III.4 Weltlinien-Quanten-Monte-Carlo-Methode (world line QMC)

Weltlinien-QMC ist ein konzeptionell relativ einfacher Zugang für Modelle wechselwirkender Quanten-Spins oder Fermionen, der erste Simulationen erlaubt und Basis für effizientere Algorithmen (Schleifen-, Wurm-Algorithmen) ist.

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 $S^+ = S^x + iS^y$, $S^- = S^x - iS^y$ 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.

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

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

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

(*)

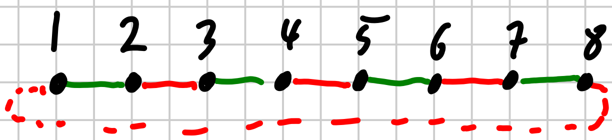
Grundidee von Weltlinien-Verfahren ist es nun, den Hamilton-Operator so aufzuteilen, dass jeder der Teile in kommutierende 2-Platz-Terme zerfällt. Bei Modellen, in denen H maximal nächste Nachbarn auf einem hyperkubischen Gitter verbindet, sind das

2d Teile: $H = H_1^x + H_2^x + H_1^y + H_2^y + \ldots$

Wichtig: Notwendige Voraussetzung ist, dass die Systemlänge in jeder Richtung gerade ist: $L^\alpha = 2n_\alpha$

Speziell im vorliegenden 1-d-Fall:

$$H = \underbrace{\sum_{n=1}^{L/2} H^{(2n)}}_{H_1} + \underbrace{\sum_{n=1}^{L/2} H^{(2n-1)}}_{H_2}$$



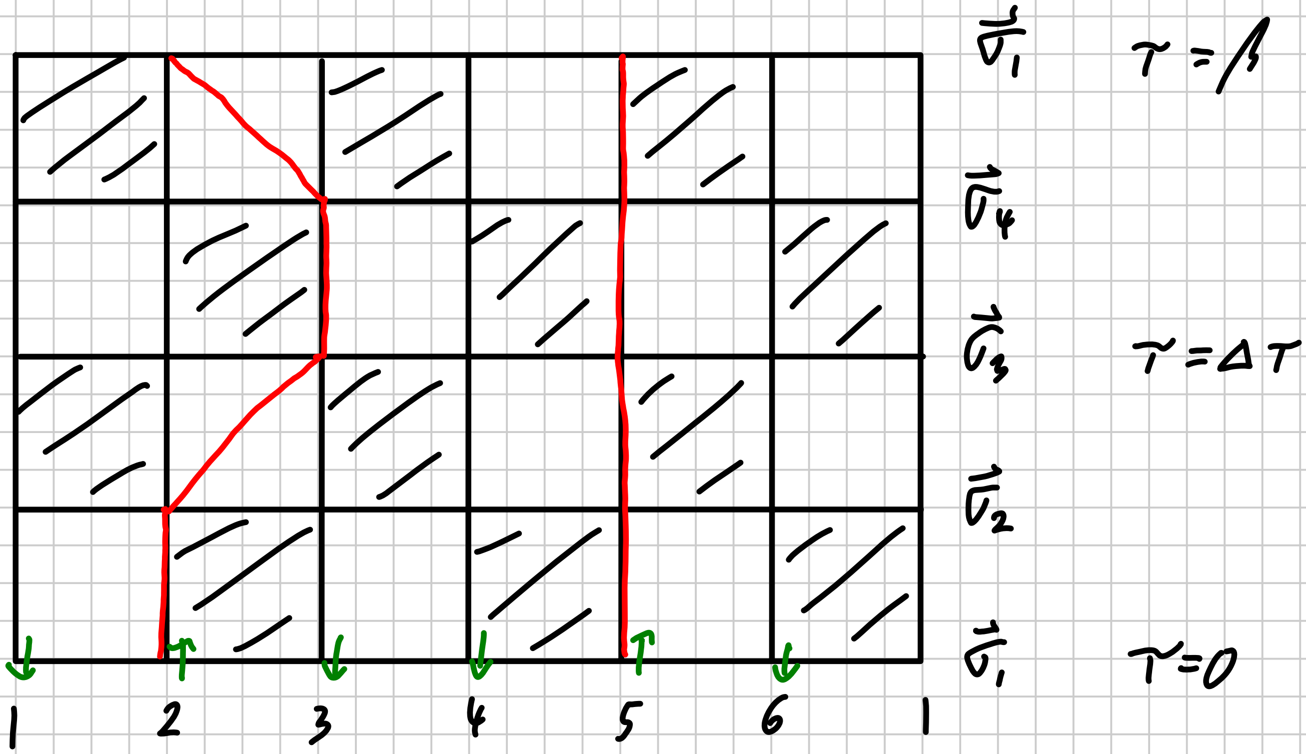
Diese Aufteilung wird nun in einer Trotter-Zerlegung der Zustandssumme benutzt ($\Delta\tau = \beta/M$):

$$
\begin{aligned}
Z = \mathrm{Sp}\left[e^{-\beta H}\right] &= \mathrm{Sp}\left[\left(e^{-\Delta\tau H}\right)^M\right] \\
&\approx \mathrm{Sp}\left[\left(e^{-\Delta\tau H_1} e^{-\Delta\tau H_2}\right)^M\right] \\
&= \sum_{\vec{\sigma}_1 \dots \vec{\sigma}_{2M}} \langle \vec{\sigma}_1 | e^{-\Delta\tau H_1} | \vec{\sigma}_{2M} \rangle \langle \vec{\sigma}_{2M} | e^{-\Delta\tau H_2} | \vec{\sigma}_{2M-1} \rangle \dots \\
&\qquad \langle \vec{\sigma}_3 | e^{-\Delta\tau H_1} | \vec{\sigma}_2 \rangle \langle \vec{\sigma}_2 | e^{-\Delta\tau H_2} | \vec{\sigma}_1 \rangle
\end{aligned}
$$

mit dem Gesamtspinvektor $\vec{\sigma}_\tau$ zur imaginären Zeit τ:

$$\vec{\sigma}_\tau = \left(\sigma_{1,\tau}, \sigma_{2,\tau}, \dots, \sigma_{L,\tau}\right)$$

Graphische Repräsentation: Weltlinien – Evolution von $\uparrow$-Zuständen (bei Fermion-Simulationen: von besetzten Zuständen) in der imaginären Zeit:



$L = 6$ Spins, davon 2 up-Spins ($S^z = -1$),

$M = 2$ Diskretisierungsschritte der imaginären Zeit.

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

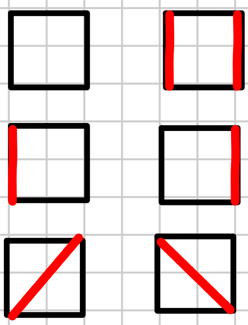
Die Matrixelemente in $\Omega(w)$ faktorisieren:

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

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

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

Analog erhält man für die Plaketten:



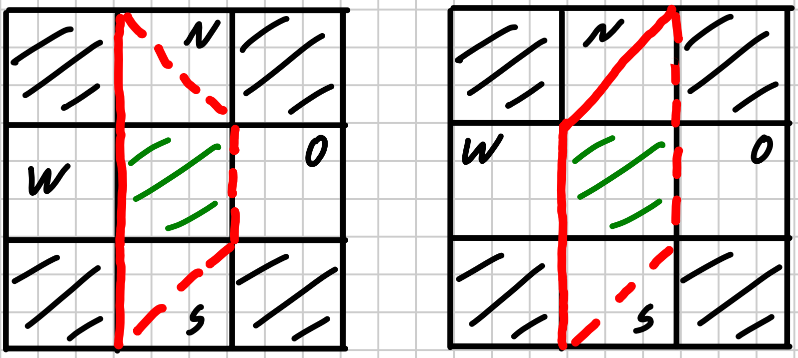
$$e^{-\Delta\tau J_z/4}$$
$$e^{\Delta\tau J_z/4} \cosh(\Delta\tau J_x/2)$$
$$-e^{\Delta\tau J_z/4} \sinh(\Delta\tau J_x/2)$$

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 – $p = \min\{r, 1\}$)