

# شبیه سازی مونت کارلو برای مدل هایزنبرگ یک بعدی

مهرداد صالحیان متی کلائی  
کارشناس ارشد

حسین آقا حسینی  
استادیار

دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی امیرکبیر

## چکیده

در این مقاله، یک روش جدید برای شبیه سازی مدل هایزنبرگ  $XYZ = \frac{1}{2} (S)$  یک بعدی معرفی می گردد. این روش بر اساس فرمول تروتر بنا شده است. بدین ترتیب که با استفاده از فرمول تروتر یک مدل یک بعدی کوانتموی به مدل دو بعدی کلاسیکی تبدیل می گردد، که در آن بعد اضافه شده، یعنی زمان موهومی به دمای سیستم مربوط بوده و نقش تأثیرات کوانتموی را بازی خواهد کرد. بدین ترتیب که با استفاده از تکنیک مونت کارلو و انگرال مسیر فایمن، خواص ترموبنامیکی یک دستگاه با جمع کردن اثر عملگر نمایی بروزی مسیرهای کلاسیکی در درجات حرارت پائین محاسبه و با نتایج حاصل از مقاله Bonner & Fisher که با روش متفاوت انجام گردیده مقایسه گردیده اند. یکی از محسنات این روش، سرعت بالای آن در مقایسه با دیگر روشهای است. بعلاوه جمع روی حالتها، دارای یک نمایش گرافیکی است که می تواند بینشی از طبیعت درونی یک دستگاه بر هم کنشی ارائه دهد.

## Monte Carlo Simulation for one Dimensional Heisenberg Model

H.Aghahosseini  
Assistant Professor

M.Salehian Maticollahi  
M.SC

Physics Department,  
Amirkabir University of Technology

## Abstract

With use of the Trotter's technique simulation for one - dimensional XYZ Heisenberg systems of spin-  $\frac{1}{2}$  have been performed. It is shown that the one- dimensional quantum systems can be transformed to the two- dimensional classical systems by Trotter's technique. The extra dimension found to be like an imaginary time which has been related to the temperature of the system. Several chains of one - dimensional spin systems are simulated by Monte carlo method and the thermodynamic quantities of these are calculated at low temperature by means of this technique. Comparison is made with Bonner & Fisher's exact data which is found to be in good agreement with their results.

شکل  $H_{j,j+1}$  نمایش دهیم. در اینصورت خواهیم داشت:

$$H_1 = \sum_{j \text{ odd}} H_{j,j+1}$$

$$H_2 = \sum_{j \text{ even}} H_{j,j+1}$$

با تفکیک بیشتر هامیلتونی داریم:

$$H_{j,j+1} = H_{j,j+1}^{xy} + H_{j,j+1}^z$$

با توجه به تقسیم بندی فوق، و با توجه به اینکه تابع پارش باید تابع زوجی از  $m$  باشد [7]: یک مجموعه ای از  $2m$  ویژه حالت های عملگر  $S^z$  کل رادر هر گام زمانی  $(\Delta\tau = \frac{\beta}{m})$  قرار می دهیم [8-9].

$$Z = \lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \sum \left\langle i_1 \left| e^{\Delta\tau H_1} \right| i_2 \right\rangle \left\langle i_2 \left| e^{\Delta\tau H_2} \right| i_3 \right\rangle \left\langle i_3 \left| e^{\Delta\tau H_1} \right| i_4 \right\rangle \dots \left\langle i_{2m} \left| e^{\Delta\tau H_2} \right| i_1 \right\rangle \quad (2)$$

محاسبه المانهای ماتریسی در فرمول (2) منجر به محاسبه وزن های بولتزمن نیز می شود.

$$B = \left\langle S_{j,t}^z, S_{j+1,t}^z \left| e^{-\Delta\tau \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2} \right| S_{j+1,t+1}^z, S_{j+2,t+1}^z \right\rangle$$

که در آن  $t+1$  نمایانگر دو گام زمانی مجاور استند. هر وزن بولتزمن که مربوط به اسپین های یک پیوند در دو گام زمانی مجاور است، در واقع متناظر با یک مربع برهم کنشی است که در آن ذرات امکان جاگایی دارند.

در هر گام زمانی آرایش جایگاههای اسپینی مبین یکی از حالات میانی  $\langle k |$  در فرمول (2) می باشد. مربع های هاشورزده متناظر نواحی خاصی از فضای حقیقی و زمان موهومی است که در آنها ذرات می توانند جابجا شوند. جمع زدن روی حالات میانی در معادله (2) متناظر با جمع روی همه روشهای ممکن توزیع ذرات در امتداد محور فضایی در هر گام زمانی است. یا به عبارت دیگر این جمع به معنای درنظر گرفتن تمام آرایش های دو بعدی متناظر با یک آرایش یک بعدی فضایی می باشد.

اگر در شکل 1 جایگاههای اشغال شده مربوط به یک ذره رادر تمام گامهای زمانی متصل کنیم خطی به نام جهان خط آن ذره حاصل می شود.

سال ۱۹۷۶، سوزوکی برابری مدل آیزینگ ۲ بعدی با حالت زمینه مدل XY خطی را با محاسبه سری پذیرفتاری ثابت کرد [1] و براساس آن بستگی عمومی بین دستگاه های اسپینی کوانتومی  $d$  بعدی و مدل آیزینگ  $d+1$  بعدی را براساس زیر بیان می شود. نتیجه گرفت [2-6]:

$$e^{H_1 + H_2} = \lim_{m \rightarrow \infty} \left( e^{H_1/m} + e^{H_2/m} \right)^m$$

بدین ترتیب یک مدل کوانتومی  $d$  بعدی به مدل ۱ بعدی کلاسیکی تبدیل می شود، که در آن بعد اضافه شده به دمای سیستم اختصاص دارد.

بدین ترتیب دستگاه معادل بصورت زیر بسط داده می شود:

$$Z = \text{tr}^{(d)} e^{-\beta H} = \text{tr}^{(d+1)} \exp H_{eff}^{(d+1)}$$

که در آن  $H_{eff}^{(d+1)}$  یک هامیلتونی  $d+1$  بعدی مؤثر کلاسیک است.

حال هامیلتونی هایزنبرگ با بر هم کنش نزدیکترین همسایه ها برای یک شبکه پاد فرو مغناطیس یک بعدی را در نظر می گیریم:

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z) \quad (1)$$

که در آن  $J$  ثابت تبادلی و  $S$  عملگر اسپینی الکترون در جایگاه زام شبکه است.

در یک ماده پافرو مغناطیس در حالت تعادل گرمائی و در غیاب میدان مغناطیسی، مغناطیس های اتمی (اثر اسپین) امتدادهای کاملاً تصادفی اختیار می کنند، بطوریکه اثر کل آنها صفر می شود. بنابراین با استفاده از فرمول تروتر، اثر فوق را با در نظر گرفتن تکنیک مونت کارلو شبیه سازی می کنیم.

## ۱- محاسبه تابع پارش

برای محاسبه تابع پارش، هامیلتونی سیستم را به دو قسمت تقسیم می کنیم:

$$H = H_1 + H_2$$

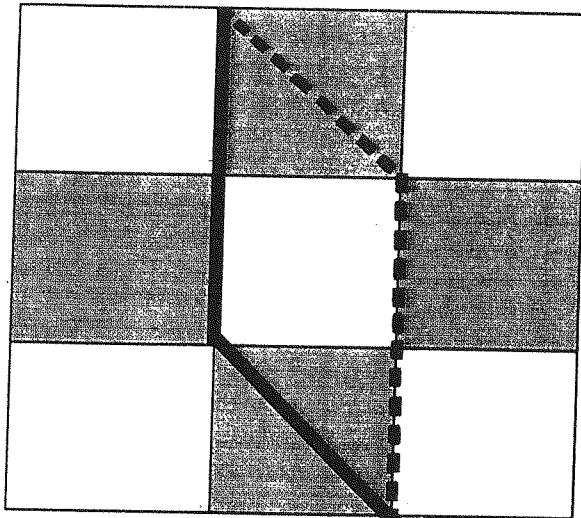
که در آن فرض می کنیم،  $H_1$  شامل پیوندهای فرد و  $H_2$  شامل پیوندهای زوج باشند. اگر هامیلتونی مورد نظر را به

مورد آزمایش می باشد.

حال برای قبول و یا رد تغییر ایجاد شده در جهان خط، از الگوریتم متropolیس استفاده می کنیم. بدین ترتیب که یک عدد تصادفی بین صفر و یک، در نظر می گیریم و احتمال  $P$  را مطابق زیر تعریف می نمائیم.

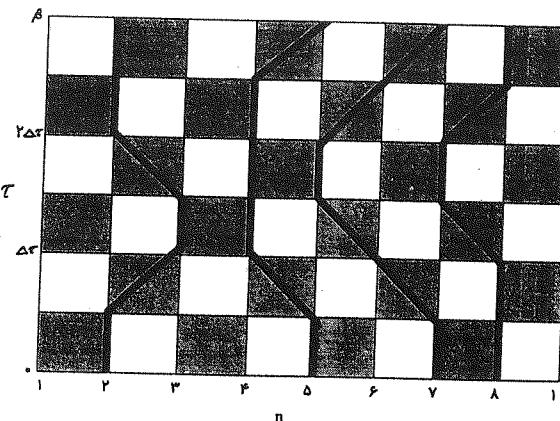
$$P = \frac{R}{1 + R}$$

اگر  $p < r$  (عدد تصادفی بین و صفر و یک) باشد آرایش جدید مورد قبول واقع میگردد و در غیر اینصورت مردود شمرده می شود.



شکل (۱) تغییر موضعی مجاز در یک جهان خط.

خط توپر نماینده جهان خط قبل از تغییر و خط چین نماینده بعد از تغییر مکان ذرات می باشد.



شکل (۲) تغییر موضعی مجاز از روی یک شبکه دو بعدی که در آن محور عمودی نماینده زمان موهومی  $\tau$  می باشد. مربع های سفید نماینگر مربع های غیر برهم کنشی هستند که در آنها ذرات امکان جابجایی ندارند و مربع های هافوزرده نمایانگر مربع های برهم کنشی می باشند که در خلال آنها ذرات جابجا می شوند.

## ۲- روش بهنگام کردن\*

فرایند ایجاد یک پیکربندی جدید مجاز از روی پیکربندی قدیم را بهنگام کردن می نامیم.

برای تشریح این فرایند، یک پیکربندی مجاز را در نظر می گیریم. از آنجائیکه فرم هامیلتونی اقتضا می کندکه برای هر پیکربندی، در هر مربع برهم کنشی تعداد ذرات بقاداشته باشند، حداقل تغییری که می تواند یک حالت جدید ایجاد کند، جابجایی دو ذره از لبه عمودی یک مربع غیر برهم کنشی به لبه دیگر این مربع می باشد و جابجایی صرفاً یک ذره باعث ایجاد یک حالت غیرمجاز می شود، چون اگر ما از یک ترکیب مجاز شروع کنیم، همیشه به یک فرمیون بدون بقدار یک مربع برهم کنشی هدایت می شویم.

با انجام پی در پی تغییر مکان فوق الذکر، تمام پیکربندی بطور تصادفی ایجاد می شوند.

اگر چنانچه امکان یک جابجایی موضعی برای جهان خط وجود داشته باشد، باید حاصلضرب المانهای ماتریسی در معادله (۲) بعد و قبل از حرکت محاسبه گردد. که این نسبت به  $R$  نمایش داده می شود. به عبارت دیگر  $R$  نسبت سهم آرایش جدید در تابع پارش به سهم آرایش قبیم می باشد. برای یک انحراف جزئی  $|\psi\rangle$  ویژه حالت  $\langle\psi|\rightarrow|\psi'\rangle$ ، این نسبت را بدست می آوریم [10]:

$$R = \frac{\langle\psi' | e^{-\beta H} | \psi' \rangle}{\langle\psi | e^{-\beta H} | \psi \rangle}$$

که در آن  $|\psi\rangle$  ویژه حالت دو ذره ای است، و  $\langle\psi|$  ویژه حالت

## ۳- محاسبه وزن های بولتزمن

برای اجتناب از داشتن وزن های بولتزمن منفی در محاسبه تابع پارش، روی هامیلتونی (۱) یک تبدیل یکانی  $U$  انجام می دهیم [11]:

$$H \Rightarrow UHU^+$$

$$U = \exp(i\pi S_j^z)$$

بنابراین داریم:

$$e^{i\pi S_j^z} S_j^x S_{j+1}^x e^{-i\pi S_j^z}$$

$$e^{i\pi S_j^z} S_j^y S_{j+1}^y e^{-i\pi S_j^z}$$

$$H = \sum_j -J \left( S_j^x S_{j+1}^x + S_j^y S_{j+1}^y \right) + \sum_j JS_j^z S_{j+1}^z$$

با جایگزینی  $S_j^+$  و  $S_j^-$  در معادله فوق بدست می آوریم:

$$H = \sum_j -\frac{J}{2} \left( S_j^+ S_{j+1}^- + S_j^- S_{j+1}^+ \right) + \sum_j JS_j^z S_{j+1}^z$$

حال با توجه به هامیلتونی فوق، وزن های بولتزمن را می توان به شکل زیر محاسبه کرد:

$$B = \left\langle S_{j,t}^z, S_{j+1,t}^z \mid \exp \left( \frac{\beta J}{2m} (S_j^+ S_{j+1}^- + S_j^- S_{j+1}^+) \right) \exp \left( -\frac{\beta J}{m} S_j^z S_{j+1}^z \right) \right| S_{j,t+1}^z, S_{j+1,t+1}^z \right\rangle$$

با قرار دادن  $\hbar = 1$  تاثیر عملگرهای  $S_j^-, S_j^+, S_j^z$  روی حالت های اسپینی  $|+\rangle$  و  $|-\rangle$  که به ترتیب بردارهای ویژه  $S_j^z$  به ازای مقادیر ویژه  $\pm \frac{1}{2}$  و  $0$  باشند، به شکل زیر می باشند:

$$S^- |+\rangle = |-\rangle, \quad S^- |-\rangle = 0$$

$$S^+ |-\rangle = |+\rangle, \quad S^+ |+\rangle = 0$$

$$S^z |+\rangle = \frac{+1}{2} |+\rangle, \quad S^z |-\rangle = \frac{-1}{2} |-\rangle$$

به ازای مقادیر مختلف حالات اسپینی  $(\pm \frac{1}{2})$ ، مقادیر مختلف برای وزن های بولتزمن خواهیم داشت. ولی نکته قابل توجه آن است که به سادگی می توان دید که وزن های بولتزمن که بقای  $S_j^z$  رانقض می کنند، صفر می باشند و تنها وزن غیر صفر داریم:

$$B_1 = \langle ++ | e^{-\Delta t H} | j,j+1 \rangle = \langle -- | e^{-\Delta t H} | j,j+1 \rangle = \exp \left( -\frac{\beta J}{4m} \right)$$

$$B_2 = \langle +- | e^{-\Delta t H} | j,j+1 \rangle = \langle -+ | e^{-\Delta t H} | j,j+1 \rangle = \exp \left( \frac{\beta J}{4m} \right) \cosh \left( \frac{\beta J}{2m} \right)$$

$$B_3 = \langle +- | e^{-\Delta t H} | j,j+1 \rangle = \langle -+ | e^{-\Delta t H} | j,j+1 \rangle = \exp \left( \frac{\beta J}{4m} \right) \sinh \left( \frac{\beta J}{2m} \right)$$

هر یک از وزن های فوق، یکی از اشکال شکل (۳) را نشان می دهد.

#### ۴- محاسبه کمیتهای فیزیکی

حال می توانیم مقدار چشمداشتی عملگرهای  $\langle H \rangle$  و  $\langle H^2 \rangle$  را جهت محاسبه انرژی و ظرفیت گرمائی بدست آوریم. برای محاسبه انرژی می بایست به بررسی کمیت

$$e^{i\pi S_j^z} S_j^z S_{j+1}^z e^{-i\pi S_j^z}$$

بدلیل جابجا شدن عملگرهای اسپینی در جایگاه های مختلف شبکه و بعلوه جابجایی  $e^{i\pi S_j^z}$  و  $S_j^z$  داریم:

$$e^{i\pi S_j^z} S_j^z S_{j+1}^z e^{-i\pi S_j^z} = S_j^z S_{j+1}^z$$

برای بقیه جملات داریم:

$$e^{i\pi S_j^z} S_j^x S_{j+1}^x e^{-i\pi S_j^z} = \left( e^{i\pi S_j^z} S_j^x e^{-i\pi S_j^z} \right) S_{j+1}^x = \hat{A} S_{j+1}^x$$

$$e^{i\pi S_j^z} S_j^y S_{j+1}^y e^{-i\pi S_j^z} = \left( e^{i\pi S_j^z} S_j^y e^{-i\pi S_j^z} \right) S_{j+1}^y = \hat{B} S_{j+1}^y$$

برای محاسبه عملگرهای  $\hat{A}$  و  $\hat{B}$  توجه داریم که:

$$\exp(i\pi S_j^z) S_j^x \exp(-i\pi S_j^z) = S_j^z + i\pi [S_j^z, S_j^x] +$$

$$\left( \frac{i\pi}{2!} \right)^2 [S_j^z, [S_j^z, S_j^x]] + \left( \frac{i\pi}{3!} \right)^3 [S_j^z, [S_j^z, [S_j^z, S_j^x]]] +$$

$$\dots = S_j^x - \pi S_j^y - \frac{\pi^2}{2!} S_j^x + \frac{\pi^3}{3!} S_j^y + \dots$$

$$= S_j^x \cos \pi - S_j^y \sin \pi = -S_j^x$$

بنابراین به ازای  $(\hbar = 1)$  داریم:

$$\hat{A} = -S_j^x$$

و با روش مشابه بدست می آوریم:

$$\hat{B} = -S_j^y$$

بطور خلاصه اثر تبدیل یکانی روی هامیلتونی چنین است:

$$S_j^x \Rightarrow -S_j^x, \quad S_j^y \Rightarrow -S_j^y, \quad S_j^z \Rightarrow S_j^z$$

و در نتیجه هامیلتونی معادله (۱) بصورت زیر در می آید:

$$\langle H \rangle = \frac{-\sum_k \frac{\partial W(k)}{\partial b} / P(k)}{\sum_k W(k) / P(k)}$$

$$= \frac{1}{Mm} \sum_{k=1}^M \left[ N_1(k) \frac{J}{4} - N_2(k) \frac{J}{2} \left[ \text{Tanh}\left(\frac{\beta J}{2m}\right) + \frac{1}{2} \right] - N_3(k) \frac{J}{2} \left[ \text{Coth}\left(\frac{\beta J}{2m}\right) + \frac{1}{2} \right] \right]$$

و برای ظرفیت گرمایی داریم:

$$C = \frac{1}{MK_B T^2 m^2} \sum_k \left( \langle E^2(k) \rangle - \langle E(k) \rangle^2 \right)$$

که با محاسبه  $\langle E^2(K) \rangle$  به سادگی می توان مقدار C را محاسبه کرد:

$$C = \frac{1}{MK_B T^2 m^2} \sum_{k=1}^M \left[ \frac{J^2}{4m} \left[ 1 - \text{Tanh}\left(\frac{\beta J}{2m}\right) \right] N_2(k) + \frac{J^2}{4m} \left[ 1 - \text{Coth}\left(\frac{\beta J}{2m}\right) \right] N_3(k) \right]$$

## ۵. الگوریتم

اندازه گیریها و محاسباتی که در بخش های قبل شرح داده شد، از طریق الگوریتم زیر، شبیه سازی کامپیوتري انجام می پذیرد:

مرحله ۱- یک ردیف از ذرات را بطور تصادفی ایجاد می کنیم.  
مرحله ۲- آرایش ردیف اول را برای هر گام زمانی تکرار می نماییم و شرایط مرزی دوره ای را اعمال می کنیم.  
مرحله ۳- تک تک مربع های بدون سایه را در نظر می گیریم (مطابق شکل ۲)، احتمال  $P = \frac{R}{1+R}$  را برای هر حالت مورد نظر محاسبه و عدد تصادفی r را بین صفر و یک ایجاد می کنیم. اگر  $r < P$  باشد، تغییر مربوطه مورد قبول واقع می شود و در غیر اینصورت مردود می گردد.

مرحله ۴- پس از به تعادل رسیدن سیستم می بایست به ذخیره سازی اطلاعات به منظور محاسبه میانگین های مورد نظر بپردازیم.

مرحله ۵- سیستم را M بار جاروب می کنیم (M پیکربندی جدید ایجاد می کنیم).

## ۶- نتایج عددی

برای مدل هایزنبیگ با هامیلتونی (۱) و اسپین  $\frac{1}{2}$  با استفاده از روش مونت کارلو محاسبات انرژی داخلی و ظرفیت گرمایی انجام گردیده و نتایج حاصله با نتایج مرجع [12] مقایسه گردیده اند. در اینجا شباهت و انتظام مناسبی بین جوابها وجود دارد. همچنین تعدادی از جوابها به صورت نمودار ارائه گردیده اند.  
در جدول زیر ثابت های پلانک و بولتزمن برابر یک فرض

$$\frac{\langle i_1(k) | e^{-\Delta\tau H_{j,j+1}} | i_2(k) \rangle}{\langle i_1(k) | e^{-\Delta\tau H_{j,j+1}} | i_2(k) \rangle}$$

بپردازیم که منجر به محاسبه مقادیر زیر می شوند:

$$(a) \quad \begin{array}{ccc} \text{Diagram 1} & = & \text{Diagram 2} \\ \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow & & \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \end{array} \Rightarrow \exp\left(-\frac{\beta J}{4m}\right)$$

$$(b) \quad \begin{array}{ccc} \text{Diagram 1} & = & \text{Diagram 2} \\ \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow & & \downarrow \uparrow \uparrow \downarrow \uparrow \\ \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow & & \end{array} \Rightarrow \exp\left(\frac{\beta J}{4m}\right) \cosh\left(\frac{\beta J}{2m}\right)$$

$$(c) \quad \begin{array}{ccc} \text{Diagram 1} & = & \text{Diagram 2} \\ \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow & & \downarrow \uparrow \uparrow \downarrow \uparrow \\ \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow & & \end{array} \Rightarrow \exp\left(\frac{\beta J}{4m}\right) \sinh\left(\frac{\beta J}{2m}\right)$$

شکل (۳) نمایش وزن های بولتز من غیر صفر.

$$E(+, +; +, +) = E(-, -; -, -) = \frac{J}{4}$$

$$E(+, -; +, -) = E(-, +; -, +) = -\frac{J}{2} \left[ \text{Tanh}\left(\frac{\beta J}{2m}\right) + \frac{1}{2} \right]$$

$$E(-, +; +, -) = E(+, -; -, +) = -\frac{J}{2} \left[ \text{Coth}\left(\frac{\beta J}{2m}\right) + \frac{1}{2} \right]$$

برای ساده تر شدن محاسبه انرژی و ظرفیت گرمایی، تابع پارش را بصورت زیر نمایش می دهیم:

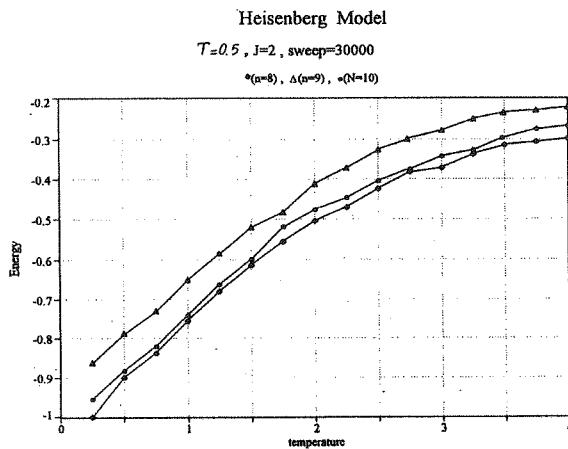
$$Z = \sum_K W(k) = \sum_K B_1^{N_1(k)} B_2^{N_2(k)} B_3^{N_3(k)} \quad (۳۴)$$

که در آن  $N_1(k)$ ،  $N_2(k)$  و  $N_3(k)$  به ترتیب تعداد مربع های برم کنشی نوع a, b, c در شکل (۳) برای پیکربندی K ام را نشان می دهند.  $B_1$ ,  $B_2$  و  $B_3$  نیز ضرائب بولتزمن می باشند. همچنین با توجه به نماد گذاری فوق انرژی برابر است با:

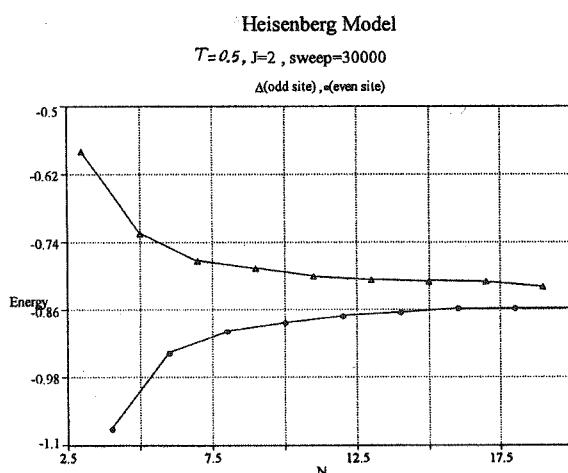
$$\langle H \rangle = -\frac{\partial Z / \partial \beta}{Z} = -\frac{\sum_K \partial W(K) / \partial \beta}{\sum_K W(K)}$$

از آنجاییکه در فرمول فوق، می بایست اثر ایجاد هر پیکربندی k ام را با احتمال  $p$  محوظ کنیم بنابراین خواهیم داشت:

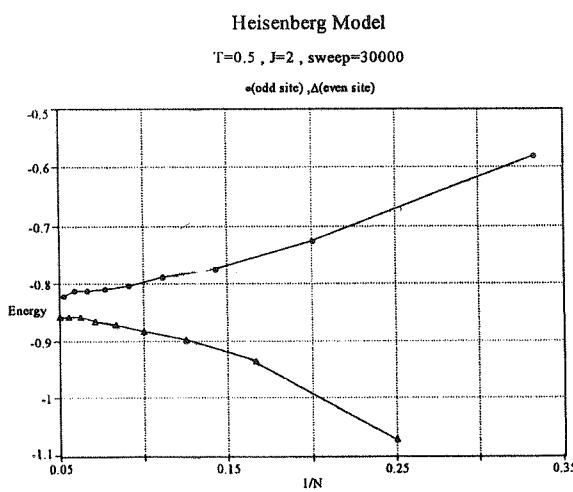
- مطالعه اثرات ناهمگنی در دستگاههای کوانتومی
- تعمیم این روش به مدل‌های نسبیتی



شکل (۴) نمودار تغییرات انرژی داخلی بر حسب  $T$ .



شکل (۵) نمودار تغییرات انرژی داخلی بر حسب  $N$ .



شکل (۶) نمودار تغییرات انرژی داخلی بر حسب  $1/N$ .

شده اند.  $N/2$  تعداد فرمیونها و  $m$  نیز نمایانگر عدد تروتر است. همچنین، اندیس exact به حل دقیق کمیت مورد نظر مربوط می شود که در مرجع [12] ارائه گردیدند. اندیس های (10000) و M.C(30000) به ترتیب برای 10000 و 30000 اندازه گیری مربوط می شوند که با استفاده از روش مونت کارلو بدست آمدند. نتایج بدست آمده نسبت به نتایج دقیق کمتر از ۳٪ انحراف دارند.

## ۷. نتیجه گیری

روش معرفی شده در این مقاله، امکان مطالعه اغلب دستگاههای بر هم کنشی (فرمیونی، بوزونی و اسپینی) در شبکه یک بعدی را فراهم می سازد. این روش امکان مطالعه دستگاههای بزرگ را دارد. برای نمونه، در مدل هایزنبرگ یک بعدی، قطعی کردن هامیلتونی برای دستگاههای بزرگتر از ۸ جایگاه بسیار مشکل است، اما با استفاده از این روش، بسادگی می توان محاسبات را برای دستگاههای تا ۱۰۰ جایگاه در هر یک از مدل های بر هم کنشی انجام داد. برای بعضی از دستگاههای کوانتومی، ممکن است حل های دقیقی برای تابع موج و انرژی حالت زمینه یافت شود، اما با استفاده از این تکنیک می توانیم خواص ترمودینامیکی را در دمایهای کمی بالاتر از حالت زمینه، بسادگی تعیین کرد. این روش را می توان به ابعاد بالاتر تعمیم داد. برای مثال، در دو بعد، می توان هامیلتونی را بصورت  $H = H_{ox} + H_{oy} + H_{ex} + H_{ey}$  تجزیه کرد، که در آن  $H_{ox}$  و  $H_{oy}$  شامل باندهای فرد و  $H_{ex}$  و  $H_{ey}$  شامل باندهای زوج در امتداد محورهای  $x$  و  $y$  هستند.

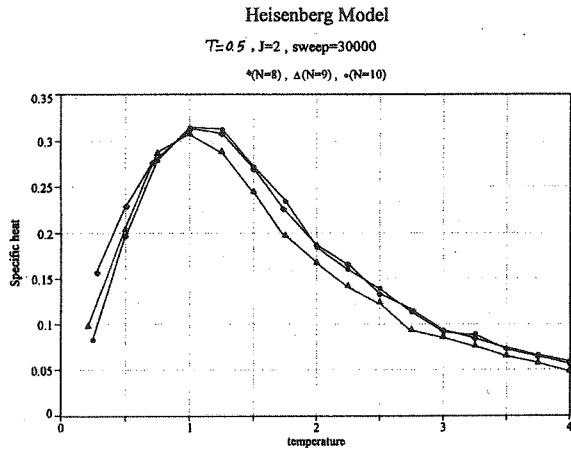
همه عناصر ماتریسی را می توان برآحتی محاسبه کرد، بجز اینکه حاصل ضرب همه عناصر ماتریسی برای ترکیبات فرمیونی، منفی می شوند. برای رفع این مشکل، مقدار چشمداشتی عملگر  $O$  را می توان بصورت زیر نوشت:

$$\langle O \rangle = \frac{\text{tr}(O \text{ signB}|B|)}{\text{tr}(\text{signB}|B|)} \equiv \frac{\langle O \text{ signB} \rangle_{|B|}}{\langle \text{signB} \rangle_{|B|}} \quad (3)$$

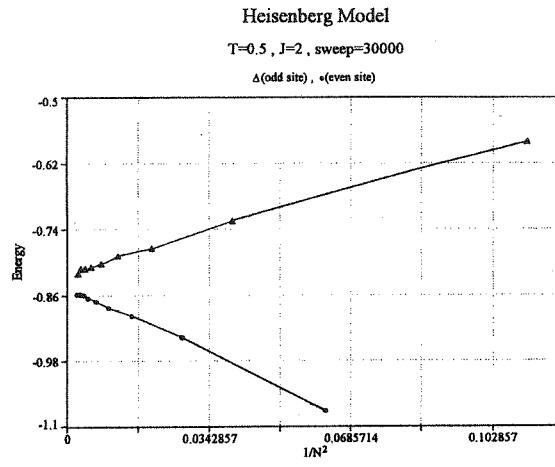
که در آن  $B$  به عناصر ماتریسی تقسیم شده بوسیله تابع پارش مربوط می شود (وزن بولتزمن) و  $|B|$  قدر مطلق وزن بولتزمن است که در صورت و مخرج معادله (۳) ظاهر می شود.

بهمین ترتیب می توان این تکنیک را به سه بعد تعمیم داد. از این روش، همچنین می توان برای مطالعه موارد زیر استفاده کرد.

- مطالعه دستگاههای بر هم کنشی فرمیون-بوزون
- بررسی اثر میدان مغناطیسی در دستگاههای کوانتومی



شکل (۶) نمودار تغییرات ظرفیت گرمایی بر حسب T.



شکل (۷) نمودار تغییرات انرژی داخلی بر حسب  $1/N^2$ .

## زیرنویس‌ها

- 1- Time slice
- 2- Siles
- 3- World line
- 4- Updating
- 5- flip trial

جدول (۱) انرژی داخلی و گرمای ویژه بر واحد جایگاه ( $\tau=0.5, J=2, \Delta\tau=0.1$ )

N	$E_{exact}$	$E_{M.C}(10000)$	$E_{M.C}(30000)$	$C_{M.C}(10000)$	$C_{M.C}(30000)$
3	-0.500	-0.581	-0.582	0.635	0.642
4	-1.000	-1.073	-1.072	0.691	0.713
5	-0.747	-0.728	-0.726	0.472	0.464
6	-0.934	-0.937	-0.938	0.330	0.310
7	-0.815	-0.770	-0.775	0.372	0.344
8	-0.912	-0.899	-0.899	0.234	0.247
9	-0.843	-0.793	-0.789	0.307	0.299
10	-0.903	-0.881	-0.884	0.233	0.218
11	-0.857	-0.800	-0.803	0.267	0.265
12	-0.897	-0.873	-0.873	0.204	0.213

## مراجع

- [1] Masuo Suzuki; prog. theor. phys. 56, 1454 (1976)
- [2] Masuo Suzuki; Commun. Math. phys. vol 51, 183 (1976)
- [3] Masuo Suzuki; phys. Rev. B31, 2957 (1985)
- [4] Masuo Suzuki, seiji miyashita, akira Kuroda; prog. theor. phys. 58, 1377 (1977)
- [5] Masuo Suzuki; J. Math. phys. 26, 601 (1985)
- [6] Masuo Suzuki; phys. Lett. A 146, 319 (1990)
- [7] Masuo Suzuki; phys. Lett. A113, 299 (1985)
- [8] Malvin H. Kalos ; Monte Carlo Methods in Quantum problems , D. Reidel publishing Company (1982)
- [9] J. E. Hirsch, R. L. Sugar ,D. J. Scalapino, R. Blankenbecler; phys . Rev. B26, 5033 (1982)
- [10]Masuo Suzuki ; Quantum Monte Carlo Methods in Codensed Matter physics, World scientific (1993)
- [11] Miloje S. Makivic & Hong - Qiang Ding ; phys. Rev. B43, 3562 (1991)
- [12] Jill C. Bonner & Michael E. Fisher; phys. Rev., vol A 135- 3, 640 (1964)