

FIZIČKI FAKULTET
UNIVERZITETA U BEOGRADU

Kosta Ladavac

Monte Carlo analiza
jednodimenzionog $S=1/2$
Heisenberg-ovog antiferomagnetika

- MAGISTARSKI RAD -

Beograd 1998.

Zahvaljujem se dr. Aleksandru Beliću na vremenu i znanju koje je uložio u ovaj rad.
dr. Milanu Konstantinoviću se zahvaljujem na aktuelnoj problematici u koju me je uveo,
i odličnoj saradnji.
Hvala mom najvećem prijatelju Antunu.

ciao mamma ciao tata

Sadržaj

1	Uvod	1
2	Spin-Peierls-ov prelaz	3
2.1	Spin-Peierls-ova faza u NaV_2O_5	3
2.2	Model	6
3	Metodi	9
3.1	Monte Carlo	9
3.1.1	VMC - algoritam	11
3.1.2	VMC - korelisano sampliranje	16
3.1.3	VMC - izbor probne talasne funkcije	16
3.1.4	GFMC - algoritam	18
3.1.5	GFMC - importance sampliranje	20
3.2	Egzaktna dijagonalizacija	24
4	Homogen lanac	27
4.1	VMC	27
4.2	GFMC	31
5	Modulisani lanac	37
5.1	Verifikacija algoritma	37
5.1.1	Egzaktna dijagonalizacija	37
5.1.2	Lanac idealnih dimera	38
5.2	Rezultati	40
5.3	Poređenje sa eksperimentom	44
6	Zaključak	49
	Literatura	51

Glava 1

Uvod

Niskodimenzioni magnetski sistemi pokazuju mnoštvo zanimljivih fizičkih efekata, a među njima je i pojava nove uređene niskotemperaturske faze - spin-Peierls-ove faze. Magneto-elastični spin-Peierls-ov prelaz u organskim jedinjenjima bio je široko studiran '80-tih godina. Otkriće CuGeO_3 1993. godine, koji takođe ispoljava ovaj efekat, potaklo je nov ciklus intenzivnog istraživanja ove problematike, i to prvenstveno zbog neorganske prirode ovog materijala. Ona omogućava lakšu sintezu monokristalnih uzoraka, dovoljno velikih da se na njima mogu vršiti npr. elastična rasejanja neutrona, kao i druga ranije nedostupna merenja. Otkriće NaV_2O_5 1996. godine dalo je još jedan snažan impuls istraživanjima ovog tipa. Ovaj materijal je danas veoma aktuelan i puno toga o njegovoj prirodi još uvek nije objašnjeno. Ovaj rad predstavlja korak u tom pravcu.

Nagli razvoj računarske tehnologije u zadnjih par godina takođe je značio i razvoj numeričkih metoda. Ovo se naročito oseća u fizici mnogočestičnih sistema, gde su problemi retko rešivi analitički i numerika postaje glavno sredstvo u radu. Mnogi metodi nalaze primenu tek sad, kada postoje dovoljno moćne mašine sposobne za zahtevne proračune, a stalno se razvijaju i novi. Razvijanje Monte Carlo algoritma za proučavanje osobina niskodimenzionih magnetnih sistema je osnovni cilj ovog rada.

U sledećoj, drugoj, glavi ćemo ukratko opisati fenomenologiju spin-Peierls-ove faze. Sličnost osobina NaV_2O_5 i CuGeO_3 ilustrovaćemo rezultatima merenja magnetne susceptibilnosti ova dva materijala. Na kraju ćemo definisati model kojim opisujemo niskotemperatursku fazu NaV_2O_5 , i izvršiti prelaz sa Heisenberg-ovog linearnog antiferomagnetnika na model **hard-core** bozona, potreban za dalju numeričku simulaciju ovog sistema.

U trećoj glavi biće reči o metodima koje koristimo, o Monte Carlo metodu i o egzaktnoj dijagonalizaciji matrice hamiltonijana. Veći deo je posvećen finim detaljima varijacione Monte Carlo (VMC) i Green's function Monte Carlo (GFMC) procedure. Opisaćemo algoritam kojim računamo energije osnovnog stanja u nekim svojstvenim potprostorima hamiltonijana, a koji se sastoji od GFMC algoritma vođenog rezultatima VMC procedure.

U četvrtoj glavi izvršićemo simulaciju homogenog Heisenberg-ovog antiferomagnetnog lanca. U ovom slučaju su poznati analitički rezultati za energiju osnovnog i nekih pobuđenih stanja, i poređenjem sa njima verifikujemo primenjeni numerički algoritam. Uverićemo se da za ovaj sistem GFMC daje egzaktne energije osnovnih stanja u posmatranim potprostorima.

U petoj glavi ćemo prezentovati naše rezultate za osnovno i pobuđena stanja modulisanog antiferomagnetnog Heisenberg-ovog lanca. Prvo ćemo verifikovati MC program i u ovom slučaju, a onda dati pregled izračunatih energija. Ovi rezultati biće iskorišteni za identifikaciju i interpretaciju nekih modova u Ramanskim spektrima NaV_2O_5 , uz određivanje fizičkih parametara ovog materijala, izmenskog integrala J i modulacije δ . Slaganje ovih rezultata sa odgovarajućim dobijenim drugim metodima - merenjem susceptibilnosti - uverava nas da se niskotemperaturna faza NaV_2O_5 može opisati korišćenim modelom.

Glava 2

Spin-Peierls-ov prelaz

U ovoj glavi ćemo ukratko prikazati fenomenologiju spin-Peierls-ove faze (odjeljak 2.1), a zatim ćemo, u odjeljku 2.2, definisati model kojim opisujemo ovu pojavu u slučaju NaV_2O_5 kristala.

2.1 Spin-Peierls-ova faza u NaV_2O_5

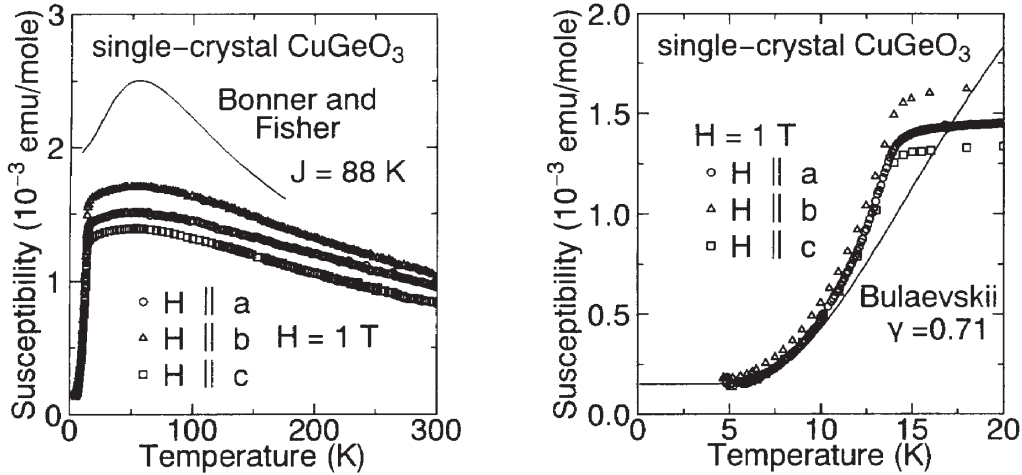
Spin-Peierls-ov (SP) prelaz je magnetski analogon Peierls-ovog prelaza [1] kod elektrona u metalima, i jedan je od najinteresantnijih efekata vezanih za nisko dimenzionalne spinske sisteme. Karakterističan je samo za jednodimenzionalne lance sa polucelom spinom koji interaguju antiferomagnetnom izmenschkom interakcijom, i odgovara uspostavljanju dimerizovane magnetski uređene faze u kojoj je konstanta izmenschke interakcije J modulirana duž lanca, tj. naizmjenično uzima vrednosti J_1 i J_2 . Dimerizacija predstavlja fizičko približavanje po dva jona u rešetki.

Karakteristika spin-Peierlsove faze je pojava procepa u energetsom spektru. Po Haldane-u [2], prvo pobuđeno stanje antiferomagnetnih lanaca polucelog spina je degenerisano sa osnovnim stanjem, dok se kod istih sistema celobrojnog spina ova degeneracija ukida. Pojavljuje se oblast zabranjenih energija odmah iznad energije osnovnog stanja - procep u energetsom spektru (gap). U spin-Peierls-ovoj fazi, poluceli spinovi se fizički približavaju i ponašaju kao efektivno celobrojni spinovi, pa se pojavljuje gap u spektru.

Pojava gap-a se vidi u temperaturskoj zavisnosti magnetne susceptibilnosti $\chi(T)$. Na $T = 0$ sistem se nalazi u osnovnom stanju. Ako nema gap-a, za proizvoljno slabu perturbaciju (magnetno polje) sistem može da pređe u pobuđeno stanje, bar neki spinovi menjaju orijentaciju i prisutan je odziv (magnetizacija), dakle $\chi(T = 0) \neq 0$. Ako ima gap-a, za pobuđivanje sistema neophodna je konačna perturbacija i $\chi(T = 0) \equiv 0$.

Kao što je nedavno pokazano [3] NaV_2O_5 je još jedan neorganski spin-Peierls-ovski materijal, uz ranije poznat CuGeO_3 [4]. Merenja susceptibilnosti CuGeO_3 prikazana su

na Slici 2.1. Široki maksimum na $T = 60$ K je karakteristika jednodimenzionalnog spin-

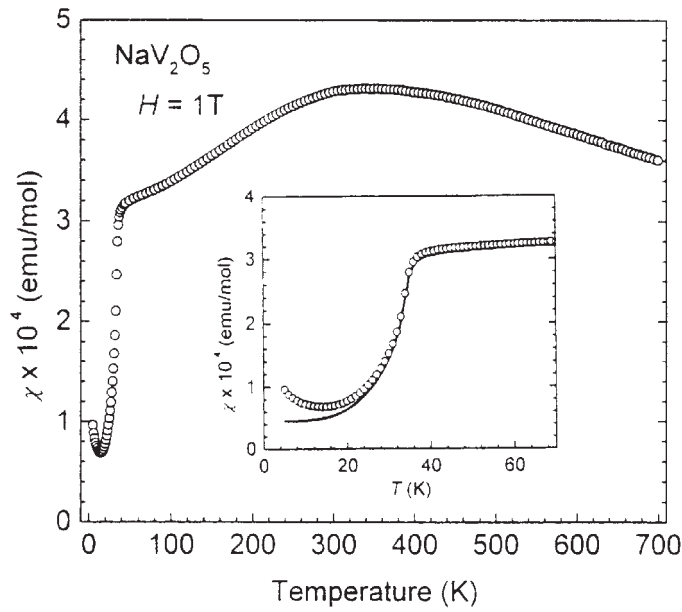


Slika 2.1: Temperaturna zavisnost susceptibilnosti $\chi(T)$ u CuGeO_3 preuzeta iz [4]. Visokotemperaturna faza i poređenje sa [5] (levo), i niskotemperaturna faza u poređenju sa [6] (desno).

skog uređenja; fluktuacije su u tom slučaju velike pa nema dugodometnog uređenja koje bi se ispoljilo ostrim maksimumom susceptibilnosti. Pad susceptibilnosti na $T = 14$ K ukazuje na pojavu faznog prelaza, iz visokotemperaturne paramagnetne faze u uređeni kratkodometni režim. Da se ispod ove temperature sistem nalazi u spin-Peierls-ovoj fazi ukazuje $\chi(T = 0) \neq 0$. Visokotemperaturna faza se opisuje po proračunu Bonnera i Fisher-a [5] kao antiferomagnetni lanac homogenog J , dok se niskotemperaturno ponašanje susceptibilnosti slaže sa teorijom Bulaevskog [6] koja uzima u obzir dimerizovani lanac, odnosno modulisanu interakciju. Na Slici 2.1 prikazani su i rezultati pomenutih proračuna, gde je desno uvećan niskotemperaturni deo spektra radi lakšeg poređenja sa računom Bulaevskog. Ovi rezultati dobijeni su u aproksimaciji interakcije samo najbližih suseda. Bolje slaganje dobija se uključivanjem frustracije, interakcije i među sledećim najbližim susednim spinovima, koja se ispostavlja da je značajna u ovom materijalu.

Merenja susceptibilnosti NaV_2O_5 prikazana su na Slici 2.2. Slično slučaju CuGeO_3 i ovde je prisutan oštar pad susceptibilnosti, ali na temperaturi $T = 34$ K. Takođe se vidi široki maksimum u visokotemperaturnoj fazi, što je argument 1D prirode materijala. Niskotemperaturna zavisnost se dobro slaže sa rezultatima Bulaevskog i bez uključivanja frustracije, tj. sistem se nalazi u SP fazi.

Dimerizacija rešetke NaV_2O_5 i pojava gap-a u energetskom spektru takođe su potvrđeni



Slika 2.2: Temperaturna zavisnost susceptibilnosti $\chi(T)$ u NaV_2O_5 , prema [3].

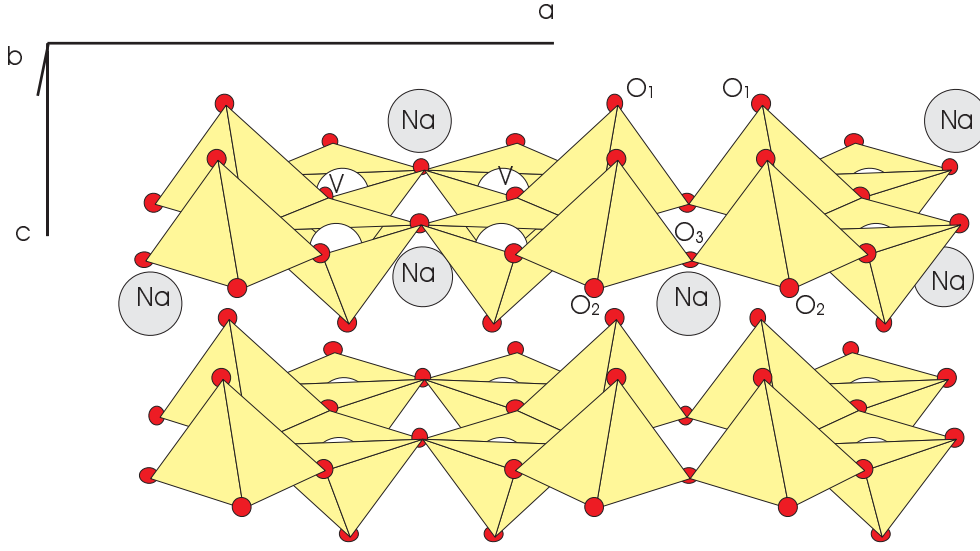
merenjima difrakcije x-zraka, neelastičnog rasejanja neutrona [7], nuklearne magnetne rezonance NMR [8] i elektronske spinske rezonance ESR [9]. Na osnovu ovih tehnika, procenjena veličina gap-a je u intervalu od 85 do 98 K. No, sama priroda prelaza je još uvek aktuelno pitanje, s obzirom da se više eksperimentalnih rezultata ne slaže sa standardnim spin-Peierls-ovim scenariom.

Prvobitna meranja kristalne strukture NaV_2O_5 [10] pokazuju da je prostorna grupa simetrije ovog oksida $P2_1mn$ (D_{2v}^7). Duž b -ose razlikuju se dve vrste vanadijumskih lanaca: jedan se sastoji od magnetičnih V^{4+} ($S = 1/2$), a drugi od ne-magnetičnih V^{5+} ($S = 0$) jona. Lanci su međusobno paralelni, dele stranicu obližnje VO_5 piramide i formiraju slojeve u ab ravni. Natrijumovi atomi se nalaze između slojeva. Ova struktura je efektivno jednodimenziona jer su lanci koji nose spin fizički razdvojeni ne-magnetnim lancima.

Ipak, najnovija strukturna analiza [11] pokazuje da su svi vanadijumovi atomi ekvivalentni, nalaze se u stanju *mešane* valence. Odgovarajuća prostorna grupa u ovom slučaju je $Pm\bar{m}n$, čija je struktura prikazana na Slici 2.3. No, čak i u slučaju ekvivalentnih V atoma, s obzirom na jake elektronske korelacije, i dalje je moguće formiranje antiferomagnetnih lanaca [12]. Takođe je moguće i *cik-cak* uređenje duž 'merdevina'¹ vanadijumovih jona [13]. U oba ova slučaja, opisivanje NaV_2O_5 kao jednodimenzionalnog Heisenberg-ovog antiferomagnetika je opravdano.

Sve u svemu, u proračunu magnetskih eksitacija u niskotemperaturnoj fazi, NaV_2O_5 opisujemo kao Heisenberg-ov antiferomagnetni lanac sa moduliranim izmenschkim inte-

¹ladder (engleski) - merdevine



Slika 2.3: Struktura NaV_2O_5 kristala sa ekvivalentnim vanadijumovim atomima

gralom (koji alternira duž lanca, uzimajući vrednosti J_1 i J_2) i bez frustracije.

2.2 Model

Hamiltonijan Heisenberg-ovog $S = 1/2$ linearnog antiferomagneta sa modulisanom interakcijom duž lanca i u aproksimaciji interakcije samo najbližih suseda dat je sa

$$\mathcal{H} = J \sum_{i=1}^N (1 + (-1)^i \delta) \vec{S}_i \vec{S}_{i+1} \quad , \quad (2.1)$$

gde je δ modulacija interakcije. Izmenski integral duž lanca naizmenično uzima vrednosti $J_1 = J(1 - \delta)$ i $J_2 = J(1 + \delta)$, uz $J > 0$. Koristimo periodične granične uslove $\vec{S}_{N+i} = \vec{S}_i$. Hamiltonijan (2.1) može se izraziti preko operatora podizanja i spuštanja z komponente spina, $S_i^\pm = S_i^x \pm iS_i^y$, kao

$$\mathcal{H} = \frac{J}{2} \sum_{i=1}^N (1 + (-1)^i \delta) (S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+) + J \sum_{i=1}^N (1 + (-1)^i \delta) S_i^z S_{i+1}^z \quad . \quad (2.2)$$

U daljem računu biće nam pogodno da talasna funkcija bude nenegativna, $\Psi_0 \geq 0$. To se uvek može postići u slučaju bozonskog sistema, i zato vršimo sledeću transformaciju: Operatori podizanja i spuštanja z komponente spina na različitim čvorovima komutiraju. Na istom čvoru (podrazumevamo indeks čvora i , radi preglednosti zapisa)

$$S^+ S^- + S_z^2 = S^2 + \hbar S_z \quad , \quad (2.3)$$

što primenjeno na svojstveno stanje operatora S^2 i S_z daje

$$\frac{S_z}{\hbar}|\Psi\rangle = \frac{S^+S^-}{\hbar^2}|\Psi\rangle - \frac{1}{2}|\Psi\rangle = b^+b|\Psi\rangle - \frac{1}{2}|\Psi\rangle = \left(n - \frac{1}{2}\right)|\Psi\rangle \quad , \quad (2.4)$$

gde su

$$b^+ = \frac{S^+}{\hbar} \quad , \quad b = \frac{S^-}{\hbar} \quad , \quad b^+b = n \quad . \quad (2.5)$$

Dakle

$$[S^+, S^-] = 2\hbar S_z \quad \Rightarrow \quad [b^+, b^-]|\Psi\rangle = \frac{2S_z}{\hbar}|\Psi\rangle = (2n - 1)|\Psi\rangle = \pm|\Psi\rangle \quad . \quad (2.6)$$

Poslednja jednakost u jednačini (2.6) je zadovoljena ako je $n|\Psi\rangle = (1, 0)|\Psi\rangle$. Znači operatori b egzaktno zadovoljavaju bozonske komutacione relacije (\pm je samo fazni faktor) na proizvoljnim čvorovima, ako je maksimalan broj bozona na svakom čvoru jednak 1.

Dakle, sistem $S = 1/2$ spinova se egzaktno transformiše u sistem **hard-core** bozona. Analogija je jednostavna: spin-gore odgovara prisustvu a spin-dole odsustvu bozona. **Hard-core** uslov, da se na jednom čvoru maksimalno može nalaziti jedan bozon, zapisuje se kao $(b_i^+)^2 = 0$.

Prirodno je da operatoru kinetičke energije u hamiltonijanu (2.2) pridružimo negativan predznak, jer se prelaskom s čvora na čvor (što opisuje ovaj operator) bozon delokalizuje i tako smanjuje svoju energiju. Zato na kraju vršimo kanonsku transformaciju (transformacija koja ne menja komutacione relacije) $S_i^{x,y} \rightarrow -S_i^{x,y}$ i $S_i^z \rightarrow S_i^z$ na neparnim čvorovima i . Na jeziku bozona to znači $b_i^+ \rightarrow \epsilon_i b_i^+$, gde je $\epsilon_i = \pm 1$ na A/B podrešetki, t.j. za parno/neparno i .

Konačno, hamiltonijan sistema **hard-core** bozona dat je sa ($\hbar = 1$)

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2} \sum_{i=1}^N (1 + (-1)^i \delta) (b_i^+ b_{i+1} + b_i b_{i+1}^+) + J \sum_{i=1}^N (1 + (-1)^i \delta) n_i n_{i+1} + E_N \quad , \quad (2.7)$$

gde je $E_N = J(N/4 - N_b)$. Iskoristili smo činjenicu da $S_z^{tot} \equiv \sum_i (S_z)_i$ komutira sa hamiltonijanom (2.2), S_z^{tot} je konstanta kretanja, a samim tim je konstantan i broj bozona $N_b \equiv \sum_i n_i$.

Pored ukupne z projekcije spina S_z^{tot} , i operator $(\vec{S}^{tot})^2 = (\sum_i \vec{S}_i)^2$ komutira sa hamiltonijanom (2.1). Hamiltonijan se redukuje u svojstvenim potprostorima ova dva operatora, tj. S_z^{tot} i $(S^{tot})^2$ su dobri kvantni brojevi. S obzirom da se sistem nalazi van spoljašnjeg magnetnog polja, energije su degenerisane po S_z^{tot} . S druge strane, po teoremama Lieb-a i Mattis-a [14], znamo da je za ovakav spinski sistem energetski najniže stanje spina $S^{tot} = n$ uvek niže od najnižeg u potprostoru $S^{tot} = n + 1$. Dakle, zaključujemo

da je energetska najniže stanje sa fiksnim S_z^{tot} ujedno najniže stanje u potprostoru $S^{tot} = |S_z^{tot}|$.

GFMC algoritam daje egzaktnu energiju osnovnog stanja simuliranog sistema. Fiksiranjem broj bozona N_b u hamiltonijanu (2.7), odnosno fiksnim $S_z^{tot} = N_b - N/2$, nalazimo energetska najniže stanje sa ukupnom z projekcijom spina S_z^{tot} . To je istovremeno i najniže stanje ukupnog spina $S^{tot} = |S_z^{tot}|$, i GFMC procedurom računali smo energetska najniža stanja u sledećim potprostorima:

- $S_z^{tot} = 0 \quad \Rightarrow \quad N_b = N/2$

E_0 (singlet) - osnovno stanje

- $S_z^{tot} = -1 \quad \Rightarrow \quad N_b = N/2 - 1$

E_T (triplet) - najniže stanje sa $S^{tot} = 1$, a ujedno i prvo pobuđeno stanje [14]

- $S_z^{tot} = -2 \quad \Rightarrow \quad N_b = N/2 - 2$

E_Q (kvintuplet) - najniže stanje sa $S^{tot} = 2$

Glava 3

Metodi

Heisenberg-ov antiferomagnet na jednodimenzionalnoj rešetki (lancu) do sada nije analitički rešen u slučaju proizvoljne interakcije među spinovima. Poznati su samo neki specijalni slučajevi. Hulthen [15] je još 1938. godine koristeći Bethe-ansatz [16] odredio energiju osnovnog stanja homogenog lanca ($\delta = 0$ u (2.7)), u kom interaguju samo najbliži-susedni spinovi, izmenschkom interakcijom J istom duž celog lanca. Takođe je rešiv sistem *savršenih dimera* ($\delta = 1$), gde je lanac podeljen na parove spinova - dimere - koji međusobno ne interaguju. Prirodno se nameću numerički metodi u proučavanju fizički zanimljivijih sistema u kojima izmenschki integral nije konstantan duž lanca, tj. u jednačini (2.7) δ uzima proizvoljnu vrednost. Rad je intenziviran poslednjih godina, sa razvojem računara sposobnih za zahtevne proračune.

U ovoj glavi ćemo opisati dva numerička metoda koja smo koristili: 1) Monte Carlo simulaciju, za računanje očekivanih vrednosti opservabli u energetski najnižim stanjima fiksiranih potprostora S_z^{tot} , i 2) Egzaktnu dijagonalizaciju matrice Hamiltonijana za sisteme malih veličina, za koje je račun ostvariv korišćenjem računarskih resursa kojima raspoložemo.

3.1 Monte Carlo

Monte Carlo (MC) je metod rešavanja raznih matematičkih problema korišćenjem pseudo¹-slučajnih brojeva. Ovaj metod je posebno moćan pri integraciji, čestom problemu u fizici, i dominira nad standardnim metodom kvadratura u slučaju višestrukih integrala.

Metod kvadratura sastoji se u deljenju domena integracije mrežom hiperpovršni na

¹Slučajne brojeve uvek razigravamo po određenom algoritmu, tako da oni nikad nisu stvarno slučajni, zato koristimo reč *pseudo*. Kvalitet algoritma (*generatora slučajnih brojeva*) proveravamo testovima koji kontrolišu da li su brojevi razigrani iz željene raspodele. U ovom radu je svuda korišćen generator `dran3` [17].

što manje oblasti. Što takav domen postane manji, to je i aproksimacija bolja - integral se aproksimira vrednošću podintegralne funkcije u nekoj reprezentativnoj tački, otežinjenom zapreminom oblasti. Greška ovog metoda srazmerna je $\epsilon_Q \sim h^k$, gde je h linearna dimenzija dobijenih oblasti a k konstanta koja zavisi od konkretno primenjene formule kvadrature. Vreme potrebnog računanja proporcionalno je broju tačaka u kojima se računa integrand

$$T \sim n \sim \left(\frac{1}{h}\right)^D \sim \epsilon_Q^{-D/k} \quad \Rightarrow \quad \epsilon_Q \sim T^{-k/D} \quad , \quad (3.1)$$

gde je D dimenzionalnost integrala. Vidi se da što je D veće to greška sporije opada sa uložnim računarskim vremenom.

Kod Monte Carlo metoda greška je srazmerna (vidi niže, (3.8))

$$\epsilon_{MC} \sim T^{-1/2} \quad , \quad (3.2)$$

tj. ne zavisi od dimenzionalnosti integrala! U praksi, razlika u efikasnosti između ova dva algoritma značajna je već za $D > 10$. Mi smo radili i sa sistemima veličine $N = 200$ (u jednodimenzionalnom sistemu je $D = N$) i razumljiva je prednost MC metoda.

Proizvoljan integral I uvek možemo zapisati kao

$$I = \int d\vec{R} F(\vec{R}) = \int d\vec{R} f(\vec{R}) \cdot P(\vec{R}) \quad , \quad (3.3)$$

gde je

$$P(\vec{R}) \geq 0 \quad , \quad \int d\vec{R} P(\vec{R}) = 1 \quad , \quad (3.4)$$

raspodela, a $f = F/P$. Monte Carlo strategija sastoji se u standardnom usrednjavanju funkcije f po tačkama \vec{R}_i izvučenim iz raspodele P , što simbolički označavamo $\vec{R}_i \in P(\vec{R})$, odnosno

- Generiše se N_{MC} setova slučajnih brojeva $\vec{R}_i = (R_i^1, R_i^2, \dots, R_i^N)$ ($i = 1, \dots, N_{MC}$) iz raspodele $P(\vec{R})$
- Računa se vrednost podintegralne funkcije $f_i \equiv f(\vec{R}_i)$ u dobijenim tačkama
- Integral se ocenjuje kao [18]

$$I \approx \frac{1}{N_{MC}} \sum_{i=1}^{N_{MC}} f_i \quad , \quad (3.5)$$

a greška ocene integrala sa

$$\Delta I = \frac{\sigma}{N_{MC}^{1/2}} \quad , \quad (3.6)$$

gde je σ^2 varijansa ocene

$$\sigma^2 = \frac{1}{N_{MC}} \sum_{i=1}^{N_{MC}} f_i^2 - \left(\frac{1}{N_{MC}} \sum_{i=1}^{N_{MC}} f_i \right)^2 . \quad (3.7)$$

Iz jednačine (3.6) vidimo da je greška MC ocene obrnuto proporcionalna aritmetičkom korenu broja MC koraka

$$\Delta I \sim N_{MC}^{-\frac{1}{2}} , \quad (3.8)$$

pa ako na primer želimo grešku smanjiti 10 puta, dovoljno je povećati broj MC koraka 100 puta. Na taj način rezultat se uvek može popraviti produžavanjem MC sekvence. Sama varijansa zavisi od konkretnog razlaganja podintegralne funkcije, i pogodan izbor raspodele P je presudan (izbor nije jednoznačan). To je ono što čini razliku između dobrih i loših MC algoritama. Najbitnije je odabrati dobro razlaganje, takvo da je raspodelu što jednostavnije razigravati (u smislu uloženog računarskog vremena) a varijansa funkcije f u dobijenim tačkama \vec{R}_i bude što manja.

Osnovne prednosti MC algoritma su u jednostavnoj implementaciji, jednostavnoj proceni greške, u lakom tretiranju komplikovanih graničnih uslova, i najvažnije - ocena se može popravljati ulaganjem dodatnog računarskog vremena. S druge strane, moguće su sistematske greške (pristrasnost ocene) i posebna pažnja mora se posvetiti verifikaciji algoritma. Takođe je neophodan 'dovoljno dobar' generator slučajnih brojeva.

U ovom odeljku ćemo opisati dva MC metoda koja smo koristili - varijacioni Monte Carlo (VMC) i Green's function Monte Carlo (GFMC) metod.

3.1.1 VMC - algoritam

Očekivana vrednost proizvoljnog operatora u stanju određenom nekom talasnom funkcijom Ψ_T data je sa

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{\langle \Psi_T | \hat{O} | \Psi_T \rangle}{\langle \Psi_T | \Psi_T \rangle} . \quad (3.9)$$

U VMC proceduri određuje se očekivana vrednost hamiltonijana, a podintegralna funkcija razlaže se na raspodelu

$$P(\vec{R}) = \frac{\Psi_T^*(\vec{R})\Psi_T(\vec{R})}{\int d\vec{R}' \Psi_T^*(\vec{R}')\Psi_T(\vec{R}')} , \quad (3.10)$$

i lokalnu energiju

$$E_L(\vec{R}) = \frac{\mathcal{H}\Psi_T(\vec{R})}{\Psi_T(\vec{R})} , \quad (3.11)$$

gde $\vec{R} = (\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ označava skup koordinata svih čestica. Očekivana vrednost hamiltonijana u stanju Ψ_T računa se kao srednja vrednost lokalne energije E_L po konfiguracijama \vec{R}_i ($i = 1, \dots, N_{MC}$) izvučenim iz raspodele P , $\vec{R}_i \in P(\vec{R})$.

Funkcionalni oblik probne talasne funkcije zadaje se preko nekog skupa parametara $\alpha = (f_1, f_2 \dots)$, $\Psi_T = \Psi_T(\alpha)$. Zadate vrednosti parametara preko izraza (3.9) određuju varijacionu energiju $E_V = E_V(\alpha)$. Skup parametara α_0 za koje izraz (3.9) ima minimum daje najbolju ocenu energije osnovnog stanja, koju dalje zovemo samo varijacionu energija $E_V = E_V(\alpha_0)$, i varijacionu talasnu funkciju $\Psi_V = \Psi_T(\alpha_0)$, koja je najbolja aproksimacija talasne funkcije osnovnog stanja u skupu probnih talasnih funkcija.

Osnovni problem VMC algoritma je razigravanje potrebne raspodele (3.10). U zavisnosti od njenih analitičkih osobina, postoje razni načini da se to postigne [18]. No daleko najmoćniji, u smislu da je primenjiv za proizvoljan funkcionalni oblik raspodele, je Metropolis² algoritam [19], naročito podesan za razigravanje komplikovanih raspodela u višedimenzionim prostorima. On se koristi u većini primena VMC metoda.

Metropolis algoritam sastoji se u evoluciji konfiguracija $\vec{R}_1 \rightarrow \dots \vec{R}_i \rightarrow \vec{R}_{i+1} \rightarrow \dots$. Pravila prelaza sa i -te na $i+1$ -vu konfiguraciju su izabrana tako da za velike i $\vec{R}_i \in P(\vec{R})$, odnosno da raspodela konfiguracija \vec{R}_i konvergira željenoj raspodeli P [19]. Kad razigramo set konfiguracija, integral računamo standardnim MC usrednjavanjem $\int d\vec{R} f(\vec{R}) \cdot P(\vec{R}) = N_{MC}^{-1} \sum f_i$.

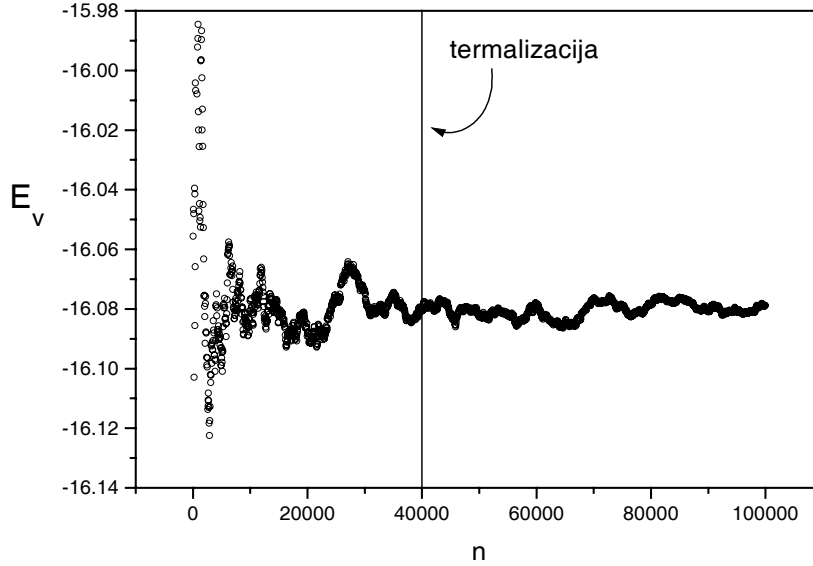
Konvergencija Metropolis algoritma (generisanje konfiguracija iz željene raspodele) je garantovana, ali brzina nije. Ona zavisi od izbora početne konfiguracije \vec{R}_1 , i tek posle određenog broja koraka konfiguracije postaju $\vec{R}_i \in P(\vec{R})$ sa dovoljnom tačnošću. Sve prethodne se odbacuju, tj. ne koriste se u oceni integrala. Koliko ih je potrebno odbaciti određujemo tako što pratimo **running average**³ lokalne energije $E_L(R)$, koji dobijamo usrednjavanjem njenih prvih n vrednosti, u funkciji od n , $E_V(n) = 1/n \sum_{i=1}^n E_L(\vec{R}_i)$. **Running average** kao funkcija n pokazuje tzv. termalizaciju. Naime, kad u određenom trenutku generisane konfiguracije \vec{R}_i zaista postanu raspodeljene po željenoj gustini verovatnoće, onda lokalne energije $E_L(\vec{R}_i)$ samo fluktuiraju oko srednje vrednosti, doprinos **running average**-u je stalno isti i njegova vrednost u funkciji broja MC koraka n postaje konstantna. Kada ocenimo da su konfiguracije termalizovale, poslednju konfiguraciju beležimo i dalje je tretiramo kao početnu. U praksi smo odbacivali po nekoliko stotina hiljada konfiguracija, a tipičan **running average** grafik prikazana je na Slici 3.1.

Za početnu konfiguraciju uzimali smo Néel-ovo stanje - bozoni popunjavaju tačno jednu podrešetku. Iz postojeće (\vec{R}) dobijamo sledeću konfiguraciju (\vec{R}') tako što redom prolazimo kroz ceo lanac (to zovemo **sweep**⁴) i svaki bozon pomeramo na susedni ili

²preciznije M(RT)² algoritam; autori su Metropolis, Rosenbluth, Rosenbluth, Teller i Teller.

³**running average** (engleski) - tekuća srednja vrednost.

⁴**sweep** (engleski) - prebrisavanje, u smislu prolaska kroz ceo lanac.



Slika 3.1: Running average u VMC proračunu osnovnog stanja homogenog lanca od $N = 100$ spinova ($N_b=50$ bozona). Generisano je $N_{MC} = 10^5$ koraka, a korišćena je jednoparameterska probna funkcija sa $f=0.3$

sledeći-susedni čvor (levo ili desno) sa podjednakom verovatnoćom; po Metropolis-ovom pravilu pomeraj prihvatamo sa verovatnoćom

$$q = \min \left(1, \frac{\Psi_T^2(R')}{\Psi_T^2(R)} \right) \quad . \quad (3.12)$$

Dužina pomeraja bozona (2, susedni ili sledeći-susedni čvor) izabrana je tako da verovatnoća prihvatanja bude oko 25%, što je 50% od 50%. Maksimalna verovatnoća prihvatanja je 50%, jer moramo zadovoljiti **hard-core** uslov, a čvor na koji se bozon pomera je prazan sa tom verovatnoćom. Tako je ovo u stvari prihvatanje od 50% u odnosu na maksimalno moguće. Ovakav izbor povećava efikasnost procedure, a ne utiče na rezultat.

Proces generisanja konfiguracija ponavljamo veliki broj (bar 10^5) puta. Dobijene konfiguracije nisu međusobno nezavisne, jer su i dobijene rekurzivno jedna iz druge. Ove autokorelacije povećavaju grešku računanja očekivanih vrednosti opservabli, jer osnovna pretpostavka u oceni varijanse po formuli (3.7) je da su slučajne promenljive \vec{R}_i međusobno nezavisne. Ako to nisu, prava varijansa je [19]

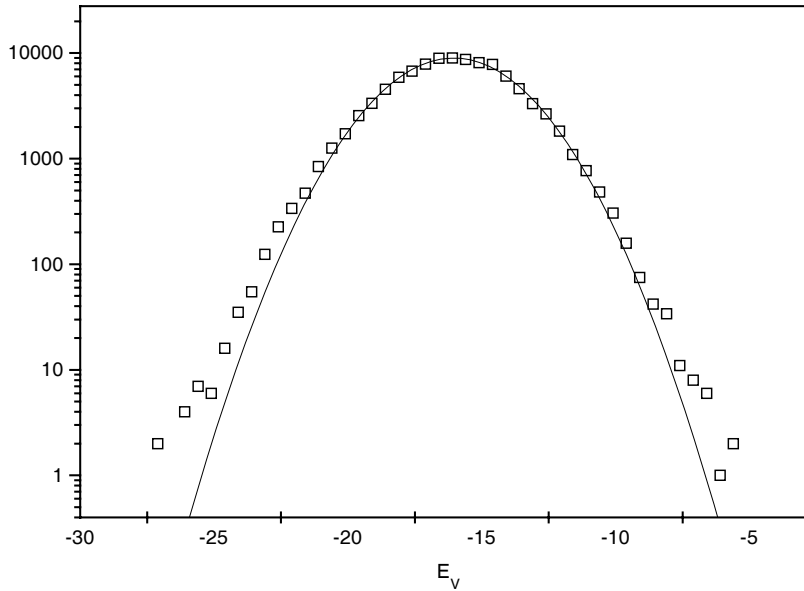
$$\sigma^2 \longrightarrow \tau_c \cdot \sigma^2 \quad , \quad \tau_c = 1 + 2 \sum_{k=1}^{N_{MC}} C_k \quad , \quad (3.13)$$

gde je τ_c autokorelaciono vreme, a C_k koeficijenti autokorelacije dati sa

$$\begin{aligned}
 C_k &= \frac{\langle E_L(\vec{R}_i) \cdot E_L(\vec{R}_{i+k}) \rangle - \langle E_L(\vec{R}_i) \rangle^2}{\langle E_L^2(\vec{R}_i) \rangle - \langle E_L(\vec{R}_i) \rangle^2} \\
 &\equiv \frac{\frac{1}{N_{MC}-k} \sum_{i=1}^{N_{MC}-k} E_L(\vec{R}_i) \cdot E_L(\vec{R}_{i+k}) - \left(\frac{1}{N_{MC}} \sum_{i=1}^{N_{MC}} E_L(\vec{R}_i) \right)^2}{\frac{1}{N_{MC}} \sum_{i=1}^{N_{MC}} E_L^2(\vec{R}_i) - \left(\frac{1}{N_{MC}} \sum_{i=1}^{N_{MC}} E_L(\vec{R}_i) \right)^2} . \quad (3.14)
 \end{aligned}$$

Postoji više načina da se izbegnu autokorelacije među generisanim konfiguracijama. S obzirom da u VMC proceduri samo generisanje konfiguracija nije vremenski 'skup' proces, prosto smo ih odbacivali, zadržavajući tek svaku n_{freq} -tu konfiguraciju. Koeficijenti autokorelacije opadaju sa k po eksponencijalnom zakonu. Merili smo ih, i za n_{freq} uzimali onaj broj za koji su svi $C_k < 0.1$, za $k > n_{freq}$. Tipično smo uzimali $n_{freq} = 10$.

No, ni uz odbacivanje konfiguracija varijanica ne mora imati standardno tumačenje, u smislu da raspodela rezultata ne mora biti Gauss-ovska, Slika 3.2. Da bi restaurirali



Slika 3.2: Histogram 10^5 termalizovanih varijacionih energija generisanih kao na Slici 3.1. Linija predstavlja odgovarajuću Gauss-ovu raspodelu. Vide se odstupanja u krilima.

Gauss-ovost raspodele, vršimo usrednjavanje po blokovima [19, 20]: N_{MC} generisanih vrednosti lokalne energije grupišemo u B blokova veličine N_B ($B \cdot N_B = N_{MC}$), u svakom

bloku prosto usrednjimo, i dobijenih B vrednosti tretiramo dalje

$$E_I = \frac{1}{N_B} \sum_{i \in I} E_i \quad , \quad \text{gde je } I \text{ indeks bloka} \quad , \quad (3.15)$$

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \frac{1}{B} \sum_{I=1}^B E_I \quad , \quad \sigma_B^2(\mathcal{H}) = \frac{1}{B-1} \left[\frac{1}{B} \sum_{I=1}^B E_I^2 - \left(\frac{1}{B} \sum_{I=1}^B E_I \right)^2 \right] \quad . \quad (3.16)$$

Kao što se vidi iz jednačina (3.15) i (3.16), podela na blokove ne utiče na dobijeni rezultat, samo modifikuje ocenu greške.

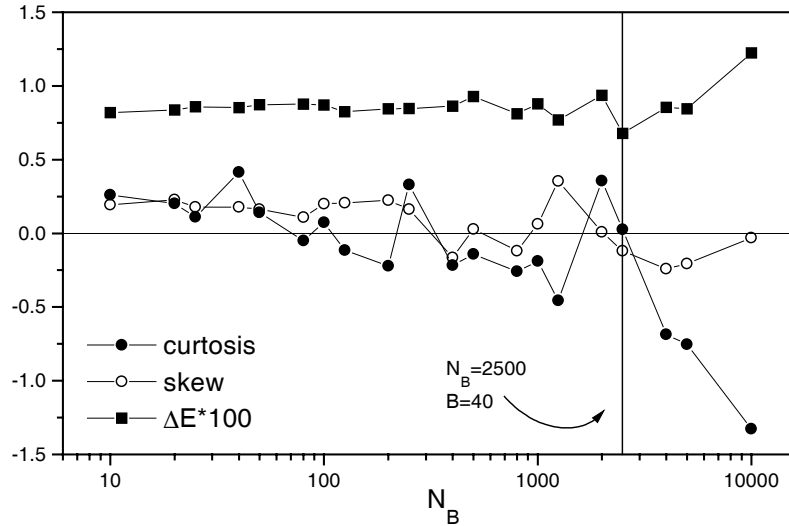
Za Gauss-ovu raspodelu karakteristično je da su **skew**

$$\alpha_3 = \langle (\mathcal{H} - \langle \mathcal{H} \rangle)^3 \rangle \quad , \quad (3.17)$$

i **curtosis**

$$\alpha_4 = \langle (\mathcal{H} - \langle \mathcal{H} \rangle)^4 \rangle - 3 \quad , \quad (3.18)$$

jednaki nuli. Pošto želimo da raspodela naših rezultata bude što više nalik Gauss-ovoj, N_{MC} generisanih konfiguracija delimo na blokove različitih dužina, i one vrednosti B i N_B za koje su **skew** i **curtosis** lokalne energije najbliži nuli uzimamo za optimalne u daljem radu (Slika 3.3).



Slika 3.3: Skew, curtosis i greška u VMC proračunu osnovnog stanja homogenog lanca. Veličina sistema i talasna funkcija su isti kao na Slici 3.1.

3.1.2 VMC - korelisano sampliranje

U varijacionoj proceduri optimizacije parametara talasne funkcije koristili smo metod korelisanog sampliranja. Naime, naivno određivanje integrala

$$E_v(\alpha) = \frac{\langle \Psi_T(\alpha) | \mathcal{H} | \Psi_T(\alpha) \rangle}{\langle \Psi_T(\alpha) | \Psi_T(\alpha) \rangle}, \quad (3.19)$$

za različite vrednosti parametara daje rezultate koji usled varijance MC metoda ne pokazuju jasno gde je minimum. Mnogo bolje je korelisano sampliranje [20] iz $M(\text{RT})^2$ sekvence vođene talasnom funkcijom $\Psi_T(\alpha_0, \vec{R})$:

$$E_v(\alpha) = \frac{\int \Psi_T^*(\alpha, \vec{R}) \mathcal{H} \Psi_T(\alpha, \vec{R}) d\vec{R}}{\int \Psi_T^*(\alpha, \vec{R}) \Psi_T(\alpha, \vec{R}) d\vec{R}} = \frac{\int E_L(\alpha, \vec{R}) W(\alpha, \vec{R}) P(\alpha_0, \vec{R}) d\vec{R}}{\int W(\alpha, \vec{R}) P(\alpha_0, \vec{R}) d\vec{R}}, \quad (3.20)$$

gde su

$$W(\alpha, \vec{R}) = \frac{\Psi_T^*(\alpha, \vec{R}) \Psi_T(\alpha_0, \vec{R})}{P(\alpha_0, \vec{R})}, \quad P(\alpha_0, \vec{R}) = \Psi_T^*(\alpha_0, \vec{R}) \Psi_T(\alpha_0, \vec{R}), \quad (3.21)$$

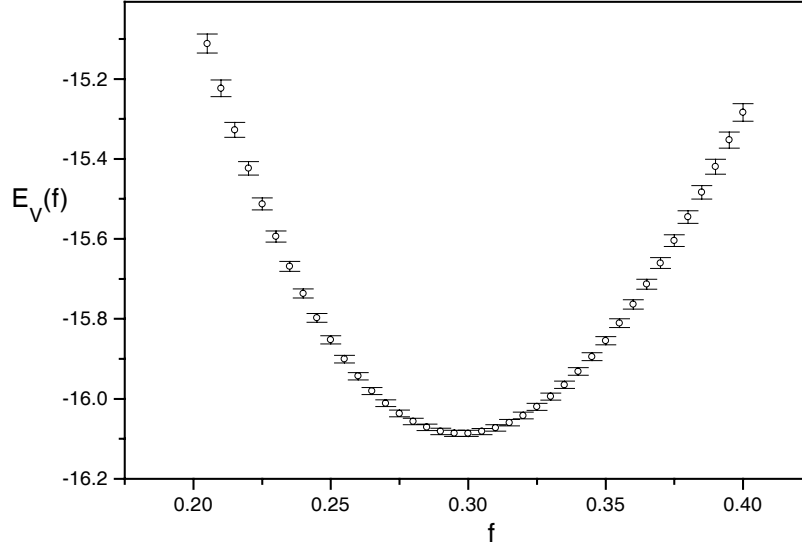
tj.

$$E_v(\alpha) = \frac{\langle E_L(\alpha, \vec{R}) W(\alpha, \vec{R}) \rangle_{\alpha_0}}{\langle W(\alpha, \vec{R}) \rangle_{\alpha_0}}. \quad (3.22)$$

Ovakva procedura je brža, jer se generiše samo jedan set konfiguracija (iz raspodele $|\Psi_T(\alpha_0, \vec{R})|^2$) i sa njima usrednjava za više vrednosti parametara α . Dobijeno $E_v(\alpha)$ je glatka funkcija čiji se minimum može lako odrediti (Slika 3.4). Postupak je sledeći: prvo 'naivno', tj. običnim nekorelisanim sampliranjem, izračunamo srednju vrednost lokalne energije za nekoliko različitih vrednosti parametara α i grubo ocenimo položaj minimuma. Onda korake u korelisanom sampliranju 'vodimo' talasnom funkcijom datom tim vrednostima parametara. Rezultate korelisanog sampliranja fitujemo odgovarajućom kvadratnom formom. Fit daje novu poziciju minimuma koju koristimo za novo korelisano sampliranje, itd. Ovaj iterativni proces nastavljamo sve dok se pozicija minimuma pomera. Što je veći broj varijacionih parametara, procedura je, naravno, sve duža, ali nam u praksi nikad nije trebalo više od 10 iteracija.

3.1.3 VMC - izbor probne talasne funkcije

Osnovni problem u varijacionom računu je izbor odgovarajuće funkcionalne forme za probnu talasnu funkciju Ψ_T . Radili smo sa Jastrow-ljevim oblikom [19] koji uzima u obzir samo dvočestične korelacije



Slika 3.4: Korelisano sampliranje u VMC proračunu osnovnog stanja homogenog lanca, jednoparametarska Ψ_T , $f_{opt}=0.3$. Veličina sistema i talasna funkcija su isti kao na Slici 3.1.

$$\Psi_T(\vec{R}) = \prod_{i<j} f(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \quad , \quad (3.23)$$

gde je $\vec{R} = (\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_{N_b})$ konfiguracija sistema, \vec{r}_i su vektori položaja bozona na rešetki. **Hard-core** uslov za f je $f(0) = 0$. Za veliko međurastojanje $f(r \rightarrow \infty) \rightarrow 1$.

Uzimali smo u obzir samo kratkodometne korelacije. Najjednostavniji izbor je

$$f(r) = \begin{cases} 0 & , \text{ ako } \vec{r} = 0 \\ f_1 & , \text{ ako } \vec{r} = \vec{a}, \text{ i ako su } \check{\text{c}}\text{vorovi povezani preko } J_1 \\ f_2 & , \text{ ako } \vec{r} = \vec{a}, \text{ i ako su } \check{\text{c}}\text{vorovi povezani preko } J_2 \\ 1 & , \text{ ina} \check{\text{c}}\text{e} \end{cases} \quad , \quad (3.24)$$

gde je \vec{a} rastojanje među susednim čvorovima. Ovaj izbor je računski najlakši jer u sebi sadrži najmanji broj parametara - dva. Dvoparametarska talasna funkcija je prosto $\Psi_T(\vec{R}) = f_1^{nn1} \cdot f_2^{nn2}$, gde je $nn1$ ($nn2$) ukupan broj susednih čvorova popunjenih bozonima u datoj konfiguraciji \vec{R} i povezanih preko J_1 (J_2).

Niža varijaciona energija, bliža pravoj energiji osnovnog stanja, dobija se dodavanjem

još jednog varijacionog parametra, odnosno korišćenjem

$$f(r) = \begin{cases} 0 & , \text{ ako } \vec{r} = 0 \\ f_1 & , \text{ ako } \vec{r} = \vec{a}, \text{ i ako su čvorovi povezani preko } J_1 \\ f_2 & , \text{ ako } \vec{r} = \vec{a}, \text{ i ako su čvorovi povezani preko } J_2 \\ f_3 & , \text{ ako } \vec{r} = 2\vec{a} \\ 1 & , \text{ inače} \end{cases} . \quad (3.25)$$

Ovako dobijamo troparametarsku talasnu funkciju, $\Psi_T(\vec{R}) = f_1^{nn1} \cdot f_2^{nn2} \cdot f_3^{nnn}$, gde je nnn ukupan broj sledećih-susednih čvorova popunjenih bozonima u datoj konfiguraciji \vec{R} .

U slučaju homogenog ($\delta = 0$) Heisenberg-ovog lanca stavljamo $f_1 = f_2$, i gore pomenute dvo- i troparametarske probne funkcije postaju jedno- i dvoparametarske, tj. zavise od jednog parametra manje.

3.1.4 GFMC - algoritam

Green's Function Monte Carlo je opšti algoritam za nalaženje ekstremalne svojstvene vrednosti operatora. Probni vektor se prepušta vremenskoj evoluciji, čiji je efekat da filtrira onu komponentu vektora koja odgovara ekstremalnoj svojstvenoj vrednosti operatora. Ako se na probnu funkciju deluje operatorom \mathcal{G} (*propagator*), filtriraće se talasna funkcija osnovnog stanja.

Definišemo iterativnu proceduru

$$\Psi^{(n)}(\vec{R}') = \sum_{\vec{R}} \mathcal{G}(\vec{R}', \vec{R}) \Psi^{(n-1)}(\vec{R}) \quad , \quad \mathcal{G}(\vec{R}', \vec{R}) = \langle \vec{R}' | \mathcal{G}(\mathcal{H}) | \vec{R} \rangle \quad , \quad (3.26)$$

gde su **time step**⁵ τ i *probna energija* ω ulazni parametri. U zavisnosti od izbora propagatora postoje različiti metodi. Na ovom mestu koristimo *stepeni metod*⁶, gde je

$$\mathcal{G}(\mathcal{H}) = 1 - \tau(\mathcal{H} - \omega) \quad , \quad (3.27)$$

što je razvoj $e^{-\tau(\mathcal{H}-\omega)}$ zaključno sa linearnim članom.

Izražen u svojstvenom bazu hamiltonijana $\mathcal{H}|\Phi_\alpha\rangle = E_\alpha|\Phi_\alpha\rangle$, propagator postaje

$$\mathcal{G}(\mathcal{H}) = \sum_{\alpha} |\Phi_\alpha\rangle (1 - \tau(E_\alpha - \omega)) \langle \Phi_\alpha| \quad , \quad (3.28)$$

⁵time step (engleski) - vremenski korak

⁶power method (engleski)

a talasna funkcija u n -tom iterativnom koraku

$$\begin{aligned} [\mathcal{G}(\mathcal{H})]^n |\Psi^{(0)}\rangle &= \sum_{\alpha} |\Phi_{\alpha}\rangle (1 - \tau(E_{\alpha} - \omega))^n \langle \Phi_{\alpha} | \Psi^{(0)} \rangle = \\ &= |\Phi_0\rangle (1 - \tau(E_0 - \omega))^n \langle \Phi_0 | \Psi^{(0)} \rangle + \sum_{\alpha \neq 0} |\Phi_{\alpha}\rangle (1 - \tau(E_{\alpha} - \omega))^n \langle \Phi_{\alpha} | \Psi^{(0)} \rangle \quad . \end{aligned} \quad (3.29)$$

Ako su zadovoljeni sledeći uslovi

1. $E_0 \approx \omega < E_{\alpha} (\alpha \neq 0)$,
2. $\langle \Phi_0 | \Psi^{(0)} \rangle \neq 0$,
3. $\tau < 2/(E_{max} - \omega)$

biće $|1 - \tau(E_{\alpha \neq 0} - \omega)| < 1$, i suma po $\alpha \neq 0$ u jednačini (3.29) teži nuli kad $n \rightarrow \infty$. Dobijamo

$$|\Psi^{(n)}\rangle = [\mathcal{G}(\mathcal{H})]^n |\Psi^{(0)}\rangle \quad , \quad (3.30)$$

tj. uzastopna primena $\mathcal{G}(\mathcal{H})$ zaista filtrira osnovno stanje sistema.

Uslov 3. može biti zadovoljen za $\tau \neq 0$ samo ako postoji konačna gornja granica energetskog spektra $E_{max} < \infty$, što je zadovoljeno jer je sistem diskretan i konačan. Ova činjenica je presudna za naš izbor propagatora - stepeni metod je najjednostavniji za računanje, a i brži je u odnosu na ostale metode u kojima se propagator zadaje u vidu eksponencijalne funkcije. S obzirom da je E_{max} reda veličine maksimalne potencijalne energije koja se dobija kada se svi bozoni nalaze jedan do drugog, dobijamo $E_{max} \cong NJ$ i biramo $\tau = 1/NJ$.

Uslovi 1. i 2. su zadovoljeni ako se za ulazne parametre GFMC procedure uzmu VMC rezultati $\Psi^{(0)} = \Psi_V$, $\omega = E_V$. Uslov 2. nije restriktivan, dovoljno je za probnu funkciju uzeti bilo koju koja nije ortogonalna na talasnu funkciju osnovnog stanja. Izvršili smo i probu da GFMC počnemo od funkcije za koju je očigledno da je neoptimalna - npr. od Néel-ovog stanja. Iterativna procedura filtriranja komponente osnovnog stanja je i dalje konvergirala, ali je varijansa bila veća nego u slučaju GFMC vođenog VMC rezultatima.

Dakle, algoritam se sastoji u određivanju varijacione energije E_V i varijacione talasne funkcije Ψ_V , sa dobijenim rezultatima ulazi se u GFMC proceduru i filtrira **egzaktna** talasna funkcija osnovnog stanja. Onda je moguće računati očekivane vrednosti opservabli u osnovnom stanju.

Talasna funkcija osnovnog stanja bozonskog sistema je nenegativna, kao i propagator \mathcal{G} . Stoga se $\Psi^{(n)}(\vec{R})$ može tretirati kao gustina verovatnoće i predstavljati konfiguracijama raspodeljenim po tom zakonu. Svaka konfiguracija tretira se kao 'šetač' u konfiguracionom prostoru, a ukupan broj šetača u svakom trenutku $t = n\tau$ opisuje se kao populacija n -te generacije.

Propagacija šetača uključuje dva osnovna procesa. i) Difuzija: pomeraji pojedinačnih bozona su vođeni operatorom kinetičke energije koji ih prebacuje sa jednog čvora na drugi. ii) Grananje: ako konfiguracija evoluira u pravcu oblasti visoke potencijalne energije, takvi šetači se sa nekom verovatnoćom odbacuju. S druge strane, ako početna konfiguracija evoluira u pravcu niže potencijalne energije, multiplicira se sa nekom verovatnoćom. Pogodno je propagator predstaviti kao proizvod faktora koji odgovaraju tim procesima ponaosob: $G(\vec{R}', \vec{R}) = P(\vec{R}', \vec{R}) \cdot m(\vec{R}', \vec{R})$, gde je $P(\vec{R}', \vec{R})$ verovatnoća pomeraja $\vec{R} \rightarrow \vec{R}'$ (odgovoran za difuziju) a $m(\vec{R}', \vec{R})$ je multiplicitet dobijene konfiguracije \vec{R}' (odgovara grananju).

3.1.5 GFMC - importance sampliranje

Ako postoji približna ocena talasne funkcije osnovnog stanja, mnogo efikasnije je voditi evoluciju probnog vektora u pravcu ove funkcije, zvane *vodeća talasna funkcija* Ψ_G . Takva procedura vodi do značajnog smanjenja varijanse i poznata je kao **importance** sampliranje. Difuzija šetača je usmerena i pomeraji u oblasti faznog prostora koje su značajne u odnosu na Ψ_G su češći.

Radi uvođenja **importance** sampliranja, u jednačini (3.26) gustina verovatnoće u n -tom koraku menja se u $F^{(n)} = \Psi^{(n)}\Psi_G$. Jednačine (3.26) i (3.27) modifikuju se u [21]

$$F^{(n)}(\vec{R}') = \sum_{\vec{R}} \mathcal{G}(\vec{R}', \vec{R}) F^{(n-1)}(\vec{R}) \quad , \quad (3.31)$$

$$\mathcal{G}(\vec{R}', \vec{R}) = \Psi_G(\vec{R}') \langle \vec{R}' | [1 - \tau(\mathcal{H} - \omega)] | \vec{R} \rangle \frac{1}{\Psi_G(\vec{R})} \quad . \quad (3.32)$$

Kada $n \rightarrow \infty$, onda $F^{(n)} \rightarrow F^* = \phi_0 \Psi_G$. Optimalno razlaganje \mathcal{G} u P i m , ono koje vodi do najmanjeg srednjeg-kvadratnog-grananja [21] $\langle (m - \langle m \rangle)^2 \rangle$, daje [22]

$$m(\vec{R}') = 1 - \tau \left[E_L(\vec{R}') - \omega \right] \quad , \quad (3.33)$$

$$P(\vec{R}', \vec{R}) = m^{-1}(\vec{R}) \cdot \begin{cases} 1 - \tau \left[U(\vec{R}') - \omega \right] & , \text{ ako } \vec{R}' = \vec{R} \\ \frac{1}{2} \tau J \Psi_G(\vec{R}') / \Psi_G(\vec{R}) & , \text{ ako } \vec{R}' \in N(\vec{R}) \\ 0 & , \text{ inače} \end{cases} \quad , \quad (3.34)$$

gde je $U(\vec{R}') = \langle \vec{R}' | J \sum_i (1 + (-1)^i \delta) n_i n_{i+1} | \vec{R}' \rangle$ potencijalna energija konfiguracije \vec{R}' . Skup $N(\vec{R})$ je 'okolina' \vec{R} i sastoji se od svih konfiguracija koje je moguće dobiti iz \vec{R} pomeranjem bilo kog bozona levo ili desno.

Problem ovakvog algoritma je nekontrolisana multiplikacija šetača, koja se može eliminisati podešavanjem ω na svakih K generacija [19]:

$$\omega = \omega + \frac{1}{K\tau} \ln \left(\frac{p_0}{p_k} \right) \quad , \quad (3.35)$$

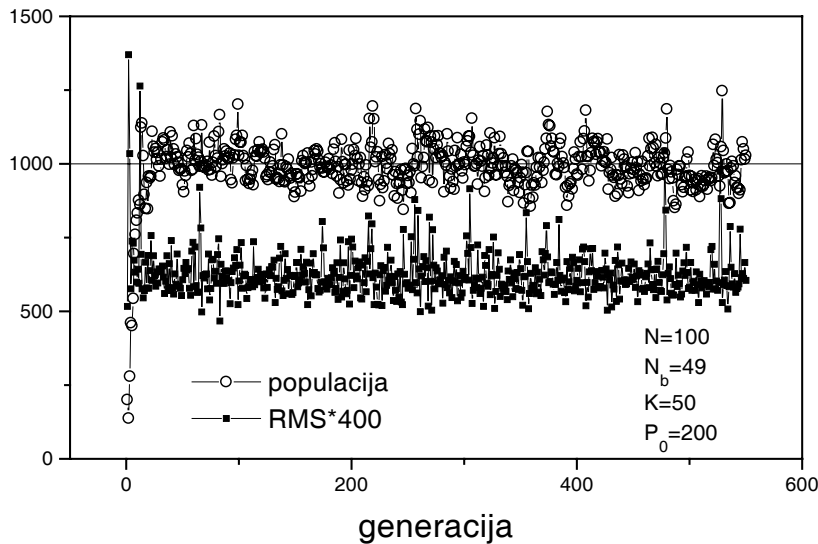
gde su p_0 i p_k populacije nulte i K -te generacije. Ovo znači da, ako je $p_k > p_0$ tada ω treba sniziti da bi se konfiguracije odbacivale intenzivnije, a ako je $p_k < p_0$ tada ω treba povećati da bi se konfiguracije multiplicirale.

Sve u svemu, koristili smo sledeću proceduru:

1. Počinjemo sa osnovnim skupom od nekoliko stotina konfiguracija, generisanih iz raspodele $F^{(0)}(\vec{R}) = \Psi^{(0)}(\vec{R})\Psi_G(\vec{R}) = \Psi_V^2(\vec{R})$, gde je vodeća funkcija $\Psi_G = \Psi_V$.
2. Za svaku konfiguraciju u generaciji pravimo tabelu verovatnoća prelaza u bilo koju od $2N_b + 1$ mogućih novih konfiguracija, po jednačini (3.34). U skladu sa ovim verovatnoćama izvlačimo P , što daje bozon koji treba pomeriti i pravac pomeraja, tj. novu konfiguraciju \vec{R}' . Posle svakog pomeraja tabela verovatnoća prelaza se obnavlja. Pošto je za svaku konfiguraciju $\vec{R}' \in N(\vec{R})$ neophodno računati $\Psi_G(\vec{R}')/\Psi_G(\vec{R})$, da bi algoritam bio efikasan značajno je da funkcionalna forma $\Psi_G(\vec{R})$ bude što jednostavnija. To je osnovni razlog za rad sa dvo- i tro- a ne više parametarskim talasnim funkcijama.
3. Multiplicitet šetača računa se u skladu sa jednačinom (3.33) i akumulira u vidu proizvoda, ali grananje se vrši tek nakon K koraka. Vrednost K se bira tako da koren-srednje-kvadratne (RMS⁷) vrednosti multipliciteta bude oko 2 [21]. Veći RMS je nepoželjan, jer bi to značilo da pratimo šetače malih relativnih težina. S druge strane, premali RMS bi rezultovao u sporijem algoritmu. Pratili smo ovu RMS vrednost multipliciteta (Slika 3.5), usrednjenu po šetačima iz K koraka 2.
4. Vršiti se grananje nakon K koraka, a stvarni multiplicitet se uzima kao $M(R) = \lfloor m(R) + \xi \rfloor$ [21], gde je ξ slučajni broj uniformno raspodeljen u intervalu $[0, 1]$, a $\lfloor \cdot \rfloor$ označava operaciju odsecanja razlomljenog dela ('ceo deo'). Na ovom mestu modifikuje se i ω u skladu sa jednačinom (3.35). Sa dobijenim konfiguracijama ide se nazad na korak 2.

Slično VMC, i ovde se odbacuju konfiguracije prvih generacija, jer na njih utiče izbor probne talasne funkcije. Posle određenog broja generacija isfiltrirana je talasna funkcija osnovnog stanja, odnosno u slučaju opisanog **importance** sampling metoda dobijaju se generacije raspodeljene po $\Phi_0\Psi_G$. Koliko početnih generacija je potrebno odbaciti određuje se praćenjem **running average**-a energije, i ocenjivanjem kada nastupa termalizacija. Tipičan primer je prikazan na Slici 3.6. Primećeno je da se termalizacija usporava

⁷Root-mean-square (engleski)

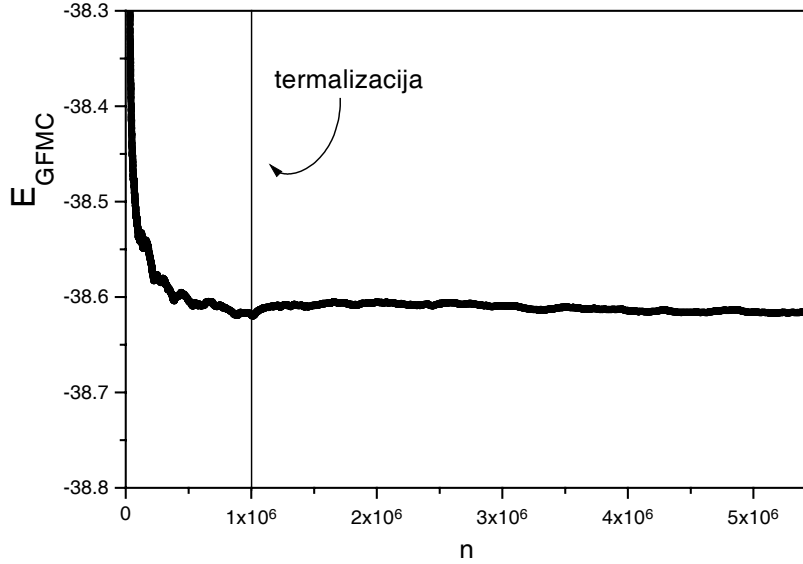


Slika 3.5: RMS i populacija u funkciji broja GFMC koraka; homogen lanac $N = 100$, $N_b = 49$ jednoprametarska Ψ_G .

sa porastom veličine sistema. Najsporija je za $N = 200$, kada je potrebno odbaciti 10^6 konfiguracija (oko 1000 generacija). Radi automatizacije algoritma ovu vrednost smo zadržali za sve N , što nije predstavljalo problem, jer je za manje sisteme algoritam brži.

Razlog za ovakvo ponašanje termalizacije leži u usporenu GFMC evolucije talasne funkcije, zbog smanjenja vremenskog koraka (*time step*) sa porastom N , $\tau \sim N^{-1}$. Potrebno računarsko vreme za postizanje istog broja GFMC koraka linearno raste sa veličinom sistema, a zbog smanjenja τ za postizanje istog kvaliteta rezultata potrebno je uložiti još vremena, isto reda N . Tako je GFMC procedura $O(N^2)$, u smislu postizanja iste tačnosti na sistemima različitih veličina.

Uticao autokorelacija na ocenu greške umanjili smo na drugačiji način nego u VMC slučaju. Naime, u GFMC algoritmu proces samog generisanja konfiguracija je vremenski mnogo zahtevniji nego u VMC proceduri, to je deo algoritma u kom se provodi najviše vremena - u stalnoj tabulaciji matrice prelaza (jednačina (3.34)). Prosto odbacivanje konfiguracija nije isplativo, a i n_{freq} bi moralo biti mnogo veće jer su konfiguracije korelisane. Korelisane su na primer dve konfiguracije koje se nalaze (u nizu svih generisanih konfiguracija) na relativnom rastojanju reda veličine populacije (oko 1000), jer je druga direktan potomak prve. Takođe, bliske konfiguracije mogu biti i identične, ako su nastale prostim grananjem istog šetača. Da ne bi odbacivali utrošeno računarsko vreme, vršili smo usrednjavanje po blokovima, po jednačinama (3.15), (3.16). Pratili smo skew, curtosis, a



Slika 3.6: Running average energije u GFMC proračunu osnovnog stanja homogenog lanca od $N = 200$ spinova ($N_b = 100$ bozona), vođenom dvoparametarskom talasnom funkcijom. Termalizacija je nastupila posle 1.000.000 generisanih konfiguracija

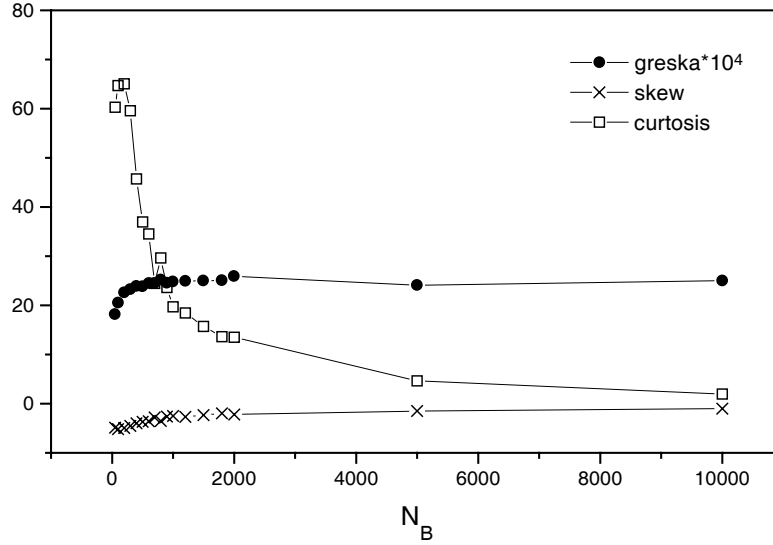
i raspodelu rezultata dobijenih usrednjavanjem po blokovima, za razne B , N_B . Rezultati nisu bili zadovoljavajući - tek za velike blokove (tako da ih u celoj GFMC sekvenci bude od 10 do 100) raspodela bi postajala Gauss-ovska. No to nije problem, jer se ocena greške stabilizuje i pri neoptimalnoj veličini bloka tj. malo se razlikuje od prave Gauss-ovske. Slika 3.7 ilustruje jednu od situacija u kojoj je teško optimizovati *skew* i *curtosis* (u pitanju je doduše *nehomogen lanac*, $\delta = 0.06$), ali vidimo da ocena greške ne varira mnogo sa promenom veličine bloka N_B . Tako nismo vršili stvarnu optimizaciju već smo za sve N uzimali blokove veličine $N_B = 1000$, pošto smo proverili da se pri takvoj podeli ocena greške stabilizovala.

Monte Carlo usrednjavanjem po dobijenim konfiguracijama računa se *mixed estimate*⁸ [22]

$$\langle \hat{O} \rangle_M = \frac{\langle \Psi^{(n)} \hat{O} \Psi_G \rangle}{\langle \Psi^{(n)} \Psi_G \rangle} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \frac{\langle \Phi_0 \hat{O} \Psi_G \rangle}{\langle \Phi_0 \Psi_G \rangle}, \quad (3.36)$$

Kada je u pitanju hamiltonijan, ova ocena je upravo egzaktna ocena energije osnovnog stanja, jer s obzirom da je Φ_0 svojstveno stanje hamiltonijana, delovanjem na Φ_0 dobija se tačno E_0 . Tako smo određivali energiju osnovnog stanja sistema (2.7), egzaktno, bez aproksimacije.

⁸mixed estimate (engleski) - mešana ocena



Slika 3.7: Skew, curtosis i ocena greške za energije osnovnog stanja nehomogenog ($\delta = 0.06$) lanca od $N = 20$ spinova ($N_b = 10$ bozona) dobijene usrednjavanjem po blokovima. GFMC sekvenca sadrži 3.5×10^6 energija (posle termalizacije). Ocena greške je konstantna za $N_B > 1000$.

U opštem slučaju operatora koji ne komutira sa hamiltonijanom, kom Φ_0 nije svojstveno stanje, ova ocena ne daje egzaktnu očekivanu vrednost operatora u osnovnom stanju. Kvalitet ocene zavisi od kvaliteta probne talasne funkcije Ψ_T . Za popravku ocene vrši se ekstrapolacija [19]

$$\langle \hat{O} \rangle = 2\langle \hat{O} \rangle_M - \langle \hat{O} \rangle_T + O(\|\Phi_0 - \Psi_T\|^2) \quad , \quad (3.37)$$

za koju je potrebno znati očekivanu vrednost operatora u stanju Ψ_T . U slučaju $\Psi_T = \Psi_V$ znači potrebna je varijaciona ocena.

3.2 Egzaktna dijagonalizacija

Matrica hamiltonijana sistema od N spinova, zapisanog u koordinatnoj reprezentaciji, može se egzaktno dijagonalizovati. Prednost ovog metoda je u dobijanju svih svojstvenih stanja i energija sistema, ali osnovni problem je veličina matrice koju je potrebno dijagonalizovati, a koja eksponencijalno raste sa veličinom sistema.

Prostor stanja sistema od N spinova, $S = 1/2$, je 2^N -dimenzionalan jer svaki spin ima po dve moguće orijentacije. Zapisan u ovakvom bazu hamiltonijan postaje matrica $2^N \times 2^N$. Veličina matrice može se smanjiti ako se rešavanje ograniči na samo neke potprostore u kojima se hamiltonijan redukuje (u odgovarajućem bazu, prilagođenom ovakvoj dekompoziciji prostora stanja, matrica je blok-dijagonalna). Poželjno je odrediti što više (što manjih) ovakvih potprostora, i rešavanje kompletnog svojstvenog problema svesti na dijagonalizaciju više matrica manje dimenzije. U tom smislu koriste se simetrije - operatori koji komutiraju sa hamiltonijanom i u čijim svojstvenim potprostorima se on redukuje.

Već je napomenuto da operator ukupnog broja bozona $\sum_i n_i$ komutira sa hamiltonijanom (jednačina (2.7)), odnosno da je broj bozona konstantan. Kao što je rečeno, odvojeno posmatramo potprostore $N_b = N/2, N/2-1, N/2-2$ i u njima nas interesuju energetska najniža stanja. S obzirom da su bozoni nerazličive čestice, prostor stanja se redukuje na permutaciono simetričan, i hamiltonijan se svodi na $\binom{N}{N_b} \times \binom{N}{N_b}$ matricu u svakom potprostoru sa zadatim N_b .

Osnovno stanje mora biti potpuno simetrično (transformiše se po jediničnoj ireducibilnoj reprezentaciji grupe simetrija), i traže se simetrizovani potprostori svih preostalih operatora simetrije. Koristili smo translacionu simetriju (periodični granični uslovi), particle-hole simetriju (u smislu bozona; na rečniku spinova to je inverzija z -ose) i simetriju u odnosu na rotaciju oko sredine lanca (paran broj čvorova).

Uz sve navedeno, broj mogućih stanja i dalje brzo raste sa veličinom sistema, $N_{states} \approx e^{\alpha N}$. Pronalaženje novih simetrija sistema može samo da smanji koeficijent α , ali zavisnost ostaje eksponencijalna. Od interesa bi bilo pronaći grupe simetrija čiji red takođe eksponencijalno raste sa dužinom lanca. Korišćenje ovakvih simetrija bi moglo da dovede do suštinskog smanjenja N_{states} , i samim tim povećanja veličine sistema za koje je moguća egzaktna dijagonalizacija.

Potrebno računarsko vreme u algoritmu egzaktne dijagonalizacije [17] raste sa veličinom sistema kao

$$T \sim N_{states}^3 \quad , \quad (3.38)$$

a takođe raste i potreba za memorijskim resursima (matrica koja se dijagonalizuje mora se negde beležiti). Uz optimizaciju koda programa, za sistem veličine $N = 14$ sa modulisanom interakcijom duž lanca i dalje je potrebno ~ 90 MB radne memorije (u trenutku rada na Origin2000 računaru IPCF-a na raspolaganju je bilo 128 MB), tako da smo egzaktnom dijagonalizacijom odredili energetska stanja sistema $N = 4, 6, 8, 10, 12, 14$ za fiksno $S_z^{tot} = 0, -1, -2$.

Glava 4

Proračun osobina uniformnog Heisenberg-ovog antiferomagnetnog lanca

Antiferomagnetni lanac sa interakcijom između najbližih susednih čvorova koja je ista duž lanca - *homogen* Heisenberg-ov antiferomagnetni lanac, je za nas od izuzetnog značaja zbog toga što su poznate egzaktna energija osnovnog [16, 15] i pobuđenih [23, 24] stanja. U numeričkom radu veoma su korisni analitički rezultati, radi provere ispravnosti računa i boljeg razumevanja same prirode primenjenog algoritma. Kao što smo izložili u prethodnoj glavi, pouzdanost MC algoritma zavisi od niza kompleksnih tehničkih detalja kao što su termalizacija, uklanjanje serijskih korelacija, izbor generatora slučajnih brojeva itd. U ovoj glavi ćemo pokazati da se primenom VMC i GFMC metoda mogu reprodukovati svi poznati analitički rezultati za osnovno i pobuđena stanja homogenog Heisenberg-ovog antiferomagnetnog lanca, što znači da su svi gore pomenuti fini detalji u potpunosti shvaćeni i verifikovani.

4.1 VMC

Hamiltonijan (2.7) u slučaju homogenog lanca postaje

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2} \sum_i (b_i^+ b_{i+1} + b_i b_{i+1}^+) + J \sum_i n_i n_{i+1} + E_N \quad . \quad (4.1)$$

Svi čvorovi u lancu su isti, i svaki interaguje sa svoja dva susedna čvora istom jačinom $J_1 = J_2 \equiv J$. Dvo- i tro-parametarske probne talasne funkcije zadate jednačinama (3.24) i (3.25) svode se na jedno- i dvo-parametarske, respektivno, uzimanjem $f_1 = f_2$. Račun je jednostavniji i efikasniji pošto treba minimizirati po manje parametara.

Varijacioni račun smo počeli izračunavanjem osnovnog stanja $N = 100$ sistema ($N_b = 50$). Već gruba (nekorelisano razigravanje) ocena minimuma energije daje optimalno $f_1 = 0.3$. Za vodeću talasnu funkciju u korelisanom sampliranju onda smo uzimali $\Psi(f_1 = 0.3)$ i precizno odredili varijacionu energiju. U daljem računu sa sistemima različite veličine, grubo ocenjivanje položaja minimuma energije više nije bilo neophodno. Odmah smo prelazili na korelisano sampliranje vođeno varijacionom talasnom funkcijom (funkcijom optimizovanih parametara) koja odgovara sistemu bliske veličine. Iz tabele 4.1. vidi se da se optimalne vrednosti parametara ne menjaju drastično sa promenom veličine sistema, te je ovakav pristup bio opravdan. Ovo je naročito bitno za rad sa dvoparametarskom talasnom funkcijom, gde minimum treba tražiti u dvodimenzionalnom prostoru parametara, pa mu je položaj teže odrediti.

Dodatnu pomoć i proveru postupka minimizacije daje činjenica da za $N = 4(6)$ jedno- (dvo-) parametarska probna funkcija sa optimalnim vrednostima parametara odgovara egzaktnoj talasnoj funkciji osnovnog stanja. Razlog za ovakvu situaciju je najlakše shvatiti na primeru $N = 4$ sistema sa $N_b = 2$ bozona u lancu. Oni mogu biti ili jedan do drugog ili razdvojeni, što znači da postoje samo dve neekvivalentne konfiguracije. Ako njihove amplitude verovatnoće zapišemo kao $\Psi_T(\text{razdvojeno})=1$ i $\Psi_T(\text{zajedno})=f_1$ dobijamo (nenormalizovanu) Jastrow-ljevu jednoparametarsku funkciju (3.24).

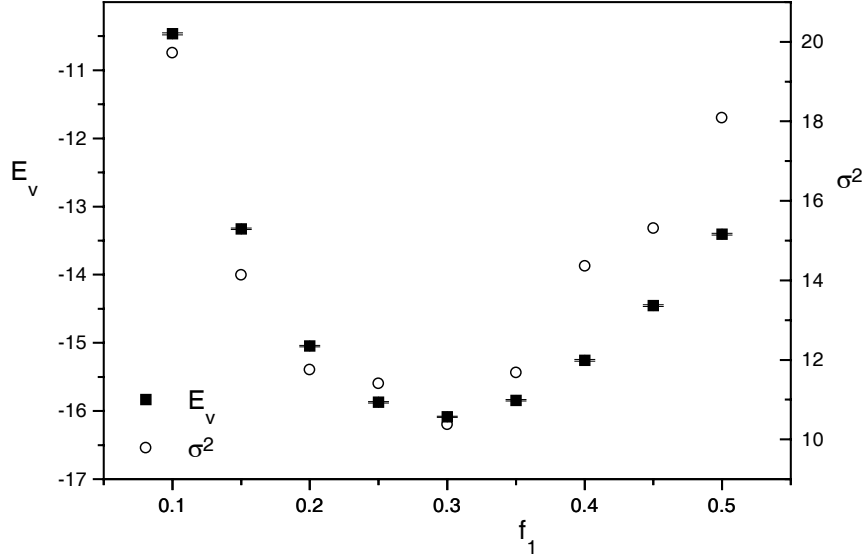
U svakoj VMC iteraciji odbacivan je određeni broj netermalizovanih konfiguracija, ne više od 10^6 . Termalizacija je kontrolisana svaki put, praćenjem `running average`-a energije, kao što je objašnjeno u odeljku 3.1.1. Što je sistem veći to je varijaciona talasna funkcija lošija, pa je i termalizacija sporija.

Optimizaciju parametara moguće je vršiti i minimiziranjem varijanse, s obzirom da najmanja varijansa odgovara optimalnoj varijacionoj talasnoj funkciji [19]. Takva procedura je sporija jer je sampliranje nekorelisano (u slučaju korelisano sampliranja varijansa je uvek minimalna za $\alpha = \alpha_0$ i nema informacije o stvarnom minimumu). Izvršili smo je jednom radi provere, a rezultati su prikazani na Slici 4.1.

Autokorelacije među generisanim konfiguracijama isključivali smo uzimanjem u obzir tek svake n_{freq} -te konfiguracije, kao što je diskutovano u odeljku 3.1.1. Za optimalne vrednosti parametara ocenjivali smo koeficijente autokorelacije i proveravali kvalitet izbora n_{freq} . Maksimalno odbacivanje bilo je sa $n_{freq} = 20$.

Ocena greške je skoro konstantna u relativno širokom intervalu veličine blokova (jednačina (3.15)), kao što je ilustrovano Slikom 3.3. Optimalna podela na blokove, u smislu Gaussovskih vrednosti za `skew` i `curtosis`, nije neophodna u toku procesa minimizacije, već samo na kraju, za optimalne vrednosti parametara.

Rezultati optimizacije jednoparametarske talasne funkcije predstavljeni su u Tabeli 4.1 i na Slikama 4.2 i 4.4.



Slika 4.1: Nekorelisani VMC osnovnog stanja homogenog lanca $N = 100$ u funkciji f_1 . Korišćeni su parametri $B = 500$, $N_B = 200$, $N_{MC} = 10^5$ termalizacija nakon 500.000 sweep-ova. Minimum varijanse σ^2 se poklapa sa minimumom varijacione energije E_V .

Sa Slika 4.2 i 4.4 vidimo da za $N \geq 10$, f_1 i E_V linearno zavise od $1/N$. Linearnim (neotežinjenim) fitom kroz tačke $N = 200, 100, 50, 20, 10$ procenjeno je

$$\frac{E_v(N)}{NJ} \Big|_{N \rightarrow \infty}^{(f_1)} = -0.1574 \pm 0.0004 \quad , \quad f_1(N) \Big|_{N \rightarrow \infty} = 0.292 \pm 0.002 \quad . \quad (4.2)$$

Tačke $N = 6, 4$ ne leže na ovim linearnim fitovima. Tu je $1/N$ dovoljno veliko pa se moraju uzeti popravke višeg reda. Ovi rezultati se odlično slažu sa egzaktnom minimizacijom Jastrow-ljeve jednoparametarske talasne funkcije, koja za beskonačne sisteme daje [25]

$$\frac{E_v(N)}{NJ} \Big|_{N \rightarrow \infty}^{(f_1)} = \frac{10 - 7\sqrt{7}}{54} = -0.1578 \quad , \quad \text{za } f_1 = 2\sqrt{7} - 5 = 0.2915 \quad . \quad (4.3)$$

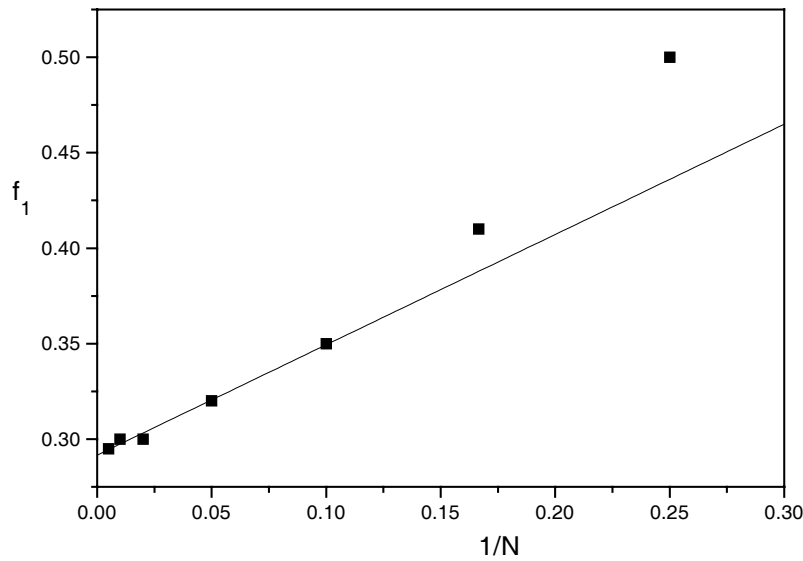
Varijacioni rezultat je blizu poznate egzaktnosti za beskonačan sistem [16, 15] $E_0 = NJ(1/4 - \ln 2)$ što, kad se meri od energije Néel-ovog stanja koju smo mi uzimali za nulu energije, iznosi

$$\frac{E_0(N)}{NJ} \Big|_{N \rightarrow \infty} = \frac{1}{2} - \ln 2 = -0.1931 \quad . \quad (4.4)$$

Rezultat (4.2) je iznad egzaktnog, što je u redu s obzirom da varijacioni račun daje samo gornju granicu za energiju osnovnog stanja.

N	f_1	E_v/N
4	0.50	-0.25(0)
6	0.41	-0.2157(1)
10	0.35	-0.1915(6)
20	0.32	-0.1735(5)
50	0.30	-0.1643(4)
100	0.30	-0.16086(8)
200	0.295	-0.1593(3)
∞	0.292(2)	-0.1574(4)

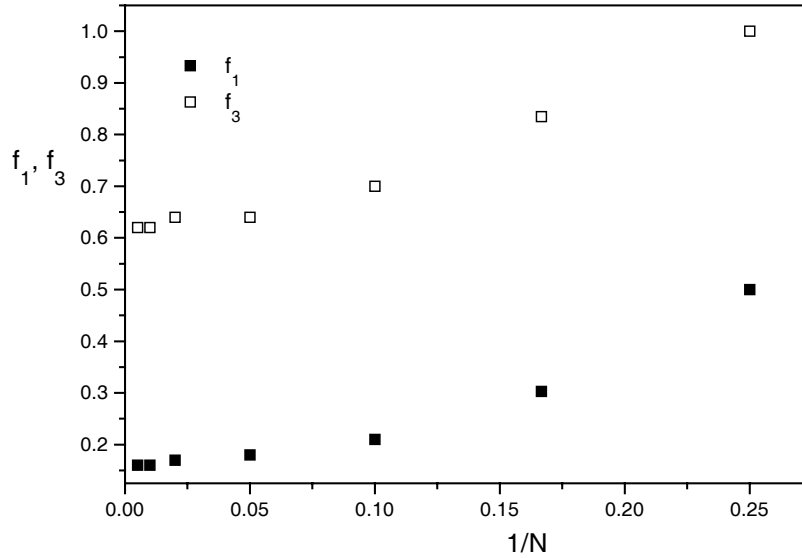
Tabela 4.1: VMC rezultati sa jednoparametarskom probnom funkcijom.



Slika 4.2: Optimalne vrednosti parametra f_1 u VMC proračunu energije osnovnog stanja homogenog lanca jednoparametarskom probnom funkcijom. Puna linija je linearni fit $f_1(N) = 0.292 + 0.58/N$.

Kvalitetniji rezultati dobijaju se korišćenjem dvoparametarske talasne funkcije ((3.25) sa $f_1 = f_2$) koja uzima u obzir i korelacije svakog čvora sa sledećim-susednim, čime su implicitno uključene i tročestične korelacije.

Algoritam je sporiji nego u jednoparametarskom slučaju jer je izračunavanje $\Psi_T(\vec{R}')/\Psi_T(\vec{R})$, koje se vrši u svakom VMC koraku, sada znatno komplikovanije, a takođe i zato što energiju treba minimizirati i po f_1 i po f_3 . Potraga za varijacionim minimumom energije je



Slika 4.3: Optimalne vrednosti parametara f_1 i f_3 u VMC proračunu energije osnovnog stanja homogenog lanca dvoparametarskom probnom funkcijom.

vršena pomoću korelisanog sampliranja, tako što smo prvu iteraciju vodili iz tačke starog jednoparametarskog minimuma u ravni (f_1, f_3) tj. f_1 iz Tabele 4.1 i $f_3 = 1$. Minimizaciju po dva parametra vršili smo korelisanim razigravanjem kroz vodeću tačku i 8 susednih $(f_1 \pm \Delta f_1, f_3 \pm \Delta f_3)$ uz pogodno izabrane Δf_1 i Δf_3 . Kroz dobijene tačke u 3D prostoru (E_V, f_1, f_2) smo fitovali paraboloid, dobijajući novu poziciju pretpostavljenog minimuma. Iteriranje se prekida kad fit prestane da daje sniženje energije u granici greške, i kad sve okolne samplirane tačke imaju veću energiju.

Rezultati dvoparametarskog VMC proračuna energije osnovnog stanja su date u Tabeli 4.2 i na Slikama 4.4 i 4.3. Varijaciona energija beskonačnog sistema, dobijena linearnim fitom slično kao i u jednoparametarskom slučaju, je

$$\frac{E_v(N)}{NJ} \Big|_{N \rightarrow \infty}^{(f_1, f_2)} = -0.1729 \pm 0.0001 \quad , \quad (4.5)$$

što je, kao što smo i očekivali, bolja gornja granica za egzaktnu energiju od jednoparametarske.

4.2 GFMC

Sušтина GFMC algoritma je detaljno objašnjena u odeljcima 3.1.4 i 3.1.5. Ovde

N	f_1	f_3	E_v/N
4	0.50	1	-0.25(0)
6	0.303	0.835	-0.21713(0)
10	0.21	0.70	-0.1968(7)
20	0.18	0.64	-0.1848(5)
50	0.17	0.64	-0.1776(5)
100	0.16	0.62	-0.1755(4)
200	0.16	0.62	-0.1742(4)
∞	- - -	- - -	-0.1729(1)

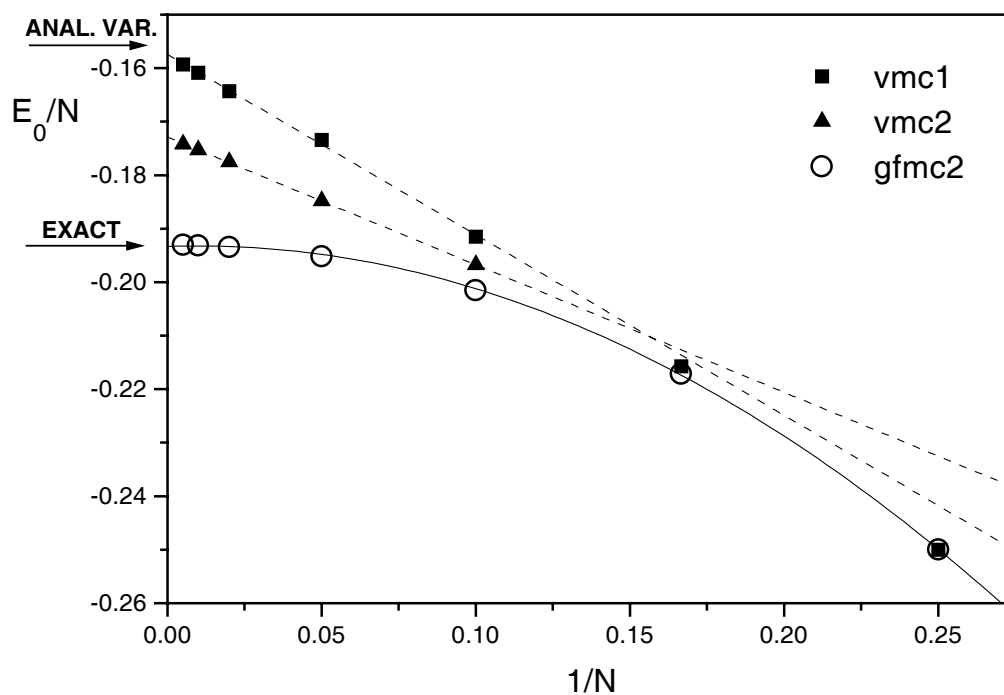
Tabela 4.2: VMC rezultati sa dvoparametarskom probnom funkcijom.

navodimo nekoliko tehničkih detalja koji pojašnjavaju njegovu implementaciju u slučaju homogenog lanca. Koristili smo metod `importance` sampliranja, vođenog dobijenim jedno- i dvo-parametarskim varijacionim talasnim funkcijama. Za probnu energiju uzimali smo varijacioni rezultat $\omega = E_V$, i modifikovali je pre svakog grananja (jednačina (3.35)). Populaciju generacije podešavali smo na 1000 - 1200, variranjem početne populacije. Broj koraka pre grananja K takođe smo varirali podešavajući RMS multipliciteta, u sklopu diskusije na strani 21. Vrednost probne energije za koju se populacije generacija stabilisu može poslužiti kao gruba ocena energije osnovnog stanja [21], a preciznu ocenu dobijali smo kroz `mixed estimator`, jednačina (3.36).

Proceduru smo ponavljali za sisteme različitih veličina $N = 4, 6, 10, 20, 50, 100, 200$. Računali smo osnovna stanja u potprostorima $S_z^{tot} = 0, -1, -2$, tj. energije osnovnog, najnižeg tripletnog i najnižeg kvinupletnog stanja, kao što je opisano na strani 8. Za male sisteme početna populacija se malo menja GFMC evolucijom ($N = 10, p_0 = 800$), dok je za veće sisteme potrebno krenuti od manje populacije ($N = 200, p_0 = 200$) da bi se na kraju ona stabilisala na ~ 1000 . Ovo je posledica osobine vodeće varijacione talasne funkcije da je tim bolja što je sistem manji.

Rezultati za energiju osnovnog stanja dobijeni GFMC algoritmom vođenim dvoparametarskom talasnom funkcijom prikazani su na Slici 4.4 i u Tabeli 4.3. zajedno sa analitički poznatim rezultatima. Istu energiju smo računali i sa jednoparametarskom vodećom funkcijom, ali samo kao proveru ispravnosti programa, jer se ispostavlja da je to neefikasno. GFMC proračun vođen dvoparametarskom talasnom funkcijom je svega 10-20% sporiji a greška je za red veličine manja. Ovi rezultati se međusobno odlično slažu u granici procenjene greške.

Iz Tabele 4.3 se vidi da GFMC daje egzaktne rezultate za $N = 4, 6$ kao što se i očekivalo s obzirom da je vodeća dvoparametarska funkcija u tom slučaju egzaktna. Interesantno



Slika 4.4: Rezultati MC simulacije osnovnog stanja homogenog lanca. Kvadratići i trouglovi označavaju VMC rezultate dobijene jedno- i dvoparametarskom varijacionom funkcijom respektivno (Tabele 4.1 i 4.2), a kružići reprezentuju GFMC energije (Tabela 4.3). Greške su manje od veličine simbola. Linije predstavljaju fitove objašnjene u tekstu. Strelice označavaju analitički poznate energije beskonačnih sistema, (4.3) i (4.4).

N	E_{gfmc}/N	$E_0(\text{egzaktno})/N$
4	-0.25(0)	-0.25
6	-0.21713(0)	-0.21713
20	-0.19520(2)	- - -
50	-0.19350(2)	- - -
100	-0.19316(1)	- - -
200	-0.19308(1)	- - -
∞	- - -	-0.193147

Tabela 4.3: GFMC rezultati sa dvoparametarskim Ψ_G za različite veličine sistema i poređenje sa poznatim egzaktnim rezultatima.

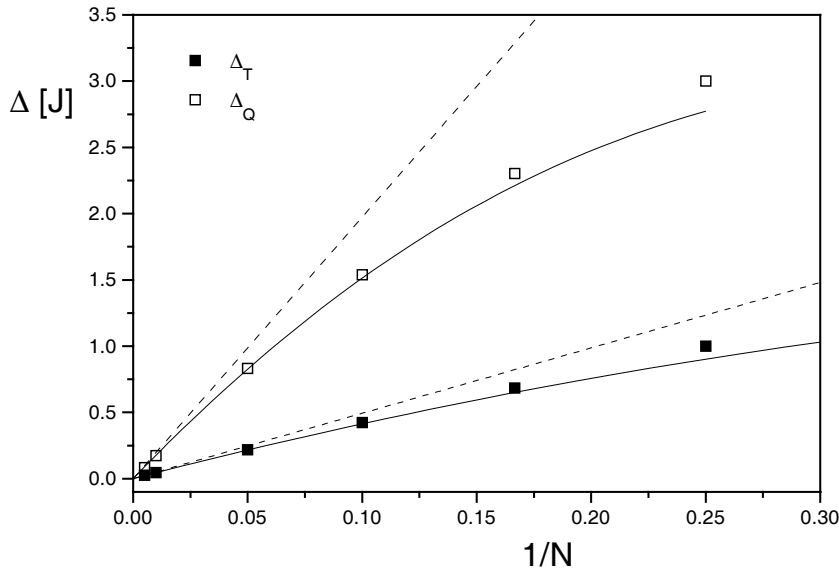
je ekstrapolirati GFMC rezultate na beskonačan lanac. O detaljima ekstrapolacije biće više reći u narednom poglavlju, a ovde samo navodimo da se dobijena energija osnovnog stanja skalira sa veličinom sistema po zakonu

$$\frac{E(N)}{N} = -0.19332 + \frac{0.01944}{N} - \frac{0.98306}{N^2} \quad , \quad (4.6)$$

što daje neotežinjeni fit polinomom drugog stepena. Greška slobodnog člana u jednačini (4.6) po ovakvom fitu je $\Delta E_{0fit} = 3 \cdot 10^{-4}$, tako da se ovaj rezultat

$$\frac{E_{0gfmc}}{N} \Big|_{N \rightarrow \infty} = -0.1933(3) \quad , \quad (4.7)$$

slaže sa analitičkim (4.4), odnosno GFMC procedura zaista daje egzaktnu energiju osnovnog stanja.



Slika 4.5: Tripletni (puni) i kvintupletni (prazni kvadrati) gap-ovi homogenog lanca. Pune linije: numeričko rešenje Bethe ansatza [23]. Isprekidane linije: analitički vodeći član (4.8) za dugačke lance [24].

Rezultati proračuna pobuđenih stanja, najnižeg tripletnog i najnižeg kvintupletnog, dati su na Slici 4.5. Poređenja radi, navodimo analitički rezultat za gap-ove koji odgovaraju fiksiranoj magnetizaciji $m = S_z^{tot}/N$ dobijen Bethe ansatz-om [24]

$$\frac{\Delta}{N} = \frac{\pi^2}{2} m^2 + O\left(\frac{m^2}{\ln m}\right) \quad , \quad m = \frac{|S_z^{tot}|}{N} \quad , \quad (4.8)$$

koji je na Slici 4.5 predstavljen isprekidanim linijama. Ovaj rezultat važi samo za velike N , i slaganje sa GFMC je evidentno za $N \geq 100$.

Poređenje je takođe moguće sa numeričkim rešenjem Bethe ansatz integralnih jednačina [23] prikazanim punim linijama na Slici 4.5. Jedina aproksimacija u ovom rešenju se sastoji u prelasku sa sume po stanjima sistema na integral, koja je sve grublja što je sistem manji. Odstupanje od GFMC rezultata za $N < 10$ pripisujemo upravo toj aproksimaciji. Na osnovu naših podataka fitovanjem nalazimo asimptotski izraz za gap u funkciji magnetizacije:

$$\frac{\Delta(m)}{N} = \frac{\pi^2}{2} m^2 \left(1 + \frac{1}{2 \ln m} + \frac{1}{3} \frac{\ln |\ln m|}{(\ln m)^2} \right) . \quad (4.9)$$

Prva dva člana u tom razvoju su poznata iz ranijih numeričkih istraživanja [23].

Iz svega ovoga zaključujemo da simulacija homogenog $\delta = 0$ lanca GFMC metodom daje pouzdane rezultate za energije osnovnog i najnižih tripletnih i kvintupletnih pobuđenih stanja sistema (2.7).

Glava 5

Proračun osobina modulisanog Heisenberg-ovog antiferomagnetnog lanca

U ovoj glavi ćemo opisati naše rezultate za osnovno i pobuđena stanja modulisanog antiferomagnetnog Heisenberg-ovog lanca. U odeljku 5.1 biće opisana verifikacija MC programa u ovom slučaju, a u odeljku 5.2 daćemo pregled izračunatih energija. Ovi rezultati nam omogućavaju identifikaciju i interpretaciju nekih modova u Ramanskim spektrima NaV_2O_5 , što će biti izloženo u odeljku 5.3.

5.1 Verifikacija algoritma

Kao što je već više puta naglašeno, verifikacija ispravnosti programa je centralna tema u numeričkom radu, a ovaj odeljak ima za cilj da je demonstrira u slučaju modulisanog lanca.

5.1.1 Egzaktna dijagonalizacija

U prethodnoj glavi uverili smo se da je GFMC algoritam pouzdan u simulaciji homogenog lanca. Da bi se u to uverili i u slučaju proizvoljno modulisane interakcije duž lanca, izvršili smo istovremeno egzaktnu dijagonalizaciju i GFMC simulaciju za neke parove N i δ . Poređenje dobijenih rezultata prikazano je u Tabeli 5.1. S obzirom da je egzaktna dijagonalizacija često korišćen metod, u literaturi postoje neki rezultati na kojima takođe možemo da proverimo ispravnost implementacije GFMC algoritma, što prikazuje Tabela 5.2.

Vidimo da se GFMC rezultati odlično slažu sa rezultatima egzaktne dijagonalizacije. Štaviše, od ukupno 18 parova rezultata koje poredimo, tačno 12 se slažu u granici greške, odnosno tačno $2/3$ egzaktnih se nalazi u intervalu $E_{gfmc} \pm \Delta E_{gfmc}$, a svih 18 se nalazi u intervalu $E_{gfmc} \pm 2\Delta E_{gfmc}$. Ovo je indikacija da je i GFMC ocena greške dobra i da je možemo tumačiti standardno, u smislu Gauss-ovske raspodele GFMC rezultata.

δ	$N = 6, E_0$	$N = 10, E_0$	$N = 10, E_T$	$N = 10, E_Q$
0.00 GFMC	-1.3029(1)	-2.0150(5)	-1.5927(4)	-0.4756(3)
0.00 exact	-1.30278	-2.01545	-1.59221	-0.47593
0.05 GFMC	-1.3116(1)	-2.0390(7)	-1.5971(4)	-0.4775(3)
0.05 exact	-1.31167	-2.03867	-1.59693	-0.47729
0.1 GFMC	-1.3377(1)	-2.1030(5)	-1.6112(4)	-0.4813(4)
0.1 exact	-1.33774	-2.10300	-1.61104	-0.48136

Tabela 5.1: Poredjenje rezultata GFMC i egzaktne dijagonalizacije

δ	$N = 20, E_0$	$N = 20, \Delta_T$
0.00 GFMC	-3.9039(4)	0.2179(8)
0.00 exact	-3.90438	0.21794
0.02 GFMC	-3.917(1)	0.227(2)
0.02 exact	-3.9174	0.2273
0.05 GFMC	-3.9789(5)	0.2709(9)
0.05 exact	-3.97822	0.26972

Tabela 5.2: Poredjenje GFMC rezultata sa egzaktnim dijagonalizacijama iz [26]

Pošto je utvrđeno da GFMC i egzaktna dijagonalizacija daju identične rezultate, dalje ih koristimo paralelno u proučavanju energetskeg spektra antiferomagnetnog lanca spinova $S = 1/2$ modulisane interakcije J .

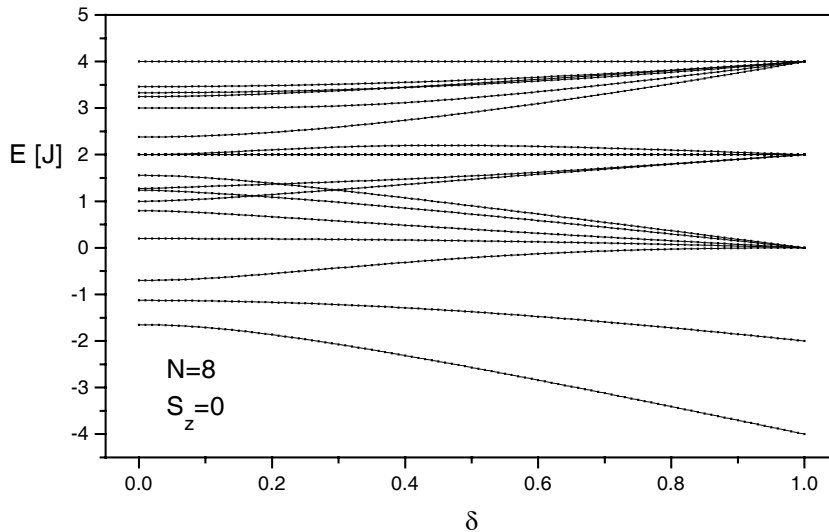
Egzaktnu dijagonalizaciju matrice hamiltonijana (2.7) izvršili smo za sisteme veličine $N = 4, 6, 8, 10, 12, 14$ za razne vrednosti modulacije δ . Za veće sisteme $N=20, 50, 100, 200$ koristili smo GFMC proceduru. Rezultate oba metoda paralelno koristimo u ekstrapolaciji $N \rightarrow \infty$.

5.1.2 Lanac idealnih dimera

Rezultate metoda egzaktne dijagonalizacije smo, pored upoređivanja sa GFMC rezul-

tatima, nezavisno verifikovali korištenjem analitičkog rešenja za sistem neinteragujućih dimera, koji se dobija za $\delta = 1$.

Energetski spektar ovog sistema je potpuno određen spektrom jednog jedinog dimera, koji se sastoji iz svega dva moguća stanja - spinovi su ili paralelni ili antiparalelni. Odgovarajuće energije su $E_{\uparrow\downarrow} = -3/2 J$ i $E_{\uparrow\uparrow} = 1/2 J$ (kada se koristi (2.7) sa $\delta = 1$, tj. interakcija unutar dimera je $2J$). Osnovno stanje ovakvog sistema odgovara situaciji kada su svi dimeri u osnovnim stanjima ponaosob, a eksitacije se dobijaju pobuđivanjem jednog po jednog dimera. Energetski spektar je dakle ekvidistantan, razdaljina među nivoima je $2J$.



Slika 5.1: Energetski $S_z^{tot} = 0$ spektar lanca od $N = 8$ spinova u funkciji δ , dobijen egzaktnom dijagonalizacijom.

Na Slici 5.1 je prikazana zavisnost od modulacije δ spektra lanca od $N = 8$ spinova, u potprostoru $S_z^{tot} = 0$. Vidimo kako se sa smanjenjem δ ukida degeneracija, prisutna u sistemu savršenih dimera, gde u ovom slučaju postoji tačno 5 energetski neekvivalentnih stanja (osnovno i 4 pobuđena - od ukupno 4 dimera).

Verifikaciju rezultata egzaktno dijagonalizacije vršili smo i poređenjem sa perturbativnim razvojem u okolini limesa idealnih dimera, tj. za $\delta = 1 - \epsilon$, gde je $\epsilon \ll 1$ [27, 28]. Numerički smo reprodukovali rezultate perturbativnog računa, egzaktno dijagonalizujući hamiltonijan sistema $N = 4, 6, 8, 10, 12$ spinova, za $\delta = 0.9999, 0.999, 0.99, 0.9$, tj. za $\epsilon = 10^{-4}, 10^{-3}, 10^{-2}, 10^{-1}$. Radi observacije malih efekata perturbacije na energiju, povećali smo internu preciznost računanja u ovom slučaju na četverostruku,

umesto uobičajene dvostruke. Tako smo videli i efekte perturbacije 3. reda.

Kao ilustraciju ove procedure dajemo u Tabeli 5.3 energije osnovnog stanja lanca od $N = 12$ spinova u blizini limesa idealnih dimera. Iz podataka u tabeli se vidi da

$$\frac{E_0}{NJ} = -\frac{1}{2} \left(1 - \frac{3}{4}\epsilon + \frac{3}{64}\epsilon^2 + \frac{15}{512}\epsilon^3 + O(\epsilon^4) \right) . \quad (5.1)$$

Analogno se za tripletni gap dobija

$$\frac{\Delta_T}{J} = 2 \left(1 - \frac{3}{4}\epsilon - \frac{3}{32}\epsilon^2 - \frac{11}{256}\epsilon^3 + O(\epsilon^4) \right) . \quad (5.2)$$

Ovi izrazi se slažu sa poznatim rezultatima perturbativnog razvoja do članova drugog reda [27], a članovi $O(\epsilon^3)$ su nezavisno dobijeni u [28]. U izrazima za singletni i kvintupletni gap primećuje se zavisnost koeficijenata u razvoju od veličine sistema N koja ograničava preciznost na linearni član

$$\frac{\Delta_s}{J} = 4 \left(1 - \frac{3}{4}\epsilon + O(\epsilon^2) \right) , \quad \frac{\Delta_Q}{J} = 4 \left(1 - \frac{3}{4}\epsilon + O(\epsilon^2) \right) . \quad (5.3)$$

ϵ	E_0
0.1	-5.553000053406156337989329130300
0.01	-5.955028301890593127925803536189
0.001	-5.995500281425891549560436780377
0.0001	-5.999550002812675792273649490218
0	-6

Tabela 5.3: Energija osnovnog stanja $N = 12$ lanca za $\epsilon = 1 - \delta \rightarrow 0$.

Iz svega ovoga zaključujemo da procedura koja izvršava egzaktnu dijagonalizaciju ispravno radi, čime je ostvarena verifikacija i GFMC rezultata.

5.2 Rezultati

Monte Carlo simulacija dimerizovanog lanca ostvarena je po ekstenzivno verifikovanom algoritmu kao što je detaljno opisano u prethodnim glavama. Detalji numeričke procedure ne razlikuju se značajno, osim što je rađeno samo sa troparametarskom talasnom funkcijom (3.25), za koju je utvrđeno da daje rezultate najmanje varijanse u odnosu na vreme uloženo u njihovo dobijanje. Proces VMC minimizacije jeste sporiji za tri parametra i računarsko vreme je do 20% duže, ali greška računa vođenog ovakvom talasnom funkcijom je za red veličine manja nego u slučaju dvoparametarskog GFMC.

Računali smo energije osnovnog E_0 , najnižeg tripletnog E_T i najnižeg kvintupletnog E_Q stanja, za različite vrednosti modulacije δ . Ove energije određene su egzaktno, kao što je utvrđeno na homogenom lancu i poređenjem sa rezultatima egzaktno dijagonalizacije. Dobijeni gap-ovi, tripletni $\Delta_T = E_T - E_0$ i kvintupletni $\Delta_Q = E_Q - E_0$, prikazani su u Tabelama 5.4. i 5.5. i predstavljaju glavni rezultat ovog istraživanja.

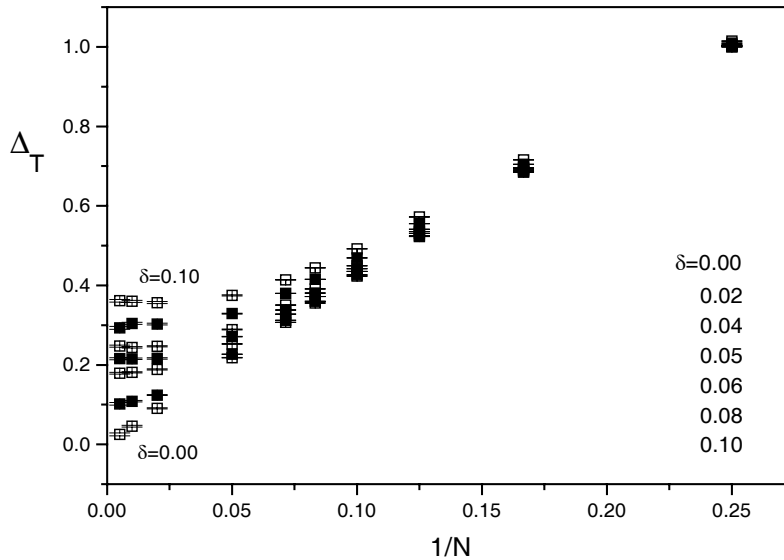
δ	Δ_{10}	Δ_{20}	Δ_{50}	Δ_{100}	Δ_{200}	Δ_T^∞
0.00	0.42324	0.2179(8)	0.091(1)	0.045(2)	0.025(4)	0.0085(5)
0.01	0.42400	0.2204(7)	0.100(1)	0.066(2)	0.074(4)	0.066(1)
0.02	0.42627	0.2268(8)	0.124(1)	0.108(2)	0.102(3)	0.123(1)
0.03	0.43002	0.2384(8)	0.154(1)	0.148(2)	0.151(3)	0.1551(1)
0.04	0.43520	0.2524(8)	0.188(1)	0.181(2)	0.179(2)	0.1808(4)
0.05	0.44174	0.2709(9)	0.216(2)	0.215(2)	0.216(2)	0.2156(1)
0.06	0.44957	0.289(1)	0.247(2)	0.244(2)	0.247(2)	0.2450(1)
0.08	0.46873	0.329(1)	0.302(2)	0.305(3)	0.293(4)	0.301(1)
0.10	0.49196	0.375(1)	0.356(2)	0.360(3)	0.361(4)	0.3603(1)

Tabela 5.4: Rezultati za tripletni gap Δ_T ; za $N = 10$ egzaktna dijagonalizacija, ostalo GFMC.

δ	Δ_{10}	Δ_{20}	Δ_{50}	Δ_{100}	Δ_{200}	Δ_Q^∞
0.00	1.53951	0.8317(7)	0.351(1)	0.174(2)	0.082(4)	0.00(1)
0.01	1.54041	0.8347(7)	0.364(1)	0.208(2)	0.175(4)	0.16(1)
0.02	1.54308	0.8432(7)	0.392(1)	0.264(2)	0.226(3)	0.25(1)
0.03	1.54751	0.8554(8)	0.434(1)	0.331(2)	0.302(3)	0.32(1)
0.04	1.55363	0.8730(7)	0.475(1)	0.389(1)	0.369(2)	0.373(1)
0.05	1.56138	0.8958(8)	0.523(2)	0.451(2)	0.436(2)	0.436(2)
0.06	1.57069	0.9197(8)	0.573(2)	0.507(2)	0.497(2)	0.495(3)
0.08	1.59361	0.9711(9)	0.664(2)	0.617(3)	0.607(4)	0.610(1)
0.10	1.32164	1.033(1)	0.761(2)	0.725(3)	0.717(4)	0.720(1)

Tabela 5.5: Rezultati za kvintupletni gap Δ_Q ; za $N = 10$ egzaktna dijagonalizacija, ostalo GFMC.

Zavisnost od veličine sistema za razne vrednosti modulacije δ predstavljena je na Slici 5.2, u slučaju tripletnog gap-a. Kvintupletni gap pokazuje slično ponašanje.



Slika 5.2: Tripletni gap Δ_T za različite modulacije δ u funkciji veličine sistema.

Ekstrapolacija rezultata za tripletni i kvintupletni gap na $N \rightarrow \infty$ izvršena je korišćenjem

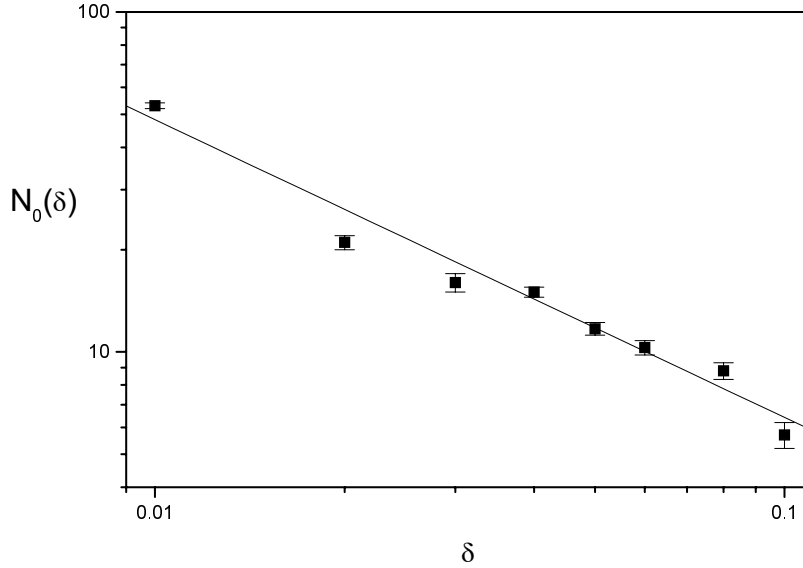
$$\Delta_{T,Q}(N, \delta) = \Delta_{T,Q}^{\infty}(\delta) + \left(\frac{A}{N} + \frac{B}{N^2} + \frac{C}{N^3} \right) \exp\left(-\frac{N}{N_0(\delta)}\right) \quad , \quad (5.4)$$

gde $\Delta_{T,Q}^{\infty}(\delta) \equiv \Delta_{T,Q}(N = \infty, \delta)$ označava ekstrapoliranu vrednost, a $N_0(\delta)$ je korelaciona dužina. Slične jednostavnije funkcije korišćene su ranije u [29] za ekstrapolaciju rezultata dobijenih egzaktom dijagonalizacijom po Lanczos algoritmu za sisteme sa $N \leq 28$. Ovde koristimo opštiju formulu, koja uključuje i faktore višeg reda u razvoju po $1/N$, da bi uspešno fitovali i gap-ove dobijene za male sisteme. Rezultati ekstrapolacije su predstavljeni u poslednjim kolonama Tabela 5.4. i 5.5., kao i na Slici 5.6.

δ	0.00	0.01	0.02	0.03	0.04	0.05	0.06	0.08	0.10
$N_0(\delta)$	630(10)	53(1)	21(1)	16(1)	15.0(5)	11.7(5)	10.3(5)	8.8(5)	5.7(5)

Tabela 5.6: Korelacione dužine $N_0(\delta)$ modulisanog lanca (jednačina (5.4)).

Korelacione dužine dobijene fitovanjem po zakonu (5.4) prikazane su u Tabeli 5.6. i Slici 5.3. Evidentna je divergencija $N_0(\delta)$ za male δ , što je osobina svih faznih prelaza drugog reda. Osnovna prednost GFMC proračuna u odnosu na druge algoritme je u opisanju za red veličine većih sistema. Za procenu graničnih mogućnosti GFMC na resursima kojim danas raspolažemo, izvršili smo simulaciju za jednu vrednost $\delta = 0.05$ na sistemu



Slika 5.3: Zavisnost korelacione dužine korišćene u fitu (5.4) $N_0(\delta)$ od modulacije δ . Puna linija predstavlja fit $\delta^{-0.87(7)}$.

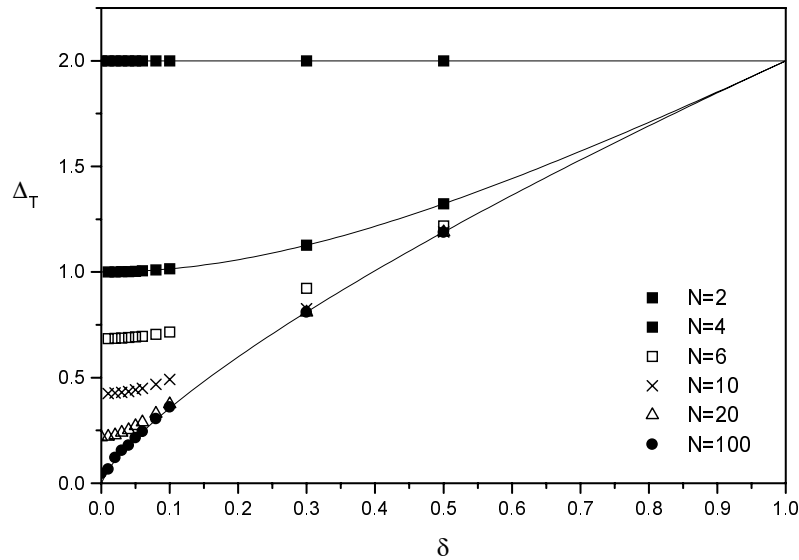
$N = 500$. Za ocenu jednog gap-a potrebno je 6 dana na jednom procesoru Origin2000 računara. S druge strane, Lanzcos metodom [29] moguće obraditi sisteme maksimalne veličine $N = 28$. S obzirom da korelaciona dužina za eksperimentalno relevantan slučaj $\delta = 0.05$ iznosi $N_0(0.05) \approx 12$, jasno je da je ekstrapolacija naših GFMC rezultata za $N \rightarrow \infty$ znatno pouzdanija, što je ilustrovano i na Slici 5.5 gde uspravna linija označava najveće N u Lanzcos dijagonalizaciji.

Instruktivno je posmatrati izračunate gap-ove u funkciji δ za fiksirano N , što je prikazano na Slici 5.4. Vidi se da, kako raste veličina sistema, Δ_T konvergira ka

$$\Delta_T(\delta, N \rightarrow \infty) = 2\delta^{3/4} \quad . \quad (5.5)$$

Zavisnost (5.5) smo očekivali na osnovu rezultata perturbativnog razvoja (5.2). Reklo bi se da je u ovom slučaju odgovarajući kritični eksponent jednak $3/4$, ali nije, jer tačniji rezultati [30, 31] pokazuju da za veoma malo δ važi razvoj $\Delta_T \sim \delta^{2/3}/\sqrt{|\ln \delta|}$. Za neku vrednost modulacije dakle mora se javiti prelaz između ova dva režima, ali mi ga nismo videli jer region $\delta \rightarrow 0$ nije relevantan u proučavanju NaV_2O_5 . Ipak, utvrdili smo da zakonitost (5.5) važi za sve $\delta > 0.01$.

Sa slike 5.4 se jasno vidi kako ne-analitičnost gap-a Δ_T , parametra poretka u spin-Peierls-ovom prelazu, nastaje u termodinamičkom limesu $N \rightarrow \infty$. Kao što je dobro poznato, u konačnim sistemima Δ_T je analitička, a zbog parnog broja spinova u sistemima



Slika 5.4: Tripletne razlike Δ_T za različite modulacije δ u funkciji veličine sistema. Puna linija, redom odozgo nadole, odgovara izrazima 2 , $\sqrt{1+3\delta^2}$, $2\delta^{3/4}$.

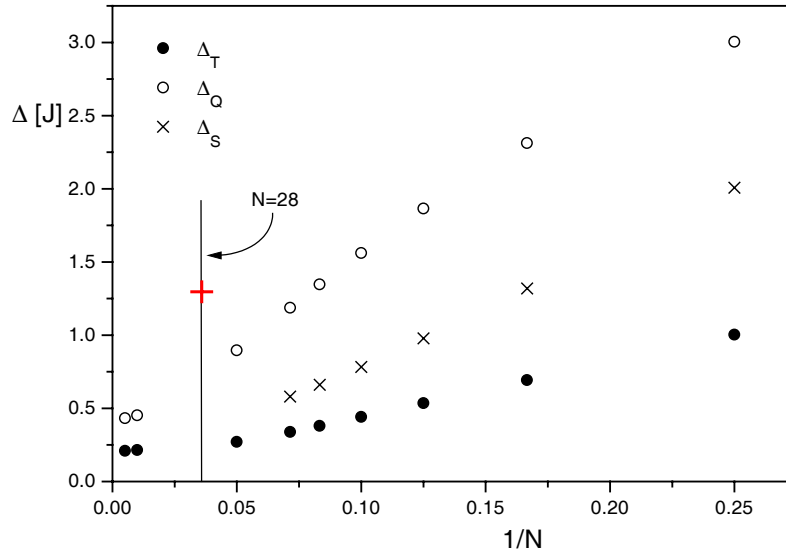
koje posmatramo takođe i parna funkcija, pa za male δ važi

$$\Delta_T(\delta, N) = a(N) + b(N)\delta^2 + O(\delta^4) \quad , \quad (5.6)$$

tj. prvi izvod gap-a po δ za $\delta = 0$ je identički jednak nuli za svako konačno N . Iz ovoga bi se mogao izvući pogrešan zaključak da je ovaj izvod jednak nuli i za beskonačan sistem. Rešenje ovog prividnog paradoksa leži u dobro poznatoj činjenici da granični procesi $\delta \rightarrow 0$ i $N \rightarrow 0$ ne komutiraju u tački faznog prelaza.

Na Slici 5.5 prikazani su tripletne, kvintupletne kao i singletne **gap**-ovi za $\delta = 0.05$, što je relevantno u slučaju NaV_2O_5 . Možemo se uveriti da najniže tripletno odgovara prvom pobuđenom stanju, saglasno teoremama [14]. Ispod ovog stanja ne mogu se nalaziti stanja većeg ukupnog spina, a vidi se da već prvo pobuđeno singletno stanje leži iznad najnižeg tripletnog. Takođe se vidi da je singletni gap ispod kvintupletnog. S obzirom da smo ove rezultate dobili metodom egzaktno dijagonalizacije, dakle za $N = 14$ i manje sisteme, nismo u mogućnosti da ih pouzdano ekstrapoliramo na beskonačan sistem. Umesto toga, energiju singletnog gap-a ćemo u sledećem poglavlju oceniti koristeći GFMC rezultate za Δ_T i Δ_Q .

5.3 Poređenje sa eksperimentom

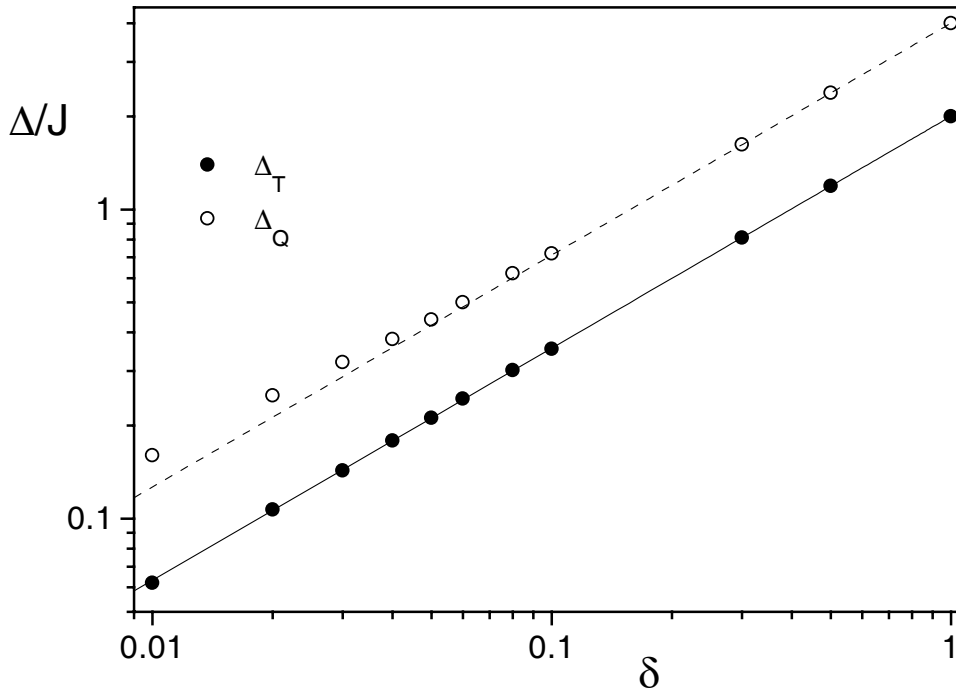


Slika 5.5: Tripletni, singletni i kvintupletni gap-ovi Δ_T , Δ_s i Δ_Q za $\delta = 0.05$ u funkciji veličine sistema.

U ovom odeljku poredimo naše numeričke rezultate sa eksperimentalnim rezultatima [32, 33]. Izvršena su merenja Ramanskog rasejanja svetlosti na monokristalu NaV_2O_5 , sintetizovanom kao što je opisano u [3]. U dobijenim spektrima identifikovani su novi modovi koji se javljaju ispod $T_{SP} = 34$ K, gde se ovaj materijal očigledno nalazi u novoj, uređenoj fazi. Mehanizam faznog prelaza, kao ni sve fizičke osobine ovog materijala, još uvek nisu jasni, a asignacija niskotemperaturskih modova u Raman spektrima je aktuelno pitanje. Dileme u vezi pojedinih modova mogu biti razrešene korišćenjem numeričkih rezultata prezentovanih u prethodnom odeljku, i prikazanih na Slici 5.6.

Ramanski spektri NaV_2O_5 [32] prikazani su na Slici 5.7. Označeni su modovi čije poreklo ćemo dalje diskutovati - energetski najniža struktura na 66 cm^{-1} i početak kontinuuma na 126 cm^{-1} .

Što se tiče strukture na 66 cm^{-1} , merenja su izvršena i sa većom rezolucijom (Slika 5.7 desno). Vidi se da se ona u stvari sastoji iz dva vrlo bliska moda, čije su pozicije određene fitom sa dve Lorenz-ove raspodele. S obzirom da se sa povećanjem temperature 65 cm^{-1} mod pomera ka nižim energijama (levi inset), jasno je da je on magnetne prirode, i da odgovara gap-u, prelazu iz osnovnog u najniže pobuđeno stanje. Ovaj rezultat se odlično slaže sa rezultatima ranijih merenja [3, 7, 9], koja daju vrednost $\Delta = (70 \pm 10 \text{ cm}^{-1})$. Pozicija 67 cm^{-1} moda se ne menja u ovom temperaturskom intervalu, i opisan je kao fonon sa ivice Brillouen-ove zone, koji postaje Raman-aktivan usled dupliranja



Slika 5.6: Ekstrapolirani rezultati za tripletni i kvintupletni gap, Δ_T i Δ_Q u funkciji modulacije. Greška je manja od veličine simbola. Puna linija ($2\delta^{3/4}$) odlično fituje ekstrapolirane vrednosti Δ_T ($\delta \geq 0.01$), a Δ_Q odstupa od $4\delta^{3/4} \approx 2\Delta_T$ (isprekidana linija) za $\delta < 0.1$.

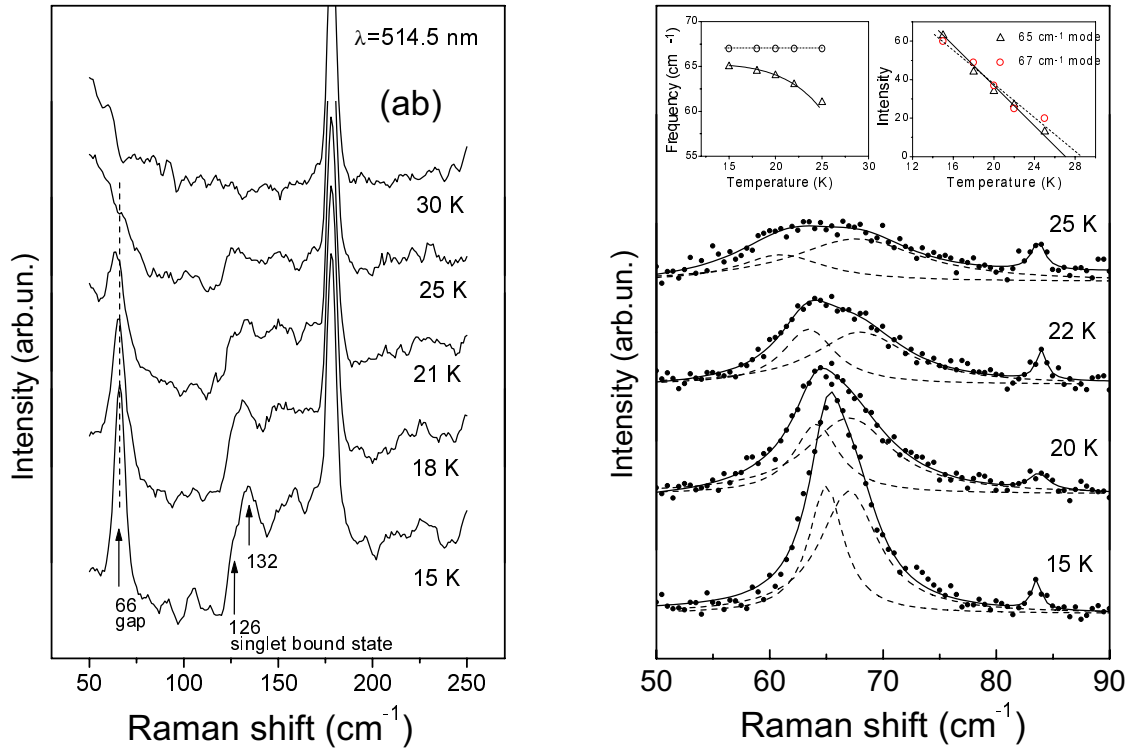
elementarne ćelije u spin-Peierls-ovoj fazi.

Prirodu kontinuuma koji počinje na 126 cm^{-1} možemo opisati korišćenjem numeričkih rezultata za tripletni i kvintupletni gap. Njegovom početku odgovara singletni gap, tj drugo pobuđeno stanje [34]. Energiju ovog stanja ne možemo izračunati egzaktno korišćenjem GFMC metoda, jer ga nismo izolovali kao osnovno stanje nekog svojstvenog potprostora hamiltonijana (vidi stranu 19), a ne možemo da izvršimo ni pouzdanu ekstrapolaciju samo na osnovu rezultata egzaktno dijagonalizacije. Ipak, možemo je proceniti korišćenjem relacija dobijenih u aproksimaciji slučajnih faza (RPA)

$$\Delta_Q = 2\Delta_T + \epsilon \quad (5.7)$$

$$\Delta_T = 2\Delta_T - 2\epsilon \quad (5.8)$$

gde je ϵ energija veze. Naime, po toj teoriji kvintupletno stanje odgovara razvezujućem



Slika 5.7: Ramanski spektri monokristala NaV_2O_5 , mereni na različitim temperaturama $T < T_{SP}$ (levo). Merenja strukture na 66 cm^{-1} povećanom rezolucijom (desno).

dvo-magnonskom stanju (magnoni paralelnog spina), a prvo pobuđeno singletno stanje odgovara vezanom stanju dva antiparalelna magnona, sa odgovarajućom energijom veze 2ϵ [34]. Ovo je u skladu sa našim rezultatima, koji pokazuju da se kvintupletni gap nalazi na energiji većoj od prostog zbira dva magnona (Slika 5.6).

Iz rezultata merenja koji daju energije jednomagnonskog Δ_T i vezanog dvomagnonskog stanja Δ_S , vidimo da je energija veze dva antiparalelna magnona $2\epsilon = 4 \text{ cm}^{-1}$, pa se odgovarajuće kvintupletno stanje nalazi na rastojanju 132 cm^{-1} od osnovnog stanja.

Poređenje sa rezultatima MC simulacije, Δ_T i Δ_Q , daje za modulaciju δ i izmiski integral J vrednosti $\delta = 0.047$, $J = 455 \text{ K}$ (veličine gap-ova za $\delta = 0.047$ ocenjeni su linearnom interpolacijom između odgovarajućih za $\delta = 0.04$ i $\delta = 0.05$). Dobijeni rezultati se odlično slažu sa vrednostima dobijenim fitovanjem rezultata niskotemperaturnih merenja susceptibilnosti po teoriji Bulaevskog za modulisan antiferomagnetni lanac, koje su $\delta = 0.048$ i $J = 441 \text{ K}$ [35]. Ovo slaganje potvrđuje ispravnost pretpostavke da 126 cm^{-1} mod odgovara magnetnom singletnom gap-u, a takođe i primenjivost rezultata izvršene Monte Carlo simulacije u asignaciji i opisivanju Ramanskih spektara.

Na kraju, zaključujemo da se NaV_2O_5 ispod temperature faznog prelaza $T_{SP} = 34$ K nalazi u spin-Peierls-ovoj fazi, u kojoj se opisuje kao modulisani Heisenberg-ov antiferomagnetni lanac bez frustracije, sa parametrima interakcije $\delta = 0.047$, $J = 455$ K.

Glava 6

Zaključak

U ovom radu razvijali smo Monte Carlo proceduru za proučavanje osobina jednodimenzionalnih $S = 1/2$ antiferomagnetika, proizvoljno modulirane interakcije među spinovima. Želeli smo da izračunamo energije osnovnog, najnižeg tripletnog i najnižeg kvintupletnog stanja ovakvog sistema.

Kao prvo, cilj je bio uspostaviti efikasan algoritam i izvršiti njegovu verifikaciju. U tu svrhu gore pomenute energije smo računali za homogen ($\delta = 0$) sistem radi poređenja sa analitičkim rezultatima, poznatim u ovom slučaju. Kao drugo, hteli smo da ovim metodom izračunamo iste odgovarajuće energije linearnog antiferomagnetika proizvoljne modulacije, koji odgovara spin-Peierls-ovoj fazi sistema. Ove rezultate želeli smo da primenimo u diskusiji niskoležećih magnetskih eksitacija, viđenih u Ramanskim spektrima NaV_2O_5 .

Navedeno je ostvareno, i opisano u ovom radu. Energija osnovnog stanja homogenog lanca izračunata za sisteme različitih veličina prikazana je u Tabeli 4.3. i na Slici 4.4. Ekstrapolirana vrednost za beskonačan sistem (4.6) odlično se slaže sa analitičkim rezultatom (4.4). Pobuđena stanja, najniže tripletno i najniže kvintupletno, takođe su izračunata egzaktno što se vidi poređenjem sa poznatim vrednostima na Slici 4.5. Rezultati za modulirani lanac predstavljeni su u Tabelama 5.4 i 5.5, kao i na slikama u petoj glavi.

Dobijeni rezultati iskorišćeni su za asignaciju nekih modova u Raman spektrima NaV_2O_5 . 65 cm^{-1} mod odgovara magnetnom gap-u, i ova vrednost se odlično slaže sa rezultatima ranijih merenja [3, 7, 9]. Za 126 cm^{-1} mod je ocenjeno da odgovara prelazu iz osnovnog u prvo pobuđeno singletno stanje. Ove ocene, dobijene na osnovu našeg numeričkog proračuna, daju rezultate za izmenski integral J i modulaciju interakcije δ koji se odlično slažu sa predviđanjima dobijenim merenjima susceptibilnosti [35] i fitovanjem po teoriji Bulaevskog [6] koja opisuje dimerizovan lanac.

Na osnovu izvršenih numeričkih proračuna i poređenja sa Raman spektrima zaključujemo da se na niskim temperaturama NaV_2O_5 nalazi u spin-Peierls-ovoj fazi, i može opisati kao

linearni Heisenberg-ov antiferomagnetik sa modulisanom izmenschkom interakcijom i bez frustracije.

Mogućnosti daljeg numeričkog rada su široke, i obuhvataju simulacije različitih fizičkih sistema. Kao prvo, nastavljamo proučavanje NaV_2O_5 posmatranjem uticaja nečistoća u kristalu na spektar magnetskih eksitacija. Naime, sa dopiranjem se snižava temperatura faznog prelaza i gap se smanjuje. Ovakvo ponašanje bi moglo da se objasni efektivnim razbijanjem beskonačnog lanca, od strane nemagnetnih primesa, na više lanaca konačne dužine. To znači da Monte Carlo simulaciju tada treba izvršiti uz korišćenje otvorenih graničnih uslova, jer dobijeni lanci ne interaguju, pošto ih primese fizički razdvoje. Umesto ekstrapolacije, rezultat za beskonačan sistem treba tražiti usrednjavanjem rezultata za lance konačnih dužina u zavisnosti od njihove zastupljenosti u sistemu, a koja zavisi od broja primesnih atoma po jedinici dužine. Ovaj rad je u toku, ali rezultati su još preliminarni i zato nisu prikazani na ovom mestu.

Dalje, moguće je proučavanje istog sistema uz uključivanje frustracije ili ladder-sistema. Ove dve situacije su ekvivalentne u smislu numeričkog algoritma, jer treba uzeti u obzir interakciju svakog spina sa još tačno dva dodatna, a postojeći kod samo modifikovati. Probnoj talasnoj funkciji treba dodati još parametara, čime bi se usporio algoritam i u minimizaciji i u GFMC proceduri, ili osmisliti kvalitetniju probnu funkciju koja bi bolje opisivala ovakav sistem.

Takođe bi bilo veoma interesantno izračunati dinamički form-faktor ovakvog sistema, što bi omogućilo poređenje i tumačenje i spektara dobijenih neutronske rascejanjem, odnosno dalo informaciju i o $k \neq 0$ prelazima. U ovakvim simulacijama se koristi metod maksimalne entropije, koji je, za razliku od korišćenog GFMC metoda, samo približan. I pored toga, glavna osobina ovog metoda je da mu se greška sistematski smanjuje zadavanjem što više poznatih relacija (uslova veze) u proučavanom sistemu. To znači da u slučaju linearnog antiferomagnetika možemo očekivati njegovu uspešnu implementaciju, s obzirom na sve relacije i osobine izračunate u okviru ovog rada.

Literatura

- [1] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 6th edition
(Wiley-Interscience Publication, New York, 1988).
- [2] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **50** 1153 (1983).
- [3] M. Isobe and Y. Ueda, J. Phys. Soc. Japan **65** 1178 (1996).
- [4] M. Hase, I. Terasaki and K. Uchinokura, Phys. Rev. Lett. **70** 3651 (1993).
- [5] J. C. Bonner and M. E. Fisher, Phys. Rev. **135** A640 (1964).
- [6] L. N. Bulaevskii, Sov. Phys. JETP **16** 685 (1963).
L. N. Bulaevskii, Sov. Phys. - Solid State **11** 921 (1969).
- [7] Y. Fuji, H. Nakao, T. Yosihama, M. Nishi, K. Nakajima, K. Kakurai, M. Isobe,
Y. Ueda and H. Sawa, J. Phys. Soc. Japan **66** 326 (1997).
- [8] T. Ohama, M. Isobe, H. Yasuoka and Y. Ueda, J. Phys. Soc. Japan **66** 545 (1997).
- [9] A. N. Vasil'ev, A. I. Smirnov, M. Isobe and Y. Ueda, Phys. Rev. B **56** 5065 (1997).
- [10] A. Carpy and J. Galy, Acta Crystallogr. Sec. B **31** 1481 (1982).
- [11] H.-G. von Schnering, Yu Grin, M. Knaupp, M. Somer, R. Kremer, O. Jepsen,
T. Chatterji and M. Weiden, Zeit. Kristal. **246**, (1998) in press.
- [12] P. Horsch and F. Mack, cond-mat/9801316 preprint.
- [13] H. Seo and H. Fukuyama, cond-mat/9805185 preprint.
- [14] D. C. Mattis, *The Theory of Magnetism I* (Springer-Verlag, Berlin, 1981), p. 125.
- [15] L. Hulthen, Ark. Met. Astron. Fysik **26A**, Na. 11 (1938).
- [16] H. Bethe, Z. Phys. **71**, 205 (1931).

- [17] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Wetterling and B. P. Flannery,
Numerical Recipes in Fortran, 2nd edition
(Cambridge University Press, New York, 1992).
- [18] M. H. Kalos and P. A. Whitlock, *Monte Carlo Methods*
(Wiley-Interscience Publication, New York, 1986).
- [19] A. Belić, *Numerički metodi u fizici kondenzovanog stanja, predavanja*
(IF Zemun, 1997).
- [20] D. S. Lewart and V. R. Pandharipande,
Variational Monte Carlo studies of Many-Body systems (ETS Editrice, Pisa, 1992).
- [21] N. Trivedi and D. M. Ceperley, Phys. Rev. B **41**, 4552 (1990).
- [22] W. von der Linden, Physics Reports **220**, 76 (1992).
- [23] R. B. Griffiths, Phys. Rev. **133**, A768 (1964).
- [24] C. N. Yang and C. P. Yang Phys. Rev. **150**, 321 (1966).
C. N. Yang and C. P. Yang Phys. Rev. **150**, 327 (1966).
- [25] A. Belić, privatna komunikacija.
- [26] Z. G. Soos *et al.*, Phys. Rev. B **32**, 3124 (1985).
- [27] A. B. Harris, Phys. Rev. B **7**, 3166 (1973).
- [28] T. Barnes, J. Riera and D. A. Tennant cond-mat/9801224 preprint.
- [29] D. Augier, D. Poilblanc, S. Haas, A. Delia and E. Dagotto,
Phys. Rev. B **56**, R5732 (1997).
- [30] M. C. Cross and D. Fischer, Phys. Rev. B **19**, 402 (1979).
- [31] J. L. Black and V. J. Emery, Phys. Rev. B **23**, 429 (1981).
- [32] M. J. Konstantinović, K. Ladavac, A. Belić, Z. V. Popović, A. N. Vasil'ev, M. Isobe
and Y. Ueda, submitted to J. Phys. Cond. Matt.

- [33] Z. V. Popović, M. J. Konstantinović, R. Gajić, V. N. Popov, Y. S. Raptis, A. N. Vasil'ev, M. Isobe and Y. Ueda, *J. Phys. Cond. Matt.* **10**, L5213 (1998).
M. J. Konstantinović, M. Fischer, P. H. M. van Loosdrecht, G. Güntherodt, Z. V. Popović, A. N. Vasil'ev, M. Isobe and Y. Ueda, to be published.
- [34] G. S. Uhrig and H. J. Schulz, *Phys. Rev. B* **57**, R9624 (1996).
- [35] M. Weiden, R. Hauptman, C. Geibel, F. Steglich, M. Fischer, P. Lemmens and G. Güntherodt *Z. Phys. B* **103**, 1 (1997).