Advanced Computational Physics

Zeitentwicklung von 1d Vielteilchensystemen: Berechnung mittels Matrix Produkt Zuständen

Zusammenfassung

Sommersemester 2015

H. G. Evertz

• Quantenmechanisches Heisenberg Modell in 1 Dimension :

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{L} J_{xy} \left(\hat{S}_i^x \hat{S}_{i+1}^x \; + \; \hat{S}_i^y \hat{S}_{i+1}^y \right) \; + \; J_z \, \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z \tag{1}$$

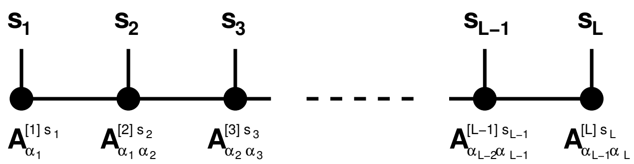
$$= \sum_{i=1}^{L} \frac{1}{2} J_{xy} \left(\hat{S}_i^+ \hat{S}_{i+1}^- \; + \; \hat{S}_i^- \hat{S}_{i+1}^+ \right) \; + \; J_z \, \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z \tag{2}$$

mit $\hat{S}_i^+ |\downarrow\rangle_i = |\uparrow\rangle_i$, $\hat{S}_i^- |\uparrow\rangle_i = |\downarrow\rangle_i$. Es gibt 2^L Basiszustände. In der z-Basis: $|s_1, s_2, \dots, s_L\rangle$, mit $s_i = \uparrow, \downarrow$.

Allgemeiner Zustand: $|\psi\rangle = \sum_{s_1, s_2, \dots, s_L} c_{s_1, s_2, \dots, s_L} \; |s_1, s_2, \dots, s_L\rangle$.

• Matrixproduktzustände (MPS). Ansatz :

$$|\psi\rangle = \sum_{s_1, s_2, \dots, s_L} \; \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{L-1}} A_{\alpha_1}^{[1]s_1} A_{\alpha_1,\alpha_2}^{[2]s_2} A_{\alpha_2,\alpha_3}^{[3]s_3} \dots A_{\alpha_{L-2},\alpha_{L-1}}^{[L-1]s_{L-1}} A_{\alpha_{L-1}}^{[L]s_L} \quad |s_1, s_2, \dots, s_L\rangle \tag{3}$$



mit $\chi \times \chi$ Matrizen $A^{[j]s_j}$, $2 \leq j \leq L-1$, und Vektoren $A^{[1]s_1}$ und $A^{[L]s_L}$.

• Beispiel 1: Produktzustand :

$$\begin{array}{cccccccccc}
|\psi\rangle & = & | & \downarrow & \downarrow & \uparrow & \downarrow & \uparrow & \downarrow & \rangle \\
A^{\uparrow} & = & & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & \\
A^{\downarrow} & = & & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 &
\end{array} \tag{4}$$

(Wir werden die Zeitentwicklung mit einem solchen einfachen Zustand beginnen.)

Beispiel 2: Nichtlokales Singulett :

$$\begin{array}{ccccccccccccc}
|\psi\rangle & = \frac{1}{\sqrt{2}} & (& | & \downarrow & \downarrow & \color{red}{\uparrow} & \downarrow & \downarrow & \color{red}{\downarrow} & \downarrow & \downarrow & \rangle \\
& & - & | & \downarrow & \downarrow & \color{red}{\downarrow} & \downarrow & \downarrow & \color{red}{\uparrow} & \downarrow & \downarrow & \rangle \;)
\end{array}$$

$$\begin{array}{ccccccccc}
A^{\uparrow} & = & 0, & 0, & (1,0), & \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, & \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, & -\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} / \sqrt{2}, & 0, \; 0 \\
A^{\downarrow} & = & 1, & 1, & (0,1), & \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, & \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, & \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} / \sqrt{2}, & 1, \; 1
\end{array} \tag{5}$$

• SVD : Beliebige $m \times n$ Matrix M: $\boxed{M \; = \; U \; D \; V^{\dagger}}$,

$$U^{\dagger} U = \mathbb{1}, \quad V^{\dagger} V = \mathbb{1}, \quad D = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & & & & \\ & \lambda_2 & & & & & \\ & & \lambda_3 & & & & \\ & & & \ddots & & & \\ & & & & \lambda_r & & \\ & & & & & 0 & \\ & & & & & & \ddots \\ & & & & & & & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_r > 0 \tag{6}$$

mit Rang $r \leq \min(n, m)$. (S.a. Wikipedia, englisch).

- **Pseudoinverse :** $D^{\mathrm{inv}}_{\alpha\beta} = 1/D_{\alpha\beta}$ wenn $D_{\alpha\beta} > \varepsilon$, und $= 0$ sonst, mit z.B. $\varepsilon = 10^{-10}$.

- **Schmidt-Zerlegung :** Ein qm System wird in beliebige Teilsysteme A,B aufgeteilt, mit orthonormalen Basen $|j\rangle_A$, $|k\rangle_B$. Allgemeiner Zustand: $|\psi\rangle = \sum_{jk} c_{jk}\ |j\rangle_A\ |k\rangle_B$.

SVD: $C = \tilde{U} D \tilde{V}^\dagger$, mit unitären Basistransformationen $\tilde{U}$ und $\tilde{V}$,
die man auf $|j\rangle_A$ und $|k\rangle_B$ anwenden kann.

$$\Rightarrow \boxed{|\psi\rangle = \sum_{\alpha=1}^{\chi} \lambda_\alpha\ |A\rangle_\alpha |B\rangle_\alpha\ ,\ \ \sum_{\alpha=1}^{\chi} \lambda_\alpha^2 = 1} \quad \text{mit Schmidt-Rang } \chi. \tag{7}$$

Bei einem Produktzustand gibt es nur 1 Summanden: $\chi = 1$, $\lambda = 1$.

Reduzierte Dichtematrix :

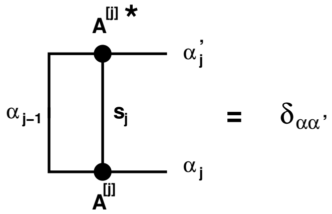
$$\hat\rho_A \ \equiv\ \mathrm{Tr}_B\,\hat\rho \ =\ \sum_{\alpha=1}^{\chi} \lambda_\alpha^2\, |A\rangle_\alpha\ {}_\alpha\langle A| \tag{8}$$

Entanglement :

$$S_A \ =\ -\,\mathrm{Tr}\,\hat\rho_A\,\log\hat\rho_A \ \ =- \ \sum_\gamma \lambda_\gamma^2\ \log\lambda_\gamma^2 \tag{9}$$

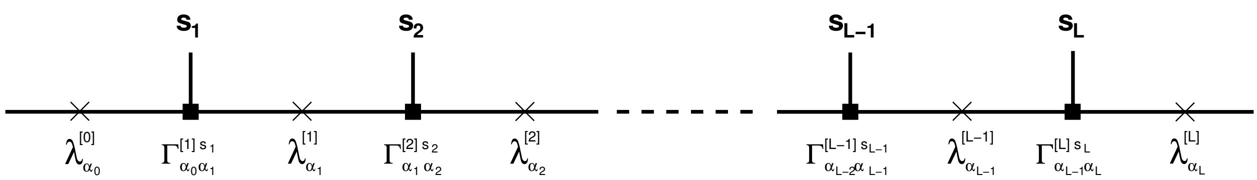
Normierung eines MPS : Aus der Darstellung als Sequenz von Basistransformationen folgt

$$\sum_{s_j} \left(A^{[j]s_j}\right)^\dagger\ A^{[j]s_j} \ =\ \mathbb{1} \tag{10}$$



- **Kanonische Darstellung eines MPS :**
Die Singulärwerte aus der Schmidt-Zerlegung werden aus den A-Matrizen herausgezogen (durch Multiplikation mit der Pseudoinversen von λ). Dies definiert die Gamma-Matrizen. Man kann auch noch die Zahlen $\lambda_0 = \lambda_L = 1$ definieren.

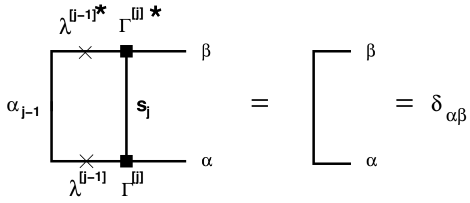
$$A^{[j]s_j}_{\alpha_{j-1}\,\alpha_j} \ =:\ \lambda^{[j-1]}_{\alpha_{j-1}}\ \Gamma^{[j]s_j}_{\alpha_{j-1}\,\alpha_j} \tag{11}$$

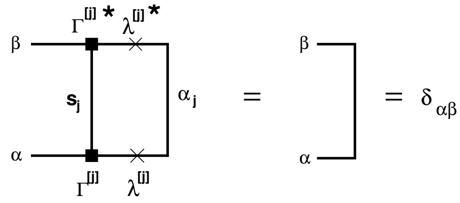


Die kanonische Darstellung enthält an jeder Stelle direkt die Schmidt-Singulärwerte einer Schmidt-Zerlegung.

Normierung :

$$\sum_{s_j} \left(\Gamma^{[j]s_j}\right)^\dagger \; \left(\lambda^{[j-1]}\right)^2 \; \Gamma^{[j]s_j} \; = \; \mathbb{1} \qquad\qquad \sum_{s_j} \Gamma^{[j]s_j} \; \left(\lambda^{[j]}\right)^2 \; \left(\Gamma^{[j]s_j}\right)^\dagger \; = \; \mathbb{1}$$





• **Trunkierung :** Schneide λ_α bei $\alpha = \chi_{max}$ ab (oder bei $\lambda_\alpha < \varepsilon$).

Discarded weight:
$$w := 1 - \sum_{\alpha=1}^{\chi_{cut}} \lambda_\alpha^2 \tag{12}$$

Re-normieren:
$$\lambda_\alpha \;\rightarrow\; \lambda_\alpha / \sqrt{1-w} \;, \quad \text{damit} \; \sum_\alpha \lambda_\alpha^2 = 1 \tag{13}$$

Die Normierung von A und Γ bleibt erhalten.

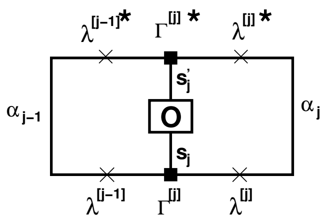
• **Erwartungswerte von 1-Platz-Operatoren $\hat{O}^{[j]}$: :**

Man benötigt nur die Matrizen der direkten Umgebung von Platz j:

$$M^{s_j}_{\alpha_{j-1}\alpha_j} \;:=\; \lambda^{[j-1]}_{\alpha} \; \Gamma^{[j]\,s_j}_{\alpha_{j-1}\alpha_j} \; \lambda^{[j]}_{\alpha_j} \;. \tag{14}$$

Dann ist

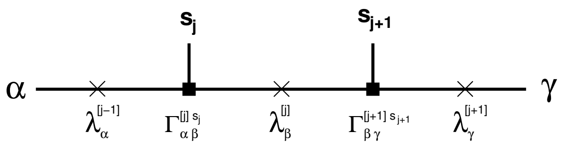
$$\langle\psi|\,\hat{O}^{[j]}\,|\psi\rangle \;\; = \;\; \sum_{s,s'} \langle s'|\,\hat{O}\,|s\rangle \;\, \mathrm{Tr}\, \left(M^{s'}\right)^\dagger \;\; M^s \tag{15}$$



- **Anwendung eines Zwei-Platz-Operators $\hat{O}^{[j,j+1]}$ auf einen MPS Zustand :**

1. Man benötigt wieder nur die Matrizen der direkten Umgebung und berechnet

$$\Theta^{s_j\, s_{j+1}}_{\alpha\gamma} \;:=\; \sum_{\beta} \lambda^{[j-1]}_{\alpha}\, \Gamma^{[j]\, s_j}_{\alpha\beta}\, \lambda^{[j]}_{\beta}\, \Gamma^{[j+1]\, s_{j+1}}_{\beta\gamma}\, \lambda^{[j+1]}_{\gamma} \tag{16}$$



2. Anwenden von $\hat{O}$ auf Θ:

$$\tilde{\Theta}^{s'_j\, s'_{j+1}}_{\alpha\gamma} \;=\; \sum_{s_j, s_{j+1}} \langle s'_j\, s'_{j+1} |\, \hat{O}\, | s_j\, s_{j+1} \rangle\; \Theta^{s_j\, s_{j+1}}_{\alpha\gamma} \tag{17}$$

Matrix mal Koeffizientenvektor

3. Umkopieren von $\tilde{\Theta}$ in eine Matrix $\bar{\Theta}$

$$\bar{\Theta}_{(\alpha s'_j),(\gamma s'_{j+1})} \;:=\; \tilde{\Theta}^{s'_j\, s'_{j+1}}_{\alpha\gamma} \tag{18}$$

4. SVD von $\bar{\Theta}$. (Schmidt-Rang bis zu 2χ !)

$$\bar{\Theta}_{(\alpha s'_j),(\gamma s'_{j+1})} \;=\; \sum_{\beta=1}^{2\chi} U_{(\alpha s'_j)\,\beta}\; \lambda'_{\beta}\; V^{\dagger}_{\beta\,(\gamma s'_{j+1})} \tag{19}$$

5. *Trunkieren* von λ'_{β} zu einer kleineren Matrix $\tilde{\lambda}_{\beta}$ (z.B. wieder mit Dimension χ).
   Berechnen des Discarded weight w.
   Renormieren: $\tilde{\lambda}_{\beta} \to \tilde{\lambda}_{\beta} \,/\, \sqrt{1-w}$.
   Abschneiden von U und $V^{\dagger}$ bei der neuen Matrixgröße.

6. Extrahieren der neuen Gamma-Matrizen durch Abspalten (Pseudoinverse) der *unveränderten* äußeren λ-Matrizen:

$$\tilde{\Gamma}^{[j] s'_j}_{\alpha\beta} \;=\; (\lambda^{[j-1]}_{\alpha})^{\mathrm{inv}}\; U_{(\alpha s'_j)\,\beta} \quad , \qquad \tilde{\Gamma}^{[j+1] s'_{j+1}}_{\beta\gamma} \;=\; V^{\dagger}_{\beta\,(\gamma s'_{j+1})}\; (\lambda^{[j+1]}_{\gamma})^{\mathrm{inv}} \tag{20}$$

Ergebnis: neue $\chi \times \chi$ Matrizen $\tilde{\Gamma}^{[j] s'_j}_{\alpha\beta}$, $\tilde{\lambda}_{\beta}$, und $\tilde{\Gamma}^{[j+1] s'_{j+1}}_{\beta\gamma}$.

• Zeitentwicklung :

Der Hamilton-Operator sei eine Summe von Zwei-Platz-Operatoren, wie bei der Heisenberg-Kette: $\hat{H} = \sum_i \hat{H}_{i,i+1}$. Aufspaltung:

$$\hat{H} = \hat{H}_u + \hat{H}_g, \qquad \hat{H}_u = \sum_{i \text{ ungerade}} \hat{H}_{i,i+1}, \qquad \hat{H}_g = \sum_{i \text{ gerade}} \hat{H}_{i,i+1}. \tag{21}$$

Trotter-Zerlegung:

$$\mathrm{e}^{-i\hat{H}\Delta t} \quad = \quad \mathrm{e}^{-i\hat{H}_u\Delta t} \; \mathrm{e}^{-i\hat{H}_g\Delta t} \quad + \quad O((\Delta t)^2 \; , \tag{22}$$

mit

$$\mathrm{e}^{-i\hat{H}_u\Delta t} \quad = \quad \prod_{i \text{ ungerade}} \mathrm{e}^{-i\hat{H}_{i,i+1}\Delta t} \; , \quad \mathrm{e}^{-i\hat{H}_g\Delta t} \quad = \quad \prod_{i \text{ gerade}} \mathrm{e}^{-i\hat{H}_{i,i+1}\Delta t} \; . \tag{23}$$

Vorgehen:

1. Schreibe den Anfangszustand als kanonischen MPS.
2. Berechne die Matrixelemente $\langle s'_j s'_{j+1} | \mathrm{e}^{-i\hat{H}_{j,j+1}\Delta t} | s_j s_{j+1} \rangle$
3. Ein Zeitschritt: Wende $\mathrm{e}^{-i\hat{H}\Delta t}$ gemäß der Trotter-Zerlegung an, durch sequentielles Anwenden der Zwei-Platz-Operatoren $\mathrm{e}^{-i\hat{H}_{j,j+1}\Delta t}$, zunächst für ungerade j, dann für gerade j.
4. Nach einem oder mehreren Zeitschritten können Messungen durchgeführt werden.

Alternative: Trotter-Zerlegung 2. Ordnung:

- $\mathrm{e}^{-i\hat{H}\Delta t} \quad = \quad \mathrm{e}^{-i\hat{H}_u\frac{\Delta t}{2}} \; \mathrm{e}^{-i\hat{H}_g\Delta t} \; \mathrm{e}^{-i\hat{H}_u\frac{\Delta t}{2}} \quad + \quad O((\Delta t)^3 \; ,$
  Messung jeweils nach (mehreren) kompletten Zeitschritten $\mathrm{e}^{-i\hat{H}\Delta t}$, d.h. zwischen zwei Anwendungen von $\mathrm{e}^{-i\hat{H}_u\frac{\Delta t}{2}}$. (Ohne Messung kann man wegen $\mathrm{e}^{-i\hat{H}_u\frac{\Delta t}{2}}\mathrm{e}^{-i\hat{H}_u\frac{\Delta t}{2}} = \mathrm{e}^{-i\hat{H}_u\Delta t}$ Operationen sparen.)