

Algoritem TEBD

Miha Čančula

26. maj 2013

1 Algoritem

Algoritem TEBD sem implementiral v programskem jeziku **Octave**. Pri tem sem uporabil funkcijo za razcep na matrični produkt iz prejšnje naloge. Uporabil sem tudi dvodelčni propagator za Heisenbergove verige, ki smo ga uporabljali že pri nalogi o Trotter-Suzukijevem razcepu.

Algoritem je podrobno opisan v navodilih, kot implementacijski detajl lahko omenim le, da sem za razcep matrik namesto vgrajene metode **svg** uporabil metodo **svgs**, ki deluje iterativno in vrne le zahtevano število singularnih vrednosti. Dimenzijo vezi M_j sem omejil tako, da sem uporabil največ $M = 200$ singularnih vrednosti, dodatno pa sem zavrgel še vse tisto, ki so po absolutni vrednosti vsaj 10^6 -krat manjše od največje.

Pri propagaciji oz. iskanju termičnih stanj norma stanja narašča eksponentno, zato sem stanje po nekaj korakih ponovno normaliziral. Za normalizacijo sem izračunal vse člene vektorja stanja ψ , vektor normaliziral, nato pa zopet izvedel razcep na produkt matrik. Takšen postopek je zamuden, zato ga nisem izvajal na vsakem koraku propagacije.

Vedno sem uporabljala antiiferomagnetni Heisenbergov Hamiltonian.

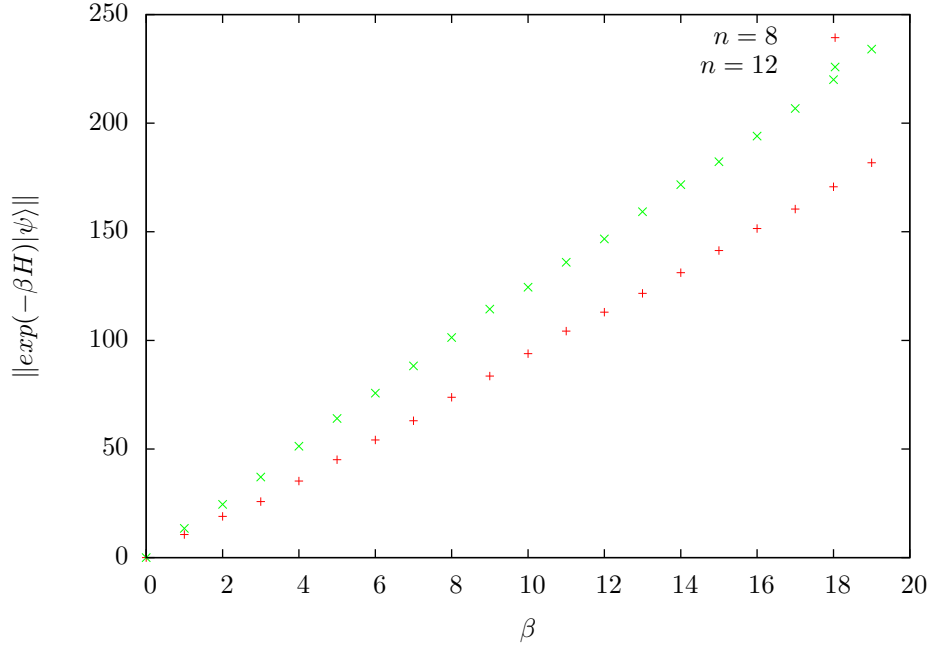
2 Osnovno stanje Heisenbergove verige

Če sem naključno stanje propagiral z realnim $z = \beta$, kar ustreza iskanju termičnih stanj, pri dovolj velikem β program vrne dober približek za osnovno stanje, v obliki matričnega produkta. Iz matričnega produkta bi lahko izračunali stanje ψ , ampak za predstavitev je bolj koristno računanje energije osnovnega stanja in korelacije v tem stanju.

Energijo stanja bi lahko izračunal z delovanjem Hamiltoniana na stanje, kot $E = \langle \psi | H | \psi \rangle$. Ker pa je matrika H lahko zelo velika, sem prihranil na računalniškem spominu z uporabo enakosti

$$E = - \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\| \exp(-\beta H) | \psi_i \rangle \|}{\beta} \quad (1)$$

ki velja, če je na začetno stanje ψ_i normirano. Obstoj oz. konvergenca te limite je dobro viden na naslednji sliki.

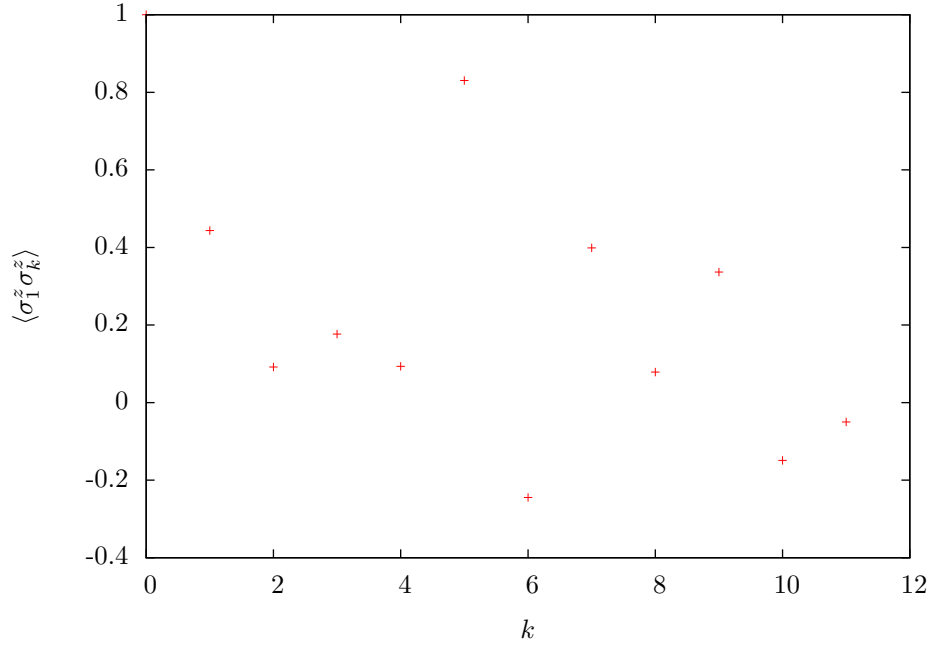


Slika 1: Odvisnost norme $\langle \psi | \psi \rangle$ od inverzne temperature β

Na grafu vidimo lepo eksponentno naraščanje norme, torej so prispevki višjih stanj res zanemarljivi. Naklon premice na logaritemskem grafu je odvisen od velikosti sistema.

3 Spinske korelacije

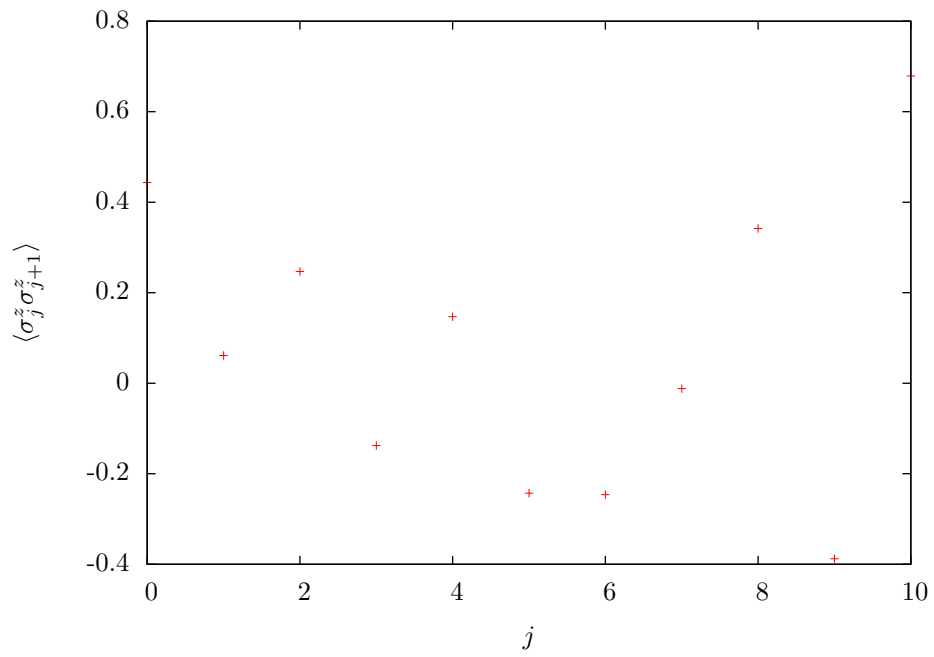
Opazoval sem tudi korelacije med spini posameznih delcev. Najbolj zanimiva je verjetno odvisnost korelacije $\langle \sigma_j^z \sigma_k^z \rangle$ od razdalje med j in k . To odvisnost za $j = 1$ prikazuje slika 2.



Slika 2: Spinska korelacija delcev na različnih razdaljah v osnovnem stanju

Ker sem uporabil odprte robne pogoje, stanje ni nujno odvisno le od razdalje med j in k , ampak je lahko

odvisno tudi od njunega absolutnega položaja. Zato sem dodatno računal odvisnost korelacije $\langle \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z \rangle$ od j .



Slika 3: Spinska korelacija dveh sosednjih delcev v osnovnem stanju