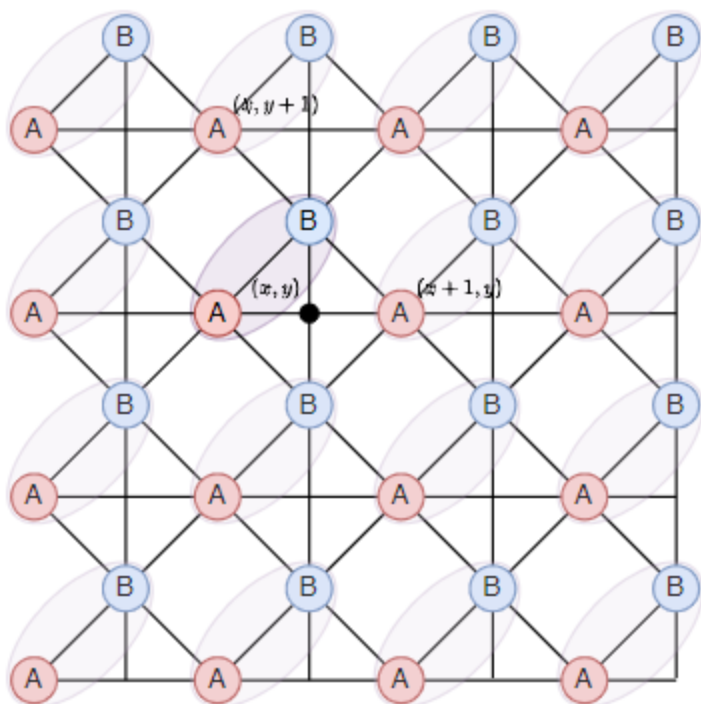


Computational_Physics_7

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 $L_x = L_y = L$.

问题 1：找出系统的基态构型规则。这个模型的基态简并吗？ (1分)

基态构型规则：

根据题目所给哈密顿量：

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

该模型是一个二维方晶格上的反铁磁 Ising 模型，其中每个元胞包含两个子格（A 和 B），存在 A-A、A-B、B-B 的耦合。用“灰格子”指代图中的中间有十字交叉的格子：

则基态构型规则为：

每一个灰格子四个顶点（2A + 2B）上的自旋值之和为 0。

具体来说，由于自旋 $s_i \in \{-1, +1\}$ ，要满足这个条件，只有以下几类组合可能：

- (+1, +1, -1, -1)
- (+1, -1, +1, -1)
- (+1, -1, -1, +1)
- 及其对称旋转

这表示灰格子中必须恰好包含两个 +1 和两个 -1 的自旋，从而满足局域能量最小化。

构型规则总结：

系统的基态要求每一个灰格子中的 4 个顶点（2 个 A 子格和 2 个 B 子格）自旋值之和为 0，即每个灰格子中有两个 +1 和两个 -1 的自旋。

基态是否简并？

由于每个灰格子允许多个满足条件的自旋配置（例如 (+1, +1, -1, -1)、(+1, -1, +1, -1)、(+1, -1, -1, +1) 等），且整个系统包含 $L \times L$ 个灰格子，因此：

- 各个灰格子之间的构型选择存在一定自由度
- 整体系统可以在多个满足局部灰格子条件的全局配置中选择

这意味着系统具有大量等能量的基态。

结论：

该模型的基态是高度简并的，简并度随着系统尺寸指数增长。

问题 2：计算边长为 L 的模型的基态能量

根据题目和图像分析，我们知道每个“格子”包含 4 条边，分别是：

- **A-B 边**: 每条 A 和 B 相邻的自旋是相反的, 因此每条边的贡献是 -1 。
- **A-A 边**: 每条 A-A 边的自旋相同, 因此每条边的贡献是 $+1$ 。
- **B-B 边**: 每条 B-B 边的自旋相同, 因此每条边的贡献是 $+1$ 。

因此, 每个格子的总能量为:

$$E_{\text{每个格子}} = 4 \times (-1) + 2 \times (+1) = -4 + 2 = -2$$

系统总能量

系统有 L^2 个格子, 因此总的基态能量为:

$$E_0 = -2 \times L^2$$

结论

基态下系统的总能量为:

$$E_0 = -2L^2$$

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)