计算物理学 (A) 第二次大作业 第 2 题

截止日期：5 月 28 日

1 严格对角化求解海森堡模型

严格对角化 (Exact Diagonalization) 是求解量子多体系统的一种数值方法，我们以海森堡模型为例来讲述这一方法。如图1所示为 1 维海森堡模型的示意图，空间被视作离散的格点，每个格点上用一个自旋来表示磁偶极矩，只考虑最近邻格点之间的相互作用，其哈密顿量可以写成如下形式

$$\begin{aligned} H &= J\sum_{i=1}^{N}\mathbf{S}_i\cdot\mathbf{S}_{i+1} = J\sum_{i=1}^{N}\left[S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + S_i^z S_{i+1}^z\right] \\ &= J\sum_{i=1}^{N}\left[S_i^z S_{i+1}^z + \frac{1}{2}\left(S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+\right)\right] \end{aligned} \tag{1}$$

其中 S_i 是 i 格点的自旋算符，J 表征最近邻的两个自旋之间的相互作用。每个格点的自旋有 $\uparrow$ 和 $\downarrow$ 两种状态，第 i 个格点的算符只作用在 i 格点的自旋上，并有如下规律

$$\begin{array}{ll} S_i^z|\uparrow\rangle_i = \frac{1}{2}|\uparrow\rangle_i & S_i^z|\downarrow\rangle_i = -\frac{1}{2}|\downarrow\rangle_i \\ S_i^+|\downarrow\rangle_i = |\uparrow\rangle_i & S_i^+|\uparrow\rangle_i = 0 \\ S_i^-|\uparrow\rangle_i = |\downarrow\rangle_i & S_i^-|\downarrow\rangle_i = 0 \end{array} \tag{2}$$

若 $j \neq i$，则 $S_i|\uparrow\rangle_j = S_i|\downarrow\rangle_j = 0$.

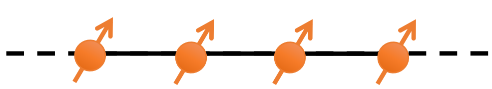

图 1: 1 维海森堡模型示意图

包含 N 个格点的希尔伯特空间的维度为 2^N，这是因为每个格点包含 $\uparrow$ 和 $\downarrow$ 两种自旋状态。用二进制数 0 和 1 来分别表示自旋向下和自旋向上，则希尔伯特空间的基矢可以选为

$$\begin{aligned}
&|0\rangle = |\downarrow,\downarrow,\downarrow,\ldots,\downarrow\rangle \qquad &(= 0\ldots000)\\
&|1\rangle = |\uparrow,\downarrow,\downarrow,\ldots,\downarrow\rangle \qquad &(= 0\ldots001)\\
&|2\rangle = |\downarrow,\uparrow,\downarrow,\ldots,\downarrow\rangle \qquad &(= 0\ldots010)\\
&|3\rangle = |\uparrow,\uparrow,\downarrow,\ldots,\downarrow\rangle \qquad &(= 0\ldots011)\\
&\cdots\cdots\\
&|2^N-1\rangle = |\uparrow,\uparrow,\uparrow,\ldots,\uparrow\rangle \qquad &(= 1\ldots111)
\end{aligned} \tag{3}$$

在该表象下，哈密顿量的矩阵元表示为

$$\begin{aligned}
&H_{ij} = \langle i|H|j\rangle\\
&i,j = 0,\ldots,2^N-1
\end{aligned} \tag{4}$$

求 H 的本征值和本征矢亦即将 H 进行对角化，这是严格对角化的由来。我们先简单看一下 $N=2$ 的情况，体系的基矢为

$$|0\rangle = |00\rangle \quad |1\rangle = |01\rangle \quad |2\rangle = |10\rangle \quad |3\rangle = |11\rangle \tag{5}$$

通过作用式2可将哈密顿矩阵写为

$$H = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0\\ 0 & -\frac{1}{2} & 1 & 0\\ 0 & 1 & -\frac{1}{2} & 0\\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \tag{6}$$

可以求得 4 个本征值分别为 $-1.5, 0.5, 0.5, 0.5$.

但这里的问题是矩阵的维度 $M = 2^N$，当 N 增大时，计算效率会大大降低。解决办法是通过寻找系统的一些守恒量，将 H 分块对角化 (图2)，再对每个小块进行对角化操作，这能够节省计算时间。

对于海森堡模型1，可以看到磁化强度

$$m_z = \sum_{i=1}^{N} S_i^z \tag{7}$$

与哈密顿量对易，因而它是一个守恒量。我们选取的希尔伯特基矢3均为 m_z 的本征态，若某个基矢含有 $n_\uparrow$ 个 $\uparrow$ 态和 $N-n_\uparrow$ 个 $\downarrow$ 态，则对应 m_z 的

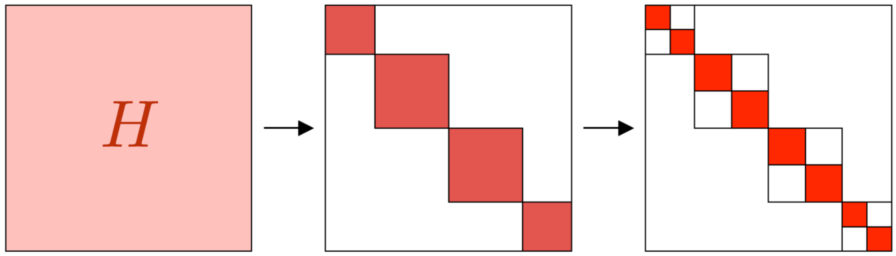

图 2: 将 H 进行分块对角化【图片来源:http://physics.bu.edu/~sandvik/vietri/dia.pdf，关于严格对角化的更多细节也可参见该网站】

本征值为 $n_{\uparrow} - \frac{1}{2}N$. 我们可以调换基矢的顺序，使得具有相同 m_z 的本征值的基矢为一组，则调序之后哈密顿量具有分块对角的形式，每个块状矩阵对应 m_z 的一个本征值。显然块状矩阵的维度为 $C_N^{n_{\uparrow}}$，最大的块状矩阵维度为 $C_N^{N/2} = \frac{N!}{(N/2)!(N/2)!}$. 还可以寻找其他的守恒量使哈密顿矩阵进一步分块对角化 [1]。

试求：

1. 先重复出 $N = 2$ 时的矩阵表达式6，熟悉一下自旋算符的运算规则。
2. 对于 $N = 4$ 的情况，直接将 H 对角化，求出基态能量及其对应的磁化强度，你能够计算的最大尺寸是多少？
3. 若在该体系中增加一个 z 方向的磁场，相当于将哈密顿量变为

$$H = J\sum_{i=1}^{N} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + h\sum_i S_i^z \tag{8}$$

   试讨论 h/J 的大小对基态磁化强度的影响。
4. 考虑 $N = 4$ 时的 2 维海森堡模型，如图3所示。我们仍然只考虑最近邻之间的相互作用，可以看到，2 维模型除了 1 维中已有的最近邻 $(1,2),(2,3),(3,4),(4,1)$ 之外，由于周期性边界条件，还会出现 $(1,4),(2,1)$ 等等的相互作用。写出 $N = 4$ 的 2 维海森堡模型的哈密顿量，并求出其基态能量与基态磁化强度。

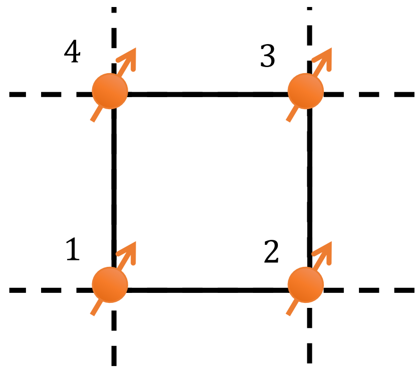

图 3: 2 维海森堡模型示意图

参考文献

[1] Jung-Hoon Jung and Jae Dong Noh. Guide to exact diagonalization study of quantum thermalization. *Journal of the Korean Physical Society*, 76(8):670–683, Apr 2020.