

Київський національний університет імені Тараса Шевченка
Міністерство освіти і науки України

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

Кваліфікаційна наукова
праця на правах рукопису

Раков Михайло Володимирович

УДК 537.611, 519.637

ДИСЕРТАЦІЯ

ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ
КВАНТОВИХ БАГАТОЧАСТИНКОВИХ СИСТЕМ
З ВИКОРИСТАННЯМ ТЕНЗОРНИХ МЕРЕЖ

01.04.02 – Теоретична фізика

Подається на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання чужих ідей, результатів і текстів мають посилання на відповідне джерело.

М. В. Раков

Науковий керівник:
Доценко Іван Сергійович,
доктор фіз.-мат. наук,
професор

Київ – 2017

АНОТАЦІЯ

Раков М. В. Чисельне моделювання квантових багаточастинкових систем з використанням тензорних мереж. - Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 «Теоретична фізика». - Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова НАН України, Київ, 2017.

Дисертація присвячена теоретичному дослідженню властивостей заплутаності та фазової структури квантових XXZ моделі частинок зі спіном $1/2$ та білінійно-біквадратної моделі Гайзенберга (ББГ) частинок зі спіном 1 з квадратичним ефектом Зеемана (так званою одновимірною анізотропією). Досліджуються як властивості скінченновимірних спінових кілець, так і властивості систем в термодинамічній граници.

Показано, що структура заплутаності збуджених станів XXZ моделі частинок зі спіном $1/2$ в феромагнітній фазі не описується задовільно одно- і двочастинковими мірами заплутаності. Найбільшу вагу в феромагнітній фазі має заплутаність далекої дії або багатокубітова заплутаність, в той час як в антиферомагнітній фазі найбільшу вагу має заплутаність між найближчими сусідами. Така міра запуланості, як ОТ, є сталою при $\Delta < -1$ для будь-якого основного стану в секторі з проекцією спіну S_z , в той час як узгодження формування дорівнює нулеві для всіх станів, окрім одного. З іншого боку, така міра заплутаності, як ТТ (англ. “three-tangle”), сильно залежить від параметра анізотропії Δ при $\Delta < 0$ та монотонно зростає зі зростанням $|\Delta|$. Okрім того, в загальному випадку спостерігається немонотонна залежність узгодження формування від S_z .

Найнижча частина спектра ББГ моделі частинок зі спіном 1 за відсутності квадратичного ефекту Зеемана була ґрунтовно досліджена в діапазоні контрольного параметра $-3/4 < \theta/\pi < 1/2$ (тобто всюди, окрім феромагнітної фази, де основний стан є багатократно виродженим з повним спіном S , рівним кількості частинок N). Два найнижчі синг'лети, один або два найнижчі триплети та найнижчий квінтет були розраховані для систем розміром до 50 частинок. Було підтверджено загальні відомості про найнижчі збудження в фазі Холдейна та димерній фазі. Окрім того, було показано, що основний стан ББГ моделі в геометрії кільця є двократно виродженим триплетом в критичній фазі, що дуже відрізняється від ситуації в ББГ моделі в геометрії ланцюга. Найнижчий квінтет стає виродженим з двома вказаними триплетами в термодинамічній границі.

Була досліджена можливість існування п'ятої (нематичної) фази у вказаній моделі. Була використана екстраполяція значення щілини між двома синг'летами та між найнижчим синг'летом і найнижчим квінтетом. Доведено, що п'ята фаза може існувати в ББГ моделі без квадратичного ефекту Зеемана лише у вузькому інтервалі значень контрольного параметра $-3/4 < \theta/\pi < -0.72$. Понад те, автор схильний заперечити існування цієї фази, що узгоджується з сучасними припущеннями теоретиків.

Найнижча частина спектра біквадратної моделі Гайзенберг'a частинок зі спіном 1 з квадратичним ефектом Зеемана була ґрунтовно досліджена в діапазоні контрольного параметра $-0.5 < D < 0.6$. Два найнижчі синг'лети, а також або найнижчий дублет, або найнижчий триплет, були розраховані для систем розміром до 50 частинок. За рахунок виродження двох найнижчих синг'летів в термодинамічній границі межі області димеризації були визначені як $D \lesssim 0.025$. Однак при $D \lesssim -0.3$ спостерігалось закриття щілини між двома найнижчими синг'летами та найнижчим триплетом, що вказує на існування нещілинної димерної області, яка потенційно розмежовує нематичну фазу та фазу Нееля при $\theta = -\pi/2$. Таким чином, межі димерної щілинної фази визначаються як $-0.3 \lesssim D \lesssim 0.025$.

В процесі виконання роботи було здійснено три модифікації алгоритму матричнодобуткових станів (МДС) з періодичними крайовими умовами (ПКУ). Всі три модифікації були розроблені з метою пришвидшення розрахунків та підвищення їхньої точності.

Дві з вказаних модифікацій використовують теорему Мерміна-Вагнера. Згідно з нею, якщо гамільтоніан одновимірної системи має неперервну симетрію (відповідно $U(1)$ та $SU(2)$), то його власні стани також матимуть цю симетрію (за будь-якої абсолютної температури та навіть в термодинамічній граници). Тому $U(1)$ - та $SU(2)$ -симетричні МДС з ПКУ були розроблені і використані як варіаційні стани. Локальні тензори МДС представлені згідно з теоремою Вігнера-Екарта та мають характерну розріджену структуру.

В роботі описано специфічний спосіб утворення $U(1)$ -симетричного МДС з ПКУ з будь-якою проекцією спіну S_z . Зазвичай до цього використовувався невзаємодіючий «додатковий спін» з проекцією спіну $-S_z$. В роботі використовується абелевість $U(1)$ симетрії, завдяки чому «додатковий спін» «розподіляється» поміж іншими спінами. Наводяться технічні деталі відповідного алгоритму, які можуть бути безпосередньо застосовані з використанням операцій над розрідженими тензорами спеціфічних програмних пакетів.

$SU(2)$ -симетричний МДС з ПКУ утворюється аналогічно до відкритих крайових умов (ВКУ), однак віртуальні індекси робляться рівноправними. Використовується той факт, що всі тензори, які виникають в алгоритмі, є $SU(2)$ -симетричними. Це дозволяє повністю виключити з розрахунків всі $3j$ символи (що було зроблено МакКаллоком для ВКУ). В цьому випадку використовуються тільки так звані зведені тензори, а всі суми $3j$ символів, що з'являються в процесі розрахунків, є спеціфічними добутками $6j$ та $9j$ символів. У випадку ПКУ «блоки» мають ранг 6, тому алгоритм, аналогічний якому був раніше розроблений для ВКУ, стає нагато складнішим. В роботі наводяться технічні деталі алгоритму, а саме: рекурсивні формули для «корегування» зведеніх «блоків», отримання узагальненої задачі на власні значення, отримання зведеного МДО квадрату гамільтоніана і т.д. Оскільки

«блоки» в зведеній формі є дуже розрідженими, частково є можливим використання операцій над розрідженими тензорами програмного забезпечення *Mathematica*.

Третя модифікація алгоритму МДС з ПКУ використовує швидке спадання сингулярних чисел довгих добутків трансферних матриць. Воно дозволяє замінити ці довгі добутки на їхні скорочені розклади за сингулярними числами та утворити узагальнену задачу на власні значення, що розв'язується при кожній ітерації, за набагато менший час. В цьому випадку необхідно застосувати перенормування МДС по колу (для гарантії достатньої кількості трансферних матриць в добутку), а систему необхідно розбити на щонайменше три сегменти, добутки всередині яких потрібно порахувати зазделегідь (для уникнення розрахунків обернених матриць). Однак доведено, що швидке спадання сингулярних чисел має місце не для всіх систем великого розміру (воно трапляється частіше в щілинних системах, ніж в нещілинних). Також продемонстровано, що швидке спадання частково зумовлене наявністю $U(1)$ або $SU(2)$ симетрії у гамільтоніана системи (завдяки розрідженні структурі МДС), якщо ця симетрія не врахована апріорі. Тому автор радить використовувати таке спадання тільки тоді, якщо можна очікувати суттєвого (щонайменше на порядок) пришвидшення розрахунків.

Хороша точність розроблених чисельних методів була доведена розрахунками певних значень енергій та спін-спінових кореляторів. Наприклад, для XXZ моделі були розраховані z - z корелятор та чергована намагніченість, а для ББГ моделі - рядковий корелятор та димерний корелятор (останній розраховувався з двох найнижчих синг'летів, що утворюють вироджену пару в термодинамічній границі). Також для обох моделей були відтворені відомі значення енергій.

Ключові слова: модель XXZ, білінійно-біквадратна модель Гайзенберга, заплутаність, фазова структура, матричнодобуткові стани (МДС), $U(1)$ симетрія, $SU(2)$ симетрія.

Список публікацій:

1. Weyrauch M., Rakov M. V., “Efficient MPS algorithm for periodic boundary conditions and applications”, Ukr. J. Phys. 58(7), 657 (2013).
2. Rakov M. V., Weyrauch M., Braiorr-Orrs B., “Symmetries and entanglement in the one-dimensional spin-1/2 XXZ model”, Phys. Rev. B. 93(5), 054417 (2016).
3. Braiorr-Orrs B., Weyrauch M., Rakov M. V., “Phase diagrams of one-, two-, and three-dimensional quantum spin systems derived from entanglement properties”, Quant. Inf. Comput. 16(9-10), 885 (2016).
4. Rakov M. V., Weyrauch M., “Bilinear-biquadratic spin-1 rings: an SU(2) symmetric MPS algorithm for periodic boundary conditions”, J. Phys. Commun. 1(1), 015007 (2017).
5. Weyrauch M., Rakov M. V., “Dimerization in ultracold spinor gases with Zeeman splitting”, Phys. Rev. B. 96(13), 134404 (2017).
6. Braiorr-Orrs B., Weyrauch M., Rakov M. V. “Numerical studies of entanglement properties of quantum Ising and XXZ spin-1/2 models in one and two dimensions”, *Proc. of the "Numerical and analytical methods for strongly correlated systems" Conference* (Banasque, 2014, Spain), p. 1.
7. Braiorr-Orrs B., Weyrauch M., Rakov M. V. “Numerical studies of the entanglement properties in infinite 1D and 2D quantum Ising and XXZ spin-1/2 models”, *Proc. of the 79th Annual Meeting of DFG, "Condensed Matter" section* (Berlin, 2015, Germany), p. 482.
8. Rakov M. V., Weyrauch M., “Phase diagram of the spin-1 bilinear-biquadratic Heisenberg model with and without Zeeman effect”, *Proc. of 42nd MECO conference* (Lyon, 2017, France), p. 152.

SUMMARY

Rakov M. V. Numerical simulation of quantum many body systems using tensor networks. - Qualification research thesis with the rights of manuscript.

Thesis for the Doctor of Philosophy degree (Candidate of science in Physics and Mathematics) in the speciality 01.04.02 “Theoretical physics”. - Taras Shevchenko National University of Kyiv, Bogolyubov Institute for Theoretical Physics of the NAS 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 $|\Delta|$. Moreover, non-monotonous dependence of concurrence of formation on S_z is observed in general.

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. Common knowledge about lowest excitations in the Haldane and in the dimerized phase was confirmed. Furthermore, 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 $D \lesssim 0.025$. However, the closing of the gap between two lowest singlets and lowest triplet is observed at $D \lesssim -0.3$, 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 $-0.3 \lesssim D \lesssim 0.025$.

During the work, three modifications of the algorithm with matrix product states (MPS) for 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). Therefore $U(1)$ 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. It allows to replace these long products by their reduced singular value decomposition and thus construct the generalized eigenvalue problem to be solved at each iteration step in a much smaller CPU time. In this case circular manner of the MPS update must be

employed (to secure sufficient length of the product of transfer matrices), and the system must be split into at least three sections where the products must be pre-computed (to avoid calculation of inverse matrices). However, the strong decay of the singular values is proved to happen not for arbitrary large system (it is more likely to happen 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 the symmetry is not taken care of from the outset. Therefore it is advised to utilize the decay only if significant (at least an order of magnitude) reduction of the CPU time is expected.

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 (the latter was calculated using two lowest singlets, which form a degenerate pair in the thermodynamic limit). Also the energy values were reproduced precisely for both models wherever precise values are available.

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

List of publications:

1. Weyrauch M., Rakov M. V., “Efficient MPS algorithm for periodic boundary conditions and applications”, Ukr. J. Phys. 58(7), 657 (2013).
2. Rakov M. V., Weyrauch M., Braiorr-Orrs B., “Symmetries and entanglement in the one-dimensional spin-1/2 XXZ model”, Phys. Rev. B. 93(5), 054417 (2016).
3. Braiorr-Orrs B., Weyrauch M., Rakov M. V., “Phase diagrams of one-, two-, and three-dimensional quantum spin systems derived from entanglement properties”, Quant. Inf. Comput. 16(9-10), 885 (2016).

4. Rakov M. V., Weyrauch M., “Bilinear-biquadratic spin-1 rings: an SU(2) symmetric MPS algorithm for periodic boundary conditions”, J. Phys. Commun. 1(1), 015007 (2017).
5. Weyrauch M., Rakov M. V., “Dimerization in ultracold spinor gases with Zeeman splitting”, Phys. Rev. B. 96(13), 134404 (2017).
6. Braiorr-Orrs B., Weyrauch M., Rakov M. V. “Numerical studies of entanglement properties of quantum Ising and XXZ spin-1/2 models in one and two dimensions”, *Proc. of the "Numerical and analytical methods for strongly correlated systems" Conference* (Benasque, 2014, Spain), p. 1.
7. Braiorr-Orrs B., Weyrauch M., Rakov M. V. “Numerical studies of the entanglement properties in infinite 1D and 2D quantum Ising and XXZ spin-1/2 models”, *Proc. of the 79th Annual Meeting of DFG, "Condensed Matter" section* (Berlin, 2015, Germany), p. 482.
8. Rakov M. V., Weyrauch M., “Phase diagram of the spin-1 bilinear-biquadratic Heisenberg model with and without Zeeman effect”, *Proc. of 42nd MECO conference* (Lyon, 2017, France), p. 152.

ЗМІСТ

Перелік скорочень	15
Вступ	16
Розділ 1 Загальний підхід МДС/МДО для періодичних крайових умов	38
1.1 Матричнодобуткові стани з відкритими крайовими умовами (МДС з ВКУ)	38
1.2 Матричнодобуткові стани з періодичними крайовими умовами (МДС з ПКУ)	43
1.3 Канонічний вигляд та перекалібрування МДС	45
1.4 Матричнодобуткові оператори (МДО)	45
1.5 Конкретні гамільтоніани та їхні МДО	48
1.6 Ітеративний пошук основного стану	49
1.7 Ітеративний пошук збудженого стану	53
1.8 Утворення матриць для задачі на власні значення	55
1.9 Трансферні матриці	57
1.10 Процедура оптимізації	58
1.11 Необхідний для розрахунків час	59
1.12 U(1) та SU(2) симетрія: походження секторів симетрії в МДС	61
Розділ 2 Розроблені варіаційні алгоритми для МДС з ПКУ	64
2.1 Ефективний алгоритм МДС/МДО по колу	64
2.1.1 Чому алгоритм по колу є корисним?	64
2.1.2 Необхідні для алгоритму по колу оператори	65
2.1.3 Зменшення часу розрахунків	67
2.1.4 Процедура оптимізації в алгоритмі по колу	69
2.1.5 Швидкий розрахунок $\langle H^2 \rangle$	70
2.2 Алгоритм для U(1)-симетричних МДС з ПКУ	71

2.2.1	Загальна форма $U(1)$ -інваріантних МДС	71
2.2.2	Звичайний спосіб утворення $U(1)$ -коваріантного МДС . .	72
2.2.3	Ефективний спосіб утворення $U(1)$ -коваріантного МДС з ПКУ	74
2.2.4	Перекалібрування $U(1)$ -коваріантного МДС	78
2.2.5	Задача на власні значення у випадку $U(1)$ -коваріантного МДС	79
2.3	Алгоритм для $SU(2)$ -симетричних МДС з ПКУ	81
2.3.1	Утворення $SU(2)$ -симетричного МДС з ПКУ	81
2.3.2	Перекалібрування $SU(2)$ -симетричного МДС	83
2.3.3	Пряме формулювання варіаційного алгоритму у випадку $SU(2)$ -симетричного МДС	85
2.3.4	Алгоритм для ПКУ з використанням тільки зведених тензорів	87
2.3.5	Зведені представлення МДО	90
2.3.6	Зведене представлення МДО для ББГ гамільтоніана . .	90
2.3.7	Зведені тензори блоків	93
2.3.8	Задача на власні значення в термінах зведених тензорів .	96
2.3.9	Розрахунок спостережуваних величин	97
2.3.10	Розрахунок $\langle H^2 \rangle$	98
Розділ 3 Результати		99
3.1	Загальні міркування	99
3.2	XXZ модель частинок зі спіном 1/2 з ПКУ	104
3.2.1	Тестування роботи алгоритмів	105
3.2.2	Спінові корелятори та властивості заплутаності	109
3.3	Білінійно-біквадратна модель Гайзенберга (ББГ) частинок зі спіном 1 з ПКУ	115
3.3.1	Тестування роботи алгоритмів	115
3.3.2	Найнижча частина спектра та фазова діаграма	123
3.4	Димерна фаза ББГ моделі частинок зі спіном 1 та квадратничним ефектом Зеемана	128
3.4.1	Загальні міркування	128

3.4.2 Специфіка чисельних розрахунків	129
3.4.3 Найнижча частина спектра та фазова структура	130
3.4.4 Енергетичні щілини	131
3.4.5 Димеризація та кіральність в системі	133
3.4.6 Прогнозована фазова діаграма	136
3.5 Збіжність запропонованих алгоритмів та точність розрахунків .	138
3.6 Аналіз параметрів скорочення p та p'	142
Висновки	145
План подальших досліджень	147
Подяка	148
Додаток А	149
Додаток Б: Список публікацій за темою дисертації та відомості про апробацію результатів дисертації	162
Список використаних джерел	164

ПЕРЕЛІК СКОРОЧЕНЬ

1D	одновимірний
2D	дтовимірний
XXZ	подається без перекладу (модель частинок)
АКЛТ	Аффлек-Кеннеді-Ліб-Тасакі
ББГ	білінійно-біквадратна (модель) Гайзенберг'a
БКТ	Березінський-Костерлітц-Таулесс
ВКУ	відкриті крайові умови
ВПС	Верстрате-Поррас-Сірак (алгоритм)
ГГЦ	Грінберг'єр-Горне-Цайлінг'єр
КФП	квантовий фазовий переход
МДС	матричнодобутковий стан (англ. “matrix product state (MPS)’’)
МДО	матричнодобутковий оператор (англ. “matrix product operator (MPO)’’)
нПБзЕЧ	некінченновимірне проріджування блоків з еволюцією часу (англ. “infinite-size time-evolving block decimation (iTEBD)’’)
ОТ	one-tangle (величина, що показує заплутаність між одною частинкою і рештою системи)
ПКУ	періодичні крайові умови
ПВЕ	Піппан-Вайт-Евертц (алгоритм)
РГМГ	ренормгрупа матриці густини (англ. “density matrix renormalization group (DMRG)’’)
РзСЧ	роздріблення за сингулярними числами
р-ня	рівняння
ТМ	тензорна мережа (англ. “tensor network”)

ВСТУП

Актуальність теми. *Сильно корельовані квантові системи* В останні кілька десятиліть технічно досить простим є досягнення наднизьких температур та маніпуляції над різними квантовими об'єктами при таких температурах. Спершу це були ізольовані об'єкти (електрони, йони, атоми), але наразі можливо локалізовувати (уловлювати) також системи таких об'єктів (тобто багато частинок водночас) наnano-, мікро- та мезоскопічних масштабах. В низькотемпературних багаточастинкових системах температурні ступені вільності є «вимороженими», однак такі системи можна зробити квантовомеханічно сильно корельованими навіть за нульової температури. Вони наразі викликають великий інтерес.

Одним з видів таких систем є низьковимірні квантові магнетики, які можливо створити, починаючи з 1970-их років (зазвичай шляхом вирощування кристалів). В цих системах дуже сильною є взаємодія магнітних моментів частинок. Прикладами таких квантових магнетиків [1] є сполуки, засновані на йонах Cu^{2+} , що утворюють системи зі спіном $1/2$ (наприклад, KCuF_3 , Sr_2CuO_3 або спін-паєрлсові матеріали CuGeO_3), або на йонах Ni^{2+} , що утворюють системи зі спіном 1 (наприклад, так звані NENP ($\text{Ni}(\text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2)_2\text{NO}_2(\text{ClO}_4)$) та NDMAP ($\text{Ni}(\text{C}_5\text{H}_{14}\text{N}_2)_2\text{N}_3(\text{PF}_6)$)). Інші магнітні матеріали складаються з атомів або йонів перехідних металів, таких як Mn чи Fe, або рідкоземельних металів, таких як Ce чи Nd. Подальший розвиток матеріалознавства спричинив інтерес до спінових драбин - об'єктів «між» одновимірними та двовимірними системами [2].

Поведінка вище названих магнітних систем може бути описана квантовими моделями з зазвичай досить складними спін-спіновими взаємодіями. Однак виявляється, що модельні гамільтоніани (Ізінга чи Гайзенберга), які досліджувались за десятиліття до того, також можуть бути реалізовані на

практиці [3] - їх можна (в хорошому наближенні) створити штучно. Як результат, вивчення квантових спінових моделей є ефективним способом вивчення певних видів магнітних матеріалів.

Інтерес до магнітних матеріалів мав ще один поштовх після відкриття високотемпературних надпровідників, природа яких виявилась тісно пов'язаною з сильними магнітними флюктуаціями, можливими в низьковимірних матеріалах [4]. Часткове пояснення цього явища [5] засноване на розумінні 2D моделі Габбарда в $t - J$ границі [6] для ферміонів зі спіном 1/2. Емпіричний досвід показав, що всюди в околі високо- T_c надпровідної фази існує антиферомагнітна (фрустрована) фаза. Фрустровані антиферомагнетики відтоді викликають великий інтерес в фізиці конденсованого стану [7].

Хорошим стимулом є також можливість створення екзотичних квантових фаз, як-от: валентнозв'язкові тверді тіла, резонуючі валентнозв'язкові тверді тіла, а також різні типи квантових спінових рідин (спінові рідини 1-го і 2-го типу [8] та топологічні і критичні спінові рідини [9]). Зокрема, нещодавно спінові системи з топологічним порядком були запропоновані [10] як кандидати для надійних квантових розрахунків. Що цікаво, схожість між кіральними спіновими станами та станами дробового квантового ефекту Холла (ДКХ) [11] дозволила використовувати теорію топологічного порядку для опису різних ДКХ-станів [12]. Як і кіральні спінові стани, ДКХ-стани мають виродження основного стану, що залежить від топології простору [13, 14].

Інший вид сильно корельованих квантових систем - ультрахолодні атомні гази - вперше були створені в 1990-і роки і тепер активно досліджуються. Це був крок уперед після того, як учені навчилися маніпулювати одиночними атомами. При досліженні властивостей квантових газів початковою точкою для вивчення квантових багаточастинкових моделей є слабо взаємодіючий бозе-газ [15, 16, 17]. Вивчення такої системи призводить до спостереження фундаментального явища бозе-ейнштейнівської кондесації (БЕК) [18]. Іншими прикладами є перехід з молекулярного БЕК в БКШ-режим, що вивчається в сильно взаємодіючих фермі-газах (див., наприклад, [19]), та перехід

з напрівідного стану в стан ізолятора Мотта, що спостерігається в бозе-газі, поміщеному в потенціал оптичної гратки [20, 21, 22]. В останньому випадку динаміка ультрахолодних газів за різних умов реалізує множину моделей Бозе-Габбарда (БГ) [23]. Також виявляється, що за допомогою холодних атомів можна реалізувати моделі з топологічним порядком [24, 25]

Нарешті, за допомогою бозе-бозе-, фермі-фермі- та бозе-фермі-суміші можна утворити дуже екзотичні стани. Приміром, вважається, що в суміші двох бозонних видів на гратці міжвидове відштовхування та притягання може спричинити існування фаз відповідно нестискуваної надконтррідини (англ. “supercounterfluid (SCF)”) та стискуваної паронадплинної рідини (англ. “pair-superfluid (PSF)”) [26].

В певних межах моделі Габбарда зводяться до різних спінових моделей; холодні атоми та йони дозволяють практично ідеальну реалізацію таких спінових моделей (див., приміром, [27, 28, 29]). Така реалізація може бути використана також як квантовий симулатор для утворення певних моделей та для дослідження дуже специфічних і спеціалізованих питань в фізиці конденсованого стану.

Як висновок, вивчення квантових моделей є корисним з двох точок зору. Вони описують поведінку реальних (низьковимірних) багаточастинкових систем і є хорошими об'єктами для дослідження нетривіальних явищ в фізиці конденсованого стану.

Взаємодії між складовими (частинками) в низьковимірних квантових моделях можуть бути різноманітними, а «сила» кожної взаємодії визначається параметрами, що налаштовуються експериментально. Такі параметри звуться контрольними. Зазвичай на практиці їх один або два. Залежно від значень цих параметрів система може проявляти принципово різні властивості (зокрема, у своєму основному стані).

В різних діапазонах значень контрольних параметрів основний стан багаточастинкової системи характеризується ненульовими спостережуваними значеннями певних кореляційних функцій. Діапазони контрольних параметрів

трів, де квантова система характеризується одним і тим самим характерним корелятором, звуться квантовими фазами. Змінюючи відповідний контрольний параметр, можна спричиняти квантові фазові переходи (КФП) між різними фазами. КФП відбуваються в різних квантових системах і останнім часом привернули велику увагу в фізиці конденсованого стану [30]. Очевидно, що вони відбуваються при чітко визначених значеннях контрольних параметрів, що звуться точками фазових переходів.

Важливо зауважити наступне. Поблизу та в самих критичних точках різні частини системи є квантовомеханічно сильно корельованими, і тому різні кореляційні функції можуть мати сингулярність [31]. Квантові багаточастинкові системи десятиліттями вивчались в термінах таких кореляційних функцій в рамках теорії Ландау. Згідно з нею, кожна фаза характеризується порушенням певної симетрії в своєму основному стані, що призводить до появи відповідного корелятора (який звуться параметром порядку). Однак топологічно упорядковані фази [32], квантові спінові рідини [7] та необмежені (англ. “deconfined”) квантові критичні точки [33] не можуть бути описані параметрами порядку в їхньому класичному сенсі. Натомість вони характеризуються рядковими операторами (англ. “string operators”), що задовільняють «правило нуля» (англ. “zero-law”) [34]. Також було виявлено, що такі квантові фази та КФП можуть бути розрізnenі та описані в термінах квантової заплутаності [35, 36]. Прості міри заплутаності можуть принципово описувати структуру багаточастинкових систем, а саме - визначати їхні критичні властивості (наприклад, положення критичних точок) не гірше за кореляційні функції. Виродження специфічної міри заплутаності - спектра заплутаності - вказує на існування топологічної фази [37]. Міри заплутаності, що використовуються в даній роботі, описані в Додатку А. Вивчаються тільки прості міри, які не характеризують заплутаність далекої дії чи багатокубітову (тричастинну або іншу) заплутаність.

Виявляється, що навіть одновимірні і досить прості квантові моделі можуть мати дуже нетривіальну фазову структуру. Це можна побачити на при-

кладі білінійно-біквадратної моделі Гайзенберга (ББГ) зі спіном 1. Вона може перебувати щонайменше в чотирьох фазах [38, 39]: Холдейна, критичній, феромагнітній та димерній. В димерній фазі порушується трансляційна симетрія основного стану (що й спричиняє димеризацію). Топологічно захищена фаза Холдейна має порушену «приховану» $Z_2 \times Z_2$ симетрію та подвійно вироджений спектр запутаності - вона характеризується наявністю «нелокально-го» рядкового параметра порядку. Феромагнітна фаза має нескінченократно вироджений основний стан, а критична - квадрупольні головні збудження. До того ж, довгий час тривала дискусія щодо існування нематичної фази між феромагнітною та димерною фазами.

З огляду на сказане, в даній роботі увага зосереджується на одновимірних квантових моделях. Конкретніше, досліджуються XXZ модель частинок зі спіном 1/2 (що може бути відображене на модель Бозе-Габбарда) та білінійно-біквадратна модель Гайзенберга (ББГ) частинок зі спіном 1 та однойонною анізотропією (квадратичним ефектом Зеемана). Увага зосереджується на тих властивостях цих вже відомих моделей, які наразі є слабо дослідженими.

Вибір чисельного методу Фазова структура конкретної моделі може бути визначена двома шляхами. Одним із них є визначення властивостей основного стану, а точніше - визначення параметрів порядку, що характеризують основний стан в кожній фазі (як уже згадувалось раніше, кожний фазовий перехід характеризується появою/зникненням певного параметра порядку). Іншим способом є вивчення найнижчої частини енергетичного спектра моделі. Вона є принципово різною в різних фазах (як в скінчених, так і в нескінчених системах), отже, різним є і тип елементарних колективних збуджень.

Який би з вищеназваних способів не використовувався, очевидно, що необхідно з високою точністю визначити певну множину власних станів гамільтоніана моделі. (В більшості випадків це найнижчі стани, однак, наприклад, для дослідження структури запутаності XXZ моделі зі спіном 1/2 можуть знадобитися високі збуджені стани)

Вивляється, що для гамільтоніанів більшості 1D квантових систем рів-

няння Шрьодінгера не може бути розв'язане точно (аналітично). Тому для розрахунків доводиться використовувати наближені методи. Добре відомий наближений метод - теорія збурень - не спрацьовує для сильно корельованих систем через відсутність малого параметра. Отже, необхідно використовувати варіаційні методи, в яких варіаційні параметри розраховуються чисельно.

Незважаючи на простоту багатьох квантових спінових моделей, їхній спектр може бути дуже неочевидним. В свою чергу, власні стани можуть мати складну структуру заплутаності, що одразу позначається на ресурсах, необхідних для розрахунків. З цієї причини для розрахунків потрібно використовувати високоточні і при цьому ресурсно ефективні чисельні методи.

Власні стани досліджуваних квантових моделей, в принципі, необхідно визначати в термодинамічній границі. Однак в переважній більшості випадків є можливість отримати розв'язки для скінченних систем і з високою точністю екстраполювати їх на нескінченність. Окрім того, більшість чисельних алгоритмів для нескінченних систем порушують неперервні симетрії гамільтоніанів (наприклад, $U(1)$ або $SU(2)$ симетрію). Саме тому в даній роботі увага зосереджується на розробці алгоритмів для розрахунку властивостей скінченних 1D квантових систем. В деяких випадках будуть використані наявні алгоритми для нескінченних систем (без жодних вдосконалень).

Зазвичай досліджуються 1D системи з відкритими крайовими умовами (ВКУ), тобто «ланцюги». Але системи з періодичними крайовими умовами (ПКУ), тобто «кільця», дозволяють екстраполяцію до термодинамічної границі для набагато менших систем. Окрім того, кільцеві системи не зазнають впливу крайових ефектів (на кшталт осциляцій Фріделя). Також гамільтоніани з ПКУ можуть мати трансляційну інваріантність (на відміну від ВКУ), що в свою чергу зумовлює трансляційну інваріантність власних станів, яка може бути використана. Тому в даній роботі увага зосереджується на спінових моделях саме з ПКУ (геометрії кільця).

Приблизно 25 років тому потужний метод ренормгрупи матриці густини (РГМГ) [40, 41, 42] був розроблений як високоточний інструмент для чисель-

ного опису одновимірних квантових багаточастинкових систем. Спочатку він дозволив розрахувати характеристики антиферомагнітних спінових ланцюгів Гайзенберга з $S = \frac{1}{2}$ та $S = 1$, використовуючи при цьому набагато менше ресурсів, ніж інші методи типу Монте-Карло, і забезпечуючи набагато вищу точність. Відтоді він був успішно застосований до багатьох систем спінів та сильно корельованих електронів. Метод показав можливість бозе-конденсації в антиферомагнітному ланцюгу в сильному полі [43] та пролив світло на спіновий квантовий ефект Холла в нетрадиційних надпровідниках [44]. Була визначена поведінка оптичної провідності залежно від частоти в різних моделях [45]. Точне моделювання еволюції в часі дозволило дослідження добре контролюваних ультрахолодних атомних систем [46]. Нарешті, метод можливо поширити на 2D системи [47, 48].

Намагаючись пояснити успіх РГМГ, Остлунд та Роммер прийшли до квантових станів у формі так званих матричнодобуткових станів (МДС). Ці стани були на той час більш-менш відомі як скінченно корельовані стани [49], найпростішою формою яких є АКЛТ-стан [50]. Було доведено, що в той час як МДС відображає принципову структуру власних станів, РГМГ точно відслідковує і визначає «важливі» ступені вільності, що описують поведінку системи [51, 52]. Пізніше було строго доведено, що крок РГМГ, в якому блок зростає, еквівалентний почастинковій оптимізації МДС [53]. Тому наразі передові застосування РГМГ використовують формалізм МДС.

МДС є частковим випадком більш загального класу квантових станів, що звуться станами тензорних мереж (ТМ). Підхід ТМ [54, 55] для квантових багаточастинкових систем був розроблений в 2000-і роки вченими, що займаються квантовою інформатикою. Базовою ідеєю ТМ є представлення хвильової функції квантової багаточастинкової системи як мережі з'єднаних між собою тензорів. Відомими прикладами ТМ є PEPS (англ. “projected-entangled pair states”) [56], MERA (англ. “multiscale entanglement renormalization ansatz”) [57], TTN (англ. “tree tensor network”) [58] і т.д. МДС є найпростішим прикладом PEPS, де кожен тензор має 3 виміри.

Піхід ТМ виявився дуже гнучким в різних аспектах: за його допомогою можна вивчати системи в різних розмірностях; скінченного та нескінченного розміру; з різними крайовими умовами, симетріями; системи бозонів, ферміонів та фрустрованих спінів; і т.д. Його успіх в застосуванні до квантових спінових ланцюгів пояснюється так: багато важливих гамільтоніанів є такими, що взаємодії між різними частинками в них є локальними (приміром, між найближчими сусідами, через одну частинку і т.д.). Як наслідок, можна довести, що багато власних станів щілинних гамільтоніанів з локальними взаємодіями задовільняють так зване «правило площ» [59] для ентропії заплутаності (див., наприклад, [60, 61, 62, 63]). «Правило площ» каже, що ентропія заплутаності частини простору пропорційна площі поверхні області, а не об'єму. Аналогічне правило з мультиплікативними та/або адитивними поправками діє для нещілинних гамільтоніанів [64, 65]. Все це означає, що множина власних станів реальних гамільтоніанів є тільки крихітною, експоненційно малою частиною всього гільбертового простору, що може бути охоплена ТМ з резонними розмірами тензорів.

В даній роботі власні стани одновимірних квантових систем представляються як МДС. Донині сформульовано багато алгоритмів з МДС, і в статті [66] поданий досить детальний огляд. Алгоритми з МДС базуються на варіаційному підході при розрахунку станів скінченних систем та уявній еволюції в часі у випадку нескінченних систем. По суті, в алгоритмах для скінченних систем варіаційним методом розв'язується звичайне рівняння Шрьодінгера (єдина відмінність від стандартного варіаційного методу в тому, що параметри варіюються порціями, тобто не всі одразу). З іншого боку, багато алгоритмів для нескінченних систем базуються на уявній еволюції в часі, використовуючи Троттер-розклад [67] оператора еволюції. Вони зазвичай використовують трансляційну інваріантність основних станів моделей (наприклад, трансляційно інваріантний МДС з одночастинковим корегуванням [68] та ПБзЕЧ для МДС [69, 70]).

Спочатку алгоритм РГМГ був розроблений для ВКУ (відповідний МДС

з ВКУ утворюється по ходу розрахунків). Навіть зараз системи з ПКУ часто досліджуються за допомогою МДС з ВКУ, просто додаючи до гамільтоніана один член взаємодії. Однак в даній роботі розрахунки проводитимуться за допомогою МДС, запропонованого Верстрате, Поррасом та Сіраком для ПКУ [71].

Чисельні методи, які необхідно розробити Майже одразу було виявлено, що звичайні розрахунки методом РГМГ для 1D квантових систем вимагають набагато більше ресурсів для ПКУ, ніж для ВКУ [41]. Це зумовлено набагато більшою кількістю заплутаності в системі, яка має бути охоплена в алгоритмі. Окрім того, у випадку ПКУ РГМГ збігається набагато повільніше. Верстрате, Поррас та Сірак (ВПС) дослідили цю проблему і запропонували алгоритм в термінах матричнодобуткових станів для кільцевих систем (вище згаданих МДС з ПКУ), що забезпечує приблизно таку саму точність, що й РГМГ для ВКУ з тим самим розміром МДС m [71]. Цей алгоритм природно урівнює в правах всі частинки, що властиво ПКУ.

Проміжні кроки алгоритму ВПС використовують матриці розміру $m^2 \times m^2$, і час розрахунків в ньому залежить від m як $O(m^5)$, в той час як для ВКУ - як $O(m^3)$. Це питання було розглянуте Піппаном, Вайтом та Евертцом (ПВЕ), які виявили, що для достатньо великих систем можливі набагато швидші розрахунки з використанням розкладу за сингулярними числами (РзСЧ) добутків певних трансферних матриць [72]. Достатньо утримувати досить малу кількість сингулярних чисел для розрахунку таких добутків з хорошою точністю. Корисність вдосконаленого алгоритму була продемонстрована розрахунками основного стану гамільтоніана Гайзенберга зі спіном 1. Автори показали, що для основного стану отримуються точні результати. Россіні та співавтори розвинули це дослідження і виявили, що кількість елементарних операцій в алгоритмі має порядок $O(m^4)$ [73]. Однак всі названі роботи розглядають тільки конкретні спінові моделі, не використовуючи універсальний механізм для розрахунку довільної моделі. Він полягає у введенні в алгоритм так званих матричнодобуткових операторів (МДО) [68].

Як вже згадувалось, ґрунтовний огляд алгоритмів з МДС та їхнього зв’язку з РГМГ поданий в [66] (додаткова процедура для розрахунку збуджених станів описана в [74]). В цьому огляді більшість алгоритмів формулюються безвідносно до симетрій. Однак згідно з теоремою Мерміна-Вагнера-Коулмена неперервна симетрія не може порушуватися в 1D [75, 76]. Тому можна зробити висновок, що 1D гамільтоніани, що вивчаються в роботі, зокрема, $U(1)$ -симетрична XXZ модель зі спіном $1/2$ та $SU(2)$ -симетрична білінійно-біквадратна модель Гайзенберга (ББГ) зі спіном 1, завжди мають відповідно $U(1)$ -та $SU(2)$ -симетричні власні стани. І бажано (як з фізичної, так і з розрахункової точки зору) утворити МДС, який включає $U(1)$ або $SU(2)$ симетрію апріорі, що зумовлено розв’язуваною задачею. В такому разі МДС будуть станами з визначеною проекцією спіну ($U(1)$ симетрія) або повним спіном ($SU(2)$ симетрія).

Цікаво, що $SU(2)$ -симетричні МДС використовувались вже в ранніх статтях Остлунда та Роммера [51, 52] при спробі пояснити успіх РГМГ. Вони усвідомили, що МДС-тензори для кожної частинки розкладаються на структурну частину, що задається симетрією, та вироджену частину. Структурна частина містить коефіцієнт Клебша-Гордана (що зводиться до символу Кронекера у випадку $U(1)$ симетрії), а варіаційні параметри містяться лише в виродженій частині. Таким чином кількість параметрів, які необхідно визначити, сильно зменшується порівняно з алгоритмом без симетрій. Недоліком підходу Остлунда та Роммера було те, що вони використовували глобальну мінімізацію МДС і тому не мали можливості використовувати великі тензори, необхідні в більшості розрахунків.

МакКаллок дослідив практичні аспекти застосування абелевих та неабелевих симетрій до МДС [77]. Зовсім недавно Сінг, Жоу, Пфайфер та Відал представили досить систематичний огляд застосування симетрій для тензорних мереж. В ряді публікацій [78, 79, 80, 81] була описана принципова структура $U(1)$ -та $SU(2)$ -симетричних станів у вигляді тензорних мереж для довільних мереж з тензорів довільного рангу. Наприклад, було показано, що

структурна частина є добутком коефіцієнтів Клебша-Гордана у випадку тензорів великого рангу.

У випадку $U(1)$ симетрії достатньо базового застосування симетрії в тензорній мережі для зменшення кількості незалежних параметрів. Всі тензори в алгоритмі є розрідженими, і ними можна ефективно оперувати відповідним програмним забезпеченням (типу *Mathematica*). Однак у випадку $SU(2)$ симетрії величини, що відповідають різним проекціям спіну, є рівними, і є можливість провести сумування за проекціями спіну. В такому випадку краще повністю виключити структурні тензори і розробити алгоритми в термінах тільки тензорів виродження [53, 82, 83, 77, 84]. Це суттєво зменшить вимоги до розрахункових ресурсів і відповідно дозволить суттєве збільшення точності результатів, що отримуються.

Виключення всіх структурних тензорів з алгоритмів вимагає суттєвих змін в стандартних алгоритмах з ТМ. Відповідні суми за проекціями спіну можна розрахувати прямо, як в [81]. Для цього автори використовують деревовидні розклади (англ. “tree decompositions”) та дерева злиття-розділіття (англ. “fusion-splitting trees”) для представлення симетричних тензорів. В загальному випадку суми відповідних коефіцієнтів, що виникають, можна розрахувати тільки чисельно [85]. Однак МакКаллок зауважив [77], що лінійні схеми, які пов’язують різні деревовидні розклади $SU(2)$ симетричних тензорів МДС/МДО, отриманих в [81], прямо відповідають виразам, які пов’язують різні схеми парування спінів, що показано в [86] та [87] в термінах $6j$ -символів Рака, $9j$ -символів Вігнера або складніших символів. Як наслідок, зручніше виразити суми саме через ці символи.

Запропонований МакКаллоком елегантний шлях оперування $SU(2)$ -симетричними МДС має місце тільки для відкритих крайових умов. В цьому випадку тензор має ранг щонайбільше 4 (МДО), тому вирази у варіаційному алгоритмі набувають досить простого вигляду. При ПКУ тензори мають максимальний ранг 6 («блоки»), і вирази, які необхідно отримати, є нетривіальними. Окрім того, $U(1)$ -симетричний МДС в [77] теж стосується ВКУ,

де різним кінцям системи можна присвоїти різні квантові числа (при ПКУ такий підхід є дещо нефізичним, оскільки система є «закільцьованою»).

Анізотропна XXZ модель частинок зі спіном 1/2 XXZ модель зі спіном 1/2 виглядає як

$$H = \sum_{i=1}^N (s_i^x \otimes s_{i+1}^x + s_i^y \otimes s_{i+1}^y + \Delta s_i^z \otimes s_{i+1}^z) \quad (1)$$

де $N+1 \rightarrow 1$. Спінові оператори s_i^α ($\alpha = x, y, z$) співвідносяться з матрицями Паулі σ_i^α як $s_i^\alpha = \sigma_i^\alpha/2$. Контрольним параметром даної моделі є параметр анізотропії Δ .

Модель є цікавою з кількох причин. По-перше, її можна відобразити на модель Бозе-Габбарда безспінових ферміонів, що описує незгасальні потоки в мезо- та мікроскопічних одновимірних кільцях. По-друге, вона описує поведінку одновимірних магнетиків на основі перехідних металів. По-третє, її можна використати як тестовий майданчик для багатьох чисельних алгоритмів.

XXZ модель є $U(1)$ -симетричною, тобто її гамільтоніан H комутує з z -компонентою $\hat{S}_z = \sum_{i=1}^N \hat{s}_i^z$ повного оператора спіну \hat{S} . Тому власні стани мають чітко визначену проекцію спіну S_z (в даній роботі стани також позначаються намагніченістю на один спін $m_z = \frac{S_z}{N}$). Рівняння для XXZ моделі можуть бути розв'язані за допомогою Бете-анзацу [88, 89, 90, 91, 92, 93] при $\Delta > -1$.

Власні стани моделі з конкретним S_z є одночасно власними станами такої ж моделі у зовнішньому магнітному полі h :

$$H = \sum_{i=1}^N (s_i^x \otimes s_{i+1}^x + s_i^y \otimes s_{i+1}^y + \Delta s_i^z \otimes s_{i+1}^z) + h \sum_{i=1}^N s_i^z, \quad (2)$$

за умови, що

$$h = -\frac{1}{N} \frac{\partial E(m_z, h=0)}{\partial m_z}$$

(деталі наведені в статті [89]). З цієї причини зобразимо фазову діаграму моделі (2) та звернемо увагу, що вона означатиме при $h = 0$.

Фазова діаграма основного стану XXZ моделі зі спіном $1/2$, отримана за допомогою Бете-анзацу, показана на рис. 1. Вона може перебувати в трьох фа-

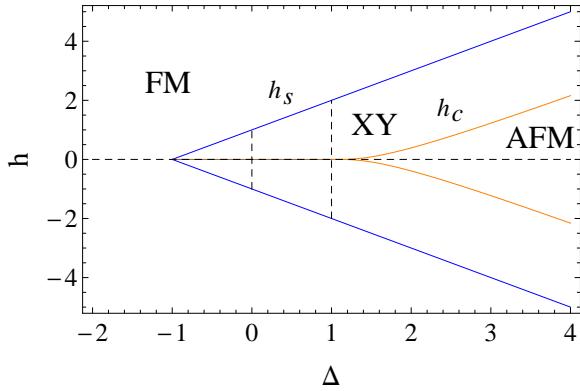


Рис. 1: Фазова діаграма XXZ моделі зі спіном $1/2$ в магнітному полі по осі z . Критична лінія h_s розділяє фазу спінової рідини (XY) та феромагнітну (FM) фазу. Критична лінія h_c розділяє XY-фазу та антиферомагнітну (AFM) фазу. Модель з манітним полем (р-ня (2)) може бути відображеня на модель без поля (р-ня (1)). В даній роботі модель досліджується вздовж штрихованих ліній, покладаючи $h = 0$ і натомість розраховуючи стани з різним m_z . Окрема увага приділяється феромагнітній фазі, де Бете-анзац є незастосовним.

зах: феромагнітній (FM), спіноворідинній (XY) та антиферомагнітній (AFM). Ці три фази розділені двома лініями $h_s = 1 + \Delta$ та h_c , точний вираз для якої отримано в [91], р-ня (8). При $h = 0$ XXZ система зазнає фазового переходу першого порядку при $\Delta = -1$ та фазового переходу нескінченого порядку типу Березінського-Костерлітца-Таулесса (БКТ) [94, 95] в $SU(2)$ -симетричній точці $\Delta = 1$ [96]. Лінія між цими двома точками є критичною лінією, де в спектрі зникає щілина (лінія розмежовує дві різні спіноворідинні фази).

XXZ модель зі спіном $1/2$ добре вивчена в так званих XY та антиферомагнітній фазах, так як може бути розв'язана за допомогою Бете-анзацу для скінчених та нескінчених розмірів системи. Однак Бете-анзац не є застосовним до феромагнітної фази. Можна довести нескінченне виродження основного стану в термодинамічній границі в цій області [88], але мало що відомо про скінченні системи (тільки властивості (повністю поляризованого) основного та першого збудженого стану). Виявляється, що фізика високих збуджених станів в цій області дуже цікава, так як вони проявляють багату та складну структуру заплутаності.

В світлі всього сказаного, в роботі модель вивчається вздовж штрихованих ліній на фазовій діаграмі. Відтворюються вже відомі результати на прямих $\Delta = 0$ і $\Delta = 1$ та повністю вивчається пряма $h = 0$ (що означає $m_z = 0$ при $\Delta > -1$ та довільну m_z при $\Delta \leq -1$).

Білінійно-біквадратна модель Гайзенберга (ББГ) частинок зі спіном 1

Білінійно-біквадратна модель Гайзенберга (ББГ) в кільцевій геометрії виглядає як

$$H = \sum_{i=1}^N [\cos \theta \vec{s}_i \otimes \vec{s}_{i+1} + \sin \theta (\vec{s}_i \otimes \vec{s}_{i+1})^2] \quad (3)$$

де $N + 1 \rightarrow 1$, а $\vec{s}_i \in \text{SU}(2)$ матричними представленнями спіну s : $\vec{s}_i = (s_i^x, s_i^y, s_i^z)$. Контрольним параметром моделі є кут θ . ($\operatorname{tg}\theta$, очевидно, показує співвідношення між силами двох взаємодій)

ББГ модель описує поведінку атомних газів на оптичних ґратках [97, 98, 99, 74] за певних умов. Вона також моделює фізику деяких квазіодновимірних кристалів, приміром, LiVGe_2O_6 [100] або NENP [101]. До того ж, її можна використати як тестовий майданчик для нових алгоритмів з ТМ [102, 103, 104].

Так як $\text{SU}(2)$ симетрія ББГ моделі не може порушуватись в 1D згідно з теоремою Мерміна-Вагнера-Коулмена, власні стани її гамільтоніана можна охарактеризувати квантовим числом повного кутового моменту S . До речі, ББГ модель має $\text{SU}(3)$ симетрію при $\theta = \frac{1}{4}\pi$ і $\theta = -\frac{3}{4}\pi$; а також «ческовану» $\text{SU}(3)$ симетрію ($\text{SU}(3)$ симетрію на подвійній ґратці) при $\theta = \pm\frac{1}{2}\pi$. Це можна перевірити, записавши гамільтоніан в термінах матриць Гелл-Манна (див., приміром, [105]).

Залежно від контрольного параметра θ нескінченна ББГ система зі спіном 1 має багату фазову структуру, зображену на рис. 2 [38]. Коротко обговоримо різні фази, йдучи за годинниковою стрілкою.

При $\frac{\pi}{4} > \theta > -\frac{\pi}{4}$ система знаходиться в щілинній фазі Холдейна з приходженим топологічним порядком [106, 37]. Основний стан має спін $S = 0$ і є невиродженим. Перший збуджений стан є триплетом (спін 1). При $\theta = 0$ модель

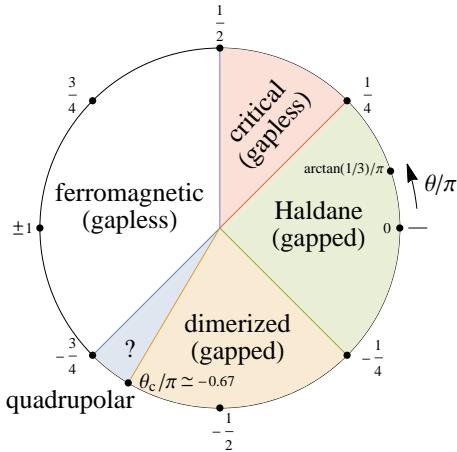


Рис. 2: Фазова діаграма нескінченної білінійно-біквадратної моделі Гайзенберга зі спіном 1. Існування окремої (нематичної) фази при $-0.75 < \theta/\pi \lesssim -0.67$ довгий час було дискусійним питанням і тому досліджується в даній роботі.

відповідає звичайному антиферомагнетику Гайзенберга, а при $\theta = \operatorname{arctg} \frac{1}{3}$ основний стан є АКЛТ станом [50]. При $\theta = -\frac{\pi}{4}$ щілина зникає і відбувається перехід другого порядку до димерної фази [107, 108].

Димерна фаза простягається від $\theta = -\frac{\pi}{4}$ до $\theta = -\frac{3\pi}{4}$. Основний стан є *подвійно виродженим* станом з $S = 0$ з щілиною до збудженого стану, що має спін або 1, або 2 [109]. Цей стан має ненульову димеризацію [110, 111]. При $\theta = -\frac{\pi}{2}$ модель може бути відображенна на XXZ модель зі спіном 1/2, а тому може бути розв'язана за допомогою Бете-анзацу [111, 112]. Ця точка характеризується дуже далекояжними спіновими кореляціями [112] та максимальною заплутаністю між найближчими сусідами.

Згідно з даними статей [113, 114], димерний параметр порядку поводиться нетипово в області $-0.67\pi \gtrsim \theta > -\frac{3\pi}{4}$, а також сильно зростають квадрупольні спінові кореляції. Припущення Чубукова [115], що в цій області існує щілинна нематична фаза, було поставлене під сумнів в [116, 98] і заперечено в [117]. Можливість існування *нешілинної* нематичної фази була заперечена для $\theta \gtrsim -0.7\pi$ в статті [118]. Теоретики схиляються до висновку, що така фаза відсутня в усій області $-\frac{3\pi}{4} < \theta \lesssim -0.7\pi$.

В області $\frac{5\pi}{4} > \theta > \frac{\pi}{2}$ система перебуває в нешілинній феромагнітній фазі з $(2N + 1)$ -кратно виродженим основним станом (N - розмір системи).

Він є нескінченнократно виродженим в термодинамічній границі. В критичній точці $\theta = -\frac{3\pi}{4}$ система має $SU(3)$ симетрію [105], а перехід вважається переходом типу БКТ. За феромагнітною фазою йде нещілинна фаза з домінантними квадрупольними спіновими кореляціями [114, 119] при $\frac{\pi}{2} > \theta > \frac{\pi}{4}$ (однак структура спектра в цій області є слабо досліженою, особливо при ПКУ). В точці Лая-Сазерленда $\theta = \frac{\pi}{4}$ система зазнає фазового переходу типу БКТ [120, 110] до фази Холдейна. В цій точці система має $SU(3)$ симетрію і розв'язується за допомогою Бете-анзацу (див. [121, 109]).

Рівняння Шрьодінгера не може бути розв'язане точно для ББГ моделі зі спіном 1 в загальному випадку (а тільки в деяких точках). Але модель є досить добре вивченою за допомогою теорії поля. І все ж, щонайменше в одній області поведінка системи є не до кінця зрозумілою в термодинамічній границі. Можливість існування нещілинної нематичної фази у вузькому околі точки $\theta = -3\pi/4$ не спростована чисельно через те, що розраховані числа є порівнянними з похибкою чисельних розрахунків в цій області параметра [118, 114]. Саме тому ця область розглядається в даній роботі.

ББГ модель частинок зі спіном 1 та квадратичним ефектом Зеемана Гамільтоніан такої моделі рівний

$$H = \sum_{i=1}^N [(\vec{s}_i \otimes \vec{s}_{i+1}) \cos \theta + (\vec{s}_i \otimes \vec{s}_{i+1})^2 \sin \theta] + D \sum_{i=1}^N (s_i^z)^2 \quad (4)$$

де $s_i^\nu \in SU(2)$ матричними представленнями спіну 1 ($\nu = x, y, z$), а $i = 1, \dots, N$ ($N + 1 \rightarrow 1$).

Як згадувалось раніше, ця модель описує поведінку системи ультрахолодних атомів на оптичній гратці в режимі ізолятора Мотта (однойонна анізотропія виникає з дисперсного співвідношення). Модель має багату фазову структуру, досить повний огляд якої залежно від θ та зееманівського множника D представлений в статтях Родрігес і співавторів [39] та Де К'яри, Левенштайн і Санпери [38]. При $D = 0$ є чотири вище згадані фази, але при $D \neq 0$ система також може перебувати в «велика- D » фазі (при $D > 0$), фазі Нееля (при $D < 0$), XY-феромагнітній (при $D > 0$) та ще одній критичній

(при $D < 0$) фазах.

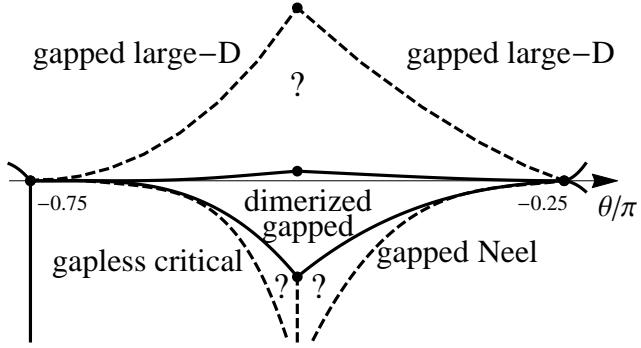


Рис. 3: Якісна фазова діаграма білінійно-біквадратної моделі Гайзенберга зі спіном 1 та квадратичним ефектом Зеемана в області $-3\pi/4 < \theta < -\pi/4$. Області, позначені знаком питання, є областями, щодо належності яких до певних фаз наразі триває дискусія між науковими групами.

Попри якісне узгодження, результати двох груп дуже відрізняються кількісно щодо меж димерної фази (див. рис. 3). В статті [38] отримано, що димерна фаза поширюється від деякого невизначеного поки що $D < -2$ до $D \simeq 0.03$ при $\theta = -\pi/2$. На противагу, автори статті [39] отримали межі димерної фази як $-0.3 \lesssim D \lesssim 0.6$ при цьому самому значенні θ . Варто зауважити, що в цих роботах використовуються досить різні методи: в роботі [39] межі димерної фази визначаються спектроскопією рівнів [122] для досить маліх спінових кілець ($N \leq 16$), а в статті [38] з розрахованого основного стану спінових ланцюгів розміром до $N = 204$ отримується димерний параметр порядку. Розбіжність результатів двох груп була одним з поштовхів для даної роботи.

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 космомікрофізики», номер державної реєстрації в УкраїНТЕІ - 0106U006394. Науковий керівник - д.ф.-м.н., проф. Каденко Ігор Миколайович.

Мета і задачі дослідження. Метою дослідження є вивчення властиво-

стей власних (основного та низки збуджених) станів одновимірних квантових систем в XXZ моделі частинок зі спіном $1/2$ та білінійно-біквадратній 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 заплутаності для власних станів квантової системи в XXZ моделі частинок зі спіном $1/2$ з різними значеннями проекції спіну в феромагнітній фазі (де неможливо провести розрахунки за допомогою Бете-анзацу). Прослідкувати залежність мір заплутаності 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 синг'летом 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 синг'летами та найнижчим синг'летом і найнижчим квінтетом.

Об'єктами дослідження є дві одновимірні квантові моделі: XXZ модель частинок зі спіном $1/2$ 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 заплутаності збуджених станів XXZ моделі зі спіном 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 матричнодобуткових 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 добутків трансферних матриць, що виникають в процесі розрахунків.

Наукова новизна одержаних результатів. Основними науковими результатами, що виносяться на захист, є такі:

1. Отримано межі димерної щілинної фази в ББГ моделі зі спіном 1 в точці $\theta = -\pi/2$: $D^- < D < D^0$, $D^- \simeq -0.3$, $D^0 \simeq 0.025$. 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 контролюального параметра $\theta/\pi = -1/4$ до щонайменше $\theta/\pi = -0.72$. Здобувач схильний заперечити існування окремої фази в околі $SU(3)$ -симетричної точки $\theta = -3\pi/4$.
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 двовимірних та 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 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.

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:

1. У роботі [123] дисертант розробив алгоритм пришвидшеного розрахунку власних станів систем з великою кількості частинок та перевірив його універсальність.

2. У роботі [124] 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.
3. У роботі [125] 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.
4. У роботі [126] дисертант дослідив найнижчий спектр білінійно-біквадратної моделі Гайзенберг'a 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.
5. У роботі [127] дисертант отримав розробленими в попередніх роботах методами найнижчий спектр біквадратної моделі Гайзенберг'a зі спіном 1 за наявності квадратичного ефекту Зеемана та визначив межі димерної фази.

Апробація результатів дисертації. Матеріали дисертації пройшли апробацію на семінарах відділів синергетики та нелінійної фізики конденсованого стану Інституту теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова НАН України (Київ, 2012-2017). Також результати доповідались на наступних конференціях:

- 38th Middle European Cooperation (MECO) in Statistical Physics, Trieste, 2013, Italy.
- Numerical and analytical methods for strongly correlated systems, Benasque, 2014, Spain.

- 79th Annual Meeting of the Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG), Berlin, 2015, Germany.
- 42nd Middle European Cooperation (MECO) in Statistical Physics, Lyon, 2017, France.

Публікації. За матеріалами дисертації опубліковано 8 робіт, 5 із них складають статті в наукових журналах [123, 124, 125, 126, 127], а 3 - у працях конференцій [128, 129, 130].

Структура та об'єм дисертації. Дисертаційна робота складається зі вступу, 3 розділів, висновків, додатка та списку використаних джерел, що містить 157 найменувань. Робота містить 34 рисунки і 14 таблиць. Загальний обсяг роботи становить 182 сторінки.

Дисертаційна робота організована наступним чином. В розділі 1 висвітлюється загальний підхід МДС для періодичних крайових умов. Викладення матеріалу аналогічне до [66], де розглядаються переважно відкриті крайові умови, і вказуються суттєві відмінності між ВКУ та ПКУ. Здобувач вважає це необхідним, оскільки послідовного огляду для ПКУ немає в жодному з наявних джерел. Розділ 2 містить вдосконалення стандартного алгоритму МДС з ПКУ, а саме: використання швидкого спадання сингулярних чисел довгих добутків трансферних матриць та алгоритми оптимізації для $U(1)$ - та $SU(2)$ -симетричних МДС з ПКУ. Фізичні результати представлені в розділі 3. Деякі технічні деталі алгоритмів, відомі алгоритми для нескінчених 1D систем (наприклад, ПБзЕЧ); інформація про міри заплутаності, що вивчаються в даній роботі; та деякі відомі чисельні результати наводяться в додатку А.

РОЗДІЛ 1

ЗАГАЛЬНИЙ ПІДХІД МДС/МДО

ДЛЯ ПЕРІОДИЧНИХ КРАЙОВИХ УМОВ

1.1 Матричнодобуткові стани з відкритими крайовими умовами (МДС з ВКУ)

Системи з відкритими крайовими умовами («ланцюги») не вивчаються в даній роботі. Однак обговорення МДС з ВКУ та способу, в який вони виникають, є важливим для наступних міркувань.

Уявимо собі фізичну систему з N частинок, кожна з яких має d локальних ступенів вільності (приміром, $d = 2s + 1$ для системи частинок зі спіном s). Тоді повний гільбертовий простір системи має d^N базисних станів, і будь-який стан в цьому просторі може бути записаний як суперпозиція

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N=1}^d c_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N} |\sigma_1 \sigma_2 \cdots \sigma_N\rangle \quad (5)$$

де $|\sigma_i\rangle$ є локальними базисами.

Можна обрати ортонормований базис $|a_{N-1}\rangle$ в гільбертовому просторі перших $N - 1$ частинок. Кожен з цих базисних станів є суперпозицією базисних станів $|\sigma_1 \sigma_2 \cdots \sigma_{N-1}\rangle$. І навпаки, кожен базисний стан є суперпозицією станів $|a_{N-1}\rangle$:

$$|\sigma_1 \sigma_2 \cdots \sigma_{N-1}\rangle = \sum_{a_{N-1}} \tilde{c}_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_{N-1}}^{a_{N-1}} |a_{N-1}\rangle. \quad (6)$$

Тоді стан всієї системи N частинок може бути представлений як

$$|\psi\rangle = \sum_{a_{N-1}, \sigma_N} \left(\sum_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_{N-1}} \tilde{c}_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_{N-1}}^{a_{N-1}} c_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N} \right) |a_{N-1} \sigma_N\rangle. \quad (7)$$

Внутрішню суму в дужках можна позначити як $M_{a_{N-1}}^{[N],\sigma_N}$. Спеціально введемо німий індекс $a_N = 1$ і позначимо суму як $M_{a_{N-1},1}^{[N],\sigma_N}$. Тоді

$$|\psi\rangle = \sum_{a_{N-1},\sigma_N} M_{a_{N-1},1}^{[N],\sigma_N} |a_{N-1}\sigma_N\rangle. \quad (8)$$

Можна рекурсивно представити всі стани ортонормованого базису $|a_{N-1}\rangle$ підсистеми перших $N-1$ частинок як функції станів ортонормованого базису підсистеми перших $N-2$ частинок. Аналогічно до попереднього рівняння

$$|a_{N-1}\rangle = \sum_{a_{N-2},\sigma_{N-1}} M_{a_{N-2},a_{N-1}}^{[N-1],\sigma_{N-1}} |a_{N-2}\sigma_{N-1}\rangle. \quad (9)$$

Зауважимо, що M тепер має 3 нетривіальні індекси. Це пояснюється тим, що стан $|\psi\rangle$, який треба отримати, єдиний, а кількість станів підсистеми $|a_{N-1}\rangle$, з яких можна утворити $|\psi\rangle$, вже більша за 1. Тепер хвильову функцію можна переписати як

$$|\psi\rangle = \sum_{a_{N-2},a_{N-1},\sigma_{N-1},\sigma_N} M_{a_{N-2},a_{N-1}}^{[N-1],\sigma_{N-1}} M_{a_{N-1},1}^{[N],\sigma_N} |a_{N-2}\sigma_{N-1}\sigma_N\rangle. \quad (10)$$

Таку рекурсію можна продовжувати. Наприклад, коли залишається тільки ліва частинка $i = 1$,

$$|\psi\rangle = \sum_{a_1,\dots,a_{N-1}} \sum_{\sigma_2,\dots,\sigma_N} M_{a_1,a_2}^{[2],\sigma_2} \cdots M_{a_{N-1},1}^{[N],\sigma_N} |a_1\sigma_2\dots\sigma_N\rangle. \quad (11)$$

Ортонормований базис $|a_1\rangle$ представляє підсистему, що містить лише один спін $i = 1$. Отже, цей базис може бути представлений як суперпозиція базисних станів: $|a_1\rangle = \sum_{\sigma_1} M_{a_1}^{[1],\sigma_1} |\sigma_1\rangle$. Німий індекс $a_0 = 1$ в M -коєфіцієнтах вводиться спеціально: $M_{1,a_1}^{[1],\sigma_1}$. Тоді

$$|\psi\rangle = \sum_{a_1,\dots,a_{N-1}} \sum_{\sigma_1,\sigma_2,\dots,\sigma_N} M_{1,a_1}^{[1],\sigma_1} M_{a_1,a_2}^{\sigma_2} \cdots M_{a_{N-1},1}^{\sigma_N} |\sigma_1\sigma_2\dots\sigma_N\rangle. \quad (12)$$

Це, як бачимо, така сама форма, як і (5), де

$$c_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N} = \sum_{a_1, \dots, a_{N-1}} M_{1, a_1}^{[1], \sigma_1} M_{a_1, a_2}^{[2], \sigma_2} \dots M_{a_{N-1}, 1}^{[N], \sigma_N} = \sum_{\substack{a_0=a_N=1 \\ a_1, \dots, a_{N-1}}} M_{a_0, a_1}^{[1], \sigma_1} M_{a_1, a_2}^{[2], \sigma_2} \dots M_{a_{N-1}, a_N}^{[N], \sigma_N}. \quad (13)$$

Тобто поки що ми просто переписали коефіцієнти розкладу $c_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N}$ в іншому вигляді.

Як бачимо, кожен множник $M^{[i]}$ для частинки i має три нетривіальні індекси: $M_{a_{i-1}, a_i}^{[i], \sigma_i}$. Отже, його можна уявити як елемент тензора 3-го рангу. Як наслідок, для конкретного значення σ_i $M_{a_{i-1}, a_i}^{[i], \sigma_i}$ є елементом тензора 2-го рангу (тобто матриці). Можна означити матриці $M^{[i], \sigma_i}$ (на кожній частинці d таких матриць). Тоді

$$c_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N} = M^{[1], \sigma_1} M^{[2], \sigma_2} \dots M^{[N], \sigma_N} \quad (14)$$

що є просто матричним добутком M -матриць з відповідними значеннями σ_i на відповідних частинках i . З цієї причини цей анзац звється «матрично-добутковий стан». σ_i є фізичними (спіновими) індексами, тоді як індекси a_i звуться віртуальними (матричними) індексами.

Хвильова функція може бути тоді записана як

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N} M^{[1], \sigma_1} M^{[2], \sigma_2} \dots M^{[N], \sigma_N} |\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_N\rangle, \quad (15)$$

або, враховуючи, що лівий індекс матриці M^{σ_1} та правий індекс матриці M^{σ_N} є німими, а тому матричний добуток дає матрицю розміру 1×1 ,

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N} \text{Tr}(M^{[1], \sigma_1} M^{[2], \sigma_2} \dots M^{[N], \sigma_N}) |\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_N\rangle. \quad (16)$$

Ми вже переконалися, що в загальному випадку проміжні базиси $|a_{i-1}\rangle$ та $|a_i\rangle$, що з'являються в процесі цієї «процедури побудови», пов'язані через

локальний тензор МДС:

$$|a_i\rangle = \sum_{a_{i-1}, \sigma_i} M_{a_{i-1}, a_i}^{[i], \sigma_i} |a_{i-1} \sigma_i\rangle. \quad (17)$$

Умова ортонормальності одночасно $|a_{i-1}\rangle$ та $|a_i\rangle$ ($\langle a_{i-1}|a'_{i-1}\rangle = \delta_{a_{i-1}, a'_{i-1}}$ та $\langle a_i|a'_i\rangle = \delta_{a_i, a'_i}$) дає цікаву властивість M -тензора:

$$\sum_{a_{i-1}, \sigma_i} M_{a_{i-1}, a_i}^{[i], \sigma_i*} M_{a_{i-1}, a'_i}^{[i], \sigma_i} = \delta_{a_i, a'_i} \quad (18)$$

або просто

$$\sum_{\sigma_i} M^{[i], \sigma_i\dagger} M^{[i], \sigma_i} = \mathbb{1}. \quad (19)$$

Звісно, описаний вище «розклад» c -коєфіцієнтів можна також починати не з останньої, а з першої частинки. Тоді $|a_i\rangle$ буде ортонормованим базисом частинок після i , а $|a_{i-1}\rangle$ визначатиметься з $|a_i\rangle$ як

$$|a_{i-1}\rangle = \sum_{a_i, \sigma_i} M_{a_{i-1}, a_i}^{[i], \sigma_i} |\sigma_i a_i\rangle. \quad (20)$$

Умова ортонормованості накладає наступну умову на M -тензор:

$$\sum_{\sigma_i} M^{[i], \sigma_i} M^{[i], \sigma_i\dagger} = \mathbb{1}. \quad (21)$$

Описані дві процедури є нічим іншим, як побудовою на ходу «важливих» базисів системи шляхом послідовного додавання до системи ще одної частинки, рухаючись зліва ($|a_2\rangle = \sum_{a_1, \sigma_2} M_{a_1, a_2}^{[2], \sigma_2} |a_1 \sigma_2\rangle$, $|a_3\rangle = \sum_{a_2, \sigma_3} M_{a_2, a_3}^{[3], \sigma_3} |a_2 \sigma_3\rangle$, ...) або справа ($|a_{N-2}\rangle = \sum_{\sigma_{N-1}, a_{N-1}} M_{a_{N-2}, a_{N-1}}^{[N-1], \sigma_{N-1}} |\sigma_{N-1} a_{N-1}\rangle$, $|a_{N-3}\rangle = \sum_{\sigma_{N-2}, a_{N-2}} M_{a_{N-3}, a_{N-2}}^{[N-2], \sigma_{N-2}} |\sigma_{N-2} a_{N-2}\rangle$, ...). Процедура починяється з однієї частинки: $|a_1\rangle = \sum_{\sigma_1} M_{1, a_1}^{[1], \sigma_1} |\sigma_1\rangle$ або $|a_{N-1}\rangle = \sum_{\sigma_N} M_{a_{N-1}, 1}^{[N], \sigma_N} |\sigma_N\rangle$, і можна уявити, що вона починяється взагалі з тривіального (з одного стану) базису $|a_0\rangle = |a_N\rangle = (1)$: $|a_1\rangle = \sum_{a_0=1, \sigma_1} M_{1, a_1}^{[1], \sigma_1} |a_0 \sigma_1\rangle$ або $|a_{N-1}\rangle = \sum_{\sigma_N, a_N=1} M_{a_{N-1}, 1}^{[N], \sigma_N} |\sigma_N a_N\rangle$.

Щодо оптимізаційного алгоритму, то в ньому взагалі-то базис $|a_{i-1}\rangle$ зліва від поточної частинки i утворюється побудовою від лівого краю рухом

вправо, а базис $|a_i\rangle$ справа від поточної частинки i утворюється побудовою від правого краю рухом вліво. Тому всі локальні тензори МДС для частинок від 1 до $i - 1$ мають властивість (19), а всі локальні тензори МДС для частинок від $i + 1$ до N мають властивість (21). Ці властивості в подальшому зватимуться лівим та правим нормуванням (англ. “left-normalization” та “right-normalization”). Цікаво, що якщо тензор МДС на поточній частинці i є ліво- або право-нормованим, хвильова функція є нормованою: $\langle\psi|\psi\rangle = 1$.

Якщо почати утворювати базиси з першої частинки, то (до певного моменту) кількість станів в $|a_i\rangle$ зростає як d^i : 1 для $|a_0\rangle$, d для $|a_1\rangle$, d^2 для $|a_2\rangle$, і т.д. Це очевидно з поданих вище рівнянь для $|a_i\rangle$. Таким чином, розміри матриць МДС рівні: $1 \times d$ на спіні 1, $d \times d^2$ на спіні 2, і т.д.

Однак далі кількість станів кожого наступного базису зменшується. Можна це зрозуміти, почавши утворювати стани від правого краю: тоді до певного номера частинки кількість станів зростає як d^{N-i} : 1 для $|a_N\rangle$, d для $|a_{N-1}\rangle$, d^2 для $|a_{N-2}\rangle$, і т.д. Таким чином, розміри матриць МДС рівні: $d \times 1$ на спіні N , $d^2 \times d$ на спіні $N - 1$, і т.д.

Враховуючи умову, що кількість станів має бути рівною, можна отримати номер частинки, де кількість проміжних базисних станів найбільша: $N/2$ для парних N і $(N + 1)/2$ для непарних N . Найбільші розміри матриць МДС рівні: $d^{N/2-1} \times d^{N/2}$ на спіні $i = N/2$ або $d^{N/2} \times d^{N/2-1}$ на спіні $i = N/2 + 1$, і $d^{(N-1)/2} \times d^{(N-1)/2}$ на спіні $i = (N + 1)/2$ відповідно.

Цікаво, що кількість незалежних параметрів в усій множині МДС-тензорів дорівнює $d^N - 1$, як і в звичайному представленні хвильової функції (умова нормування $\langle\psi|\psi\rangle$ зменшує кількість незалежних параметрів на 1). Це можна легко перевірити. При парному N є всього $d^2 + d^4 + \dots + d^N + d^N + \dots + d^4 + d^2$ параметрів, а ліві (праві) нормування на всіх частинках накладають разом $d^2 + d^4 + \dots + d^N + d^{N-2} + \dots + d^2 + 1$ умов. При непарному N є всього $d^2 + d^4 + \dots + d^{N-1} + d^N + d^{N-1} + \dots + d^4 + d^2$ параметрів, а кількість умов дорівнює $d^2 + d^4 + \dots + d^{N-1} + d^{N-1} + d^{N-2} + \dots + d^2 + 1$. Таким чином, якщо ми не змінили кількість незалежних параметрів, які не-

обхідно визначити, представлення стану в формі МДС є просто канонічним перетворенням.

Цікаво те, що якщо проміжні базиси $|a_i\rangle$ посередині ланцюга (де кількість базисних станів найбільша) обираються «розумно», тільки малий відсоток цих станів є фізично важливими. Отже, на певному етапі можна почати скорочувати кількість базисних станів, які утворюються додаванням нової частинки до попереднього базису. Тобто якщо d^i (чи d^{N-i}) починає перевищувати задане число m , з цього базису утримуються тільки m станів. В такому випадку розміри матриць на кожній частинці будуть: $1 \times d$, $d \times d^2$, ..., $d^{i_{\text{crit}}} \times m$, $m \times m$, ..., $m \times m$, $m \times d^{i_{\text{crit}}}$, ..., $d^2 \times d$, $d \times 1$.

На практиці така процедура означає, що базисні стани $|a_i\rangle$ є ортонормованими, але вже не утворюють повного набору: $\sum_{a_i} |a_i\rangle\langle a_i| = \text{diag}(1, 1, \dots, 1, 0, \dots, 0)$.

1.2 Матричнодобуткові стани з періодичними крайовими умовами (МДС з ПКУ)

Як ми пригадуємо, будь-який фізичний стан спінової системи може бути записаний як

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N=1}^d c_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N} |\sigma_1 \sigma_2 \cdots \sigma_N\rangle. \quad (22)$$

Тут $\{c_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N}\}$ - множина коефіцієнтів, що мають задовільнити умову нормування $\sum_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N=1}^d |c_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N}|^2 = 1$.

Запишемо хвильову функцію системи з ПКУ аналогічно до хвильової функції системи з ВКУ (див р-ня (16)):

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N=1}^d \text{Tr}(M^{[1], \sigma_1} M^{[2], \sigma_2} \cdots M^{[N], \sigma_N}) |\sigma_1 \sigma_2 \cdots \sigma_N\rangle \quad (23)$$

або

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N=1}^d \sum_{a_1, a_2, \dots, a_N=1}^m M_{a_N, a_1}^{[1], \sigma_1} M_{a_1, a_2}^{[2], \sigma_2} \cdots M_{a_{N-1}, a_N}^{[N], \sigma_N} |\sigma_1 \sigma_2 \cdots \sigma_N\rangle, \quad (24)$$

де d - розмірність гільбертового простору одного спіну i .

Принциповою різницею між ПКУ та ВКУ є те, що слід (сума за віртуальним індексом $a_0 = a_N$) не є тривіальним при ПКУ. Натомість всі індекси стають рівноправними, забезпечуючи таким чином ПКУ.

Кожний локальний тензор $M^{[i]}$ є тепер множиною d матриць розміру $m \times m$ ($M^{[i],\sigma_i}$ є відповідною матрицею цієї множини). Таким чином, кількість варіаційних параметрів, що представляють стан системи, рівна Ndm^2 . Очевидно, що якщо $Ndm^2 \approx d^N$, стан представлений *точно*. Метою алгоритму є представити стан великої системи за допомогою досить помірного m , використовуючи «правило площ». Кожен тензор $M^{[i]}$ буде в такому випадку оператором проектування, що не дозволяє гільбертовому простору системи розростатись при додаванні нових спінів.

Можна уявити графічне представлення $M^{[i]}$, як показано на рис. 4. З-вимірний тензор $M^{[i]}$ має фізичний (спіновий) індекс σ_i (вертикальна лінія на рисунку) і два матричні індекси a_{i-1}, a_i (горизонтальні лінії). Лівий матричний індекс частинки i завжди дорівнює правому матричному індексу по-передньої частинки $i-1$. Для розрахунку спостережуваних величин також потрібні комплексно спряжені тензори $M^{[i]*}$. Відповідне графічне представлення показане на рис. 5.

Сумування за індексами a_1, a_2, \dots, a_{N-1} - це множення відповідних матриць, в той час як сумування за a_N є взяттям сліду. Сумування за індексами можна уявити як з'єднання ліній, що відповідають цим індексам, але різним частинкам. Тоді МДС з ПКУ можна представити графічно так, як показано на рис. 6. Індекси $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N$ залишаються відкритими і представляють стани $|\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_N\rangle = |\vec{\sigma}\rangle$.

1.3 Канонічний вигляд та перекалібрування МДС

Ми вже довели, що за ВКУ умову нормування ($\langle \psi | \psi \rangle = 1$) [66] для МДС легко задовольнити, якщо стан ліво-канонічний:

$$\sum_{\sigma_i} M^{[i],\sigma_i\dagger} M^{[i],\sigma_i} = \mathbb{1} \quad (25)$$

або право-канонічний:

$$\sum_{\sigma_i} M^{[i],\sigma_i} M^{[i],\sigma_i\dagger} = \mathbb{1}. \quad (26)$$

У скінчених системах з ПКУ $\langle \psi | \psi \rangle \neq 1$ ні для ліво-, ні для право-канонічного МДС (для нескінчених систем зазвичай використовується праве нормування і воно забезпечує $\langle \psi | \psi \rangle = 1$). Однак матриці МДС потрібно перекалібровувати після кожного кроку оптимізаційної процедури, щоб алгоритм залишався стабільним [72]. На відміну від ВКУ, де ліве (праве) нормування є необхідним, при ПКУ перекалібрування МДС можна здійснювати багатьма способами, якщо алгоритм залишається чисельно стабільним. Однак в даній роботі (для спрощення) використовуються ті самі умови нормування, що й для ВКУ. Необхідно розрахувати норму $|\psi\rangle$ і поділити на неї перший тензор $M^{[1]}$, щоб зробити стан *справді* нормованим.

Звести МДС до канонічного вигляду можна за допомогою РзСЧ матриці Q (див. Додаток А) або за допомогою QR-розкладу відповідним чином вирівняного МДС-тензора [66]: відповідно $\Psi_{(a_{i-1}\sigma_i),a_i} = M_{a_{i-1},a_i}^{\sigma_i}$ або $\Psi_{a_{i-1},(\sigma_i a_i)} = M_{a_{i-1},a_i}^{\sigma_i}$. Розраховується матриця X , і матриці МДС $M^{[i],\sigma_i}$ множаться на неї справа або зліва, так що задовільняється умова лівого або правого нормування. Матриці $M^{[i\pm 1],\sigma_{i\pm 1}}$ відповідно множаться на X^{-1} .

1.4 Матричнодобуткові оператори (МДО)

Будь-який гамільтоніан можна записати аналогічно до МДС, використовуючи добутки матриць, розташованих на кожній частинці системи. Єдиною різницею є два типи відкритих індексів. Такі оператори звуться матричнодобутковими операторами (МДО) [66]:

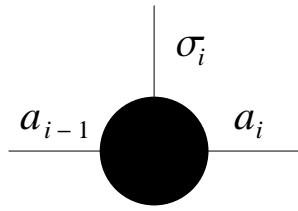


Рис. 4: Графічне представлення локального тензора МДС $M^{[i]}$. Вертикальна лінія відповідає фізичному (спіновому) індексу, а горизонтальні лінії - віртуальним (матричним) індексам.

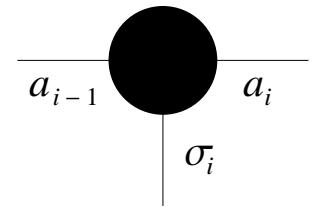


Рис. 5: Графічне представлення комплексно спряженого локального тензора МДС $M^{[i]*}$. Вертикальна лінія відповідає фізичному (спіновому) індексу, а горизонтальні лінії - віртуальним (матричним) індексам.



Рис. 6: Графічне представлення всього МДС. Проводиться сумування за матричними індексами (що еквівалентно множенню матриць). Це можна уявити як з'єднання горизонтальних ліній, що відповідають одним і тим самим матричним (віртуальним) індексам. Фізичні (спінові) індекси залишаються відкритими.

$$H = \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N=1}^d \sum_{\sigma'_1, \sigma'_2, \dots, \sigma'_N=1}^d \text{Tr}(W^{[1], \sigma_1, \sigma'_1} W^{[2], \sigma_2, \sigma'_2} \dots W^{[N], \sigma_N, \sigma'_N}) | \sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_N \rangle \langle \sigma'_1 \sigma'_2 \dots \sigma'_N |. \quad (27)$$

Тут $W^{[i], \sigma_i, \sigma'_i}$ - матриці розміру $m_W \times m_W$. m_W залежить від конкретного гамільтоніана і для взаємодій короткої дії є порівняно малим. Конкретні приклади $W^{[i], \sigma_i, \sigma'_i}$ наведені в розділі 1.5.

$W^{[i]}$ очевидно є тензором 4-го рангу з двома фізичними (спіновими) індексами та двома віртуальними (матричними) індексами. Тому можна уявити його графічне представлення, як показано на рис. 7. Спінові індекси σ_i, σ'_i

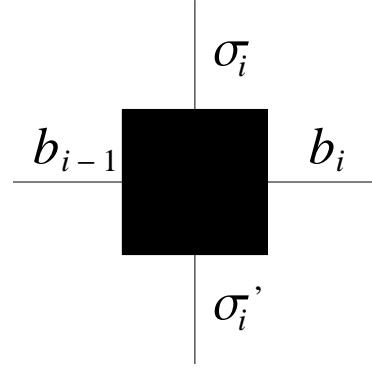


Рис. 7: Графічне представлення локального тензора МДО $W^{[i]}$. Вертикальні лінії відповідають фізичним (спіновим) індексам, а горизонтальні - віртуальним (матричним) індексам.

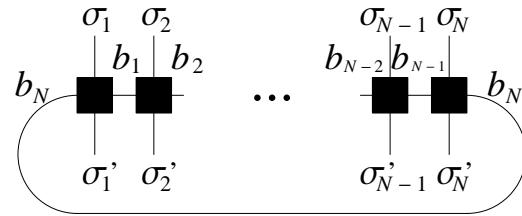


Рис. 8: Графічне представлення всього МДО. Проводиться сумування за матричними індексами (що еквівалентно множенню матриць). Це можна уявити як з'єднання горизонтальних ліній, що відповідають одним і тим самим матричним індексам. Дві множини фізичних (спінових) індексів залишаються відкритими.

відповідають вертикальним лініям, матричні b_{i-1}, b_i - горизонтальним.

В розгорнутій формі (27) виглядає як

$$H = \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N=1}^d \sum_{\sigma'_1, \sigma'_2, \dots, \sigma'_N=1}^d \sum_{b_1, b_2, \dots, b_N=1}^m W_{b_N, b_1}^{[1], \sigma_1, \sigma'_1} W_{b_1, b_2}^{[2], \sigma_2, \sigma'_2} \dots W_{b_{N-1}, b_N}^{[N], \sigma_N, \sigma'_N} |\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_N \rangle \langle \sigma'_1 \sigma'_2 \dots \sigma'_N|. \quad (28)$$

Таким чином, графічне представлення МДО можна уявити аналогічно до МДС, як показно на рис. 8. Тут індекси $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N, \sigma'_1, \sigma'_2, \dots, \sigma'_N$ залишаються відкритими і представляють оператори $|\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_N \rangle \langle \sigma'_1 \sigma'_2 \dots \sigma'_N| =$

$|\vec{\sigma}\rangle\langle\vec{\sigma}'|$.

1.5 Конкретні гамільтоніани та їхні МДО

Позначимо матричні $SU(2)$ представлення локального спіну як s_i^x, s_i^y, s_i^z .

Для систем частинок зі спіном $1/2$ це просто матриці Паулі, поділені на 2: $s_i^\alpha = \frac{\sigma_i^\alpha}{2}$, де $\alpha = x, y, z$.

Прикладами спінових гамільтоніанів є:

1. $U(1)$ симетрична XXZ модель $H = \sum_{i=1}^N (s_i^x \otimes s_{i+1}^x + s_i^y \otimes s_{i+1}^y + \Delta s_i^z \otimes s_{i+1}^z)$.

В роботі досліджується тільки XXZ модель зі спіном $1/2$. Частковим випадком XXZ моделі є $SU(2)$ -симетрична модель Гайзенберга ($\Delta = 1$).

2. $SU(2)$ симетрична білінійно-біквадратна модель Гайзенберга (ББГ) $H = \sum_{i=1}^N [\cos \theta (\vec{s}_i \otimes \vec{s}_{i+1}) + \sin \theta (\vec{s}_i \otimes \vec{s}_{i+1})^2]$ (де $\vec{s}_i = (s_i^x, s_i^y, s_i^z)$). В роботі досліджується тільки ББГ модель зі спіном 1. Модель Гайзенберга зі спіном 1 є частковим випадком ББГ моделі зі спіном 1 при $\theta = 0$.

Тут $N + 1 \rightarrow 1$ в $\sum_{i=1}^N$, що забезпечує ПКУ.

Відповідні матриці, що використовуються в представленні МДО, дорівнюють, приміром

$$W^{[1]} = \begin{pmatrix} 0 & s_1^x & s_1^y & \Delta s_1^z & \mathbb{1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & s_1^x \\ 0 & 0 & 0 & 0 & s_1^y \\ 0 & 0 & 0 & 0 & s_1^z \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad W^{[i]} = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ s_i^x & 0 & 0 & 0 & 0 \\ s_i^y & 0 & 0 & 0 & 0 \\ s_i^z & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & s_i^x & s_i^y & \Delta s_i^z & \mathbb{1} \end{pmatrix} \quad (i = 2, \dots, N). \quad (29)$$

для XXZ моделі з будь-яким спіном. МДО для ББГ моделі не подається тут через великий розмір.

В загальному випадку МДО є розрідженими блочними матрицями розміру $m_W \times m_W$. $m_W = 5$ для XXZ моделі та $m_W = 14$ для ББГ моделі. Їхні блоки є, очевидно, матрицями розміру $d \times d$: $W_{b_{i-1}, b_i}^{[i]} = 0, \mathbb{1}, s^x, s^y, s^z$ ($b_{i-1}, b_i = 1, \dots, m_W$).

Необхідні для (27) матриці W^{σ_i, σ'_i} отримуються так: $(W^{[i], \sigma_i, \sigma'_i})_{b_{i-1}, b_i} = (W^{[i]}_{b_{i-1}, b_i})_{\sigma_i, \sigma'_i}$. Можна помітити, що

$$W^{[i]} = \sum_{\sigma_i, \sigma'_i} W^{[i], \sigma_i, \sigma'_i} \otimes (|\sigma_i\rangle\langle\sigma'_i|). \quad (30)$$

Тоді можна довести, що (див. (27))

$$\begin{aligned} H = \sum_{\vec{\sigma}, \vec{\sigma}'} \text{Tr}(W^{[1], \sigma_1, \sigma'_1} W^{[2], \sigma_2, \sigma'_2} \dots W^{[N], \sigma_N, \sigma'_N}) [(&|\sigma_1\rangle\langle\sigma'_1|) \otimes (&|\sigma_2\rangle\langle\sigma'_2|) \otimes \dots \\ &\dots \otimes (&|\sigma_N\rangle\langle\sigma'_N|)] = \text{Tr}[W^{[1]} \bullet W^{[2]} \bullet \dots \bullet W^{[N]}] \end{aligned} \quad (31)$$

(тепер матриці множаться/слід береться поблоково).

1.6 Ітеративний пошук основного стану

Завдання - мінімізувати енергію

$$E = \langle\psi|H|\psi\rangle \quad (32)$$

за умови

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1. \quad (33)$$

Це звичайна задача на умовний екстремум. Тому можна ввести множник Лагранжа ϵ і мінімізувати лагранжіан

$$\mathbb{L} = \langle\psi|H|\psi\rangle - \epsilon\langle\psi|\psi\rangle. \quad (34)$$

Одержана $|\psi\rangle$ буде потрібною нам хвильовою функцією, а ϵ - енергією основного стану. Якщо бути точним, лагранжіан повинен містити доданок $\epsilon(1 - \langle\psi|\psi\rangle)$, але константу ϵ можна відкинути.

В загальному випадку потрібно варіювати всі елементи тензорів МДС (їх всього Ndm^2). Мінімізація лагранжіана зрештою (гарантовано) приведе до основного стану. Однак головною ідеєю алгоритму з МДС є варіювання не всього набору параметрів, а тільки множини, що відповідає поточному спінну i . Лагранжіан мінімізується відносно елементів $M_{a_{i-1}, a_i}^{[i], \sigma_i*}$ (їх dm^2) під час

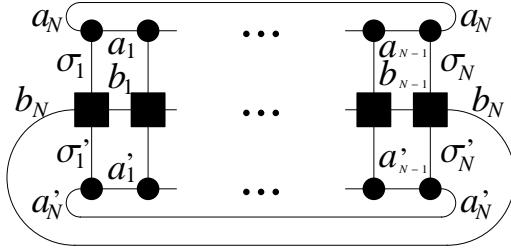


Рис. 9: Графічне представлення виразу $\langle\psi|H|\psi\rangle$.

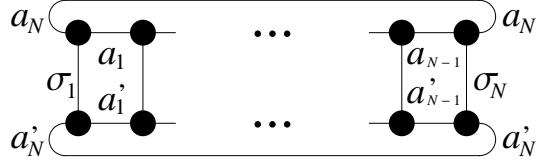


Рис. 10: Графічне представлення виразу $\langle\psi|\psi\rangle$.

кожного кроку ітерації, рухаючись від спіну до спіну. Число ϵ зрештою збігається до енергії основного стану E . Однак необхідно пам'ятати одну річ: *немає* математичного доведення, що така процедура справді дає основний стан (тобто попри підтвердження правильності алгоритму численними розрахунками, строгого доведення на разі немає).

Запишемо (34) в розгорнутій формі. Перший член дорівнює

$$\begin{aligned}
 \langle\psi|H|\psi\rangle &= \sum_{\vec{\sigma}, \vec{\sigma}'} \sum_{\substack{b_1, \dots, b_N \\ a_1, \dots, a_N \\ a'_1, \dots, a'_N}} M_{a_N, a_1}^{[1], \sigma_1*} \dots M_{a_{N-1}, a_N}^{[N], \sigma_N*} W_{b_N, b_1}^{[1], \sigma_1, \sigma'_1} \dots W_{b_{N-1}, b_N}^{[N], \sigma_N, \sigma'_N} M_{a'_N, a'_1}^{[1], \sigma'_1} \dots M_{a'_{N-1}, a'_N}^{[N], \sigma'_N} = \\
 &= \sum_{\substack{a_{i-1}, a_i \\ a'_{i-1}, a'_i \\ b_{i-1}, b_i}} (\sum_{\sigma_i, \sigma'_i} M_{a_{i-1}, a_i}^{[i], \sigma_i*} W_{b_{i-1}, b_i}^{[i], \sigma_i, \sigma'_i} M_{a'_{i-1}, a'_i}^{[i], \sigma'_i}) \times \sum_{\substack{a_{i+1}, \dots, a_{i-2} \\ a'_{i+1}, \dots, a'_{i-2} \\ b_{i+1}, \dots, b_{i-2}}} \\
 &\quad [\sum_{\sigma_{i+1}, \sigma'_{i+1}} M_{a_i, a_{i+1}}^{[i+1], \sigma_{i+1}*} W_{b_i, b_{i+1}}^{[i+1], \sigma_{i+1}, \sigma'_{i+1}} M_{a'_i, a'_{i+1}}^{[i+1], \sigma'_{i+1}}] \dots [\sum_{\sigma_N, \sigma'_N} M_{a_{N-1}, a_N}^{[N], \sigma_N*} W_{b_{N-1}, b_N}^{[N], \sigma_N, \sigma'_N} M_{a'_{N-1}, a'_N}^{[N], \sigma'_N}] \times \\
 &\quad \times [(\sum_{\sigma_1, \sigma'_1} M_{a_N, a_1}^{[1], \sigma_1*} W_{b_N, b_1}^{[1], \sigma_1, \sigma'_1} M_{a'_N, a'_1}^{[1], \sigma'_1}) \dots (\sum_{\sigma_{i-1}, \sigma'_{i-1}} M_{a_{i-2}, a_{i-1}}^{[i-1], \sigma_{i-1}*} W_{b_{i-2}, b_{i-1}}^{[i-1], \sigma_{i-1}, \sigma'_{i-1}} M_{a'_{i-2}, a'_{i-1}}^{[i-1], \sigma'_{i-1}})].
 \end{aligned}$$

Можна ввести матриці $H_R^{[i]}$ і $H_L^{[i]}$ такі, що

$$(H_R^{[i]})_{(b_i a_i a'_i), (b_N a_N a'_N)} = \sum_{\substack{a_{i+1}, \dots, a_{N-1} \\ a'_{i+1}, \dots, a'_{N-1} \\ b_{i+1}, \dots, b_{N-1}}} \left(\sum_{\sigma_{i+1}, \sigma'_{i+1}} M_{a_i, a_{i+1}}^{[i+1], \sigma_{i+1}*} W_{b_i, b_{i+1}}^{[i+1], \sigma_{i+1}, \sigma'_{i+1}} M_{a'_i, a'_{i+1}}^{[i+1], \sigma'_{i+1}} \right) \times \dots \times \left(\sum_{\sigma_N, \sigma'_N} M_{a_{N-1}, a_N}^{[N], \sigma_N*} W_{b_{N-1}, b_N}^{[N], \sigma_N, \sigma'_N} M_{a'_{N-1}, a'_N}^{[N], \sigma'_N} \right), \quad (35)$$

$$(H_L^{[i]})_{(b_N a_N a'_N), (b_{i-1} a_{i-1} a'_{i-1})} = \sum_{\substack{a_1, \dots, a_{l-2} \\ a'_1, \dots, a'_{i-2} \\ b_1, \dots, b_{i-2}}} \left[\left(\sum_{\sigma_1, \sigma'_1} M_{a_N, a_1}^{[1], \sigma_1*} W_{b_N, b_1}^{[1], \sigma_1, \sigma'_1} M_{a'_N, a'_1}^{[1], \sigma'_1} \right) \times \dots \times \left(\sum_{\sigma_{i-1}, \sigma'_{i-1}} M_{a_{i-2}, a_{i-1}}^{[i-1], \sigma_{i-1}*} W_{b_{i-2}, b_{i-1}}^{[i-1], \sigma_{i-1}, \sigma'_{i-1}} M_{a'_{i-2}, a'_{i-1}}^{[i-1], \sigma'_{i-1}} \right) \right]. \quad (36)$$

Тоді

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \sum_{\substack{a_{i-1}, a_i \\ a'_{i-1}, a'_i \\ b_{i-1}, b_i}} \left(\sum_{\sigma_i, \sigma'_i} M_{a_{i-1}, a_i}^{[i], \sigma_i*} W_{b_{i-1}, b_i}^{[i], \sigma_i, \sigma'_i} M_{a'_{i-1}, a'_i}^{[i], \sigma'_i} \right) \times \sum_{b_N, a_N, a'_N} (H_R^{[i]})_{(b_i a_i a'_i), (b_N a_N a'_N)} (H_L^{[i]})_{(b_N a_N a'_N), (b_{i-1} a_{i-1} a'_{i-1})}. \quad (37)$$

Аналогічно

$$\langle \psi | \psi \rangle = \sum_{\substack{a_{i-1}, a_i \\ a'_{i-1}, a'_i}} \left(\sum_{\sigma_i, \sigma'_i} M_{a_{i-1}, a_i}^{[i], \sigma_i*} M_{a'_{i-1}, a'_i}^{[i], \sigma'_i} \delta_{\sigma_i, \sigma'_i} \right) \sum_{a_N, a'_N} (N_R^{[i]})_{(a_i a'_i), (a_N a'_N)} (N_L^{[i]})_{(a_N a'_N), (a_{i-1} a'_{i-1})} \quad (38)$$

де матричні елементи $N_R^{[i]}$ і $N_L^{[i]}$ дорівнюють

$$(N_R^{[i]})_{(a_i a'_i), (a_N a'_N)} = \sum_{\substack{a_{i+1}, \dots, a_{N-1} \\ a'_{i+1}, \dots, a'_{N-1}}} \left(\sum_{\sigma_{i+1}} M_{a_i, a_{i+1}}^{[i+1], \sigma_{i+1}*} M_{a'_i, a'_{i+1}}^{[i+1], \sigma_{i+1}} \right) \dots \left(\sum_{\sigma_N} M_{a_{N-1}, a_N}^{[N], \sigma_N*} M_{a'_{N-1}, a'_N}^{[N], \sigma_N} \right) \quad (39)$$

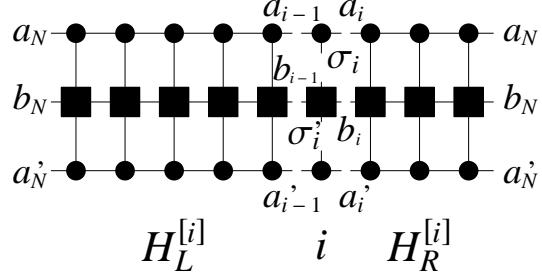


Рис. 11: Графічна схема для обчислення матриць $H_L^{[i]}$ і $H_R^{[i]}$.

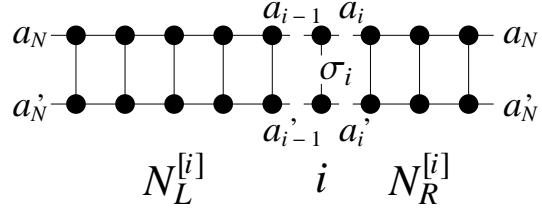


Рис. 12: Графічна схема для обчислення матриць $N_L^{[i]}$ і $N_R^{[i]}$.

та

$$(N_L^{[i]})_{(a_N a'_N), (a_{i-1} a'_{i-1})} = \sum_{\substack{a_1, \dots, a_{i-2} \\ a'_1, \dots, a'_{i-2}}} (\sum_{\sigma_1} M_{a_N, a_1}^{[1], \sigma_1 *} M_{a'_N, a'_1}^{[1], \sigma_1}) \dots (\sum_{\sigma_{i-1}} M_{a_{i-2}, a_{i-1}}^{[i-1], \sigma_{i-1} *} M_{a'_{i-2}, a'_{i-1}}^{[i-1], \sigma_{i-1}}). \quad (40)$$

Таким чином,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbb{L}}{\partial M_{a_{i-1}, a_i}^{[i], \sigma_i *}} &= \sum_{\sigma'_i, a'_{i-1}, a'_i} \sum_{b_{i-1}, b_i} \left(\sum_{b_N, a_N, a'_N} (H_R^{[i]})_{(b_i a_i a'_i), (b_N a_N a'_N)} (H_L^{[i]})_{(b_N a_N a'_N), (b_{i-1} a_{i-1} a'_{i-1})} \right) \times \\ &\times W_{b_{i-1}, b_i}^{[i], \sigma_i, \sigma'_i} M_{a'_{i-1}, a'_i}^{[i], \sigma'_i} - \epsilon \sum_{\sigma'_i, a'_{i-1}, a'_i} \left(\sum_{a_N, a'_N} (N_R^{[i]})_{(a_i a'_i), (a_N a'_N)} (N_L^{[i]})_{(a_N a'_N), (a_{i-1} a'_{i-1})} \right) \delta_{\sigma_i, \sigma'_i} M_{a'_{i-1}, a'_i}^{[i], \sigma'_i} = 0. \end{aligned} \quad (41)$$

Маємо dm^2 таких рівнянь, кожне для конкретного $M_{a_{i-1}, a_i}^{[i], \sigma_i *}$.

Можна ввести матриці $H_{\text{eff}}^{[i]}$ і $N_{\text{eff}}^{[i]}$ такі, що

$$(H_{\text{eff}}^{[i]})_{(\sigma_i a_{i-1} a_i), (\sigma'_i a'_{i-1} a'_i)} = \sum_{b_{i-1}, b_i} \sum_{b_N, a_N, a'_N} W_{b_{i-1}, b_i}^{[i], \sigma_i, \sigma'_i} (H_R^{[i]})_{(b_i a_i a'_i), (b_N a_N a'_N)} \times \\ \times (H_L^{[i]})_{(b_N a_N a'_N), (b_{i-1} a_{i-1} a'_{i-1})}, \quad (42)$$

$$(N_{\text{eff}}^{[i]})_{(\sigma_i a_{i-1} a_i), (\sigma'_i a'_{i-1} a'_i)} = \sum_{a_N, a'_N} \delta_{\sigma_i, \sigma'_i} (N_R^{[i]})_{(a_i a'_i), (a_N a'_N)} (N_L^{[i]})_{(a_N a'_N), (a_{i-1} a'_{i-1})} \quad (43)$$

і вишикувати елементи $M_{a'_{i-1}, a'_i}^{[i], \sigma'_i}$ у вектор $\vec{\nu}^{[i]}$ довжини dm^2 . Тоді

$$\sum_{\sigma'_i, a'_{i-1}, a'_i} (H_{\text{eff}}^{[i]})_{(\sigma_i a_{i-1} a_i), (\sigma'_i a'_{i-1} a'_i)} \nu_{\sigma'_i a'_{i-1} a'_i}^{[i]} = \epsilon \sum_{\sigma'_i, a'_{i-1}, a'_i} (N_{\text{eff}}^{[i]})_{(\sigma_i a_{i-1} a_i), (\sigma'_i a'_{i-1} a'_i)} \nu_{\sigma'_i a'_{i-1} a'_i}^{[i]} \quad (44)$$

або просто $(H_{\text{eff}}^{[i]} \vec{\nu}^{[i]})_{(\sigma_i a_{i-1} a_i)} = \epsilon (N_{\text{eff}}^{[i]} \vec{\nu}^{[i]})_{(\sigma_i a_{i-1} a_i)}$.

Отже, отримується узагальнена задача на власні значення:

$$H_{\text{eff}}^{[i]} \vec{\nu}^{[i]} = \epsilon N_{\text{eff}}^{[i]} \vec{\nu}^{[i]}. \quad (45)$$

1.7 Ітеративний пошук збудженого стану

Якщо необхідно розрахувати котрийсь із збуджених станів системи, цей стан має бути ортогональним до всіх n_s нижчих станів, отриманих раніше [131].

Ідея полягає тому, щоб спроектувати рівняння $H_{\text{eff}}^{[i]} \vec{\nu}^{[i]} = \epsilon N_{\text{eff}}^{[i]} \vec{\nu}^{[i]}$ на такий підпростір, що результатуючий отриманий стан буде ортогональним до всіх нижчих станів. В такому випадку необхідно буде розв'язати задачу на власні значення

$$(P^{[i]} H_{\text{eff}}^{[i]} P^{[i]\dagger}) (P^{[i]} \vec{\nu}^{[i]}) = \epsilon (P^{[i]} N_{\text{eff}}^{[i]} P^{[i]\dagger}) (P^{[i]} \vec{\nu}^{[i]}). \quad (46)$$

Припускається, що множина найнижчих станів вже отримана в формі

МДС:

$$|\psi^{(k)}\rangle = \sum_{\vec{\sigma}} \text{Tr}(\Phi_k^{[1],\sigma_1} \Phi_k^{[2],\sigma_2} \dots \Phi_k^{[N],\sigma_N}) |\vec{\sigma}\rangle, \quad (47)$$

де k пробігає значення від 0 до $n_s - 1$.

Стан, який потрібно отримати

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N} \text{Tr}(M^{[1],\sigma_1} M^{[2],\sigma_2} \dots M^{[N],\sigma_N}) |\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_N\rangle \quad (48)$$

має бути таким, що $\langle \psi | \psi^{(k)} \rangle = 0$ для будь-якого k . Отже,

$$\begin{aligned} & \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N} \text{Tr}(M^{[1],\sigma_1*} M^{[2],\sigma_2*} \dots M^{[N],\sigma_N*}) \cdot \text{Tr}(\Phi_k^{[1],\sigma_1} \Phi_k^{[2],\sigma_2} \dots \Phi_k^{[N],\sigma_N}) = \\ &= \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N} \text{Tr}[(M^{[1],\sigma_1*} \otimes \Phi_k^{[1],\sigma_1})(M^{[2],\sigma_2*} \otimes \Phi_k^{[2],\sigma_2}) \dots (M^{\sigma_N*} \otimes \Phi_k^{[N],\sigma_N})] = \\ &= \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N} \sum_{\substack{a_1, a_2, \dots, a_N \\ a'_1, a'_2, \dots, a'_N}} [(M^{[1],\sigma_1*}(\Phi_k^{[1]})_{a'_N, a'_1}^{\sigma_1})(M^{[2],\sigma_2*}(\Phi_k^{[2]})_{a'_1, a'_2}^{\sigma_2}) \dots \\ & \quad \dots (M^{[N],\sigma_N*}(\Phi_k^{[N]})_{a'_{N-1}, a'_N}^{\sigma_N})] = 0. \end{aligned}$$

Перепишемо рівняння відносно поточного спіну i та введемо для кожного k так звані «перекриття» O_L та O_R , матричні елементи яких

$$\begin{aligned} (O_{L,k}^{[i]})_{(a_N a'_N), (a_{i-1} a'_{i-1})} &= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_{i-1}} \sum_{\substack{a_1, \dots, a_{i-2} \\ a'_1, \dots, a'_{i-2}}} (M^{[1],\sigma_1*}(\Phi_k^{[1]})_{a'_N, a'_1}^{\sigma_1}) \dots \\ & \quad \dots (M^{[i-1],\sigma_{i-1}*}(\Phi_k^{[i-1]})_{a'_{i-2}, a'_{i-1}}^{\sigma_{i-1}}) \quad (49) \end{aligned}$$

та

$$\begin{aligned} (O_{R,k}^{[i]})_{(a_i a'_i), (a_N a'_N)} &= \sum_{\sigma_{i+1}, \dots, \sigma_N} \sum_{\substack{a_{i+1}, \dots, a_N \\ a'_{i+1}, \dots, a'_N}} (M^{[i+1],\sigma_{i+1}*}(\Phi_k^{[i+1]})_{a'_i, a'_{i+1}}^{\sigma_{i+1}}) \dots \\ & \quad \dots (M^{[N],\sigma_N*}(\Phi_k^{[N]})_{a'_{N-1}, a'_N}^{\sigma_N}). \quad (50) \end{aligned}$$

Після прямих викладок можна отримати

$$\sum_{\sigma_i, a_{i-1}, a_i} M_{a_{i-1}, a_i}^{[i], \sigma_i*} \left(\sum_{a'_{i-1}, a'_i} \sum_{a_N, a'_N} (O_{R,k}^{[i]})_{(a_i a'_i), (a_N a'_N)} (O_{L,k}^{[i]})_{(a_N a'_N), (a_{i-1} a'_{i-1})} (\Phi_k^{[i]})_{a'_{i-1}, a'_i}^{\sigma_i} \right) = 0. \quad (51)$$

Пригадуємо, що тензор $M^{[i]}$, який необхідно оптимізувати, перебудовується у вектор $\vec{\nu}^{[i]}$: $\nu_{(\sigma_i a_i a_{i-1})}^{[i]} = M_{a_{i-1}, a_i}^{[i], \sigma_i}$. Вже наявна множина тензорів $\Phi_k^{[i], \sigma_i}$ перебудована аналогічно у вектори $\vec{\phi}_k^{[i]}$. Тоді (51) можна переписати як

$$\sum_{\sigma_i, a_{i-1}, a_i} \nu_{(\sigma_i a_i a_{i-1})}^{[i]*} \left(\sum_{a'_{i-1}, a'_i} \sum_{a_N, a'_N} (O_{R,k}^{[i]})_{(a_i a'_i), (a_N a'_N)} (O_{L,k}^{[i]})_{(a_N a'_N), (a_{i-1} a'_{i-1})} (\phi_k^{[i]})_{(\sigma_i a'_i a'_{i-1})} \right) = 0. \quad (52)$$

або просто

$$\vec{\nu}^{[i]\dagger} \vec{y}_k^{[i]} = 0, \quad (53)$$

де y -вектор розраховується як

$$(y_k^{[i]})_{(\sigma_i a'_i a'_{i-1})} = \sum_{a'_{i-1}, a'_i} \sum_{a_N, a'_N} (O_{R,k}^{[i]})_{(a_i a'_i), (a_N a'_N)} (O_{L,k}^{[i]})_{(a_N a'_N), (a_{i-1} a'_{i-1})} (\phi_k^{[i]})_{(\sigma_i a'_i a'_{i-1})}. \quad (54)$$

Отже, проектор $P^{[i]}$ є просто підпростором, ортогональним до всіх векторів $y_k^{[i]}$, де k пробігає значення від 0 до $n_s - 1$. Він отримується звичайною процедурою ортогоналізації.

1.8 Утворення матриць для задачі на власні значення

Потрібно визначити конкретний вигляд H_{eff} та N_{eff} .

$$\begin{aligned}
H_{\text{eff}}^{[i]} &= \sum_{\substack{\sigma_i, a_{i-1}, a_i \\ \sigma'_i, a'_{i-1}, a'_i}} (H_{\text{eff}}^{[i]})_{(\sigma_i a_{i-1} a_i), (\sigma'_i a'_{i-1} a'_i)} |\sigma_i a_{i-1} a_i\rangle \langle \sigma'_i a'_{i-1} a'_i| = \sum_{\substack{a_{i-1}, a_i \\ a'_{i-1}, a'_i}} \sum_{b_{i-1}, b_i} \sum_{\sigma_i, \sigma'_i} \\
&[\sum_{b_N, a_N, a'_N} W_{b_{i-1}, b_i}^{[i], \sigma_i \sigma'_i} (H_R^{[i]})_{(b_i a_i a'_i), (b_N a_N a'_N)} (H_L^{[i]})_{(b_N a_N a'_N), (b_{i-1} a_{i-1} a'_{i-1})}] (|\sigma_i\rangle \langle \sigma'_i|) \otimes (|a_{i-1} a_i\rangle \langle a'_{i-1} a'_i|) \\
&= \sum_{b_{i-1}, b_i} (\sum_{\sigma_i, \sigma'_i} W_{b_{i-1}, b_i}^{[i], \sigma_i \sigma'_i} |\sigma_i\rangle \langle \sigma'_i|) \otimes (\sum_{\substack{a_{i-1}, a_i \\ a'_{i-1}, a'_i}} (H_R^{[i]} \cdot H_L^{[i]})_{(b_i a_i a'_i), (b_{i-1} a_{i-1} a'_{i-1})} |a_{i-1} a_i\rangle \langle a'_{i-1} a'_i|).
\end{aligned} \tag{55}$$

$\sum_{\sigma_i, \sigma'_i} W_{b_{i-1}, b_i}^{[i], \sigma_i \sigma'_i} |\sigma_i\rangle \langle \sigma'_i| = W_{b_{i-1}, b_i}^{[i]}$. Щодо другого множника, $H_R^{[i]} \cdot H_L^{[i]}$ є блочною матрицею $m_W \times m_W$ з блоків розміру $m^2 \times m^2$. Отже, $(H_R^{[i]} \cdot H_L^{[i]})_{(b_i a_i a'_i), (b_{i-1} a_{i-1} a'_{i-1})} = ((H_R^{[i]} \cdot H_L^{[i]})_{b_i, b_{i-1}})_{(a_i a'_i), (a_{i-1} a'_{i-1})}$.

$$(H_R^{[i]} \cdot H_L^{[i]})_{b_i, b_{i-1}} = \sum_{a_{i-1}, a_i, a'_{i-1}, a'_i} ((H_R^{[i]} \cdot H_L^{[i]})_{b_i, b_{i-1}})_{(a_i a'_i), (a_{i-1} a'_{i-1})} |a_i a'_i\rangle \langle a_{i-1} a'_{i-1}|. \tag{56}$$

Це точно дорівнюватиме другому множнику (55), якщо:

1. a'_i і a_{i-1} поміняються ролями,
2. Ліві та праві індекси поміняються ролями.

Тоді

1.

$$H_{\text{eff}}^{[i]} = \sum_{b_{i-1}, b_i} W_{b_{i-1}, b_i}^{[i]} \otimes (\widetilde{(H_R^{[i]} \cdot H_L^{[i]})}_{b_i, b_{i-1}}) \tag{57}$$

де $\tilde{X}_{(ij),(kl)} = X_{(ik),(jl)}$,

2. Елементи $M_{a'_{i-1}, a'_i}^{[i], \sigma'_i}$ будуть вишикувані у вектор так, що $\nu_{(\sigma'_i a'_i a'_{i-1})}^{[i]} = M_{a'_{i-1}, a'_i}^{[i], \sigma'_i}$.

Аналогічно можна отримати

$$N_{\text{eff}}^{[i]} = \mathbb{1} \otimes (\widetilde{N_R^{[i]} \cdot N_L^{[i]}}), \tag{58}$$

та y -вектори для проектора $P^{[i]}$:

$$\vec{y}_k^{[i]} = (\widetilde{O_{R,k}^{[i]} \cdot O_{L,k}^{[i]}}) \vec{\phi}_k^{[i]} \quad (59)$$

де $(\phi_k^{[i]})_{(\sigma'_i a'_i a'_{i-1})} = (\Phi_k^{[i]})_{a'_{i-1}, a'_i}^{\sigma'_i}$.

1.9 Трансферні матриці

Для зручності вводиться так звана трансферна матриця [72]

$$E_{O_i}^{[i]}(A, B) = \sum_{\sigma_i, \sigma'_i} O_i^{\sigma_i, \sigma'_i} A^{[i], \sigma_i*} \otimes B^{[i], \sigma'_i} \quad (60)$$

$O_i^{\sigma_i, \sigma'_i}$ є $d \times d$ оператором з МДО (він може дорівнювати 0, $\mathbb{1}$, s_i^x, s_i^y, s_i^z і т.д.). A та B є локальними тензорами МДС (вони можуть відповідати різним МДС).

Часто буває зручно ввести так звані узагальнені трансферні матриці [131]

$$E_W^{[i]}(A, B) = \sum_{\sigma_i, \sigma'_i} W^{[i], \sigma_i, \sigma'_i} \otimes A^{[i], \sigma_i*} \otimes B^{[i], \sigma'_i}. \quad (61)$$

Можна помітити, що цей оператор є $m_W \times m_W$ матрицею операторів $E_{W_{b_{i-1}, b_i}^{[i]}}^{[i]}$ розміру $m^2 \times m^2$. Наприклад, для моделі Гайзенберга на частинках $i = 2, \dots, N$

$$E_W^{[i]} = \begin{pmatrix} E_1^{[i]} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ E_{s_i^x}^{[i]} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ E_{s_i^y}^{[i]} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ E_{s_i^z}^{[i]} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_{s_i^x}^{[i]} & E_{s_i^y}^{[i]} & E_{s_i^z}^{[i]} & E_1^{[i]} \end{pmatrix}. \quad (62)$$

Також можна помітити, що вираз $\sum_{\sigma_i, \sigma'_i} M_{a_{i-1}, a_i}^{[i], \sigma_i*} W_{b_{i-1}, b_i}^{[i], \sigma_i, \sigma'_i} M_{a'_{i-1}, a'_i}^{[i], \sigma'_i}$, що зустрічається при розрахунку спостережуваного значення оператора, дорівнює $(b_{i-1} a_{i-1} a'_{i-1}), (b_i a_i a'_i)$ -ому елементу $E_W^{[i]}(M, M)$. Спеціальна трансферна матриця $E_1^{[i]}(M, M)$ відповідатиме виразу $\sum_{\sigma_i, \sigma'_i} M_{a_{i-1}, a_i}^{[i], \sigma_i*} \delta_{\sigma_i, \sigma'_i} M_{a'_{i-1}, a'_i}^{[i], \sigma'_i}$.

Таким чином, порівнюючи (39)–(40) з (60) та (35)–(36) з (61), можна отримати оператори, необхідні для утворення задачі на власні значення:

$$H_L^{[i]} = E_W^{[1]}(M, M) \cdots E_W^{[i-1]}(M, M); \quad (63)$$

$$H_R^{[i]} = E_W^{[i+1]}(M, M) \cdots E_W^{[N]}(M, M). \quad (64)$$

$$N_L^{[i]} = E_1^{[1]}(M, M) \cdots E_1^{[i-1]}(M, M); \quad (65)$$

$$N_R^{[i]} = E_1^{[i+1]}(M, M) \cdots E_1^{[N]}(M, M); \quad (66)$$

$$O_{L,k}^{[i]} = E_1^{[1]}(M, \Phi_k) \cdots E_1^{[i-1]}(M, \Phi_k); \quad (67)$$

$$O_{R,k}^{[i]} = E_1^{[i+1]}(M, \Phi_k) \cdots E_1^{[N]}(M, \Phi_k); \quad (68)$$

Тут W позначає МДО гамільтоніана H .

Вказані оператори можна розрахувати ітеративно «на ходу» під час процедури оптимізації. Для отримання оператора для частинки i відповідний оператор для частинки $i \pm 1$ необхідно помножити на відповідний трансферний оператор для частинки i .

Можна довести, що спостережуване значення оператора O може також бути розраховане з добутку трансферних матриць:

$$\langle \psi | O | \psi \rangle = \text{Tr}(E_{W_O}^{[1]}(M, M) \cdots E_{W_O}^{[N]}(M, M)) \quad (69)$$

де W_O є представленням МДО оператора O .

1.10 Процедура оптимізації

Повний алгоритм оптимізації виглядає наступним чином:

- Стартувати з деякого початкового стану $|\psi\rangle$, що є право-канонічним для частинок від 2 до N . Нормувати $|\psi\rangle$.

- Ітеративно обчислити всі R -вирази $H_R^{[i]}$ та $N_R^{[i]}$ (для збуджених станів також $O_{R,k}^{[i]}$ для всіх k) для всіх частинок від $N - 1$ до 1. Це робиться шляхом послідовного множення їх зліва на матриці відповідно $E_W^{[i]}(M, M)$ та $E_1^{[i]}(M, M)$ (або $E_1^{[i]}(M, \Phi_k)$).
- *Правий прохід*: починаючи від частинки $i = 1$ до частинки $N - 1$, іти граткою вправо наступним чином. Розв'язати задачу на власні значення для $M^{[i]}$, взявши поточне значення як початкове наближення. Після отримання розв'язку ліво-нормувати $M^{[i]}$ та відповідно перекалібрувати $M^{[i+1]}$ (це буде початкове наближення для наступного кроку). «Корегувати» (англ. “update”) L -вирази $H_L^{[i]}$ та $N_L^{[i]}$ (для збуджених станів також $O_{L,k}^{[i]}$), додавши поточну частинку (тобто помноживши їх справа на матриці відповідно $E_W^{[i]}(M, M)$ та $E_1^{[i]}(M, M)$ або $E_1^{[i]}(M, \Phi_k)$). Перейти на частинку вперед ($i \rightarrow i + 1$) і повторити пункт знову.
- *Лівий прохід*: починаючи від частинки $i = N$ до частинки 2, іти граткою вліво наступним чином. Розв'язати задачу на власні значення для $M^{[i]}$, взявши поточне значення як початкове наближення. Після отримання розв'язку право-нормувати $M^{[i]}$ та відповідно перекалібрувати $M^{[i-1]}$ (це буде початкове наближення для наступного кроку). «Корегувати» R -вирази $H_R^{[i]}$ та $N_R^{[i]}$ (для збуджених станів також $O_{L,k}^{[i]}$), додавши поточну частинку (тобто помноживши їх зліва на матриці відповідно $E_W^{[i]}(M, M)$ та $E_1^{[i]}(M, M)$ або $E_1^{[i]}(M, \Phi_k)$). Перейти на частинку назад ($i \rightarrow i - 1$) і повторити пункт знову.
- Повторювати лівий та правий проходи, поки не буде досягнуто збіжності результату. Отриманий МДС є власним станом, а значення ϵ дає енергію цього стану.

1.11 Необхідний для розрахунків час

Оцінимо кількість елементарних операцій, необхідних для стандартного алгоритму з ПКУ. Очевидно, що найбільшого часу потребують корегування

блоків та утворення задачі на власні значення. Вони потребують множення матриць розміру $m^2 \times m^2$. Інші процедури, як-от: перекалібрування МДС чи ортогоналізація y -векторів, є досить швидкими.

Пряме множення $m^2 \times m^2$ матриць зробить кількість необхідних операцій на одну ітерацію (що включає один розв'язок задачі на власні значення + 2 або 3 корегування блоків) порядку $O(m^6)$. Однак цей шлях не є найефективнішим. Покажемо, як кількість операцій може бути зменшена до $O(m^5)$.

Задачу на власні значення можна розв'язувати не прямо, а методом, що використовує матрично-векторне множення (відповідними добутками в цьому випадку є $H_{\text{eff}}^{[i]} \vec{\nu}^{[i]}$ та $N_{\text{eff}}^{[i]} \vec{\nu}^{[i]}$), наприклад, методом Арнольді. Водночас корегування блоків може бути здійснене без прямого розрахунку трансферних матриць. Достатньо розглянути кількість операцій для N -тензорів, так як доведення для H - та O -тензорів буде аналогічним. Варто також зауважити, що злиття, розділення та зміна порядку індексів в тензорах є досить швидкими операціями в сучасних програмних пакетах, тому єдиною громіздкою процедурою є *сумування за індексами* (згортка).

Можна взяти до уваги специфічну форму $N_{\text{eff}}^{[i]}$: вона містить «тильдовий» добуток матриць $N_R^{[i]}$ and $N_L^{[i]}$ розміру $m^2 \times m^2$, що є нічим іншим, як згорткою межових індексів a_N та a'_N (див. Рис. 12). Множення цього «тильдового» добутку на вектор $\vec{\nu}^{[i]}$ можна уявити як згортку індексів a'_{i-1} та a'_i . Можна спочатку згорнути a'_{i-1} , утворивши таким чином збільшений тензор з $\vec{\nu}^{[i]}$ та $N_L^{[i]}$. А тоді згорнути цей збільшений тензор з $N_R^{[i]}$ (одночасно згортуючи 3 індекси: a'_i , a_N та a'_N). Кількість операцій справді дорівнюватиме $O(m^3 \cdot m \cdot dm) + O(dm \cdot m^3 \cdot m) = O(m^5)$.

Корегування блока можна здійснити, використовуючи таку саму ідею. Блок необхідно згортати почергово з кожним тензором, що входить в кронекерівський добуток в означенні трансферної матриці. Наприклад, під час правого проходу для N -блоків (див. Рис. 12) індекс a_{i-1} можна згорнути першим, утворюючи таким чином збільшений тензор з $M^{[i]*}$ та $N_L^{[i]}$. А тоді цей збільшений тензор згортается з $M^{[i]}$ (одночасно згортуючи 2 індекси: σ_i та a'_{i-1}).

Загальна кількість необхідних операцій $O(m^3 \cdot m \cdot dm) + O(m^3 \cdot dm \cdot m) = O(m^5)$.

1.12 U(1) та SU(2) симетрія: походження секторів симетрії в МДС

U(1) симетрія спінового гамільтоніана означає, що він комутує з оператором повної проекції спіну системи: $[\hat{H}, \hat{S}_z] = 0$. SU(2) симетрія означає, що, окрім попередньої умови, гамільтоніан також комутує з оператором повного спіну системи: $[\hat{H}, \hat{\vec{S}}^2] = 0$. Тобто оператори \hat{H} і \hat{S}_z (U(1) симетрія) або \hat{H} , \hat{S}_z і $\hat{\vec{S}}^2$ (SU(2) симетрія) мають однакову множину власних функцій (станів). Інакше кажучи, кожен стан U(1)-симетричного гамільтоніана має чітко визначену повну проекцію спіну S_z , а кожен стан SU(2)-симетричного гамільтоніана має чітко визначений повний спін S та чітко визначену повну проекцію спіну S_z . Звісно, SU(2)-симетричний гамільтоніан є частковим випадком U(1)-симетричного (так як група U(1) є підгрупою групи SU(2)).

Згідно з теоремою Мерміна-Вагнера-Коулмена неперервна симетрія не може порушуватись в нескінченій одновимірній квантовій системі. Отже, власні стани U(1)- та SU(2)-симетричних гамільтоніанів в термодинамічній границі все одно матимуть відповідно U(1)- та SU(2)-симетричні власні стани.

Ми вже переконалися, що хвильова функція $|\psi\rangle$ утворюється ітеративно, починаючи з одного кінця системи, шляхом послідовного додавання ще однієї частинки. Під час цієї процедури отримуються проміжні базиси $|a_i\rangle$. Так як $|\psi\rangle$ має чітко визначену проекцію спіну S_z або повний спін S , логічно утворювати базисні стани проміжних базисів $|a_i\rangle$ також як стани з визначеними проекціями спіну чи повними спінами. Додавання ще однієї частинки ($i+1$ при русі зліва направо та i при русі справа наліво) спричинить: 1) додавання/віднімання від проекції спіну стану $|a_i\rangle$ проекції спіну додаткової частинки у випадку U(1) симетрії; 2) додавання (за правилом додавання спінів) повного спіну стану $|a_i\rangle$ і спіну додаткової частинки у випадку SU(2) симетрії.

Для наочності продемонструємо сказане на прикладі системи частинок

зі спіном $1/2$ ($d = 2$). Будуватимемо стани $|a_i\rangle$, починаючи з лівого краю системи. Спершу розглянемо $U(1)$ симетрію.

1-ий спін (тобто базис $|a_1\rangle$) містить 2 (або d) проекцій спіну: $-\frac{1}{2}$ і $\frac{1}{2}$. Базис $|a_2\rangle$ містить всі можливі комбінації проекцій спіну $|a_1\rangle$ і базису $|\sigma_2\rangle$ 2-го спіну (що є також $-\frac{1}{2}$ і $\frac{1}{2}$). Отже, отримуємо проекції спіну $-1, 0, 0, 1$ (загалом $d^2 = 2^2 = 4$).

Додаємо 3-ій спін і отримуємо базис $|a_3\rangle$. Він містить всі можливі комбінації проекцій спіну $|a_2\rangle$ і базису $|\sigma_3\rangle$ 3-го спіну (знов $-\frac{1}{2}$ і $\frac{1}{2}$). Отримуємо $-\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$. Упорядкувавши їх за зростанням, маємо $-\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$ (всього $d^3 = 2^3 = 8$).

Цю процедуру можна продовжувати. Помічаємо, що кожен проміжний базис $|a_i\rangle$ містить певну множину проекцій спіну, які, однак, зазвичай є виродженими. А загальна кількість станів в $|a_i\rangle$ залишається такою ж, як і без врахування симетрії (що не дивно). Таким чином, кожен індекс a_i в МДС-матрицях може бути розкладений на певну проекцію спіну m_i та певне число t_i в рамках її кратності виродження: $a_i = \{m_i, t_i\}$.

Тепер розглянемо $SU(2)$ симетрію. Тут додаються повні спіни. Наприклад, 1-ий спін (тобто базис $|a_1\rangle$) містить тільки один спін $\frac{1}{2}$ (з $2 \cdot \frac{1}{2} + 1 = 2$ станів). Базис $|a_2\rangle$ містить всі можливі комбінації спінів $|a_1\rangle$ та спіну базису $|\sigma_2\rangle$ 2-го спіну (що також рівний $\frac{1}{2}$). Отримуємо спіни 0 і 1 (кількість станів рівна $(2 \cdot 0 + 1) + (2 \cdot 1 + 1) = 2^2 = 4$).

Додаємо 3-ій спін і отримуємо базис $|a_3\rangle$. Він містить всі можливі комбінації віртуальних спінів $|a_2\rangle$ і спіну базису $|\sigma_3\rangle$ 3-го спіну (знов $\frac{1}{2}$). Отримуємо $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$ (кількість станів рівна $(2 \cdot \frac{1}{2} + 1) + (2 \cdot \frac{1}{2} + 1) + (2 \cdot \frac{3}{2} + 1) = 2^3 = 8$).

І знов: цю процедуру можна продовжувати. Знову помічаємо, що кожен проміжний базис $|a_i\rangle$ містить певну множину спінів, які зазвичай є виродженими. До того ж, кожен віртуальний спін j_i містить $2j_i + 1$ станів з різними проекціями спіну $m_i = -j_i, -j_i + 1, \dots, j_i - 1, j_i$. Загальна кількість станів $|a_i\rangle$ залишається такою ж, як і без врахування симетрії (що не дивно). Отже, кожен індекс a_i в МДС-матрицях може бути розкладений на певний спін j_i ,

певне число t_i в межах його кратності виродження та проекцію спіну m_i в дозволеному інтервалі $-j_i \leq m_i \leq j_i$: $a_i = \{j_i, t_i, m_i\}$.

Зазвичай кількість станів в тензорах МДС посередині ланцюга обмежують певним числом t . З урахуванням вищевказаних симетрій це означатиме наступне. У випадку $U(1)$ симетрії кратності виродження t_{m_i} проекцій m_i зменшуються (деякі $t_{m_i} = 0$, що означає повне зникнення відповідних проекцій спіну). У випадку $SU(2)$ симетрії кратності виродження t_{j_i} спінів j_i зменшуються (деякі $t_{j_i} = 0$, що означає повне зникнення відповідних спінів). Урізання m_i -простору в межах одного й того самого j_i та t_i неможливе, оскільки тоді $SU(2)$ симетрія (повна незалежність від проекцій спіну) буде порушена.

Задачею алгоритму оптимізації у випадку $U(1)$ або $SU(2)$ симетрії є, очевидно, розумне визначення «найважливіших» множин $\{m_i, t_i\}$ або $\{j_i, t_i\}$ для кожного проміжного індекса МДС a_i .

РОЗДІЛ 2

РОЗРОБЛЕНІ ВАРІАЦІЙНІ АЛГОРИТМИ ДЛЯ МДС З ПКУ

2.1 Ефективний алгоритм МДС/МДО по колу

2.1.1 Чому алгоритм по колу є корисним?

Як вже було показано в Розділі 1.11, стандартний алгоритм МДС з ПКУ потребує $O(m^5)$ комп'ютерних операцій для оптимізації кожного локального МДС-тензора. Однак для достатньо великих систем ($N \geq 100$ частинок) є можливість зменшити кількість операцій до $O(m^4)$.

Можна використати той факт, що спін-спінові кореляції дуже швидко спадають з відстанню. На практиці це означає, що сингулярні числа добутків $E_1^{[i]} E_1^{[i+1]} \dots E_1^{[i+l-1]}$ та $E_W^{[i]} E_W^{[i+1]} \dots E_W^{[i+l-1]}$ спадають дуже швидко, якщо l досить велике [72, 132]. В цьому випадку матриці E_1 розміру $m^2 \times m^2$ та матриці E_W розміру $m_W m^2 \times m_W m^2$ можна замінити їхнім скороченим РзСЧ у вигляді вектор-векторних добутків. Їхнє множення на трансферні матриці може бути здійснене, використовуючи прийом, описаний в Додатку А.

Умова достатньої довжини добутку l не завжди задовільняється в звичній процедурі оптимізації вперед-назад. Отже, необхідно ввести шлях оптимізації «по колу», роблячи природним використання ПКУ. В цьому випадку завжди йде рух (корегування) по колу, скажімо, зліва направо.

Пряме обчислення добутків типу $E_1^{[i+1]} \dots E_1^{[N]} E_1^{[1]} \dots E_1^{[i-1]}$ або $E_W^{[i+1]} \dots E_W^{[N]} E_W^{[1]} \dots E_W^{[i-1]}$ є неефективним, оскільки попередні добуки потрібно помножити на відповідні матриці E_1^{-1} або E_W^{-1} (розрахунок яких займає багато часу). Щоб уникнути цього, спінове кільце розбивається на три сегменти (див. рис. 13). Коли оптимізація відбувається всередині кожного конкретного сегмента, можна обчислити вищевказані добутки для

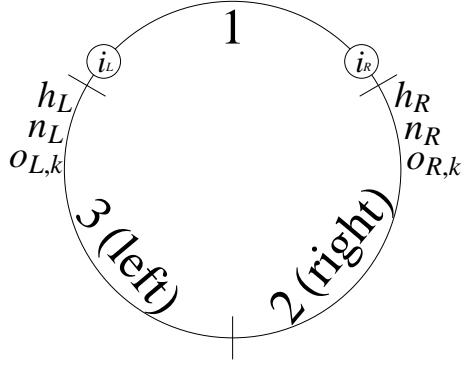


Рис. 13: Для оптимізації всередині конкретного сегмента оператори $\prod_i E_W^{[i]}(M, M)$, $\prod_i E_1^{[i]}(M, M)$ (для збуджених станів також $\prod_i E_1^{[i]}(M, \Phi_k)$) розраховуються для сегментів зліва і справа та зберігаються. Вони позначаються як h_L , h_R , n_L , n_R (для збуджених станів $o_{L,k}$, $o_{R,k}$).

сегментів справа та зліва і зберігати їх як сталі. Вони містять добутки $\lfloor \frac{N}{3} \rfloor$ (або $\lceil \frac{N}{3} \rceil$) матриць, отже, їхні сингулярні числа справді швидко спадають при досить великому N .

Загалом виявляється, що алгоритм по колу є корисним, навіть якщо необхідно утримувати *всі* сингулярні числа. Це має місце, приміром, тоді, коли процедура автоматичного вибору множин кратностей [133] для U(1) чи SU(2) симетрії застосовується при ПКУ. Якщо ж належать використовувати звичайний спосіб, множину кратностей для віртуального індекса між частинками N та 1 неможливо змінити (це нормально для ВКУ, де вона є тривіальною, але не для ПКУ).

2.1.2 Необхідні для алгоритму по колу оператори

Під час оптимізації необхідно розрахувати наступні оператори: H_L , H_R , N_L , N_R , а у випадку збуджених станів також $O_{L,k}$ і $O_{R,k}$ (k від 0 до $n_s - 1$).

З цією метою допоміжні оператори, а саме: h_L , h_R , n_L , n_R , а ще $o_{L,k}$, $o_{R,k}$, розраховуються та зберігаються в алгоритмі по колу. $n(o)$ -оператори мають розмір $m^2 \times m^2$, а h -оператори мають розмір $d_W m^2 \times d_W m^2$ і можуть бути розбиті на блоки H_{ij} розміру $m^2 \times m^2$ (i, j пробігають значення від 1 до m_W).

При корегуванні матриці $h_{L/R}$ множиться на трансферні матриці $E_W^{[i]}(M, M)$, а $n_{L/R}$ та $o_{L/R,k}$ - відповідно на $E_1^{[i]}(M, M)$ та $E_1^{[i]}(M, \Phi_k)$:

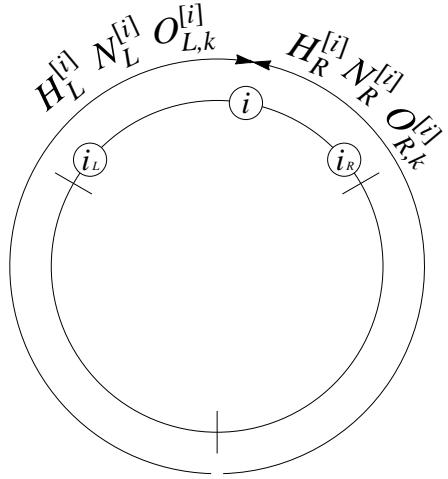


Рис. 14: Перед початком оптимізації необхідно ініціалізувати поточний сегмент. Потрібно ітеративно розрахувати добутки $E_W^{[i]}(M, M) \cdots E_W^{[i_R]}(M, M) h_R$, $E_1^{[i]}(M, M) \cdots E_1^{[i_R]} n_R$ (для збуджених ста-нів також $E_1^{[i]}(M, \Phi_k) \cdots E_1^{[i_R]} o_{R,k}$) для всіх i від $i_L + 1$ до i_R . Під час корегування матриці H_L , N_L (а також $O_{L,k}$) стартують з h_L , n_L (а також $o_{L,k}$) і множаться на матриці $E_W^{[i]}(M, M)$, $E_1^{[i]}(M, M)$ (або $E_1^{[i]}(M, \Phi_k)$).

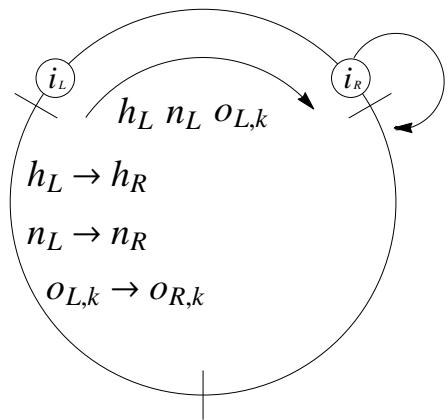


Рис. 15: Перш ніж перейти до наступного сегмента, необхідно присвоїти $h_L \rightarrow h_R$, $n_L \rightarrow n_R$, $o_{L,k} \rightarrow o_{R,k}$ (сегмент, що був зліва, тепер знаходиться справа). Після цього необхідно розрахувати нові блоки h_L , n_L , $o_{L,k}$. Для цього обчислюються всі матриці типу $y = x E^{[i_L]} \cdots E^{[i_R]}$, які потім ортогоналі-зують до y' . Після цього обчислюють всі матриці типу $z = E^{[i_L]} \cdots E^{[i_R]} y'^\dagger$ і розкладають за сингулярними числами. Деталі наведені в Додатку А.

1. $H_L = h_L E_W^{[i_L]}(M, M) \cdots E_W^{[i-1]}(M, M)$
2. $H_R = E_W^{[i+1]}(M, M) \cdots E_W^{[i_R]}(M, M) h_R$
3. $N_L = n_L E_1^{[i_L]}(M, M) \cdots E_1^{[i-1]}(M, M)$
4. $N_R = E_1^{[i+1]}(M, M) \cdots E_1^{[i_R]}(M, M) n_R$
5. $O_{L,k} = o_{L,k} E_1^{[i_L]}(M, \Phi_k) \cdots E_1^{[i-1]}(M, \Phi_k)$
6. $O_{R,k} = E_1^{[i+1]}(M, \Phi_k) \cdots E_1^{[i_R]}(M, \Phi_k) o_{R,k}$

Велика кількість нулів в W -матрицях може бути легко опрацьована в програмному пакеті *Mathematica*, що дозволяє швидкий розрахунок H -блоків.

2.1.3 Зменшення часу розрахунків

В цьому підрозділі описується спосіб зменшення кількості операцій до $O(m^4)$ для великих систем.

Як уже згадувалось, добутки $h_{L/R}$ розміру $m_W m^2 \times m_W m^2$ і добутки $n_{L/R}$ розміру $m^2 \times m^2$ (для збуджених станів ще й $o_{L/R,k}$) заміняються на їхні РзСЧ відносно зменшеної кількості сингулярних чисел. Позначимо ці числа як p' для h -добутків та p для $n(o)$ -добутків. Тоді

$$h_{L/R} = \sum_{l=1}^{p'_{max}} s_l |u_l\rangle \langle v_l| \approx \sum_{l=1}^{p'} s_l |u_l\rangle \langle v_l|. \quad (70)$$

$$n_{L/R}, o_{L/R,k} = \sum_{l=1}^{m^2} s_l |u_l\rangle \langle v_l| \approx \sum_{k=1}^p s_l |u_l\rangle \langle v_l|, \quad (71)$$

$|u_l\rangle$ та $\langle v_l|$ є векторами довжини $m_W m^2$ в р-ні (70) і довжини m^2 в р-ні (71).

Так як зазвичай використовуються підматриці H_{ij} H -блоків, що мають розмір $m^2 \times m^2$, вектори в р-ні (70) можна розділити на підвектори $|u_{l,i}\rangle$ та $\langle v_{l,i}|$ розміру m^2 : $|u_l\rangle = \oplus_i |u_{l,i}\rangle$, $\langle v_l| = \oplus_i \langle v_{l,i}|$, де i має значення від 1 до m_W . Тоді

$$(h_{L/R})_{ij} \approx \sum_{l=1}^{p'} s_l |u_{l,i}\rangle\langle v_{l,j}|.$$

p' завжди є більшим за p . Однак, хоча $p_{\max} = m^2$, то $p'_{\max} < m_W m^2$ для будь-якого оператора, що розглядається в роботі, через розрідженість відповідного МДО. Наприклад, для наших двох гамільтоніанів $p'_{\max} = 2m^2$, а для r -частинкової кореляційної функції $p'_{\max} = (r+2)m^2$ (це можна безпосередньо довести методом Гаусса для E_W -матриць).

Чисельні розрахунки також показують, що навіть для великих систем p і p' зростають зі зростанням m (див. також [73]). Це зростання грубо можна оцінити як прямо пропорційне: $p \propto m$ і $p' \propto m$. Досвід також показує, що для наших гамільтоніанів p' можна взяти рівним $p' = 2p$.

Швидкий спосіб розрахунку РзСЧ h, n, o -добутків не є очевидним. Тому він описується окремо в додатку. Кількість операцій, необхідна для швидкого РзСЧ, має порядок $O(m^4)$.

В процедурі оптимізації є ще дві ресурсоємні операції - корегування блоків та задача на власні значення. Доведемо, що необхідна кількість операцій - теж $O(m^4)$.

$H_{L/R}$ та $N_{L/R}$ (для збуджених станів також $O_{L/R,k}$) корегуються шляхом множення на відповідні матриці E_W або E_1 . Розглянемо N -корегування. Кожен вектор $|u_l\rangle$ або $\langle v_l|$ розміру m^2 множиться на трансферну матрицю $\sum_{\sigma} M^{\sigma*} \otimes M^{\sigma}$. Кількість доданків рівна $d = \text{const} \ll p, m$, тому достатньо оцінити кількість операцій для одного множення $(M^{\sigma*} \otimes M^{\sigma})|u_l\rangle$ або $\langle v_l|(M^{\sigma*} \otimes M^{\sigma})$. Але воно дорівнює $O(m^3)$ (див. Додаток А). Так як векторів всього p , загальна кількість операцій $O(pm^3)$, тобто $O(m^4)$. Доведення для O -блоків є аналогічним.

Щодо корегування H -блоків, необхідно виписати результат множення вектора $\bigoplus_{i=1}^{m_W} |u_{l,i}\rangle$ або $\bigoplus_{i=1}^{m_W} \langle v_{l,i}|$ на $\sum_{\sigma, \sigma'} W^{\sigma, \sigma'} \otimes M^{\sigma*} \otimes M^{\sigma'}$. Так як $m_W = \text{const}$, достатньо оцінити кількість операцій для множення тільки на один доданок. Вона рівна $O(m^3)$ (див. Додаток А), і так як векторів всього p' , загальна кількість операцій $O(p'm^3)$, тобто $O(m^4)$.

Для розв'язання задачі на власні значення потрібне множення матриць

$$H_{\text{eff}} = \sum_{i,j=1}^{m_W} W_{ij} \otimes (\widetilde{H_R \cdot H_L})_{ji} = \sum_{i,j,q=1}^{m_W} W_{ij} \otimes ((H_R)_{jq} \cdot \widetilde{(H_L)_{qi}}) \quad (72)$$

та

$$N_{\text{eff}} = \mathbb{1} \otimes (\widetilde{N_R \cdot N_L}) \quad (73)$$

на вектори $\vec{\nu} = \bigoplus_{i=1}^d \vec{\nu}_i$. Очевидно, ці два множення можна здійснити схожим чином (єдина різниця в тому, що в першому рівнянні кількість доданків має порядок приблизно m_W^3). Отже, достатньо довести, що кількість операцій $O(m^4)$, лише для одного доданка (як в N_{eff}). Кожен такий доданок має форму

$$\text{term} = W \otimes \sum_{k,l} s_k^R s_l^L \langle v_k^R | u_l^L \rangle \widetilde{| u_k^R \rangle \langle v_l^L |} = \sum_{k,l} s_k^R s_l^L \langle v_k^R | u_l^L \rangle (W \otimes U_k^R \otimes V_l^L) \quad (74)$$

Тут W має розмір $d \times d$. Доведення представлене в Додатку А. Як уже згадувалось, воно також може бути застосоване до корегування H -блока (окрім множників $\alpha_{kl} = s_k^R s_l^L \langle v_k^R | u_l^L \rangle$, яких тут немає), де W -тензор має розмір $m_W \times m_W$.

Специфіка описаної вище методики обґрунтовує зберігання матриць U_H розміру $d_W m^2 \times p'$ і матриць V_H розміру $p' \times d_W m^2$ у вигляді 4-вимірних тензорів розмірності $d_W \times p' \times m \times m$. Матрицями $U_{N/O}$ та $V_{N/O}$ розмірів відповідно $m^2 \times p$ та $p \times m^2$ можна оперувати аналогічно, і відповідні 4-вимірні тензори матимуть розмір $1 \times p \times m \times m$.

2.1.4 Процедура оптимізації в алгоритмі по колу

1. Ініціалізувати сегмент шляхом розрахунку $H_R^{[i]}$ та $N_R^{[i]}$ (а також $O_{R,k}^{[i]}$) для i від $i_R - 1$ до i_L (Рис. 14). Це робиться почерговим правим корегуванням h_R та n_R (для збуджених станів також $o_{R,k}$).
2. Для i від i_L до i_R виконати наступні дії:
 - (a) Розв'язати задачу на власні значення (45). Отримується новий тензор $M^{[i]}$.

- (b) Ліво-нормувати $M^{[i]}$ (таким чином отримується новий тензор $M^{[i+1]}$).
- (c) Корегувати $H_L^{[i+1]}$ та $N_L^{[i+1]}$ (для збуджених станів також $O_{L,k}^{[i+1]}$), використовуючи новий тензор $M^{[i]}$.

3. Перед тим, як перейти до наступного сегмента (рис. 15):

- (a) Присвоїти $h_L \rightarrow h_R$, $n_L \rightarrow n_R$, $o_{L,k} \rightarrow o_{R,k}$ (сегмент, що був зліва, тепер справа).
- (b) Ефективно обчислити нові блоки h_L , n_L , $o_{L,k}$ (див. Додаток А).

Така процедура повинна повторюватись, поки не буде досягнуто збіжності результату. Отриманий МДС є власним станом, а значення ϵ дає енергію цього стану.

2.1.5 Швидкий розрахунок $\langle H^2 \rangle$

МДО для розрахунку $\langle H^2 \rangle$ отримується з формули

$$\mathcal{W}_{(b_{i-1}b'_{i-1}), (b_i b'_i)}^{[i], s_i, s'_i} = \sum_{s''_i} W_{b_{i-1}, b_i}^{[i], s_i, s''_i} W_{b'_{i-1}, b'_i}^{[i], s''_i, s'_i}.$$

Такий МДО є матрицею 25×25 для XXZ моделі (їого розгорнута форма не записується тут через великий розмір); $\langle H^2 \rangle$ може бути отримане з цього МДО, використовуючи р-ня (69) і відповідні трансферні матриці $E_{\mathcal{W}}^{[i]}$ розміру $25m^2 \times 25m^2$.

Однак можна безпосередньо довести (методом Гаусса), що всі трансферні матриці (і відповідно їхні добутки) мають лише $p'' = 6m^2$ ненульових сингулярних чисел. Тому добуток N таких трансферних матриць може бути отриманий ефективним способом корегування, запропонованим в [72, 123].

2.2 Алгоритм для $U(1)$ -симетричних МДС з ПКУ

2.2.1 Загальна форма $U(1)$ -інваріантних МДС

В цьому підрозділі описується звичайний спосіб утворення $U(1)$ -симетричного МДС. Підхід є загальним і підходить для будь-якої $U(1)$ -симетричної системи (а не тільки для спінової).

Як ми пригадуємо з Розділу 1.12, у випадку $U(1)$ симетрії кожен тензорний індекс розкладається на індекс проекції спіну та індекс виродження. Фізичні (спінові) індекси розкладаються тривіально: $\sigma_i = (s_i, 1)$ (тому в цьому підрозділі σ_i та s_i не розрізнятимуться). Віртуальні (матричні) індекси МДС розкладаються як $a_i = (m_i, t_i)$; де $t_i = \overline{1, t_{m_i}}$ показує кратність виродження конкретного m_i . На практиці необхідно обрати скінченні множини $\{m_i\}$ з відповідними $\{t_{m_i}\}$. Вони визначаються не симетрією, а гамільтоніаном, що розглядається (для різних значень контрольного параметра «вдало обрані» множини є різними). Передовий алгоритм повинен обирати ці множини автоматично.

Утворення МДС, інваріантного щодо симетрії, детально розглянуте в багатьох роботах (наприклад, [80]). Згідно з теоремою Вігнера-Екарта, кожен локальний тензор розкладається на структурну та вироджену частину (англ. “degeneracy part”). Для $U(1)$ симетрії теорема Вігнера-Екарта набуває дуже простої форми, і елементи матриць МДС задаються рівністю

$$M_{(m_{i-1}, t_{i-1}), (m_i, t_i)}^{[i], s_i} = \mathcal{M}_{(m_{i-1}, t_{i-1}), (m_i, t_i)}^{[i]} \cdot \delta_{m_{i-1}, m_i + s_i}. \quad (75)$$

Матричні елементи $\mathcal{M}_{(m_{i-1}, t_{i-1}), (m_i, t_i)}^{[i]}$ виродженої частини часто звуться «зведеніми матричними елементами» (в роботі вони позначаються рукописними літерами). У випадку $U(1)$ симетрії зведені матричні елементи дорівнюють звичайним матричним елементам, якщо ті є ненульовими. Тому в цьому підрозділі вона зазвичай не розрізнятимуться. Звертаємо увагу, що зведені матричні елементи, що відповідають нульовому символу Кронекера для довільного σ_i , можна взяти будь-якими, і в роботі вони взяті рівними нулю.

Інакше можна сказати, що локальні тензори МДС мають блочну структуру, і позиції ненульових блоків визначаються «правилом відбору»

$$m_{i-1} = m_i + s_i, \quad (76)$$

а розміри блоків визначаються індексами виродження.

2.2.2 Звичайний спосіб утворення U(1)-коваріантного МДС

Множина «правил відбору», задана (76) для всіх N тензорів МДС, доповнюється умовами $m_0 = 0$ та $m_N = -S_z$ при ВКУ (індекси a_0 і a_N є тривіальними, тому містять лише одну невироджену проекцію спіну). Можна перевірити, що такий набір умов справді утворює U(1) симетричний МДС з проекцією спіну S_z .

Однак при ПКУ присвоєння різних проекцій спіну до лівого та правого крайніх віртуальних індексів виглядає дещо нефізичним, так як МДС є «закільцованим» (при ВКУ кінці є вільними). Для того, щоб закодувати всю інформацію про U(1) симетричний МДС з ПКУ в самих матрицях, задаємо $m_0 = m_N$ для всіх значень m_0 та m_N (індекс $a_0 = a_N$ вже не є тривіальним при ПКУ). Як результат, вище описана процедура утворює лише U(1)-інваріантні стани, тобто стани з $S_z = 0$. Підказка, як практично утворити U(1)-коваріантний МДС з ПКУ, отримується з робіт [82, 77, 80]: додатковий заряд $-S_z$ (тобто невзаємодіючий спін з проекцією спіну $-S_z$) вставляється в систему в будь-якій місці. Модифікована система має нульову повну проекцію спіну і може бути описана U(1)-інваріантною тензорною мережею.

Додатковий заряд (англ. “fictitious charge”) для зручності вставляється на позиції $N + 1$, тобто між частинками N та 1. Базис на новій «частинці» є тривіальним (бо $s_{N+1} = -S_z$). Отже, МДС-тензор для неї є одною матрицею, матричний елемент якої

$$F_{(m_N, t_N), (m_{N+1}, t_{N+1})}^{[N+1], -S_z} = \mathcal{F}_{(m_N, t_N), (m_{N+1}, t_{N+1})}^{[N+1]} \cdot \delta_{m_N, m_{N+1}} \cdot \delta_{t_N, t_{N+1}}. \quad (77)$$

(“F” означає “fictitious”). Варіаційний алгоритм може бути сформульований аналогічно до звичайного (без додаткового спіну). Відповідний МДО для до-

додаткового спіну є просто одиничним МДО розміру $m_W \times m_W$:

$$W^{[N+1]} = \begin{pmatrix} (1) & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & (1) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & (1) & \cdots & 0 \\ & & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & (1) \end{pmatrix}$$

так як спін невзаємодіючий. Використовуючи модифікований МДС, можна отримати $U(1)$ -інваріантний стан і відповідне значення енергії, як показано в попередньому розділі.

Щоб отримати потрібний нам $U(1)$ -коваріантний стан, треба позбавитись додаткового спіну шляхом множення його матриці на тензор сусідньої частинки, тобто кожна з матриць $M^{[N],s_N}$ множиться на матрицю $M^{[N+1],-S_z}$. Матричний елемент нового тензора $M'^{[N]}$

$$M'^{[N],s_N}_{(m_{N-1},t_{N-1}),(m_N,t_N)} = \mathcal{M}'^{[N]}_{(m_{N-1},t_{N-1}),(m_N,t_N)} \cdot \delta_{m_{N-1},m_N+s_N-S_z} \quad (78)$$

задовільняє «правило відбору»

$$m_{N-1} + S_z = m_N + s_N. \quad (79)$$

Це правило відбору (79) відрізняється від правила відбору (76) для всіх інших частинок системи. Можна прямо перевірити, використовуючи р-ня (24), що результатуючий МДС матиме бажану проекцію спіну S_z :

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_{\substack{s_1, s_2, \dots, s_N \\ (m_1, t_1), (m_2, t_2), \dots, (m_N, t_N)}} M_{(m_N, t_N), (m_1, t_1)}^{s_1} M_{(m_1, t_1), (m_2, t_2)}^{s_2} \cdots M_{(m_{N-1}, t_{N-1}), (m_N, t_N)}^{s_N} |s_1 s_2 \cdots s_N\rangle \\ |s_1 s_2 \cdots s_N\rangle &= \sum_{\substack{s_1, s_2, \dots, s_N \\ m_1, m_2, \dots, m_N \\ t_1, t_2, \dots, t_N}} \delta_{m_1+s_1, m_N} \delta_{m_2+s_2, m_1} \cdots \delta_{m_N+s_N-S_z, m_{N-1}} \times \\ &\quad \mathcal{M}_{(m_N, t_N), (m_1, t_1)}^{[1]} \mathcal{M}_{(m_1, t_1), (m_2, t_2)}^{[2]} \cdots \mathcal{M}_{(m_{N-1}, t_{N-1}), (m_N, t_N)}^{[N]'} |s_1 s_2 \cdots s_N\rangle = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{s_1, s_2, \dots, s_N} \delta_{s_1+s_2+\dots+s_N, S_z} \left\{ \sum_{\substack{m_1=m_N-s_1 \\ m_2=m_1-s_2 \\ \dots \\ m_N=m_{N-1}+S_z-s_N}} \sum_{t_1, t_2, \dots, t_N} \mathcal{M}_{(m_N, t_N), (m_1, t_1)}^{[1]} \mathcal{M}_{(m_1, t_1), (m_2, t_2)}^{[2]} \dots \right. \\
&\quad \left. \dots \mathcal{M}_{(m_{N-1}, t_{N-1}), (m_N, t_N)}^{[N]'} \right\} |s_1 s_2 \dots s_N\rangle = \sum_{s_1, s_2, \dots, s_N} \delta_{s_1+s_2+\dots+s_N, S_z} c_{s_1, s_2, \dots, s_N} |s_1 s_2 \dots s_N\rangle = \\
&= \sum_{s_1+s_2+\dots+s_N=S_z} c_{s_1, s_2, \dots, s_N} |s_1 s_2 \dots s_N\rangle.
\end{aligned}$$

Матриця $M^{[N+1], -S_z}$ є суттєво недіагональною при великих $|S_z|$. Як наслідок, для заданих m та S_z ця матриця може навіть занулитись. Наприклад, щоб утворити довільний МДС з максимальною можливою намагнічністю $S_z^{\max}/N = s$ для системи з N частинок, потрібно щонайменше $N + 1$ секторів симетрії, що унеможливлює практичні розрахунки. Для менших $|S_z|$ мінімальна кількість необхідних секторів симетрії є меншою, але, на відміну від стану з $S_z/N = s$, такі стани є сильно заплутаними, і для їхнього хорошого представлення потрібно достатньо параметрів. Через це алгоритм часто сходить до неправильного значення енергії або стає нестабільним - МДС стає «поганим» варіаційним анзацом з невеликою ефективною кількістю параметрів.

2.2.3 Ефективний спосіб утворення U(1)-коваріантного МДС з ПКУ

В цьому підрозділі пропонується спосіб утворення U(1)-коваріантного МДС з ПКУ, який не призводить до чисельної нестабільності алгоритму. Необхідно вставити декілька додаткових спінів на декількох позиціях системи. Це приведе до МДС з наступними матричними елементами

$$M_{(m_{i-1}, t_{i-1}), (m_i, t_i)}^{[i], s_i} = \mathcal{M}_{(m_{i-1}, t_{i-1}), (m_i, t_i)}^{[i]} \delta_{m_{i-1}+x_i, m_i+s_i} \quad (80)$$

де x_i є фіксованим на кожному спіні, а $\sum_{i=1}^N x_i = S_z$. Символ Кронекера в рівні (80) накладає умову, що x_i може бути тільки цілим або напівцілим. Однак, на відміну від ВКУ, де різниця між різними t_i завжди рівна 1, для ПКУ різниця дорівнює $1/2$ для ферміонних систем та 1 для бозонних.

Можна легко перевірити, використовуючи р-ня (24), що матриці, означені в р-ні (80), утворюють МДС з бажаною проекцією спіну S_z :

$$\begin{aligned}
|\psi\rangle &= \sum_{\substack{s_1, s_2, \dots, s_N \\ m_1, m_2, \dots, m_N \\ t_1, t_2, \dots, t_N}} \delta_{m_1+s_1-x_1, m_N} \delta_{m_2+s_2-x_2, m_1} \cdots \delta_{m_N+s_N-x_N, m_{N-1}} \mathcal{M}_{(m_N, t_N), (m_1, t_1)}^{[1]} \times \\
&\times \mathcal{M}_{(m_1, t_1), (m_2, t_2)}^{[2]} \cdots \mathcal{M}_{(m_{N-1}, t_{N-1}), (m_N, t_N)}^{[N]} |s_1 s_2 \cdots s_N\rangle = \sum_{s_1, s_2, \dots, s_N} \delta_{s_1+s_2+\cdots+s_N, x_1+x_2+\cdots+x_N} \times \\
&\times \left\{ \sum_{\substack{m_1=m_N+x_1-s_1 \\ m_2=m_1+x_2-s_2 \\ \vdots \\ m_N=m_{N-1}+x_N-s_N}} \sum_{t_1, t_2, \dots, t_N} \mathcal{M}_{(m_N, t_N), (m_1, t_1)}^{[1]} \mathcal{M}_{(m_1, t_1), (m_2, t_2)}^{[2]} \cdots \mathcal{M}_{(m_{N-1}, t_{N-1}), (m_N, t_N)}^{[N]} \right\} \\
|s_1 s_2 \cdots s_N\rangle &= \sum_{s_1, s_2, \dots, s_N} \delta_{s_1+s_2+\cdots+s_N, S_z} c_{s_1, s_2, \dots, s_N} |s_1 s_2 \cdots s_N\rangle.
\end{aligned}$$

Різниця між даним підходом та (наївним) підходом, описаним в попередньому підрозділі, в тому, що загальний заряд S_z розподіляється між усіма спінами. Так можна зробити, оскільки $U(1)$ симетрія є абелевою.

По суті, запропонований підхід можна «відобразити» на випадок з ВКУ. При ВКУ всі x_i покладають рівними нулю, але завдяки різниці між m_0 та m_N множини проекцій спіну та їхніх вироджень відрізняються для кожного віртуального індексу. Отже, взамін цього можна ввести x_i (так що «правила відбору» стають, як в р-ні (81)), а m_N можна взяти рівним нулю.

Може виникнути запитання: яка ж тоді різниця між нашим підходом для ПКУ і стандартним підходом для ВКУ? Відповідь така: квантові числа (разом з їхніми кратностями виродження) та правила відбору при ВКУ виникають з перших принципів (кратності можуть навіть бути обчислені точно для малих систем шляхом прямої побудови МДС з двох кінців системи). З іншого боку, при ПКУ правила відбору можна задовільнити багатьма способами, квантові числа визначені тільки з точністю до сталої, а кратності мають зміст лише як «важливі» «зв'язкові» (англ. “bond”) ступені вільності.

«Правило відбору», яке необхідно задовільнити для кожної частинки,

$$m_{i-1} + x_i = m_i + s_i \quad (81)$$

75

має бути доповнене умовою $\sum_{i=1}^N x_i = S_z$. Для $S_z/N = s$ вибір x_i є очевидним: $x_i = s_i = s$ для кожної частинки, і для віртуальних індексів потрібен тільки один сектор симетрії. Але для $S_z/N < s$ ці умови можна задовільнити багатьма способами. В роботі обирається один з них, що розподіляє S_z по всіх спінах найбільш рівномірно з можливих варіантів. Для цього S_z розділяється на маленькі порції, а саме: $1/2$ для систем частинок зі спіном $1/2$ та 1 для систем частинок зі спіном 1 .

Так як $|S_z| \leq \frac{N}{2}$ для систем зі спіном $1/2$, $x_i = 0$ для певного числа частинок і $x_i = \frac{1}{2}$ для решти. Всі ненульові x_i розміщують на одному кінці системи, а всі нульові x_i - на іншому (кінці визначаються за нумерацією частинок $1, \dots, N$). Отже, правила відбору виглядатимуть як

$$m_{i-1} = m_i + s_i - \text{Sgn}(S_z) \cdot \frac{1}{2} \quad i \leq 2|S_z| \quad (82)$$

$$m_{i-1} = m_i + s_i \quad i > 2|S_z|. \quad (83)$$

Матриці МДС є блочними головними/нижніми/верхніми діагональними. Введемо такі позначення: $d \equiv$ блочна діагональна, $|d|, \|d\|, \dots \equiv$ блочна 1-ша, 2-га, ... нижня діагональна, $ud, uud, \dots \equiv$ блочна 1-ша, 2-га, ... верхня діагональна. Використовуючи ці позначення, можна проілюструвати, як виглядає структура матриць: для $S_z \geq 0$

$$\{M^{[i],-1/2}, M^{[i],1/2}\} = \begin{cases} \{uud, d\}, & i \leq 2S_z \\ \{ud, |d|\}, & i > 2S_z \end{cases}$$

а для $S_z < 0$

$$\{M^{[i],-1/2}, M^{[i],1/2}\} = \begin{cases} \{d, \|d\|\}, & i \leq 2|S_z| \\ \{|d|, ud\}, & i > 2|S_z|. \end{cases}$$

Наведемо аналогічні результати для систем частинок зі спіном 1 . Як було згадано раніше, S_z розбивається на порції, рівні 1 . Правила відбору:

$$m_{i-1} = m_i + s_i - \text{Sgn}(S_z) \cdot 1, \quad \text{for } i \leq |S_z| \quad (84)$$

$$m_{i-1} = m_i + s_i \quad \text{for } i > |S_z|, \quad (85)$$

а структура матриць виглядає для $S_z \geq 0$ як

$$\{M^{[i],-1}, M^{[i],0}, M^{[i],1}\} = \begin{cases} \{\text{uud}, \text{ud}, \text{d}\}, & i \leq S_z \\ \{\text{ud}, \text{d}, \text{|d}\}, & i > S_z \end{cases}$$

а для $S_z < 0$

$$\{M^{[i],-1}, M^{[i],0}, M^{[i],1}\} = \begin{cases} \{\text{d}, \text{|d}, \text{||d}\}, & i \leq |S_z| \\ \{\text{ud}, \text{d}, \text{|d}\}, & i > |S_z|. \end{cases}$$

Аналогічний вибір можна отримати також для фізично цікавих систем частинок зі спіном $3/2$ (або вищим). Наприклад, для систем зі спіном $3/2$ величина x_i може дорівнювати $3/2, 1, 1/2, 0$ (залежно від значення $|S_z|$).

Щоб побудувати $U(1)$ симетричну матрицю, необхідно обрати кратності виродження для віртуальних індексів. На практиці «вдалу» множину $T = \{t_{m_1}, t_{m_2}, \dots, t_{m_n}\}$ доводиться підбирати (t_{m_i} позначають розмір кожного сектора симетрії). Множина T не визначається симетрією, «вдалий» вибір залежить від самого гамільтоніана. Для $U(1)$ симетричного повністю поляризованого стану $T = \{1\}$, а для заплутаного стану множина може дорівнювати, приміром, $T = \{1, 2, 3, 4, 4, 3, 2, 1\}$. Вже було запропоновано підхід, що обирає множини кратностей автоматично під час оптимізації, і були отримані попередні результати. Однак цей підхід виходить за межі дисертаційної роботи.

Зробимо ремарку щодо фізично цікавої моделі Бозе-Габбарда. Вона описує систему взаємодіючих безспінових ферміонів. Локальний гільбертовий простір визначається кількістю частинок на конкретній позиції (зазвичай він 2-вимірний: $n_i = 0$ або 1). Якщо віртуальні індекси розкласти як $a_i = (N_i, t_i)$, а загальна кількість частинок в системі рівна n , «правила відбору» виглядають як

$$N_{i-1} = N_i + n_i - 1 \quad i \leq n \tag{86}$$

$$N_{i-1} = N_i + n_i \quad i > n. \tag{87}$$

2.2.4 Перекалібрування U(1)-коваріантного МДС

Пригадуємо, що необхідна для перекалібрування МДС конструкція Q дорівнює

$$Q = \begin{cases} \sum_{s_i} M^{[i], s_i \dagger} M^{[i], s_i}, & \text{ліве нормування} \\ \sum_{s_i} M^{[i], s_i} M^{[i], s_i \dagger}, & \text{праве нормування} \end{cases}$$

Визначимо, як виглядає Q у випадку право-нормованого U(1)-коваріантного МДС (для ліво-нормованого МДС ситуація буде аналогічною):

$$\begin{aligned} Q_{(m', t'), (m'', t'')}^R &= \sum_{s_i} (M^{[i], s_i} M^{[i], s_i \dagger})_{(m', t'), (m'', t'')} = \sum_{s_i} \sum_{m, t} M_{(m', t'), (m, t)}^{[i], s_i} M_{(m'', t''), (m, t)}^{[i], s_i *} = \\ &= \sum_{s_i, m, t} \mathcal{M}_{(m', t'), (m, t)}^{[i]} \mathcal{M}_{(m'', t''), (m, t)}^{[i] *} \delta_{m', m+s_i} \delta_{m'', m+s_i} = \\ &= \delta_{m', m''} \sum_{m+s_i = m', t} \mathcal{M}_{(m', t'), (m, t)}^{[i]} \mathcal{M}_{(m'', t''), (m, t)}^{[i] *} = \delta_{m', m''} \mathcal{Q}_{(m', t'), (m'', t'')}. \end{aligned}$$

Таким чином, маємо блочну діагональну матрицю відносно квантових чисел m :

$$Q = \bigoplus_m Q_m^{t_m \times t_m} \quad (88)$$

де $Q_m = Q_m^\dagger$ для будь-якого m .

Матриці $M^{[i], s_i}$ множаться на певну матрицю X зліва (праве нормування) або справа (ліве нормування). Тоді у випадку U(1) симетрії рівняння виглядатиме як

$$\begin{cases} X^\dagger Q X = \mathbb{1}^{\sum_m t_m \times \sum_m t_m}, & \text{ліве нормування} \\ X Q X^\dagger = \mathbb{1}^{\sum_m t_m \times \sum_m t_m}, & \text{праве нормування} \end{cases}$$

Тоді матриця X (і відповідно X^{-1}), очевидно, матиме вигляд:

$$X = \bigoplus_m X_m^{t_m \times t_m} \quad (89)$$

де

$$\begin{cases} X_m^\dagger Q_m X_m = \mathbb{1}^{t_m \times t_m}, & \text{ліве нормування} \\ X_m Q_m X_m^\dagger = \mathbb{1}^{t_m \times t_m}, & \text{праве нормування} \end{cases}$$

Спосіб побудови кожної X_m такий самий, як і для розрахунку X в алгоритмі без симетрії (див. Додаток А). Матриця Q розкладається за власними числами поблоково.

Перекалібрування МДС у випадку $U(1)$ симетрії є тривіальним. Через символ Кронекера відповідні блоки матриці $M^{[i],s_i}$ множаться на відповідні діагональні блоки X , а відповідні блоки $M^{[i\pm 1],s_{i\pm 1}}$ множаться на відповідні діагональні блоки X^{-1} .

2.2.5 Задача на власні значення у випадку $U(1)$ -коваріантного МДС

Як ми пригадуємо з Розділу 1.6, задача на власні значення отримується з мінімізації лагранжіана $\mathbb{L} = \langle \psi | H | \psi \rangle - \epsilon \langle \psi | \psi \rangle$ відносно тензора $M^{[i]*}$. В загальному випадку береться часткова похідна за кожним елементом $M_{a_{i-1},a_i}^{[i],s_i*}$, яка прирівнюється нулю: $\frac{\partial \mathbb{L}}{\partial M_{a_{i-1},a_i}^{[i],s_i*}} = 0$. У випадку $U(1)$ симетрії ця процедура має одну специфічну рису.

Можна брати похідну тільки за ненульовими елементами $M_{a_{i-1},a_i}^{[i],s_i*}$ (тобто тими, для яких символ Кронекера рівний 1). Отже, кількість рівнянь зменшується до кількості ненульових значень (позначимо її як q). Ці рівняння утворюють лінійну систему з вектором-змінною $\vec{\nu}$, але $\vec{\nu}$ тепер містить тільки ненульові елементи $M_{a'_{i-1},a'_i}^{[i],s'_i}$ (нульові не дають внеску в лагранжіан). Отже, маємо систему q лінійних рівнянь з q невідомими, що приводить до «зведеної» $q \times q$ задачі на власні значення:

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}^{[i]} \nu^{[i]} = \epsilon \mathcal{N}_{\text{eff}}^{[i]} \nu^{[i]}. \quad (90)$$

На практиці $\mathcal{H}_{\text{eff}}^{[i]}$ та $\mathcal{N}_{\text{eff}}^{[i]}$ отримуються з «повних» $H_{\text{eff}}^{[i]}$ та $N_{\text{eff}}^{[i]}$ шляхом відкидання рядків і стовпчиків, що відповідають нульовим елементам МДС. Вектор $\nu^{[i]}$ отримується відповідно відкиданням нульових елементів МДС.

Такий самий підхід використовується для проектора \mathcal{P} , якщо розраховуються збуджені стани. Розраховуються «повні» вектори $\vec{y}^{(k)}$, і відкидаються ті елементи, що відповідають нульовим елементам МДС. Тільки після цього можна ортогоналізовувати множину y .

В принципі, алгоритм можна сформулювати таким чином, що він апріорі оперує лише ненульовими зведеними матричними елементами (тобто тими, що відповідають ненульовому символу Кронекера). Але для $U(1)$ симетрії це не робиться, оскільки натомість можна зменшити розрахункові ресурси шляхом врахування розрідженості матриць.

Варто також відзначити, що спостережувані величини розраховуються з використанням трансферних матриць $E_W^{[i]}$ так само, як і в алгоритмі без симетрій. Величина $\langle H^2 \rangle$ розраховується способом, описаним в Розділі 2.1.5 (без відкидання сингулярних чисел).

2.3 Алгоритм для SU(2)-симетричних МДС з ПКУ

2.3.1 Утворення SU(2)-симетричного МДС з ПКУ

Спочатку розглянемо спосіб утворення SU(2)-інваріантних станів, тобто станів з повним спіном $S = 0$.

Множина матриць МДС, означена в р-ні (23), має бути приведена до SU(2) симетричної форми для кожної частинки i . Як ми пам'ятаємо з Розділу 1.12, кожен тензорний індекс розкладається в SU(2) симетричну форму. Фізичний (спіновий) індекс розкладається тривіально як $\sigma_i = (s, 1, s_i)$ або просто $\sigma_i = (s, s_i)$. Матричні (віртуальні) індекси розкладаються як $a_{i-1} = (j_{i-1}, t_{i-1}, m_{i-1})$, $a_i = (j_i, t_i, m_i)$.

Структура локального тензора 3-го рангу $M^{[i]}$ на частинці i визначається теоремою Вігнера-Екарта [81], згідно з якою тензор розкладається на вироджену та структурну частини:

$$M_{(j_{i-1}t_{i-1}m_{i-1}), (j_i t_i m_i)}^{[i], (s_1 s_i)} = \mathcal{M}_{(j_{i-1}t_{i-1}), (j_i t_i)}^{[i]} C_{m_{i-1}, s_i, m_i}^{j_{i-1}, s, j_i} \quad (91)$$

де структурна частина зафікована SU(2) симетрією і представляється в термінах $3j$ -символів Вігнера:

$$C_{m_1, m_2, m_3}^{j_1, j_2, j_3} = (-1)^{j_1 - m_1} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}. \quad (92)$$

В дисертаційній роботі використовуються формули Едмондса [86], тому структурну частину краще записувати в термінах $3j$ -символів замість споріднених до них коефіцієнтів Клебша-Гордана. Також вводить «правило трикутника»

$$\begin{cases} |j_1 - j_2| \leq j_3 \leq j_1 + j_2 \\ j_1 + j_2 + j_3 \text{ є цілим числом} \end{cases}$$

Ця умова показує, чи спіни j_1, j_2, j_3 «стикуються» за правилом додавання спінів.

Як і у випадку U(1) симетрії, вироджена частина (що зветься зведенім тензором) позначається прописною літерою, а відповідний «повний» тензор

позначається друкованою літерою. Часто буває зручно використовувати комбінований індекс $\gamma = (j, t)$, тобто $\mathcal{M}_{(j_{i-1}t_{i-1}), (j_i t_i)}^{[i]} = \mathcal{M}_{\gamma_{i-1}, \gamma_i}^{[i]}$.

Вироджена частина \mathcal{M} не залежить від проекцій спіну і містить варіаційні параметри стану. Звертаємо увагу, що зведені матричні елементи МДС, для яких спіни j_{i-1}, s, j_i не задовільняють «правило трикутника», можна взяти рівними будь-чому, так як відповідний $3j$ -символ зануляється. В роботі вони покладаються рівними нулю, що робить зведені тензори МДС досить розрідженими, а саме - блочними «смуговими» діагональними.

Можна помітити, що кожна матриця $M^{[i], s_i}$ складається з блоків $(\mathcal{M}^{[i]})_{j_L, j_R}^{t_{j_L} \times t_{j_R}} \otimes C_{s_i, j_L, j_R}^{(2j_L+1) \times (2j_R+1)}$ (верхній індекс позначає розміри матриць). $(\mathcal{M}^{[i]})_{j_L, j_R}$ є підматрицею матриці $\mathcal{M}^{[i]}$, що відповідає конкретному спіну j_L лівого віртуального індекса та конкретному спіну j_R правого віртуального індекса. C_{s_i, j_L, j_R} є матрицею C -множників для конкретної пари j_L, j_R та конкретної локальної проекції спіну s_i .

Віртуальні індекси МДС характеризуються множиною віртуальних спінів та їхніх кратностей виродження (або просто множиною кратностей): $T = \{(j_1, t_{j_1}), (j_2, t_{j_2}), \dots, (j_n, t_{j_n})\}$. Вона може бути рівна, приміром, $T = \{(1/2, 2), (3/2, 4), (5/2, 3)\}$. На практиці бажано обрати найменшу можливу множину з кількох різних спінів j з малими кратностями t . Однак алгоритм, що автоматично обирає цю множину для МДС з ПКУ, виходить за межі дисертаційної роботи, тому вона тут обирається вручну. Звісно, для великої або сильно заплутаної системи необхідні кратності будуть великими, і потрібно багато віртуальних спінів. Але на певному етапі розмір множин кратностей обмежується наявними комп'ютерними ресурсами.

Перейдемо до утворення коваріантних станів з повним спіном $S \neq 0$. З цією метою в систему вставляється додатковий невзаємодіючий локальний спін $S > 0$ [82, 79]. (На відміну від $U(1)$ симетрії, де додатковий спін є «фантомом» з визначеною проекцією спіну, тепер це реальний спін) Додатковий спін вставляється на позиції $N+1$, між частинками N та 1. Для цього додаткового

спіну тензор набуває вигляду

$$F_{(j_N, t_N, m_N), (j_{N+1}, t_{N+1}, m_{N+1})}^{[N+1], (S, 1, M)} = \mathcal{F}_{(j_N t_N), (j_{N+1} t_{N+1})}^{[N+1]} C_{m_N, M, m_{N+1}}^{j_N, S, j_{N+1}}, \quad (93)$$

і результаючий МДС має повний спін, рівний нулю. Отже, результаючий МДС може бути описаний $SU(2)$ інваріантною тензорною мережею. Для повноти опису введемо також $F^{(0,1,0)} = 1$ для $S = 0$, де додатковий спін, в принципі, не потрібен. Літера “F” знов означає “fictitious”.

Після оптимізації тензорної мережі з додатковим спіном необхідно отримати коваріантний стан $|SM\rangle$, що має вигляд

$$|SM\rangle = \sum_{\{s_i\}} \text{Tr}(M^{[1], (s_1 s_1)} \dots M^{[N], (s_1 s_N)} F^{[N+1], (S, 1, -M)}) |s_1 \dots s_N\rangle. \quad (94)$$

Цей стан нормується в разі необхідності. На практиці такий стан (94) рідко буває потрібним, оскільки більша частина цікавих спостережуваних величин відповідає $SU(2)$ інваріантним операторам. Як буде показано нижче, розрахунок $SU(2)$ інваріантних спостережуваних величин може бути представлений в термінах тільки зведених тензорів.

На жаль, коваріантний стан у випадку $SU(2)$ симетрії розраховується не так просто, як при $U(1)$ симетрії. Причиною є неабелевість $SU(2)$ симетрії. Саме тому додатковий спін не може бути розподілений між багатьма спінами.

Примітка. Якщо система складається з непарної кількості напівцілих спінів, S не може дорівнювати нулю. Але процедура отримання стану з таким S є точно такою, як описано вище.

2.3.2 Перекалібрування $SU(2)$ -симетричного МДС

Спершу покажемо, як матриці Q^L та Q^R , означені в р-нях (25), (26), приводяться до $SU(2)$ -симетричної форми. Використовуючи співвідношення ортогональності $3j$ -символів, легко показати, що

$$\begin{aligned}
Q_{(j',t',m'),(j'',t'',m'')}^R &= \sum_{\sigma_i} (M^{[i],\sigma_i} M^{[i],\sigma_i\dagger})_{(j',t',m'),(j'',t'',m'')} = \sum_{j,t} \mathcal{M}_{(j't'),(jt)}^{[i]} \mathcal{M}_{(j''t''),(jt)}^{[i]*} \times \\
&\times (\sum_{m,s_i} (C_{m',s_i,m}^{j',s,j})^2) = \delta_{j',j''} \delta_{m',m''} \cdot (\frac{1}{2j'+1} \sum_{j,t} \mathcal{M}_{(j't'),(jt)}^{[i]} \mathcal{M}_{(j''t''),(jt)}^{[i]*} \delta(j,s,j')) = \\
&= \delta_{j',j''} \delta_{m',m''} \mathcal{Q}_{(j't'),(j''t'')} = \delta_{j',j''} \delta_{m',m''} \mathcal{Q}_{\gamma',\gamma''}
\end{aligned}$$

$(\delta(j, s, j') = 1$, якщо j, s, j' задовільняють «правило трикутника», і 0 в іншому випадку). Схожу рівність можна отримати також для $\sum_{\sigma_i} M^{[i],\sigma_i\dagger} M^{[i],\sigma_i}$. Щодо додаткового спіну, єдина різниця полягає в тому, що $\delta(j, s, j')$ заміняється на $\delta(j, S, j')$.

Наведене вище співвідношення являє собою $SU(2)$ -симетричну форму тензора 2-го рангу Q . (γ', m') , (γ'', m'') -ий елемент $Q^{L/R}$ не залежить від проекції спіну. Завдяки двом символам Кронекера $Q^{L/R}$ виглядає як

$$Q = \bigoplus_j Q_j^{t_j \times t_j} \otimes \mathbb{1}^{(2j+1) \times (2j+1)} \quad (95)$$

де $Q_j = Q_j^\dagger$ для будь-якого j . Матриця $\mathcal{Q} = \bigoplus_j Q_j^{t_j \times t_j}$ є зведеним тензором $SU(2)$ -симетричного тензора 2-го рангу Q .

Під час перекалібрування матриці $M^{[i],\sigma_i}$ множиться на певну матрицю X зліва (праве нормування) або справа (ліве нормування). Матриця X розраховується з рівняння

$$\begin{cases} X^\dagger Q X = \mathbb{1}^{\sum_j t_j(2j+1) \times \sum_j t_j(2j+1)}, & \text{ліве нормування} \\ X Q X^\dagger = \mathbb{1}^{\sum_j t_j(2j+1) \times \sum_j t_j(2j+1)}, & \text{праве нормування} \end{cases}$$

$\mathbb{1}^{\sum_j t_j(2j+1) \times \sum_j t_j(2j+1)}$ можна записати як $\bigoplus_j \mathbb{1}^{t_j \times t_j} \otimes \mathbb{1}^{(2j+1) \times (2j+1)}$. Тоді X має форму

$$X = \bigoplus_j X_j^{t_j \times t_j} \otimes \mathbb{1}^{(2j+1) \times (2j+1)} \quad (96)$$

де

$$\begin{cases} X_j^\dagger Q_j X_j = \mathbb{1}^{t_j \times t_j}, & \text{ліве нормування} \\ X_j Q_j X_j^\dagger = \mathbb{1}^{t_j \times t_j}, & \text{праве нормування} \end{cases}$$

Кожна матриця X_j розраховується так само, як і X в алгоритмі без симетрій (див. Додаток А). Матриця X^{-1} , очевидно, також матиме форму (96). Матриця $\mathcal{X} = \bigoplus_j X_j$ є зведенім тензором тензора 2-го рангу X .

Шляхом прямих викладок можна переконатися в наступному. Коли $SU(2)$ -інваріантний тензор множиться на X (або X^{-1}) зліва або справа, його блоки $(\mathcal{M}^{[i]})_{j_L, j_R} \otimes C_{s_i, j_L, j_R}$ стають рівними $(\mathcal{M}'^{[i]})_{j_L, j_R} \otimes C_{s_i, j_L, j_R}$ (де $(\mathcal{M}'^{[i]})_{j_L, j_R}$ є відповідними блоками *перекаліброваної* матриці $\mathcal{M}'^{[i]}$). Наприклад, при лівому корегуванні $\mathcal{M}_{j_L, j_R} \otimes C_{s_i, j_L, j_R}$ множиться на $X_{j_R} \otimes \mathbb{1}^{(2j_R+1) \times (2j_R+1)}$. Отже, принципова структура МДС не змінюється в процесі перекалібрування. Змінюються тільки матриця $\mathcal{M}^{[i]}$. Як наслідок, можна перекалібровувати (специфічним чином) не повний МДС-тензор $M^{[i]}$, а зведений тензор $\mathcal{M}^{[i]}$.

Відповідна процедура перекалібрування виглядає так: вводяться зведені тензори 2-го рангу $\mathcal{Q} = \bigoplus_j Q_j^{t_j \times t_j}$ та $\mathcal{X} = \bigoplus_j X_j^{t_j \times t_j}$. Очевидно, \mathcal{Q} та \mathcal{X} мають такі самі розміри, як і \mathcal{M} .

\mathcal{Q} поблоконо розкладається за власними числами (див. Додаток А). \mathcal{X} розраховується поблоконо, використовуючи р-ня $X_j^\dagger Q_j X_j = \mathbb{1}$ or $X_j Q_j X_j^\dagger = \mathbb{1}$ (для відповідно лівого та правого нормування). І тоді $\mathcal{M}^{[i]}$ для відповідної частинки множиться на \mathcal{X} , а $\mathcal{M}^{[i \pm 1]}$ множиться на \mathcal{X}^{-1} .

2.3.3 Пряме формулювання варіаційного алгоритму у випадку $SU(2)$ -симетричного МДС

Алгоритм для $SU(2)$ -симетричного МДС можна сформулювати так само, як і алгоритм без симетрій, використовуючи МДО розміру $m_W \times m_W$ для

додаткового спіну:

$$W^{[N+1]} = \begin{pmatrix} \mathbb{1}^{(2S+1) \times (2S+1)} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \mathbb{1}^{(2S+1) \times (2S+1)} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \mathbb{1}^{(2S+1) \times (2S+1)} & \dots & 0 \\ & & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \mathbb{1}^{(2S+1) \times (2S+1)} \end{pmatrix}.$$

Однак виведення задачі на власні значення має специфічну рису, аналогічну випадку U(1) симетрії. Лагранжіан $\mathbb{L} = \langle \psi | H | \psi \rangle - \epsilon \langle \psi | \psi \rangle$ потрібно мінімізувати відносно тензора $M^{[i]*}$. Випишемо цей лагранжіан в розгорнутій формі:

$$\begin{aligned} \mathbb{L} = & \sum_{b_{i-1}, b_i} \sum_{\sigma_i, a_{i-1}, a_i} \sum_{\sigma'_i, a'_{i-1}, a'_i} (M_{a_{i-1}, a_i}^{[i], \sigma_i*} W_{b_{i-1}, b_i}^{[i], \sigma_i \sigma'_i} M_{a'_{i-1}, a'_i}^{[i], \sigma'_i}) (H_R^{[i]} \cdot H_L^{[i]})_{(b_i a_i a'_i), (b_{i-1} a_{i-1} a'_{i-1})} - \\ & - \epsilon \sum_{\sigma_i, a_{i-1}, a_i} \sum_{\sigma'_i, a'_{i-1}, a'_i} (M_{a_{i-1}, a_i}^{[i], \sigma_i*} \delta_{\sigma_i, \sigma'_i} M_{a'_{i-1}, a'_i}^{[i], \sigma'_i}) (N_R^{[i]} \cdot N_L^{[i]})_{(a_i a'_i), (a_{i-1} a'_{i-1})}. \quad (97) \end{aligned}$$

Пригадуємо, що $M_{a_{i-1}, a_i}^{[i], \sigma_i*} = \mathcal{M}_{\gamma_{i-1}, \gamma_i}^{[i]*} C_{m_{i-1}, s_i, m_i}^{j_{i-1}, s, j_i}$ та $M_{a'_{i-1}, a'_i}^{[i], \sigma'_i} = \mathcal{M}_{\gamma'_{i-1}, \gamma'_i}^{[i]} C_{m'_{i-1}, s'_i, m'_i}^{j'_{i-1}, s, j'_i}$. Отже, часткова похідна має братись за зведенім матричним елементом і покладатись рівною нулю: $\frac{\partial \mathbb{L}}{\partial \mathcal{M}_{\gamma_{i-1}, \gamma_i}^{[i]*}} = 0$. До того ж, множина лінійних рівнянь тепер матиме як змінні уже зведені матричні елементи $\mathcal{M}_{\gamma_{i-1}, \gamma_i}^{[i]}$. Таким чином, задача на власні значення формулюється так, що є необхідність безпосередньо врахувати C -множники, які відповідають $\mathcal{M}_{\gamma_{i-1}, \gamma_i}^{[i]*}$ та $\mathcal{M}_{\gamma'_{i-1}, \gamma'_i}^{[i]}$. Отже, задачі на власні значення «зводиться» до

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}^{[i]} \nu^{[i]} = \epsilon \mathcal{N}_{\text{eff}}^{[i]} \nu^{[i]} \quad (98)$$

де $\nu_{[\gamma_i \gamma_{i-1}]}^{[i]} = \mathcal{M}_{\gamma_{i-1}, \gamma_i}^{[i]}$. Проектор $P^{[i]}$ «зводиться» аналогічно (результатуюча задача на власні значення виглядає як $(\mathcal{P}^{[i]} \mathcal{H}_{\text{eff}}^{[i]} \mathcal{P}^{[i]\dagger})(\mathcal{P}^{[i]} \nu^{[i]}) = \epsilon (\mathcal{P}^{[i]} \mathcal{N}_{\text{eff}}^{[i]} \mathcal{P}^{[i]\dagger})(\mathcal{P}^{[i]} \nu^{[i]})$).

Така процедура, коли задача на власні значення зазнає перетворення від повних до зведеніх матричних елементів, є спеціальним проектуванням ма-

триць $H_{\text{eff}}^{[i]}$ та $N_{\text{eff}}^{[i]}$. Так як дана процедура притаманна саме $SU(2)$ симетрії, назовемо відповідний проектор $P_{SU(2)}$. «Зведені» $\mathcal{H}_{\text{eff}}^{[i]}$ та $\mathcal{N}_{\text{eff}}^{[i]}$ отримуються з $H_{\text{eff}}^{[i]}$ та $N_{\text{eff}}^{[i]}$ як

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}^{[i]} = P_{SU(2)} H_{\text{eff}}^{[i]} P_{SU(2)}^\dagger$$

$$\mathcal{N}_{\text{eff}}^{[i]} = P_{SU(2)} N_{\text{eff}}^{[i]} P_{SU(2)}^\dagger$$

Таке пряме впровадження $SU(2)$ симетрії в алгоритм для МДС з ПКУ має один великий недолік. Так як зазвичай необхідними є розрахунки з МДС великого розміру (приблизно 60-120), H -блоки стають дуже великими. І, незважаючи на свою сильну розрідженість, вони дуже уповільнюють розрахунки, що виконуються з використанням цього алгоритму.

2.3.4 Алгоритм для ПКУ з використанням тільки зведених тензорів

Пригадаємо, що спостережувані величини та «блоки» розраховуються з використанням трансферних операторів $E_W^{[i]}$. Так як ці оператори складаються лише з МДС та МДО:

$$(E_W^{[i]})_{(b_{i-1}, a_{i-1}, a'_{i-1}), (b_i, a_i, a'_i)} = \sum_{\sigma_i, \sigma'_i} W_{b_{i-1}, b_i}^{[i], \sigma_i, \sigma'_i} A_{a_{i-1}, a_i}^{[i], \sigma_i*} B_{a'_{i-1}, a'_i}^{[i], \sigma'_i},$$

а за фізичними індексами проводиться сумування, кожен трансферний оператор позначається лише віртуальними індексами МДС/МДО. Отже, те саме має місце і для тензора «блока».

МДО отримується з $SU(2)$ -інваріантного гамільтоніана, отже, кожен МДО-тензор сам є $SU(2)$ -симетричним і може бути записаний в $SU(2)$ -симетричній формі (як і МДС). Таким чином, всі блоки $H_L^{[i]}$, $H_R^{[i]}$, $N_L^{[i]}$, $N_R^{[i]}$, $O_{L,k}^{[i]}$, $O_{R,k}^{[i]}$ також є $SU(2)$ -симетричними операторами і можуть бути представлені аналогічно.

Як наслідок, існує можливість задати структуру зі зведенеми тензорами не лише для МДС, а для *всіх* тензорів в алгоритмі. Сам же алгоритм може

бути сформульований в термінах лише зведених тензорів (вони будуть використані для прямого утворення задачі на власні значення (98)). Всі структурні частини (індекси проекцій спіну) будуть повністю виключені з алгоритму. Як результат, розрахунки стануть набагато ефективнішими і їх можна буде проводити навіть для дуже великих (понад 100) розмірів МДС.

Аналогічна робота була пророблена МакКаллоком [77] для відкритих краївих умов. Принциповою різницею між ВКУ та ПКУ є те, що при ПКУ блоки мають ранг не 3, а 6, і їхня SU(2)-симетрична форма є досить нетривіальною. Так як ми маємо в алгоритмі тензори рангу 3 (МДС), 4 (МДО) та 6 (блоки), необхідно означити загальну SU(2)-симетричну форму тензора будь-якого рангу.

Найзручніший шлях зробити це - розглянути кожен віртуальний/фізичний індекс окремо. Їх необхідно розкласти вищезгаданим способом: на індекси спіну, проекції спіну та виродження. Приймемо в подальшому наступні позначення: $b_{i-1} = \{j_{i-1}^W, t_{i-1}^W, m_{i-1}^W\}$, $b_i = \{j_i^W, t_i^W, m_i^W\}$, $a_{i-1} = \{j_{i-1}, t_{i-1}, m_{i-1}\}$, $a'_{i-1} = \{j'_{i-1}, t'_{i-1}, m'_{i-1}\}$, $a_i = \{j_i, t_i, m_i\}$, $a'_i = \{j'_i, t'_i, m'_i\}$ (верхній індекс "W" тут означає взаємодію). Те саме має місце для краївих індексів: $b_N = \{j_N^W, t_N^W, m_N^W\}$, $a_N = \{j_N, t_N, m_N\}$, $a'_N = \{j'_N, t'_N, m'_N\}$. Фізичні індекси σ_i та σ'_i в МДС та МДО відповідають єдиному невиродженному представленню спіну s , отже, у випадку зведених тензорів вони будуть тривіальними.

При означенні SU(2)-*інваріантних* тензорів T_{a_1, \dots, a_k} рангу k припускається, що кожен індекс вже розкладений на індекси спіну, виродження та проекції спіну, наприклад, $a_1 = (j_1, t_1, m_{j_1})$. Загальна форма [78, 81] елемента SU(2)-інваріантного тензора рангу k виглядає як (для $k \geq 3$)

$$T_{a_1, a_2, \dots, a_k} = \sum_{\substack{j_{e_1}, t_{e_1}, m_{e_1} \\ \dots \\ j_{e_{k-3}}, t_{e_{k-3}}, m_{e_{k-3}}}} (\mathcal{T}^{j_{e_1}, \dots, j_{e_{k-3}}})_{\gamma_{a_1}, \gamma_{a_2}, \dots, \gamma_{a_k}} \cdot (Q_{j_{a_1}, j_{a_2}, \dots, j_{a_k}}^{j_{e_1}, \dots, j_{e_{k-3}}})_{m_{a_1}, m_{a_2}, \dots, m_{a_k}, m_{e_1}, \dots, m_{e_{k-3}}} \quad (99)$$

де e_1, \dots, e_{k-3} - проміжні індекси, за якими необхідно провести сумування,

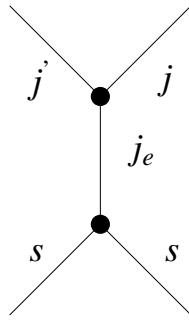


Рис. 16: Схема парування спінів, що відповідає розкладу тензора W 4-го рангу (р-ня (100)). Кожна вершина відповідає C -множнику. Проводиться сумування за внутрішнім індексом.

$(\mathcal{T}^{j_{e_1}, \dots, j_{e_{k-3}}})_{\gamma_{a_1}, \gamma_{a_2}, \dots, \gamma_{a_k}}$ - зведений тензорний елемент, а $Q_{j_{a_1}, j_{a_2}, \dots, j_{a_k}}^{j_{e_1}, \dots, j_{e_{k-3}}}$ - переплетення $SU(2)$ рангу k (узагальнений коефіцієнт Клебша-Гордана).

Переплетення (англ. “intertwiner”) рангу k можна розкласти як добуток C -множників, означених в р-ні (92). Можливі різні варіанти розкладів, і всі вони можуть бути представлені як схеми парування спінів (детальніше це пояснено в [86]). Вони використовуються в роботі замість дерев злиття-розділля [78, 81]. В даній роботі обираються найзручніші схеми парування з можливих.

Очевидно, МДС-тензор (91) є частковим випадком (99) при $k = 3$ (проміжних індексів немає, а індекс σ_i тривіально розкладається як $\sigma_i = (s, 1, s_i)$ або просто $\sigma_i = (s, s_i)$). Отже, зведений МДС-тензор, строго кажучи, має бути позначений як $\mathcal{M}_{\gamma_{i-1}, \gamma_i}^{[i], s}$, але тривіальний індекс s зазвичай відкидають). Analogічно можна розкласти МДО рангу 4 (він має один проміжний індекс e). Деталі наведені в Розділі 2.3.5. Okрім того, якщо розглянути $N_L^{[i]}, N_R^{[i]}, O_{L,k}^{[i]}, O_{R,k}^{[i]}$ як тензори рангу 6 з тривіальними віртуальними індексами МДО, всі тензори блоків - $H_L^{[i]}, H_R^{[i]}, N_L^{[i]}, N_R^{[i]}, O_{L,k}^{[i]}, O_{R,k}^{[i]}$ - можна розкласти таким самим чином (вони матимуть три проміжні індекси e_1, e_2, e_3). Деталі наведені в Розділі 2.3.7.

Як результат, крок оптимізації (98) виводиться природним чином (деталі наводяться в Розділі 2.3.8). Нова матриця $\mathcal{M}^{[i]}$ тоді отримується відповідним переформуванням вектора $\nu^{[i]}$ в матрицю: $\mathcal{M}_{\gamma_{i-1}, \gamma_i}^{[i]} = \nu_{[\gamma_i \gamma_{i-1}]}^{[i]}$, разом з нулями для тих тензорних елементів, для яких не виконується «правило трикутника».

2.3.5 Зведені представлення МДО

Проілюструємо утворення $SU(2)$ -інваріантних тензорів на МДО-тензорах $W^{[i]}$. Ці тензори мають ранг 4, отже, потрібен один проміжний індекс $e = (j_e, m_e)$. МДО має два фізичні індекси $\sigma_i = (s, 1, s_i)$ та $\sigma'_i = (s, 1, s'_i)$ (якщо на кожній позиції знаходяться частинки однакового спіну s) і два віртуальні індекси $(j_{i-1}^W t_{i-1}^W m_{i-1}^W), (j_i^W t_i^W m_i^W)$. Тензор W розкладається як

$$W_{(j_{i-1}^W t_{i-1}^W m_{i-1}^W), (j_i^W t_i^W m_i^W)}^{[i], (s, 1, s_i), (s, 1, s'_i)} = \sqrt{2s+1} \sum_{j_e, m_e} \mathcal{W}_{(j_{i-1}^W t_{i-1}^W), (j_i^W t_i^W)}^{[i], j_e} C_{m_{i-1}^W, m_e, m_i^W}^{j_{i-1}^W, j_e, j_i^W} C_{s_i, m_e, s'_i}^{s, j_e, s} \quad (100)$$

де зведений тензор $\mathcal{W}_{\gamma_{i-1}^W, \gamma_i^W}^{[i], j_e}$ має ранг 3 (множник $\sqrt{2s+1}$ вводиться для зручності, щоб винести з представлення одиничного тензора множник, залежний від s). Строго кажучи, зведений тензор має бути позначений як $\mathcal{W}_{\gamma_{i-1}^W, \gamma_i^W}^{[i], j_e, s, s}$, але два тривіальні індекси s відкидаються. Також звертаємо увагу, що $t_e = 1$, оскільки додавання двох однакових спінів s дає невироджений спін. Наведене означення зведеного тензора відповідає схемі парування спінів, показаній на рис. 16.

Зробимо важливе зауваження. Виносити множник $\sqrt{2s+1}$ можна, тільки якщо кожна частинка системи містить єдине представлення спіну (це не має місце, приміром, в біквадратній моделі Гайзенберга зі спіном 1, якщо її записати в $SU(3)$ -симетричній формі).

2.3.6 Зведене представлення МДО для ББГ гамільтоніана

Через обмеження, що накладаються структурними C -множниками, та сильну розрідженість МДО в його незведеній формі багато елементів зведеного тензора дорівнюють нулю. Тому зведений тензор \mathcal{W} має характерну розріджену структуру. Продемонструємо це на прикладі ББГ гамільтоніана зі спіном s .

Тензори W для цього гамільтоніана та їхні зведені представлення \mathcal{W} можуть бути отримані *точно*. W -тензори мають розмір $11 \times 11 \times s \times s$, що може бути згрупованій в три $SU(2)$ синг'лети, один триплет та один квінтет. Отже, зведене представлення характеризується множиною кратностей

$T = \{(0, 3), (1, 1), (2, 1)\}$ для віртуальних розмірностей МДО.

Для побудови зведеного тензора $\mathcal{W}_H^{[i]}$ для ББГ гамільтоніана зі спіном s цей гамільтоніан переписується в термінах тензорів $C_{s_i, m_e, s'_i}^{s, j_e, s}$, тобто спінові матриці заміняються C -тензорами. В загальному випадку присутні доданки з $j_e = 0, 1, \dots, 2s - 1, 2s$, але для даного гамільтоніана ненульовими є тільки доданки з $j_e \leq 2$.

Таким чином, для частинки $i = 1$ матриці \mathcal{W}_H дорівнюють

$$\begin{aligned} \mathcal{W}_H^{[1],0} &= \begin{pmatrix} 0 & w_0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & w_0 \cdot \Sigma_0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \mathcal{W}_H^{[1],1} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & w_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & w_1 \cdot \Sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \mathcal{W}_H^{[1],2} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & w_2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & w_2 \cdot \Sigma_0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{101}$$

Для інших частинок $i = 2, \dots, N$ матриці дорівнюють

$$\begin{aligned} \mathcal{W}_H^{[i],0} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ w_0 \cdot \Sigma_0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & w_0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \mathcal{W}_H^{[i],1} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & w_1 & 0 \\ w_1 \cdot \Sigma_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \mathcal{W}_H^{[i],2} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & w_2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ w_2 \cdot \Sigma_0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (102)$$

де

$$\begin{aligned} w_0 &= \sqrt{\frac{1}{3} |\sin \theta| s^2 (s+1)^2}, \\ w_1 &= \sqrt{\frac{3}{2} |\sin \theta - 2 \cos \theta| s(s+1)}, \\ w_2 &= \sqrt{\frac{10}{3} |\sin \theta| (s - \frac{1}{2})s(s+1)(s + \frac{3}{2})} \end{aligned} \quad (103)$$

а також $\Sigma_0 = \text{Sgn}(\sin \theta)$ та $\Sigma_1 = \text{Sgn}(\sin \theta - 2 \cos \theta)$. Виходить, що $w_2 = 0$ і відповідно $\mathcal{W}^{[i],2} = 0$ для $s = 1/2$. Через ПКУ тензори для першої частинки відрізняються від тензорів для решти частинок.

Зведений тензор для відповідних одиничних МДО має вигляд

$$\mathcal{W}_1^{[i],0} = \text{diag}\{\sqrt{2j+1}\}, \quad (104)$$

тобто є діагональною матрицею, утвореною з усіх спінів j множини кратностей T . Наприклад, для множини $T = \{(0, 3), (1, 1), (2, 1)\}$ зведений одиниця

чний оператор виглядає як

$$\mathcal{W}_1^{[N+1],0} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{5} \end{pmatrix}. \quad (105)$$

Ця матриця використовується для додаткового спіну.

Для Гайзенбергового антиферомагнетика ($\theta = 0$) чи феромагнетика ($\theta = \pi$) МДО можна спростити. Отримуємо: $w_0 = w_2 = 0$, $\Sigma_0 = 0$, $\Sigma_1 = -\text{Sgn}(\cos \theta) = \mp 1$, $\mathcal{W}^{[i],2} = 0$. Отже, квінтет та один синг'лет можна відкинути, і базис стає $T = \{(0, 2), (1, 1)\}$. Тоді зведені тензори набувають вигляду: для $i = 1$

$$\mathcal{W}_H^{[1],0} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{W}_H^{[1],1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \omega_1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & \omega_1 \cdot \Sigma_1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (106)$$

а для інших частинок $i = 2, \dots, N$

$$\mathcal{W}_H^{[i],0} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{W}_H^{[i],1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \omega_1 \\ \omega_1 \cdot \Sigma_1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (107)$$

де $\omega_1 = \sqrt{3s(s+1)}$. Зведений одиничний тензор для додаткового спіну скрочується до

$$\mathcal{W}_1^{[N+1],0} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3} \end{pmatrix}. \quad (108)$$

МДО для оператора димеризації можна отримати аналогічно.

2.3.7 Зведені тензори блоків

Як згадувалось раніше, розрахунок матричних елементів МДС через МДО приводить до добутку скінченної кількості трансферних тензорів. Тен-

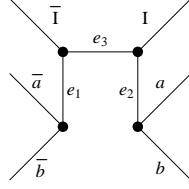


Рис. 17: Схема парування спінів, що відповідає розкладу тензорів блоків H , N або O_k (див. р-ня (109)). Кожна вершина відповідає C -множнику. Проводиться сумування за внутрішніми індексами.

зори «блоків» $H_L^{[i]}$, $H_R^{[i]}$, $N_L^{[i]}$, $N_R^{[i]}$, $O_{L,k}^{[i]}$, $O_{R,k}^{[i]}$, необхідні для побудови узагальненої задачі на власні значення (98), також є добутками скінченної кількості трансферних тензорів. Розмір блока можна збільшити шляхом множення вже наявного блока на трансферний тензор справа або зліва. В загальному випадку ці блоки позначатимуться як $B_L^{[i]}$ та $B_R^{[i]}$.

В зведеній формі ці тензори мають три проміжні індекси e_1 , e_2 , e_3 , отже, $\mathcal{B}_{L/R}^{[i]}$ мають ранг 9. Для означення таких зведених тензорів обирається схема парування спінів, показана на рис. 17, що відповідає наступному виразу для, приміром, лівого блока

$$(B_L^{[i]})_{(b_N, a_N, a'_N), (b_{i-1}, a_{i-1}, a'_{i-1})} = \sum_{\substack{j_{e_1}, m_{e_1} \\ j_{e_2}, m_{e_2} \\ j_{e_3}, m_{e_3}}} (\mathcal{B}_L^{[i], j_{e_1}, j_{e_2}, j_{e_3}})_{(\gamma_N^W, \gamma_N, \gamma'_N), (\gamma_{i-1}^W, \gamma_{i-1}, \gamma'_{i-1})} \times \\ \times C_{m_N, m_{e_1}, m'_N}^{j_N, j_{e_1}, j'_N} C_{m_N^W, m_{e_3}, m_{e_1}}^{j_{e_3}, j_{e_2}, j_{e_1}} C_{m_{i-1}, m_{e_2}, m'_{i-1}}^{j_{i-1}, j_{e_2}, j'_{i-1}} C_{m_{i-1}^W, m_{e_3}, m_{e_2}}^{j_{i-1}^W, j_{e_3}, j_{e_2}}. \quad (109)$$

Без обмеження загальності можна взяти $t_{e_1} = t_{e_2} = t_{e_3} = 1$. Для N - та O -блоків $j_N^W = j_{i-1}^W = 0$ (плюс $\gamma_N^W = \gamma_{i-1}^W = 1$) і, відповідно, $j_{e_1} = j_{e_2} = j_{e_3}$. Для правих блоків можна записати аналогічну рівність. Використовуючи співвідношення ортогональності $3j$ -символів [86], можна виразити тензорні елементи зведеного блока $\mathcal{B}_{L/R}^{[i]}$ через тензорні елементи $B_{L/R}^{[i]}$.

Під час процедури корегування довжина блока зростає через множення на трансферний оператор зліва чи справа. Необхідно визначити скореговані *зведені* блоки з попередніх зведених блоків. Для цього потрібно аналітично провести сумування за проміжними проекціями спіну, використовуючи відповідні формули сум для $3j$ -символів. Такі формули можна знайти, приміром,

в [86], і в цьому розділі я строго дотримуюсь відповідного формалізму.

Збільшення зведеного лівого блока на одну трансферну матрицю може бути виражене через наступну рекурентну формулу:

$$(\mathcal{B}_L^{[i+1],j_{e_1},j_{e_2},j_{e_3}})_{(b_N,a_N,a'_N),(b_i,a_i,a'_i)} = (2j_{e_2} + 1) \sum_{\substack{j_e, j_{\underline{e}_2} \\ \gamma_{i-1}^W, \gamma_{i-1}, \gamma'_{i-1}}} \begin{bmatrix} j'_i & S_i & j'_{i-1} \\ j_i^W & j_e & j_{i-1}^W \\ j_i & S_i & j_{i-1} \\ j_{e_2} & j_{e_3} & j_{\underline{e}_2} \end{bmatrix} \times \\ \times (\mathcal{B}_L^{[i],j_{\underline{e}_1},j_{\underline{e}_2},j_{e_3}})_{(b_N,a_N,a'_N),(b_{i-1},a_{i-1},a'_{i-1})} \sqrt{2S_i + 1} \mathcal{W}_{\gamma_{i-1}^W, \gamma_i^W}^{[i],j_e} \alpha_{\gamma_{i-1}, \gamma_i}^{[i]*} \beta_{\gamma'_{i-1}, \gamma'_i}^{[i]}. \quad (110)$$

Аналогічна формула для правого блока виглядає як

$$(\mathcal{B}_R^{[i-1],j_{e_1},j_{e_2},j_{e_3}})_{(b_{i-1},a_{i-1},a'_{i-1}),(b_N,a_N,a'_N)} = (2j_{e_1} + 1) \sum_{\substack{j_e, j_{\underline{e}_1} \\ \gamma_i^W, \gamma_i, \gamma'_i}} \begin{bmatrix} j'_i & S_i & j'_{i-1} \\ j_i^W & j_e & j_{i-1}^W \\ j_i & S_i & j_{i-1} \\ j_{\underline{e}_1} & j_{e_3} & j_{e_1} \end{bmatrix} \times \\ \times (\mathcal{B}_R^{[i],j_{\underline{e}_1},j_{\underline{e}_2},j_{e_3}})_{(b_i,a_i,a'_i),(b_N,a_N,a'_N)} \sqrt{2S_i + 1} \mathcal{W}_{\gamma_{i-1}^W, \gamma_i^W}^{[i],j_e} \alpha_{\gamma_{i-1}, \gamma_i}^{[i]*} \beta_{\gamma'_{i-1}, \gamma'_i}. \quad (111)$$

Тут

$$\begin{bmatrix} j_{11} & j_{12} & j_{13} \\ j_{21} & j_{22} & j_{23} \\ j_{31} & j_{32} & j_{33} \\ j_{41} & j_{42} & j_{43} \end{bmatrix} = (-1)^{j_{21}+j_{22}+j_{42}+j_{43}} \left\{ \begin{array}{c} j_{11} \quad j_{12} \quad j_{13} \\ j_{41} \quad j_{22} \quad j_{43} \\ j_{31} \quad j_{32} \quad j_{33} \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{c} j_{21} \quad j_{22} \quad j_{23} \\ j_{43} \quad j_{42} \quad j_{41} \end{array} \right\}. \quad (112)$$

Вирази в фігурних дужках позначають відповідно 9j-символ Вігнера і 6j-символ Рака. Матриці $\alpha^{[i]}$ та $\beta^{[i]}$ є зведеними тензорами, що відповідають МДС $A^{[i]}$ та $B^{[i]}$, а $\mathcal{W}^{[i]}$ є зведенним W -тензором МДО. Локальний спін $S_i = s$ для $i \leq N$ та $S_i = S$ для додаткового спіну. Рекурсія починається зі зведеного одиничного тензора блока, який легко отримати з р-ня (109):

$$\mathcal{I}_{(\bar{\gamma}^W, \bar{\gamma}, \bar{\gamma}'), (\underline{\gamma}^W, \underline{\gamma}, \underline{\gamma}')}^{j_{e_1}, j_{e_2}, j_{e_3}} = (2j_{e_1}+1)(2j_{e_3}+1) \delta_{\bar{\gamma}^W, \underline{\gamma}^W} \delta_{\bar{\gamma}, \underline{\gamma}} \delta_{\bar{\gamma}', \underline{\gamma}'} \delta_{j_{e_1}, j_{e_2}} \delta(j, j_{e_2}, j') \delta(j, j_{e_3}, j_{e_2}) \quad (113)$$

де $\delta(j_1, j_2, j_3) = 1$, якщо j_1, j_2, j_3 задовільняють «правило трикутника», і 0 в іншому випадку.

Може виникнути запитання: чому один з проміжних індексів (j_{e_1} при лівому корегуванні та j_{e_2} при правому корегуванні), по суті, «не бере участі» в корегуванні? Відповідь така: цей індекс непрямо присутній через наявність $\delta_{j_{e_1}, j_{e_2}}$ в початковому одиничному тензорі. І все ж розрахунки можуть бути суттєво пришвидшенні: виявляється, що ненульові елементи блоків, які виникають після корегувань, задовільняють умову $|j_{e_1} - j_{e_2}| \leq \max(j_e)$.

Варто зробити зауваження. Зведені блоки (особливо це стосується H -блоків) є дуже розрідженими. Тому є сенс використовувати програмне за-безпечення, що дозволяє ефективне множення та операції розрідженими тензорами *високого рангу*. В даній роботі використовується *Mathematica*.

2.3.8 Задача на власні значення в термінах зведених тензорів

Зведений ефективний гамільтоніан $\mathcal{H}_{\text{eff}}^{[i]}$ та зведена ефективна нормувальна матриця $\mathcal{N}_{\text{eff}}^{[i]}$ для узагальненої задачі на власні значення (98) визначаються зі співвідношення

$$(\mathcal{O}_{\text{eff}}^{[i]})_{[\gamma_i \gamma_{i-1}], [\gamma'_i \gamma'_{i-1}]} = \sum_{\substack{j_e, j_{e_1}, j_{e_2}, j_{e_3}, j_{e'_1} \\ \gamma_{i-1}^W, \gamma_i^W, \gamma_N^W, \gamma_N, \gamma'_N}} \frac{\sqrt{2S_i + 1}}{(2j_{e_1} + 1)(2j_{e_3} + 1)} \begin{bmatrix} j'_i & S_i & j'_{i-1} \\ j_i^W & j_e & j_{i-1}^W \\ j_i & S_i & j_{i-1} \\ j_{e'_1} & j_{e_3} & j_{e_2} \end{bmatrix} \mathcal{W}_{\gamma_{i-1}^W, \gamma_i^W}^{[i], j_e} \times \\ \times (\mathcal{B}_R^{[i], j_{e'_1}, j_{e_1}, j_{e_3}})_{(\gamma_i^W, \gamma_i, \gamma'_i), [\gamma_N^W, \gamma_N, \gamma'_N]} (\mathcal{B}_L^{[i], j_{e_1}, j_{e_2}, j_{e_3}})_{[\gamma_N^W, \gamma_N, \gamma'_N], (\gamma_{i-1}^W, \gamma_{i-1}, \gamma'_{i-1})} \quad (114)$$

Звісно, для $\mathcal{N}_{\text{eff}}^{[i]}$ треба взяти зведений тензор $\mathcal{W}_{\gamma_{i-1}^W, \gamma_i^W}^{[i], 0} = 1$ одиничного опера-тора, що призводить до важливих спрощень в $6j$ - і $9j$ -символах.

Так само отримується зведений вектор $y_k^{[i]}$ для розрахунку збуджених ста-

нів згідно з р-ням (53):

$$(y_k^{[i]})_{[\gamma_i \gamma_{i-1}]} = \sum_{\substack{j_{e_1} \\ \gamma'_{i-1}, \gamma'_i, \gamma_N, \gamma'_N}} \frac{1}{(2j_{e_1} + 1)^2} \begin{bmatrix} j'_i & S_i & j'_{i-1} \\ 0 & 0 & 0 \\ j_i & S_i & j_{i-1} \\ j_{e_1} & j_{e_1} & j_{e_1} \end{bmatrix} \sqrt{2S_i + 1} \times \\ \times (\mathcal{O}_{R,k}^{[i], j_{e_1}, j_{e_1}, j_{e_1}})_{(1, \gamma_i, \gamma'_i), [1 \gamma_N \gamma'_N]} (\mathcal{O}_{L,k}^{[i], j_{e_1}, j_{e_1}, j_{e_1}})_{[1 \gamma_N \gamma'_N], (1, \gamma_{i-1}, \gamma'_{i-1})} (\phi_k^{[i]})_{\gamma'_{i-1}, \gamma'_i} \quad (115)$$

де $\phi_k^{[i]}$ позначає тензор, зведений від МДС-тензора $\Phi_k^{[i]}$.

2.3.9 Розрахунок спостережуваних величин

Якщо оператор O спостережуваної величини є SU(2)-інваріантним, його спостережуване значення (69) може бути розраховане з використанням тільки зведених тензорів. (На разі в роботі зведені тензори не використовуються у випадку SU(2)-коваріантних операторів) Використовуючи р-ня (27) для оператора та р-ня (94) для хвильової функції $|SM\rangle$, можна записати

$$\langle S'M'|O|SM\rangle = \delta_{S'S} \delta_{M'M} \times \text{Tr}\left[\left(\sum_{\sigma_1, \sigma'_1} W^{[1], \sigma_1, \sigma'_1} \otimes M^{[1], \sigma_1*} \otimes M^{[1], \sigma'_1}\right) \times \cdots \times \right. \\ \left. \times \left(\sum_{\sigma_N, \sigma'_N} W^{[N], \sigma_N, \sigma'_N} \otimes M^{[N], \sigma_N*} \otimes M^{[N], \sigma'_N}\right) \times (\mathbb{1} \otimes F^{[N+1], (S, 1, -M)*} \otimes F^{[N+1], (S, 1, -M)})\right].$$

Спостережувані значення SU(2)-інваріантного оператора є рівними для різних проекцій спіну: $\langle SM|O|SM\rangle = \langle SM'|O|SM'\rangle$. Отже, можна записати

$$\langle S|O|S\rangle = \frac{1}{2S+1} \sum_M \langle SM|O|SM\rangle = \text{Tr}(E_W^{[1]}(M, M) \cdots E_W^{[N]}(M, M) \times \\ \times E_1^{[N+1]}(F, F)) = \sum_{j_{e_1}, j_{e_3}} \frac{1}{2j_{e_1} + 1} \text{Tr } \mathcal{B}_L^{j_{e_1}, j_{e_1}, j_{e_3}}, \quad (116)$$

якщо МДС-тензор $F^{[N+1]}$ для додаткового спіну нормований так, що $Q^R = \mathbb{1}$.

В останньому рядку спостережуване значення представлене як зведений тензор блока, означений в Розділі 2.3.7. Він розраховується послідовним лівим корегуванням за всіма спінами + за додатковим спіном, починаючи з (113).

Прикладом SU(2)-інваріантного оператора є оператор димеризації. З іншого боку, рядковий корелятор (англ. “string correlator”) не є SU(2)-

симетричним через множник парності $\prod_{j=i+1}^{i+l-1} \exp(i\pi s_j^z)$. Для такого оператора необхідно реконструювати повний МДС (94) і використати МДО в його незведеній формі.

2.3.10 Розрахунок $\langle H^2 \rangle$

Для розрахунку спостережуваного значення $\langle H^2 \rangle$ необхідний МДО квадрату оператора. Він будується так, як вказано в Розділі 2.1.5. Два ліві і два праві віртуальні індекси з'єднуються кожні в один віртуальний індекс, і проводиться сумування за проміжними проекціями фізичного спіну s .

В формалізмі SU(2) симетрії необхідно виразити зведений тензор \mathcal{W} квадрату оператора O^2 через зведений тензор \mathcal{W} оператора O . Для цього використаємо р-ня (7.1.1) та (7.1.5) книги [86]. Отримаємо

$$\begin{aligned} (\mathcal{W}_{O^2})_{[(j_1 t_1)(j_2 t_2)](jt), [(j'_1 t'_1)(j'_2 t'_2)](j't')}^{j_e} &= \\ &= (2j_e + 1) \sqrt{(2j + 1)(2j' + 1)(2s + 1)} (-1)^{j_{e2}} \times \\ &\quad \times \begin{bmatrix} j_1 & j & j_2 \\ s & j_e & s \\ j'_1 & j' & j'_2 \\ j_{e1} & s & j_{e2} \end{bmatrix} (\mathcal{W}_O^{[i]}_{(j_1 t_1), (j'_1 t'_1)})^{j_{e1}} (\mathcal{W}_O^{[i]}_{(j_2 t_2), (j'_2 t'_2)})^{j_{e2}} \end{aligned} \quad (117)$$

Тут j_{e1} та j_{e2} - проміжні індекси зведених тензорів \mathcal{W}_O , а j_e - проміжний індекс зведеного тензора \mathcal{W}_{O^2} . Ліві віртуальні індекси $(j_1 t_1)$ та $(j_2 t_2)$ тензорів \mathcal{W}_O з'єднуються в один індекс (jt) і аналогічно праві віртуальні індекси $(j'_1 t'_1)$ та $(j'_2 t'_2)$ з'єднуються в індекс $(j't')$. Можна одразу побачити з р-ня (117), що для ББГ моделі зі спіном 1 зведений тензор \mathcal{W}_{H^2} має розмірність $3 \times 36 \times 36$, а його віртуальні спіни описуються множиною кратностей $\{(0, 11), (1, 11), (2, 10), (3, 3), (4, 1)\}$. Ці тензори є дуже розрідженими. Варто зауважити, що співвідношення (117) виконується для будь-якого локального спіну s .

РОЗДІЛ 3

РЕЗУЛЬТАТИ

3.1 Загальні міркування

В цьому розділі алгоритми, розроблені в розділі 2, використовуються для аналізу властивостей двох спінових моделей з взаємодією між найближчими сусідами в геометрії кільця: 1) XXZ моделі частинок зі спіном $1/2$; 2) білінійно-біквадратної моделі Гайзенберг'a (ББГ) частинок зі спіном 1. Вивчаються системи *скінченного розміру*. Системи, матриця гамільтонаїна яких може бути прямо діагоналізована (тобто системи до 20 спінів), не вивчаються в роботі (такі результати можуть використовуватись лише для прогнозування поведінки більших систем). В деяких випадках проводиться екстраполяція до термодинамічної границі (для цього використовуються результати для 30 або більше спінів). Варто зазначити, що модифікований алгоритм ПВЕ [72] варто застосовувати для систем зі 100 або більше спінів, де можливе швидке спадання сингулярних чисел добутків трансферних матриць.

Перед початком розрахунків необхідно задати три параметри. Це: 1) розмір МДС m в алгоритмі без симетрій, множина кратностей $T = \{t_{m_1}, \dots, t_{m_n}\}$ (тоді $m = \sum_i t_{m_i}$) в алгоритмі з $U(1)$ симетрією, множина кратностей $T = \{(j_1, t_{j_1}), \dots, (j_n, t_{j_n})\}$ (тоді $m = \sum_i (2j_i + 1)t_{j_i}$) в алгоритмі з $SU(2)$ симетрією; 2) кількість сингулярних чисел p та p' , які утримуються в розкладі добутків трансферних матриць (не в алгоритмі з $SU(2)$ симетрією); 3) необхідна кількість ітерацій N_u .

Звісно, бажано використовувати якнайбільший розмір МДС. Однак через обмеженість оперативної пам'яті використовуються: $m \simeq 40$ (без симетрій), $m \simeq 60$ ($U(1)$ симетрія), $m \simeq 120$ ($SU(2)$ симетрія). (Такий m все одно набагато менший за свій аналог в розрахунках методом РГМГ з ВКУ)

Збіжність алгоритму є експоненційно повільною поблизу мінімуму енер-

гії. Отже, для одержання високої точності необхідно багато ітерацій, і їхня кількість обирається динамічно шляхом моніторингу значень енергії всередині одного сегмента (алгоритм по колу) або всієї системи (алгоритм вперед-назад). Якщо відносна зміна (усереднена за системою чи сегментом) стає меншою за 10^{-7} , ітерації зупиняють. Це своєрідний компроміс між двома факторами: 1) «спільнота» часто зацікавлена в результатах з точністю до багатьох знаків після коми; 2) якщо від початку обирається «вдалий» анзац МДС, задовільної точності для всіх спостережуваних величин можна досягти вже за 3 кола розрахунків. Збіжність алгоритму детальніше обговорюється в підрозділі 3.5.

Оцінка, наскільки точно розрахований МДС рівний власному стану, робиться на основі дисперсії

$$\Delta H = \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2 \quad (118)$$

яка для власного стану дорівнює нулю (спосіб розрахунку $\langle H^2 \rangle$ описаний в Розділі 2.1.5). Як уже згадувалось, ранг МДО оператора H^2 є набагато меншим за m_W^2 . Іноді також корисно розрахувати дисперсію на одну частинку $\delta H = (\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2)/N$. Згідно з твердженням Йєна МакКаллока, в алгоритмі з МДС ця величина прямує до певної малої сталої при збільшенні розміру системи до $N \rightarrow \infty$.

Утворені МДС є власними станами як гамільтоніана, так і оператора проекції повного кутового моменту \hat{S}_z або повного кутового моменту $\hat{\vec{S}}^2$ (тому стани позначаються повною проекцією спіну S_z або повним спіном S). Завдяки трансляційній інваріантості системи ці стани також є власними станами оператора квазіімпульсу \hat{p} . Однак трансляційна інваріантість не вбудована безпосередньо в алгоритм, тому квазіімпульс p можливо розрахувати тільки для невироджених станів (за винятком $SU(2)$ -виродження, де всі $2S + 1$ станів мають одинаковий квазіімпульс). В роботі визначаються квазіімпульси p деяких станів, що є особливо важливими в димерній фазі ББГ моделі. Так як оператор трансляції T_n на n частинок діє на власний стан з визначенням

квазіімпульсом p як

$$T_n|\psi\rangle = e^{-ipn}|\psi\rangle,$$

для таких станів $p = 2\pi n_p/N$ ($n_p = 0, \dots, N - 1$) може бути визначений зі спостережуваного значення оператора трансляції: $\langle\psi|T_n|\psi\rangle = e^{-ipn}$. Це легко робиться в формалізмі МДС, використовуючи р-ня (69) та циклічну перестановку МДС-тензорів в $|\psi\rangle$.

Перед початком розрахунків є сенс оцінити необхідні для них ресурси. Загальний розмір МДС тісно пов'язаний з кількістю заплутаності в системі. До того ж виявляється, що у випадку $U(1)$ або $SU(2)$ симетрії множина кратностей непрямо відображає розподіл заплутаності в системі (цей факт обговорюється в Розділі 3.5): кількість секторів симетрії пов'язана з кореляційною довжиною, а їхній середній розмір якісно характеризує заплутаність короткої дії. Як наслідок, оцінку ресурсів можна провести шляхом розрахунку простих мір заплутаності.

На рис. 18 представлена залежність двочастинкової заплутаності на один зв'язок загального основного стану нескінченної XXZ моделі зі спіном $1/2$ від Δ (розрахунки проводились методом нПБзЕЧ з $m = 20$). Проекція спіну основного стану рівна $S_z = 0$ при $\Delta > -1$ і $S_z = \frac{N}{2}$ при $\Delta < -1$ (це має місце для системи довільного розміру, починаючи з $N = 2$). Припускаю, що заплутаність на один зв'язок насправді є більшою за розраховану в XY-фазі ($-1 < \Delta < 1$) та в області $\Delta \lesssim 1.5$. Однак оцінку розрахункових ресурсів можна провести навіть з якісних результатів.

З рисунка видно, що критичні точки $\Delta = \pm 1$ отримуються правильно. XY-фаза ($-1 < \Delta < 1$), очевидно, характеризується найбільшою заплутаністю, але її розподіл складно передбачити. В критичній точці $\Delta = -1$ заплутаність зникає (S_{PB} в цій точці має злам). Це природно, так як відбувається перехід до повністю незаплутаного основного стану. Можна здогадатись, що стан з $S_z = 0$ є сильно заплутаним при $\Delta < -1$, але заплутаність короткої дії в ньому дуже мала (цей здогад підтверджується на практиці). В антиферомагнітній фазі заплутаність на один зв'язок зменшується, оскільки при

великих додатніх Δ стан стає близьким до стану Нееля. Через це для стану з $S_z = 0$ розрахункові ресурси спадають приблизно монотонно від $\Delta = -\infty$ до $\Delta = \infty$. Для стану з $S_z = \frac{N}{2}$ розмір МДС $m = 1$. Для станів з проміжним значенням S_z структуру заплутаності складно спрогнозувати і в даній роботі вона визначається методом проб і помилок.

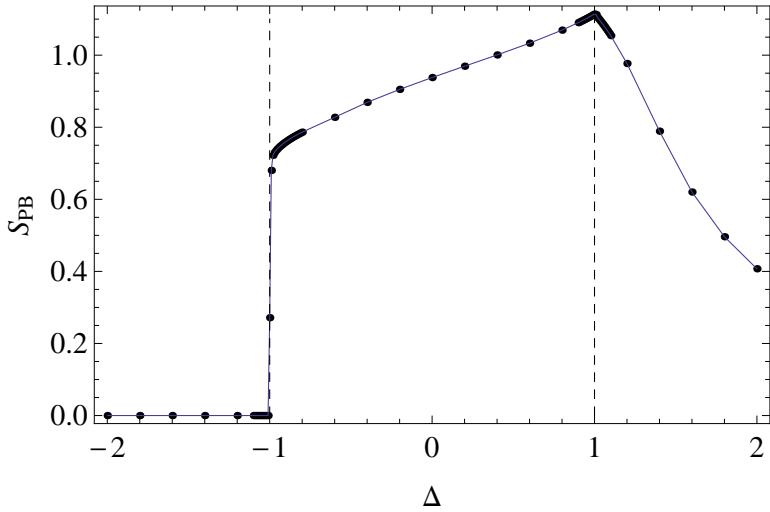


Рис. 18: Залежність запутаності на один зв'язок в нескінченому 1D XXZ кільці від параметра анізотропії Δ . Вона отримана методом нПБзЕЧ при розмірі МДС $m = 20$. Намагніченість загального основного стану дорівнює $m_z = 1/2$ при $\Delta < -1$ та $m_z = 0$ при $\Delta > -1$.

Для оцінки заплутаності між найближчими кутритами в ББГ моделі зі спіном 1 при різних значеннях θ методом прямої діагоналізації розраховується загальний основний стан системи з $N = 10$ спінів, а тоді розраховується його негативність (рис. 19). Заплутаність між найближчими сусідами зникає (в системі будь-якого розміру) в точці з нульовою заплутаністю $\theta = \pi/2$. При $\theta = -3\pi/4$ негативність також зникає. Однак можна здогадатись (і це підтверджується на практиці), що в цій точці основний стан є сильно заплутаним (аналогічно XXZ моделі зі спіном 1/2 при $\Delta = -1$) аналогічно до стану Грінбергера-Горне-Цайлінгера (ГГЦ), що є максимально заплутаним при нульовій заплутаності між найближчими сусідами. Негативність також має характерний мінімум в АКЛТ-точці $\theta = \arctg \frac{1}{3}$. Загалом можна припустити, що розрахункові ресурси є малими в області $-0.2 \lesssim \theta/\pi \lesssim 0.2$, помірними в області $0.2 \lesssim \theta/\pi < \frac{1}{2}$ і дуже великими при $-\frac{3}{4} \leq \theta/\pi \lesssim -0.2$. В околі SU(3)-симетричної точки $\theta = -\frac{3\pi}{4}$ потрібна дуже велика кількість секторів

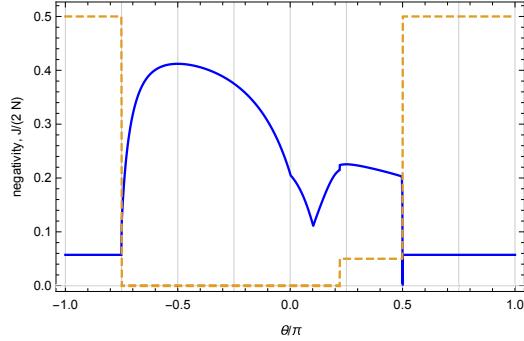


Рис. 19: Залежність негативності (суцільна лінія) білійнійно-біквадратного Гайзенбергового кільця з $N = 10$ спінів від θ , отримана прямою діагоналізацією гамільтоніана. Повний спін S основного стану (штрихована лінія) дорівнює $S = 0$ для $-0.75 < \theta/\pi \lesssim 0.22$, $S = 1$ для $0.22 \lesssim \theta/\pi < 0.5$ та $S = N$ для $0.5 < \theta/\pi < 1.25$. На рисунку зображена величина $S/(2N)$.

симетрії в МДС.

Що цікаво, негативність демонструє характерну поведінку в певних точках, таким чином частково відображаючи фазову структуру, що спостерігається в термодинамічній границі, вже при $N = 10$ (окрім слабкого зламу в точці $\theta = 0$, де в термодинамічній границі немає фазового переходу). Іншим підтвердженням фазової структури є зображення на рисунку величини $\frac{S}{2N}$ (S є повним спіном основного стану) для $N = 10$. $S = 1$ в області параметра $\frac{1}{4} < \theta/\pi < \frac{1}{2}$, тоді як в інших фазах вона рівна нулю (окрім феромагнітної фази, де $S = N$). Це дозволяє передбачити, які стани розраховувати в алгоритмі з $SU(2)$ симетрією (на відміну від XXZ моделі зі спіном $1/2$, структура найнижчих мультиплетів в ББГ моделі зі спіном 1 є нетривіальною).

Застосуємо розроблені в попередньому розділі алгоритми для розрахунків характеристик XXZ моделі зі спіном $1/2$ та ББГ моделі зі спіном 1 з періодичними крайовими умовами. Наприклад, власні стани XXZ гамільтоніана зі спіном $1/2$ мають визначену повну проекцію спіну S_z , а власні стани ББГ гамільтоніана зі спіном 1 без квадратичного ефекту Зеемана мають визначений повний спін S . В останньому випадку стани утворюють $(2S + 1)$ -кратно вироджені мультиплети з однаковим спіном S і різними проекціями спіну $S_z = -S, \dots, S$ (при $S = 0$ мультиплет складається тільки з одного стану). Такі мультиплети розраховуються цілком, якщо $SU(2)$ симетрія вбудована в алгоритм від початку.

3.2 XXZ модель частинок зі спіном 1/2 з ПКУ

При дослідженні властивостей XXZ моделі увага зосереджується на двох питаннях:

1. Якою є поведінка мір заплутаності в різних фазах XXZ моделі (особливо в феромагнітній фазі) та яким є розподіл заплутаності в системі?
2. Наскільки точним та швидкісним є запропонований алгоритм для U(1)-симетричних МДС з ПКУ?

Для розрахунку мір заплутаності необхідна двочастинкова зведенна матриця густини. Як можна бачити з [134], необхідно розрахувати наступні спінові корелятори: намагніченості $m_\alpha = \frac{S_\alpha}{N} = \langle s_i^\alpha \rangle$, черговані намагніченості (англ. “staggered magnetizations”) $\bar{m}_\alpha = \frac{1}{2} \langle s_i^\alpha - s_{i+1}^\alpha \rangle$ та спін-спінові корелятори $\langle s_i^\alpha \otimes s_{i+1}^\beta \rangle$ (де $\alpha, \beta = x, y, z$).

U(1) симетрія станів накладає на вказані корелятори багато умов. Намагніченості вздовж осей x та y та їхні черговані аналоги зникають ($m_x = m_y = 0$, $\bar{m}_x = \bar{m}_y = 0$). Окрім того, $\langle s_i^x \otimes s_{i+1}^y \rangle = \langle s_i^y \otimes s_{i+1}^x \rangle = 0$ та $\langle s_i^x \otimes s_{i+1}^x \rangle = \langle s_i^y \otimes s_{i+1}^y \rangle$. Всі ці умови виконуються чисельно в представлених тут розрахунках (що є природним результатом використання U(1)-коваріантних МДС).

Завдяки U(1) симетрії z -намагніченість $m_z = \frac{S_z}{N}$ є величиною, що зберігається, тому вона може бути використана для позначення станів системи. Як уже згадувалось, основний стан в XY та антиферомагнітній фазах має $m_z = 0$, а в феромагнітній фазі має $m_z = 1/2$. Однак в даній роботі вивчається не тільки загальний основний стан в різних фазах, а й основні стани в секторах з різними m_z (наприклад, стан з $m_z = 0$ в феромагнітній області, що має цікаві властивості заплутаності). Виявляється, що порядок цих основних станів завжди співпадає з порядком намагніченостей m_z (на відміну від ББГ моделі зі спіном 1, де порядок основних станів в різних секторах симетрії є дуже нетривіальним).

Двочастинкова зведенна матриця густини XXZ моделі в світлі U(1) симетрії виражається через спінові корелятори як

$$\rho_{12} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} + \mathcal{Z} + m_z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} - \mathcal{Z} + \bar{m}_z & \frac{E}{N} - \mathcal{Z}\Delta & 0 \\ 0 & \frac{E}{N} - \mathcal{Z}\Delta & \frac{1}{4} - \mathcal{Z} - \bar{m}_z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4} + \mathcal{Z} - m_z \end{pmatrix}. \quad (119)$$

Для приведення зведененої матриці густини до цього вигляду була використана рівність $\frac{E}{N} = 2\langle s_i^x \otimes s_{i+1}^x \rangle + \Delta \mathcal{Z}$. Бачимо, що ρ_{12} повністю виражається через енергію на один спін E/N , намагніченість m_z (що задається зазделегідь), корелятором $\mathcal{Z} = \langle s_i^z \otimes s_{i+1}^z \rangle$ та чергованою намагніченістю $\bar{m}_z = \frac{1}{2}\langle s_i^z - s_{i+1}^z \rangle$. Останні дві величини розраховуються, використовуючи р-ня (69) і відповідні МДО для кожного оператора.

Одночастинкова зведенна матриця густини отримується як частковий слід ρ_{12} по другій частинці:

$$\rho_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} + m_z + \bar{m}_z & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} - m_z - \bar{m}_z \end{pmatrix}. \quad (120)$$

З цієї матриці густини одразу отримується ОТ для U(1)-симетричного стану:

$$\tau_1 = 4 \det \rho_1 = 1 - 4(m_z + \bar{m}_z)^2. \quad (121)$$

3.2.1 Тестування роботи алгоритмів

Перед початком практичних розрахунків необхідно перевірити дієвість алгоритму з U(1)-симетричними МДС. Для цього при різних m_z визначаються залежності характеристик XXZ кілець розміром до 100 спінів від параметра анізотропії Δ . Ці результати порівнюються з результатами аналітичних розрахунків за допомогою Бете-анзацу для нескінченних систем (що наведені в Додатку А). окремо розглядаються XX точка $\Delta = 0$ та Гайзенбергова точка $\Delta = 1$ для систем розміром $N = 50$ та $N = 100$. Бете-анзац для скінченних

m_z	E/N	E_T/N	$\Delta E/E$	m	$p \ p'$
0.5	0	0		1	1 2
0.4	-0.098423	-0.098428	$5.1 \cdot 10^{-5}$	25	625 1250
0.3	-0.187144	-0.187221	$4.1 \cdot 10^{-4}$	44	1830 3600
0.2	-0.257447	-0.257688	$9.3 \cdot 10^{-4}$	44	1480 2950
0.1	-0.302792	-0.302930	$4.6 \cdot 10^{-4}$	44	1640 3200
0	-0.318517	-0.318519	$6.3 \cdot 10^{-6}$	39	1240 2490

Табл. 1: Залежність енергії на одну частинку E/N від m_z для XXZ системи з 50 спінів $s = 1/2$ з ПКУ при $\Delta = 0$. E_T розраховується з р-ня (122), $\Delta E = (E - E_T)/E_T$. Дисперсія на одну частинку δH для $m_z = 0$ дорівнює $6.1 \cdot 10^{-6}$. Використовується алгоритм з $U(1)$ симетрією. Відповідні множини кратностей дорівнюють (зверху донизу): $\{1\}$, $\{1 \times 4, 2, 2, 3, 3, 3, 2, 2, 1 \times 4\}$, $\{1 \times 8, 2, 3 \times 8, 2, 1 \times 8\}$ (три підряд), $\{1 \times 3, 2, 3, 4, 5, 5, 4, 3, 2, 1 \times 3\}$.

систем при $\Delta = 1$ розглядається в статті [93], а для $\Delta = 0$ є аналітичний результат для скінчених систем [92]:

$$\frac{E(m_z)}{N} = -\frac{1}{N \sin \frac{\pi}{N}} \cos(\pi m_z), \quad (122)$$

що при $N \rightarrow \infty$ переходить в $\frac{E(m_z)}{N} = -\frac{1}{\pi} \cos(\pi m_z)$ (див. також [90]).

Чисельні результати для XXZ моделі розміром $N = 50$ і $N = 100$ спінів з ПКУ при різних m_z представлені в таблицях 1, 2, 3, 4. Обрані для кожного розрахунку множини кратностей $T = \{t_{m_1}, \dots, t_{m_n}\}$ також наведені в таблицях. Система з 100 спінів є вже достатньо великою, щоб можна було провести порівняння з результатами Бете-анзацу для нескінчених систем. Результати показують хорошу точність алгоритму для $U(1)$ -симетричних МДС з ПКУ. Очікується, що точність для проміжних значень m_z підвищиться при збільшенні розміру використовуваного МДС.

Отримані чисельні результати для $N = 100$ спінів в інтервалі $-2 < \Delta < 4$ порівнюються з енергіями, отриманими за допомогою Бете-анзацу для $N \rightarrow \infty$, на рис. 20. Енергія основного стану з $m_z = 0$ при $\Delta \geq -1$ узгоджується з результатами Бете-анзацу з точністю $\Delta E/E \sim 10^{-4}$, що ще раз вказує на успішність запропонованого алгоритму для $U(1)$ -коваріантних МДС з ПКУ.

m_z	E/N	E_T/N	$\Delta E/E$	m	$p p'$
0.5	0.25	0.25	0	1	1 2
0.4	0.051743	0.051741	$3.5 \cdot 10^{-5}$	32	1024 2048
0.3	-0.134075	-0.134268	$1.4 \cdot 10^{-3}$	44	1640 3200
0.2	-0.291461	-0.292021	$1.9 \cdot 10^{-3}$	47	1680 3335
0.1	-0.401968	-0.402081	$2.9 \cdot 10^{-4}$	47	1870 3690
0	-0.443474	-0.443477	$6.7 \cdot 10^{-6}$	39	1190 2360

Табл. 2: Залежність енергії на одну частинку E/N від m_z для XXZ системи з 50 спінів $s = 1/2$ з ПКУ при $\Delta = 1$. E_T розраховується за допомогою Бете-анзацу [93], $\Delta E = (E - E_T)/E_T$. Дисперсія на одну частинку δH для $m_z = 0$ дорівнює $8.3 \cdot 10^{-6}$. Використовується алгоритм з $U(1)$ симетрією. Відповідні множини кратностей дорівнюють (зверху донизу): $\{1\}$, $\{1 \times 5, 2, 3 \times 6, 2, 1 \times 5\}$, $\{1 \times 8, 2, 3 \times 8, 2, 1 \times 8\}$, $\{1 \times 8, 2, 3 \times 9, 2, 1 \times 8\}$ (два підряд), $\{1, 3, 5, 7, 7, 5, 3, 1\}$.

Область $\Delta \leq -1$ вимагає коментаря. Значення енергій основних станів на один спін $E(m_z)/N = \Delta/4$ не залежать від m_z [88] для *некінченних* систем. Тобто в цій області параметра основний стан є нескінченнократно виродженим. Цікаво, що для системи зі 100 спінів виродження основних станів з різними m_z отримується чисельно при $\Delta = -1$ з високою точністю (відносна похибка $\Delta E/E \lesssim 2.5 \cdot 10^{-4}$).

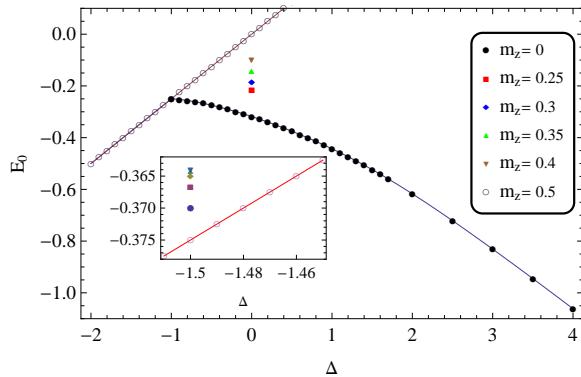


Рис. 20: Залежність енергії на одну частинку $E(m_z)/N$ XXZ моделі зі 100 спінів $s = 1/2$ з ПКУ від параметра анізотропії Δ . Суцільна лінія зображує результат, отриманий за допомогою Бете-анзацу (р-ня (134)). Символи, описані в легенді, відповідають розрахованим енергіям для обраних значень m_z . Вставка показує результати при $\Delta = -1.5$ для $m_z = 0.5, 0.49, 0.48, 0.47, 0.46, 0.45$.

Однак для скінченних систем виродження станів строго знімається при $\Delta < -1$ (вставка на рис. 20). Приміром, значення енергії на один спін загаль-

m_z	E/N	E_T/N	$(E/N)_\infty$	$\Delta E/E$	m	$p p'$
0.5	0	0	0		1	1 2
0.4	-0.097939	-0.098379	-0.098363	$4.5 \cdot 10^{-3}$	25	290 580
0.3	-0.183044	-0.187129	-0.187098	$2.2 \cdot 10^{-2}$	44	590 1150
0.2	-0.245605	-0.257560	-0.257518	$4.6 \cdot 10^{-2}$	44	970 1720
0.1	-0.296970	-0.302780	-0.302731	$1.9 \cdot 10^{-2}$	44	1120 2050
0	-0.318340	-0.318362	-0.318310	$6.9 \cdot 10^{-5}$	39	835 1650

Табл. 3: Залежність енергії на одну частинку E/N від m_z для XXZ системи зі 100 спінів $s = 1/2$ з ПКУ при $\Delta = 0$. E_T розраховується з р-ня (122), $\Delta E = (E - E_T)/E_T$. Дисперсія на одну частинку δH для $m_z = 0$ дорівнює $2.7 \cdot 10^{-5}$. Використовується алгоритм з U(1) симетрією. Відповідні множини кратностей дорівнюють (зверху донизу): {1}, {1 × 4, 2, 2, 3 × 3, 2, 2, 1 × 4}, {1 × 8, 2, 3 × 8, 2, 1 × 8} (три підряд), {1, 1, 1, 2, 3, 4, 5 × 3, 4, 3, 2, 1, 1, 1}.

m_z	E/N	E_T/N	$(E/N)_\infty$	$\Delta E/E$	m	$p p'$
0.5	0.25	0.25	0.25	0	1	1 2
0	-0.443205	-0.443230	-0.443147	$5.7 \cdot 10^{-5}$	39	725 1450

Табл. 4: Залежність енергії на одну частинку E/N від m_z для XXZ системи зі 100 спінів $s = 1/2$ з ПКУ при $\Delta = 1$. E_T розраховується за допомогою Бете-анзану [93], $\Delta E = (E - E_T)/E_T$. Дисперсія на одну частинку δH для $m_z = 0$ дорівнює $4.4 \cdot 10^{-5}$. Використовується алгоритм з U(1) симетрією. Відповідні множини кратностей дорівнюють {1} and {1, 3, 5, 7 × 3, 5, 3, 1}.

ного першого збудженого стану, тобто стану з $S_z = \frac{N}{2} - 1$ та $m_z = 1/2 - 1/N$, дается точним виразом

$$\frac{E(\frac{1}{2} - \frac{1}{N})}{N} = \frac{\Delta}{4} + \frac{|\Delta| - 1}{N}, \quad (123)$$

(цей розв'язок узгоджується з передбаченням [88], що $E/N = \Delta/4$ при $N \rightarrow \infty$). Цей факт вказує на великий скінченорозмірний ефект при досягненні помірному Δ . Відповідний чисельний результат, показаний на рис. 20 (вставка), точно узгоджується з р-ням (123). Додатково на вкладці до рис. 20 зображені енергії кількох станів з великими намагніченостями. Вони вказують на ще більші скінченорозмірні ефекти. Стани з $m_z < 0.45$ не зображені на рисунку через велику густину станів з різними m_z в цій частині спектра. Значення енергії стану з $m_z = 0$ при $\Delta = -1.5$ дорівнює $E/N \simeq -0.3638$.

N	S	E/N	E_{BA}/N	$\Delta E/E_{\text{BA}}$	T
20	0	-0.4452189	-0.4452193	$7.7 \cdot 10^{-7}$	$\{4, 4, 4, 4, 4\}$
30	0	-0.4440652	-0.4440654	$5.5 \cdot 10^{-7}$	$\{4, 4, 4, 4, 4\}$
40	0	-0.4436629	-0.4436631	$3.8 \cdot 10^{-7}$	$\{6, 6, 6, 6, 6\}$
50	0	-0.4434769	-0.4434771	$5.6 \cdot 10^{-7}$	$\{6, 6, 6, 6, 6\}$
N	S	E/N	E_{BA}/N	$\Delta E/E_{\text{BA}}$	T
20	1	-0.4343203	-0.4343221	$4.0 \cdot 10^{-7}$	$\{5, 5, 5, 5, 5\}$
30	1	-0.4391582	-0.4391605	$5.1 \cdot 10^{-6}$	$\{5, 5, 5, 5, 5\}$
40	1	-0.4408820	-0.4408833	$2.8 \cdot 10^{-6}$	$\{6, 6, 6, 6, 6\}$
50	1	-0.4416812	-0.4416889	$1.7 \cdot 10^{-6}$	$\{6, 6, 6, 6, 6\}$

Табл. 5: Залежність енергії на одну частинку E/N основного стану ізотропної моделі Гайзенберга зі спіном $1/2$ в секторах $S = 0$ і $S = 1$ від N . E_{BA} отримані за допомогою Бете-анзацу (англ. “Bethe ansatz (BA)”) [93]. Використовується алгоритм з $SU(2)$ симетрією. Відповідні множини кратностей дорівнюють $T = \{(0, x_1), (1/2, x_2), (1, x_3), (3/2, x_4), (2, x_5)\}$ (позначаються як $\{x_1, x_2, x_3, x_4, x_5\}$).

На нашій системі з напівцілим спіном можна також перевірити точність алгоритму з $SU(2)$ симетрією. Такою системою є частковий випадок XXZ моделі - модель Гайзенберга зі спіном $1/2$ (таблиця 5). Результати показують хорошу роботу алгоритму: використовуючи досить малий ресурс, алгоритм отримує не менш, а часто й більш точні результати, ніж коли використовується алгоритм з $U(1)$ симетрією. В таблиці 5 наведені значення енергії основного стану систем розміром до 50 частинок з повним спіном $S = 0$ і $S = 1$. Результати Бете-анзацу відтворені з високою точністю. Розрахунковий ресурс (що є помірним) залежить від множин кратностей віртуальних спінів МДС. Обрані множини наведені в Таблиці 5. Логічно, що для більших систем необхідні більші кратності виродження кожного віртуального спіну.

3.2.2 Спінові корелятори та властивості заплутаності

Розглянемо властивості заплутаності XXZ моделі зі спіном $1/2$ при різних значеннях Δ і m_z . Необхідні для розрахунків τ_1 , C_F та C_A чисельні результати частково наведені в попередньому параграфі. В таблицях 6, 7, 8 і 9 наведено значення $z - z$ корелятора та мір заплутаності для XXZ систем

m_z	E/N	\mathcal{Z}	τ_1	C_F	C_A
0.5	0	0.25	0	0	0
0.4	-0.098423	0.150316	0.359993	0.165020	0.231194
0.3	-0.187144	0.055058	0.640004	0.263648	0.500524
0.2	-0.257447	-0.025888	0.840037	0.312642	0.754026
0.1	-0.302792	-0.081479	0.960063	0.334296	0.934246
0	-0.318517	-0.101456	1.000000	0.339946	1.000000

Табл. 6: Залежність енергії на одну частинку E/N , спінового корелятора \mathcal{Z} та мір заплутаності τ_1 , C_F і C_A від m_z для XXZ системи з 50 спінів $s = 1/2$ з ПКУ при $\Delta = 0$. З високою точністю $\bar{m}_z = 0$.

m_z	E/N	\mathcal{Z}	τ_1	C_F	C_A
0.5	0.25	0.25	0	0	0
0.4	0.051743	0.150092	0.359998	0.179531	0.216983
0.3	-0.134075	0.051847	0.639977	0.305155	0.462994
0.2	-0.291461	-0.039533	0.839907	0.372763	0.710159
0.1	-0.401968	-0.113493	0.959960	0.391109	0.912827
0	-0.443474	-0.147826	1.000000	0.386944	1.000000

Табл. 7: Залежність енергії на одну частинку E/N , спінового корелятора \mathcal{Z} та мір заплутаності τ_1 , C_F і C_A від m_z для XXZ системи з 50 спінів $s = 1/2$ з ПКУ при $\Delta = 1$. З високою точністю $\bar{m}_z = 0$.

з ПКУ розміром 50 та 100 спінів при $\Delta = 0$ та $\Delta = 1$.

Значення ОТ та узгодження асистування показують, що заплутаність монотонно зростає від повністю поляризованого стану з $m_z = 1/2$ до стану з $m_z = 0$. Однак заплутаність між найближчими сусідами має максимум поза $m_z = 0$ при $\Delta = 1$, вказуючи на дещо складну структуру заплутаності при даному Δ . Це непрямо відображається в досить утрудненому виборі множини кратностей T , необхідної для отримання енергій станів з $m_z < 1/2$ з достатньою точністю.

На рис. 21 отримані значення чергованої намагніченості \bar{m}_z системи з $N = 100$ спінів порівнюються з результатами Бете-анзацу, наведеними в Додатку А. Як і очікувалось, чергована намагніченість є ненульовою тільки в

m_z	E/N	\mathcal{Z}	τ_1	C_F	C_A
0.5	0	0.25	0	0	0
0.4	-0.097939	0.150	0.360	0.158	0.237
0.3	-0.183044	0.058	0.640	0.229	0.522
0.2	-0.245605	-0.016	0.839	0.248	0.775
0.1	-0.296970	-0.076	0.960	0.310	0.937
0	-0.318340	-0.101	1.0	0.339	1.0

Табл. 8: Залежність енергії на одну частинку E/N , спінового корелятора \mathcal{Z} та мір заплутаності τ_1 , C_F і C_A від m_z для XXZ системи зі 100 спінів $s = 1/2$ з ПКУ при $\Delta = 0$. З високою точністю $\bar{m}_z = 0$.

m_z	E/N	\mathcal{Z}	τ_1	C_F	C_A
0.5	0.25	0.25	0	0	0
0	-0.443205	-0.148	1.0	0.386	1.0

Табл. 9: Залежність енергії на одну частинку E/N , спінового корелятора \mathcal{Z} та мір заплутаності τ_1 , C_F і C_A від m_z для XXZ системи зі 100 спінів $s = 1/2$ з ПКУ при $\Delta = 1$. З високою точністю $\bar{m}_z = 0$.

антиферомагнітній області $\Delta > 1$. Щікаво, що в системі зі 100 спінів при $1 \leq \Delta \lesssim 1.4$ спостерігаються великі скінченнорозмірні ефекти. Перевірено (але не зображенено на рисунку), що ці ефекти стають все менш вираженими при збільшенні розміру системи. Очевидно, що точка фазового переходу може бути отримана тільки шляхом екстраполяції точки перегину функції $\bar{m}_z^N(\Delta)$ до $N \rightarrow \infty$.

На рис. 21 також зображені результати для ОТ, отримані підставленням значень \bar{m}_z в р-ня (121). Вони показують, що стан з $m_z = 0$ є максимально заплутаним при $\Delta < 1$. Справа від $\Delta = 1$ цей стан монотонно «втрачає» заплутаність при зростанні Δ . Для отримання точних результатів для чергованої намагніченості при $-1 < \Delta < 1$ необхідним є забезпечення $U(1)$ симетрії. Перевірено, що використання алгоритмів без симетрій призводить до нефізичних результатів для \bar{m}_x (вона стає ненульовою), через що отримується неправильне значення τ_1 . Для наочності продемонстровано втрату заплутаності при зростанні намагніченості від $m_z = 0$ до $m_z = 0.5$ при $\Delta = 0$.

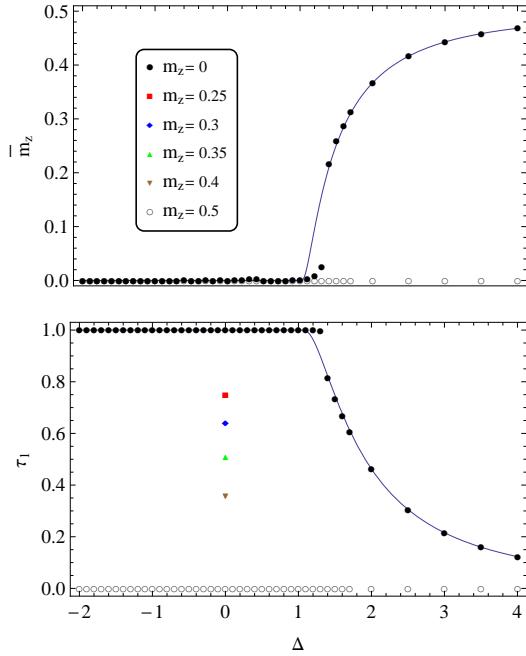


Рис. 21: Залежності чергованої намагніченості \bar{m}_z (вгорі) та ОТ τ_1 (внизу) 1D XXZ системи зі 100 спінів $s = 1/2$ з ПКУ від параметра анізотропії Δ . Чисельні результати (символи) порівнюються зі значеннями, отриманими з р-нь (136) і (121). При $1 \leq \Delta \lesssim 1.4$ спостерігаються сильні скінченорозмірні ефекти. Чергована намагніченість дорівнює нулю для всіх m_z при $\Delta < 1$.

На рис. 22 представлені результати для узгодження формування C_F та узгодження аистування C_A для системи зі 100 спінів. Результати порівнюються з розрахунками, отриманими Бете-анзацом для нескінчених систем. В даній роботі отримано хороше узгодження з результатами, наведеними для великих скінченних систем при $\Delta > 0$ в [135]. Як і у випадку з \bar{m}_z та τ_1 , в околі критичної точки $\Delta = 1$ в залежності для C_A спостерігаються сильні скінченорозмірні ефекти.

Узгодження аистування C_A показує таку ж структуру заплутаності, як і τ_1 . Однак узгодження формування C_F поводиться зовсім інакше, так як має максимум при $\Delta = 1$ і дорівнює нулю при $\Delta < -1$. В цьому сенсі стан з $m_z = 0$ при $\Delta < -1$ є аналогічним до стану ГГЦ, що має нульове узгодження формування (тобто нульову заплутаність *між найближчими сусідами*), але є сильно заплутаним з ОТ та узгодженням аистування, рівними 1.

Що цікаво, в феромагнітній області ($\Delta < -1$) узгодження формування *загального* першого збудженого стану, тобто стану з намагніченістю

$m_z = 1/2 - 1/N$, з високою точністю дорівнює $C_F(\frac{1}{2} - \frac{1}{N}) \simeq \frac{2}{N}$. Воно прямує до нуля *лише* в термодинамічній границі. Чисельні розрахунки показують, що це єдиний m_z -сектор, в якому основний стан має ненульову заплутаність між найближчими сусідами при $\Delta < -1$. Це ще одна ознака того, що узгодження формування (на відміну від інших мір заплутаності) має нетривіальну залежність від m_z .

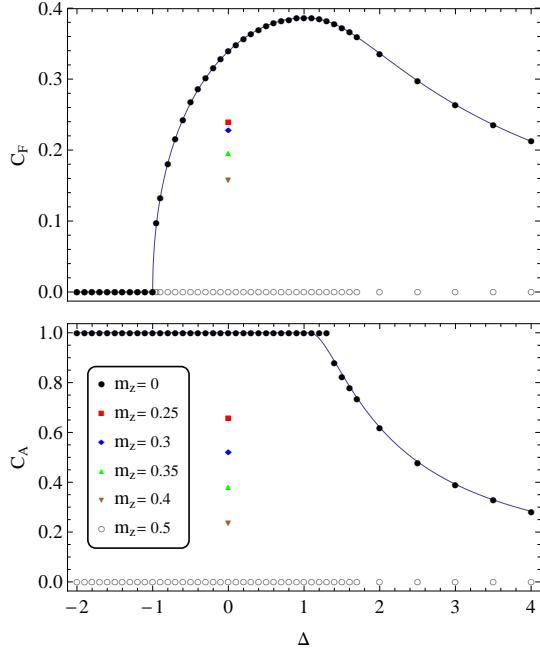


Рис. 22: (Вгорі) Залежність узгодження формування C_F 1D XXZ системи зі 100 спінів з ПКУ від параметра анізотропії Δ . Отримані значення порівнюються з результатами Бете-анзацу (суцільна крива). При $\Delta < -1$ чорні та білі круги накладаються. (Внизу) Залежність узгодження асистування C_A 1D XXZ системи зі 100 спінів з ПКУ від параметра анізотропії Δ . Отримані значення порівнюються з результатами Бете-анзацу (суцільна крива). При $1 \leq \Delta \lesssim 1.4$ спостерігаються великі скінченорозмірні ефекти.

Наочанок дослідимо розподіл заплутаності в XXZ моделі зі спіном $1/2$, а саме: в найнижчому стані з $m_z = 0$ (для інших значень m_z ситуація є якісно такою самою). Для цього використовується нерівність ККВ (див. Додаток А). Необхідні величини τ_1 , C_F та C_A вже отримані, і на рис. 23 зображені C_F^2 , C_A^2 та τ_1 . Нерівність ККВ задовільняється в усьому діапазоні значень Δ . Також очевидно, що при $\Delta < -1$ велику роль грає або заплутаність далекої дії, або багатокубітова заплутаність (в [136] доведено, що якщо $C_F = 0$, заплутаність між найближчими сусідами справді зникає). Згідно з попередніми розрахунками Б. Брайорр-Орпса (також відомого як Володимир Воронов) та

Юрія Бідасюка, величина three-tangle стану з $m_z = 0$ монотонно зростає при спаданні Δ . Наприклад, $\tau_3 \simeq 0.18$ при $\Delta = -1$. З іншого боку, при великих додатніх значеннях Δ заплутаність є майже виключно між найближчими сусідами. Це логічно, так як стан системи стає все більшим до стану Нееля.

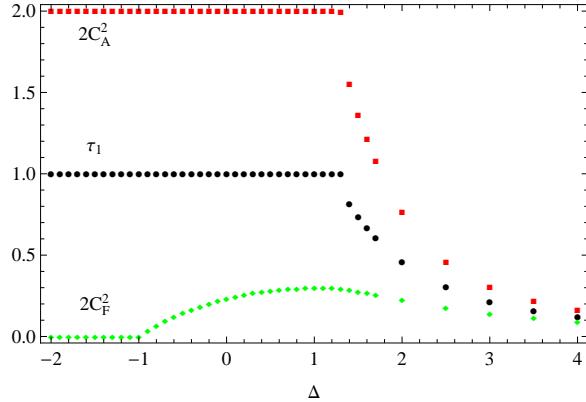


Рис. 23: Аналіз моногамності заплутаності найнижчого стану з $m_z = 0$ XXZ системи зі 100 спінів $s = 1/2$ з ПКУ. Зображені величини $2C_F^2$ (заплутаність між найближчими сусідами), τ_1 (загальна заплутаність) та $2C_A^2$. Нерівність ККВ задовільняється в усьому діапазоні значень Δ , а відсоток заплутаності між найближчими сусідами стає дуже малим при великих від'ємних значеннях Δ , вказуючи на складну структуру заплутаності в системі. Для станів з $0 < m_z < 1/2$ при $\Delta < -1$ спостерігається аналогічна ситуація, вказуючи на нездатність τ_1 , C_F та C_A задовільно описувати властивості системи в цій області.

Варто зауважити, що наведений в таблицях загальний розмір МДС m , необхідний для отримання значень енергії з задовільною точністю, непрямо «вимірює» заплутаність в системі. До того ж, кількість необхідних секторів симетрії грубо оцінює вагу заплутаності між сусідніми та несусідніми частинками системи. Що більша кількість секторів, то більша вага заплутаності між найближчими сусідами і відповідно менша вага заплутаності далекої дії та багатокубітової (англ. “many-way”) заплутаності. Це видно з результатів для C_F при $\Delta = 0$ та $\Delta = 1$ (наприклад, з таблиць 6 та 7).

Необхідні розміри МДС m та велика кількість секторів симетрії для станів з $0 < m_z < 1/2$ показують, що заплутаність в цих станах не характеризується задовільно простими мірами τ_1 , C_F або C_A . Це підтверджується також тим, що $\bar{m}_z = 0$ для всіх станів при $\Delta < 1$, а $\mathcal{Z} \simeq 0.25$ для всіх станів при $\Delta < -1$. Кращими мірами для опису заплутаності власних станів XXZ моделі є заплутаність довгої дії чи (більш імовірно) багатокубітова заплутаність.

3.3 Білінійно-біквадратна модель Гайзенберга (ББГ)

частинок зі спіном 1 з ПКУ

При дослідженні властивостей ББГ моделі (р-ня (3)) увага зосереджується на двох питаннях:

1. Якою є характерна поведінка ББГ системи в кожній фазі та чи існує п'ята (нематична) фаза в околі $SU(3)$ -симетричної точки $\theta = -\frac{3\pi}{4}$?
2. Наскільки точними та швидкісними є два запропоновані алгоритми, а саме: алгоритм для $SU(2)$ -симетричних МДС з ПКУ та модифікований алгоритм ПВЕ?

Згідно з поставленими задачами, чисельні розрахунки властивостей ББГ моделі (р-ня (3)) проводяться двома алгоритмами. Однак виявляється, що для повного опису фазової структури моделі необхідно розрахувати 4-5 найнижчих спінових мультиплетів. До того ж, іноді цікаво дослідити властивості саме скінчених систем. Як наслідок, перевага надається алгоритму з $SU(2)$ симетрією. Виявляється, що можливо отримати результати з високою точністю (навіть для високих збуджених станів), використовуючи помірні розрахункові ресурси та порівняно малу кількість варіаційних параметрів.

3.3.1 Тестування роботи алгоритмів

Для демонстрації хорошої точності розроблених алгоритмів в даному підрозділі відтворюються відомі значення енергій. Також розраховуються декілька спінових кореляторів, що характеризують загальний основний стан системи в різних фазах.

Для проведення розрахунків зазначеними методами необхідно обрати: 1) відповідну множину кратностей віртуальних спінів j в алгоритмі з $SU(2)$ симетрією; 2) параметри скорочення p, p' в алгоритмі без симетрій. Вибір множин кратностей частково зумовлений структурою запутаності (рис. 19). Як уже згадувалось, можна очікувати з рис. 19, що в димерній фазі необхідні великі кратності виродження, в той час як в критичній фазі та фазі

m	$E(S = 0)/N$ ($\Delta E/E$)	$E(S = 1)/N$	Δ_{01}
20	-1.401458747 ($1.5 \cdot 10^{-5}$)	-1.397301988	0.41566
30	-1.401483243 ($5.9 \cdot 10^{-7}$)	-1.397364199	0.41192
40	-1.401483902 ($9.7 \cdot 10^{-8}$)	-1.397372375	0.41115
РГМГ	-1.401484039	-1.397379019	0.41048

Табл. 10: Енергія на одну частинку основного стану $E(S = 0)/N$, першого збудженого стану $E(S = 1)/N$ та щілина Холдейна $\Delta_{01} = E(S = 1) - E(S = 0)$ білінійної ($\theta = 0$) моделі Гайзенберга з $N = 100$ спінів $s = 1$ з ПКУ. $\Delta E/E$ є відносною похибкою результатів щодо найкращих відомих розрахунків. В останньому випадку енергія $E(S = 1)/N$ визначається з найкращого відомого результату для $E(S = 0)/N$ [72] та найкращого відомого результату для щілини Холдейна для 100 спінів [137]. Використовується модифікований алгоритм ПВЕ.

Холдейна вони помірні. Також очікується, що в нематичній області (поблизу $\theta = -\frac{3\pi}{4}$), щодо якої триває дискусія, заплутаність далекої дії є великою (так як основний стан має $S = N$ при $\theta = -\frac{3\pi}{4}$) і потрібні великі віртуальні спіни j . В АКЛТ-точці $\theta = \operatorname{arctg} \frac{1}{3}$ існує точний розв'язок для будь-якого розміру системи з тривіальним представленням віртуального спіну $\{(1/2, 1)\}$ [50].

Енергія основного стану Отримані модифікованим методом ПВЕ результати для ізотропного Гайзенбергового кільця з $N = 100$ спінів зібрані в таблиці 10. Енергії основного (зі спіном 0) та першого збудженого (зі спіном 1) стану добре узгоджуються з результатами інших авторів [72, 137]. З отриманих значень можна отримати щілину Холдейна, і вона досить добре узгоджується з найкращим наразі результатом [137]. До речі, результат для основного стану системи зі 100 спінів досить близький до значення, отриманого для нескінченної системи в [42].

Іншим цікавим тестом модифікованого алгоритму ПВЕ є біквадратна система ($\theta = -\frac{\pi}{2}$), детально досліджена Соренсеном та Янгом [112] шляхом відображення біквадратного кільця зі спіном 1 на XXZ систему зі спіном $\frac{1}{2}$ (для якої розв'язок можна отримати за допомогою Бете-анзацу). Така система є гарним тестовим майданчиком для чисельних алгоритмів, оскільки результати відомі для систем до 1000 спінів. В таблиці 11 наведені результа-

m	$E(0,0)/N$ ($\Delta E/E$)	ΔH	$E(0,\pi)/N$ ($\Delta E/E$)	ΔH	Δ_{00}
20	-2.795792 ($4.1 \cdot 10^{-4}$)	0.44	-2.795633 ($4.1 \cdot 10^{-4}$)	0.44	0.0161
30	-2.796790 ($5.0 \cdot 10^{-5}$)	0.03	-2.796676 ($4.0 \cdot 10^{-5}$)	0.28	0.0115
БА	-2.796931		-2.796786		0.0144

Табл. 11: Енергія на одну частинку основного стану $E(0,0)/N$, першого збудженого стану $E(0,\pi)/N$ та щілина між ними $\Delta_{00} = E(0,\pi) - E(0,0)$ для біквадратної ($\theta = -\frac{\pi}{2}$) моделі Гайзенберга зі $N = 100$ спінів $s = 1$ з ПКУ. Перше число в дужках позначає повний спін ($S = 0$), а друге - квазімпульс p (0 або π). $\Delta E/E$ є відносною похибкою результатів щодо розрахунків методом Бете-анзацу (БА) [112]. ΔH позначає дисперсію. Використовується модифікований алгоритм ПВЕ.

ти для двох найнижчих станів зі спіном 0 та різними квазімпульсами (які є загальними основним та першим збудженим станами) системи з ПКУ зі $N = 100$ спінів. В термодинамічній границі очікується подвійно вироджений основний стан з малою щілиною до наступних станів (зі спіном 1, 2). Для 100 спінів виродження знімається на малу величину $\Delta_{00} = 0.0144$ (близькість до термодинамічної границі можлива лише для такої великої системи). Значення енергій добре узгоджуються з результатами Бете-анзацу, але для високої точності потрібні великі m ; до того ж, для $m = 30$ необхідні параметри скорочення рівні $p = 30$ та $p' = 60$.

Розрахунок ΔH дозволяє оцінку того, наскільки добре розрахованій МДС апроксимує власний стан системи. Що цікаво, хороше значення енергії ще не гарантує хорошого *власного стану*: перший збуджений стан з $S = 0$ є не дуже точним (див. таблицю 11). Автор підозрює, що навряд чи можливо отримати хороший власний стан, не врахувавши безпосередньо в алгоритмі SU(2) симетрію системи.

Тепер перевіримо точність алгоритму для SU(2) симетричних МДС з ПКУ. Для цього розрахуємо енергію *загального* основного стану ББГ кільця з $N = 100$ спінів $s = 1$ в усьому діапазоні $-\pi < \theta \leq \pi$. Результати зображені на рис. 24. При розрахунках необхідно врахувати, що загальний основний стан має різний повний спін при різних θ : $S = 0$ при $-\frac{3}{4} < \theta/\pi < \frac{1}{4}$, $S = 1$ при $\frac{1}{4} < \theta/\pi < \frac{1}{2}$ (в так званій критичній фазі) та

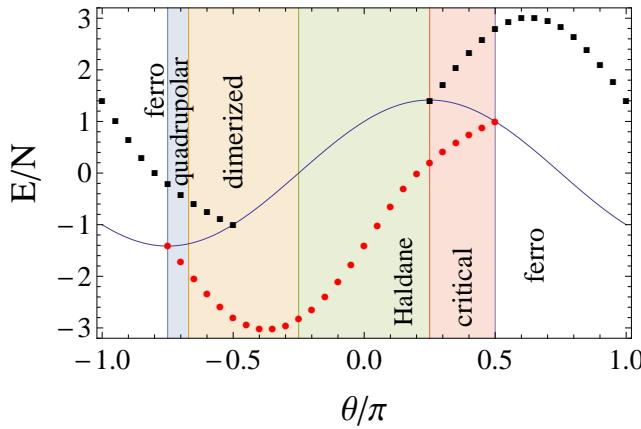


Рис. 24: Залежність найнижчого (круги) та найвищого (квадратики) значення енергії на одну частинку ББГ моделі зі спіном 1 зі $N = 100$ частинок з ПКУ від θ . В області $\frac{1}{4} < \theta/\pi < \frac{1}{2}$ результати для $S = 1$, $S = 2$ та $S = 0$ є дуже близькими. Найнижче значення енергії на одну частинку в секторі $S = N$ (штрихована лінія) $E/N = \cos \theta + \sin \theta$ не залежить від розміру системи. В феромагнітній фазі цей стан є загальним основним станом, а в області $-\frac{1}{2} < \theta/\pi < \frac{1}{4}$ цей стан є найвищим.

$S = N$ при $\frac{1}{2} < \theta/\pi < \frac{5}{4}$ (в так званій феромагнітній фазі). Завдяки симетрії $H(\theta) = -H(\theta + \pi)$ мінімальне та максимальне значення енергії пов'язані рівністю $E_{\min}(\theta) = -E_{\max}(\theta + \pi)$ (максимальна енергія також показана на рис. 24). За кількома винятками графік отримано з використанням множини кратностей $T = \{(1/2, 6), (3/2, 6), (5/2, 5)\}$ (окрім феромагнітної фази, де використовується $T = \{(N/2, 1)\}$). Результати для $N = 100$ є досить близькими до термодинамічної границі.

Точні значення енергії основного стану відомі для точок з великим виродженням $\theta/\pi = -\frac{3}{4}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ (перша має $SU(3)$ симетрію, а інші дві - «чертговану» $SU(3)$ симетрію). Також відомими є значення енергії основного стану E/N для нескінченних систем при $\theta/\pi = \pm\frac{1}{4}$. Отже, на цих значеннях θ можна добре продемонструвати точність запропонованого алгоритму з $SU(2)$ симетрією. Наведені в таблиці 12 одержані результати добре узгоджуються з точними значеннями, доводячи успішність зазначеного алгоритму.

Дві $SU(3)$ -симетричні точки $\theta = \pi/4, -3\pi/4$ вимагають коментаря. В цих точках спектр є сильно виродженим, тому для розрахунків потрібні найбільші розрахункові ресурси. Зокрема, множина кратностей має містити $j = 7/2$ або більші спіни в околі точки $\theta = -3\pi/4$. Можна очікувати (з розрахунків для

θ/π	E/N	E_T/N	$\Delta E/E_T$	T
0.25	0.210586040			$\{6, 6, 5, 0\}$
0.5	1.000000043	1.0	$4.3 \cdot 10^{-8}$	$\{1, 1, 1, 0\}$
-0.75	-1.41003865	-1.41421356	$3.0 \cdot 10^{-3}$	$\{3, 3, 3, 2\}$
-0.5	-2.79678849	-2.79693073	$5.1 \cdot 10^{-5}$	$\{6, 6, 5, 0\}$
-0.25	-2.82866909			$\{7, 7, 6, 0\}$

Табл. 12: Енергія на одну частинку основного стану ББГ моделі зі спіном 1 зі $N = 100$ частинок з ПКУ при різних значеннях параметра θ . E_T є відомими результатами для скінчених систем при $\theta/\pi = 0.5, -0.75, -0.5$ (див., наприклад, [112]). Результати Бете-анзацу для нескінчених систем: при $\theta/\pi = 0.25$ [121, 109] $\frac{E}{N} = \frac{1}{\sqrt{2}}(2 - \frac{\pi}{3\sqrt{3}} - \log 3) \simeq 0.20986075$ та $\theta/\pi = -0.25$ [107] $\frac{E}{N} = -\sqrt{8} \simeq -2.82842712$. Використовується алгоритм з $SU(2)$ симетрією. Спінові представлення $T = \{(1/2, x_1), (3/2, x_2), (5/2, x_3), (7/2, x_4)\}$ позначаються просто як $\{x_1, x_2, x_3, x_4\}$.

систем малоого розміру), що в точці переходу $-3\pi/4$ необхідні $j \lesssim N/2$. Але хороші результати можна отримати навіть з помірними значеннями j .

Цікаво зазначити, що чисельні результати пири $-\frac{3}{4} < \theta/\pi < \frac{1}{2}$ отримуються з використанням тільки напівцілих спінів. Такі самі значення можна отримати з використанням цілих спінів, але ціною дещо більшого розрахункового ресурсу. Через те, що фізичний спін є цілим ($s = 1$), цілі та напівцілі спіни не паруються між собою (згідно з «правилом трикутника»). Отже, недоцільно використовувати їх одночасно (це зробить повний розмір t занадто великим для розрахунків на цьому етапі).

Спеціального коментаря потребує також феромагнітна область $\frac{1}{2} < \theta/\pi < \frac{5}{4}$. Тут задачу на власні значення можна отримати аналітично. Трансляційна інваріантність та правила перекалібрування МДС дозволяють отримати одинаковий МДС для всіх спінів (окрім додаткового): $\mathcal{M}^{[i]} = (\sqrt{N+1})$. Отже, можна легко отримати $\mathcal{N}_{\text{eff}}^{[i]}$, що в цьому випадку не залежить від досліджуваного гамільтоніана. Всі проміжні індекси є рівними, отже

$$(\mathcal{N}_{\text{eff}}^{[i]})_{(1,1),(1,1)} = \sum_{j_{e_1}} (-1)^{j_{e_1}} (2j_{e_1} + 1) \frac{(N!)^2}{(N - j_{e_1})!(N + j_{e_1} + 1)!} \left(1 - \frac{2j_{e_1}(j_{e_1} + 1)}{N(N + 2)}\right)^N. \quad (124)$$

Матриця $\mathcal{H}_{\text{eff}}^{[i]}$ для ББГ моделі дорівнює

$$(\mathcal{H}_{\text{eff}}^{[i]})_{(1,1),(1,1)} = N(\cos \theta + \sin \theta) \sum_{j_{e_1}} (-1)^{j_{e_1}} (2j_{e_1} + 1) \frac{(N!)^2}{(N - j_{e_1})!(N + j_{e_1} + 1)!} \times \\ \times \left(1 - \frac{2j_{e_1}(j_{e_1} + 1)}{N(N + 2)}\right)^N. \quad (125)$$

Як наслідок, значення енергії на один спін стану з $S = N$ природно дорівнює $\frac{E}{N} = \frac{1}{N} \frac{(\mathcal{H}_{\text{eff}}^{[i]})_{(1,1),(1,1)}}{(\mathcal{N}_{\text{eff}}^{[i]})_{(1,1),(1,1)}}$ $= \cos \theta + \sin \theta$. Цей результат можна отримати чисельно для $N \lesssim 25$. Так як матричні елементи $\mathcal{H}_{\text{eff}}^{[i]}$ та $\mathcal{N}_{\text{eff}}^{[i]}$ монотонно спадають з N , при $N \gtrsim 25$ вони, на жаль, вже не представляються числами, більшими за машинну точність комп'ютера.

Кореляційні функції Для тестування роботи алгоритму з $SU(2)$ симетрією також розраховуються кілька цікавих кореляторів в ББГ моделі.

Рядковий корелятор Фаза Холдейна ($-\frac{\pi}{4} < \theta < \frac{\pi}{4}$) характеризується ненульовим значенням рядкового корелятора в основному стані зі спіном 0 [138],

$$g(l) = -\langle s_i^z (\prod_{j=i+1}^{i+l-1} \exp(i\pi s_j^z)) s_{i+l}^z \rangle, \quad (126)$$

що не затухає в границі $N, l \rightarrow \infty$. Цей корелятор також звється «рядковим параметром порядку» (англ. “string order parameter”), але він не є «локальним» і тому не є параметром порядку в його звичайному сенсі.

На рис. 25 показана залежність рядкового корелятора $g(l)$ від θ . Розмір системи $N = 100$, а довжина ряду обирається рівною $l = 30$. Такий вибір забезпечує достатню довжину як ряду, так і решти системи, що необхідно для відтворення властивостей систем нескінченного розміру (розрахунки показують, що $g(l)$ з високою точністю є сталою для $20 \leq l \leq 40$). Наведені результати в області $-0.22 \leq \theta/\pi \leq 0.23$ дуже добре узгоджуються з результатами для нескінчених систем, наведених в [139].

Розрахунки доводять, що дальній рядковий порядок присутній тільки в фазі Холдейна. Чисельно складно отримати точні значення на границях фа-

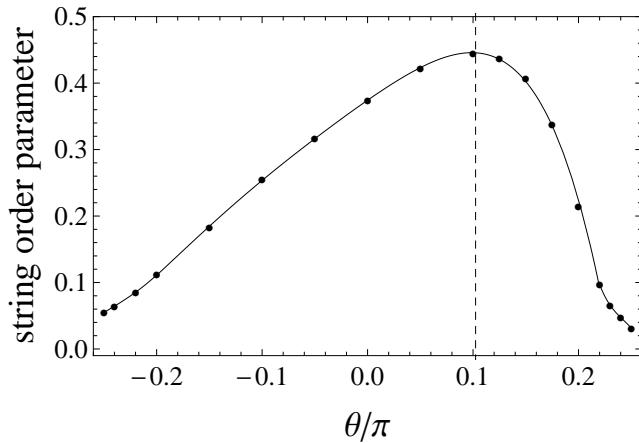


Рис. 25: Рядковий параметр порядку, розрахований для ББГ моделі з ПКУ як функція θ (штрихована лінія позначає АКЛТ-точку). Розмір системи дорівнює $N = 100$, а довжина ряду дорівнює $l = 30$ (що забезпечує достатній розмір як ряду, так і всієї системи). Значення для $\theta = 0$ дорівнює $g(l) \simeq 0.374330$, що дуже добре узгоджується з розрахунками для нескінчених систем [41].

зи Холдейна, що може бути спричинено скінченим розміром системи (для аналізу фазового переходу потрібна строго нескінчена система). В АКЛТ-точці ($\theta = \arctg \frac{1}{3}$) точний результат дорівнює $g(\infty) = 4/9$ [50], що дуже точно відтворюється нашими розрахунками для $N = 100$ спінів. В даній точці крива має максимум. Для білінійної ($\theta = 0$) моделі Гайзенберга зі спіном 1 найкращий відомий результат дорівнює $g(\infty) \simeq 0.374325$ [41]. Наш результат $g(30) = 0.374330$ для $N = 100$ дуже добре узгоджується з зазначеним.

Димерний корелятор В області $-\frac{3\pi}{4} < \theta < -\frac{\pi}{4}$ розраховується димерний корелятор

$$\mathcal{D} = \frac{1}{N} \sum_i (-1)^i [\cos \theta \vec{s}_i \otimes \vec{s}_{i+1} + \sin \theta (\vec{s}_i \otimes \vec{s}_{i+1})^2] \quad (127)$$

Основний та збуджені стани трансляційно інваріантної системи скінченно-го розміру з ПКУ *не можуть* димеризуватись. Для розрахунку димеризації необхідно взяти симетричну/антисиметричну суперпозицію двох найнижчих станів з $S = 0$ та різними квазіімпульсами ($p = 0$ та $p = \pi$). В скінчених системах ці два стани розділені малою щілиною, але в термодинамічній границі вони утворюють вироджений дублет. Розрахований таким чином димерний параметр порядку дорівнює

$$\mathcal{D} = \frac{1}{2} \langle 0^{(0)} \pm 0^{(\pi)} | \mathcal{D} | 0^{(0)} \pm 0^{(\pi)} \rangle = \pm \langle 0^{(0)} | \mathcal{D} | 0^{(\pi)} \rangle.$$

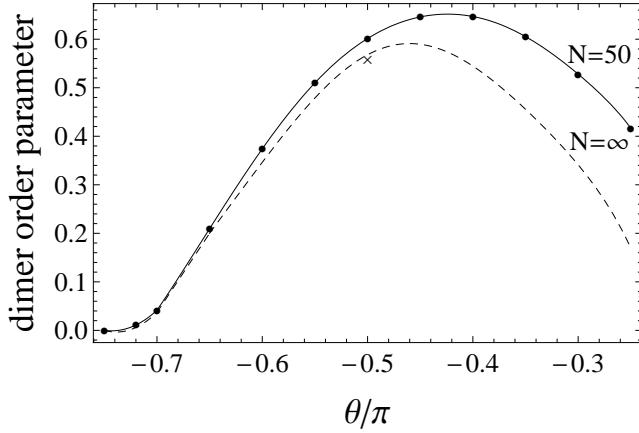


Рис. 26: Димерний параметр порядку (р-ня (127)), розрахований з двох найнижчих станів ББГ моделі зі спіном 1 з $N = 50$ частинок з ПКУ (суцільна крива), та його значення, екстрапольоване до термодинамічної границі (штрихована крива), як функції θ . $\mathcal{D}(N = 50) \simeq 0.6015$ при $\theta = -\pi/2$. Екстрапольоване значення $\mathcal{D}_\infty \simeq 0.568$ при даному θ добре узгоджується з теоретичним розрахунком для нескінченної системи (що позначений хрестом) [140, 141].

Строго кажучи, необхідно *спочатку довести*, що щілина між двома найнижчими станами зникає при $N \rightarrow \infty$, інакше процедура стає необґрунтованою. В наших розрахунках умова виконується, що продемонстровано на прикладі точок $\theta = -0.72\pi, -\frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{4}$. Значення щілини Δ_{00} дуже точно показує степеневу залежність: $\Delta_{00} = BN^{-\alpha}$. Сама ж димеризація апроксимується функцією, наведеною в р-ні (6) статті [118]:

$$\mathcal{D}(N) = \mathcal{D}_\infty + c N^{-\beta} \exp(-N/2\xi).$$

Можна одразу оцінити точність розрахунків, так як димеризація може бути розрахована аналітично при $\theta = -\frac{\pi}{2}$ в термодинамічній границі (тут ББГ модель може бути відображенна на XXZ): $\mathcal{D} = \frac{\sqrt{5}}{2} \prod_{n=1}^{\infty} \operatorname{th}^2(n \operatorname{arch} \frac{3}{2}) \simeq 0.5622$ [140, 141]. Наші результати для 30, 40 та 50 спінів при $\theta = -\pi/2$ дають $\mathcal{D}_\infty \simeq 0.568$, $\beta = 1$, $\xi \simeq 20.2$, що гарно узгоджується з теорією. Для отримання точнішого результату необхідні розрахунки для більших систем (понад 100 спінів).

Обґрунтувавши процедуру, розрахуємо димерний корелятор для системи з $N = 50$ та екстрапольоване (справжнє) значення для $N \rightarrow \infty$ (рис. 26).

Димеризація (127) обчислювалась також в [116] для систем з ВКУ розміром до 48 частинок. При ВКУ трансляційної інваріантності немає, тому

вироджені стани утворюються автоматично. Спостерігається, що для систем з ПКУ розміром до 50 спінів результат завжди трохи більший, ніж для ВКУ. Димеризація у вигляді чотириточкового корелятора $\langle 0^{(0)} | \mathcal{D}^2 | 0^{(0)} \rangle$ розраховувалась для систем з ПКУ в статті [74]. Наш екстрапольований результат при $\theta = -0.65\pi$ узгоджується з результатом, отриманим в [74].

3.3.2 Найнижча частина спектра та фазова діаграма

Тепер розглянемо фазову структуру ББГ моделі зі спіном 1. Як уже згадувалось, багато інформації про фазову структуру моделі можливо дістати з аналізу властивостей основного стану. Однак в даній роботі вивчається найнижча частина спектра системи. (На відміну від XXZ моделі зі спіном 1/2, тепер необхідно рахувати також *збуджені* стани в різних спінових секторах) В цьому підрозділі спектр обговорюватиметься в визначених точках фазової діаграми, і наголошуватимуться характерні відмінності, що мають місце в різних фазах навіть для скінченних систем. Звісно, деякі з результатів дублюватимуть вже відомі результати (мова йде про фазу Холдейна та димерну фазу). Феромагнітна фаза не розглядається.

Спектр системи з 50 спінів в діапазоні $-\frac{3}{4} < \theta < \frac{1}{2}$ зображений на рис. 27. Показані два найнижчі стани зі спіном 0 (синг'лети), один або два найнижчі стани зі спіном 1 (триплети) та один стан зі спіном 2 (квінтет). Необхідно пам'ятати, що найвищі з цих 4-5 мультиплетів можуть знаходитись понад іншими станами, що не розраховуються тут (справа в тому, що ці стани не впливають на загальну картину). В деяких випадках стани позначаються їхнім квазіімпульсом p .

Розглянемо спектр в різних фазах, зображений на рис. 27, зліва направо.

В *критичній* фазі ($\frac{1}{4} < \theta/\pi < \frac{1}{2}$) для систем з ПКУ розміром до 50 спінів підтверджено, що основний стан є двократно виродженим триплетом. Присутня слабка щілина до найнижчого квінтета та трохи більша щілина до найнижчого синг'лета (вони обов'язково мають квазіімпульс $p = 0$). Що цікаво, в критичній фазі збуджені стани в секторах з $S = 2$ та $S = 0$ часто є виродженими.

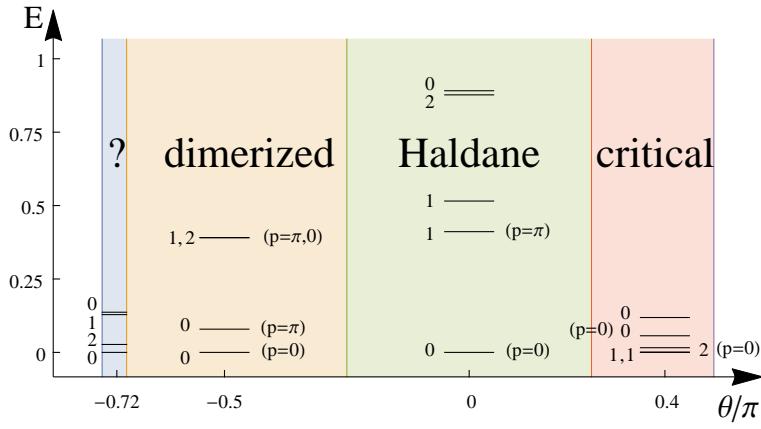


Рис. 27: Найнижча частина спектра ББГ моделі зі спіном 1 з $N = 50$ частинок з ПКУ в інтервалі параметра $-3/4 < \theta/\pi < 1/2$. Показані два найнижчі стани зі спіном 0, один або два найнижчі стани зі спіном 1 та найнижчий стан зі спіном 2. Енергія основного стану взята як $E = 0$. Примітка 1: в (нематичній) області, щодо якої триває дискусія, для великих систем перший збуджений стан зі спіном 0 стає нижчим за найнижчий стан зі спіном 2. Примітка 2: в критичній фазі між найнижчими станами зі спіном 0 та 2 є й інші стани. Мітки вздовж осі позначають значення θ , в яких розраховується спектр.

Як наслідок, головне збудження в критичній фазі є квадрупольним, що підтверджує результати для систем з ВКУ [114]. Наші результати для загального основного стану для систем з 50 та 100 спінів при $\theta = 0.4\pi$ дуже добре узгоджуються з екстрапольованими результатами для менших систем, наведеними в [142].

Основний стан в усій фазі Холдейна ($-\frac{1}{4} < \theta/\pi < \frac{1}{4}$) має спін $S = 0$, а перший збуджений стан - спін $S = 1$. Холдейн довів [106], що щілина між цими двома станами залишається ненульовою в термодинамічній границі в системах з цілим спіном (в білінійній моделі Гайзенберга вона звуться «щілиною Холдейна»). В роботі це підтверджено розрахунками для великих систем. Також спостерігається (рис. 27), що при $\theta = 0$ перший збуджений синг'лет знаходиться набагато вище за найнижчий триплет і є майже виродженим з найнижчим квінтетом (аналогічні розрахунки наведені в [137]). Але при наближенні до $\theta = -\frac{\pi}{4}$ перший збуджений стан зі спіном $S = 0$ опускається і наближається до стану зі спіном $S = 1$.

Отримані результати для станів з $S = 0$ та $S = 1$ для білінійної моделі Гайзенберга з ПКУ зі $N = 100$ спінів наведені в таблиці 13. З цих результатів отримується щілина Холдейна $\Delta = 0.41096$ (найкращий відомий результат

S	E/N	E_C/N	$\Delta E/E_C$	T
0	-1.401484019	-1.401484039	$1.4 \cdot 10^{-8}$	$\{6, 6, 6\}$
1	-1.397374407	-1.397379245	$3.5 \cdot 10^{-6}$	$\{9, 9, 9\}$

Табл. 13: Значення енергії на одну частинку найнижчих станів білінійної моделі Гайзенберга зі $N = 100$ спінів $s = 1$ з ПКУ. Використовуються спінові представлення $T = \{(1/2, x_1), (3/2, x_2), (5/2, x_3)\}$, які позначаються просто як $\{x_1, x_2, x_3\}$. Щілина Холдейна дорівнює $\Delta E = 0.41096$ (найкращий відомий результат: $\Delta E = 0.41048$). E_C є результатами чисельних розрахунків інших авторів [133, 72, 102]. E_C для $S = 1$ визначається з найкращих відомих результатів для щілини Холдейна та енергії стану з $S = 0$. Використовується алгоритм з $SU(2)$ симетрією.

$\Delta = 0.41048$ наведений в [102, 137]). Що цікаво, за властивостями системи зі 100 спінів майже не відрізняється від нескінченної системи. Енергія стану з $S = 0$ добре узгоджується з результатами інших авторів [133, 72].

Димерна фаза ($-\frac{3}{4} < \theta/\pi < -\frac{1}{4}$) була цікава багатьом авторам, відколи була запропонована ББГ модель. В цій фазі перший збуджений синг'лет розташований нижче за найнижчі триплет та квінтет. Але ключовим є те, що два найнижчі стани (тепер це два синг'лети з різними квазіімпульсами $p = 0$ і $p = \pi$) утворюють вироджений дублет при $N \rightarrow \infty$. Через це в термодинамічній граници порушується трансляційна інваріантність основного стану, який відповідно димеризується.

Варто прокоментувати головне збудження в системі. В димерній фазі триплет розташовується нижче за квінтет при $\theta/\pi > -\frac{1}{2}$ і вище при $\theta/\pi < -\frac{1}{2}$. В точці $\theta = -\pi/2$ (що має «черговану» $SU(3)$ симетрію) найнижчі триплет і квінтет утворюють вироджену пару. Це виродження підтверджено чисельно в [110] для систем малого розміру, а в даній роботі - для систем розміром до 50 спінів. Важливо, що в термодинамічній граници щілина між дублетом станів з $S = 0$ та найнижчим триплетом або квінтетом є ненульовою.

Як видно з таблиці 14, розраховані значення енергії чотирьох найнижчих мультиплетів для біквадратної точки $\theta = -\pi/2$ дуже добре узгоджуються з розрахунками Соренсена та Янга методом Бете-анзацу [112]. В цій точці розрахунки є технічно дуже складними, що підтверджує передбачення, зроблене

S	E/N	E_{BA}/N	$\Delta E/E_{\text{BA}}$	T
0	-2.797465	-2.797493	$1.0 \cdot 10^{-5}$	$\{8, 8, 7, 0\}$
0	-2.795884	-2.795919	$1.2 \cdot 10^{-5}$	$\{8, 8, 7, 0\}$
1	-2.789761	-2.789989	$8.2 \cdot 10^{-5}$	$\{8, 8, 8, 0\}$
2	-2.789779	-2.789989	$7.5 \cdot 10^{-5}$	$\{6, 6, 6, 6\}$

Табл. 14: Енергія на одну частинку чотирьох найнижчих станів біквадратної ($\theta = -\pi/2$) моделі Гайзенберга з $N = 50$ спінів $s = 1$ з ПКУ. Результати Бете-анзацу E_{BA} отримуються з [112]. Використовуються спінові представлення $T = \{(1/2, x_1), (3/2, x_2), (5/2, x_3), (7/2, x_4)\}$, які позначаються просто як $\{x_1, x_2, x_3, x_4\}$. Отримане значення щілини між двома станами з $S = 0$ дорівнює $\Delta_{00} = 0.0791$ (Бете-анзац: $\Delta_{00} = 0.0787$). Отримане значення щілини між найнижчими станами з відповідно $S = 0$ та $S = 1$ дорівнює $\Delta_{01} = 0.3852$ (Бете-анзац: $\Delta_{01} = 0.3752$). Використовується алгоритм з $SU(2)$ симетрією.

з властивостей заплутаності.

Найцікавішим є дослідження області параметра поблизу $\theta = -3\pi/4$, де триває дискусія про існування *нематичної* фази. В статті [116] розглядались системи з ПКУ з $N \leq 16$, які в даній роботі поширюються на системи розміром до 50 спінів.

Спостерігається, що для *скінченної* системи завжди існує область $-\frac{3\pi}{4} < \theta < \theta_{\text{cr}}$, де найнижчий квінтет розташований нижче за перший збуджений синг'лет та найнижчий триплет. Приміром, для 10 спінів $\theta_{\text{cr}} \simeq -0.58\pi$, а для 50 спінів $\theta_{\text{cr}} \simeq -0.67\pi$. Як наслідок, в цій області дуже зростають квадрупольні кореляції, що було вказано в [114].

З вказаних результатів можна помилково припустити, що в даній області існує окрема фаза. Але необхідно дослідити поведінку спектра в термодинамічній границі. Для цього потрібно провести скінченнорозмірний скейлінг щілин Δ_{00} і Δ_{02} та отримати їхні значення Δ_{00}^∞ і Δ_{02}^∞ для $N \rightarrow \infty$.

Твердження про наявність щілинної нематичної фази (тобто $\Delta_{00}^\infty > 0$ і $\Delta_{02}^\infty = 0$) було зроблене в [115] і спростоване в [116, 98, 117]. В останніх статтях завжди отримується закриття щілини між двома синг'летами: $\Delta_{00}^\infty = 0$. Однак досі допускається можливість, що $\Delta_{02}^\infty = 0$ у вузькій області $-\frac{3}{4} < \theta/\pi \lesssim -0.7$. Попередні розрахунки РГМГ для ВКУ [114] були нездатні чисельно

визначити дуже малі значення Δ_{02}^∞ .

В даній роботі для скінченорозмірного скейлінг'у обирається точка $\theta/\pi = -0.72$. Вона є досить близькою до точки переходу $\theta = -\frac{3\pi}{4}$, але ще не вимагає захмарних розрахункових ресурсів. Виявляється, що при даному значенні θ для розрахунку синг'летів достатньо значення віртуального спіну $j = 7/2$, зате для розрахунку квінтету необхідні $j = 11/2$ або навіть більші спіни.

Як уже згадувалось в попередньому підрозділі, зі скінченорозмірного скейлінг'у отримується $\Delta_{00}^\infty \lesssim 2 \cdot 10^{-4}$ при $\theta/\pi = -0.72$. Це означає, що щілина між двома синг'летами закривається (як і для інших випадків). Можна сказати, що перший збуджений синг'лет дуже швидко «опускається» при збільшенні розміру системи. До речі, $\Delta_{00}(N)$ дуже добре апроксимується степеневою залежністю $\Delta_{00}(N) = BN^{-\alpha}$ (в цьому випадку $\alpha \simeq 1.10$). В свою чергу димеризація є ненульовою при даному θ : $\mathcal{D}_\infty = (4 \pm 2) \cdot 10^{-3}$.

На противагу, $\Delta_{02}(N)$ демонструє експоненційну поведінку (і повільне спадання при збільшенні N). Через це важко зробити точну екстраполяцію, використовуючи результати для систем помірного розміру (очевидно, необхідні розрахунки для 100 або більше спінів). Екстраполяція наших найточніших результатів дає значення щілини між найнижчими синг'летом та квінтетом $\Delta_{02}^\infty \simeq 0.009$ при $\theta = -0.72\pi$ (що за порядком величини співпадає з результатами інших авторів). Для повноти аналізу для $\Delta_{00}(N)$ і $\Delta_{02}(N)$ розраховується також масштабована щілина $N\Delta(N)$. Спостерігається монотонне спадання $N\Delta_{00}(N)$ та монотонне зростання $N\Delta_{02}(N)$ при збільшенні N . Як висновок, димерна фаза сягає щонайменше точки $\theta/\pi = -0.72$.

В статті [118] вказано, що можливість існування нещілинної нематичної фази зовсім близько до $\theta/\pi = -\frac{3}{4}$ не спростована чисельно. Необхідними є розрахунки більше до феромагнітної області, причому для більших систем та з ще більшою точністю. Однак на разі теоретики схильні вважати, що п'ятої фази в моделі не існує. Автор схиляється до такого ж висновку. Отримані по ходу роботи результати дозволяють припустити, що для *некінченної* системи область з $\Delta_{02}^\infty = 0$ є просто точкою $\theta = -\frac{3\pi}{4}$.

3.4 Димерна фаза ББГ моделі частинок зі спіном 1 та квадратичним ефектом Зеемана

3.4.1 Загальні міркування

В цьому підрозділі визначаються межі димерної фази одновимірної білінійно-біквадратної моделі Гайзенберга (ББГ) частинок зі спіном 1 за наявності квадратичного ефекту Зеемана (див. р-ня (4)). Межі димерної фази цієї моделі вивчались К. Родрігес та співавторами [39] за допомогою спектроскопії рівнів і Г. Де К'ярою та співавторами [38] шляхом прямих розрахунками димерного параметра порядку. Результати двох груп занадто сильно відрізняються. Нашою метою є дослідити цю відмінність, використовуючи паралельно варіації обох методів. З цією метою найнижча частина спектра та димерний параметр порядку визначаються як функції зееманівського параметра D при $\theta = -\frac{\pi}{2}$. Розрахунки проводяться для систем з ПКУ розміром до 100 спінів за допомогою алгоритмів МДС з ПКУ для $U(1)$ та $SU(2)$ симетрії (Розділи 2.2, 2.3).

В даному підрозділі розглядається точка $\theta = -\frac{\pi}{2}$, де гамільтоніан рівний

$$H = - \sum_i (\vec{s}_i \otimes \vec{s}_{i+1})^2 + D \sum_i (s_i^z)^2. \quad (128)$$

Причиною є те, що при $\theta = -\frac{\pi}{2}$ та $D = 0$ гамільтоніан є $SU(3)$ симетричним [143, 105]. Його можна переписати як білінійну модель в термінах тривимірних $SU(3)$ представлень Гелл-Манна - «кваркового» (λ) та «антикваркового» ($\bar{\lambda}$):

$$H(D=0) = -8 \sum_i \vec{\lambda}_i \otimes \vec{\lambda}_{i+1} - \frac{4}{3} \mathbb{1}. \quad (129)$$

Квадратичний член Зеемана, що в термінах матриць Гелл-Манна виглядає як $2D(1/3 \mathbb{1} + \lambda_3 - \lambda_8)$, знижує симетрію від $SU(3)$ до $SU(2)$, тобто триплет Гелл-Манна для кожної частинки розділяється на $SU(2)$ дуплет зі спіном $\frac{1}{2}$ та $SU(2)$ синглет зі спіном 0: $v = \{0, 1/2\}$ (згідно з результатами М. Вайрауха).

Ця $SU(2)$ підгрупа зветься v -спіном. Така $SU(2)$ симетрія має місце лише при $\theta = -\pi/2, \pi/2, -3\pi/4$ та $\pi/4$ і відрізняється від очевидної $SU(2)$ симетрії гамільтоніана при $D = 0$, яка зветься s -спіном (через зееманівський член остання зводиться до $U(1)$ при всіх значеннях θ). $U(1)$ підгрупи v -спіну та s -спіну пов'язані співвідношенням $S_z = 2V_z$ (тобто $V = 0$ означає $S_z = 0$, $V = 1/2$ означає $S_z = \pm 1$, $V = 1$ означає $S_z = -2, 0, 2$ і т.д.)

3.4.2 Специфіка чисельних розрахунків

Так як неперервна симетрія не може порушуватись в одновимірній системі згідно з теоремою Мерміна-Вагнера, кожен власний стан моделі має чітко визначений v -спін V . Тому є можливість безпосередньо ввести симетрію v -спінів в наш алгоритм МДС з ПКУ для $SU(2)$ симетрії, викладений в Розділі 2.3. Це призводить до наступних незначних змін в алгоритмі:

1. Зведений локальний тензор МДС має ранг 3: $\mathcal{M}_{\gamma, \gamma'}^v$. Відповідно в рівняннях (114), (115) тензори \mathcal{O} та y мають 3 індекси в квадратних дужках замість 2.
2. Зведений локальний тензор МДО має ранг 5: $\mathcal{W}_{\gamma, \gamma'}^{j_e, v, v'}$.
3. В рівняннях (110), (111) з'являється подвійна сума за v_i, v'_i . (Для додаткового спіну $v_i = v'_i = V$)
4. В символі, введеному в р-ні (112), спін s змінюється на v_i та v'_i .

$SU(2)$ симетрична форма гамільтоніана вимагає коментаря. Якщо його переписати в термінах матриць $C_{v_i, m_e, v'_i}^{v, j_e, v'}$, він має форму

$$H = -N \left(1 - \frac{D}{2}\right) + \sum_i \left[-\left(1 + \frac{D}{2}\right) C_{m_s, 0, m'_s}^{0, 0, 0} \otimes C_{m_s, 0, m'_s}^{0, 0, 0} - (1 - D) C_{m_s, 0, m'_s}^{1/2, 0, 1/2} \otimes C_{m_s, 0, m'_s}^{1/2, 0, 1/2} - 2 \sum_{m_e} C_{m_s, m_e, m'_s}^{0, 1/2, 1/2} \otimes C_{m_s, -m_e, m'_s}^{0, 1/2, 1/2} + 2 \sum_{m_e} C_{m_s, m_e, m'_s}^{1/2, 1/2, 0} \otimes C_{m_s, -m_e, m'_s}^{1/2, 1/2, 0} + 3 \sum_{m_e} C_{m_s, m_e, m'_s}^{1/2, 1, 1/2} \otimes C_{m_s, -m_e, m'_s}^{1/2, 1, 1/2} \right]$$

Згідно з р-ням (5.2.4) книги [86], в стандартній $SU(2)$ симетричній формі знаки в усіх сумах за m_e чергуються. Можна безпосередньо перевірити, що

якщо гамільтоніан H' має знаки, що чергуються, то його розраховані власні стани $|\psi'\rangle$ дають такі самі очікувані значення $SU(2)$ інваріантного оператора (наприклад, гамільтоніана та димерного оператора), як і тоді, коли розрахунки проводяться для початкового гамільтоніана H : $\langle\psi|H|\psi\rangle = \langle\psi'|H'|\psi'\rangle$. Тому розрахунки в роботі проводитимуться для гамільтоніана H' .

3.4.3 Найнижча частина спектра та фазова структура

В даному підрозділі вивчається найнижча частина спектра при $\theta = -\pi/2$ для різних розмірів системи N та значень параметра анізотропії D , що потім екстраполюється до термодинамічної границі. Протяжність димерної фази визначається з тої області параметра, де екстрапольована енергія основного стану є двократно виродженою. В цьому діапазоні значень D також розраховується димерний параметр порядку, і результат порівнюється з вищевказаним результатом. Окрім того, в цій фазі визначається нематичний параметр порядку.

Як ми вже переконалися, спектри достатньо великих систем вказують на межі фаз через закриття чи відкриття спектральних щілин. Оскільки спектри визначаються лише для скінчених систем, отримані перетини рівнів не обов'язково сигналізують закриття/відкриття спектральних щілин в термодинамічній границі.

Спектр для $N = 30$ частинок при $\theta = -\pi/2$ показаний на Рис. 28 як функція D в інтервалі $-0.5 < D < 0.6$. Характерні перетини рівнів при $D = D^-$ та $D = D^+$ показані на рисунку чорними штрихованими лініями. Ці значення досить точно співпадають з межами димерної фази D^- і D^+ , отриманими для цього значення θ в статті [39]. (Увага: через різні знаки зееманівського члена в формулі для гамільтоніана «+» та «-» необхідно поміняти місцями при порівнянні з результатами даної роботи) В цій статті область $D < D^-$ вважається межею між XY -нематичною фазою та фазою Нееля, v -спіновий триплет є найнижчим збудженням (див. Рис. 28). Область $D > D^+$ описується як Ізінг-нематична фаза, найнижчим збудженням є подвійно виродже-

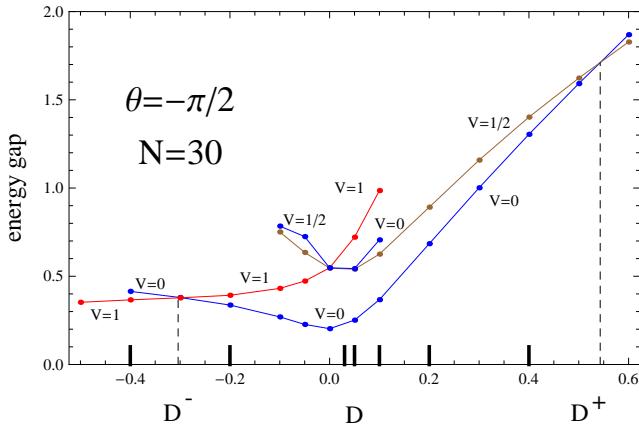


Рис. 28: Найнижча частина спектра біквадратного ($\theta = -\pi/2$) Гайзенбергового кільця з $N = 30$ спінів за наявності квадратичного ефекту Зеемана в діапазоні значень параметра $-0.5 < D < 0.6$. Показані два найнижчі збудження з $V = 0$ ($S_z = 0$) та найнижчі мультиплети з $V = 1/2$ ($S_z = -1, 1$) та $V = 1$ ($S_z = -2, 0, 2$) (енергія основного синг'єтного стану взята як $E = 0$). При $D = 0$ над двома найнижчими $SU(3)$ синг'єтами спостерігається $SU(3)$ октет, який розділяється на $SU(2)$ v -спінові мультиплети при $D \neq 0$. При $D^- \simeq -0.30$ та $D^+ \simeq 0.54$ відбуваються два характерні перетини рівнів, показані чорними штрихованими вертикальними лініями. Жирні мітки вздовж горизонтальної осі показують значення D , при яких спектр розраховується також для систем більшого розміру. Принципова структура спектра зберігається для більших систем.

ний v -спіновий дублет. При $D^- < D < D^+$ найнижчим збудженим станом є синг'єт, і автори прогнозують закриття щілини між ним та основним станом та появу димеризації. Наша задача - дослідити, чи описаний сценарій справді має місце.

3.4.4 Енергетичні щілини

Досліджується залежність структури найнижчої частини спектра від розміру системи N для декількох характерних значень D , позначених мітками вздовж горизонтальної осі на Рис. 28. Результати зібрані на Рис. 29-30. Розглядаються системи розміром від $N = 30$ до $N = 100$.

Залежність структури спектра від розміру системи при $D = 0$ була ґрунтовно вивчена Соренсеном та Янгом [112] за допомогою Бете-анзацу. В термодинамічній границі щілина Δ_{00} між двома найнижчими $SU(2)/SU(3)$ синг'єтами закривається, в той час як щілина до $SU(3)$ октета (v -спінового триплета) залишається ненульовою. Відповідні результати для $D = 0$ включені в Рис. 29 для порівняння (чорна штрихована лінія).

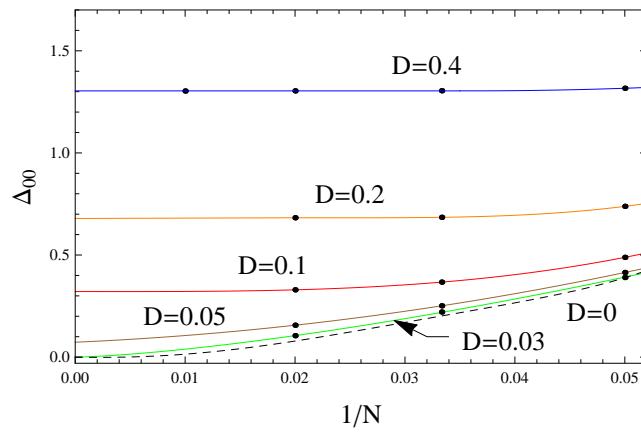


Рис. 29: Енергетична щілина між двома найнижчими станами з $V = 0$ ($S_z = 0$) біквадратного Гайзенбергового кільця за наявності квадратичного ефекту Зеемана при різних додатніх значеннях D . Екстрапольовані значення щілини Δ_{00}^∞ є ненульовими при $D \geq 0.03$ (наприклад, $\Delta_{00}^\infty(D = 0.05) \simeq 0.07$).

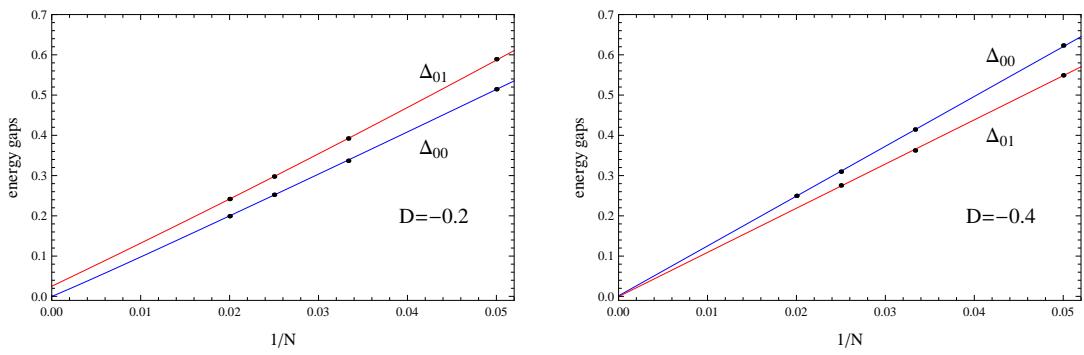


Рис. 30: Щілина між двома найнижчими станами з $V = 0$ ($S_z = 0$) та між найнижчим станом з $V = 0$ та мультиплетом з $V = 1$ ($S_z = -2, 0, 2$) біквадратного Гайзенбергового кільця за наявності квадратичного ефекту Зеемана при $D = -0.2$ (зліва) and $D = -0.4$ (справа). Екстрапольоване значення щілини $\Delta_{00}^\infty \simeq 0$ для обох значень D , що вказує на присутність димеризації. Екстрапольоване значення щілини $\Delta_{01}^\infty(D = -0.2) \simeq 0.025$ є ненульовим, в той час як обидві щілини закриваються в термодинамічній границі при $D = -0.4$. Мале значення $\Delta_{01}^\infty(D = -0.2)$ узгоджується з припущенням [39], що фазовий перехід при D^- є переходом типу Березінського-Костерлітца-Таулесса.

З результатів для Δ_{00} , показаних на Рис. 29, робимо висновок, що при додатніх $D \geq 0.03$ щілина не закривається в термодинамічній границі. Як наслідок, система не димеризується. Цей результат узгоджується з висновками Г. Де К'яри та співавторів [38], зроблених з розрахунків димеризації скіченних ланцюгів (про що детальніше піде мова в наступному підрозділі). Питання, чи щілина Δ_{00} закривається при $0 < D \leq 0.03$, складно вирішити чисельними розрахунками. Однак з представлених в наступному підрозділі результатів можна очікувати, що щілина справді закривається в області $0 < D \lesssim 0.025$.

Перейдемо до області $D < 0$. Варто зазначити, що через більшу кореляційну довжину в системі в цій області необхідні набагато більші розрахункові ресурси, ніж для додатніх значень D . На практиці множину кратностей поступово збільшують, доки не буде досягнуто збіжності результату. В області $D \lesssim -0.3$ кореляційна довжина монотонно зростає зі зростанням розміру системи ($\xi \propto N$), через що результати важко отримати чисельно.

На Рис. 30 (зліва) показано залежність енергетичних щілин Δ_{00} та Δ_{01} від $1/N$ при $D = -0.2$. Екстрапольовані результати показують, що в термодинамічній границі Δ_{00} закривається, а Δ_{01} залишається ненульовою. Це аналогічно ситуації, описаній в [112] при $D = 0$, і вказує, що точка $D = -0.2$ знаходиться всередині димерної фази. На противагу, представлені на Рис. 30 (справа) результати для $D = -0.4$ вказують, що *обидві* щілини Δ_{00} та Δ_{01} закриваються в термодинамічній границі. Як наслідок, при $D = -0.4$ система залишається димеризованою з нещілинними нематичними збудженнями. Наш результат не суперечить припущенняю, що перехід типу Бєрзінського-Костерлітца-Таулесса до критичної нематичної фази відбувається саме при D^- . Однак фази є димеризованими по обидва боки фазового переходу (тобто тільки димеризація не є достатнім критерієм для визначення цього переходу).

3.4.5 Димеризація та кіральність в системі

Г. Де К'яра та співавтори [38] визначили межі димерної фази шляхом розрахунку спостережуваного значення оператора димеризації $\mathcal{D} =$

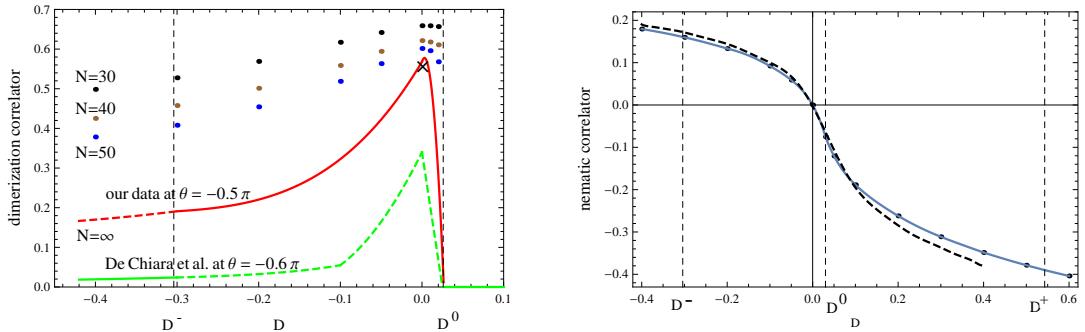


Рис. 31: (Зліва) Димерний корелятор, розрахований для біквадратної моделі Гайзенберга з квадратичним ефектом Зеемана з двох найнижчих станів з $V = 0$ та різними квазімпульсами. Показані результати для 30, 40 та 50 частинок. Червона крива зображує результати екстраполяції до термодинамічної границі. Чорний хрест показує результат розрахунку за допомогою Бете-анзацу при $D = 0$ та $N \rightarrow \infty$. Димеризація є нульовою для $D \gtrsim 0.025$. Зелена крива зображує результати, отримані в статті [38] для $\theta = -0.6\pi$ (штрихована частина є екстрапольованою з результатів вказаної статті). Отримані в даній роботі результати підтверджують результати Г. Де К'яри та співавторів, що димеризація поширюється до великих від'ємних значень D . (Справа) Нематичний корелятор (кіральність), екстрапольований до термодинамічної границі (синя крива). Він розраховується з двох найнижчих власних станів при $-0.3 \lesssim D \lesssim 0.025$ та п'яти найнижчих власних станів при $D \lesssim -0.3$. Нематичний корелятор дорівнює нулю при $D = 0$. Точка перегину $D \simeq 0.02$ досить добре співпадає з точкою переходу $D^0 \simeq 0.025$ між димерною та недимерною зонами. Кіральність не має характерної поведінки при D^- та D^+ . Результати, отримані К. Родрігес та співавторами [39] при $\theta = -0.54\pi$ для ланцюгів з 36 спінів, також наведені для порівняння (чорна штрихова лінія).

$\frac{1}{N} \sum_i (-1)^i [-(\vec{s}_i \otimes \vec{s}_{i+1})^2 + D(s_i^z)^2]$ для скінченних ланцюгів (з ВКУ) розміром до $N = 204$ та екстраполяції до термодинамічної границі.

Як ми пригадуємо з Розділу 3.3.2, основний та збуджені стани скінченних кільцевих систем (з ПКУ) не можуть бути димеризованими через трансляційну інваріантність. Для розрахунку димеризації необхідно взяти симетричну/антисиметричну суперпозицію $\frac{1}{\sqrt{2}}|0^{(0)} \pm 0^{(\pi)}\rangle$ двох найнижчих станів з $V = 0$ та різними квазімпульсами ($p = 0, \pi$). Всередині димерної фази ці два стани розділені малою щілиною у скінченній системі і формують вироджений дублет в термодинамічній границі. Перш ніж використовувати цю процедуру, важливо переконатись, що два найнижчі стани з $V = 0$ справді є виродженими в термодинамічній границі.

Результати розрахунків димерного корелятора показані на Рис. 31. Ре-

зультат для $D = 0$ був обчислений в Розділі 3.3.2. Для перевірки, чи система димеризується при малих додатніх D , були проведені детальні розрахунки при $D = 0.01$ та $D = 0.02$ (де спектроскопія рівнів не давала однозначного результату) та була отримана ненульова димеризація. Зелена крива на Рис. 31 містить результати Г. Де К'яри та співавторів для $\theta = -0.6\pi$ (частково екстрапольовані, оскільки в статті не подаються результати для $D \gtrsim -0.3$). Загалом результат Г. Де К'яри та співавторів, що димеризація присутня в області $-\infty < D \lesssim 0.025$, підтверджується. Варто також зазначити, що при $D < D^-$ спостережуване значення димеризації необхідно розраховувати з 5 станів, однак ненульове значення дають тільки два синг'лети. Таким чином, димерний корелятор має злам в точці $D = D^-$.

Окрім димеризації, розраховується також нематичний корелятор (кіральності) $Q = \frac{1}{N} \sum_i (S_i^z)^2 - \frac{2}{3}$ основного стану. При $\theta = -\pi/2$ та $D = 0$ нематичний корелятор дорівнює нулю для системи будь-якого розміру [39]. Для екстраполяції до термодинамічної границі необхідно взяти до уваги, що при $N \rightarrow \infty$ основний стан є двократно виродженим для $-0.3 \lesssim D \lesssim 0.025$ та п'ятикратно виродженим для $D \lesssim -0.3$. На відміну від димерного корелятора, нематичний корелятор будь-якого власного стану є ненульовим, в той час як власне значення, розраховане для двох різних станів, дорівнює нулю. Спостерігається, що нематичні корелятори двох (або п'яти) вироджених власних станів з високою точністю рівні між собою для великих розмірів системи, а скінченорозмірні ефекти є малими. Тому точна екстраполяція до $N \rightarrow \infty$ можлива з розрахунків для систем з $N \leq 50$ частинок.

Нематичний корелятор має характерний перегин при $D \simeq 0.02$ (аналогічний перегин був отриманий для $\theta = -0.54\pi$ в [39]). Цей перегин, очевидно, сигналізує перехід між димерною та недимерною фазами. З іншого боку, нематичний корелятор не має характерних рис при D^- та D^+ .

Насамкінець було перевірено, що чергована намагніченість основного стану дорівнює нулю на всій прямій $\theta = -\pi/2$. Це не суперечить припущенням, що при $D < D^-$ пряма $\theta = -\pi/2$ є межею між критичною фазою та фазою

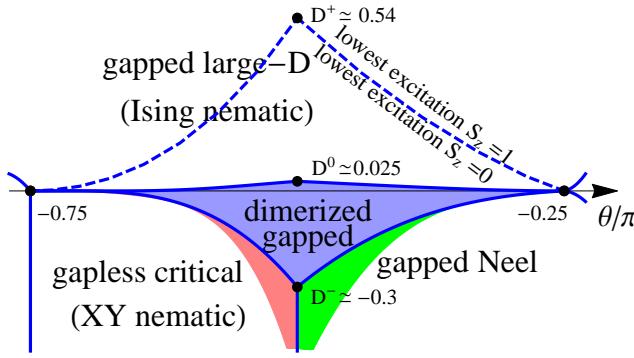


Рис. 32: Схематична фазова діаграма білінійно-біквадратної моделі Гайзенберга з квадратичною зееманівською анізотропією D в області $-\frac{3\pi}{4} < \theta < -\frac{\pi}{4}$. В трьох кольорових областях (червоній, зеленій та синій) присутня димеризація, супільні сині криві позначають фазові переходи. Деталі наводяться в основному тексті.

Нееля. Однак для уточнення є бажаними розрахунки при $\theta > -\frac{\pi}{2}$.

3.4.6 Прогнозована фазова діаграма

Як висновок, були отримані межі димерної фази біквадратної ($\theta = -\frac{\pi}{2}$) моделі Гайзенберга частинок зі спіном 1 та квадратичним ефектом Зеемана. *Щілинна* димерна фаза існує в діапазоні значень параметра $D^- < D < D^0$, де $D^- \simeq -0.30$ і $D^0 \simeq 0.025$, однак була виявлена також *нешілинна* димерна фаза, яка поширюється від D^- до великих від'ємних значень D . Попри підтвердження результатів Де К'яри та співавторів [38], що передбачили слабку димеризацію навіть при $D < -2.0$, в даній роботі відзначається наявність і щілинної, і нешілинної димерної області. Перехід між цими двома димерними областями відбувається при D^- , що вважається межею димерної фази в статті [39]. На іншому краю димерної області поблизу $D = D^0$ димеризація різко спадає до нуля, а щілина між двома синг'летами відкривається, позначаючи перехід до недимерної області. При $D = D^+$, що вважається верхньою межею димерної фази в статті [39], насправді немає фазового переходу.

Наші результати для $\theta = -\pi/2$ можна якісно поширити на інтервал параметрів $I = (-\frac{3\pi}{4}, -\frac{\pi}{4})$, окремо для додатніх та від'ємних значень D , користуючись загальними міркуваннями та розрахунками, наведеними в [39] та [38]. Результатуюча схематична фазова діаграма зображена на Рис. 32.

Наразі досить точно доведено, що при $D = 0$ білінійно-біквадратна мо-

дель зі спіном 1 має димеризований основний стан в усьому інтервалі I . Зокрема, існування нематичної фази в околі точки переходу до феромагнітної фази було заперечено (як в статтях [117, 144], так і в даній роботі). При великих додатніх чи від'ємних значеннях D система не є димеризованою. Це випливає з простих аналітичних міркувань [38].

При великих додатніх D система перебуває в щілинній «велика- D » фазі [38], а перехід між димерною та недимерною фазами відбувається при малому додатньому значенні D для всіх $\theta \in I$ [38]. При $D > D^0$ система перебуває в Ізінг'-нематичній («велика- D ») фазі, позначеній білим кольором поверх синьої області на Рис. 32 (оскільки в спектрі немає нульових щілин). З результатів статті [39] очікується, що найнижче збудження змінюється з $S_z = 0$ при $D < D^+$ на $S_z = \pm 1$ при $D > D^+$, що позначено синіми штрихованими кривими.

При великих від'ємних значеннях D система перебуває в нещілинній критичній (XY -нематичній) фазі при $-\frac{3\pi}{4} < \theta < -\frac{\pi}{2}$ та в щілинній фазі Нееля при $-\frac{\pi}{2} < \theta < \frac{\pi}{2}$ [38]. При малих та середніх від'ємних значеннях D нематична фаза та фаза Нееля розділені димерними областями, що позначені на Рис. 32 синім, червоним та зеленим кольорами. Очікується, що щілина між двома найнижчими синглетами закривається в усіх кольорових областях. В червоній області також припускається закриття щілини до найнижчого триплету, тобто очікується 5-кратне виродження основного стану та відсутність чергованої намагніченості. В зеленій області припускається відкрита щілина до триплетного стану та ненульова чергована намагніченість. Пряма між червоною та зеленою секціями розділяє фази з присутньою та відсутньою чергованою намагніченістю. Це твердження потребує перевірки подальшими розрахунками, що виходять за межі дисертаційної роботи.

3.5 Збіжність запропонованих алгоритмів та точність розрахунків

Представлені в попередніх підрозділах результати мали на меті описати цікаві фізичні властивості досліджуваних моделей, а також проілюструвати роботу запропонованих алгоритмів. Хороша точність результатів була отримана з використанням помірних розмірів МДС. Через те, що оперувати за-пропонованим Верстрате, Поррасом та Сіраком МДС [71] технічно складно, не ставилась мета підвищувати точність розрахунків до межі. Окрім того, збіжність в околі точного результату є експоненційно повільною.

В процесі розрахунків з використанням симетричних МДС випливає явний недолік. З результатів очевидно, що точність дуже залежить від множини кратностей T , що також визначає повний розмір МДС m : $m = \sum_i t_{m_i}$ для U(1) симетрії та $m = \sum_i (2j_i + 1)t_{j_i}$ для SU(2) симетрії. Може статись так, що для даної множини кратностей T оптимізація зупиняється до того, як досягти мінімуму, або алгоритм стає повністю нестабільним. До того ж, іноді алгоритм може «застрягнути» в «локальному мінімумі». Цей «локальний мінімум» справді є власним станом з потрібним S_z/S , але є вищим за потрібний власний стан (таке може статися, якщо густина станів з потрібним S_z/S є високою в тій частині спектра, що розглядається; наприклад, в феромагнітних фазах обох досліджуваних моделей).

Розглянемо до певної міри вибір множини кратностей. По-перше, варто згадати, що завдяки трансляційній інваріантності досліджуваних моделей множини кратностей є однаковими для всіх віртуальних індексів (для систем без трансляційної інваріантності це буде не так). З усіх отриманих результатів можна зробити чіткий висновок: множина кратностей T (в рамках заданого розміру МДС $m!$) визначається розподілом заплутаності в системі. Якщо внесок заплутаності короткої дії є великим, зазвичай потрібно менше секторів симетрії, але більшого розміру. І навпаки: якщо великим є внесок заплутаності далекої дії, потрібно більше секторів симетрії меншого розміру. Зв'язок

між багатокубітовою (many-way) заплутаністю (наприклад, тристоронньою) і T не досліджується в даній роботі.

Продемонструємо сказане на декількох прикладах. Заплутаність між найближчими сусідами в ББГ моделі зі спіном 1 найвища в біквадратній точці $\theta = -\frac{\pi}{2}$, а в XXZ моделі зі спіном $1/2$ - в ізотропній точці $\Delta = 1$. Це гарно відображене в кратностях виродження віртуальних спінів/їхніх проекцій: вони великі, але кількість секторів є порівняно малою. При переміщенні до точки переходу $\theta = -\frac{3\pi}{4}$ (ББГ модель) чи $\Delta = -1$ (XXZ модель) чітко спостерігається зростання потрібної кількості секторів симетрії. Це зумовлено більшою вагою заплутаності далекої дії. А саме: 1) при $\theta \simeq -0.7\pi$ розрахунок синг'летів потребує віртуального спіну $7/2$, а розрахунок квінтету - вже віртуальних спінів $9/2, 11/2$ чи більше; 2) при $\Delta = 0$ кількість секторів симетрії зростає з 9 до 11, а середня кратність виродження зменшується. При наближенні до $\Delta = -1$ це стає ще помітніше (потрібні приблизно 20 секторів симетрії). В екстремальних випадках ($\theta = -\frac{3\pi}{4}$ для ББГ моделі та $\Delta < -1$ для XXZ моделі) розподіл кратностей за секторами стає майже рівномірним, але для розрахунків потрібні великі розміри МДС. Наприклад, розрахунки ББГ кільця зі 100 спінів при $\theta = -\frac{3\pi}{4}$ показують, що для отримання точного результату потрібно набагато більше секторів симетрії (збільшення кратностей не допомагає).

Варто зробити наступне зауваження. Як вже було сказано, точні розрахунки найнижчих станів з $S_z = 0$ для $\Delta = 0$ та $\Delta = 1$ можуть бути здійснені за допомогою МДС однакового розміру $m = 39$, але з різним T : випадок $\Delta = 1$ вимагає менше секторів більшого розміру. Якщо спробувати помінняти місцями множини кратностей для даних значень Δ , похибка $\Delta E/E$ зросте щонайменше на порядок.

Розподіл заплутаності в системі неможливо передбачити апріорі. Тому для деяких власних станів проводять декілька розрахунків, поки не вгадають «потрібну» множину кратностей. Очевидно, було б бажано, щоб алгоритм сам автоматично обирає оптимальну множину кратностей T і не застрягав в

«локальних мінімумах». Для МДС з ВКУ така процедура існує. Вона була запропонована Вайтом [133] і полягає в модифікації процедури перекалібрування. Замість р-нь (25–26) розраховуються наступні вирази

$$\begin{aligned}\rho_{(a_{i-1}, s_i), (a'_{i-1}, s'_i)} &= \sum_{a_i} M_{a_{i-1}, a_i}^{[i], s_i} M_{a'_{i-1}, a_i}^{[i], s'_i *} \text{ ліве норм.,} \\ \rho_{(s_i, a_i), (s'_i, a'_i)} &= \sum_{a_{i-1}} M_{a_{i-1}, a_i}^{[i], s_i} M_{a_{i-1}, a'_i}^{[i], s'_i *} \text{ праве норм.,}\end{aligned}\quad (130)$$

ρ має розмір $(2s + 1)m \times (2s + 1)m$. Його РзСЧ $\rho = USV^\dagger$ має рівно m сингулярних чисел, отже, ρ має ранг m , і можна отримати перекалібровану матрицю $M_{a_{i-1}, a_i}^{[i], s_i} = U_{(a_{i-1}, s_i), a_i}$. Вона ідентична матриці, отриманій з р-нь (25–26). Можна довести, що для ВКУ вирази (130) дорівнюють зведеній матриці густини $\rho_{1 \rightarrow i}$ для частинок від 1 до i (ліве нормування) та $\rho_{i \rightarrow N}$ для частинок від i до N (праве нормування) відповідно. Їх виявляється можливим розрахувати з одного тензора $M^{[i]}$.

У випадку U(1) або SU(2) симетрії інваріантна форма ρ є блочною діагональною, де кожен блок відповідає конкретній віртуальній проекції спіну чи повному спіну. Через «правила відбору» кожен ненульовий блок ρ відповідає аналогічному блоку $Q^{L/R}$, і ці блоки мають одинаковий ранг. Таким чином, перекалібрування можна робити поблоко, і отримуються такі самі результати, як якби використовувались р-ня (25–26).

Ключовою операцією, запропонованою Вайтом [133] для ВКУ, є модифікація матриці густини ρ (див. р-ня (217) статті [66]). Ранг модифікованої матриці густини є більшим за m . Знову розраховується РзСЧ цієї матриці $\rho = USV^\dagger$, і перекалібрований локальний тензор $M^{[i]}$ утворюється з матриці \tilde{U} , що відповідає m найбільшим сингулярним числам. У випадку симетричних МДС обираються m найбільших сингулярних чисел безвідносно до сектора, якому вони належать. Таким чином, сектори симетрії можуть збільшуватись чи зменшуватись, а ще сектори можуть динамічно зникати чи утворюватись під час процедури оптимізації.

У випадку МДС з ПКУ ця процедура не працює в оригінальному вигляді,

оскільки вищевказані вирази вже не дорівнюють зведенім матрицям густини. Але вони можуть бути використані як «псевдо»-зведені матриці густини, а збурення $\Delta\rho$ можна модифікувати відповідним чином. Попередні розрахунки за допомогою такого алгоритму показують покращення збіжності розрахунків: алгоритм вже не застригає в станах з заданим S_z/S , що є вищими за потрібний стан; і оптимальна множина кратностей в межах заданого розміру МДС t обирається автоматично. Є тільки один недолік: така процедура була розрахована на ВКУ і принципово порушує трансляційну інваріантність в системі, що є небажаним у випадку трансляційно інваріантних систем з ПКУ. Сказане непрямо виражається в тому, що множина кратностей починає відрізнятись для різних віртуальних індексів. Необхідною є модифікація пропозиції Вайта, яка б змінювала множини кратностей одночасно на всіх віртуальних індексах.

3.6 Аналіз параметрів скорочення p та p'

Як вже згадувалось раніше, кількість сингулярних чисел p, p' , які необхідно утримувати в алгоритмі без симетрій, зростає зі зростанням m . Необхідно бути обережним, щоб не взяти в розкладі (70–71) занадто мало доданків. Досвід показує, що необхідне зростання є приблизно $\propto m$ (цей факт був виявлений в статті [73] для p , і аналогічне співвідношення має місце для p'). Таке саме співвідношення продемонстроване для алгоритму з $U(1)$ симетрією.

В цьому підрозділі хочеться зупинитись на різниці в поведінці сингулярних чисел в двох випадках. А саме: 1) коли досліджується одна її та сама модель, але використовується почергово алгоритм без симетрії та з $U(1)$ симетрією; 2) різні фізичні системи досліджуються за допомогою алгоритму з $U(1)$ симетрією. Перше питання досліджується на прикладі білінійної моделі Гайзенберга зі спіном 1, а друге – на прикладі білінійної моделі Гайзенберга зі спіном $1/2$ та 1.

Як критерій скорочення використовується критерій статті [72], що співвідношення (найбільше сингулярне число)/(найменше утримуване сингулярне число) повинне бути приблизно 10^{-11} (такі сингулярні числа називають «важливими»). Варто нагадати, що для XXZ гамільтоніана з будь-яким спіном частинок $p_{\max} = m^2$ і $p'_{\max} = 2m^2$ (це можна перевірити методом Гаусса для відповідних трансферних матриць).

На рис. 33 показаний розподіл сингулярних чисел N -та H -блоків, отриманий після розрахунків з $m = 30$ для Гайзенбергового кільця зі 100 частинок зі спіном 1. Рис. 34 порівнює розподіл сингулярних чисел N -блоків на початку і наприкінці розрахунку за допомогою $U(1)$ симетричних МДС однакового розміру $m = 30$ з множиною кратностей $T = \{1, 2, 4, 8, 8, 4, 2, 1\}$. Аналогічне порівняння розподілів сингулярних чисел N -блоків наприкінці розрахунків за допомогою $U(1)$ симетричних МДС для моделі Гайзенберга зі спіном 1 та $1/2$ було проведено, але не показано на рисунку.

Виявляється, що кінцева кількість «важливих» сингулярних чисел для

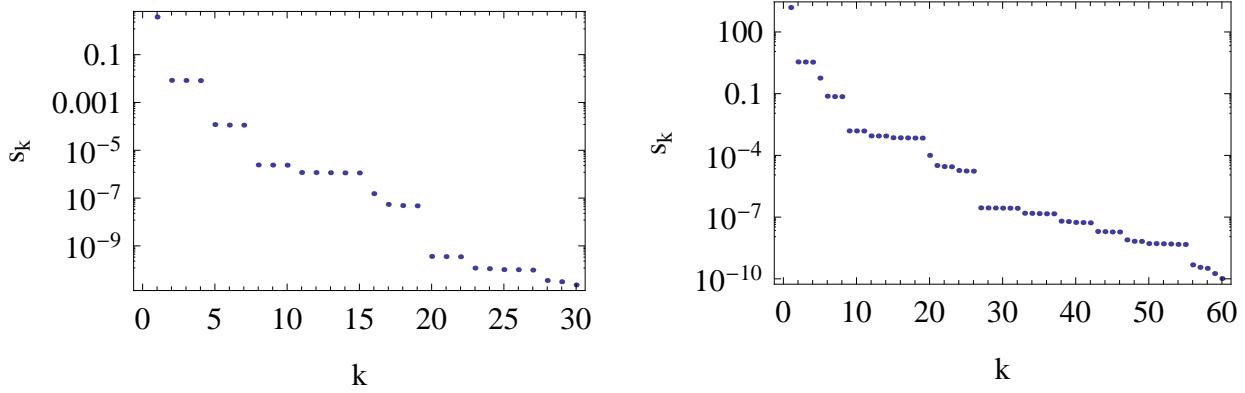


Рис. 33: Розподіл сингулярних чисел добутків n_L (зліва) і h_L (справа) 33 трансферних матриць після розрахунку основного стану білінійного Гайзенбергового кільця з 100 частинок зі спіном 1 за допомогою несиметричного МДС розміру $m = 30$.

моделі Гайзенберга зі спіном 1 не залежить від того, чи в розрахунках використовується $U(1)$ симетрія. Однак виявлено цікавий факт: кількість «важливих» сингулярних чисел в алгоритмі з $U(1)$ симетрією суттєво змінюється *pід час* виконання алгоритму. Якщо точніше, найменші сингулярні числа зменшуються на багато порядків (до 6) після декількох кіл оптимізації. Таким чином, якщо від початку утримувати тільки «кінцеву» кількість сингулярних чисел, алгоритм з великою ймовірністю продемонструє чисельну нестабільність. Наприклад, в розрахунку, показаному на рис. 34, кількість сингулярних чисел, які необхідно утримувати *pід час* виконання алгоритму, дорівнює $p = 60$ та $p' = 120$ (що в 2 рази перевищує відповідну кількість в алгоритмі без симетрій).

Порівняння поведінки сингулярних чисел N -блоків для моделей Гайзенберга зі спіном $1/2$ та 1 демонструє інший цікавий факт. Для (щілинної) моделі Гайзенберга зі спіном 1 сингулярні числа спадають дуже швидко для системи розміром $N = 100$, що спостерігалося в статті [72]; в той час як для (нешілинної) моделі Гайзенберга зі спіном $1/2$ зі 100 частинок потрібен більший відсоток сингулярних чисел. До того ж, вище зазначене спостереження стає ще промовистішим: попри малу кількість «кінцевих» сингулярних чисел, під час оптимізації необхідно зберігати приблизно 50% сингулярних чисел (див. Таблиці 3, 4), в той час як для моделі Гайзенберга зі спіном 1 ця

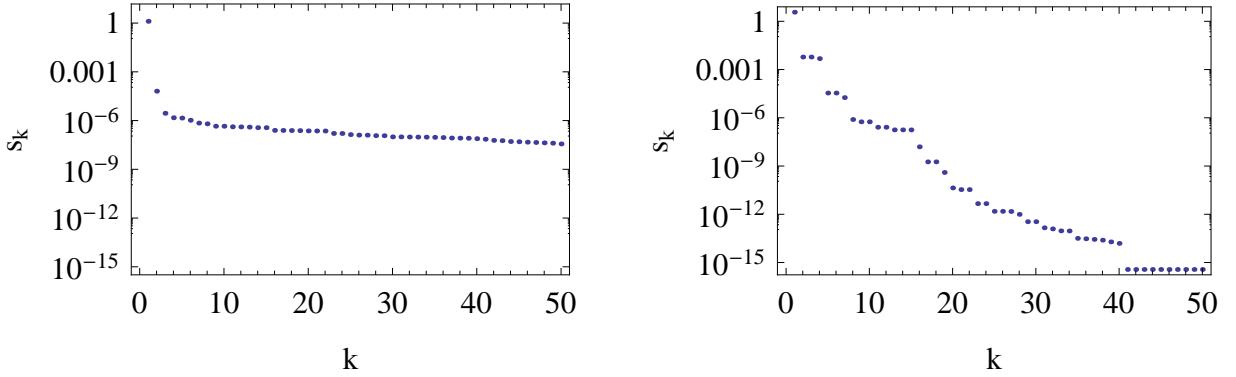


Рис. 34: Розподіл сингулярних чисел добутків $n_L = 33$ трансферних матриць на початку (зліва) та наприкінці (справа) розрахунку основного стану білінійного Гайзенбергового кільця зі 100 частинок зі спіном 1 за допомогою $U(1)$ симетричного МДС з множиною кратностей $T = \{1, 2, 4, 8, 8, 4, 2, 1\}$ (розмір МДС $m = 30$). Якщо від початку утримуються 25-30 сингулярних чисел (які є «важливими» наприкінці розрахунку відповідно до критерію статті [72]), алгоритм з $U(1)$ симетрією демонструє чисельну нестабільність (на відміну від алгоритму без симетрії).

частка складає менше за 10%.

Подальші розрахунки для моделі Гайзенберга зі спіном $1/2$ показують, що при розмірах системи $N > 150$ параметри p, p' можуть бути зменшені приблизно пропорційно $\frac{1}{N^2}$. Таким чином, при $N \simeq 300$ кількість утримуваних сингулярних чисел стає порівнянною з аналогічною величиною для моделі Гайзенберга зі спіном 1. Можливе пояснення полягає в тому, що спін-спінові кореляції в нещілинній моделі є більшими, ніж в щілинній моделі, і вони зменшуються з відстанню для набагато більших систем (кількість «важливих» сингулярних чисел має зв'язок зі спін-спіновими кореляціями [132]).

Як висновок, для забезпечення чисельної стабільності алгоритму величини p та p' необхідно контролювати під час виконання алгоритму шляхом моніторингу співвідношення (найбільше сингулярне число)/(найменше утримуване сингулярне число). Автор радить уникати скорочення РзСЧ, якщо не очікується справді суттєвого пришвидшення розрахунків (щонайменше на порядок).

ВИСНОВКИ

Дисертаційна робота була присвячена вивченю цікавих властивостей двох одновимірних квантових моделей, а саме: XXZ моделі частинок зі спіном $1/2$ та білінійно-біквадратної моделі Гайзенберга (ББГ) частинок зі спіном 1 без та за наявності квадратичного ефекту Зеемана, обох в геометрії кільця (названі моделі є $U(1)$ або $SU(2)$ симетричними за певних значень контрольних параметрів). Такими властивостями є властивості заплутаності високих збуджених станів XXZ моделі частинок зі спіном $1/2$ в феромагнітній фазі та межі димерної фази ББГ моделі зі спіном 1 . Дуже важливою частиною роботи була розробка чисельних методів для технічно ефективних розрахунків власних станів кільцевих систем з великої кількості частинок. З завершеної роботи можна зробити наступні висновки:

1. Отримано межі димерної щілинної фази в ББГ моделі зі спіном 1 в точці $\theta = -\pi/2$: $D^- < D < D^0$, $D^- \simeq -0.3$, $D^0 \simeq 0.025$. 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 контролюального параметра $\theta/\pi = -1/4$ до щонайменше $\theta/\pi = -0.72$. Здобувач схильний заперечити існування окремої фази в околі $SU(3)$ -симетричної точки $\theta = -3\pi/4$ 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.

ПЛАН ПОДАЛЬШИХ ДОСЛІДЖЕНЬ

По-перше, розроблені чисельні методи можна модифікувати для розрахунків властивостей 2D систем, які на разі викликають великий інтерес (звісно, необхідно пам'ятати, що в 2D в деяких випадках неперервні симетрії порушуються, на відміну від 1D).

На разі проводяться розрахунки характеристик $U(1)$ та $SU(2)$ симетричних 1D систем, які є менш тривіальними та менш дослідженими. Прикладом $U(1)$ симетричної моделі є ББГ модель зі спіном 1 та квадратичним ефектом Зеемана (вона є $SU(2)$ симетричною при чотирьох значеннях θ : $\theta = -3\pi/4, -\pi/2, \pi/4, \pi/2$). В дисертаційній роботі отримані результати для $\theta = -\pi/2$, але цікаво дослідити поведінку системи також при $\theta = \pi/4$ та $-\pi/2 < \theta < -\pi/4$. Також цікаво дослідити системи з домішками; наприклад, модель Бозе-Габбарда (що описує незгасальні потоки в мікроскопічних системах).

Розроблені алгоритми досі мають недолік, що множина кратностей визначається методом проб і помилок. Алгоритм для її автоматичного визначення під час оптимізації вже розроблений аналогічно до наявного алгоритму для систем з ВКУ, але є необхідність дослідити причину, з якої цей алгоритм принципово порушує трансляційну інваріантність в системі.

ПОДЯКА

Перш за все я хочу подякувати своєму науковому керівнику Івану Сергійовичу Доценку та завідувачу кафедри Станіславу Йосиповичу Вільчинському за велике терпіння та підтримку під час виконання роботи. Я також вдячний секретарці кафедри Олені Теслик за спрощення моого робочого процесу.

Хочу подякувати наступним людям за корисні обговорення: Гансу Герду Евертцу за інформацію про деталі чисельного алгоритму Піппана-Вайта-Евертца, Йену П. МакКаллоку за обговорення алгоритмів для МДС з ВКУ з неперервними симетріями, Олексію Колежуку за інформацію про властивості різних спінових моделей та Б. Брайорр-Оррсу (також відомому як Володимир Воронов) за інформацію про міри заплутаності та 2D тензорні мережі.

Хочу відзначити роль д-ра Міхаеля Вайрауха (інститут Physikalisch-Technische Bundesanstalt, м. Брауншвайг, Німеччина) в цій дисертаційній роботі, оскільки його ідеї були базовими (особливо тензорні мережі з симетріями). Я вдячний інституту Physikalisch-Technische Bundesanstalt за надання в моє користування для розрахунків робочих станцій (включно з розрахунковим кластером в Берліні) та програмного забезпечення *Mathematica*. Особливо відзначаю сприяння д-ра Роберта Вінандса та проф. Андрея Суржикова. Також я вдячний Юрію Бідасюку та Б. Брайорр-Оррсу за проведення розрахунків від моого імені.

Окремо хочу подякувати подружжю Федоренків, Анатолію Петровичу та Ліні Миколаївні, за те, що колись повірили в мене і вказали один з можливих шляхів, куди рухатися. Я вдячний своїй дівчині Тетяні та моїм друзям Олександру Вязлу, Олегу Слабоспицькому, Юлії Жуковській і багатьом іншим за їхню віру, моральну підтримку, натхнення та гумор.

І, звісно, дякую моїй мамі Алії Андріївні та сестрі Тані за велике терпіння і моральну підтримку під час моого навчання в університеті та аспірантурі.

Додаток А

А.1. Проріджування блоків з еволюцією часу (iTEBD)

Алгоритм проріджування блоків з еволюцією часу (ПБзЕЧ, англ. “iTEBD”) приводить до основного стану в канонічній формі МДС [69, 70, 66]. В цій формі окрім тензора A на кожній вершині ТМ також присутні зв’язкові вектори (англ. “bond vectors”) $\vec{\lambda}$ на кожному зв’язку. В конкретному канонічному МДС зв’язкові вектори можна розглядати як перенормовані базиси фізичних ступенів вільності багаточастинкової системи (наприклад, «ефективні» спіни). Таким чином, зв’язкові вектори пов’язані з коефіцієнтами Шмідта в розкладі хвильової функції; тобто вони описують двосторонню заплутаність всередині стану. Понад те, зведена матриця густини стану може бути наближено охарактеризована в термінах цих ефективних ступенів вільності.

Метод ПБзЕЧ локально порушує трансляційну інваріантність. А саме: в стані присутнє розділення на дві частини, і трансляційно інваріантний основний стан представлений двома тензорами $\{A, B\}$. Спосіб визначення A та B добре описаний в розділі 7.3.2 статті [66], тому він тут не наводиться. Двочастинкова зведена матриця густини визначається як

$$\rho_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma'_1 \sigma'_2} = \text{Tr}(\mathcal{G} \cdot T_A^{\sigma_1 \sigma'_1} \cdot T_B^{\sigma_2 \sigma'_2}). \quad (131)$$

«Домішкові матриці» дорівнюють: $T_A^{\sigma \sigma'} = A^{\sigma *} \otimes A^{\sigma'}$, $T_B^{\sigma \sigma} = B^{\sigma *} \otimes B^{\sigma}$. «Матриця оточення» $\mathcal{G} = (|v_R\rangle \langle v_L|)/\lambda$, де λ є найбільшим власним значенням, а $|v_L|$, $|v_R\rangle$ - відповідними власними векторами комбінованої двочастинкової трансферної матриці $(\sum_{\sigma_1} T_A^{\sigma_1 \sigma_1}) \cdot (\sum_{\sigma_2} T_B^{\sigma_2 \sigma_2})$.

А.2. Модифікація алгоритму Остлунда-Роммера на випадок $U(1)$ симетрії

Тут розглядаються тільки системи чатсинок зі спіном $\frac{1}{2}$ та 1.

Алгоритм для розрахунку основного стану системи з $SU(2)$ -симетричним (наприклад, Гайзенберговим) гамльтоніаном був запропонований Остлундом та Роммером [51, 52]. Він будеутися на ідеї, що якщо гамільтоніан є трансляційно інваріантним, можна утворити трансляційно інваріантний МДС з ПКУ (тобто локальний тензор МДС дублюється на всіх частинках). Елементи МДС визначаються теоремою Ві'гнера-Екарта:

$$M_{(\gamma_L, m_L), (\gamma_R, m_R)}^{(s, 1, s_i)} = \mathcal{M}_{\gamma_L, \gamma_R} C_{m_L, s_i, m_R}^{j_L, s, j_R}. \quad (132)$$

Вираз для енергії на одну частинку прямо мінімізується відносно параметрів МДС $\mathcal{M}_{\gamma_L, \gamma_R}$.

Вираз для енергії на одну частинку для гамільтоніана Гайзенберга дорівнює

$$\frac{E_0}{N} = \langle v_L | (\hat{E}_{s^x} \hat{E}_{s^x} + \hat{E}_{s^y} \hat{E}_{s^y} + \hat{E}_{s^z} \hat{E}_{s^z}) | v_R \rangle,$$

де E - відповідні трансферні матриці, а $\langle v_L |, | v_R \rangle$ - лівий та правий власний вектор.

Запропонований Остлундом та Роммером МДС має одну цікаву рису. Він утворює $SU(2)$ -інваріантний стан $|\psi\rangle$, який (за означенням) є станом з повним спіном $S = 0$. Схожу ідею можна використати для $U(1)$ -симетричних гамільтоніанів (наприклад, XXZ моделі зі спіном $1/2$). Можна створити МДС, що є $U(1)$ -інваріантним, тобто має проекцію спіну $S_z = 0$ (аналогічно до $S = 0$) і є одночасно трансляційно інваріантним. Такий МДС справді може бути створений - див. Розділ 2.2.3. У випадку $S_z = 0$ всі $x_i = 0$, і МДС має форму

$$M_{(m_L, t_L), (m_R, t_R)}^{s_i} = \mathcal{M}_{(m_L, t_L), (m_R, t_R)} \delta_{m_L, s_i + m_R}. \quad (133)$$

«Вдалу» множину кратностей T для проекцій спіну $m_{L/R}$ необхідно вгада-

ти. Також варто зауважити, що трансляційно інваріантний МДС може бути утворений для повністю поляризованого стану $S_z = Ns$ (тут $x_i = s$). Однак енергія цього стану є тривіальною.

Енергія на одну частинку XXZ моделі (частинок зі спіном $1/2$ та 1), яку потрібно мінімізувати, дорівнює

$$\frac{E_0}{N} = \langle v_L | (\hat{E}_{s^x} \hat{E}_{s^x} + \hat{E}_{s^y} \hat{E}_{s^y} + \Delta \hat{E}_{s^z} \hat{E}_{s^z}) | v_R \rangle$$

Попередні результати для XXZ моделі зі спіном $1/2$ рівні (для $T = \{1, 1, 2, 2, 1, 1\}$):

- $\Delta = 0$: $E_0/N = -0.316169$ (точний результат $E_0/N = -1/\pi$);
- $\Delta = 1$: $E_0/N = -0.441058$ (точний результат $E_0/N = 1/4 - \log 2$).

Попередні результати для XXZ моделі зі спіном 1 рівні (для $T = \{1, 2, 2, 1\}$):

- $\Delta = 0$: $E_0/N = -1.11244$ (найточніший відомий результат $E_0/N \simeq -1.12$);
- $\Delta = 1$: $E_0/N = -1.39966$ (найточніший відомий результат $E_0/N \simeq -1.401484$).

A.3. Результати Бете-анзацу для нескінченних XXZ моделі частинок зі спіном $1/2$ та ББГ моделі частинок зі спіном 1

Енергія на одну частинку стану з $m_z = 0$ XXZ моделі частинок зі спіном $1/2$, визначена за допомогою нескінченорозмірного Бете-анзацу [88, 90], дорівнює

$$E_0 = \frac{\Delta}{4} \quad \Delta \leq -1, \quad (134)$$

$$E_0 = \frac{\Delta}{4} - \frac{1}{2}(1 - \Delta^2) \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\operatorname{ch} \pi x (\operatorname{ch}(2x \arccos \Delta) - \Delta)}, \quad \Delta > -1. \quad (135)$$

При $\Delta = 1$ підінтегральний вираз невизначений, тому необхідно взяти граніцю. $z - z$ корелятор \mathcal{Z} отримується як часткова похідна $\mathcal{Z} = \partial E_0 / \partial \Delta$.

Чергована намагніченість \bar{m}_z для цієї моделі визначається формулою [141],

$$\begin{aligned}\bar{m}_z &= 0, \quad \text{for } \Delta < 1, \\ \bar{m}_z &= \frac{1}{2} \prod_{n=1}^{\infty} \operatorname{th}^2(n \operatorname{arch} \Delta), \quad \text{for } \Delta \geq 1.\end{aligned}\quad (136)$$

Нескінченнорозмірний результат Бете-анзацу для ББГ моделі при $\theta = \pi/4$ [121, 109] рівний $E/N = \frac{2-\ln 3-\frac{\pi}{3\sqrt{3}}}{\sqrt{2}}$, а для $\theta/\pi = -\pi/4$ рівний $E/N = -\sqrt{8}$ [107].

A.4. Матриці Гелл-Манна

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \lambda_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \lambda_3 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \lambda_4 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \lambda_5 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \lambda_6 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \lambda_7 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \lambda_8 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{2}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}\end{aligned}$$

A.5. Розрахунок матриці X для перекалібрування МДС

Метою є утворити таку матрицю X , що

$$\begin{cases} X^\dagger Q X = \mathbb{1}, & \text{ліве нормування} \\ X Q X^\dagger = \mathbb{1}, & \text{праве нормування} \end{cases}$$

де $Q = Q^\dagger$.

Ключем до цього розрахунку є ермітовість Q . Завдяки цьому розклад Q

за власними числами виглядає як

$$Q = PSP^\dagger,$$

де S - дійсна діагональна матриця, а P - унітарна матриця: $P^\dagger P = PP^\dagger = \mathbb{1}$.

Розглянемо умову для правої нормалізації. Отримаємо

$$XPSP^\dagger X^\dagger = \mathbb{1}.$$

Цю умову можна легко задоволити, поклавши

$$XPS^{\frac{1}{2}} = \mathbb{1}.$$

Тоді, взявши до уваги вищевказані умови для S та P , отримуємо

$$X = S^{-\frac{1}{2}}P^\dagger \quad (137)$$

і, як наслідок,

$$X^{-1} = PS^{\frac{1}{2}}. \quad (138)$$

Звертаємо увагу, що якщо S не має оберненої (тобто якщо її діагональ містить нулі), необхідно брати псевдообернену матрицю.

Аналогічно для лівого нормування можна отримати

$$S^{\frac{1}{2}}P^\dagger X = \mathbb{1},$$

отже,

$$X = PS^{-\frac{1}{2}} \quad (139)$$

та

$$X^{-1} = S^{\frac{1}{2}}P^\dagger. \quad (140)$$

A.6. Ефективне матрично-векторне множення

Розглянемо $m \times m$ матриці A і B та $m^2 \times 1$ вектор-стовпчик $|u\rangle$.

Є необхідність швидко розрахувати добуток $(A \otimes B)|u\rangle$ (*). Його прямий розрахунок вимагатиме $O(m^4)$ елементарних операцій і для розрахунку добутку Кронекера, і для його множення на вектор.

Замість цього вишикуємо вектор $|u\rangle$ в матрицю U так, що $u_{(kl)} = U_{kl}$. (ij) -ий елемент (*) рівний

$$\begin{aligned} ((A \otimes B)|u\rangle)_{(ij)} &= \sum_{k,l=1}^m (A \otimes B)_{(ij),(kl)} u_{(kl)} = \sum_{k,l=1}^m A_{ik} B_{jl} U_{kl} = \\ &= \sum_{k,l=1}^m A_{ik} U_{kl} B_{lj}^T = (AUB^T)_{ij}. \end{aligned} \quad (141)$$

Можна вишикувати $m \times m$ матрицю BUA^T у вектор-стовпчик. Тоді, очевидно,

$$(\text{Vec}(AUB^T))_{(ij)} = ((A \otimes B)|u\rangle)_{(ij)},$$

отже

$$(A \otimes B)|u\rangle = \text{Vec}(AUB^T). \quad (142)$$

Аналогічно, добуток

$$\langle v|(A \otimes B) = \text{Vec}(A^T V B), \quad (143)$$

де $v_{(kl)} = V_{kl}$.

Ця дія вимагає множення тільки матриць $m \times m$, тому вона виконується за $O(m^3)$ операцій.

A.7. РзСЧ з використанням меншої кількості операцій

Розглянемо матрицю M великого розміру $l \times l$, в якої швидко спадають сингулярні числа. Її потрібно замінити на її РзСЧ відносно p найбільших сингулярних чисел. Цей РзСЧ рівний

$$M \approx USV, \quad (144)$$

154

де d є діагональною матрицею розміру $p \times p$. Очевидно, розмірності матриць U і V дорівнюють відповідно $l \times p$ та $p \times l$. Рівняння можна записати також як

$$M \approx \sum_{k=1}^p s_k |u_k\rangle\langle v_k|,$$

де $|u_k\rangle$ є стовпчиками U , а $|v_k\rangle$ - рядками V .

Щоб отримати U , S і V за меншу кількість операцій, утворимо випадкову $p \times l$ матрицю x і потім утворимо

$$y = xM = xUSV. \quad (145)$$

Для ілюстрації перші три матриці можна об'єднати в одну $p \times p$ матрицю $A = xUS$. Тоді

$$y = AV \quad (146)$$

або в розгорнутому вигляді

$$y = \sum_{i,k=1}^p \sum_{j=1}^{m^2} A_{ik} V_{kj} |i\rangle\langle j|.$$

i -ий рядок y можна розрахувати як

$$\langle y_i | = \langle i | y = \sum_{i',k=1}^p \sum_{j=1}^{m^2} A_{i'k} V_{kj} \langle i | i' \rangle \langle j | = \sum_{k=1}^p \sum_{j=1}^{m^2} A_{ik} V_{kj} \langle j |.$$

Аналогічно k -ий рядок V рівний $\langle V_k | = \sum_{j=1}^{m^2} V_{kj} \langle j |$, отже,

$$\langle y_i | = \sum_{k=1}^p A_{ik} \langle V_k |. \quad (147)$$

Таким чином, кожен рядок y є лінійною комбінацією рядків V . Можна ортогоналізувати y до ортогональної за рядками матриці y' такої, що

$$y' y'^{\dagger} = \mathbb{1}^{p \times p} \quad (148)$$

Можна уявити y' також як застосування іншого перетворення до V :

$$y' = A'V. \quad (149)$$

Якщо матриця M має ранг, рівний p , можна зробити зворотне перетворення:

$$V = By' \quad (150)$$

(якщо ранг не точно дорівнює p , таке рівняння можна записати тільки наближено). Тоді можна помітити, що

$$Vy'^\dagger y' = B \underbrace{y'y'^\dagger}_{\mathbf{1}} y' = By' = V. \quad (151)$$

Отже, можна записати

$$M = USV = (USV)y'^\dagger y' = zy', \quad (152)$$

де $z = My'^\dagger$ - матриця розміру $l \times p$.

Матрицю z можна точно розкласти за сингулярними числами:

$$z = USV'. \quad (153)$$

Порівнюючи (144), (152) та (153), можна отримати

$$V = V'y'. \quad (154)$$

V' є ортогональною (як результат РзСЧ), а y' - ортогональна за рядками (доведено раніше). Отже, V ортогональна за рядками, як і повинно бути при РзСЧ.

Як висновок можна сформулювати модифікований алгоритм РзСЧ для матриці розміру $l \times l$ з p «важливими» сингулярними числами:

1. Утворити випадкову матрицю x розміру $p \times l$.
2. Обчислити матрицю $y = xM$ розміру $p \times l$.

3. Ортогоналізувати y до y' .
4. Утворити матрицю $z = My'^\dagger$ розміру $l \times p$.
5. Розкласти за сингулярними числами матрицю z : $z = USV'$.
6. Утворити $V = V'y'$.

Розрахунок матриць $y = xM$ і $z = My'^\dagger$ варто проводити без прямого розрахунку добутків $M N/3$ трансферних матриць (на що потрібно $O(m^5)$ операцій). Можна помітити, що матрицю x можна розглядати як множину p (або p') бра-векторів (таких самих, як v -вектори з Розділу 2.1.3). В рамках МДС вектори мають довжину $l = m^2$ або $l = m_W m^2$. Таким чином, xM можна розраховувати послідовним корегуванням (множенням на трансферні матриці) цієї множини векторів вправо, як описано в Розділі 2.1.3. Аналогічно My'^\dagger можна розрахувати послідовним корегуванням вліво (так як y'^\dagger можна розглядати як множину кет-векторів типу u -векторів). Як наслідок, процедура потребує $O(pm^3) \propto O(m^4)$ операцій.

Утворення $V = V'y'$ потребує тільки $O(p^2 m^2)$ або $O(p'^2 m^2)$ операцій, в той час як РзСЧ матриць розміру $p \times m^2$ чи $p' \times m_W m^2$ + ортогоналізація потребує тільки $O(pm^2)$ or $O(p'm^2)$ [72]. Таким чином, загальна кількість операцій ефективного РзСЧ справді має порядок $O(m^4)$.

A.8. Ефективне матрично-векторне множення для задачі на власні значення

Необхідно оцінити кількість операцій, потрібних для розрахунку

$$\left\{ \sum_{k,l=1}^{p(p')} s_k^R s_l^L \langle v_k^R | u_l^L \rangle (W \otimes U_k^R \otimes V_l^L) \right\} (\bigoplus_{j=1}^n \vec{\nu}_j),$$

де U_k^R та V_l^L мають розмір $m \times m$, W має розмір $n \times n$, n не залежить від m, p, p' ; ν_j є матрицею МДС M^j , перебудованою у вектор.

Цей добуток також можна записати як

$$\bigoplus_{j=1}^n \left(\sum_{k,l=1}^{p(p')} \alpha_{kl} \text{Vec}(U_k^R (\sum_{j'} W_{jj'} (M^{j'})^T) (V_l^L)^T) \right).$$

Найбільш ефективна процедура виглядає так:

- 1) Розраховуються всі $p^2(p'^2)$ коефіцієнтів $\alpha_{kl} = s_k^R s_l^L \langle v_k^R | u_l^L \rangle$. Так як одне вектор-векторне множення потребує $O(m^2)$ операцій, вся множина коефіцієнтів потребує $O(p^2m^2)$ або $O(p'^2m^2)$.
- 2) Розраховуються всі $m \times m$ матриць $B_j = \sum_{j'} W_{jj'} (M^{j'})^T$. Одна така матриця потребує $O(nm^2) \propto O(m^2)$ операцій, отже, вся множина з n матриць потребує $O(m^2)$.

Добуток відповідно перепишеться як

$$\bigoplus_{j=1}^n \text{Vec} \left(\sum_{k,l=1}^{p(p')} \alpha_{kl} U_k^R B_j (V_l^L)^T \right).$$

- 3) Розраховуються матриці $C_{jl} = B_j (V_l^L)^T$. Таких матриць $n \cdot p$ (або $n \cdot p'$), тому вся множина потребує $O(dpm^3) \propto O(pm^3)$ операцій (або $O(p'm^3)$).
- 4) Розраховуються матриці $D_l = \sum_{k=1}^{p(p')} \alpha_{kl} U_k^R$. Так як додавання матриць потребує тільки $O(m^2)$ операцій, кожна конкретна D_l потребує $O(pm^2)$ ($O(p'm^2)$). Отже, вся множина потребує $O(p^2m^2)$ ($O(p'^2m^2)$).
- 5) Добуток можна переписати як

$$\bigoplus_{j=1}^n \text{Vec} \left(\sum_{l=1}^{p(p')} D_l C_{jl} \right).$$

Ресурс такої згортки дорівнює $O(npm^3) \propto O(pm^3)$ (або $O(p'm^3)$) операцій.

Як висновок, ресурс, необхідний для матрично-векторного множення для задачі на власні значення, дорівнює $O(p'm^3) + O(p'^2m^2)$ або $O(pm^3) + O(p^2m^2)$, тобто $O(m^4)$ операцій.

A.9. Міри заплутаності

Найвідомішою мірою заплутаності є *одночастинкова ентропія заплутаності*, що є ентропією фон Нойманна одночастинкової зведеної матриці гу-

стини [145]:

$$S(\rho) = -\rho_1 \log_2 \rho_1 = -\sum_i \lambda_i \log_2 \lambda_i. \quad (155)$$

Замість цього в роботі використовується one-tangle (OT) [146], що також розраховується з одночастинкової зведененої матриці густини:

$$\tau_1(\rho_1) = 4 \det \rho_1. \quad (156)$$

В роботі також розраховуються міри заплутаності з двочастинкової зведененої матриці густини ρ_{12} . Простою мірою двочастинкової заплутаності змішаного стану є *заплутаність формування* E_F [147]. Вона рахує мінімальну кількість максимально заплутаних станів (станів Белла), необхідних для утворення даного стану з використанням лише локальних операцій та класичного зв'язку (ЛОКЗ) (для деталей див. [147, 145]). Заплутаність формування можна розрахувати з узгодження формування C_F [148, 136]:

$$E_F = h \left(\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{1 - C_F^2}}{2} \right), \quad (157)$$

де $h(x)$ позначає бінарну ентропійну функцію.

Інший тип узгодження - узгодження асистування C_A - був представлений у сполученні з *заплутаністю асистування* E_A [149]. Заплутаність асистування вимірює максимальну двочастинкову заплутаність, яка може бути отримана при проведенні вимірювань над рештою спінів. Ідея заплутаності асистування походить з аналізу систем з трьох частин, що описуються станами $|\psi^{123}\rangle$. Варіюючи вимірювання над частиною 3, «помічник» 3 здатний впливати на змішаний стан частин 1 та 2 [150].

Узгодження формування [136] та узгодження асистування [151] розраховуються як

$$C_F(\rho_{12}) = \max(0, \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4), \quad (158)$$

$$C_A(\rho_{12}) = \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 + \lambda_4, \quad (159)$$

де $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4$ є квадратними коренями власних значень (у порядку спадання) неермітової матриці $\rho_{12}\tilde{\rho}_{12}$, де $\tilde{\rho}_{12} = (\sigma^y \otimes \sigma^y)\rho_{12}^*(\sigma^y \otimes \sigma^y)$, а ρ_{12}^* - ком-

плексно спряжена до ρ_{12} (σ^y є матрицею Паулі для спіну $1/2$). Узгодження формування вимірює двочастинкову заплутаність *найближчих сусідів*.

Негативність N тісно пов'язана з узгодженням формування. Вона, однак, може бути розрахована також для систем частинок зі спіном 1. Вона отримується з двочастинкової зведененої матриці густини ρ_{12} [152],

$$N(\rho_{12}) = \frac{1}{2}(\|\rho_{12}^{T_1}\| - 1),$$

де T_1 позначає часткове транспонування ρ_{12} відносно першого кубіта (кутрита), а $\|\cdot\|$ - слідову норму.

Двочастинкова заплутаність на один зв'язок S_{PB} [153] отримується безпосередньо з МДС-представлення хвильової функції (в його канонічній формі!), що робить цю міру такою привабливою. Вона дуже корисна в 2D та 3D, так як не вимагає розрахунків очікуваних значень, для чого потрібно $O(e^N)$ операцій. S_{PB} визначається в термінах компонент зв'язкових векторів λ_i , які при нормуванні задовільняють умову $\sum_i \lambda_i^2 = 1$. Тоді S_{PB} визначається як ентропія фон Нойманна [145]

$$S_{\text{PB}} = - \sum_i \lambda_i^2 \log_2 \lambda_i^2. \quad (160)$$

На практиці виявляється, що зв'язкові вектори, приєднані до конкретного спіну i , є приблизно рівними, що є наслідком трансляційної симетрії використованої тензорної мережі. Як наслідок, зв'язкові вектори, приєднані до конкретного спіну i , усереднюються при розрахунку S_{PB} .

Варто зазначити, що двочастинкова заплутаність на один зв'язок не є експериментально вимірюваною величиною. До того ж, максимально можливе значення S_{PB} (що вимірює максимально можливу заплутаність даного стану) залежить від обраного розміру МДС t . Це означає, що обране представлення МДС може не бути здатним точно описати стани в околі критичних точок, де заплутаність може бути дуже великою (наприклад, точки фазових переходів). Однак ця величина все одно може бути використана для напівкількісного визначення точок фазових переходів (навіть для фазових переходів

некінченного порядку).

Використовуючи розраховані міри заплутаності, можна розрахувати цікаву характеристику - моногамність заплутаності, тобто розподіл заплутаності між різними частинами системи [154]. Спрощено моногамність заплутаності можна зрозуміти так: якщо дві частини є максимально заплутаними, вони не можуть бути заплутаними з третьою частиною. Вирази для розподілу заплутаності в формі співвідношень моногамності для багатокубітових систем з використанням узгодження формування C_F та асистування C_A були отримані в статтях [155, 156].

Вирази для моногамності заплутаності N -кубітових систем були отримані з нерівності Коффман-Кунду-Вуттерса (ККВ) [146]:

$$[C_F]_{A|B_1B_2\dots B_{N-1}}^2 \geq [C_F]_{AB_1}^2 + [C_F]_{AB_2}^2 + \dots + [C_F]_{AB_{N-1}}^2, \quad (161)$$

де $[C_F]_{AB_i} = [C_F](\rho_{AB_i})$ - узгодження зведеногої матриці густини ρ_{AB_i} , а $[C_F]_{A|B_1B_2\dots B_{N-1}} = C(|\psi\rangle_{A|B_1B_2\dots B_{N-1}})$ - узгодження чистого стану $|\psi\rangle$, визначене в статті [157]. Для чистих N -кубітових станів $C_{A|B_1B_2\dots B_{N-1}}^2$ може бути отримане з одночастинкової зведеногої матриці густини і (згідно з розрахунками Б. Брайорр-Орпса) дорівнює ОТ: $[C_F]_{A|B_1B_2\dots B_{N-1}}^2 = 4 \det \rho_A = \tau_1$ [157].

Додаток Б: Список публікацій за темою дисертації та відомості про апробацію результатів дисертації

Б.1. Список публікацій 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., Braiorr-Orrs B. // Phys. Rev. B. - 2016. - Vol. 93, Iss. 5. - P. 054417.
3. *Braiorr-Orrs B.* Phase diagrams of one-, two-, and three-dimensional quantum spin systems derived from entanglement properties / Braiorr-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. // J. Phys. Commun. - 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. *Braiorr-Orrs B.* Numerical studies of entanglement properties of quantum Ising and XXZ spin-1/2 models in one and two dimensions / Braiorr-Orrs B., Weyrauch M., Rakov M. V. // International Conference "Numerical and

analytical methods for strongly correlated systems proceedings. - Benasque, 2014, Spain. - p. 1.

7. *Braiorr-Orrs B.* Numerical studies of the entanglement properties in infinite 1D and 2D quantum Ising and XXZ spin-1/2 models / Braiorr-Orrs B., Weyrauch M., Rakov M. V. // 79th Annual Meeting of DFG, "Condensed Matter"section, proceedings. - Berlin, 2015, Germany. - 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. // 42nd MECO conference, proceedings. - Lyon, 2017, France. - p. 152.

Б.2. Апробація результатів дисертації

1. 38th MECO conference (Тріест, Італія, 25-27 березня 2017 р.) - стендова доповідь.
2. International Conference "Numerical and analytical methods for strongly correlated systems" (Бенаске, Іспанія, 24 серпня - 13 вересня 2014 р.) - стендова доповідь.
3. 79th Annual Meeting of DFG, "Condensed Matter"section (Берлін, Німеччина, 15-20 березня 2015 р.) - усна доповідь.
4. 42nd MECO conference (Ліон, Франція, 8-10 лютого 2017 р.) - стендова доповідь.
5. Науковий семінар відділу синергетики Інституту теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова НАН України (Київ, 28 вересня 2017 р.) - усна доповідь.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

- [1] *Mikeska, H.-J.* One-dimensional magnetism / H.-J. Mikeska, A. K. Kolezhuk // Quantum Magnetism / Ed. by U. Schollwöck, J. Richter, D. J. J. Farnell, R. F. Bishop. — Springer Berlin Heidelberg, 2004. — Vol. 645 of *Lecture Notes in Physics*. — P. 1–83.
- [2] *Brenig, W.* Aspects of electron correlations in the cuprate superconductors / W. Brenig // *Phys. Rep.* — 1995. — Vol. 251. — P. 153.
- [3] *Sandvik, A. W.* Computational Studies of Quantum Spin Systems / A. W. Sandvik // *AIP Conference Proceedings*. — 2010. — Vol. 1297. — P. 135.
- [4] *Chen, X.* Local unitary transformation, long-range quantum entanglement, wave function renormalization, and topological order / X. Chen, Z.-C. Gu, X.-G. Wen // *Phys. Rev. B*. — 2010. — Vol. 82, Iss. 15. — P. 155138.
- [5] *Anderson, P. W.* Superconductivity in high T_c cuprates: the cause is no longer a mystery / P. W. Anderson // Condensation and Coherence in Condensed Matter / Ed. by T. Claeson, P. Delsing. — Göteborg, 2001. — Proc. of the Nobel Jubilee Symposium. — P. 10–12.
- [6] *Auerbach, A.* Interacting Electrons and Quantum magnetism / A. Auerbach. — Springer, New York, 1994.
- [7] *Diep, H. T.* Frustration - exactly solved frustrated models / H. T. Diep, H. Giacomini // Frustrated spin systems / Ed. by H. T. Diep. — World Scientific, Singapore, 2004. — P. 1–58.

- [8] *Misguich, G.* Two-dimensional quantum anti-ferromagnets / G. Misguich, C. Lhuillier // Frustrated spin systems / Ed. by H. T. Diep. — World Scientific, Singapore, 2004. — P. 235–322.
- [9] *Alet, F.* Exotic quantum phases and phase transitions in correlated matter / F. Alet, A. M. Walczak, M. P.A. Fisher // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. — 2006. — Vol. 369. — P. 122.
- [10] *Kitaev, A.* Anyons in an exactly solved model and beyond / A. Kitaev // *Ann. Phys.* — 2006. — Vol. 321. — P. 2.
- [11] *Laughlin, R. B.* Anomalous Quantum Hall Effect: An Incompressible Quantum Fluid with Fractionally Charged Excitations / R. B. Laughlin // *Phys. Rev. Lett.* — 1983. — Vol. 50, Iss. 18. — P. 1395–1398.
- [12] *Wen, X. G.* Ground-state degeneracy of the fractional quantum Hall states in the presence of a random potential and on high-genus Riemann surfaces / X. G. Wen, Q. Niu // *Phys. Rev. B*. — 1990. — Vol. 41, Iss. 13. — P. 9377–9396.
- [13] *Haldane, F. D. M.* Periodic Laughlin-Jastrow wave functions for the fractional quantized Hall effect / F. D. M. Haldane, E. H. Rezayi // *Phys. Rev. B*. — 1985. — Vol. 31, Iss. 4. — P. 2529–2531.
- [14] *WEN, X. G.* TOPOLOGICAL ORDERS IN RIGID STATES / X. G. WEN // *International Journal of Modern Physics B*. — 1990. — Vol. 04, No. 02. — P. 239–271.
- [15] *Lewenstein, M.* Ultracold atoms in optical lattices / M. Lewenstein, A. Sanpera, V. Ahufinger. — Oxford University Press, Oxford, 2012.
- [16] *Leggett, A. J.* Quantum liquids / A. J. Leggett. — Oxford University Press, New York, 2006.

- [17] *Esslinger, T.* Fermi-Hubbard Physics with Atoms in an Optical Lattice / T. Esslinger // *Annu. Rev. Cond. Matter Phys.* — 2010. — Vol. 1, No. 1. — P. 129–152.
- [18] *Dalfovo, F.* Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases / F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, S. Stringari // *Rev. Mod. Phys.* — 1999. — Vol. 71, Iss. 3. — P. 463.
- [19] *Zwierlein, M. W.* Condensation of Pairs of Fermionic Atoms near a Feshbach Resonance / M. W. Zwierlein, C. A. Stan, C. H. Schunck *et al.* // *Phys. Rev. Lett.* — 2004. — Vol. 92, Iss. 12. — P. 120403.
- [20] *Jaksch, D.* Cold Bosonic Atoms in Optical Lattices / D. Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac *et al.* // *Phys. Rev. Lett.* — 1998. — Vol. 81, Iss. 15. — P. 3108–3111.
- [21] *Büchler, H. P.* Atomic Quantum Simulator for Lattice Gauge Theories and Ring Exchange Models / H. P. Büchler, M. Hermele, S. D. Huber *et al.* // *Phys. Rev. Lett.* — 2005. — Vol. 95, Iss. 4. — P. 040402.
- [22] *Greiner, M.* Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms / M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger *et al.* // *Nature*. — 2002. — Vol. 415. — P. 39–44.
- [23] *Essler, F. H. L.* The One-Dimensional Hubbard Model / F. H. L. Essler, H. Frahm, F. Gohmann *et al.* — Cambridge University Press, Cambridge, 2005.
- [24] *Duan, L.-M.* Controlling Spin Exchange Interactions of Ultracold Atoms in Optical Lattices / L.-M. Duan, E. Demler, M. D. Lukin // *Phys. Rev. Lett.* — 2003. — Vol. 91, Iss. 9. — P. 090402.
- [25] *Micheli, A.* A toolbox for lattice-spin models with polar molecules /

- A. Micheli, G. K. Brennen, P. Zoller // *Nature Physics*. — 2006. — Vol. 2. — P. 341–347.
- [26] *Bloch, I.* Many-body physics with ultracold gases / I. Bloch, J. Dalibard, W. Zwerger // *Rev. Mod. Phys.* — 2008. — Vol. 80, Iss. 3. — P. 885–964.
- [27] *Dorner, U.* Entangling Strings of Neutral Atoms in 1D Atomic Pipeline Structures / U. Dorner, P. Fedichev, D. Jaksch *et al.* // *Phys. Rev. Lett.* — 2003. — Vol. 91, Iss. 7. — P. 073601.
- [28] *Santos, L.* Atomic Quantum Gases in Kagomé Lattices / L. Santos, M. A. Baranov, J. I. Cirac *et al.* // *Phys. Rev. Lett.* — 2004. — Vol. 93, Iss. 3. — P. 030601.
- [29] *García-Ripoll, J. J.* Implementation of Spin Hamiltonians in Optical Lattices / J. J. García-Ripoll, M. A. Martin-Delgado, J. I. Cirac // *Phys. Rev. Lett.* — 2004. — Vol. 93, Iss. 25. — P. 250405.
- [30] *Sachdev, S.* Quantum Phase Transitions. 2nd Edition / S. Sachdev. — Cambridge: Cambridge University Press, 2011.
- [31] *Amico, L.* Entanglement in many-body systems / L. Amico, R. Fazio, A. Osterloh, V. Vedral // *Rev. Mod. Phys.* — 2008. — Vol. 80, Iss. 2. — P. 517–576.
- [32] *Wen, X.-G.* Quantum Field Theory of Many-Body Systems / X.-G. Wen. — New York, USA: Oxford University Press, 2004.
- [33] *Senthil, T.* Quantum criticality beyond the Landau-Ginzburg-Wilson paradigm / T. Senthil, L. Balents, S. Sachdev *et al.* // *Phys. Rev. B*. — 2004. — Vol. 70, Iss. 14. — P. 144407.
- [34] *Hastings, M. B.* Quasiadiabatic continuation of quantum states: The stability of topological ground-state degeneracy and emergent gauge invari-

- ance / M. B. Hastings, X.-G. Wen // *Phys. Rev. B*. — 2005. — Vol. 72, Iss. 4. — P. 045141.
- [35] *Osborne, T. J.* Entanglement in a simple quantum phase transition / T. J. Osborne, M. A. Nielsen // *Phys. Rev. A*. — 2002. — Vol. 66, Iss. 3. — P. 032110.
- [36] *Osterloh, A.* Scaling of entanglement close to a quantum phase transition. / A. Osterloh, L. Amico, G. Falci, R. Fazio // *Nature*. — 2002. — Vol. 416, No. 6881. — P. 608–10.
- [37] *Pollmann, F.* Entanglement spectrum of a topological phase in one dimension / F. Pollmann, A. M. Turner, E. Berg, M. Oshikawa // *Phys. Rev. B*. — 2010. — Vol. 81, Iss. 6. — P. 064439.
- [38] *De Chiara, G.* Bilinear-biquadratic spin-1 chain undergoing quadratic Zeeman effect / G. De Chiara, M. Lewenstein, A. Sanpera // *Phys. Rev. B*. — 2011. — Vol. 84, Iss. 5. — P. 054451.
- [39] *Rodríguez, K.* Field-Induced Phase Transitions of Repulsive Spin-1 Bosons in Optical Lattices / K. Rodríguez, A. Argüelles, A. K. Kolezhuk *et al.* // *Phys. Rev. Lett.*. — 2011. — Vol. 106, Iss. 10. — P. 105302.
- [40] *White, S. R.* Density matrix formulation for quantum renormalization groups / S. R. White // *Phys. Rev. Lett.*. — 1992. — Vol. 69, Iss. 19. — P. 2863.
- [41] *White, S. R.* Numerical renormalization-group study of low-lying eigenstates of the antiferromagnetic S=1 Heisenberg chain / S. R. White, D. A. Huse // *Phys. Rev. B*. — 1993. — Vol. 48, No. 6. — P. 3844.
- [42] *White, S. R.* Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups / S. R. White // *Phys. Rev. B*. — 1993. — Vol. 48, No. 14. — P. 10345.

- [43] *Sørensen, E. S.* Large-scale numerical evidence for Bose condensation in the $S = 1$ antiferromagnetic chain in a strong field / E. S. Sørensen, I. Affleck // *Phys. Rev. Lett.* — 1993. — Vol. 71, Iss. 10. — P. 1633–1636.
- [44] *Senthil, T.* Spin quantum Hall effect in unconventional superconductors / T. Senthil, J. B. Marston, M. P. A. Fisher // *Phys. Rev. B.* — 1999. — Vol. 60, Iss. 6. — P. 4245–4254.
- [45] *Jeckelmann, E.* Dynamical density-matrix renormalization-group method / E. Jeckelmann // *Phys. Rev. B.* — 2002. — Vol. 66, Iss. 4. — P. 045114.
- [46] *Verstraete, F.* Continuous Matrix Product States for Quantum Fields / F. Verstraete, J. I. Cirac // *Phys. Rev. Lett.* — 2010. — Vol. 104, Iss. 19. — P. 190405.
- [47] *Xiang, T.* Two-dimensional algorithm of the density-matrix renormalization group / T. Xiang, J. Lou, Z. Su // *Phys. Rev. B.* — 2001. — Vol. 64, Iss. 10. — P. 104414.
- [48] *Verstraete, F.* Renormalization algorithms for Quantum-Many Body Systems in two and higher dimensions / F. Verstraete, J. I. Cirac // *Preprint.* — 2004. — Vol. cond-mat/0407066.
- [49] *Fannes, M.* Finitely correlated states on quantum spin chains / M. Fannes, B. Nachtergaele, R. F. Werner // *Comm. Math. Phys.* — 1992. — Vol. 144, No. 3. — P. 443.
- [50] *Affleck, I.* Rigorous results on valence-bond ground states in antiferromagnets / I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb, H. Tasaki // *Phys. Rev. Lett.* — 1987. — Vol. 59, Iss. 7. — P. 799.
- [51] *Östlund, S.* Thermodynamic Limit of Density Matrix Renormalization /

S. Östlund, S. Rommer // *Phys. Rev. Lett.* — 1995. — Vol. 75, Iss. 19. — P. 3537.

- [52] *Rommer, S.* Class of ansatz wave functions for one-dimensional spin systems and their relation to the density matrix renormalization group / S. Rommer, S. Östlund // *Phys. Rev. B*. — 1997. — Vol. 55, Iss. 4. — P. 2164.
- [53] *Dukelsky, J.* Equivalence of the variational matrix product method and the density matrix renormalization group applied to spin chains / J. Dukelsky, M. A. Martín-Delgado, T. Nishino, G. Sierra // *Europhys. Lett.* — 1998. — Vol. 43, No. 4. — P. 457.
- [54] *Cirac, J. I.* Renormalization and tensor product states in spin chains and lattices / J. I. Cirac, F. Verstraete // *J. Phys. A: Math. Theor.* — 2009. — Vol. 42, No. 50. — P. 504004.
- [55] *Orús, R.* A practical introduction to tensor networks: Matrix product states and projected entangled pair states / R. Orús // *Ann. Phys.* — 2014. — Vol. 349. — P. 117 – 158.
- [56] *Verstraete, F.* Matrix product states, projected entangled pair states, and variational renormalization group methods for quantum spin systems / F. Verstraete, V. Murg, J.I. Cirac // *Adv. Phys.* — 2008. — Vol. 57, No. 2. — P. 143–224.
- [57] *Vidal, G.* Class of Quantum Many-Body States That Can Be Efficiently Simulated / G. Vidal // *Phys. Rev. Lett.* — 2008. — Vol. 101, Iss. 11. — P. 110501.
- [58] *Murg, V.* Simulating strongly correlated quantum systems with tree tensor networks / V. Murg, F. Verstraete, Ö. Legeza, R. M. Noack // *Phys. Rev. B*. — 2010. — Vol. 82, Iss. 20. — P. 205105.

- [59] *Eisert, J. Colloquium*: Area laws for the entanglement entropy / J. Eisert, M. Cramer, M. B. Plenio // *Rev. Mod. Phys.* — 2010. — Vol. 82, Iss. 1. — P. 277.
- [60] *Legeza, Ö.* Quantum data compression, quantum information generation, and the density-matrix renormalization-group method / Ö. Legeza, J. Sólyom // *Phys. Rev. B*. — 2004. — Vol. 70, Iss. 20. — P. 205118.
- [61] *Vidal, G.* Entanglement in Quantum Critical Phenomena / G. Vidal, J. I. Latorre, E. Rico, A. Kitaev // *Phys. Rev. Lett.* — 2003. — Vol. 90, Iss. 22. — P. 227902.
- [62] *Calabrese, P.* Entanglement entropy and quantum field theory / P. Calabrese, J. Cardy // *J. Stat. Mech.* — 2004. — P. P06002.
- [63] *Plenio, M. B.* Entropy, Entanglement, and Area: Analytical Results for Harmonic Lattice Systems / M. B. Plenio, J. Eisert, J. Dreißig, M. Cramer // *Phys. Rev. Lett.* — 2005. — Vol. 94, Iss. 6. — P. 060503.
- [64] *Wolf, M. M.* Violation of the Entropic Area Law for Fermions / M. M. Wolf // *Phys. Rev. Lett.* — 2006. — Vol. 96, Iss. 1. — P. 010404.
- [65] *Kallin, A. B.* Anomalies in the entanglement properties of the square-lattice Heisenberg model / A. B. Kallin, M. B. Hastings, R. G. Melko, R. R. P. Singh // *Phys. Rev. B*. — 2011. — Vol. 84, Iss. 16. — P. 165134.
- [66] *Schollwöck, U.* The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states / U. Schollwöck // *Ann. Phys.* — 2011. — Vol. 326, No. 1. — P. 96.
- [67] *Trotter, H. F.* On the product of semi-groups of operators / H. F. Trotter // *Proc. Amer. Math. Soc.* — 1959. — Vol. 10. — P. 545–551.

- [68] *Pirvu, B.* Matrix product operator representations / B. Pirvu, V. Murg, J. I. Cirac, F. Verstraete // *New J. Phys.* — 2010. — Vol. 12, No. 2. — P. 025012.
- [69] *Vidal, G.* Efficient Simulation of One-Dimensional Quantum Many-Body Systems / G. Vidal // *Phys. Rev. Lett.* — 2004. — Vol. 93, Iss. 4. — P. 040502.
- [70] *Vidal, G.* Classical Simulation of Infinite-Size Quantum Lattice Systems in One Spatial Dimension / G. Vidal // *Phys. Rev. Lett.* — 2007. — Vol. 98, Iss. 7. — P. 070201.
- [71] *Verstraete, F.* Density Matrix Renormalization Group and Periodic Boundary Conditions: A Quantum Information Perspective / F. Verstraete, D. Porras, J. I. Cirac // *Phys. Rev. Lett.* — 2004. — Vol. 93, No. 22. — P. 227205.
- [72] *Pippin, P.* Efficient matrix-product state method for periodic boundary conditions / P. Pippin, S. R. White, H. G. Evertz // *Phys. Rev. B.* — 2010. — Vol. 81, No. 8. — P. 081103R.
- [73] *Rossini, D.* Large system asymptotics of persistent currents in mesoscopic quantum rings / D. Rossini, V. Giovanetti, R. Fazio // *J. Stat. Mech.* — 2011. — P. P05021.
- [74] *Porras, D.* Renormalization algorithm for the calculation of spectra of interacting quantum systems / D. Porras, F. Verstraete, J. I. Cirac // *Phys. Rev. B.* — 2006. — Vol. 73, No. 1. — P. 014410.
- [75] *Mermin, N. D.* Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models / N. D. Mermin, H. Wagner // *Phys. Rev. Lett.* — 1966. — Vol. 17, Iss. 22. — P. 1133.

- [76] *Coleman, S.* There are no Goldstone bosons in two dimensions / S. Coleman // *Comm. Math. Phys.* — 1973. — Vol. 31, No. 4. — P. 259.
- [77] *McCulloch, I. P.* From density-matrix renormalization group to matrix product states / I. P. McCulloch // *J. Stat. Mech.* — 2007. — P. P10014.
- [78] *Singh, S.* Tensor network decompositions in the presence of a global symmetry / S. Singh, R. N. C. Pfeifer, G. Vidal // *Phys. Rev. A*. — 2010. — Vol. 82, Iss. 5. — P. 050301.
- [79] *Singh, S.* Simulation of one-dimensional quantum systems with a global $SU(2)$ symmetry / S. Singh, H.-Q. Zhou, G. Vidal // *New J. Phys.* — 2010. — Vol. 12, No. 3. — P. 033029.
- [80] *Singh, S.* Tensor network states and algorithms in the presence of a global $U(1)$ symmetry / S. Singh, R. N. C. Pfeifer, G. Vidal // *Phys. Rev. B*. — 2011. — Vol. 83, Iss. 11. — P. 115125.
- [81] *Singh, S.* Tensor network states and algorithms in the presence of a global $SU(2)$ symmetry / S. Singh, G. Vidal // *Phys. Rev. B*. — 2012. — Vol. 86, Iss. 19. — P. 195114.
- [82] *McCulloch, I. P.* Collective phenomena in strongly correlated electron systems: Ph. D. thesis / Australian National University. — 2001.
- [83] *McCulloch, I. P.* The non-Abelian density matrix renormalization group algorithm / I. P. McCulloch, M. Gulácsi // *Europhys. Lett.* — 2002. — Vol. 57. — P. 852.
- [84] *Zadourian, R.* Matrix product states for $SU(2)$ invariant quantum spin chains / R. Zadourian, A. Fledderjohann, A. Klümper // *J. Stat. Mech.* — 2016. — No. 8. — P. 083101.

- [85] *Weichselbaum, A.* Non-abelian symmetries in tensor networks: A quantum symmetry space approach / A. Weichselbaum // *Ann. Phys.* — 2012. — Vol. 327, No. 12. — P. 2972.
- [86] *Edmonds, A. R.* Angular momentum in quantum mechanics / A. R. Edmonds. — Princeton University Press, 1957.
- [87] *Levinson, Y. B.* Sums of Wigner coefficients and their graphical representation (in Russian) / Y. B. Levinson. — Tr. of Insitute of Physics and Technology, AS of Latvian SSR, 1957.
- [88] *Yang, C. N.* Ground-State Energy of a Heisenberg-Ising Lattice / C. N. Yang, C. P. Yang // *Phys. Rev.* — 1966. — Vol. 147, Iss. 1. — P. 303–306.
- [89] *Yang, C. N.* One-Dimensional Chain of Anisotropic Spin-Spin Interactions. I. Proof of Bethe's Hypothesis for Ground State in a Finite System / C. N. Yang, C. P. Yang // *Phys. Rev.* — 1966. — Vol. 150, Iss. 1. — P. 321–327.
- [90] *Yang, C. N.* One-Dimensional Chain of Anisotropic Spin-Spin Interactions. II. Properties of the Ground-State Energy Per Lattice Site for an Infinite System / C. N. Yang, C. P. Yang // *Phys. Rev.* — 1966. — Vol. 150, Iss. 1. — P. 327–339.
- [91] *Yang, C. N.* One-Dimensional Chain of Anisotropic Spin-Spin Interactions. III. Applications / C. N. Yang, C. P. Yang // *Phys. Rev.* — 1966. — Vol. 151, Iss. 1. — P. 258–264.
- [92] *De Pasquale, A.* XY model on the circle: Diagonalization, spectrum, and forerunners of the quantum phase transition / A. De Pasquale, P. Facchi // *Phys. Rev. A.* — 2009. — Vol. 80, Iss. 3. — P. 032102.

- [93] *Karbach, M.* Introduction to the Bethe Ansatz II / M. Karbach, K. Hu, G. Müller // *Comput. Phys.* — 1998. — Vol. 12, No. 6. — P. 565.
- [94] *Berezinskii, V. L.* Destruction of long-range order in one-dimensional and two-dimensional systems having a continuous symmetry group. II. Quantum systems / V. L. Berezinskii // *Sov. Phys. JETP*. — 1972. — Vol. 34, Iss. 3. — P. 610–616.
- [95] *Kosterlitz, J. M.* Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems / J. M. Kosterlitz, D. J. Thouless // *J. Phys. C: Solid State Phys.* — 1973. — Vol. 6, Iss. 7. — P. 1181–1203.
- [96] *Justino, L.* Bell inequalities and entanglement at quantum phase transitions in the XXZ model / L. Justino, T. R. de Oliveira // *Phys. Rev. A*. — 2012. — Vol. 85, Iss. 5. — P. 052128.
- [97] *Orzel, C.* Squeezed States in a Bose-Einstein Condensate / C. Orzel, A. K. Tuchman, M. L. Fenselau *et al.* // *Science*. — 2001. — Vol. 291, No. 5512. — P. 2386.
- [98] *Rizzi, M.* Phase Diagram of Spin-1 Bosons on One-Dimensional Lattices / M. Rizzi, D. Rossini, G. De Chiara *et al.* // *Phys. Rev. Lett.* — 2005. — Vol. 95, Iss. 24. — P. 240404.
- [99] *Rossini, D.* Anti-ferromagnetic spinor BECs in optical lattices / D. Rossini, M. Rizzi, G. De Chiara *et al.* // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* — 2006. — Vol. 39, No. 10. — P. S163.
- [100] *Millet, P.* Biquadratic Interactions and Spin-Peierls Transition in the Spin-1 Chain $LiVGe_2O_6$ / P. Millet, F. Mila, F. C. Zhang *et al.* // *Phys. Rev. Lett.* — 1999. — Vol. 83, Iss. 20. — P. 4176.
- [101] *Renard, J. P.* Presumption for a Quantum Energy Gap in the Quasi-One-Dimensional $S = 1$ Heisenberg Antiferromagnet $Ni(C_2H_8N_2)_2NO_2(ClO_4)$ /

- J. P. Renard, M. Verdaguer, L. P. Regnault *et al.* // *Europhys. Lett.* — 1987. — Vol. 3, No. 8. — P. 945.
- [102] *Pirvu, B.* Matrix product state based algorithm for determining dispersion relations of quantum spin chains with periodic boundary conditions / B. Pirvu, J. Haegeman, F. Verstraete // *Phys. Rev. B*. — 2012. — Vol. 85, Iss. 3. — P. 035130.
- [103] *Haegeman, J.* Post-matrix product state methods: To tangent space and beyond / J. Haegeman, T. J. Osborne, F. Verstraete // *Phys. Rev. B*. — 2013. — Vol. 88, Iss. 7. — P. 075133.
- [104] *Gerster, M.* Unconstrained tree tensor network: An adaptive gauge picture for enhanced performance / M. Gerster, P. Silvi, M. Rizzi *et al.* // *Phys. Rev. B*. — 2014. — Vol. 90, Iss. 12. — P. 125154.
- [105] *Batista, C. D.* Unveiling order behind complexity: Coexistence of ferromagnetism and Bose-Einstein condensation / C. D. Batista, G. Ortiz, J. E. Gubernatis // *Phys. Rev. B*. — 2002. — Vol. 65, Iss. 18. — P. 180402.
- [106] *Haldane, F. D. M.* Continuum dynamics of the 1-D Heisenberg antiferromagnet: Identification with the O(3) nonlinear sigma model / F. D. M. Haldane // *Phys. Lett. A*. — 1983. — Vol. 93, No. 9. — P. 464.
- [107] *Takhtajan, L. A.* The picture of low-lying excitations in the isotropic Heisenberg chain of arbitrary spins / L. A. Takhtajan // *Phys. Lett. A*. — 1982. — Vol. 87, No. 9. — P. 479.
- [108] *Babujian, H. M.* Exact solution of the one-dimensional isotropic Heisenberg chain with arbitrary spins S / H. M. Babujian // *Phys. Lett. A*. — 1982. — Vol. 90, No. 9. — P. 479.

- [109] *Nomura, K.* A New Phase of the S=1 Bilinear-Biquadratic Chain: a Trimerized State / K. Nomura, S. Takada // *J. Phys. Soc. Jpn.* — 1991. — Vol. 60, No. 2. — P. 389.
- [110] *Fáth, G.* Isotropic spin-1 chain with twisted boundary condition / G. Fáth, J. Sólyom // *Phys. Rev. B.* — 1993. — Vol. 47, Iss. 2. — P. 872.
- [111] *Barber, M. N.* Spectrum of the biquadratic spin-1 antiferromagnetic chain / M. N. Barber, M. T. Batchelor // *Phys. Rev. B.* — 1989. — Vol. 40, Iss. 7. — P. 4621.
- [112] *Sørensen, E. S.* Correlation length of the biquadratic spin-1 chain / E. S. Sørensen, A. P. Young // *Phys. Rev. B.* — 1990. — Vol. 42, Iss. 1. — P. 754.
- [113] *Kawashima, N.* Quantum Monte Carlo Methods / N. Kawashima // *Prog. Theor. Phys. Suppl.* — 2002. — Vol. 145. — P. 138.
- [114] *Läuchli, A.* Spin nematics correlations in bilinear-biquadratic $S = 1$ spin chains / A. Läuchli, G. Schmid, S. Trebst // *Phys. Rev. B.* — 2006. — Vol. 74, Iss. 14. — P. 144426.
- [115] *Chubukov, A. V.* Spontaneous dimerization in quantum-spin chains / A. V. Chubukov // *Phys. Rev. B.* — 1991. — Vol. 43, Iss. 4. — P. 3337.
- [116] *Fáth, G.* Search for the nondimerized quantum nematic phase in the spin-1 chain / G. Fáth, J. Sólyom // *Phys. Rev. B.* — 1995. — Vol. 51, Iss. 6. — P. 3620.
- [117] *Grover, T.* Quantum Spin Nematics, Dimerization, and Deconfined Criticality in Quasi-1D Spin-One Magnets / T. Grover, T. Senthil // *Phys. Rev. Lett.* — 2007. — Vol. 98, Iss. 24. — P. 247202.

- [118] *Buchta, K.* Probable absence of a quadrupolar spin-nematic phase in the bilinear-biquadratic spin-1 chain / K. Buchta, G. Fáth, Ö. Legeza, J. Sólyom // *Phys. Rev. B*. — 2005. — Vol. 72, Iss. 5. — P. 054433.
- [119] *Schmitt, A.* Static and dynamic structure factors in the Haldane phase of the bilinear-biquadratic spin-1 chain / A. Schmitt, K-H. Mütter, M. Karbach *et al.* // *Phys. Rev. B*. — 1998. — Vol. 58, Iss. 9. — P. 5498.
- [120] *Itoi, C.* Extended massless phase and the Haldane phase in a spin-1 isotropic antiferromagnetic chain / C. Itoi, M.-H. Kato // *Phys. Rev. B*. — 1997. — Vol. 55, Iss. 13. — P. 8295.
- [121] *Sutherland, B.* Model for a multicomponent quantum system / B. Sutherland // *Phys. Rev. B*. — 1975. — Vol. 12, Iss. 9. — P. 3795.
- [122] *Okamoto, K.* Fluid-dimer critical point in $S = 1/2$ antiferromagnetic Heisenberg chain with next nearest neighbor interactions / K. Okamoto, K. Nomura // *Phys. Lett. A*. — 1992. — Vol. 169. — P. 433.
- [123] *Weyrauch, M.* Efficient MPS algorithm for periodic boundary conditions and applications / M. Weyrauch, M. V. Rakov // *Ukr. J. Phys.* — 2013. — Vol. 58, No. 7. — P. 657.
- [124] *Rakov, M. V.* Symmetries and entanglement in the one-dimensional spin- $\frac{1}{2}$ XXZ model / M. V. Rakov, M. Weyrauch, B. Braiorr-Orrs // *Phys. Rev. B*. — 2016. — Vol. 93, Iss. 5. — P. 054417.
- [125] *Braiorr-Orrs, B.* Phase diagrams of one-, two-, and three-dimensional quantum spin systems derived from entanglement properties / B. Braiorr-Orrs, M. Weyrauch, M. V. Rakov // *Quant. Inf. Comput.* — 2016. — Vol. 16, Iss. 9–10. — P. 885.
- [126] *Rakov, M. V.* Bilinear-biquadratic spin-1 rings: an SU(2) symmet-

- ric MPS algorithm for periodic boundary conditions / M. V. Rakov, M. Weyrauch // *J. Phys. Commun.* — 2017. — Vol. 1. — P. 015007.
- [127] *Weyrauch, M.* Dimerization in ultracold spinor gases with Zeeman splitting / M. Weyrauch, M. V. Rakov // *Phys. Rev. B*. — 2017. — Vol. 96, Iss. 13. — P. 134404.
- [128] *Braiorr-Orrs, B.* Numerical studies of entanglement properties of quantum Ising and XXZ spin-1/2 models in one and two dimensions / B. Braiorr-Orrs, M. Weyrauch, M. V. Rakov // *Proc. of Int. Conference "Numerical and analytical methods for strongly correlated systems"*. — (Benasque, Spain), 2014. — P. 1.
- [129] *Braiorr-Orrs, B.* Numerical studies of the entanglement properties in infinite 1D and 2D quantum Ising and XXZ spin-1/2 models / B. Braiorr-Orrs, M. Weyrauch, M. V. Rakov // *Proc. of the 79th Annual Meeting of DFG, "Condensed Matter" section*. — (Berlin, Germany), 2015. — P. 482.
- [130] *Rakov, M. V.* Phase diagram of the spin-1 bilinear-biquadratic Heisenberg model with and without Zeeman effect / M. V. Rakov, M. Weyrauch // *Proc. of the 42nd MECO conference*. — (Lyon, France), 2017. — P. 152–153.
- [131] *Wall, M. L.* Out-of-equilibrium dynamics with matrix product states / M. L. Wall, L. D. Carr // *New J. Phys.* — 2012. — Vol. 14, No. 12. — P. 125015.
- [132] *Pirvu, B.* Exploiting translational invariance in matrix product state simulations of spin chains with periodic boundary conditions / B. Pirvu, F. Verstraete, G. Vidal // *Phys. Rev. B*. — 2011. — Vol. 83, Iss. 12. — P. 125104.

- [133] *White, S. R.* Density matrix renormalization group algorithms with a single center site / S. R. White // *Phys. Rev. B*. — 2005. — Vol. 72, No. 18. — P. 180403R.
- [134] *Syljuåsen, O. F.* Entanglement and spontaneous symmetry breaking in quantum spin models / O. F. Syljuåsen // *Phys. Rev. A*. — 2003. — Vol. 68, Iss. 6. — P. 060301.
- [135] *Gu, S.-J.* Entanglement, quantum phase transition, and scaling in the XXZ chain / S.-J. Gu, H.-Q. Lin, Y.-Q. Li // *Phys. Rev. A*. — 2003. — Vol. 68, Iss. 4. — P. 042330.
- [136] *Wootters, W. K.* Entanglement of Formation of an Arbitrary State of Two Qubits / W. K. Wootters // *Phys. Rev. Lett.* — 1998. — Vol. 80, Iss. 10. — P. 2245–2248.
- [137] *Haegeman, J.* Variational matrix product ansatz for dispersion relations / J. Haegeman, B. Pirvu, D. J. Weir *et al.* // *Phys. Rev. B*. — 2012. — Vol. 85, Iss. 10. — P. 100408.
- [138] *Girvin, S. M.* Hidden topological order in integer quantum spin chains / S. M. Girvin, D. P. Arovas // *Phys. Scr.* — 1989. — Vol. 1989, No. T27. — P. 156.
- [139] *Schollwöck, U.* Onset of incommensurability at the valence-bond-solid point in the $S=1$ quantum spin chain / U. Schollwöck, Th. Jolicoeur, T. Garel // *Phys. Rev. B*. — 1996. — Vol. 53, Iss. 6. — P. 3304.
- [140] *Xian, Y.* Exact results of dimerization order parameter in $SU(n)$ antiferromagnetic chains / Y. Xian // *Phys. Lett. A*. — 1993. — Vol. 183, No. 5-6. — P. 437.
- [141] *Baxter, R. J.* Spontaneous staggered polarization of the F-model / R. J. Baxter // *J. Stat. Phys.* — 1973. — Vol. 9, No. 2. — P. 145.

- [142] *Fáth, G.* Period tripling in the bilinear-biquadratic antiferromagnetic $S=1$ chain / G. Fáth, J. Sólyom // *Phys. Rev. B*. — 1991. — Vol. 44, Iss. 21. — P. 11836.
- [143] *Affleck, I.* Exact critical exponents for quantum spin chains, non-linear σ -models at $\theta = \pi$ and the quantum Hall effect / I. Affleck // *Nucl. Phys. B*. — 1986. — Vol. 265. — P. 409.
- [144] *Hu, S.* Berry-Phase-Induced Dimerization in One-Dimensional Quadrupolar Systems / S. Hu, A. M. Turner, K. Penc, F. Pollmann // *Phys. Rev. Lett.* — 2014. — Vol. 113, Iss. 2. — P. 027202.
- [145] *Nielsen, M. A.* Quantum Computation and Quantum Information / M. A. Nielsen, I. L. Chuang. — Cambridge: Cambridge University Press, 2000.
- [146] *Coffman, V.* Distributed entanglement / V. Coffman, J. Kundu, W. K. Wootters // *Phys. Rev. A*. — 2000. — Vol. 61, Iss. 5. — P. 052306.
- [147] *Bennett, C. H.* Mixed-state entanglement and quantum error correction / C. H. Bennett, D. P. DiVincenzo, J. A. Smolin, W. K. Wootters // *Phys. Rev. A*. — 1996. — Vol. 54, Iss. 5. — P. 3824–3851.
- [148] *Hill, S.* Entanglement of a Pair of Quantum Bits / S. Hill, W. K. Wootters // *Phys. Rev. Lett.* — 1997. — Vol. 78, Iss. 26. — P. 5022–5025.
- [149] *DiVincenzo, D. P.* Entanglement of assistance, in Quantum Computing and Quantum Communications, ed. C. P. Williams / D. P. DiVincenzo, C. A. Fuchs, H. Mabuchi *et al.* // *LNCS*. — 1999. — Vol. 1509. — P. 247–257.
- [150] *Smolin, J. A.* Entanglement of assistance and multipartite state distil-

- lation / J. A. Smolin, F. Verstraete, A. Winter // *Phys. Rev. A* — 2005. — Vol. 72, Iss. 5. — P. 052317.
- [151] *Laustsen, T.* Local vs. joint measurements for the entanglement of assistance / T. Laustsen, F. Verstraete, S. J. van Enk // *Quant. Inf. Comput.* — 2003. — Vol. 3. — P. 64.
- [152] *Vidal, G.* Computable measure of entanglement / G. Vidal, R. F. Werner // *Phys. Rev. A* — 2002. — Vol. 65, Iss. 3. — P. 032314.
- [153] *Huang, C.-Yu.* Multipartite entanglement measures and quantum criticality from matrix and tensor product states / C.-Yu Huang, F.-L. Lin // *Phys. Rev. A* — 2010. — Vol. 81, Iss. 3. — P. 032304.
- [154] *Amico, L.* Divergence of the entanglement range in low-dimensional quantum systems / L. Amico, F. Baroni, A. Fubini *et al.* // *Phys. Rev. A* — 2006. — Vol. 74, Iss. 2. — P. 022322.
- [155] *Zhu, X.-N.* Entanglement monogamy relations of qubit systems / X.-N. Zhu, S.-M. Fei // *Phys. Rev. A* — 2014. — Vol. 90, Iss. 2. — P. 024304.
- [156] *Gour, G.* Dual monogamy inequality for entanglement / G. Gour, S. Bandyopadhyay, B. C. Sanders // *J. Math. Phys.* — 2007. — Vol. 48, No. 1. — P. 012108.
- [157] *Rungta, P.* Universal state inversion and concurrence in arbitrary dimensions / P. Rungta, V. Bu žek, C. M. Caves *et al.* // *Phys. Rev. A* — 2001. — Vol. 64, Iss. 4. — P. 042315.