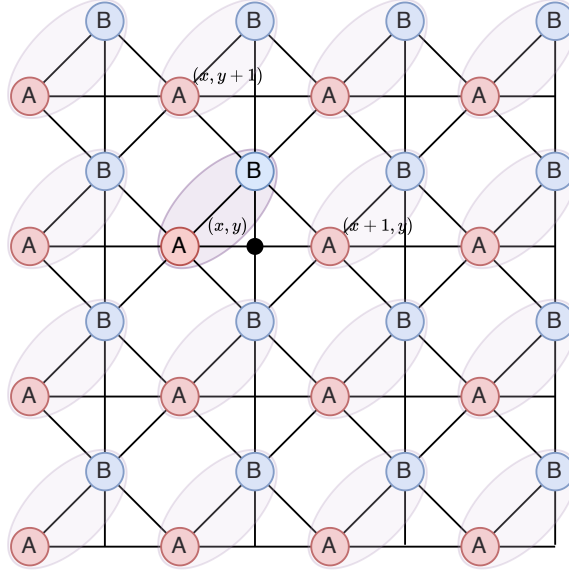


计算物理导论 - Homework 7

A. 阻挫Ising模型

考虑方晶格上面的下列反铁磁Ising模型，每个元胞包含两个子格。



系统的哈密顿量为：

$$H = \frac{1}{2} J \sum_{(i,j) \in \text{bonds}} s_i s_j, \quad J > 0$$

其中bonds代表所有有bond的邻居，例如对图中 (x, y) 处的元胞，A子格具有4个B邻居和2个A邻居。

现在考虑 $J = 1$. 取周期边界条件，系统两个方向的尺寸相同，即 $L_x = L_y = L$.

1. 找出系统的基态构型规则。这个模型的基态简并吗？(1分)
2. 计算边长为 L 的模型的基态能量。(1分)
3. 在零温度下，简并的不同基态是等可能性出现的。现在寻找一个方法，尽可能地采样不同的基态构型。写出你的思路和方法，并给出代码。(3分)
4. 具体呈现3个不同的基态构型，验证它们都满足（1）中你发现的规则，验证能量是否是理论值。(1分)
5. 关联函数 计算基态的关联函数：

$$C^{\mu\nu}(\mathbf{r}) = \langle s^\mu(\mathbf{R}) \cdot s^\nu(\mathbf{R} + \mathbf{r}) \rangle_{\mathbf{R}}$$

其中 $\mu, \nu \in (A, B)$. 作平均时， \mathbf{R} 取遍所有正格矢，而 \mathbf{r} 也取正格矢。用热力图画出这个关联函数。

(1分) 观察关联函数在 x, y 和对角线方向的值，你发现了什么规律？(2分)

6. 你能解释你发现的规律吗？(1分)