

# 特殊講義C: 量子多体問題の計算科学

3日目

2018/8/8

Special Lecture C:  
Computational Science of  
Quantum Many-body Problems

1. What is  $H\Phi$ ?
2. Exercise

# HΦとは

量子格子模型の数値厳密対角化法は、量子多体問題、とくに強相関電子系の数値的研究を行う際の最も基本的な手法です。西森秀稔教授(東京工業大学)が開発された量子スピン模型に対する先駆的な数値対角化パッケージTITPACK[1]は、その公開以来20年以上にわたって幅広いユーザーに利用されてきました。

HΦはTITPACKに代わる並列計算機対応数値対角化パッケージを目指して開発されました。遍歴電子系を含む幅広い量子格子模型に柔軟に適用でき、さらに高並列に対応するソフトウェアです。2015/2016/2017年度東大物性研ソフトウェア開発・高度化支援[2]を受け開発を進めています。

[1] [http://www.stat.phys.titech.ac.jp/~nishimori/titpack2\\_new/index-e.html](http://www.stat.phys.titech.ac.jp/~nishimori/titpack2_new/index-e.html)

[2] <http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/supercom/rsayh2/softwea-dev>

# 数値対角化が持ちってきた重要な例

## 分数量子ホール効果

### 分数量子ホール効果

D. C. Tsui, *et al.*, Phys. Rev. Lett. 48, 1559 (1982).

R. B. Laughlin, Phys. Rev. Lett. 50, 1395 (1983).

F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. 55, 2095 (1985).

## ラフリンの波動関数の精度を検証

## 孤立量子系の熱化

M. Rigol, V. Dunjko, and M. Olshanii, Nature 452, 854 (2008).

## 孤立量子系の時間発展を長時間追っていった結果

# 厳密対角化に基づく量子格子模型ソルバー

TITPACK by Y. Taguchi & H. Nishimori (1985-)  
Heisenberg & XXZ model

KOBEPACK by M. Kaburagi, T. Nishino, & T. Tonegawa (1992-)  
- $S=1$  Heisenberg

SPINPACK by J. Schulenburg (1995-)  
-MPI & PTHREAD  
-XXZ, Hubbard, &  $t$ - $J$  model  
-Symmetries

ALPS IETL library by P. Dayal, M. Troyer, & R. Villiger

主に量子統計力学の標準的な模型  
(Heisenberg, Hubbard)向け

# HΦとは

実験と理論の直接比較・数値計算手法開発促進を目指して

数値厳密対角化法による量子格子模型ソルバー

-広汎な多体量子系に対応

-ランチョス法[1]&CG法: 基底状態及び低励起状態の波動関数

-熱的純粋量子(TPQ)[2]: 有限温度物理量計算

-ハイブリッド並列化

[1] E. Dagotto, Rev. Mod. Phys. 66, 763 (1994) .

[2] S. Sugiura, A. Shimizu, Phys. Rev. Lett. 108, 240401 (2012).

オープンソース・ソフトウェア 最新版: ver.3.0.0

ライセンス: GNU GPL version3\*

\*自由に使ったり、変更したり、頒布してください。

ただし、HΦの開発者の著作権をみとめ、変更を明示し、再配布もGPLv3で行ってください。

# どうやってHΦをインストールするか

Q. Where can you get HΦ ?

A. Materiapps or Github

<https://ma.issp.u-tokyo.ac.jp/app/339>

<https://github.com/issp-center-dev/Hphi/releases>

Q. What does HΦ require?

A. C compiler, Fortran compiler and Lapack.

If you have MPI library, you can enjoy larger simulation

Q. How to install HΦ?

A. Let's install with me!

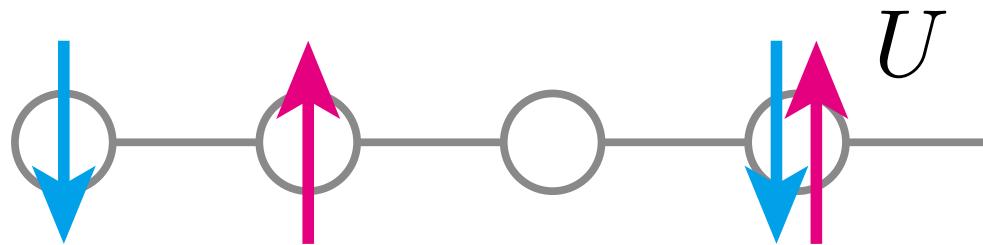
(MateriAppsからダウンロードできるマニュアルも参照)

# HΦでできること: 量子格子模型

- ・計算できる系

遍歴電子系: Hubbard-type model

$$H = -\mu \sum_{i=1}^N \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} - \sum_{i \neq j} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_{i=1}^N n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \sum_{i \neq j} V_{ij} n_i n_j$$



Fermion Hubbard: 粒子数・トータル  $S_z$  保存

HubbardNConserved: 粒子数保存・トータル  $S_z$  非保存

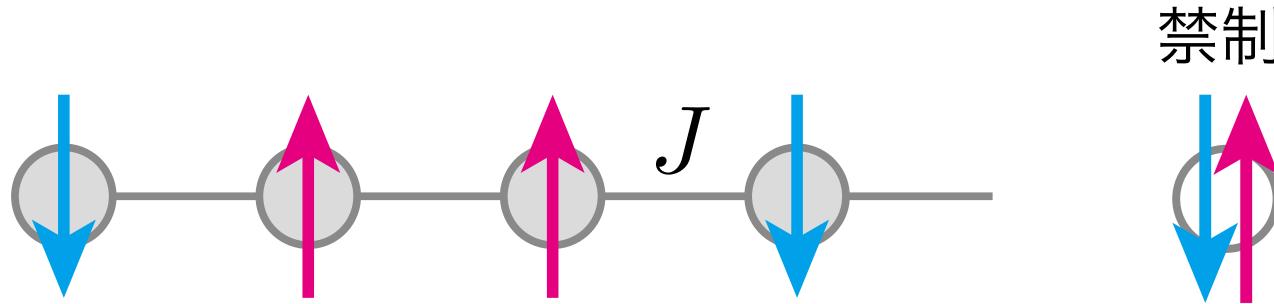
Fermion HubbardGC: 粒子数・トータル  $S_z$  非保存

# $H\Phi$ でできること: 量子格子模型

- ・計算できる系

局在スピン系: Heisenberg-type model

$$H = -h \sum_{i=1}^N S_i^z + \Gamma \sum_i S_i^x + D \sum_i S_i^z S_i^z + \sum_{i,j} \sum_{\alpha,\beta=x,y,z} J_{ij}^{\alpha\beta} S_i^\alpha S_j^\beta$$



Spin: トータル  $S_z$  保存

SpinGC: トータル  $S_z$  非保存

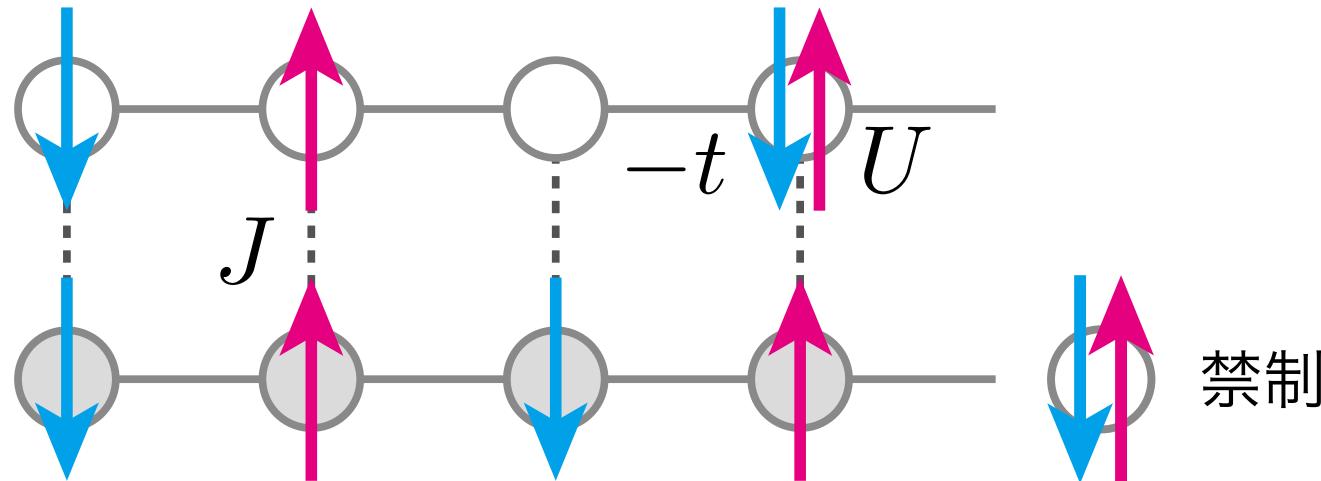
$S > 1/2$  にも対応

# $H\Phi$ でできること: 量子格子模型

- 計算できる系

局在スピン系: Kondo-lattice-type model

$$H = -\mu \sum_{i=1}^N \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} - t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \frac{J}{2} \sum_{i=1}^N \left\{ S_i^+ c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} + S_i^- c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} + S_i^z (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}) \right\}$$



Kondo Lattice: 粒子数・トータル  $S_z$  保存

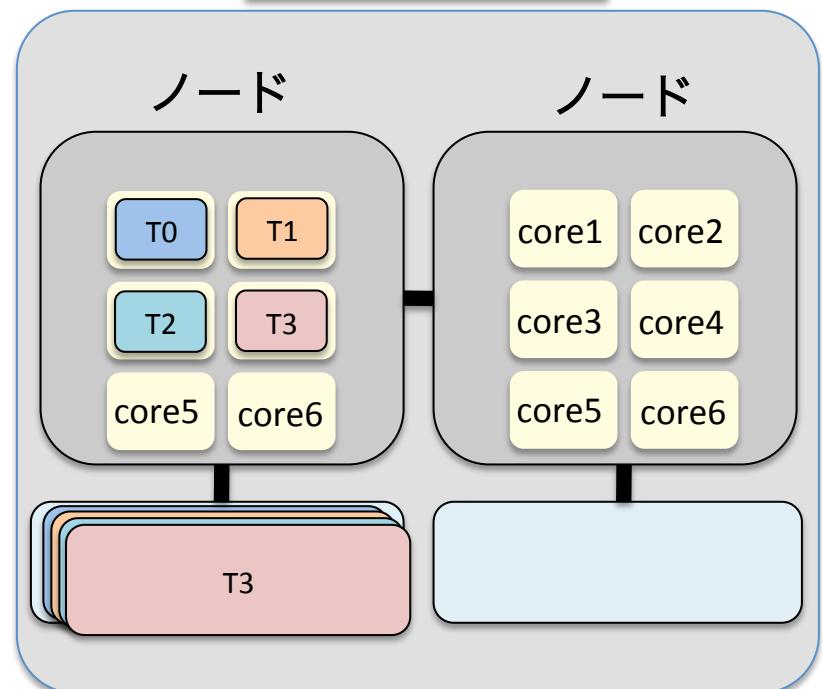
Kondo LatticeGC: 粒子数・トータル  $S_z$  非保存

# HPCでできること: 並列計算

- ・ハイブリッド並列

- 共有メモリ並列(OpenMP) **スレッド**
- 分散メモリ並列(MPI) **プロセス**

並列計算機



# HΦでできること: 並列計算

- ハイブリッド並列

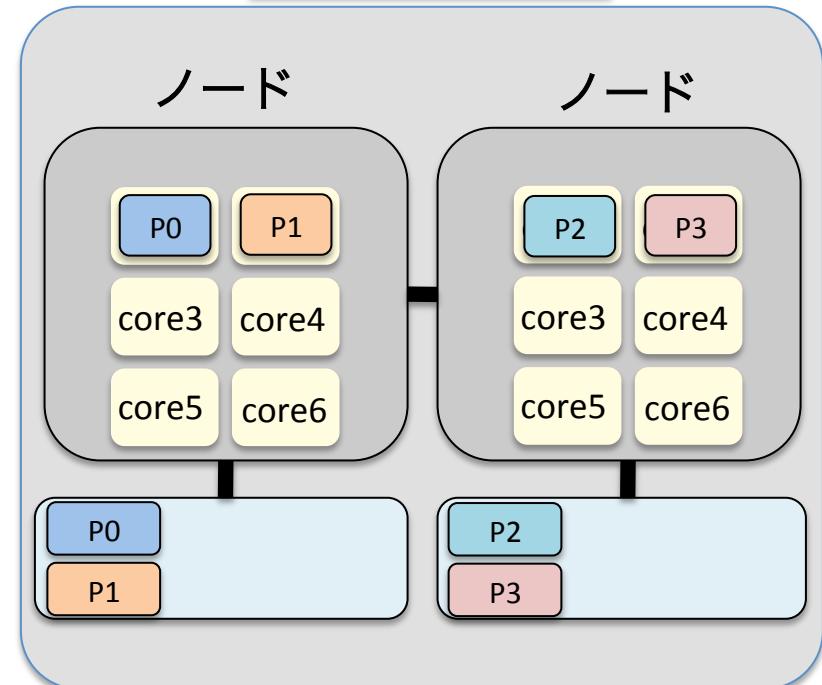
- 共有メモリ並列(OpenMP) **スレッド**
- 分散メモリ並列(MPI) **プロセス**

- Hubbard/Kondo Lattice /HubabrdGC  
→ $4^n$ プロセス
- Spin/SpinGC  
→ $(2S+1)^n$ プロセス

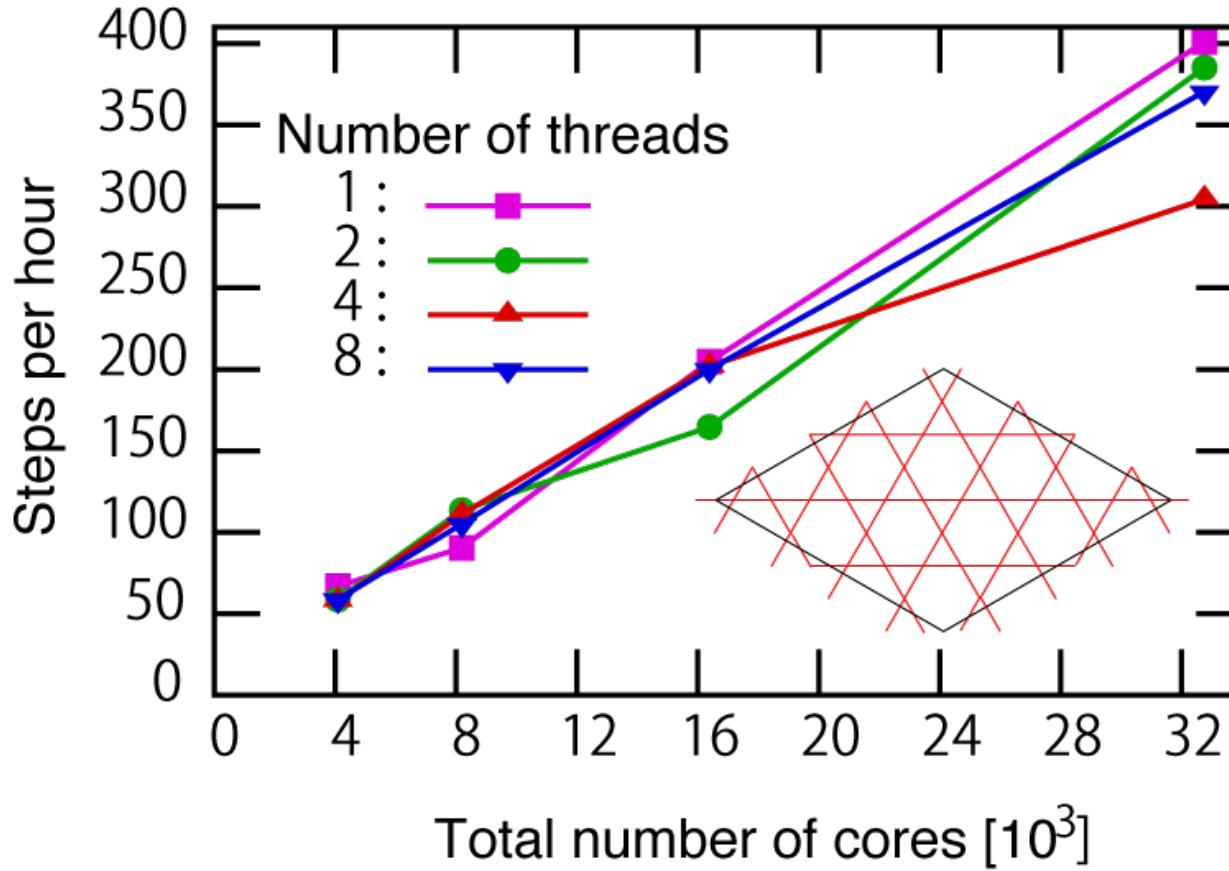
波動関数の分割例: 2プロセス

$$\begin{array}{lcl} |0\rangle & = & |\downarrow\downarrow \downarrow\rangle \\ |1\rangle & = & |\uparrow\downarrow \downarrow\rangle \\ |2\rangle & = & |\downarrow\uparrow \downarrow\rangle \\ |3\rangle & = & |\uparrow\uparrow \downarrow\rangle \\ \hline |4\rangle & = & |\downarrow\downarrow \uparrow\rangle \\ |5\rangle & = & |\uparrow\downarrow \uparrow\rangle \\ |6\rangle & = & |\downarrow\uparrow \uparrow\rangle \\ |7\rangle & = & |\uparrow\uparrow \uparrow\rangle \end{array} \quad \text{rank } 0$$
$$\quad \text{rank } 1$$

並列計算機



# Speedup



Lanczos method: Up to  $6.87 \times 10^{10}$  dimension  
@K computer & ISSP supercomputer  
From 4096 32768 cores: Parallelization efficiency 80%

# HΦをどう使うか

- ・計算モード

## -スタンダード・モード

StdFace.def for 1D S=1/2 Heisenberg model

L = 16	System size
model = "Spin"	Model
method = "Lanczos"	Method
lattice = "Chain Lattice"	Lattice
J = 1.0	Exchange coupling
2Sz = 0	Total Sz
2S = 1	Size of spin

## 計算実行

PATH/HPhi -s StdFace.def

mpirun -np xx PATH/HPhi -s StdFace.def (xx: # of process)

# 例題: Two Spins

Decimal representation of orthonormalized basis

	0 th site		1 st site
$ 0\rangle_d$	$=$	$ \downarrow\rangle$	$\otimes$
$ 1\rangle_d$	$=$	$ \uparrow\rangle$	$\otimes$
$ 2\rangle_d$	$=$	$ \downarrow\rangle$	$\otimes$
$ 3\rangle_d$	$=$	$ \uparrow\rangle$	$\otimes$
			$ \downarrow\rangle$
			$ \uparrow\rangle$

Problem 1: Find 4 by 4 Hamiltonian matrix that describes

$$\begin{aligned}\hat{H}/J &= \hat{S}_0^x \hat{S}_1^x + \hat{S}_0^y \hat{S}_1^y + \hat{S}_0^z \hat{S}_1^z \\ &= \frac{1}{2} \left( \hat{S}_0^+ \hat{S}_1^- + \hat{S}_0^- \hat{S}_1^+ \right) + \hat{S}_0^z \hat{S}_1^z\end{aligned}$$

Useful transformation:

$$\hat{S}_j^+ |\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle$$

Ladder operators

$$\hat{S}_j^+ = \hat{S}_j^x + i\hat{S}_j^y \quad \hat{S}_j^+ |\uparrow\rangle = 0$$

$$\hat{S}_j^- = \hat{S}_j^x - i\hat{S}_j^y \quad \hat{S}_j^- |\downarrow\rangle = 0$$

$$\hat{S}_j^- |\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle$$

# Answer of the Problem 1

$$\hat{H} = J \left( \hat{S}_0^x \hat{S}_1^x + \hat{S}_0^y \hat{S}_1^y + \hat{S}_0^z \hat{S}_1^z \right)$$

Matrix element  ${}_{\text{d}} \langle I | \hat{H} | J \rangle_{\text{d}}$  ( $I, J = 0, 1, 2, 3$ )

4 by 4 Hamiltonian matrix

$$\hat{H} \doteq J \begin{bmatrix} +1/4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1/4 & +1/2 & 0 \\ 0 & +1/2 & -1/4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & +1/4 \end{bmatrix}$$

# Energy Spectrum of the Two Spins

Problem 2: Diagonalize 4 by 4 Hamiltonian matrix

$$\hat{H} \doteq J \begin{bmatrix} +1/4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1/4 & +1/2 & 0 \\ 0 & +1/2 & -1/4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & +1/4 \end{bmatrix}$$

# Answer of the Problem 2: Energy Spectrum of the Two Spins

$$\hat{H} \doteq J \begin{bmatrix} +1/4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1/4 & +1/2 & 0 \\ 0 & +1/2 & -1/4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & +1/4 \end{bmatrix}$$

$$E = -\frac{3J}{4}, +\frac{J}{4}, +\frac{J}{4}, +\frac{J}{4}$$

HΦで確認しよう

# レポート問題の解説

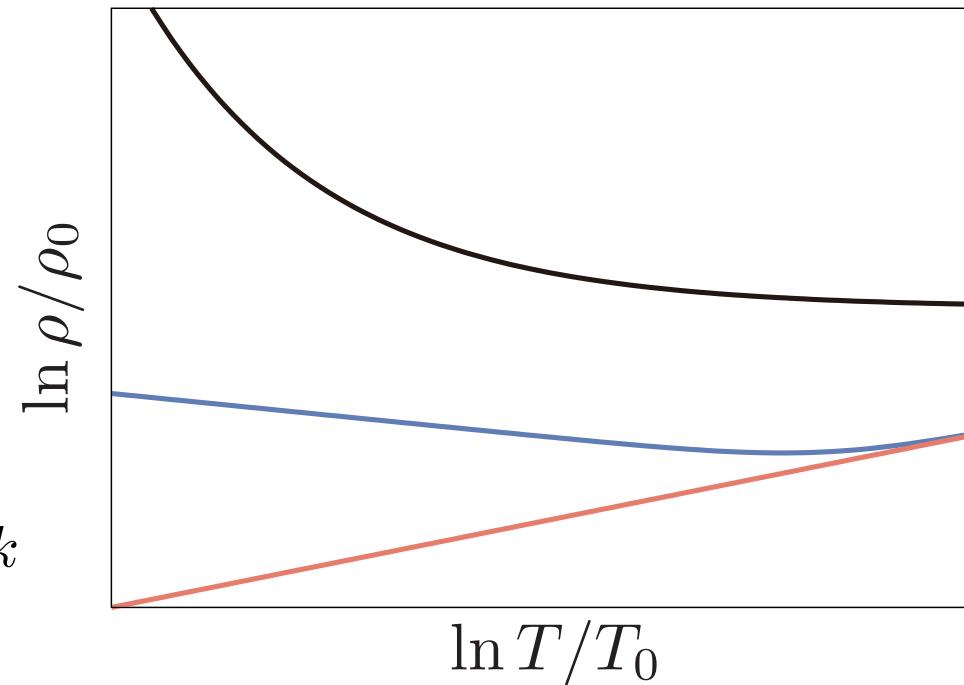
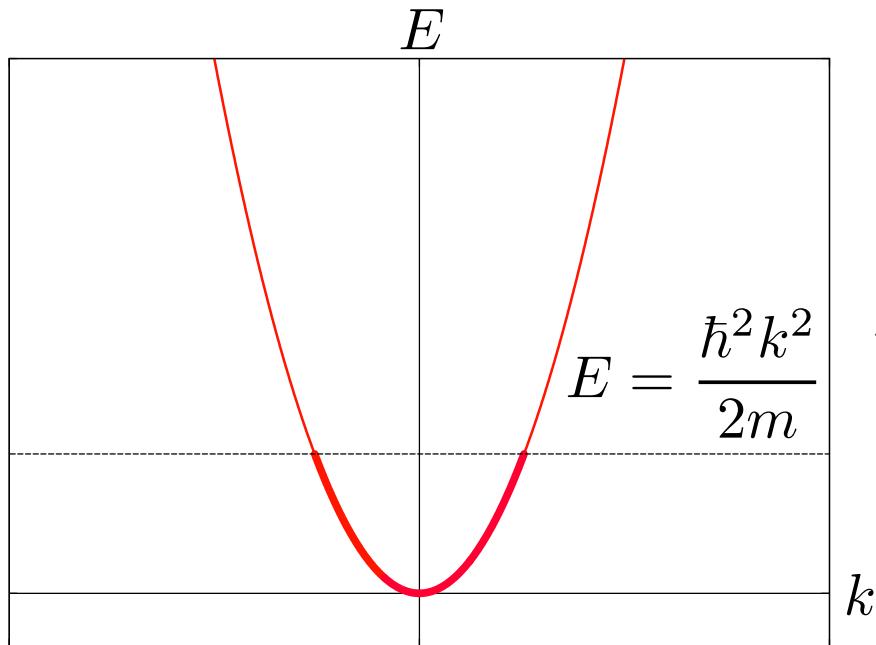
# 背景: トポロジカル相

励起にギャップがある量子相の分類

Nobel Prize in 2016  
“Topological phase transitions and  
topological phases of matter”

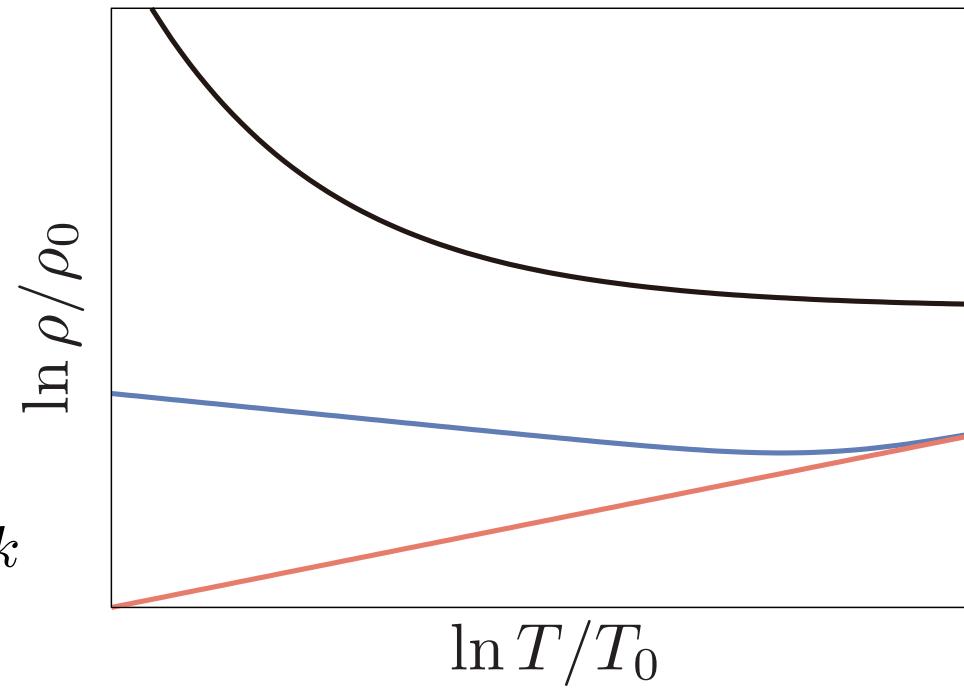
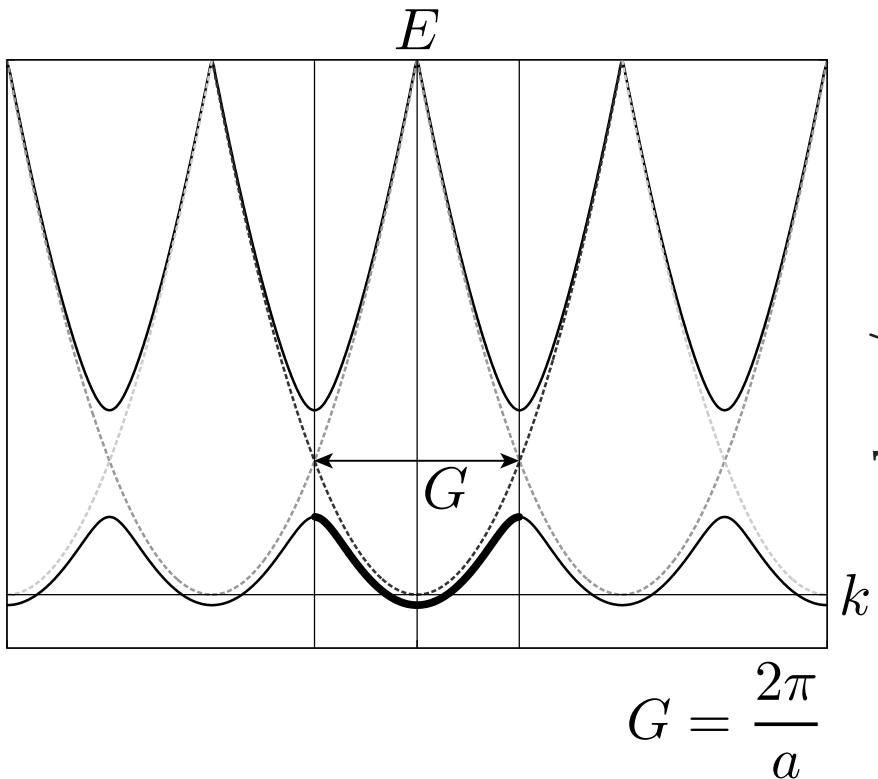
# 電気伝導から見た結晶固体の分類

- ・金属
- ・ゼロギャップ半導体
- ・半導体・バンド絶縁体
- ・モット絶縁体



# 電気伝導から見た結晶固体の分類

- ・金属
- ・ゼロギャップ半導体
- ・半導体・バンド絶縁体
- ・モット絶縁体

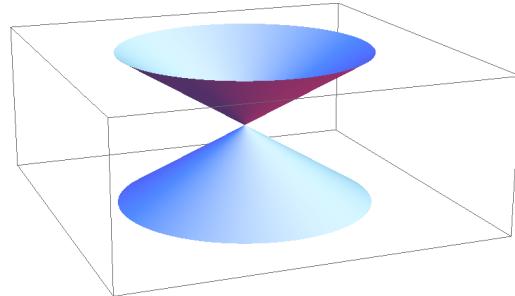
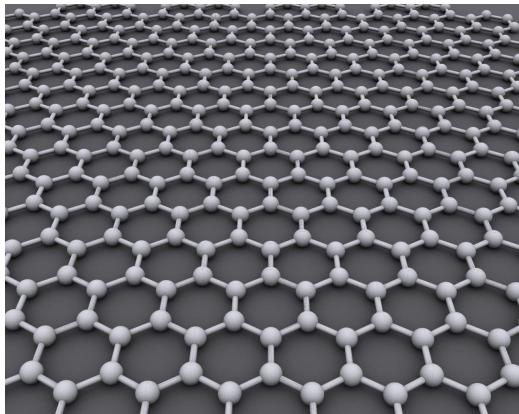


# 電気伝導から見た結晶固体の分類

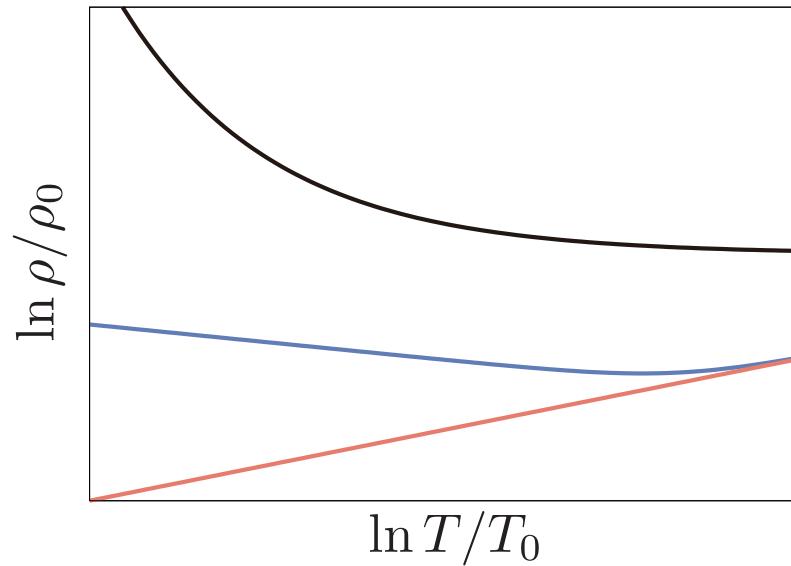
- ・金属
- ・ゼロギャップ半導体
- ・半導体・バンド絶縁体
- ・モット絶縁体

## ゼロギャップ半導体の例

2次元ディラック: グラフェン

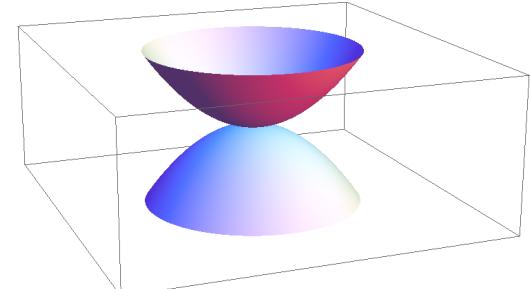


Castro Neto, Guinea, Peres, Novoselov, & Geim,  
Rev. Mod. Phys. 81, 109 (2009)



3次元ディラック:  
 $\text{Cd}_3\text{As}_2$ ,  $\text{Na}_3\text{Bi}$

$\text{HgTe}$ ,  $\alpha\text{-Sn}$  (gray tin)



# 電気伝導から見た結晶固体の分類

- ・金属
- ・ゼロギャップ半導体
- ・半導体・バンド絶縁体
- ・モット絶縁体

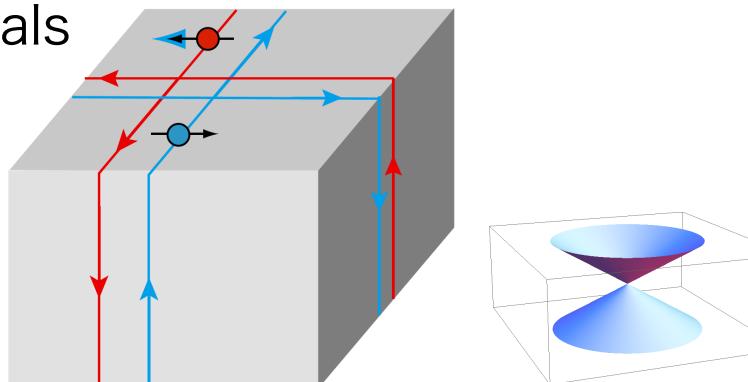
自明な絶縁体

Si

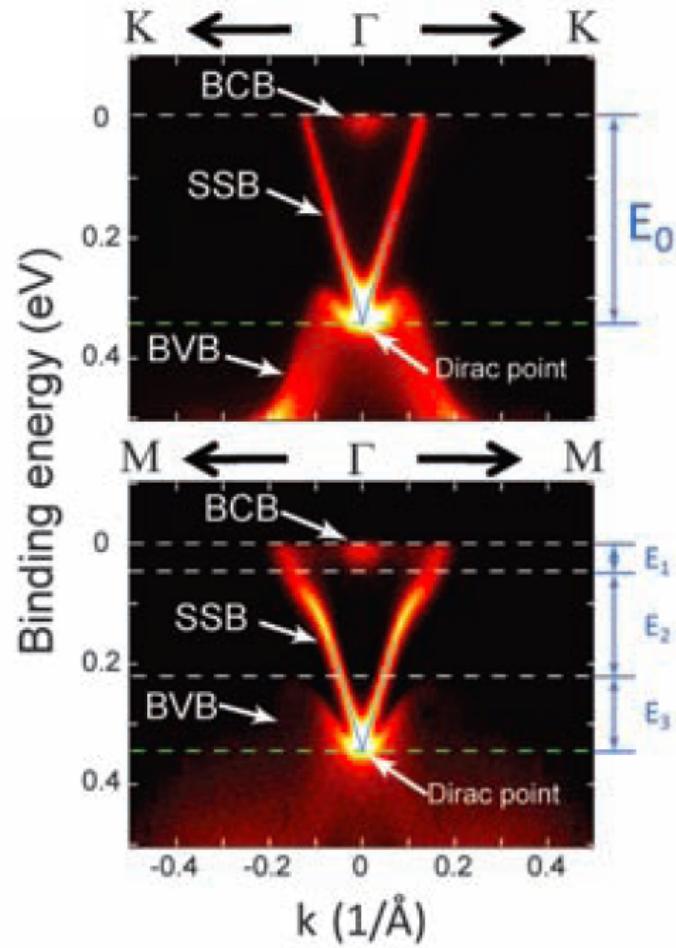
トポロジカル絶縁体

$\text{Bi}_2\text{Te}_3$   
熱電材料

Surface metals

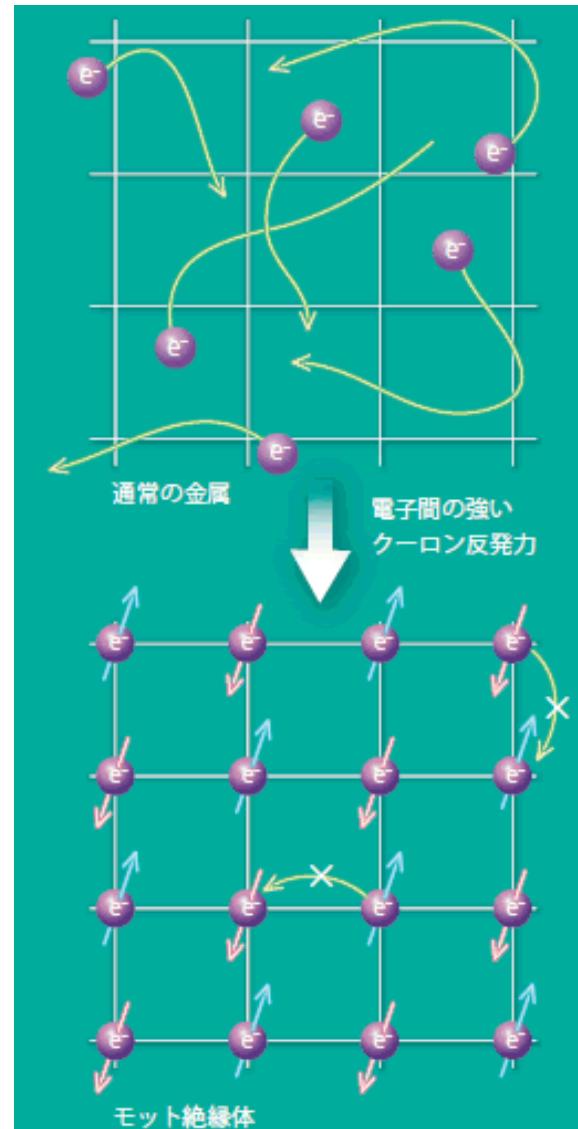


Y. L. Chen, et al., Science 325, 178 (2009)



# 電気伝導から見た結晶固体の分類

- ・金属
- ・ゼロギャップ半導体
- ・半導体・バンド絶縁体
- ・モット絶縁体



「京」コンピュータPj  
CMSI広報誌  
torrent No.5 より

# 問題: $S=1$ ハイゼンベルグ模型

ハルデン・ギャップ

F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. 50, 1153 (1983); Phys. Lett. 93A, 464 (1983).

-励起ギャップについての理論予測:

Gapless:  $S = 1/2, 3/2, 5/2, \dots$

Gapful:  $S = 1, 2, 3, \dots$

cf.) AKLT I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb, and H. Tasaki,  
Commun. Math. Phys. 115, 477 (1988).

$$\Delta(S) = \begin{cases} 0.41048(6) & \text{for } S = 1 \\ 0.08917(4) & \text{for } S = 2 \\ 0.01002(3) & \text{for } S = 3 \end{cases}$$

S. Todo and K. Kato, Phys. Rev. Lett. 87, 047203 (2001).

→ Symmetry Protected Topological (SPT) state

# スピンの合成

- 電子1つが持つスピンは $S=1/2$ , スピン角運動量は $h/4\pi$
- 磁石の磁性の源は、複数の電子のスピン角運動量の合成による  
(角運動量も合算される)
- 例: 希土類磁性体ガドリニウム  $\text{Gd}^{+3}$   $S=7/2$
- $S \rightarrow +\infty$  の極限が古典ハイゼンベルグ・スピンを再現

$S=1$ の場合

$$|m_z = +1; S = 1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$$

$$|m_z = 0; S = 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$$

$$|m_z = -1; S = 1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle$$

# 量子スピン $S=1$ のスピン演算子

$S=1$ の場合

$$\hat{S}^x \doteq \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & +1 & 0 \\ +1 & 0 & +1 \\ 0 & +1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}^y \doteq \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ +i & 0 & -i \\ 0 & +i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}^z \doteq \begin{pmatrix} +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

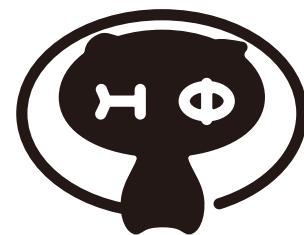
$\hat{S}^x$	+1	0	-1
+1	0	$+1/\sqrt{2}$	0
0	$+1/\sqrt{2}$	0	$+1/\sqrt{2}$
-1	0	$+1/\sqrt{2}$	0

$\hat{S}^y$	+1	0	-1
+1	0	$-i/\sqrt{2}$	0
0	$+i/\sqrt{2}$	0	$-i/\sqrt{2}$
-1	0	$+i/\sqrt{2}$	0

$\hat{S}^z$	+1	0	-1
+1	+1	0	0
0	0	0	0
-1	0	0	-1

# レポート問題1

1. (手で解ける問題) 2サイトのハバード模型の波動関数を求めよ。ただし、↑スピン電子、↓スピン電子が一つずつあるとする。ただし  $U/t$  の関数として求めよ。  
また、2サイトの  $S=1/2$  ハイゼンベルグ模型の波動関数との比較を行え。
2. 4サイトの  $S=1/2$  ハイゼンベルグ鎖の固有値の分布と  
4サイトのハバード模型の固有値の分布を比較し、  
ハバード模型の強結合極限( $U/t \gg 1$ )とハイゼンベルグ模型との関係を論ぜよ。



Quantum lattice model solver HΦ

<http://ma.cms-initiative.jp/ja/index/ja/listapps/hphi>

# レポート問題2

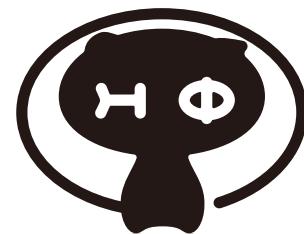
1.  $S=1/2$ と $S=1$ のハイゼンベルグ鎖(1次元周期境界条件)の基底状態と第一励起状態の間のエネルギー差を、スピン数 $L$ の逆数 $1/L$ でプロットし、 $L \rightarrow +\infty$ の極限を推定せよ。  
なおエネルギー差 $\Delta(L)$ を、 $a+b/L+c/L^2$ 、あるいは $a+b \exp(-c/L)$ で外挿を行うことがしばしば行われる。  
メモリ・コストから可能な $L$ の範囲で計算を行えば良い。
2. 基底状態と第1励起状態の全スピンについて論じよ。

-提出はメールに添付

宛先: [yamaji@ap.t.u-tokyo.ac.jp](mailto:yamaji@ap.t.u-tokyo.ac.jp)

-レポート内には氏名と学籍番号を明記すること

-締め切りは8/17



Quantum lattice model solver HΦ

<http://ma.cms-initiative.jp/ja/index/ja/listapps/hphi>

# Appendix: Conjugate Gradient Method

Algorithm for linear equations  
instead of eigenvalue problems

$$A\vec{x} = \vec{b}$$

A simple method: Gradient descent/steepest descent

Solving a linear equation is mapped onto  
finding a minimum of a cost function

For symmetric matrix  $A$

$$f(\vec{x}) = \frac{1}{2}\vec{x}^T A \vec{x} - \vec{b}^T \vec{x}$$

$$\vec{\nabla}_x f(\vec{x}) = A\vec{x} - \vec{b}$$

$$\vec{x}_{k+1} = \vec{x}_k - \alpha \vec{\nabla}_x f(\vec{x})|_{\vec{x}=\vec{x}_k}$$

-Only local information is utilized,  
and thus often captured by local minima

# Appendix: *Conjugate Gradient Method*

M. R. Hestenes & E. Stiefel, J. Res. Natl. Bur. Stand. 49, 409 (1952).

Find an approximate solution in a Krylov subspace

$$\vec{x}_k = \sum_{j=0}^{k-1} a_j \vec{p}_j$$

Conjugate basis set  $\{\vec{p}_k\}$      $\vec{p}_i^T A \vec{p}_j = 0 \ (i \neq j)$

Additional constraint: Find orthogonal residual vectors

$$\vec{r}_k = \vec{b} - A \vec{x}_k$$

Orthogonal basis set  $\{\vec{r}_k\}$      $\vec{r}_i^T \vec{r}_j = 0 \ (i \neq j)$

# Conjugate Gradient Method: Algorithm

Linear equations  $A\vec{x} = \vec{b}$

For symmetric matrix  $A$

$$\vec{p}_0 = \vec{r}_0 = \vec{b} - A\vec{x}_0$$

For  $k = 0, 1, \dots, m$

$$\alpha_k = \frac{\vec{r}_k^T \vec{r}_k}{\vec{p}_k^T A \vec{p}_k}$$

$$\vec{x}_{k+1} = \vec{x}_k + \alpha_k \vec{p}_k$$

$$\vec{r}_{k+1} = \vec{r}_k - \alpha_k A \vec{p}_k$$

$$\beta_k = \frac{\vec{r}_{k+1}^T \vec{r}_{k+1}}{\vec{r}_k^T \vec{r}_k}$$

$$\vec{p}_{k+1} = \vec{r}_{k+1} + \beta_k \vec{p}_k$$

M. R. Hestenes & E. Stiefel,  
J. Res. Natl. Bur. Stand. 49, 409 (1952).

The algorithm generates  
-Conjugate basis set  $\{\vec{p}_k\}$   
-Orthogonal basis set  $\{\vec{r}_k\}$   
 $\leftarrow$ A Krylov subspace

CG method finds an approximate solution  
of the linear equation in a Krylov subspace

# Appendix: 固有値問題のためのCG法

## CG method

$$A\vec{x} = E\vec{x}$$

$$\mu_k^{(i)} = \frac{(\mathbf{x}_k^{(i)}, A\mathbf{x}_k^{(i)})}{(\mathbf{x}_k^{(i)}, \mathbf{x}_k^{(i)})}$$

$$\mathbf{w}_k^{(i)} = A\mathbf{x}_k^{(i)} - \mu_k^{(i)} \mathbf{x}_k^{(i)}$$

$$S_A = \{\mathbf{w}_k^{(1)}, \dots, \mathbf{w}_k^{(m)}, \mathbf{x}_k^{(1)}, \dots, \mathbf{x}_k^{(m)}, \mathbf{p}_k^{(1)}, \dots, \mathbf{p}_k^{(m)}\}^T A \{\mathbf{w}_k^{(1)}, \dots, \mathbf{w}_k^{(m)}, \mathbf{x}_k^{(1)}, \dots, \mathbf{x}_k^{(m)}, \mathbf{p}_k^{(1)}, \dots, \mathbf{p}_k^{(m)}\}$$

$$S_B = \{\mathbf{w}_k^{(1)}, \dots, \mathbf{w}_k^{(m)}, \mathbf{x}_k^{(1)}, \dots, \mathbf{x}_k^{(m)}, \mathbf{p}_k^{(1)}, \dots, \mathbf{p}_k^{(m)}\}^T \{\mathbf{w}_k^{(1)}, \dots, \mathbf{w}_k^{(m)}, \mathbf{x}_k^{(1)}, \dots, \mathbf{x}_k^{(m)}, \mathbf{p}_k^{(1)}, \dots, \mathbf{p}_k^{(m)}\}$$

Obtain  $i$ th smallest eigenstate of  $S_A \mathbf{v}^{(i)} = \mu^{(i)} S_B \mathbf{v}^{(i)}$ ,  $\mathbf{v}^{(i)} = (\alpha_1^{(i)}, \dots, \alpha_m^{(i)}, \beta_1^{(i)}, \dots, \beta_m^{(i)}, \gamma_1^{(i)}, \dots, \gamma_m^{(i)})$

$$\mathbf{x}_{k+1}^{(i)} = \sum_{j=1}^m \left( \alpha_j^{(i)} \mathbf{w}_k^{(j)} + \beta_j^{(i)} \mathbf{x}_k^{(j)} + \gamma_j^{(i)} \mathbf{p}_k^{(j)} \right)$$

$$\mathbf{p}_{k+1}^{(i)} = \sum_{j=1}^m \left( \alpha_j^{(i)} \mathbf{w}_k^{(j)} + \gamma_j^{(i)} \mathbf{p}_k^{(j)} \right)$$

-Eigenvalues and eigenvectors

Locally optimal block CG (LOBCG):

A. V. Knyazev,

SIAM journal on scientific computing 23, 517 (2001).

# $\text{H}\Phi$ Developers



Dr. Takahiro Misawa  
The Institute for Solid State Physics,  
The University of Tokyo



Dr. Mitsuaki Kawamura  
The Institute for Solid State Physics,  
The University of Tokyo



Dr. Yoshikazu Yoshimi  
The Institute for Solid State Physics,  
The University of Tokyo



Prof. Synge Todo  
Department of Physics,  
The University of Tokyo



Prof. Naoki Kawashima  
The Institute for Solid State Physics,  
The University of Tokyo

Youhei Yamaji  
Department of Applied Physics,  
The University of Tokyo



## Acknowledgement:

Prof. Takeo Hoshi (Tottori Univ.)

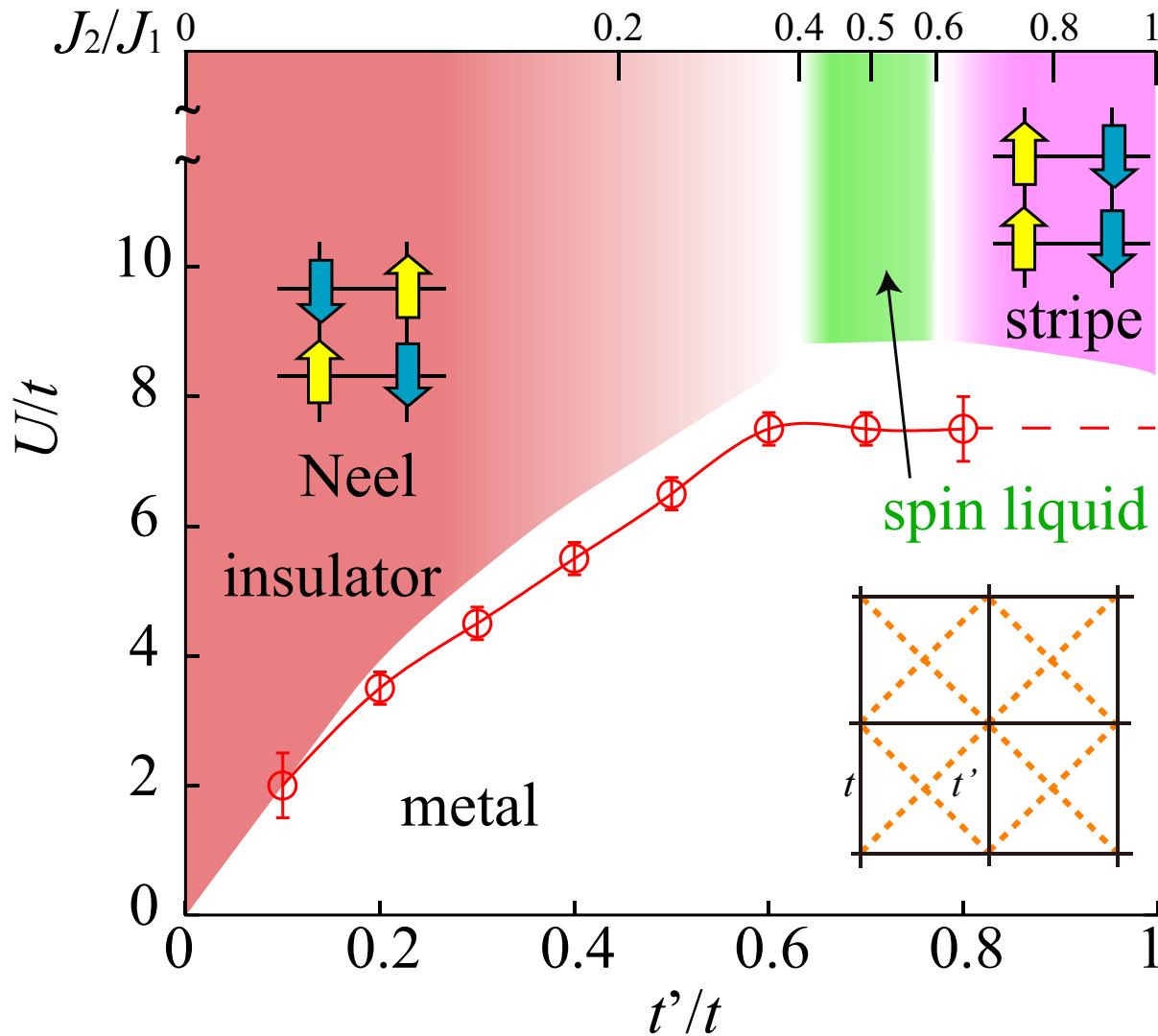
Prof. Tomohiro Sogabe (Nagoya Univ.)

*“Project for advancement of software usability in materials science” by ISSP*



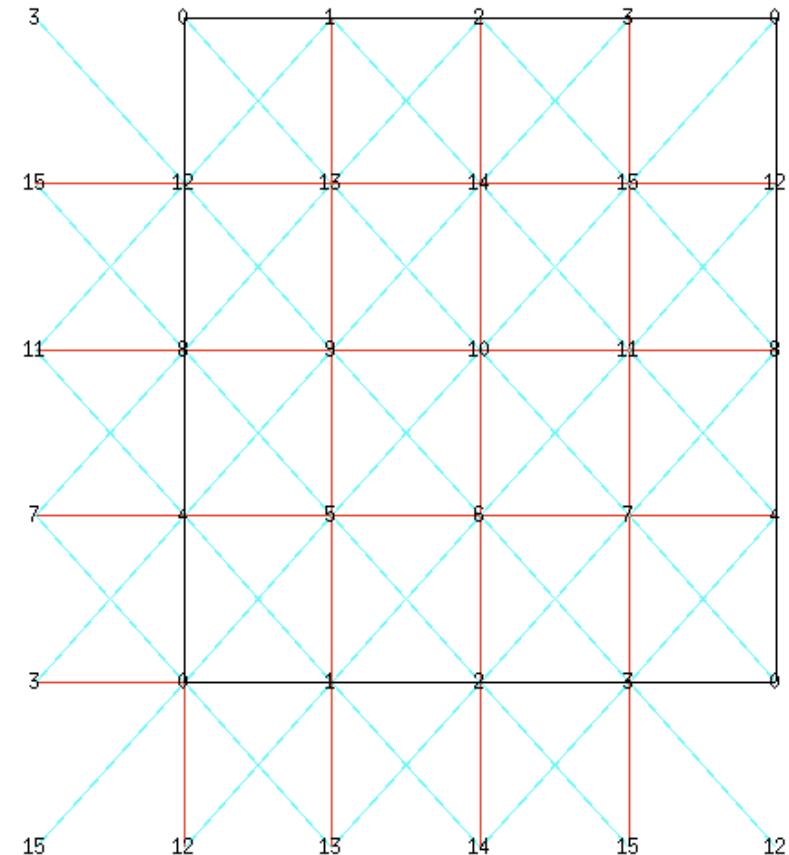
# An Example: $t$ - $t'$ Hubbard

T. Misawa & Y. Yamaji, arXiv:1608.09006



# “Standard” Input

```
W = 4
L = 4
model = "Hubbard"
//method = "Lanczos"
method = "TPQ"
//method = "FullDiag"
lattice = "Square"
t = 1.0
t' = 0.5
U = 8.0
nelec = 16
2Sz = 0
```



# Output

- Ground-state/finite-temperature
- Energy
- Square of energy
- One-body equal time Green's function
- Two-body equal time Green's/correlation function

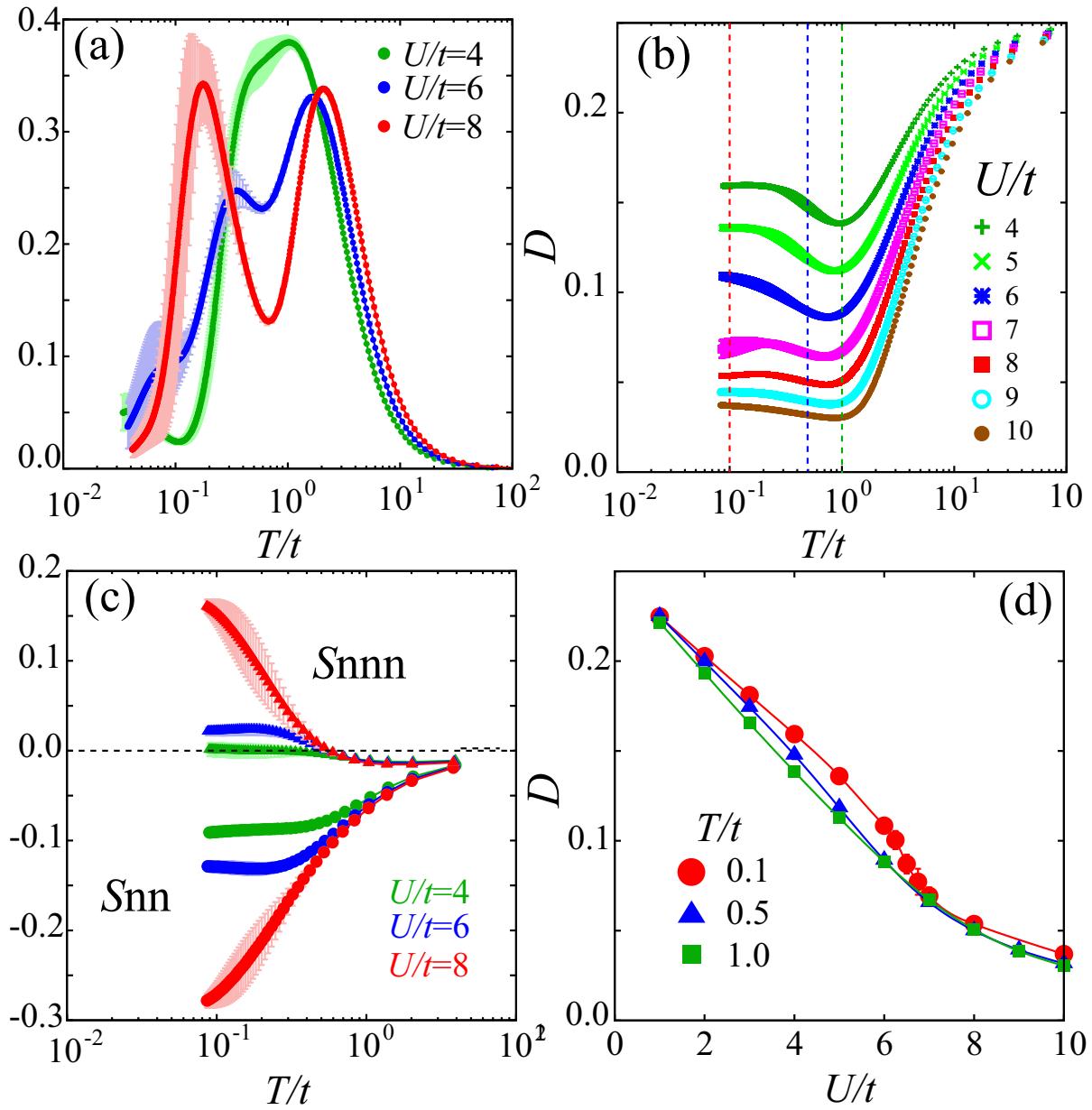
$$\langle H \rangle, \langle H^2 \rangle, \langle c_{i\sigma_1}^\dagger c_{j\sigma_2} \rangle, \langle c_{i\sigma_1}^\dagger c_{j\sigma_2} c_{k\sigma_3}^\dagger c_{\ell\sigma_4} \rangle$$

$$t'/t = 0.5$$

$$C = \frac{\langle \hat{H}^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle^2}{k_B T^2}$$

$$\frac{\langle \phi | \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle}$$

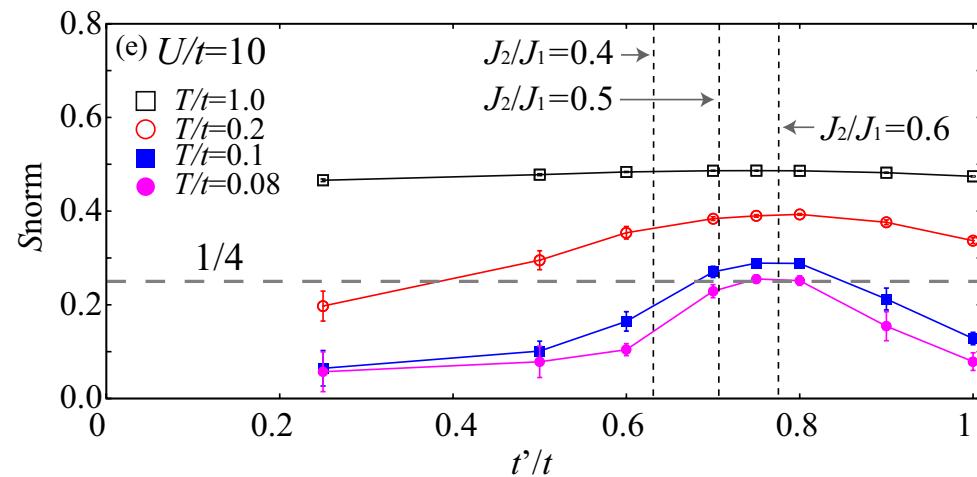
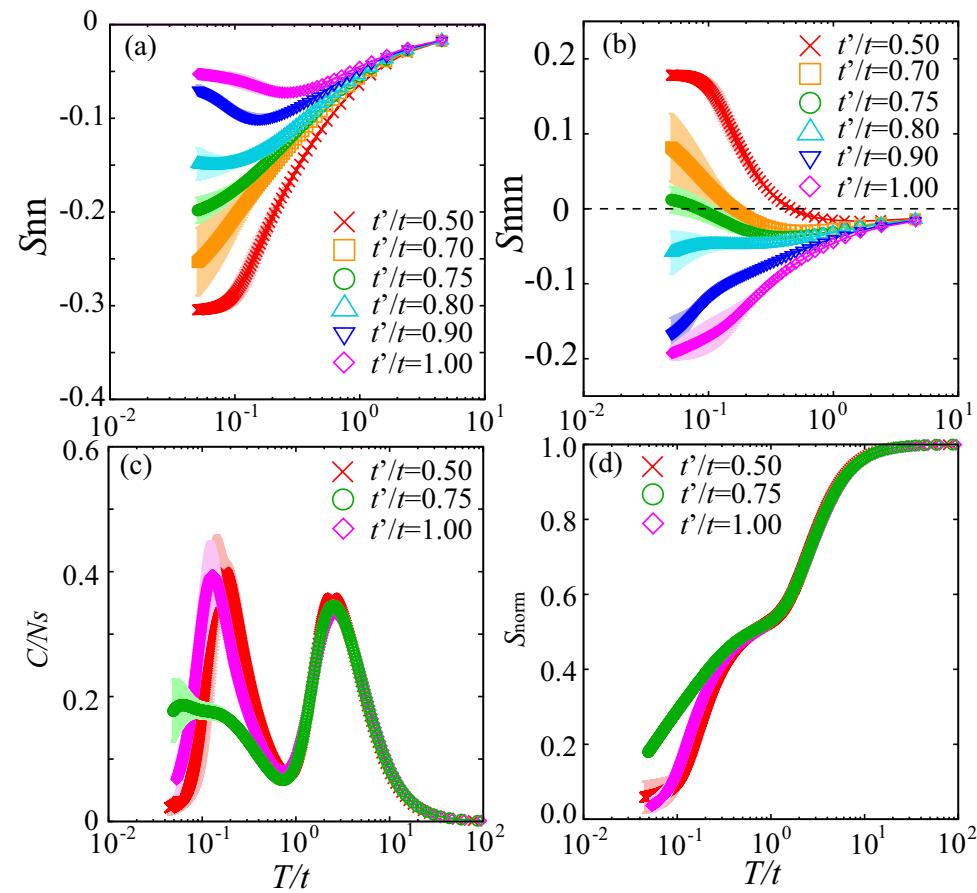
$$D = \frac{\langle \phi | \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle}$$



$$U/t = 10$$

$$\frac{\langle \phi | \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle}$$

$$C = \frac{\langle \hat{H}^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle^2}{k_{\text{B}} T^2}$$



# Standard input

```
W = 4
L = 4
model = "Hubbard"
//method = "Lanczos"
method = "TPQ"
//method = "FullDiag"
lattice = "Square"
t = 1.0
t' = 0.5
U = 8.0
nelec = 16
2Sz = 0
```

Standard interface

Making input files  
from scratch

Expert input

Def. files for Hamiltonian

Def. files for controlling simulation

Expert interface

Subroutines:  
-Lanczos  
-TPQ  
-Full diag. (LAPACK)

# Models

Standard input: Simplified input for typical lattice models

**Hubbard**

$$H = -\mu \sum_{i=1}^N \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} - \sum_{i \neq j} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_{i=1}^N n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \sum_{i \neq j} V_{ij} n_i n_j$$

**Quantum spins**

$$H = -h \sum_{i=1}^N S_i^z + \Gamma \sum_i S_i^x + D \sum_i S_i^z S_i^z + \sum_{i,j} \sum_{\alpha,\beta=x,y,z} J_{ij}^{\alpha\beta} S_i^\alpha S_j^\beta$$

**Kondo lattice**

$$H = -\mu \sum_{i=1}^N \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} - t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \frac{J}{2} \sum_{i=1}^N \left\{ S_i^+ c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} + S_i^- c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} + S_i^z (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}) \right\}$$

Expert input: Flexible input for any one- and two-body hamiltonian

$$H = \sum_{i,j} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} t_{i\sigma_1 j \sigma_2} c_{i\sigma_1}^\dagger c_{j\sigma_2} + \sum_{i,j,k,\ell} \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4} I_{i\sigma_1 j \sigma_2; k \sigma_3 \ell \sigma_4} c_{i\sigma_1}^\dagger c_{j\sigma_2} c_{k\sigma_3}^\dagger c_{\ell\sigma_4}$$