

**Національна академія наук України
Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова**

Раков Михайло Володимирович

УДК 537.611, 519.637

**ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ
КВАНТОВИХ БАГАТОЧАСТИНКОВИХ СИСТЕМ
З ВИКОРИСТАННЯМ ТЕНЗОРНИХ МЕРЕЖ**

01.04.02 – теоретична фізика

Автореферат
дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Київ – 2017

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана в Київському національному університеті імені Тараса Шевченка.

Науковий керівник – доктор фізико-математичних наук

Доценко Іван Сергійович,

Київський національний університет

імені Тараса Шевченка,

професор кафедри квантової теорії поля,

фізичний факультет.

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук, професор,

член-кореспондент НАН України

Іванов Борис Олексійович,

Інститут магнетизму НАН України та МОН України,

завідувач лабораторії магнітних матеріалів;

доктор фізико-математичних наук,

старший науковий співробітник

Крячко Євген Сергійович,

Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова

НАН України, провідний науковий співробітник відділу теорії

нелінійних процесів в конденсованих середовищах.

Захист відбудеться « 1 » лютого 20 18 р. об 12³⁰ годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 26.191.01 Інституту теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова Національної Академії Наук України за адресою: вул. Метрологічна 14-б, м. Київ, 03143, Україна.

З дисертацією можна ознайомитись у науковій бібліотеці Інституту теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова Національної Академії Наук України за адресою: вул. Метрологічна 14-б, м. Київ, 03143, Україна.

Автореферат розісланий « 27 » грудня 20 17 р.

Вчений секретар

спеціалізованої вченої ради Д 26.191.01,

доктор фіз.-мат. наук

В. Є. Кузьмичев

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Моделі квантових багаточастинкових систем широко використовуються в фізиці твердого тіла. Вони з високою точністю відображають поведінку реальних систем на нано-, мікро- і мезорівні, як-от: квантові одно- і двовимірні магніти, високотемпературні надпровідники, об'єкти з топологічним порядком, ультрахолодні атомні гази (в тому числі Бозе-конденсати) тощо. Виявляється, що навіть прості і навіть одновимірні квантові моделі мають нетривіальні властивості. Тому моделювання поведінки квантових одновимірних багаточастинкових систем є важливою та актуальною задачею.

Віднедавня з'явилась можливість з високою точністю створювати різні квантові моделі з заданими параметрами на оптичних ґратках. Підбираючи експериментальні умови, зокрема, глибину потенціальних ям ґратки, можливо локалізувати частинки в потенціальних ямах, утворюючи так звані ізолятори Мотта. Таким чином можна добитись того, що поведінка системи визначатиметься взаємодією між магнітними моментами частинок, які, в свою чергу, визначаються спінами частинок. Такі одновимірні системи називають спіновими, і саме на них зосереджується увага в даній роботі.

Власні стани спінових систем характеризуються наявністю певних спін-спінових кореляцій. Їхня інтенсивність визначається контрольними параметрами моделі, що змінюються експериментально. Кожен спін-спіновий корелятор є ненульовим у визначеному діапазоні значень контрольних параметрів. Відповідні діапазони значень контрольних параметрів визначають межі квантових фаз, дослідження яких стало важливою задачею фізики твердого тіла. Зокрема, в даній роботі досліджується фазова структура білінійно-біквдратної моделі Гайзенберга зі спіном 1 за наявності квадратичного ефекту Зеємана. При цьому існують квантові фази, характерні корелятори яких є нелокальними. Такі фази зручніше аналізувати в термінах квантової заплутаності. На разі актуальною задачею є поведінка мір заплутаності в точках фазових переходів.

Для більшості гамільтоніанів, які описують поведінку одновимірних квантових систем, рівняння Шр'юдінгера не розв'язується аналітично: ні точно, ні наближено за допомогою теорії збурень (через відсутність малого параметра). Тому для розрахунків доводиться застосовувати чисельні методи. Для систем з понад 20 частинок точна діагоналізація матриці гамільтоніана технічно нездійсненна, тому застосовують варіаційні методи. В роботі пропонується розглядати системи в геометрії кільця, а не ланцюга (що розглядається зазвичай). Це забезпечує трансляційну інваріантність та можливість екстраполяції характеристик систем помірного розміру (приблизно 50 частинок) до термодинамічної границі.

Стандартний варіаційний метод з використанням часткового випадку тензорної мережі – матричнодобуткових станів (МДС) з періодичними крайовими умовами (ПКУ) – є технічно досить неефективним. Тому актуальним є вдосконалення цього методу, що й було зроблено в даній роботі. Шляхом відтворення вже відомих результатів з високою точністю було доведено спроможність вдосконаленого методу.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Результати, що увійшли в дисертаційну роботу, були отримані на кафедрі квантової теорії поля фізичного факультету Київського національного університету імені Тараса Шевченка в рамках теми №16БФ051-05 “Дослідження фундаментальних проблем фізики ядра, елементарних частинок та космофізики”, номер державної реєстрації в УкрІНТЕІ – 0106U006394. Науковий керівник – д.ф.-м.н., проф. Каденко Ігор Миколайович.

Метою і задачею дослідження є вивчення властивостей власних (основного та низки збуджених) станів одновимірних квантових систем в XXZ моделі частинок зі спіном $\frac{1}{2}$ та білінійно-біквдратній моделі Гайзенберга (ББГ) зі спіном 1 за наявності квадратичного ефекту Зеемана. Для досягнення цієї мети було поставлено наступні завдання:

1. Розробити швидкісні чисельні методи для розрахунку характеристик одновимірних систем в геометрії кільця. Перевірити здатність цих методів адекватно описувати властивості одновимірних систем у великій кількості випадків.
2. Отримати значення одно- і двочастинкових мір запутаності для власних станів квантової системи в XXZ моделі частинок зі спіном $\frac{1}{2}$ з різними значеннями проекції спіну в феромагнітній фазі (де неможливо провести розрахунки за допомогою Бете-анзацу). Прослідкувати залежність мір запутаності від параметра анізотропії Δ .
3. Отримати значення енергій чотирьох або п'яти найнижчих мультиплетів ББГ моделі зі спіном 1 за відсутності квадратичного ефекту Зеемана у всіх фазах, окрім феромагнітної. Шляхом екстраполяції значень щілини між найнижчими мультиплетами до термодинамічної границі перевірити відсутність щілини між найнижчим синглетом і найнижчим квінтетом поблизу SU(3)-симетричної точки $\theta = -3\pi/4$.
4. Отримати значення енергій трьох найнижчих мультиплетів ББГ моделі зі спіном 1 за відсутності білінійного члена взаємодії (при $\theta = -\pi/2$) в усьому діапазоні значень параметра анізотропії D . Шляхом екстраполяції значень щілини між найнижчими мультиплетами до термодинамічної границі перевірити відсутність щілини між двома найнижчими синглетами та найнижчим синглетом і найнижчим квінтетом.

Об'єктами дослідження є дві одновимірні квантові моделі: XXZ модель частинок зі спіном $\frac{1}{2}$ та ББГ модель частинок зі спіном 1 (без та за наявності квадратичного ефекту Зеемана). Перша з цих моделей описує поведінку одновимірних магнітних кристалів на основі перехідних металів, друга – поведінку одновимірних ультрахолодних газів лужних металів.

Предметом дослідження є структура запутаності збуджених станів XXZ моделі зі спіном $\frac{1}{2}$ у феромагнітній фазі та межі димерної фази в ББГ моделі зі спіном 1.

Методи дослідження. Важливою частиною роботи є розробка та тестування швидкості й точності методів дослідження квантових систем в геометрії кільця. Представлено три вдосконалення вже наявного методу Верстрате-Порраса-Сірака для матричнодобутоквих станів (МДС) з періодичними крайовими умовами (ПКУ).

Два вдосконалення використовують симетрії гамільтоніанів, які досліджуються в роботі (відповідно $U(1)$ та $SU(2)$ симетрію). Третє з них використовує швидке спадання сингулярних чисел довгих добутоків трансферних матриць, що виникають в процесі розрахунків.

Наукова новизна одержаних результатів.

В дисертаційній роботі отримано наступні результати:

1. Отримано межі димерної щільної фази в ББГ моделі зі спіном 1 в точці $\theta = -\pi/2$: $D^- < D < D^0$, $D^- \approx -0.3$, $D^0 \approx 0.025$. При $D < D^-$ лінія $\theta = -\pi/2$ розмежовує критичну фазу та фазу Нееля (димеризація при цьому залишається ненульовою).
2. Доведено, що димерна фаза в ББГ моделі зі спіном 1 за відсутності квадратичного ефекту Зеемана простягається від значення контрольного параметра $\theta/\pi = -1/4$ до щонайменше $\theta/\pi = -0.72$. Здобувач схильний заперечити існування окремої фази в околі $SU(3)$ -симетричної точки $\theta/\pi = -3/4$.
3. Неперервні симетрії $U(1)$ та $SU(2)$ були введені в тензорну мережу матричнодобуткових станів (МДС) з періодичними крайовими умовами (ПКУ). Було продемонстровано, що розроблений варіаційний метод є стабільним і забезпечує високу точність розрахунків.
4. Продемонстровано здатність такої міри заплутаності, як заплутаність на один зв'язок, з високою точністю визначати положення критичних точок. Це робить її корисною для якісного аналізу властивостей дво- і тривимірних систем, так як дозволяє уникнути розрахунку спостережуваних величин.
5. Показано, що одно- і двочастинкові міри заплутаності, розраховані для власних станів XXZ моделі зі спіном $1/2$ в феромагнітній фазі, не є ефективними величинами для опису властивостей системи в даній фазі.
6. Показано, що швидке спадання сингулярних чисел довгих добутоків трансферних матриць в методі для МДС не є універсальним. Швидкість спадання залежить від кореляційної довжини в системі та частково є зумовленою наявністю симетрії у гамільтоніана системи.

Практичне значення одержаних результатів. Отримані теоретичні результати розкривають раніше не вивчені властивості XXZ моделі зі спіном $1/2$ та ББГ моделі зі спіном 1 без та за присутності квадратичного ефекту Зеемана. Вони можуть слугувати як теоретичне підґрунтя для майбутніх експериментів на системах, що описуються заданими моделями, а також демонструють складність властивостей заплутаності навіть простих моделей. Розроблені в роботі чисельні методи підходять для опису властивостей широкого класу раніше не досліджених одновимірних квантових систем.

Особистий внесок здобувача. Результати, що виносяться на захист, отримані здобувачем самостійно. До дисертації включені лише ті результати з робіт, опублікованих у співавторстві, що належать автору. Самостійно отримано наступні результати:

У роботі [1] дисертант розробив алгоритм пришвидшеного розрахунку власних станів систем з великої кількості частинок та перевіряв його універсальність.

У роботі [2] здобувач визначив характеристики заплутаності XXZ моделі в феромагнітній фазі. З цією метою в роботі був розроблений алгоритм для

використання $U(1)$ симетричних МДС як варіаційних станів в системах з геометрією кільця.

У роботі [3] дисертант отримав уже відомим методом ПБЗЕЧ (англ. “TEBD”) графіки залежності заплутаності на один зв'язок від контрольних параметрів в одновимірних моделях XY та XXZ та підтвердив здатність цієї величини з високою точністю визначати положення критичних точок.

У роботі [4] дисертант дослідив найнижчий спектр білінійно-біквдратної моделі Гайзенберга частинок зі спіном 1 і показав відсутність нематичної фази в моделі. З цією метою в роботі був розроблений алгоритм для використання $SU(2)$ симетричних МДС як варіаційних станів в системах з геометрією кільця.

У роботі [5] дисертант отримав розробленими в попередніх роботах методами найнижчий спектр біквдратної моделі Гайзенберга зі спіном 1 за наявності квадратичного ефекту Зеємана та визначив межі димерної фази.

Апробація результатів дисертації. Матеріали дисертації пройшли апробацію на семінарах відділів синергетики та нелінійної фізики конденсованого стану ІТФ НАН України (Київ, 2012–2017) та на наступних конференціях: 38th та 42nd Middle European Cooperation in Statistical Physics (відповідно 25–27.03.2013, Трієст, Італія, та 8–10.02.2017, Ліон, Франція); “Numerical and analytical methods for strongly correlated systems” (24.08–13.09.2014, Бенаске, Іспанія); 79th Annual Meeting of the DFG (15–20.03.2015, Берлін, Німеччина).

Публікації. За матеріалами дисертації опубліковано 8 робіт, 5 із них складають статті в наукових журналах [1, 2, 3, 4, 5], а 3 – у працях конференцій [6, 7, 8].

Структура дисертаційної роботи. Дисертаційна робота складається зі вступу, 3 розділів, висновків, додатка та списку використаних джерел, що містить 157 найменувань. Робота написана на 182 сторінках машинописного тексту, містить 34 рисунки і 14 таблиць.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ

У *вступі* до дисертації обґрунтовується актуальність теми дисертаційної роботи, сформульовані мета та задачі дослідження, вказані наукова та практична цінність отриманих результатів, визначений особистий внесок здобувача, вказані апробація результатів роботи та розкрита структура дисертації.

Актуальність теми роботи висвітлена в декількох аспектах. По-перше, пояснюється необхідність дослідження спінових одновимірних квантових моделей в геометрії кільця. По-друге, обґрунтовується необхідність вдосконалення варіаційного чисельного методу ренормгрупи матриці густини (РГМГ) з використанням матричнодобуткових станів (МДС) з періодичними крайовими умовами (ПКУ). Згідно з теоремою Мерміна-Вагнера будь-який власний стан одновимірного гамільтоніана має ту саму неперервну симетрію, що й гамільтоніан (приміром, $U(1)$ чи $SU(2)$), за будь-якої абсолютної температури.

По-третє, стисло аналізуються вже наявні результати щодо фазової структури та властивостей заплутаності двох квантових моделей, які досліджуються в даній роботі (див. PRB 55, 3336(R) (1997), PRL 80 2709 (1998)): XXZ моделі частинок зі спіном $\frac{1}{2}$ та білінійно-біквдратної Гайзенбергової (ББГ) моделі частинок зі спіном 1 за наявності однойонної анізотропії (квадратичного ефекту Зеємана)

$$H_{\text{XXZ}} = \sum_i (s_i^x \otimes s_{i+1}^x + s_i^y \otimes s_{i+1}^y + \Delta s_i^z \otimes s_{i+1}^z) \quad (1)$$

$$H_{\text{ББГ}} = \sum_i [(\vec{s}_i \otimes \vec{s}_{i+1}) \cos \theta + (\vec{s}_i \otimes \vec{s}_{i+1})^2 \sin \theta] + D \sum_i (s_i^z)^2 \quad (2)$$

Виділяються проблеми, які ще не були розв'язані: структура заплутаності XXZ моделі в феромагнітній фазі (при $\Delta < -1$) та межі димерної фази в ББГ моделі (в околі точки $\theta = -3\pi/4$ при $D = 0$ та в точці $\theta = -\pi/2$). В перших двох випадках задача не була розв'язана через технічну неспроможність, а в третьому випадку результати розрахунків двох наукових груп дуже відрізняються між собою.

У *першому розділі* зроблено огляд базового чисельного методу, що використовується та вдосконалюється в роботі. Здобувач вважає це необхідним, оскільки подібного повного і послідовного огляду немає в жодному з наявних джерел. Пояснюється представлення варіаційних станів у формі МДС, а гамільтоніанів – у формі матричнодобуткових операторів (МДО):

$$|\psi\rangle = \sum_{\vec{\sigma}} \text{Tr}(M^{[1],\sigma_1} M^{[2],\sigma_2} \dots M^{[N],\sigma_N}) |\vec{\sigma}\rangle, \quad (3)$$

$$H = \sum_{\vec{\sigma}, \vec{\sigma}'} \text{Tr}(W^{[1],\sigma_1,\sigma_1'} W^{[2],\sigma_2,\sigma_2'} \dots W^{[N],\sigma_N,\sigma_N'}) |\vec{\sigma}\rangle \langle \vec{\sigma}'|. \quad (4)$$

Тут $|\vec{\sigma}\rangle = |\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_N\rangle$ – базисні стани системи частинок. Наводяться приклади МДО для конкретних гамільтоніанів. З рівняння Шрьодінгера та умови почергового варіювання параметрів, що відповідають кожному спіну i , виводиться узагальнена задача на власні значення:

$$H_{\text{eff}}^{[i]} v^{[i]} = \varepsilon N_{\text{eff}}^{[i]} v^{[i]} \quad (5)$$

(вектор $v^{[i]}$ містить елементи тензорів $M^{[ij]}$) та отримуються формули для відповідних матриць $H_{\text{eff}}^{[i]}$ та $N_{\text{eff}}^{[i]}$. Описується спосіб розрахунку збуджених станів. Після визначення тензора МДС з рівняння (5) його перекалібровують, використовуючи допоміжну матрицю $Q^{L/R} = \sum_i M^{[i],s_i,\dagger} M^{[i],s_i} , \sum_i M^{[i],s_i} M^{[i],s_i,\dagger}$.

Вводиться поняття трансферних матриць. Показано, як матриці $H_{\text{eff}}^{[i]}$ та $N_{\text{eff}}^{[i]}$ отримуються з так званих «блоків» – добутків трансферних матриць зліва та справа від поточного спіну i . Вводиться операція корегування – множення «блока» на одну трансферну матрицю. Демонструється, що ключовою величиною, яка визначає ефективність розрахунків, є розмір m матриць МДС.

Пояснюється механізм виникнення секторів симетрії в віртуальних розмірностях МДС ($a_i = \{m_i, t_i\}$ та $a_i = \{j_i, t_i, m_i\}$ відповідно) за наявності у гамільтоніана системи $U(1)$ та $SU(2)$ симетрії. Це є основою для введення зазначених симетрій у використований чисельний метод (див. другий розділ).

У *другому розділі* описана розробка вдосконалених чисельних методів на базі методу МДС з періодичними крайовими умовами. Розділ поділений на три підрозділи, кожен з яких відповідає конкретному типу вдосконалення.

В *першому підрозділі* розробляється пришвидшений метод розрахунку характеристик одновимірних систем зі 100 і більше частинок. Добутки великої кількості трансферних матриць замінюються на їхній скорочений розклад за сингулярними числами (РзСЧ). Обґрунтовується необхідність перейти від

стандартної для РГМГ оптимізації параметрів вперед-назад до оптимізації лише в одному напрямку (по колу), а також розбиття системи на три сегменти і розрахунок відповідних добутків для подальшого корегування на необхідну кількість трансферних матриць (для уникнення обрахунку обернених матриць).

Описуються способи пришвидшеного розрахунку скороченого РзСЧ та корегування «блоків», а також обчислення матриць для задачі на власні значення. Спосіб швидкого розрахунку добутків матриць всередині сегментів виноситься в додаток. Спростовується гіпотеза Піппана, Вайта та Евертца про те, що кількість сингулярних чисел, які мають бути збережені, не залежить від розміру МДС m . Натомість показано, що вона зростає приблизно прямо пропорційно m , що визначає порядок кількості необхідних елементарних операцій, а саме: $O(m^4)$.

Доведено можливість використання описаного принципу для розрахунку спостережуваного значення квадрату гамільтоніана (який дозволяє визначити, наскільки розрахований власний стан є близьким до реального). Такий самий принцип можна буде використати для U(1)-симетричного МДС.

В *другому підрозділі* розробляється спосіб утворення U(1)-симетричного власного стану у формі МДС для періодичних крайових умов. У випадку спінової системи цей стан має чітко визначену проекцію спіну S_z .

Зазвичай для довільної тензорної мережі послуговуються наступним способом. Згідно з теоремою Вігнера-Екарта, кожен локальний тензор МДС набуває блочної діагональної форми:

$$M_{(m_{i-1}, t_{i-1}), (m_i, t_i)}^{[i], s_i} = \mathcal{M}_{(m_{i-1}, t_{i-1}), (m_i, t_i)}^{[i]} \delta_{m_{i-1}, m_i + s_i} \quad (6)$$

Утворений стан має проекцію спіну $S_z = 0$. При $S_z \neq 0$ до системи додається додатковий незваємодіючий спін з визначеною проекцією спіну $s_i = -S_z$ (тоді утворена система разом з додатковим спіном матиме загальну проекцію спіну 0 за умови $\sum_{i=1}^N s_i = S_z$). Для багатьох значень S_z застосування цього методу для ПКУ є незручним через швидке зростання необхідного для розрахунків розміру МДС.

U(1) симетрія є абелевою, тому в роботі пропонується розділити проекцію додаткового спіну $-S_z$ на найменш можливі цілі або напівцілі порції x_i (за умови $\sum_{i=1}^N x_i = S_z$), які прилучаються до відповідної кількості спінів:

$$M_{(m_{i-1}, t_{i-1}), (m_i, t_i)}^{[i], s_i} = \mathcal{M}_{(m_{i-1}, t_{i-1}), (m_i, t_i)}^{[i]} \delta_{m_{i-1} + x_i, m_i + s_i} \quad (7)$$

Це дозволяє описати за допомогою МДС резонного розміру ($m \leq 60$) і розрахувати на практиці навіть стан з великою заплутаністю. Запропонований спосіб демонструється на системах частинок з найпоширенішими значеннями спіну ($1/2$ та 1), але він працює для будь-якого напівцілого/цілого значення спіну.

Описаний в першому розділі алгоритм визначення варіаційних параметрів модифікується для U(1)-симетричного МДС з ПКУ наступним чином. Матриця Q набуває блочного діагонального вигляду відносно квантових чисел, що дозволяє перекалібрувати МДС поблоково. З утворених стандартним чином матриць $H_{\text{eff}}^{[i]}$ та $N_{\text{eff}}^{[i]}$ необхідно виключити рядки та стовпчики, що відповідають нульовим елементам МДС. Для алгоритму з U(1) симетрією можна використовувати ті самі МДО, що й для алгоритмів без симетрій.

В *третьому підрозділі* розробляється спосіб утворення SU(2)-симетричного власного стану у формі МДС для періодичних крайових умов. У випадку спінової системи цей стан має чітко визначений повний спін S .

Спосіб, який використовується для довільної тензорної мережі, базується на теоремі Вігнера-Екарта. У випадку SU(2) симетрії всі локальні тензори отримуються з так званих зведених тензорів та набору $3j$ -символів:

$$M_{(j_{i-1}, t_{i-1}, m_{i-1}), (j_i, t_i, m_i)}^{[i], (s_1 s_i)} = \mathcal{M}_{(j_{i-1}, t_{i-1}), (j_i, t_i)}^{[i]} C_{m_{i-1}, s_i, m_i}^{j_{i-1}, s, j_i} \quad (8)$$

Зведені матриці є набагато меншими за розміром (зазвичай у 5–7 разів), ніж «повні» (незведені). У випадку SU(2) симетрії неможливо розділити «додатковий спін» S на декілька частин, оскільки дана симетрія не є абелевою.

В роботі виводяться формули для алгоритму визначення варіаційних параметрів SU(2)-симетричного МДС з ПКУ, які є досить нетривіальними.

Матриця Q набуває досить специфічного блочного діагонального вигляду відносно квантових чисел j : $Q = \bigoplus_j Q_j \otimes 1^{(2j+1) \otimes (2j+1)}$. Таким чином, перекалібрується лише зведений тензор МДС (що логічно, адже принципова структура МДС не повинна змінюватись) з використанням матриці $Q' = \bigoplus_j Q_j$.

Зазнає змін узагальнена задача на власні значення. Для її утворення використовується наступний факт: всі тензори, що виникають в алгоритмі як результат множення SU(2)-симетричних тензорів МДС та МДО, самі є SU(2)-симетричними. Тому в роботі пропонується використання тільки зведених тензорів в алгоритмі, а суми специфічних добутоків $3j$ -символів, які виникають в процесі, дорівнюватимуть стандартним символам ($6j$ -, $9j$ - і т.д.) та їхнім добуткам.

Описується спосіб отримання зведених тензорів для 4-вимірних тензорів МДО та наводиться конкретний вигляд зведеного МДО для ББГ моделі зі спіном 1 без квадратичного ефекту Зеемана.

В роботі наводяться рекурсивні формули отримання зведеного тензора «блока» після корегування зі зведеного тензора «блока» до корегування. В формулу входять зведені МДС та МДО і специфічний добуток $6j$ - та $9j$ -символа:

$$\begin{bmatrix} j_{11} & j_{12} & j_{13} \\ j_{21} & j_{22} & j_{23} \\ j_{31} & j_{32} & j_{33} \\ j_{41} & j_{42} & j_{43} \end{bmatrix} = (-1)^{j_{21}+j_{22}+j_{42}+j_{43}} \begin{Bmatrix} j_{11} & j_{12} & j_{13} \\ j_{41} & j_{22} & j_{43} \\ j_{31} & j_{32} & j_{33} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_{21} & j_{22} & j_{23} \\ j_{43} & j_{42} & j_{41} \end{Bmatrix}. \quad (9)$$

Наприклад, формула для «блока», утвореного з усіх спінів зліва від поточного спіну i , має вигляд:

$$\begin{aligned} (\mathcal{B}_L^{[i+1], j_{e_1}, j_{e_2}, j_{e_3}})_{(b_N, a_N, a'_N), (b_i, a_i, a'_i)} &= (2j_{e_2} + 1) \sum_{\substack{j_e, j_{e_2} \\ \gamma_{i-1}^W, \gamma_{i-1}, \gamma'_i}} \begin{bmatrix} j'_i & S_i & j'_{i-1} \\ j_i^W & j_e & j_{i-1}^W \\ j_i & S_i & j_{i-1} \\ j_{e_2} & j_{e_3} & j_{e_2} \end{bmatrix} \times \\ &\times (\mathcal{B}_L^{[i], j_{e_1}, j_{e_2}, j_{e_3}})_{(b_N, a_N, a'_N), (b_{i-1}, a_{i-1}, a'_{i-1})} \sqrt{2S_i + 1} \mathcal{W}_{\gamma_{i-1}^W, \gamma_i^W}^{[i], j_e} \alpha_{\gamma_{i-1}, \gamma_i}^{[i]*} \beta_{\gamma'_{i-1}, \gamma'_i}^{[i]}. \end{aligned} \quad (10)$$

Отримується також зведений тензор одиничного «блока».

Матриці $H_{\text{eff}}^{[i]}$ та $N_{\text{eff}}^{[i]}$ отримуються зі зведених «блоків», зведеного МДО та такого самого добутоків $6j$ - та $9j$ -символа:

$$\begin{aligned}
(\mathcal{O}_{\text{eff}}^{[i]})_{[\gamma_i \gamma_{i-1}], [\gamma'_i \gamma'_{i-1}]} = & \sum_{\substack{j_e, j_{e_1}, j_{e_2}, j_{e_3}, j_{e'_1} \\ \gamma_{i-1}^W, \gamma_i^W, \gamma_N^W, \gamma_N, \gamma'_N}} \frac{\sqrt{2S_i + 1}}{(2j_{e_1} + 1)(2j_{e_3} + 1)} \begin{bmatrix} j'_i & S_i & j'_{i-1} \\ j_i^W & j_e & j_{i-1}^W \\ j_i & S_i & j_{i-1} \\ j_{e_1} & j_{e_3} & j_{e_2} \end{bmatrix} \mathcal{W}_{\gamma_{i-1}^W, \gamma_i^W}^{[i], j_e} \times \\
& \times (\mathcal{B}_R^{[i], j_{e'_1}, j_{e_1}, j_{e_3}})_{(\gamma_i^W, \gamma_i, \gamma'_i), [\gamma_N^W, \gamma_N, \gamma'_N]} (\mathcal{B}_L^{[i], j_{e_1}, j_{e_2}, j_{e_3}})_{[\gamma_N^W, \gamma_N, \gamma'_N], (\gamma_{i-1}^W, \gamma_{i-1}, \gamma'_{i-1})}.
\end{aligned} \tag{11}$$

Описується також модифікована процедура розрахунку збуджених станів.

Отримується формула для розрахунку спостережуваної величини $SU(2)$ -інваріантного оператора шляхом використання тільки зведених тензорів. Наостанок описується спосіб отримання зведеного МДО квадрату гамільтоніана.

У *третьому розділі* здійснені розрахунки фізичних характеристик двох квантових моделей: XXZ моделі зі спіном $\frac{1}{2}$ та білінійно-біквдратної Гайзенбергової (ББГ) моделі зі спіном 1. Для XXZ моделі це структура заплутаності в феромагнітній фазі (де неможливо провести розрахунки за допомогою Бете-анзацу), а для ББГ моделі – межі димерної фази (зокрема, наявність п'ятої фази в фазовій діаграмі моделі за відсутності анізотропії, яка досі не підтверджена та не спростована чисельними розрахунками інших авторів).

У *першому підрозділі* проводиться оцінка ресурсів, необхідних для розрахунків. Ключових факторів є три:

1) розмір МДС m . Він оцінюється з мір заплутаності, які характеризують заплутаність короткої дії – негативності (для ББГ моделі) та заплутаності на один зв'язок (для XXZ моделі);

2) мінімальні кількості сингулярних чисел p та p' , які забезпечують реалізацію алгоритму по колу (не в алгоритмі з $SU(2)$ симетрією). Для кожного фіксованого m емпірично знаходять такі мінімальні значення p та p' , при яких результат для енергії є стабільним (що одночасно означає збіжність алгоритму);

3) критерій зупинки ітерацій. Кількість ітерацій N_u обирається динамічно з умови, що значення енергії змінюється за один прохід (цілої системи або її сегмента) не більше ніж на 10^{-7} від своєї абсолютної величини.

Для XXZ моделі найбільший розмір МДС потрібен в феромагнітній фазі та ХУ-фазі, а для ББГ моделі – в димерній фазі та обох критичних фазах.

При використанні симетрій розподіл розміру МДС за секторами симетрії є неочевидним і визначається почасти інтуїтивно. Для певності проводять кілька розрахунків для одного й того ж стану і пересвідчуються в незмінності результату. МДС містить багато секторів симетрії, зокрема, в феромагнітній фазі XXZ моделі та в димерній фазі ББГ моделі поблизу ліній фазових переходів (в тому числі поблизу точки $\theta = -3\pi/4$), що зумовлено великою кореляційною довжиною в системі. Як висновок, найбільші розрахункові ресурси необхідні саме в тих областях контрольних параметрів, які досліджуються в даній роботі.

В *другому і третьому підрозділах* спочатку проводиться перевірка здатності розроблених чисельних методів описувати властивості зазначених квантових моделей з потрібною точністю. Для цього розраховуються вже відомі значення енергій та інших спостережуваних величин зазначених моделей, і оскільки похибка розрахунків є малою, спроможність розроблених методів підтверджується.

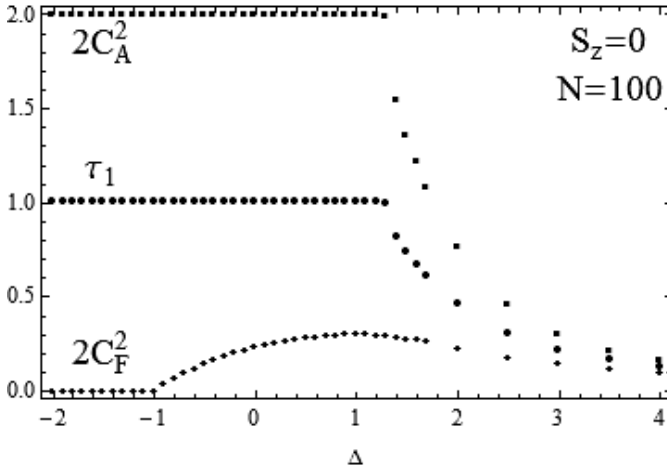


Рис. 1. Аналіз моногамності запутаності в XXZ моделі зі спіном $\frac{1}{2}$ для 100 частинок і стану з $S_z = 0$ залежно від параметра Δ . На рисунку показані ОТ та подвоєні квадрати узгоджень формування та асистування. Зокрема, запутаність між найближчими сусідами відсутня у феромагнітній фазі, з чого випливає, що прості міри запутаності не відображають структури запутаності системи в цій фазі

Для XXZ моделі зі спіном $\frac{1}{2}$ при $\Delta > -1$ розраховуються значення енергії, чергової намагніченості $\bar{m}_z = \frac{1}{2} \langle s_z^i - s_z^{i+1} \rangle$ та z - z корелятора $Z = \langle s_z^i \otimes s_z^{i+1} \rangle$, які можна отримати за допомогою Бете-анзацу. Вказані значення для 100 спінів співпадають зі значеннями, розрахованими нашими методами, з точністю порядку 10^{-4} . Для ББГ моделі зі спіном 1 при $D = 0$ розраховуються значення енергії в точках $\theta/\pi = -3/4, -1/2, -1/4, 0, 1/4, 1/2$ та АКЛТ-точці $\theta = \arctg 1/3$ (точність розрахунків коливається за порядком величини від 10^{-3} до 10^{-8}). Для ББГ моделі розраховується також рядковий корелятор при $-\pi/4 < \theta < \pi/4$ та димерний корелятор при $-3\pi/4 < \theta < -\pi/4$. Отримані значення добре узгоджуються з результатами, отриманими іншими авторами.

Для XXZ моделі зі спіном $\frac{1}{2}$ для 100 частинок були визначені всі вищезазначені спінові корелятори для різних значень Δ (розглядалися тільки основні стани для кожного S_z). З одно- і двочастинкової зведених матриць густини були розраховані міри запутаності τ_1 (one-tangle (ОТ) – запутаність між одним спіном і рештою системи), C_F (узгодження формування – запутаність між найближчими сусідами), C_A (узгодження асистування – максимальна двочастинкова запутаність, яка може бути отримана шляхом проведення вимірювань над рештою системи). Графіки їхньої залежності від параметра Δ для стану з $S_z = 0$ показані для прикладу на рис. 1.

Отримано значення чергової намагніченості $\bar{m}_z = 0$ для будь-якого власного стану при $\Delta < -1$. Через це τ_1 не залежить від Δ : $\tau_1 = 1 - (2S_z/N)^2$. Корелятор Z має значення в межах $0.23 < Z \leq 1/4$ для всіх станів, що розраховувались в феромагнітній фазі для системи зі 100 спінів. Через це C_A слабо залежить від Δ (для всіх розрахованих станів воно змінювалось менш ніж на 10% від $\Delta = -2$ до $\Delta = -1.5$). При $\Delta < -1$ узгодження формування $C_F \neq 0$ тільки для першого збудженого стану, що має проекцію спіну $S_z = \frac{N}{2} - 1$ (для цього стану $C_F \approx \frac{2}{N}$). Отже, τ_1 , C_F та C_A не підходять для опису властивостей XXZ моделі в феромагнітній фазі.

Для ББГ моделі зі спіном 1 при $D = 0$ було визначено структуру спектра найнижчих мультиплетів в діапазоні значень $-3\pi/4 < \theta < \pi/2$. Зокрема, при $\pi/4 < \theta < \pi/2$ система має основний стан у вигляді двократно виродженого триплету та перший збуджений стан у вигляді квінтета (рис. 2), щілина між якими зникає в термодинамічній границі (цей факт не був відомий раніше). При $-3\pi/4 < \theta < -\pi/4$

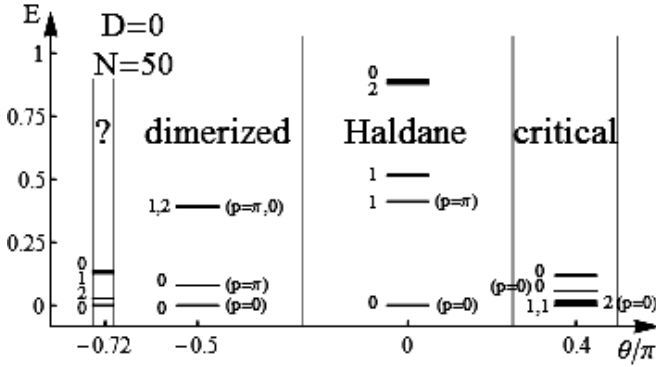


Рис. 2. Найнижчі стани білінійно-біквдратної моделі Гайзенберга зі спіном 1 при $D = 0$ для 50 частинок в інтервалі $-3\pi/4 < \theta < \pi/2$. В критичній фазі найнижчі збуджені стани вказані вибірково (основний стан є двократно виродженим триплетом). Перший збуджений синглет знаходиться суттєво нижче для великих систем ($N > 100$) в околі точки $\theta = -3\pi/4$

найнижчі стани системи є синглетами з різними квазіімпульсами (0 та π), які стають виродженими для нескінченної системи (що й спричиняє порушення трансляційної симетрії в системі та її димеризацію).

Структура спектра, що спостерігається в околі SU(3)-симетричної точки $\theta = -3\pi/4$ навіть для порівняно великої системи (50 спінів), дуже змінюється при збільшенні розміру системи до 100 і більше спінів. Тому присутність іншої фази в цій області можна визначити шляхом розрахунку значень щілин між найнижчими мультиплетами для різних розмірів системи та їхньої екстраполяції до $N \rightarrow \infty$: Δ_{00}^∞ та Δ_{02}^∞ . Сучасні теоретичні уявлення та наявні чисельні розрахунки сходяться на тому, що $\Delta_{00}^\infty = 0$ (тобто система є димеризованою) в усьому інтервалі $-3\pi/4 < \theta < -\pi/4$. Однак чисельні розрахунки донині не могли принципово визначити, чи $\Delta_{02}^\infty = 0$ в області $-3\pi/4 < \theta < -0.7\pi$ (точно відомо, що $\Delta_{02}^\infty > 0$ при $\theta > -0.7\pi$).

В даній роботі для аналізу обрана точка $\theta = -0.72\pi$, що є досить близькою до точки фазового переходу $\theta = -3\pi/4$, але ще не вимагає занадто великих розрахункових ресурсів (кореляційна довжина в системі зростає при $\theta \rightarrow -3\pi/4$).

Скінченнорозмірний аналіз підтверджує закриття щілини між двома синглетами з високою точністю: $\Delta_{00}^\infty < 2 \cdot 10^{-4}$ при $\theta = -0.72\pi$. Спостерігається швидке спадання розміру щілини за степеневу залежністю $\Delta_{00}(N) = BN^\alpha$ з високою точністю (в даному випадку $\alpha \simeq 1.10$). Аналіз димерного корелятора дає скінченний результат: $D^\infty = (4 \pm 2) \cdot 10^{-3}$. З іншого боку, розмір щілини між синглетами і квінтетом спадає приблизно експоненційно повільно зі зростанням розміру системи. Через це важко провести точну екстраполяцію, розраховуючи тільки системи до 50 спінів. Найкращий отриманий результат для $\theta = -0.72\pi$ дорівнює $\Delta_{02}^\infty \approx 0.009$ (що співпадає за порядком величини з результатами інших авторів).

Для перевірки отриманого результату розраховується так звана нормована щілина – розмір щілини, помножений на кількість частинок. Спостерігається монотонне спадання нормованої щілини $N\Delta_{00}(N)$ та монотонне зростання $N\Delta_{02}(N)$ при збільшенні N . Таким чином підтверджується, що при $D = 0$ в точці $\theta = -0.72\pi$ система перебуває в димерній фазі. Здобувач схиляється до висновку, що $\Delta_{02}^\infty = 0$ тільки в точці $\theta = -3\pi/4$ (що означає відсутність нематичної фази при $D = 0$).

В четвертому підрозділі визначаються межі області димеризації в біквдратній моделі Гайзенберга (при $\theta = -\pi/2$ та $D \neq 0$). Записавши гамільтоніан в термінах матриць Гелл-Манна, можна довести, що він є SU(2)-симетричним за будь-якого

значення D . Представлення локального спіну в цьому випадку стає звідним: замість одного значення спіну $s = 1$ отримуються два значення так званого ν -спіну: $\nu = \{0, 1/2\}$. При цьому кожен власний стан системи має чітко визначений повний ν -спін V . В термінах s -спінів модель є $U(1)$ -симетричною.

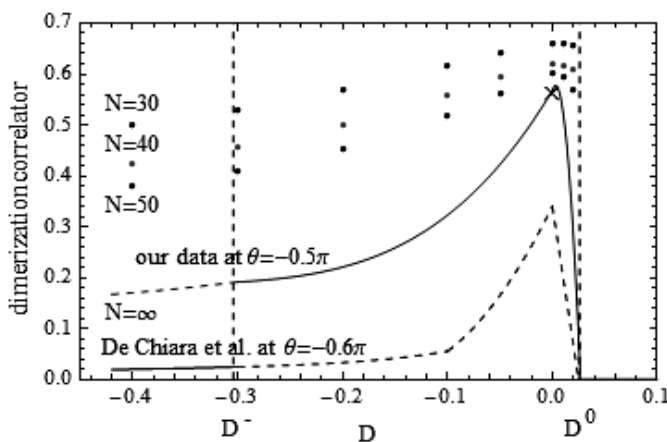


Рис. 3. Залежність димерного корелятора біквадратної моделі Гайзенберга (при $\theta = -\pi/2$) від параметра однойонної анізотропії D . На рисунку показані розраховані значення для 30, 40 та 50 частинок, а також значення, екстрапольовані до $N \rightarrow \infty$ (значення при $D = 0$ позначене хрестиком). Димеризація присутня в діапазоні $-\infty < D < D^0$, $D^0 \approx 0.025$

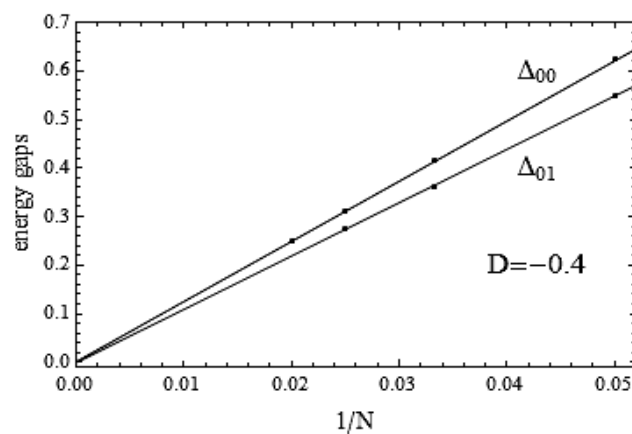
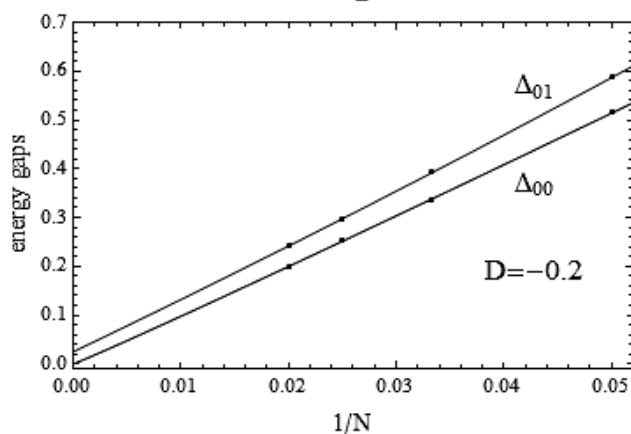


Рис. 4. Екстрапольовані значення спектральних щілин біквадратної (при $\theta = -\pi/2$) моделі Гайзенберга як функції $1/N$ при значеннях параметра анізотропії $D = -0.2$ та $D = -0.4$. Виявлено, що димеризація співіснує з нещільним нематичним збудженням при $D < D^*$, $D^* \approx -0.3$

Спектр найнижчих мультиплетів моделі з $N = 30$ частинок дає можливість якісно оцінити межі фаз. Основним станом системи завжди є синглет $V = 0$ ($S_z = 0$). Найнижчими збудженими станами при $D > 0$ є синглет $V = 0$ та дублет $V = 1/2$ ($S_z = -1, 1$), а при $D < 0$ – синглет $V = 0$ та триплет $V = 1$ ($S_z = -2, 0, 2$).

Димеризація характеризується наявністю двох вироджених синглетів: $\Delta_{00}^{\infty} = 0$. Також необхідно перевірити відмінність від нуля щілини між двократно виродженим основним станом та найближчими мультиплетами. Розрахунки показують, що $\Delta_{0,1/2}^{\infty} > 0$ в усьому діапазоні $D > 0$. Тому завданням є перевірка рівностей: $\Delta_{00}^{\infty} = 0$ при $-\infty < D < \infty$ та $\Delta_{01}^{\infty} > 0$ при $D < 0$.

В роботі перевірено, що щілина між двома синглетами $\Delta_{00}^{\infty} > 0$ при $D > D^0$, де $D^0 \approx 0.025$. При цьому доведено, що при $D < D^0$ щілина $\Delta_{00}^{\infty} = 0$ принаймні в діапазоні значень $D \geq -0.4$. Відповідно, димеризація в цій області є ненульовою (рис. 3). Цей результат узгоджується з результатами статті PRB 85 054451 (2011), де область димеризації отримана в межах $-\infty < D < D^0$ (отримане в статті значення D^0 з високою точністю співпадає зі значенням, отриманим в даній роботі).

Доведено присутність спектральної щілини ($\Delta_{01}^{\infty} > 0$) між виродженими синглетами та найнижчим триплетом в області $D > D^-$, де $D^- \approx -0.3$. Отже, в діапазоні $D^- < D < D^0$ існує димерна *щілинна* фаза. Однак, на прикладі точки $D = -0.4$ продемонстровано зростання кореляційної довжини в системі при зростанні її розміру ($\xi \sim N$) та одночасну рівність нулю обох щілин: $\Delta_{00}^{\infty} = \Delta_{01}^{\infty} = 0$ (рис. 4). Це спричиняє 5-кратне виродження основного стану і злам в графіку для димеризації при $D = D^-$ (рис. 3). Цей результат вказує на можливість існування димерної *нещілинної* фази в моделі. Для точної перевірки цієї гіпотези необхідні розрахунки при $D < 0$ та $\theta \neq -\pi/2$, що виходять за межі дисертаційної роботи.

В *п'ятому підрозділі* аналізується збіжність трьох вдосконалених чисельних методів. Природно, що збіжність покращується при зростанні розміру МДС m (що, до речі, не завжди призводить до збільшення часу розрахунків).

Збіжність методу, що використовує швидке спадання сингулярних чисел добутків трансферних матриць, але не використовує симетрій, визначається тільки величинами p та p' . Збіжність методів з $U(1)$ та $SU(2)$ симетрією дуже залежить від розподілу розміру МДС m між секторами симетрії: різні варіанти розподілу одного й того ж m можуть дати дуже різний результат для енергії одного й того ж стану (якщо розподіл «невдалий», метод взагалі не сходиться). «Вдалий» розподіл доводиться підбирати, що є недоліком методу в його поточній формі.

В процесі роботи виявлено інший недолік методу з використанням симетрій. Якщо стан з заданим значенням S_z/S необхідно визначити в області значень енергій, де густина станів з таким самим значенням S_z/S є великою, то алгоритм часто «застрягає» в стані з заданим S_z/S , вищому за потрібний стан.

Обидві проблеми можна вирішити, застосувавши специфічне збурення до зведених матриць густини лівої/правої частини системи, що для ПКУ наближено задаються виразами: $\rho_{(a_{i-1}, s_i), (a'_{i-1}, s'_i)}^L = \sum_{a_i} M_{a_{i-1}, a_i}^{[i], s_i} M_{a'_{i-1}, a_i}^{[i], s'_i}$, $\rho_{(s_i a_i), (s'_i a'_i)}^R = \sum_{a_{i-1}} M_{a_{i-1}, a_i}^{[i], s_i} M_{a_{i-1}, a_i}^{[i], s'_i}$ (для

ВКУ дані вирази є точними). Матриці ρ мають такий самий набір квантових чисел, що й матриці Q , які використовуються при перекалібруванні МДС. Додавання збурення, яке містить блоки $H_{L/R}^{[i]}$ (тобто є пропорційним $H|\psi\rangle\langle\psi|H$), дозволяє утворювати на проміжних ітераціях нові квантові числа і дає алгоритму можливість самому обирати «більш значущі» сектори в процесі оптимізації.

Відповідний алгоритм вже розроблений, і попередні розрахунки підтверджують його дієвість. Однак цей алгоритм порушує трансляційну інваріантність системи. Необхідність дослідити причину порушення виводить його за межі даної роботи.

У *шостому підрозділі* досліджується універсальність факту швидкого спадання сингулярних чисел добутків трансферних матриць (для алгоритму без симетрії та з $U(1)$ симетрією). На прикладі білінійних моделей Гайзенберга зі спінами $1/2$ та 1 (що є відповідно нещілинною та щілинною) показано, що сингулярні числа спадають приблизно на порядок швидше для щілинної моделі, ніж для нещілинної. Це вказує на наявність зв'язку між швидкістю спадання сингулярних чисел та кореляційною довжиною в системі. На прикладі білінійної моделі Гайзенберга зі спіном 1 показано, що сингулярні числа можуть спадати на 4-6 порядків повільніше у випадку застосування $U(1)$ симетрії. Це змушує припустити, що швидке спадання насправді зумовлене наявністю неперервної симетрії у гамільтоніана, не врахованої апріорі в конструкції власних станів.

ВИСНОВКИ

1. Отримано межі димерної щільної фази в ББГ моделі зі спіном 1 в точці $\theta = -\pi/2$: $D^- < D < D^0$, $D^- \approx -0.3$, $D^0 \approx 0.025$. При $D < D^-$ пряма $\theta = -\pi/2$ розмежовує критичну фазу та фазу Нееля (димеризація при цьому залишається ненульовою). Також в роботі доведено, що димерна фаза в ББГ моделі зі спіном 1 при $D = 0$ простягається від значення контрольного параметра $\theta/\pi = -1/4$ до щонайменше $\theta/\pi = -0.72$. Здобувач схильний заперечити існування окремої фази в околі SU(3)-симетричної точки $\theta/\pi = -3/4$ при $D = 0$.
2. Неперервні симетрії U(1) та SU(2) були введені в тензорну мережу матричнодобуткових станів (МДС) з періодичними крайовими умовами (ПКУ). Було продемонстровано, що розроблений варіаційний метод є стабільним і забезпечує високу точність розрахунків.
3. Показано, що одно- і двочастинкові міри заплутаності, розраховані для власних станів XXZ моделі зі спіном $1/2$ в феромагнітній фазі, не є ефективними для опису властивостей системи в даній фазі.
4. Показано, що швидке спадання сингулярних чисел довгих добутків трансферних матриць в методі для МДС не є універсальним. Швидкість спадання залежить від кореляційної довжини в системі та частково є зумовленою наявністю симетрії у гамільтоніана системи.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Weyrauch M. Efficient MPS algorithm for periodic boundary conditions and applications / Weyrauch M., Rakov M. V. // Ukr. J. Phys. – 2013. – Vol. 58, No. 7. – P. 657–665.
2. Rakov M. V. Symmetries and entanglement in the one-dimensional spin-1/2 XXZ model / Rakov M. V., Weyrauch M., Braierr-Orrs B. // Phys. Rev. B. – 2016. – Vol. 93, Iss. 5. – P. 054417.
3. Braierr-Orrs B. Phase diagrams of one-, two-, and three-dimensional quantum spin systems derived from entanglement properties / Braierr-Orrs B., Weyrauch M., Rakov M. V. // Quant. Inf. Comput. – 2016. – Vol. 16, No. 9–10. – P. 885–899.
4. Rakov M. V. Bilinear-biquadratic spin-1 rings: an SU(2)-symmetric MPS algorithm for periodic boundary conditions / Rakov M. V., Weyrauch M. // Journal of Physics Communications. – 2017. – Vol. 1, No. 1. – P. 015007.
5. Weyrauch M. Dimerization in ultracold spinor gases with Zeeman splitting / Weyrauch M., Rakov M. V. // Phys. Rev. B. – 2017. – Vol. 96, Iss. 13. – P. 134404.
6. Braierr-Orrs B. Numerical studies of entanglement properties of quantum Ising and XXZ spin-1/2 models in one and two dimensions / Braierr-Orrs B., Weyrauch M., Rakov M. V. // Proc. of the “Numerical and analytical methods for strongly correlated systems” International Conference. – 2014. – P. 1.
7. Braierr-Orrs B. Numerical studies of the entanglement properties in infinite 1D and 2D quantum Ising and XXZ spin-1/2 models / Braierr-Orrs B., Weyrauch M., Rakov M. V. // Proc. of the 79th Annual Meeting of DFG, “Condensed Matter” section. – 2015. – P. 482.
8. Rakov M. V. Phase diagram of the spin-1 bilinear-biquadratic Heisenberg model with and without Zeeman effect / Rakov M. V., Weyrauch M. // Proc. of 42nd Middle European Cooperation in Statistical Physics (MECO) conference. – 2017. – P. 152.

АНОТАЦІЯ

Раков М. В. Чисельне моделювання квантових багаточастинкових систем з використанням тензорних мереж. – На правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика. – Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова НАН України, Київ, 2017.

Дисертація присвячена розгляду властивостей запутаності та фазової структури квантових XXZ моделі зі спіном $\frac{1}{2}$ і білінійно-біквдратної моделі Гайзенберга (ББГ) зі спіном 1 та квадратичним ефектом Зеємана. Визначено межі димерної фази в ББГ моделі в біквдратній точці ($\theta/\pi = -1/2$) та доведено, що нематична фаза може існувати в моделі за відсутності анізотропії ($D = 0$) лише в вузькому діапазоні значень контрольного параметра $-3/4 < \theta/\pi < -0.72$. Показано, що структура запутаності збуджених станів XXZ моделі в ферромагнітній фазі не описується задовільно одно- та двочастинковими мірами запутаності. В процесі роботи для розрахунків було вдосконалено чисельний метод, що використовує матричнодобуткові стани (МДС) з періодичними крайовими умовами (ПКУ), шляхом використання U(1)- та SU(2)-симетричних МДС як варіаційних станів (згідно з теоремою Мерміна-Вагнера).

Ключові слова: XXZ модель, модель Гайзенберга, запутаність, фазова структура, матричнодобуткові стани (МДС), U(1) симетрія, SU(2) симетрія.

АННОТАЦИЯ

Раков М. В. Численное моделирование квантовых многочастичных систем с использованием тензорных сетей. – На правах рукописи.

Диссертация на соискание научной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика. – Институт теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова НАН Украины, Киев, 2017.

Диссертация посвящена рассмотрению свойств запутанности и фазовой структуры квантовых XXZ модели со спином $\frac{1}{2}$ и билинейно-биквдратной модели Гайзенберга (ББГ) со спином 1 и квадратичным эффектом Зеємана. Определены границы димерной фазы в ББГ модели в биквдратной точке ($\theta/\pi = -1/2$), а также доказано, что нематическая фаза может существовать в модели при отсутствии анизотропии ($D = 0$) только в узком диапазоне значений контрольного параметра $-3/4 < \theta/\pi < -0.72$. Доказано, что структура запутанности возбужденных состояний XXZ модели в ферромагнитной фазе не описывается удовлетворительно одно- и двучастичными мерами запутанности. В процессе работы для расчетов был усовершенствован численный метод, использующий матричнопроизведённые состояния (МПС) с периодическими краевыми условиями (ПКУ), путём использования U(1)- и SU(2)-симметричных МПС как вариационных состояний (согласно теореме Мермина-Вагнера).

Ключевые слова: XXZ модель, модель Гайзенберга, запутанность, фазовая структура, матричнопроизведённые состояния (МПС), U(1) симметрия, SU(2) симметрия.

ABSTRACT

Rakov M. V. Numerical simulation of quantum many body systems using tensor networks. – Manuscript.

Thesis for the Doctor of Philosophy degree (Candidate of science in Physics and Mathematics) in speciality 01.04.02 – Theoretical Physics. – Bogolyubov Institute for Theoretical Physics of National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, 2017.

The thesis is devoted to a theoretical study of the entanglement properties and the phase structure of the quantum spin-1/2 XXZ model as well as spin-1 bilinear-biquadratic Heisenberg (BBH) model with quadratic Zeeman effect (so-called single-ion anisotropy). Finite-size properties of the spin rings as well as the properties of the systems in the thermodynamic limit are investigated.

It is shown that the entanglement structure of the excited states of the spin-1/2 XXZ model in the ferromagnetic phase cannot be described satisfactorily by one- and two-site entanglement measures. It is long-range or many-way entanglement that has the largest weight in the ferromagnetic phase, while nearest-neighbor entanglement has the largest weight in the antiferromagnetic phase. Such entanglement measure as one-tangle is constant for $\Delta < -1$ for any ground state with fixed spin projection S_z , while concurrence of formation is zero for any state except one. On the other hand, such entanglement measure as three-tangle appears to depend strongly on the anisotropy parameter Δ at $\Delta < 0$ and to increase monotonically with $|\Delta|$.

The low lying spectrum of the spin-1 BBH model without quadratic Zeeman effect was investigated deeply in the range $-3/4 < \theta/\pi < 1/2$ of the control parameter (i.e., everywhere except the ferromagnetic phase, where the ground state is multifold degenerate with total spin S equal to the number of sites N). Two lowest singlets, one or two lowest triplets and a lowest quintet are calculated for systems of up to 50 sites. It is shown that the ground state of the BBH model in a ring geometry is a doubly degenerate triplet in the critical phase, which is very different from the situation for BBH spin chains. The lowest quintet appears to be degenerate with these two triplets in the thermodynamic limit.

The existence of the fifth (nematic) phase in this model was addressed. Extrapolation of the gap between two singlets and of the gap between lowest singlet and lowest quintet was used. It was proved that the fifth phase can exist in the BBH model without quadratic Zeeman effect only in a narrow range of the control parameter $-3/4 < \theta/\pi < -0.72$. Moreover, the author tends to completely reject the possibility of the existence of this phase, in line with nowadays common field theorists' belief.

The low lying spectrum of the biquadratic Heisenberg model with quadratic Zeeman effect was investigated deeply in the range $-0.5 < D < 0.6$ of the anisotropy parameter. Two lowest singlets and either the lowest duplet or the lowest triplet are calculated for systems of up to 50 sites. The boundaries of the dimerized region are determined by the degeneracy of two lowest singlets in the thermodynamic limit as $D < D^0$, $D^0 \approx 0.025$. However, the closing of the gap between two lowest singlets and lowest triplet is observed at $D < D^*$, $D^* \approx -0.3$, that indicates a presence of the gapless dimerized area there, which presumably separates the nematic and the Neel phase at $\theta = -\pi/2$. The boundaries of the gapped dimerized phase are therefore determined as $-0.3 < D < 0.025$.

Within the work, three modifications of the algorithm with matrix product states (MPS) with periodic boundary conditions (PBC) have been developed. All three were

designed in order to reduce the computational effort and improve the precision of the calculations.

Two of these modifications utilize the Mermin-Wagner theorem, which states that since our 1D Hamiltonians under consideration possess continuous symmetries (U(1) and SU(2), respectively), their eigenstates also possess the same symmetries (at any temperature and even in the thermodynamic limit). U(1) and SU(2) symmetric MPS for PBC are developed and used as variational states. The local MPS tensors are represented using Wigner-Eckart theorem, and they have characteristic sparse structure.

A specific method to construct U(1) symmetric MPS for PBC for arbitrary S_z is described in the thesis. Usually the non-interacting 'fictitious site' with spin projection S_z was used before. Now the fact that U(1) symmetry is Abelian is utilized, therefore the 'fictitious site' is 'distributed' over all sites. Technical details of the algorithm are explicitly given, and they can be easily implemented using sparse tensor operations of specific program packages.

The SU(2) symmetric MPS for PBC is constructed similarly to the OBC case, except that all virtual indices are made equal in rights. The fact that all the tensors that appear in the algorithm are SU(2) symmetric is utilized, that allows to eliminate all $3j$ symbols from the calculations (as it was done previously for OBC by McCulloch). In this case only so-called reduced tensors are used, and all the sums of $3j$ symbols which appear throughout the calculations are specific products of $6j$ and $9j$ symbols. The 'blocks' become rank-6 in the PBC case, and the algorithm previously developed for OBC becomes technically much more intricate. Technical details of the algorithm, namely: recursion formulas for reduced 'block' updates, derivation of the generalized eigenvalue problem, derivation of the reduced MPO for the squared Hamiltonian, etc. are explicitly given. Sparse tensor algebra of computer software *Mathematica* can be partly used, since the 'blocks' in their reduced form are very sparse.

Another modification of the PBC MPS algorithm utilizes fast decay of the singular values of long products of transfer matrices. These long products are replaced by their reduced singular value decomposition and the generalized eigenvalue problem to be solved at each iteration step is constructed in reduced CPU time. Circular manner of the MPS update is employed (to secure sufficient length of the product of transfer matrices), and the system is split into at least three sections where the products are pre-computed (to avoid calculation of inverse matrices). However, the strong decay of the singular values is proved to happen more likely in the gapped system rather than gapless system. It is also proved to be partly caused by U(1) or SU(2) symmetry of the Hamiltonian under consideration (due to sparse structure of the MPS), if this symmetry is not taken care of from the outset.

Good performance of the developed numerical methods was proved by calculations of specific energy values as well as spin-spin correlators. E.g., z - z spin correlator and staggered magnetization were calculated for the XXZ model, while string correlator and dimerization correlator were calculated for the BBH model. Also the available energy values were reproduced precisely for both models.

Key words: XXZ model, bilinear-biquadratic Heisenberg model, entanglement, phase structure, matrix product states (MPS), U(1) symmetry, SU(2) symmetry.

Раков Михайло Володимирович

Чисельне моделювання квантових багаточастинкових систем
з використанням тензорних мереж.

(Автореферат дисертації на здобуття наукового ступеня кандидата
фізико-математичних наук)

Підписано до друку 08.12.2017 р. Формат 60x90/16.

Ум. друк. арк. 0,9. Обл.-вид. арк. 0,9.

Тираж 100. Зам. 91.

«Видавництво “Науковий світ”»[®]

Свідоцтво ДК № 249 від 16.11.2000 р.

м. Київ, вул. Казимира Малевича (Боженка), 23, оф. 414.

200-87-15, 050-525-88-77

E-mail: nsvit23@ukr.net

Сайт: nsvit.cc.ua