Luka Medic, vpisna št.: **28182014**

VIŠJE RAČUNSKE METODE

8. naloga – Schmidtov razcep in matrično produktni nastavki

8. maj 2019

1 Uvod

V nalogi je predstavljen kvantni Monte Carlo, ki je preveden na klasičen problem polimerne verige. Obravnavana sta primera harmonskega in anharmonskega oscilatorja s pot-integralnim Monte Carlo algoritmom. Rezultati so primerjani z analitičnimi rešitvami in rezultati spektralne metode.

2 Osnovno stanje Heisenbergove verige

Imejmo antiferomagnetno ($J = -1$) Heisenbergovo verigo sode dolžine n:

$$H = \sum_{i=1}^{n} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_{i+1}, \tag{1}$$

s točno diagonalizacijo pa želimo poiskati osnovno stanje verige. H prestavimo z matriko velikosti $2^n \times 2^n$, ki jo konstruiramo z vsotami n tenzorskih produktov Paulijevih matrik in identitet. Ker je večina elementov ničelnih, se v implementaciji splača uporabiti `sparse` matrike:

```
>> for k in range(n-1):
>>     H += sparse.kron(sparse.identity(2**k),
>>                  sparse.kron(h2, sparse.identity(2**(n-k-2))))
```

pri tem je `h2` matrika:

$$\texttt{h2} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & -2 & 0 \\ 0 & -2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{2}$$

Tako konstruiran H ustreza verigi z zaprtimi robnimi pogoji. Če želimo dodati periodične robne pogoje moramo povezati prvi in zadnji spin, kar storimo z:

```
>> for s in (sx, sy, sz):
>>     H+=np.real(sparse.kron(s,sparse.kron(sparse.identity(2**(n-2)),s)))
```

Od tod naprej za oba primera uporabimo `sparse.linalg.eigsh`, da dobimo lastna stanja H.

Ker H komutira s skupno projekcijo spina S_z, bi lahko problem obravnavali po sektorjih z enakimi S_z. Pričakujemo, da bo osnovno stanje za antiferomagnetni Heisenbergov model iz sektorja z $n_\uparrow = n_\downarrow = n/2$. Če za osnovno stanje predpostavimo, da noben koeficient iz tega sektorja ni ničeln, potem lahko predpostavko preprosto preverimo s prikazom razmerij neničelnih koeficientov izračunanega osnovnega stanja s celotnim številom stanj iz tega sektorja $\binom{n}{n/2}$

3 Zaključek