

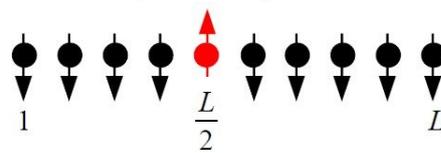
Computational Physics 2017, Teil A:

Zeitentwicklung mit Matrix-Produktzuständen

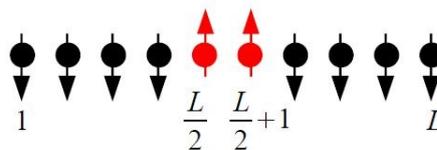
Schreiben Sie ein Programm zur Simulation der Zeitentwicklung von Spin-Anregungen in der eindimensionalen $S = \frac{1}{2}$ Heisenbergkette (mit $J_{xy} = 1$ und Parameter J_z) mittels Matrix-Produktzuständen. Benutzen Sie den Time Evolving Block Decimation (TEBD) Algorithmus, wie er in der Vorlesung vorgestellt wurde.

Betrachten Sie als Anfangszustände

1. Eine Ein-Spin-Anregung des ferromagnetischen Grundzustandes.



2. Eine Zwei-Spin-Anregung des ferromagnetischen Grundzustandes. Richten Sie hierzu zwei benachbarte Spins entgegengesetzt zu den anderen aus



- Ausgegeben werden soll die Zeitentwicklung des Erwartungswertes von S_i^z für jeden Platz der Kette. Vorteilhaft zur Interpretation der Ergebnisse ist eine Darstellung im Raum-Zeit Diagramm (z.B. mit Hilfe des *imagesc* Befehls in Matlab).
- Wie verändern sich die Intensität und Ausbreitungsgeschwindigkeit der beiden Sorten von Zuständen in Abhängigkeit von J_z ? Versuchen Sie die Ausbreitung freier und gebundener Zustände zu identifizieren. Verwenden Sie z.B. $J_z = 0, 0.5, 1, 1.5$. Was geschieht im Grenzfall $J_z \gg 1$?

Hinweise:

Anfangszustand:

Die kanonische MPS-Darstellung eines Produktzustandes benötigt nur eine Matrix-Dimension $\chi = 1$. Es sind alle $\lambda_i = 1$, und die Γ -Matrizen entsprechen genau den am Beginn der Vorlesung vorgestellten $A^{\uparrow/\downarrow}$ -Matrizen. Für den oben dargestellten Fall einer Zwei-Spin Anregung bei $L = 10$ Plätzen bedeutet das:

$$\begin{array}{rcccccccccccc} |\Psi\rangle & = & | & \downarrow & & \downarrow & & \downarrow & & \downarrow & & \uparrow & & \uparrow & & \downarrow & & \downarrow & & \downarrow & & \downarrow & \rangle \\ \lambda & = & 1 & & 1 & & 1 & & 1 & & 1 & & 1 & & 1 & & 1 & & 1 & & 1 & & 1 & \\ \Gamma^\uparrow & = & & 0 & & 0 & & 0 & & 0 & & 1 & & 1 & & 0 & & 0 & & 0 & & 0 & \\ \Gamma^\downarrow & = & & 1 & & 1 & & 1 & & 1 & & 0 & & 0 & & 1 & & 1 & & 1 & & 1 & \end{array}$$

Bei Matrix-Dimensionen $\chi > 1$ sind diese Werte die (1,1)-Elemente und alle anderen Matrixelemente sind Null.

Um das Programm einfach zu halten, können Sie den Algorithmus für eine konstante Matrix Dimension χ implementieren. Als Richtwert kann $\chi \approx 20$ verwendet werden. Wählen Sie (außer für erste Tests) eine Systemgröße von $L = 50$ oder mehr, und simulieren Sie bis etwa $t = L$.

Programm-Skizze:

- Initialisierung: Definition der äußeren Parameter (J_z, L)
- Initialisierung der Matrizen $\lambda^{[n]}$ - und $\Gamma^{[n]s_n}$ für den betrachteten Startzustand
- Schleife über die Zeitschritte:
 - Zeitentwicklung durch Anwenden der unitären 2-Platz Operatoren $\hat{u}_{n,n+1} = e^{-i\tau\hat{h}_{n,n+1}}$ (s.u., und VO-Zusammenfassung ab Gl.(16))
 - Berechnung des Erwartungswerts der 1-Platz Operatoren $\hat{S}_z^{[n]}$ (s.a. VO- Zusammenfassung ab Gl.(14))
- Output und Analyse der Ergebnisse

Zeitentwicklung:

- Zur Anwendung der unitären 2-Platz Operatoren $\hat{u}_{n,n+1} = e^{-i\tau\hat{h}_{n,n+1}}$ benötigen Sie zunächst die 4x4-Matrix $\hat{u}_{kl}^{ij} = \langle ij|e^{-i\tau\hat{h}_{n,n+1}}|kl\rangle$. Die von Null verschiedenen Elemente sind:

$$\begin{aligned} \langle \downarrow\downarrow | e^{-i\tau\hat{h}_{n,n+1}} | \downarrow\downarrow \rangle &= \langle \uparrow\uparrow | e^{-i\tau\hat{h}_{n,n+1}} | \uparrow\uparrow \rangle = e^{-i\tau\frac{J_z}{4}} \\ \langle \downarrow\uparrow | e^{-i\tau\hat{h}_{n,n+1}} | \downarrow\uparrow \rangle &= \langle \uparrow\downarrow | e^{-i\tau\hat{h}_{n,n+1}} | \uparrow\downarrow \rangle = e^{i\tau\frac{J_z}{4}} \cos\left(\frac{\tau}{2}|J_{xy}|\right) \\ \langle \downarrow\uparrow | e^{-i\tau\hat{h}_{n,n+1}} | \uparrow\downarrow \rangle &= \langle \uparrow\downarrow | e^{-i\tau\hat{h}_{n,n+1}} | \downarrow\uparrow \rangle = e^{i\tau\frac{J_z}{4}} (-i) \sin\left(\frac{\tau}{2}|J_{xy}|\right) \end{aligned}$$

Beim Update der Gamma-Matrizen ist es im Hinblick auf die Rechenzeit von Vorteil, nur diejenigen Kombinationen von $\Gamma^{[n]k}$ und $\Gamma^{[n+1]l}$ mit einzubeziehen, an denen u_{kl}^{ij} von Null verschieden ist. Die eigentliche Singulärwertzerlegung kann mit der Routine *svd* durchgeführt werden, wobei der Zusatz *'econ'* unnötig große Matrizen vermeidet.

- Die SVD liefert Ihnen 2χ Werte für $\lambda^{[n]}$. Behalten Sie davon nur diejenigen, die größer als eine Schwelle $\varepsilon \simeq 10^{-10}$ sind bzw. maximal die ersten χ . Die Summe der Quadrate der weggelassenen $\lambda^{[n]}$ Werte kann hierbei zur Kontrolle der Genauigkeit der Simulation verwendet werden. Wird eine vorgeschriebene Schranke überschritten (z.B. 10^{-8}), wiederholen Sie die Simulation mit einem größeren Wert für χ . Um den Fehler aufgrund der Trotter-Suzuki Zerlegung klein zu halten, sollte für τ ein Wert von etwa 0.01 oder kleiner verwendet werden (0.05 oder kleiner bei Trotter-Suzuki-Zerlegung 2. Ordnung). Die Signale für gebundene Zustände werden bei genügend kleinen τ deutlicher. Eine genaue Beschreibung des TEBD-Algorithmus kann auch in der DA Ganahl S.55, 57, 61-63 und in der DA Zauner S.45-50 gefunden werden.
- Da τ in der Regel wesentlich kleiner als die Simulationszeit sein wird, ist es günstig, nicht nach jedem Zeitschritt eine Messung durchzuführen. Details zur Berechnung von Erwartungswerten können auch in der DA Zauner S.30-32 nachgelesen werden.

Optional (Anregungen):

Wenn Sie möchten, können Sie auch noch einen oder mehrere der folgenden Punkte behandeln:

- Berechnung und graphische Darstellung der Entanglement Entropy $S_{i,i+1}(t)$.
- Implementierung des verschränkten 1-Spin Anfangszustands $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(c_{i-1}^\dagger + \eta c_i^\dagger \right) |0\rangle$ als Startkonfiguration, mit $\eta = e^{i\phi}$. Dieser Zustand ist in der Teilchen-Sprache geschrieben, um eine weiter unten beschriebene analytische Rechnung einfacher zu machen. Es ist $|0\rangle$ der leere Zustand ohne Teilchen (entsprechend $s_i = \downarrow$ für alle Spins), und c_i^\dagger erzeugt ein Teilchen (bzw. einen up-Spin) am Platz i . Auch für diese Linearkombination lässt sich eine kompakte MPS-Entwicklung angeben. In kanonischer Form lauten die Matrizen

$$\Gamma^{[i-1]\uparrow} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \Gamma^{[i-1]\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \Gamma^{[i]\uparrow} = \begin{pmatrix} 0 \\ \eta \end{pmatrix}, \quad \Gamma^{[i]\downarrow} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\lambda^{[i-1]} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Die Matrizen für die restlichen Plätze haben wieder die gleiche Form wie schon bei den reinen Produktzuständen. Wie man sich leicht vergewissern kann, erhält man bei $\eta = -1$ und durch Zusammenfassen von $\lambda^{[i-1]}\Gamma^{[i]k}$ gerade die am Beginn der Vorlesung vorgestellten A -Matrizen für den Fall des Singulett-Zustandes.

- Simulieren Sie auch hier die Zeitentwicklung, mit $\eta = 1, -1, i$ und $-i$. Was geschieht, wenn der Imaginärteil von η ungleich Null ist?
- Interessierte können für den Anfangszustand analytisch den Erwartungswert von $\langle \hat{n}_k \rangle = \langle \psi | c_k^\dagger c_k | \psi \rangle$ berechnen und damit Rückschlüsse auf die Impulsverteilung sowie mit Kenntnis der Dispersionsrelation $\epsilon_k = -J_{xy} \cos(k)$ Rückschlüsse auf die auftretende Geschwindigkeitsverteilung ziehen. Hilfreich hierfür ist die Relation $c_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k c_k^\dagger e^{-ikj}$.
- Implementierung der verschränkten 2-Spin Anregung $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(c_{i-1}^\dagger c_i^\dagger + \eta c_i^\dagger c_{i+1}^\dagger \right) |0\rangle$ wiederum mit $\eta = 1, -1, i, -i$. Die Matrizen hierfür sind

$$\Gamma^{[i-1]\uparrow} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \Gamma^{[i-1]\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \Gamma^{[i]\uparrow} = \sqrt{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \Gamma^{[i]\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\Gamma^{[i+1]\uparrow} = \begin{pmatrix} 0 \\ \eta \end{pmatrix}, \quad \Gamma^{[i+1]\downarrow} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda^{[i-1]} = \lambda^{[i]} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Auch in diesem Fall kann man sich leicht davon überzeugen, dass man analoge A -Matrizen wie für das „nichtlokale Singulett“ am Anfang der Vorlesung erhält, wenn man $\lambda^{[i-1]}\Gamma^{[i]k}$ und $\lambda^{[i]}\Gamma^{[i+1]k}$ bildet.

- Sie können im Fall von wenigen Up-Spins (=wenigen "Teilchen") die Zeitentwicklung auch *exakt* berechnen, indem Sie die Hamiltonmatrix im gesamten Vielteilchen-Zustandsraum aufstellen, welcher z.B. bei 2 Up-Spins und L Gitterplätzen nur die Dimension $L(L-1)/2$ hat, und danach $\expm(-iHt)$ auf den Anfangszustand anwenden.