

東海大學應用物理學系  
碩士論文

指導教授：陳永忠 博士

一維單離子單軸異向性自旋 1 XXZ 海森堡模型之基態性質  
研究

Ground State Properties of the One-dimensional uniaxial  
single-ion anisotropic Spin-1 XXZ Heisenberg Model

研究生：許德邦

中華民國一〇四年一月



東海大學應用物理學系  
碩士論文

論文題目

(中文) 一維單離子單軸異向性自旋1 XXZ 海森堡模型之  
基態性質研究

(英文) Ground State Properties of the One-dimensional  
uniaxial single-ion anisotropic Spin-1 XXZ  
Heisenberg Model

指導教授：陳永忠 博士

研究生：許德邦

中華民國一〇四年一月二十日

東海大學碩士班研究生  
論文指導教授推薦書

應用物理學系 碩士班 許德邦 君所提之論文

論文題目：

(中文) 一維單離子單軸異向性自旋 1XXZ 海森堡模型之  
基態性質研究

(英文) Ground State Properties of the One-dimensional  
uniaxial single-ion anisotropic Spin-1 XXZ  
Heisenberg Model

係由本人指導撰述，同意提付審查。

指導教授 陳永忠 (簽章)

104 年 1 月 20 日

東海大學碩士班研究生  
論文口試委員審定書

應用物理學系 碩士班 許德邦 君所提之論文

(中文) 一維單離子單軸異向性自旋 1XXZ 海森堡模型之  
基態性質研究

(英文) Ground State Properties of the One-dimensional  
uniaxial single-ion anisotropic Spin-1 XXZ  
Heisenberg Model

論文口試委員會 召集人 楊明堯 (簽章)

委員 陳永忠

林冲一

中華民國 104 年 1 月 20 日

## 誌謝

在東海的六年半時光將結束了，特別感謝陳永忠老師在碩士班給予的訓練與關心，扎實的讓我學會做數值研究以及物理研究。感謝楊明峯老師在物理上給予的教導與生活上的關心，讓我在凝態物理方面與在做研究上該小心的地方有更多的認識，感謝詹傳宗老師平時的關心與物理上的教導，感謝婁祥麟老師、栗育文老師、吳桂光老師的照顧，還有所有東海物理的老師從大學到碩士班整個學生生活的關心與幫忙。

特別要感謝曾郁欽學長，在 ED、DMRG 還有 Linux 系統上教導我非常多的知識與技巧，在相關物理上也給予我幫助，若是沒有郁欽學長的幫忙我可能還沒辦法做出這麼多的成果。感謝俊諭學長和楊嘉會博士一開始交會我 Linux 的管理，感謝實驗室的成員陳治成學長、陳建宏學長，分別在 PPT、報告、物理概念上給予我的幫助，實驗室的學弟們，魏百君、李家舜、黃士軒等人增強我解決問題的能力以及帶領我進入御宅的世界，超棒的！

感謝劉哲政、邱明宏在碩士班一開始給的建議與長期來的開導和關心，沒有兩位，我肯定不知道會迷惘到什麼時候，真的是最麻吉的兩位。系辦的林姊、紹寬助教、淳斌助教、雅如助教、孟紋助教、紹

倩姊，感謝你們的關心與平常聽我抱怨些小事，系辦也是我最棒的避風港，與你們相處這麼久了，要離開也是一陣不捨，尤其淳斌助教與紹寬助教平時晚上的吃飯聊天更是讓我能發洩的好時光。

東海 Mother 滷味的 father 與 mother，從大一就認識到我碩班結束，六年半來的照顧絕對是讓我有另一個家的感覺，謝謝你們。文中、seven、教練、小明、冬瓜、金星、書豪等文中籃球隊的朋友們，你們讓我可以有時間運動娛樂，感謝你們。小炳、李健群、晶晶、竣翔、介寅、宥峻、旻宗、匪諜、鍾尹之、書維、小賴、小淫蕩學長、品瀚、佑錫，還有遠在澳洲的睫毛好兄弟等許許多多的人，沒有你們，碩班絕對是無聊的，不能細講太多，請原諒我，全打完可能比論文本文還要多了。

最後，特別感謝我家人，我爸與我姑姑、叔叔一起支持著我的決定讓我完成碩士班學業，可惜爺爺奶奶早已不在，不能一起分享。這個碩士班，讓我認識更多人，學會更多事，除了感到值得與無盡的感謝外我已不知道該說什麼，這個致謝獻給所有在這段時間內與我有所接觸的人，謝謝。

## 中文摘要

本論文使用精確對角化 (ED) 以及密度矩陣重整化群 (DMRG) 對一維反鐵磁海森堡模型做基態性質研究。利用 ED 計算各向同性海森堡模型基態能量與自旋關聯，而後使用 DMRG 計算一維單離子單軸異向性自旋 1 XXZ 海森堡模型的相圖。利用 Haldane 相具有的對稱保護拓撲性質，經由計算利用不同晶格長度的 entanglement spectrum，得到此模型的 even Haldane 相、odd Haldane 相以及反鐵磁相，與發表於文獻中的結果一致。

關鍵字：精確對角化、密度矩陣重整化群、一維海森堡模型、自旋關聯函數、基態性質



# 英文摘要

## Abstract

In this thesis, we investigate the ground state properties of the one-dimensional antiferromagnet Heisenberg model by Exact diagonalization (ED) and Density Matrix Renormalization Group(DMRG). By the exact diagonalization, we calculate the ground state energy and spin correlation function. We employ DMRG to investigate the ground-state phase diagram of the one-dimensional uniaxial single-ion anisotropic Spin-1 XXZ Heisenberg model on different lattice sizes. By the analysis based on the property of symmetry-protected topological order, we obtain the even-Haldane phase, the odd-Haldane phase, and the anti-ferromagnetic, which are phases consistent with the published results.

Keywords: Exact diagonalization · Density Matrix Renormalization Group ·  
one-dimensional Heisenberg model · spin correlation function ·  
ground-state properties

# 目錄

誌謝.....	i
中文摘要.....	iii
英文摘要.....	iv
目錄.....	v
表目錄.....	vii
圖目錄.....	ix
第一章 緒論.....	1
第二章 自旋模型.....	4
2-1 海森堡模型.....	4
2-1-1 Haldane 猜想.....	5
2-1-2 單離子單軸異向性海森堡模型.....	5
2-2 AKLT 模型.....	9
第三章 數值方法.....	11
3-1 精確對角化.....	11
3-1-1 Householder 方法.....	11
3-1-2 Lanczos 方法.....	13
3-2 數值重整化群.....	18
3-3 密度矩陣重整化群.....	23

3-3-1 DMRG 的無限算法.....	24
3-3-1 DMRG 的有限算法.....	29
第四章 研究結果 .....	32
4-1 精確對角化結果 .....	32
4-1-1 基態能量 .....	32
4-1-2 自旋關聯函數 .....	35
4-2 DMRG 結果 .....	40
4-2-1 基態能量 .....	40
4-2-2 Entanglement spectrum.....	42
第五章 結論 .....	49
參考文獻 .....	51

## 表目錄

表 3.1	$S = \frac{1}{2}$ 組態二進位表達式與十進位數字關係 .....	12
表 3.2	無限算法得到的能量與截斷誤差 .....	28



## 圖目錄

圖 2-1	Ground state phase diagram <sup>[5]</sup> .....	6
圖 2-2	利用 energy gap 決定相變點位置 <sup>[5]</sup> .....	7
圖 2-3	利用 Central charge 決定相變點 <sup>[5]</sup> .....	8
圖 2-4	AKLT 態示意圖 .....	9
圖 3-1	能量與迭代次數關係圖 .....	16
圖 3-2	NRG 示意圖 .....	18
圖 3-3	改良的 NRG 示意圖 .....	21
圖 3-4	DMRG 系統示意圖 .....	25
圖 3-5	DMRG 無限算法示意圖 .....	27
圖 3-6	不同邊界條件下的精準度與態保留數目關係圖 <sup>[37]</sup> .....	29
圖 3-7	DMRG 有限算法示意圖 .....	30
圖 4-1	PBC 與 OBC 下自旋 1/2 $E_0/L$ v.s. $1/L^2$ .....	32
圖 4-2	PBC 與 OBC 下自旋 1 $E_0/L$ v.s. $1/L^2$ .....	34
圖 4-3	PBC 下自旋 1/2 的自旋關聯函數 .....	36
圖 4-4	PBC 下自旋 1/2 的 $\text{Log }  C(r) $ v.s. $\text{Log } r$ .....	37
圖 4-5	OBC 下自旋 1/2 的自旋關聯函數 .....	38
圖 4-6	OBC 下自旋 1/2 的 $\text{Log }  C(r) $ v.s. $\text{Log } r$ .....	39
圖 4-7	用 DMRG 計算出的 $E_0/L$ v.s. $1/L^2$ .....	40

圖 4-8	$L=88$ 到 $128 E_0/L$ v.s. $1/L^2$ .....	41
圖 4-9	$L=128 D=1.5$ entanglement spectrum, 圖中直線為 $D=1.5$ 時的相變點, 左邊直線為 EH-OH 相變點, 右邊直線為 OH-AFM 相變點 <sup>[5]</sup> 。 .....	43
圖 4-10	$L=96 D=1.5$ entanglement spectrum, 圖中直線意義同圖 4-9 <sup>[5]</sup> 。 .....	44
圖 4-11	$L=64 D=1.5$ entanglement spectrum, 圖中直線意義同圖 4-9 <sup>[5]</sup> 。 .....	44
圖 4-12	$L=32 D=1.5$ entanglement spectrum, 圖中直線意義同圖 4-9 <sup>[5]</sup> 。 .....	45
圖 4-13	$L=128 D=1$ entanglement spectrum 圖中直線為 $D=1$ 時的相變點, 左邊直線為 EH-OH 相變點, 右邊直線為 OH-AFM 相變點 <sup>[5]</sup> 。 .....	46
圖 4-14	$L=96 D=1$ entanglement spectrum, 圖中直線意義同圖 4-13 <sup>[5]</sup> 。 .....	46
圖 4-15	$L=64 D=1$ entanglement spectrum, 圖中直線意義同圖 4-13 <sup>[5]</sup> 。 .....	47
圖 4-16	$L=32 D=1$ entanglement spectrum, 圖中直線意義同圖 4-13 <sup>[5]</sup> 。 .....	47

# 第一章 緒論

物理學家探討材料性質時有幾種方法，利用理論解析先看出物理特性、數值計算算出詳細的物理參數以及利用實驗去測量來和理論做比對。有時理論領先實驗，等待實驗學家做驗證，有時反過來，實驗先量出特性，等待理論學家的解釋。之前的理論學家們已經提出很多種物理模型來探討材料的性質。近期科技的進步，二維平面材料以及准一維材料也漸漸能在實驗室做出來，然而又因尺寸很小，量子效應更加明顯，理論解析與計算顯得更加重要，可以幫助解釋實驗上的現象。

在低維度系統中，很多模型長期被理論物理學家們研究，像是古典的 Ising 模型，理論學家們還可以用平均場論去做解析，能模擬磁性系統的性質，但量子模型就沒這麼容易，將平均場論用在 Hubbard 模型、t-J 模型或是海森堡 (Heisenberg) 模型出現了很大的誤差，因為量子模型中，粒子間的交互作用、量子漲落 (Quantum fluctuation) 等效應的納入，讓量子模型在基態與低溫時有更豐富的性質存在。物理學家為了解決這問題在此時將許多的數值方法開始應用至量子模型上，得到不錯的結果。像是在小晶格系統中可以使用精確對角化 (Exact diagonalization, 簡稱 ED)，並且解析上在一些一維量子模型裡有 Bethe ansatz 精確解可供比對，大晶格系統則有量子蒙地卡羅



(Quantum Monte Carlo, 簡稱 QMC)、變分蒙地卡羅 (Variational Monte Carlo, 簡稱 VMC) 以及目前在一維系統裡計算非常強悍的密度矩陣重整化群 (Density Matrix Renormalization Group, 簡稱 DMRG), DMRG 不僅可以在一維成功, 二維系統也有不錯的結果<sup>[1]</sup>。量子自旋模型可以模擬一些真實材料的性質, 利用數值方法研究出自旋之間的關聯, 稱為自旋關聯函數、研究低溫時的量子相變, 找出相變點確切值、能隙或是磁化率等熱力學問題都是大家有興趣的。

$S = \frac{1}{2}$  的一維反鐵磁 (AFM) 海森堡模型已由 Bethe 解出精確解, 並且知道是沒有能隙 (gapless) 的<sup>[2]</sup>。然而 Haldane 則提出猜想<sup>[3]</sup>, 整數對自旋系統, 能隙是存在的, 而半整數自旋系統則沒有, 實驗上也驗證了這個觀點。Affleck、Lieb、Kennedy 以及 Tasaki 四人提出了一種可以解釋整數自旋具有能隙的模型, 又稱 AKLT 模型<sup>[4]</sup>, 在解釋 Haldane 能隙上非常成功。在拓撲觀點上<sup>[5,6,7]</sup>, 奇數自旋的奇數 Haldane (odd Haldane, 簡稱 OH) 相在邊態為半整數自旋是屬於對稱保護拓撲 (symmetry-protected topological, 簡稱 SPT) 相。

本論文以一維海森堡模型為例子, 而計算的方法使用 ED 與 DMRG。先以較簡單的  $S = \frac{1}{2}$  與  $S = 1$  各向同性海森堡模型處理在小晶格下的狀況, 用 ED 做出循環邊界條件 (Periodic boundary condition, 簡稱 PBC) 與開放性邊界條件 (Open boundary condition, 簡稱 OBC)

的基態能量、自旋關聯函數<sup>[10]</sup>，藉此確定掌握 ED 的計算方法，而 DMRG 則從小系統開始與 ED 做比對，確定結果無誤後拓展至更大的系統，另外根據文獻<sup>[5]</sup>計算單離子單軸異向性  $S=1$  XXZ 海森堡模型的 entanglement spectrum 來看相圖。又因 OH 相具有 entanglement spectrum 最低能譜有簡併的特性，利用此特性計算不同 D 值與不同尺度間的 entanglement spectrum 來看相變位置。



## 第二章 自旋模型

### 2-1 海森堡模型

在本論文中最主要研究的模型為海森堡模型，其 Hamiltonian 為：

$$H = J \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} = \sum_i (J_x S_i^x S_{i+1}^x + J_y S_i^y S_{i+1}^y + J_z S_i^z S_{i+1}^z) \quad (2.1)$$

其中  $J$  代表的是自旋之間的耦合常數，當  $J_x \neq J_y \neq J_z$  時稱為 XYZ 海森堡模型， $J_x = J_y \neq J_z$  時稱為 XXZ 海森堡模型，若  $J_x = J_y = 0$  而  $J_z \neq 0$  就是 Ising 模型。本文中大部分做的計算模擬是  $J_x = J_y = J_z$ ，即為各向同性海森堡模型，我們將(3.1)式做個改寫，引入上升與下降算符：

$$S^+ = S^x + iS^y \quad (2.2)$$

$$S^- = S^x - iS^y \quad (2.3)$$

海森堡模型 Hamiltonian 將改寫成：

$$H = J \sum_i \frac{1}{2} (S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+) + S_i^z S_{i+1}^z \quad (2.4)$$

當  $J < 0$  為鐵磁性， $J > 0$  為反鐵磁性。目前只有  $S = \frac{1}{2}$  一維海森堡模型有精確解，在 H. A. Bethe 的研究裡<sup>[2]</sup>， $S = \frac{1}{2}$  一維海森堡模型每個晶格點基態能量為  $E_0 = -\ln 2 + \frac{1}{4} = -0.43314$ 。

## 2-1-1 Haldane 猜想

1983 年 Haldane 利用非線性 sigma 模型對自旋模型做近似<sup>[3]</sup>，提出在一維均勻的反鐵磁系統中，如果自旋為整數，系統將是有能隙的，（稱 Haldane 能隙），當  $S \rightarrow \infty$  時，能隙大小約為  $\Delta(S) \sim S^2 e^{-\pi S}$ ，關聯長度約為  $\xi \sim S^{-1} e^{\pi S}$ 。而自旋為半整數時，系統沒有能隙（gapless）。並且 Haldane 提出自旋關聯函數在自旋為整數時呈現指數衰減  $\langle S_i \cdot S_j \rangle \sim e^{-\frac{r}{\xi}}$ ，其中  $r = |i - j|$ ，自旋為半整數時呈現冪次衰減（power law）形式， $\langle S_i \cdot S_j \rangle \sim r^{-\eta}$ 。後來的數值計算證明了  $S = 1$  的 Haldane 能隙為  $\Delta \approx 0.41$  與自旋關聯函數是呈指數衰減，關聯長度約為  $6.03$ <sup>[12,13]</sup>， $S = 2$  的 Haldane 能隙為  $\Delta \approx 0.085$ ，關聯長度約為  $49$ <sup>[14,15,16]</sup>，且  $S = \frac{3}{2}$  的系統沒有能隙<sup>[17]</sup>。 $S = \frac{1}{2}$  一維海森堡鏈的自旋關聯函數在數值結果上也呈現冪次衰減，其臨界指數  $\eta = 1$ <sup>[18,19,20]</sup>。

## 2-1-2 單離子單軸異向性海森堡模型

由於晶格場的影響，原本的海森堡模型可再加上一個單離子單軸異向性，Hamiltonian 為：

$$H = J \sum_i [S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + J_z S_i^z S_{i+1}^z] + D \sum_j (S_j^z)^2 \quad (2.5)$$

其中  $D$  所表現的是單離子單軸異向性。將  $D$  關閉即可回到原本的海森

堡模型。此模型包含六種相<sup>[21,22]</sup>，當  $J_z > 0$  時可看到 Haldane 相（或稱 odd Haldane 相）、large-D 相（或稱 even Haldane 相）以及 AFM 相。其各自相變的值與其他特性可參考文獻<sup>[23,24,25,26,27]</sup>。本論文則利用此模型來計算 entanglement spectrum，並嘗試只利用 entanglement spectrum 來決定相變點，在此引入參考文獻中的 ground state phase diagram 以及用 gap 與 central charge 決定相變點的圖以供參考<sup>[5]</sup>。圖 2-1 為單離子單軸異向性海森堡模型的基態相圖，由於原作者<sup>[5]</sup>將單離子單軸異向性與 extended Bose-Hubbard Model 做連結，故圖中括號內為 extended Bose-Hubbard model 的參數與相的名稱<sup>[8,9]</sup>，圖中相界範圍，實線由單離子單軸異向性海森堡模型的 central charge 所界定，虛線為 extended Bose-Hubbard model 的相界。

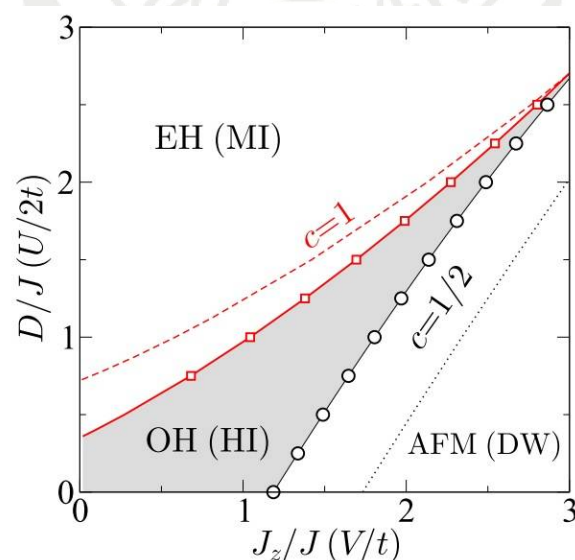


圖 2-1 Ground state phase diagram<sup>[5]</sup>

圖 2-2 是利用能隙為零的方式決定相變點，其中自旋能隙為

$$\Delta_s = E_0(1) - E_0(0) \quad (2.6)$$

neutral gap 為

$$\Delta_n = E_1(0) - E_0(0) \quad (2.7)$$

其中  $E_0(M)$  與  $E_1(M)$  是  $M = \sum_i S_i^z$  的基態或第一激發態能量。圖中的  $g$

是作者原文中所加的微擾項係數。

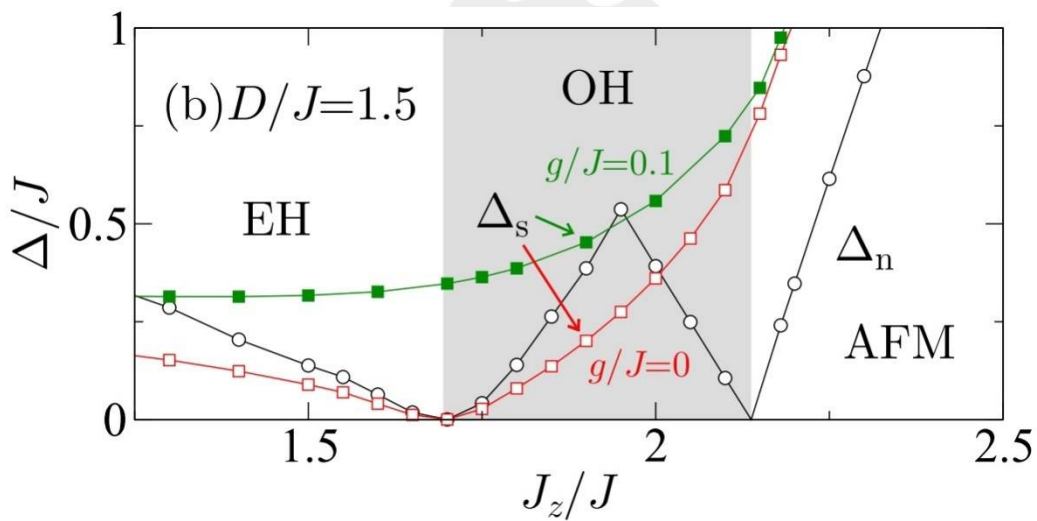


圖 2-2 利用 energy gap 決定相變點位置<sup>[5]</sup>

圖 2-3 為原作者使用 central charge 在  $D=1.5$  時所呈現的相變點。

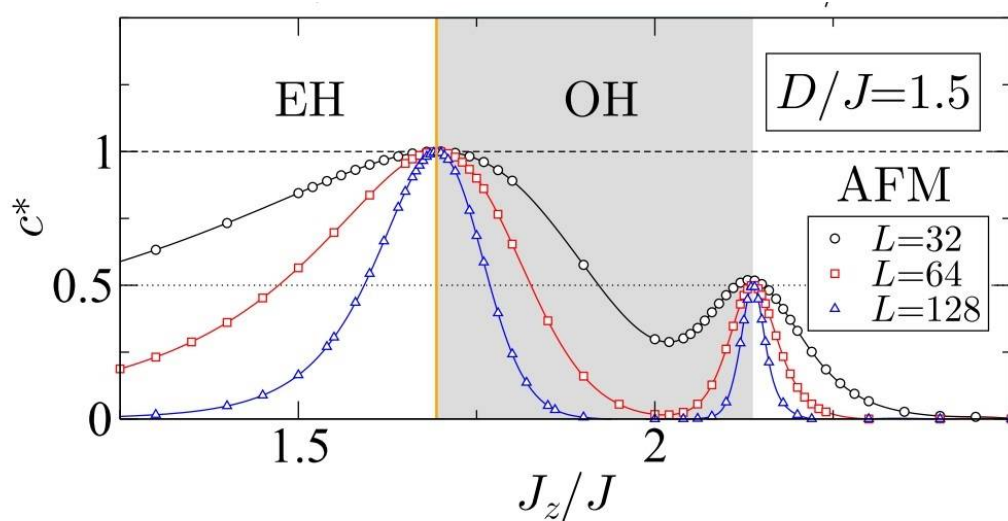


圖 2-3 利用 Central charge 決定相變點<sup>[5]</sup>





## 2-2 AKLT 模型

1987 年，Affleck、Kennedy、Lieb 以及 Tasaki 聯合提出一種嚴格可解模型來了解自旋模型，簡稱 AKLT 模型<sup>[4]</sup>。

AKLT 模型中，每個  $S=1$  的自旋可以視為兩個  $S=\frac{1}{2}$  的自旋所組成，

圖像為：

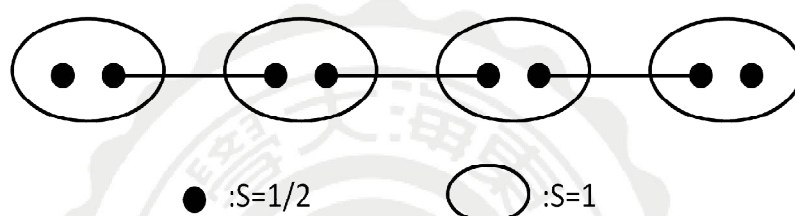


圖 2-4 AKLT 態示意圖

這時的系統基態被稱為 valence-bond-solid (VBS)，是沒有對稱性被破壞且沒有簡併的。這種自旋 1 的 Hamiltonian 為：

$$H_{S=1}^{AKLT} = \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} + \frac{1}{3} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1})^2 \quad (2.8)$$

他們成功解釋驗證了 Haldane 所提出的猜想<sup>[3]</sup>。AKLT 還能推廣至更高的自旋，每個自旋大小為  $S$  的自旋由  $2S$  個  $S=\frac{1}{2}$  自旋所組成。此處只做自旋 1 的模型，較高自旋的內容可參考文獻<sup>[4]</sup>。

另外，根據 AKLT 模型還預測了自旋模型在系統邊界條件為 OBC 時，系統兩邊端點會出現邊態 (edge state)，像是  $S=1$  的系統，兩端各有一個  $S=\frac{1}{2}$  的自旋，並且和其他自旋沒有交互作用，實驗上也觀



測到此現象<sup>[28]</sup>。而這兩個 $S=\frac{1}{2}$ 造成了 $S=1$ 海森堡鏈有四重簡併<sup>[29]</sup>。



## 第三章 數值方法

### 3-1 精確對角化

#### 3-1-1 Householder 方法

本論文的程式是利用 fortran 做編寫，在小晶格系統中，由於系統大小讓維度還屬於可以讓電腦做完整對角化的時候，可以利用 Householder 方法來解出全部的特徵值。在我們的反鐵磁海森堡模型中，Hamiltonian 如(2.4)式，取  $J=1$ ，要轉換成矩陣的話就必須給每個可能的狀態一個編號，以一維  $S=\frac{1}{2}$ ，自旋數目為 2 為例，在電腦中我們使用二進位編碼來顯示我們要自旋狀態，假設自旋向上為 1，自旋向下為 0 來表示，利用自旋粒子在不同的格點上，我們便能找出一組對應的十進位數字，接下來只要記錄好第幾個態對應哪個十進位數字，我們便能利用電腦快速的做轉換<sup>[30]</sup>。如表 3.1 所示。

編號	自旋狀態	十進位數字
$ 1\rangle$	$ 1,1\rangle$	3
$ 2\rangle$	$ 1,0\rangle$	2
$ 3\rangle$	$ 0,1\rangle$	1
$ 4\rangle$	$ 0,0\rangle$	0

表 3.1  $S = \frac{1}{2}$  組態二進位表達式與十進位數字關係

將每個狀態與 Hamiltonian 作用後可以得出另外的狀態

$$H|1,1\rangle = \frac{1}{4}|1,1\rangle \quad (3.1)$$

$$H|1,0\rangle = \frac{1}{2}|0,1\rangle - \frac{1}{4}|1,0\rangle \quad (3.2)$$

$$H|0,1\rangle = \frac{1}{2}|1,0\rangle - \frac{1}{4}|0,1\rangle \quad (3.3)$$

$$H|0,0\rangle = \frac{1}{4}|0,0\rangle \quad (3.4)$$

如此一來，就可以組成一個  $4 \times 4$  的矩陣

$$H = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{4} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4} \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

再來利用 TRED2 及 TQLI 兩個副程式<sup>[31]</sup>來解出整個系統的本徵態與

本徵向量。此為 Householder 方法。

### 3-1-2 Lanczos 方法

但 3-1-1 的例子中在自旋數目為 12 以上時，系統的 Hilbert space 維度為  $2^{12} = 4096$  若要用此維度去做計算便會超過記憶體上限，此時我們加入 Total  $S_z$  為零的對稱性：

$$S_z^{tot} = \sum_i S_i^z = 0 \quad (3.6)$$

將每個晶格點上的  $S_z$  相加，保留相加後為零的組態，此時系統維度為  $C_6^{12} = 924$ ，此時還可以使用 Householder 方法，但自旋數目增加為 14 時，儘管加入 Total  $S_z$  對稱性，維度依然達到 3432，矩陣所用的記憶體為  $3432 \times 3432$  加上其他所需要的 array 等記憶體粗略估計已經超過電腦 2GB 記憶體，又由於我們關心的是基態性質，此時我們使用 Lanczos 方法來得到基態能量。

Lanczos 方法<sup>[32,10]</sup>是建構一組 Lanczos 基底，使得我們的 Hamiltonian 變成一個三對角的矩陣。首先我們選擇一個任意的歸一化向量  $|\phi_1\rangle$  作為起始向量，接著將 Hamiltonian 作用至起始向量得到新的向量  $|\tilde{\phi}_2\rangle$ ，令其方程式為：

$$|\tilde{\phi}_2\rangle = H|\phi_1\rangle - a_1|\phi_1\rangle \quad (3.7)$$

並要求新的向量  $|\tilde{\phi}_2\rangle$  與  $|\phi_1\rangle$  正交，即  $\langle\phi_1|\tilde{\phi}_2\rangle=0$ ，因此得到：

$$\langle\phi_1|\tilde{\phi}_2\rangle=\langle\phi_1|H|\phi_1\rangle-a_1\langle\phi_1|\phi_1\rangle=0 \quad (3.8)$$

此時可以將  $a_1$  解出：

$$a_1=\langle\phi_1|H|\phi_1\rangle \quad (3.9)$$

接著將  $|\tilde{\phi}_2\rangle$  歸一化得到  $|\phi_2\rangle$

$$|\phi_2\rangle=\frac{1}{b_1}|\tilde{\phi}_2\rangle=\frac{1}{b_1}(H|\phi_1\rangle-a_1|\phi_1\rangle) \quad (3.10)$$

其中  $b_1\equiv\sqrt{\langle\tilde{\phi}_2|\tilde{\phi}_2\rangle}$ ，接著利用  $|\phi_2\rangle$  建構出第三個向量，令方程式為

$$|\tilde{\phi}_3\rangle=H|\phi_2\rangle-a_2|\phi_2\rangle-b_1|\phi_1\rangle \quad (3.11)$$

此時要求  $|\tilde{\phi}_3\rangle$  要與  $|\phi_2\rangle$  及  $|\phi_1\rangle$  都正交

$$\langle\phi_2|\tilde{\phi}_3\rangle=\langle\phi_2|H|\phi_2\rangle-a_2\langle\phi_2|\phi_2\rangle-b_1\langle\phi_2|\phi_1\rangle=0 \quad (3.12)$$

因正交條件  $\langle\phi_2|\phi_1\rangle=0$  得到：

$$a_2=\langle\phi_2|H|\phi_2\rangle \quad (3.13)$$

接著另一正交條件：

$$\langle\phi_1|\tilde{\phi}_3\rangle=\langle\phi_1|H|\phi_2\rangle-a_2\langle\phi_1|\phi_2\rangle-b_1\langle\phi_1|\phi_1\rangle=0 \quad (3.14)$$

可得出

$$b_1=\langle\phi_1|H|\phi_2\rangle \quad (3.15)$$

因 Hamiltonian 為 Hermitian，故

$$b_1 = \langle \phi_1 | H | \phi_2 \rangle = \langle \phi_2 | H | \phi_1 \rangle \quad (3.16)$$

利用(3.15)式可證明  $b_1 = \sqrt{\langle \tilde{\phi}_2 | \tilde{\phi}_2 \rangle}$

$$b_1 = \langle \phi_2 | H | \phi_1 \rangle = \langle \phi_2 | (|\tilde{\phi}_2\rangle + a_1 |\phi_1\rangle) \rangle = \langle \phi_2 | \tilde{\phi}_2 \rangle + a_1 \langle \phi_2 | \phi_1 \rangle \quad (3.17)$$

$$b_1 = \frac{1}{b_1} \langle \tilde{\phi}_2 | \tilde{\phi}_2 \rangle \quad (3.18)$$

$$b_1^2 = \langle \tilde{\phi}_2 | \tilde{\phi}_2 \rangle \quad (3.19)$$

最後再將  $|\tilde{\phi}_3\rangle$  歸一化。如此循環下去可推出 Lanczos 基底的製造方法

$$|\tilde{\phi}_{n+1}\rangle = H |\phi_n\rangle - a_n |\phi_n\rangle - b_{n-1} |\phi_{n-1}\rangle \quad (3.20)$$

$$a_n = \langle \phi_n | H | \phi_n \rangle \quad (3.21)$$

$$b_n = \langle \phi_n | H | \phi_{n+1} \rangle = \langle \phi_{n+1} | H | \phi_n \rangle \quad (3.22)$$

而 Lanczos 基底建立出的三對角矩陣的長相為

$$H = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & 0 & \cdots & \cdots \\ b_1 & a_2 & b_2 & \cdots & \cdots \\ 0 & b_2 & a_3 & b_3 & \cdots \\ \vdots & 0 & b_3 & \ddots & b_{n-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & b_{n-1} & a_n \end{pmatrix} \quad (3.23)$$

從起始向量開始，每做出一組  $a_n$ 、 $b_n$  便能利用 TQLI 副程式或是 LAPACK 中提供的副程式來解基態能量。通常在維度很大的矩陣中，利用 Lanczos 方法大約只要極短的迭代便能開始收斂。

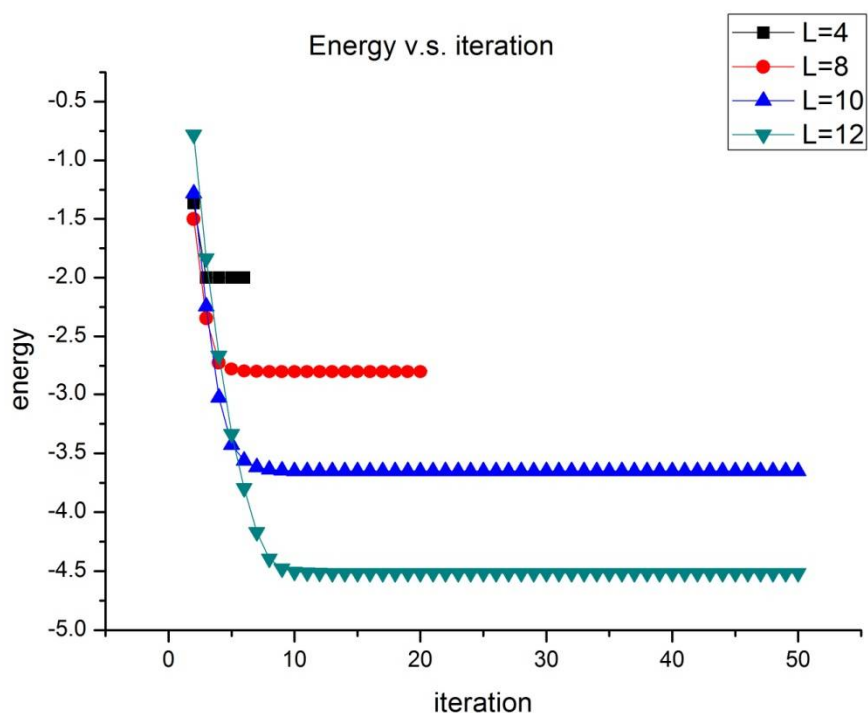


圖 3-1 能量與迭代次數關係圖

收斂的方式可以利用第  $n$  次得到的能量與第  $n-1$  次得到的能量做相減，當達到我們要的精確度以後便可停止。得到基態能量後，將以 Lanczos 基底組成的本徵向量換回我們以 Spin 為基底的基態本徵向量，然後做我們要的物理量測量。

而值得注意的是整個 Lanczos 基底作出的三對角矩陣最大的維度不可以超過原本矩陣的維度。另外便是 Lanczos 基底會造成原本的基底失去正交性，於是得到基態能量後便停止，如果嘗試收斂得到其他能量，便會發現能譜中有其他假的能量出現，也無從得知哪些是假的，這類假的能量值，稱之為「Ghost」<sup>[33]</sup>。以

循環邊界條件， $S = \frac{1}{2}$  並且取 Total  $S_z$  為零的各向同性海森堡模型  
為例，原本的能量能譜用 Householder 方法或手解為-2、-1、0、  
0、0、1 六個能量，而 Lanczos 方法嘗試得到基態能量後繼續收  
斂其他能量則得到-2、-1.97661、-1、0、0.90344、1 。





## 3-2 數值重整化群

介紹密度矩陣重整化群之前，必先提起 1975 年 K. G. Wilson 用來解近藤問題 (Kondo Problem) 所使用的數值重整化群 (Numerical Renormalization Group, 簡稱 NRG) <sup>[34]</sup>，NRG 先在小晶格上求出所要的物理訊息，利用此小晶格給出的訊息為基礎獲得較大系統的物理訊息。

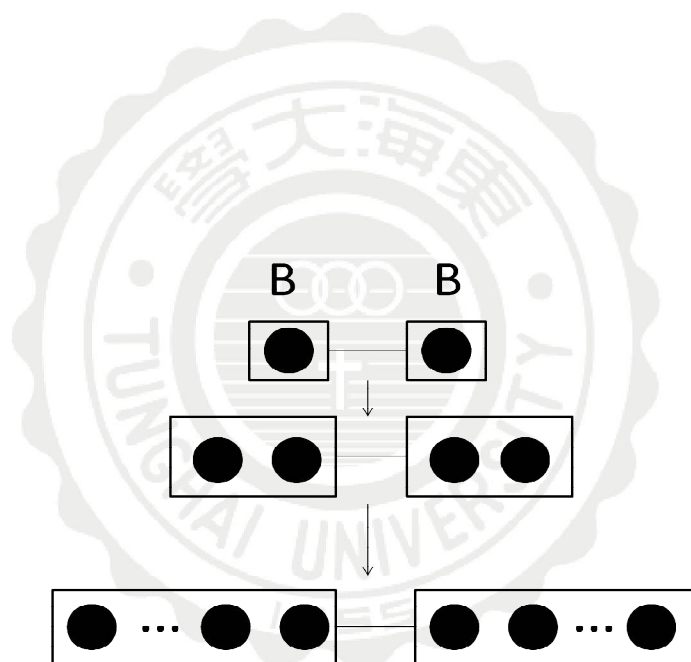


圖 3-2 NRG 示意圖

如圖 3-2 所示，先從兩個晶格點開始，每次格點加倍成長，一直長到我們需要的大小。但我們的 Hilbert space 也是隨著系統格點數呈現指數成長，到最後在達到我們所需要的格點數之前，電腦記憶體便會不足。於是我們將做截斷(truncation)的動作，將物理上可能對我們來說不重要、影響較小的物理資訊丟棄，將重要的物理資訊留住並使

用在更大的系統中，這便稱之為重整化。

本段我們以海森堡模型為例子介紹重整化的程序，首先考慮海森堡模型的 Hamiltonian:

$$H = \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} = \sum_i \left( \frac{1}{2} (S_i^+ \otimes S_{i+1}^- + S_i^- \otimes S_{i+1}^+) + S_i^z \otimes S_{i+1}^z \right) \quad (3.24)$$

在過程中我們必須儲存的東西有  $[S_r^z]$ 、 $[S_r^+]$ 、 $[S_l^z]$ 、 $[S_l^-]$  以及  $[H_B]$ ，其中足標為  $r$  ( $l$ ) 的算符是指圖 3-2 中左(右)邊方塊(block)中最右(左)邊的自旋粒子的算符，至於  $[S_r^-]$  和  $[S_l^-]$  可由  $[S_r^+]$  和  $[S_l^+]$  取共軛得到。假設我們的算符維度都為  $m \times m$  且令左邊方塊足標為  $i$ ，右邊方塊足標為  $j$ ，整個系統的 Hamiltonian 維度就是  $m^2 \times m^2$ ，寫出整個 Hamiltonian 的直積表達式為:

$$\begin{aligned} [H_{BB}]_{ij, i'j'} &= [H_B]_{ii'} \otimes [I_B]_{jj'} + [I_B]_{ii'} \otimes [H_B]_{jj'} \\ &+ \frac{1}{2} \{ [S_r^+]_{ii'} \otimes [S_l^-]_{jj'} + [S_r^-]_{ii'} \otimes [S_l^+]_{jj'} \} + [S_r^z]_{ii'} \otimes [S_l^z]_{jj'} \end{aligned} \quad (3.25)$$

將整個系統的 Hamiltonian 做出來以後，將其對角化，取其中  $m$  個最小的能量本徵值  $E_i$ ，以及其對應的本徵向量  $v_i$ ，將  $v_i$  依照對應的  $E_i$  大小從小排到大組成一個維度是  $m^2 \times m$  的轉換矩陣  $O$ ， $O$  的長相為:

$$O = \begin{pmatrix} \vdots & \vdots & & \vdots \\ v_1 & v_2 & \cdots & v_m \\ \vdots & \vdots & & \vdots \end{pmatrix}_{m^2 \times m} \quad (3.26)$$

如此一來我們便可以將原來的算符做線性變換:

$$[S_{new,r}^+]_{ij,i'j'} = O^\dagger([I_B]_{ii'} \otimes [S_r^+]_{jj'})O \quad (3.27)$$

$$[S_{new,r}^z]_{ij,i'j'} = O^\dagger([I_B]_{ii'} \otimes [S_r^z]_{jj'})O \quad (3.28)$$

$$[S_{new,l}^+]_{ij,i'j'} = O^\dagger([S_l^+]_{ii'} \otimes [I_B]_{jj'})O \quad (3.29)$$

$$[S_{new,l}^z]_{ij,i'j'} = O^\dagger([S_l^z]_{ii'} \otimes [I_B]_{jj'})O \quad (3.30)$$

$$[H_{new,B}]_{ij,i'j'} = O^\dagger([H_{BB}]_{ij,i'j'})O \quad (3.31)$$

得到新算符後，令  $[S_r^+] = [S_{new,r}^+]$  等。接著回到(3.24)式組成新的 Hamiltonian，然後重複上面敘述的動作。

但 NRG 這方法在強關聯模型或是自旋模型中卻不能達到在處理近藤模型那般準確，根據文獻<sup>[35]</sup>指出，NRG 中，兩個方塊的交互作用被忽略了，所以小系統無法完整描述整個系統，改進的方法是，系統不加倍成長，而是只增加一個晶格點<sup>[36]</sup>，如圖 3-3。

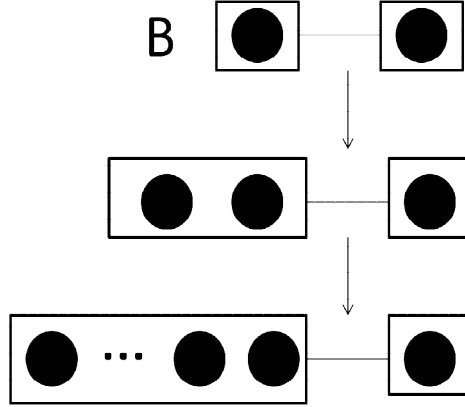


圖 3-3 改良的 NRG 示意圖

利用改良後的 NRG 方法，計算上要紀錄的內容也相對改變了，現在要儲存的算符只有  $[S_r^z]$ 、 $[S_r^+]$  及  $[H_B]$ ，而(3.25)式變成

$$[H_{BB}] = [H_B] \otimes [I_B] + \frac{1}{2} \{ [S_r^+] \otimes [S^-] + [S_r^-] \otimes [S^+] \} + [S_r^z] \otimes [S^z] \quad (3.32)$$

整個系統的 Hamiltonian 維度變成  $md \times md$ ， $d$  為最右邊自旋粒子的維度。接下來的步驟一樣，但(3.27)到(3.31)式改成做

$$[S_{new,r}^+] = O^\dagger ([I_B] \otimes [S^+]) O \quad (3.33)$$

$$[S_{new,r}^z] = O^\dagger ([I_B] \otimes [S^z]) O \quad (3.34)$$

$$[H_{new,B}] = O^\dagger ([H_{BB}]) O \quad (3.35)$$

雖然比改良前準了點，但仍然讓人不滿意。在近藤模型或相似的雜質系統中有效是因為耦合的效果會隨著系統格點數增加而呈指數衰減，但在自旋模型中，每個自旋的耦合是固定的<sup>[37]</sup>。

另一個原因，在 NRG 中我們選取的是能量的本徵值，但保留最

低能量的  $m$  個態，不一定是出現機率最大的  $m$  個態，而 Wilson 的學生 S. R. White 發現了這點而創造出新的計算法。



### 3-3 密度矩陣重整化群

S. R. White 將 Wilson 的 NRG 方法做改進，不再使用能量本徵值做選取的態，他將整個系統分成了系統塊 (system block) 和環境塊 (environment block)，進一步產生系統塊的約化密度矩陣 (reduced density matrix, 簡稱 RDM)，RDM 本徵值所含的物理意義是其對應的本徵態出現的機率，選取較大的 RDM 本徵值所對應的本徵向量來做轉換矩陣  $O$  可以合理的描述整個系統的物理。此套計算法稱為密度矩陣重整化群 (Density Matrix Renormalization Group, 簡稱 DMRG) [37]。

根據統計力學，要求一個物理量的期望值  $\langle \hat{A} \rangle$  可以寫成

$$\sum_i P_i \langle \psi_i | \hat{A} | \psi_i \rangle \quad (3.36)$$

取一組正交歸一基底  $\{|n\rangle\}$ ，將各量子態表示為

$$|\psi_i\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n | \psi_i \rangle \quad (3.37)$$

$$\langle \psi_i | = \sum_m \langle \psi_i | m \rangle \langle m | \quad (3.38)$$

將(3.37)和(3.38)式帶入(3.36)式中得到

$$\begin{aligned}
\langle \hat{A} \rangle &= \sum_i P_i \left( \sum_m \langle \psi_i | m \rangle \langle m | \right) \hat{A} \left( \sum_n | n \rangle \langle n | \psi_i \rangle \right) \\
&= \sum_{n,m} \left( \sum_i \langle n | \psi_i \rangle P_i \langle \psi_i | m \rangle \right) \langle m | \hat{A} | n \rangle
\end{aligned} \tag{3.39}$$

$$\rho_{nm} = \sum_i \langle n | \psi_i \rangle P_i \langle \psi_i | m \rangle \tag{3.40}$$

$$\hat{A}_{mn} = \langle m | \hat{A} | n \rangle \tag{3.41}$$

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_{n,m} \rho_{nm} \hat{A}_{mn} = \text{Tr}(\rho \hat{A}) \tag{3.42}$$

$$\text{Tr}(\rho) = 1 \tag{3.43}$$

而我們要研究的是系統基態，所以在重整化過程中只尋找基態（此態稱 target state）來建構密度矩陣。下面將開始介紹 DMRG 的詳細做法。

### 3-3-1 DMRG 的無限算法

DMRG 的無限算法（infinite system procedure，又稱 Warm-up procedure），基本上跟 NRG 很像，每次成長兩個晶格點，假設系統的基態波函數是

$$|\psi_0\rangle = \sum_{i,l=1}^m \sum_{j,k=1}^d \varphi_{ijkl} |i\rangle \otimes |j\rangle \otimes |k\rangle \otimes |l\rangle \tag{3.44}$$

其中  $i,l$  為左右兩邊方塊，只有保留  $m$  個態，而  $j,k$  各是單一顆自旋粒子，依自旋不同，最高維度為  $d$ （如  $S = \frac{1}{2}$ ，則  $d = 2$ ）。系統的樣子為

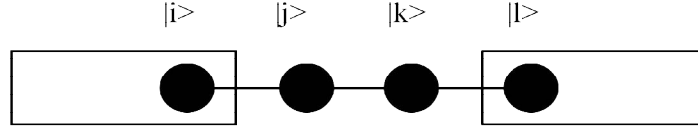


圖 3-4 DMRG 系統示意圖

我們將整個系統稱呼為超塊 (superblock)，整個系統 Hamiltonian 的直積表示式為

$$[H_{B..B}] = [H_{B..}] \otimes [I_{B..}] + [I_{B..}] \otimes [H_{..B}] + [I_{B..}] \otimes [H_{..}] \otimes [I_{B..}] \quad (3.45)$$

$$[H_{B..}] = [H_l] \otimes [I_{..}] + [S_l^z] \otimes [S_{..}^z] + \frac{1}{2} ([S_l^+] \otimes [S_{..}^-] + [S_l^-] \otimes [S_{..}^+]) \quad (3.46)$$

$$[H_{..B}] = [I_{..}] \otimes [H_r] + [S_{..}^z] \otimes [S_r^z] + \frac{1}{2} ([S_{..}^+] \otimes [S_r^-] + [S_{..}^-] \otimes [S_r^+]) \quad (3.47)$$

$$[H_{..}] = [S_{..}^z] \otimes [S_{..}^z] + \frac{1}{2} ([S_{..}^+] \otimes [S_{..}^-] + [S_{..}^-] \otimes [S_{..}^+]) \quad (3.48)$$

建構好了 Hamiltonian，算出 target state 後組出左、右方塊的約化密度矩陣，首先我們將(3.44)式的足標重新定義  $i, j \rightarrow i$ ， $k, l \rightarrow j$

$$|\psi_0\rangle = \sum_{i,j=1}^{md} \varphi_{ij} |i\rangle \otimes |j\rangle \quad (3.49)$$

兩個約化密度矩陣便可由(3.49)式來建構

$$\rho_{i,j}^L = \sum_{k=1}^{md} \psi_{i,k}^* \psi_{j,k} \quad (3.50)$$

$$\rho_{i,j}^R = \sum_{k=1}^{md} \psi_{k,i}^* \psi_{k,j} \quad (3.51)$$

將 RDM 對角化得到本徵值  $w_i$  以及對應的本徵向量  $u_i$ ，保留  $m$  個最大的本徵值，將其對應的  $m$  個本徵態依照大小順序排好，如同(3.26)式



一般建構出我們需要的轉換矩陣  $O$

$$O = \begin{pmatrix} \vdots & \vdots & \vdots \\ u_1 & u_2 & \cdots & u_m \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}_{md \times m} \quad (3.52)$$

如此便能將所需要的算符做線性轉換

$$[S_l^+] = [S_{new,l}^+] = O^\dagger ([I_{B,l}] \otimes [S_\bullet^+]) O \quad (3.53)$$

$$[S_l^z] = [S_{new,l}^z] = O^\dagger ([I_{B,l}] \otimes [S_\bullet^z]) O \quad (3.54)$$

$$[S_r^+] = [S_{new,r}^+] = O^\dagger ([S_\bullet^+] \otimes [I_{B,r}]) O \quad (3.55)$$

$$[S_r^z] = [S_{new,r}^z] = O^\dagger ([S_\bullet^z] \otimes [I_{B,r}]) O \quad (3.56)$$

$$\begin{aligned} [H_l] &= O^\dagger ([H_{B,\bullet}]) O \\ [H_r] &= O^\dagger ([H_{\bullet,B}]) O \end{aligned} \quad (3.57)$$

算符  $[S_l^z]$  ( $[S_r^z]$ ) 為左 (右) 邊方塊中最右邊 (左) 的自旋粒子算符， $[S_l^-]$  與  $[S_r^-]$  可由  $[S_l^+]$ 、 $[S_r^+]$  各自取共軛得到， $[H_l]$ 、 $[H_r]$  各代表左、右邊方塊的 Hamiltonian。接著再加入兩個晶格點就可以回到(3.45)式建構出新系統的 Hamiltonian，循著一樣的做法直到我們所需要的系統大小為止。

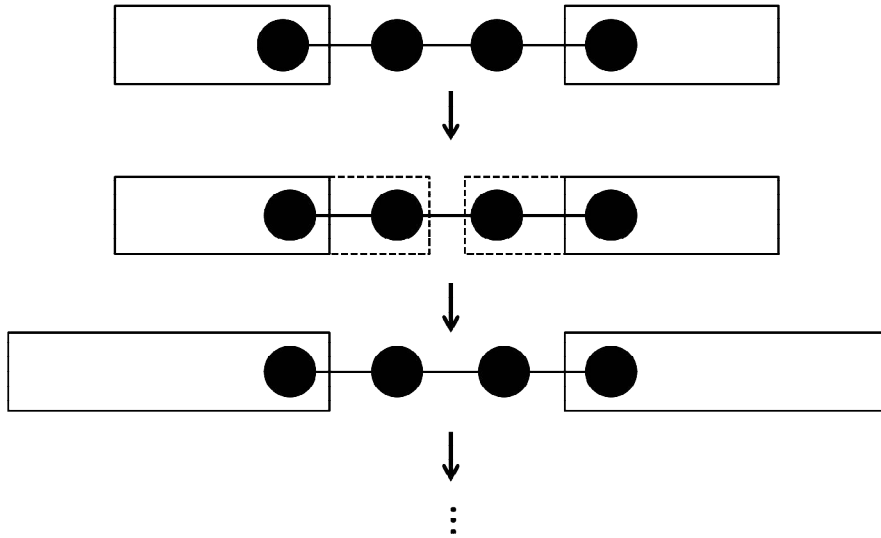


圖 3-5 DMRG 無限算法示意圖

因為左右邊方塊大小是一樣的，當方塊大小原本為  $l$ ，做完 Hamiltonian 後就是  $l+1$ ，整個 superblock 大小為  $2l+2$ 。此算法可以計算熱力學極限下的物理量結果，但由於只留下  $m$  個態，在計算有限系統的物理量時，就會精度不夠。另外密度矩陣代表的是機率，所以將本徵值加起來其總和應該為 1。因我們做了截斷這個動作，將定義截斷誤差 (truncation error)

$$T_{error} = 1 - \sum_{i=1}^m w_i \quad (3.58)$$

一般來說， $T_{error}$  越小，我們求得的物理量誤差也越小。以各向同性  $S = \frac{1}{2}$  海森堡模型， $L=32$  為例子，如表 3.2。

m	$E_0/L$	$T_{\text{error}}$
10	-0.437386476	$8.66 \times 10^{-6}$
20	-0.437415767	$1.45 \times 10^{-7}$
30	-0.437416071	$1.79 \times 10^{-8}$
40	-0.437416111	$5.61 \times 10^{-10}$

表 3.2 無限算法得到的能量與截斷誤差

DMRG 大多使用開放性邊界條件，如果使用 PBC，要達到一樣的精準度就不如 OBC 只需要保留  $m$  個態，而需要保留更多的態，如圖 3-6<sup>[37]</sup>。



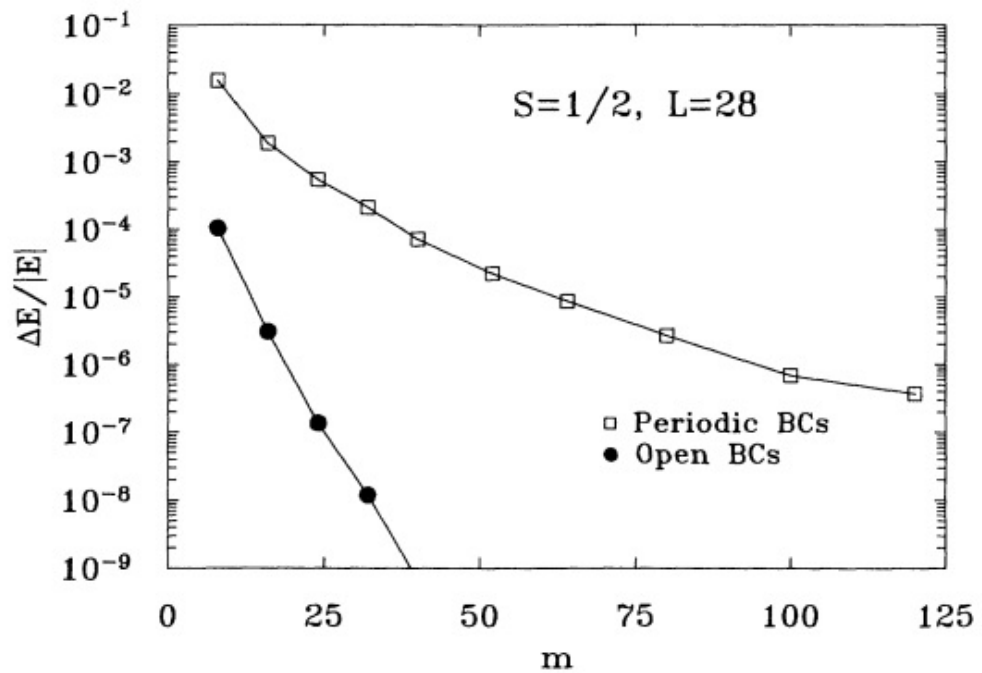


圖 3-6 不同邊界條件下的精準度與態保留數目關係圖<sup>[37]</sup>

### 3-3-1 DMRG 的有限算法

接下來介紹的是 DMRG 的有限算法 (finite system procedure, 又稱 sweep procedure), 整體流程與無限算法差不多, 只是在此每個方塊大小的算符都要儲存, 所以在做 warm-up 時可以先將所有尺寸的算符都儲存下來, 方便這邊的計算。

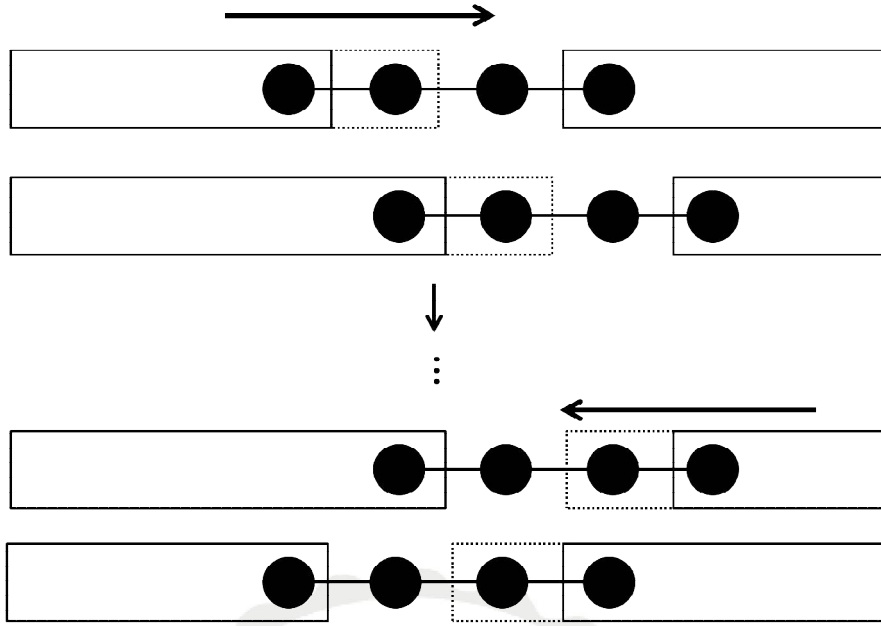


圖 3-7 DMRG 有限算法示意圖

首先假設系統大小為  $L$ ，在開始 sweep 之前長相應該如圖 3-4，此時左、右邊方塊大小為  $\frac{L}{2}-1$ 。接著開始 sweep，方向往右，左邊方塊變大為  $\frac{L}{2}$ ，右邊方塊變小為  $\frac{L}{2}-2$ ，保持兩方塊中間有兩個自旋粒子，一直到右邊只剩下一顆自旋粒子時，左邊方塊大小為  $L-3$ ，這時才往回 sweep。向左 sweep 至左邊剩下一顆自旋粒子後再往右，直到回到圖 3-4，如此完整來回一次，稱為一次 sweep。

Sweep 過程中的左方塊與右方塊的 Hamiltonian 直積表達式為

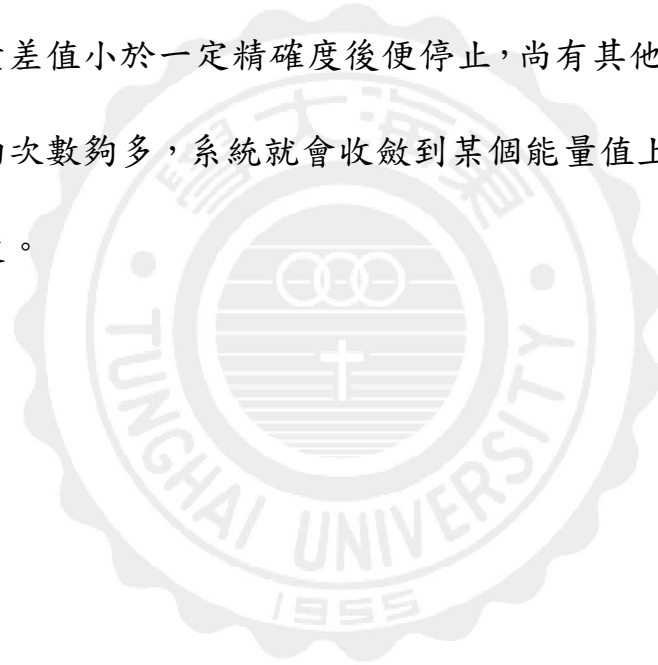
$$[H_{B.}(i+1)] = [H_l(i)] \otimes [I.] + [S_l^z(i)] \otimes [S_r^z] + \frac{1}{2}([S_l^+(i)] \otimes [S_r^-] + [S_l^-(i)] \otimes [S_r^+]) \quad (3.59)$$

$$\begin{aligned} [H_{B.}(L-i-1)] &= [I.] \otimes [H_r(L-i-2)] + [S_r^z] \otimes [S_l^z(L-i-2)] \\ &\quad + \frac{1}{2}([S_r^+] \otimes [S_l^-(L-i-2)] + [S_r^-] \otimes [S_l^+(L-i-2)]) \end{aligned} \quad (3.60)$$

當  $i=1$  時， $[H(1)]=0$ ，而  $[S^+(1)]$ 、 $[S^-(1)]$ 、 $[S^z(1)]$  為 Pauli 矩陣。當向右

(左) sweep 時我們儲存左(右)邊的算符資訊，建構 superblock Hamiltonian、算符的做法以及算符的線性轉換跟 warm-up 一模一樣。在做 sweep 時，我們的  $m$  可以再度做調整，如此一來我們算符長相會不斷的更新，所求的物理量資訊也會越準確。

有限算法沒有一定標準判斷是否收斂，一般能量最低時，是左右兩邊方塊大小相同的時候，本論文中使用的方法是用本次循環與上一次循環的能量差值小於一定精確度後便停止，尚有其他方式存在<sup>[11]</sup>。一般 sweep 的次數夠多，系統就會收斂到某個能量值上，或是達到我們要的精確度。



## 第四章 研究結果

### 4-1 精確對角化結果

#### 4-1-1 基態能量

將 ED 取 PBC 與 OBC 時，計算  $S = \frac{1}{2}$  各向同性反鐵磁海森堡模型的基態能量，在此我們有加入 Total  $S_z$  為零的對稱性，將基態能量對系統總數的倒數平方做圖結果，來看是否接近 Bethe ansatz 解。

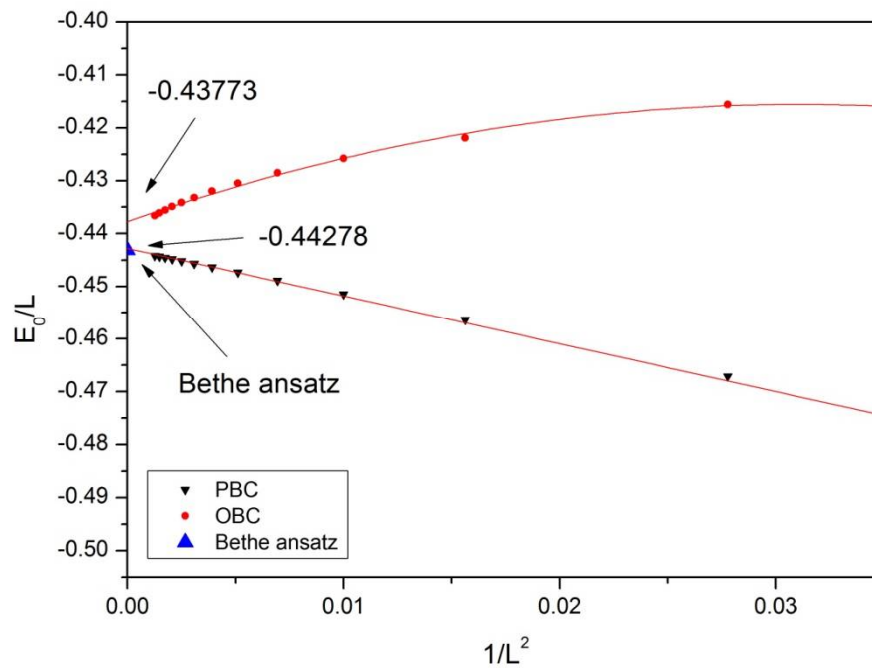


圖 4-1 PBC 與 OBC 下自旋 1/2  $E_0/L$  v.s.  $1/L^2$

圖 4-1 為  $L=6$  到 28 的狀況，PBC 時，當自旋數目趨近於無窮大時，每個自旋的基態能量為  $-0.44278$ ，與 Bethe ansatz 結果  $-\ln 2 + \frac{1}{4} = -0.44314$  接近。而 OBC 下，因邊界條件的影響，圖形無法如 PBC 呈現直線，我們用 order 2 polynomial 來 fitting，熱力學極限值為  $-0.43773$ 。在後面 DMRG 結果可以將系統數目增大，自旋數目夠多時，邊界的效應能夠減小。





自旋為 1 的系統，因維度過大，又只有 Total  $S_z$  為零的對稱性，最大的 size 只能做  $L=18$ 。根據參考文獻<sup>[12]</sup>，每個晶格能量為  $e_0 \approx -1.401484$ ，我們 fit 較大的 size 來看熱力學極限值。結果如圖 4-2。

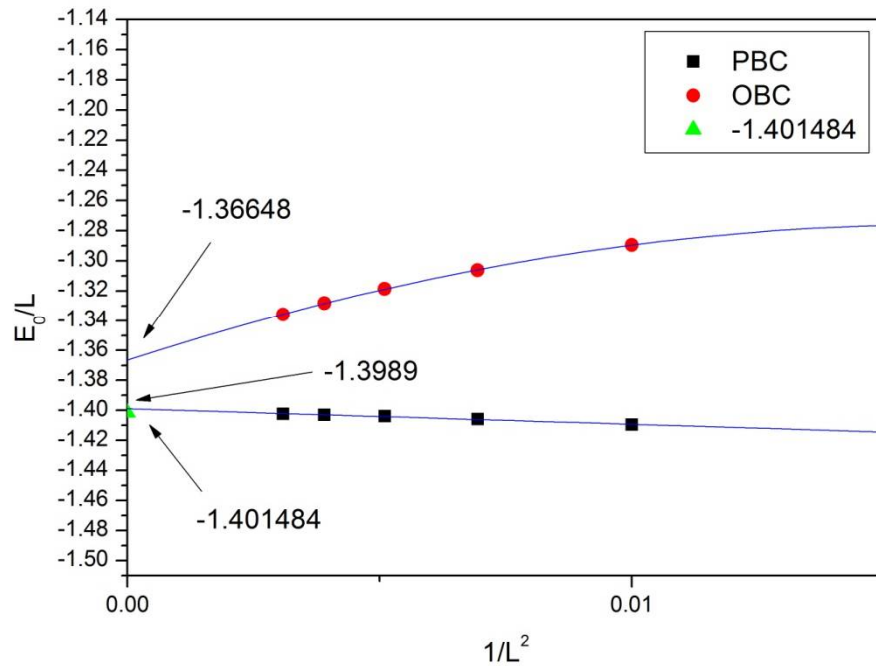


圖 4-2 PBC 與 OBC 下自旋 1  $E_0/L$  v.s.  $1/L^2$

圖中顯示 PBC 時接近直線， $L$  為無限大時每個自旋能量為 -1.3989，接近文獻值。OBC 依然無法如 PBC 是直線逼向理論值，使用 order 2 polynomial fitting 得到的熱力學極限值為 -1.36648。

## 4-1-2 自旋關聯函數

自旋關聯函數 (spin correlation function) 為計算第  $i$  個自旋與第  $j$  個自旋在基態下的關聯函數，定義為

$$C(i, j) = \langle \psi_0 | S_i^z S_j^z | \psi_0 \rangle \quad (4.1)$$

我們定義  $r = |1 - j|$ ，根據 Haldane 所提出自旋關聯函數可以分為以下兩種狀況

### 1. 有自旋能隙的系統

在擁有自旋能隙的系統中，自旋關聯函數  $C(r) \propto e^{-r/\xi}$ ，其中我們稱  $\xi$  為自旋關聯長度 (spin correlation length)。

### 2. 無自旋能隙的系統

無自旋能隙的系統中，自旋關聯函數呈現冪次函數遞減 (power law)， $C(r) \propto r^{-\eta}$ 。

我們計算在 PBC 下， $S = \frac{1}{2}$  各向同性的反鐵磁海森堡模型，我們計算第二顆自旋到第  $\frac{L}{2} + 1$  顆自旋與第一顆自旋的關聯函數。圖 4-3 中，我們分別計算  $L=8, 12, 16, 20, 24$  的自旋關聯函數。

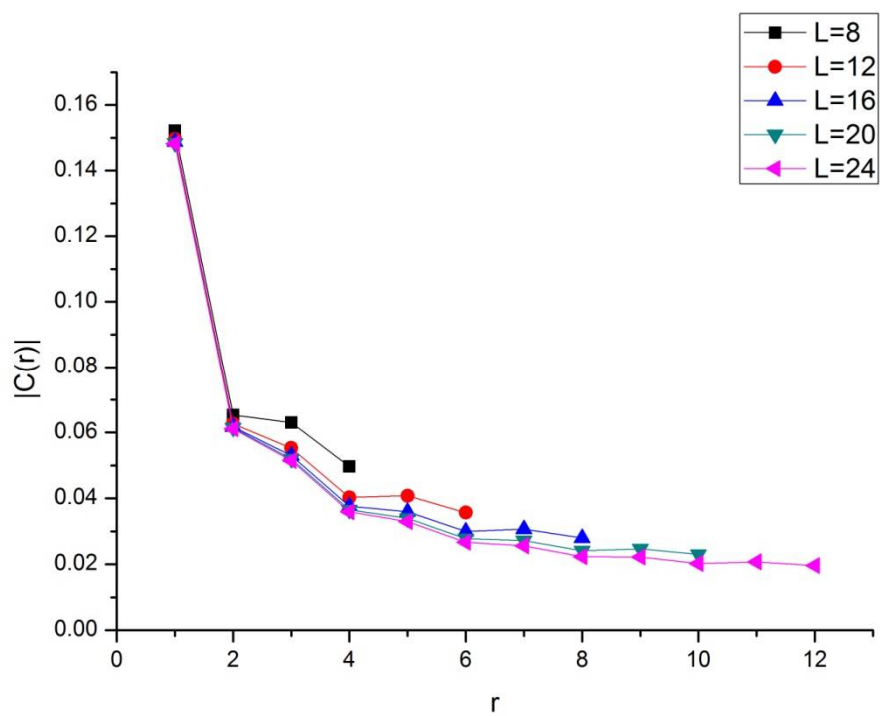


圖 4-3 PBC 下自旋 1/2 的自旋關聯函數



將圖 4-3 取對數後，發現確實呈現冪次遞減。如圖 4-4。

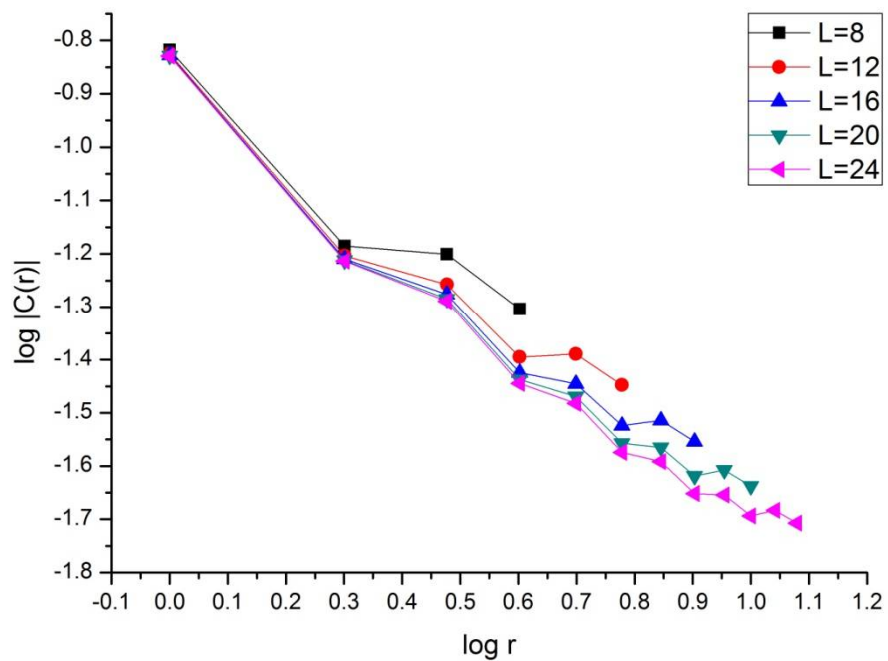


圖 4-4 PBC 下自旋 1/2 的 Log |C(r)| v.s. Log r



另外我們將 PBC 改為 OBC，計算邊界條件不同，但其餘條件相同的結果，如圖 4-5。

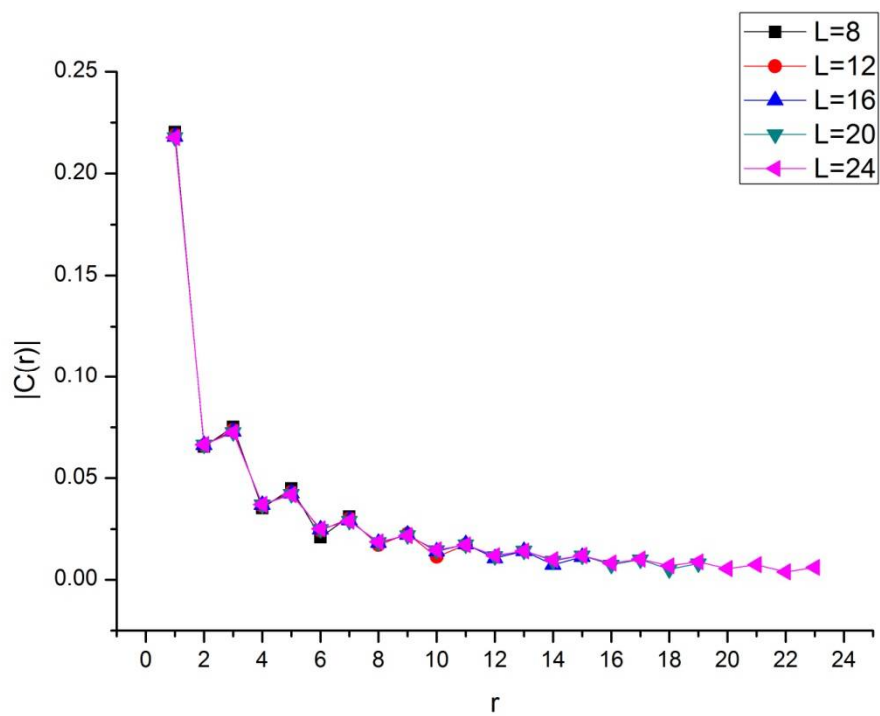


圖 4-5 OBC 下自旋 1/2 的自旋關聯函數

而將圖 4-5 取對數後的結果如下

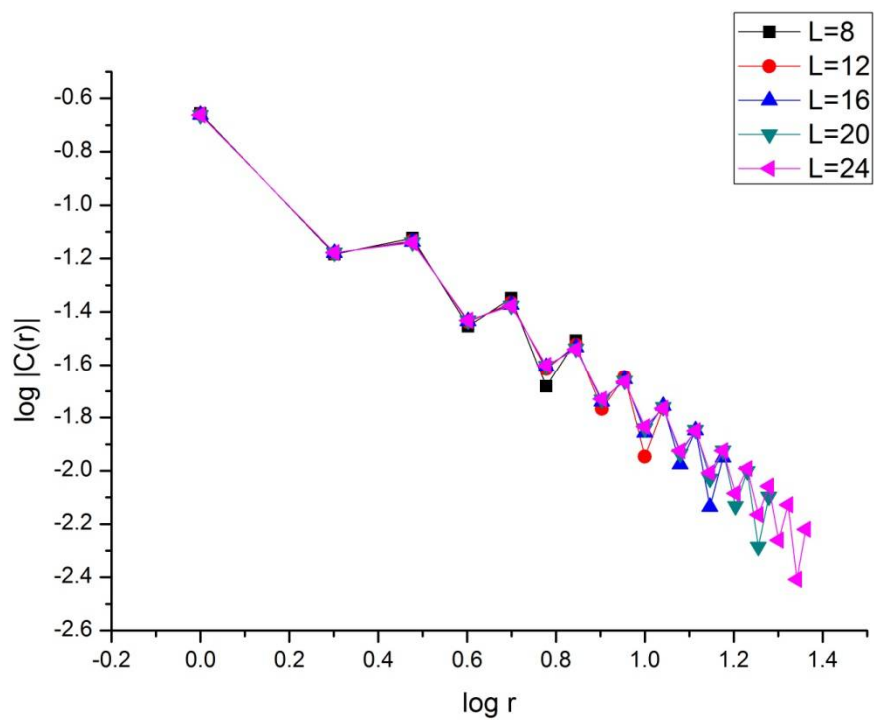


圖 4-6 OBC 下自旋 1/2 的  $\text{Log } |C(r)|$  v.s.  $\text{Log } r$

將不同自旋數目的結果取熱力學極限後，求出  $\eta = 1.0805$ ，與文獻  $\eta = 1$  接近。

## 4-2 DMRG 結果

DMRG 能計算出比 ED 更大的尺寸，在本論文中，我們並沒有加入任何對稱性，故系統的維度是原始的  $(2S+1)^L$ ，並且只討論開放性邊界條件 (OBC)。

### 4-2-1 基態能量

計算  $S = \frac{1}{2}$  各向同性反鐵磁海森堡模型， $L=32$  到 128，sweep 保留 50 個態的結果，其中  $L=28$  為 ED 給出的值。如圖 4-7。

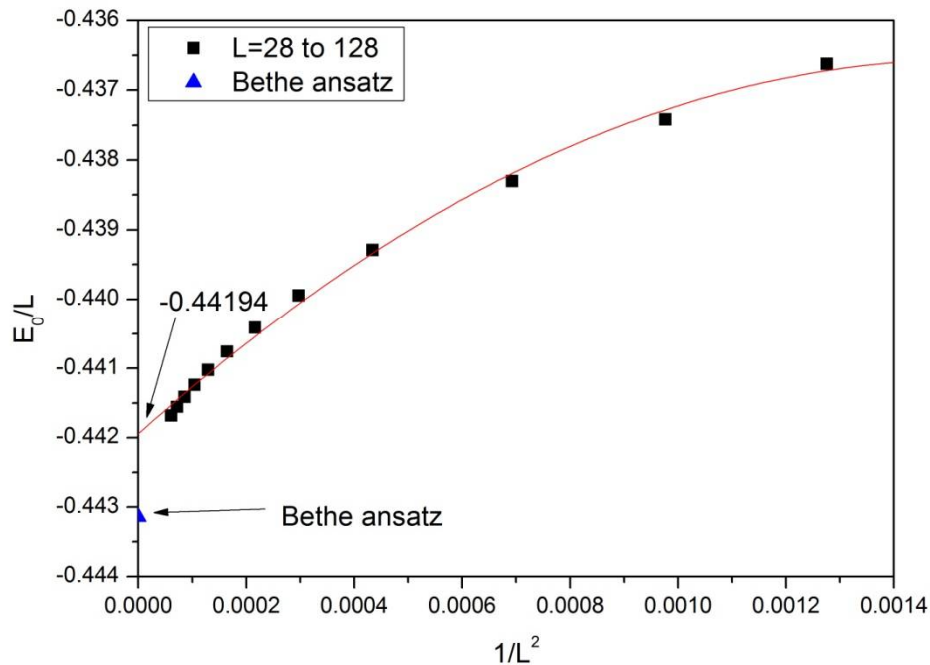


圖 4-7 用 DMRG 計算出的  $E_0/L$  v.s.  $1/L^2$

自旋數目的增加，從少格點到多格點雖然還是受到邊界影響，但我們可看到截距已經接近 Bethe ansatz 結果。我們將自旋數目 88 到 128 的狀況單獨拿出來做圖看結果，如圖 4-8。

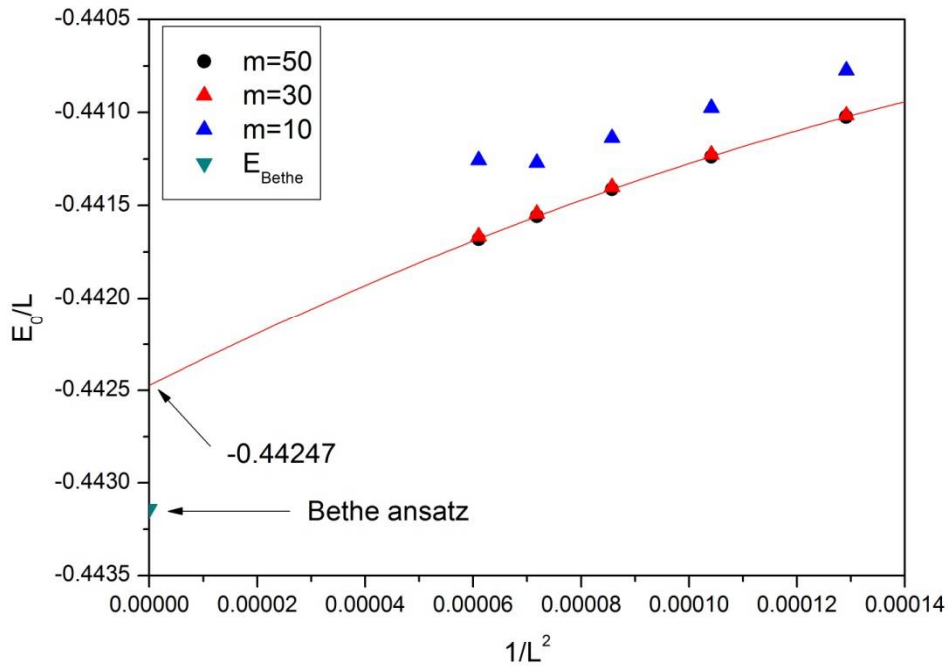


圖 4-8  $L=88$  到  $128$   $E_0/L$  v.s.  $1/L^2$

由圖可見，保留的  $m$  值影響著能量準確度，在自旋數目夠多時，邊界影響小了很多，更接近理論值。



## 4-2-2 Entanglement spectrum

此處我們計算 entanglement spectrum 的模型為單離子單軸異向性

$S=1$  XXZ 反鐵磁海森堡模型，Hamiltonian 為

$$H = J \sum_i [S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + J_z S_i^z S_{i+1}^z] + D \sum_j (S_j^z)^2 \quad (4.1)$$

在此我們調整  $D/J=1.5$ ，如此一來 EH-OH 相變和 OH-AFM 相變皆會存在，並只取 RDM 中最大的六個本徵值  $w_\alpha$  來看 entanglement spectrum。

entanglement spectrum 為<sup>[5]</sup>

$$\xi_\alpha = -2 \ln w_\alpha \quad (4.2)$$

圖 4-9 中，系統邊緣我們利用 AKLT 模型敘述，將邊界固定為  $S = \frac{1}{2}$  以便收斂。系統  $L=128$ ，在 OBC 的狀況下可以根據文獻<sup>[5]</sup>提供的 EH-OH 相變點為  $J_z/J \approx 1.6938$ ，另外根據圖 2-1， $J_z/J \approx 2.1 \sim 2.2$  之間為 OH-AFM 相變點。論文表示在 OBC 時，OH 相的最低 entanglement spectrum 會有兩重簡併，可看出我們的圖在 OH 相範圍內確實是兩重簡併，而在 AFM 相與 EH 相中卻沒有，原因為 AFM 與 EH 相並非 SPT 相。至於 EH 相中與論文相比，靠近相變點的地方沒有簡併，雖然那邊不是我們所要的物理，但我們無法相符原因可能為保留的  $m$  不夠多。

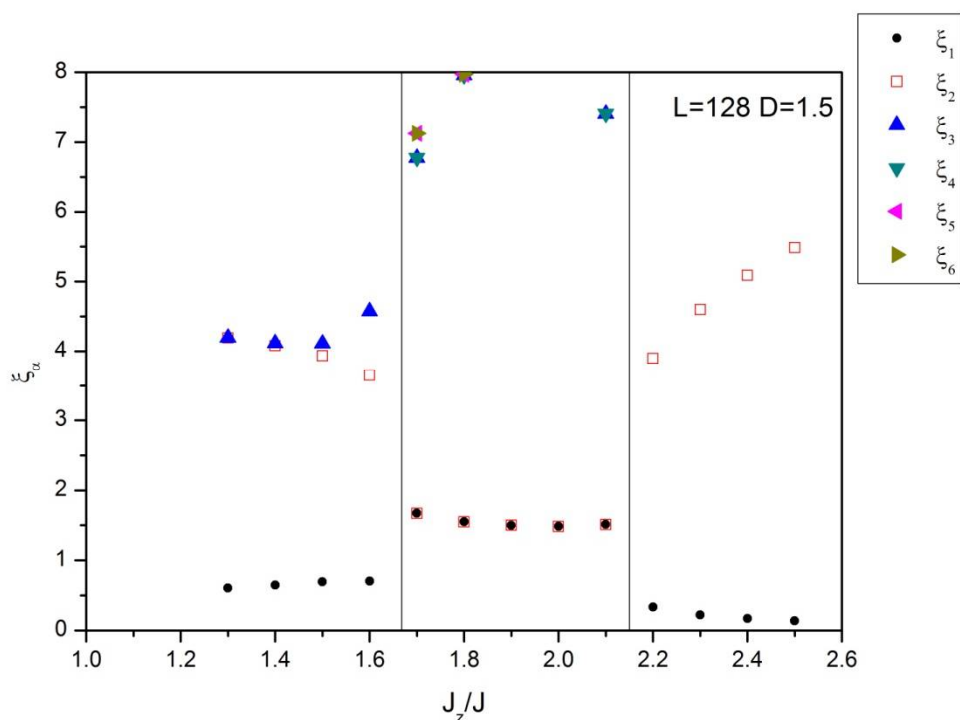


圖 4-9  $L=128$   $D=1.5$  entanglement spectrum, 圖中直線為  $D=1.5$  時的相變點, 左邊直線為 EH-OH 相變點, 右邊直線為 OH-AFM 相變點<sup>[5]</sup>。

如此一來，我們利用 OH 相在最低 entanglement spectrum 簡併特性，以及論文提供的相變點，來計算不同晶格大小時的 entanglement spectrum 來得到相圖，並觀察能否只以 entanglement spectrum 就能決定相變點位置。

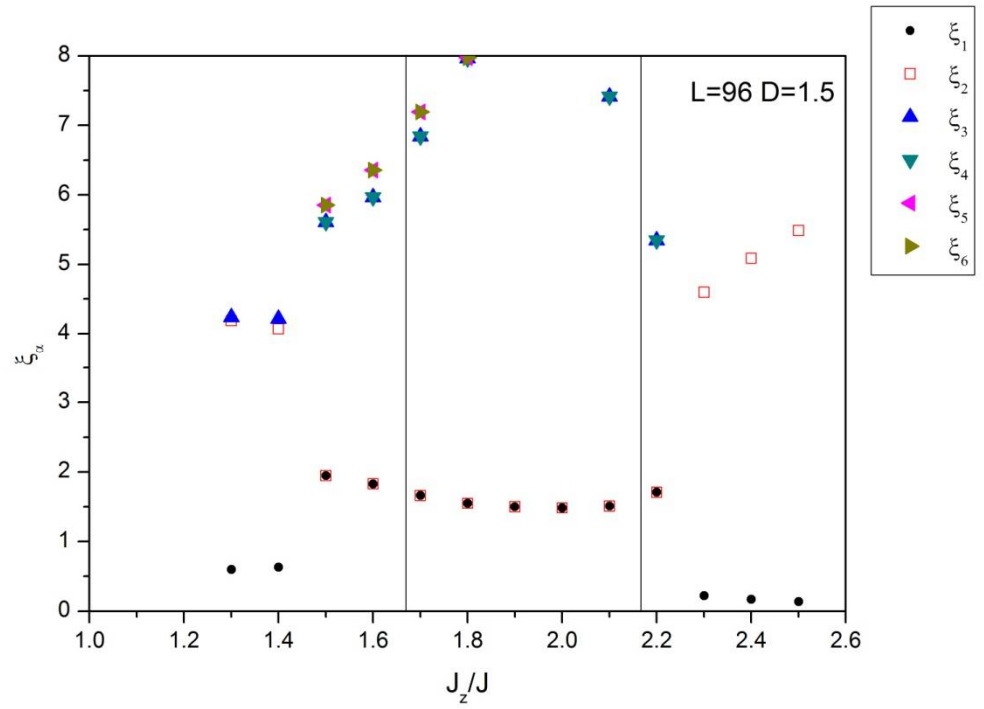


圖 4-10  $L=96$   $D=1.5$  entanglement spectrum, 圖中直線意義同圖 4-9<sup>[5]</sup>。

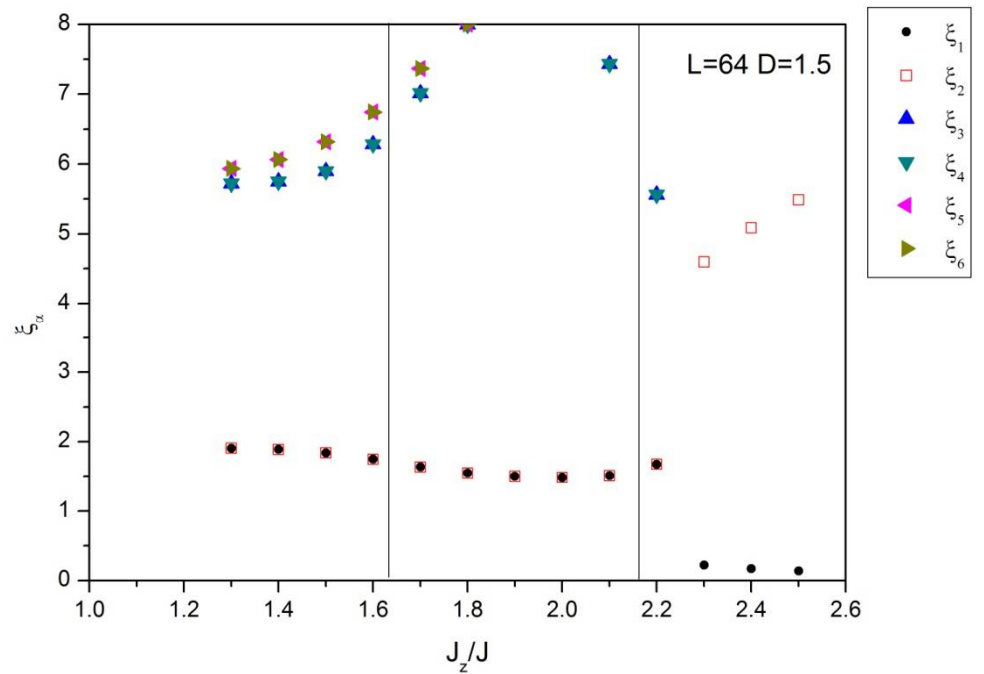


圖 4-11  $L=64$   $D=1.5$  entanglement spectrum, 圖中直線意義同圖 4-9<sup>[5]</sup>。

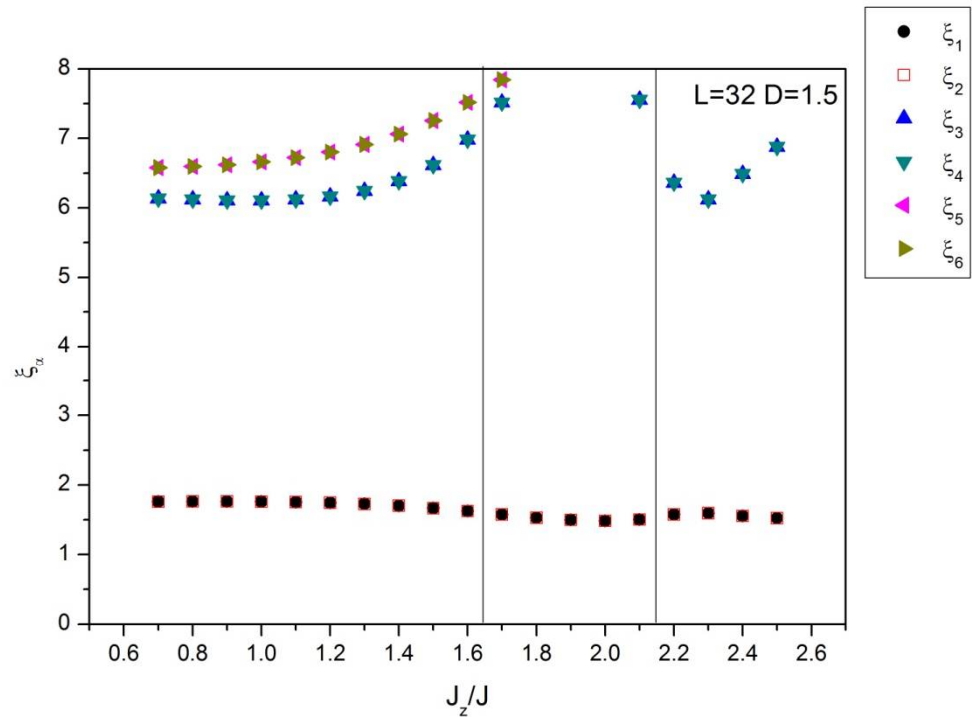


圖 4-12  $L=32$   $D=1.5$  entanglement spectrum, 圖中直線意義同圖 4-9<sup>[5]</sup>。

由圖可見，從  $L=128$  到  $L=96$  時，OH 相範圍變大了，超過論文提供的相變點後約 0.2 個  $J_z/J$  才開始出現 EH 與 AFM 相的行為，size 越小則 EH 相與 AFM 相在設定範圍內都消失，根據圖 2-1，整體相變點會隨著  $D$  變小而在橫軸上往左移，於是我們嘗試做我們做  $D=1$  時  $L=128$ 、96、64 以及 32 的結果，如下列附圖。

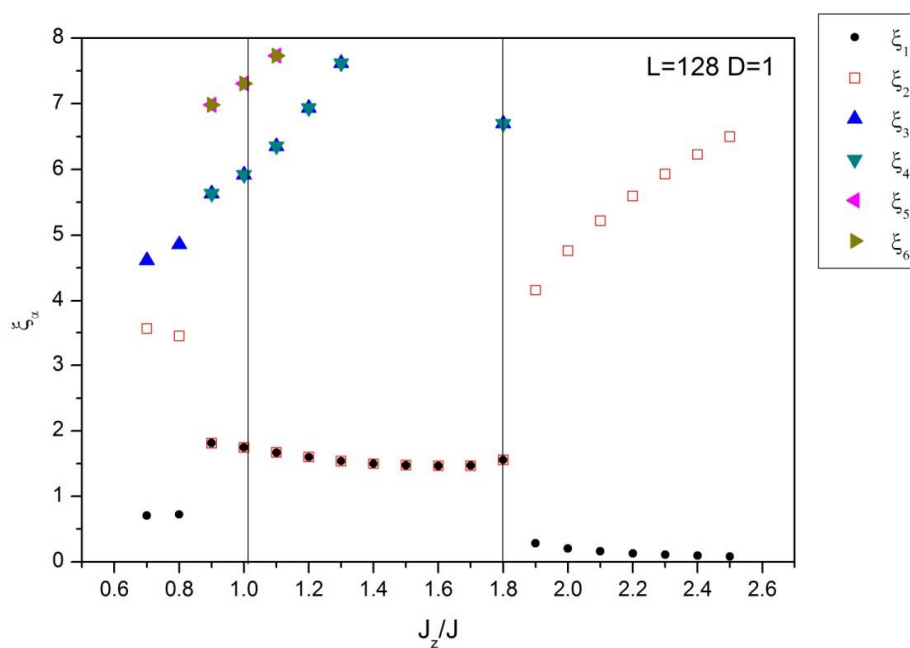


圖 4-13  $L=128$   $D=1$  entanglement spectrum 圖中直線為  $D=1$  時的相變點，左邊直線為 EH-OH 相變點，右邊直線為 OH-AFM 相變點<sup>[5]</sup>。

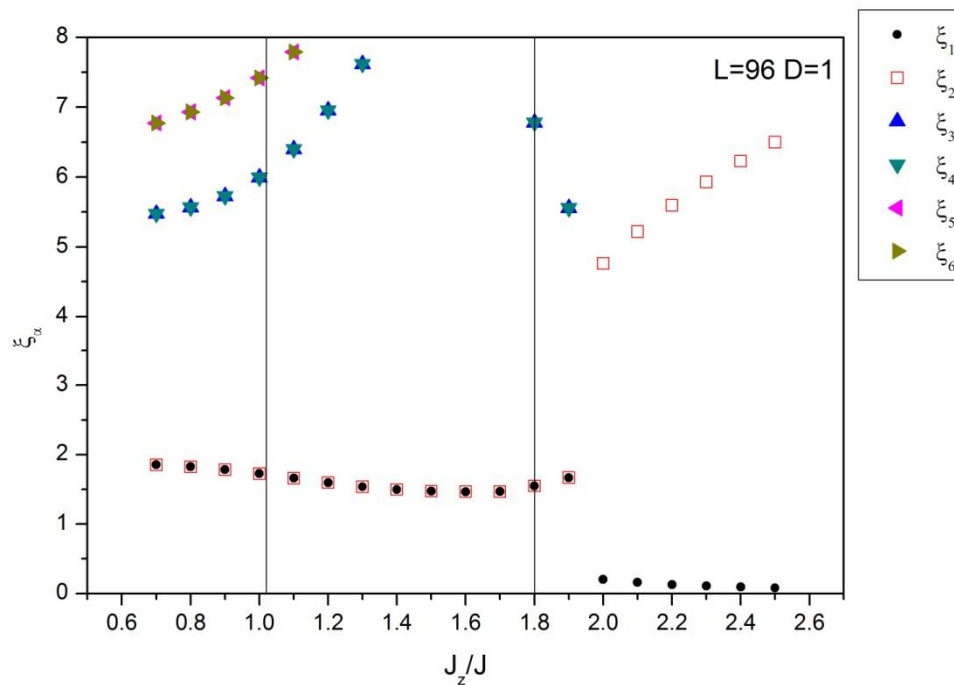


圖 4-14  $L=96$   $D=1$  entanglement spectrum，圖中直線意義同圖 4-13<sup>[5]</sup>。

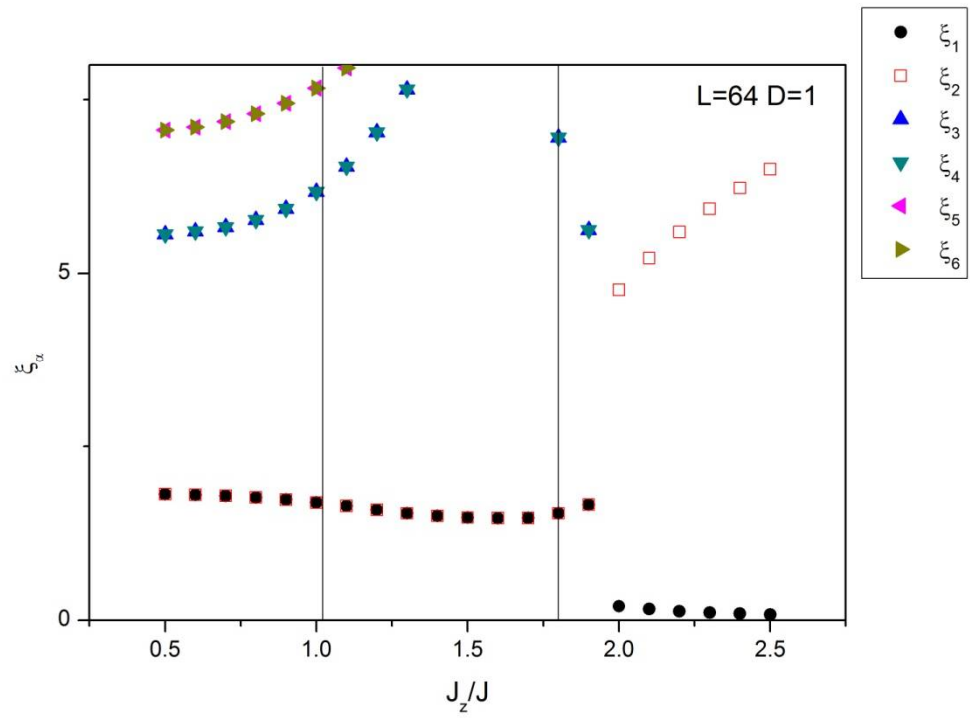


圖 4-15 L=64 D=1 entanglement spectrum, 圖中直線意義同圖 4-13<sup>[5]</sup>。

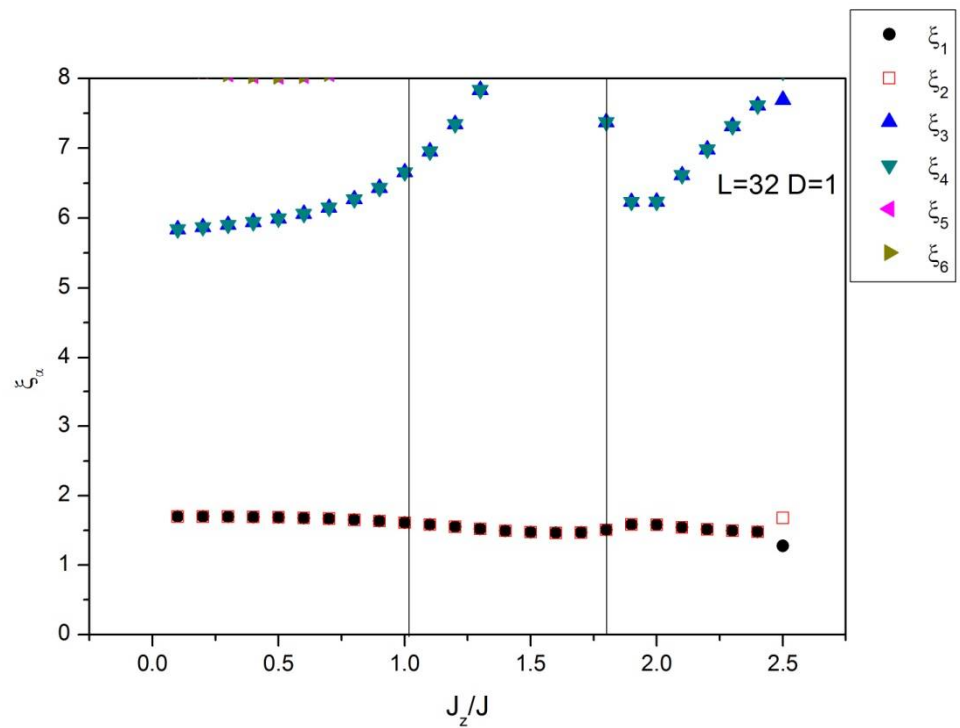


圖 4-16 L=32 D=1 entanglement spectrum, 圖中直線意義同圖 4-13<sup>[5]</sup>。

$D=1$  的結果 EH-OH 相變點為  $J_z/J \approx 1 \sim 1.1$  之間，OH-AFM 相變點約為  $J_z/J \approx 1.8$ ，在  $L=128$  時有明顯左移，符合文獻，但在 size 變小以後 EH 相在設定範圍內消失了，且以  $L=32$  來看，在  $J_z=2.5$  的地方出現 AFM 相，但實際相變點是在更早的位置，比較  $D=1.5$ ， $L=32$  的情況，整個 entanglement spectrum 像是 OH 相，但相變點早已出現。

根據我們的結果顯示在 OBC 下， $L=128$  時較能正常顯示相變位置，此外計算 entanglement spectrum 時最大的 truncation error 為  $10^{-5}$ ，故我們 truncation error 也不夠精準，結果顯示小 size 系統的相變點並不能單純利用 OH 相的拓撲性質來決定，最好回歸原始使用 central charge 或是 gap 為零的方法來決定相變點。

## 第五章 結論

本文利用一維反鐵磁海森堡模型為例，分別使用 ED 與 DMRG 探討其模型特性，並探討為何有些結果與文獻結果有些許差異。在本章節將對前面結果做結論並且提出未來可研究與改進的方向。

ED 部分，在  $S = \frac{1}{2}$  各向同性反鐵磁海森堡模型使用 PBC 條件下可以得到 Bethe ansatz 結果，每個晶格點能量為  $E_0 = -\ln 2 + \frac{1}{4} = -0.43314$ ，但在 OBC 條件下，由於晶格數目小，邊界效應造成基態能量的偏差。並且針對 Haldane 提出的自旋關聯函數特性也得到證實，在  $S = \frac{1}{2}$  時，系統的自旋關聯函數呈現冪次衰減，其臨界指數  $\eta = 1.0805$  接近理論值  $\eta = 1$ 。

DMRG 部分，OBC 時，小系統可以完全達到跟 ED 一樣的結果，而後利用截斷的方式將系統尺寸往上推，使得邊界效應較不明顯，利用 warm-up 與 sweep 將精準度達到滿意的結果。另外，我們計算了一維單離子單軸異向性  $S = 1$  XXZ 海森堡模型的 entanglement spectrum，為的是利用 Haldane 相在最低的 entanglement spectrum 會有兩重簡併的拓撲性質，嘗試只利用 entanglement spectrum 決定相變點。在 OBC 下，除了  $L=128$  能良好表現出相變點位置外，size 越小，整個 entanglement spectrum 越不能顯示原本相變點，故 entanglement



spectrum 與晶格尺寸和我們計算時保留的  $m$  值可能有關係。

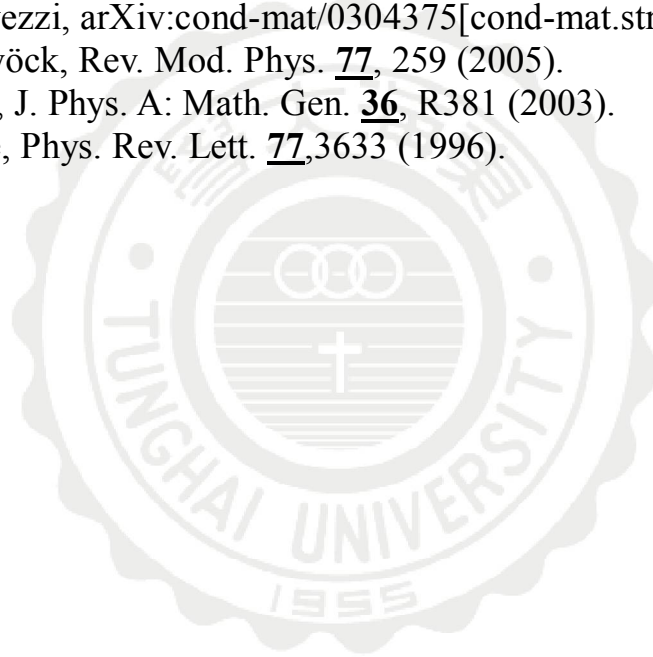
在 DMRG 方面，由於沒有加入任何對稱性，保留的  $m$  不如文獻般多，未來可以加入 total  $S_z$  為零，以及其他的對稱性<sup>[38,39,40]</sup>，來增加  $m$  值，並且也能計算自旋能隙問題<sup>[5]</sup>。程序的優化還能加入 DMRG 創始人 S. R. White 所提出的 Wave function transformation 方法來加快程式的運算<sup>[41]</sup>。此模型還有很多在文獻中可測量的物理量，如自旋能隙、neutral gap 等，由於前述的對稱性問題尚無辦法做，未來學習完成可以根據文獻做出更多物理資訊。



## 參考文獻

1. S. Yan, D. A. Huse, and S. R. White, *Science* **332**, 1173 (2011).
2. H. Bethe, *Z. Phys.* **71**, 205 (1931).
3. F. D. M. Haldane, *Phys. Lett.* **93A**, 464 (1983); *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1153(1983).
4. I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb, and H. Tasaki, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 799 (1987); *Comm. Math. Phys.* **115**, 477 (1988).
5. S. Ejima, H. Fehske, *Phys. Rev. B* **91**, 045121 (2015).
6. Z. C. Gu, X. G. Wen, *Phys. Rev. B* **80**, 155131 (2009).
7. F. Pollmann, E. Berg, A. M. Turner, and M. Oshikawa, *Phys. Rev. B* **81**, 064439 (2010).
8. E. G. Dalla Torre, E. Berg, and E. Altman, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 260401(2006).
9. S. Ejima, F. Lange, and H. Fehske, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 020401 (2014).
10. 吳明峻, Tung-Hai University Master thesis (2000).
11. 洪祥軒, Nan-Jing University Master thesis (2006).
12. S. R. White, D. A. Huse, *Phys. Rev. B* **48**, 3844 (1993).
13. O. Golinelli, Th. Jolicoeur, and R. Lacaze, *Phys. Rev. B* **50**, 3037 (1994).
14. U. Schollwöck, O. Golinelli, and T. Jolicoeur, *Phys. Rev. B* **54**, 4038 (1996).
15. U. Schollwöck and T. Jolicoeur, *Europhys. Lett.* **30**, 493 (1995).
16. X. Wang, S. Qin, and L. Yu, *Phys. Rev. B* **69**, 14529 (1999).
17. K. Hallberg, X. Q. G. Wang, P. Horsch, and A. Moreo, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4955 (1996).
18. A. Luther and I. Peschel, *Phys. Rev. B* **12**, 3908 (1975).
19. K. A. Hallberg, P. Horsch, and G. Martínez, *Phys. Rev. B* **52**, R719 (1995).
20. Shaojin Qin, Jizhong Lou, Liqun Sun, and Changfeng Chen, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 067202 (2003).
21. H. J. Schulz, *Phys. Rev. B* **34**, 6372 (1986).
22. M. den Nijs and K. Rommelse, *Phys. Rev. B* **40**, 4709 (1989).
23. W. Chen, K. Hida, and B. C. Sanctuary, *Phys. Rev. B* **67**, 104401 (2003).
24. C. Degli, Esposti Boschi, E. Ercolessi, F. Ortolani, and M. Roncaglia, *Eur. Phys. J. B* **35**, 465 (2003).
25. Yu- Chin Tzeng and Min-Fong Yang, *Phys. Rev. A* **77**, 012311 (2008).
26. Y. C. Tzeng, H. H. Hung, Y. C. Chen, and M. F. Yang, *Phys. Rev. A* **77**, 062321 (2008).
27. Yu-Chin Tzeng, *Phys. Rev. B* **86**, 024403 (2012).
28. M. Hagiwara, K. Katsumata, I. Affleck, B. I. Halperin, J. P. Renard,

- Phys. Rev. Lett. **65**, 3181 (1990).
29. T. Kennedy, J. Phys.: Condens. Matter **2**, 5737 (1990).
  30. H. Q. Lin, Phys. Rev. B **42**, 6561 (1990).
  31. W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery,  
*Numerical Recipes in Fortran, Second Edition.*
  32. C. Lanczos, J. Res. Nat. Bur. Stand **45**, 255 (1950).
  33. A. M. Läuchli, Chapter 18, p499 in *Introduction to Frustrated Magnetism*, 2011, C. Lacroix, P. Mendels, F. Mila, and Editors.
  34. K. G. Wilson, Rev. Mod. Phys. **47**, 773 (1975).
  35. S. R. White and R. M. Noack, Phys. Rev. Lett. **68**, 3487 (1992).
  36. T. Xiang and G. A. Gehring, J. Magn. Magn. Mater. **104-107**, 861 (1992).
  37. S. R. White, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992); Phys. Rev. B **48**, 10345 (1993).
  38. A. L. Malvezzi, arXiv:cond-mat/0304375[cond-mat.str-el].
  39. U. Schollwöck, Rev. Mod. Phys. **77**, 259 (2005).
  40. N. Shibata, J. Phys. A: Math. Gen. **36**, R381 (2003).
  41. S.R. White, Phys. Rev. Lett. **77**, 3633 (1996).



應用物理學系 碩士論文  
上海大學

論文題目 (中文)

許德邦撰

西元二〇一五