



# Question

1. 编写程序：计算正方格点上自旋1/2的反铁磁Heisenberg模型的自旋算符的期望值。  
将你得到的结果和quantum Monte Carlo 得到的结果进行比较， quantum Monte Carlo的结果需要自行查找。
2. 写出你的详细思路并对程序进行注释。
3. 本题满分10分，注意作业截止时间。

## 理论基础

### Quantum Monte Carlo

This part is the results from an article<sup>[1]</sup>——Finite-size scaling of the ground-state parameters of the two-dimensional Heisenberg model, I'll compare my answer with its.

In this article, TABLE III gives some parameters of the ground state and FIG 6 gives the ground-energy and the L's relation, just as fellows:

Parameters	Value
Ground state energy $E$	-0.669437(5)
Sublattice magnetization $M$	0.3070(3)
Spin stiffness $\rho_s$	0.175(2)
Perpendicular susceptibility $\chi_{\perp}$	0.0625(9)
Spin-wave velocity $c$	1.673(7)
Leading size correction $e_3$	-2.405(10)
Subleading size correction $e_4$	4.00(6)
Size correction $m_1$	0.560(6)
Size correction $m_2$	1.08(5)

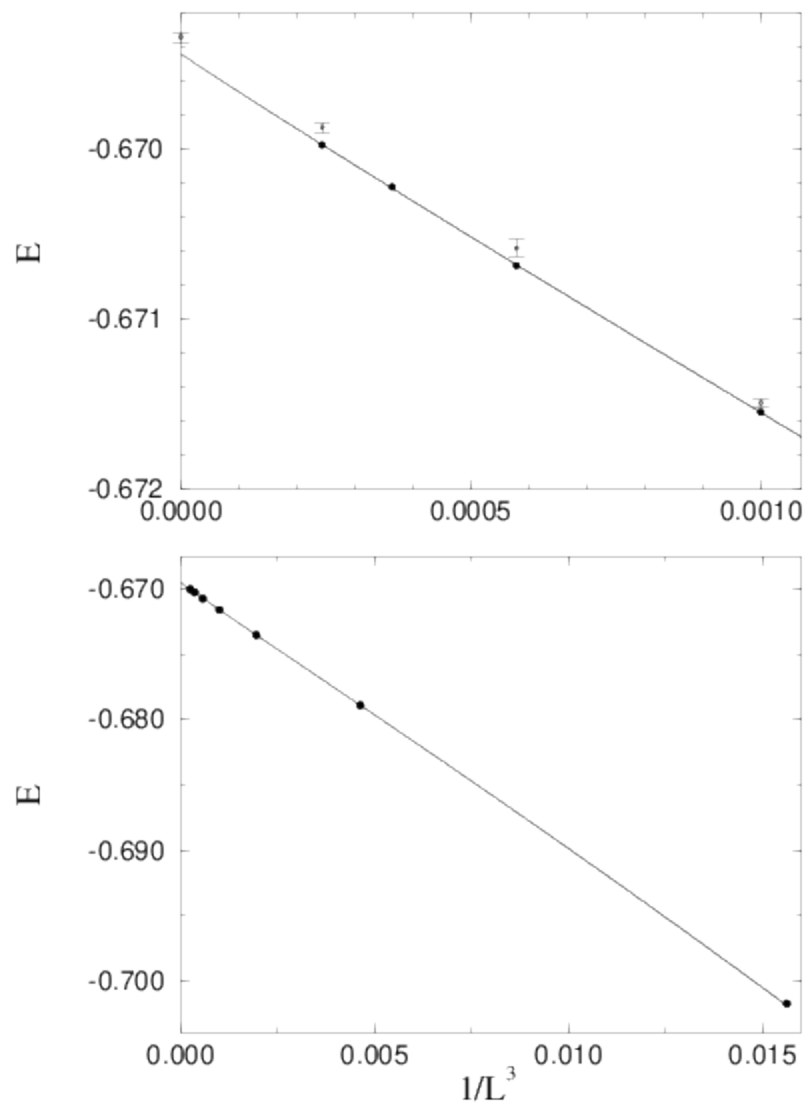


Fig. 6. A. W. Sandvik

But the  $M$  this article gives is very complex, it's divided into two types:

$$\begin{aligned}
M_1^2(L) &= 3S(\pi, \pi)/L^2 \\
M_1^2(L) &= M^2 + \frac{m_1}{L} + \frac{m_2}{L^2} + \frac{m_3}{L^3} \\
M_2^2(L) &= 3C(L/2, L/2) \\
M_2^2(L) &= M^2 + \frac{n_1}{L} + \frac{n_2}{L^2} + \frac{n_3}{L^3}
\end{aligned}$$

where has:

$$\begin{aligned}
|\alpha(p)\rangle &= \prod_{i=1}^p \hat{H}_{a_i, b_i} |\alpha\rangle, \quad |\alpha(0)\rangle = |\alpha\rangle \\
S_i^z[p] &= \langle \alpha(p) | S_i^z | \alpha(p) \rangle \\
C(i, j) &= \left\langle \frac{1}{n+1} \sum_{p=0}^n S_i^z[p] S_j^z[p] \right\rangle \\
S(\pi, \pi) &= \frac{1}{N} \sum_{i,j} (-1)^{x_j - x_i + y_j - y_i} C(i, j)
\end{aligned}$$

I can't fully understand these, so I find another definition in NTNU johnof's personal webpage<sup>[2]</sup>:

Let us next investigate the amount of magnetic order in the system. Thus we need to identify an order parameter for antiferromagnetic order. Note that the magnetization  $M = (1/N) \sum_i \langle \mathbf{S}_i \rangle$  can not be used since it is zero in the presence of antiferromagnetic order, because the two sublattices give equal-magnitude but opposite-sign contributions to  $M$ . Instead the natural order parameter is the so-called sublattice magnetization, defined by averaging  $\langle \mathbf{S}_i \rangle$  only over the sites of one of the two sublattices. Without loss of generality, let's pick sublattice A, where the putative ordering is in the z direction. The magnitude of the sublattice magnetization is thus :

$$M_A = \frac{1}{N_A} \sum_{j \in A} \langle S_j^z \rangle$$

I'll use this formula to try to calculate  $M$ .

# mean-field method

首先，需要明确的是，我们一下的讨论完全是基于自旋为1/2的情况来的；因此，需要明确下述所有具体公式的适用范围。

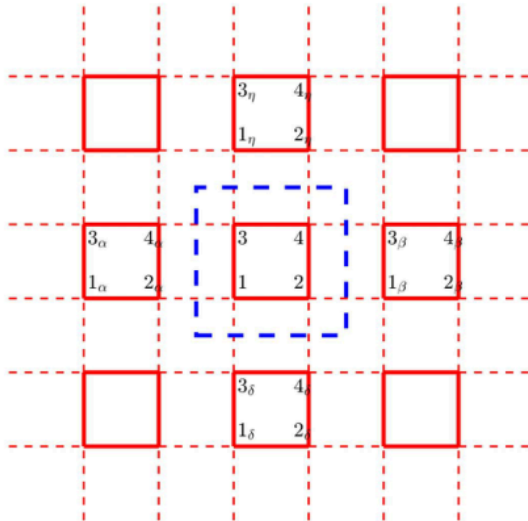
无论对于哪个粒子，均规定其自旋向上为第一个状态，则有：

$$S^x = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad S^y = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad S^z = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

下面是平均场近似的主要原理：

## 平均场计算磁化强度

设  $\mathcal{H} = \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$ ，用平均场理论计算该模型的磁化强度。这里假设  $S=1/2$ 。



$$H = \sum_{\sigma} \langle S_{2\alpha}^{\sigma} \rangle S_1^{\sigma} + \langle S_{4\alpha}^{\sigma} \rangle S_3^{\sigma} + \langle S_{1\beta}^{\sigma} \rangle S_2^{\sigma} + \langle S_{3\beta}^{\sigma} \rangle S_4^{\sigma} \\ + \sum_{\sigma} \langle S_{3\delta}^{\sigma} \rangle S_1^{\sigma} + \langle S_{4\delta}^{\sigma} \rangle S_2^{\sigma} + \langle S_{1\eta}^{\sigma} \rangle S_3^{\sigma} + \langle S_{2\eta}^{\sigma} \rangle S_4^{\sigma} \\ + \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_4 + \mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_4 + \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_3$$

$$H = \sum_{\sigma} \alpha_2^{\sigma} S_1^{\sigma} + \alpha_4^{\sigma} S_3^{\sigma} + \beta_1^{\sigma} S_2^{\sigma} + \beta_3^{\sigma} S_4^{\sigma} \\ + \sum_{\sigma} \delta_3^{\sigma} S_1^{\sigma} + \delta_4^{\sigma} S_2^{\sigma} + \eta_1^{\sigma} S_3^{\sigma} + \eta_2^{\sigma} S_4^{\sigma} \\ + \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_4 + \mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_4 + \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_3$$

这里  $\sigma = x, y, z$

以期望值代替外部粒子对元胞的作用，根据对称性，外部粒子自旋的期望就是其对应内部粒子自旋的期望。

自旋的期望用迭代收敛的方式来计算，写出哈密顿量的矩阵表示（这个会在程序设计的时候提到），对角化以求出基态能量和其对应的本征态。开始时以随机数作为期望值，通过迭代得到收敛值。（当然，暂时我还无法证明是否会收敛，只能看计算结果了）。

设最后求出来的本征态为  $|\psi\rangle$ ，则期望值  $\langle S_i^{\sigma} \rangle = \langle \psi | S_i^{\sigma\dagger} S_i^{\sigma} | \psi \rangle$ 。

至此，思路很明显了，剩下的就是程序的编写了。因为论文涉及的点阵最小是4\*4的，所以我打算写一个能计算n\*n的程序。这在设计上会有一定的困难，但最坑的还是写好了只能算2\*2的，

3\*3的可能也能算但比较勉强了。4\*4是根本算不了（在没有优化算法的情况下，在利用对称性的情况下，有可能可以算）；因为我的内存根本无法分配65536\*65536的矩阵。

## 程序编写

# header file

### 1. a program to print a tensor

```
Function m_cprint(A: ComplexTensor, row_count: Integer,
column_count: Integer)
For i from 0 to row_count - 1
    For j from 0 to column_count - 1
        real_part = RealPart(A[(i * column_count) + j])
        imaginary_part = ImaginaryPart(A[(i * column_count) + j])
        Print(real_part, "+", "i", imaginary_part, " ")
    End For
    Print(newline) // Print a newline after each row
End For
Print(newline) // Print a newline at the end of the tensor
End Function
```

### 2. the Kronecher Product (Tensor Product)

```

Function m_KP(A: ComplexMatrix, B: ComplexMatrix, ARows:
Integer, AColumns: Integer, BRows: Integer, BColumns: Integer,
C: ComplexMatrix)
For i from 0 to ARows - 1
  For j from 0 to AColumns - 1
    For k from 0 to BRows - 1
      For l from 0 to BColumns - 1
        index = ((i * BRows) + k) * (AColumns *
          BColumns) + ((j * BColumns) + l)
        C[index] = A[(i * AColumns) + j] * B[(k *
          BColumns) + l]
      End For
    End For
  End For
End For
End Function

```

### 3. get Hamiltonian

伪代码这里就不给出来了，下面只简要介绍必须的约定。

我们通过公式  $H_{mn} = \langle m | H | n \rangle$  来给出哈密顿量的矩阵。

我们需要知道两件事——1.状态的规定。2.算符对状态的作用。我们一个一个说。

首先是状态如何规定。我以0来代表状态 $|\uparrow\rangle$ （这样是为了与课上的规定相容），以1来代表状态 $|\downarrow\rangle$ 。则对于4个粒子，状态 $|0000\rangle = |0\rangle, |1111\rangle = |1 * 2^3 + 1 * 2^2 + 1 * 2^1 + 1 * 2^0\rangle$ （我们用计算机的天然语言来表示）。同样，我们也可以算出给定状态对应的序号。可以以一个数组来存储原生状态，而通过代数式来表达序号。

下面，我们需要知道各算符对状态的作用。我们有 $\hat{S}^+ |\uparrow\rangle = 0 |\rangle, \hat{S}^- |\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle, \hat{S}^+ |\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle, \hat{S}^- |\downarrow\rangle = 0 |\rangle$ ，于是有

$$\begin{aligned}
 \hat{S}^x |\uparrow\rangle &= 0.5 |\downarrow\rangle & \hat{S}^x |\downarrow\rangle &= 0.5 |\uparrow\rangle \\
 \hat{S}^y |\uparrow\rangle &= 0.5i |\downarrow\rangle & \hat{S}^y |\downarrow\rangle &= -0.5i |\uparrow\rangle \\
 \hat{S}^z |\uparrow\rangle &= 0.5 |\uparrow\rangle & \hat{S}^z |\downarrow\rangle &= -0.5 |\downarrow\rangle
 \end{aligned}$$

用序号表示则是：

$$\begin{aligned}\hat{S}^x |0\rangle &= 0.5 |1\rangle & \hat{S}^x |1\rangle &= 0.5 |0\rangle \\ \hat{S}^y |0\rangle &= 0.5i |1\rangle & \hat{S}^y |1\rangle &= -0.5i |0\rangle \\ \hat{S}^z |0\rangle &= 0.5 |0\rangle & \hat{S}^z |1\rangle &= -0.5 |1\rangle\end{aligned}$$

## main function

首先需要做的就是给出哈密顿量的矩阵表示，这个直接用直乘也是可以的，但是对于较大的矩阵来说运算效率比较低下。同时由于自旋的期望是实数，将不对自旋进行整数化。

采取使用函数的办法来给出哈密顿量，形参应该有：子晶格大小L,自旋的期望值（我将以3\*L\*L的矩阵来存储它）。

## Results

---

1. Sandvik, Anders W. "Finite-Size Scaling of the Ground-State Parameters of the Two-Dimensional Heisenberg Model." *Physical Review B*, vol. 56, no. 18, Nov. 1997, pp. 11678–90. Crossref, <https://doi.org/10.1103/physrevb.56.11678>. ↩
2. <https://folk.ntnu.no/johnof/magnetism-2016.pdf> ↩