对最近邻的世界线, 在某段虚时间内, 他们的世界线是一段连续的由第I或II类中的某种方块重复连接而成的虚时间段, 期间它们的自旋都不会发生变化, 直到第III或IV类中的某种kink类方块改变了它们的状态, 如果这个kink是这对最近邻构成, 那么它们的状态都将改变, 如果kink是其中一个与其它最近邻构成的, 那么只有一个自旋的状态会发生改变, 整个世界线组态就可以看成由很多稳定间隔加上kink方块构成。当我们对整个世界线组态进行粗粒化观察时, 可以认为每个稳定间隔就是连续的竖线, 被一些kink直线给间隔着, 如图3.10所示, 将*i*, *j*这对最近邻的0至 β 的虚时间划分成了很多个稳定间隔。考虑

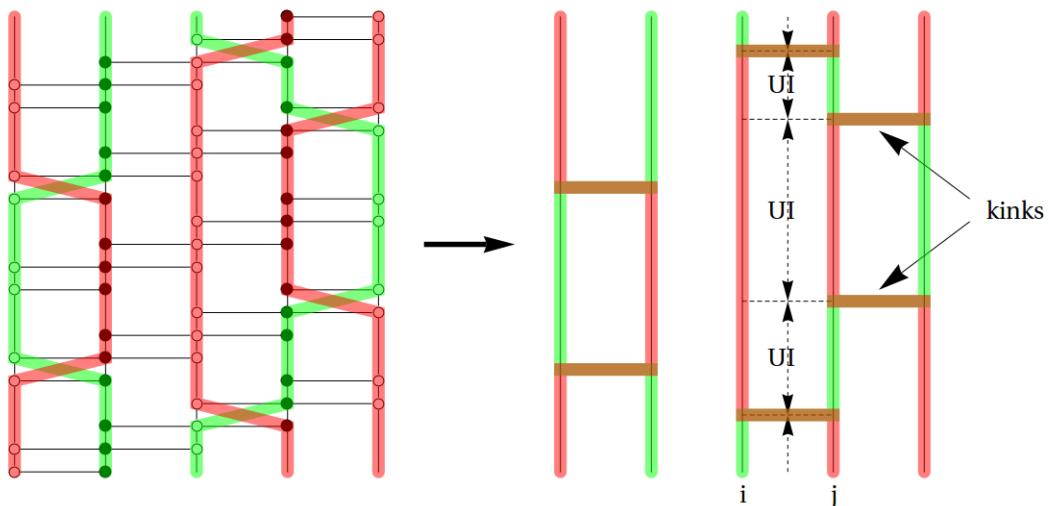


图 3.10 Uniform intervals(UI) in continuous time limit

一段虚时长度为I的稳定间隔, 其中有 $I/\Delta\tau$ 个重复的第I或II类中的某种方块, 每个

这种方块选择分裂方式 g 的概率为 $(\Delta\tau)a(g)$, 那么所有 $I/\Delta\tau$ 个方块分裂后有 n 个 g 图样的概率为

$$C_{I/\Delta\tau}^n ((\Delta\tau)a(g))^n (1 - (\Delta\tau)a(g))^{I/(\Delta\tau)-n}$$

在连续性极限时, $\Delta\tau \rightarrow 0$, 上式变成

$$\frac{1}{n!} (Ia(g))^n e^{-Ia(g)}$$

这正是一个平均值为 $Ia(g)$ 的泊松分布, 所以连续时间极限即要求我们在每个稳定间隔里对每种可能的分裂方式生成一个与之对应的泊松分布就行了, 它表示在时间间隔 I 内时间发生 n 次的概率。假设 $P(t)$ 表示两个相邻事件发生的时间间隔为 t 的概率密度函数, $\int_0^\infty P(t)dt = 1$, $P(t)dt$ 表示两相邻事件的时间间隔在 $t \sim t + dt$ 内的概率, 即在 $0 \sim t$ 时间内没有事件发生的概率 $e^{-ta(g)}$ 乘以在 $t \sim t + dt$ 内有事件发生的概率 $a(g)dt$, 这样我们就得到了关于 $P(t)$ 的指数分布函数

$$P(t) = a(g)e^{-a(g)t} \quad (3.36)$$

要模拟一个密度为 $a(g)$ 的泊松过程, 我们只需要生成一系列满足上式分布的时间间隔就行了, 因为

$$\int_0^t P(t)dt = 1 - e^{-a(g)t} \quad (3.37)$$

所以我们在 $[0, 1]$ 内产生一个均匀分布随机数 r , 则 $-\ln(r)/a(g)$ 即为满足分布3.36的时间间隔, 连续时间极限下对每个稳定间隔 $t_0 \sim t_1$ 的处理过程如下:

- 1, 设 t 为这段稳定间隔的起始时间 t_0 ;
- 2, 按上述方式得到一个时间间隔 Δt ;
- 3, 令 t 跳到 $t_{new} = t + \Delta t$;
- 4, 如果 $t_{new} \leq t_1$, 就说明在 t_{new} 位置发生了分裂为图形 g 的过程, 放一个 g 图形在这个时间点, 并回到第2步继续生成下一个分裂的可能位置; 如果 $t_{new} > t_1$, 就直接回到第1步开始考虑下一个稳定间隔的分裂情况。

上面的过程只是对一种分裂方式而言的, 对每个稳定间隔还需要重复上述过程以考虑其它分裂方式, 连续时间极限下对kink类方块的分裂操作与前面一样。连续时间极限不仅消除了 $O(\Delta\tau^2)$ 误差, 在模拟过程中也节省计算机内存, 因为不需要存

储所有时间片的状态，只需要存储kink类方块的时间点位置及其类型就行了，一个完整的连续时间极限下的世界线组态翻转过程如图3.11所示。先根据世界线组

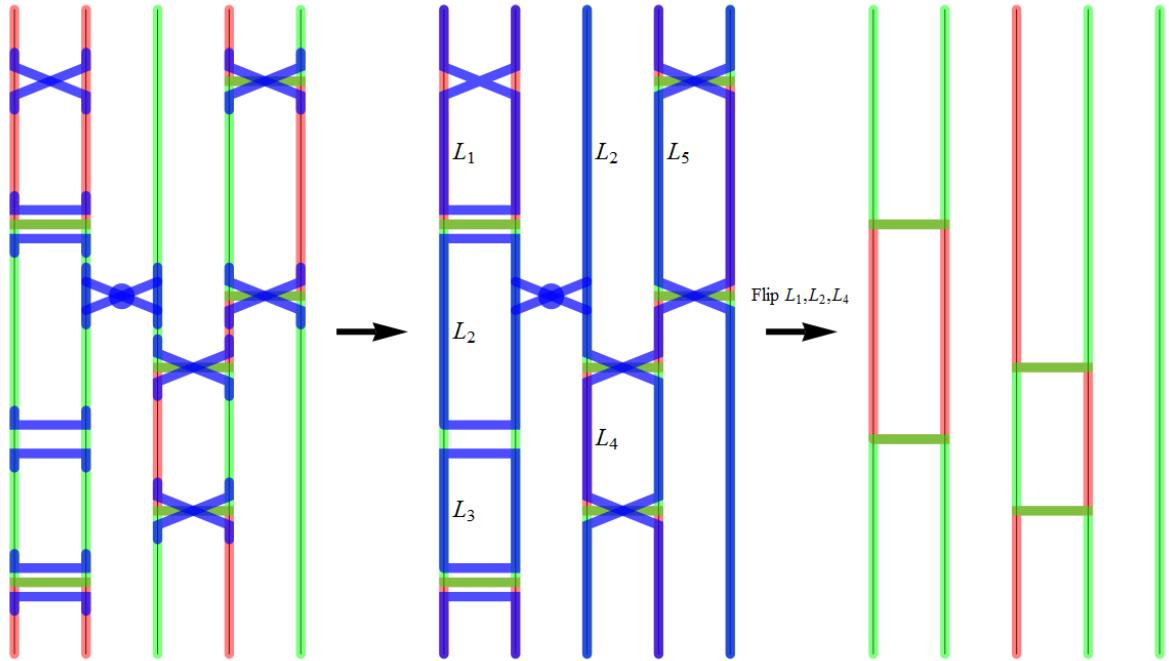


图 3.11 Loop algorithm in continuous time limit

态对每个稳定间隔考虑可能的分裂位置及类型，分裂的G图像形成环，对环进行随机翻转之后就得到了新的世界线组态，图3.11是 $J_z > J_x > J_y > 0$ 时Heisenberg模型对应的世界线组态，其中出现了第IV类方块，并且第I类方块在分裂时有可能选择绑定分裂的方式，由于这种绑定分裂方式的存在，在给环进行编号的时候也会碰到Swendsen-Wang算法中标记团簇时的效率问题，同样我们也可以用“标号的标号”这种途径解决这个问题[29]。注意在有磁场时，不再是以 $1/2$ 概率翻转每个环，而是以 $p(L_i) = \exp(-Bm_{L_i})/\exp(Bm_{L_i}) + \exp(-Bm_{L_i})$ 来进行翻转，其中

$$m_{L_i} = \int_{L_i} S^z(X) dX \quad (3.38)$$

为第*i*个环的磁化强度。

关于世界线环算法框架下物理量的统计方法，物理量*O*的热力学平均值为

$$\begin{aligned} \langle O \rangle &= \text{Tr}(e^{-\beta H} O)/Z \\ &= \sum_S \frac{\prod_{\tilde{u} \neq u} w(S_{\tilde{u}}) \langle \psi'_u | O | \psi_u \rangle}{Z} \end{aligned}$$

$$= \sum_S \frac{W(S)}{Z} \frac{\langle \psi'_u | O | \psi_u \rangle}{\langle \psi'_u | 1 - \Delta\tau H_u | \psi_u \rangle} \quad (3.39)$$

由于求迹中 O 算符可以出现在任意时间片位置，所以对某个世界线组态 S 来说，物理量 O 在这个确定的世界线组态内具有平均值

$$\begin{aligned} O(S) &= \frac{1}{\beta/\Delta\tau} \sum_u \frac{\langle \psi'_u | O | \psi_u \rangle}{\langle \psi'_u | 1 - \Delta\tau H_u | \psi_u \rangle} \\ &= \frac{1}{\beta} \sum_u O(S_u) \end{aligned} \quad (3.40)$$

其中

$$\begin{aligned} O(S_u) &= \frac{\langle \psi'_u | \Delta\tau O | \psi_u \rangle}{\langle \psi'_u | 1 - \Delta\tau H_u | \psi_u \rangle} \\ &= \begin{cases} \Delta\tau \langle \psi_u | O | \psi_u \rangle & (\psi_u = \psi'_u) \\ \frac{\langle \psi'_u | O | \psi_u \rangle}{\langle \psi'_u | -H_u | \psi_u \rangle} & (\psi_u \neq \psi'_u) \end{cases} \end{aligned} \quad (3.41)$$

所以在连续时间极限下，对于对角算符 O ，

$$O(S) = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau O(\tau) \quad (3.42)$$

其中 $O(\tau) = \langle \psi(\tau) | O | \psi(\tau) \rangle$ ，当 O 在虚时方向是个守恒量时，如 XXZ 模型的磁化强度 $\sum_i S_i^z$ ，这时 $O(S)$ 用 $O(\tau = 0)$ 代替即可。对于对角算符 A, B 构成的含时关联函数 $\Gamma_{AB}(\tau, \tau') = A(\tau)B(\tau')$ ，它的一个比较平庸的估值方式是统计 $A(\psi(\tau))B(\psi(\tau'))$ ，如果只与时间差 $\tau' - \tau$ 有关系，也可以用它在 S 组态中的平均值作为一个更好的估计方式，

$$\Gamma_{AB}^{\tau\tau'}(S) = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta dt A(\psi(t))B(\psi(t + \tau' - \tau)) \quad (3.43)$$

由这两个对角算符构成的广义磁化率

$$\chi_{AB} = \int_0^\beta d\tau \Gamma_{AB}(0, \tau) \quad (3.44)$$

所对应的

$$\chi_{AB}(S) = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau A(\psi(\tau)) \int_0^\beta d\tau B(\psi(\tau)) \quad (3.45)$$

对于非对角算符 O ，当 $\langle \psi'_u | -H_u | \psi_u \rangle$ 不为 0 时，根据方程 3.41 来进行统计，比如对于哈密顿量中的非对角部分，非对角部分就意味着世界线组态中的 kink，对一幅确定

的 S 组态，非对角部分的平均值即

$$\begin{aligned} H^{off}(S) &= \frac{1}{\beta} \sum_{u_{kink}} \frac{\langle \psi'_{u_{kink}} | O | \psi_{u_{kink}} \rangle}{\langle \psi'_{u_{kink}} | -O | \psi_{u_{kink}} \rangle} \\ &= -\frac{n_{kink}(S)}{\beta} \end{aligned} \quad (3.46)$$

整个能量的平均值则为

$$H(S) = H^{diag}(S) - \frac{1}{\beta} n_{kink}(S) \quad (3.47)$$

比热的统计方式为

$$C = \beta^2 [\langle H_{diag}^2(S) \rangle - \langle H_{diag}(S) \rangle^2] + \langle n_{kink}^2 \rangle - \langle n_{kink} \rangle^2 - \langle n_{kink} \rangle \quad (3.48)$$

对某些算符，会有 $\langle \psi'_u | -H_u | \psi_u \rangle$ 为0的情况，方程3.41的定义是无意义的，这时需要具体问题具体分析。

前面所讲的都是在世界线组态中的估值方式，与第1章介绍过的优化估值方式一样，环算法下也有定义在 G 表象下的优化估值方式[30]，物理量 O 在一个给定的 G 图样下的平均值为

$$O(G) = \sum_S W(S, G) O(S) / W(G) \quad (3.49)$$

对于 z 方向上的磁化率

$$\begin{aligned} \chi_{zz}(S) &= N^{-1} \int_0^\beta d\tau \langle M_z(\tau) M_z(0) \rangle \\ &= (N\beta)^{-1} (\int dX S^z(X))^2 \end{aligned} \quad (3.50)$$

上式中 $X \equiv (i, \tau)$ ， $\int dX$ 表示对所有世界线进行积分 $\sum_i \int d\tau$ ，根据方程3.49，在没有磁场破坏自旋反转对称性时， $W(G)$ 的权重是均等分配到 $2^{N_c(G)}$ 个相互兼容的 (S, G) 态中的，可以很容易证明

$$\chi_{zz}(G) = (N\beta)^{-1} \sum_l (m_l)^2 \quad (3.51)$$

其中 m_l 是方程3.38所定义的环磁化强度。对于非对角磁化率 χ_{xx} ，通过在包含两个奇异点的 S' 与 G' 之间的表象变换，参考文献[6]，可以求得

$$\chi_{xx}(G) = \frac{1}{4N\beta} \sum_l (V_l)^2 \quad (3.52)$$

其中 V_l 为环长度，当模型为铁磁各向同性海森堡模型时，每个环都是由自旋相同的世界线构成，这时环长度就是环磁化强度的4倍， χ_{xx} 与 χ_{zz} 相等。

3.3 随机级数展开算法

基于Handscomb展开[1], 91年Sandvik提出了随机级数展开的算法[15], 先来看看随机级数展开的思想怎样应用在经典问题中, 考虑经典配分函数

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\beta E(\sigma))^n}{n!} \quad (3.53)$$

物理量的平均值为

$$\langle f \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma\}} \sum_{n=0}^{\infty} f(\sigma) \frac{(-\beta E(\sigma))^n}{n!} \quad (3.54)$$

为了确保展开的正定性, 以将展开的每一项解释为所对应的权重, 可以对能量做一个偏移操作, 令 $E(\sigma) \rightarrow E(\sigma) - \epsilon$, ϵ 为一个足够大的数, 大于系统能量的上限。当物理量是关于能量的函数时, 它的平均值可以写成 n 的函数, 定义 $H(\sigma) = \epsilon - E(\sigma)$, 考虑能量平均值

$$\langle H \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma,n} H(\sigma) W(\sigma, n), \quad Z = \sum_{\sigma,n} W(\sigma, n), \quad W(\sigma, n) = \frac{\beta^n H(\sigma)^n}{n!} \quad (3.55)$$

令 $m = n + 1$, 可以看到

$$\sum_{\sigma,n} H(\sigma) W(\sigma, n) = \sum_{\sigma,m} \frac{m}{\beta} W(\sigma, m) \quad (3.56)$$

所以能量的平均值,

$$\langle H \rangle = \frac{1}{\beta} \langle n \rangle_W \Rightarrow E = \epsilon - \frac{1}{\beta} \langle n \rangle_W \quad (3.57)$$

同理可以证明

$$\langle H^2 \rangle = \frac{1}{\beta^2} \langle n(n-1) \rangle_W \quad (3.58)$$

由比热 $C = \beta^{-1}(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)$ 可得

$$C = \frac{1}{\beta} (\langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2 - \langle n \rangle) \quad (3.59)$$

下面以外场下的 XXZ 自旋 $1/2$ 海森堡模型为例, 介绍一下处理量子问题的方向性环算法。 XXZ 模型的哈密顿量为

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} [S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z] - h \sum_i S_i^z \quad (3.60)$$

将哈密顿量写成键相互作用求和的形式

$$H = -J \sum_{b=1}^{N_b} H_b \quad (3.61)$$

其中 $N_b = dN$ 为间的总数目， d 为维度， 对每个 H_b 我们又可以分为对角部分和非对角部分， $H_b = H_{1,b} - H_{2,b}$ ， 其中

$$H_{1,b} = C - \Delta S_{i(b)}^z S_{j(b)}^z + h_b (S_{i(b)}^z + S_{j(b)}^z) \quad (3.62)$$

$$H_{2,b} = \frac{1}{2} [S_{i(b)}^+ S_{j(b)}^- + S_{i(b)}^- S_{j(b)}^+] \quad (3.63)$$

上式中 $h_b = h/(2dJ)$ 为每个键感受到的磁场， C 这个常数的引入是为了保证 $H_{1,b}$ 的所有矩阵元都为正， 从而可以解释为权重， 所以在统计总能量的时候要注意加上 JN_bC ， C 具有如下形式

$$C = C_0 + \epsilon, \quad C_0 = \Delta/4 + h_b \quad (3.64)$$

其中 $\epsilon \geq 0$ 。要求方程3.7中的迹，与上节中Trotter展开后在算符之间插入基矢从而得到世界线组态的处理方法类似，这里也可以选一组 S^z 表象下的基矢 $|\alpha\rangle = |S_1^z, S_2^z, \dots, S_N^z\rangle$ ，则方程3.6中的算符序列 S_n 可以表示为 $S_n = [a_1, b_1], [a_2, b_2], \dots, [a_n, b_n]$ ，其中 $a_i \in \{1, 2\}$ 表示算符的类型，1为对角，2为非对角， $b_i \in \{1, \dots, N_b\}$ 表示算符所对应的键序号，配分函数可以写成

$$Z = \sum_{\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{S_n} (-1)^{n_2} \frac{\beta^n}{n!} \langle \alpha | \prod_{i=1}^n H_{a_i, b_i} | \alpha \rangle \quad (3.65)$$

n_2 是 S_n 序列中非对角算符的个数，在 bipartite 格子中， n_2 始终为偶数，所以这个展开是正定的，在对展开的项进行抽样时没有符号问题。定义 $|\alpha(p)\rangle$ 为算符序列从右往左共 p 个算符作用在 $|\alpha\rangle$ 后得到的态。

$$|\alpha(p)\rangle \sim \prod_{i=1}^p H_{a_i, b_i} |\alpha\rangle \quad (3.66)$$

可以证明，与经典情况类似(方程3.56-3.59)，量子情况下关于能量的函数的平均值也是 n 的函数，算符数目 n 的平均值具有如下关系

$$\langle n \rangle = \beta N_b |E_b| \quad (3.67)$$

其中 E_b 为每个键的平均能量(包含了常数 C)，对于有限体系， $\langle n \rangle \propto \beta N$ ，并且低温下比热趋近与0，所以 n 的分布宽度 $\sqrt{\langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2} \approx \sqrt{\langle n \rangle} \propto (\beta N)^{1/2}$ 。这样就可以对 n 做一个截断，设为 M ，只要 M 足够大以至 n 超过 M 的机会非常小，这样截断带来的误差基本是可以忽略的。做了截断即表示只考虑长度在 M 以内的算符序列的贡献，当算符序列长度 $n < M$ 时，可以通过往其中插入单位算符($H_{0,0} \equiv 1$)使整个算符序列的长度始终是 M (包括插入的单位算符之后)，考虑到 M 个位置中选 n 个位置来构成本来的 S_n 序列的简并性后，配分函数可以改写为

$$Z = \sum_{\alpha} \sum_{S_M} \frac{\beta^n (M-n)!}{M!} \langle \alpha | \prod_{i=1}^M H_{a_i, b_i} | \alpha \rangle \quad (3.68)$$

现在 $a_i \in \{0, 1, 2\}$, $b_i \in \{0, \dots, N_b\}$, n 是非单位算符的个数, $|\alpha\rangle$ 经过 M 个算符作用后回到 $|\alpha\rangle$ 的过程可以用图3.12表示，图中红色实心圆表示自旋朝上，蓝色圆环表示自旋朝下，空心方框表示对角算符，实心方框表示非对角算符，可以看到这个图和Trotter展开得到的世界线图非常类似。在模拟的过程中，通常先有一个热平衡过程，在这个过程中我们可以不断调整 M 值，比如令 $M = an_{max}$, n_{max} 是热平衡过程中到目前为止 n 所达到的最大值， a 通常取值1.2至1.5之间。

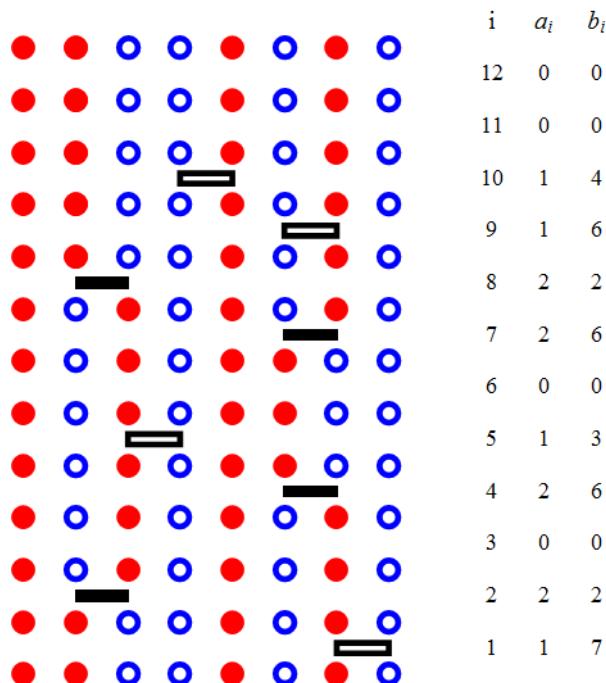


图 3.12 Graphic representation for SSE algorithm

示自旋朝下，空心方框表示对角算符，实心方框表示非对角算符，可以看到这个图和Trotter展开得到的世界线图非常类似。在模拟的过程中，通常先有一个热平衡过程，在这个过程中我们可以不断调整 M 值，比如令 $M = an_{max}$, n_{max} 是热平衡过程中到目前为止 n 所达到的最大值， a 通常取值1.2至1.5之间。

对单位算符，对角算符，非对角算符之间进行重要性抽样的步骤如下：

1，单位算符与对角算符之间的变换，它们之间的跃迁概率要满足细致平衡方程

$$W([0, 0]_p)P([0, 0]_p \rightarrow [1, b]_p) \frac{1}{N_b} = W([1, b]_p)P([1, b]_p \rightarrow [0, 0]_p) \quad (3.69)$$

上式左边乘以 $1/N_b$ 是因为从单位算符变换为某个对角算符时，要选中与某个特定键对应的对角算符 $[1, b]_p$ 的几率为 $1/N_b$ ，而反方向变换时只有一种可能，并且考虑到互相变换时非单位算符数目 n 会有 ± 1 的变化关系，可以很容易得到一组解

$$P([0, 0]_p \rightarrow [1, b]_p) = \min\left\{1, \frac{N_b \beta \langle \alpha(p) | H_{1,b} | \alpha(p) \rangle}{M - n}\right\} \quad (3.70)$$

$$P([1, b]_p \rightarrow [0, 0]_p) = \min\left\{1, \frac{M - n + 1}{N_b \beta \langle \alpha(p) | H_{1,b} | \alpha(p) \rangle}\right\} \quad (3.71)$$

在实际模拟过程中，我们可以先保存 $|\alpha\rangle$ 和算符序列 S_n ，在碰到单位算符以及对角算符，就依据上面的跃迁概率解考虑一下互换的操作，在碰到非对角算符时，就需要对 $\alpha(p)$ 进行一下更新，以便在后面求解单位算符与非对角算符之间的跃迁概率时要用到。

2，对角算符与非对角算符之间的变换，与更新世界线组态一样，也有局域的翻转方式以及非局域的环翻转方式，不过这里环的概念有所不同。因为这一步是在非单位算符之间的变换， n 不会改变，所以我们可以在这一步忽略掉单位算符，而只考虑由对角算符和非对角算符构成的序列 S_n ，即利用方程3.65而不是方程3.68来展开配分函数，下面的指标 p 将表征在算符序列 S_n 中的位置。定义如下形式的两自旋态

$$|\alpha_{b_p}(p)\rangle = |S_{i(b_p)}^z(p), S_{j(b_p)}^z(p)\rangle \quad (3.72)$$

其中 $i(b_p)$ 与 $j(b_p)$ 表征键算符 b_p 所连接的两自旋。对于一组确定的 (α, S_n) 组态，它所对应的权重为

$$W(\alpha, S_n) = \frac{\beta^n}{n!} \prod_{p=1}^n \langle \alpha_{b_p}(p) | H_{b_p} | \alpha_{b_p}(p-1) \rangle \quad (3.73)$$

把由 $\alpha_{b_p}(p)$, H_{b_p} , $\alpha_{b_p}(p-1)$ 所构成的矩阵元 $\langle \alpha_{b_p}(p) | H_{b_p} | \alpha_{b_p}(p-1) \rangle$ 称为节点(vertex)，它包含的4个自旋称为它的四条腿(leg)，则一幅 (α, S_n) 图样所对应的权重即为它所包含的所有节点权重的乘积，可以计算得到，对于方程3.60形式的哈密顿量，可能的节点及其权重如图3.13所示。

可以看到当没有外场 $h_b = 0$ ，且各向同性时 $\Delta = 1$ ，我们可以令 $\epsilon = 0$ ，则只剩下I, II类节点，并且权重都为 $1/2$ ，先以此特殊情况介绍局域翻转方式以及

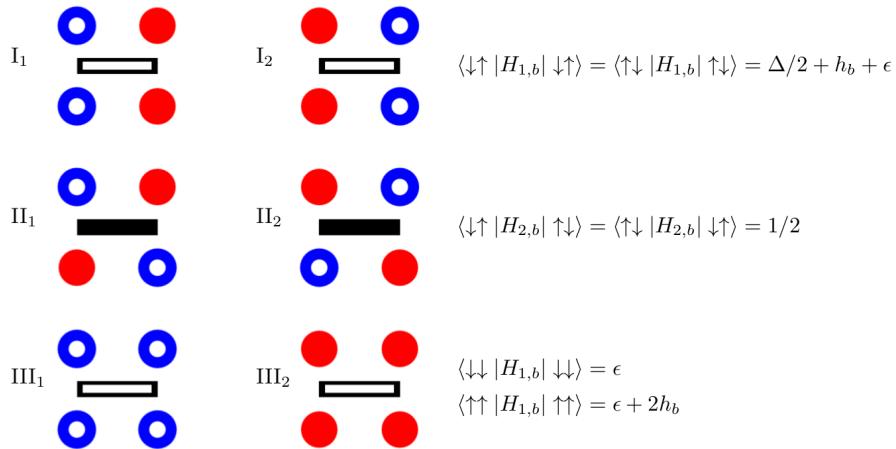
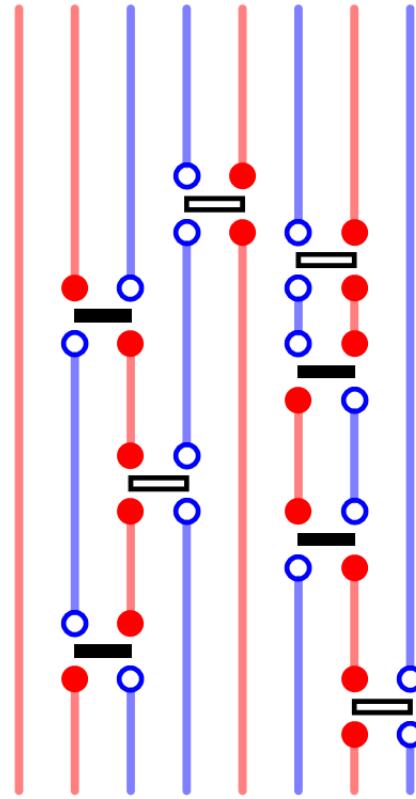


图 3.13 Graphs of possible vertices

环算法。由于现在只在 S_n 中考虑问题，所以要完整描述一个 (α, S_n) 图样，我们只需要一幅所有 n 个节点通过它们的腿连接在一起的图样就行了，即图3.12 可以简化为图3.14，可以很容易想到的一种局域的翻转方式是 $\{ \dots [1, b]_{p_2} \longleftrightarrow [1, b]_{p_1} \dots \} \Leftrightarrow \{ \dots [2, b]_{p_2} \longleftrightarrow [2, b]_{p_1} \dots \}$ 或者 $\{ \leftarrow [1, b]_{p_2} \dots \dots [1, b]_{p_1} \rightarrow \} \Leftrightarrow \{ \leftarrow [2, b]_{p_2} \dots \dots [2, b]_{p_1} \rightarrow \}$ ，其中 \Leftrightarrow 以及 \leftarrow 和 \rightarrow 表示这段虚时间里没有其他的键算符作用在与 b 相连的两自旋 $i(b)$ 和 $j(b)$ 上，局域翻转方式如图3.15所示。这种局域的翻转方式有临界减速的问题，并且绕数以及磁化强度都不会发生变化，所以还存在遍历性问题，特别是在有磁场的情况下，第III类节点权重不为0，它与第I, II类节点之间的变换需要考虑很多种情况，并且节点的权重不是一样的，还要按概率看是否接受互换操作，所以局域型的翻转方式效率不高。为了构造一种非局域的翻转方式，需要找到一种对偶表象，使之起到不同节点之间互相变换的桥梁作用。99年Sandvik提出了一种类似于Wolff算法的环翻转方式[16]，基本步骤如下：

- 1, 随机选择某个节点的某一条腿 i 为环的初始构造点；
- 2, 根据热泳概率选择某条腿 j 为这个节点的出口；
- 3, 令与 j 连接在一起的腿 i' 为下一个节点的入口；
- 4, 循环第2、3步直到某次回到了初始构造点 i ，则环闭合了，将环路经上的自旋翻转，并对算符做相应的变换。

第2步中求热泳概率时，定义左下，右下，左上和右上分别为腿1, 2, 3, 4，假设

图 3.14 Reduced (α, S_n) pattern

入口为某节点的左下腿1，出口有4种情况，则选择出口2的概率为

$$P_{2,1} = \frac{W(\begin{smallmatrix} + & + \\ - & - \end{smallmatrix})}{W(\begin{smallmatrix} + & + \\ + & + \end{smallmatrix}) + W(\begin{smallmatrix} + & + \\ - & - \end{smallmatrix}) + W(\begin{smallmatrix} - & + \\ - & + \end{smallmatrix}) + W(\begin{smallmatrix} + & - \\ - & + \end{smallmatrix})} \quad (3.74)$$

其中

$$W(\begin{smallmatrix} f_3 & f_4 \\ f_1 & f_2 \end{smallmatrix})(p) = \langle f_3 S_i^z(p), f_4 S_j^z(p) | H_b | f_1 S_i^z(p), f_2^z(p) \rangle \quad (3.75)$$

根据入口和出口的相对位置，可以分为4种过程，反弹(bounce)、折返(switch-and-reverse)、直进(continue-straight)和折进(switch-and-continue)，如图3.16所示，对于如方程3.60所示哈密顿量，由于 $J_x = J_y$ ，所以不含有 $S_i^+ S_j^+$ 以及 $S_i^- S_j^-$ 项，对于任意节点，折返与折进总有一种过程是不可能的。对于无外场且各向同性的特殊情况，则只有折返与反弹两种过程，因为反弹过程前后没有发生任何变化，是一种无效过程，要尽量避免这种过程，由于此时I, II类节点权重都等于 $1/2$ ，所以可以只保留折返这一种过程，这样环的构造过程就是一个决定性(deterministic)过程，这时可以

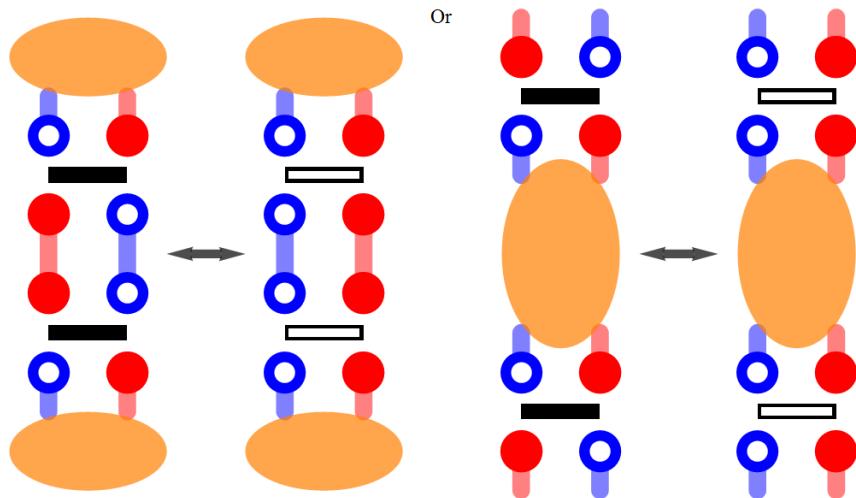


图 3.15 Local update for SSE algorithm

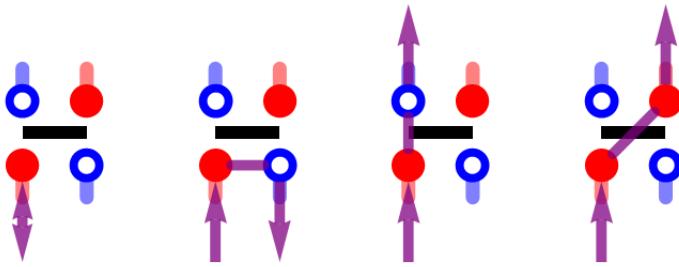


图 3.16 4 possible processes of constructing operator loop

把所有的环都构造出来，并对每个环以 $1/2$ 概率随机翻转，如图3.17所示。很显然根据热泳概率构造环的过程是满足细致平衡条件的。

对于大多数情况，节点之间的权重不相等，并且可能包括多种，这时环的构造过程就不是决定性的，反弹过程总是存在一定几率，为了把这种过程的几率降到最低，02年Syljuasen 又提出了方向性环算法[17]，上面的热泳概率只是细致平衡方程的一种平庸解，方向性环算法的目的就是要找到一组最优解使反弹过程的几率减到最低甚至为0。首先介绍一下拓展态空间(extended configuration space)的概念，由 (α, S_n) 构成的态空间称为物理态空间，它是由很多节点连在一起，节点之间的连接是没有奇异性的，如果在形成算符环的过程中，边构造环边翻转自旋及更新节点类型，则在还没有闭合时得到的图样也是节点之间连接在一起，但是在环路径的起点和终点有两个不符合物理的奇异点，这也使得这样一种图样对配分函数没有贡献，只有环闭合时才重新回到物理空间从而对配分函数起到贡献，把由节点连接在

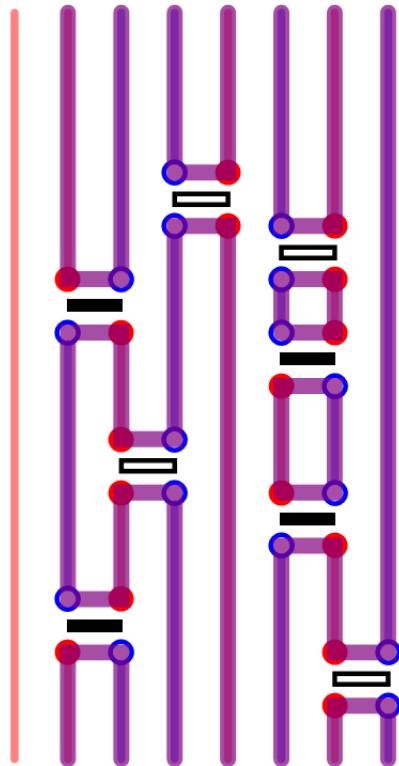


图 3.17 Deterministic operator loops for isotropic Heisenberg model

一起的所有可能图样构成的空间称为拓展态空间(可以包含任意多个奇异点), 并且认为拓展态空间中某个特定图样的权重为所有节点权重的乘积, 物理态空间是这个拓展态空间的一个子集, 如果在构造环的过程中使满足在拓展态空间中的细致平衡条件, 那么环闭合时, 物理态空间的细致平衡条件是自然得到满足的, 现在考虑拓展态空间中的细致平衡过程, 设 S 和 S' 为如图3.18所示两种组态, S 在 S' 的基础上又更新了1, 2, 3, 4四个节点, 并且在节点3有一个反弹过程, 则细致平衡方程为

$$(W(1)W(2)W(3)W(4)W_{others})(P(1_{1,4})P(2_{1,3})P(3_{4,4})P(2_{3,2}^{temp})P(4_{3,2})) = \\ (W(4')W(3')W(2')W(1')W_{others})(P(4'_{2,3})P(2'_{2,3})P(3'_{4,4})P(2'_{3,1}^{temp})P(1'_{4,1})) \quad (3.76)$$

其中 $W(i)$ 为节点*i*的权重, $P(i_{e,x})$ 表示当节点*i*的入口为 e 时, 选择出口为 x 的概率, 2^{temp} 表示节点2的1, 3腿翻转之后的节点类型, 在上式两边各乘上 $W(2^{temp})$ 后, 可以看到只要满足了下列关系

$$W(1)P(1_{1,4}) = W(1')P(1'_{4,1}) \\ W(2)P(2_{1,3}) = W(2^{temp})P(2_{3,1}^{temp})$$

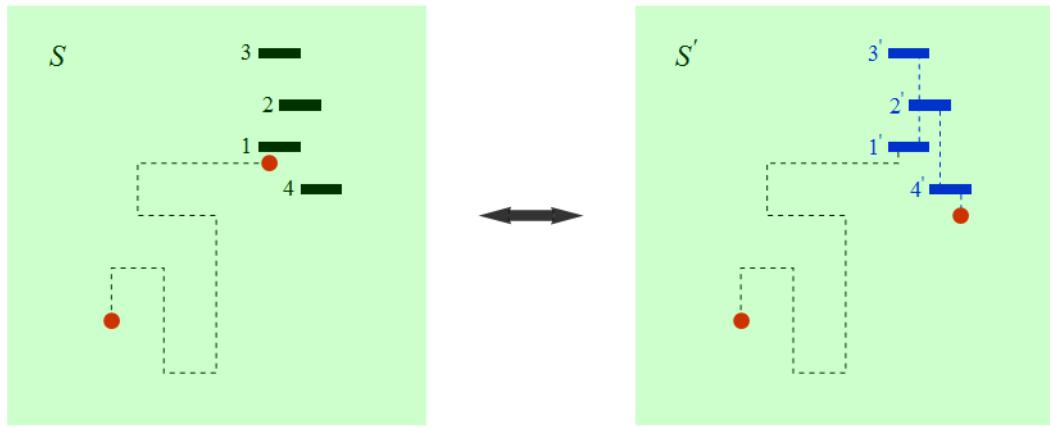


图 3.18 Detailed balance in extended configuration space

$$W(2^{temp})P(2_{3,2}^{temp}) = W(2')P(2'_{2,3})$$

⋮

就可以满足细致平衡条件，上述关系的通式为 $W(i)P(i, e, x) = W(i')P(i', x, e)$ ，如果令 $W(i)P(i, e, x) = W(i, e, x)$ ，即要求

$$W(i, l_1, l_2) = W(i', l_2, l_1) \quad (3.77)$$

对任意两种节点 i, i' ，如果它们通过腿 l_1, l_2 实现互相转换，则上式都要得到满足。概率 $P(i, l_1, l_2)$ 还要满足归一化条件

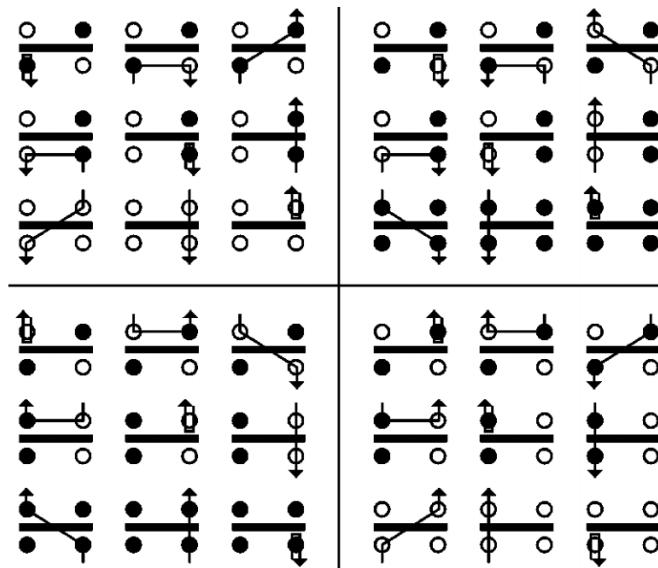
$$\sum_{l_2} P(i, l_1, l_2) = 1 \quad (3.78)$$

即在给定节点 i 和入口 l_1 情况下，选择各种出口的概率和应该为 1，上式等价于

$$\sum_{l_2} W(i, l_1, l_2) = W(i) \quad (3.79)$$

与世界线环算法中的分裂概念类似，方程 3.79 的 $W(i, l_1, l_2)$ 也可以视为对节点 i 的权重 $W(i)$ 的一种分裂，而方程 3.77 则对 $W(i, l_1, l_2)$ 提出了要求，这个要求等价于要求世界线环算法中的分裂算符 \hat{g} 所对应矩阵的对称位置的矩阵元相等。

以方程 3.60 所对应的外场下的 XXZ 模型为例，共有 6 种节点（图 3.13），每个节点可以有 4 个入口，理论上的出口有 4 种，但对于现在讨论的 XXZ 模型，给定入口后出口只可能有 3 种，所以一共有 72 个 $W(i, l_1, l_2)$ 需要我们求解，仔细研究节点之间的变

图 3.19 Possible $W(i, l_1, l_2)$ graphs(Fig.8 in [17])

换关系后发现可以分为8类，每类包含9种情况，其中4类如图3.19所示 比如对于左上角那一类，可以列出方程组

$$W_1 = b_1 + a + b$$

$$W_2 = a + b_2 + c \quad (3.80)$$

$$W_3 = b + c + b_3$$

上式中，

$$W_1 = W(II_1), W_2 = W(I_1), W_3 = W(III_1)$$

$$b_1 = W(II_1, 1, 1), b_2 = W(I_1, 2, 2), b_3 = W(III_1, 4, 4)$$

$$a = W(II_1, 1, 2) = W(I_1, 2, 1)$$

$$b = W(II_1, 1, 4) = W(III_1, 4, 1)$$

$$c = W(I_1, 2, 4) = W(III_1, 4, 2)$$

这组方程有一平庸解对应前面讲到的热泳概率，

$$a = W_1 W_2 / (W_1 + W_2 + W_3)$$

$$b = W_1 W_3 / (W_1 + W_2 + W_3)$$

$$c = W_2 W_3 / (W_1 + W_2 + W_3) \quad (3.81)$$

$$b_i = W_i^2 / (W_1 + W_2 + W_3)$$

方程3.80有6个未知数，只有3个方程，可以有多组解，视 b_1, b_2, b_3 最小的解为最优解，则要找到最优解的任务就是在保证 a, b, c, b_1, b_2, b_3 非负的情况下尽量使 b_1, b_2, b_3 取最小值。为了求得这样的一组最优解，先将 b_1, b_2, b_3 视为已知数，带入 W_i 的值，可以求得如下关于 a, b, c 的解

$$\begin{aligned} a &= \frac{1+\Delta}{4} + \frac{h_b}{2} + \frac{-b_1 - b_2 + b_3}{2} \\ b &= \frac{1-\Delta}{4} - \frac{h_b}{2} + \frac{-b_1 + b_2 - b_3}{2} \\ c &= \frac{\Delta-1}{4} + \frac{h_b}{2} + \epsilon + \frac{b_1 - b_2 - b_3}{2} \end{aligned} \quad (3.82)$$

在横坐标 Δ ，纵坐标 h_b 的坐标系下，即给定一个参数点 (h_b, Δ) ，需要调节 ϵ 以及 b_1, b_2, b_3 使该点在直线 $(1-\Delta)/4 - h_b/2 + (-b_1 + b_2 + b_3)/2 = 0$ 下方，在直线 $(1+\Delta)/4 + h_b/2 + (-b_1 - b_2 + b_3)/2 = 0$ 以及 $(\Delta-1)/4 + h_b/2 + \epsilon + (b_1 - b_2 - b_3)/2 = 0$ 上方。对图3.19中其他类也可以列出类似的方程组并求解，由于节点权重的对称性，虽然有8类方程组，但实际上有4类列出来的方程组和方程3.80一样，另外4类列出来的方程组也是一样的，对应的设为 $a', b', c', b'_1, b'_2, b'_3$ ，解的相图可以用图3.20以及表3.1所示，磁场取负值时根据对称性也可以很容易地得到对应的相图，需要说明的是并没有严格的程序决定 ϵ 的取值，在 $\epsilon_{min} = 0$ 的情况下，计算结果表明让它取略大于0的值程序效率更高[17]。表3.1中的 $\Delta^\pm = (1 \pm \Delta)/2$ ，可以看到在各向同性无外场

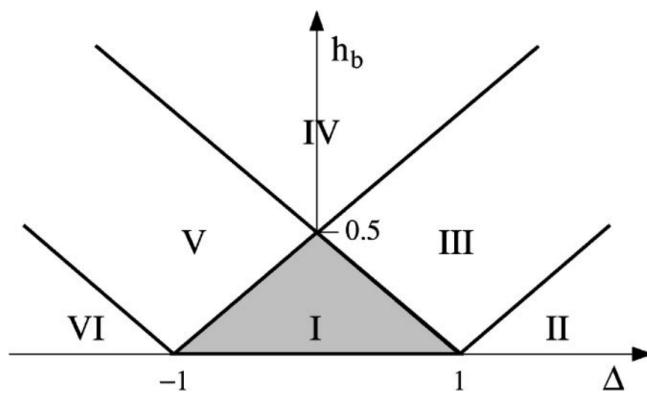


图 3.20 Phase diagram corresponding to Table 3.1(Fig.9 in [17])

时，最优解即决定性的算符环算法，对于无外场XY模型($\Delta = 0$)，令 $\epsilon = 1/4$ 或者 $1/2$

表 3.1 Solution minimizing bounce weights(Table.I in [17])

	Bounce weights		ϵ_{min}
I			$(\Delta^- - h_b)/2$
II	$b_2 = h_b - \Delta^-$	$b'_2 = -h_b - \Delta^-$	0
III	$b_2 = h_b - \Delta^-$		0
IV	$b_2 = h_b - \Delta^-$	$b'_3 = h_b - \Delta^+$	0
V		$b'_3 = h_b - \Delta^+$	$(\Delta^- - h_b)/2$
VI	$b_3 = -h_b - \Delta^+$	$b'_3 = h_b - \Delta^+$	$-h_b - \Delta/2$

都可以得到没有反弹过程的解。算符环在构造过程中已经考虑到了磁场的影响，所以克服了世界线环算法在有外场情况下环翻转接受概率低的问题，方向性算符环又指明了一种更加有效地构造环的方式，更多关于方向性环算法的效率问题参考Sandvik的文章。

3，整个(α, S_n)更新过程的最后一步是对整个虚时过程 $0 - \beta$ 中都没有被算符作用过的独立自旋(如图3.17中的第一个自旋)以1/2概率独立翻转。

在随机级数展开框架下的物理量的统计方法参考[9, 31]，方向性环算法的应用及其推广参考[32–34]。

3.4 价键基矢投影蒙特卡洛方法

前两节介绍的都是有限温度下的量子蒙特卡洛方法，出发点都是配分函数，为了得到基态的性质，都是把温度取得足够低以至于有限温度效应可以忽略，严格一点的做法是模拟几种不同温度然后插值到零温，这样就增大了计算量。对于有些量子相变问题，比如JQ模型[35]中可能存在的退禁闭量子临界现象(deconfined quantum criticality)[36]，需要模拟更大尺寸的体系才能得到更可靠的结论，这时能有一种零温的蒙特卡洛方法将是一种更好的选择。本节介绍的价键基矢投影蒙特卡洛方法的思想起源于80年代末Liang为研究一些基于价键态理论的基态提出的一种变分和投影框架[37]，而后这种在价键态表象下的变分及投影方法为Sandvik 所发展[38]，下面将在价键基矢以及 S^z 的共同表象[39]里介绍这种方法。

价键即表示两自旋间形成了自旋单态，根据Lieb-Mattis理论[40]，对于一个没有阻挫的反铁磁系统，它的基态 $|\psi_0\rangle$ 必须满足 $S = 0$ ，而许多价键耦合之后得到的态是在单态区域(singlet sector)的($S = 0$)，因此不同的价键配对方式得到的态可以作为

对反铁磁系统基态进行展开的一组基矢，如图3.21所示即为两种价键配对方式，红

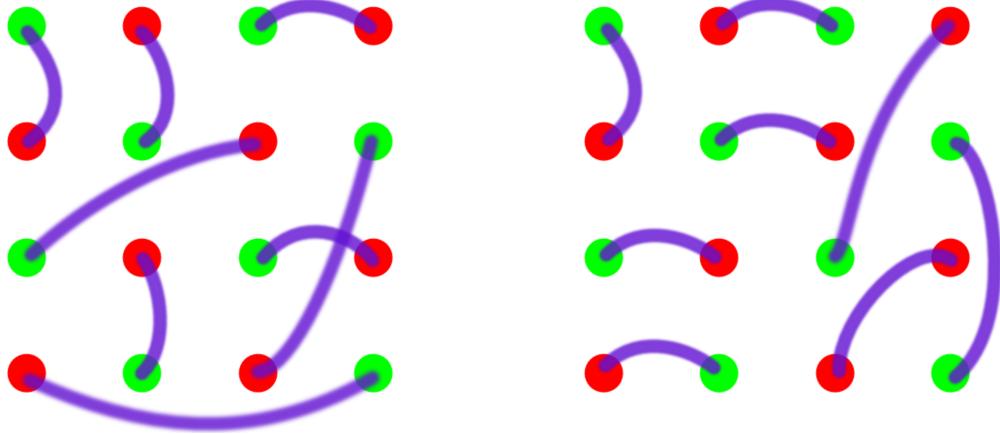


图 3.21 Valence bond basis pattern

色和绿色表示两套子格子A和B，蓝键即表示它所连接的两自旋形成了自旋单态，左图的价键总是由不同子格子的自旋配对而成，右图则包含了有同一子格子内部自旋构成的价键。根据Marshall符号规则[41]，如果在 S^z 表象下对基态进行展开，

$$|\psi_0\rangle = \sum_{\alpha} (-1)^{\Gamma(\alpha)} f_{\alpha} |\sigma_{\alpha}\rangle \quad (3.83)$$

其中 $|\sigma_{\alpha}\rangle$ 是 S^z 表象下的一个基矢， $\Gamma(\alpha)$ 是 $|\sigma_{\alpha}\rangle$ 中A子格子中自旋朝下的数目， f_{α} 非负，如果对价键做一个定义上的规范，

$$(a, b) = (|\uparrow_a \downarrow_b\rangle - |\downarrow_a \uparrow_b\rangle)/\sqrt{2} \quad (3.84)$$

其中a属于子格子A，b属于子格子B，则基态 ψ_0 可以在价键基矢下进行展开，

$$|\psi_0\rangle = \sum_{\alpha} f_{\alpha} |(a_1^{\alpha}, b_1^{\alpha}) \dots (a_{N/2}^{\alpha}, b_{N/2}^{\alpha})\rangle = \sum_{\alpha} f_{\alpha} |V_{\alpha}\rangle \quad (3.85)$$

其中 $|V_{\alpha}\rangle$ 即为一种价键配对方式所代表的价键基矢

$$|V_{\alpha}\rangle = \frac{1}{2^{N/4}} \sum_{i=1}^{2^{N/2}} (-1)^{A_{\downarrow}(\alpha, i)} |S_1^z(\alpha, i), \dots, S_N^z(\alpha, i)\rangle = \frac{1}{2^{N/4}} \sum_{i=1}^{2^{N/2}} (-1)^{A_{\downarrow}(\alpha, i)} |Z_i^{\alpha}\rangle \quad (3.86)$$

其中*i*表示某种与 $|V_{\alpha}\rangle$ 匹配的 S^z 表象的自旋表示，如图3.22， $A_{\downarrow}(\alpha, i)$ 为 (α, i) 中A子格子自旋朝下的数目，即方程中的 $\Gamma(\alpha)$ ，所以按方程方式在价键基矢下展开时可以保证展开系数 f_{α} 的正定性，这就为蒙特卡洛模拟提供了一种可能性。还需要说明的

是，像图3.21中右图所示的包含由同一子格子内部自旋形成的价键的基矢对 $|\psi_0\rangle$ 是没有贡献的，可以证明

$$(a, c)(b, d) = (a, b)(c, d) - (a, d)(c, b) \quad (a, c \in A, b, d \in B) \quad (3.87)$$

因为上式包含 $-(a, d)(c, b)$ ，所以要想满足Marshall符号规则，展开时所用的价键基矢只能(或者说只需要)由A, B之间的自旋形成的价键构成，如图3.21左图所示，在这个限制下我们可以得到对于由N个自旋构成的体系，其价键基矢的数目为 $(N/2)!$ ，而体系的单态区域构成的希尔伯特子空间维度可以证明是 $\frac{N!}{(N/2)!(N/2+1)!}$ ，价键基矢数目大于希尔伯特子空间维度，所以价键基矢是超完备的，与谐振子相干态一样，它们之间也不是正交的，可以证明

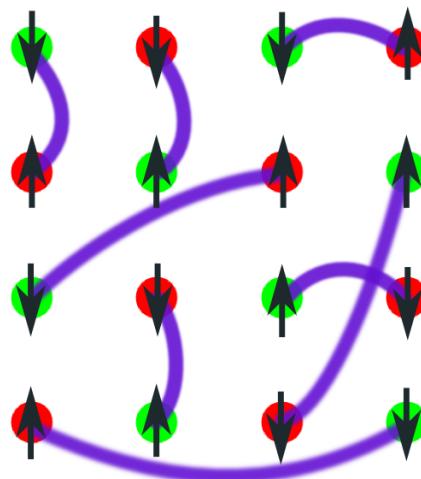


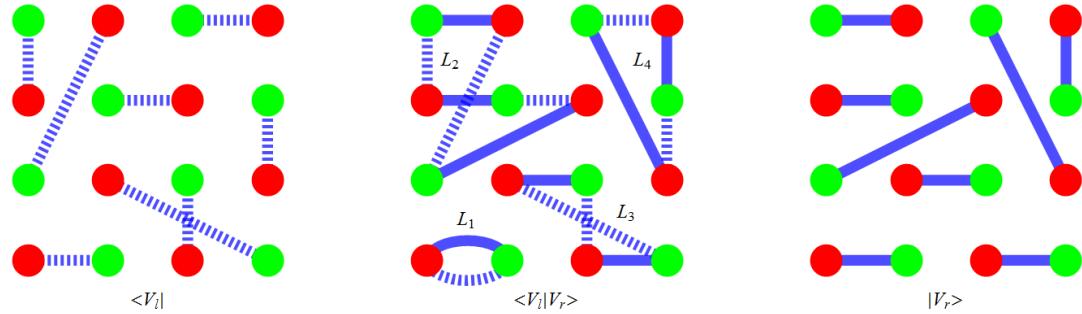
图 3.22 Combined spin and valence bond basis pattern

$$\langle V_l | V_r \rangle = \frac{1}{2^{N/2}} \sum_{i,j} \langle Z_j^l | Z_i^r \rangle (-1)^{A_{\downarrow}(r,i) + A_{\downarrow}(l,j)} = 2^{N_{loop} - N/2} \quad (3.88)$$

上式中 N_{loop} 表示由 $\langle V_l | V_r \rangle$ 叠加在一起构成的图样(Transposition graph)中环的数目，如图3.23所示，由于超完备性，基态在价键基矢下的展开

$$|\psi_0\rangle = \sum_r w_r |V_r\rangle \quad (3.89)$$

不是唯一的。还可以证明如下关系式，

图 3.23 Transposition graph of $\langle V_l | V_r \rangle$

$$\frac{\langle V_l | S_i \cdot S_j | V_r \rangle}{\langle V_l | V_r \rangle} = \begin{cases} +3/4, & \text{if } i, j \in \text{same loop, same sublattice.} \\ -3/4, & \text{if } i, j \in \text{same loop, different sublattices.} \\ 0, & \text{if } i, j \in \text{different loops.} \end{cases} \quad (3.90)$$

与环相关的更加复杂的矩阵元可以参考文献[42]。

知道了价键基矢的基本概念和性质，就可以利用这些性质来设计算法求出基态，有两种方式，一种是变分的方式，还有一种是投影的方式。变分得到的基态也可以作为投影算法的初始态，以得到更精确的基态。88年Liang提出基态具有如下幅度乘积态(amplitude product state)的变分形式，

$$w_r = \prod_{b=1}^{N/2} h(x_b^r, y_b^r) \quad (3.91)$$

即基态在某个价键基矢 $|V_r\rangle$ 的展开系数等于构成这个基矢的所有价键的幅度乘积，通常更简单的认为 h 只与价键 b 的曼哈顿距离 l_b (Manhattan length)有关系，如图3.24所示，不同键长所对应的幅度即为变分过程要优化的参数。由能量在价键基矢表象下的表达式

$$E = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\sum_{lr} W_{lr} E_{lr}}{\sum_{lr} W_{lr}} \quad (3.92)$$

可知变分过程就是要对 $\langle V_l | V_r \rangle$ 构成的叠加样式按照概率

$$W_{lr} = w_l w_r \langle V_l | V_r \rangle \quad (3.93)$$

进行重要性抽样，而一个确定的叠加样式所对应的能量为

$$E_{lr} = \frac{\langle V_l | H | V_r \rangle}{\langle V_l | V_r \rangle} \quad (3.94)$$

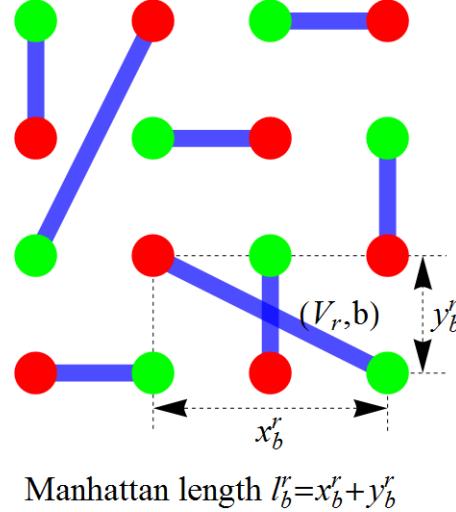


图 3.24 Variational amplitude product state

这可以很容易由方程3.90等求得。一般通过两个价键互相重新配对(two bond reconfiguration)来更新叠加样式，比如在 $|V_r\rangle$ (或 $\langle V_l|$)中随机选择两个价键(a, b)和(c, d)，然后让它们成键方式更新为(a, d)和(c, b)，如图3.25所示，这个过程的接受概率为

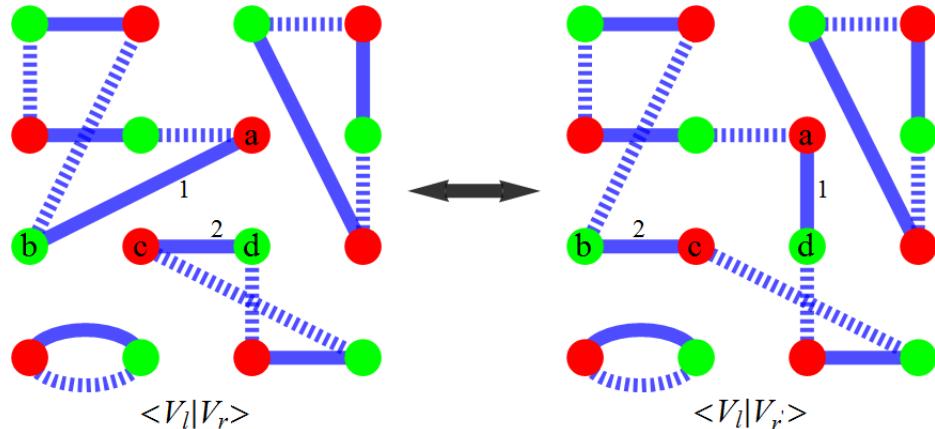


图 3.25 Two bond reconfiguration

$$P_{accept} = \min\left[\frac{h(x_1^{r'}, y_1^{r'})h(x_2^{r'}, y_2^{r'})}{h(x_1^r, y_1^r)h(x_2^r, y_2^r)} 2^{N_{loop}^{(l|r')} - N_{loop}^{(l|r)}}\right] \quad (3.95)$$

其中 $N_{loop}^{(l|r')} - N_{loop}^{(l|r)} = \pm 1$ ，要判断这个过程中环数目的变化情况，就要弄清楚在 $\langle V_l | V_r \rangle$ 叠加样式中a, b, c, d四个自旋是否在同一环内，这使得一个局域的翻转操作牵涉到一个非局域的遍历操作，Staggered磁化强度 M_s 与环长度 L_λ 具有如下关系

$$M_s^2 = \frac{1}{N^2} \sum_{ij} \phi_i \phi_j S_i \cdot S_j = \frac{1}{N^2} \sum_{\lambda=1}^{N_{loop}} L_\lambda^2 \quad (3.96)$$

而选中环 L_i 的概率为 L_i/N , 所以环的平均长度为 $\langle L_i \rangle = N\langle M_s^2 \rangle$, 当体系具有长程序时, 环的平均长度将是 N 量级的, 所以导致在价键基矢下这种翻转方式效率不高。Sandvik和Evertz提出在价键基矢以及 S^z 的共同表象下来进行这个翻转操作, 从一个互相匹配的样式 (V_l, V_r, Z_i^{lr}) (如图3.22)出发, 同样执行一个两键重新配对的操作时的接受概率为

$$P_{accept} = \min\left[\frac{h(x_1^{r'}, y_1^{r'})h(x_2^{r'}, y_2^{r'})}{h(x_1^r, y_1^r)h(x_2^r, y_2^r)}\delta_{\langle l|r' \rangle, Z}\right] \quad (3.97)$$

这时不需要判断重新配对后叠加样式中环数目的变化情况, 而只需要看是否与自旋匹配就行了, 这是一个局域的判断操作, 从而提高了效率。在这种联合表象下除了两键重新配对的翻转方式之外, 还有一种更有效的环更新方式, 如图3.26所示, 先为所有可能的 $h(l)$ 创建一个热泳概率表, 在 $|V_r\rangle$ (或 $|V_l\rangle$)中随机选择一个格点 i_0 (与 j_0 成键), 然后按照建好的热泳概率表找出一个试探格点 i' (与 j' 成键), 如果 i' 与 i 自旋一样, 则令 j_0 与 i' 成键, 如果自旋不一样则重复找试探格点直到找到自旋匹配的格点为止, 重复上述操作为 j' 寻找新的成键格点, 这个过程中始终有两个缺陷(defect) i_0 和 j' 没有成键, 直到某一次为 j' 寻找成键格点时刚好选择了 i_0 , 则两个缺陷刚好融合, 整个过程就形成一个环, 通过这种方式可以大范围的更新价键排布图样, 然后对一个新的 (V_l, V_r, Z_i^{lr}) 组态重复上述环翻转操作。

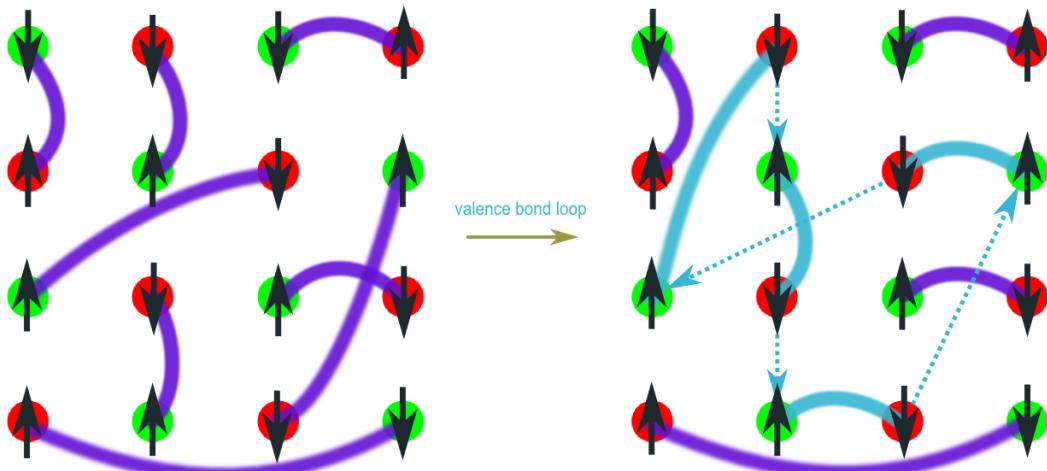


图 3.26 Bond-loop updates

一个蒙特卡洛步可以视为进行了 N 次两键重新配对翻转操作, 或进行了总长度为 N 的价键环翻转操作, 模拟一定步数的蒙特卡洛步之后, 可以得到一些物理量如

能量的平均值，然后更新 $h(l)$ 再继续模拟一定步数，如此重复操作直到能量和 $h(l)$ 收敛， $h(l)$ 的更新方式有很多种，有利用 $\frac{\partial\langle E \rangle}{\partial h(l)}$ 的如文献[43]，也有利用与幅度 $h(l)$ 呈单调递增关系的 l 键出现概率 $P(l)$ 的如文献[44]，数值结果表明 $h(l)$ 和 $P(l)$ 正比于 $1/l^3$ ，变分得到的基态能量会稍微偏高，但是得到的基态可以作为下面投影蒙特卡洛过程的很好的初始态。

投影蒙特卡洛方法的基本思想是从一个与基态有叠加的波函数 $|\psi\rangle$ 出发，通过下面的投影操作

$$(C - H)^m |\psi\rangle = c_0(C - E_0)^m [|0\rangle + \sum_n \frac{c_n}{c_0} (\frac{C - E_n}{C - E_0})^m |n\rangle] \quad (3.98)$$

当 C 为一个大于系统能量上限的值，且 m 无穷大时，上式右边就只留下了基态 $|0\rangle$ ，通常令 $H_{ab} = 1/4 - S_a \cdot S_b$ ，则 $C - H = \sum_{\langle a,b \rangle} H_{ab}$ ，投影算符可以用 H_{ab} 来展开，

$$(C - H)^m = \sum_{\alpha} \prod_{i=1}^m H_{a_i^{\alpha} b_i^{\alpha}} = \sum_{\alpha} P_{\alpha} \quad (3.99)$$

又由如下关系式

$$H_{ab} |\cdots (a, b) \cdots \rangle = |\cdots (a, b) \cdots \rangle \quad (3.100)$$

$$H_{bc} |\cdots (a, b) \cdots (c, d) \cdots \rangle = \frac{1}{2} |\cdots (c, b) \cdots (a, d) \cdots \rangle \quad (3.101)$$

可得

$$P_{\alpha} |V_r\rangle = (\frac{1}{2})^{o_{\alpha}^r} |V_r(\alpha)\rangle \quad (3.102)$$

其中 o_{α}^r 为算符序列 P_{α} 作用过程中非对角操作(方程3.101)的数目，在这种价键基矢投影框架下物理量的平均值为

$$\langle O \rangle = \frac{\langle \psi | (C - H)^m O (C - H)^m | \psi \rangle}{\langle \psi | (-H)^{2m} | \psi \rangle} = \sum_{lr\alpha\beta} W_{lr}^{\alpha\beta} O_{lr}^{\alpha\beta} / \sum_{lr\alpha\beta} W_{lr}^{\alpha\beta} \quad (3.103)$$

其中

$$W_{lr}^{\alpha\beta} = w_l w_r \langle V_l(\beta) | V_r(\alpha) \rangle 2^{-(o_r^{\alpha} + o_l^{\beta})} \quad (3.104)$$

$$O_{lr}^{\alpha\beta} = \langle V_l(\beta) | O | V_r(\alpha) \rangle / \langle V_l(\beta) | V_r(\alpha) \rangle \quad (3.105)$$

由方程3.103可知价键基矢投影蒙特卡洛方法的过程就是对 $|V_r\rangle$, $|V_l\rangle$, P_{α} , P_{β} 进行重要性抽样的过程，如图3.27所示，根据变分求得的 $h(l)$ 来更新 $|V_r\rangle$, $|V_l\rangle$ ，对 P_{α} , P_{β} 的更

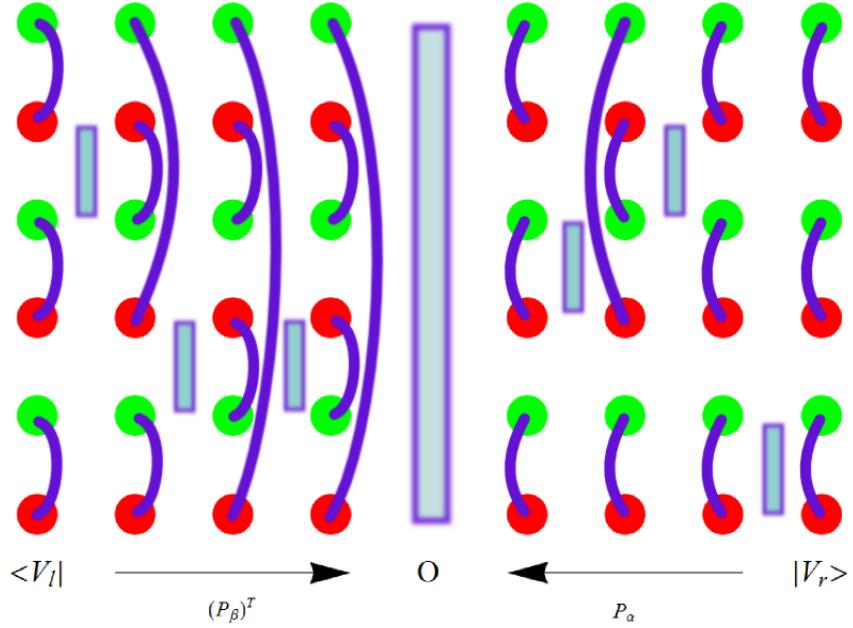


图 3.27 Graph of projection in valence bond basis

新方式是对这两个算符序列随机替换其中的一个或多个算符，然后按如下概率决定替换是否接受

$$P_{accept} = \min[1, \frac{\langle V_l(\beta') | V_r(\alpha') \rangle 2^{-(o_r^{\alpha'} + o_l^{\beta'})}}{\langle V_l(\beta) | V_r(\alpha) \rangle 2^{-(o_r^{\alpha} + o_l^{\beta})}}] \quad (3.106)$$

可是对算符序列的一个局部替换操作需要重新计算整个新序列作用在 $|V_r\rangle$ 或 $|V_l\rangle$ 后得到的结果，这不是最有效的一种方式。同样在 (V_l, V_r, Z_i^{lr}) 的联合表象下，可以通过算符环算法来提高效率，与随机级数展开方法类似，将 H_{ab} 分为对角和非对角部分，

$$H_{ab}(1) = \frac{1}{4} - S_a^z S_b^z \quad (3.107)$$

$$H_{ab}(2) = -\frac{1}{2}(S_a^+ S_b^- + S_a^- S_b^+) \quad (3.108)$$

则算符序列 $P_\alpha \rightarrow P_\alpha^e$ ，联合表象下的基矢用 $|Z_i^r\rangle$ 和 $|Z_j^l\rangle$ 来表示，则一个 $(|Z_i^r\rangle, |Z_j^l\rangle, P_\alpha^e, P_\beta^f)$ 所对应的投影样式如图3.28所示，其权重为

$$W_{lr,ij}^{\alpha\beta,ef} = w_l w_r (\frac{1}{2})^{2m+N/2} \delta_{P_\alpha^e |Z_i^r\rangle, P_\beta^f |Z_j^l\rangle} \quad (3.109)$$

联合表象下的投影图样与随机级数展开下的世界线图十分相似，不过投影图样的两端(对应于世界线图的虚时0和 β)不需要满足周期边界条件，也没有单位算符，整

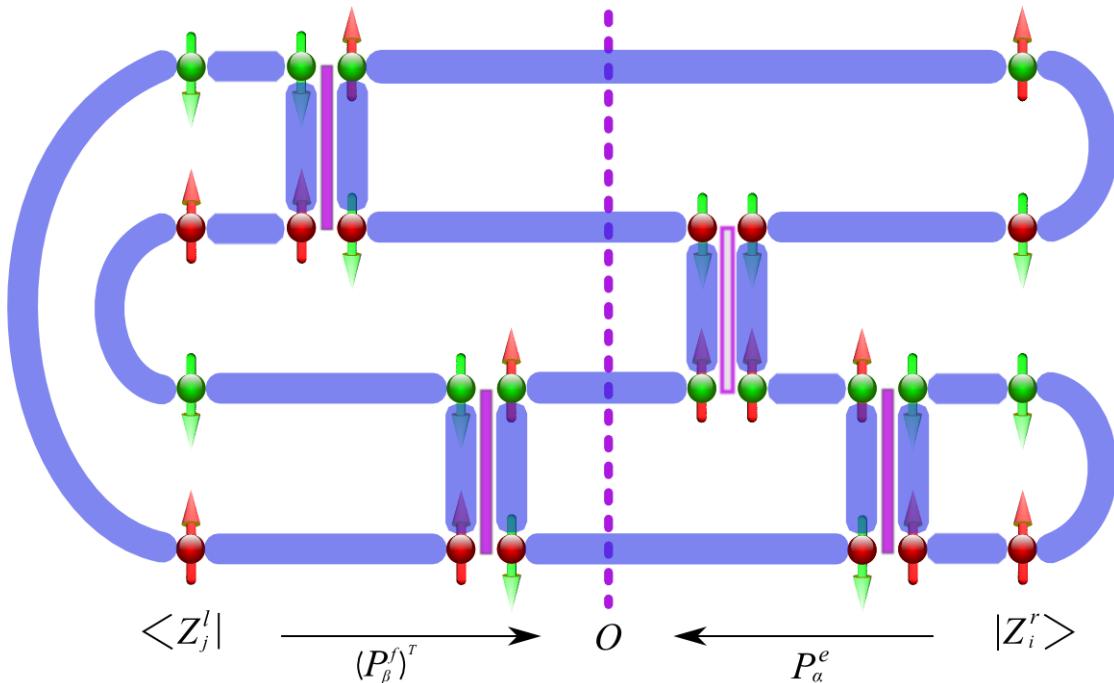


图 3.28 Graph of projection in combined basis(Adapted from Fig.4 in [39])

一个图样的翻转操作有如下3步：

- 1, 对角翻转, 遍历算符序列 $(P_\beta^f)^T P_\alpha^e$ 作用在 $|Z_i^r\rangle$ 的过程中, 碰到对角算符 $H_{ab}(1)$, 随机找一个连接两相反自旋的键所对应的对角算符来代替当前对角算符, 与随机级数展开中的对角翻转一样, 碰到非对角算符也需要更新 $Z(p)$ 的状态以便在下次对角翻转时需要用到;
- 2, 环翻转, 如图3.28蓝线所示, 通过两端价键的连接以及中间的算符对应的腿之间的连接会形成环, 然后对环以1/2概率翻转其中包含的自旋并更新相关算符类型, 这个过程与随机级数展开下的决定性环翻转方式几乎一样;
- 3, 两端的价键基矢的更新操作, 可以用前面讲的键环翻转方式。

物理量的统计可以在联合表象下的时间中线(图3.28虚线)所对应的态 $Z_i^r(\alpha, e) = Z_j^l(\beta, f)$ 下进行测量, 也可以利用方程3.105 在中线左右两边的 $\langle V_l(\beta)|$ 和 $|V_r(\alpha)\rangle$ 构成的叠加图样上进行, 而这个叠加图样可以通过穿过中线的算符环结构来得到, 将 $Z_i^r(\alpha, e)$ 和 $Z_j^l(\beta, f)$ 的对应格点连接起来, 每条线段都将穿过且垂直与时间中线, 每条线段都有一个标识符表示它所属的算符环的编号, 则在 $\langle V_l(\beta)|V_r(\alpha)\rangle$ 叠加图样中由相同标识符的线段所连接的格点是属于同一个价键环的。基于价键基矢的蒙特卡洛方法描述VBS-Neel相变[46]具有直观方便的优点, 同时还可以定义在价键基矢

下的价键纠缠熵[45]，数值结果表明在一维情况价键纠缠熵具有与冯纽曼纠缠熵极其相似的性质，高维下的价键纠缠熵的数值结果对理解高维冯纽曼纠缠熵也具有指导意义。

3.5 ALPS软件包简介

ALPS(Algorithms and Libraries for Physics Simulations)[47]是一个旨在模拟强关联量子系统的开源软件包，它包含有蒙特卡洛方法，精确对角化[48]，密度矩阵重正化群[49]，动力学平均场[50]和TEBD[51]这5个计算模块，当前ALPS具备了主流的数值计算能力，可以应对各种不同的数值计算要求，不过在处理较为复杂的系统仍然存在一定的困难，比如存在关联多个格点的相互作用的情况(JQ模型)。ALPS可以自定义格子类型，相互作用形式以及要测量的物理量，具体的安装(Setup and Installation)以及使用方法(Tutorials)可以参考其主页和[52]。现在的2.0版本已经支持Python[53]脚本方式来运行ALPS，这相比以前的命令行模式要方便很多，包括格子和模型的选择，模拟参数的给定，物理量的测量甚至最后的数据处理都可以写在一个Python脚本里，一个典型的进行蒙特卡洛模拟的脚本文件如图3.29所示，其中用到的模拟命令spinmc表示这是进行一个经典蒙特卡洛模拟，蒙特卡洛模块下的其他命令及其适用范围还有looper：世界线环算法，具有自旋翻转对称性的自旋模型或粒子空穴对称性的玻色子模型；dirloop_sse：方向性环算法，破坏了自旋翻转对称性的模型如外场下的Heisenberg模型；worm：蠕虫算法，玻色哈伯德模型以及强场下的自旋模型；quantum Wang-Landau：量子王-朗道算法[54]，主要用于计算自由能和熵。无外场下的简单的Heisenberg模型可以用任意一种算法来模拟，环算法的适用范围比较窄，但是在其适用范围之内相比其他算法有最短的自关联时间，表现最好。

```

import pyalps
import matplotlib.pyplot as plt
import pyalps.plot

#prepare the input parameters
#skip this part if you already ran the simulation from the command line
parms = []
for t in [0.05, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 1.0, 1.25, 1.5, 1.75,
2.0]:
    parms.append(
        {
            'LATTICE'      : "chain lattice",
            'T'             : t,
            'J'             : -1 ,
            'THERMALIZATION' : 10000,
            'SWEEPS'        : 500000,
            'UPDATE'        : "cluster",
            'MODEL'         : "Heisenberg",
            'L'              : 60
        }
    )

#write the input file and run the simulation
#skip this part if you already ran the simulation from the command line
input_file = pyalps.writeInputFiles('parm2a',parms)
pyalps.runApplication('spinmc',input_file,Tmin=5)

#load the susceptibility and collect it as function of temperature T
data = pyalps.loadMeasurements(pyalps.getResultFiles
(prefix='parm2a'),'Susceptibility')
susceptibility = pyalps.collectXY(data,x='T',y='Susceptibility')

#make plot
plt.figure()
pyalps.plot.plot(susceptibility)
plt.xlabel('Temperature $T/J$')
plt.ylabel('Susceptibility $\chi$')
plt.ylim(0,0.22)
plt.title('Classical Heisenberg chain')
plt.show()

```

图 3.29 A sample python script for ALPS simulation

参 考 文 献

- [1] D.C. Handscomb, *The Monte Carlo method in quantum statistical mechanics*, Proc. Cambridge Philos. Soc. **58**, 594 (1962);
D.C. Handscomb, *A Monte Carlo method applied to the Heisenberg ferromagnet*, Proc. Cambridge Philos. Soc. **60**, 115 (1964).
- [2] M. Suzuki, *Relationship between d-Dimensional Quantal Spin Systems and (d+1)-Dimensional Ising Systems*, Prog. Theor. Phys. **56**, 1454 (1976);
M. Suzuki, S. Miyashita, and A. Kuroda, *Monte Carlo simulation of quantum spin systems. I.*, Prog. Theor. Phys. **58**, 1377 (1977).
- [3] M. Takasu, S. Miyashita, and M. Suzuki, *Monte Carlo Simulation of Quantum Heisenberg Magnets on the Triangular Lattice*, Prog. Theor. Phys. **75**, 1254 (1986).
- [4] J.E. Hirsch, R.L. Sugar, D.J. Scalapino, and R. Blankenbecler, *Monte Carlo simulations of one-dimensional fermion systems*, Phys. Rev. B **26**, 5033 (1982).
- [5] P. Henelius and A.W. Sandvik, *Sign problem in Monte Carlo simulations of frustrated quantum spin systems*, Phys. Rev. B **62**, 1102 (2000).
- [6] N. Kawashima and K. Harada, *Recent Developments of World-Line Monte Carlo Methods*, J. Phys. Soc. Jpn. **73**, 1379 (2004).
- [7] P. Henelius, S.M. Girvin, and A.W. Sandvik, *Role of winding numbers in quantum Monte Carlo simulation*, Phys. Rev. B **57**, 13382 (1998).
- [8] F.F. Assaad and H.G. Evertz, *World-line and Determinantal Quantum Monte Carlo Methods for Spins, Phonons and Electrons*, Lect. Notes Phys. **739**, 277 (2008).
- [9] A.W. Sandvik, *Finite-size scaling of the ground-state parameters of the two-dimensional Heisenberg model*, Phys. Rev. B **56**, 11678 (1997).
- [10] H.G. Evertz, G. Lana, and M. Marcu, *Cluster algorithm for vertex models*, Phys. Rev. Lett. **70**, 875 (1993).

- [11] R.J. Baxter, **Exactly Solved Models in Statistical Mechanics** (Academic, New York, 1989);
E.H. Lieb and F.Y. Wu, **Phase Transitions and Critical Phenomena**, (Academic, New York, 1972), Vol. 1, p. 331.
- [12] B.B. Beard and U.-J. Wiese, *Simulations of Discrete Quantum Systems in Continuous Euclidean Time*, Phys. Rev. Lett. **77**, 5130 (1996).
- [13] N.V. Prokof'ev, B.V. Svistunov, and I.S. Tupitsyn, *Exact Quantum Monte Carlo Process for the Statistics of Discrete Systems*, arxiv:cond-mat/9612091.
- [14] N.V. Prokof'ev, B.V. Svistunov, and I.S. Tupitsyn, *Exact, complete, and universal continuous-time worldline Monte Carlo approach to the statistics of discrete quantum systems*, JETP **87**, 310 (1998);
N.V. Prokof'ev, B.V. Svistunov, and I.S. Tupitsyn, "Worm" algorithm in quantum Monte Carlo simulations, Phys. Lett. A **238**, 253 (1998).
- [15] A.W. Sandvik and J. Kurkijarvi, *Quantum Monte Carlo simulation method for spin systems*, Phys. Rev. B **43**, 5950 (1991).
- [16] A.W. Sandvik, *Stochastic series expansion method with operator-loop update*, Phys. Rev. B **59**, R14157 (1999).
- [17] O.F. Syljuasen and A.W. Sandvik, *Quantum Monte Carlo with directed loops*, Phys. Rev. E **66**, 046701 (2002).
- [18] M. Troyer and U.-J. Wiese, *Computational Complexity and Fundamental Limitations to Fermionic Quantum Monte Carlo Simulations*, Phys. Rev. Lett. **94**, 170201 (2005).
- [19] R. Blankenbecler, D.J. Scalapino, and R.L. Sugar, *Monte Carlo calculations of coupled boson-fermion systems. I*, Phys. Rev. D **24**, 2278 (1981);
G. Sugiyama and S.E. Koonin, *Auxiliary field Monte-Carlo for quantum many-body ground states*, Ann. Phys. (N.Y.) **168**, 1 (1986).

- [20] R.R. dos Santos, *Introduction to quantum Monte Carlo simulations for fermionic systems*, Braz. J. Phys. **33**, 36 (2003).
- [21] D.M. Ceperley and M.H. Kalos, in **Monte Carlo Methods in Statistical Physics**, edited by K. Binder (Springer-Verlag, Heidelberg, 1979)
- [22] Shiwei Zhang, J. Carlson, and J.E. Gubernatis, *Constrained Path Quantum Monte Carlo Method for Fermion Ground States*, Phys. Rev. Lett. **74**, 3652 (1995);
Shiwei Zhang, J. Carlson, and J.E. Gubernatis, *Constrained path Monte Carlo method for fermion ground states*, Phys. Rev. B **55**, 7464 (1997).
- [23] D.M. Ceperley, *Path integrals in the theory of condensed helium*, Rev. Mod. Phys. **67**, 279 (1995).
- [24] W.M.C. Foulkes, L. Mitas, R.J. Needs, and G. Rajagopal, *Quantum Monte Carlo simulations of solids*, Rev. Mod. Phys. **73**, 33 (2001).
- [25] R.H. Swendsen and J.-S. Wang, *Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations*, Phys. Rev. Lett. **58**, 86 (1987).
- [26] H.G. Evertz: *The loop algorithm*, Adv. Phys. **52** (2003).
- [27] D. Kandel and E. Domany, *General cluster Monte Carlo dynamics*, Phys. Rev. B **43**, 8539 (1991);
N. Kawashima and J. E. Gubernatis, *Generalizaiton of the Fortuin-Kasteleyn Transformation and Its Application to Quantum Spin Simulations*, J. Stat. Phys. **80** (1995).
- [28] P.W. Kasteleyn and C.M. Fortuin, J. Phys. Soc. Jpn. Suppl. **26**(Suppl.), 11 (1969);
C.M. Fortuin and P.W. Kasteleyn, *On the random-cluster model: I. Introduction and relation to other models*, Physica (Utrecht) **57**, 536 (1972).
- [29] J. Hoshen and R. Kopelman, *Percolation and cluster distribution. I. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm*, Phys. Rev. B **14**, 3438 (1976).

- [30] R.Brower, S. Chandrasekharan, and U.-W. Wiese, *Green's functions from quantum cluster algorithms*, Physica A **261**, 520 (1998).
- [31] A.W. Sandvik, *A generalization of Handscomb's quantum Monte Carlo scheme-application to the 1D Hubbard model*, J. Phys. A **25**, 3667 (1992).
- [32] O.F. Syljuasen, *Directed loop updates for quantum lattice models*, Phys. Rev. E **67**, 046701 (2003).
- [33] A.W. Sandvik, S. Daul, R.R.P. Singh, and D.J. Scalapino, *Striped Phase in a Quantum XY Model with Ring Exchange*, Phys. Rev. Lett. **89**, 247201 (2002).
- [34] F. Alet, S. Wessel, and M. Troyer, *Generalized directed loop method for quantum Monte Carlo simulations*, Phys. Rev. E **71**, 036706 (2005).
- [35] A.W. Sandvik, *Evidence for Deconfined Quantum Criticality in a Two-Dimensional Heisenberg Model with Four-Spin Interactions*, Phys. Rev. Lett. **98**, 227202 (2007);
A.W. Sandvik, *Continuous Quantum Phase Transition between an Antiferromagnet and a Valence-Bond Solid in Two Dimensions: Evidence for Logarithmic Corrections to Scaling*, Phys. Rev. Lett. **104**, 172201 (2010).
- [36] T. Senthil, A. Vishwanath, L. Balents, S. Sachdev, and M.P.A. Fisher, *Deconfined Quantum Critical Points*, Science **303**, 1490 (2004);
T. Senthil, L. Balents, S. Sachdev, A.Vishwanath, and M.P.A. Fisher, *Quantum criticality beyond the Landau-Ginzburg-Wilson paradigm*, Phys. Rev. B **70**, 144407 (2004).
- [37] S. Liang, B. Doucot, and P.W. Anderson, *Some New Variational Resonating-Valence-Bond-Type Wave Functions for the Spin-1/2 Antiferromagnetic Heisenberg Model on a Square Lattice*, Phys. Rev. Lett. **61**, 365 (1988);
S. Liang, *Monte Carlo calculations of the correlation functions for Heisenberg spin chains at T=0*, Phys. Rev. Lett. **64**, 1597 (1990);
S. Liang, *Existence of Néel order at T=0 in the spin-1/2 antiferromagnetic Heisenberg model on a square lattice*, Phys. Rev. B **42**, 6555 (1990).

-
- [38] A.W. Sandvik, *Ground State Projection of Quantum Spin Systems in the Valence-Bond Basis*, Phys. Rev. Lett. **95**, 207203 (2005).
 - [39] A.W. Sandvik and H.G. Evertz, *Loop updates for variational and projector quantum Monte Carlo simulations in the valence-bond basis*, Phys. Rev. B **82**, 024407 (2010).
 - [40] E.H. Lieb and D. Mattis, *Ordering Energy Levels of Interacting Spin Systems*, J. Math. Phys. (N.Y.) **3**, 749 (1962).
 - [41] W. Marshall, *Antiferromagnetism*, Proc. R. Soc. A **232**, 48 (1955).
 - [42] K.S.D. Beach and A.W. Sandvik, *Some formal results for the valence bond basis*, Nucl. Phys. B **750**, 142 (2006).
 - [43] J. Lou and A.W. Sandvik, *Variational ground states of two-dimensional antiferromagnets in the valence bond basis*, Phys. Rev. B **76**, 104432 (2007).
 - [44] A.W. Sandvik, K.S.D. Beach, *Monte Carlo Simulations of Quantum Spin Systems in the Valence Bond Basis*, arxiv:cond-mat/0704.1469v1.
 - [45] F. Alet, S. Capponi, N. Laflorencie, and M. Mambrini, *Valence Bond Entanglement Entropy*, Phys. Rev. Lett. **99**, 117204 (2007);
R.W. Chhajlany, P. Tomczak, and A. Wojcik, *Topological Estimator of Block Entanglement for Heisenberg Antiferromagnets*, Phys. Rev. Lett. **99**, 167204 (2007).
 - [46] K.S.D. Beach and A.W. Sandvik, *Valence Bond Solid Phases in a Cubic Antiferromagnet*, Phys. Rev. Lett. **99**, 047202 (2007).
 - [47] http://alps.comp-phys.org/mediawiki/index.php/Main_Page
 - [48] A.W. Sandvik, *Computational Studies of Quantum Spin Systems*, arxiv:cond-mat/1101.3281.
 - [49] S.R. White, *Density matrix formulation for quantum renormalization groups*, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992);

- U. Schollwock, *The density-matrix renormalization group*, Rev. Mod. Phys. **77**, 259 (2005).
- [50] G. Kotliar, S.Y. Savrasov, K. Haule, V.S. Oudovenko, O. Parcollet, and C.A. Marianetti, *Electronic structure calculations with dynamical mean-field theory*, Rev. Mod. Phys. **78**, 865 (2006);
E. Gull, A.J. Millis, A.I. Lichtenstein, A.N. Rubtsov, M. Troyer, and P. Werner, *Continuous-time Monte Carlo methods for quantum impurity models*, Rev. Mod. Phys. **83**, 349 (2011).
- [51] <http://physics.mines.edu/downloads/software/tebd/>
- [52] <http://course.zjnu.cn/qm/eWebEditor/uploadfile/2010629185853887.PDF>
- [53] http://woodpecker.org.cn/abyteofpython_cn/chinese/
- [54] F. Wang and D.P. Landau, *Efficient, Multiple-Range Random Walk Algorithm to Calculate the Density of States*, Phys. Rev. Lett. **86**, 2050 (2001);
F. Wang and D.P. Landau, *Determining the density of states for classical statistical models: A random walk algorithm to produce a flat histogram*, Phys. Rev. E **64**, 056101 (2001).

第四章 具有垂直单轴各向异性的分子磁体单层膜磁性研究

4.1 研究背景

因为在极低温下所具有的量子隧穿、干涉和相干效应，以及在磁存储和量子计算中的潜在应用，单分子纳米磁体已经成为当前的一个研究热点[1–8]。单分子磁体通常具有很大的自旋 S 以及强的单轴各向异性，自旋指向有一个易轴(easy axis)[8]，所以在低温下自旋要想翻转需要克服一个有效势垒 U_{eff} ，比如研究得很多的Mn₁₂单分子磁体{[Mn₁₂O₁₂(O₂CCH₂Br)₁₆(H₂O)₄] · 4CH₂Cl₂}具有自旋 $S=10$ ，其翻转势垒 U_{eff} 达到了74 K[8, 9]，而自旋 $S=12$ 的单分子磁体{Mn₆^{III}O₂(Et – sao)₆[O₂CPh(Me)₂]₂ · (EtOH)₆}具有更大的 U_{eff} ，为86.4 K[10]。

单分子磁体可以被合成为单个磁体，二聚物和其他团簇[1–5]，通过化学方法，还可以将其合成为三维晶体结构或二维层状结构[9–13]。这些结构的基本构筑单元就是单分子磁体，单分子磁体之间的相互作用通常是反铁磁作用，并且不太容易控制，导致要由单分子磁体构成一个稳定的铁磁体是比较困难的。然而最近有些小组已经在金和硅表面合成了由单分子磁体构成的单层铁磁膜[14–16]。虽然根据Mermin-Wagner理论，对于二维各向同性Heisenberg自旋模型不存在有限温度下的相变[17, 18]，但这项实验上的突破仍使我们相信由单分子磁体构成的二维规则格子可以形成理想的二维铁磁体。

在有足够的垂直单轴各向异性时，通过调节单分子磁体间的相互作用，由单分子磁体是可以构成稳定铁磁体的。单分子磁体可以看成一个大自旋，易轴方向垂直与二维自旋格子，可以将这种二维铁磁层状结构描述为具有单轴各向异性和相对较弱铁磁相互作用的Heisenberg模型。这种描述是合理和可靠的，因为自旋之间的偶极相互作用常约化为反铁磁作用并且自旋之间的相互作用可以通过选择合适的基底以及控制它们的距离来进行调节[19]。因为大的自旋值以及各向异性能，所以可以将模型视为一个经典模型[8–10]，然后我们通过蒙特卡洛方法来模拟了不同参数条件下体系的物理性质[20, 21]。我们的模拟结果证明了在实验室可控的参数条件下，由单分子磁体可以构成稳定的二维铁磁体。

4.2 自旋模型与模拟细节

单分子纳米磁体比如Mn₁₂有大的自旋，强的各向异性能，以及相对较弱的交换相互作用[8–10, 19]。当放在合适的基底上时，这些单分子磁体间可以具有相同的单轴各向异性和可调节的单分子磁体间的相互作用[14–16]。因此，这个二维铁磁体可以用如下的哈密顿量来描述，

$$H = -K \sum_i (S_i^z)^2 - \sum_{ij} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (4.1)$$

上式中 K 描述垂直于二维格子的单轴各向异性，易轴方向为 z 轴， \vec{S}_i 是在格点 i 的自旋， J_{ij} 是 \vec{S}_i 和 \vec{S}_j 之间的相互作用，这里我们主要考虑 $J_{ij} > 0$ 的铁磁情形，求和是对所有最近邻进行。因为 S 很大，我们要研究室是平衡态性质，所以可以将量子自旋算符 \vec{S}_i 视为一个经典矢量 $S\vec{s}_i$ ， \vec{s}_i 是一个单位矢量。

我们用蒙特卡洛方法研究这个模型的平衡态性质[20, 21]，在模拟过程中用到了Metropolis算法和团簇算法[22, 23]。我们取大小为 $L \times L$ 的格子，虽然单分子磁体之间最常见的是偶极相互作用，但是我们只考虑最近邻间的相互作用 $J_{ij}=J$ ，这样不失主要的物理。我们使用了周期边界条件，并令Boltzmann常数 k_B 为1，用 $D=K/J$ 来描述相对于交换相互作用，系统所具有的各向异性强度，这时温度单位可视为 JS^2 。经过测试，在100000个蒙特卡洛步(MCS)之后，系统就达到了热平衡。系统的平均磁化强度 M ，磁四极矩 U_4 ，比热 C_ν ，磁化率 χ 的统计方式如下，

$$\begin{cases} M = \langle |\vec{s}| \rangle \\ U_4 = 1 - \langle \vec{s}^4 \rangle / (3 \langle \vec{s} \rangle^2) \\ C_\nu = (\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2) / T^2 \\ \chi = (\langle \vec{s}^2 \rangle - \langle |\vec{s}| \rangle^2) / T \end{cases} \quad (4.2)$$

上式中 $\vec{s}=(1/L^2) \sum \vec{s}_i$ ， $\langle A \rangle$ 是物理量 A 的平均值。在热平衡后，每50000个蒙特卡洛步作为一个单元(bin)求一次各物理量的平均值，得到10个单元的结果后再求物理量的最终的平均值及误差[20, 21]。

4.3 模拟结果

图4.1中给出了在0.05至500的范围内16种 D 值所对应的平均磁化强度 M 关于温度 T 的函数曲线图。 $T=0$ 时，磁化强度 M 归一化为1，高温时磁化强度随 D 的增大而

增大，对给定 D 值的某条特定曲线有一个拐点，拐点位置随 D 的增大而向高温方向移动，意味着相变点 T_c 随 D 的增加而增大。为了更精确地确定相变点位置，我们用了不同 L 体系对应的 $U_4 - T$ 曲线的共同交点，这是目前获得精确相变温度值的最好方法[20, 21]。

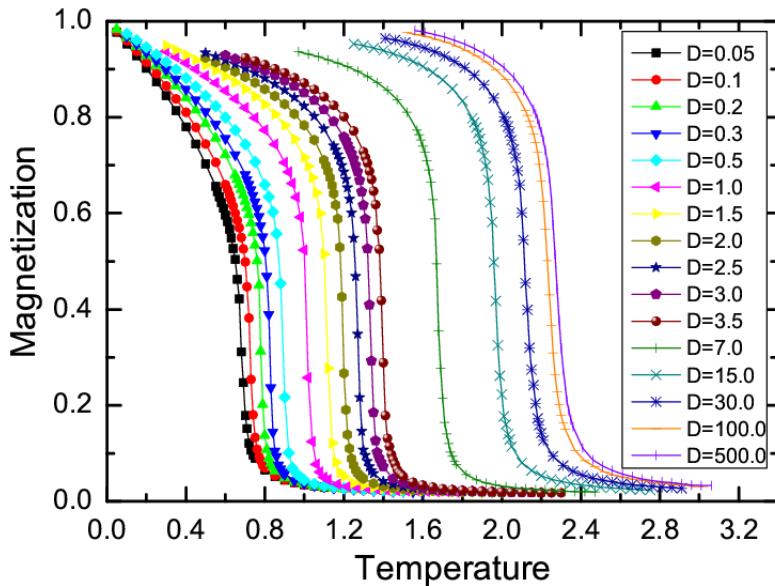


图 4.1 Normalized magnetization M as functions of temperature T (in JS^2)

图4.2中，我们给出了在 $D=7.0$ 时磁四极矩 U_4 ，比热 C_ν ，磁化率 χ 随温度的变化关系。可以看到8种不同尺寸的 $U_4 - T$ 曲线交于同一个点，其所对应的温度值即为 T_c ，从 C_ν 和 χ 的温度曲线图可以看到模拟到 $L=80$ 已经可以得到比较满意的结果。对于更大的 D 值，不同尺寸的 $U_4 - T$ 曲线都交于同一个点，并且模拟到 $L=80$ 也都可得到可靠的 $C_\nu - T$ 和 $\chi - T$ 曲线。

计算得到的 T_c 随 D 的变化关系如图4.3所示，红线是Ising极限[24, 25]，可以看到，随着 D 的增大，相变点逐渐收敛到Ising极限(约为2.269)。 $D=0$ 时，我们获得 $T_c=0$ ，这与由短程相互作用构成的二维自旋模型没有有限温度相变的结论是一致的[17, 18]，要想获得有限的 T_c ，一个非0的 D 值是必须的。

我们通过定义如下的量来衡量自旋矢量相对与易轴方向的偏离程度，

$$d_m = 1 - \langle (s^z)^2 \rangle / \langle \vec{s}^2 \rangle \quad (4.3)$$

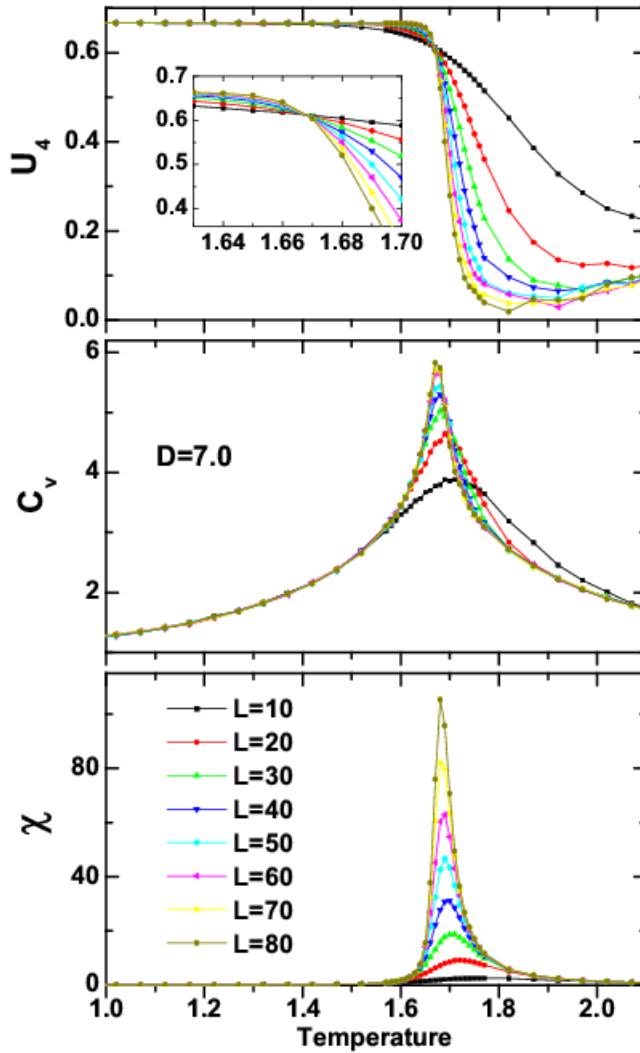
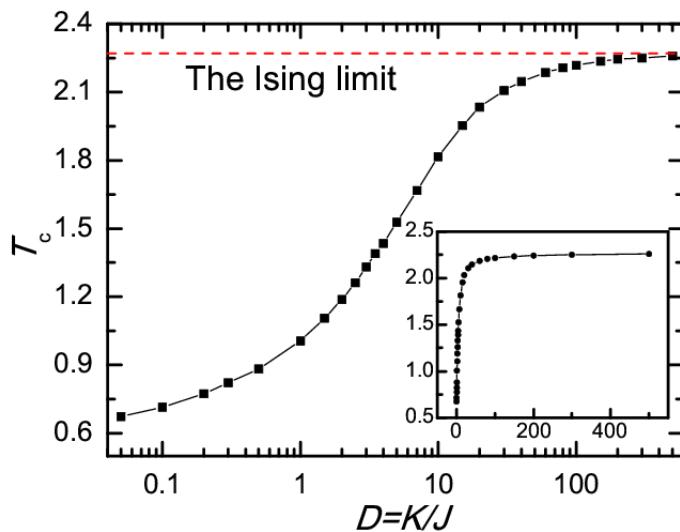
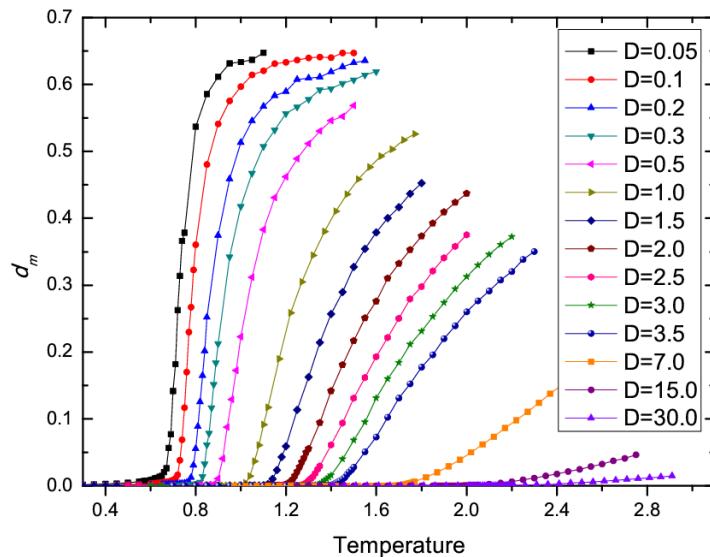


图 4.2 Simulated results of U_4 (top), C_ν (middle), and χ (bottom) as functions of temperature

$d_m=0$ 则意味着自旋沿着 $\pm z$ 轴方向。图4.4给出了对于不同 D 值的 $d_m(T)$ 关系。显然低温时 d_m 为0或者很小的值, 当 D 很小时, d_m 会由低温的接近于0上升到高温时对应于各向同性Heisenberg模型的 $2/3$, d_m 随 D 增加而减小, 在 $D > 100$ 时 d_m 几乎是0, 表明基本达到了 D 为无穷大时的Ising极限。

实验上自旋间相互作用是可以改变的, 甚至可以进行人为调节以达到某种特定目的[19], 这意味着 J 可以从几K变化到0, 考虑到方程4.1中的 K 可以接近于80K[10], 所以各向异性参数 D 可以达到10甚至更大, 这个参数区间所对应的相变温度 T_c 的范围是1.8-2.269K, 当 $K=80$ K时, 如果 $J=1$ K, 则 $T_c=2.2$ K, 如果 $J=8$ K, 则 T_c 为14.4K。因为二维铁磁体对应于大 D 的参数区域, 此时自旋相对易轴方向的偏

图 4.3 The D dependence of Curie temperature T_c 图 4.4 The temperature dependence of the deviation d_m of the spin vector from the easy axis

离 d_m 非常小，即使是在相变点位置也小于 0.001，在低温下可以视为 0，这样在强单轴各向异性情况下可以达到 Ising 极限，形成稳定的铁磁体以作为信息存储的媒介。

4.4 总结讨论

我们提出通过选择合适的基底以调节单分子磁体间的交换相互作用强度以及单轴各向异性强度，可以形成由单分子磁体构成的稳定的二维铁磁薄膜以用于信息存储。当分子磁体的自旋及各向异性都很大时，可以将它的自旋视为一个经典单位

矢量，我们的模拟结果显示在强各向异性情况下自旋对易轴方向的偏离小于0.1%，因而可以形成稳定的铁磁态。如果各向异性等于 Mn_{12} 所对应的各向异性能80K，则相变温度 T_c 约为15K，所以这样一种稳定的自旋系统具有应用在信息存储领域的前景。

参 考 文 献

- [1] W. Wernsdorfer, N. Aliaga-Alcalde, D.N. Hendrickson, and G. Christou, *Exchange-biased quantum tunnelling in a supramolecular dimer of single-molecule magnets*, Nature (London) **416**, 406 (2002).
- [2] W. Wernsdorfer and R. Sessoli, *Quantum Phase Interference and Parity Effects in Magnetic Molecular Clusters*, Science **284**, 133 (1999).
- [3] S. Hill, R.S. Edwards, N. Aliaga-Alcalde, and G. Christou, *Quantum Coherence in an Exchange-Coupled Dimer of Single-Molecule Magnets*, Science **302**, 1015 (2003).
- [4] C. Schlegel, J. van Slageren, M. Manoli, E.K. Brechin, and M. Dressel, *Direct Observation of Quantum Coherence in Single-Molecule Magnets*, Phys. Rev. Lett. **101**, 147203 (2008).
- [5] S. Bertaina, S. Gambarelli, T. Mitra, B. Tsukerblat, A. Mueller, and B. Barbara, *Quantum oscillations in a molecular magnet*, Nature (London) **453**, 203 (2008).
- [6] M.N. Leuenberger and D. Loss, *Quantum computing in molecular magnets*, Nature (London) **410**, 789 (2001).
- [7] L. Bogani and W. Wernsdorfer, *Molecular spintronics using single-molecule magnets*, Nature Mater. **7**, 179 (2008).
- [8] D. Gatteschi, R. Sessoli, and J. Villain, *Molecular Nanomagnets* (Oxford University Press, New York, 2006).
- [9] N.E. Chakov, S.-C. Lee, A.G. Harter, P.L. Kuhns, A.P. Reyes, S.O. Hill, N.S. Dalal, W. Wernsdorfer, K.A. Abboud, and G. Christou, *The Properties of the [Mn₁₂O₁₂(O₂CR)₁₆(H₂O)₄] Single-Molecule Magnets in Truly Axial Symmetry: [Mn₁₂O₁₂(O₂CCH₂Br)₁₆(H₂O)₄] · 4CH₂Cl₂*, J. Am. Chem. Soc. **128**, 6975 (2006).

- [10] C.J. Milios, A. Vinslava, W. Wernsdorfer, S. Moggach, S. Parsons, S.P. Perleps, G. Christou, and E.K. Brechin, *A Record Anisotropy Barrier for a Single-Molecule Magnet*, J. Am. Chem. Soc. **129**, 2754 (2007).
- [11] H. Miyasaka, K. Nakata, K. Sugiura, and R. Clerac, *A Three-Dimensional Ferri-magnet Composed of Mixed-Valence Mn₄ Clusters Linked by an {Mn[N(CN)₂]₆}⁴⁻ Unit*, Angew. Chem., Int. Ed. **43**, 707 (2004).
- [12] C. Coulon, R. Clerac, W. Wernsdorfer, T. Clin, and H. Miyasaka, *Direct Observation of Quantum Coherence in Single-Molecule Magnets*, Phys. Rev. Lett. **102**, 167204 (2009).
- [13] H. Miyasaka, K. Nakata, L. Lecren, C. Coulon, Y. Nakazawa, T. Fujisaki, K.-i. Sugiura, M. Yamashita, and R. Clerac, *Two-Dimensional Networks Based on Mn₄ Complex Linked by Dicyanamide Anion: From Single-Molecule Magnet to Classical Magnet Behavior*, J. Am. Chem. Soc. **128**, 3770 (2006).
- [14] B. Fleury, L. Catala, V. Huc, C. David, W.Z. Zhong, P. Jegou, L. Baraton, S. Palacin, P. Albouyd, and T. Mallah, *A new approach to grafting a monolayer of oriented Mn₁₂ nanomagnets on silicon*, Chem. Commun. (Cambridge) **2005**, 2020.
- [15] M. Cavallini, J. Gomez-Segura, D. Ruiz-Molina, M. Massi, C. Albonetti, C. Rovira, J. Veciana, and F. Biscarini, *Magnetic Information Storage on Polymers by Using Patterned Single-Molecule Magnets*, Angew. Chem., Ini. Ed. **44**, 888 (2005).
- [16] A. Naitabdi, J.P. Bucher, P. Gerbier, P. Rabu, and M. Drillon, *Self-Assembly and Magnetism of Mn₁₂ Nanomagnets on Native and Functionalized Gold Surfaces*, Adv. Mater. **17**, 1612 (2005).
- [17] N.D. Mermin and H. Wagner, *Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models*, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).
- [18] L.D. Landau and E.M. Lifshitz, *Statistical Physics* (Pergamon, London, 1959), Vol. 5, p. 482.

-
- [19] W. Wernsdorfer, S. Bhaduri, A. Vinslava, and G. Christou, *Landau-Zener tunneling in the presence of weak intermolecular interactions in a crystal of Mn₄ single-molecule magnets*, Phys. Rev. B **72**, 214429 (2005).
 - [20] K. Binder and D.W. Heermann, *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics* (Springer, Berlin, 2002).
 - [21] K. Binder, *Finite size scaling analysis of ising model block distribution functions*, Z. Phys. B **43**, 119 (1981).
 - [22] N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.M. Teller, and E. Teller, *Equations of State Calculations by Fast Computing Machines*, J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953).
 - [23] R.H. Swendsen and J.-S. Wang, *Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations*, Phys. Rev. Lett. **58**, 86 (1987).
 - [24] L. Onsager, *Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition*, Phys. Rev. **65**, 117 (1944).
 - [25] E. Ising, *Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus*, Z. Phys. **31**, 253 (1925).

第五章 二维交错二聚物Heisenberg模型的量子蒙特卡洛研究

5.1 研究背景

自从二十多年前铜氧化物高温超导体[1]的发现，人们对二维自旋 $S=1/2$ 的反铁磁Heisenberg模型已经进行了广泛地研究。作为未掺杂铜氧化物高温超导体的CuO₂平面的一个合适模型，二维反铁磁Heisenberg模型已经成为一个很好的研究强关联系统的出发点，尤其是在研究量子相变领域[2]，它提供了一个很好的模版。通过引入由几何结构或竞争机制所带来的阻挫，这些模型会经历一个从Neel态到自旋液体[3]的量子相变，比如掺杂铜氧化物会使其成为共振价键态(RVB)[4]。对于那些有不同的局域相互作用但不带来阻挫的模型，这些局域相互作用的竞争会导致一个价键态固体(VBS)形式的基态，所谓价键态固体就是自旋两两配对形成自旋单态，而这些配对的单态又以某种特定的方式进行排列从而破坏了格子的平移对称性[5]。人们对这些Dimerized Heisenberg模型中的VBS-Neel相变已经进行了广泛地研究，通常这种类型的相变通过对应到一个非线性 σ 模型[6]，从而可以用三维Heisenberg O(3)普适类来很好地描述。但是如果VBS基态是由各向同性从而保持了格子各种对称性的相互作用之间的竞争所形成，则在所对应的非线性 σ 模型中Berry相将是相关的(relevant)的，这时就会导致所谓的退禁闭量子临界现象(DQCP)[7]，这种退禁闭量子临界现象违背了通常的Landau-Ginzburg-Wilson规范(LGW)[8, 9]。有许多理论和数值的工作[10–15]试图证实这种退禁闭临界现象理论的可靠性，其中有些工作提出了其他的看法，显示了这一领域仍然具有极大的争议性。

尽管二维交错J-J'模型与自旋梯子模型十分相似，自旋梯子模型是一个很好地符合了LGW规范的模型[16]，而交错J-J'模型则被认为是一种可能存在退禁闭临界现象的模型[17]，具有与通常三维Heisenberg普适类不同的临界指数。Wenzel对于交错J-J'模型的量子蒙特卡洛研究[18]确实给出了意外的临界指数，暗示由J和J'的交错排列方式可能对临界点具有非常规的贡献。然而，这个看起来非传统的相变点可能只是由一个立方不相关(cubic irrelevant)项所引起的[19]，所以才导致了Wenzel工作中得到的临界指数 $\nu=0.689(5)$ ，并且Jiang后来的模拟工作也表明[20, 21]，对正方以及六角格子的交错J-J'模型，非传统的 $\nu=0.689(5)$ 可以利用模拟过程中的大部分数据点，并且在拟合时考虑sub-leading项而得到，但如果只用大尺寸体系的

数据点，拟合时只考虑leading项就可以得到与通常O(3)普适类一致的 ν 值，目前对O(3)普适类通过蒙特卡洛模拟方法得到的最精确的 $\nu=0.7112(5)$ [22]。

为了对这个问题有更深入地了解，我们模拟了一类拓展的具有空间排列各向异性的Heisenberg类二聚物模型，我们称之为 $J_0-J_1-J_2$ 模型，如图5.1。这个模型的哈密顿量形式如下

$$H = J_0 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i \cdot S_j + J_1 \sum_{\langle i,j' \rangle'} S_i \cdot S_j + J_2 \sum_{\langle i,j \rangle''} S_i \cdot S_j \quad (5.1)$$

上式中的 J_0 , J_1 , J_2 是如图5.1(a)所示的各种反铁磁耦合作用。当 $J_1/J_0=1$ 时，这个模型就是正方格子上的 $J-J'$ 模型5.1(b)， J_0 和 J_2 分别对应此时的 J 和 J' 。当 $J_1/J_0=0$ 时，这个模型就转化为六角格子上的 $J-J'$ 模型5.1(c)。已经有数值模拟工作对这两个模型进行模拟[18, 20, 21]，但是关于这种二维格子上的耦合作用的交错排列是否会导致非传统相变的问题仍然没有一个明确的答案。我们用量子蒙特卡洛方法研究了 J_1/J_0 在0到1的范围内的所有相变点 $\alpha_c(\alpha=J_2/J_0)$ 的性质，得到了所有相变点的精确位置，并且通过对不同物理量进行有限尺寸标度分析，我们得到了一些临界指数的值以与他人的工作进行对比。

5.2 计算细节

本章的模拟工作是利用ALPS软件包[23]中的环算法[24]来进行的。为了确定量子临界点，我们计算了一些标准的物理量如交错磁化强度(staggered magnetization) m_s ，还有它所对应的磁四极矩 Q_2 ，以及自旋刚度 ρ_s ，这些物理量的定义如方程5.2、5.3、5.4所示，方程5.4中的 W_x 和 W_y 分别表示沿 x 和 y 方向的绕数。

$$m_s = \frac{1}{N} \sum_i^N (-1)^{x_i+y_i} S_i \quad (5.2)$$

$$Q_2 = \frac{\langle (M_s^z)^4 \rangle}{\langle (M_s^z)^2 \rangle^2} \quad (5.3)$$

$$\rho_s = \frac{3}{4\beta N} \langle W_x^2 + W_y^2 \rangle \quad (5.4)$$

根据重整化群理论，在临界点附近存在如下的标度形式

$$\mathcal{O}_L(t) = L^{\lambda/\nu} [1 + c(tL^{1/\nu})L^{-\omega}] g_{\mathcal{O}}(tL^{1/\nu}) \quad (5.5)$$

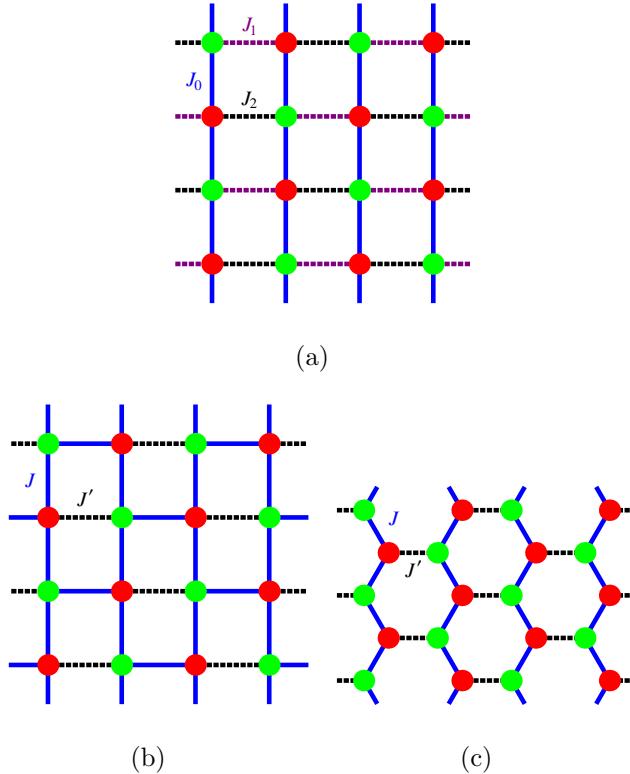


图 5.1 (a) The J_0 - J_1 - J_2 model simulated in this study. (b) For $J_1/J_0 = 1$, this model becomes the staggered J - J' model on square lattice. (c) For $J_1/J_0 = 1$, this model becomes the staggered J - J' model on honeycomb lattice.

上式中 t 表示约化的耦合强度 $t = (\alpha - \alpha_c)/\alpha_c$, L 表征体系尺寸。 ν 是衡量关联长度的临界指数, λ 是物理量 \mathcal{O} 所对应的临界指数, 对于物理量 Q_2 和 $\rho_s L$, λ 等于 0, 而对于 $|m_s^z|$ 和 $L^2 m_s^2$, λ/ν 应该分别替换为 $-\beta/\nu$ 以及 $d - z - \eta$ 。 $d = 2$ 表示我们模拟的是二维格子, 并且我们假设衡量虚时关联的临界指数 z 为 1。 $c(tL^{1/\nu})L^{-\omega}$ 是 sub-leading 修正项, ω 是 confluent 修正指数, $g_{\mathcal{O}}(tL^{1/\nu})$ 是普适标度函数。实际在相变点附近, $c(x)(x = tL^{1/\nu})$ 可以用一个常数 c 来近似, 于是得到如下的常见的标度形式

$$\mathcal{O}_L(t) = L^{\lambda/\nu}(1 + cL^{-\omega})g_{\mathcal{O}}(x) \quad (5.6)$$

大部分物理量所对应的标度形式都可以用方程 5.6 来很好地描述, 而为了更好地描述自旋刚度, 最好再引入一个偏移修正项 [25, 26], 从而标度形式变为一种推广的形式

$$\mathcal{O}_L(t) = L^{\lambda/\nu}(1 + cL^{-\omega})g_{\mathcal{O}}(x') \quad (5.7)$$

上式中 $x' = tL^{1/\nu} + dL^{-\phi/\nu}$, 这里的 d 与 c 都不是普适的, 而应该视为拟合时的参数。

在临界点附近，解析的普适函数 $g_O(x)$ 可以进行Taylor展开，我们一直展开到了四阶从而得到用来进行拟合和做数据坍缩时的标度形式

$$\mathcal{O}_L(t) = L^{\lambda/\nu}(1 + cL^{-\omega})(g_0 + g_1x + g_2x^2 + g_3x^3 + g_4x^4 + \dots) \quad (5.8)$$

对 $g_O(x')$ 也可以做同样的展开以进行拟合。

5.3 计算结果分析

对每个固定的 J_1/J_0 值所对应的模型，我们都模拟了从 $L = 10$ 到 $L = 80$ 共16中不同尺寸的体系，虽然通过磁化率的峰值可以近似确定相变点的范围，但是更精确地确定相变点位置的方法还是要依赖于各物理量在相变点的标度形式，一种很好的办法是利用不同尺寸 L 和 $2L$ 所对应的 Q_2 或者 $\rho_s L$ 等物理量的交点 $\alpha_c(L, 2L)$ 来确定相变点 α_c [27]， $\alpha_c(L, 2L)$ 具有如下形式

$$\alpha_c(L, 2L) = \alpha_c + \frac{b}{L^{1/\nu+\omega}} \quad (5.9)$$

图5.2给出了模拟出来的在 $J_1/J_0 = 0.6$ 时的 Q_2 和 $\rho_s L$ 随 α 的变化关系，以及利用这两个物理量和方程5.9的形式拟合出来的 $\alpha_c(L, 2L)$ 与 $1/L$ 的曲线，得到的相变点 α_c 为2.1904(4)，通过这种方式得到的在 $J_1/J_0 = 1$ 时所对应的正方格子交错反铁磁Heisenberg模型的相变点和在 $J_1/J_0 = 0$ 时所对应的六角格子交错反铁磁Heisenberg模型的相变点分别为2.5198(3)和1.7355(2)，与Wenzel以及Jiang所得到的相变点是非常一致的，confluent修正项使得在相变点对不同尺寸 L 的 Q_2 、 $\rho_s L$ 并不严格相交于一点，而是随着 L 慢慢趋近与它们的临界值。

在根据方程5.8对磁四极矩 Q_2 (Binder cumulant)进行拟合时，我们发现如果对所有尺寸的数据进行拟合，得到的 ν 值会稍微偏小一点，在0.7左右，如果只对尺寸稍大一点的数据进行拟合，得到的 ν 值会增大一些，有向 $O(3)$ 普适类的 $\nu = 0.7112(2)$ 靠近的趋势，并且在体系足够大时，不论考虑confluent修正项与否，拟合得到的结果是一样的，所以我们认为这时拟合得到的结果是可靠的。而对自旋刚度 $\rho_s L$ 进行拟合时，虽然像 Q_2 一样如果拟合稍大体系的数据得到的 ν 值也会有所增大，但是趋势并不明显，并且对所模拟的尺寸，要使拟合过程收敛必须考虑confluent修正项，对有些情况还需要考虑shift修正项才能保证收敛。所有 J_1/J_0 从0到1的情况下，由方程5.9得到的相变点和根据 Q_2 和 $\rho_s L$ 拟合得到的相变点以及 ν 值如表5.1所示，其

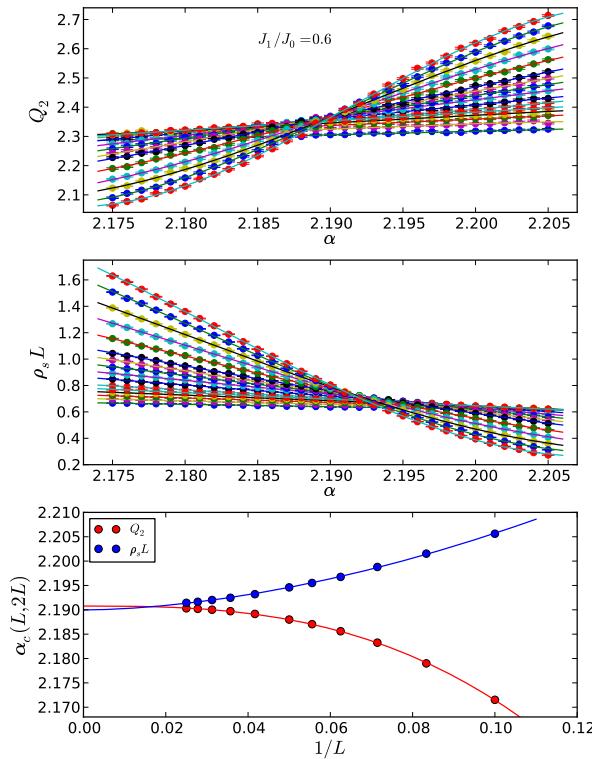


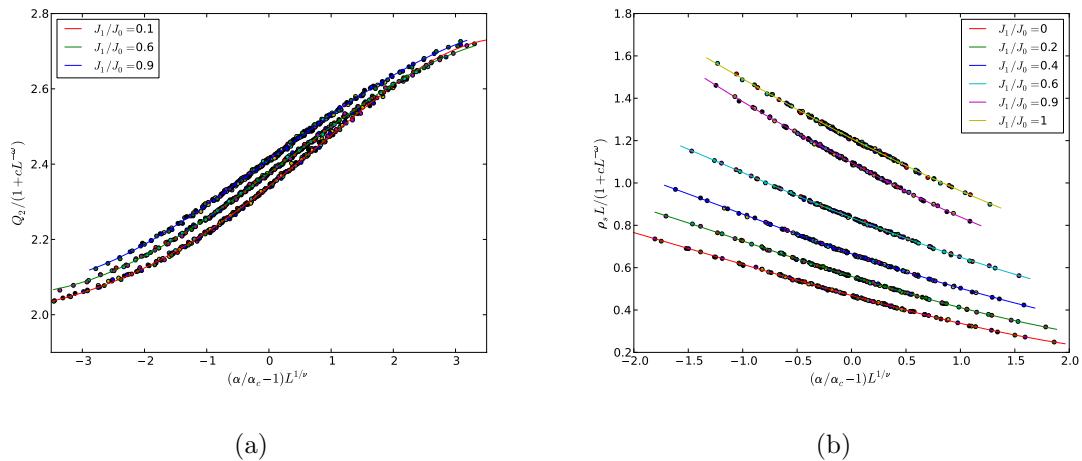
图 5.2 The Binder cumulant Q_2 (top) and the multiplication of spin stiffness with lattice size $\rho_s L$ (middle) for various lattice sizes from $L=10$ to $L=80$ while J_1/J_0 is set to be 0.6, the lines are the fitting results with polynomial form expanded up to 8th order. Scaling of crossing points used to extract the critical coupling α_c (bottom), the lines are the fitting result according to Equ.(5.9).

中 L_{min} 表示拟合用数据的最小尺寸，可以看到各种方法得到的相变点是一致的(除了 $J_1/J_0 = 0.8$ 之外)，由 Q_2 拟合得到的 ν 值与 $O(3)$ 普适类一致，然而由 $\rho_s L$ 拟合得到的 ν 值却与 Wenzel 得到的结果一致，利用各自的拟合结果对 Q_2 和 $\rho_s L$ 所做的数据坍缩如图 5.3 所示，可以看到虽然 Q_2 和 $\rho_s L$ 的拟合结果互相不一致，但各自的数据坍缩图仍然是令人满意的，文献[21]指出的整个体系进行平均之后的 $\rho_s L$ 的 confluent 修正项很大可能是造成这种不一致的原因，考虑到各向异性，沿某一特定方向上的 $\rho_s L$ 的修正会比较小，对沿这个方向上的 $\rho_s L$ 进行拟合或许可以得到一致的符合 $O(3)$ 普适类的结果，在相变点的 $Q_2(\alpha_c)$ 值在 $J_1/J_0 = 1$ 时在 2.41 左右，到 $J_1/J_0 = 0$ 时降为 2.33 左右。

为了得到 β/ν 以及 $d - z - \eta$ 的值，我们做了临界点上的不同尺寸的 $|m_s^z|$ 以及 $L^2 m_s^2$ 关于 L 的对数关系图，如图 5.4 所示，我们对这些拟合出来的直线做了一些垂

表 5.1 Fitting results of α_c and ν

J_1/J_0	α_c from Equ.5.9	fitting results of Q_2			fitting result of $\rho_s L$		
		L_{min}	α_c	ν	L_{min}	α_c	ν
0.0	1.7355(2)	24	1.7357(3)	0.712	28	1.7358(3)	0.680
0.1	1.8067(3)	28	1.8070(3)	0.708	36	1.8065(4)	0.697
0.2	1.8802(2)	28	1.8804(3)	0.707	28	1.8804(3)	0.687
0.3	1.9553(3)	28	1.9555(2)	0.707	28	1.9553(3)	0.691
0.4	2.0326(3)	32	2.0326(2)	0.711	28	2.0326(2)	0.687
0.5	2.1110(3)	24	2.1108(3)	0.705	24	2.1106(4)	0.688
0.6	2.1904(4)	28	2.1904(3)	0.710	24	2.1904(2)	0.685
0.7	2.2715(2)	28	2.2713(2)	0.706	28	2.2714(2)	0.687
0.8	2.3531(4)	28	2.3532(3)	0.701	28	2.3525(5)	0.693
0.9	2.4358(2)	24	2.4360(3)	0.711	32	2.4358(2)	0.701
1.0	2.5198(4)	40	2.5196(3)	0.705	24	2.5194(2)	0.689

**图 5.3** Data collapsing of Q_2 (a) and $\rho_s L$ (b), the lines are the fitting results of the universal functions.

直方向的偏移以让不同尺寸的拟合直线能够分开，可以看到在整个范围内 β/ν 基本在0.54到0.55之间， $1-\eta$ 范围在0.905到0.92之间，并且在 $J_1/J_0 = 1$ 时我们得到的结果与Wenzel得到的结果非常一致，通常的O(3)普适类情况下 β/ν 为0.518[18, 22]， $d-z-\eta$ 为0.971[18]，所以从这两个临界指数来看，这一类模型是否属于O(3)普适类仍然需要更多工作来进行检验。

5.4 总结讨论

我们利用量子蒙特卡洛方法研究了一类二维交错反铁磁Heisenberg类模型的VBS-Neel相变点的性质，得到相变点的精确位置，并通过各种标度形式做标度分析得到了临界指数 ν 、 β/ν 以及 $d-z-\eta$ 的值，我们发现，在对 Q_2 进行拟合时利用大尺寸体系的数据可以得到符合O(3)普适类的 ν 值，然而由 $\rho_s L$ 拟合得到的 ν 值以及由 $|m_s^z|$ 和 $L^2 m_s^2$ 得到的 β/ν 和 $d-z-\eta$ 却显示这一类交错模型无法用O(3)普适类描述，也许考虑到各向异性，只对沿某一方向上的confluent修正项较小的 $\rho_s L$ 进行拟合能够得到符合O(3)普适类的 ν 值，而 β/ν 以及 $d-z-\eta$ 与O(3)普适类的偏离仍然需要更多的解释，或许与立方不相关(cubic irrelevant)项有关系。总的来说，对这一类模型中耦合作用的交错排列方式是否会导致非传统的相变仍然需要更多的工作来进行探讨。

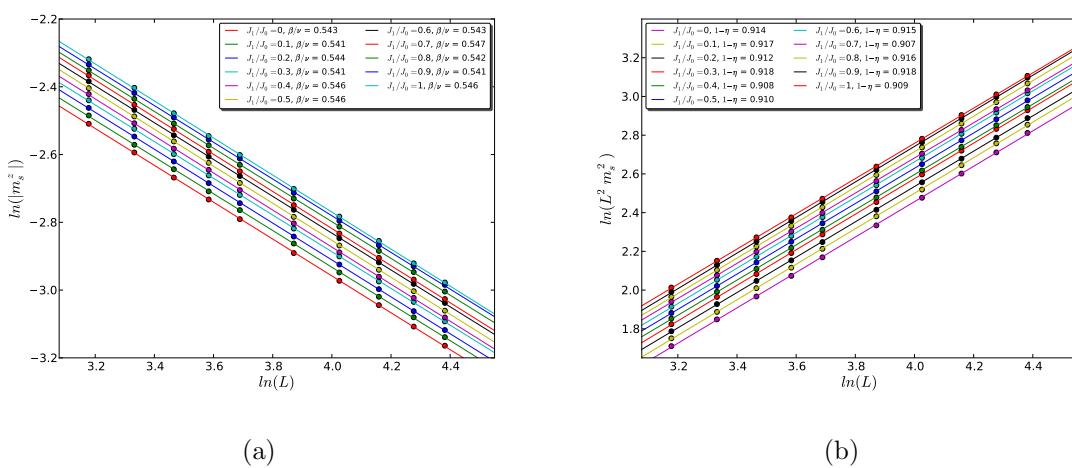


图 5.4 Extract values of β/ν and $d-z-\eta$.

参 考 文 献

- [1] E. Manousakis, *The spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet on a square lattice and its application to the cuprous oxides*, Rev. Mod. Phys. **63**, 1 (1991).
- [2] S. Sachdev, **Quantum Phase Transitions** (Cambridge University Press, Cambridge, 1999).
- [3] L. Balents, *Spin liquids in frustrated magnets*, Nature **464**, 199 (2010).
- [4] P.W. Anderson, *The Resonating Valence Bond State in La_2CuO_4 and Superconductivity*, Science **235**, 1196 (1987).
- [5] N. Read and Subir Sachdev, *Valence-bond and spin-Peierls ground states of low-dimensional quantum antiferromagnets*, Phys. Rev. Lett. **62**, 1694 (1989);
N. Read and Subir Sachdev, *Spin-Peierls, valence-bond solid, and Neel ground states of low-dimensional quantum antiferromagnets*, Phys. Rev. B **42**, 4568 (1990).
- [6] F.D.M. Haldane, *$O(3)$ Nonlinear σ Model and the Topological Distinction between Integer- and Half-Integer-Spin Antiferromagnets in Two Dimensions*, Phys. Rev. Lett. **61**, 1029 (1988);
S. Chakravarty, B.I. Halprin, and D.R. Nelson, *Two-dimensional quantum Heisenberg antiferromagnet at low temperatures*, Phys. Rev. B **39**, 2344 (1989).
- [7] T. Senthil, A. Vishwanath, L. Balents, S. Sachdev, and M.P.A. Fisher, *Deconfined Quantum Critical Points*, Science **303**, 1490 (2004);
T. Senthil, L. Balents, S. Sachdev, A. Vishwanath, and M.P.A. Fisher, *Quantum criticality beyond the Landau-Ginzburg-Wilson paradigm*, Phys. Rev. B **70**, 144407 (2004).
- [8] L.D. Landau, E.M. Lifshitz, E.M. Pitaevskii, *Statistical Physics* (Butterworth-Heinemann, New York, 1999).

- [9] K.G. Wilson, J. Kogut, *The renormalization group and the ϵ expansion*, Phys.Rep. **12**, 75 (1974).
- [10] M. Levin and T. Senthil, *Deconfined quantum criticality and Neel order via dimer disorder*, Phys. Rev. B **70**, 220403(R) (2004).
- [11] O.I. Motrunich and A. Vishwanath, *Emergent photons and transitions in the $O(3)$ sigma model with hedgehog suppression*, Phys. Rev. B **70**, 075104 (2004);
O.I. Motrunich and A. Vishwanath *Comparative study of Higgs transition in one-component and two-component lattice superconductor models*, arXiv:0805.1494.
- [12] A.W. Sandvik, *Evidence for Deconfined Quantum Criticality in a Two-Dimensional Heisenberg Model with Four-Spin Interactions*, Phys. Rev. Lett. **98**, 227202 (2007);
A.W. Sandvik, *Continuous Quantum Phase Transition between an Antiferromagnet and a Valence-Bond Solid in Two Dimensions: Evidence for Logarithmic Corrections to Scaling*, Phys. Rev. Lett. **104**, 177201 (2010).
- [13] F.-J. Jiang, M. Nyfeler, S. Chandrasekharan, and U.-J. Wiese, *From an antiferromagnet to a valence bond solid: evidence for a first-order phase transition*, J. Stat. Mech. (2008) P02009.
- [14] A.B. Kuklov, M. Matsumoto, N.V. Prokof'ev, B.V. Svistunov, and M. Troyer, *Deconfined Criticality: Generic First-Order Transition in the $SU(2)$ Symmetry Case*, Phys. Rev. Lett. **101**, 050405 (2008)
- [15] S. Kragset, E. Smorgrav, J. Hove, F.S. Nogueira, and A. Sudbo, *First-Order Phase Transition in Easy-Plane Quantum Antiferromagnets*, Phys. Rev. Lett. **97**, 247201 (2006);
F.S. Nogueira, S. Kragset, and A. Sudbo, *Quantum critical scaling behavior of deconfined spinons*, Phys. Rev. B **76**, 220403(R) (2007).
- [16] T. Senthil, L. Balents, S. Sachdev, A. Vishwanath. and M.P.A. Fisher, *Deconfined Criticality Critically Defined*, J. Phys. Soc. Jpn. **74**, 1 (2005)

- [17] D. Yoshioka, G. Arakawa, I. Ichinose, and T. Matsui, *Neel-dimer transition in an antiferromagnetic Heisenberg model and deconfinement of spinons at the critical point*, Phys. Rev. B **70**, 174407 (2004);
S. Takashima, I. Ichinose, and T. Matsui, *Deconfinement of spinons on critical points: Multiflavor $\text{CP}^1 + \text{U}(1)$ lattice gauge theory in three dimensions*, Phys. Rev. B **73**, 075119 (2006).
- [18] S. Wenzel, L. Bogacz, and W. Janke, *Evidence for an Unconventional Universality Class from a Two-Dimensional Dimerized Quantum Heisenberg Model*, Phys. Rev. Lett. **101**, 127202 (2008).
- [19] L. Fritz, R.L. Doretto, S. Wessel, S. Wenzel, S. Burdin, and M. Vojta, *Cubic interactions and quantum criticality in dimerized antiferromagnets*, Phys. Rev. B **83**, 174416 (2011).
- [20] F.-J. Jiang and U. Gerber, *Subtlety of determining the critical exponent ν of the spin-1/2 Heisenberg model with a spatially staggered anisotropy on the honeycomb lattice*, J. Stat. Mech. (2009) P09016.
- [21] F.-J. Jiang, *Monte Carlo simulations of an unconventional phase transition for a two-dimensional dimerized quantum Heisenberg model*, Phys. Rev. B **85**, 014414 (2012).
- [22] M. Campostrini, M. hasenbusch, A. Pelissetto, P. Rossi, and E. Vicari, *Critical exponents and equation of state of the three-dimensional Heisenberg universality class*, Phys. Rev. B **65**, 144520 (2002).
- [23] B. Bauer *et al.*, *The ALPS project release 2.0: open source software for strongly correlated systems*, J. Stat. Mech. (2011) P05001.
- [24] H.G. Evertz, *The Loop Algorithm*, Adv.Phys. **52**, 1 (2003);
N.Kawashima and K. Harada, *Recent Developments of World-Line Monte Carlo Methods*, J. Phys. Soc. Jpn. **73**, 1379 (2004).

- [25] L. Wang, K.S.D. Beach, and A.W. Sandvik, *High-precision finite-size scaling analysis of the quantum-critical point of $S=1/2$ Heisenberg antiferromagnetic bilayers*, Phys. Rev. B **73**, 014431 (2006).
- [26] S. Wenzel and W. Janke, *Comprehensive quantum Monte Carlo study of the quantum critical points in planar dimerized/quadrumerized Heisenberg models*, Phys. Rev. B **79**, 014410 (2009).
- [27] K. Binder, *Finite Size Scaling Analysis of Ising Model Block Distribution Functions*, Z. Phys. B: Condens. Matter **43**, 119 (1981).

攻读博士学位期间的研究成果

1. **Zheng Rui** and Liu Bang-Gui, *Stable two-dimensional ferromagnets made of regular single-layered lattices of single-molecule nanomagnets with perpendicular anisotropy*, *J. Appl. Phys.* 106, 054316 (2009).
2. **Zheng Rui** and Liu Bang-Gui, *Quantum Monte Carlo study of the phase transition for a generalized Two-Dimensional Staggered Dimerized Heisenberg Model*, in preparation.

致 谢

感谢我的家人，不论是高潮还是低谷，你们总是一如继往地相信我、鼓励我、鞭促我，你们的爱永远是我坚强的后盾，时刻提醒着我要不断学习进取，做一个勇敢的人。

感谢导师刘邦贵研究员对我的指导与帮助，刘老师严谨的工作态度、深厚的理论功底、敏锐的科研眼光、乐观的生活态度都使我收益非浅，这些都是我日后工作、科研的宝贵财富。

感谢实验室的师兄师姐师弟师妹们这几年对我的关心和帮助，刘贵斌严谨的思维方式、高超的计算机水平，李永峰乐观豁达的处世态度、风趣幽默的谈话方式，郭三栋的大智若愚、憨厚淳朴，还有与朱丽芳、赵永红、石丽洁、刘永、龚赛、李军、孔令伟、文豪华、吴志勇、陈鹏相处的点点滴滴，都是我珍藏于心的回忆。感谢王钊胜和胜献雷，和你们的君子之交让我学习到了优雅从容的生活理念，以及专业的学习态度。感谢张银寒，和你一起讨论问题，不亦快哉。感谢周建辉，你的学习激情始终让我钦佩不已。感谢一帮球友们，谢世勇、王强、郭裕、张健敏、刘阳、朱国宝、王志宙、吴贤新...，和你们在球场上厮杀是我最大的乐趣之一。

感谢在百忙之中评阅论文的各位专家、教授！

郑睿

2012 年 5 月

于中国科学院物理研究所