
4. naloga: Kvantni mnogodelčni problemi - kubitne verige

POROČILO PRI PREDMETU VIŠJE RAČUNSKE METODE

2024/25

Avtor:

Rok MLINAR VAHTAR
28242004

21. marec 2025

1 UVOD

V tej nalogi bomo numerično reševali problem enodimenzionalne spinske verige, ki predstavlja enega izmed enostavnejših mnogodelčnih problemov, a je uporaben, saj lahko na njem razvijemo numerične metode, ki delujejo tudi splošno.

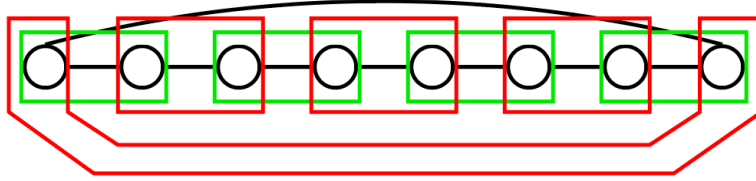
2 METODE

Naš glavni cilj bo iz vrednotenje členov oblike $e^{zA}|\psi\rangle$, kjer je z skalar z majhno absolutno vrednostjo, A pa nek operator. V splošnem so te operatorji lahko poljubni, ampak za nas bodo pobembni spinski operatorji oz. Paulijeve matrike σ_x , σ_y in σ_z , saj nas bo zanimal hamiltonian oblike

$$H = \sum_{i=0}^{n-1} (J_x \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + J_y \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y + J_z \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z) + J_x \sigma_n^x \sigma_0^x + J_y \sigma_n^y \sigma_0^y + J_z \sigma_n^z \sigma_0^z,$$

ki predstavlja 1D Heisenbergov XYZ model z periodičnimi robnimi pogoji.

Naš prvi korak je to, da razstavimo hamiltonian na sode in lihe člene, saj te komutirajo med sabo.



Slika 1: Sodi in lihi členi spinske verige

Ker se tako rdeči in zeleni členi ne prekrivajo, aplikacija enega izmed teh členov ne bo spremenila rezultata aplikacije drugega, drugače rečeno komutirajo. To pomeni da lahko hamiltonian razdelimo na dva dela, znotraj katerih velja enostavna formula $e^{A+B} = e^A e^B$. Trotter-Suzukijev razcep moramo zato uporabiti le, ko delimo eksponent hamiltoniana na sodi in lihi del, ta dela pa razpadeta na člene oblike

$$e^{J_x \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + J_y \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y + J_z \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z} = \mathbb{1}^{\otimes i} \otimes e^{U_{12}} \otimes \mathbb{1}^{\otimes (n-i-2)}$$

$$U_{12} = \begin{bmatrix} J_z & 0 & 0 & J_x - J_y \\ 0 & -J_z & J_x + J_y & 0 \\ 0 & J_x + J_y & -J_z & 0 \\ J_x - J_y & 0 & 0 & J_z \end{bmatrix}$$

$$e^{zU_{12}} = \begin{bmatrix} e^{zJ_z} \cosh(z(J_x - J_y)) & 0 & 0 & e^{zJ_z} \sinh(z(J_x - J_y)) \\ 0 & e^{-zJ_z} \cosh(z(J_x + J_y)) & e^{-zJ_z} \sinh(z(J_x + J_y)) & 0 \\ 0 & e^{-zJ_z} \sinh(z(J_x + J_y)) & e^{-zJ_z} \cosh(z(J_x + J_y)) & 0 \\ e^{zJ_z} \sinh(z(J_x - J_y)) & 0 & 0 & e^{zJ_z} \cosh(z(J_x - J_y)) \end{bmatrix}$$

če stanje $|\psi\rangle$ zapišemo v lastni bazi σ^z urejeni po binarnem zapisu. To pomeni, da stanje predstavimo kot serijo stanj spin gor = 1/dol = 0 $|d_1 d_2 \dots d_n\rangle$, ki jih uredimo tako, da N -to stanje v bazi predstavlja binarni zapis števila $N = b_1 b_2 \dots b_n$.

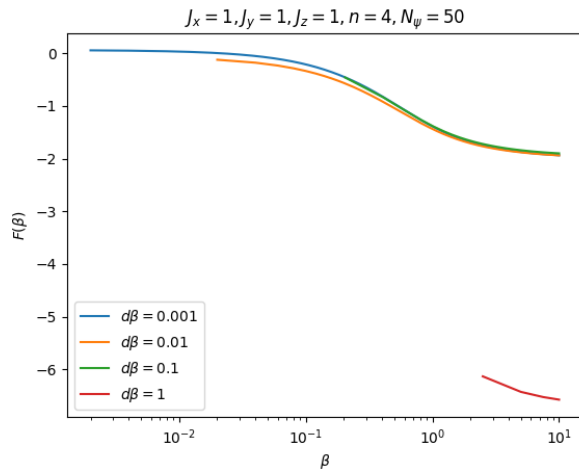
3 PROSTA ENERGIJA

Zdaj ko vemo, kako iz vrednotiti časovni razvoj stanja kot $e^{-iHt}|\psi\rangle$, lahko študiramo različne lastnosti spisknih verig. Prva od teh je prosta energija $F(\beta) = -\frac{1}{\beta}Z(\beta)$. Particijsko funkcijo $Z(\beta)$ lahko izrazimo kot

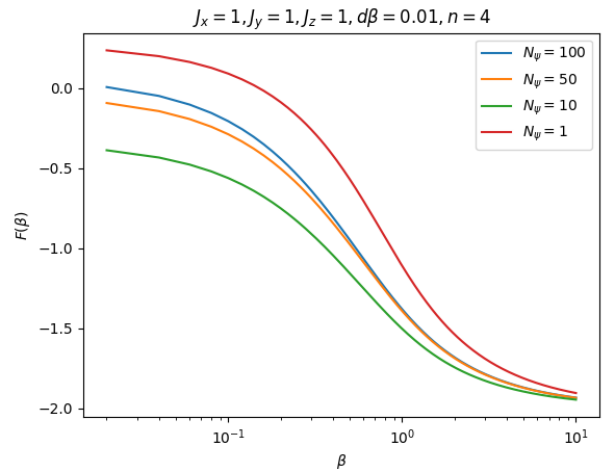
$$Z(\beta) = \text{tr}(e^{-\beta H}) = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^N \langle j | e^{-\frac{\beta}{2}H} e^{-\frac{\beta}{2}H} | j \rangle = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^N \|e^{-\frac{\beta}{2}H} | j \rangle\|^2 \approx \frac{1}{N_\psi} \sum_{r=0}^{N_\psi} \|e^{-\frac{\beta}{2}H} |\psi_r\rangle\|^2,$$

kjer smo v zadnjem koraku uporabili približek tipičnega stanja, kar pomeni, da namesto sledi čez vsa stanja opravimo sled čez le nekaj naključnih stanj, žrebanih iz gaussovske porazdelitve.

Preden pa se lotimo dejanskih izračunov bi bilo dobro vedeti, kako velik korak $d\beta$, število N_ψ in kateri Suzuki-Trotterjev razvoj moramo vzeti za zadovoljivo natančnost.

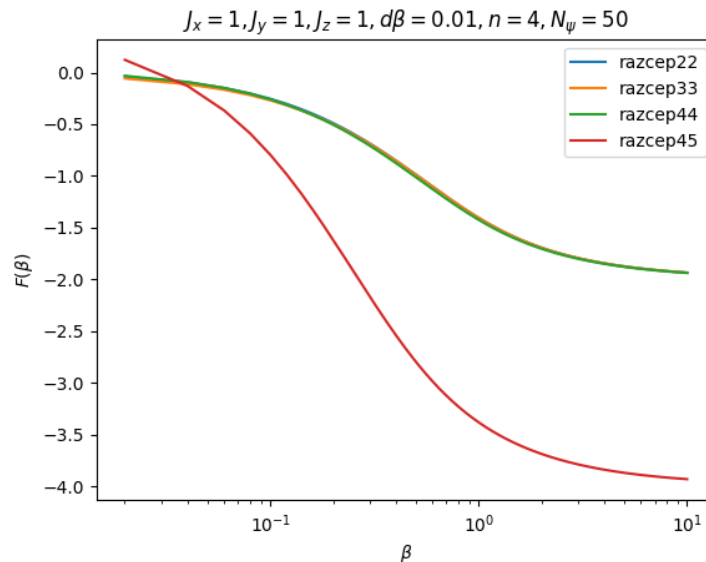


Slika 2: $F(\beta)$ pri različnih izbirah koraka db



Slika 3: $F(\beta)$ pri različnih izbirah N_ψ

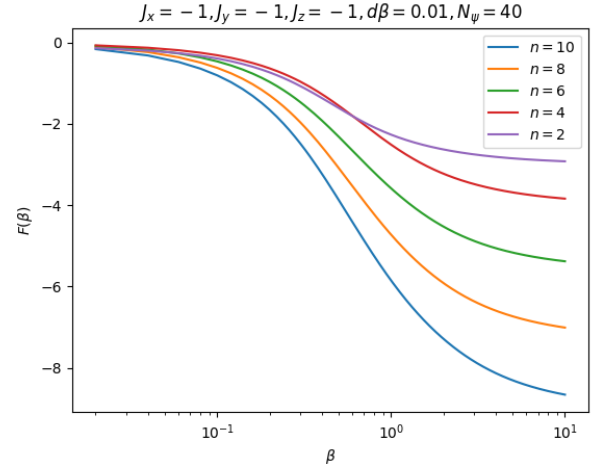
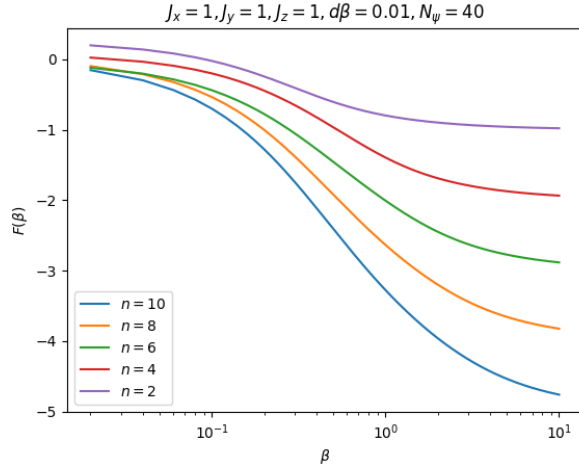
Vidimo lahko, da db med 0.1 in 0.01 popolnoma zadošča za naše potrebe in da $N_\psi = 50$ da zadovoljivo natančnost pri večjih β a ima še kar veliko napako pri majhnih. Tu sem moral žrtvovati natančnost, saj bi uporaba recimo $N_\psi = 1000$ vzela sploh pri večjih n ogromno časa.



Slika 4: $F(\beta)$ pri različnih izbirah Trotter-Suzuki razcepa

Vidimo, da nam vsi razcepi razen razcepa45 dajo praktično isto rešitev. Ker iz izkušenj iz prejšnje naloge vemo, da sta bila kompleksna razcepa nestabilna, bom napako pripisal temu. V nadaljnje sem uporabil razcep22 ($p = 2, k = 2$).

Če se zdaj osredotočimo še na fiziko, lahko narišemo graf $F(\beta)$ pri različnih dolžinah verige n .



Slika 5: $F(\beta)$ pri različnih n in $J_x = J_y = J_z = 1$ Slika 6: $F(\beta)$ pri različnih n in $J_x = J_y = J_z = -1$

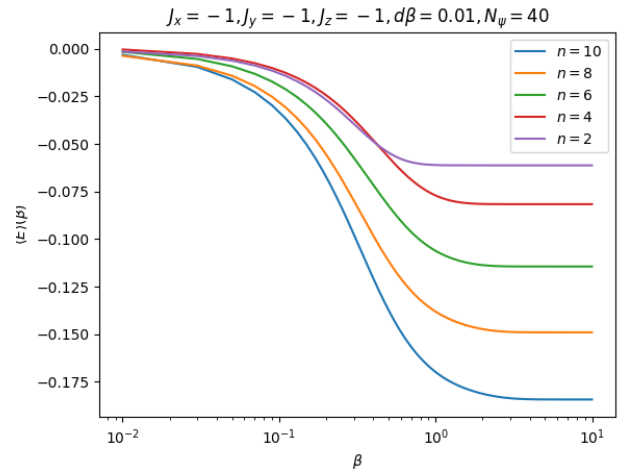
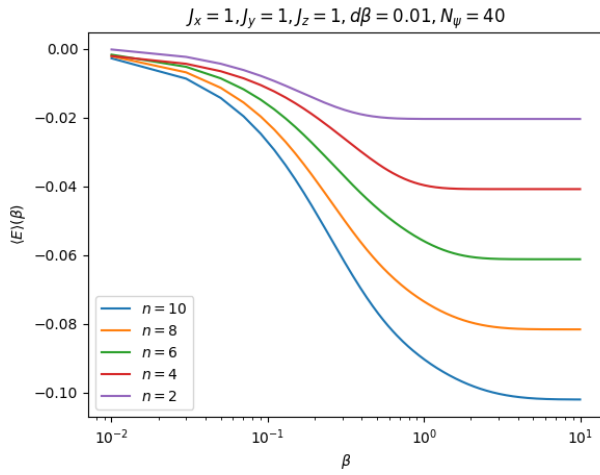
Vidimo da v splošnem prosta energija doseže maksimum pri neskončni temperaturi ($\beta = 0$), ki je skoraj enak za različne n , minimum pa pri temperaturi 0K ($\beta \rightarrow \infty$), kjer pa je za različne n različna. Enakomerne razlike med $F(\infty)$ nam povejo, da vsak dodaten spin doda enak dodatek proste energije k verigi. Iz oblike pri končnih n lahko sklepamo tudi na termodinamsko limito ko je $n \rightarrow \infty$. Takrat bi razlika med $F(0)$ in $F(\infty)$ postala zelo velika in bi zato dobili oster prehod med dvema fazama.

4 POVPREČNA ENERGIJA

Podobno kot z particijsko funkcijo, lahko tudi termodinamsko povprečje zapišemo kot vsoto čez N_ψ stanj

$$\langle H \rangle_\beta \approx \frac{1}{N_\psi Z(\beta)} \sum_{r=0}^{N_\psi} \langle \varphi_r | \theta_r \rangle$$

$$|\varphi_r\rangle = e^{-\frac{\beta}{2}H} |\psi_r\rangle \quad |\theta_r\rangle = H |\varphi_r\rangle$$



Slika 7: $\langle E \rangle(\beta)$ pri različnih n in $J_x = J_y = J_z = 1$ Slika 8: $\langle E \rangle(\beta)$ pri različnih n in $J_x = J_y = J_z = -1$

Tudi pri povprečni energiji vidimo zelo podoben vzorec kot pri prosti energiji.

5 KORELACIJSKE FUNKCIJE

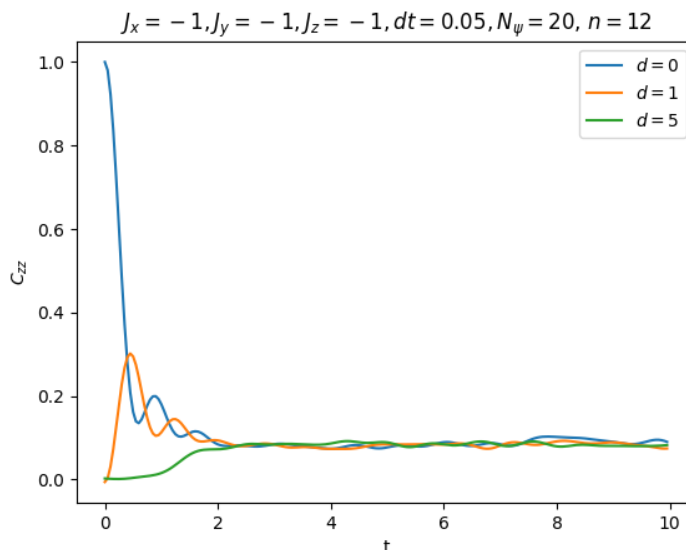
Veliko lastnosti kvantnih večelčnih sistemov, kot na primer difuzije in drugi transportni pojavi, je tesni zvezi z korelacijskimi funkcijami. Te so definirane kot

$$C_{XY} = \langle X(t), Y(0) \rangle \approx \frac{1}{N_\psi} \sum_{r=1}^{N_\psi} \langle \psi_r | e^{iHt} X e^{-iHt} Y | \psi_r \rangle,$$

kjer sta X in Y poljubna operatorja. Nas pa bo zanimala specifično korelacijska funkcija z-projekcije spina

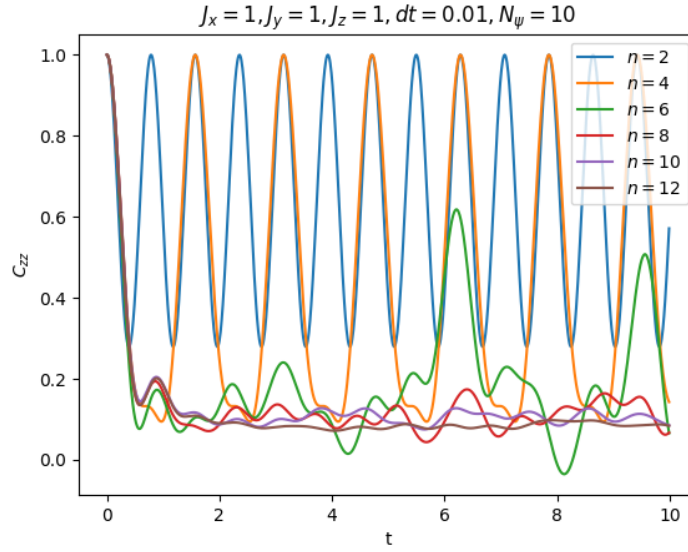
$$C_{zz} \approx \frac{1}{N_\psi} \sum_{r=1}^{N_\psi} \langle \psi_r | e^{iHt} \sigma_0^z e^{-iHt} \sigma_d^z | \psi_r \rangle,$$

kjer sta operatorja za d mest oddaljena operatorja spina.



Slika 9: Korelacije C_{zz} pri različnih razmikih

Na grafu vidimo, da se autokorelacija seveda začne pri 1, ostale pa pri nič in da je nato eksponentno dušena, dokler niso vsi spini enako korelirani drug z drugim. Zanimivo je, da vrednost ne pade na nič. Vidimo pa tudi to, da je proces tudi oscilatoren. To pomeni, da se čez spine širi val, ki po nekem času zaradi periodični robnih pogojev pride nazaj na začetno mesto.



Slika 10: Autokorelacije C_{zz} pri različnih dolžinah verig

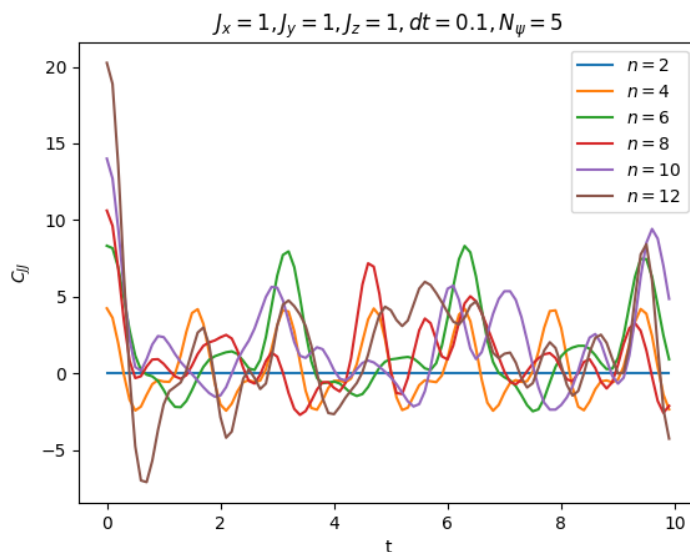
Če se osredotočimo samo na autokorelacije vidimo, da je pri tem zelo opazen vpliv prekratke verige. Za $n = 2$ in $n = 4$ sodel praktično le niha z konstantno frekvenco, ki je pri $n = 4$ le pol manjša, pri višjih n pa začne korelacija padati, kot bi pričakovali. Vseeno pa ni videti, da bi končna vrednost močno padala z n , tako da ima korelacija vsaj na prvi pogled končno vrednost pri $t \rightarrow \infty$.

6 AUTOKORELACIJE TOKA

Kot zadnje nas bo zanimala še autokorelacija spinskega toka $\langle J(t)J(0) \rangle$,

$$J = \sum_{j=0}^n \sigma_j^x \sigma_{j+1}^y - \sigma_j^y \sigma_{j+1}^x.$$

Če pogledamo njeno vrednost pri zaličnih n ,

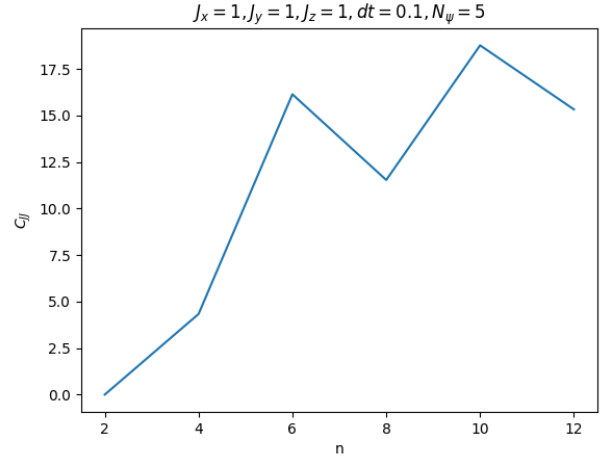
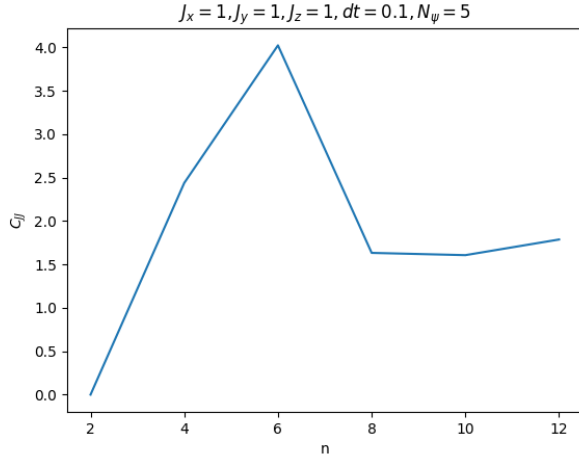


Slika 11: Autokorelacije C_{JJ} pri različnih dolžinah verig

Vidimo, da je rezultat funkcija, ki hitro pade na 0, potem pa okrog nične niha. Edina izjema je primer $n = 2$, kjer je korelacija konstantno 0. Zdaj iz izračunane korelacije lahko določimo še difuzijsko konstanto.

$$D = \frac{1}{n} \int_0^\infty C_{JJ}(t) dt \approx \frac{1}{n} \int_0^{100} C_{JJ}(t) dt$$

Tu sem uporabil formulo, ki jo je zapisal profesor na predavanjih in ne $D = \int_0^\infty C_{JJ}(t) dt$, ki je v navodilih, saj mi je slednja dala nesmiselne rezultate.



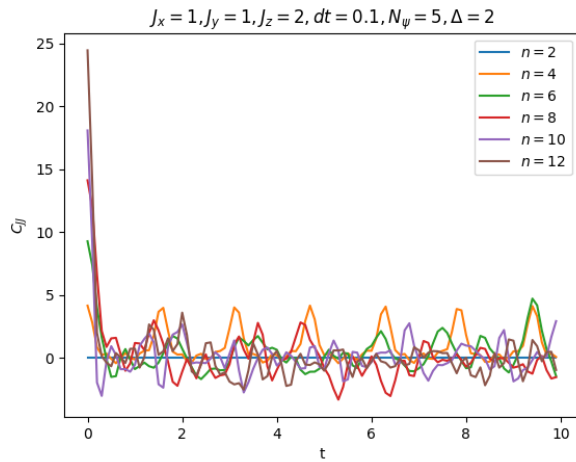
Slika 12: Difuzijska konstanta po profesorjevi formuli Slika 13: Difuzijska konstanta po formuli iz navodil

Vidimo, da prva formula hitro konvergira k vrednosti $D = 2$, medtem ko druga divergira.

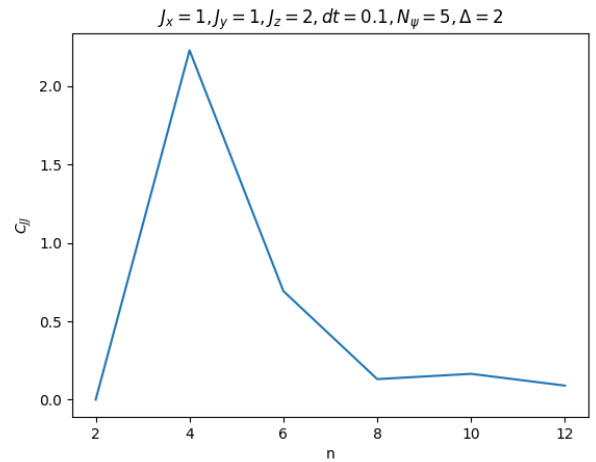
Podobno lahko raziščemo tudi model

$$H = \sum_{j=0}^n \left(2\sigma_j^+ \sigma_{j+1}^- + 2\sigma_j^- \sigma_{j+1}^+ + \Delta \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z \right) = \sum_{j=0}^n \left(\sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y + \Delta \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z \right).$$

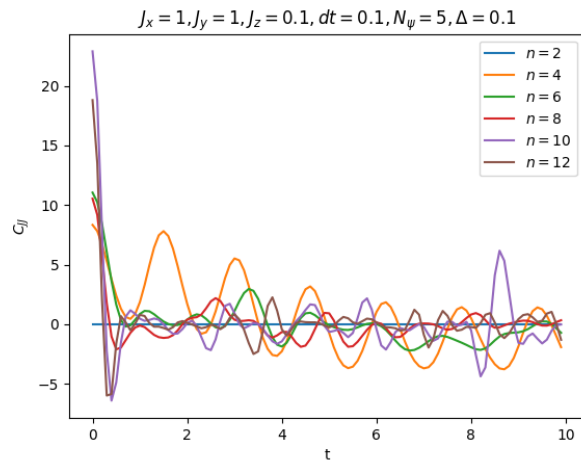
V naših formulah moramo zato nastaviti $J_x = J_y = 1$ in $J_z = \Delta$.



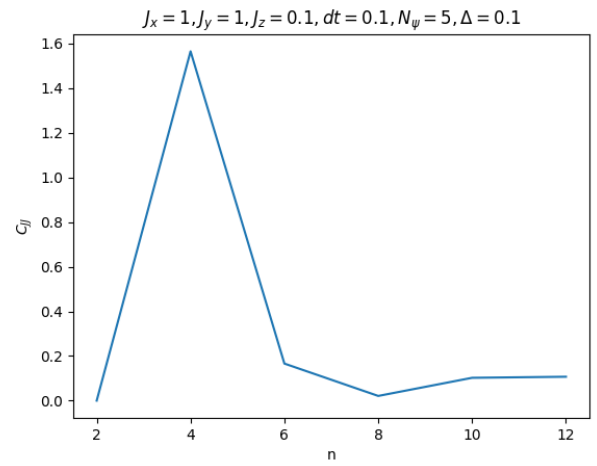
Slika 14: Autokorelacija C_{JJ} pri $\Delta = 2$



Slika 15: Difuzijska konstanta po profesorjevi formuli



Slika 16: Autokorelacija C_{JJ} pri $\Delta = 0.1$

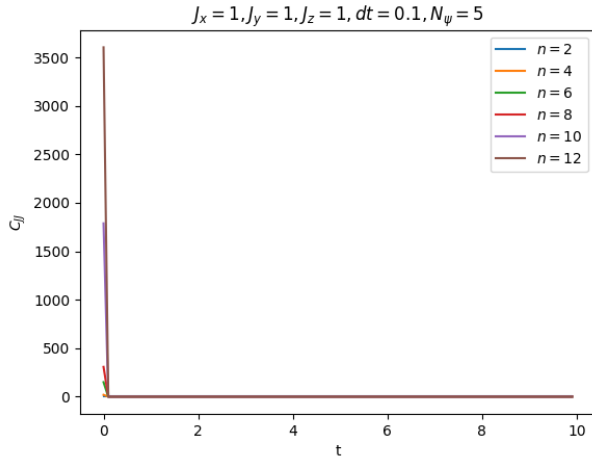


Slika 17: Difuzijska konstanta po profesorjevi formuli

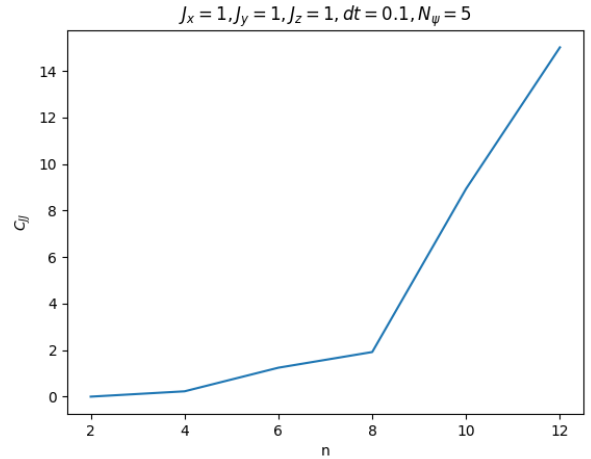
Vidimo lahko, da obe konstanti konvergirata k vrednosti okrog $D = 0.1$

7 DIFUZIJSKE KONSTANTE PRI KONČNI TEMPERATURI

En pristop, za izračun količin pri končni temperaturi je to, da namesto popolnoma naključnih stanj ψ_r žrebamo stanja glede na energijo. To storimo tak, da najprej generiramo naključno gaussovsko stanje kot prej, potem pa izračunamo njegovo energijo E . Nato iz eksponentne porazdelitve $e^{-E/T}$ žrebamo številko. Če je ta manjša od 1 stanje sprejmemo, sicer pa ga zavržemo. Tako računamo sled, obteženo z Boltzmanovim faktorjem.



Slika 18: Autokorelacija C_{JJ} pri $T = 1$



Slika 19: Difuzijska konstanta po profesorjevi formuli

Metoda kot vidimo ne deluje, kar pripisujem nizkemu številu N_ψ . Izbira višjega, ki bi boljše otipal prostor niskoenergijskih stanj pa bi vzela več časa, kot ga imam na voljo.

8 ZAKLJUČEK

Ta naloga je bila spet večinoma sestavljena iz kratkih obdobij pisanja kode in dolgimi obdobji čakanja, da se koda izvede in da izvem, da je kaj šlo hudo narobe. Glavni problem je tu predstavljala binarna baza stanj, ki je problem ravno dovolj zakomplicirala, da je v kodi vedno ostala kakšna napaka.