Als Anwendungsbeispiel wählen wir das XXZ-Modell:

$$H = \sum_{i=1}^{L} H^{(i)}; \quad H^{(i)} = \frac{J_x}{2}\left(S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+\right) + J_z \left(S_i^z S_{i+1}^z\right)$$

mit $S_i^x = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $S_i^y = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, $S_i^z = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

und periodischen Randbedingungen: $\vec{S}_{L+1} \equiv \vec{S}_1$

Basis des Hilbert-Raums sind $\sigma_i \in \left\{ |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix};\ |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}$

Mit $S^+ = S^x + i S^y$, $S^- = S^x - i S^y$ gilt:

$$H = \frac{J_x}{2} \sum_{i=1}^{L} \left(S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+\right) + J_z \sum_{i=1}^{L} \left(S_i^z S_{i+1}^z\right)$$

Für 2 Teilchen mit offenen Randbed.

$$H_{12} \hat{=} \begin{array}{cc} \begin{array}{cccc} \uparrow\uparrow & \uparrow\downarrow & \downarrow\uparrow & \downarrow\downarrow \end{array} & \\ \begin{pmatrix} J_z/4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -J_z/4 & J_x/2 & 0 \\ 0 & J_x/2 & -J_z/4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & J_z/4 \end{pmatrix} & \begin{array}{c} \uparrow\uparrow \\ \uparrow\downarrow \\ \downarrow\uparrow \\ \downarrow\downarrow \end{array} \end{array}$$

Damit ergeben sich für Eigenvektoren und Eigenwerte des 2-Spin-Systems:

$\vec{S}^2$	S^z	EV	EW
1	1	$\|\uparrow\uparrow\rangle$	$J_z/4$
1	-1	$\|\downarrow\downarrow\rangle$	$J_z/4$
1	0	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\|\uparrow\downarrow\rangle + \|\downarrow\uparrow\rangle)$	$J_x/2 - J_z/4$
0	0	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\|\uparrow\downarrow\rangle - \|\downarrow\uparrow\rangle)$	$-J_x/2 - J_z/4$

(*)

Wir führen noch einige Bezeichnungen ein:

Konfiguration $w = (\vec\sigma_1, \vec\sigma_2, \dots, \vec\sigma_{2M})$

Gewicht einer Konfiguration

$$\Omega(w) = \langle\vec\sigma_1|e^{-\Delta\tau H_1}|\vec\sigma_{2M}\rangle\langle\vec\sigma_{2M}|e^{-\Delta\tau H_2}|\vec\sigma_{2M-1}\rangle \dots$$
$$\langle\vec\sigma_3|e^{-\Delta\tau H_1}|\vec\sigma_2\rangle\langle\vec\sigma_2|e^{-\Delta\tau H_2}|\vec\sigma_1\rangle$$

Damit gilt: $Z = \sum_w \Omega(w)$

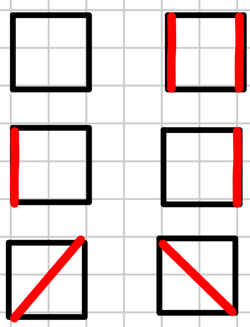
Die Matrixelemente in $\Omega(w)$ faktorisieren:

$$\langle\vec\sigma_{\tau+1}|e^{-\Delta\tau H_2}|\vec\sigma_\tau\rangle = \prod_{i=1}^{L/2}\langle\sigma_{2i,\tau+1},\sigma_{2i+1,\tau+1}|e^{-\Delta\tau H^{(2i)}}|\sigma_{2i,\tau},\sigma_{2i+1,\tau}\rangle$$

Damit ist die Berechnung der Gewichte auf das 2-Platz-Problem zurückgeführt. Z.B. erhalten wir mit *:

$$\langle\downarrow\uparrow|e^{-\Delta\tau H_2}|\uparrow\downarrow\rangle$$
$$= \frac{1}{\sqrt2}\langle\downarrow\uparrow|e^{-\Delta\tau H_2}\left[\frac{1}{\sqrt2}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) + \frac{1}{\sqrt2}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)\right]$$
$$= \frac{1}{\sqrt2}\langle\downarrow\uparrow|\Big[e^{-\Delta\tau(-J_z/4 - J_x/2)}\frac{1}{\sqrt2}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$
$$+ e^{-\Delta\tau(-J_z/4 + J_x/2)}\frac{1}{\sqrt2}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)\Big]$$
$$= -e^{\Delta\tau J_z/4}\sinh\left(\frac{\Delta\tau J_x}{2}\right)$$

Analog erhält man für die Plaketten:



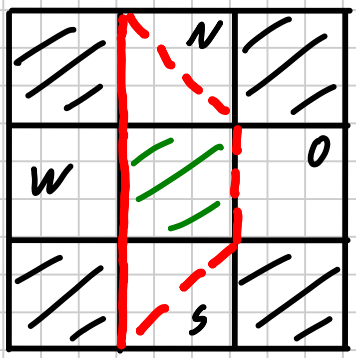
$$e^{-\Delta\tau J_z/4}$$
$$e^{\Delta\tau J_z/4}\cosh(\Delta\tau J_x/2)$$
$$-e^{\Delta\tau J_z/4}\sinh(\Delta\tau J_x/2)$$

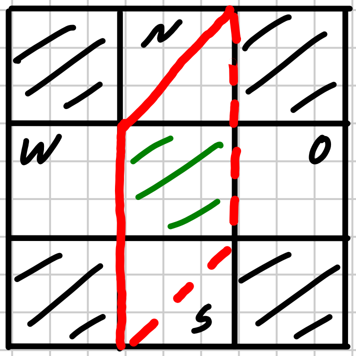
Beachte: negative Gewichte würden i. A. zu einem Vorzeichenproblem führen. Bei nächst-Nachbar-Hüpfen auf bipartiten Gittern ist die Anzahl der Diagonalplaketten jedoch in jeder Konfiguration gerade, das Vorzeichen also irrelevant.

Weltlinien-Algorithmus

(i) initialisiere Weltlinien (z. B. senkrecht) für gewünschtes L, S_z

(ii) Wähle schattierte Plakette, schlage Update vor (möglich, falls schatt. Plakette AF, stationär):





(iii) Berechne Verhältnis der Gewichte aus 4 umgebenden weissen Plaketten für w_{alt}, w_{neu}:

$$r = \frac{\Omega(w_{neu})}{\Omega(w_{alt})} = \frac{(\boxed{N} \cdot \boxed{O} \cdot \boxed{S} \cdot \boxed{W})_{neu}}{(\boxed{N} \cdot \boxed{O} \cdot \boxed{S} \cdot \boxed{W})_{alt}}$$

Akzeptiere Update mit w' $p = \frac{r}{1+r}$ (heat bath)

(Alternative: Metropolis – $p = \min\{r, 1\}$)

Berechnung von Observablen $\langle O \rangle = \frac{Sp[e^{-\beta H} O]}{Sp[e^{-\beta H}]}$

Für Observablen, die lokal in der imaginären Zeit sind, kann man schreiben: $\langle O \rangle = \frac{\sum_w \Omega(w)\, O(w)}{\sum_w \Omega(w)}$

Die Kunst ist es nun, einen Schätzer $O(w)$ zu bestimmen, der (i) korrekt ist und (ii) möglichst kleine Varianz hat.

Berechnung der Energie

$$\langle H \rangle = \frac{1}{Z} Sp\left[\left(e^{-\Delta\tau H_1} e^{-\Delta\tau H_2}\right)^M (H_1 + H_2)\right]$$

$$= \frac{1}{Z} Sp\left[\left(e^{-\Delta\tau H_1} e^{-\Delta\tau H_2}\right)^{M-1} \left(e^{-\Delta\tau H_1} H_1 e^{-\Delta\tau H_2} + e^{-\Delta\tau H_1} e^{-\Delta\tau H_2} H_2\right)\right]$$

Durch Einschieben von Einheitsoperatoren $1 = \sum_{\vec{\sigma}} |\vec{\sigma}\rangle\langle\vec{\sigma}|$ erhalten wir:

$$\langle H \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\vec{\sigma}_1, \dots, \vec{\sigma}_{2M}} \Big[\langle \vec{\sigma}_1 | e^{-\Delta\tau H_1} | \vec{\sigma}_{2M} \rangle \dots \langle \vec{\sigma}_3 | e^{-\Delta\tau H_1} | \vec{\sigma}_2 \rangle \langle \vec{\sigma}_2 | e^{-\Delta\tau H_2} H_2 | \vec{\sigma}_1 \rangle$$
$$+ \langle \vec{\sigma}_1 | e^{-\Delta\tau H_1} | \vec{\sigma}_{2M} \rangle \dots \langle \vec{\sigma}_3 | e^{-\Delta\tau H_1} H_1 | \vec{\sigma}_2 \rangle \langle \vec{\sigma}_2 | e^{-\Delta\tau H_2} | \vec{\sigma}_1 \rangle\Big]$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\vec{\sigma}_1,\dots,\vec{\sigma}_{2m}} \langle \vec{\sigma}_1 | e^{-\Delta\tau H_1} | \vec{\sigma}_{2m} \rangle \dots \langle \vec{\sigma}_3 | e^{-\Delta\tau H_1} | \vec{\sigma}_2 \rangle \langle \vec{\sigma}_2 | e^{-\Delta\tau H_2} | \vec{\sigma}_1 \rangle$$

$$\underbrace{\left[\frac{\langle \vec{\sigma}_3 | e^{-\Delta\tau H_1} H_1 | \vec{\sigma}_2 \rangle}{\langle \vec{\sigma}_3 | e^{-\Delta\tau H_1} | \vec{\sigma}_2 \rangle} + \frac{\langle \vec{\sigma}_2 | e^{-\Delta\tau H_2} H_2 | \vec{\sigma}_1 \rangle}{\langle \vec{\sigma}_2 | e^{-\Delta\tau H_2} | \vec{\sigma}_1 \rangle} \right]}_{E(w)}$$

$$= \frac{\sum_w \Omega(w) E(w)}{\sum_w \Omega(w)} \equiv \langle E(w) \rangle_w$$

Die Matrixelemente lassen sich als Summen über (weisse) Plaketten schreiben, z.B.

$$\frac{\langle \vec{\sigma}_2 | e^{-\Delta\tau H_2} H_2 | \vec{\sigma}_1 \rangle}{\langle \vec{\sigma}_2 | e^{-\Delta\tau H_2} | \vec{\sigma}_1 \rangle} = \sum_{i=1}^{L/2} \frac{\langle \sigma_{2i,\tau+1}, \sigma_{2i+1,\tau+1} | e^{-\Delta\tau H^{(2i)}} H^{(2i)} | \sigma_{2i,\tau}, \sigma_{2i+1,\tau} \rangle}{\langle \sigma_{2i,\tau+1}, \sigma_{2i+1,\tau+1} | e^{-\Delta\tau H^{(2i)}} | \sigma_{2i,\tau}, \sigma_{2i+1,\tau} \rangle}$$

$$= \sum_{i=1}^{L/2} -\frac{\partial}{\partial \Delta\tau} \ln \Big[\underbrace{\langle \sigma_{2i,\tau+1}, \sigma_{2i+1,\tau+1} | e^{-\Delta\tau H^{(2i)}} | \sigma_{2i,\tau}, \sigma_{2i+1,\tau} \rangle}_{w} \Big]$$

Zuerst berechnen wir das neue Matrixelement direkt (d.h. gemäß erster Zeile) für $\boxed{\diagup}$:

$$\langle \downarrow\uparrow | e^{-\Delta\tau H_2} H_2 | \uparrow\downarrow \rangle$$

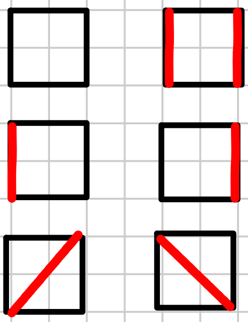
$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \downarrow\uparrow | e^{-\Delta\tau H_2} H_2 \left[\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) + \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \right]$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \downarrow\uparrow | \Big[e^{-\Delta\tau(-J_z/4 - J_x/2)} (-J_z/4 - J_x/2) \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

$$+ e^{-\Delta\tau(-J_z/4 + J_x/2)} (-J_z/4 + J_x/2) \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \Big]$$

$$= -e^{\Delta\tau J_z/4} \left[\sinh\left(\frac{\Delta\tau J_x}{2}\right)\left(-\frac{J_z}{4}\right) + \cosh\left(\frac{\Delta\tau J_x}{2}\right)\left(-\frac{J_x}{2}\right) \right]$$

Allerding ist es praktischer, die logarithmische Ableitung für die Berechnung des Quotienten zu benutzen:



	w	$E_{loc} = -\frac{\partial}{\partial \Delta\tau} \ln[w]$
1	$e^{-\Delta\tau J_z/4}$	$J_z/4$
2	$e^{\Delta\tau J_z/4} \cosh(\Delta\tau J_x/2)$	$-J_z/4 - \frac{J_x}{2} \tanh(\Delta\tau \frac{J_x}{2})$
3	$(+)e^{\Delta\tau J_z/4} \sinh(\Delta\tau J_x/2)$	$-J_z/4 - \frac{J_x}{2} \coth(\Delta\tau \frac{J_x}{2})$

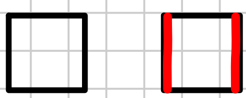
Insgesamt erhalten wir den Erwartungswert der Energie für ein Sample (eine Konfiguration w) als Summe über die Plaketten in den unteren beiden Reihen:

$$\langle H \rangle_{w,\text{einzel}} = \sum_{\substack{\text{Plakette } p \text{ mit} \\ \text{Zeiten } \tau_1, \tau_2 \\ \text{bzw. } \tau_2, \tau_3}} E_{loc}(p)$$

Um die Varianz zu reduzieren, dürfen wir wegen der Äquivalenz der imaginären Zeiten über alle Plaketten summieren. Für N Messungen (z.B. nach jeweils einem vollen Sweep, bei dem alle schwarzen Plaketten betrachtet wurden) erhalten wir:

$$\boxed{\langle H \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\substack{\text{sweeps} \\ s=1}}^{N} \frac{1}{M} \sum_{\substack{\text{alle} \\ \text{Plaketten } p}} E_{loc}(p,s)}$$

NN-Spinkorrelation: $\langle \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \rangle = \frac{1}{N} \sum_s \frac{1}{M} \sum_p c_{loc}(p,s)$ mit

$c_{loc} = 1$ für $p =$ 

$c_{loc} = -1$ sonst