

Univerza v Ljubljani  
Fakulteta *za matematiko in fiziko*



VRM  
**Kvantni Mnogodelčni Sistemi**

**Andrej Kolar - Požun**

28. 3. 2019

## Heisenbergov model

Obravnavamo verigo  $n$  spinov. Heisenbergov model s sklopitvijo, ki ustreza antiferomagnetu, opiše Hamiltonjan:

$$H = \sum_{j=1}^n \vec{\sigma}_j \cdot \vec{\sigma}_{j+1} = \sum_{j=1}^n (2\sigma_j^+ \sigma_{j+1}^- + 2\sigma_j^- \sigma_{j+1}^+ + \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z),$$

kjer je  $\sigma_j$  Paulijeva matrika, ki deluje le na  $j$ -tem mestu s periodičnimi robnimi pogoji  $\sigma_{n+1} = \sigma_1$ .

Zanimal nas bo časovni razvoj, za katerega moramo izračunati  $\exp(-itH)$  in termično povprečje, za katerega moramo izračunati  $\rho = Z^{-1} \exp(-H/T)$ . V obeh primerih moramo torej izračunati količino tipa  $e^{zH} = e^{z(A+B)}$  in spet si bomo pomagali s Trotter-Suzukijevim razcepom:

$$\begin{aligned} e^{z(A+B)} &= S_n(z) + \mathcal{O}(z^{n+1}), \\ S_2(z) &= \exp\left(\frac{z}{2}A\right) \exp(zB) \exp\left(\frac{z}{2}A\right), \\ S_4(z) &= S_2(x_1 z) S_2(x_0 z) S_2(x_1 z), \\ x_0 &= -\frac{2^{1/3}}{2 - 2^{1/3}}, x_1 = \frac{1}{2 - 2^{1/3}}. \end{aligned}$$

Odločiti se moramo še, kako bomo razbili Hamiltonjan na dva dela  $H = A + B$ . To naredimo tako, da sta  $A$  in  $B$  lahko izračunljiva, kar je res če izberemo na primer:

$$\begin{aligned} A &= \sum_{j=1}^{n/2} \vec{\sigma}_{2j-1} \cdot \vec{\sigma}_{2j}, \\ B &= \sum_{j=1}^{n/2} \vec{\sigma}_{2j} \cdot \vec{\sigma}_{2j+1}. \end{aligned}$$

Členi v zgornjih vsotah komutirajo, kar pomeni, da velja:

$$\begin{aligned} e^{zA} &= \prod_{j=1}^{n/2} \exp(z \vec{\sigma}_{2j-1} \cdot \vec{\sigma}_{2j}), \\ e^{zB} &= \prod_{j=1}^{n/2} \exp(z \vec{\sigma}_{2j} \cdot \vec{\sigma}_{2j+1}). \end{aligned}$$

Delovanje posameznega izmed faktorjev na desni pa znamo zapisat kot:

$$U(z) = \exp(z \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) = e^{-z} \begin{bmatrix} e^{2z} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cosh 2z & \sinh 2z & 0 \\ 0 & \sinh 2z & \cosh 2z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{2z} \end{bmatrix}$$

Če predstavimo stanje v lastni bazi  $\sigma_j^z$

$$|\psi\rangle = \sum_{b_1, \dots, b_n} \psi_{b_1 \dots b_n} |b_1, \dots, b_n\rangle,$$

lahko delovanje operatorja  $U(z)$  formuliramo s pomočjo njegovega matričnega elementa:

$$\psi'_{b_1, \dots, b_n} = \sum_{b, b'=0}^1 U_{(b_j, b_{j+1}), (b, b')} \psi_{b_1, \dots, b_{j-1}, b, b', b_{j+2}, \dots, b_n}.$$

Opremljeni z algoritmom za izračun  $e^{zH}$  za naš Hamiltonjan lahko računamo razna povprečja in sicer korelacijsko funkcijo:

$$\langle X(t)X(0) \rangle = \frac{1}{N_\psi} \sum \langle \psi | \exp(itH)X \exp(-itH)X | \psi \rangle$$

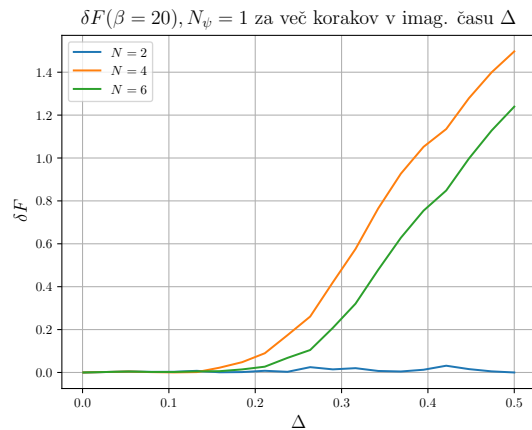
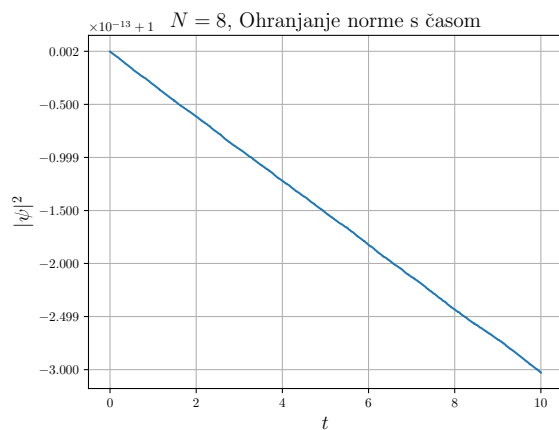
V vsoti naključno izbiramo funkcije  $\psi$ , tako da po normalni porazdelitvi izberemo realni in imaginarni del koeficientov pred baznimi funkcijami in to normiramo, da velja  $|\psi|^2 = 1$ .

Računamo lahko tudi termična povprečja, če se premikamo za imaginarni čas:

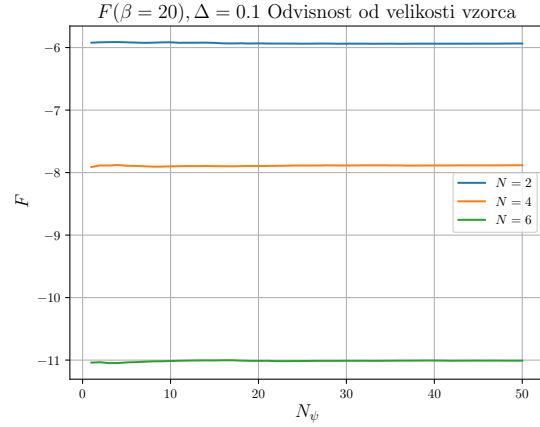
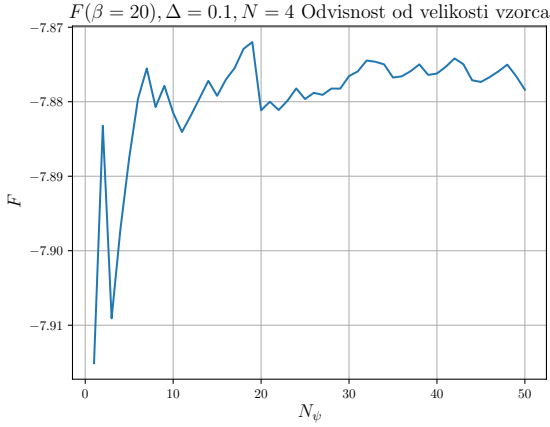
$$\langle X \rangle_\beta = \frac{1}{N_\psi} \sum \langle \psi | \exp(-\beta/2H)X \exp(-\beta/2H)X | \psi \rangle$$

## Naloga

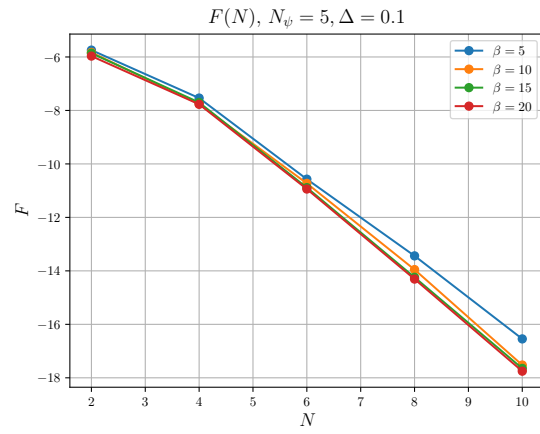
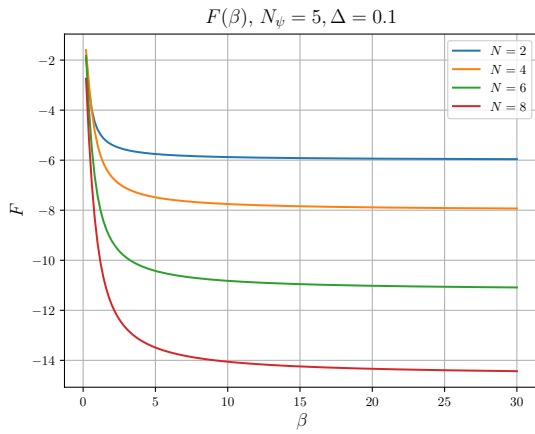
Za primer Heisenbergove verige nariši graf proste energije  $F(\beta) = -\frac{1}{\beta} \log Z(\beta)$  in energije  $\langle H \rangle$ . Limita  $\beta \rightarrow \infty$  da energijo osnovnega stanja. Najprej stestirajmo metodo:



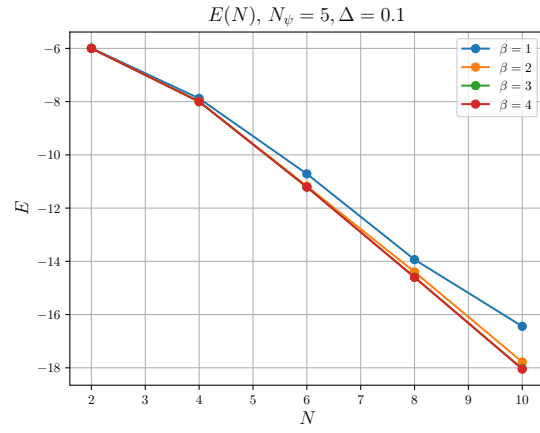
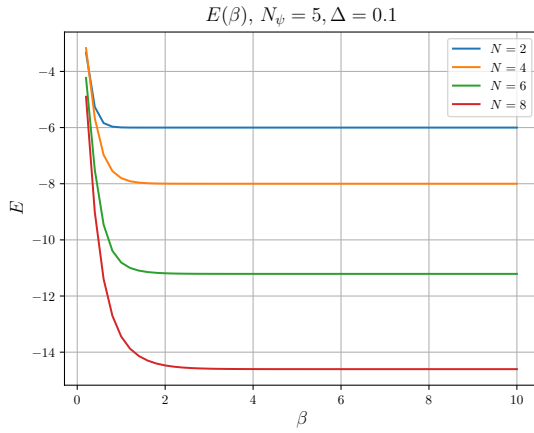
Na levi sliki je prikazan časovni razvoj naključno generiranega stanja z časovnim korakom  $\Delta = 0.01$ . Videti je mogoče, da se norma ohranja in je torej Hamiltonjan, izračunan po metodah v uvodu res hermitski. Na je prikazana relativna napaka proste energije v odvisnosti od koraka v imaginarnem času (glede na referenco  $\Delta = 0.001$ ). Opazimo lahko, da bo že časovni korak  $\Delta$  približno 0.1 dovolj natančen.



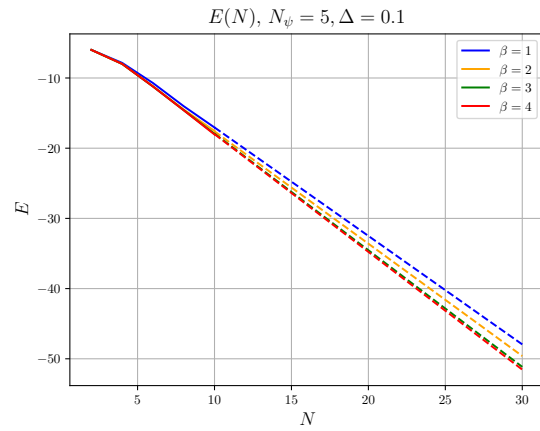
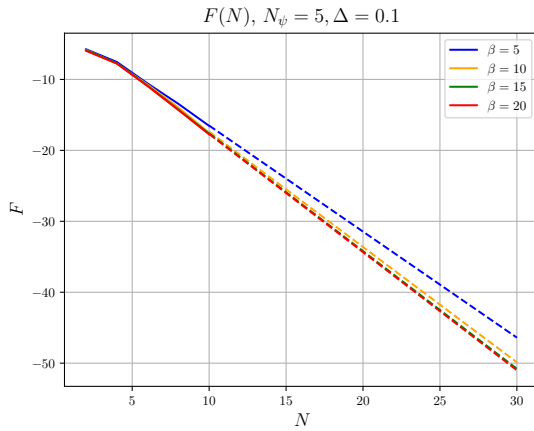
Na levi sliki je prikazano spreminjanje proste energije v odvisnosti od velikosti vzorca, po katerem povprečujemo. Za večje  $N_\psi$  seveda energija fluktuiira okoli nekega povprečja, katerega lahko že z zelo majhnim  $N_\psi$  dobro aproksimiramo. Na desni sliki je ta odvisnost prikazana za več različnih velikosti verig  $N$ . Tu se še boljše vidi, da rezultat ni močno odvisen od  $N_\psi$ . Zaradi varnosti bo v preostanku naloge vseeno uporabljen  $N_\psi = 5$ .



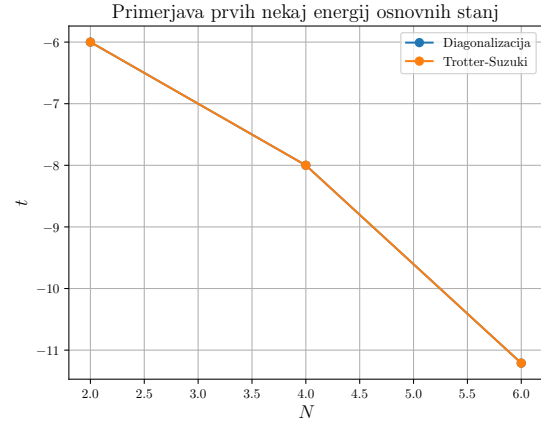
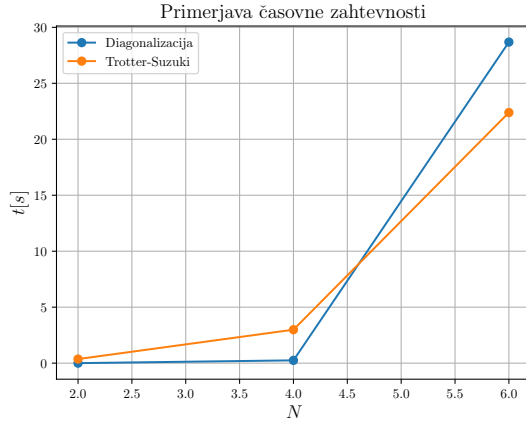
Na levi je prikazana odvisnost proste energije od inverzne temperature  $\beta$  za več velikosti verige  $N$ . Ta monotonno pada in ima asimptoto - energijo osnovnega stanja. Na desni je prikazana odvisnost proste energije pri več fiksnih  $\beta$  od velikosti verige  $N$ . Opazimo...



Na levi je prikazana odvisnost energije od inverzne temperature  $\beta$  za več velikosti verige  $N$ . Opazimo, da ta monotonno pada in ima asimptoto (energijo osnovnega stanja). Na desni vidimo odvisnost energije osnovnega stanja velikosti verige  $N$ . Z črtkanoim grafom je prikazan še rezultat, pridobljen z direktno diagonalizacijo Hamiltonjana.

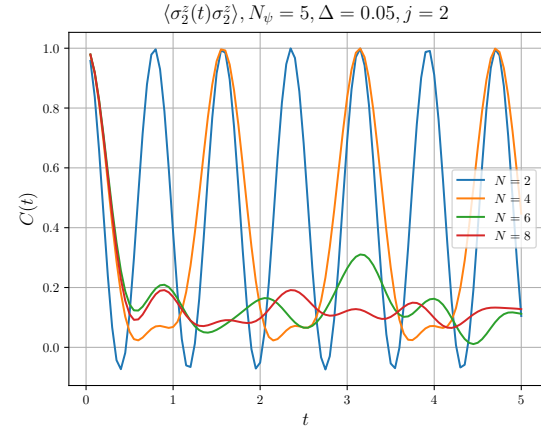
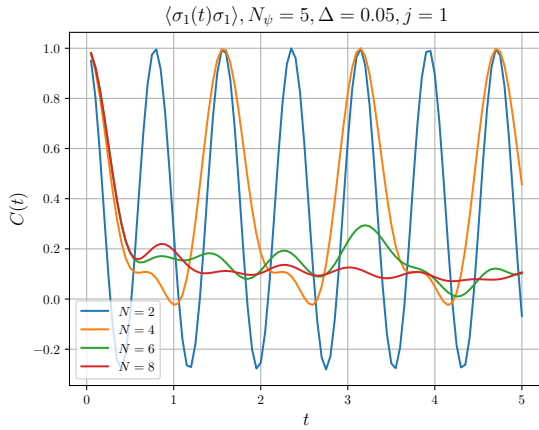


Na zgornjih grafih sta energiji glede na podatke do  $N = 10$  ekstrapolirani (z linearno funkcijo) do  $N = 30$ .

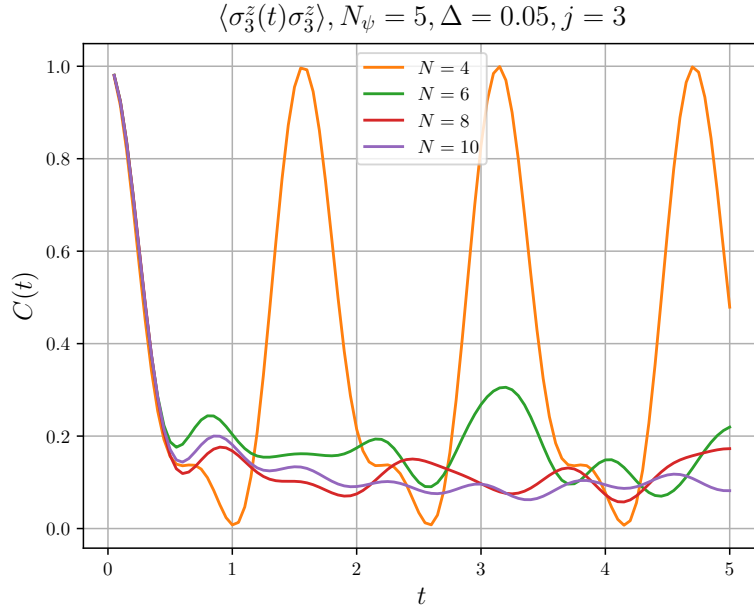


Prikazan je čas izvajanja algoritma za določitev energije osnovnega stanja. Diagonalizacija je na začetku hitrejša, vendar smo pri tej le-tej močno omejeni, saj velikosti matrik hitro rastejo in je pri fiksnem  $N$  treba shraniti  $2^{2N+1}$  števil, medtem ko je za Trotter-Suzukijev razcep treba shranjevati le vektorje, torej  $2^{N+1}$  števil. Pri  $N = 6$  je Trotter-Suzuki že hitrejši od direktne diagonalizacije, za  $N = 8$  pa je ta že tako počasna, da je sploh nisem do konca računal. Na desni sliki so prikazane še energije, ki jih data obe metodi. Tu ni vidnih nobenih razlik.

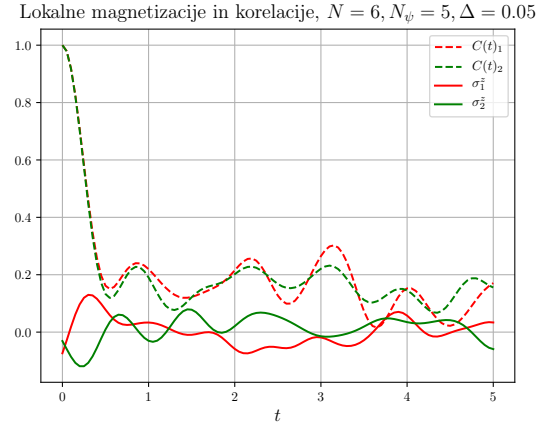
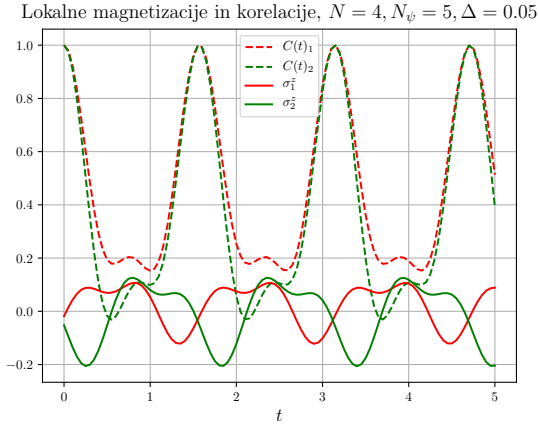
Izračunajmo še avtokorelacijske funkcije magnetizacije  $C(t) = \langle \sigma_j^z(t) \sigma_j^z \rangle$  pri neskončni temperaturi.



Prikazane so avtokorelacijske funkcije magnetizacije  $\sigma^z$  za več velikosti verig  $N$ . Za  $N = 2$  ima ta zelo izrazito periodo, za večje  $N$  pa periodičnost izginja. Prav tako na obliko avtokorelacijske funkcije vpliva tudi indeks kubita  $j$ .



Prikazane so avtokorelacijske funkcije magnetizacije  $\sigma^z$  za več velikosti verig  $N$

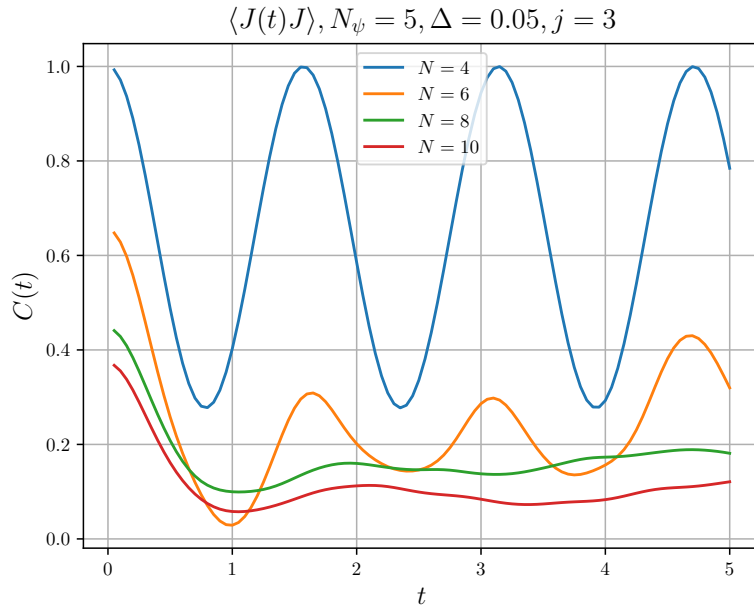


Na grafih je poleg korelacijskih funkcij magnetizacije prikazana še povprečna vrednost magnetizacije same. Pri  $N = 4$  tako vidimo, da je tudi magnetizacija res periodična z isto periodo kot korelacijska funkcija, kot je smiselno. Na desni pa ravno obratno nista ne magnetizacija, ne korelacijska funkcija zares periodični.

Poglejmo si še, kako je s korelacijo spinskega toka  $C(t) = \langle J(t)J \rangle$  pri neskončni temperaturi, kjer je spinski tok definiran kot

$$J = \sum_{j=1}^N J_j$$

$$J_j = \sigma_j^x \sigma_{j+1}^y - \sigma_j^y \sigma_{j+1}^x$$



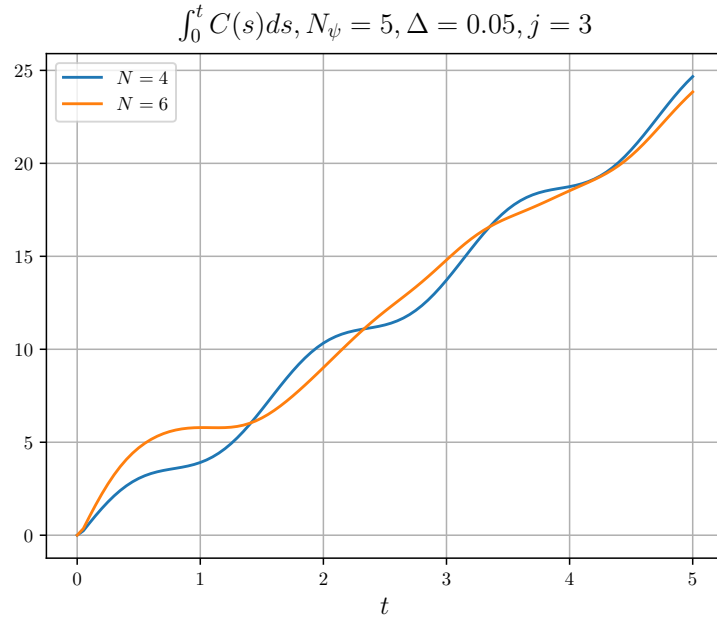
Prikazane so (normirane) avtokorelacijske funkcije spinskega toka  $J$  za več velikosti verig  $N$ . Podobno kot prej ima korelacijska funkcija izrazito periodo za majhne  $N$ , ki pa se pri večjih  $N$  zašumi. Za  $N = 2$  je v tem primeru korelacija konstanta in enaka 0.

Zanima nas, ali lahko definiramo difuzijsko konstanto za primer spinskega toka preko Kubove formule:

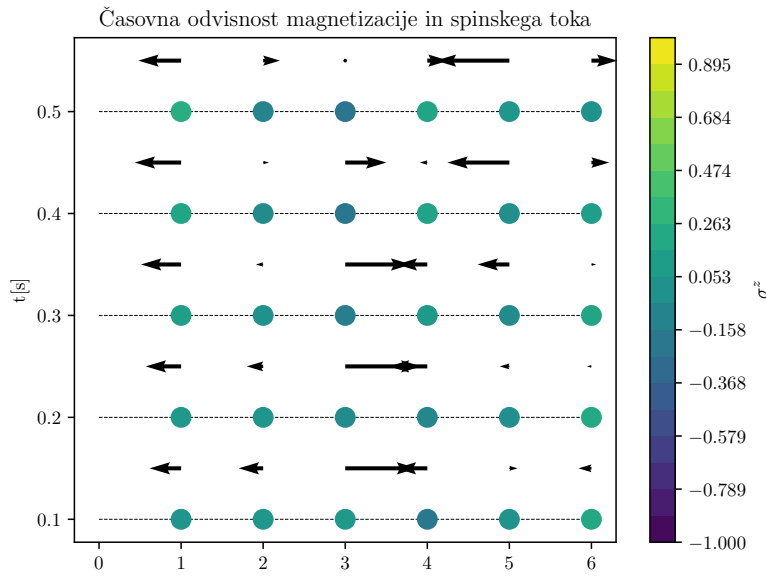
$$D = \int_0^\infty C(s) ds$$

Zdi se, da to ne bo mogoče, saj korelacijske funkcije ne padajo in so vedno večje od 0. Ta integral torej divergira.

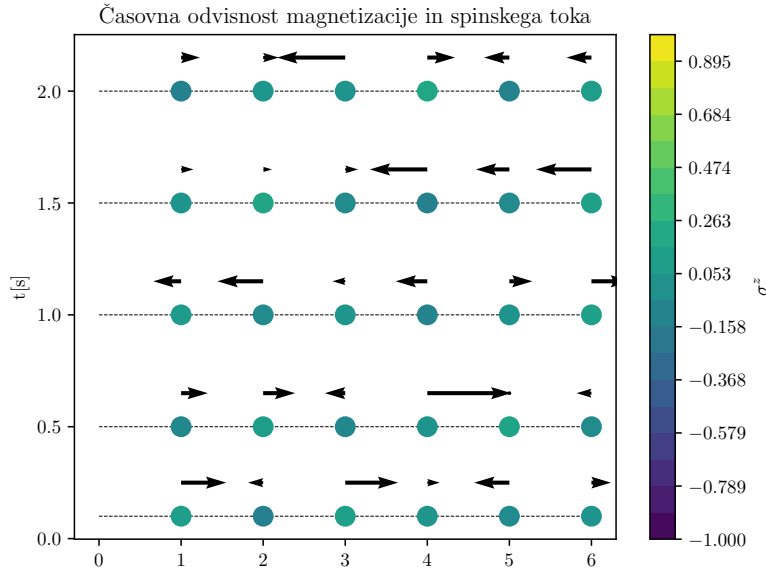




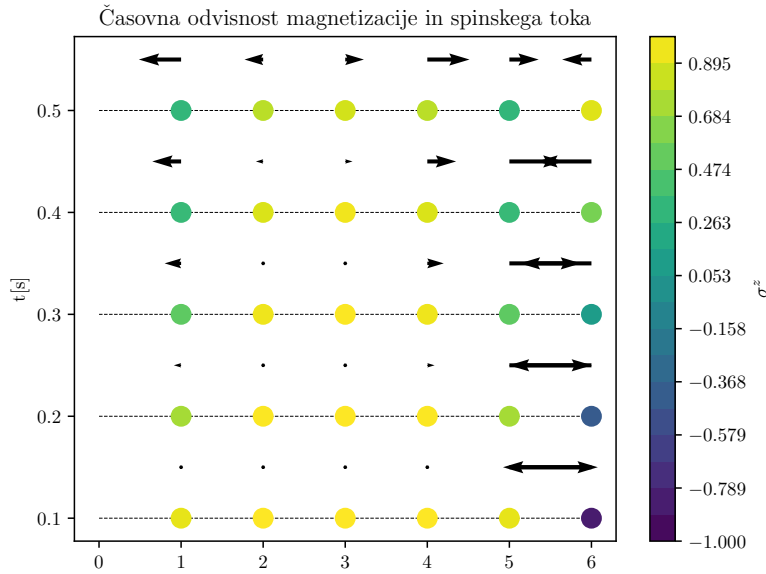
Prikazana je difuzijska konstanta kot funkcija zgornje meje integrala v njeni definiciji za  $N=4,6$ . Če bi korelacijska funkcija dovolj hitro padala, bi graf imel končno asimptoto.



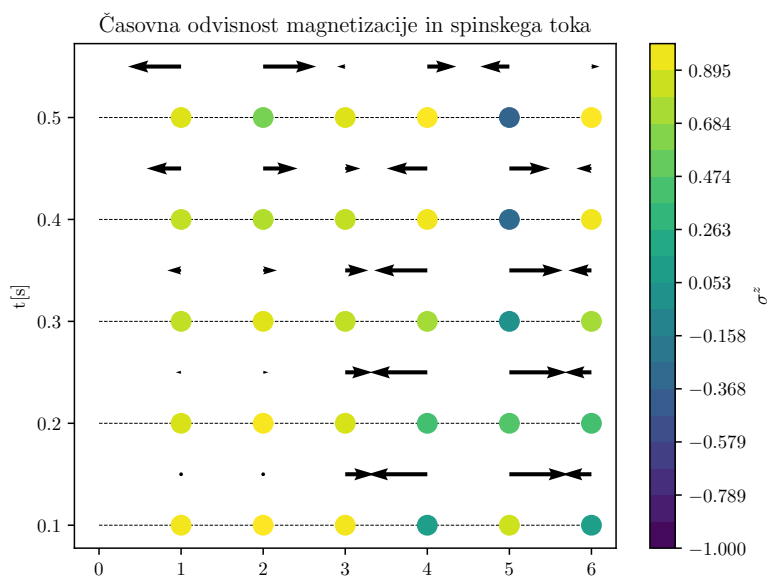
Prikazan je časovni razvoj magnetizacije na verigi. Na y osi je čas, magnetizacija pa je prikazana z barvo. Poleg tega je nad spini prikazan še trenutni spinski tok.



Prikazan je časovni razvoj magnetizacije na verigi, tokrat za večji čas. Na y osi je čas, magnetizacija pa je prikazana z barvo. Poleg tega je nad spini prikazan še trenutni spinski tok.



Prikazan je časovni razvoj magnetizacije na verigi, kjer je začetno stanje 0 na vseh spinih razen na desnem, kjer je 1. Na y osi je čas, magnetizacija pa je prikazana z barvo. Poleg tega je nad spini prikazan še trenutni spinski tok. Po barvi sodeč poteka nekakšna "difuzija spina" po verigi, tok pa včasih kaže v nenavadne smeri. Očitno je s tokom nekje neka napaka.



Prikazan je časovni razvoj magnetizacije na verigi za še en drugačen primer začetne verige. Na y osi je čas, magnetizacija pa je prikazana z barvo. Poleg tega je nad spini prikazan še trenutni spinski tok.