

密级: _____

中国科学院研究生院

博士学位论文

二维Potts模型上部分对称性破缺导致的相变问题研究

作者姓名: _____ 陈巧妮 _____

指导教师: _____ 向涛 研究员 _____

_____ 中国科学院理论物理研究所 _____

学位类别: _____ 理学博士 _____

学科专业: _____ 理论物理 _____

培养单位: _____ 中国科学院理论物理研究所 _____

2012年 4月

Study of Phase Transition Caused by Partial Symmetry

Breaking on Two Dimensional Potts Model

By

Qiao-Ni Chen

A Dissertation Submitted to

Graduate University of Chinese Academy of Sciences

In partial fulfillment of the requirement

For the degree of

Doctor of Theoretical Physics

Institute of Theoretical Physics Chinese Academy of Sciences

April, 2012

摘 要

本文采用张量重正化方法研究了二维反铁磁Potts模型上的部分长程序。通常的长程序是晶格上所有格点都参与的，然而存在部分长程序，也就是晶格上只有一部分格点参与的部分有序。过去人们发现部分长程序存在于阻挫系统中，我们研究的反铁磁Potts模型是没有阻挫，但是存在部分有序的系统。

通过这些研究，我们发现部分有序的发生有两种机制：一个是熵驱动，在所有的状态数里部分有序的状态数远远大于其它的状态数，因而产生长程有序；另一个是能量驱动，能量的最小化要求一些格点长程有序，另一些格点有一定的自由度而无序。缺陷的存在是区分这两种序的方法。

这些年随着量子计算和量子信息理论的发展，很多张量网络方法被提出，其中有一些方法可以用来计算二维统计模型的配分函数。这些方法都是先把配分函数表示成张量网络形式，再把张量网络进行收缩，都可以处理热力学极限下的系统，这是相比于其他数值方法最大的优势，除此之外计算精度也是其一大优势。我们使用张量重正化群，二次张量重正化群和时间演化块消灭算法计算了几种平面格子上Potts模型的配分函数。

Diced格子上 $q = 3$ 的反铁磁Potts模型，基态的状态数有无限多个，其中一套子格的格点有序的状态数在其中占据主导，于是会发生由于这些部分格点的长程有序导致的相变。我们发现union-jack格子上 $q = 4$ 也存在这种部分有序，并且这上面 $q = 3$ 会发生两个相变，第一个相变之后系统会进入部分有序相。

Union-jack是中心正方格子。跟正方格子一样，diced格子也是由四边形构成的，同样的可以在四边形的中心加点而得到centered-diced格子。我们发现centered-diced格子上 $q = 3$ 也会发生两个相变，而且不仅 $q = 4$ 上有部分有序， $q = 5$ 时也有。做为阻挫系统的 $q = 2$ 的union-jack格子和centered-diced格子上也都存在部分有序。

Checker-board格子是在一部分正方格子的四边形上加中心格点而得到的，这上面 $q = 2$ 和 $q = 3$ 都存在部分有序，跟前面的几种有序不同这里的部分有序完全是能量的最小化要求产生的。在diced格子上的部分四边形上加中心格点，在四边形不同的选择方式下我们得到四种dilute-centered-diced格子，这些格子

从 $q = 2$ 到 $q = 4$ 都存在部分有序。这些有序有些是状态数占据主导而产生的，有些是能量最小化导致的。

我们的研究是张量相关重正化群方法在经典统计物理上的应用，我们发现跟铁磁Potts模型相比反铁磁上的物理更加丰富，在不同晶格和不同 q 值时有不同的行为。我们的工作增加了人们对Potts模型的了解，扩展了人们在部分长程序方面的知识，增强了人们对于相变和临界现象的兴趣。

关键词： 张量重正化方法，反铁磁Potts模型，部分长程序

Abstract

We study the partial long range order on anti-ferromagnetic Potts model with tensor renormalization methods. Usually long range order is the order that all the sites in the system is evolved, however there could be partial long range order, which only partial of lattice sites evolved. People used to think partial order exists on frustrated system, the anti-ferromagnetic Potts model we studied is not frustrated but with partial order.

With these study, we found there is two way for partial order to appear: one is entropy driven, among all the states the number of partial ordered states dominate, then partial order appear; the other is energy driven, to minimize the energy some of lattice sites have to be ordered, and there is freedom for the other sites which becomes disordered. The way to distinguish the two is the existence of defects.

As the development of quantum computation and quantum communication, many different kinds of tensor renormalization methods appears, some of them could be used to calculate the partition function of two dimensional statistical model. All these methods is first express the partition function as tensor network, then contract it. One aspect is they could handel thermal dynamic limit system, the other is the precision. We simulate the partition function of anti-ferromagnetic Potts model on several lattice using tensor renormalization group, second renormalization group and time evolving block decimation.

The number of ground states of $q = 3$ anti-ferromagnetic Potts model on diced lattice is infinite, the number of one sublattice ordered dominate, then this partial order causes phase transition. We found such partial order could also occur on $q = 4$ union-jack lattice, and for $q = 3$ there will be two phase transition, partial order appears after the first transition.

Union-jack lattice is centered square lattice. Same as square lattice, diced lattice is composed by quadrilaterals, we can also add a site in the center of quadrilateral to get centered-diced lattice. We found there is two phase transition

on $q = 3$ centered-diced lattice, and partial order appears not only for $q = 4$, but also $q = 5$. As frustration system the $q = 2$ on union-jack and center-diced lattice have partial order too.

Checker-board lattice is derived by adding centered sites on partial of the quadrilaterals on square lattice. Partial order appears on both $q = 2$ and $q = 3$ of this lattice. Different from previous partial order, the appearance of order is because of minimization of energy. Then we concentrate on four dilute-centered-diced lattice, which is by adding centered sites on partial of the quadrilaterals of diced lattice in different way. There is partial order for all the four lattice from $q = 2$ to $q = 5$. Some of the order appears because the number of states dominate, the other is minimize the energy.

Our study is the application of tensor related renormalization methods to classical statistical physics, we found compared with ferromagnetic Potts model the physics of anti-ferromagnetic is rich and complex, displaying many different behavior of on different lattice and different value of q . Our work increase the understanding of Potts model, boarded the knowledge of partial long range order, and strengthen the interests on phase transition and critical phenomena.

Keywords: Tensor renormalization methods, anti-ferromagnetic Potts model, partial long range order

目 录

摘要	i
Abstract	iii
目录	v
第一章 引言	1
1.1 朗道相变理论	1
1.2 阻挫系统上的部分长程序	3
1.3 Potts模型上的部分长程序	4
1.4 张量相关重正化群方法	10
1.5 本论文的内容与结构	11
第二章 张量网络态和相关算法	13
2.1 矩阵乘积态	16
2.1.1 AKLT与MPS	16
2.1.2 MPS和DMRG	17
2.1.3 Schmidt分解	19
2.2 MPS的基态算法	20
2.2.1 正则化	20
2.2.2 无限链长基态的求解	22
2.2.3 周期性有限链长基态算法	27
2.3 投影纠缠对态及其基态算法	29
2.4 spin-1 Bilinear-Biquadratic model	32

第三章 经典统计物理与张量收缩算法	35
3.1 经典统计模型的张量网络表示	37
3.1.1 Ising模型	37
3.1.2 Potts模型	39
3.2 张量重正化群	41
3.2.1 正方格点	41
3.2.2 六角格点	45
3.3 二次张量重正化群	50
3.3.1 method	50
3.3.2 result	52
3.4 时间演化块消灭算法	54
3.4.1 竖直方向投影	54
3.4.2 对角线方向投影	55
3.5 三角格子上的Potts模型	57
3.5.1 铁磁	57
3.5.2 反铁磁	57
第四章 Union-jack 格子上的反铁磁Potts模型	59
4.1 Diced格子上的 $q = 3$ 反铁磁Potts模型	61
4.2 $q = 2$	65
4.2.1 严格解	65
4.2.2 数值结果	68
4.3 $q = 3$	70
4.4 $q = 4$	72
4.4.1 数值结果	72
4.4.2 映射到其他统计模型	77
4.4.3 Height Representation	81
4.5 Square-kagome格子上的 $q = 3$ Potts模型	83

第五章 其他格子上的反铁磁Potts模型	85
5.1 Centered diced 格子上的反铁磁Potts模型	87
5.1.1 $q = 2$	88
5.1.2 $q = 3$	90
5.1.3 $q = 4$	91
5.1.4 $q = 5$	92
5.2 ‘checkerboard’ 格子上的反铁磁Potts模型	94
5.2.1 $q = 2$	94
5.2.2 $q = 3$	95
5.3 Dilute centered diced格子上的反铁磁Potts模型	99
5.3.1 $q = 2$	100
5.3.2 $q = 3$	102
5.3.3 $q = 4$	105
第六章 结论	109
参考文献	113
发表文章目录	131
致谢	133

第一章 引言

量子力学的建立拉开了微观物理学的帷幕，将量子力学应用于分子，诞生了量子化学，将量子力学和统计物理应用于晶体中的原子和分子，产生了固体物理学，各种各样复杂的凝聚态物质以及繁杂丰富的集体现象使得固体物理学的范围扩大，产生了凝聚态物理学。

不同于以往通过不断将系统拆分还原成更简单的系统而进行研究的物理学，凝聚态物理与复杂性为邻，研究的是包含大量粒子的复杂系统上呈现的合作现象。凝聚态物理的两大基石是朗道的费米液体理论和朗道的相变理论，后者研究的是相变和临界现象。我们知道多粒子系统的行为由粒子的统计行为和粒子间的相互作用所决定，正是这两种因素的竞争产生了相变。

1.1 朗道相变理论

相变[1]是自然界中最普遍的现象，我们知道在常温下水是以液态的形式存在的，温度升高时水会蒸发成为水蒸汽，温度降低时水会冻结成冰。冰，水和水蒸气是同一物质 H_2O 的三种不同形态，我们称之为不同的相，不同相之间的变化就是相变，如水和冰之间的固液相变，水和水蒸气之间的气液相变。除此之外，还有铁磁相到顺磁相的相变，超导超流相变，原子核里的形状相变，夸克-夸克间的色超导相变等。相变无处不在，从我们日常生活中经常接触的物质，到最基本的粒子如夸克胶子等离子体，甚至宇宙尺度的系统中。

相变的产生是由于物质内部粒子之间相互作用和粒子之间统计行为的竞争而产生的。粒子内部的相互作用总是倾向于使系统趋于某种有序，而粒子的统计则倾向于让系统更加无序。我们知道热力学平衡要求自由能极小 $F = U - TS$ ，低温时内能在自由能中占主导，内能极小化通常意味着系统处于有序相，高温时自由能极小相当于要求熵极大，此时系统处于无序相，在有序相和无序相之间的转变就是相变。这是热涨落驱动的相变，还有一类相变是因为量子涨落而发生的，也就是人们常常提到的量子相变[2]。

自然界从来都不吝惜给我们以惊喜，这么多行行色色的相变都可以在朗道范式下进行描述，也就是朗道的连续相变理论。Ehrenfest根据配分函数的各阶

导数的连续性，对相变进行分类，一阶导数不连续的是一级相变，一阶导数连续而二阶导数不连续是二级相变，以此类推。一级相变也被称为不连续相变，二级及以上的是连续相变。朗道的相变理论是用来描述连续相变的，然而某些一级相变（弱一级相变）也可以在这个框架下进行描述。

朗道相变理论的核心思想是对称性破缺，低温下由于要使得能量最小，对称性破缺，系统处于低温有序相，高温下热涨落破坏了长程序，系统的对称性恢复。可以用序参数来刻画相变，有序相序参数不为零，无序相序参数为零，从无序相到有序相时系统自发破缺到原来对称性的一个子群。铁磁相变的序参量是自发磁化强度，气液相变的序参量是气相和液相的密度差。

连续相变的相变点也叫临界点，临界点附近会发生临界现象。临界现象最早可以追溯到1869年Andrews发现二氧化碳的临界乳光现象，在临界点附近由于密度的强烈涨落，气体分子跟光的散射作用大大增强，产生了乳光现象。在临界点附近由于临界涨落使得系统具有很多在远离时所不具备的性质，人们发现临界现象满足标度性和普适性。

前面提到在临界点附近热力学量会发散，临界指数用来标志热力学量在临界点附近的发散程度，如比热在相变点附近随温度发散的指数，序参量在临界点附近趋于零的指数等。人们发现所有的相变，临界指数之间都满足标度关系，六个临界指数中只有两个是独立的。标度律可以在标度假说的框架下得到解释，标度假说认为热力学函数的奇异部分是约化温度和有效外场的广义齐次函数。

除了标度性，临界现象还具有普适性。普适性是指所有的相变可以分为有限的几类，属于同一类的系统具有相同的临界指数，同一个普适类的热力学函数以温度和外场的某些次数作为自变量时具有相同的形式，也就是普适标度函数。普适性还有一个含义就是普适的标度函数不依赖于微观模型的具体形式。基于临界点具有标度不变性这一假设的重正化群理论可以解释普适性。

重正化群理论的出现使得人们对临界现象的理解有了质的飞跃，重正化群理论[3]是基于标度变换的。标度变换实际上是通过粗粒化实现大尺度到小尺度的变换，在动量空间就表现为对大动量部分的截断。临界点因为关联长度发散，系统没有尺度的差异，因而具有标度不变性。重正化群流的图中，相变点是不稳定不动点，相同普适类系统的对应相同的不动点。

共形变换是标度变换的延伸，具有共形不变性的场就是共形场。共形场论

的研究扩展了人们在临界现象方面的知识[4]，尤其是二维的系统。标度不变性只是把相变分成不同的普适类，而共形变换可以对临界类型进行分类，并严格地给出临界指数的大小，以及二维系统上的多点关联函数。共形场论还可以证明临界指数是有理数。

1.2 阻挫系统上的部分长程序

有序和无序是多粒子系统的重要特征，对于它的研究是平衡态统计物理的一个基本任务。通常的长程序是系统的所有格点都参与的长程序，如铁磁Ising模型的基态是系统中所有格点都取自旋向上或者向下的状态，而部分有序是系统中一部分格点参与有序的长程序，也就是说系统当中的格点，其中一部分有序另一部分无序。

首先人们发现阻挫系统中存在部分有序。阻挫系统是指能量不能局域最小化的系统，如三角格子上的反铁磁Ising模型，没有一种状态可以使三角形上三条边的能量同时最小化。Hoever猜想[5]如果系统的两个基态可以通过局域的，能量不变的变换相转换，那么这个系统将没有自发对称性破缺，不存在长程序，然而人们却发现一些阻挫系统会存在长程序，并且是部分有序的长程序[6]。

部分有序通常和reentrance现象相关，reentrance现象是指系统本来处于一个无序相，但随着温度升高又进入有序相。我们知道一般情况下有序相出现在低温，而无序相出现在高温。发生reentrance现象的相图里，无序相之下一定存在另一个有序相，于是在无序相之上的有序相则相当于系统重新进入有序相。这个现象一般发生在相图中存在部分有序相的情况。但是部分有序相和reentrance现象为什么相关，以及它们是怎样联系在一起的现在并不清楚。

有很多存在严格解的系统中存在部分有序，如三角格子上的自旋S反铁磁Ising模型，在S足够大时（大于1/2），基态是其中两套子格上的格点形成的六角格子上的反铁磁序，第三套子格上的格点无序[7]。Union-jack格子[8]、checker-board格子[9]以及稀释中心正方格子[10]上的Ising模型存在部分有序。除此之外还有各向异性的三角格子[11]和Villain格子（各向异性的正方格子）[12]上的Ising模型，以及反铁磁自旋S阻挫Ising[13]。

除了这些有严格解的模型之外，另外一些阻挫模型上也存在部分有序，如Villain格子上的 $q = 3$ 的Potts模型[14, 15]，checker-board格子上的XY模

型[16]。部分有序不止存在于二维系统上，还有三维的系统上，如简立方格子上的阻挫模型[17, 18]，堆积三角格子上的Ising模型[19]，体心立方格子上的Ising模型[20]，体心立方上的经典Heisenberg模型[21]，金刚石格子上的反铁磁 $q = 4$ Potts模型[22]。实验上在反铁磁阻挫材料 $Gd_2Ti_2O_7$ 上也观察到了部分有序相[23]。

量子系统中也会存在这种部分有序，如三角格子上的周期性Anderson模型[24, 25]，体心立方上的Heisenberg模型[26, 27]，以及三角格子上的自旋3/2的模型[28]，人们通过不同的理论方法预言这些系统上存在着部分有序。量子系统上出现部分有序的原因比经典系统上要复杂。

可以看到部分有序存在于二维、三维的阻挫的系统上，包括经典和量子模型，其存在性已经通过严格解，数值方法和实验得以证实。阻挫系统的特征是能量不能局域最小化，基态的简并度无穷大。 q 态反铁磁Potts模型同样也是基态简并度无穷大的系统，因而也是一种可能有部分有序长程序的系统。我们通过很多不同格子上反铁磁Potts模型的研究，来系统地了解部分长程序。

1.3 Potts模型上的部分长程序

Potts模型[29]在统计物理和临界现象的研究中占据重要地位，最早出现在Domb[30]给他的学生Potts布置的毕业论文，他们想把Krammer和Wannier[31]提出的Ising模型上的对偶变换推广到现在称为平面Potts模型的模型上，可是Potts[32]发现平面Potts模型不能做这个变换，但他发现另外一个模型，也就是Potts模型上可以做这个变换。

Potts模型是Ising模型的多分量推广，如式(1.1)每个格点上有 q 种不同的状态，只有当近邻格点取相同状态时贡献能量 J ，否则贡献就为0。因此在 $J > 0$ 时近邻格点倾向于取不同状态，属于反铁磁情况，反之，倾向于取不同的状态，属于铁磁情况。在 $q = 2$ 时Potts模型和Ising是等价的，同时 $q = 4$ 的Potts模型和Ashkin-Teller模型[33]是等价的。

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{\sigma_i \sigma_j}, \sigma_i = 0, 1, \dots, q-1 \quad (1.1)$$

还有平面Potts模型，哈密顿量定义如式(1.2)，状态是均匀分布在平面内的单位

表 1.1: 不同格子上的反铁磁Potts模型的临界 q_c

格子	配位数	q_c
Honeycomb	3	2.618
Square	4	3
Diced	4	> 3
Kagome	4	3
Triangular	6	4

矢量。平面Potts模型在 $q = 2, 3, 4$ 时分别与Potts的 $q = 2, 3, 2$ 等价。

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j), \theta_i = 0, 2\pi i/q, \dots, 2\pi i(q-1)/q \quad (1.2)$$

对于铁磁Potts模型，基态是系统所有格点取相同的状态，因此无论在任何格子上低温下存在长程序，高温时长程序被消灭，一定有相变发生。只是 q 值不同时相变的级数不同， q 比较小时是二级相变， q 比较大是一级相变。二维时 $q < 4$ 是二级相变，而三维时 $q < 2$ 是二级相变。而反铁磁的情况要复杂一些。通常在 q 很小的时候因为每个格点可以选择的状态并不多，低温时有可能会有长程序形成；在 q 很大的情况下每个格点可以选择的状态很多，通常即使在零温也不会存在长程序。在 q 很大时这一结论由Sokal和Salas[34]通过Dobrushin定理[35, 36]证明。通常认为存在临界的 q_c ，使得零温是相变临界点：(1) $q < q_c$ 通常低温有序，存在有限温相变。但是有例外情况，如三角格子和kagome格子上 $q = 2$ 时无序，没有相变发生。(2) $q = q_c$ 零温临界点，无相变。(3) $q > q_c$ 任何温度都无序，关联函数指数衰减。

表1.1列出了几种常见的晶格上的临界 q_c ，我们看到配位数跟 q_c 关系密切。Diced格子上 $q = 3$ 是人们最早发现的有部分有序的非阻挫系统，我们猜想是由于子格之间的不等价引起了部分有序，我们知道阿基米德格子的不同子格之间是完全等价的。

阿基米德格子是一类非常有趣的格子，如图1.1所示，二维平面上总共有十一种阿基米德格子。我们所熟悉的正方，三角，六角格子都属于阿基米德格子。阿基米德格子是指系统内的每个格点都跟其他格点等价的格子，所以首先一个要求是每个格点的配位数都相等的，除此之外每个格点所在的多边的种类

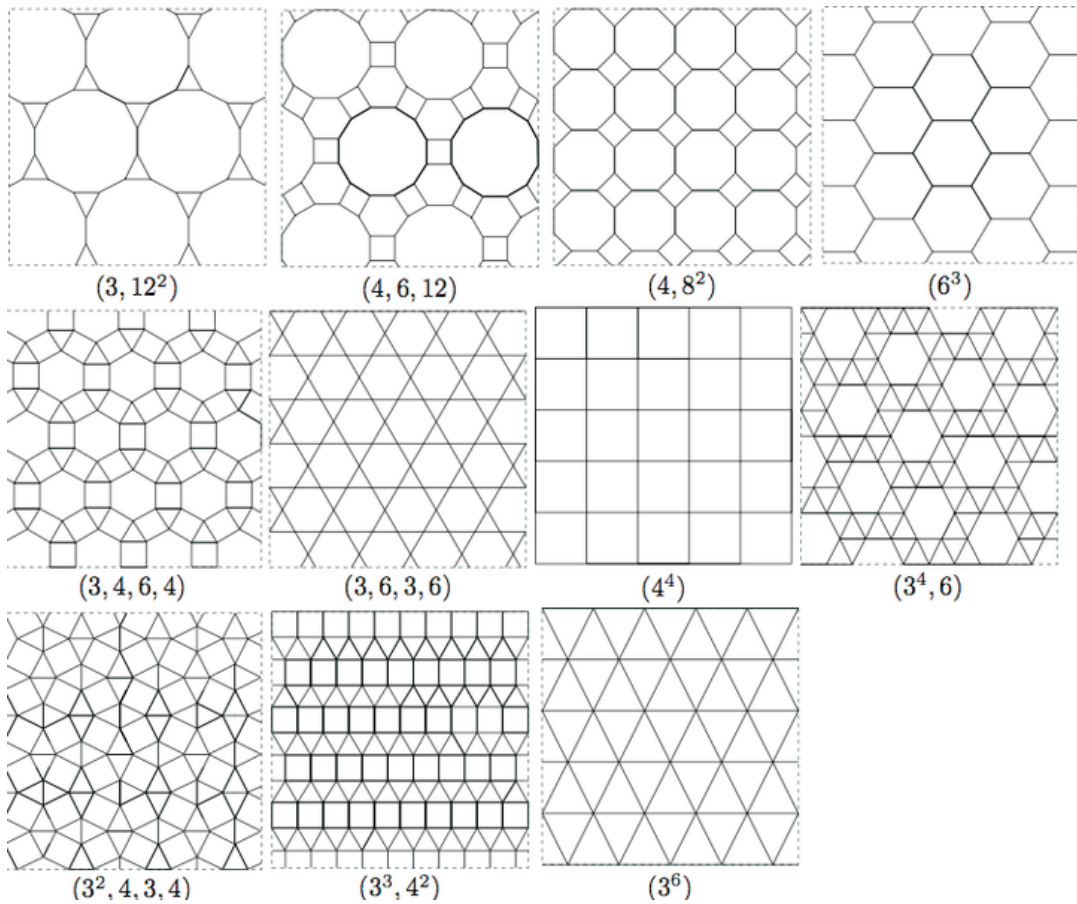


图 1.1: 二维平面上的阿基米德格子

和数目是相同的。如果阿基米德格子的配位数是 x 的话，那么这个格子上的边染色问题在颜色数大于等于 x 时都是存在的。

在晶格上每个多边形的中心加一个点，连接相邻的多边形中心的点之后得到的晶格就是对偶格子，对偶变换是互逆的。正方格子是其自身的对偶格子，而三角格子和六角格子互为对偶格子，所以这三种格子的对偶格子还是阿基米德格子，而另外的八种阿基米德格子的对偶格子一般称为Lave格子，如图1.2所示。

前面我们提到的diced格子是kagome格子的对偶格子，因而也是一种Lave格子，图1.2第二行第一个格子。Diced格子是双子格的，两套格子上的格点数不同，导致了部分长程序。图1.2第一行第三个格子是union-jack格子，是三子格的并且不同子格的格点数不同。通过计算我们发现union-jack 格子上有部分

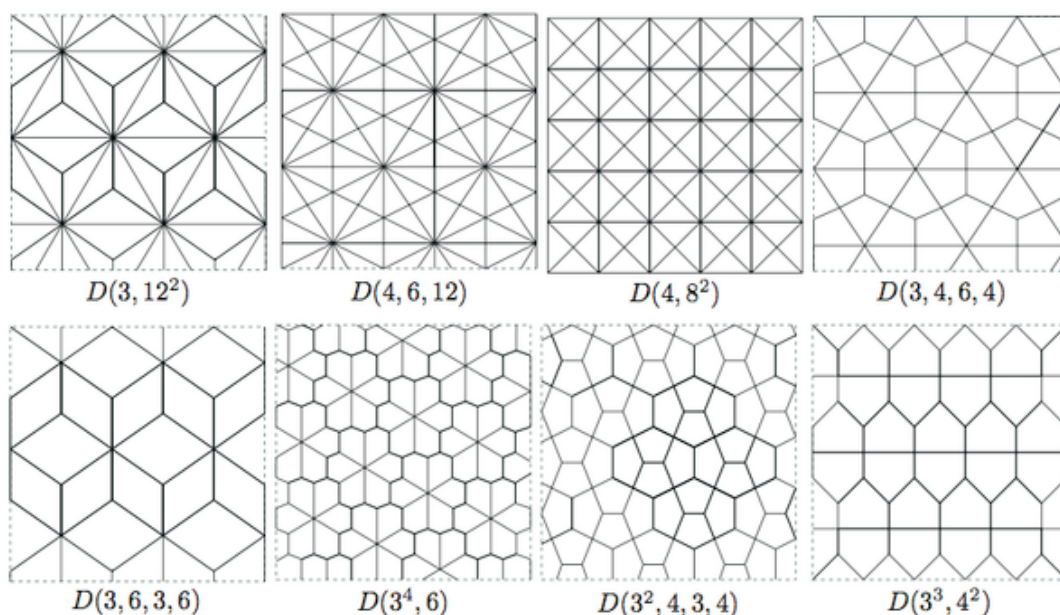


图 1.2: 二维平面上的阿基米德格子的对偶—Lave格子

长程序。同样做为Lave格子，centered-diced格子（图1.2第一行第二个格子）上也有部分长程序。我们还发现checker-board格子和dilute-centered-diced格子上的反铁磁Potts模型上都存在部分有序。

由四色定理我们知道平面上的格子最多分为四套子格，下面我们分别讨论不同子格数的晶格上面的反铁磁Potts模型。

双子格的晶格包括两类，一类是由偶数边的多边形构成的格子，如正方形是由四边形构成的，六角格子是六边形构成的，4-8格子（图1.1第一行第三个格子）是由四边形和八边形构成的，4-6-12格子（图1.1第一行第二个格子）是由四边形，六边形和十二边形构成的。全部由四边形构成的格子除了正方形外，还有diced（D(3-6)）格子和D(3-4-6)格子。在这类格子上不同子格是把每个多边形上的格点按照隔一个的原则来进行划分的，也就是每个多边形是由ABABAB...格点构成的。

另一类是decorated格子，也就是在格子每条边的中点加入一个点，新加入的点和原来晶格上的点分别属于不同的子格。decorated格子上的Potts模型都可以映射到初始格子上同样 q 值的铁磁Potts模型。

双子格的晶格上 $q = 2$ 一定有相变，低温时每个子格上的格点各占据一种

状态，高温时无序，中间发生相变。 $q = 3$ 时的情形比较复杂，很难通过直观的想象来判定其物理图像，零温时可以是无序、临界或者有序，典型的例子分别是六角格子、正方格子和diced格子。双子格晶格上在 $q = 4$ 时通常没有相变。

在平面格子中三子格的格子在其中占据重要地位，因为大多数都是三子格的。三子格晶格上一定有奇数边的多边形（三角形和五边形），但是不一定全由奇数边的多边形构成。三子格的晶格如果是由三角形构成的，那么一定是三子格确定的，例如三角格子，union-jack格子，和centered-diced格子。三子格确定也就是说晶格上不同子格的取法只有一种。这些格子上 $q = 3$ 的反铁磁Potts模型在低温时是每套格点各占据一种状态，存在长程序，随着温度的增长，热涨落会导致长程序消失，相变发生，并且子格的配位数不同的晶格还会发生两次相变。

另外大多数是三子格不确定的格子，如kagome, square-kagome, IA, IB, IIA和IIB型的dilute-centered-diced 格子，checkerboard格子以及内接3-4-6格子。这些格子上的 $q = 3$ 反铁磁Potts模型在零温时要么是临界的，要么是存在长程序的，要么是无序的。

三子格的格子上 $q = 2$ 是有阻挫的，零温时可能是无序，可能是临界，也可能会有序，如果是有序的话，那么一定是部分有序的。 $q = 4$ 时有一些晶格上可能会有长程有序，大多数格子是无序的，也有临界的情况，如三角格子。 $q = 5$ 时基本上都是无序，但也有例外，如centered-diced格子。

四子格的晶格可以通过在三子格中心加点而得到，不论是在所有的三角形还是部分的三角形上都可以得到四子格的晶格。但是这样得到的四子格都是子格不确定的，3-12格子（图1.1第一行第一个格子）的对偶格子D(3-12)格子就是（图1.2第一行第一个格子）通过在三角格子的每个三角形的中心加点而得到的，可以分为四套子格的晶格。因为三角格子上每个顶点分别属于不同的子格，而中心的点也必须跟三个顶点处于不同的子格，于是D(3-12)格子是四子格的。

D(3-12)格子在 $q = 2$ 和 $q = 3$ 时是有阻挫的，因为不可能存在一种状态使得每条边上的能量都是零。 $q = 4$ 时我们观察每个元胞，也就是有中心格点的三角形，中心格点的状态只需要跟边上的三个点不同就可以了，总共只有四种状态，所以只要外面的三个点状态确定了，中间格点也就确定了。这样我们知道三角格子上 $q = 4$ 的基态跟D(3-12)格子上的基态有一一对应的关系，三角格子在零温是临界的，D(3-12)在零温也一定是临界的。

表 1.2: 平面格子上反铁磁Potts模型临界 q_c

格子	平均配位数 ¹	q_c
Decorated Honeycomb	2.4	< 3
Decorated Square	2.667	< 3
Honeycomb	3	2.618
Square	4	3
Kagome	4	3
Diced	4	> 3
DcdicedIA	5	> 4
DcdicedIB	5	> 4
Checker-board	5.333	> 3
DcdicedIIA	5.6	> 4
DcdicedIIB	5.6	> 4
Triangular	6	4
Union-jack	6	> 4
Centered-diced	6	> 5

通过我们的研究，我们把表1.1进行扩展，得到表1.2，只是这里因为引入了非阿基米德格子，不同格点的配位数不同，所以配位数成为平均配位数。从表1.2我们可以看到一般来说晶格的平均配位数越大，其临界 q_c 也就越大，可配位数相同并不表示 q_c 一定相同，如正方格子和diced格子，三角格子和union-jack格子以及centered-diced格子，这表明晶格不同子格间的不等价性也对 q_c 有影响。

通过对一些非阿基米德格子上反铁磁Potts模型上的部分长程序的研究，我们发现部分有序大致有两种机制，一个是能量驱动，一个是熵驱动。能量驱动是由于局域的最小化，只要求系统的一部分格点上有序，这样的部分有序系统，因为那些无序格点的存在，零温熵仍然不为零，但是零温熵的数值却非常容易估计。另外一类熵驱动的部分有序，能量的最小化要求并不会长程序，但由于部分有序的状态数远远大于没有序的状态，因为系统的统计性而出现长程序。由于这类系统上，一些非完美序的状态也是基态，并且对状态数的贡献也是很重要的，零温熵的估计十分困难。如果把非完美序上不满足的长程序的

格点叫缺陷的话，区分能量驱动和熵驱动的标志就是缺陷存在与否。

Potts模型上缺乏严格解，蒙特卡洛和转移矩阵等数值方法的固有缺陷，以及人们在认识上的局限导致过去在这个方向上的工作十分有限。我们采用最近这些年发展出的张量重正化方法，对这些格子上的Potts模型进行了系统的研究。这些数值方法在计算配分函数时可以达到很高的精度，并且可以处理无穷大的系统，因而可以提炼出很多我们需要的信息。

1.4 张量相关重正化群方法

强关联电子系统是凝聚态物理的重要分支，研究的是相互作用比较强的电子体系。对于没有相互作用的系统，系统的每个部分都是相互独立的，也就相当于是单体问题。单体量子问题虽然不一定有严格解，但是数值上总是可以处理的。如果是相互作用比较弱的系统，我们可以采用微扰论来处理，对于相互作用比较强的，微扰论无法处理的系统，在其中有严格解的更是凤毛麟角，于是很多数值方法被发展出来试图解决这类问题。

这些数值方法包括严格对角化 (Exact Diagonalization, ED)，量子蒙特卡罗 (Quantum Monte Carlo, QMC)，动力学平均场 (Dynamic Mean Field Theory, DMFT)，数值重正化群 (Numerical Renormalization Group, NRG)，密度矩阵重正化群 (Density Matrix Renormalization Group, DMRG) 等。以及用来处理多体问题的耦合团簇方法 (coupled cluster method, CCM)，以及关联基函数理论 (correlated basis function theory, CBFT)。

量子信息和量子计算理论这些年得到极大的发展。纠缠是量子信息和量子计算中的重要资源，也是量子多体物理与经典多体物理的主要区别，对于量子纠缠的进一步认识也增进了人们对于量子多体问题的理解。纠缠熵，任意熵，保真度等概念可以很好地用来标识量子相变，而共形场论也告诉了我们这些物理量在量子临界区域的行为。从某种程度上来说，纠缠也就是关联，对于关联的进一步认识促进了张量网络算法的发展。

张量网络算法是基于张量网络态的，也就是一种把波函数表示成张量之间的连接的表示，在这个表示的基础上人们提出了各种相关的算法。量子网络算法最初主要是针对自旋系统的[37–39]，然而玻色子[40, 41]和费米子[42–47]相关的算法也被发展出来了。张量网络相关算法也跟变分蒙特卡罗相结合[48, 49]，来求解系统的基态，除了求解基态波函数，张量网络态的期望值也可以用蒙特

卡罗[50]来计算。

张量网络算法包括处理量子临界系统的纠缠重正化（Entanglement Renormalization, ER）算法[51, 52]，这个算法也可以用于有拓扑量子序的系统[53, 54]，二维系统[55]，可以处理有阻挫的自旋系统[56]，自由玻色子系统[57]，费米子系统[58]包括无相互作用[59]和有相互作用[60]情形，及任意子系统[61]。在用途方面可以计算时间演化问题[62]，研究边界临界现象[63]，以及规范对称性的系统[64]。

张量网络态可以用来表示有拓扑量子相变的系统[65]，也可以表示弦网凝聚态[66]，只是张量的微小变化并不一定对应着哈密顿量的微扰[67]。采用张量纠缠过滤重正化方法[68]就可以把一个系统不同的相进行区分，局域么正变换的波函数重正化群流[69]可以对拓扑量子相进行分类，其中一维自旋链有能隙的相，可以很好地进行分类[70, 71]，二维的分类也有一些进展[72]。使用张量网络算法研究拓扑量子相变的工作越来越多[73, 74]。

计算热力学量的算法有通过引入虚拟维度，然后做纯化的方法[75]，超算符方法[76]，以及White提出的算法[77]，最新的进展是线性张量重正化群（Linearized Tensor Renormalization Group, LTRG）[78]。热力学的问题某种程度上跟动力学问题是等价的，折叠算法[79]是一种典型的动力学算法。

严格解[80]的存在使得经典统计模型在相变的研究中占据重要地位，然而只有极少数的模型存在严格解。另外一些模型的临界指数等量可以通过重正化群和共形场论可以严格地得到相变的，对于更多的模型，只能通过数值计算来得到它们的性质。这些数值方法包括级数展开[81]，转移矩阵，蒙特卡罗。一些张量网络算法也可以用来研究离散的经典统计模型。

1.5 本论文的内容与结构

在本论文中我们把张量重正化方法用到经典统计模型上，研究反铁磁Potts模型上的部分有序的长程序。这样本论文后面的章节将包含两部分内容，第一部分包括第二章和第三章，我们将首先介绍张量网络态和与之相关的算法，及其在经典统计物理中的应用，第二部分包括第四章和第五章，主要讨论采用这些算法对反铁磁Potts模型的研究结果，分析了不同格子上长程序的发生机制。

第二章首先介绍矩阵乘积态，怎样把一个量子波函数写成矩阵乘积态，它

与密度矩阵重正化群之间的关系，周期性无限链和有限链上基态的求法，还介绍了纠缠投影对态，基态的投影算法，以及这个算法在六角格子上自旋1双线性双二次Heisenberg模型上的应用。

第三章我们先以Ising模型和Potts模型为例，说明怎样把经典统计模型的配分函数表示成张量网络形式，然后介绍了张量重正群和二次张量重正化群，以及时间演化块消灭算法，最后介绍这些算法在三角格子上Potts模型上的应用。

第四章利用张量重正化群和时间演化块消灭等算法，通过计算证实了diced格子上 $q = 3$ 反铁磁Potts模型上的部分有序导致的相变，接着猜想union-jack格子上 $q = 4$ 时也有类似机制的相变，数值计算结果表明union-jack格子上不但 $q = 4$ 有部分有序， $q = 2$ 和 $q = 3$ 时也存在。

第五章先讨论了centered-diced格子上从 $q = 2$ 到 $q = 5$ 时发生的部分有序，并跟union-jack格子上的结果进行对比和联系，接着讨论checker-board格子上 $q = 2$ 和 $q = 3$ 的部分有序，然后讨论四种diluted-centered-diced格子上从 $q = 2$ 到 $q = 5$ 的部分有序，最后对平面格子上的反铁磁Potts模型进行总结。

最后一章我们对本论文的内容进行了总结，并对未来的工作进行了展望。

第二章 张量网络态和相关算法

量子多体问题如凝聚态物理中的强关联电子体系，原子核物理和量子化学中都存在一个困难就是随着系统格点数的增长，希尔伯特空间的大小随之而指数增长。这样在进行数值计算的时候，计算格点数稍大的系统都无法进行，这就是所谓的指数墙问题。过去的几十年中人们发展了很多数值算法试图解决这一问题，密度矩阵重正化群是这些算法中处理一维问题精度最高的算法。起初人们不理解为什么DMRG的精度可以达到那么高，1995年Ostlund和Rommer[82, 83]发现DMRG实际上是以矩阵乘积态（Matrix product state, MPS）为形式的变分方法[84]，按照施密特系数进行截断，使得截断后的波函数最大程度地与截断前相似，保证了计算的精度。

矩阵乘积态最早被提出时是以有限关联态命名的[85]，我们知道量子波函数可以表示成一组完备正交基的叠加，在通常的波函数里叠加态前面的系数是普通的复数。MPS是把迭加系数用一组矩阵的乘积来表示。

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{m\}} \text{Tr}(A^1[m_1]A^2[m_2] \cdots A^N[m_N]) |m_1 m_2 \cdots m_N\rangle \quad (2.1)$$

这里A是 $D \times D$ 的矩阵， m 是这个系统的物理指标，有 d 个自由度，如果系统的格点数是 N ，那么MPS的参数个数是 $D^2 d N$ ，而通常的波函数需要的参数个数是 d^N ，MPS大大减小了所需的参数个数。MPS是完备的，一维的量子波函数都可以用 D 足够大的MPS来描述[86]。我们将在这一章详细讨论MPS的构成，以及各种性质，关于MPS的这些性质可以参看文献[87]。

MPS是一维的量子波函数，我们更感兴趣的是二维和更高维度的量子问题，于是很多二维量子波函数的张量网络态被提出了，下面我们将介绍这些态，首先是投影纠缠对态（Projected entanglement pairing state, PEPS）[88, 89]，也叫张量乘积态是MPS的二维直接推广。矩阵乘积态里矩阵的下标是跟近邻的格点的矩阵下标收缩的，在二维正方格子上每个格点的最近邻是四，如果我们把矩阵换成四阶张量，并使之与近邻格点的下标收缩，也就是把公式(2.1)中A换成 $D \times D \times D \times D$ 的张量，这样我们就得到了投影纠缠对态。通常认为有能隙的量子系统的纠缠熵满足面积定律，即纠缠熵与系统的边界成正

比，PEPS正是满足满足面积定律的状态，这也是它能够被广泛应用于各种问题的原因。除此之外跟MPS一样PEPS也大大减小了参数空间的大小，使得很多计算变成了可能。

有能隙的系统纠缠熵满足面积定律，而一维没有能隙的系统纠缠熵是随着系统尺寸对数发散的，Vidal提出纠缠重正化算法来处理无能隙超越面积定律的系统[51]。正如矩阵乘积态是密度矩阵重正化群衍生出的波函数，多尺寸纠缠重正化拟设（multi-scale entanglement renormalization ansatz, MERA）[90]是纠缠重正化衍生出的张量网络态。一维量子系统的MERA是二维的张量，一个维度是空间的，另一个是额外的维度相当于计算的时间尺度，是在纠缠重正化的过程中产生的，链长为 N 的系统，在额外维度上的长度是 $\log(N)$ ，额外维度上的不同层之间是由解纠缠算符和等距算符连接而成的。

PEPS在计算物理量的期望值时计算量很大，为了解决这一问题人们提出了弦键态（string bond state, SBS）[49, 91]，这种态的格点上定义了很多弦，每条弦由系统上的格点相连而成，弦可以是开放的，也可以是封闭的，每条弦上的格点可以在一条直线上，也可以在不同的直线上。每个格点可以有多个弦通过。仍然是跟MPS一样的基，每条弦上是一个矩阵乘积，波函数的迭加系数是所有矩阵乘积的积。这样MPS在计算上的优势就可以体现到二维波函数上。

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{m\}} \prod_s Tr(A^s[m_1] A^s[m_2] \cdots A[m_N^s]) |m_1 m_2 \cdots m_N\rangle \quad (2.2)$$

基于同样的计算量上的考虑而被提出的另一种二维张量网络态是纠缠块态（Entanglement plaquette state, EPS）[92]，这种态是首先把系统分成不同的块，每个块内的波函数都是PEPS，系统波函数是所有块波函数的直积。这样无论是计算多大的系统，计算量都取决于最大的子块的大小，在波函数本身允许的情况下（没有长程关联），把系统分成一个个足够小的子块，计算量会大为降低。

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{m^{p_1}\}} Tr(A_1^{p_1}[m_1^{p_1}] \cdots A_{N_{p_1}}^{p_1}[m_{N_{p_1}}^{p_1}]) |m_1^{p_1} \cdots m_{N_{p_1}}^{p_1}\rangle \cdots \sum_{\{m^{p_L}\}} Tr(A_1^{p_L}[m_1^{p_L}] \cdots A_{N_{p_L}}^{p_L}[m_{N_{p_L}}^{p_L}]) |m_1^{p_L} \cdots m_{N_{p_L}}^{p_L}\rangle \quad (2.3)$$

关联乘积态（correlator product state CPS）[93, 94]跟前面的两种波函数一样，把系统分成一个个的关联块，每个块的大小不定，跟SBS类似每个格

点可以同时属于几个块，不同的是这里没有辅助的虚拟空间，波函数直接是一堆系数的乘积，如果把SBS每个弦上的矩阵相乘，我们就可以得到CPS，所以SBS一定可以写成CPS，但是反过来则不一定，CPS的波函数如下所示：

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{m\}} C^{m_1 m_2} C^{m_2 m_3} \dots C^{m_{N-1} m_N} |m_1 m_2 \dots m_N\rangle \quad (2.4)$$

CPS形式的基态波函数也可以通过变分蒙特卡罗得到[95, 96]。

树图张量网络态 (tree tensor network, TTN) [97–99]也是一种二维张量网络态，跟PEPS不同的地方是TTN的图表示上没有回路，只有树形结构，于是很多MPS的性质在TTN上也具备，如可以正则化，正则化的方式，张量收缩的精度等。

最近这些年提出的二维波函数还包括在量子化学中用来描述分子波函数的完全图张量网络(complete-graph tensor network, CGTN)[100]，CGTN是一类费米子波函数，可以用来描述分子中的原子，在原子轨道基下， k 个轨道的波函数需要 2^k 个参数，而CGTN波函数只需要 $2k(k+1)$ 个参数。大大减小参数空间的CGTN可以有效地描述很多种量子波函数。

除此之外还有连续的MPS[101]，描述自由度连续的系统，如Lieb-Linger模型。无穷大MPS[102]也被提出了，可以成功运用于Haldane-Shastry模型。还有权重图态[103, 104]，和sequentially generated state[105]是PEPS的子集。

诸多的张量网络算法都基于这些张量网络态，关于这些算法的总结可以参看文献[106]。这些量子波函数都有其适合描述的系统，因而在研究具体的问题时，要根据所研究系统的特点，选取合适的波函数。这些波函数中最普适的是一维的MPS和二维的PEPS，我们将在这一章详细讨论这两种波函数的性质，及其基态求解的基本算法，更多的关于这两种波函数的算法可以参看文献[39]。

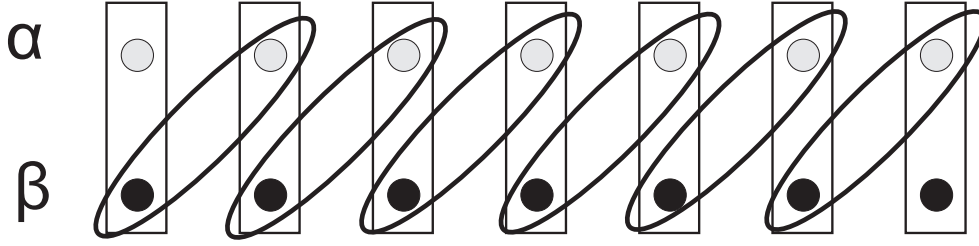


图 2.1: AKLT态的图形表示, 把自旋的1的态分解成两个1/2自旋的耦合 (灰色和黑色), 每个格点上的两个1/2自旋 (黑、灰) 分别与最近邻的1/2自旋 (灰、黑) 形成单态, 这里的方块表示每个格点上的自旋1的状态, 椭圆表示相邻格点形成的自旋单态。

2.1 矩阵乘积态

2.1.1 AKLT与MPS

我们首先讨论跟矩阵乘积态密切相关的AKLT态[107], 人们正是通过这个态理解了Haldane gap出现的原因, 存在隐藏的长程序也是这个态受到人们关注的原因。AKLT态是式(2.5)所示自旋1模型的基态:

$$H_{AKLT} = \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\frac{1}{3} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)^2 + \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \frac{2}{3} \right) = \sum_{\langle i,j \rangle} P_{ij} / 3 \quad (2.5)$$

这里算符 $P_{ij} = (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)^2 + 3\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + 2$, 因为每个格点自旋是1, 两个相邻格点的总自旋可以是0, 1, 2, 对应的 $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$ 的值分别是-2, -1, 1, 相应的算符 P_{ij} 的值是0, 0, 1, 因为这里 P_{ij} 的本征值只有0和1, 所以它是投影算符, 是把两个近邻格点的状态投影到总自旋为2子空间的投影算符。基态时为了满足能量最小化的要求, P_{ij} 的值应当取0, 也就是说近邻格点的总自旋只能是0和1。两个自旋1/2的态可以耦合成自旋1的状态, 如图2.5我们可以把每个格点上自旋1的态 S 拆成两个自旋1/2态的态 α 和 β 的耦合。令 α 和左边格点的 β , β 和右边格点的 α 形成自旋单态, 此时一对近邻格点可以看成是一个单态和两个自由的1/2之间的耦合, 也就是自旋0和两个自旋1/2的耦合, 那么总自旋只能是0和1, 而不可能是2, 这样就满足了哈密顿量基态的要求, 这就是所谓的AKLT态。

AKLT态的波函数可以表示成虚拟空间自旋单态的直积:

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \otimes \cdots \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (2.6)$$

如果定义矩阵

$$W = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

这样波函数可以表示成式(2.8)的形式，这里 α 和 β 是虚拟的自旋1/2的态，有两种取值，

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{\alpha,\beta\}} W_{\beta_1\alpha_2} W_{\beta_2\alpha_3} \cdots W_{\beta_N\alpha_1} |\alpha_1\beta_1\alpha_2\beta_2 \cdots \alpha_N\beta_N\rangle \quad (2.8)$$

$$= \sum_{\{\alpha,\beta\}} W_{\beta_1\alpha_2} W_{\beta_2\alpha_3} \cdots W_{\beta_N\alpha_1} \sum_{\{m\}} |m_1 m_2 \cdots m_N\rangle \langle m_1 | \alpha_1 \beta_1 \rangle \langle m_2 | \alpha_2 \beta_2 \rangle \cdots \langle m_N | \alpha_N \beta_N \rangle \quad (2.9)$$

$$= \sum_{\{\alpha,\beta\}} C_{\alpha_1\beta_1}[m_1] W_{\beta_1\alpha_2} C_{\alpha_2\beta_2}[m_2] W_{\beta_2\alpha_3} C_{\alpha_3\beta_3}[m_3] \cdots W_{\beta_N\alpha_1} |m_1 m_2 \cdots m_N\rangle \quad (2.10)$$

$$= \sum_{\{m\}} \sum_{\{\alpha\}} A_{\alpha_1\alpha_2}[m_1] A_{\alpha_2\alpha_3}[m_2] \cdots A_{\alpha_N\alpha_1}[m_N] |m_1 m_2 \cdots m_N\rangle \quad (2.11)$$

如式(2.9)再往这个式子里插入自旋1的Z方向分量为基的完备算符组。然后把CG系数写成矩阵的形式 $C_{\alpha_i\beta_i}[m_i] = \langle m_i | \alpha_i \beta_i \rangle$ ，并且定义 $A_{\alpha_i\alpha_{i+1}}[m_i] = \sum_{\beta_i} C_{\alpha_i\beta_i}[m_i] W_{\beta_i\alpha_{i+1}}$ ，那么我们就把AKLT态写成矩阵乘积态的形式了，式(2.11)，这里考虑周期性边界条件，这样的矩阵乘积态的矩阵分别为：

$$A[1] = \begin{pmatrix} 0 & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, A[0] = \begin{pmatrix} -1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix}, A[-1] = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -1/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \quad (2.12)$$

这样我们就得到了AKLT态的矩阵乘积态形式，相当于把波函数以自旋Z方向分量为本征矢展开，展开系数是一组矩阵乘积的迹。

2.1.2 MPS和DMRG

密度矩阵重正化群（DMRG）是目前计算一维量子系统基态最准确的方法，除了基态也可以计算系统热力学和动力学的性质，含时演化问题，动量空间的问题，也可以进行扩展从而处理二维问题，是一维低维的强大数值工具。我们以最基本的无限链长算法为例来介绍DMRG的做法。

首先我们构造出初始系统块和环境块，并在初始系统块和环境块上各加一个格点表示初始系统超块和环境超块。初始超块要足够小使得其哈密顿量可以

直接对角化，然后就可以进行重正化计算了，具体的步骤是：先对角化系统超块和环境超块的哈密顿量，得到基态波函数。由基态波函数构造系统块的约化密度矩阵，对角化约化密度矩阵。在约化密度矩阵的最大D个本征值对应的本征矢下，写出超块的哈密顿量。把现在的系统和环境的超块做为新的系统块和环境块，再每块上各加一个格点做为新的超块，重复以上步骤，最终就可以得到系统的基态。

我们以开放边条件的DMRG为例，说明它与MPS的关系。我们假设系统块只有一个点，如式(2.13)波函数可以在 S^z 本征态的基下展开，系统块加入一个格点后，波函数可以表示成式(2.14)的形式，不断增长系统块的格点，系统块的波函数可以依次成为式(2.15)和式(2.16)的形式，当系统块有 L 个格点时，波函数表示成式(2.17)

$$|\psi_{\alpha_1}^1\rangle = \sum_{m_1} A_{\alpha_1}^1[m_1]|m_1\rangle \quad (2.13)$$

$$|\psi_{\alpha_2}^2\rangle = \sum_{\alpha_1, m_2} A_{\alpha_1 \alpha_2}^2[m_2]|\psi_{\alpha_1}^1\rangle|m_2\rangle \quad (2.14)$$

$$|\psi_{\alpha_3}^3\rangle = \sum_{\alpha_2, m_3} A_{\alpha_2 \alpha_3}^3[m_3]|\psi_{\alpha_2}^2\rangle|m_3\rangle \quad (2.15)$$

.....

.....

$$|\psi_{\alpha_i}^i\rangle = \sum_{\alpha_{i-1}, m_i} A_{\alpha_{i-1} \alpha_i}^i[m_i]|\psi_{\alpha_{i-1}}^{i-1}\rangle|m_i\rangle \quad (2.16)$$

.....

.....

$$|\psi^L\rangle = \sum_{\alpha_{L-1}, m_L} A_{\alpha_{L-1}}^L[m_L]|\psi_{\alpha_{L-1}}^{L-1}\rangle|m_L\rangle \quad (2.17)$$

那么最后系统的波函数成为：

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{m\}} \sum_{\{\alpha\}} A_{\alpha_1}^1[m_1]A_{\alpha_1 \alpha_2}^2[m_2] \cdots A_{\alpha_{L-1}}^L[m_L]|m_1 m_2 \cdots m_L\rangle \quad (2.18)$$

这里的波函数是矩阵乘积态在开放边条件下的形式，第一个格点和最后一个格点的矩阵是向量的形式。于是我们看到DMRG是在MPS波函数形式下的变分法。下面我们将介绍MPS的一些性质，正是这些性质使得DMRG精度可以很高。

2.1.3 Schmidt分解

任何一个波函数都可以用一组完备正交基展开，如式(2.19)任何两体波函数都可以在两体的完备正交基下展开， C_{ij} 是展开系数，有两个下标可以看成是矩阵。如果我们先对系数矩阵 C 做奇异值(singular value decomposition,SVD)分解，奇异值分解的效果是把一个矩阵分解成一个幺正阵 U ，一个对角阵 λ 以及一个幺正阵 V 的乘积。这里 U 是 CC^\dagger 的本征向量，而 V 则是 $C^\dagger C$ 的本征向量， λ^2 是 CC^\dagger 和 $C^\dagger C$ 的本征值。做完奇异值分解，我们再把幺正算符 U 和 V 分别作用到两套基矢上，我们得到新的基矢 $|\tilde{\phi}\rangle$ 和 $|\tilde{\psi}\rangle$ ，幺正变换后的基矢仍然是正交完备的，此时我们就得到两体波函数的施密特(Schmidt)分解形式。这里 λ_i 是施密特系数，因为是平方根，所以一定是非负的。

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= \sum_{ij} C_{ij} |\phi^i\rangle |\psi^j\rangle = \sum_{ijk} U_{ik} \lambda_k V_{kj} |\phi^i\rangle |\psi^j\rangle \\ &= \sum_k \lambda_k \sum_i U_{ik} |\phi^i\rangle \sum_j V_{kj} |\psi^j\rangle = \sum_k \lambda_k |\tilde{\phi}^k\rangle |\tilde{\psi}^k\rangle \end{aligned} \quad (2.19)$$

有了施密特系数，我们可以定义系统的纠缠熵：

$$S = - \sum_i p_i \log p_i \quad (2.20)$$

这里 $p_i = \lambda_i^2$ 是约化密度矩阵的本征值，约化密度矩阵就是上面的 CC^\dagger 和 $C^\dagger C$ 。 p_i 满足归一性和正定性，因此纠缠熵满足凸性，恒正等熵的要求。在形式上纠缠熵跟香农熵是一样的。除了纠缠熵之外，我们还可以定义Renyi熵，同样也满足熵的各种性质：

$$S_\alpha = \frac{1}{1-\alpha} \log \sum_i p_i^\alpha \quad (2.21)$$

当 $\alpha = 1$ 时Renyi熵就是纠缠熵。

2.2 MPS的基态算法

矩阵乘积态的基态可以通过变分的方法求得[84]，但是这个方法的计算量很大，这一节我们将介绍在具有平移不变性的系统上的两种算法，一个是时间演化块消灭[108, 109]算法，用在无限链长的系统上[110, 111]是一种计算效率较高，精度很高并且编程比较容易的方法。另外一个是我们提出的[112]，用于周期性边界条件的有限链长算法。

2.2.1 正则化

MPS表示有‘规范自由度’，如果我们在MPS的任意两个矩阵之间插入一对互逆算符，整体上相当于插入单位阵，因此新的MPS仍然表示着跟原来一样的波函数。如果我们把MPS表示成：

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{m\}} Tr(\Gamma_{\alpha_1\alpha_2}^1[m_1]\lambda_{\alpha_2}^1\Gamma_{\alpha_2\alpha_3}^2[m_2]\lambda_{\alpha_3}^2\cdots\Gamma_{\alpha_N\alpha_1}^N[m_N]\lambda_{\alpha_1}^N)|m_1m_2\cdots m_N\rangle \quad (2.22)$$

这里 $A_{\alpha_i\alpha_{i+1}}^i[m_i] = \Gamma_{\alpha_i\alpha_{i+1}}^i[m_i]\lambda_{\alpha_{i+1}}^i$ ，因为我们可以断开任意一个键把一维链分成两部分，如果 λ^i 是沿着第 i 个键把系统分成两部分时的施密特系数，式(2.22)就是MPS的正则形式。那么满足正则形式的MPS的矩阵应该满足什么条件呢？首先把波函数表示成：

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha_{i+1}} \lambda_{\alpha_{i+1}}^i |\psi_{\alpha_{i+1}}^{L_i}\rangle |\psi_{\alpha_{i+1}}^{R_i}\rangle \quad (2.23)$$

这里

$$|\psi_{\alpha_{i+1}}^{L_i}\rangle = \sum_{\alpha_i m_i} \lambda_{\alpha_i}^{i-1} \Gamma_{\alpha_i\alpha_{i+1}}^i[m_i] |\psi_{\alpha_i}^{L_{i-1}}\rangle |m_i\rangle \quad (2.24)$$

$$|\psi_{\alpha_{i+1}}^{R_i}\rangle = \sum_{\alpha_{i+2} m_{i+1}} \Gamma_{\alpha_{i+1}\alpha_{i+2}}^{i+1}[m_{i+1}] \lambda_{\alpha_{i+2}}^{i+1} |m_{i+1}\rangle |\psi_{\alpha_{i+2}}^{R_{i+1}}\rangle \quad (2.25)$$

因为施密特分解的基是正交的，所以我们得到

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\alpha'_{i+1}}^{L_i} | \psi_{\alpha_{i+1}}^{L_i} \rangle &= \delta_{\alpha'_{i+1}\alpha_{i+1}} \\ &= \sum_{\alpha_i m_i} \lambda_{\alpha_i}^{i-1} \Gamma_{\alpha_i\alpha'_{i+1}}^i[m_i] \lambda_{\alpha_i}^{i-1} \Gamma_{\alpha_i\alpha_{i+1}}^i[m_i] \\ &= \sum_{\alpha_i m_i} \Gamma_{\alpha'_{i+1}\alpha_i}^i (\lambda_{\alpha_i}^{i-1})^2 \Gamma_{\alpha_i\alpha_{i+1}}^i = \delta_{\alpha'_{i+1}\alpha_{i+1}} \end{aligned}$$

同样地

$$\begin{aligned} & \langle \psi_{\alpha'_{i+1}}^{R_i} | \psi_{\alpha_{i+1}}^{R_i} \rangle = \delta_{\alpha'_{i+1} \alpha_{i+1}} \\ & = \sum_{\alpha_{i+2} m_{i+1}} \Gamma_{\alpha'_{i+1} \alpha_{i+2}}^{i+1} [m_{i+1}] \lambda_{\alpha_{i+2}}^{i+1} \Gamma_{\alpha_{i+1} \alpha_{i+2}}^{i+1} [m_{i+1}] \lambda_{\alpha_{i+2}}^{i+1} \\ & \sum_{\alpha_{i+2} m_{i+1}} \Gamma_{\alpha'_{i+1} \alpha_{i+2}}^{i+1} [m_{i+1}] (\lambda_{\alpha_{i+2}}^{i+1})^2 \Gamma_{\alpha_{i+1} \alpha_{i+2}}^{i+1} [m_{i+1}] = \delta_{\alpha'_{i+1} \alpha_{i+1}} \end{aligned}$$

这样我们得到正则化的条件

$$\sum_{m_i} A^{i\dagger}[m_i] (\lambda^{i-1})^2 A^i[m_i] = (\lambda^i)^2 \quad (2.26)$$

$$\sum_{m_i} A^i[m_i] A^{i\dagger}[m_i] = I \quad (2.27)$$

具有平移不变性的波函数的矩阵乘积态表示，不同格点的矩阵可以是一样的，这种情况下正则化条件成为：

$$\sum_m A^\dagger[m] (\lambda)^2 A[m] = (\lambda)^2 \quad (2.28)$$

$$\sum_m A[m] A^\dagger[m] = I \quad (2.29)$$

我们知道可以在矩阵乘积态的相邻两个矩阵中插入任意一对互逆阵，不会改变波函数，可以把这两个矩阵分别乘到两边的矩阵乘积态的矩阵上。可见矩阵乘积态的表示不是唯一的，我们可以把任意的表示化成正则化形式。

下面考虑怎样把一般的矩阵乘积态转换成满足正则化条件的表示。我们定义：

$$T_{xx',yy'} = \sum_m A_{xy}[m] A_{x'y'}^*[m] \quad (2.30)$$

如果我们求出 T 的最大本征值和最大本征向量 $TX = \eta X$ ， X 是 D^2 维的向量，可以把它表示成 $D \times D$ 维的矩阵的形式，于是有

$$\sum_m A[m] X A^\dagger[m] = \eta X \quad (2.31)$$

可以证明 X 一定是对称正定阵，于是我们可以对 X 做本征值分解 $X = UDU^\dagger$ ，然后定义：

$$\dot{A} = \eta^{-1/2} D^{-1/2} U^\dagger A[m] U D^{1/2} \quad (2.32)$$

可以证明 \dot{A} 满足正则化的第一个条件:

$$\sum_m \dot{A}[m] \dot{A}^\dagger[m] = I \quad (2.33)$$

接下来我们可以定义

$$T'_{yy',xx'} = \sum_m \dot{A}_{xy}[m] \dot{A}^*_{x'y'}[m] \quad (2.34)$$

然后求出 T' 的最大本征值 $T'Y = \zeta Y$, 相当于

$$\sum_m \dot{A}^\dagger[m] Y \dot{A}[m] = \zeta Y \quad (2.35)$$

同样地 Y 也是对称正定阵, 可以对 Y 做本征值分解 $Y = VD'V^\dagger$, 定义

$$\ddot{A} = \zeta^{-1/2} V^\dagger \dot{A}[m] V \quad (2.36)$$

我们发现 \ddot{A} 满足:

$$\sum_m \ddot{A}^\dagger[m] D' \ddot{A}[m] = D' \quad (2.37)$$

同时也满足

$$\sum_m \ddot{A}[m] \ddot{A}^\dagger[m] = I \quad (2.38)$$

此时 \ddot{A} 同时满足正则化的两个条件, 这样我们就把任意的矩阵化成满足正则化条件的矩阵, 并且跟原来的矩阵描述同样的波函数。这里的 D' 是对角阵, 它的矩阵元正是施密特系数。

如果我们把一个算符作用到矩阵乘积态上时, 矩阵的维数会增加, 当我们把一个矩阵乘积态正则化之后, 就可以根据施密特系数对矩阵乘积态的矩阵进行截断。

2.2.2 无限链长基态的求解

量子信息理论告诉我们局域的么正操作不改变系统的纠缠性。例如在两体系统中对其中一个做么正演化不会改变奇异值分解的奇异值, 如上所述基态可以通过把投影算符作用到任意的初始状态而得到。

$$|\Psi_0\rangle = \lim_{\beta \rightarrow \infty} e^{-\beta H} |\Psi\rangle \quad (2.39)$$

如果 $\beta = M\tau$ ，这里 τ 是很小的数，只要 M 足够大就可以保证 β 足够大。

$$e^{-\beta H} = e^{-\tau H} e^{-\tau H} \dots e^{-\tau H} \quad (2.40)$$

对于一维的只有最近邻相互作用的量子模型，哈密顿量可以写成如下的形式：

$$H = H_{12} + H_{23} + H_{34} + H_{45} + \dots \quad (2.41)$$

如果我们把哈密顿量通过奇偶拆成两部分 $H = H_{odd} + H_{even}$ ，其中

$$H_{odd} = H_{12} + H_{34} + \dots \quad (2.42)$$

$$H_{even} = H_{23} + H_{45} + \dots \quad (2.43)$$

这样每部分哈密顿量的所有项之间都是相互对易的。我们可以通过Trotter-Suzuki分解把投影算符分解，通常我们采用一阶和二阶分解。一阶的表达式是

$$e^{-\tau H} = e^{-\tau H_{odd}} e^{-\tau H_{even}} + o(\tau^2) \quad (2.44)$$

二阶分解的表达式是

$$e^{-\tau H} = e^{-\tau H_{odd}/2} e^{-\tau H_{even}} e^{-\tau H_{odd}/2} + o(\tau^3) \quad (2.45)$$

因为每一项的内部之间得到项都是互相对易的，所以投影算符又可以进一步表示成：

$$e^{-\tau H_{odd}} = e^{-\tau H_{12}} e^{-\tau H_{24}} \dots \quad (2.46)$$

$$e^{-\tau H_{even}} = e^{-\tau H_{23}} e^{-\tau H_{45}} \dots \quad (2.47)$$

这样我们就把投影算符分解成一个个局域的算符，每个局域算符作用到系统上的两个格点上。当 τ 很小时，算符 $e^{-\tau H}$ 可以看成是近似幺正的，局域幺正算符不会改变系统的纠缠性质，也就是说我们把每个局域的投影算符作用到波函数上时，不会改变这两个点和外面的纠缠性，用正则化的语言来说也就是外面的两个 λ 不变，我们只要让新产生的 λ 也满足正则化的条件就好。

我们以只有最近邻相互作用的自旋1/2的海森堡模型为例来说明求基态的具体步骤。首先随机地产生初始波函数，因为哈密顿量有平移不变性，且边界

条件是周期性的，因此波函数是两个格点平移不变的，只需要两个张量就可以描述波函数：

$$|\Psi\rangle = \text{Tr}(\lambda_{\alpha_1}^b A_{\alpha_1\beta_1}[m_1] \lambda_{\beta_1}^a B_{\beta_1\alpha_2}[m_2] \lambda_{\alpha_2}^b A_{\alpha_2\beta_2}[m_3] \lambda_{\beta_2}^a B_{\beta_2\alpha_3}[m_4] \lambda_{\alpha_3}^b \cdots) |m_1 m_2 m_3 m_4 \cdots m_{L-1} m_L\rangle \quad (2.48)$$

虚拟指标 α 的维数是 D ，物理指标 m 的维数是 d ，自旋 $1/2$ 时 $d = 2$ 。首先随机生成 D 维的向量 λ^a 和 λ^b ，以及 d 个 $D \times D$ 的矩阵 $A[m_1]$ 和 $B[m_2]$ 。

先把 $e^{-\tau H_{12}}$ 作用到波函数上，定义 $O_{m_1 m_2 m'_1 m'_2} = e^{-\tau H_{12}[m_1, m_2; m'_1, m'_2]}$ 我们有：

$$S_{\alpha_1 \alpha_2 m_1 m_2} = \sum_{m'_1 m'_2 \beta_1} O_{m_1 m_2 m'_1 m'_2} \lambda_{\alpha_1}^b A_{\alpha_1 \beta_1}[m'_1] \lambda_{\beta_1}^a B_{\beta_1 \alpha_2}[m'_2] \lambda_{\alpha_2}^b \quad (2.49)$$

然后把 S 写成矩阵的形式，并且做奇异值分解：

$$S_{\alpha_1 \alpha_2 m_1 m_2} = S_{\alpha_1 m_1, \alpha_2 m_2} = U_{\alpha_1 m_1, \beta_1} \Lambda_{\beta_1} V_{\beta_1, \alpha_2 m_2} \quad (2.50)$$

那么经过这次投影之后，新的张量定义为：

$$\tilde{A}_{\alpha_1 \beta_1}[m_1] = (\lambda_{\alpha_1}^b)^{-1} U_{\alpha_1 m_1, \beta_1} \quad (2.51)$$

$$\tilde{\lambda}_{\beta_1}^a = \Lambda_{\beta_1} \quad (2.52)$$

$$\tilde{B}_{\beta_1 \alpha_1}[m_2] = V_{\beta_1, \alpha_2 m_2} (\lambda_{\alpha_2}^b)^{-1} \quad (2.53)$$

这里新产生的指标 β_1 的维数是 Dd ，为了保证每次投影之后矩阵的维数不变，我们需要做截断，也就是按照奇异值的大小把 β_1 的维数截断成 D 。这一次投影之后，矩阵 A 和 B 还有 λ^a 发生改变，而 λ^b 不变。下一次投影的做法是一样的，只不过 λ^a 不变，而 λ^b 要改变。重复投影直到 λ 收敛，我们就得到基态波函数。

要是把 λ 分到每个矩阵上的话，那么每个矩阵里应该有一半，为什么在式(2.49)里外面的 λ 整个包含在内呢？我们知道在对波函数进行截断时，如果是按照施密特系数截断的话就可以保证截断是最优的。把矩阵乘积态正则化后得

到的 λ 就是施密特系数。两套子格的正则化条件是：

$$\sum_m \dot{A}[m] \dot{A}^\dagger[m] = I \quad (2.54)$$

$$\sum_m \dot{B}[m] \dot{B}^\dagger[m] = I \quad (2.55)$$

$$\sum_m \dot{A}^\dagger[m] \Lambda^a \dot{A}[m] = \Lambda^b \quad (2.56)$$

$$\sum_m \dot{B}^\dagger[m] \Lambda^b \dot{B}[m] = \Lambda^a \quad (2.57)$$

这里有 $\Lambda^a = (\lambda^a)^2$ 及 $\Lambda^b = (\lambda^b)^2$ ， \dot{A} 和 \dot{B} 都是把 λ 吸收以后的矩阵。跟我们上面的 A 和 B 的关系是 $\dot{A}[m] = A[m]\lambda^a$ ，以及 $\dot{B}[m] = B[m]\lambda^b$ ，所以正则化条件变成：

$$\sum_m A[m] \Lambda^a A^\dagger[m] = I \quad (2.58)$$

$$\sum_m B[m] \Lambda^b B^\dagger[m] = I \quad (2.59)$$

$$\sum_m A^\dagger[m] \Lambda^b A[m] = I \quad (2.60)$$

$$\sum_m B^\dagger[m] \Lambda^a B[m] = I \quad (2.61)$$

我们采用奇异值分解得到的新矩阵 \tilde{A} 和 \tilde{B} ，考虑到 U 和 V 是幺正阵，根据他们的正交关系，可以得到如下的条件：

$$\sum_m \tilde{B}[m] \Lambda^b \tilde{B}^\dagger[m] = I \quad (2.62)$$

$$\sum_m \tilde{A}^\dagger[m] \Lambda^a \tilde{A}[m] = I \quad (2.63)$$

每一步新生成的矩阵满足正则化条件的一半，而下一步投影时新生成的张量满足另一半的正则化条件。当然这是一个近似，尤其是投影的前几步，可是随着投影步数的增加，这种方法跟正则化达到的精度是一样的，可是时间代价却小的多。图2.2是两种方法投影得到基态的比较，横轴是迭代次数，左图和右图分别是两种方法算出的基态能和两个基态能的能量差。如果只看能量的话几乎看不出两种方法的差别，如果观察能量差的图，我们可以看到两种方法在迭代次

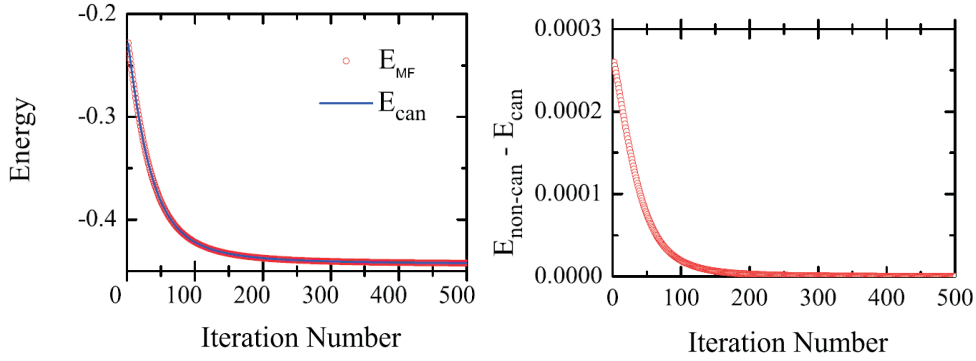


图 2.2: 左: 自旋1/2海森堡链的基态能, 正则化和iTEBD结果比较, 蓝色实线是正则化随着迭代步数的变化, 红色圆圈是iTEBD得到的能量, 两个方法结果基本相同; 右: 两种方法的能量差随着迭代次数的变化, 在最初的100步两种方法还有些差别, 随着迭代次数的增长, 两种方法几乎没有什么差别。

数足够多时几乎没有差别, 只是在迭代的前几步正则化得到的状态更接近基态。

得到了基态波函数, 我们就可以计算任何我们感兴趣的物理量, 我们以作用在格点1上的单体算符 O_1 为例说明怎样计算物理量的值。

$$\begin{aligned} \langle \Psi | O_1 | \Psi \rangle = & \sum_{m, \alpha, \beta} \sum_{m', \alpha', \beta'} A_{\alpha'_1 \beta'_1} [m'_1] B_{\beta'_1 \alpha'_2} [m'_2] \cdots B_{\beta'_L \alpha'_1} [m'_L] A_{\alpha_1 \beta_1} [m_1] B_{\beta_1 \alpha_2} [m_2] \\ & \cdots B_{\beta_L \alpha_1} [m_L] \langle m'_1 | O_1 [m'_1, m_1] | m_1 \rangle \langle m'_2 | m_2 \rangle \cdots \langle m'_L | m_L \rangle \end{aligned} \quad (2.64)$$

如果定义:

$$T_{\alpha\alpha', \beta\beta'}^A = \sum_m A_{\alpha\beta} [m] A_{\alpha'\beta'} [m] \quad (2.65)$$

$$T_{\beta\beta', \alpha\alpha'}^B = \sum_m B_{\beta\alpha} [m] B_{\beta'\alpha'} [m] \quad (2.66)$$

$$\tilde{T}_{\alpha\alpha', \beta\beta'}^A = \sum_{mm'} \langle m' | O [m', m] | m \rangle A_{\alpha\beta} [m] A_{\alpha'\beta'} [m'] \quad (2.67)$$

那么 O_1 的期望值变成:

$$\langle \Psi | O_1 | \Psi \rangle = \sum_{\alpha, \beta} \tilde{T}_{\alpha_1 \alpha'_1, \beta_1 \beta'_1}^A T_{\beta_1 \beta'_1, \alpha_2 \alpha'_2}^B T_{\alpha_2 \alpha'_2, \beta_2 \beta'_2}^A \cdots T_{\beta_L \beta'_L, \alpha_1 \alpha'_1}^B \quad (2.68)$$

物理量的期望值变成矩阵的乘积, 只不过矩阵的维数是原来矩阵乘积态矩阵的平方。

2.2.3 周期性有限链长基态算法

对于无穷大的系统，边界条件对于物理的影响不大，但是在有限长的链时，边界的影响就非常重要了，边界的存在会引入边界效应，而周期性边界条件会消除边界效应，在平移不变的系统保持平移不变性，更容易推广到无穷大的情况。iTEBD是无穷长链周期性边条件的算法，对于有限链长有各种变分的算法。可是变分法的计算是非常大的，虽然后来Pippan等人[113]引入SVD的技巧改进了算法使得计算量降低，有限链长的效率还是比iTEBD要低。还有[114]也是一种有限链长的算法。

我们从AKLT的波函数可以看到对于周期性边条件，链长对MPS的矩阵没有影响，也就是不论链长是多长，MPS的矩阵都是一样的。可以把从无穷长链MPS的矩阵直接用于有限链长。这样有限链的效率就得到很大提高。我们[112]在反铁磁海森堡模型上测试了这一结论。具有平移不变性的波函数可以用具有平移不变性的MPS来表示，所以反铁磁周期性海森堡模型只需要用两个矩阵来表示(公式(2.69))。

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{m\}} Tr(A[m_1]B[m_2] \cdots A[m_{N-1}]B[m_N])|m_1 m_2 \cdots m_{N-1} m_N\rangle \quad (2.69)$$

iTEBD的误差来自于两方面，一是每次对D做截断所带来的误差，另一个是Trotter-Suzuki分解带来的误差。截断误差可以通过提高D来减小，而Trotter-Suzuki误差可以通过减小 τ 以及采用高阶Trotter-Suzuki分解来减小。

我们首先采用iTEBD方法得到的矩阵作为有限链长的矩阵，计算了自旋1/2海森堡模型基态能的相对误差对矩阵保留维数D在不同 τ 时的依赖关系。不同链长的基态能可以通过严格对角化得到，基态能的误差就是跟这个结果比较而得到的。在矩阵维数D比较小的情况下误差主要来源于截断误差，当D增大到一定程度，相对误差不再随着D的增加而变化，而由Trotter-Suzuki误差决定。我们还计算了自旋1的海森堡链，结果与自旋1/2类似，我们可以得到相同的结论。区别在于相同D时自旋1的相对误差要高一些，D很大时相对误差减小。

还计算了在D相同时相对误差随着不同系统长度的变化，可以看到不同D的相对误差几乎不随着系统的尺寸而变化。而相对误差是正比于 τ^2 ，符合我们以上的分析。为了消除Trotter-Suzuki分解带来的误差，我们把无穷链长DMRG算法得来的矩阵做为有限链长的矩阵。我们的计算还包括是两种方

法在不同 D 时自旋 $1/2$ 海森堡模型基态能的相对误差。从结果可以看到无限长DMRG和iTEBD的结果大致相当，大体都由截断误差决定。

2.3 投影纠缠对态及其基态算法

矩阵乘积态的二维推广，是张量乘积态，最早被称为顶角矩阵乘积假设[115]，也叫纠缠投影对态[88]，被用来求解三维经典模型的配分函数[116, 117]，及无穷大量子问题上[118]。跟MPS一样PEPS也是辅助空间上的态形成最大纠缠态，因而叫做投影纠缠对态。PEPS态满足纠缠熵的面积定律，这是PEPS得到广泛应用的原因。除此之外，波函数的参数是 NdD^4 ，跟别的波函数比大大的减少，这也是其得到广泛应用的原因。很多量子波函数可以用PEPS来表示，如团簇态（cluster state），toric code和共振价键态（AKLT的二维推广）。

$$|\Psi\rangle = Tr \prod_{i \in A, j \in B} \lambda_{\alpha_i}^x \lambda_{\beta_i}^y \lambda_{\gamma_i}^z A_{\alpha_i \beta_i \gamma_i} [m_i] B_{\alpha_j \beta_j \gamma_j} [m_j] |m_i m_j\rangle \quad (2.70)$$

PEPS的基态可以通过变分法求得[88]，具体的方式是变分某一个张量时，固定其他张量不变，然后逐点扫描。变分法的缺点是算不了太大的系统。除此之外有我们下面要介绍的投影方法[119]，这个方法被用来求解二维格点模型的基态，并研究上面的量子相变，如六角格子上的各向异性Heisenberg模型[120]，正方格子上的XXZ模型[121]，以及自旋1的Bilinear-Biquadratic模型[122]。投影方法是对iTEBD做直接的二维推广，除此之外还有iPEPS算法[123]，这个算法被用来解决量子Compass模型[124]，以及硬核Bose-Hubbard模型[41]。PEPS基态的算法还有最近的提出的团簇更新方法[125]，这个算法计算了正方格子上的J1-J2的Heisenberg模型[126]。

如果我们把前面的iTEBD做简单的推广，就可以计算二维量子问题的基态。我们以六角格子上最近邻的海森堡模型为例，说明求解基态的方法。哈密顿量可以分成三部分，每部分内的算符都是互相对易的：

$$H = H_x + H_y + H_z \quad (2.71)$$

跟一维一样是把投影算符 $e^{-\tau H}$ 作用到任意的状态上，这里一阶Trotter分解是：

$$e^{-\tau H} = e^{-\tau H_x} e^{-\tau H_y} e^{-\tau H_z} + o(\tau^2) \quad (2.72)$$

二阶Trotter分解的表达式是：

$$e^{-\tau H} = e^{-\tau H_x/2} e^{-\tau H_y/2} e^{-\tau H_z} e^{-\tau H_y/2} e^{-\tau H_x/2} + o(\tau^3) \quad (2.73)$$

先随机地产生初始波函数，也就是3个 D 维的向量 λ^x λ^y 和 λ^z 以及 d 个 $D \times D \times D$ 的张量 $A[m]$ 和 $B[m]$ 。

先把作用到 z 键的投影算符作用到格点1和2上，同样可以地定义算符 $O_{m_1 m_2 m'_1 m'_2} = e^{-\tau H_{12}[m_1, m_2; m'_1, m'_2]}$ ，作用到波函数上我们有

$$S_{\alpha_1 \alpha_2 \beta_1 \beta_2 m_1 m_2} = \sum_{m'_1 m'_2 \gamma_1} O_{m_1 m_2 m'_1 m'_2} \lambda_{\alpha_1}^x \lambda_{\beta_1}^y A_{\alpha_1 \beta_1 \gamma_1}[m'_1] \lambda_{\gamma_1}^z \lambda_{\alpha_2}^x \lambda_{\beta_2}^y B_{\alpha_2 \beta_2 \gamma_1}[m'_2] \quad (2.74)$$

然后把 S 写成矩阵的形式，并且做奇异值分解：

$$S_{\alpha_1 \alpha_2 \beta_1 \beta_2 m_1 m_2} = S_{\alpha_1 \beta_1 m_1, \alpha_2 \beta_2 m_2} = U_{\alpha_1 \beta_1 m_1, \gamma_1} \Lambda_{\gamma_1} V_{\gamma_1, \alpha_2 \beta_2 m_2} \quad (2.75)$$

那么经过这次投影之后，新的张量的定义是：

$$\tilde{A}_{\alpha_1 \beta_1 \gamma_1}[m_1] = (\lambda_{\alpha_1}^x)^{-1} (\lambda_{\beta_1}^y)^{-1} U_{\alpha_1 \beta_1 m_1, \gamma_1} \quad (2.76)$$

$$\tilde{\lambda}_{\gamma_1}^z = \Lambda_{\gamma_1} \quad (2.77)$$

$$\tilde{B}_{\alpha_2 \beta_2 \gamma_1}[m_2] = V_{\gamma_1, \alpha_2 \beta_2 m_2} (\lambda_{\alpha_1}^x)^{-1} (\lambda_{\beta_2}^y)^{-1} \quad (2.78)$$

这样新产生的指标 γ_1 的维数是 $D^2 d$ ，我们只需在奇异值分解时把维数截断成 D ，经过足够多次的投影我们就可以得到基态。得到了基态我们可以对基态的物理量进行计算。

如果要计算算符 O_1 的期望值，我们可以定义张量：

$$T_{\alpha\alpha', \beta\beta', \gamma\gamma'}^A = \sum_m A_{\alpha\beta\gamma}[m] A_{\alpha'\beta'\gamma'}[m] \quad (2.79)$$

$$T_{\alpha\alpha', \beta\beta', \gamma\gamma'}^B = \sum_m B_{\alpha\beta\gamma}[m] B_{\alpha'\beta'\gamma'}[m] \quad (2.80)$$

$$\tilde{T}_{\alpha\alpha', \beta\beta', \gamma\gamma'}^A = \sum_{mm'} \langle m' | O[m', m] | m \rangle A_{\alpha\beta\gamma}[m] A_{\alpha'\beta'\gamma'}[m'] \quad (2.81)$$

这样算符 O_1 的期望值成为：

$$\langle \Psi | O_1 | \Psi \rangle = \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \tilde{T}_{\alpha_1 \alpha'_1, \beta_1 \beta'_1, \gamma_1 \gamma'_1}^A T_{\alpha_2 \alpha'_2, \beta_2 \beta'_2, \gamma_1 \gamma'_1}^B T_{\alpha_2 \alpha'_2, \beta_3 \beta'_3, \gamma_2 \gamma'_2}^A \cdots T_{\alpha_L \alpha'_L, \beta_L \beta'_L, \gamma_L \gamma'_L}^B \quad (2.82)$$

也就是成为三阶张量的收缩。

一维因为任意剪断一个键我们就可以把系统分成不连接的两部分，可是二维我们无法做到这一点，我们无法做到二维的正则化。这种投影的方法

是iTEBD的二维推广，然而iTEBD是有正则化做为理论基础的，二维时由于没有正则化的良好定义，这个投影方法的稳定性会差一些。

我们用这个方法计算了六角格子和正方格子上的自旋1/2海森堡模型。正方格子跟六角格子的做法基本相同，只不过哈密顿量要拆成四部分，张量的阶数变成四阶。

六角格子上反铁磁海森堡模型的基态是尼尔序，我们计算了基态能和磁化强度，采用投影方法得到基态之后，可以用TRG和SRG计算得到物理量的期望值。我们用张量维数 $D = 8$ 的PEPS计算出的能量值跟蒙特卡罗结果相当。

我们用SRG计算的海森堡模型的基态和交错磁化强度，这里因为我们加入了好量子数，计算物理量时的截断维数可以取比较大。基态能随着PEPS张量维数 D 的增加越来越大，到了一定的 D 结果趋于一个常数。交错磁化强度的计算，不能采用我们计算基态能的波函数。因为哈密顿量有SU(2)不变性，而基态破缺了这种对称性，我们需要在投影时哈密顿量里加入一个小的磁场，使得对称性发生破缺。我们发现直接计算得到的磁化强度偏大，一方面是因为我们加的外场太大，另一方面是 D 取得不够大。

我们计算了 $D = 6$ 时在不同的外场大小下计算出波函数的磁化强度，我们可以采用外插法，得到零场时的磁化强度，也就是自发磁化强度，我们得到的大约是0.32，这跟自旋波的结果有一定的差异，是因为我们计算的 D 不够大。还有在不同 D 下计算的磁化强度，我们在不同 D 时进行插值，最终得到无穷大 D 时的磁化强度0.285，这个值跟其它方法得到的结果比较接近。

我们还计算了正方格子上的反铁磁海森堡模型，跟六角格子上一样，基态也是尼尔序，我们计算了基态能和交错磁化强度，并和其它方法得到的结果进行了比较，我们同样发现投影方法得到的基态能可以跟蒙特卡罗相比，而自发磁化强度需要用外插的方法才能得到合理的结果。投影方法可以成功地用于六角格子和正方格子上的Heisenberg模型。

2.4 spin-1 Bilinear-Biquadratic model

采用前面发展的投影算法，我们计算了六角格子上双线性双二次海森堡模型。我们考虑六角格子是因为在二维的平面格子中，六角格子的配位数最小，最接近一维因而最有可能存在非常规的量子相。这个模型在一维时的相图相对比较清楚，在二维时有平均场和蒙特卡洛计算的结果。模型的哈密顿量是：

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} [(\cos \theta) \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + (\sin \theta) (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)^2] \quad (2.83)$$

第一项是双线性项，也就是普通的海森堡模型项，第二项是双二次项，可调参数 θ 的存在使得这个模型包含了很多模型。 $\theta = 0$ 就是海森堡模型。当 $\theta = \pi/4$, $5\pi/4$ ，以及 $\pm\pi/2$ 时，哈密顿量有SU(3)不变性。当 $\theta_{\pm} = \pm \arctan 2$ 时，哈密顿量可以表示成：

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} ((\cos \theta) \vec{Q}_i \cdot \vec{Q}_j + \sin \theta) \quad (2.84)$$

这里 $\vec{Q}_i = (S_{ix}^2 - S_{iy}^2, \sqrt{3}S_{iz}^2 - 2/\sqrt{3}, S_{ix}S_{iy} + S_{iy}S_{ix}, S_{iy}S_{iz} + S_{iz}S_{iy}, S_{iz}S_{ix} + S_{ix}S_{iz})$ 是四阶算符，跟铁磁的自旋算符 $\vec{S} = \sum_i \vec{S}_i$ 一样，铁磁的二级矩算符 $\vec{Q} = \sum_i \vec{Q}_i$ 跟哈密顿量是对易的。但是反铁磁的二级矩算符 $\vec{Q}_s = \sum_i (-1)^i \vec{Q}_i$ 跟哈密顿量是不对易的。

一维时这个模型的相图很清楚，如图2.3左图所示：当 $-\pi/4 < \theta < \pi/4$ 时，系统处于Haldane相，激发态存在Haldane能隙，当 $\arctan \theta = 1/3$ ，模型的基态是AKLT态。在 $\theta = \pi/4$ 时，会发生一个连续的相变，使得系统进入三聚化的相。我们知道 $\theta = \pi/4$ 时哈密顿量具有SU(3)对称性，并且可以通过Bethe ansatz严格解。三聚化的基态存在的区间是 $\pi/4 < \theta < \pi/2$ ，激发态是无能隙的。当 $\theta = \pi/2$ ，一级相变会发生使得系统处于铁磁相。铁磁相在 $\pi/2 < \theta < 5\pi/4$ 区域存在，这个区域内激发态仍然是无能隙的。在 $\theta = 5\pi/4$ 时，系统要从无能隙的铁磁相到有能隙的二聚化相，因而相变是一级的。二聚化基态的存在区间是 $5\pi/4 < \theta < 7\pi/4$ ，当然也有人认为在 θ 稍大于 $5\pi/4$ 时存在非二聚化的液晶相。当 $\theta = 3\pi/2$ 时，模型也有Bethe ansatz严格解。从二聚化相到Haldane相的相变点 $\theta = 7\pi/4$ 处发生的相变是二级的，而且相变点是可积的。

二维的相图就不那么清楚了，在经典极限下（图2.3中图所示），相图分为四个区域： $-\pi/2 < \theta < \pi/4$ 时，系统处于反铁磁尼尔区（Antiferromagnetic, AFM）， $\pi/4 < \theta < \pi/2$ 是反铁磁二级矩区（Antiferro Quadrupolar, AFQ）， $\pi/2 < \theta <$

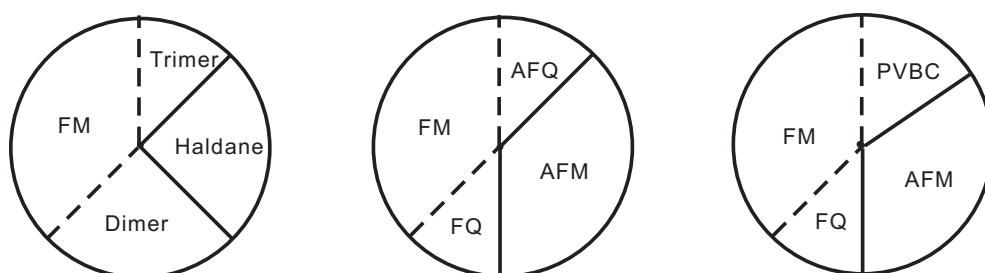


图 2.3: Bilinear-Biquadratic海森堡模型的相图，这里虚线表示一级相变，实线二级相变。左：一维链的相图；中：六角格子上经典极限的相图；右：六角格子上投影方法得到的相图。

$5\pi/4$ 是铁磁区 (Ferromagnetic, FM), $5\pi/4 < \theta < 3\pi/2$ 是铁磁二级矩区 (Ferro Quadrupolar, FQ)。我们的计算在FM, AFM, FQ区域跟经典极限的结果是一致的 (图2.3右图所示), 只是在经典AFQ区域有非常规的块共振价键晶体态 (plaquette valence bond crystal, PVBC), 从这个相到反铁磁尼尔相的相变点移动到 $\theta \approx 0.19\pi$

下面我们用计算结果来说明。首先可能的序有三种, 跟尼尔序不同, 这几种序是每六个格点形成一个元胞, 在投影过程中我们需要对六个张量进行投影, 初始化波函数时, 我们需要 $3 \times 6 = 18$ 个 $D \times D \times D$ 的张量, 3是因为自旋1的系统物理自由度为3。我们计算了不同 θ 时的基态能及其导数, 从而确定相图。从的基态能曲线可以看到, 基态能在 $\theta = -3\pi/4$ 和 $\theta = \pi/2$ 时有kink, 同时可以看到基态能导数的曲线在这两个点是不连续的, 因而这两个点会发生一级相变。基态能导数的曲线上在点 $\theta = -\pi/2$ 以及小于 $\theta = \pi/4$ 的地方有kink, 所以这两个地方会有二级相变。

我们还计算了序参量, 磁化强度和交错磁化强度。磁化强度在 $\pi/2 < \theta < 5\pi/4$ 时不为零, 其它区域都为零, 这跟经典极限的铁磁区域是一样的。而交错磁化强度在 $-\pi/2 < \theta < 0.2\pi$ 时非零, 反铁磁相在这个区域存在, 跟经典极限不同的是右边的边界不同。还有四级矩和交错四级矩。四级矩在 $-\pi/2 < \theta < 0.2\pi$ 区间非零, 这里面包含了铁磁和反铁磁区域, 这是合理的因为 S_{iz} 的本征态也是 S_{iz}^2 的本征态。除了铁磁和反铁磁区间外的 $-3\pi/4 < \theta < -\pi/2$ 正是经典极限下的铁磁四级矩区域。而反铁磁四级矩在整个相图上都为零, 也就意味着不存在反铁磁四级矩相, 这正是跟经典极限不同的地方。铁磁相到其他两个相的序参量变化是不连续的, 这两个相变点发生的是一级相变, 这也跟前面基态能

的分析得到的结论是一致的。而反铁磁相到其他两个相的序参量，交错磁化强度和铁磁四级矩都是连续的，因而相变是二级的。

我们发现经典极限下的四种序参量在 $\pi/4 < \theta < \pi/2$ 时全都为零，根据理论上的预测，我们认为这个区间很有可能出现块VPC态，于是我们计算了块VBC序参量 P ，这里 P 的定义是：

$$P = \frac{\sum_{\langle i,j \rangle \in red} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{2 \sum_{\langle i,j \rangle \in black} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j} - 1 \quad (2.85)$$

我们发现 P 在这个区间内不为零，这样我们就找到正确的序参量。为了确定这个相和反铁磁相的相变点，我们对交错磁化强度和 P 进行了更为仔细的计算，最后发现无论是交错磁化强度还是 P 在相变点 θ_d 附近都是连续变化的，同时确定 $\theta_d \approx 0.19\pi$ 。

我们采用前面的投影方法，计算了双线性双二次海森堡模型的相图，在经典极限的反铁磁四级矩区间发现了非常规的块VBC相。同时我们认为从这个相到反铁磁相的相变点是退禁闭的量子临界点。

第三章 经典统计物理与张量收缩算法

上一章我们介绍了张量网络算法在量子问题上的应用，我们发现对于二维的张量网络波函数投影纠缠对态（PEPS）归一化系数及物理量的计算，都属于二维张量网络的收缩的问题。一些二维经典统计模型的配分函数也可以表示成二维张量网络的收缩。这一章我们首先介绍离散统计模型，如Ising模型和Potts模型怎样表示成张量网络的形式，然后介绍收缩二维张量网络的算法，以及这些算法的实际应用。

配分函数能够表示成张量网络的二维统计模型包括Ising模型，Potts模型和Vertex模型，这些模型都是离散的统计模型。Ising模型是最简单的统计模型，只有两个分量，在一维和二维的大多数格子上都有严格解，严格解的存在为验证算法的精度和可靠性提供了依据。 q 态Potts模型可以看成是Ising模型的多分量推广， $q = 2$ 时等价于Ising模型， $q > 2$ 时只有正方格子上 $q = 3$ 的零温，和三角格子上 $q = 4$ 的零温有严格解。Vertex模型是定义在顶点上不同波尔兹曼权重的求和，只有进和出两个分量，很多顶点模型有严格解，如正方格子上的六顶点和八顶点模型。事实上很多二维统计模型的严格解也都是通过映射到Vertex模型而得到的。

矩阵和矩阵相乘得到的还是矩阵，如果我们把矩阵看成是二阶张量的话，二阶张量和二阶张量收缩后张量的阶数不变，并且维数也不变。三阶或者更高阶张量间的收缩，收缩之后张量的阶数会变大，如果是很多个格点张量网络的收缩，张量的阶数会变得越来越大，以至于计算无法进行，在热力学极限下张量网络的收缩问题是一个NP问题。然而我们可以采用一些数值近似的方法来进行解决这个问题，能解决这个问题的算法包括张量网络重正化群（Tensor Renormalization Group, TRG），二次张量重正化群（Second Renormalization Group, SRG），转角转移矩阵（Corner transfer matrix），块重正化（Plaquette renormalization），上一章提到的主要用来求一维量子问题基态的间演化块消灭算法（time evolving block decimation），以及最近提出的基于高阶SVD分解的张量重正化群方法。

张量重正化群是2007年Levin和Nave^[127]提出的一种实空间的粗粒化方法，在张量的收缩过程中保持张量的阶数和几何结构不变，张量的维数会增大。但

是我们可以采用SVD分解，对张量的维数进行截断。这种方法的误差主要是在截断过程中产生的。

在张量重正化群的基础上，我们提出二次张量重正化群[128, 129]，在每一步重正化群的步骤中，考虑环境的影响，也就是把环境因素加入到截断的标准里，这样计算的精度可以大大地提高，与此同时计算量就会增加了，包括计算所需的内存和运算时间。对于热力学极限的系统，环境格点的数目也是无穷多个，为了提高运算效率，我们只需要计算有限个格点的环境。环境的选取是二次重正化群的关键。

转角转移矩阵最早是Baxter[130]在严格解时提出的，在数值方面也是Baxter提出了一种变分的相当于Krammers-Wannier近似的方法，随后Nishino和Okunishi[131, 132]提出了DMRG和CTM相结合的算法，在此基础上Orus和Vidal[133]对这个算法进行了改进，最近Orus又把转角矩阵推广成为转角张量[134]，以解决高于二维的问题。

块重正化群[135]是利用辅助张量对正方格子上的张量网络进行收缩的方法。以每四个格点组成的四边形为一个单元，在单元与单元之间的边上加入辅助的三阶张量，每四个单元组成更大的单元，大单元与大单元之间的边上也要引入辅助的三阶张量，这样就可以进行张量网络收缩了。

基于高阶SVD分解的张量重正化群[136]是最近提出的，跟张量重正化群一样，这个方法也可以做二次重正化，相对比于TRG这个方法最大的优势是在高温的推广。

时间演化块消灭算法（iTEBD）也可以用于二维张量网络的收缩，因为二维的经典问题与一维的量子问题的等价性。实际上这种方法跟求矩阵最大本征值的投影方法是一样的，求配分函数相当于是求转移矩阵最大的本征值，不同的是这里我们采用矩阵乘积态做为转移矩阵的本征向量。这种方法的好处是计算过程中误差不积累，因而可以达到较高精度。

这里我们将重点讨论张量重正化群、二次重正化群和时间演化块消灭算法，后面的几章我们将采用这些数值方法对反铁磁Potts模型进行研究。

3.1 经典统计模型的张量网络表示

3.1.1 Ising模型

相变的发生伴随着热力学函数的不连续，热力学函数是配分函数的各阶导数。导数不连续意味着一个配分函数有奇异性。可是配分函数是解析函数，也就是各阶导数都连续并可导的函数。起初人们不明白配分函数是否可以用来描述相变。1920年Wilhelm Lenz 让他的学生Ernst Ising 通过对后来被称为Ising模型的研究来回答这一问题。1925年Ising完成了他的博士论文，他严格求解了一维Ising模型，没有发现相变，并把这一结果推广到二维和三维，认为也不存在相变，于是得出配分函数无法描述相变这一结论。

直到1936年Peierls发现二维的Ising模型是有相变的，改变了人们的错误认识，八年之后的1944年Onsager给出二维Ising的严格解，确定相变确实发生。1952年杨振宁[137]严格计算了其自发磁化强度。1950年Wannier[138]给出三角格点上的严格解，因为六角格子是其对偶格子。Kagome格子上也可以通过Y - Δ以及Decoration-Itreation变换同六角格子相联系，相当于那两种格子也都严格解了。虽然一维以及二维多数格点上都有严格解，三维Ising模型至今没有严格解，2000年Sorin Istrail证明[139]严格解三维Ising模型是NP完全问题。

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i, \sigma_i = 1, -1 \quad (3.1)$$

Ising模型是最简单的统计模型，每个格点上的自旋可以取向上向下两种状态式(3.1)。当耦合强度J是正值，近邻格点的自旋倾向于平行，反之近邻格点倾向于反平行。一维Ising模型的配分函数可以表示成：

$$\begin{aligned} Z = \exp\{-\beta H\} &= \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \exp\{\beta J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} + \beta h \sum_{i=1}^N \sigma_i\} \\ &= \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \exp\{\beta J \sigma_1 \sigma_2 + \beta h \sigma_1/2 + \beta h \sigma_2/2\} \\ &\quad \exp\{\beta J \sigma_2 \sigma_3 + \beta h \sigma_2/2 + \beta h \sigma_3/2\} \cdots \exp\{\beta J \sigma_N \sigma_1 + \beta h \sigma_N/2 + \beta h \sigma_1/2\} \end{aligned}$$

如果我们定义矩阵 $S_{\sigma_i \sigma_{i+1}} = \exp\{\beta J \sigma_i \sigma_{i+1} + \beta h \sigma_i/2 + \beta h \sigma_{i+1}/2\}$ ，那么配分函数可以写成S矩阵的乘积。如果把矩阵T分解成 $S_{\sigma_i \sigma_{i+1}} = \sum_{\alpha_i} U_{\sigma_i \alpha_i} V_{\alpha_i \sigma_{i+1}}$ ，并

且定义 $T_{\alpha_{i-1}\alpha_i} = \sum_{\sigma_i} V_{\alpha_{i-1}\sigma_i} U_{\sigma_i\alpha_i}$ 那么配分函数变成:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\{\sigma_1 \cdots \sigma_N\}} S_{\sigma_1\sigma_2} S_{\sigma_2\sigma_3} \cdots S_{\sigma_N\sigma_1} = \text{Tr}(SS \cdots S) \\ &= \sum_{\{\sigma_1 \cdots \sigma_N\}} \sum_{\{\alpha_1 \cdots \alpha_N\}} U_{\sigma_1\alpha_1} V_{\alpha_1\sigma_2} U_{\sigma_2\alpha_2} V_{\alpha_2\sigma_3} \cdots U_{\sigma_N\alpha_N} V_{\alpha_N\sigma_1} \\ &= \sum_{\{\alpha_1 \cdots \alpha_N\}} \sum_{\{\sigma_1 \cdots \sigma_N\}} V_{\alpha_1\sigma_2} U_{\sigma_2\alpha_2} V_{\alpha_2\sigma_3} U_{\sigma_3\alpha_3} \cdots V_{\alpha_{N-1}\sigma_N} U_{\sigma_N\alpha_N} \\ &= \sum_{\{\alpha_1 \cdots \alpha_N\}} T_{\alpha_1\alpha_2} T_{\alpha_2\alpha_3} \cdots T_{\alpha_{N-1}\alpha_N} = \text{Tr}(TT \cdots T) \end{aligned}$$

二维Ising模型的配分函数同样可以表示为矩阵 S 的相乘。在正方格点上如果把每一行的物理指标当成一个指标，那么配分函数可以写成沿着列的矩阵相乘，但是此时矩阵的维数是 2^L ， L 是行方向的长度，随着系统尺寸的增长，这个维数是指数增长的，因而这种表示不实用。然而跟一维相同我们可以把横向和纵向的 S 矩阵分别分解成 $S_{\sigma_{i,j}\sigma_{i+1,j}} = \sum_{\alpha_{i,j}} U_{\sigma_{i,j}\alpha_{i,j}} V_{\alpha_{i,j}\sigma_{i+1,j}}$ 和 $S_{\sigma_{i,j}\sigma_{i,j+1}} = \sum_{\beta_{i,j}} U_{\sigma_{i,j}\beta_{i,j}} V_{\beta_{i,j}\sigma_{i,j+1}}$ 并且定义:

$$T_{\alpha_{i,j}\beta_{i,j}\alpha_{i+1,j}\beta_{i,j+1}} = \sum_{\sigma_{i,j}} U_{\sigma_{i,j}\alpha_{i,j}} U_{\sigma_{i,j}\beta_{i,j}} V_{\alpha_{i+1,j}\sigma_{i,j}} V_{\alpha_{i,j+1}\sigma_{i,j}} \quad (3.2)$$

那么配分函数可以表示成定义在正方格子上四阶张量的收缩。如果是其他格点，张量的阶数取决于格点的配位数，三角格子的六阶张量，而六角格子是三阶张量。除了这种表示之外，二维的配分函数还有另外一种表示方法，我们以正方格点为例。首先正方格子是由方块组成的，每个方块由四个自旋，每两个方块共用一对自旋。如果我们定义新的变量，

$$s_1 = \sigma_1\sigma_2,$$

$$s_2 = \sigma_2\sigma_3,$$

$$s_3 = \sigma_3\sigma_4,$$

$$s_4 = \sigma_4\sigma_1,$$

每一个方块上的哈密顿量可以表示成 $H_{\square} = J(\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_3 + \sigma_3\sigma_4 + \sigma_4\sigma_1)$ ，我们定义 $T_{s_1s_2s_3s_4} = e^{-\beta H_{\square}/2}$ 那么配分函数可以表示成

$$Z = \sum_{s_1s_2s_3s_4 \cdots} T_{s_1s_2s_3s_4} T_{s_1s_5s_6s_7} \cdots \quad (3.3)$$

这样配分函数又可以表示成定义在正方格点上四阶张量的乘积，但是此时张量不是定于在格点上而是定义在正方形的中心。如果是三角格子，因为三角形有三条边，配分函数表示成三阶张量的收缩，这个三阶张量定义在六角格子上，同样六角格子的配分函数是定义在三角格子上的六阶张量的收缩。这是因为三角格子和六角格子互为对偶格子，对偶变换是指把一个图上的多边形用点替换，点被多边形替换，边用边来替换。而正方格子是自对偶格子，所以对于每个格子都至少有两种方法定义配分函数。

在加磁场的情况下，上面的定义指保存了两个近邻格点间的信息，也就是两个格点的状态相同或者不同，这样做的好处是写出来的张量的维数比较小，但是每个格点的自旋信息却丢失了。为了保留每个格点的信息我们可以把变量 s 定义成：

$$s_1 = \sigma_1 + \sigma_2/2 + 5/2,$$

$$s_2 = \sigma_2 + \sigma_3/2 + 5/2,$$

$$s_3 = \sigma_3 + \sigma_4/2 + 5/2,$$

$$s_4 = \sigma_4 + \sigma_1/2 + 5/2,$$

3.1.2 Potts模型

Potts模型是Ising模型的多分量推广，加磁场的哈密顿量定义如式(3.4)，

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{\sigma_i \sigma_j} - h \sum_i \delta_{\sigma_i, 0}, \sigma_i = 0, 1, \dots, q-1 \quad (3.4)$$

磁场跟其中一个分量耦合。

与Ising模型不同的地方是二维Potts模型基本上只在临界点有严格解，如反铁磁 $q = 3$ 在正方格子上的零温以及反铁磁 $q = 4$ 在三角格子上零温有严格解，正方格子上铁磁Potts模型的临界点有严格解。 $q = 3$ 在正方格子上的零温与六顶点模型的特例冰模型是等价的。如果定义 $\nu = e^{\beta J} - 1$ ，其对偶格子上Potts模型的 ν' 满足 $\nu\nu' = q$ 。这样对于互为对偶的两种格子，相同 q 值的铁磁和铁磁，反铁磁和反铁磁能够互相映射。

跟Ising模型一样，我们可以定义 S 矩阵 $S_{\sigma_1 \sigma_2} = e^{\beta J \delta_{\sigma_1 \sigma_2}}$ ，只不过这里 S 矩阵的维数是 $q \times q$ ，做SVD分解后把矩阵重排，同样可以把二维的配分函数写成张

量网络表示。

同样Potts模型的配分函数也可以通过对偶格子上的变换得到。如果是在对偶格子上，那么变量代换变成：

$$\begin{aligned} s_1 &= \text{mod}(\sigma_1 - \sigma_2, q), \\ s_2 &= \text{mod}(\sigma_2 - \sigma_3, q), \\ s_3 &= \text{mod}(\sigma_3 - \sigma_4, q), \\ s_4 &= \text{mod}(\sigma_4 - \sigma_1, q), \end{aligned}$$

有外场时的

$$\begin{aligned} s_1 &= \sigma_1 q + \sigma_2 + 1, \\ s_2 &= \sigma_2 q + \sigma_3 + 1, \\ s_3 &= \sigma_3 q + \sigma_4 + 1, \\ s_4 &= \sigma_4 q + \sigma_1 + 1, \end{aligned}$$

把配分函数写成张量网络态后剩下的问题就是张量的收缩了。矩阵和矩阵的收缩（即矩阵相乘）后得到的仍然是矩阵，可是张量和张量收缩后张量的阶数会长，所以需要采用其他方法来做。我们使用的方法有张量重正化群，二次重正化群，时间演化块消灭算法。

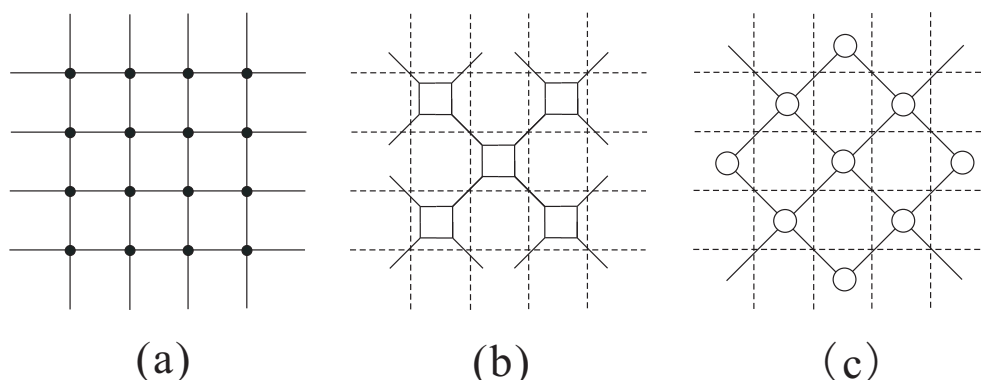


图 3.1: 正方格子上的TRG的分为两个步骤, 从(a)到(b)正方格子上不同子格的张量沿着不同的方向拉伸, 从(b)到(c)每四个张量收缩成一个新的四阶张量, 因此每步重正化之后系统的格点数是原来的1/2。

3.2 张量重正化群

张量重正化群 (Tensor Renormalization Group, TRG) 是一种实空间的粗粒化方法, 2007年由Levin和Nave[127]提出的用于收缩二维张量网络的算法。在不同的格点上具体做法会有些不同, 但都是首先把张量分解, 然后再重新组合, 在这个过程中保持张量的几何结构不变, 张量的数目在每一步重正化的过程中会减少。TRG可以用来收缩很多规则的张量网络, 在不同的格子上都可以进行这种操作。张量重正化群可以用于二维统计模型配分函数的求解, 如Shastry-Sutherland格子上的反铁磁Ising模型[140], 畸变Kagome格子上的Ising模型[141], union-jack格子上的Potts模型[142], 三角格子上的自旋玻璃问题[143], 二维量子问题波函数的收缩[65, 119], 同时在图像处理方面也有广泛的应用。下面我们以正方格子和六角格子为例, 说明这个算法的具体做法。

3.2.1 正方格点

如图3.1所示正方格子上的TRG分为两步, 首先正方格子是双子格的, 我们可以把正方格子上的所有格点分为两套子格, 然后把两套子格上的张量沿分别着两个不同的对角线方向拽开, 这样一个点变成两个点, 两个点之间产生新的指标, 四阶张量变三阶。此时我们得到定义在4-8格子上的三阶张量组成的张量网络。接下来第二步我们把三阶张量中旧的指标收缩掉, 每四个三阶张量收缩变成一个四阶张量, 于是我们又得到定义在正方格子上的四阶张量。这就

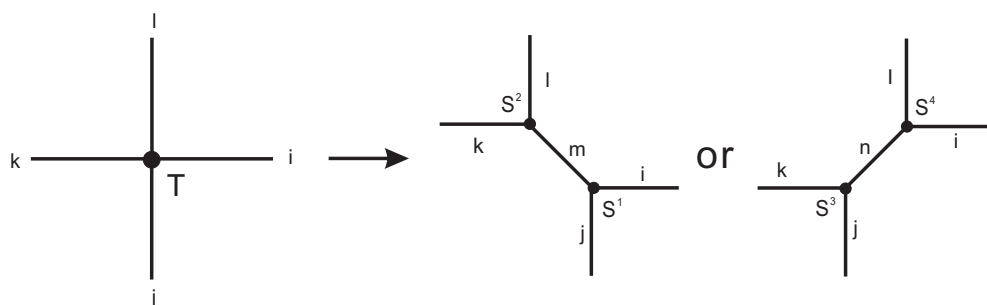


图 3.2: 正方格子上TRG的第一步, 把每个四阶张量沿对角线方向拉伸成为两个三阶张量, 两套子格上的格点分别沿不同的对角线方向

是TRG的每一步重正化的步骤, 晶格结构保持不变, 并且每一步之后格点数是原来的1/2, 如果重正化做了 $step$ 步, 那么系统的格点数正比于 2^{step} , 因此不需要太多的步骤我们就可以计算很大的系统尺寸。

第一步我们先把四阶张量沿着对角线方向拉伸成两个三阶张量如图3.2, 两套子格上的张量分别沿不同的对角线方向。把四阶张量分解成两个三阶张量的具体做法是先把四阶张量的指标两两当成一个指标, 相当于把四阶张量写成矩阵形式, 再把这个矩阵分解成两个矩阵的乘积。这样两个新的矩阵都有一个新的下标和一个旧的下标, 只要把旧的下标再分开成两个下标, 我们就把把一个四阶张量分解成了两个三阶张量。这个过程如式(3.2)所示:

$$T_{ijkl}^1 = T_{ij,kl}^1 = S_{ij,m}^1 S_{m,kl}^2 = S_{ijm}^1 S_{mkl}^2 \quad (3.5)$$

$$T_{ijkl}^2 = T_{jk,il}^2 = S_{jk,n}^3 S_{n,li}^4 = S_{jkm}^3 S_{mli}^4 \quad (3.6)$$

把一个矩阵分解成两个矩阵的乘积的方式有很多种, 我们采用SVD分解来实现, 也就是

$$T_{ij,kl} = U_{ij,m} \Lambda_m V_{m,kl} \quad (3.7)$$

如果下标 i, j, k, l 的维数是 D , 那么新产生的下标 m 的维数将是 D^2 , 令 $S_{ij,m}^1 = U_{ij,m} \sqrt{\Lambda_m}$ 和 $S_{m,kl}^2 = \sqrt{\Lambda_m} V_{m,kl}$ 。

$$T'_{mnpq} = S_{ijm}^1 S_{jkn}^4 S_{klp}^2 S_{liq}^3 \quad (3.8)$$

新的四阶张量由四个三阶张量的缩并而成。如图3.3左图和式(3.8)所示, 每个三阶张量旧的指标都在内部, 全被收缩掉了, 新四阶张量的四个下标全都是拉

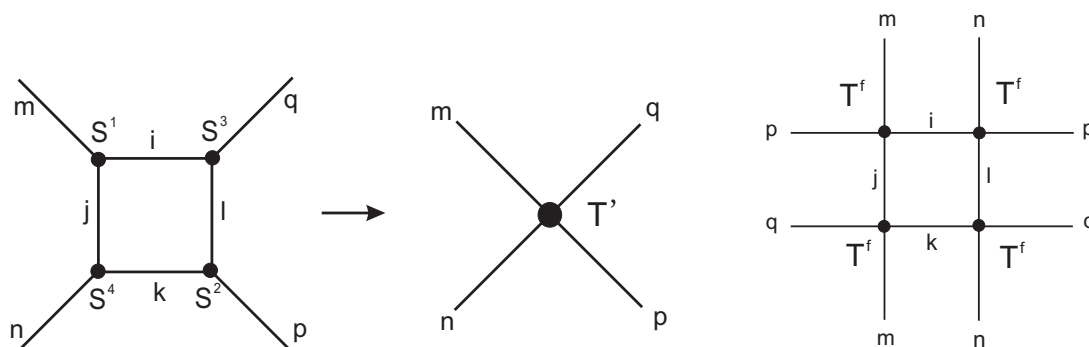


图 3.3: 左: 正方格子上TRG的第二步, 四个三阶张量合并成一个四阶张量。右: 最后一步TRG的做法, 把剩下的四个张量的指标全部收缩得到配分函数

伸时新产生的下标。因为新下标的维数是旧小标的平方, 每步重正化之后张量的阶数虽然跟原来一样, 但是张量上每个腿的维数却成为原来的平方了, 这样张量的维数会随着重正化步数的增长而指数增长。因此每一步重正化时都需要对张量的维数进行截断, 以保证张量的阶数和维数都不变。

我们可以在SVD分解时按照奇异值的大小进行截断, 这样每一步拉伸时新产生的下标维数跟旧的下标一样都是 D , 新产生的四阶张量的维数就能和原来一样了。

$$T_{ij,kl} = \sum_{m=1}^{D^2} U_{ij,m} \Lambda_m V_{m,kl} \approx \sum_{m=1}^D U_{ij,m} \Lambda_m V_{m,kl} \quad (3.9)$$

我们可以看到奇异值分解的优势。首先奇异值分解时的奇异值都是非负的, 这样我们只要按照奇异值的大小直接做截断。如果是本征值分解, 本征值会有正有负还可能有虚数导致没有一个好的截断标准。其他的分解方式也存在类似的问题。

我们把重正化步骤做足够多次就可以得到很大系统尺寸的配分函数了, 重正化的最后一步是当系统只剩下四个张量如图3.3右图所示, 只需要直接对张量进行收缩就可以了。

$$Z = \sum_{ijklmnpq} T_{ijpm}^f T_{plin}^f T_{kmqj}^f T_{qnkl}^f \quad (3.10)$$

有严格解的模型为检验数值计算的精度提供了依据, 正方格子上的Ising模型有严格解, 于是我们用TRG计算了正方格子上的Ising模型, 并把数值结果跟

严格解进行对比。严格解给出的相变的温度 $T_c = 4/\log(3 + 2\sqrt{2}) \approx 2.2692$ ，正方格点上自由能的严格解是：

$$F = -\ln(2 \cosh 2\beta J)/\beta - \frac{1}{2\pi\beta} \int_0^\pi d\phi \ln \frac{1}{2} (1 + \sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \phi}) \quad (3.11)$$

比热的表达式：

$$\frac{1}{\kappa} C = \frac{2}{\pi} (\beta J \coth 2\beta J)^2 \{2K_1(\kappa) - 2E_1(\kappa) - (1 - \kappa') [\frac{\pi}{2} + \kappa' K_1(\kappa)]\} \quad (3.12)$$

这里

$$\kappa = \frac{e^{2\beta J} - e^{-2\beta J}}{(e^{2\beta J} + e^{-2\beta J})^2} = \frac{2 \sinh 2\beta J}{\cosh^2 2\beta J} \kappa' = 2 \tanh^2 2\beta J - 1, \\ \kappa^2 + \kappa'^2 = 1$$

其中 $K_1(\kappa)$ 是第一类椭圆函数：

$$K_1(\kappa) = \int_0^{\pi/2} \frac{d\phi}{\sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \phi}} \quad (3.13)$$

而 $E_1(\kappa)$ 是第二类椭圆函数：

$$E_1(\kappa) = \int_0^{\pi/2} d\phi \sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \phi} \quad (3.14)$$

在TRG的计算中，影响计算精度的一个是重正化的步数，一个是截断维数。重正化的步数控制的是系统的尺寸，我们计算了 $D_{cut} = 10$ 时不同步数下的结果，如图3.4左图所示我们计算了不同步数下的自由能，可以看到几乎没有什么差别，但是如果我们观察右图的比热曲线，可以看到 $step = 10$ 和其它有显著差异，但是当步数大于20时几乎没有什么差别。在以后的计算中我们取 $step = 25$ 。

如图3.5，我们比较了严格解和TRG计算结果的精度，图3.5左图是自由能误差随着温度的变化，可以看到误差在远离相变点时较小，相变附件较大，在相变达到最大值，图中的虚线是严格解的相变温度，蓝色是 $D_{cut} = 30$ 的结果，红色是 $D_{cut} = 40$ 的结果，可以看到随着 D_{cut} 的增长，误差可以被有效地控制。图3.5右图是不同 D_{cut} 时计算出的比热，可以看到 $D_{cut} = 30$ 就可以给出很好的跟严格解符合的结果。

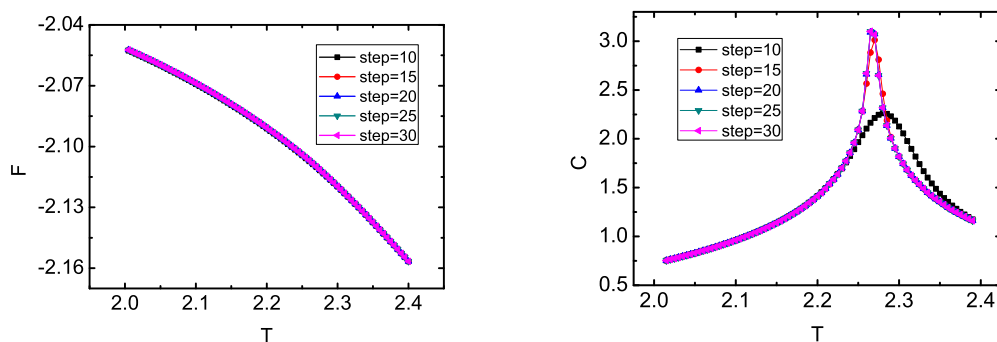


图 3.4: 正方格子上Ising模型的自由能（左）和比热（右），不同颜色的曲线是重正化步数不同的结果，自由能在不同步数时的差别不同，比热在的差别则比较明显

3.2.2 六角格点

六角格点上的TRG过程与正方格子类似，如图3.6所示也是分为两步，第一步(3.15)先把两个三阶张量合并成一个四阶张量，然后沿着垂直于原来公共边的方向拉伸成为两个三阶张量，我们得到图3.6b的定义在3-12格子上三阶张量构成的张量网络。第二步是(3.16)把每三个三阶张量收缩成为一个新的三阶张量，这样我们得到新的定义在六角格子上的张量网络。一步重正化就完成了，每步之后格点数变为原来的1/3。也就是说如果重正化了 $step$ 步，那么系统的格点数正比于 3^{step} 。

先把图3.6a所示的红色边上的两个三阶张量缩并成一个四阶张量，然后再把这个四阶张量拉伸成两个三阶张量，拉伸的方向和红色的边垂直。如图3.7和式(3.15)所示：

$$T_{ijm}^1 T_{klm}^2 = M_{ijkl} = M_{ik,jl} = S_{ikn}^1 S_{jln}^2 = S_{ikn}^1 S_{jln}^2 \quad (3.15)$$

每个四阶张量拉成两个三阶张量 S^1 和 S^2 ，如图3.6b所示，把每三个 S^1 或 S^2 合并成一个新的三阶张量。图3.8左图以及式(3.16)(3.17)表示怎样把三个三阶张量

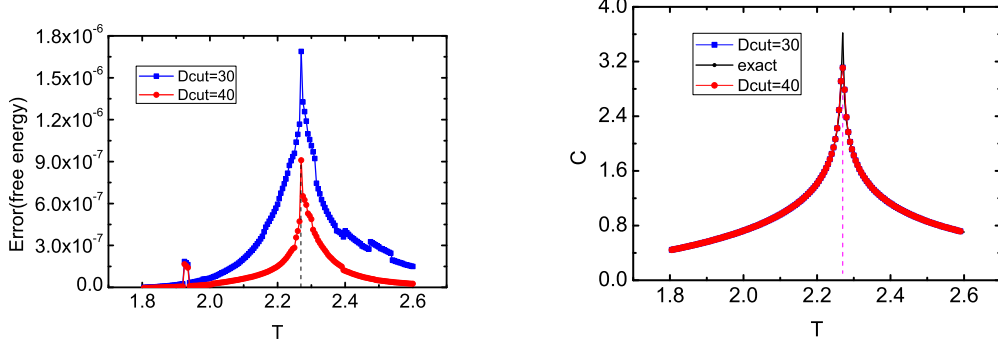


图 3.5: 左: 正方格子上Ising模型在不同截断维数时自由能的相对误差, 虚线是严格的相变点位置, 越靠近相变点相对误差越大; 右: 不同维数时的比热跟严格解比较, 黑色曲线是严格解的结果, 红色和蓝色的点分别是TRG在 $D_{cut} = 40$ 和 $D_{cut} = 30$ 的结果。

合并成一个三阶张量。

$$T_{lmn}^{1'} = S_{ijl}^1 S_{jkm}^1 S_{kin}^1 \quad (3.16)$$

$$T_{lmn}^{2'} = S_{ijl}^2 S_{jkm}^2 S_{kin}^2 \quad (3.17)$$

跟正方格子上一样, 重正化的最后一步是对几个张量直接进行收缩, 如图3.8右图所示, 六角格子上最后剩下六个张量, 我们同样采用周期性边界条件。

$$Z = \sum_{ijklmnopq} T_{ijq}^f T_{jko}^f T_{klp}^f T_{lmq}^f T_{mno}^f T_{nip}^f \quad (3.18)$$

跟正方格子上一样, 结果的精度依赖于重正化的步数和截断维数, 只要重正化步骤足够多, 这里同样取 $step = 25$, 这样结果就只依赖于截断维数。我们计算了三角格子上铁磁Ising模型, 来测试方法的正确性。如图3.9左图所示我们计算了Ising模型的比热, 蓝色是 $D_{cut} = 30$ 的结果, 红色是 $D_{cut} = 40$ 的结果, 紫红色是严格解给出的结果, 可以看到数值结果和严格解相一致。

Kagome格子上的张量收缩可以变成六角格子上的张量收缩问题。如图3.10所示, 第一步跟正方格子一样把四阶的张量拉伸成为两个三阶张量, 这些三阶张量定义在3-12格子上, 也就是六角格子上每一个重正化步骤的中间的

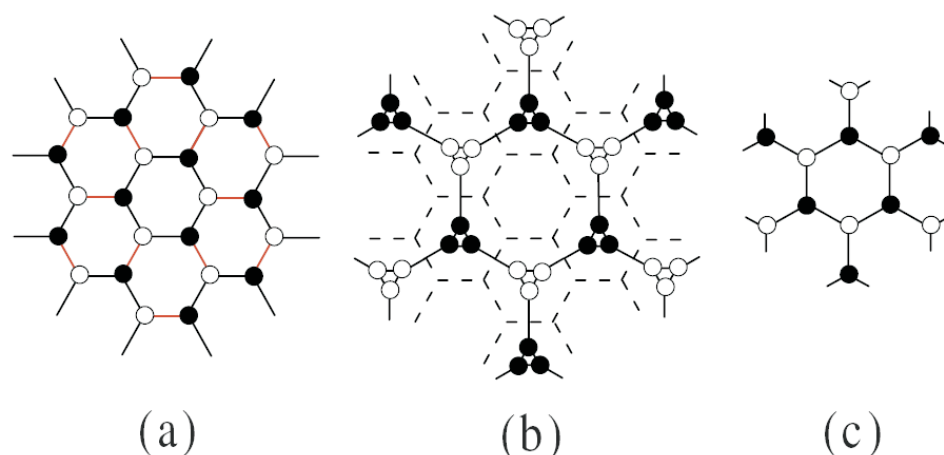


图 3.6: 六角格子上的TRG的分为两个步骤, 从(a)到(b)六角格子上两个格点沿着水平方向收缩, 然后把新产生的四阶张量沿着竖直方向拉伸, 从(b)到(c)每三个张量收缩成一个新的三阶张量, 因此每步重正化之后系统的格点数是原来的 $1/3$ 。

图3.10b, 只要再把每三个三阶张量的旧的指标收缩, 就可以得到定义在六角格子上的张量网络。然后采用六角格子上的TRG过程就可以完成Kagome格子上的张量网络的收缩。

我们可以看到, 从Kagome格子变到六角格子的过程中, 每个kagome格子上的三角形成为六角格子的一个点, 而kagome格子上每个点被两个三角形共用, 每个三角形上有三个点, 也就是说如果kagome格子上的格点数是 N 的话, 那么上面的三角形的数目是 $2N/3$, 这也是kagome格子上的格点数和六角格子上格点数的对应关系。如果我们做了 $step$ 步的六角格子重正化, 那么相当于处理了 $6 \cdot 3^{step}$ 个六角格子上的格点, 也就是处理了格点数为 $9 \cdot 3^{step}$ 的kagome格子。

如图3.9右图我们计算了kagome格子上的铁磁Ising模型, 蓝色和红色分别是 $D_{cut} = 30$ 和 $D_{cut} = 40$ 的结果, 紫红色是严格解的相变位置, 比热的发散位置与之符合的很好。

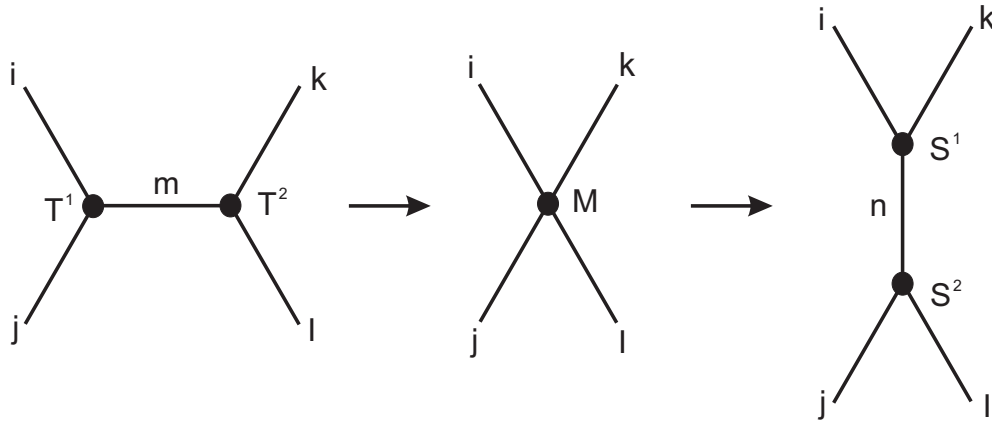


图 3.7: 六角格子上TRG的第一步, 先把两个三阶张量收缩成一个四阶张量, 然后把四阶张量沿着垂直于原来公共边的方向拉伸成为两个新的三阶张量

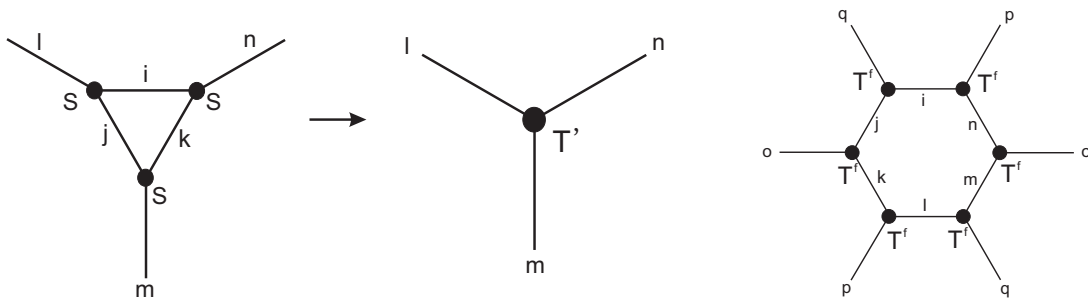


图 3.8: 左: 六角格子上TRG的第二步, 三个三阶张量合并成为一个三阶张量; 右: 最后一步TRG的做法, 把剩下的六个张量的指标全部收缩得到配分函数

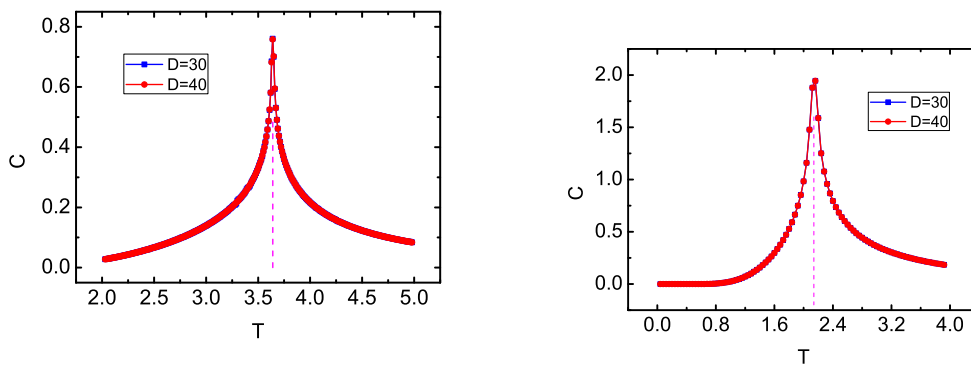


图 3.9: 三角格子和kagome格子比热, 紫红色是严格解的结果, 分别是3.6410和2.1433

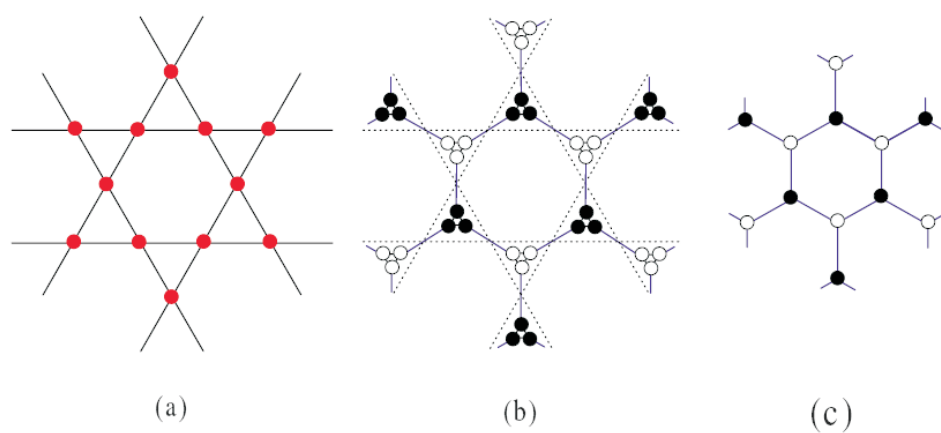


图 3.10: Kagome格子上的张量网络变成六角格子上张量网络有两个步骤, 从(a)到(b)每个四阶张量沿着kagome格子上三角形的方向拉伸, 从(b)到(c)每三个张量收缩成一个新的三阶张量, 这样就得到六角格子上的张量网络了, 再重复六角格子上TRG的步骤即可。

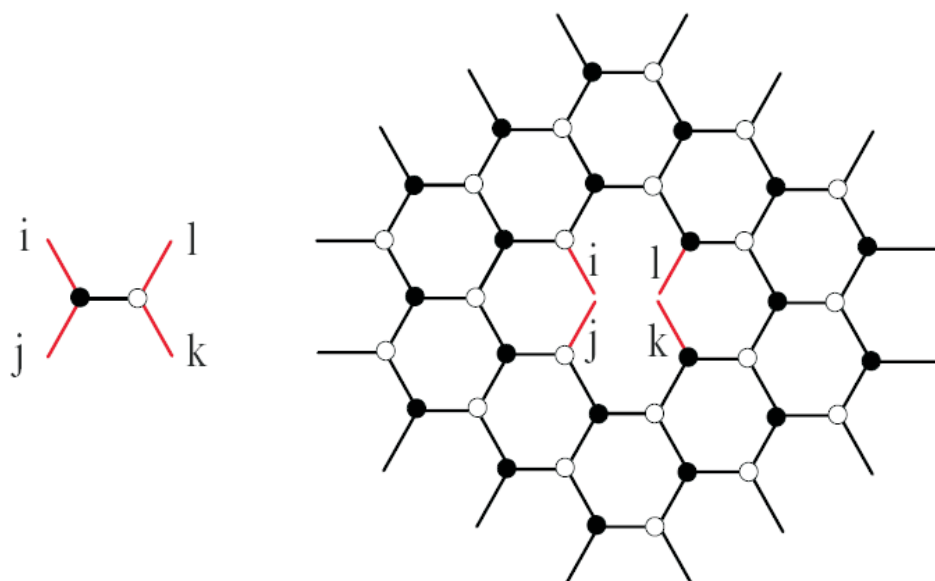


图 3.11: 二次张量重正化群方法中系统张量和环境张量的定义, 这里黑色的边表示这条边的指标要被收缩, 红色表示指标是开外的, 因此系统和环境张量的都是四阶张量

3.3 二次张量重正化群

TRG的计算过程中所有的误差都来自于截断, 截断方式的选取是决定计算成功与否的重要因素。TRG对张量的收缩是采用局域截断的方式, 我们提出[128, 129]考虑环境的影响来把对张量进行截断, 这就是二次张量重正化群 (Second Renormalization Group, SRG)。我们采用这个方法计算了三角格子上的Potts模型[144], diced格子上的反铁磁Potts模型[142], 在后面的章节中我们会详细讨论这些结果。

3.3.1 method

整个TRG的过程相当于不断地用维数较小的张量近似维数较大的张量, 也就是通过奇异值分解对M矩阵进行截断, 配分函数等于很多个张量的收缩, TRG的做法是对张量网络上每一个张量进行局域的截断。可是我们最终的目的是计算配分函数, 只要对配分函数做优化即可。

我们把配分函数写成一个局域张量和环境张量的乘积（图3.11所示）：

$$Z = \text{Tr} M M M^e \quad (3.19)$$

如果对环境张量 M^e 进行奇异值分解

$$M_{ij,kl}^e = \sum_n U_{ij,n}^e \Lambda_n^e V_{n,kl}^e \quad (3.20)$$

此时配分函数可以写成 $Z = \text{Tr} M U^e \Lambda^e V^e$ ，因为求迹时矩阵的顺序可以轮换，配分函数又可以表示成 $Z = \text{Tr} V^e M U^e \Lambda^e = (\Lambda^e)^{1/2} V^e M U^e (\Lambda^e)^{1/2}$ 如果这里我们定义

$$\tilde{M}_{n_1 n_2} = (\Lambda^e)^{1/2}_{n_1} V_{kl,n}^e M_{ij,kl} U_{ij,n}^e (\Lambda^e)^{1/2}_{n_2} \quad (3.21)$$

然后把配分函数写成 $Z = \text{Tr} \tilde{M}$ ，最小化配分函数的误差相当于最小化 \tilde{M} 的误差。如果我们把 \tilde{M} 做奇异值分解， $\tilde{M} = \tilde{U} \tilde{\Lambda} \tilde{V}$ ，截断时可以直接对 $\tilde{\Lambda}$ 进行截断。再把这个代入式(3.21)，可以得到

$$M = V^e (\Lambda^e)^{-1/2} \tilde{M} (\Lambda^e)^{-1/2} U^e \quad (3.22)$$

这样此时新的张量是

$$S^1 = V^e (\Lambda^e)^{-1/2} \tilde{U} (\tilde{\Lambda})^{1/2} \quad (3.23)$$

$$S^2 = \tilde{\Lambda}^{1/2} \tilde{V} (\Lambda^e)^{-1/2} U^e \quad (3.24)$$

也就是说现在我们首先计算环境张量 M^e ，再带入式(3.21)计算出 \tilde{M} ，然后做奇异值分解，进行截断后得到新的张量，这就是一个二次重正化的步骤。剩下的问题就在于怎么计算环境张量了，环境张量应当是其余所有张量的收缩，但是在实际的计算中我们不可能严格地计算出环境张量，否则严格计算配分函数就不是一个困难了。因此环境张量的计算是SRG中最为关键的一步。

最简单的考虑环境的方式是用 Λ 来近似代替，也就是

$$M_{ijkl}^e = (\Lambda_i)^{1/2} (\Lambda_j)^{1/2} (\Lambda_k)^{1/2} (\Lambda_l)^{1/2} \quad (3.25)$$

这里选择1/2次方而不是其他次方，是因为 Λ 有一半已经包含在系统张量中，环境张量包含另一半。当然这是一个很简单却又粗糙的近似，更为准确的方法是用TRG直接计算出环境，为了节约计算资源，环境块的大小不适于取太大，我

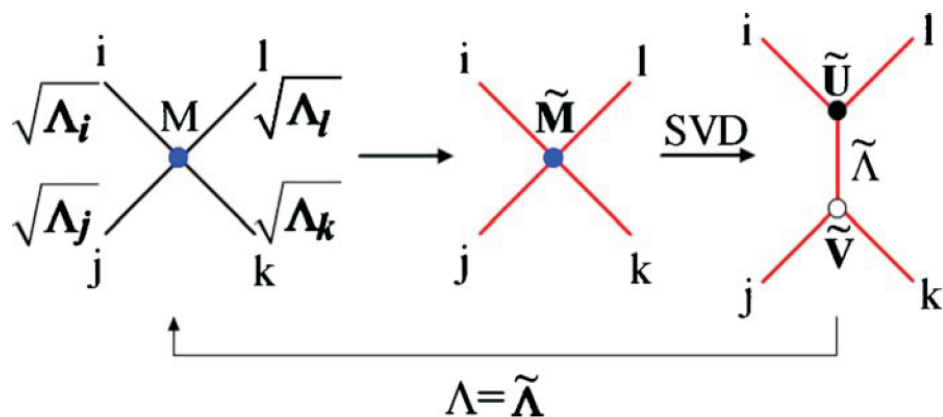


图 3.12: 环境张量平均场方法的自洽的过程, 先对系统张量 M 做奇异值分解, 然后得到平均场意义下的环境张量, 利用环境张量得到新的系统张量, 再把奇异值分解, 重复这个步骤

们分别测试了环境块大小为4, 8, 14, 和22个格点的情况。从结果看我们不需要取太大的环境就可以打到很高的计算精度。

当然除了直接代入之外, 我们还可以对环境张量进行迭代计算。进行迭代时结果的精度会得到大大的提高。首先介绍环境张量用最简单的那种近似时这种迭代是怎么进行的。我们把 M 做奇异值分解, 得到 Λ , 然后按照式(3.25)的定义得到环境张量, 于是可以得到新的系统张量, 重复这个步骤, 直到 Λ 收敛。这个过程如图3.12所示。环境张量更复杂时, 迭代过程也类似。

3.3.2 result

我们通过对三角格子上Ising模型的计算来测试SRG的精度, 我们先用SRG计算配分函数, 再跟严格解比较求出自由能相对误差, 图3.13不同颜色的曲线是在环境张量大小不同的情况下计算的, 我们看到环境张量取的越大, 对精度的提高越明显。在远离临界点的区域, 精度提高特别显著, 在临界点附近精度也有1-2个数量级的提高。

正方格子上同样也可以做SRG, 跟六角格子上基本是相同的。如果我们把正方格子都朝一个方向拉伸, 我们可以得到六角格子。我们把正方格子上的张量网络表示成六角格子上的张量网络后可以用六角格子上SRG的程序进行计算。正方格子上的结果同样说明相对TRG, SRG可以提高精度。

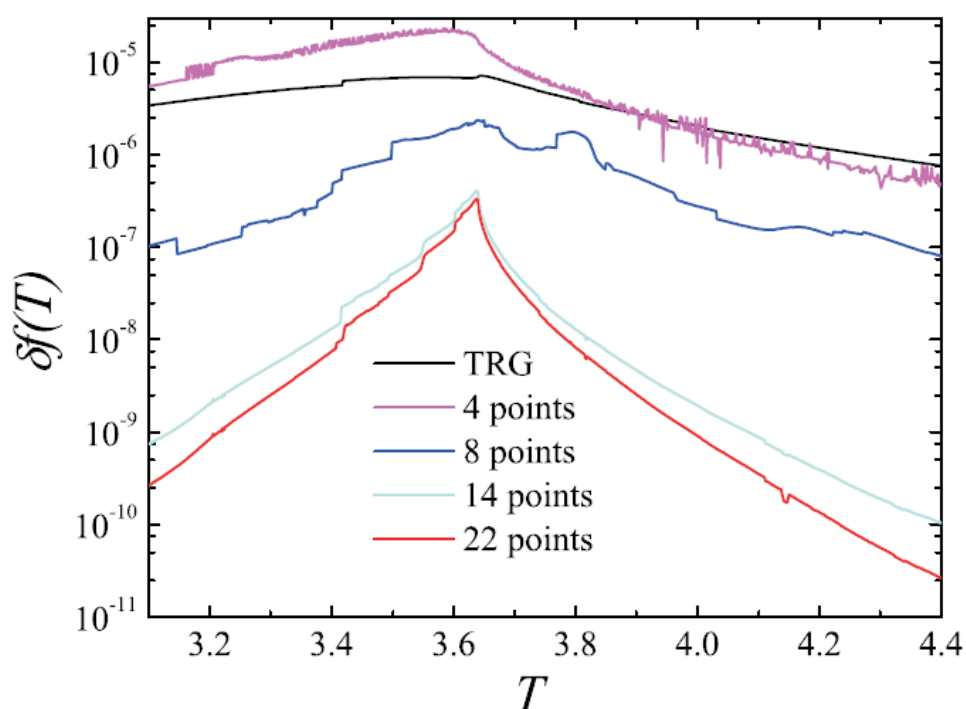


图 3.13: 不同温度下三角格子上铁磁Ising模型自由能相对误差, 不同颜色的曲线是环境张量大小不同的结果, 在远离相变点的区域, 精度提高特别明显

通过第二章的投影方法, 我们可以得到六角格子上海森堡模型的基态, 我们知道虽然有了波函数, 物理量的计算也是一个困难。我们分别用TRG和SRG计算了基态能和自发磁化强度, 如同样的投影纠缠对态的维数 D 下, 波函数都是一样的, TRG和SRG只代表所采用的计算物理量的方法不同。对于纠缠投影对态, 我们知道 D 越大, 相应的态就越接近真正的基态, 当 D 大到一定程度时, 跟真正的基态差别会非常小。我们可以看到SRG的结果无论是基态能还是自发磁化都满足这个规律, 可是TRG的结果却明显地违背了 D 越大越接近基态这一规律。尽管TRG所计算的基态能更低, 但是我们采用的是同样的波函数, 可见跟TRG相比SRG的可靠性和准确性更高。

通过以上无论是经典还是量子模型的结果, 我们发现跟TRG相比SRG可以极大地提高收缩二维张量网络的精度, 并且环境并不需要取特别大, 就可以使得整个计算的精度大大地提高。

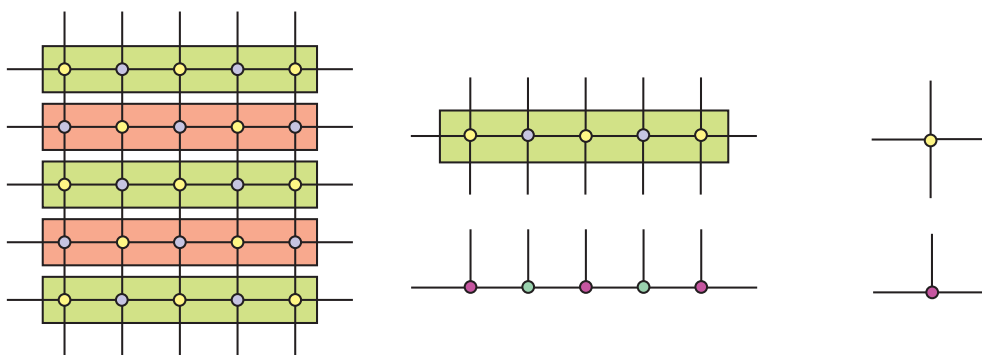


图 3.14: 左: 正方格子上张量网络表示成垂直方向转移矩阵的乘积, 每个方块内是一个转移矩阵; 中: 转移矩阵以及矩阵乘积态的定义; 右: 转移矩阵怎样作用到矩阵乘积态上

3.4 时间演化块消灭算法

配分函数是张量网络的收缩, 可以看成是求转移矩阵的最大本征值问题, 我们首先回顾一下求矩阵最大本征值的投影方法, 首先生成一个随机向量, 把矩阵作用到这个随机向量上, 作用足够多次以后, 向量会收敛到矩阵的最大本征值对应的本征向量, 于是我们可以得到最大本征值。

转移矩阵的最大本征值也是同样的求法, 只是此时转移矩阵的向量是矩阵乘积态。具体到正方格子上, 投影的方式有两种, 下面我们分别对这两种方式进行介绍。

3.4.1 竖直方向投影

如图3.14左图所示, 我们可以把配分函数表示成转移矩阵的乘积。如果把每一行张量 (也就是图中的绿色或红色的方块) 的横向指标收缩, 并把纵向的指标当成一个指标, 这样每个方块就只有沿着纵方向的两个指标, 这就是转移矩阵。张量网络收缩的配分函数, 此时就表示成转移矩阵的乘积了。

转移矩阵的本征向量是矩阵乘积态, 如图3.14中图所示, 每一行的转移矩阵作用到矩阵乘积态上。具体的方式如图3.14右图所示, 每个四阶张量作用到一个矩阵乘积态的矩阵上面, 纵向的指标收缩了, 横向的指标并在一起, 新得到的矩阵乘积态的矩阵维数增长。如果四阶张量 T 的维数是 $d \times d \times d \times d$,

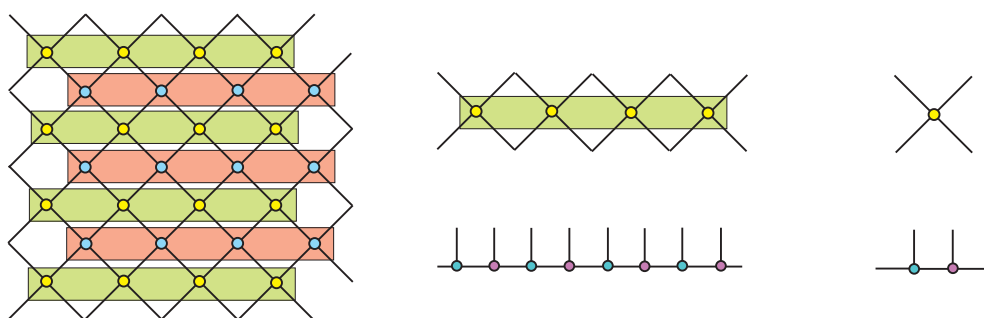


图 3.15: 左: 正方格子上张量网络表示成对角线方向转移矩阵的乘积, 每个方块内是一个转移矩阵; 中: 转移矩阵以及矩阵乘积态的定义; 右: 转移矩阵怎样作用到矩阵乘积态上

MPS矩阵 A 的维数是 $D \times D \times d$, 新产生的MPS矩阵 A' 的维数是 $Dd \times Dd \times d$

$$T_{uvmn} A_{xy}[m] = A'_{ux,vy}[n] = A'_{x'y'}[m'] \quad (3.26)$$

这样每一步投影之后MPS矩阵的维数都会变大, 所以我们要对矩阵的维数进行截断, 截断的依据是第二章的正则化, 我们先把MPS正则化, 然后根据施密特系数, 对MPS进行截断。可以看到竖直方向的投影对应于第二章提到的非么正算符的演化。

3.4.2 对角线方向投影

如果我们把张量网络转45度, 会发现沿着对角线方向, 同样可以定义转移矩阵。如图3.15左图所示, 每个绿色或红色方块内是转移矩阵。图3.15中图是转移矩阵作用到矩阵乘积态上的方式。局域的操作如图3.15右图所示, 每个张量作用到矩阵乘积态的两个格点上, 这里的作用方式对应于第二章时间演化的非么正演化。

跟竖直投影不同, 对角线方向的投影每次作用到两个格点上,

$$T_{m_1 m_2 n_1 n_2} A_{x_1 y}[m_1] B_{y x_2}[m_2] = M_{x_1, x_2}[n_1 n_2] = U_{x_1 m_1, y'} V_{y', x_2 m_2} = A'_{x'_1 y'}[m'_1] B'_{y'_2 x'_2}[m'_2] \quad (3.27)$$

这里新的矩阵是:

$$A'_{x'_1 y'}[m'_1] = U_{x_1 m_1, y'}, \quad (3.28)$$

$$B'_{y'_2 x'_2}[m'_2] = V_{y', x_2 m_2} \quad (3.29)$$

每次投影后矩阵 A 和 B 的维数会增长，如果张量 T 是幺正的，我们可以按照前面第二章介绍的iTEBD的方法对 M 做奇异值分解；如果是非幺正算符，可以先做正则化，然后再做截断。

3.5 三角格子上的Potts模型

我们采用前面几节介绍过的TRG和SRG方法研究了三角格子上的Potts模型[144]，我们知道 $q = 2$ 的Potts模型等价于Ising模型，铁磁和反铁磁都存在严格解。我们在前面的两节讨论了这个结果，在 $D_{cut} = 24$ 时可以保证所有温度的误差都低于 10^{-7} 。我们采用 $D_{cut=24}$ 对铁磁和反铁磁模型分别进行了SRG的计算，下面我们对得到的结果进行讨论。

3.5.1 铁磁

我们知道铁磁在低温时一定有长程序，相变一定会发生。我们首先计算了内能的结果， $q = 3$ 和 $q = 4$ 时内能是连续变化的，表明此时的相变是二级的。而 $q = 5$ 和 $q = 6$ 时内能在相变点附近有个跃变，此时相变从一级变成了二级。这与之前平均场的预言[29]是一致的。正方，六角，三角格子上的铁磁Potts模型的临界点有严格解。三角格子上的临界点是

$$\nu^3 + 3\nu^2 - q = 0, \nu = e^{\beta J} - 1 \quad (3.30)$$

我们还计算了比热比热的尖峰表明有相变的发生。我们通过比热尖峰来确定相变点的位置，我们把SRG得到的相变点与严格解进行比较，结果表明SRG可以很精确地确定相变点的位置。临界指数的指数的计算对相变点的精度要求非常高，我们计算了比热的临界指数。 $C = (|T - T_c|/T_c)^{-\alpha}$ ，我们首先通过确定对相变点附近的数据进行拟合。对于 $q = 3$ 我们得到 $\alpha = 0.317 \pm 0.009$ ，对于 $q = 4$ 我们得到 $\alpha = 0.592 \pm 0.002$ 。这些结果与临界指数的严格结果一致，表明SRG能够得到非常精确的数值结果。

3.5.2 反铁磁

三角格子上的反铁磁Potts模型在 $q = 2$ 和 $q = 4$ 时零温是临界点， $q > 4$ 时从零温到有限温都无序，只有 $q = 3$ 时因为是三子格，会形成每套格子各占据一种状态的反铁磁基态，因而有个有限温的相变。我们计算了 $q = 3$ 的比热和内能，比热尖峰表明相变的发生。同样相变的位置由比热尖峰来定，我们得到的结果是 $T_c = 0.627163 \pm 0.000003$ ，这个精度比重正化，级数展开和蒙特卡罗的精度都高。除了 $q = 3$ 之外，其他 q 值的反铁磁Potts模型都是没有相变的。我们还计算了他们的比热，所有的比热曲线都是光滑的，并且有一个宽的峰，这个峰和

相变没有关系。在低温时比热为零，在高温时当所有能量都激发，高温极限下比热趋于零，所以比热有个最大值，但是因为没有相变的发生，比热曲线会有一个包。

第四章 Union-jack 格子上的反铁磁Potts模型

跟铁磁Potts模型相比，反铁磁Potts模型的性质是非常丰富，且不可预测的，在不同格子上的不同 q 值时表现出不同的行为。这一章我们采用前面第二章和第三章介绍的张量重正化方法对Diced格子和union-jack格子上的反铁磁Potts模型进行研究。

部分长程序通常发生在阻挫系统中，阻挫系统有一个特征就是零温熵不为零，而反铁磁Potts模型的零温熵也不为零，因而这类系统中也可能存在部分长程序。Diced格子上 $q = 3$ 的反铁磁Potts模型就是一个例子。Diced格子是双子格的，两套子格之间的不等价性造成部分有序的出现。我们试图寻找存在部分有序的其他格子，最后发现union-jack格子上 $q = 4$ 存在这种部分有序引起的相变[142]，同时这个格子在 $q = 2$ 时存在阻挫引起的部分有序， $q = 3$ 在发生第一个相变后也存在部分有序。

如图4.1左图所示union-jack格子也就是中心正方格子，可以通过在正方格子的每个方块中心加一个点，并使之与四周的格点相连而得到。因为正方格子是双子格的（图中的红色和蓝色格点），新加入的点（黄色格点）和这两种格点属于不同的子格，因此union-jack是三子格的。我们看到每套格点的配位数分别是8, 8, 4，红色和蓝色格点的数目是总格点数 N 的 $1/4$ ，黄色格点的数目是 $N/2$ ，所有格点的平均配位数是6，正是因为不同子格之间的不等同性，导致union-jack格子上的反铁磁Potts模型有很丰富的物理。Union-jack格子的对偶格子是由四边形和八边形构成的4-8格子（图1.1第一行第三个），一种双子格，每个格点的配位数都是3的阿基米德格子。

Union-jack格子的晶格元胞如图4.1中图所示，晶格上每个元胞的哈密顿量的定义如下：

$$H_{\square}^{\text{UJ}} = J(\delta_{\sigma_1\sigma_2} + \delta_{\sigma_2\sigma_3} + \delta_{\sigma_3\sigma_4} + \delta_{\sigma_4\sigma_1})/2 + J(\delta_{\sigma_1\sigma_5} + \delta_{\sigma_2\sigma_5} + \delta_{\sigma_3\sigma_5} + \delta_{\sigma_4\sigma_5}) \quad (4.1)$$

这里的 $1/2$ 是因为，每条四边形上的边被两个元胞共用，于是我们可以定义 $T_{\square} = e^{-\beta H_{\square}}$ ，这里除了 σ_5 之外的点都是和其他元胞共用的，所以状态数

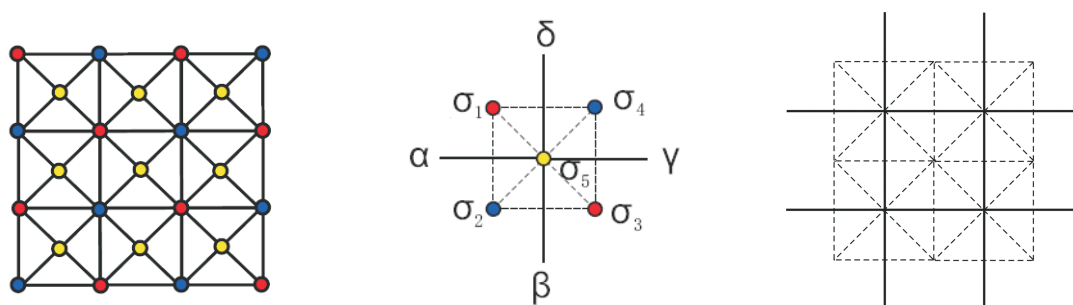


图 4.1: 左: union-jack格子是中心正方格子, 通过在正方格子(红色和蓝色格点构成的格子)每个方块的中心加一个点得到, 因而是三子格的(红蓝黄三种格点), 配位数分别是8, 8, 4; 中: union-jack格子的元胞, 如果把每个元胞中间的点求和掉, 我们得到张量的定义; 右: union-jack格子上配分函数可以定义在正方格子上

的求和只要对 σ_5 进行, 于是 T_{\square} 是关于 $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ 和 σ_4 的函数 $T_{\square}(\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4) = \sum_{\sigma_5} e^{-\beta H_{\square}}$, 然后做变量代换:

$$\alpha = \text{mod}(\sigma_1 - \sigma_2, q),$$

$$\beta = \text{mod}(\sigma_2 - \sigma_3, q),$$

$$\gamma = \text{mod}(\sigma_3 - \sigma_4, q),$$

$$\delta = \text{mod}(\sigma_4 - \sigma_1, q),$$

这里新的变量 α, β, γ , 和 δ 定义和前面正方格子上的对偶格子张量定义是一样的。这样每个元胞由一个四阶张量表示, 相邻的元胞共享一个键, 也就是这里的每一个新的指标, 于是配分函数可以表示成定义在正方格子上张量网络的收缩, 我们可以使用TRG和iTEBD对配分函数进行计算。得到了配分函数, 我们可以求导而得到其他热力学量。

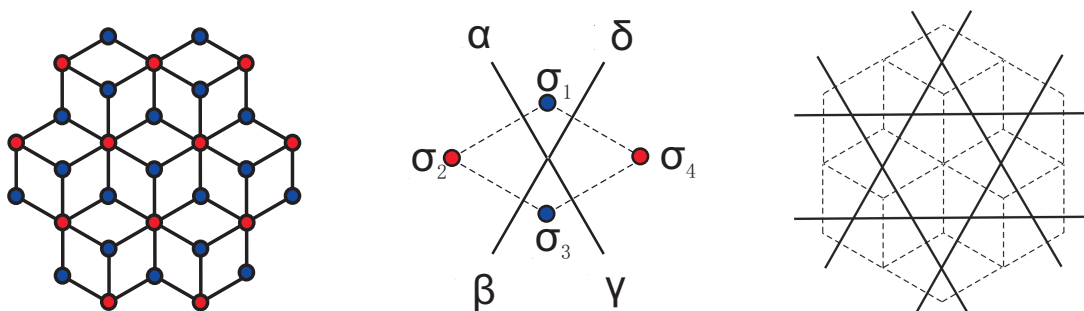


图 4.2: 左: Diced格子分为红蓝两套子格, 配位数分别是3, 6; 中: 在对偶格子上张量的定义; 右: diced格子上配分函数可以定义在kagome格子上

4.1 Diced格子上的 $q = 3$ 反铁磁Potts模型

如图4.2左图所示Diced格子是由四边形构成的, 因而是双子格的, 蓝色子格和红色子格的配位数分别是3和6, 所以红色格点的数目是蓝色格点的两倍, 红色格点的数目是 $N/3$, 蓝色格点是 $2N/3$, 系统的平均配位数是4。我们可以按照第三章提到的对偶格子上张量网络的写法, 来定义diced格子上的配分函数。如图4.2中图我们在diced格子上的每个四边形上定义四阶张量, 这样配分函数就表示成了kagome格子上的四阶张量的收缩 (图4.2右图所示)。

Diced格子是kagome的对偶格子, 跟其他二维格子一样, 铁磁的情况下的总是有相变, 不过没有严格解。反铁磁情况下, 当 $q = 2$ 时, 跟其它双子格格点 (如正方格子) 一样, 基态是每套格点各占据一种状态, 低温存在长程序, 相变一定发生, 因为有严格解存在, 这里不仔细地讨论。而 $q = 3$ 时正方格子上是零温临界点, 可是Diced格子上却存在有限温的相变。

Jensen[146]等人首先对kagome格子上的配分函数零点的进行了分析。配分函数是解析函数, 如果我们把它解析延拓到温度轴的复平面, 我们会看到到配分函数在复平面有奇点。在热力学极限下, 这些奇点会无限接近温度的正实轴的某个点, 这个点就是相变发生的点。Jensen等人利用低温级数展开计算了kagome格子上 $q = 3$ 的零点, 他们发现在 $\nu = -3.486 \pm 0.003$ 的地方是配分函数的奇点。Feldmann等人[147]根据Potts模型的对偶性质, 指出在Diced格子上 $\nu = -0.8607 \pm 0.008$ 的地方会存在一个相变。

相变的发生是Kotecky等人[145]通过Monte Carlo方法证实的。他们在不同的系统尺寸下计算了Binder ratio和关联长度, 不同尺寸的宾得比率 (Binder

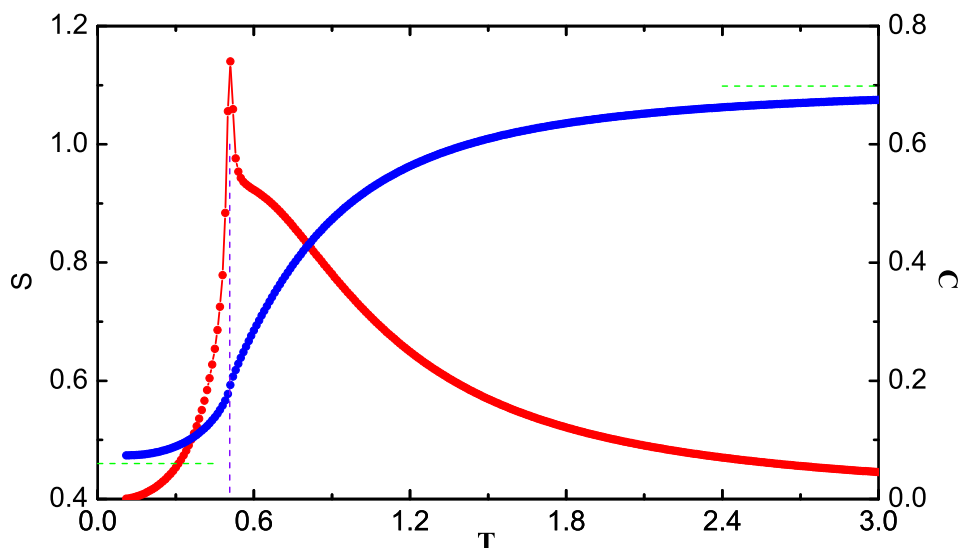


图 4.3: Diced格子上 $q = 3$ 的熵和比热, 蓝色曲线是熵, 红色是比热, 绿色虚线是熵的低温和高温极限, 紫色虚线是蒙特卡罗计算[145]给出的相变点。

ratio) 和关联长度随着温度的变化相交于同一个点, 表明临界点的存在性, 并且可以精确地得到临界点的位置。因为在蒙特卡罗计算中, 这是确定临界点最精确的方法。他们还从解析的角度证明了这个相变的存在性。

Diced格子是由四边形构成的, 如图4.2中图所示。 $q = 3$ 时总共有三种状态, 相邻的格点又必须占据不同的状态, 那么在一个四边行上, 一对红色或一对蓝色格点, 至少有一对必须占据相同的状态。如果现在所有红色格点占据状态‘0’, 那么每个蓝色格点都可以任意地占据‘1’和‘2’两种状态, 反过来蓝色格点都是一种状态也同样。系统的总格点数如果是 N , 红色格点的数目是 $2N/3$, 蓝色格点的数目是 $N/3$ 。在前一种情况(红色格点有序)时的状态数是 $2^{N/3}$, 后一种情况的状态数是 $2^{2N/3}$ 。在热力学极限下, 蓝色子格有序的可能性远大于红色子格有序。Diced格子上的低温序是一种部分有序长程序。

正如上面提到的, 我们可以把Diced格子上的配分函数写成定义在kagome格子上的四阶张量的收缩。这样我们可以在使用TRG和SRG来计算热力学量。我们首先计算了熵, 图4.3中蓝色曲线根据玻尔兹曼定律 $S \propto \ln W$, 这里 W 是总的状态数, 我们可以由状态数确定出熵的大小。高温时因为每个格点的自由度

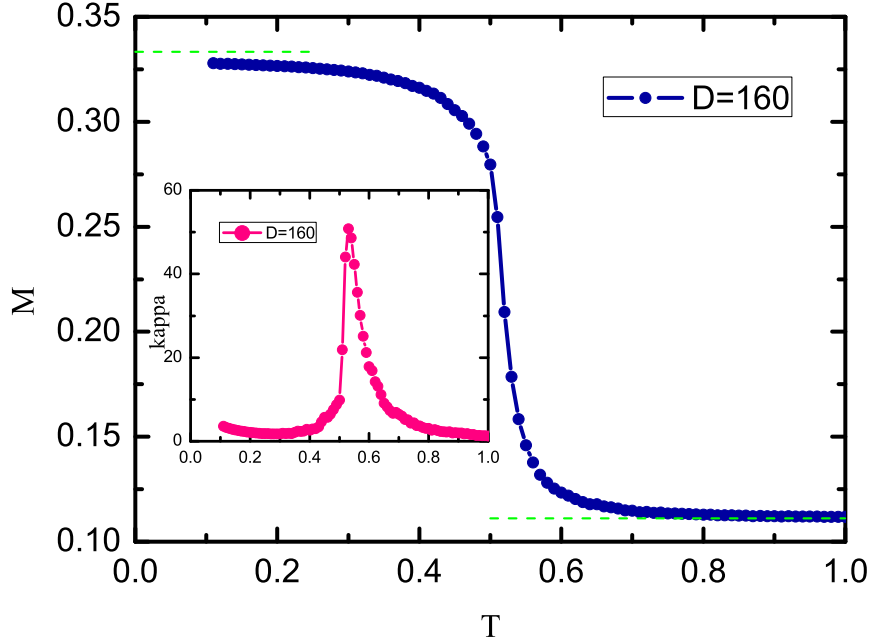


图 4.4: Diced格子上 $q = 3$ 时的序参量，这里序参量的定义是A子格上的磁化强度，绿色虚线是序参量的低温和高温极限，子图是磁化率，发散表示相变发生

是3，总的状态数是 3^N ，每个格点的熵是 $\ln 3$ 。零温时状态数 $2^{2N/3}$ ，所以低温熵极限是 $2/3 \ln 2$ 。熵的高温和低温极限在图4.3中用绿色虚线表示。但是因为基态中还包括大量不是完全有序的状态，严格的零温熵会跟 $2/3 \ln 2$ 有一定的差距，我们将在这一章的最后一节这个差距出现的原因。

我们还计算了系统的比热，图4.3中的红色曲线，比热有一个尖峰，表明相变的发生。通过比热尖峰得到的相变点的位置跟蒙特卡罗[145]的结果（紫色虚线）一致。

序参量是刻画相变的重要物理量，我们也对序参量进行了计算，在图4.4中用蓝色的曲线表示，图4.4中的小图是磁化率。在这里序参量的定义为红色子格（A子格）上处于状态‘0’的格点数除以总的格点数：

$$M = \sum_{i \in A} \delta_{\sigma_i, 0} / N \quad (4.2)$$

可以通过在A子格上加一个小的外场，来计算序参量

$$M = -\frac{\partial}{\partial h} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z \quad (4.3)$$

在零温时A子格的格点数是总格点数的1/3，所以序参量的零温极限是 $\frac{1}{3} \approx 0.3333$ ，随着温度的升高在序参量为零的相，每个格点占据‘0’‘1’‘2’三种状态的几率是相等的，这时序参量的大小就变成 $\frac{1}{3} \times \frac{1}{3} = \frac{1}{9} \approx 0.1111$ 。序参量的高温 and 低温极限在图4.4中虚线表示。序参量跟零温的极限有一定的差距，这是缺陷造成的，我们将本章的最后一节讨论这个影响。

磁化率是序参量对磁场的导数，从图4.4可以看到磁化率发散的溫度，并不严格等于序参量变为0.1111 的溫度。长程有序意味着对称性的自发破缺，但是在没有任何外场的情况下，系统的对称性不可能破缺。我们需要加一个小的外场，使得对称性破缺，这个外场趋于零的极限就是自发磁化强度的数值。然而实际计算中不可能让外场太小，必定是一个小的但有限的数值，正是因为我们引入的小磁场，使得磁化强度并不是在相变点立刻变到无序时的数值。

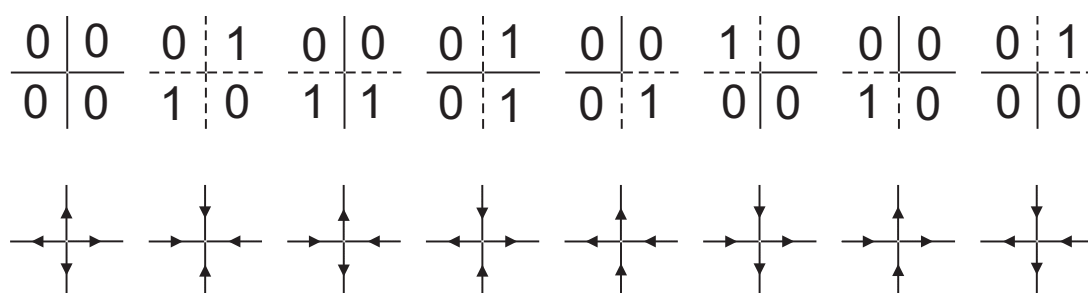


图 4.5: Union-jack格子上 $q = 2$ 的Potts模型和正方格子上八顶点模型的映射, Potts模型上两个相邻格点的状态相同对应与顶点模型的出射箭头, 不同的状态对应入射的箭头

4.2 $q = 2$

$q = 2$ 的Potts模型等价于Ising模型, 在union-jack格子上有严格解, 而且耦合强度各向异性也有严格解。1966年Vaks, Larkin and Ovchinnikov [8]首先给出了union-jack格子上Ising模型的严格解, 他们考虑的是耦合强度对称的情况, 得到了自由能和两点关联函数。1975年Sacco和Wu[148]将这一结果与三角格子上的32顶点模型相联系。1987年Wu和Lin[149, 150]给出耦合强度各向异性下的严格解, 证明这个问题与正方格子上的八顶点模型等价, 并证明其满足自由费米子条件。通过这个等价性他们计算了自由能, 自发磁化强度以及三点关联函数。

4.2.1 严格解

首先我们介绍怎样把这个模型映射到八顶点模型。把union-jack上的每个元胞(如图4.1中图所示)中心的格点积分掉, 外面剩四个格点。如图4.5所示, 这四个格点如果相邻的两个取相同的状态, 我们就画一条垂直于这两个点所在边的实线, 否则画一条虚线。每个格点有两种状态, 每个元胞有四个格点因而有十六种状态, 也就是图4.5中的八种, 以及把‘0’和‘1’两种状态互换之后的八种, 然而虚线实线的构型就只有如图所示的八种。如果我们把实线用出射的箭头表示, 虚线用入射的箭头表示, 图4.5后六个就是满足冰规则的六顶点模型中的六种顶点, 再加上全都是出射和全都是入射的前两种顶点, 我们就得到了八顶点模型。正方格子上的八顶点模型是有严格解的, 于是我们就可以得到union-jack格子上 $q = 2$ Potts模型的严格解。

接下来我们对Union-jack格子上Ising模型各向异性的严格解进行讨论，如图4.1中图，在各向异性时每个元胞上的哈密顿量是

$$H_{\square} = J(\sigma_1\sigma_2 + \sigma_3\sigma_4)/2 + J'(\sigma_1\sigma_4 + \sigma_2\sigma_3)/2 + J_1\sigma_1\sigma_5 + J_2\sigma_2\sigma_5 + J_3\sigma_3\sigma_5 + J_4\sigma_4\sigma_5 \quad (4.4)$$

这里的1/2是因为每条外面的边被两个元胞所共用，此时某种构型的几率是：

$$\begin{aligned} \omega_{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4} &= e^{\beta/2(J(\sigma_1\sigma_2 + \sigma_3\sigma_4) + J'(\sigma_1\sigma_4 + \sigma_2\sigma_3))} \sum_{\sigma_5} e^{\beta(J_1\sigma_1 + J_2\sigma_2 + J_3\sigma_3 + J_4\sigma_4)\sigma_5} \\ &= 2e^{\beta/2(J(\sigma_1\sigma_2 + \sigma_3\sigma_4) + J'(\sigma_1\sigma_4 + \sigma_2\sigma_3))/2} \cosh(\beta(J_1\sigma_1 + J_2\sigma_2 + J_3\sigma_3 + J_4\sigma_4)) \end{aligned}$$

这里前面的系数2是由于双曲余弦函数的定义要除以2。

图4.5中八种构型的权重分别是：

$$\begin{aligned} \omega_1 &= 2e^{\beta J + \beta J'} \cosh(\beta(J_1 + J_2 + J_3 + J_4)), \\ \omega_2 &= 2e^{-\beta J - \beta J'} \cosh(\beta(J_1 - J_2 + J_3 - J_4)), \\ \omega_3 &= 2e^{-\beta J + \beta J'} \cosh(\beta(J_1 - J_2 - J_3 + J_4)), \\ \omega_4 &= 2e^{\beta J - \beta J'} \cosh(\beta(J_1 + J_2 - J_3 - J_4)), \\ \omega_5 &= 2 \cosh(\beta(J_1 + J_2 - J_3 + J_4)), \\ \omega_6 &= 2 \cosh(\beta(-J_1 + J_2 + J_3 + J_4)), \\ \omega_7 &= 2 \cosh(\beta(J_1 - J_2 + J_3 + J_4)), \\ \omega_8 &= 2 \cosh(\beta(J_1 + J_2 + J_3 - J_4)), \end{aligned}$$

可以证明这些权重此时满足自由费米子条件：

$$\omega_1\omega_2 + \omega_3\omega_4 = \omega_5\omega_6 + \omega_7\omega_8 \quad (4.5)$$

自由费米子模型的自由能被Fan和Wu计算过[151]，于是可以得到Ising模型上每个格点上的自由能：

$$F = \frac{1}{16\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta d\phi \ln(2a + 2b \cos(\theta) + 2c \cos(\phi) + 2d \cos(\theta - \phi) + 2e \cos(\theta + \phi)) \quad (4.6)$$

这里我们有

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{2}(\omega_1^2 + \omega_2^2 + \omega_3^2 + \omega_4^2), \\ b &= \omega_1\omega_3 - \omega_2\omega_4, \\ c &= \omega_1\omega_4 - \omega_2\omega_3, \\ d &= \omega_3\omega_4 - \omega_7\omega_8, \\ e &= \omega_3\omega_4 - \omega_5\omega_6, \end{aligned}$$

Baxter[152]计算了自由费米子模型的自发磁化强度，我们可以得到Ising模型上每个格点上的自发磁化强度是：

$$M = (1 - \Omega^{-2})^{1/8} \quad (4.7)$$

这里

$$\Omega = 1 - \frac{\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4}{16\omega_5\omega_6\omega_7\omega_8} \quad (4.8)$$

这里系数的定义是：

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= -\omega_1 + \omega_2 + \omega_3 + \omega_4, \\ \gamma_2 &= \omega_1 - \omega_2 + \omega_3 + \omega_4, \\ \gamma_3 &= \omega_1 + \omega_2 - \omega_3 + \omega_4, \\ \gamma_4 &= \omega_1 + \omega_2 + \omega_3 - \omega_4, \end{aligned}$$

发生相变的临界点是 $\Omega^2 = 1$ ，也就是

$$\omega_1 + \omega_2 + \omega_3 + \omega_4 = 2 \max(\omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_4) \quad (4.9)$$

Vaks考虑的是耦合强度对称的情况，也就是 $J = J'$ 以及 $J_1 = J_2 = J_3 =$

J_4 时，八种构型的概率成为：

$$\begin{aligned}\omega_1 &= 2e^{2\beta J} \cosh(4\beta J_1), \\ \omega_2 &= 2e^{-2\beta J}, \\ \omega_3 &= 2, \\ \omega_4 &= 2, \\ \omega_5 &= 2 \cosh(2\beta J_1), \\ \omega_6 &= 2 \cosh(2\beta J_1), \\ \omega_7 &= 2 \cosh(2\beta J_1), \\ \omega_8 &= 2 \cosh(2\beta J_1)\end{aligned}$$

4.2.2 数值结果

我们计算了union-jack格子上的热力学量，图4.6中的蓝色和红色曲线分别是熵和比热。比热曲线的发散告诉我们低温有长程序。一般阻挫的格子上是没有长程序的，如三角格子和kagome格子。union-jack格子是由三角形构成的，不可能让每条边的能量都最小化，能量最小的状态是每个三角形上有两条边的能量最小化，也就是说两个格点取相同的状态，剩下的格点取另外一种状态。在整个晶格上比较简单的情形是三套子格中的其中两套形成反铁磁序，这样第三套子格上的每个格点可以任意选取两种状态。因为C子格的格点数是 $N/2$ ，A和B子格形成长程序的状态数是 $2^{N/2}$ ，如果是A和C形成反铁磁序B格点可以任意选取两种状态，这样的状态数是 $2^{N/4}$ ，B和C形成反铁磁序结果也一样。可见在热力学极限下A和B形成反铁磁序的可能性远远大于其他的可能性。

零温熵可以告诉我们状态数的信息。在熵的计算中我们发现低温时总有一个小的发散，这个发散是怎样产生的呢？首先我们写出几种构型的概率：

$$\begin{aligned}\omega_1 &= e^{2\beta J}(1 + e^{4\beta J}), \\ \omega_2 &= 2e^{2\beta J}, \\ \omega_3 &= \omega_4 = 2e^{3\beta J}, \\ \omega_5 &= \omega_6 = \omega_7 = \omega_8 = e^{2\beta J}(1 + e^{2\beta J}),\end{aligned}$$

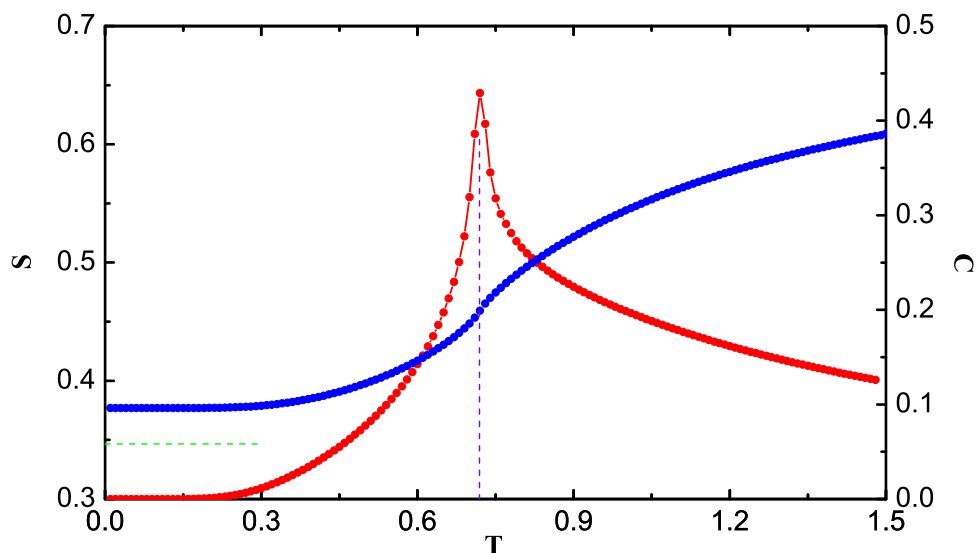


图 4.6: union-jack格子上 $q = 2$ 的熵和比热，蓝色曲线是熵，绿色虚线表示熵的低温平庸极限，红色曲线是比热，紫色虚线是严格解的相变位置。

我们发现每个张量都可以提出一个因子 $e^{2\beta J}$ ，反铁磁低温时这个量是很小的，这样会导致整个计算的精度大大降低，我们有必要把这个因子整体提出来。这样配分函数就成为 $Z = (e^{2\beta J})^{N/2} Z_0$ ，我们知道熵的表达式是：

$$S = T \frac{\partial \ln Z}{\partial T} + \ln Z \quad (4.10)$$

把配分函数分成两部分之后，熵的表达式成为：

$$S = T \frac{\partial \ln Z_0}{\partial T} + T \frac{\partial \beta J N}{\partial T} + \ln Z_0 + \beta J N = T \frac{\partial \ln Z_0}{\partial T} + \ln Z_0 - \beta J N + \beta J N \quad (4.11)$$

我们在计算中采用的低温熵的表达式是 $S = \ln Z$ ，因为反铁磁Potts模型的基态能是零，因而自由能中只包含熵乘以温度的贡献，这个近似在低温是好的近似，可是这里如果熵只包含一项的话，在低温时就会有一个发散项，如果我们把每个张量都除以这个因子的话，发散项将被消除。

消除了发散项后，我们得到了光滑的熵曲线，图4.6中的蓝色曲线，因为A和B有反铁磁序的状态数是 $2^{N/2}$ ，熵的零温极限是 $\log 2/2$ ，在图中我们用绿色虚线表示，可以看到实际的熵跟这个极限有一定的差距，这是因为包含缺陷的态对状态数的贡献也不为零，我们将在这一章的最后一节讨论这个问题。

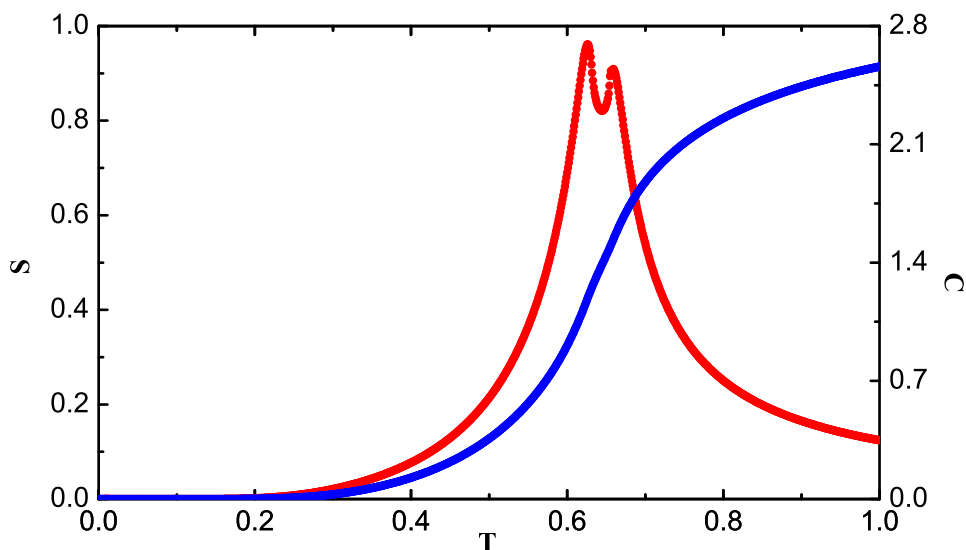


图 4.7: union-jack格子上 $q = 3$ 的熵和比热, 蓝色曲线是熵, 红色是比热, 比热的出现了两个尖峰是因为这里发生了两次相变。

4.3 $q = 3$

$q = 3$ 的情况通常比 $q = 2$ 复杂, 可是因为union-jack格子是三子格的, 并且每套子格的取法是固定的, 因此基态就是每套格子分别占据不同的状态, 所以在union-jack格子上反而 $q = 3$ 的情况要更简单些。在低温下有序, 温度升高热涨落增强长程有序被破坏。

我们计算了 $q = 3$ 的热力学量如图4.7所示, 蓝色曲线是熵, 红色是比热。因为格子是三子格确定的, A、B和C三套子格上的格点分别占据一种状态就是基态。A格点可以选取‘0’、‘1’和‘2’三种状态, 如果A格点选择的是‘0’, 那么B格点可以选择‘1’和‘2’两种状态, 若B占据的是状态‘1’, 那么C格点只能占据状态‘2’了。所以基态总共有六种, 在热力学极限下零温熵等于零, 我们的数值结果也是零。

我们通过对比热尖峰的计算来确定相变点的位置。然而我们却发现比热有两个尖峰, 也就是发生了两次相变。系统发生了从有序相到另一个有序相的转变, 再从高温有序相到无序相的转变。高温时的性质跟激发态有关, 下面我们来分析激发态的性质。我们知道union-jack 格子上的基态时只要一个三角形上

三个格点的状态确定了，所有格点的状态都确定了。当一个C子格上的格点状态发生变化时，也就是说取另外的两种状态时，有两条边的能量会发生改变，这种激发态的能量是 $2J$ 。当一个A子格上的格点状态发生变化时，至少会有四条边的能量发生变化，这种激发态的能量是 $4J$ 。同样B子格上也是，激发态的能量是 $4J$ 。

因为激发A或者B子格上格点所需的能量是C子格的两倍，在温度不够高时，C子格的无序的可能性高于A和B子格无序，所以在有限温时会存在A和B子格上的有序，这是一种部分有序，这种部分有序就是前面提到的高温有序相，正是这种部分有序，导致系统从低温到高温有两个相变。

4.4 $q = 4$

对于 $q = 4$ 的情况我们关心是否会存在类似diced格子上 $q = 3$ 的那种部分有序，如果有部分有序，这个序是否可以在有限温存在。这种序是什么样的。我们通过对热力学函数的计算试图回答这些问题。我们知道union-jack格子可以分成三套子格，其中A和B子格的格点数分别是 $N/4$ ，而C子格的格点数是 $N/2$ ，这里 N 是总的格点数。从diced 格子上的经验我们知道，如果有长程序的发生，那么一定是在发生在格点数少的格点上，因此这里的序可能是A子格或者B子格有序，或者A子格和B子格同时有序。

如果是A和B子格同时有序，即A和B子格分别占据状态‘0’和‘1’，那么C子格上的每个格点可以任意选择‘2’和‘3’两种状态，所以A和B同时有序的状态数是 $2^{N/2}$ 。如果是A和B子格只有一套处于长程序，比如A子格占据状态‘0’，那么B子格和C子格就占据剩下的‘1’，‘2’，‘3’三种状态，相当于是decorated-square格子上的 $q = 3$ 的反铁磁Potts模型。如果 $q = 3$ 的decorated-square零温熵是 S_0^{ds} ，并且 $S_0^{ds} = \ln \zeta$ ，那么A子格有序的状态数是 $\zeta^{3N/4}$ ，这里 $3N/4$ 是因为B子格和C子格总的格点数为 $3N/4$ 。因此如果 $\zeta > 2^{2/3}$ ，也就是 $S_0^{ds} > 2/3 \log(2)$ 部分有序发生在A或者B子格上，否则A子格和B子格将同时有序。

4.4.1 数值结果

我们首先计算了decorated-square格子上 $q = 3$ Potts模型的零温熵。如图4.8左图所示，decorated-square格子是在正方格子的每条边上加一个点，使之与边上的两个点有相互作用，我们可以看到decorated-square 格子可以由union-jack格子上的B子格（蓝）和C子格（黄）构成。而decorated-square格子上的配分函数可以定义在正方格子上，如图4.8右图所示，我们可以把黄色格点上的物理自由度做为张量的指标。在式(4.12)中 S 的定义与第二章中的定义相同。

$$T_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4} = \sum_{\sigma_5} S_{\sigma_1 \sigma_5} S_{\sigma_2 \sigma_5} S_{\sigma_3 \sigma_5} S_{\sigma_4 \sigma_5} = \sum_{\sigma_5} e^{\beta J (\delta_{\sigma_1 \sigma_5} + \delta_{\sigma_2 \sigma_5} + \delta_{\sigma_3 \sigma_5} + \delta_{\sigma_4 \sigma_5})} \quad (4.12)$$

decorated-square格子上的 q 态Potts模型可以映射到正方格子上的 q 态Potts模型，decorated-square格子上无论是铁磁还是反铁磁的Potts模型都会映射到正方格子上铁磁的Potts模型。我们可以通过正方格子上 $q = 2$ 的严格解，定

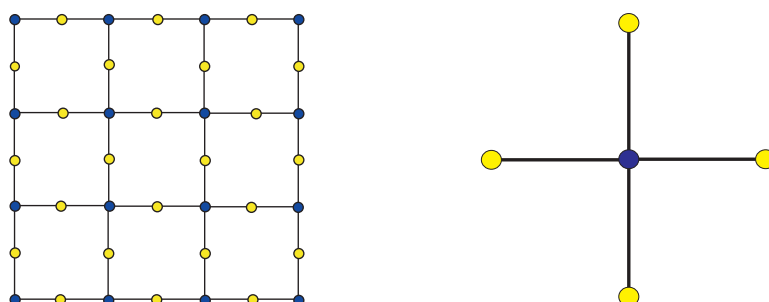


图 4.8: 左: union-jack格子上的B子格(蓝)和C子格(黄)构成decorated-square格子; 右: decorated-square格子上的张量的定义, 把黄色格点的物理指标看成是张量的指标, 这样decorated格子上的配分函数就可以表示成正方格子上的张量的收缩

出decorated-square上 $q = 2$ 的相变点, 在计算中我们通过相变的位置的正确性来验证程序的正确性。然后计算了 $q = 3$ 的零温熵, 我们的结果是0.561069, 而 $2/3 \log(2) \approx 0.462098$, 于是我们有 $\zeta > 2^{2/3}$, 因此union-jack格子上如果有部分有序, 这种部分有序只发生在A子格或者B子格上。

如图4.9我们计算了 $q = 4$ 的熵, 玻尔兹曼定律告诉我们 $S \propto \log(W)$, 这里 W 是状态数。在高温时每个点的自由度是4, 总的状态数是 4^N , 于是每个格点的熵 $S_\infty^{uj} = \log(4)$, 这就是高温熵的极限。下面我们讨论零温熵。在只有A子格有序时, B子格和C子的状态数跟decorated-square格子上 $q = 3$ 是相同的, 也就是说 $S_0^{uj} = 3/4 S_0^{ds} = 0.420802$, 这个数值在图4.9中用绿色虚线表示。但是我们的计算的结果是0.430998, 关于这个偏差我们可以将在后面讨论。

相变的发生伴随着热力学函数的奇异性, 通常最常见的发散量是比热, 一级相变时比热发散, 二级相变比热通常是不连续的, 但是一些二级相变(如正方格子上的Ising模型)的比热在相变点附近是对数发散的, 因此比热的奇异性可以很好地揭示相变的发生及其性质。我们计算了union-jack格子上 $q = 4$ 的比热, 来观察相变是否会发生, 如图4.9中的红色曲线, 整个比热曲线看起来是光滑的, 跟零温临界和没有相变发生时的行为类似。

我们计算比热是通过对配分函数做二阶微分得到, 在数值计算中微分的计算是通过差分得到的, 差分的精度可以通过缩短离散格点之间距离来提高。我们把温度间隔取更小, 得到新的数据, 可以看到此时的比热在最大值的左边, 也就是低温的方向有个微小的晃动, 当然这有可能是计算精度造成的, 于是我

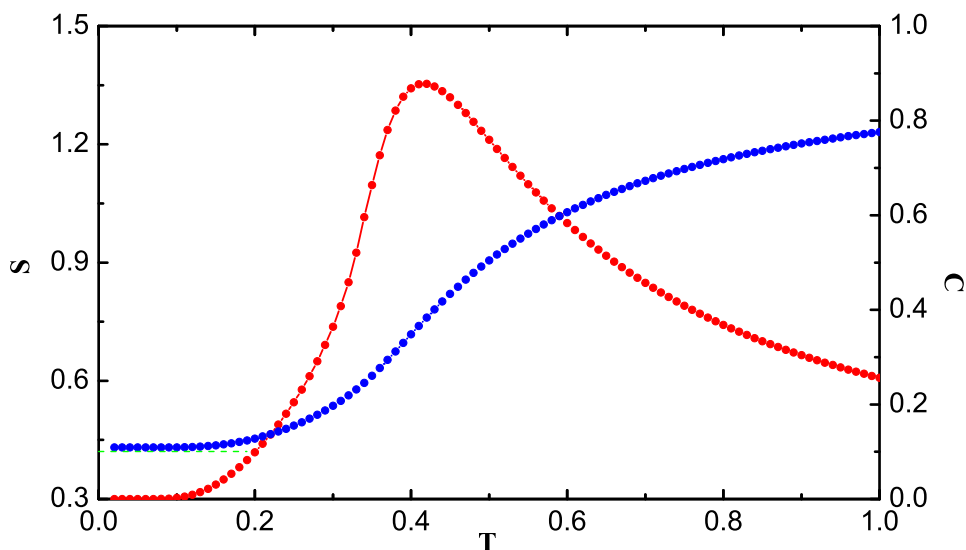


图 4.9: union-jack格子上 $q = 4$ 的熵和比热, 蓝色是熵, 绿色虚线是用decorated-square格子上的熵估计出的零温极限, 红色是比热

们增加截断维数, 在我们的最大的努力下这个微小的晃动仍然不消失。

为了研究清楚这个微小晃动的起因, 我们又采用iTEBD的方法对比热进行计算。当截断维数很小时, 这个微小的晃动消失了, 可当我们增加截断维数, 并缩小温度间隔时, 可以看到比热实际上是不连续的, 有个微小的跳跃, 只是这个跳跃的数值非常小。温度间隔越小, 这个跳跃的值越大。可是我们不能任意地减小温度间隔, 因为数值计算是有一定精度的, 间隔太小会导致计算无法区分相邻两个温度点的配分函数。

如图4.10所示, 我们采用iTEBD计算了 $D_{cut} = 800$ 时的比热, 因为我们在计算中加入了量子数, 因而可以计算到 D_{cut} 很大的数值。我们可以看到, 比热有一个在微小晃动的温度区间内有不连续。比热不连续明确地证实了相变的发生。

我们发现不同 D 对应不同的连续的区间, 也就是相变点的位置是不同的。这是因为类似于有限尺寸标度, 矩阵乘积态的计算中会有一个有限 D 标度[153]。我们以比热不连续的两端的中点做为特定 D 时的相变点, 通过外插的方法推测出截断维数无穷大时的相变点 $T_c^\infty = 0.339(1)$, 如图4.11所示。

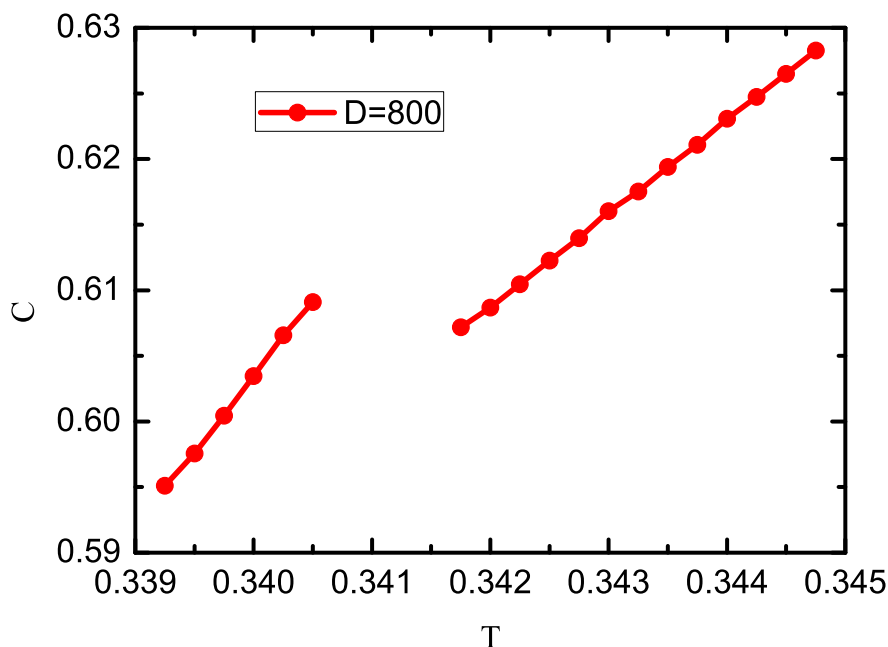


图 4.10: union-jack格子上 $q = 4$ 的比热，这里的比热是用iTEBD在 $D = 800$ 的情况下算出的，比热的不连续表明相变的发生。

矩阵乘积态存在有限尺寸标度是跟MPS本身的性质有关的。MPS的纠缠熵随着MPS矩阵的维数对数增长，我们知道在临界点附近纠缠熵随着关联长度也是对数增长的[154]，于是MPS矩阵的维数和关联长度是幂函数关系 $\xi = D^\kappa$ 。我们知道有效温度 t 跟关联长度的关系是 $t \sim \xi^\nu$ ，于是 $\xi \sim t^{-1/\nu}$ ，这样我们得到有效温度跟MPS矩阵维数的关系 $t \sim D^{-\kappa/\nu}$ ，我们知道有效温度 $t = |T - T_c|/T_c$ ，这样温度跟MPS矩阵维数的关系是 $T_D = T_c - aD^{-\kappa/\nu}$ ，在矩阵维数无穷大时，我们得到临界点，幂次函数的截距就是临界温度。

序参量是刻画相变的重要物理量，为了验证我们前面关于长程序的猜想，我们计算了序参量。我们认为长程序是A子格的格点都取相同的状态，这里序参量的定义是 $M = \sum_{i \in A} \delta_{\sigma_i, 0} / N$ ，也就是对A子格上所有状态为‘0’格点的格点数的求和。因为A子格占有所有格点数的1/4，在完美序的情况下，序参量的零温极限是1/4，然而我们计算的零温极限却小于这个数值。如图4.12所示，蓝色曲线是序参量，绿色虚线是平庸极限。高温下每个格点可以任意选取四种状

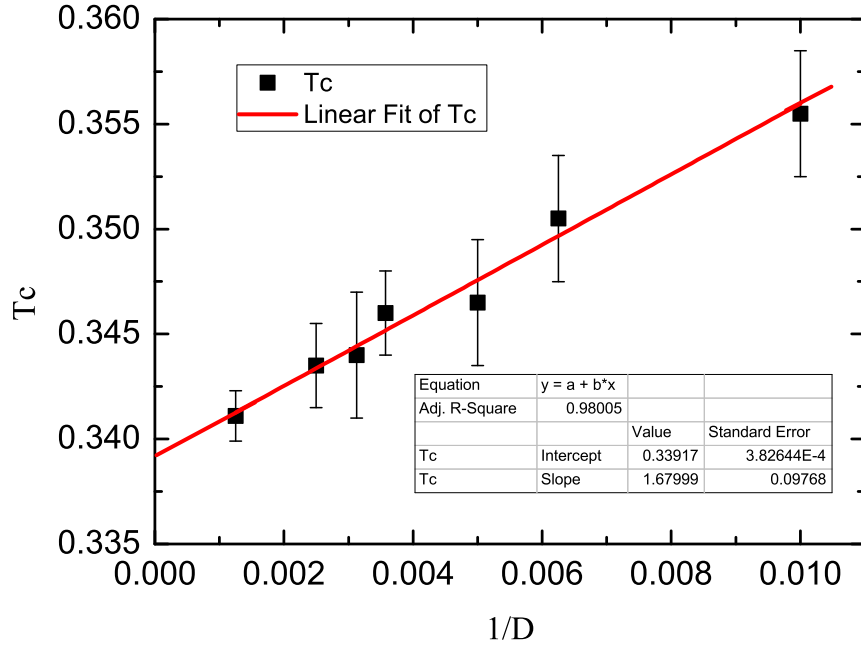


图 4.11: union-jack格子上 $q = 4$ 的截断维数和临界点的线性拟合，这里的临界点是通过比热曲线不连续的两边的中点

态，A子格也同样，序参量的高温极限是 $1/4 \times 1/4 = 1/16 = 0.0625$ ，跟我们的计算符合的很好。

磁化率是序参量相对外加磁场的一阶导数，我们也计算了磁化率。如图4.12中的子图所示，磁化率在相变点附近发散，我们可以通过发散点的位置，严格地定出相变点的值。我们看到磁化率发散的点，并不是序参量变到高温极限的位置。序参量不为零，意味着存在对称性破缺，我们在计算中是通过在系统上一个小的外场，使得对称性自发破缺到长程有序的状态。在低温时这个小的外场的影响比高温时更重要。我们看到在相同 D 的情况下，磁化率和比热给出的相变点是一致的。

零温熵和零温磁化强度跟理论预言都有一个偏差，这个小的偏差是因为这里的序是根据状态数的最大化挑选出来的，有大量的不满足这个序的状态也是基态。例如图4.13左图所示的情况，在所有A子格的格点都占据状态‘0’时，如果有一个A格点占据状态‘1’，跟这个格点相邻的B子格和C子格的自由度变

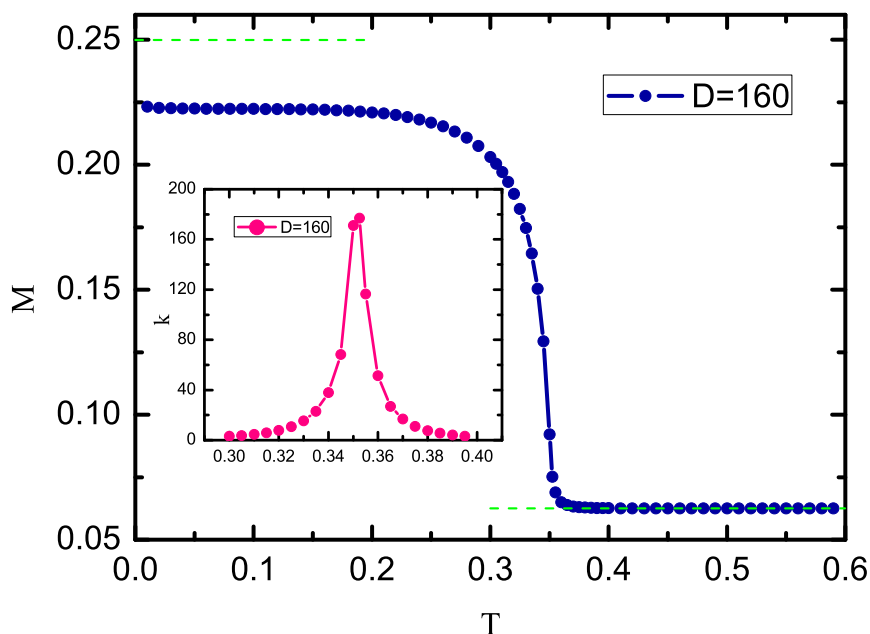


图 4.12: union-jack格子上 $q = 4$ 的序参量，这里序参量的定义是A子格的磁化强度，绿色虚线是序参量的低温和高温极限，子图是磁化率

小，可是远离这个A格点的其余B格点和C格点的自由度仍然不受影响，这样的状态的状态数随着粒子数也是指数增长的，这种不是完美序的状态对熵也有贡献，我们把这样一个A格点叫缺陷。这是一个缺陷，还有两个，三个甚至更多的缺陷，两个相邻的缺陷，也分这两个缺陷相邻和远离的情况，图4.13右图是两个缺陷相邻的情况，正是这些形形色色各种类型的缺陷导致零温熵的值相对decorated-square格子零温值有偏差。

4.4.2 映射到其他统计模型

零温时union-jack格子上 $q = 4$ Potts模型可以映射到其他的统计模型。我们知道反铁磁的Potts模型在零温时等价于图论里的顶点染色问题。顶点染色问题是说在一个给定的图（顶点和边的集合）上给顶点染色，要求同一条边上的两个顶点必须染不同的颜色。而反铁磁Potts模型的基态要求有相互作用的两个格点（被一条边相连）必须占据不同的状态，因此这两个问题是等价的，某

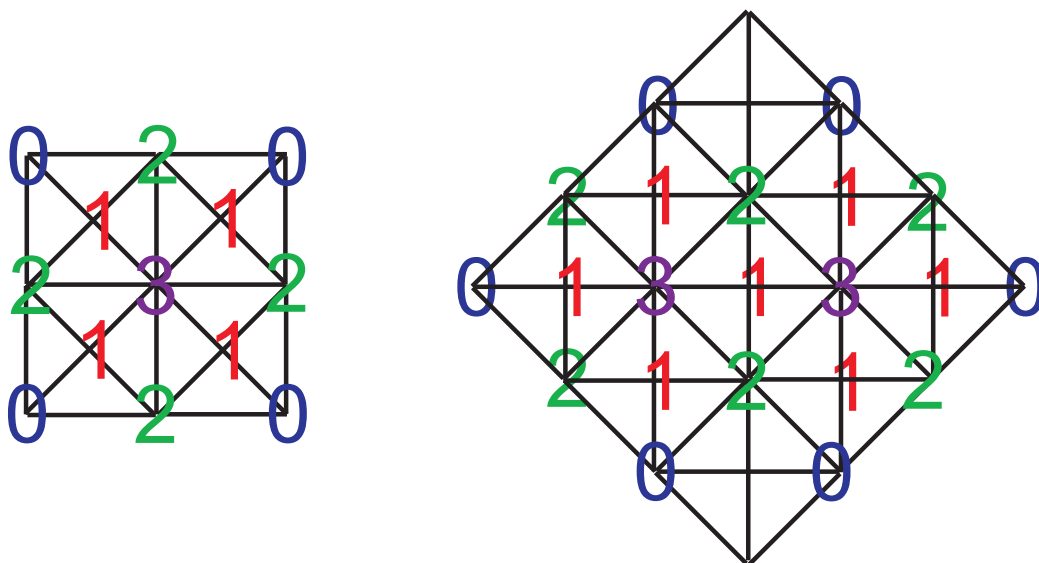


图 4.13: union-jack格子上的缺陷，左：一个缺陷，最中心A格点的状态是‘3’，而不是‘0’，破坏了长程序，可是这个状态仍然是基态，只是周围的B格点和C格点的状态选择变少了；右：两个缺陷，中间的两个A子格的状态是‘3’，而不是‘0’。

格子上 q 态反铁磁Potts模型在零温时等价于这个格子上的 q 色顶点染色问题。这一小节，我们把union-jack格子上的四色顶点染色问题映射到其他统计模型。

除了顶点染色问题之外，还有边染色问题。边染色是说在图的边上染色，要求共用一个顶点的两条边必须染不同的颜色。我们可以建立union-jack格子的四色顶点染色问题，与其对偶格子上三色边染色问题的映射。如图4.14左图所示的正四面体，正四面体的顶点表示union-jack格子的四种颜色，这里我们用数字表示那四种颜色，正四面体的边表示其对偶格子上边的颜色，这里我们用红绿蓝三种颜色表示对偶格子上的三种颜色。可以看到正四面体每个面上的三角形都是三条边的颜色各不同。如图4.14右图所示，union-jack格子上的每个三角形都映射到其对偶格子4-8格子上的一点，这个点的三条边各不相同，满足边染色问题的条件，这样我们就建立了从union-jack的四色顶点染色问题到4-8格子上三色边染色问题间的映射。可以看到每一个union-jack格子上的顶点染色状态，都可以对应到4-8格子上的一点三色边染色状态。可是反过来当我们有一个边染色的状态时，从任意一条边出发，这条边的一个格点有四种选择，当一个点的状态选定后，另一个也定下来了，同时其他格点的状态也跟着

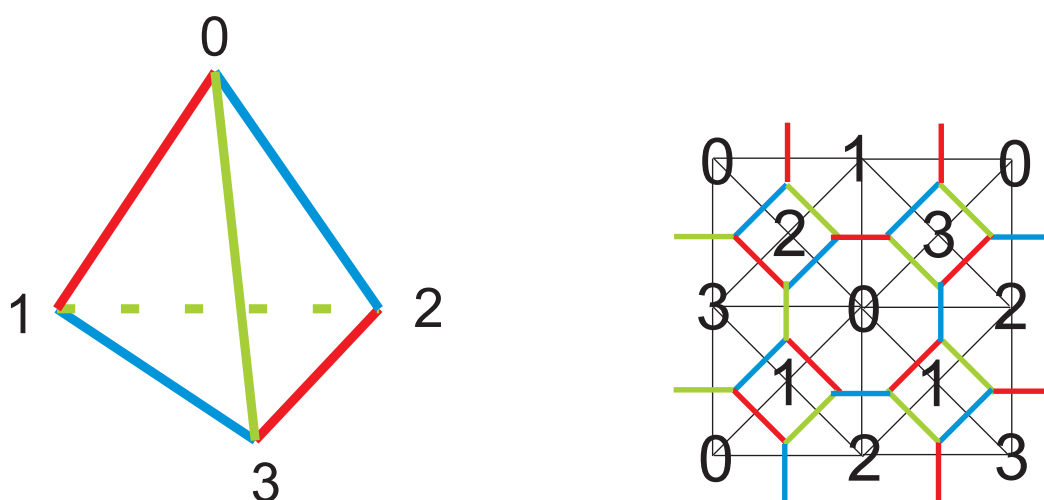


图 4.14: 左: 顶点染色与边染色状态的对应, 四边形的顶点是union-jack格子上顶点染色的四个状态, 四边形的边是4-8格子上的边染色的状态; 右: union-jack格子上四色顶点染色问题跟其对偶4-8格子上的三色边染色问题的对应。

完全确定了, 所以反过来是一个一对四的映射。可以看到这个映射对任何由三角形组成的平面格子都适用[155]。

因为4-8格子上每个格点有三个边, 这三条边的颜色都不同。如果我们任意选取其中两种颜色, 例如红和蓝, 选取格子上所有的顶点和它的红边蓝色构成一个图。每个格点都会有两条边是红色或蓝色的, 这样图上的每个格点的连通度都是2, 我们知道连通度为2的点会形成一个个的回路。这些回路满足一些特殊的性质, 首先是每个格点都有回路通过, 并且每个格点只有一个回路通过, 其次是回路之间不接触也不相交。这样的回路模型被称为fully-packed loop(FPL) model, 配分函数可以写成:

$$Z = \sum_G n^{N_L} \quad (4.13)$$

这里的 N_L 是回路的数目, n 是回路的fugacity, 也就是自由度。如果我们把回路的状态映射回到染色问题, 每个回路可以对应于‘红蓝红蓝’或者‘蓝红蓝红’两种状态, 所以跟三色边染色问题等价的FPL模型的fugacity是2。Jacobsen[156]研究了4-8格子上的FPL模型, 他指出 $n > 1.88$ 时关联长度是有限的, 意味着系统处于非临界状态。他还指出在 $n = 2$ 时这个模型可以映射

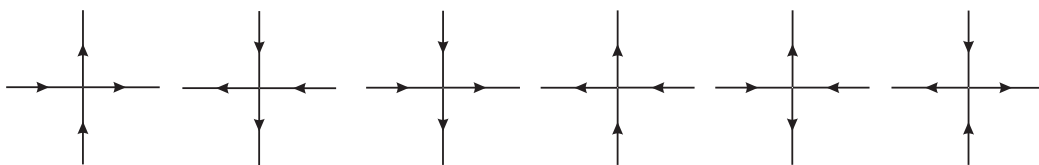


图 4.15: 六顶点模型, 满足冰规则, 每个顶点上的四条边, 都是两进两出的, 因而总共有六种构型。

到9态Potts模型。

4-8格子上的三色边染色问题还可以映射到正方格子上的completely-packed loop(CPL) model [157]。4-8格子上的边有构成四边形的和只构成八边形的两种, 我们分别称这两种边为内边和外边。四边形的边为内边, 每个四边形与四条外边相连。总共三种颜色于是每个四边形上总有一对内边的颜色是相同的, 并且这两条边是相对的。连接这两条边的对角线把四条外边分成两对, 每对的两条边的颜色必然相同。如果四边形上两对内边的颜色都相同, 那么四条外边的颜色都相同, 这四个外边可以沿着任意一个对角线方向分成两组。抹去内边后所有的外边形成正方格子, 把正方格子上相同颜色的边连在一起, 会形成一个个回路, 这些回路会覆盖正方格子的每条边, 每条边只属于某一个回路, 回路之间不相交但可以接触, 这样的回路模型就是CPL模型, 跟FPL模型不同, CPL模型只能定义在配位数全是偶数的格点上, 配分函数的形式跟FPL模型一样。我们把CPL模型映射回到边染色问题时, 每个回路可以选取三种颜色, 因此跟边染色问题等价的CPL模型上fugacity是3。正方格子上的CPL模型在 $|n| < 2$ 是临界的, 所以 $n = 3$ 时是非临界的。

正方格子上的CPL模型可以映射到正方格子上的六顶点模型[158], 对应关系是 $\Delta = -n/2$ 。如果我们在CPL的每个回路都沿着逆时针或者顺时针方向加上箭头, 因为每个格点有两条回路通过, 对每个回路来说都是一进一出, 每个顶点上一定是两进两出的, 这样我们就建立了CPL模型和六顶点模型的映射。正方格子上的六顶点模型有严格解。这个解首先是Lieb[159]给出的, 后来还有这个结果的推广。对于六顶点模型, 在 $\Delta \geq 1$ 时处于铁电相, 这个相是非临界的, 在 $\Delta < -1$ 处于反铁电相, 同样也是非临界的, 而在 $-1 \leq \Delta < 1$ 时处于无序相, 这个相是临界的。在CPL模型 $n = 3$ 的情况下 $\Delta = -3/2$, 所以此时系统是处于反铁电非临界区域。

union-jack格子上零温的 $q = 4$ Potts模型与4-8格子上的三色边染色问题

和 $n = 2$ 的FPL模型等价，同时也和正方格子上的 $n = 3$ 的CPL模型和六顶点模型等价。最后这个模型也可以映射到正方格子上 $q = 9$ 的铁磁Potts模型[160]，对应的铁磁Potts模型的温度是 $e^{\beta J} = 4$ 。这些模型都是非临界的，所以在 $q = 4$ 在零温时也是非临界的，这跟我们关于零温有长程序的观点是一致的。

4.4.3 Height Representation

很多统计模型可以映射到interface模型或者叫solid-on-solid模型，或者称之为‘height’模型，也就是所谓的‘高度’映射。每个格点可以被分配一个高度，这个高度可以是标量的，也可以是矢量的。这个过程相当于是在二维的格点上定义了一个一维或者高维的场，这个场是光滑的。如果我们认为这个高度场的行为是高斯曲面，这个模型处于rough相时这个结论是被证实的。这样我们可以直接求解这个模型的临界行为，得到临界指数等我们关心的标志临界行为的物理量。临界指数依赖于高斯曲面的弹性 K 以及以高度为函数的近似算符的波长。对于微观高度场做粗粒化，我们可以得到一个模型有效场论。这个有效场论可以跟库仑气体理论相联系，我们知道库仑气体是可以重正化的，于是临界算符等物理量可以直接得到。

存在高度映射通常意味着系统是临界的，这样的例子包括正方格子上反铁磁 $q = 3$ Potts模型[161]，三角格子上 $q = 4$ 反铁磁Potts模型，三角格子上的Ising模型，kagome格子上 $q = 3$ Potts模型，dimer模型，以及FPL模型等。

下面我们介绍union-jack上的高度映射，做法跟三角格子是类似的[155]。首先我们定义张量 B ，张量 B 定义在union-jack格子的键上：

$$B = \mathbf{t} \otimes \mathbf{E} \quad (4.14)$$

这里 \mathbf{t} 和 \mathbf{E} 是矢量， \mathbf{t} 是单位矢量，方向是沿着union-jack格子上边的方向，我们定义在AB边是从A格点到B格点，BC边是从B格点到C格点，AC边是从C格点到A格点。这样可以保证每个三角形上的向量形成一个回路，每个回路是顺时针或者逆时针的，如果一个回路是顺时针的，它相邻的回路都是逆时针的。

向量 \mathbf{E} 依赖于两边格点的物理指标，跟Union-jack四色顶点染色问题到4-8格子三色边染色问题的映射一样，我们可以把两个顶点的12种状态对应到边上的三种状态，这三种状态在这里就是平面上的三个互成120度的单位向量。

于是我们可以定义位置 x 处的高度场:

$$h(x) = h(0) + \int_0^x ds \cdot B \quad (4.15)$$

这里的积分是沿着从0到 x 的任意路径, 我们知道结果是不依赖于路径的, 因此每个闭合回路的积分一定是零。

接下来的任务是找到理想状态, 理想状态是那些宏观上零斜率的态, 这些态使得熵密度最大化。存在高度表示意味着系统是临界的或者是长程有序的, 从前面跟其他统计模型的映射我们知道系统在零温时是非临界的, 这也就间接地表明系统在零温有长程序。

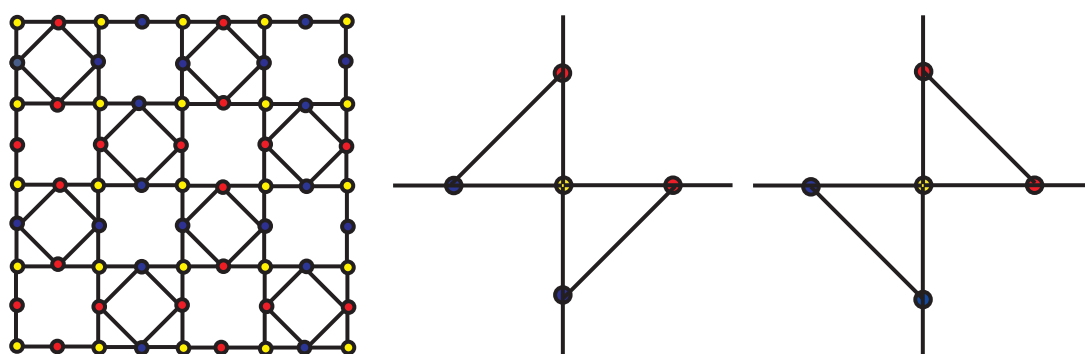


图 4.16: 左: square-kagome格子分为三套子格, 但是三套子格的选取方式不是唯一的; 中: square-kagome格子上张量A的定义; 右: square-kagome格子上张量B的定义。

4.5 Square-kagome格子上的 $q = 3$ Potts模型

类似于kagome格子和三角格子关系, square-kagome是union-jack的media格子。也就是在原来晶格上边的中心加点, 并把共用一个顶点的两条边对应的点相连, 也就是把原来格子上的边映射成为点, 也相当于是在原来的图形上的每个多边形内部画上其内接多边形。一对对偶格子的边与边之间是一一对应的关系, 因而通常一对对偶格子的media格子是相同的, 也就是说4-8格子和union-jack格子的media格子都是square-kagome格子。这样我们就知道4-8格子上的边染色问题, 跟square-kagome上的顶点染色问题是等价的, 因为union-jack上的四色顶点染色问题跟4-8格子上的三色边染色问题等价, 因而square-kagome上的三色顶点染色问题和union-jack上的四色顶点染色问题等价。同理square-kagome上 $q = 3$ Potts模型和union-jack上 $q = 4$ 在零温是等价的。

square-kagome格子是三子格的, 我们可以按照如图4.16所示的三种颜色, 把square-kagome格子分成三套子格, 然而这样的选择方式不是唯一的, 例如我们可以把任意一个带内接四边形的方块上的红色和蓝色任意互换, 而不会影响到其他位置格点颜色的选取, 这样的选取方式有无穷多种。

square-kagome格子可以看成是有相互作用的decorated-square格子, 同样地我们可以把decorated格点上的物理自由度做为张量指标来定义张量。此时总共分两种张量, 分别如图4.16的中图和右图所示, 新引入相互作用在每个张量中存在于两对格点之间。这样我们就可以用定义在正方格点上的四阶张量的收

缩来计算square-kagome格子上的配分函数。

$$T_{\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4}^1 = \sum_{\sigma_5} e^{-\beta J(\sigma_1\sigma_3 + \sigma_2\sigma_4 + \sigma_1\sigma_5 + \sigma_2\sigma_5 + \sigma_3\sigma_5 + \sigma_4\sigma_5)} \quad (4.16)$$

$$T_{\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4}^2 = \sum_{\sigma_5} e^{-\beta J(\sigma_2\sigma_3 + \sigma_1\sigma_4 + \sigma_1\sigma_5 + \sigma_2\sigma_5 + \sigma_3\sigma_5 + \sigma_4\sigma_5)} \quad (4.17)$$

我们知道union-jack格子在零温是有长程序的，根据这两个模型之间的等价性，我们期待square-kagome上也会有一些有趣的现象。square-kagome可以看成是由包含内接四边形的四边形通过点对点的方式构成的，我们观察每个这样的结构，也就是四个黄色格点构成的四边形，上面有两个蓝色和红色格点。如果这上面的一对蓝色分别取不同的状态‘0’和‘1’，两个红色的格点都跟着两个蓝色格点相连，所以这两个红色格点都只能取状态‘2’，这样边上的四个黄色格点的状态也就完全地确定下来了。与之相邻的四边形上只有一个黄色格点与之相连，这个黄色格点的状态是确定的，可是和这个黄色格点相连的红色和蓝色格点的状态是不确定的，并且跟这两个格点相连的两个黄色格点的状态也不受这个黄色格点状态的影响。也就是说这个系统不存在任何的长程序。

基态的要求是每个四边形上的一对红色或者一对蓝色格点必须占据相同的状态，这样系统中只存在短程序而不存在长程序，因而在有限温的时候不会有任何的相变。我们对比热的计算也证实了这一事实。比热只有一个极大值，是典型的无相变发生的曲线。

再看看union-jack和这个模型之间的映射，union-jack上A和B子格之间的边对应于square-kagome 格子上的黄色格点，A和C之间的边对应于红色的格点，而B和C之间的边对应着蓝色的格点。union-jack 上的元胞对应着这里的带内接四边形的四边形。union-jack上的有序是所有的A子格都取相同的状态，而C子格上的状态是任意的，每个元胞内的一对A和C之间的边必然对应于同一个状态，也就是说每个元胞内的一对红色格点必须占据相同的状态。但是不同元胞的C格点状态可以是不同的，因而不同四边形的红色格点可以占据不同的状态，union-jack上的长程序对应到square-kagome上成为短程序。

第五章 其他格子上的反铁磁Potts模型

从前面的第三章和第四章的结果我们知道，反铁磁Potts模型在不同的晶格上和不同 q 值时的性质是丰富而不容易预测的，这一章我们将继续采用张量网络算法计算很多种非常规晶格上的反铁磁Potts模型，并对这些结果进行讨论、分析和总结。我们将看到很多非常规的序，以及各种丰富的临界行为。

Union-jack格子是在正方格子的每个四边形中心加一个格点而得到的，同样的我们可以在diced 格子上的四边形中心加点，从而得到centered-diced格子，跟union-jack格子一样，这上面的子格之间的差异性更大，因为正方格子上的两套子格是等价的，可是diced格子上的子格却不互相等价，于是我们可以看到centered-diced格子上的物理更加丰富，从 $q = 2$ 到 $q = 5$ 都会存在部分有序的生长程序。

在正方格子的每个四边形中心加点，我们会得到union-jack格子，如果我们交错地在四边形的中心加入格点，我们就会得到checker-board格子，这个格子上的 $q = 2$ 和 $q = 3$ 都存在部分有序，并且 $q = 3$ 时的部分有序是能量驱动的，跟前面讨论的熵驱动的部分有序不同，我们将会详细地讨论这两种部分有序的不同之处。

同样地我们可以在diced格子上的的一部分四边形上加入中心格点，这就是我们将会讨论的dilute-centered-diced 格子，主要考虑1/3或者2/3的四边形被加入中心格点，由于我们要讨论的是有平移不变性和周期性的格点，每种填充数的情况有两种加入的方式，这样总共有四种晶格要讨论。这些晶格在 $q = 2$ 到 $q = 4$ 都存在部分有序，其中有序的机制也有多种。

通过对这些晶格上反铁磁Potts模型的研究，我们发现部分有序生长程序的出现有两种机制。一个是熵驱动，第四章的union-jack格子上从 $q = 2$ 到 $q = 4$ ，以及diced格子上 $q = 3$ 上面的部分有序全都是由于具有部分有序的状态数远大于没有序的状态，而出现了长程序。这一章centered-diced格子上 $q = 2$ 到 $q = 5$ 上的部分有序全都是由于这种原因出现的。这种序的特点是缺陷的存在导致零温熵的实际数值大于我们估计出的数值。Dilute-centered-diced IIB格子 $q = 2$ 时，IA和IB格子 $q = 3$ 时，以及四种dilute-centered-diced格子在 $q = 4$ 时都是这种情况。

另外一种部分有序是能量驱动的，也就是说完全是能量最小化要求部分格点有序，另外部分的格点有一定的自由度，是长程无序的。这样的部分有序发生在checker-board格子上的 $q = 2$ 和 $q = 3$ 时，及dilute-centered-dicedIA格子、IB格子、IIA格子上 $q = 2$ 时，IIA和IIB格子 $q = 3$ 时，这些模型上的零温熵极容易估计。

表 5.1: 原始格子, 对偶格子, 四边形格子, media格子以及中心格子

G	G^*	\bar{G}	\bar{G}^*	\tilde{G}
square	square	square	square	union-jack
honeycomb	triangular	diced	kagome	centered-diced
diced	kagome	D(3-4-6)	3-4-6	centered-D(3-4-6)

5.1 Centered diced 格子上的反铁磁Potts模型

如果在diced格子上每个四边形中间加一个点, 并与四边形的四个顶点相连, 我们得到centered-diced格子, 在一些文献中也被称为bisected-hexagonal格子。与union-jack类似分为三套子格, 如图5.1左图所示, 三套子格分别用红黄蓝三种颜色标识, 可以看到配位数分别是4, 6, 12。如果总的的格点数是 N , 那么红黄蓝三套格子上的格点数分别是 $N/6$, $N/3$, $N/2$, 所有格点的平均配位数是6。跟union-jack格子相比, centered-diced格子上的三套子格之间更加不等同, 导致这上面有更丰富的物理, 我们将在这一节讨论。centered-diced格子的对偶格子是4-6-12格子, 是一种配位数为3的双子格阿基米德格子。

union-jack格子和centered-diced格子一样都是通过由在四边形构成的格子中的每个四边形的中心加一个点而构成的。如果我们把一个格子 G 以及其对偶格子 G^* 都画在一张图里, 并且把 G 和 G^* 上的键都抹去, 把 G 上的每个格点与 G^* 上离它最近的格点相连, 这样我们得到新的格子 \bar{G} 。 \bar{G} 是由四边形构成的格子。如果 G 是正方格子, 它的对偶格子 G^* 以及 \bar{G} 都是正方格子。如果 G 是六角格子, 那么 G^* 是六角格子, \bar{G} 是diced格子。如果我们在 \bar{G} 上每个四边形的中心加一个点, 并与四边形的四个顶点相连, 这样我们得到由三角形构成的 \tilde{G} 格子。 \tilde{G} 格子是三子格的, 三套子格分别是由 G 和 G^* 上的格点以及新添加的格点构成的。 \tilde{G} 格子上的 $q = 4$ 反铁磁Potts模型有相变, 表5.1列出了几种这样的中心格子。

这一节我们讨论的很多centered-diced格子上的性质在这些中心格点上都具有, 如 $q = 2$ 时阻挫导致的部分有序, $q = 3$ 在有限温的部分有序, $q = 4$ 上零温时的部分有序, 以及这些模型映射跟其他模型之间的映射。

如图5.1中图所示, 跟union-jack格子一样, center-diced格子上的配分函数可以通过把每个元胞中间点的自由度积分积掉, 然后把配分函数定义在原始格子的对偶格子上。如图5.1右图所示, centered-diced格子上的配分函数可以表示成kagome格子上四阶张量的收缩。正如我们在第三章所讨论的, kagome格

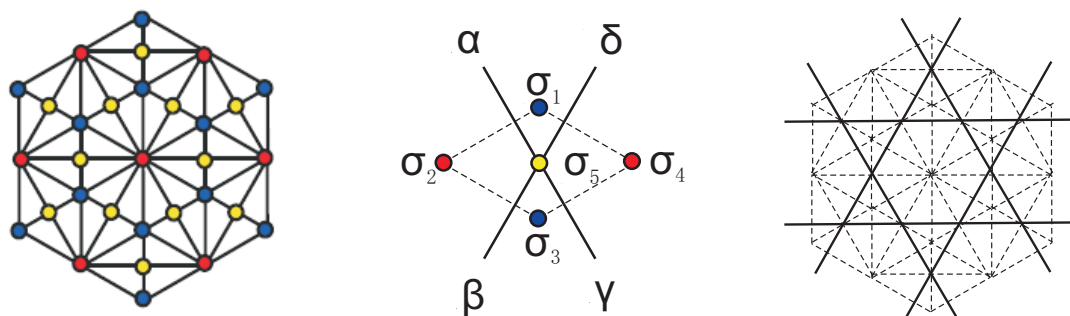


图 5.1: 左: centered-diced格子是三子格的, 包括红黄蓝三种格点, 配位数分别是8, 8, 4; 中: 把每个元胞中间的点求和掉, 我们得到张量的定义; 右: centered-diced格子上的配分函数可以定义在kagome格子上

子上的张量网络, 可以先拉伸, 合并成六角格子上的张量网络, 然后采用六角格子上的TRG、SRG及iTEBD等方法进行计算。

5.1.1 $q = 2$

$q = 2$ 的Potts模型等价于Ising模型, 二维的Ising模型一般都有严格解, centered-diced格子也不例外。我们通过积分掉元胞中心格点的方式, 把centered-diced格子上的Ising模型映射到kagome格子上的八顶点模型[162], 从而严格解了这个问题。求和掉中心格点的方式跟union-jack格子变到square格子一样, 但是因为kagome格子是三子格的, 具体的细节会有一些不同。图5.2示意了怎样把centered-diced格子上的Ising模型模型映射到kagome格子上的八顶点模型。如果两个相邻格点的状态相同的话, 就把它们之间用实线表示, 若状态不同, 则用虚线表示。这样就把centered-diced格子上的状态映射到kagome格子上用实线和虚线表示的状态。每个元胞上有四个格点, 共十六种状态, 但是每种实线或虚线的状态对应的是两种状态, 这样实线和虚线总共只有八种状态, 如图5.2第一行所示。kagome格子是三子格的, 不同子格的选取方式不是唯一的, 周期性的, 有平移不变性的方式有两种。令AB之间实线是从A指向B的, 虚线是B到A, B和C之间的实线是从A指向B, 虚线则反之, CA之间的实线是从C指向A的。存在两种不同子格选取方式, 于是映射到八顶点模型上的构型也有两种, 分别在图5.2的第二行和第三行显示。kagome格子上的八顶点模型存在严格解, 就这样我们得到了centered-diced格子上的严格解。

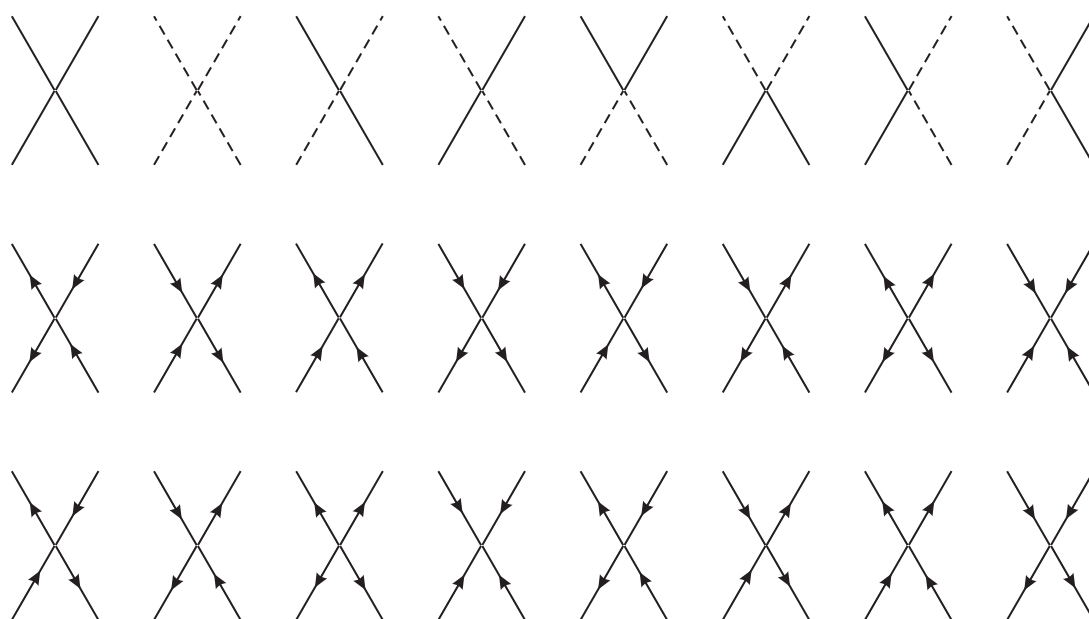


图 5.2: Centered-diced格子上 $q = 2$ 的Potts模型映射到kagome格子上八顶点模型有两种方式，分别如第二行和第三行所示

centered-diced格子是三角形构成的，因而是有阻挫的，可是零温时却也可以形成长程序。作为三子格的晶格，在 $q = 2$ 时，A和B，B和C或者A和C形成反铁磁序都是系统的基态。如果A和B子格形成反铁磁序时，C子格的每个格点可以任意选取其中的两个状态。因为三套子格的数目是不相等的，其中C子格的数目最多，因而C子格无序的状态数远多于其他两套子格无序。也就是A和B子格形成反铁磁长程序的状态数是基态数中的主要贡献，这也是有阻挫的情况下会形成长程序的原因。

如图5.3我们计算了 $q = 2$ 时的热力学量，图中蓝色的线是熵，红色是比热。A和B子格形成反铁磁序时，每个C格点可以任意选取两种状态，这种状态的状态数是 $2^{N/2}$ ，对应的熵是 $(\log 2)/2 \approx 0.346573$ ，在图中用绿色的虚线标出，而我们的数值结果是0.394632，跟平庸极限有一定差距，正如我们在第四章讨论的，是缺陷导致了这种差异。只是在这里缺陷出现的几率比较大，因而熵的偏差比较大。比热的发散表明相变的发生，我们可以看到此时相变的发散行为跟其他格子上 $q = 2$ 时是一样的，都是对数发散，属于同一个普适类。

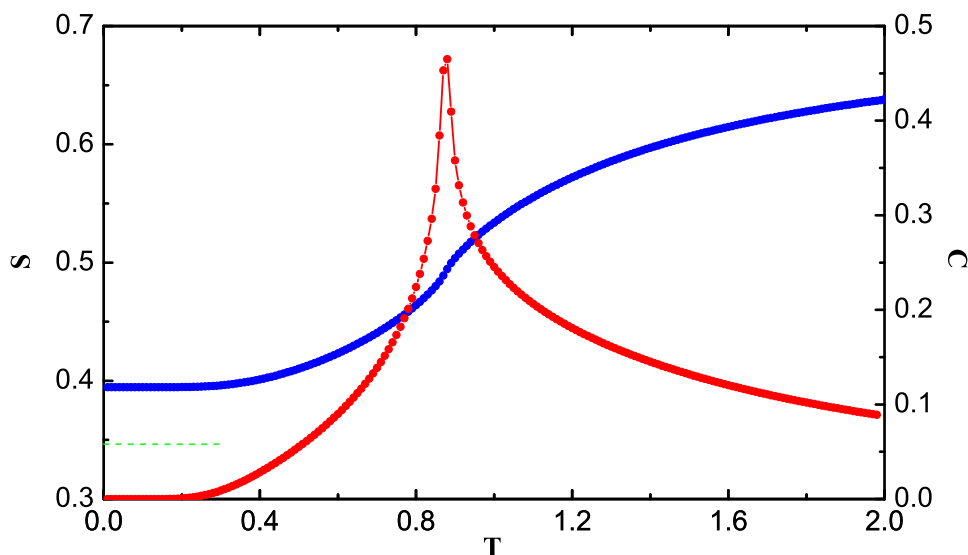


图 5.3: centered diced格子上 $q = 2$ 的熵和比热, 蓝色是熵, 绿色虚线是熵的平庸极限, 红色是比热, 对数发散表明这个相变属于Ising普适类。

5.1.2 $q = 3$

三套子格的晶格, 若不同子格的选择方式是唯一的, $q = 3$ 时的反铁磁基态是每套格子上的格点各占据其中一种状态。也就是说基态是唯一的, union-jack格子和三角格子都属于这种情况, 低温有长程序, 随着温度的升高, 热涨落破坏了长程序, 相变发生后, 系统处于高温无序相。centered-diced格子也是三子格完全确定的格子, 然而我们的计算表明它跟其他两个格子不同, 如图5.4所示:

我们看到跟union-jack格子上 $q = 3$ 一样, centered-diced格子上比热也在两个不同温度处发散, 也就是说从零温到高温发生了两个相变, 系统经历了三种状态。这三种状态分别是低温低对称有序相, 低温高对称有序相和高温无序相。不过不同的地方是在这里A子格的状态发生变化时, 有6条边的能量发生变化, B子格有3条边的能量发生变化, C子格是2条边。所以在高温下, B和C子格无序的可能性远远大于A子格无序, 在有限温度下存在A子格有序的长程序, 这一点跟union-jack格子不一样。

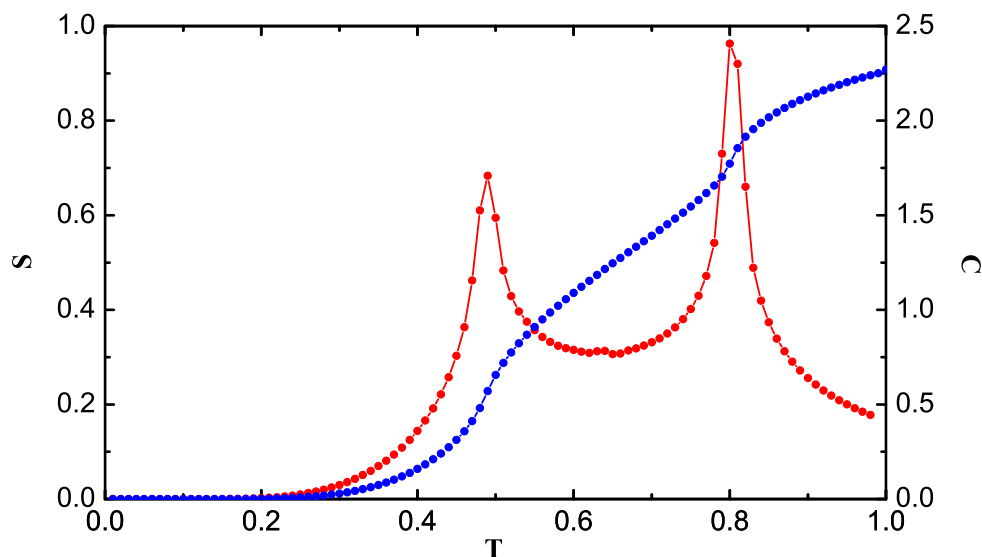


图 5.4: centered diced格子上 $q = 3$ 的熵和比热，蓝色是熵，红色是比热，两个发散是因为发生了两次相变。

5.1.3 $q = 4$

我们首先预言并通过张量重正化群的计算证实了这一相变，同时这一相变也被其他小组[160]预言过。跟第四章讨论的union-jack格子一样，零温时centered-diced格子上的 $q = 4$ 也可以映射到4-6-12格子上的三色边染色问题，4-6-12格子上 $n = 2$ 的FPL模型，kagome格子上 $n = 3$ 的CPL模型，kagome格子上的六顶点模型，以及三角和六角格子上温度为 $e^{\beta J} = 4$ 的9态铁磁Potts模型等。这些模型之间的映射方法是相同的，同样地，也可以做高度映射。

跟union-jack格子一样，有序是少数点子格上的有序，这里的有序发生在A子格上，也就是图5.1左图中的红色格点，那么剩下的蓝色和黄色格点形成decorated-honeycomb格子，A子格有序的状态数跟decorated-honeycomb格子上 $q = 3$ 的基态数是一样，因为B子格和C子格的格点是 $5N/6$ ，于是有 $S_0^{cd} = 5/6 S_0^{dh}$ ，我们数值计算得到的 $S_0^{dh} = 0.612153$ ，那么centered-diced格子上的零温极限是0.510128，我们计算得到的零温熵是0.510418。

此时如果有一个A格点上出现缺陷，跟他相邻的6个B格点和6个C格点的状态都会受到影响，原来的状态数是 2×2^{11} ，现在成为2，每个缺陷的出现会导

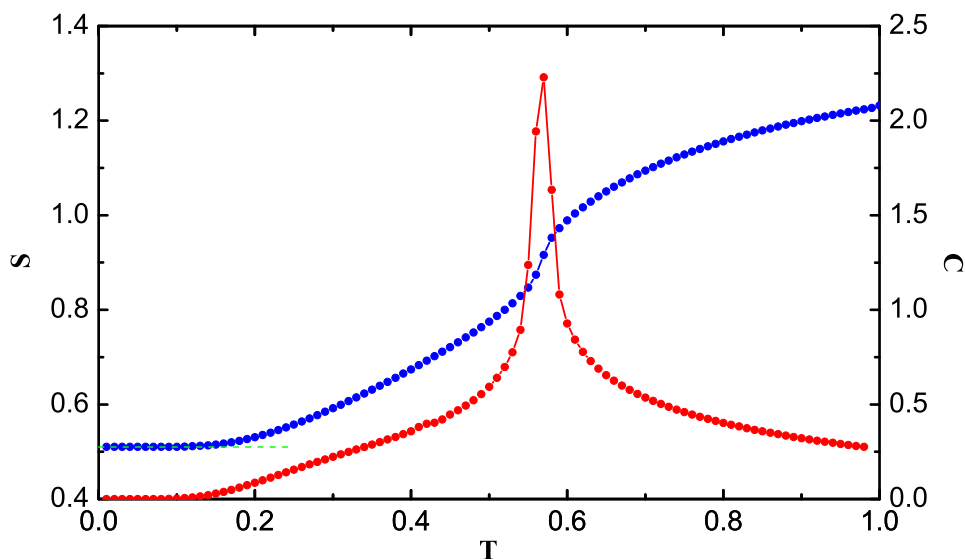


图 5.5: centered diced格子上 $q = 4$ 的熵和比热, 蓝色是熵, 红色是比热, 绿色虚线是熵的零温平庸极限

致状态数大大地减少, 于是缺陷对熵的贡献就会比较小。但是因为这里的序是熵最大化驱动的, 缺陷对熵的修正一定是有限的。

比热的发散证实了相变确实发生, 只不过在这里长程序只破坏了四种状态之间的对称性, 没有破缺晶格子格之间的对称性, 在相变附近比热有个明显的尖峰, 这表明相同 q 值的Potts模型上的相变不一定属于同一个普适类。

5.1.4 $q = 5$

邓友金等人[160]预言centered-diced格子上的 $q_c = 5.397(5)$, 表明这个格子在 $q = 5$ 时会有相变。我们通过对于热力学量的计算和分析(图5.6), 证实了相变的发生。这是目前我们唯一知道的, 在 $q = 5$ 仍然会发生相变的格子。

假设此时的有序仍然是发生在A子格上, 跟 $q = 4$ 一样可以通过decorated-honeycomb格子上 $q = 4$ 的零温熵, 来估算这上面的零温熵。 $S_0^{dh} = 1.041077$, 那么centered-diced格子上的零温极限是0.867564, 我们计算得到的零温熵是0.873538, 可见这里缺陷对熵的修正也比较小。我们还计算了比热, 比热的发散告诉我们确实是有相变发生的。比热的行为跟 $q = 3$ 时的diced格子上类

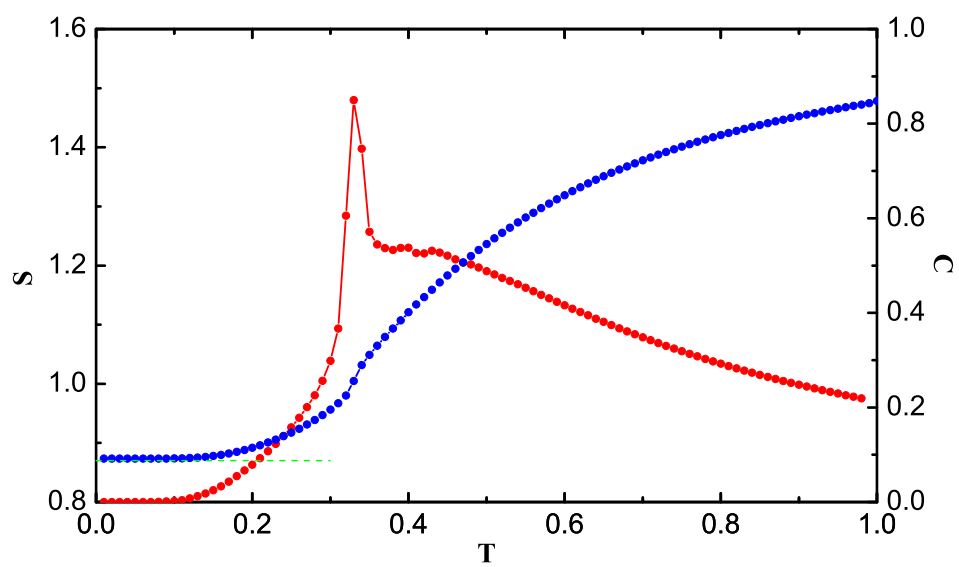


图 5.6: centered dimer格子上 $q = 5$ 的熵和比热, 同样地蓝色曲线是熵, 绿色虚线是熵的平庸极限, 红色是比热。

似。

5.2 ‘checkerboard’ 格子上的反铁磁Potts模型

Union-jack格子是通过在正方格子每个正方形的中心加一个点而得到的，如果我们在正方格子上交错地加中心格点，可以得到类似于checkerboard格子的一种格子，如图5.7所示，通常的checkerboard格子是指在正方格子上存在交错的对角相互作用，这里是把对角相互作用变成，在中心加入一个新的格点并使之与四周的格点有相互作用。checkerboard格子可以看成是部分union-jack格子，上面的格点有配位数为4和6的两种，跟union-jack格子和centered-diced格子一样，可以分为三套子格，不同的是子格的选择不是唯一的，也就是说前两种晶格上把格点划分为三套子格只有一种方式，在checkerboard格子上虽然三种颜色已经可以使得最近邻的格点都染不同的颜色，可是三种子格的选择方式却又很多种，于是这个格子上 $q = 3$ 的Potts模型不像前两种格子有唯一的基态，基态是简并的。

我们知道checkerboard格子是部分的union-jack格子，也就是可以看成是union-jack格子和正方格子的过渡。所以我们期望它的性质也介于这两种格子之间。我们知道 $q = 2$ 时，这两种格子上低温都有序，只是union-jack上是部分有序。在 $q = 3$ 时，正方格子上零温临界点，没有长程序，而在union-jack格子上是部分有序，那么checkerboard格子是否会存在长程序是一个值得探讨的问题。

checkerboard格子上张量的定义可以有两种方式。一种是跟union-jack一样，把每个元胞中间格点的自由求和掉，把配分函数表示成正方格子上四阶张量的收缩，只不过在这里，张量是交错的，也就是说一半的张量需要求和掉中心的格点，另外一半则只需要做对偶变换。另外一种方式是类似于decorated-square格子上的定义，如果我们把checkerboard格子转45度，黄色的格点构成正方格子，红色和蓝色格点点缀于上面的每条边上，跟decorated-square格子一样，我们把红色和蓝色格点的自由度做为张量的指标，并考虑他们之间的相互作用，可得到张量的定义如下：

$$T_{\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4} = e^{-\beta J(\delta_{\sigma_1\sigma_2} + \delta_{\sigma_2\sigma_3} + \delta_{\sigma_3\sigma_4} + \delta_{\sigma_4\sigma_1})} \sum_{\sigma_5} e^{-\beta J(\delta_{\sigma_1\sigma_5} + \delta_{\sigma_2\sigma_5} + \delta_{\sigma_3\sigma_5} + \delta_{\sigma_4\sigma_5})} \quad (5.1)$$

5.2.1 $q = 2$

$q = 2$ 等价于Ising是存在严格解的，通过映射到八顶点模型的办法，Azaria等人[9]给出了这个模型的严格解，随后Lin和Wu[163]又给出了这个模

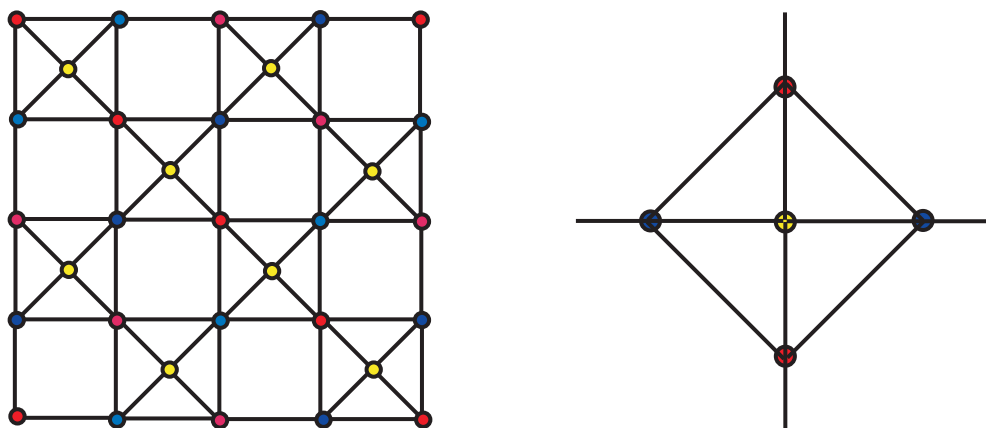


图 5.7: 左: checkerboard格子可以分为三套子格, 子格的选取方式不是唯一的; 右: checkerboard格子上张量的定义

型的磁化强度, 这些严格结果都表明会有相变发生, 后来蒙特卡罗的数值计算也证实会发生相变[164]。

Checkerboard格子是由union-jack的元胞通过点和点重叠的方式形成的, 要是观察每一个元胞, 能量最小的状态是边上的四个点形成反铁磁序, 中间的格点在两种状态中任意选取一种, 于是有可能在整个晶格上形成A和B子格的长程序。

如图5.8所示, 我们计算了 $q = 2$ 熵和比热。如果长程序跟union-jack格子上一致, 是A和B子格间形成反铁磁序, 也就是红色和蓝色格点, 每个黄色格点的自由度是2, 这样的状态数是 $2^{N/3}$, 因此零温熵的平庸极限是 $1/3 \log 2 \approx 0.231049$, 在图5.8中用绿色虚线标出。我们计算的熵(图5.8中蓝色曲线)跟这个结果符合的很好, 我们计算得出的零温的熵是0.231049, 跟平庸极限一致, 说明这里的序是由能量最小化导致的。我们还计算了比热(图5.8中红色曲线), 比热的发散表明相变的发生, 可以看到比热是对数发散, 这个相变也属于其他二维Ising模型的普适类。严格解相变点的位置 $T_c = 0.9742$ 在图5.8中用紫色虚线标出, 我们的计算给出的相变点位置跟严格解是一致的。

5.2.2 $q = 3$

checker-board格子是由union-jack的元胞和四边形构成的, 如果我们观察union-jack元胞的结构, $q = 3$ 时只有三种状态, 中心格点占据了‘0’状态

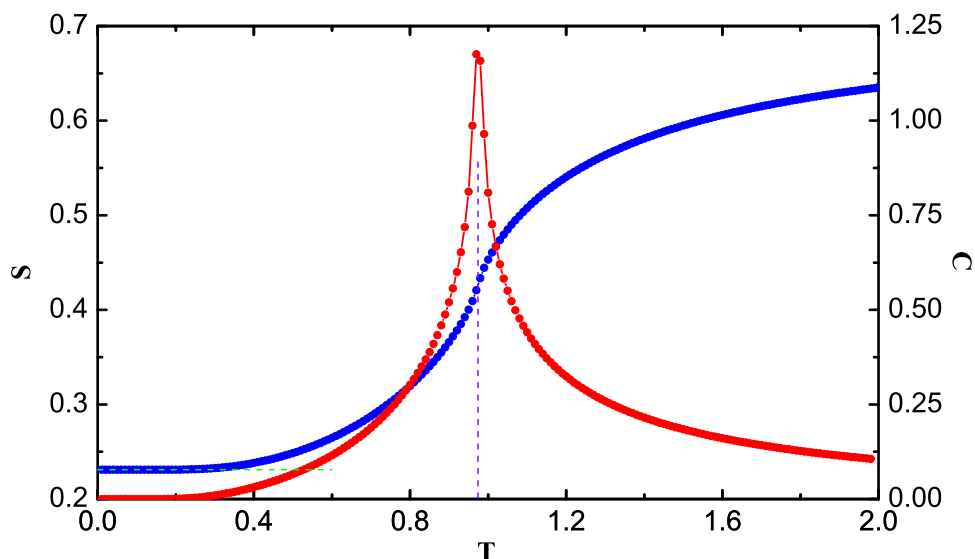


图 5.8: checker-board格子上 $q = 2$ 的熵和比热, 蓝色是熵, 绿色虚线是熵的零温极限, 红色是比热, 紫色虚线标示了严格解给出的相变位置。

之后, 边上的四个格点只能占据‘1’和‘2’了, 而且相邻的格点状态必须不一样, 那么只能是对角线方向的两对格点分别占据‘1’和‘2’。于是每个union-jack元胞上沿着对角线的一对格点必定取相同的状态, 而在正方形上却不是这样。正方形上, 只要有一对格点取相同的状态就可以了。如果我们把原来正方格子上的点分成A和B两套子格, 中心的点是C子格。我们看到这时沿着同一条对角线的所有A格点和沿着同一条对角线的B格点必须取相同的状态。与此同时相交的两条对角线上的A和B必须取不同的状态, 因为一条A的线与所有B的线都相交, 所以A取定一种状态时, B上可以任意取剩下的两种状态。那么剩下的其他线上的A也只能取那条对角线上A的状态。反过来也一样, 所以要么所有的A都占据相同的状态, 要么所有的B。这样系统就会形成A格点或者B格点上的长程序。

checkerboard格子也可以看成是由包含内接四边形的四边形通过边对边的方式构成的, 也就是黄色格点构成的四边形。每个四边形上要么一对红色, 要么一对蓝色必须取相同的状态, 这是不同行的蓝色或红色格点之间的约束。如果所有的红色都占据相同的状态, 那么不同行的蓝色格点可以取不同的状态,

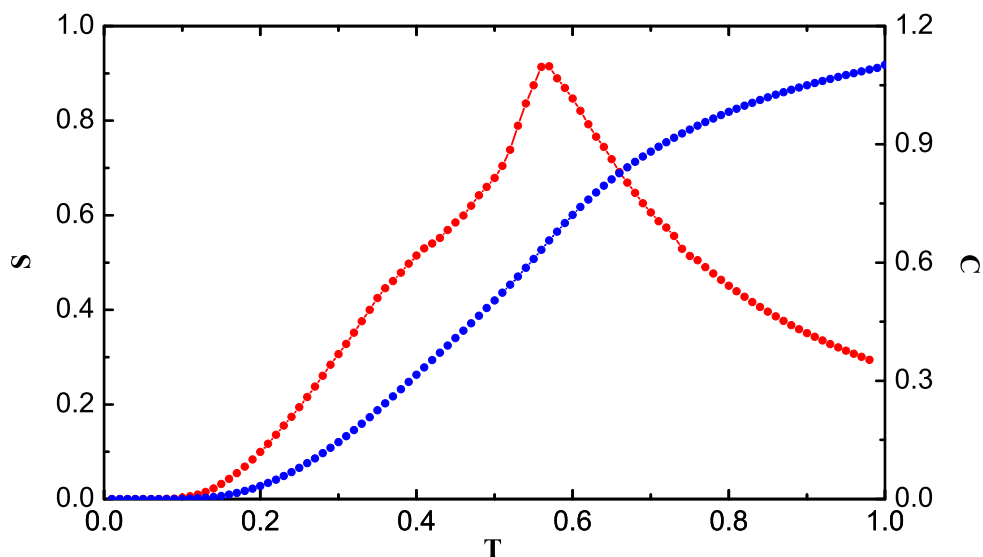


图 5.9: checker-board格子上 $q = 3$ 的熵和比热，红色是比热，蓝色是熵

这种状态的状态数是 2^L 。如果此时其中一行的红色格点的状态发生变化，这样夹在这行红色格点和其邻近行的不同行蓝色格点都必须取相同的状态，可是这些蓝色的格点是属于不同行的，而每一行的蓝色格点都必须取相同的状态，于是系统中所有的蓝色格点都必须同时占据一种状态。这是系统从红色格点有序变成了蓝色格点有序。

从上面的分析我们看到， $q = 3$ 时的长程有序完全是由能量的最小化要求导致的，所以基态的构型中没有不完美的序，零温的熵可以完全地预测出来。我们知道，基态的数目是 2^L ，这里 L 是 C 格点构成的正方格子的行数，于是每个格点的零温熵是 $L/N \log(2)$ ，在热力学极限下趋于零。我们的计算如图5.9，零温熵等于零，随着温度的增长，在高温时每个格点的自由度成为3，高温熵的极限是 $\log(3)$ 。

我们还计算了比热（图5.9中红色的曲线），看上去是连续的，这跟我们认为存在长程序是不一致的，于是我们又增加截断维数和温度间隔，计算了比热如图5.10所示，可以看到比热有个不连续，表明相变的发生，这里比热的行为跟union-jack格子上 $q = 4$ 类似，这两个系统的相同之处是基态都破缺了A和B子格的对称性，而不同之处是一个破缺了3种状态的对称性，一个

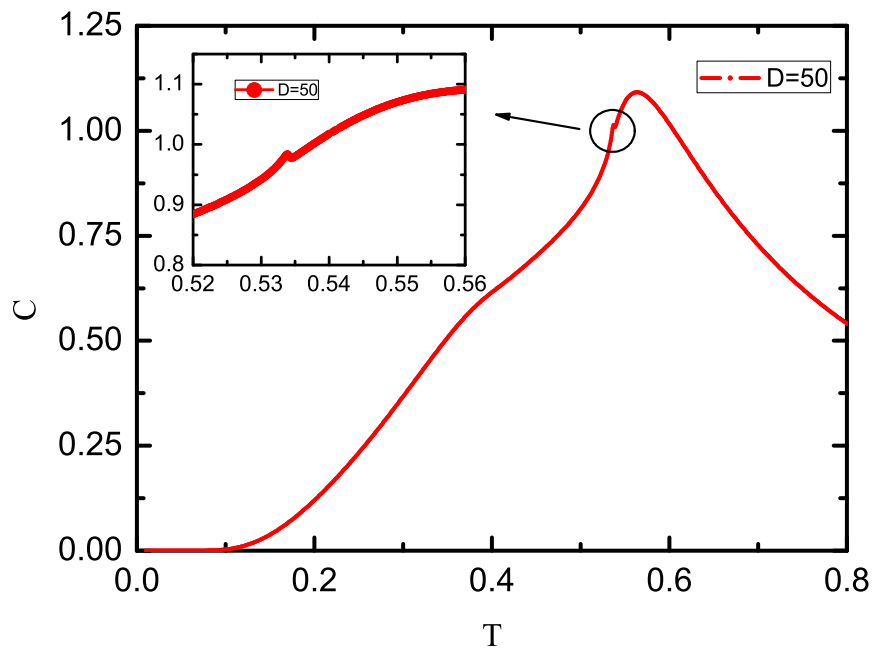


图 5.10: checker-board格子上 $q = 3$ 在截断维数是 $D = 50$ 的比热, 子图是计算更精细时的比热, 可以看到有明显的 discontinuity, 表明有相变的发生。

是4种状态的对称性。

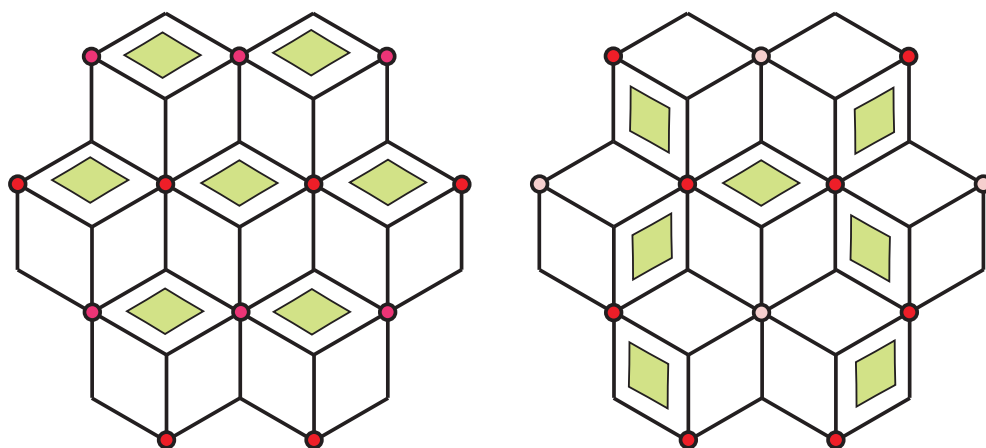


图 5.11: 选取diced格子上1/3的四边形加中心点而得到的两种dilute centered diced格子IA和IB

5.3 Dilute centered diced格子上的反铁磁Potts模型

正方格子是由四边形构成的，在四边形的中心加点我们可以得到union-jack格子，如果是交错地在四边形中心加点我们可以得到checker-board格子。centered-diced格子是通过在diced格子的四边形中心加点而得到的，同样我们可以在diced格子上部分的四边形的中心加点。如果选择的四边形是有平移不变性的，周期性的，那么我们就得到了要讨论的dilute-centered-diced格子。

在diced的格子上挑选四边形就相当于在kagome格子上选点，因为我们可以通过面到点，点到面的映射做对偶变换把diced格子对偶到kagome格子。Kagome格子是三子格的，因此我们在选的时候可以选其中的一套或者两套子格，也就是分别选取diced格子上1/3或者2/3的四边形在中心加点。Diced格子可以看成是把六角格子上每个六边形分成三个四边形而得到的，所以1/3和2/3就表示在每个六边形选取一个或两个。在平移不变性的情况下，对于每个填充数，有两种可能的选择。如图5.11和图5.12所示，图中有颜色的四边形表示添加了中心格点。

如果我们仍然按照centered-diced格子上的方式，对子格进行划分的话，A子格和B子格是diced格子上的A和B子格，C子格是中心格点。首先图5.11的两种格子，是在1/3的四边形上加中心格点得到的。如果 M 是系统中四边形的个数的话，A子格的格点数是 $M/3$ ，B子格的格点数是 $2M/3$ ，C子格是 $M/3$ ，这样总格点数是 N 的话，A、B、C子格上的格点数分别是 $N/4$ 、 $N/2$ 和 $N/4$ 。对于

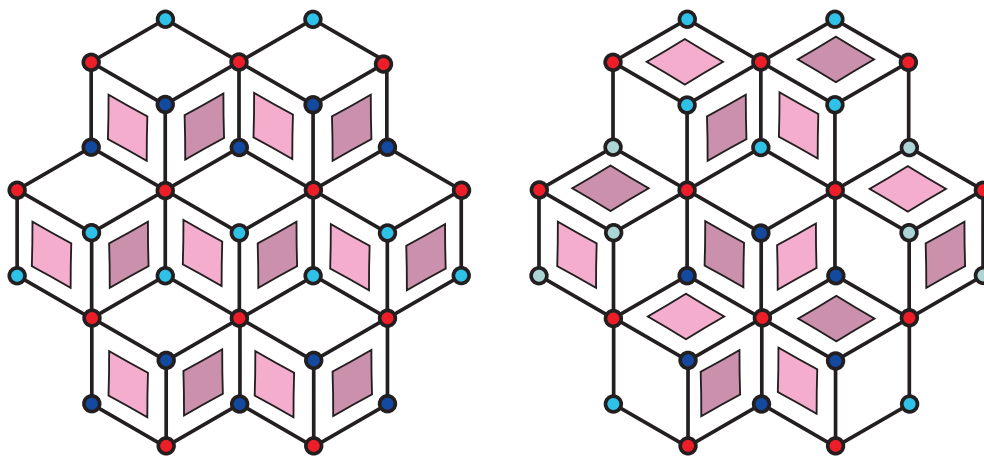


图 5.12: 选取diced格子上 $2/3$ 的四边形加中心点而得到的两种dilute centered diced格子IIA和IIB

图5.12中的两种格子，A、B、C三种子格的格点数分别是 $M/3$ 、 $2M/3$ 和 $2M/3$ ，也就是 $N_A = N/5$ ， $N_B = 2N/5$ 和 $N_C = 2N/5$ 。

这四种晶格都是三子格的格子，并且三种子格的取法不固定。在计算它们的配分函数时，只要把带有中心格点的四边形求和，同样可以得到定义在kagome格子上的张量网络，只是在这里kagome格子上的张量不再是均匀的。其他地方跟kagome格子上没有什么不同。

5.3.1 $q = 2$

我们首先考虑了这四种格子 $q = 2$ 时的情况，这几个晶格都是由四边形和带有中心格点的四边形构成的，在IA格子上带有中心格点的四边形是通过点和点相连接的，毫无疑问不带中心格点的四边形上的基态是反铁磁态。对于带有中心格点的四边形，如果是边上的四个格点形成反铁磁序，中间的格点无论取何种状态，都会有两条边不能够满足能量最小化。如果边上有一个格点破坏了反铁磁序，那么至少有三条边不能满足能量最小化。因此带有中心格点的四边形上的基态也是四边形上的格点形成反铁磁序。IB格子跟IA格子类似，带有中心格点的四边形也是通过点相连接的，因此基态也是A子格和B子格形成反铁磁序。

然而IIA和IIB格子上却不同，带有中心格点的四边形是通过边与边的方式相连的。在这两种格子上，如果AC边的数目是 K ，BC边的数目也是 K ，

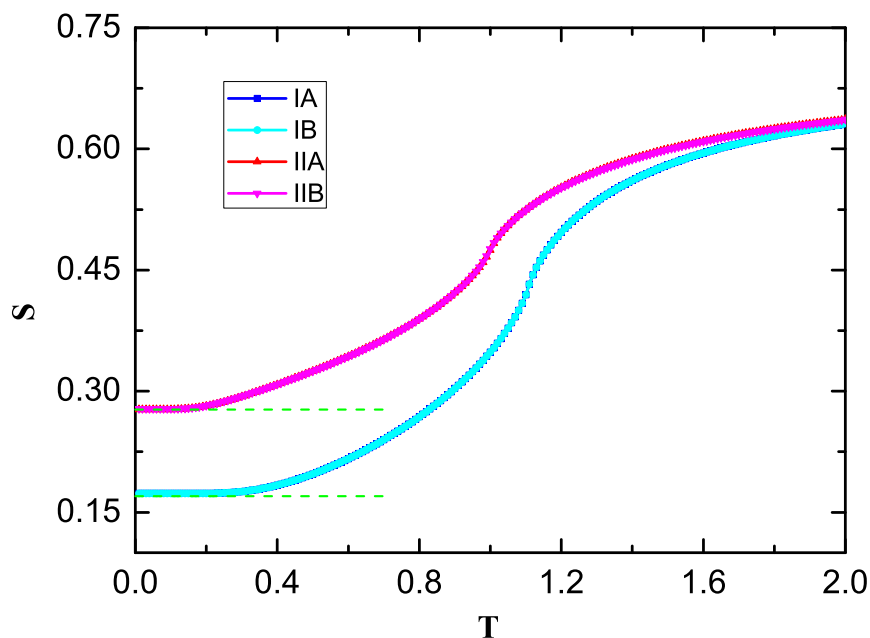


图 5.13: Dilute centered diced格子上 $q = 2$ 的熵，四种格子上的熵用不同颜色的曲线表示，绿色虚线分别是四种格子上的零温极限

而AB边的数目是 $3K$ ，当A子格和B子格形成反铁磁序时，将有 $3K$ 条边的能量最小化，C子格上的点可以任意取两种状态，那么还有 K 条边的状态也最小化，因此总共有 $4K$ 条边的能量是最小化的。A子格和B子格上的反铁磁序也是IIA和IIB格子上的基态。

而在IIB格子上，还有另外一种基态。我们观察每六个相邻的带有中心格点的四边形上，如果最中间的A格点的状态跟B格点的状态相同时，这时如过6个中心的C格点都跟其他6个A格点取相同的状态时，总共有12条边的不满足能量最小化。如果A格点和B格点形成反铁磁序，每个四边形上有两条边不满足，因此总共也有12条边不满足能量最小化。当A和B子格反铁磁序时，C子格上的格点可以任意选取两种状态，有 2^6 种这种状态，在热力学极限下A和B子格反铁磁有序将在状态数上占据大多数。

从上面的分析可以看到，这两种四边形上的基态都是四边形上的四个格点形成反铁磁序。在这种情况下，中心格点可以任意选取剩下的两种状

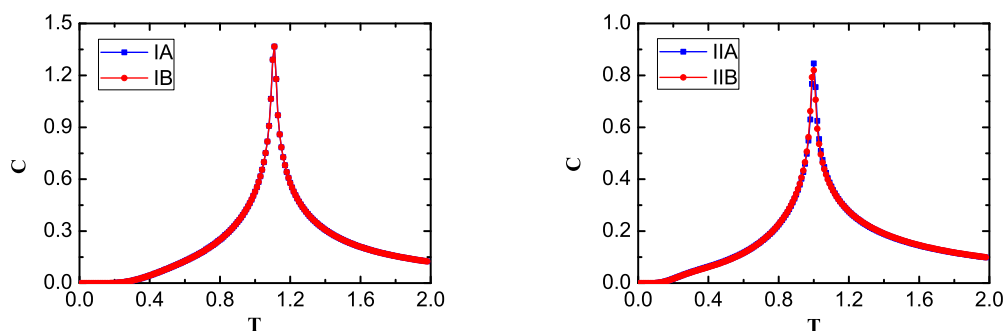


图 5.14: Dilute centered diced格子上 $q = 2$ 的比热, 左: IA和IB格子上的比热; 右: IIA和IIB格子上的比热。

态。于是IA和IB格子上的状态数是 $2^{M/3} = 2^N/2$, IIA和IIB格子上的状态数是 $2^{M'/3} = 2^{2N/5}$ 。

这四种格子上的熵如图5.13所示, 分别用蓝色、青色、红色和洋红色的曲线表示, 绿色虚线分别是这几种晶格的零温平庸极限。零温时IA和IB的平庸极限都是 $(\log 2)/4 \approx 0.173287$, 我们计算得到的IA格子上的零温熵是0.173287, IB格子上的零温熵是0.173287。IIA和IIB格子上的零温极限是 $2/5 \log 2 \approx 0.277259$, 实际上IIA格子上的熵是0.277259, 而IIB格子计算出的真实极限是0.278292。

我们还计算了比热, 如图5.14, 填充数相同的两种格子, IA和IB, IIA和IIB的相变点的位置几乎在同一处, 并且比热曲线几乎是重叠的。我们再看熵的曲线, 发现这两种格子上熵的曲线也是重叠的, 这说明 $q = 2$ 时填充数相同的格子上热力学函数的行为几乎是一样的。

5.3.2 $q = 3$

首先考虑在 $1/3$ 填充时的两种格子。从前面的checkerboard格子我们知道, 每个有中心格点的四边形上四个格点, 相对的一对必须取相同的状态, 图5.11左图所示的格子IA, 根据这个要求每一行红色格点的状态必须是相同的, 但是不同行的红色格点可以占据不同的状态。我们发现红色的格点正好是diced格子上A子格的点, 当所有的A子格上的点都取相同的状态‘0’时, 每个四边形上个一对B子格的点可以取剩下的两种状态, 并且不同四边形上的B子格的状态是独立的, 也就是说此时系统的状态数是 $2^{M/3}$ 。这里 M 是diced格子上四边形的个数, 如果 N 是IA格子的格点数, 那么 $N =$

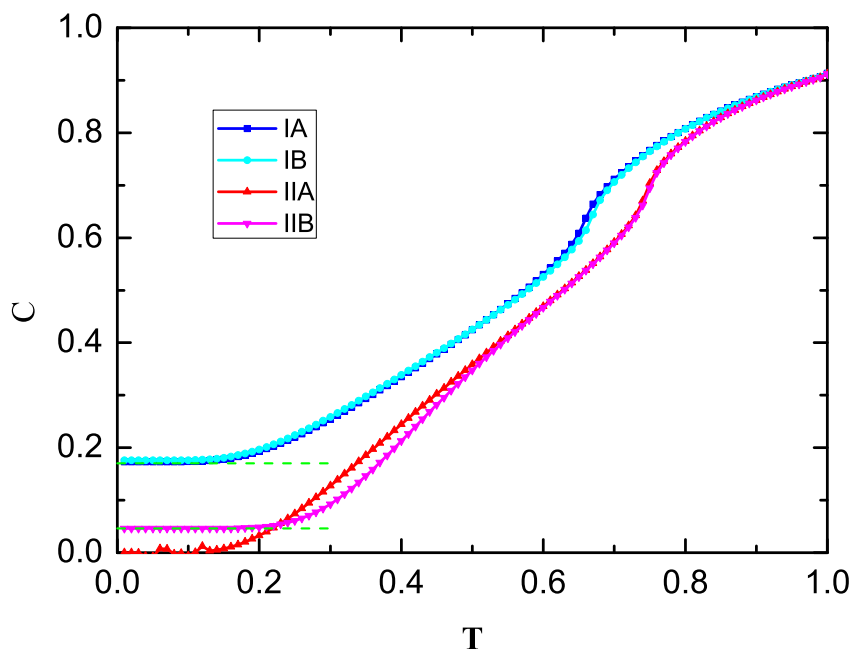


图 5.15: Dilute centered diced格子上 $q = 3$ 的熵，四种格子分别用不同的颜色表示，同样地绿色虚线是熵的低温极限。

$4/3M$ 。如果其中一行的A全都取状态‘1’时，与之相邻的两行A之间的所有B子格的点都只能占据状态‘2’了，那么此时的状态数是 $2^{M/3-6L}$ ，这里 L 是每两行红色A格点之间四边形的个数。所以虽然能量的局部最小化要求的序是一维的长程序，可是状态数却选择了二维的长程序，也就是所有A子格都占据相同状态的序。

我们计算了IA格子上的熵，如图5.15所示（蓝色曲线），从上面的分析我们得知零温熵的极限是 $(\log 2)/4 \approx 0.173287$ ，而我们计算出来的实际零温熵也是0.173287，这是因为最小的缺陷是某一行的A都占据另外的状态，此时的状态数成为 $2^{M/3-6L}$ ，对熵的贡献会比较小。因此虽然这种部分有序是熵驱动的，零温熵跟平庸极限差不多。

图5.11右图所示的格子IB也类似，根据能量的局域最小化要求的基态是图中的红色格点都取相同的状态。如果图中粉色的格点跟红色格点一样也占据状态‘0’时，也就是所有的A子格的点都有序时每个有中心格点的四边形上的点

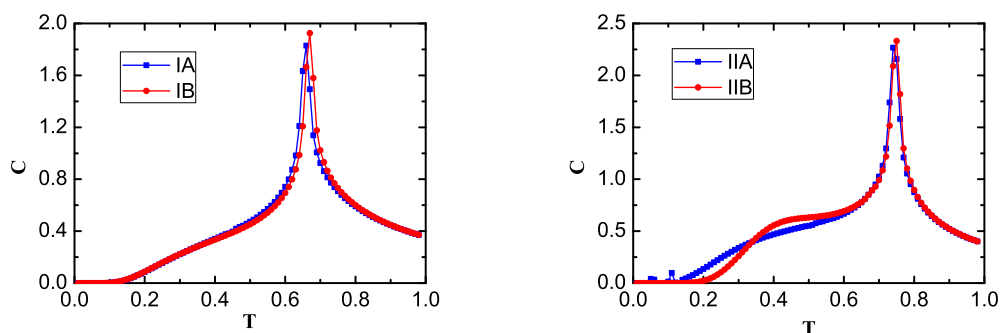


图 5.16: Dilute centered diced格子上 $q = 3$ 的比热, 左: IA和IB格子上的比热; 右: IIA和IIB格子上的比热。

就可以取剩下的任意两种状态, 并且四边形上是独立的, 这种状态数是 $2^{M/3}$, 如果有一个粉色的格点不占据‘0’状态的话, 与之相邻的六个红色格点之间的B子格的点都必须取相同的状态, 此时的状态数成为 $2^{M/3-6}$, 所以在这个格点上的长程序也是所有A子格的点形成长程序。

同样IB格子上零温熵的平庸极限也是 $(\log 2)/4 \approx 0.173287$, 而计算给出的结果是0.175856, 这里的差异是缺陷造成的, 最小的缺陷是图5.11右图中一个粉色格点的取跟红色格点不同的状态。上面的分析告诉我们这种缺陷对零温熵的修正比较大。

接下来我们考虑图5.12所示的两种格子。对于图5.12左图所示的格子IIA, 能量的局域最小化要求所有红色的格点都占据相同的状态, 也就是A子格有序, 除此之外每两行A子格之间的B子格也都必须占据相同的状态, 但是不同行之间的B子格可以取不同的状态, 我们在图中用浅蓝和深蓝色来标记可以取不同状态的格点。也就是说此时A子格形成二维的长程序, 而B子格形成准一维的长程序, 这种序完全是由于能量的最小化而产生的, 跟前面的状态数选择出来的长程序不同。这种状态的状态数是 2^L 。

IIA格子上的部分序是由能量驱动的, 因为基态数的指数不正比于系统的格点数, 而是正比于行数, 因而在热力学极限下, 零温熵为零, 图5.15中红色曲线所示。

而对于图5.12右图所示的格子IIB, 同样地能量的最小化要求A子格的所有格点都占据相同的状态。我们看到这种格子上会有六个相邻的四边形都有中

心格点，这六个四边形存在于由六个A格点围成的六边形内部，这个六边形内部有六个B格点和一个A格点。能量的最小化要求这六个B子格必须取相同的状态，而属于不同的六边形的B格点不需要取相同的状态。在图中我们用不同深浅的蓝色来标记必须和可以占据相同状态的B格点。同样这个格子上有长程序，是A子格的格点都取相同的状态，这种状态的状态数是 $2^{2M/3/6}$ ，这里 $N = 5/3M$ 。

IIB格子上部分有序的状态数是 $2^{N/15}$ ，因而零温平庸极限是 $(\log 2)/15 \approx 0.046209$ ，跟IIA格子上一致，这种部分有序也完全是能量驱动的，不存在缺陷，实际的零温熵仍然是0.046209。

我们还计算了这几种晶格的比热，图5.16左图是IA格子和IB格子上的比热，右图是IIA格子和IIB格子上的比热。低温下这些晶格上都有长程序，于是都会发生相变，IA和IB格子上的相变点很接近，IIA和IIB格子上的相变点几乎相同。

5.3.3 $q = 4$

首先观察IA格子，当A子格所有格点都取相同的状态，如状态‘0’，也就是A子格有序时，不同元胞上的B和C格点之间的状态是独立的。同一个元胞内有两个B格点和一个C格点，当C占据状态‘1’时，两个B格点可以占据相同和不同的状态，也就是说有‘2’和‘3’、‘3’和‘2’、‘2’和‘2’、‘3’和‘3’四种状态，然后C格点还可以占据其他两种状态，所以每个元胞上有十二种状态。A有序时的状态数是 $12^{M/3} = 12^{N/4}$ 。如果是B子格有序的话，A子格和C子格的点形成一维的链，这样的状态数是 $2^{3/4N} (3/2)^K$ ，这里K是晶格的行数，在热力学极限下可以忽略后面那项的作用，于是状态数是 $2^{3/4N}$ ，A有序的状态数远大于B有序。

对于IB格子，我们看到A子格有序时，不同元胞上的B和C格点之间的状态是独立的，同样地A子格有序的状态数是 $12^{N/4}$ ，如果是B子格有序，A子格和C子格的格点形成decorated honeycomb格子，我们可以通过这上面的零温熵来估计状态数。我们前面的计算有 $S_0^{dh} = 0.612153$ ，这样的状态数是 $(e^{S_0^{dh}})^{3N/4}$ 可见仍然是A子格有序的状态数更多。

接下来我们讨论IIA格子上的情况，当A子格有序时，B和C子格上的格点形成一维的链，在这样的每条链上，最左边的格点可以选取三种状态，其

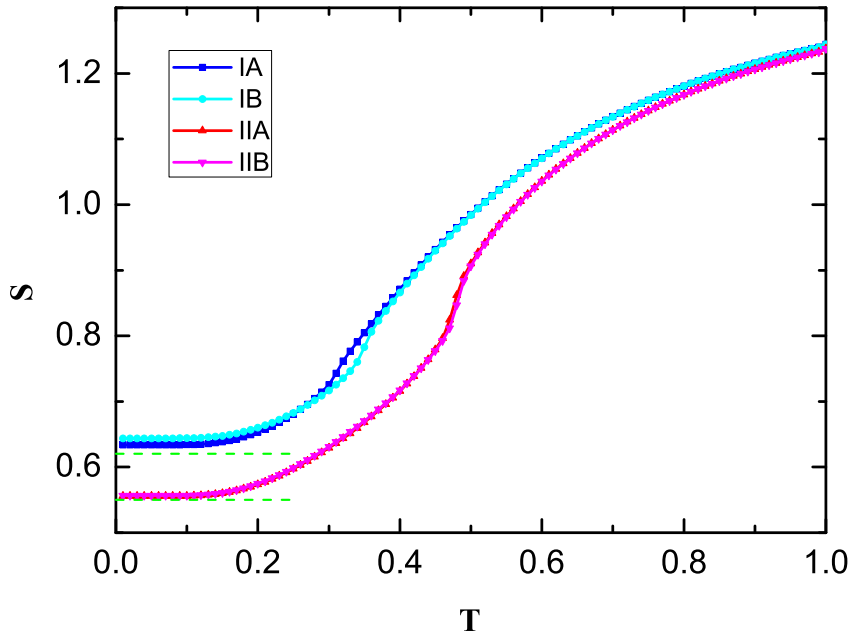


图 5.17: Dilute centered diced格子上 $q = 4$ 的熵, 四种格子上的比热分别用不同的颜色表示。

他格点可以任意选取剩下的两种状态, 这样的状态数是 $2^{4N/5}(3/2)^K$ 。如果是B子格有序, A子格和C子格的格点形成decorated square格子, 这样的状态数是 $(e^{S_0^{ds}})^{3N/5}$, 同样地在热力学极限下, A子格有序的状态数远大于B子格有序。

最后我们对IIB格子进行分析, 当A子格有序时, B和C子格形成一个个独立的带装饰格点的六边形, 每个六边形上一个格点有三个自由度, 其他的格点上有两个自由度, 这样的状态数是 $2^{4N/5}(3/2)^{N/15}$ 。当B子格有序时, A和C子格上的格点形成decorated diced格子, 这样的状态数是 $(e^{S_0^{dd}})^{3N/5}$ 。

零温时IA和IB的平庸极限都是 $(\log 12)/4 \approx 0.621227$, 我们计算得到的IA格子上的零温熵是0.633597, IB格子上的零温熵是0.643703。IIA和IIB格子上的零温极限是 $4/5 \log 2 \approx 0.554518$, 实际上IA格子上的熵是0.555658, 而IIB格子计算出的真实极限是0.556541。熵的数值结果如图5.17所示。

如图5.14我们计算了这四种晶格在 $q = 4$ 时的比热。IA和IB上的比热行为

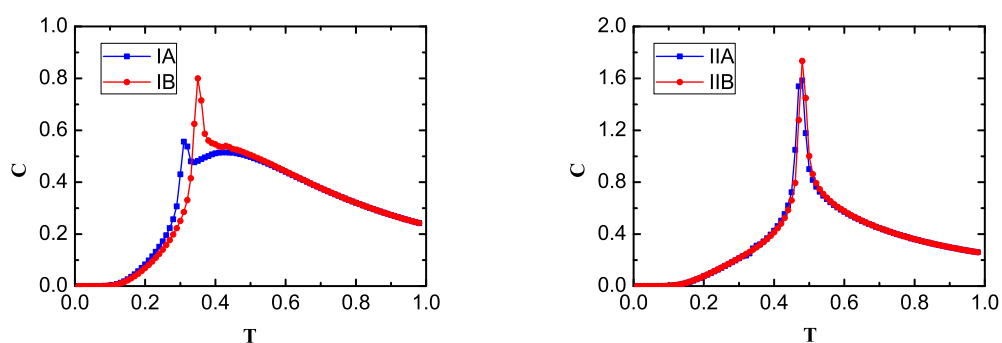


图 5.18: Dilute centered diced格子上 $q = 4$ 的比热, 左: IA和IB格子上的比热; 右: IIA和IIB格子上的比热。

跟diced格子上 $q = 3$ 时是类似的, 而IIA和IIB 格子上的比热跟centered-diced格子上的比热行为类似。

第六章 结论

本论文中我们研究了二维反铁磁Potts模型上部分长程序导致的相变，这种长程序是部分格点上的对称性破缺造成的。过去人们发现阻挫系统上存在部分长程序，反铁磁Potts模型是没有阻挫，但是有长程序的系统。采用张量相关的重正化群方法，这些方法有张量重正化群、二次张量重正化群和时间演化块消灭算法，我们发现部分长程序存在于一些非阿基米德格子上，这些晶格包括diced格子、union-jack格子、centered-diced格子、checker-board格子以及dilute-centered-diced格子。

我们首先通过对diced格子上 $q = 3$ 反铁磁Potts模型的计算，证实了非阻挫系统也可能存在部分有序的长程序，于是我们猜想是diced格子上两套子格间格点数的差异引起了部分有序，那么有三套子格且子格的格点数也不同的union-jack格子在 $q = 4$ 有可能存在部分有序，张量网络算法的数值计算证实了我们的猜想。我们还发现union-jack格子上 $q = 3$ 时会发生两次相变，分别是完全有序到部分有序，部分有序到无序的相变，这是一种从有限的温度才开始出现的部分有序。

Union-jack格子是通过在正方格子的中心加入格点而得到的，那么我们可以同样由四边形构成的diced格子上加入中心格点，得到centered-diced格子，使它的性质跟union-jack格子类似。我们的计算表明centered-diced格子不仅在 $q = 4$ ，在 $q = 5$ 时也存在部分有序的长程序，并且 $q = 3$ 时也发生了两个相变，存在有限温开始出现的长程序。

如果在正方格子的一半四边形上加入中心格点就得到了checker-board格子，这上面的 $q = 3$ 也存在部分有序，但是跟前面的几种由状态数占据主导导致的部分有序不同，这里完全是由能量的最小化而导致了部分有序。前面的部分有序的状态数都是以系统格点数为指数的，这里的部分有序的状态数是以系统的长度为指数的，这样虽然状态数在热力学极限下是无穷大的，零温熵仍然是零。

Diced格子上的四边形也可以只有一部分加入中心格点，在有平移不变性的情况，我们得到了四种dilute-centered-diced格子。这些格子在 $q = 3$ 时都存在部分有序，1/3的四边形加入中心格点的IA和IB格子上，部分有序的存在是

状态数占据主导导致的，而 $2/3$ 的四边形上引入中心格点的IIA和IIB格子上，是能量最小化的要求引起了部分有序的存在。这四种格子在 $q = 4$ 时也都存在部分有序，并且全都是因为状态数占据主导而产生的。

我们知道无论是union-jack格子、centered-diced格子、checker-board格子还是四种dilute-centered-diced格子，它们上面都有三角形，也就是说在 $q = 2$ 时有阻挫。我们也计算了这些格子上的 $q = 2$ 的情况，发现这些格子上都存在部分有序，这些部分有序可以是状态数占据主导产生的，也可以是由能量的最小化要求而产生的，如checker-board 格子、dilute-centered-dicedIA、IB和IIA格子。

正方格子和diced格子可以看成是一对对偶格子相连而成的，也就是说我们可以利用任何的二维晶格和它的对偶格子，而得到由四边形构成的格子。在这个四边形的格点上加入中心格点，在每个四边形上都加，或者在其中一部分四边形上面加，得到不同的中心晶格。我们所讨论的反铁磁Potts模型的部分有序，在这些中心格子上面全都存在。如完全的中心格子上 $q = 3$ 的有限温和 $q = 4$ 的零温，稀释中心格子上的 $q = 3$ 。完全中心格子和稀释中心格子上在 $q = 2$ 时都有阻挫，也都存在部分有序。

无论是在阻挫还是非阻挫的系统上，部分有序的长程序的发生有两种机制：一个是能量驱动，能量的最小化要求系统中的格点一部分有序，另一部分有一定的自由度；另一个是熵驱动，一部分格点有序的状态数远大于其他状态的状态数，由于在状态数上的主导性而产生的长程序。缺陷的存在是区分这两种部分有序的方式。

我们发现当基态破缺了子格的对称性时，比热不发散而是只有一个有限的跃变。Union-jack格子上的 $q = 4$ 和checker-board 格子上的 $q = 3$ 都属于这种情况，长程序同时破缺了几种状态的等价性及正方格子上两套子格之间的对称性，相变发生时比热不发散，而是只有一个有限的跃变。在我们计算的无穷大系统上，这个有限的跃变要通过非常小心的计算才能发现，在有限系统上这个跃变更加不明显，这使得蒙特卡罗等其他数值方法在这个问题上有很大的困难。

过去人们认为维数和哈密顿量的对称性决定了相变的普适类，随着进一步的研究人们发现相变的普适分类光靠这么简单的原则是不够的，如反铁磁Potts模型在不同晶格上的相变属于不同的普适类。我们研究的这几种格子

上由部分有序长程序导致的相变，有很多是之前没有被其他人发现的，这些发现将使得人们对于普适类的理解更进一步。

精度高和可以处理无穷大系统是张量网络算法的两大优势，正是这两点使得我们把张量网络算法成功应用于经典统计模型。然而张量网络算法的发展目前还不十分成熟，仅限于处理离散自由度的系统，例如Ising模型和Potts模型在每个格点上都是有限个自由度。经典的XY模型，每个格点的自旋在XY平面内连续取值，我们知道张量的维数取决于每个格点的自由度，当自由度连续时，相当于要找到‘连续的张量’，因此连续模型是没有办法用张量网络的方法计算的。因此在算法工作方面，探索连续统计模型的张量网络算法是有意义的，当然也许要跟其它数值方法相结合。另一方面寻找三维的张量网络算法，因为三维的统计模型没有严格解，蒙特卡罗数值计算也因为系统尺寸的问题而限制，虽然这方面的工作已经有一些进展，值得去尝试的工作还有很多。

本论文中我们讨论的晶格基本上是三子格的，然而四子格晶格上的物理可能会更加丰富。对于反铁磁Potts模型的认识还处于一个初步的阶段，有很多工作可以去做。Reentrance现象跟部分长程序的关系还没有搞清楚，对于Potts模型完整相图的研究将帮助我们了解这两者的关系。然而目前这方面的工作不多，有很多可以做的事情。重正化群和共形场论已经取得了很大的成功，可是它们的基础却不十分稳固，Schramm-Loewner演化就是在这方面的尝试和探索。进一步挖掘张量网络表示深层次的东西，可能在这些方面发挥重要的作用。

参考文献

- [1] D. Domb and M. S. Green, editors. *Phase Transitions and Critical Phenomena, Volume 1*. Academic Press, 1972.
- [2] Subir Sachdev. *Quantum Phase Transitions*. Cambridge University Press, 2011.
- [3] John Cardy. *Scaling and Renormalization in Statistical Physics* 1996. Cambridge University Press, 1996.
- [4] P. Christe and M. Henkel. *Intruduction to Conformal Invariance and its application to Critical Phenomena*. Springer-Verlag, 1993.
- [5] P. Hoever, W. F. Wolff, and J. Zittartz. Random layered frustration models. *Z. Phys. B*, 41:43–53, 1981.
- [6] H. T. Diep. *Magnetic systems with competing interactions: frustrated spin systems*. World Scientific, 1994.
- [7] Ojiro Nagai, Seiji Miyashita, and Tsuyoshi Horiguchi. Ground state of the antiferromagnetic ising model of general spin S on a triangular lattice. *Phys. Rev. B*, 47:202–205, Jan 1993.
- [8] V. G. Vaks, A. I. Larkin, and Yu. N. Ochnikov. Ising model with interaction between nonnearest neighbors. *JETP Letters*, 22:820, 1966.
- [9] P. Azaria, H. T. Diep, and H. Giacomini. Coexistence of order and disorder and reentrance in an exactly solvable model. *Phys. Rev. Lett.*, 59:1629–1632, Oct 1987.
- [10] M. Debauche and H. T. Diep. Successive reentrances and phase transitions in exactly solved dilute centered square ising lattices. *Phys. Rev. B*, 46:8214–8218, Oct 1992.

- [11] H. T. Diep, M. Debauche, and H. Giacomini. Exact solution of an anisotropic centered honeycomb ising lattice: Reentrance and partial disorder. *Phys. Rev. B*, 43:8759–8762, Apr 1991.
- [12] André, G., Bidaux, R., Carton, J.-P., Conte, R., and de Seze, L. Frustration in periodic systems : exact results for some 2d ising models. *J. Phys. France*, 40(5):479–488, 1979.
- [13] A Lipowski and T Horiguchi. Entropic order in frustrated antiferromagnets. *J. Phys. A: Math. Theor.*, 28(12):3371–3379, 1995.
- [14] D P Foster, C Gérard, and I Puha. Critical behaviour of fully frustrated potts models. *J. Phys. A: Math. Theor.*, 34(25):5183, 2001.
- [15] D. P. Foster and C. Gérard. Critical behavior of the fully frustrated q -state potts piled-up-domino model. *Phys. Rev. B*, 70:014411, Jul 2004.
- [16] E. H. Boubcheur, R. Quartu, H. T. Diep, and O. Nagai. Noncollinear XY spin system: First-order transition and evidence of a reentrance. *Phys. Rev. B*, 58:400–408, Jul 1998.
- [17] Daniel Blankschtein, M. Ma, and A. Nihat Berker. Fully and partially frustrated simple-cubic ising models: Landau-ginzburg-wilson theory. *Phys. Rev. B*, 30:1362–1365, Aug 1984.
- [18] H T Diep, P Lallemand, and O Nagai. Critical properties of a simple cubic fully frustrated ising lattice by monte carlo method. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, 18(5):1067, 1985.
- [19] Daniel Blankschtein, M. Ma, A. Nihat Berker, Gary S. Grest, and C. M. Soukoulis. Orderings of a stacked frustrated triangular system in three dimensions. *Phys. Rev. B*, 29:5250–5252, May 1984.
- [20] P. Azaria, H. T. Diep, and H. Giacomini. First-order transition, multicriticality and re-entrance in a b.c.c. lattice with ising spins. *Europhys. Lett.*, 9(8):755, 1989.

- [21] C. Santamaria and H. T. Diep. Evidence of partial disorder in a frustrated heisenberg spin system. *J. Appl. Phys.*, 81(8):5276–5278, 1997.
- [22] Ryo Igarashi and Masao Ogata. Partial order of frustrated potts model. *J. Phys.: Conf. Ser.*, 200(2):022019, 2010.
- [23] J R Stewart, G Ehlers, A S Wills, S T Bramwell, and J S Gardner. Phase transitions, partial disorder and multi- k structures in $\text{gd}_2\text{ti}_2\text{o}_7$. *J. Phys.: Condens. Matter*, 16(28):L321, 2004.
- [24] Satoru Hayami, Masafumi Udagawa, and Yukitoshi Motome. Partial disorder in the periodic anderson model on a triangular lattice. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 80(7):073704, 2011.
- [25] S. Hayami, M. Udagawa, and Y. Motome. Carrier doping to a partially disordered state in the periodic Anderson model on a triangular lattice. *ArXiv e-prints*, 1107.4401, July 2011.
- [26] R. Quartu and H. T. Diep. Partial order in frustrated quantum spin systems. *Phys. Rev. B*, 55:2975–2980, Feb 1997.
- [27] C. Santamaria, R. Quartu, and H. T. Diep. Frustration effect in a quantum heisenberg spin system. *J. Appl. Phys.*, 84(4):1953–1957, 1998.
- [28] M. Matsuda, H. Yoshida, M. Isobe, C. de la Cruz, and R. S. Fishman. Partially Disordered State and Spin-Lattice Coupling in an $S=3/2$ Triangular Lattice Antiferromagnet Ag_2CrO_2 . *ArXiv e-prints*, 1110.4822, October 2011.
- [29] F. Y. Wu. The potts model. *Rev. Mod. Phys.*, 54:235–268, Jan 1982.
- [30] C Domb. Configurational studies of the potts models. *J. Phys. A: Math. Theor.*, 7(11):1335, 1974.
- [31] H. A. Kramers and G. H. Wannier. Statistics of the two-dimensional ferromagnet. part i. *Phys. Rev.*, 60:252–262, Aug 1941.

- [32] R. B. Potts. Some generalized order-disorder transformations. *Proc. Camb. Phil. Soc.*, 48:106–109, 1952.
- [33] J. Ashkin and E. Teller. Statistics of two-dimensional lattices with four components. *Phys. Rev.*, 64:178–184, Sep 1943.
- [34] Jesus Salas and Alan Sokal. Absence of phase transition for antiferromagnetic potts models via the dobrushin uniqueness theorem. *J. Stat. Phys.*, 86:551–579, 1997.
- [35] P. L. Dobrushin. The description of a random field by means of conditional probabilities and conditions of its regularity. *Theor. Prob. Appl.*, 13(2):197–224, 1968.
- [36] R. L. Dobrushin. Prescribing a system of random variables by conditional distributions. *Theor. Prob. Appl.*, 15(3):458–486, 1970.
- [37] V. Murg, F. Verstraete, and J. I. Cirac. Efficient evaluation of partition functions of inhomogeneous many-body spin systems. *Phys. Rev. Lett.*, 95:057206, Jul 2005.
- [38] V. Murg, F. Verstraete, and J. I. Cirac. Exploring frustrated spin systems using projected entangled pair states. *Phys. Rev. B*, 79:195119, May 2009.
- [39] F. Verstraete, V. Murg, and J.I. Cirac. Matrix product states, projected entangled pair states, and variational renormalization group methods for quantum spin systems. *Adv. Phys.*, 57(2):143–224, 2008.
- [40] V. Murg, F. Verstraete, and J. I. Cirac. Variational study of hard-core bosons in a two-dimensional optical lattice using projected entangled pair states. *Phys. Rev. A*, 75:033605, Mar 2007.
- [41] Jacob Jordan, Román Orús, and Guifré Vidal. Numerical study of the hard-core bose-hubbard model on an infinite square lattice. *Phys. Rev. B*, 79:174515, May 2009.

-
- [42] Christina V. Kraus, Norbert Schuch, Frank Verstraete, and J. Ignacio Cirac. Fermionic projected entangled pair states. *Phys. Rev. A*, 81:052338, May 2010.
- [43] Carlos Pineda, Thomas Barthel, and Jens Eisert. Unitary circuits for strongly correlated fermions. *Phys. Rev. A*, 81:050303, May 2010.
- [44] Thomas Barthel, Carlos Pineda, and Jens Eisert. Contraction of fermionic operator circuits and the simulation of strongly correlated fermions. *Phys. Rev. A*, 80:042333, Oct 2009.
- [45] Q.-Q. Shi, S.-H. Li, J.-H. Zhao, and H.-Q. Zhou. Graded Projected Entangled-Pair State Representations and An Algorithm for Translationally Invariant Strongly Correlated Electronic Systems on Infinite-Size Lattices in Two Spatial Dimensions. *ArXiv e-prints*, 0907.5520, July 2009.
- [46] Philippe Corboz, Román Orús, Bela Bauer, and Guifré Vidal. Simulation of strongly correlated fermions in two spatial dimensions with fermionic projected entangled-pair states. *Phys. Rev. B*, 81:165104, Apr 2010.
- [47] Philippe Corboz, Steven R. White, Guifré Vidal, and Matthias Troyer. Stripes in the two-dimensional t - j model with infinite projected entangled-pair states. *Phys. Rev. B*, 84:041108, Jul 2011.
- [48] A. W. Sandvik and G. Vidal. Variational quantum monte carlo simulations with tensor-network states. *Phys. Rev. Lett.*, 99:220602, Nov 2007.
- [49] Norbert Schuch, Michael M. Wolf, Frank Verstraete, and J. Ignacio Cirac. Simulation of quantum many-body systems with strings of operators and monte carlo tensor contractions. *Phys. Rev. Lett.*, 100:040501, Jan 2008.
- [50] Ling Wang, Iztok Pizorn, and Frank Verstraete. Monte carlo simulation with tensor network states. *Phys. Rev. B*, 83:134421, Apr 2011.
- [51] G. Vidal. Entanglement renormalization. *Phys. Rev. Lett.*, 99:220405, Nov 2007.

- [52] G. Evenbly and G. Vidal. Algorithms for entanglement renormalization. *Phys. Rev. B*, 79:144108, Apr 2009.
- [53] Miguel Aguado and Guifré Vidal. Entanglement renormalization and topological order. *Phys. Rev. Lett.*, 100:070404, Feb 2008.
- [54] Robert König, Ben W. Reichardt, and Guifré Vidal. Exact entanglement renormalization for string-net models. *Phys. Rev. B*, 79:195123, May 2009.
- [55] G. Evenbly and G. Vidal. Entanglement renormalization in two spatial dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 102:180406, May 2009.
- [56] G. Evenbly and G. Vidal. Frustrated antiferromagnets with entanglement renormalization: Ground state of the spin- $\frac{1}{2}$ heisenberg model on a kagome lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 104:187203, May 2010.
- [57] G Evenbly and G Vidal. Entanglement renormalization in free bosonic systems: real-space versus momentum-space renormalization group transforms. *New J. Phys.*, 12(2):025007, 2010.
- [58] Philippe Corboz and Guifré Vidal. Fermionic multiscale entanglement renormalization ansatz. *Phys. Rev. B*, 80:165129, Oct 2009.
- [59] G. Evenbly and G. Vidal. Entanglement renormalization in noninteracting fermionic systems. *Phys. Rev. B*, 81:235102, Jun 2010.
- [60] Philippe Corboz, Glen Evenbly, Frank Verstraete, and Guifré Vidal. Simulation of interacting fermions with entanglement renormalization. *Phys. Rev. A*, 81:010303R, Jan 2010.
- [61] R. N. C. Pfeifer, P. Corboz, O. Buerschaper, M. Aguado, M. Troyer, and G. Vidal. Simulation of anyons with tensor network algorithms. *Phys. Rev. B*, 82:115126, Sep 2010.
- [62] Matteo Rizzi, Simone Montangero, and Guifre Vidal. Simulation of time evolution with multiscale entanglement renormalization ansatz. *Phys. Rev. A*, 77:052328, May 2008.

-
- [63] G. Evenbly, R. N. C. Pfeifer, V. Picó, S. Iblisdir, L. Tagliacozzo, I. P. McCulloch, and G. Vidal. Boundary quantum critical phenomena with entanglement renormalization. *Phys. Rev. B*, 82:161107, Oct 2010.
- [64] L. Tagliacozzo and G. Vidal. Entanglement renormalization and gauge symmetry. *Phys. Rev. B*, 83:115127, Mar 2011.
- [65] Zheng-Cheng Gu, Michael Levin, and Xiao-Gang Wen. Tensor-entanglement renormalization group approach as a unified method for symmetry breaking and topological phase transitions. *Phys. Rev. B*, 78:205116, Nov 2008.
- [66] Zheng-Cheng Gu, Michael Levin, Brian Swingle, and Xiao-Gang Wen. Tensor-product representations for string-net condensed states. *Phys. Rev. B*, 79:085118, Feb 2009.
- [67] Xie Chen, Bei Zeng, Zheng-Cheng Gu, Isaac L. Chuang, and Xiao-Gang Wen. Tensor product representation of a topological ordered phase: Necessary symmetry conditions. *Phys. Rev. B*, 82:165119, Oct 2010.
- [68] Zheng-Cheng Gu and Xiao-Gang Wen. Tensor-entanglement-filtering renormalization approach and symmetry-protected topological order. *Phys. Rev. B*, 80:155131, Oct 2009.
- [69] Xie Chen, Zheng-Cheng Gu, and Xiao-Gang Wen. Local unitary transformation, long-range quantum entanglement, wave function renormalization, and topological order. *Phys. Rev. B*, 82:155138, Oct 2010.
- [70] Xie Chen, Zheng-Cheng Gu, and Xiao-Gang Wen. Classification of gapped symmetric phases in one-dimensional spin systems. *Phys. Rev. B*, 83:035107, Jan 2011.
- [71] X. Chen, Z.-C. Gu, Z.-X. Liu, and X.-G. Wen. Symmetry protected topological orders and the cohomology class of their symmetry group. *ArXiv e-prints*, 1106.4772, June 2011.

- [72] X. Chen, Z.-X. Liu, and X.-G. Wen. Models with on-site symmetry protected topological order in two spatial dimension. *ArXiv e-prints*, 1106.4752, June 2011.
- [73] Sébastien Dusuel, Michael Kamfor, Román Orús, Kai Phillip Schmidt, and Julien Vidal. Robustness of a perturbed topological phase. *Phys. Rev. Lett.*, 106:107203, Mar 2011.
- [74] Marc Daniel Schulz, Sébastien Dusuel, Román Orús, Julien Vidal, and Kai Phillip Schmidt. Breakdown of a perturbed z_n topological phase. *New J. Phys.*, 14(2):025005, 2012.
- [75] F. Verstraete, J. J. García-Ripoll, and J. I. Cirac. Matrix product density operators: Simulation of finite-temperature and dissipative systems. *Phys. Rev. Lett.*, 93:207204, Nov 2004.
- [76] Michael Zwolak and Guifré Vidal. Mixed-state dynamics in one-dimensional quantum lattice systems: A time-dependent superoperator renormalization algorithm. *Phys. Rev. Lett.*, 93:207205, Nov 2004.
- [77] Adrian E. Feiguin and Steven R. White. Finite-temperature density matrix renormalization using an enlarged hilbert space. *Phys. Rev. B*, 72:220401, Dec 2005.
- [78] Wei Li, Shi-Ju Ran, Shou-Shu Gong, Yang Zhao, Bin Xi, Fei Ye, and Gang Su. Linearized tensor renormalization group algorithm for the calculation of thermodynamic properties of quantum lattice models. *Phys. Rev. Lett.*, 106:127202, Mar 2011.
- [79] M. C. Bañuls, M. B. Hastings, F. Verstraete, and J. I. Cirac. Matrix product states for dynamical simulation of infinite chains. *Phys. Rev. Lett.*, 102:240603, Jun 2009.
- [80] Rodney J. Baxter. *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*. Academic Press, 1982.

-
- [81] D. Domb and M. S. Green, editors. *Phase Transitions and Critical Phenomena, Volume 3*, volume 3. Academic Press, 1974.
- [82] Stellan Östlund and Stefan Rommer. Thermodynamic limit of density matrix renormalization. *Phys. Rev. Lett.*, 75:3537–3540, Nov 1995.
- [83] Stefan Rommer and Stellan Östlund. Class of ansatz wave functions for one-dimensional spin systems and their relation to the density matrix renormalization group. *Phys. Rev. B*, 55:2164–2181, Jan 1997.
- [84] F. Verstraete, D. Porras, and J. I. Cirac. Density matrix renormalization group and periodic boundary conditions: A quantum information perspective. *Phys. Rev. Lett.*, 93:227205, Nov 2004.
- [85] M. Fannes, B. Nachtergaele, and R. Werner. Finitely correlated states on quantum spin chains. *Commun. Math. Phys.*, 144:443–490, 1992.
- [86] F. Verstraete and J. I. Cirac. Matrix product states represent ground states faithfully. *Phys. Rev. B*, 73:094423, Mar 2006.
- [87] D. Perez-Garcia, F. Verstraete, M. M. Wolf, and J. I. Cirac. Matrix Product State Representations. *Quantum Inf. Comput*, 7(5):401, August 2006.
- [88] F. Verstraete and J. I. Cirac. Renormalization algorithms for Quantum-Many Body Systems in two and higher dimensions. *ArXiv e-prints*, 0407066, July 2004.
- [89] F. Verstraete, M. M. Wolf, D. Perez-Garcia, and J. I. Cirac. Criticality, the area law, and the computational power of projected entangled pair states. *Phys. Rev. Lett.*, 96:220601, Jun 2006.
- [90] G. Vidal. Class of quantum many-body states that can be efficiently simulated. *Phys. Rev. Lett.*, 101:110501, Sep 2008.
- [91] Alessandro Sfondrini, Javier Cerrillo, Norbert Schuch, and J. Ignacio Cirac. Simulating two- and three-dimensional frustrated quantum systems with string-bond states. *Phys. Rev. B*, 81:214426, Jun 2010.

- [92] F Mezzacapo, N Schuch, M Boninsegni, and J I Cirac. Ground-state properties of quantum many-body systems: entangled-plaquette states and variational monte carlo. *New J. Phys.*, 11(8):083026, 2009.
- [93] Hitesh J. Changlani, Jesse M. Kinder, C. J. Umrigar, and Garnet Kin-Lic Chan. Approximating strongly correlated wave functions with correlator product states. *Phys. Rev. B*, 80:245116, Dec 2009.
- [94] S. Al-Assam, S. R. Clark, C. J. Foot, and D. Jaksch. Capturing long range correlations in two-dimensional quantum lattice systems using correlator product states. *Phys. Rev. B*, 84:205108, Nov 2011.
- [95] E. Neuscamman, H. Changlani, J. Kinder, and G. Kin-Lic Chan. Further developments in correlator product states: deterministic optimization and energy evaluation. *ArXiv e-prints*, 1008.4945, August 2010.
- [96] E. Neuscamman, C. J. Umrigar, and G. Kin-Lic Chan. Optimizing large parameter sets in variational quantum Monte Carlo. *ArXiv e-prints*, 1108.0900, August 2011.
- [97] Y.-Y. Shi, L.-M. Duan, and G. Vidal. Classical simulation of quantum many-body systems with a tree tensor network. *Phys. Rev. A*, 74:022320, Aug 2006.
- [98] L. Tagliacozzo, G. Evenbly, and G. Vidal. Simulation of two-dimensional quantum systems using a tree tensor network that exploits the entropic area law. *Phys. Rev. B*, 80:235127, Dec 2009.
- [99] V. Murg, F. Verstraete, Ö. Legeza, and R. M. Noack. Simulating strongly correlated quantum systems with tree tensor networks. *Phys. Rev. B*, 82:205105, Nov 2010.
- [100] Konrad H Marti, Bela Bauer, Markus Reiher, Matthias Troyer, and Frank Verstraete. Complete-graph tensor network states: a new fermionic wave function ansatz for molecules. *New J. Phys.*, 12(10):103008, 2010.

-
- [101] F. Verstraete and J. I. Cirac. Continuous matrix product states for quantum fields. *Phys. Rev. Lett.*, 104:190405, May 2010.
- [102] J. Ignacio Cirac and Germán Sierra. Infinite matrix product states, conformal field theory, and the haldane-shastry model. *Phys. Rev. B*, 81:104431, Mar 2010.
- [103] Simon Anders, Hans J Briegel, and Wolfgang Dür. A variational method based on weighted graph states. *New J. Phys.*, 9(10):361, 2007.
- [104] S. Anders, M. B. Plenio, W. Dür, F. Verstraete, and H.-J. Briegel. Ground-state approximation for strongly interacting spin systems in arbitrary spatial dimension. *Phys. Rev. Lett.*, 97:107206, Sep 2006.
- [105] M. C. Bañuls, D. Pérez-García, M. M. Wolf, F. Verstraete, and J. I. Cirac. Sequentially generated states for the study of two-dimensional systems. *Phys. Rev. A*, 77:052306, May 2008.
- [106] J Ignacio Cirac and Frank Verstraete. Renormalization and tensor product states in spin chains and lattices. *J. Phys. A: Math. Theor.*, 42(50):504004, 2009.
- [107] Ian Affleck, Tom Kennedy, Elliott H. Lieb, and Hal Tasaki. Valence bond ground states in isotropic quantum antiferromagnets. *Commun. Math. Phys.*, 115:477–528, 1988. 10.1007/BF01218021.
- [108] Guifré Vidal. Efficient classical simulation of slightly entangled quantum computations. *Phys. Rev. Lett.*, 91:147902, Oct 2003.
- [109] Guifré Vidal. Efficient simulation of one-dimensional quantum many-body systems. *Phys. Rev. Lett.*, 93:040502, Jul 2004.
- [110] G. Vidal. Classical simulation of infinite-size quantum lattice systems in one spatial dimension. *Phys. Rev. Lett.*, 98:070201, Feb 2007.
- [111] R. Orús and G. Vidal. Infinite time-evolving block decimation algorithm beyond unitary evolution. *Phys. Rev. B*, 78:155117, Oct 2008.

- [112] Cai Jian-Wei, Chen Qiao-Ni, Zhao Hui-Hai, Xie Zhi-Yuan, Qin Ming-Pu, Wei Zhong-Chao, and Xiang Tao. Translation invariant tensor product states in a finite lattice system. *Chin. P. B*, 20(11):117501, 2011.
- [113] Peter Pippin, Steven R. White, and Hans Gerd Evertz. Efficient matrix-product state method for periodic boundary conditions. *Phys. Rev. B*, 81:081103, Feb 2010.
- [114] B. Pirvu, F. Verstraete, and G. Vidal. Exploiting translational invariance in matrix product state simulations of spin chains with periodic boundary conditions. *Phys. Rev. B*, 83:125104, Mar 2011.
- [115] G. Sierra and M. A. Martin-Delgado. The Density Matrix Renormalization Group, Quantum Groups and Conformal Field Theory. *ArXiv e-prints*, 9811170, November 1998.
- [116] T. Nishino and K. Okunishi. A Density Matrix Algorithm for 3D Classical Models. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 67:3066–3072, September 1998.
- [117] T. Nishino, K. Okunishi, Y. Hieida, N. Maeshima, and Y. Akutsu. Self-consistent tensor product variational approximation for 3d classical models. *Nucl. Phys. B*, 575(3):504–512, 2000.
- [118] Y. Nishio, N. Maeshima, A. Gendiar, and T. Nishino. Tensor Product Variational Formulation for Quantum Systems. *ArXiv e-prints*, 0401115, January 2004.
- [119] H. C. Jiang, Z. Y. Weng, and T. Xiang. Accurate determination of tensor network state of quantum lattice models in two dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 101:090603, Aug 2008.
- [120] Wei Li, Shou-Shu Gong, Yang Zhao, and Gang Su. Quantum phase transition, $o(3)$ universality class, and phase diagram of the spin- $\frac{1}{2}$ heisenberg antiferromagnet on a distorted honeycomb lattice: A tensor renormalization-group study. *Phys. Rev. B*, 81:184427, May 2010.

- [121] Pochung Chen, Chen-Yen Lai, and Min-Fong Yang. Numerical study of spin-1/2 xxz model on square lattice from tensor product states. *J. Stat. Mech.*, 2009(10):P10001, 2009.
- [122] H. H. Zhao, C. Xu, Q. N. Chen, Z. C. Wei, M. P. Qin, G. M. Zhang, and T. Xiang. Plaquette order and deconfined quantum critical point in the spin-1 bilinear-biquadratic heisenberg model on the honeycomb lattice. *ArXiv e-prints*, 1105.2716, May 2011.
- [123] J. Jordan, R. Orús, G. Vidal, F. Verstraete, and J. I. Cirac. Classical simulation of infinite-size quantum lattice systems in two spatial dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 101:250602, Dec 2008.
- [124] Román Orús, Andrew C. Doherty, and Guifré Vidal. First order phase transition in the anisotropic quantum orbital compass model. *Phys. Rev. Lett.*, 102:077203, Feb 2009.
- [125] L. Wang and F. Verstraete. Cluster update for tensor network states. *ArXiv e-prints*, 1110.4362, 2011.
- [126] L. Wang, Z.-C. Gu, X.-G. Wen, and F. Verstraete. Possible spin liquid state in the spin 1/2 J1-J2 antiferromagnetic Heisenberg model on square lattice: A tensor product state approach. *ArXiv e-prints*, 1112.3331, December 2011.
- [127] Michael Levin and Cody P. Nave. Tensor renormalization group approach to two-dimensional classical lattice models. *Phys. Rev. Lett.*, 99:120601, Sep 2007.
- [128] Z. Y. Xie, H. C. Jiang, Q. N. Chen, Z. Y. Weng, and T. Xiang. Second renormalization of tensor-network states. *Phys. Rev. Lett.*, 103:160601, Oct 2009.
- [129] H. H. Zhao, Z. Y. Xie, Q. N. Chen, Z. C. Wei, J. W. Cai, and T. Xiang. Renormalization of tensor-network states. *Phys. Rev. B*, 81:174411, May 2010.

- [130] R J Baxter. Corner transfer matrix. *Physica A*, 106:18, 1981.
- [131] Tomotoshi Nishino and Kouichi Okunishi. Corner transfer matrix renormalization group method. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 65(4):891–894, 1996.
- [132] Tomotoshi Nishino and Kouichi Okunishi. Corner transfer matrix algorithm for classical renormalization group. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 66(10):3040–3047, 1997.
- [133] Román Orús and Guifré Vidal. Simulation of two-dimensional quantum systems on an infinite lattice revisited: Corner transfer matrix for tensor contraction. *Phys. Rev. B*, 80:094403, Sep 2009.
- [134] R. Orus. Exploring corner transfer matrices and corner tensors for the classical simulation of quantum lattice systems. *ArXiv e-prints*, 1112.1412, December 2011.
- [135] Ling Wang, Ying-Jer Kao, and Anders W. Sandvik. Plaquette renormalization scheme for tensor network states. *Phys. Rev. E*, 83:056703, May 2011.
- [136] Z. Y. Xie, J. Chen, J. W. Zhu, L. P. Yang, and T. Xiang. Coarse graining tensor renormalization by the higher-order singular value decomposition. *ArXiv e-prints*, 1201.1144, January 2012.
- [137] C. N. Yang. The spontaneous magnetization of a two-dimensional ising model. *Phys. Rev.*, 85:808–816, Mar 1952.
- [138] G. H. Wannier. Antiferromagnetism. the triangular ising net. *Phys. Rev.*, 79:357–364, Jul 1950.
- [139] S Istrail. Statistical mechanics, three-dimensionality and np-completeness - i. universality of intractability for the partition function of the ising model across non-planar lattices,. *Proceedings of the thirty-second annual ACM symposium on Theory of computing*, pages 87–96, 2000.

- [140] Ming-Che Chang and Min-Fong Yang. Magnetization plateau of the classical ising model on the shastry-sutherland lattice: A tensor renormalization-group approach. *Phys. Rev. B*, 79:104411, Mar 2009.
- [141] Wei Li, Shou-Shu Gong, Yang Zhao, Shi-Ju Ran, Song Gao, and Gang Su. Phase transitions and thermodynamics of the two-dimensional ising model on a distorted kagome lattice. *Phys. Rev. B*, 82:134434, Oct 2010.
- [142] Q. N. Chen, M. P. Qin, J. Chen, Z. C. Wei, H. H. Zhao, B. Normand, and T. Xiang. Partial order and finite-temperature phase transitions in potts models on irregular lattices. *Phys. Rev. Lett.*, 107:165701, Oct 2011.
- [143] Can Güven, Michael Hinczewski, and A. Nihat Berker. Tensor renormalization group: Local magnetizations, correlation functions, and phase diagrams of systems with quenched randomness. *Phys. Rev. E*, 82:051110, Nov 2010.
- [144] Meng-Xiong Wang, Jian-Wei Cai, Zhi-Yuan Xie, Qiao-Ni Chen, Hui-Hai Zhao, and Zhong-Chao Wei. Investigation of the potts model on triangular lattices by the second renormalization of tensor network states. *Chin. Phys. Lett.*, 27:076402, 2010.
- [145] Roman Kotecký, Jesús Salas, and Alan D. Sokal. Phase transition in the three-state potts antiferromagnet on the diced lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 101:030601, Jul 2008.
- [146] Iwan Jensen, Anthony J Guttmann, and Ian G Enting. The potts model on kagome and honeycomb lattices. *J. Phys. A: Math. Theor.*, 30(23):8067–8083, 1997.
- [147] Heiko Feldmann, Robert Shrock, and Shan-Ho Tsai. Complex-temperature partition function zeros of the potts model on the honeycomb and kagomé lattices. *Phys. Rev. E*, 57:1335–1346, Feb 1998.
- [148] J E Sacco and F Y Wu. 32-vertex model on the triangular lattice. *J. Phys. A: Math. Theor.*, 8(11):1780, 1975.

- [149] F Y Wu and K Y Lin. Ising model on the union jack lattice as a free fermion model. *J. Phys. A: Math. Theor.*, 20(16):5737–5740, 1987.
- [150] K Y Lin and F Y Wu. Three-spin correlation of the free-fermion model. *J. Phys. A: Math. Theor.*, 22(8):1121–1130, 1989.
- [151] Chungpeng Fan and F. Y. Wu. General lattice model of phase transitions. *Phys. Rev. B*, 2:723–733, Aug 1970.
- [152] R. J. Baxter. Free-fermion, checkerboard and z-invariant lattice models in statistical mechanics. *Proc. R. Soc. A*, 404(1826):1–33, 1986.
- [153] L. Tagliacozzo, Thiago. R. de Oliveira, S. Iblisdir, and J. I. Latorre. Scaling of entanglement support for matrix product states. *Phys. Rev. B*, 78:024410, Jul 2008.
- [154] P. Calabrese and J. Cardy. Entanglement entropy and quantum field theory: a non-technical introduction. *Int. J. Quantum Inf*, 4:429, 2006.
- [155] Cristopher Moore and M. E. J. Newman. Height representation, critical exponents, and ergodicity in the four-state triangular potts antiferromagnet. *J. Stat. Phys.*, 99:629–660, 2000.
- [156] Jesper Lykke Jacobsen. On the universality of fully packed loop models. *J. Phys. A: Math. Theor.*, 32(29):5445–5453, 1999.
- [157] J. O. Fjaerestad. The 3-edge-colouring problem on the 4-8 and 3-12 lattices. *J. Stat. Mech.*, 2010(01):P01004, 2010.
- [158] R J Baxter, S B Kelland, and F Y Wu. Equivalence of the potts model or whitney polynomial with an ice-type model. *J. Phys. A: Math. Theor.*, 9(3):397, 1976.
- [159] Elliott H. Lieb. Residual entropy of square ice. *Phys. Rev.*, 162:162–172, Oct 1967.

-
- [160] Youjin Deng, Yuan Huang, Jesper Lykke Jacobsen, Jesús Salas, and Alan D. Sokal. Finite-temperature phase transition in a class of four-state potts antiferromagnets. *Phys. Rev. Lett.*, 107:150601, Oct 2011.
- [161] Jesus Salas and Alan Sokal. The three-state square-lattice potts antiferromagnet at zero temperature. *J. Stat. Phys.*, 92:729–753, 1998.
- [162] R. J. Baxter. Solvable eight-vertex model on an arbitrary planar lattice. *Proc. R. Soc. A*, 289(1359):315–346, 1978.
- [163] K. Y. Lin and F. Y. Wu. Magnetization of the ising model on the generalized checkerboard lattice. *J. Stat. Phys.*, 52:669–678, 1988. 10.1007/BF01019723.
- [164] M. Debauche, H. T. Diep, P. Azaria, and H. Giacomini. Exact phase diagram of a generalized kagomé ising lattice: Reentrance and disorder lines. *Phys. Rev. B*, 44:2369–2372, Aug 1991.

发表文章目录

- [1] **Q. N. Chen**, M. P. Qin, J. Chen, Z. C. Wei, H. H. Zhao, B. Normand and T. Xiang, *Partial order and finite-temperature phase transitions in Potts models on irregular lattices*, Phys. Rev. Lett **107**, 165701 (2011)
- [2] Z. Y. Xie, H. C. Jiang, **Q. N. Chen**, Z. Y. Weng, and T. Xiang, *Second Renormalization of Tensor-Network States*, Phys. Rev. Lett **103**, 160601 (2009)
- [3] H. H. Zhao, Z. Y. Xie, **Q. N. Chen**, Z. C. Wei, J. W. Cai and T. Xiang, *Renormalization of Tensor-Network States*, Phys. Rev. B **81**, 174411 (2010), editor's suggestion
- [4] M. X. Wang, J. W. Cai, Z. Y. Xie, **Q. N. Chen**, H. H. Zhao, and Z. C. Wei, *Investigation of Potts model on Trianglar lattice*, Chin. Phys. Lett **27**, 076402(2010)
- [5] J. W. Cai, **Q. N. Chen**, H. H. Zhao, Z. Y. Xie, M. P. Qin, Z. C. Wei, and T. Xiang, *Translational invariant tensor product states in a finite lattice system*, Chin. Phys. B **20**, 117501(2011)
- [6] H. H. Zhao, **Q. N. Chen**, Z. C. Wei, M. P. Qin, G. M. Zhang, and T. Xiang, *Quantum spin liquid phase in the spin-1 bilinear-biquadratic Heisenberg model on a honeycomb lattice*, arXiv:1105.2716, submitted to Phys. Rev. Lett
- [7] **Q. N. Chen** et al, *Partially ordered long range order of anti-ferromagnetic Potts model*, in preparation.

致 谢

*I went to the woods,
because I wanted to live deliberately.
I wanted to live deep,
and suck out all the marrow of life!
To put to rout all that was not life.
And not, when I came to die,
discover that I had not lived.*

多年前对理论物理的向往，使我选择了读博这条道路。从当初的懵懂无知到现在即将毕业，一路走来有欢乐，有痛苦，从每个问题被提出时的兴奋，中间遇到挫折时的迷茫，到最后得到结果时的喜悦，从刚来理论所时的憧憬，到现在临别时的不舍。这一路上，有很多人给我帮助，没有他们的帮助，我无法走到这一步，在这里对他们一并表示感谢。

首先感谢我的导师向涛研究员对我的悉心指导和照顾，感谢他几年来每次讨论时精辟清晰的讲解，组会时简明扼要的总结，迷茫时对我的指引，挫折时的给我的鼓励。向老师学识渊博，渗透到凝聚态物理的方方面面，对很多物理问题有独特的见解，有自己鲜明的研究风格，并且时刻保持着对科研前沿的热情与活力。他经常鼓励我们要开拓自己的视野，多尝试不同方向的课题，挑战更有难度的问题，这些都深深影响着我，使我受益匪浅，更为重要的是他对物理的热爱和对学术的执着追求感染着他身边的每一个人，做为他的学生，我感到十分幸运。

感谢中国人民大学的Bruce Normand教授，跟他的合作使我受益良多，他清晰的物理图像，对每个研究细节的关注，以及犀利的风格令人印象深刻。感谢覃绍京老师对我的关心和帮助，覃老师亦师亦友，总有极大的耐心为我答疑解惑。感谢北京师范大学的郭文安教授，跟他的讨论使我学到很多统计物理的知识。感谢虞跃老师和罗洪刚老师对我的照顾和帮助。

感谢组里的所有成员，每周组会上跟他们的讨论，会后餐桌上的谈笑风生，以及平时在物理问题上的交流和合作是我宝贵的经历和美好的回忆。他们

是刘承师老师，封晓勇师兄，郭成师兄，杨丽平师姐，许文虎，蔡建伟，还有各位师弟秦明普，魏忠超，谢志远，赵汇海，陈靖和王顺。徐鹰博后，孔鑫，韩兴杰，刘志远和黄杰的加入让这个组的未来焕发着生机和希望。还要感谢加入组会讨论的李伟，朱金伟，王宗国和梁龙。

感谢凝聚态大组的师兄弟姐妹，他们是李淑明师姐，司铁岩师兄，张学峰，马峰杰师兄，胡时杰师兄，王智慧师姐，卢仙聪师兄，康凯和眭晓红。感谢跟我同办公室的闫循旺师兄给我的帮助，感谢来组里访问的聂文星，感谢张振华，他在文献管理上对我的帮助使我的论文顺利完成，感谢卜严严，他对物理的热情和专注使我深受鼓舞。感谢多年来跟我一同学习的同学，董辉，秦涛，常越，黄海平，石弢，曾颖和隋艳芹，感谢张志平同学对我的照顾，感谢所有给予我帮助的同学。

我还要感谢王丽老师，她的工作为我在所里的学习和生活提供了极大的帮助。感谢所里其他的工作人员，他们为大家营造了方便舒适的科研环境。

最后要感谢我的父母，感谢他们多年来对我的理解与支持，他们虽然并不一定清楚和明白我的每个决定，但总是一如既往的支持我，给予我最大的信任和理解。二十多年来他们为我的培养付出了极大的艰辛，谨把这篇微不足道的论文献给我最敬爱的父亲和母亲！

.....

路漫漫其修远兮，吾将上下而求索！