

7. naloga – MPA in Schmidtov algoritem

Jože Zobec

Schmidtov algoritem in matrično produktni nastavki

1.1 Uvod

Navodila so opisana na spletu v profesorjevi skripti in jih zaradi tega nima smisla ponavljati. Za uvod bomo zato najprej pogledali, kako do Heisenbergovega hamiltoniana v matrični obliki, kjer imamo za bazo spinske konfiguracije.

Imamo Heisenbergov hamiltonian za spinsko verigo (v odsotnosti magnetnega polja), ki ga poznamo že iz drugega poglavja (in raznih drugih kurzov):

$$H = -J \sum_j \vec{S}_j \cdot \vec{S}_{j+1} = -J \sum_j \hat{h}_{j,j+1}.$$

Hamiltonian smo razcepili na vsoto dvodelčnih hamiltonianov, ki se glase

$$\hat{h}_{j,j+1} = S_j^x S_{j+1}^x + S_j^y S_{j+1}^y + S_j^z S_{j+1}^z.$$

Seveda, nam ta oblika ne diši preveč, spomnimo pa se, da spinski operatorji zadoščajo grupi $SU(2)$ in zanje lahko poiščemo operatorje dviganja in spuščanja:

$$\begin{aligned} S_j^+ &= S_j^x + iS_j^y, \\ S_j^- &= S_j^x - iS_j^y. \end{aligned}$$

To uporabimo na dvodelčnem hamiltonianu $\hat{h}_{j,j+1}$ in dobimo

$$\hat{h}_{j,j+1} = \frac{1}{2} (S_j^+ S_{j+1}^- + S_j^- S_{j+1}^+ + 2S_j^z S_{j+1}^z).$$

Izračunajmo $\hat{h}_{1,2}^{(2)}$ v spinski bazi:

$$\hat{h}_{1,2}^{(2)} = \frac{1}{2 \cdot 2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{4} h_{1,2}^{(2)}$$

Zgornji indeks '2' v oklepaju, nas spomni, da to velja samo, kadar imamo trivialno verigo z zgolj dvema členoma.

Na tem mestu lahko brez izgube splošnosti redefiniramo $J \rightarrow J' = 4J$, zato, da se znebimo tistih nadležnih polovic in nam ostane samo matrika $h_{j,j+1}$.

Imamo anti-feromagnetno sklopitev, tj. $J < 0$. Nobenega razloga ni, zakaj ne bi bil kar $J = -1$.

Popoln hamiltonian za več delcev je enak vsoti Kroneckerjevih produktov večih takih matrik $h_{1,2}^{(2)}$ z identitetami. Seveda deluje le za sodo število delcev (tj. za verige dolžine $= 2m$, $m \in \mathbb{N}$).

Skratka, n -delčni hamiltonian $H^{(n)}$ dobimo kot

$$H^{(n)} = \sum_{j=1}^{n-1} h_{j,j+1}^{(n)} = \sum_{j=1}^{2m-1} \mathbb{1}_{2^{j-1}} \otimes h_{1,2}^{(2)} \otimes \mathbb{1}_{2^{2m-j-1}} \quad (1)$$

Torej, našo matriko 4×4 vozimo po produktu identitet s korakom 2. Za primer, ko $m = 2$, tj. verigo dolžine 4, to pomeni:

$$H^{(4)} = \underbrace{h_{1,2}^{(2)} \otimes \mathbb{1}_4}_{h_{1,2}^{(4)}} + \underbrace{\mathbb{1}_2 \otimes h_{1,2}^{(2)} \otimes \mathbb{1}_2}_{h_{2,3}^{(4)}} + \underbrace{\mathbb{1}_4 \otimes h_{1,2}^{(2)}}_{h_{3,4}^{(4)}}$$

Vendar kot vidimo, ta formula velja samo za odprte robne pogoje. Za periodične robne pogoje moramo razcepiti matriko $h_{1,2}^{(2)}$ na Kroneckerjev produkt matrik dimenzije 2×2 , saj moramo za periodične robne pogoje dobiti člen oblike ' $B \otimes \mathbb{1}_4 \otimes A$ ', pri čemer smo predpostavili, da je $h_{1,2}^{(2)} = A \otimes B$.

Razcep naredimo nekako takole: opazimo, da sta diagonalna bloka v matriki $h_{1,2}^{(2)}$ enaka σ^z in $-\sigma^z$, izvendiagonalna bloka pa sta $2\sigma^+$ in $2\sigma^-$, tj. bločno

$$h_{1,2}^{(2)} = \begin{bmatrix} \sigma^z & 2\sigma^- \\ 2\sigma^+ & -\sigma^z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma^z & 0 \\ 0 & -\sigma^z \end{bmatrix} + 2 \begin{bmatrix} 0 & \sigma^- \\ \sigma^+ & 0 \end{bmatrix}.$$

Takoj opazimo, da je prva matrika enaka $\sigma^z \otimes \sigma^z$. Drugo matriko pa moramo razcepiti še naprej:

$$\sigma^\pm = \frac{1}{2}(\sigma^x \pm i\sigma^y),$$

$$2 \begin{bmatrix} 0 & \sigma^- \\ \sigma^+ & 0 \end{bmatrix} = 2 \cdot \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & \sigma^x - i\sigma^y \\ \sigma^x + i\sigma^y & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & \sigma^x \\ \sigma^x & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & -i\sigma^y \\ i\sigma^y & 0 \end{bmatrix} = \sigma^x \otimes \sigma^x + \sigma^y \otimes \sigma^y.$$

Torej velja

$$h_{1,2}^{(2)} = \sum_{\lambda \in \{x,y,z\}} \sigma^\lambda \otimes \sigma^\lambda$$

Za prejšnji zgled, ko smo imeli verigo dolžine 4, bi torej potrebovali še člen $h_{4,1}^{(4)}$. Tega lahko sedaj zapišemo kot

$$h_{4,1}^{(4)} = \sigma^x \otimes \mathbb{1}_4 \otimes \sigma^x + \sigma^y \otimes \mathbb{1}_4 \otimes \sigma^y + \sigma^z \otimes \mathbb{1}_4 \otimes \sigma^z$$

Za verigo dolžine $n = 2m$ je to

$$h_{n,1}^{(n)} \equiv \sum_{\lambda \in \{x,y,z\}} \sigma^\lambda \otimes \mathbb{1}_{4^{m-1}} \otimes \sigma^\lambda \quad (2)$$

Hamiltonian s periodičnimi robnimi pogoji, $\tilde{H}^{(n)}$, je torej enak tistemu iz enačbe (1), le da mu prištejemo popravek (2)

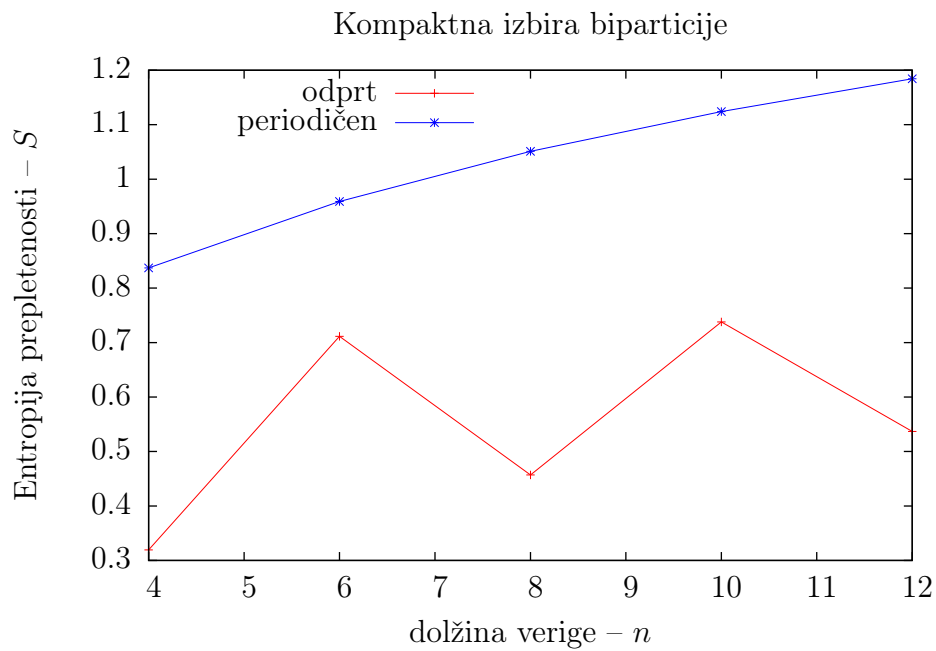
$$\tilde{H}^{(n)} \equiv H^{(n)} + h_{n,1}^{(n)} \quad (3)$$

1.2 Rezultati

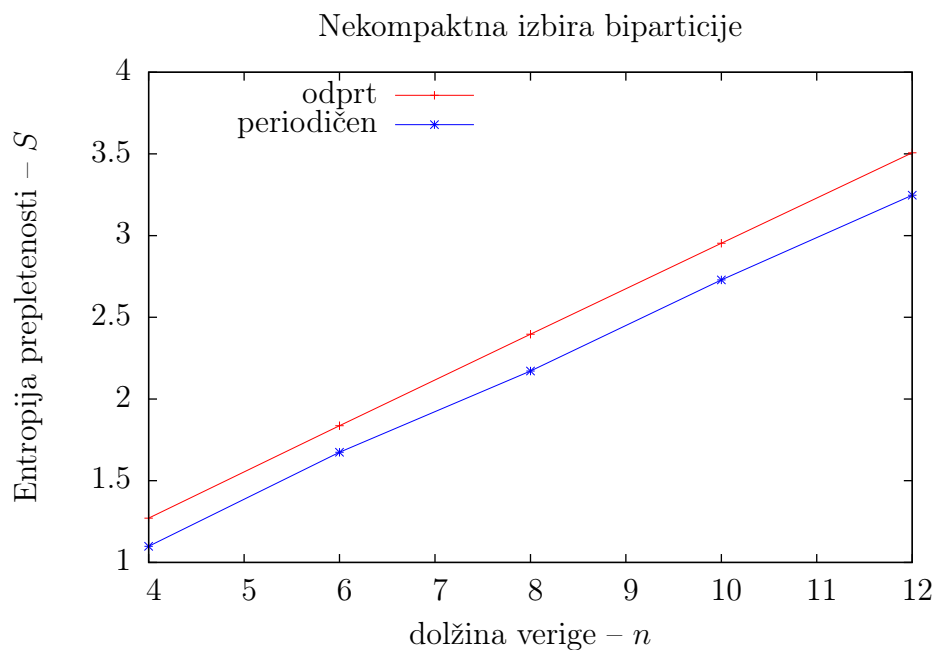
Schmidtov algoritem sem preveril z matrično-produktnimi nastavki, ki so mi preverjeno delovali (tj. ustrezno množene matrike $\mathbf{A}_{s_n}^{(n)}$ so mi dale nazaj prave koeficiente).

1.2.1 Schmidtov algoritem

Najprej bom predstavil rezultate, dobljene iz Heisenbergovega hamiltoniana, ki sem ga omenil v prejšnjem poglavju. Grafa na sl. 1 in 2 prikazujeta entropijo za simetrično bipartitijo v odvisnosti od dolžine verige.

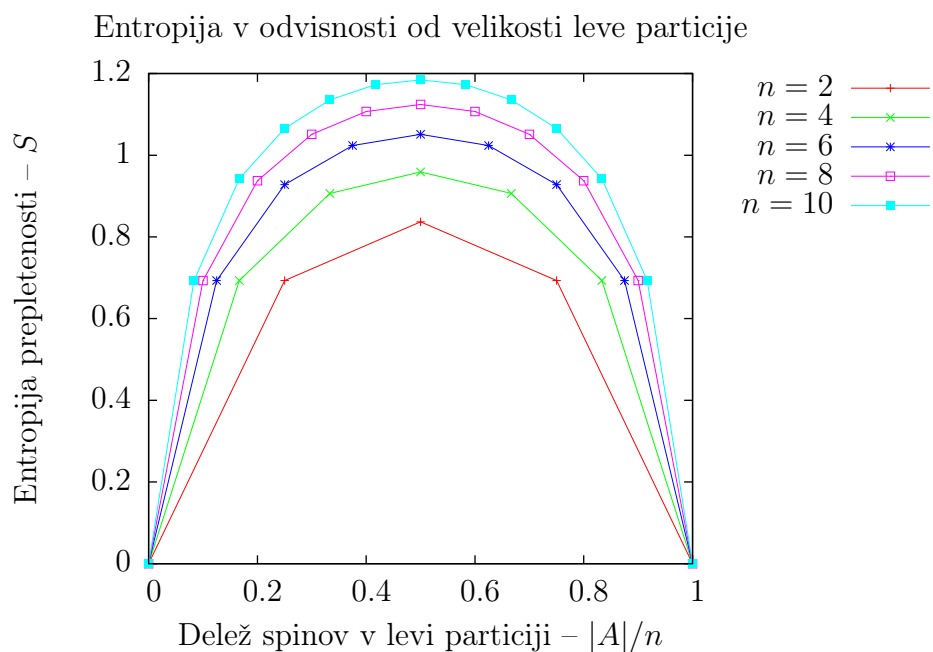


Slika 1: Kompaktna izbira počasi v povprečju premo narašča z dolžino verige. Vidimo, da je za periodične robne pogoje entropija večja.



Slika 2: Naraščanje je sedaj bolj linearno kot prej. Vidimo, da imata premici isti naklon, razlikujeta se zgolj za aditivno konstanto.

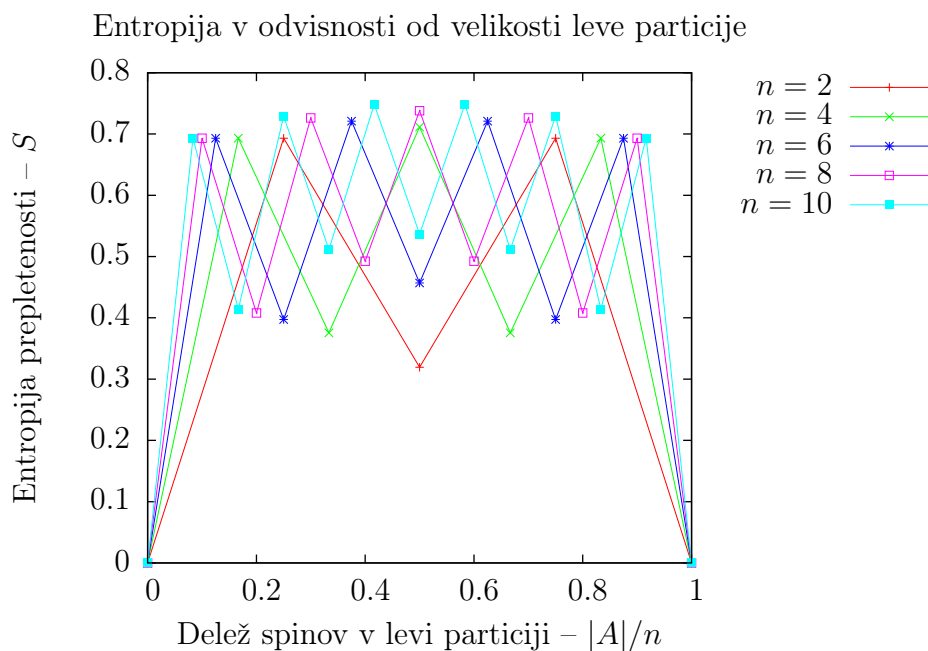
Poglejmo si tudi kako se graf spreminja v odvisnosti od razmerja particij v bipartitiji za periodičen in neperiodičen hamiltonian.



Slika 3: Za periodični problem graf spominja na parabolo, simetrično okrog $|A|/n = 1/2$. Vidimo, da je tam entropija največja. V resnici to ni parabola, saj je vrh preveč zaobljen.

Še ena zanimivost je ta, (na grafu se ne vidi), da je za vse dolžine verige vrednost

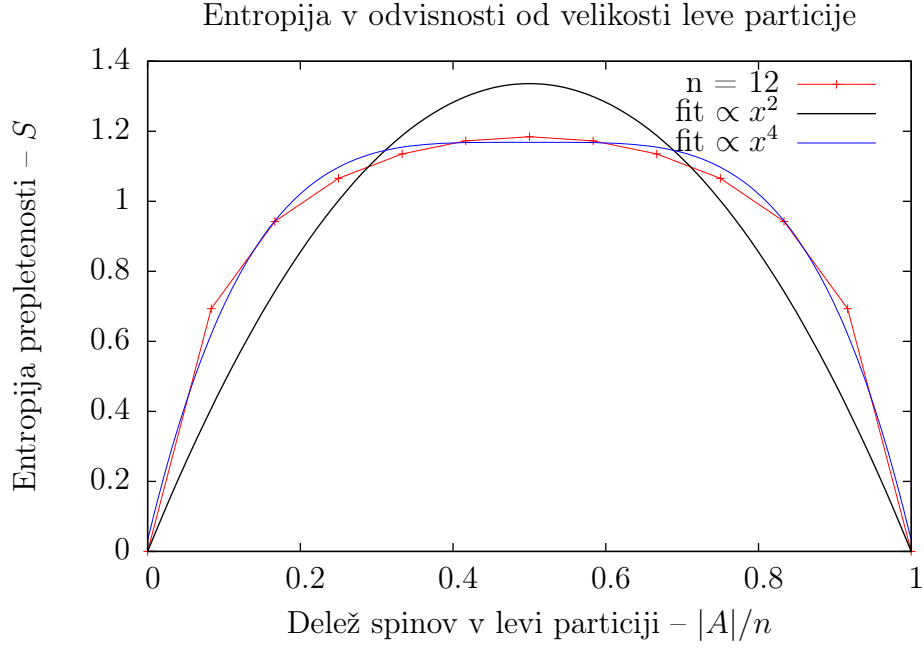
entropije na robovih (tj. za izbiro bipartitije, ko je $|A| = 1$ oz. $|A| = n - 1$, maksimalna možna. V tem primeru je to $S = \ln 2 \approx 0.69315$.



Slika 4: Tudi v tem primeru dobimo v povprečju parabolo – dobimo dve paraboli. Lahko si mislimo, da imamo „lihe“ in „sode“ bipartitije. Vse sode ležijo na eni paraboli, vse lihe pa na drugi.

Dokaz, da tisto res niso kvadratne parabole sem naredil tako, da sem fital na verigo dolžine 12. Za limitne primere na robovih, tj. $|A|/n \in \{0, 1\}$ sem res lahko vzel 0, kar potrjuje tudi algoritem.

Ce je tisti izraz parabola, mora biti cela družina oblike $f(x; \alpha) = \alpha x(x - 1)$, kjer je $x = |A|/n$. Ugibamo, da je kvadratna potenca premajhna in poizkusimo tudi s kvartičnim nastavkom, $g(x; \alpha, \beta) = -\alpha(x - 1/2)^4 + \beta$. Ta se res bolj obnese.



Slika 5: Vidimo, da odvisnost od razmerja velikosti particij ni kvadratna, je pa verjetno kvartična.

1.2.2 Matrično produktni nastavki

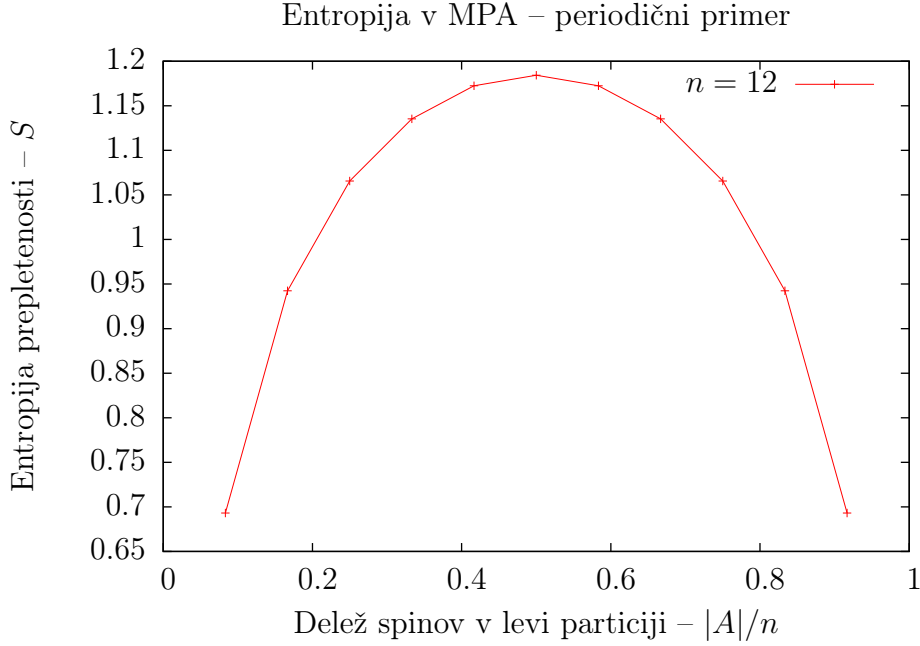
Naše stanje $|\psi\rangle$ predstavimo s stolpcem

$$|\psi\rangle = \sum_{s_1, \dots, s_n \in \{\uparrow, \downarrow\}} C_{s_1, s_2, \dots, s_n} |s_1, \dots, s_n\rangle$$

kjer je $C_{s_1, \dots, s_n} = \langle s_1, s_2, \dots, s_n | \psi \rangle = C_{\underline{s}}$. Vsak koeficient $C_{\underline{s}}$ lahko predstavimo kot produkt matrik $\mathbf{A}_{s_j}^{(j)}$. Npr. koeficient $C_{\uparrow\downarrow\downarrow}$ zapišemo kot

$$C_{\uparrow\downarrow\downarrow} = \mathbf{A}_{\uparrow}^{(1)} \mathbf{A}_{\downarrow}^{(2)} \mathbf{A}_{\downarrow}^{(3)} \mathbf{A}_{\downarrow}^{(4)}$$

Prav tako, morajo biti diagonalne matrike $\lambda^{(j)}$ enake Schmidtovim koeficientom za razcep $j = |A|$. To se izkaže, da je res: entropija prepletenosti mora biti enaka. Za periodični hamiltonian dobimo namreč iste kvartične parabole, kar vidimo na grafu 6.



Slika 6: Dobimo isto kvartično parabolo, kot v prejšnjem primeru, vendar ne moremo definirati skrajnih robnih točk, tj. $|A| = 0$ in $|A| = n$, kar je sicer v redu, saj brez biparticije ni entropije prepletenosti.

Ker mora teorija delovati tudi za kompleksen primer, sem naredil isto za naključno izbran normiran vektor. Njegove komponente so naključno izbrana Gaussovo porazdeljena števila s težiščem v ničli. Preverjal sem, ali dobim res pravi vektor nazaj z rekonstrukcijo in ali dimenzija vektorja vpliva na natančnost. To sem delal tako, da sem meril kot med vhodnim in izhodnim vektorjem – α in razliko njunih norm ΔN . Ugotovil sem, da je napaka neodvisna od dimenzije vektorja in da je $\alpha \sim 10^{-8}$ in $\Delta N \sim 10^{-16}$. Torej je metoda zelo natančna.

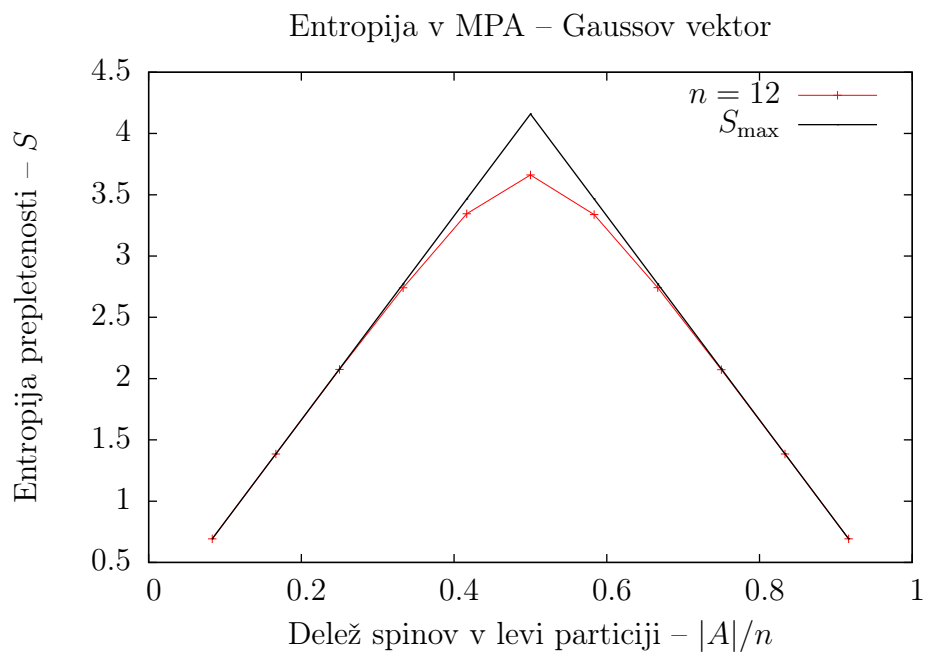
Graf 7 prikazuje kakšne entropije nam vrne Gaussov naključni vektor za različne izbire biparticije. Ker je stanje popolnoma naključno izbrano, pričakujemo, da bo stopnja nereda višja – blizu maksimalne entropije prepletenosti. Graf 7 zato prikazuje tudi maksimalno entropijo. Dolžina verige je $n = 12$.

Schmidtovi rangi za spinsko verigo dolžine n so

$$M_j^{(n)} = 2^{n/2} 2^{-|j-n/2|}.$$

Zgornja meja entropije prepletenosti je potem

$$S_{j,\max}^{(n)} = \ln M_j^{(n)} = \left(\frac{n}{2} - \left| j - \frac{n}{2} \right| \right) \ln 2.$$



Slika 7: Opazimo lahko, da je naključno izbrano stanje bolj prepleteno, kot osnovno stanje. Na robovih grafa je entropija maksimalna, potem pa proti simetrijskemu središču čedalje bolj odstopa. Oblika krivulje spominja na Bezierovo krivuljo.

Verjetno so vse krivulje, kar smo jih dobili v resnici Bezierove, le da so nekatere bolj zglajene pri vrhu, druge pa ne.