

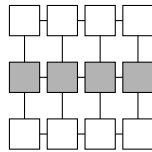
Matrix Product Toestand voor Supergeleiding

Bert Jorissen

Promotor: Prof. Dr. Jacques Tempere

2019 - 2020

Proefschrift ter verkrijging van de graad van Master in de Fysica



Samenvatting

In het vakgebied van de vastestoffysica worden er dikwijls veeldeeltjesproblemen bestudeerd. De complexiteit van deze systemen groeit snel. Daarnaast is de kwantummechanische verstrengeling in deze systemen moeilijk te beschrijven met een numerieke oplossing. Een matrix product toestand is een numerieke methode die vanuit deze verstrengeling begint. In plaats van de verstrengeling te minimaliseren, zal deze methode een model maken van de verstrengeling in het systeem. Hierdoor kan een systeem waar veel verstrengeling in plaatsvindt goed beschreven worden met een vrij eenvoudige methode.

Een veeldeeltjesysteem dat supergeleiding vertoont heeft veel verstrengeling. Een exacte berekening maken voor dit systeem is moeilijk, analytisch of numeriek. In deze thesis wordt met een matrix product toestand een eenvoudig systeem beschreven dat nog steeds supergeleiding bevat. De resultaten uit deze numerieke methode zijn beter dan de resultaten verkregen door een gemiddeld-veld benadering. De matrix product toestand neemt de verstrengeling tussen alle toestanden mee, waar de gemiddeld-veld benadering geen veeldeeltjesverstrengeling toelaat. De matrix product toestand zal resultaten geven uit het canonisch ensemble die overeenkomen met de analytische resultaten verkregen voor kleine systemen in het canonisch ensemble.

Het bestudeerde systeem heeft een logaritmische groei voor de bindingsentropie naarmate het aantal deelsystemen M toeneemt. Omdat deze bindingsentropie niet constant is, zal de oppervlaktewet voor bindingsentropie gebroken zijn. Een matrix product toestand kan systemen die voldoen aan deze wet goed beschrijven. Doordat de bindingsentropie slechts logaritmisch toeneemt, kan supergeleiding nog steeds goed beschreven worden met een matrix product toestand. Hierbij zal de computationele kost van de berekening schalen met $O(M^{3.5})$. Een exacte oplossing heeft een computationele kost die exponentieel stijgt met het aantal deelsystemen M .

Abstract

Many body problems are a much-studied subject in the field of Solid-State Physics. The rapid growth of complexity in these problems often prohibits finding an exact solution. Quantum mechanical entanglement makes it very hard to make a numerical calculation. Matrix product states allow to develop numerical methods that start from this entanglement. Instead of minimizing the entanglement, it will make a model of the entanglement in the system. This allows the simple method of matrix product state to make correct descriptions of systems that contain a lot of entanglement.

Superconductivity is a phenomenon in many body systems that contains a lot of entanglement. It is hard to make exact calculations for this system, analytical or numerical. In this thesis, a matrix product state is derived that describes the ground state of a simple model exhibiting superconductivity. The results obtained by this numerical method are better than those obtained by a mean field calculation. The matrix product state takes the correlation in account between all the subsystems. Mean field theory only allows for entanglement between the single particle states that form a Cooper pair. The matrix product state will give results from the canonical ensemble. These results coincide with the analytical results obtained for small systems in the canonical ensemble.

The studied system has a bond entropy that grows logarithmically with the number of subsystems M . Because the bond entropy varies with the number of subsystems, the surface law for bond entropies will be broken. A matrix product state is very efficient in describing systems that comply with this law. Luckily, the bond entropy will merely increase logarithmically so that the matrix product state will still give a good description of the system. The computational cost of the calculation will scale with $O(M^{3.5})$. An exact solution has a computational cost that grows exponentially with the number of subsystems M .

Dankwoord

Graag zou ik mijn promotor Prof. Dr. Jacques Tempere willen bedanken. Hij bracht me in contact met het nieuwe gebied van matrix product toestanden. Het onderwerp gaf me een nieuwe kijk op de kwantummechanica. De gesprekken die ik met hem had over de thesis gaven me altijd nieuwe inzichten. Hij zorgde er steeds voor dat problemen opgelost konden worden, en dat ik keer op keer meer motivatie kreeg om het onderwerp te bestuderen

Ook wil ik mijn lief bedanken. Dankzij zijn steun en geduld heb ik in bewogen tijden steeds kunnen doorwerken aan de thesis.

Inhoudsopgave

1	Inleiding	1
1.1	Kwantumtoestand	2
1.2	Matrix product toestand	4
1.3	Tensor netwerk	6
2	Tensor rekening	7
2.1	Diagram notatie	7
2.2	Van tensor naar matrix	8
2.3	Operaties op tensoren	9
2.4	Tensor contractie	10
2.5	Singulierwaardenontbinding	13
2.6	Lanczos algoritme	15
3	Matrix product toestand	16
3.1	Golffunctie	16
3.2	Bindingsentropie	18
3.3	Canonieke vorm	20
3.4	Externe indices	22
3.5	Matrix product operator	23
3.6	Operatoren evalueren	27
4	Algoritmes	28
4.1	DMRG	29
5	BCS-theorie	34
5.1	BCS-Hamiltoniaan	34
5.2	BCS-Grondtoestand	35
5.3	Exact oplosbaar systeem	35
5.4	gemiddeld-veld Hamiltoniaan	36
6	Resultaten	37
6.1	Implementatie	37
6.2	Berekening	38
6.3	Energie	39
6.4	Aantal elektronenparen	39
6.5	Fluctuatie aantal elektronenparen	40
6.6	Anomale gemiddelde	41
6.7	Bindingsdimensie	42
6.8	Bindingsentropie	43
6.9	Paarcondensatie	43
7	Discussie	46
7.1	Even en oneven lengte	46
7.2	Zelfinteractie	46
7.3	Interactieterm	47
7.4	Kinetische energie en chemische potentiaal	50
8	Conclusie	51

1 Inleiding

Kamerling Onnes ontdekte in 1911 supergeleiding [1]. Hij toonde aan dat de elektrische weerstand van bepaalde metalen volledig wegvalt bij zeer lage temperaturen. In 1933 vonden Meissner en Ochsenfeld [2] dat een supergeleider een perfecte diamagneet is: het Meissner effect. Bardeen, Cooper en Schrieffer beschreven in 1957 een theorie die een theoretische achtergrond gaf bij dit fascinerende fenomeen van supergeleiding [3]. Hierbij startten ze van de bevindingen van Cooper in 1956 [4] dat elektronen een gebonden paar kunnen vormen, het Cooperpaar.

De BCS-theorie geldt nog steeds als de meest succesvolle poging tot een theorie voor supergeleiding. Hoewel de theorie al verschillende keren werd uitgebreid, faalt hij nog steeds in de beschrijving van hoge-temperatuur supergeleiding. Een nieuwe alomvattende theorie van supergeleiding is nodig om dit speciale type supergeleider te kunnen beschrijven.

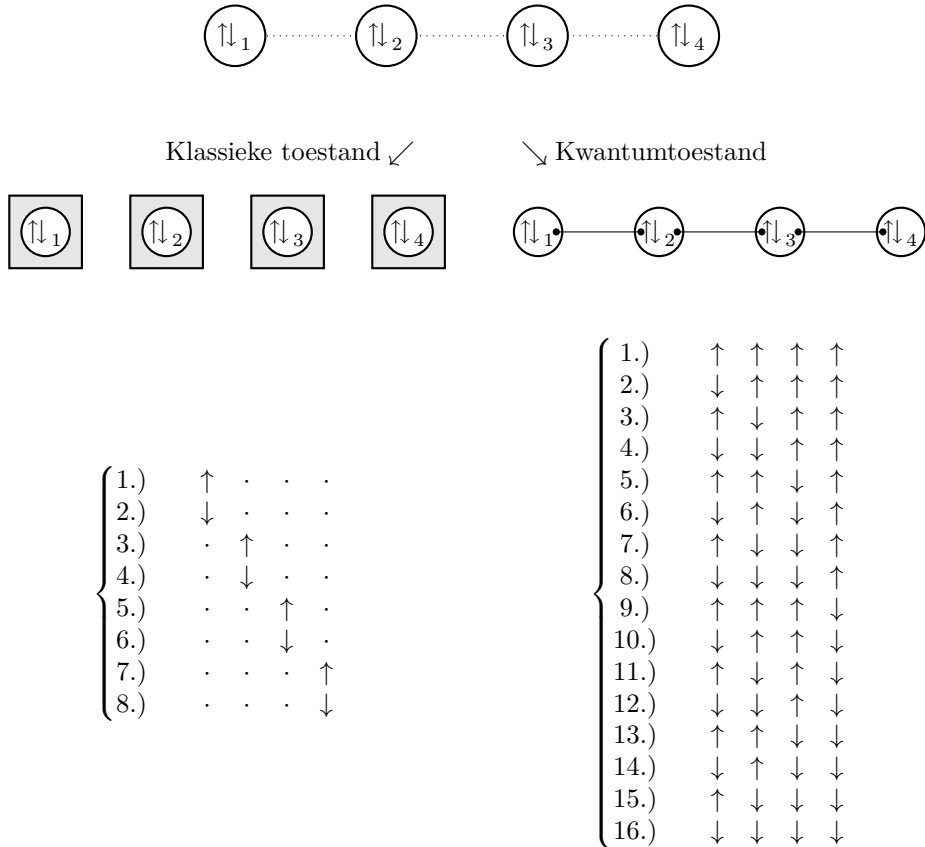
Deze thesis bestudeert een eenvoudig systeem waarbij nog steeds supergeleiding bij elektronen kan plaatsvinden. Dit systeem is afgeleid van een systeem bestudeerd door Richardson [5]. Het systeem zal onderzocht worden met een tensor netwerk (*tensor network* - TN), meerbepaald een matrix product toestand [6] (*matrix product state* - MPS). De grondtoestand van het systeem wordt onderzocht door het dichtheidsmatrix renormalisatie groep algoritme (*density matrix renormalization group* - DMRG) [7].

De beschrijving met een MPS samen met DMRG biedt de mogelijkheid om een andere kijk te krijgen op supergeleiding. Hoewel er reeds voor het Bose-Hubbard model [8] een succesvolle beschrijving is met DMRG [9], zijn er voornog niet veel toepassingen van DMRG of tensor netwerken om supergeleiding te bestuderen op een minimaal BCS-model.

De eerste hoofdstukken, over tensor netwerken, tensor rekening en matrix product toestanden volgen het overzichtsartikel geschreven door Román Orús [12].

1.1 Kwantumtoestand

Een kwantumtoestand is anders dan een klassieke toestand. Het fenomeen van *verstrengeling* in de kwantummechanica heeft geen gelijkenis in de klassieke fysica. Dat kan best geïllustreerd worden met een voorbeeld.



Figuur 1: Een combinatie van 4 twee-niveau deelsystemen. (links) De klassieke onafhankelijke toestanden. Ieder deelsysteem is onafhankelijk van elkaar, en zit in zijn eigen kluis. Om het systeem te beschrijven voldoet het om te kijken naar elke toestand afzonderlijk. Het voldoet om een lijst bij te houden voor ieder deelsysteem apart, waarbij de andere deelsystemen buiten beschouwing (.) worden gelaten. (rechts) De verstrengelde kwantumtoestanden is voorgesteld met een dikke lijn tussen ieder systeem. De verstrengeling tussen de toestanden zorgt dat het systeem in zijn geheel moet bekeken worden. Om het systeem te beschrijven moeten een lijst met alle mogelijke combinaties van toestanden van de deelsystemen bijgehouden worden.

Neem bijvoorbeeld een keten van 2-niveau deelsystemen, zoals getoond in figuur 1 voor een keten van lengte $M = 4$. Dat kan een keten zijn van spin- $1/2$ deelsystemen. De toestanden kunnen beschreven worden als lineaire combinaties van 'op' \uparrow en 'neer' \downarrow , twee verschillende basistoestanden voor het deelsysteem.

Volgens de klassieke fysica [10] bevindt het systeem uit figuur 1 zich in één van acht mogelijke toestanden voor de deelsystemen. Elk van de toestanden kan

onafhankelijk van de andere bekeken worden. Het systeem bestaat uit identieke, onderscheidbare delen.

In de klassieke fysica is een systeem volledig bepaald als de toestandssom van het systeem gekend is. De toestandssom van een enkel deelsysteem is gegeven als

$$(1) \quad \mathcal{Z}_i = \sum_{\varepsilon_i} \exp\left(-\frac{\varepsilon_i}{k_B T}\right)$$

$$(2) \quad = \exp\left(-\frac{\varepsilon_{\uparrow,i}}{k_B T}\right) + \exp\left(-\frac{\varepsilon_{\downarrow,i}}{k_B T}\right),$$

de toestandssom voor het gehele systeem is gegeven als het product van de aparte toestandssommen

$$(3) \quad \mathcal{Z}_{tot} = \prod_{i=1}^4 \mathcal{Z}_i$$

$$(4) \quad = (\mathcal{Z}_i)^4,$$

de verschillende toestanden van de deelsystemen komen voor in verschillende factoren van de toestandssom. Elke toestand van een deelsysteem is onafhankelijk van de andere deelsystemen, een meting op een enkele toestand verandert de waarden van de andere toestanden niet. Er zijn 2 mogelijkheden per systeem, en 4 deelsystemen. De totale dimensie van de faseruimte is: $2 \cdot 4 = 8$.

Volgens de kwantummechanica [11] kan het systeem voor de meting in superpositie zijn. Een algemene toestand $|\Psi\rangle$ kan voor ieder van de $2^4 = 16$ verschillende mogelijke toestanden een waarschijnlijkheid of amplitudo hebben.

Een kwantumtoestand kan bijvoorbeeld bestaan uit

$$(5) \quad |\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{10}} \left(2|\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + 2|\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + \sqrt{2}|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle \right).$$

Als een meting op het vierde deelsysteem uitgevoerd wordt, $|\downarrow_4\rangle$, en het resultaat is $|\uparrow\rangle$, zullen de verwachtingswaarden voor een meting op een andere toestand evenredig zijn met de amplitudo's voor de toestanden met $|\uparrow_4\rangle$,

$$(6) \quad |\psi\rangle = \langle\uparrow_4|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{10}} (2|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + 2|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle).$$

Hier zal $|\psi\rangle$ ervoor zorgen dat de eerste $|\uparrow_1\rangle$ en derde toestand $|\uparrow_3\rangle$ tevens $|\uparrow\rangle$ zal zijn, terwijl er voor de tweede toestand $|\uparrow_2\rangle$ een kans $1/2$ is op zowel $|\uparrow\rangle$ als $|\downarrow\rangle$.

Een meting op een enkele kwantumtoestand zal invloed hebben op het gehele systeem. Hierdoor zijn toestanden *niet* onafhankelijk van elkaar te beschouwen, de toestanden zijn verstrengeld.

Deze verstrengeling bij kwantumsystemen heeft als resultaat dat de $2M$ -dimensionale faseruimte van de klassieke systemen vergroot wordt naar de 2^M -dimensionale Hilbertruimte voor kwantumtoestanden. Deze Hilbertruimte bevat

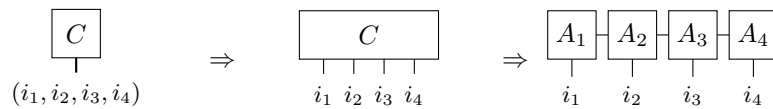
elke mogelijke combinatie van de deelsystemen, waar de klassieke faseruimte enkel de toestanden van de aparte deelsystemen bijhoudt.

Deze verstrengeling is iets *magisch* van de kwantummechanica. In het dagelijks leven kom je geen professor in superpositie tegen, of krijg je geen punt op een examen dat goed of slecht is afhankelijk of je kijkt naar dit punt. De *intuïtie* zegt dat de professor of het punt reeds vast ligt voordat hiernaar gekeken wordt.

Vaak zullen kwantumsystemen niet *ver* van de klassieke toestand afwijken als ze in superpositie zijn. Een goede benadering voor de kwantumsystemen zou gemaakt kunnen worden door bijvoorbeeld enkel een superpositie tussen burens van de keten toe te laten. Verstrengeling tussen het begin en het einde van de keten zou verwaarloosd kunnen worden.

Matrix product toestanden gebruiken deze benadering om het kwantumsysteem te beschrijven. Om preciezer te zijn zal er enkel gewerkt worden met toestanden die voldoen aan de oppervlaktewet voor bindingsentropie.

1.2 Matrix product toestand



Figuur 2: De *originele* tensor, de tensor in de basis van de deelsystemen en de MPS die deze tensoren vervangt.

Voor de spin- $1/2$ -keten opgebouwd uit 4 deelsysteem kan de kwantumtoestand uitgedrukt worden in de basis van de deelsystemen $|\varphi_r\rangle$, met 2 toestanden $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$, als

$$(7) \quad |\Psi\rangle = \sum_{i_1, i_2, i_3, i_4=1}^2 C_{i_1, i_2, i_3, i_4} |\varphi_{i_1}\rangle \otimes |\varphi_{i_2}\rangle \otimes |\varphi_{i_3}\rangle \otimes |\varphi_{i_4}\rangle,$$

waarbij de tensor C_{i_1, i_2, i_3, i_4} $2^4 = 16$ complexe getallen bevat. Deze tensor kan geschreven worden in een diagram zoals weergegeven in figuur 2. De grote tensor C kan opgesplitst worden in verschillende kleinere tensoren, A_1 , A_2 , A_3 en A_4 . Hierbij zal de verbinding tussen de verschillende delen A_r de verstrengeling in het systeem voorstellen. Dit is een matrix product toestand.

$$\begin{array}{c}
 \boxed{C} \\
 \downarrow \\
 (i_1, i_2)
 \end{array}
 \Rightarrow
 \begin{array}{c}
 \boxed{C} \\
 \downarrow \downarrow \\
 i_1 \ i_2
 \end{array}
 \Rightarrow
 \begin{array}{c}
 \boxed{A_1} \text{---} \alpha \text{---} \boxed{A_2} \\
 \downarrow \qquad \downarrow \\
 i_1 \qquad i_2
 \end{array}$$

$$\begin{array}{c}
 | \uparrow \uparrow \rangle \\
 | \downarrow \uparrow \rangle \\
 | \uparrow \downarrow \rangle \\
 | \downarrow \downarrow \rangle
 \end{array}
 \begin{array}{c}
 \left. \begin{array}{c} 3 \\ -1 \\ 1 \\ -2 \end{array} \right| \\
 \begin{array}{c} i_1 \\ i_2 \end{array}
 \end{array}
 \Rightarrow
 \begin{array}{c}
 | \uparrow \rangle \\
 | \downarrow \rangle
 \end{array}
 \begin{array}{c}
 \left. \begin{array}{c} 3 \quad 1 \\ -1 \quad -2 \end{array} \right| \\
 \begin{array}{c} i_1 \\ i_2 \end{array}
 \end{array}
 =
 \begin{array}{c}
 | \uparrow \rangle \\
 | \downarrow \rangle
 \end{array}
 \begin{array}{c}
 \left. \begin{array}{c} 1 \quad 2 \\ -2 \quad 1 \end{array} \right| \\
 \begin{array}{c} \alpha_1 \quad \alpha_2 \end{array}
 \end{array}
 \times
 \begin{array}{c}
 \left. \begin{array}{c} 1 \quad 1 \\ 1 \quad 0 \end{array} \right| \\
 \begin{array}{c} \alpha_2 \\ \alpha_1 \end{array}
 \end{array}$$

Figuur 3: De originele lijst met toestanden, de grote geordende tensor C en de opsplitsing in tensoren A_1 en A_2 van een willekeurige toestand. Door een contractie te nemen tussen A_1 en A_2 wordt terug de tensor C verkregen.

In figuur 3 is als voorbeeld de toestand

$$(8) \quad |\Psi\rangle = \frac{3|\uparrow\uparrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle - 2|\downarrow\downarrow\rangle}{\sqrt{15}}$$

weergegeven voor een spin- $1/2$ -systeem met twee deelsystemen. Hierbij is de lijst van toestanden, de grote tensor C en de opsplitsing in tensoren A_1 en A_2 gegeven.

Het aantal complexe getallen in de tensor A_r kan gekozen worden. Stel dat er voor tensor A_1 en A_4 uit figuur 2 ieder 2 elementen zijn, en voor tensoren A_3 en A_4 ieders 4 elementen, dan zal het totaal aantal elementen voor deze MPS met 4 tensoren gelijk zijn aan 12. Het aantal elementen in de grote tensor C is gelijk aan 16.

In dit voorbeeld was de dimensie van het deelsysteem klein ($p = 2$), met een klein aantal deelsystemen ($M = 4$). Als de dimensie van het deelsysteem p en de lengte van de keten M toenemen zal het verschil tussen het klassieke systeem, dat schaal als $p \cdot M$, en het kwantumsysteem, p^M , meer uitgesproken worden. Een MPS zal altijd meer elementen bevatten dan het aantal elementen nodig om een klassieke keten te beschrijven. Dit komt doordat de MPS tevens de verstrengeling in het systeem moet bijhouden. Maar het aantal elementen in de MPS zal steeds *linear* zijn, $O(p \cdot M)$, en niet *exponentieel* zoals voor de totale tensor C . Door contracties te nemen tussen tensoren kan toch de gigantische tensor C verkregen worden die p^M elementen bevat, die in dit geval niet allemaal onafhankelijk zijn van elkaar.



Figuur 4: Het aantal toestanden dat voldoet aan de oppervlaktewet is veel kleiner dan het aantal toestanden in de gehele Hilbertruimte.

De MPS heeft minder elementen nodig doordat het bepaalde verstrengelingen verwaarloost. De gehele Hilbertruimte aan toestanden is immers zeer groot, deze schaalt *exponentieel* met het aantal deelsystemen. De grondtoestand van systemen voldoet veelal aan de oppervlaktewet voor de bindingsentropie [13]. De MPS zal efficiënt toestanden zoeken die voldoen aan de oppervlaktewet [14] of hier licht van afwijken [15] (bijvoorbeeld logaritmische schaling). Dit is een veel kleiner gebied om te zoeken dan de gehele Hilbertruimte, zoals getoond in figuur 4. Hierdoor zal de MPS een efficiënte beschrijving van een kwantumtoestand kunnen geven.

1.3 Tensor netwerk

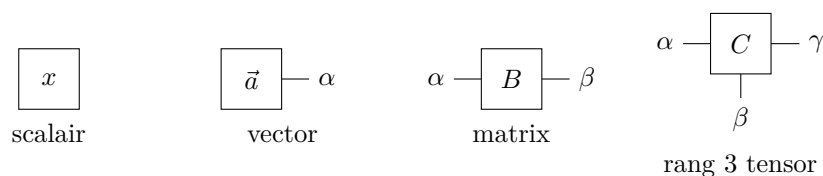
De benaming *tensor netwerk* is de algemene naam voor methoden die opsplitsingen maken van een complexe toestand in tensoren met onderlinge connecties. Een matrix product toestand is een tensor netwerk dat goed een 1-dimensionaal veeldeeltjessysteem kan simuleren. Een geprojecteerd verstrengeld paar toestand [16] (*Projected Entangled Pair states* - PEPS) is een ander gelijkaardig soort tensor netwerk dat beter geschikt is voor 2-dimensionale veeldeeltjessystemen.

Een ander soort tensor netwerk is bijvoorbeeld *multi-scale entanglement renormalization ansatz* [17] (MERA). Dit netwerk helpt in de beschrijving van kwantum zwaartekracht [18]. Het heeft andere connecties die andere eigenschappen aan het netwerk geven. De verschillende vormen van netwerken worden gekozen zodat een goed verband gevonden kan worden met de verstrengelingen in het systeem. Als de verstrengeling in een systeem hoofdzakelijk in 1 dimensie plaats heeft, kan er voor MPS gekozen worden. Als de verstrengelingen echter complexer zijn, bijvoorbeeld lange dracht interacties heeft, kan er gekozen worden voor MERA.

In dit werk zal enkel gebruik gemaakt worden van de MPS om een kwantummechanisch systeem voor te stellen. Er zijn veel verschillende rekenprogramma's om tensor netwerken uit te rekenen. Voor numerieke berekeningen zal TeNPy [19] gebruikt worden. TeNPy heeft efficiënte numerieke methoden, laat eenvoudig programmeren toe en heeft een bibliotheek met fysische systemen en eigenschappen. Andere methoden zijn meer gericht op het uitrekenen van netwerken, met minder fysische achtergrond. Een lijst met mogelijke programma's is te vinden op tensornetworks.org.

2 Tensor rekening

2.1 Diagram notatie



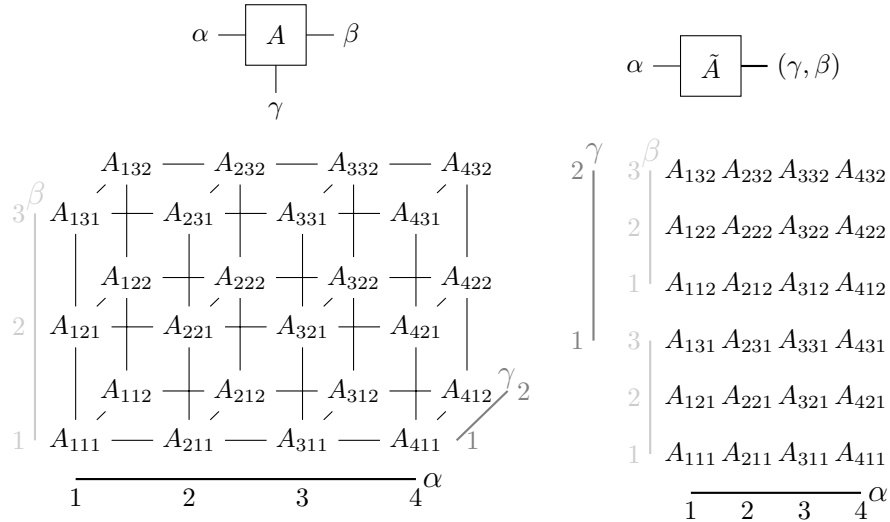
Figuur 5: Tensoren van verschillende rang.

De tensoren zullen getekend worden als vierkantjes, de lijnen tussen de tensoren zijn de bondindices. Deze bondindices geven contracties tussen tensoren weer. De losse lijnen zijn externe indices. Deze externe indices zullen het netwerk met operatoren verbinden.

Een tensor is een meerdimensionale matrix van complexe getallen¹. De rang van een tensor is het aantal indices, of lijnen, aan de tensor. Een rang 0 tensor is een scalair, een rang 1 tensor is een vector en een rang 2 tensor een matrix, zoals weergegeven in figuur 5.

¹Er is een onderscheid tussen een *tensor* en een *meerdimensionale lijst*. Een tensor moet voldoen aan een bepaald gedrag bij een transformatie, bijvoorbeeld een rotatie. In de algemene relativiteitstheorie worden ook tensoren gebruikt, maar deze voldoen aan extra voorwaarden. De benaming *tensor* zal in dit werk gebruikt worden om een *meerdimensionale lijst* aan te duiden zoals deze geprogrammeerd kunnen worden in een computer. Deze tensoren zijn nog steeds gegeven in een zekere basis, zoals in sectie 3.4 zal uitgelegd worden.

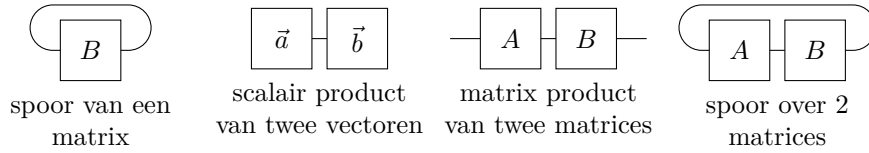
2.2 Van tensor naar matrix



Figuur 6: Een tensor kan omgezet worden naar een matrix door indices samen te nemen en de verschillende delen van de tensor achter elkaar te plaatsen. Hier werd voor tensor $A_{\alpha\gamma\beta}$ indices β en γ samengenomen tot matrix $\tilde{A}_{\alpha(\gamma,\beta)}$.

Een tensor met een rang groter dan 2 is moeilijk weer te geven of in te beelden. Door indices samen te nemen, zoals getoond in figuur 6, kan een tensor wel voorgesteld worden als een matrix. Het is handig om een tensor met een grote rang in te beelden als een grote matrix, waarbij de delen van de tensor *achter elkaar geplakt* zijn. Dit helpt om meer *intuïtie* te krijgen voor de methoden gebruikt bij de tensor netwerken. Een matrix afkomstig van een tensor A zal aangeduid worden met een extra *tilde* \tilde{A} .

2.3 Operaties op tensoren



Figuur 7: Het spoor, scalair product en product tussen matrices uitgedrukt in diagrammen.

Operaties op tensoren kunnen geschreven worden met diagrammen, zoals weergegeven in figuur 7. Hierbij is het spoor (*trace*) van een matrix weergegeven als

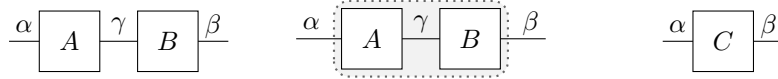
$$\text{Tr}(B) = \sum_{\alpha=1}^{d_{\alpha}} B_{\alpha\alpha},$$

het scalair product tussen twee vectoren als

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = \sum_{\alpha=1}^{d_{\alpha}} a_{\alpha} b_{\alpha},$$

en het matrix product van twee matrices. Merk op dat voor het scalair product en het spoor geen externe indices getekend zijn. Het resultaat is een scalair.

2.4 Tensor contractie



Figuur 8: Diagram notatie voor het matrix product.

Een tensor contractie van twee tensoren is de samenvoeging van een index tussen twee tensoren en geeft een nieuwe tensor. Voor rang 2 tensoren is dit het matrix product

$$C_{\alpha\beta} = A \times B = \sum_{\gamma=1}^{d_\gamma} A_{\alpha\gamma} B_{\gamma\beta},$$

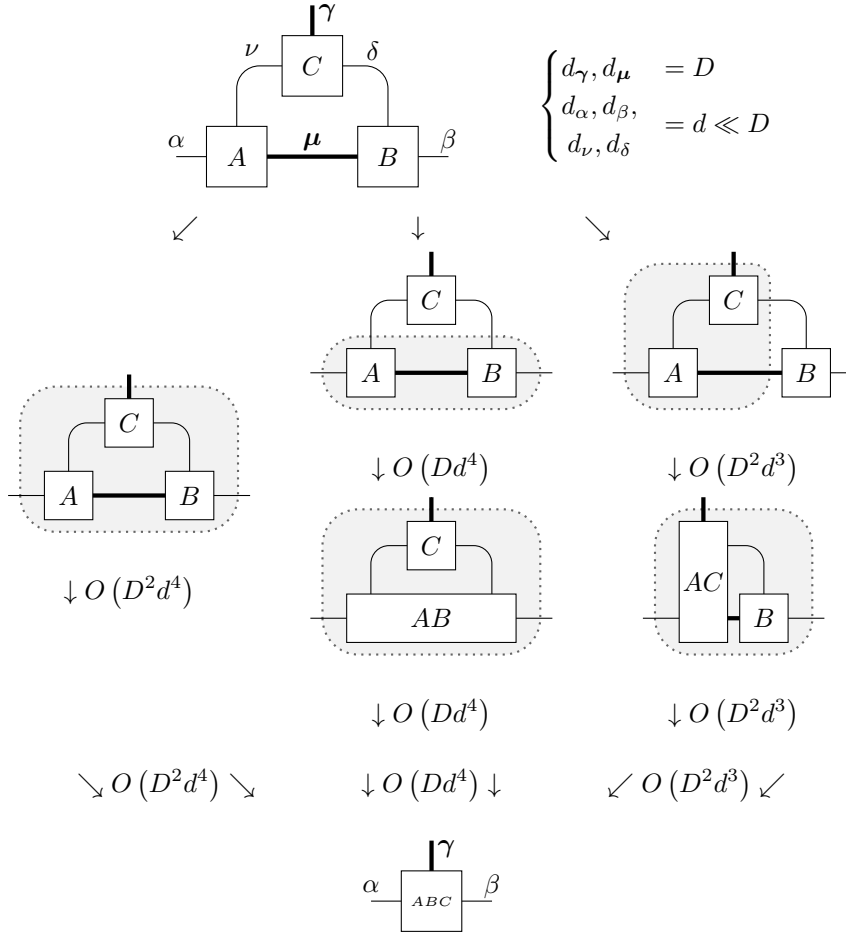
hierbij loopt de som van 1 tot d_γ , de *dimensie* van de index γ . Net als bij het matrix product moeten bij de tensor contractie de dimensies van de tensoren overeenkomen. Dit kan beter geïllustreerd worden met een voorbeeld:

$$\begin{pmatrix} 10 & 6 & 1 \\ 15 & 32 & -3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 2 & 3 \\ -1 & 5 & 0 & 6 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 1 & 0 & 3 \\ 2 & 4 & 0 \\ 3 & 0 & -1 \\ 1 & 2 & 0 \end{pmatrix},$$

waarbij $\dim(\alpha) = d_\alpha = 2$, $d_\gamma = 4$ en $d_\beta = 3$. De resulterende tensor zal de resterende indices krijgen van de andere tensoren. Het matrix product is weergegeven met diagrammen in figuur 8. Een contractie zal aangeduid worden met een gestippelde lijn.

De *kost* om een matrix product uit te voeren is van de orde van het product van de dimensies van de matrices, $O(d_\alpha d_\beta d_\gamma)$. De *kost* is het aantal berekeningen benodigd om het resultaat te krijgen. Een computer zal een tijd nodig hebben om de berekening uit te voeren. Deze tijd is evenredig met de *kost*. Een efficiënte computer kan schijnbaar een *sneller* resultaat verkrijgen door betere algoritmes te gebruiken of in *parallel* te werken, maar het aantal benodigde berekeningen blijft hetzelfde.

De kost van een matrix product is eenvoudig aan te tonen, de som bevat d_γ termen met elke term een vermenigvuldiging, wat al $2d_\gamma$ berekeningen geeft. Deze som moet genomen worden voor elke index α en β van de matrices A en B , er zijn $d_\alpha \cdot d_\beta$ combinaties die doorlopen moeten worden. Dit geeft in totaal voor de kost $O(d_\alpha d_\beta d_\gamma)$. Een tensor contractie kan herschreven worden naar een product van matrices, de kost van een tensor contractie is hierdoor hetzelfde.

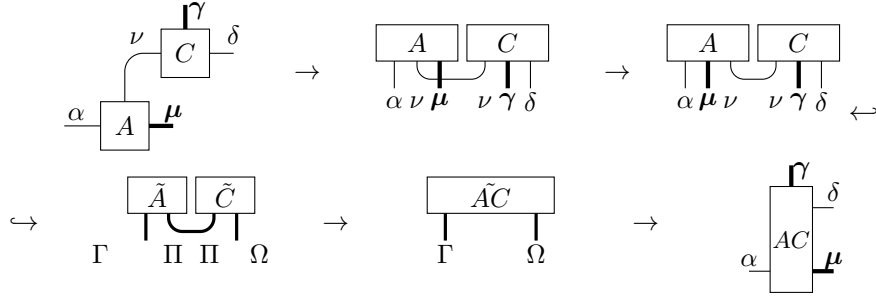


Figuur 9: De contractie van het tensor netwerk op drie verschillende manieren. Hierbij zal de methode met eerst een contractie tussen A en B efficiënter zijn dan de *naïeve* contractie of eerst een contractie tussen A en C .

De contractie van een netwerk van tensoren kan op verschillende manieren gebeuren. Het netwerk getoond in figuur 9 kan op de *naïeve* methode berekend worden door

$$ABC_{\alpha\beta\gamma} = \sum_{\mu=1}^D \sum_{\delta=1}^d \sum_{\nu=1}^d A_{\alpha\nu\mu} C_{\nu\gamma\delta} B_{\mu\delta\beta}, \quad \text{met} \quad \left\{ \begin{array}{l} d_\gamma, d_\mu = D. \\ d_\alpha, d_\beta, \\ d_\nu, d_\delta = d \ll D \end{array} \right.$$

Deze drie sommaties komen in een programma overeen met drie geneste *For-loops*. De kost van deze berekening kan bepaald worden door te zien dat tweemaal een sommatie gebeurt met d waarden en één sommatie met D waarden, wat Dd^2 termen oplevert, met ieder twee vermenigvuldigingen. Het aantal berekeningen is dan $3Dd^2$. Verder zijn er nog drie indices, met dimensies d, d en D , wat nog $d^2 D$ extra combinaties geeft. De kost is $O(D^2 d^4)$.



Figuur 10: De verschillende stappen om een tensor contractie om te zetten in een product van matrices, als voorbeeld de contractie van tensoren A en C van het netwerk uit figuur 9.

Er kan echter ook gewerkt worden met een matrix product. In het voorbeeld van figuur 10 is de contractie tussen tensoren A en C van het netwerk uit figuur 9 uitgewerkt. Hier wordt eerst een tensor gemaakt waarvan de indices een bepaalde volgorde hebben, $A(\alpha, \nu, \mu)$ en $C(\nu, \delta, \gamma)$, de notatie gelijkaardig aan deze gebruikt in *MATLAB*. Nu moet de index (of indices) waarover gecontracteerd wordt naar achter geschoven worden, $A(\alpha, \mu, \nu)$. De indices waarover gecontracteerd zal worden en de open indices worden samengenomen tot $\tilde{A}(\Gamma, \Pi)$ en $\tilde{C}(\Pi, \Omega)$ met $\Gamma = (\alpha, \mu)$, $\Pi = (\nu)$ en $\Omega = (\delta, \gamma)$. Het resultaat zijn matrices waarvan de dimensies gegeven worden door $d_\Gamma = d_\alpha \cdot d_\mu$, analoog voor d_Π en d_Ω . De matrix met de samengenomen indices heeft een vervorming analoog aan deze getoond in figuur 6, vandaar de grotere dimensies. Vervolgens kan het matrix product genomen worden met deze nieuwe matrices. Door de grote dimensies is deze operatie zeer kostelijk, $O(d_\Gamma d_\Pi d_\Omega) = O(D^2 d^3)$, het product van de dimensies van indices binnen de gestippelde gebieden in figuur 9. Hierna moet de verkregen matrix opnieuw worden *uiteen gehaald*, en de originele indices worden weer verkregen. De operaties van de permutatie (indices omwisselen) en indices samennemen is computationeel verwaarloosbaar ten opzichte van het product tussen de matrices.

Figuur 9 illustreert dat aan de contractie van een netwerk niet zomaar begonnen kan worden. Er moet gecontroleerd worden hoe de laagst mogelijke *kost* bereikt kan worden. Specifieke algoritmes kunnen dit automatisch bepalen voor een gegeven tensor. Ze zullen het netwerk zo efficiënt mogelijk berekenen. Voor *normale* tensoren uit de Fysica, met dimensies in de orde $O(1)$, maakt het niet uit hoe precies een contractie plaats heeft. De (grootste) dimensies in de berekeningen zullen snel oplopen en van de orde $O(10^2)$ worden. Door de volgorde van contracties te controleren kan de kost aanzienlijk verlaagd worden.

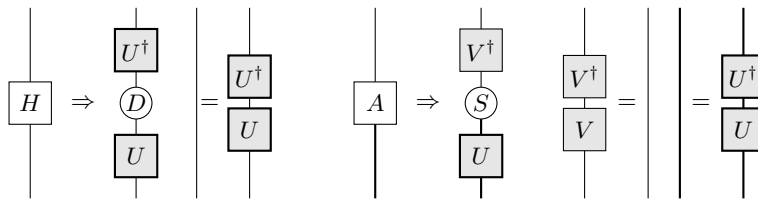
2.5 Singulierewaardenontbinding

Singulierewaardenontbinding² (*Singular Vale Decomposition* - SVD) [20] is een methode voor de ontbinding van een matrix in singuliere waarden, onafhankelijk gevonden door E. Beltrami en C. Jordan [21]. Deze singuliere waarden zijn analoog aan de eigenwaarden van een vierkante matrix, SVD laat toe dit uit te breiden naar matrices met twee verschillende dimensies.

Analoog aan de spectraalontbinding van een vierkante matrix, kan een matrix ontbonden worden in drie nieuwe matrices door de SVD [20]. Bij een spectraalontbinding wordt de vierkante hermitische matrix H omgezet naar een diagonaalmatrix D , waarbij de transformatie geschreven kan worden als

$$H = UDU^\dagger.$$

De matrices U zijn unitair en bevatten de verschillende eigentoestanden horend bij de eigenwaarden op de diagonaal van D . Hierbij wordt de conventie aangenomen dat de eigenwaarden van hoog naar laag zijn gerangschikt. De spectraalontbinding staat weergegeven in diagrammen in figuur 11. In de diagrammen zullen cirkels gebruikt worden voor matrices met enkel waarden op de diagonaal en unitaire matrices zullen een grijze achtergrond krijgen.



Figuur 11: De spectraalontbinding en SVD in diagrammen.

De SVD is een veralgemening van de spectraalontbinding naar matrices die niet vierkant zijn. Hierbij wordt een matrix A omgezet naar een matrix met dezelfde dimensies S met op de diagonaal de singuliere waarden. De omzetting van de matrix gaat als volgt

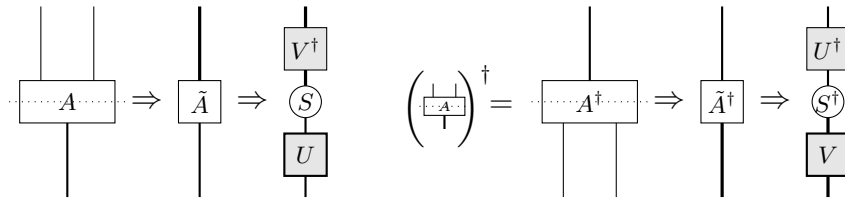
$$(9) \quad A = USV^\dagger,$$

met U de linker singuliere vectoren en V de rechter singuliere vectoren, beide unitair als de matrix A een rang heeft gelijk aan de kleinste dimensie van A , alle singuliere waarden zijn niet-nul. Deze eigenschap zal gebruikt worden om een tensor netwerk efficiënt te kunnen berekenen.

De SVD laat toe matrices te *verkleinen* door slechts de grootste singuliere waarden mee te nemen in de berekening. Net als bij de eigenwaarden van een functie zullen eigentoestanden met een kleine singuliere waarde relatief minder bijdragen tot de gehele matrix. Er kan gekozen worden om enkel de singuliere waarden te behouden van een zekere grootte, of een bepaald aantal singuliere

²In de cursus *Numerical methods* komt het onderwerp van singulierewaardenontbinding aan bod.

waarden te bewaren.



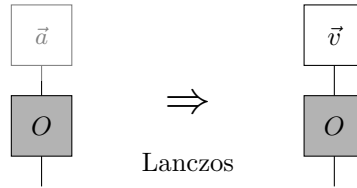
Figuur 12: Het *hermitisch toegevoegde* van een tensor is het complex toegevoegde van die tensor, waarbij de samengenomen indices worden omgewisseld.

Het begrip *hermitisch toegevoegde* kan uitgebreid worden naar tensoren. In figuur 10 werd gegeven hoe een tensor omgevormd kan worden naar een matrix. Door een tensor naar een matrix te herschrijven, en SVD toe te passen, werd de tensor omgezet in twee unitaire matrices.

Het *hermitisch toegevoegde* van een tensor is het complex toegevoegde van de tensor, waarbij de samengenomen externe indices van de tensor van plaats gewisseld zijn. Dit is getoond in figuur 12. Hierbij zijn de samengenomen indices van de tensor opgesplitst met een gestippelde lijn. Alle indices onder of boven deze lijn zullen bij het hermitisch toevoegen naar de andere kant van deze stippellijn gaan.

2.6 Lanczos algoritme

Het Lanczos algoritme³ [22] laat toe de eigentoestand en eigenwaarden te vinden van een gegeven functie of matrix. Hierbij kan een operator \hat{O} en een *gok* \vec{a} gegeven worden [23], en het algoritme zal de eigentoestand \vec{v} van deze operator berekenen, zoals weergegeven in figuur 13.



Figuur 13: Het Lanczos algoritme geeft de eigentoestand \vec{v} horende bij een operator of matrix O , met als *gok* \vec{a} . De matrix O heeft een donkere achtergrond, deze zal overeenkomen met de tensor van een operator zoals uitgelegd zal worden in sectie (3.5).

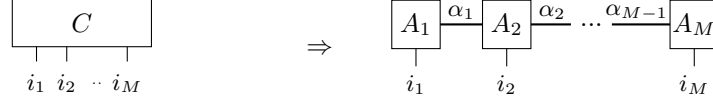
Het algoritme neemt een matrix of operator \hat{O} en deze gebruikt de vermenigvuldiging met een *gok* \vec{a} om de eigentoestand \vec{v} te bepalen. Als de *gok* \vec{a} reeds dicht bij de eigentoestanden ligt, zal het Lanczos algoritme sneller convergeren naar de juiste eigentoestand. In het DMRG algoritme zal Lanczos de resultaten van een vorige berekening gebruiken om een nieuwe eigentoestand te bepalen.

³De Engelstalige Wikipedia pagina bevat een stapsgewijze beschrijving van het Lanczos algoritme. De paper van Dargel [23] geeft een toepassing op een MPS. Een uitgewerkt voorbeeld programma is te vinden op de website tensors.net als onderdeel van een DMRG algoritme.

3 Matrix product toestand

Nu er vertrouwen is met de werking van tensoren, kunnen enkele eigenschappen van de MPS bekeken worden. Het MPS zal opnieuw geïntroduceerd worden.

3.1 Golfunctie



Figuur 14: De *originele* tensor en de MPS dat het vervangt.

Een systeem dat opgebouwd is uit M kleinere delen, zoals een spinketen, kan voorgesteld worden door een product van de individuele orthonormale basis $|\varphi_r\rangle$, met p toestanden, voor elk deel van dit systeem als

$$(10) \quad |\Psi\rangle = \sum_{i_1, \dots, i_M=1}^p C_{i_1 \dots i_M} |\varphi_{i_1}\rangle \otimes |\varphi_{i_2}\rangle \otimes \dots \otimes |\varphi_{i_M}\rangle,$$

waarbij de tensor $C_{i_1 \dots i_M}$ p^M complexe getallen bevat en verondersteld werd dat alle subsystemen identiek zijn. Elk complex getal komt overeen met een toestand opgebouwd uit de verschillende mogelijkheden van de kleine systemen. Deze tensor bevat dus $O(p^M)$ elementen. Dit is computationeel zeer inefficiënt. De dimensie van de externe indices is $d_{i_r} = p$.

In plaats van deze gigantische tensor, zal een MPS verschillende kleinere tensoren bevatten die elk een individuele toestand beschrijven. Dit kan geschreven worden als

$$(11) \quad |\Psi\rangle = \sum_{i_1, \dots, i_M,=1}^p \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_{M-1},=1}^{\chi_1, \dots, \chi_{M-1}} \left[(A_1)_{i_1 \alpha_1} (A_2)_{\alpha_1 i_2 \alpha_2} \dots (A_M)_{\alpha_{M-1} i_M} |\varphi_{i_1}\rangle \otimes |\varphi_{i_2}\rangle \otimes \dots \otimes |\varphi_{i_M}\rangle \right],$$

waarbij A_r de tensoren zijn die de verschillende individuele toestanden beschrijven. De dimensie van de bindingsindices α_r tussen de tensoren A_r en A_{r+1} wordt $\dim(\alpha_r) = \chi_r$ genoemd, de bindingsdimensie. De dimensie χ_r kan anders zijn voor elke index α_r . De externe indices hebben terug dimensie $d_{i_r} = p$.

De MPS is een andere schrijfwijze van de tensor $C_{i_1 \dots i_M}$ uit vergelijking (10) en *niet* van de toestand $|\Psi\rangle$. De tensor $C_{i_1 \dots i_M}$ is gegeven in de basis van $\bigotimes_{r=1}^M |\varphi_r\rangle$. Een verandering van deze basis zal ook de tensor veranderen. Deze tensor $C_{i_1 \dots i_M}$ is gigantisch, een MPS zal deze gigantische tensor opdelen in meer behapbare delen. Het verband tussen de MPS en $C_{i_1 \dots i_M}$ kan geschreven worden als

$$(12) \quad C_{i_1 \dots i_M} = \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_{M-1},=1}^{\chi_1, \dots, \chi_{M-1}} (A_1)_{i_1 \alpha_1} (A_2)_{\alpha_1 i_2 \alpha_2} \dots (A_M)_{\alpha_{M-1} i_M},$$

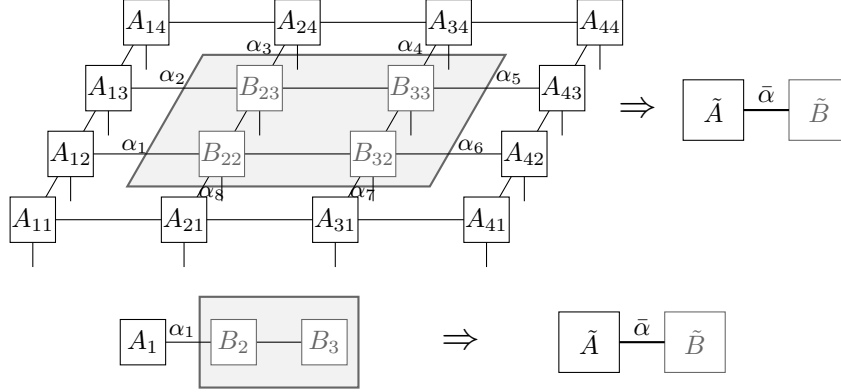
wat overeenkomt met de contractie van de tensor in figuur 14.

Het systeem zal hoogstens $O(Mp\chi^2)$ elementen bevatten, met χ de maximale interne dimensie of bindingsdimensie. Dit is *lineair* met de grootte van het systeem. De grootte van χ zal bepalen hoeveel elementen er zijn in de tensoren, en bijgevolg hoe groot de Hilbertruimte van mogelijke toestanden zal worden.

Het bijzondere is dat de contractie van de M tensoren in de MPS een tensor geeft van rang M , met p^M elementen. Door de contractie is het mogelijk om een goede benadering te maken van deze p^M elementen met tensoren die in totaal minder elementen bevatten. De *magie* komt van het feit dat deze elementen niet onafhankelijk zijn. De verstrengeling van het systeem geeft het verband tussen de elementen. Bij een tensor netwerk is het belangrijk de juiste keuze van netwerk te maken. Hierdoor kan de verstrengeling van het systeem, hoe de tensoren met elkaar verbonden zijn, correct weergegeven worden.

In figuur 14 zijn de externe indices voor de MPS naar onder getekend. Deze notatie zal gebruikt worden om de tensor voor te stellen afkomstig van een *ket* $|\Psi\rangle$. Voor een *bra* $\langle\Psi|$ zullen de externe indices naar boven getekend zijn. De tensoren die de *bra* en de *ket* voorstellen zijn elkaars hermitisch toegevoegde, de indices zijn omgewisseld van plaats en de elementen zijn complex toegevoegd.

3.2 Bindingsentropie



Figuur 15: Een PEPS Tensor Network met een onderverdeling en een MPS met een onderverdeling.

De bindingsentropie geeft de verstrengeling weer tussen twee systemen. Zoals vermeld, zal de structuur van een netwerk de verstrengeling bepalen binnen dit netwerk. Neem aan dat het netwerk overal een bindingsdimensie χ heeft, elke *lijn* tussen tensoren heeft dimensie χ .

De oppervlaktewet zegt dat de maximale waarde van de bindingsdimensie constant is voor een MPS, het is een 1-dimensionaal systeem. Het voorbeeld zal daarom worden uitgewerkt voor een PEPS, een 2-dimensionaal systeem. In figuur 15 is zo'n netwerk weergegeven. De bindingsentropie tussen de twee delen A en B van het netwerk zal bepaald worden. Stel dat dit gebied een vierkant is met L tensoren aan iedere zijde (in figuur 15 is $L = 2$), dan zijn er $4L$ bindingsindices van het PEPS die over de grens van dat gebied lopen. De bindingsindices die over de grens lopen, worden aangeduid met $\tilde{\alpha} = \{\alpha_1, \dots, \alpha_{4L}\}$. De dimensie van deze nieuwe index is $d_{\tilde{\alpha}} = \prod_{i=1}^{4L} d_{\alpha_i} = \chi^{4L}$. De toestand kan geschreven worden als

$$(13) \quad |\Psi\rangle = \sum_{\tilde{\alpha}} \chi^{4L} |A(\tilde{\alpha})\rangle \otimes |B(\tilde{\alpha})\rangle.$$

De gereduceerde dichtheidsmatrix van B is gegeven als

$$(14) \quad \rho_B = \sum_{\tilde{\alpha}, \tilde{\alpha}'} X_{\tilde{\alpha}\tilde{\alpha}'} |B(\tilde{\alpha})\rangle \langle B(\tilde{\alpha}')|,$$

met $X_{\tilde{\alpha}\tilde{\alpha}'} = \langle A(\tilde{\alpha}') | A(\tilde{\alpha}) \rangle$. Deze gereduceerde dichtheidsmatrix heeft hoogstens een rang χ^{4L} . De bindingsentropie is gegeven als $S_{AB} = -\text{Tr}[\rho_B \log \rho_B]$, dit geeft maximaal

$$(15) \quad S(L) \leq 4L \log \chi,$$

iedere gebroken bindingsindex zal een factor $\log \chi$ bijdragen aan de bindingsentropie, er zijn $4L$ gebroken bindingsindices. Voor een MPS geldt bijgevolg

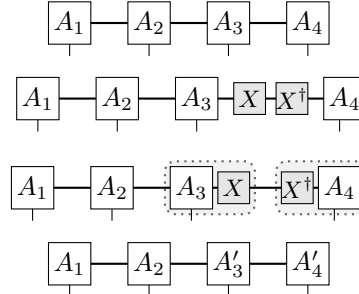
$$(16) \quad S \leq \log \chi.$$

De bindingsentropie is afhankelijk van de gekozen bindingsindex χ . Deze parameter kan vrij gekozen worden. De algoritmes om bijvoorbeeld de grondtoestand te bepalen voor de MPS zullen ervoor zorgen dat de bindingsindex groeit. Door een keuze om maar een bepaald aantal singuliere waarden te behouden in het SVD algoritme zal een maximale χ opgelegd kunnen worden. De nauwkeurigheid en de grootte van de Hilbertruimte kan met χ aangepast worden. Een te kleine χ zal ervoor zorgen dat het systeem niet correct te beschrijven valt, een te grote zal een Hilbertruimte onderzoeken die groter is dan noodzakelijk en een grotere kost hebben.

Als $\chi = 1$ genomen wordt, dan zal gelden dat $S = 0$. Dit is logisch, dit komt overeen met de gemiddeld-veld benadering.

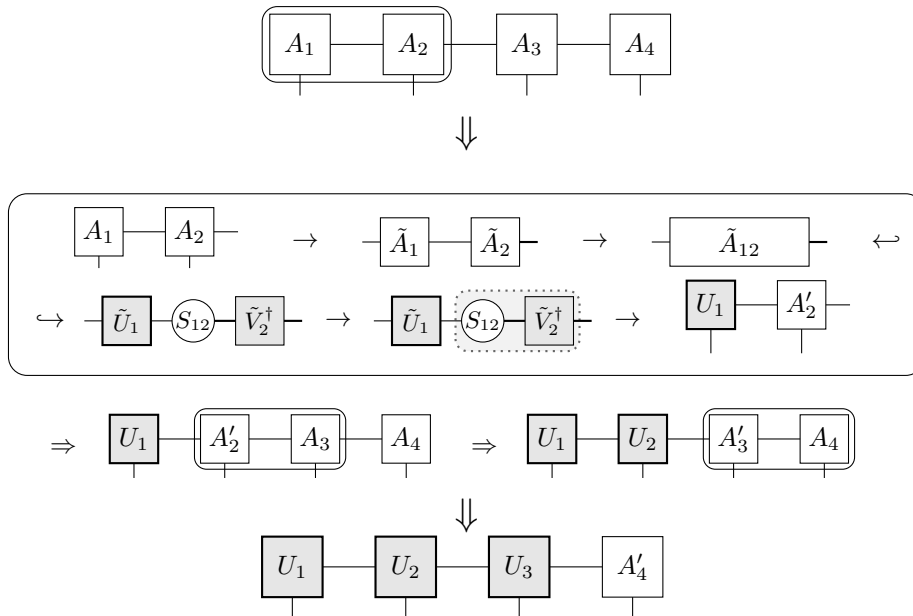
Bij algoritmes kunnen door voorwaarden op de nauwkeurigheid van de energie en de entropie bepalen welke singuliere waarden er behouden worden. Dit bepaalt tevens hoe groot χ zal worden. Een maximale waarde voor χ opleggen zou ervoor kunnen zorgen dat de gewenste nauwkeurigheid niet gehaald zal worden, maar wel dat het algoritme een *zo goed mogelijke* benadering maakt.

3.3 Canonieke vorm

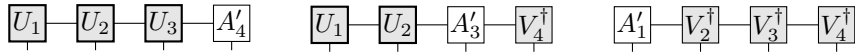


Figuur 16: Een MPS toestand is niet uniek bepaald, maar kan door vermenigvuldiging van unitaire matrices nieuwe tensoren geven die dezelfde toestand weergeven.

Een beschrijving van een toestand $|\Psi\rangle$ met een MPS is niet uniek bepaald. Er kan namelijk steeds met een unitaire matrix vermenigvuldigd worden, en zijn hermitisch toegevoegde, om vervolgens terug een MPS te verkrijgen die dezelfde toestand weergeeft, zoals getoond in figuur 16.



Figuur 17: Het algoritme om een netwerk om te zetten in een canonieke vorm. Hier wordt een links orthogonaal netwerk gemaakt.



Figuur 18: Verschillende vormen van Canonieke netwerken, (links) links orthogonaal netwerk, (midden) centrum van orthogonaliteit op A'_3 , (rechts) rechts orthogonaal netwerk.

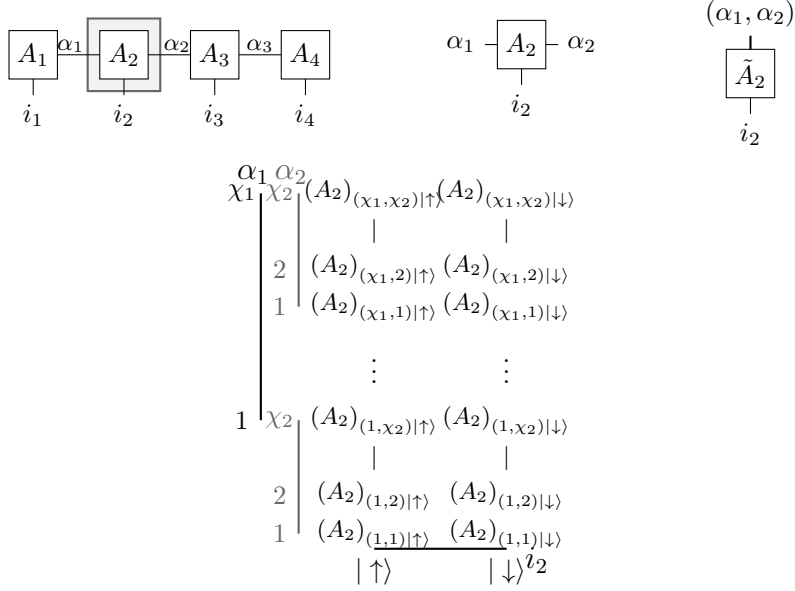
Deze vrijheid kan gebruikt worden om het netwerk te schrijven in unitaire matrices. Dit verloopt zoals weergegeven in figuur 17, te beginnen met tensoren aan de rand.

- Herorden de tensoren naar matrices.
- Neem de twee matrices samen tot één matrix
- Voer op deze nieuwe matrix een SVD uit.
- Laat de linkse (rechtse) unitaire matrix staan.
- Vermenigvuldig de matrix S , die de singuliere waarden bevat, met de rechter (linker) unitaire matrix.
- Zet de matrices terug om naar tensoren.
- Voer hetzelfde algoritme uit op de rechter (linker) unitaire tensor en de tensor daar rechts (links) naast.

Na dit algoritme doorlopen te hebben zal heel het netwerk bestaan uit unitaire tensoren en links of rechts de overblijvende tensor die niet unitair is. Het netwerk is dan respectievelijk rechts of links orthogonaal, zoals getoond in figuur 18. Ook kan vanaf beide randen de SVD uitgewerkt worden tot een bepaald punt, dit is dan het orthogonaal centrum.

De procedure van het canoniek maken van een MPS komt overeen met een Schmidt decompositie van de toestand $|\Psi\rangle$ in de verschillende subsystemen $|i_1\rangle \otimes \dots \otimes |i_M\rangle$ [24].

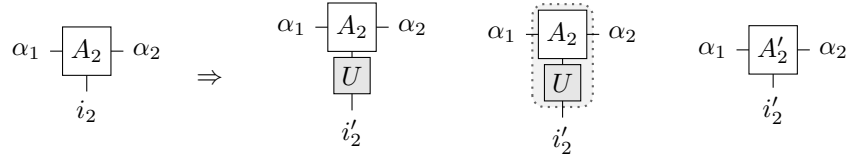
3.4 Externe indices



Figuur 19: De elementen van de externe indices i_r van de tensoren A_r komen overeen met de gekozen basis voor de deelsystemen. Het voorbeeld is gegeven in een spin-1/2 deelsysteem met basis $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$. De gemaakte stappen om de tensor A_2 te schrijven als een matrix zijn tevens getoond.

De externe indices van een MPS zijn gegeven in een gekozen basis. Deze basis komt overeen met de basis van het subsysteem, zoals in vergelijkingen (10) en (11). De gekozen basis van de subsystemen $|\varphi_r\rangle$ bepaalt waar elke waarde van de externe index mee overeenkomt.

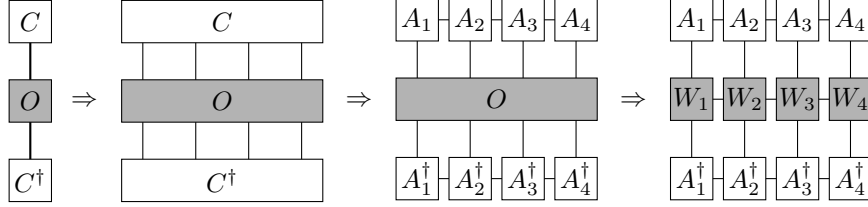
Als voorbeeld kan een spin-1/2 systeem genomen worden. De dimensie van dit systeem is $2 = p = \dim(i_r)$. Dit systeem kan uitgedrukt worden in de basis $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$. Hierbij zal het eerste deel van de index overeenkomen met de bijdrage voor $|\uparrow\rangle$, het tweede deel met $|\downarrow\rangle$, zoals getoond in figuur 19.



Figuur 20: De basis van de externe index i_r kan veranderd worden naar i'_r door te vermenigvuldigen met unitaire matrix U die overeenkomt met deze transformatie.

Er kan van basis veranderd worden door een unitaire transformatie van de toestanden $|\varphi\rangle : \{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ naar $|\varphi'\rangle : \{|\rightarrow\rangle, |\leftarrow\rangle\}$ met de matrix U , zoals getoond in figuur 20.

3.5 Matrix product operator



Figuur 21: De berekening van $\langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle$. Een MPS werd geconstrueerd door een toestand op te delen. Een MPO zal de tensor van de operator opdelen in kleinere delen.

De verwachtingswaarde van een operator is gegeven door $\langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle$, en kan uitgerekend worden als

(17)

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle &= \left(\sum_{i'_r, \alpha'_r} \left[(A_1^\dagger)_{i'_1 \alpha'_1} \cdots (A_M^\dagger)_{\alpha'_{M-1} i'_M} \langle \varphi_{i'_1} | \otimes \cdots \otimes \langle \varphi_{i'_M} | \right] \right) \hat{O} \\ &\quad \left(\sum_{i_r, \alpha_r} \left[(A_1)_{i_1 \alpha_1} \cdots (A_M)_{\alpha_{M-1} i_M} |\varphi_{i_1}\rangle \otimes \cdots \otimes |\varphi_{i_M}\rangle \right] \right) \\ (18) \quad &= \sum_{i_r, i'_r, \alpha_r, \alpha'_r} \left[(A_1^\dagger)_{i'_1 \alpha'_1} \cdots (A_M^\dagger)_{\alpha'_{M-1} i'_M} \right. \\ &\quad \left. O_{i_1, \dots, i_M, i'_1, \dots, i'_M} (A_1)_{i_1 \alpha_1} \cdots (A_M)_{\alpha_{M-1} i_M} \right], \end{aligned}$$

waarbij vergelijking (11) gebruikt werd om $|\Psi\rangle$ te herschrijven en de tensor $O_{i_1, \dots, i_M, i'_1, \dots, i'_M}$ de complexe getallen bevat die verkregen worden door

$$(19) \quad O_{i_1, \dots, i_M, i'_1, \dots, i'_M} = (\langle \varphi_{i'_1} | \otimes \cdots \otimes \langle \varphi_{i'_M} |) \hat{O} (|\varphi_{i_1}\rangle \otimes \cdots \otimes |\varphi_{i_M}\rangle).$$

De verkregen tensor is tevens getoond in figuur 21, waarbij eerste de operator in een willekeurige basis is geschreven. In deze willekeurige basis is er één index met de tensor C , afkomstig van de coëfficiënten van de *ket* $|\Psi\rangle$, en één index met de tensor C^\dagger , afkomstig van de coëfficiënten van de *bra* $\langle \Psi |$, beide met de gigantische dimensie p^M . In de volgende stap is de overgang gemaakt naar de M orthonormale basistoestanden $|\varphi_{i_r}\rangle$ van dimensie p , wat zorgt voor M externe indices van dimensie p tussen C en O , en tussen O en C^\dagger . De stap hierna is de vervanging van de tensor C naar de MPS met tensoren A_r , zoals gegeven in vergelijking (12).

De laatste stap splitst de tensor uit vergelijking (19) verder op. Deze opgesplitste tensor is een matrix product operator (MPO), een opgedeelde tensor, afkomstig van een operator, geschreven zoals een MPS. Iedere tensor W_r van deze MPO zal met een specifieke basistoestand $|\varphi_r\rangle$ koppelen. De termen in de MPO die afhangen van deze toestand zullen voorkomen in deze tensor W_r . Analooq aan de MPS, zullen bondindices tussen W_r en W_{r+1} aangeduid worden

met β_r .

Als voorbeeld kan de Hamiltoniaan voor de Ising keten [25] uitgewerkt worden met een MPO. Deze Hamiltoniaan is gegeven als

$$(20) \quad \hat{H}_I = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z - Jg \sum_i \hat{\sigma}_i^x,$$

waarbij $\hat{\sigma}_i^x$ en $\hat{\sigma}_i^z$ de Pauli matrices zijn en $\langle i,j \rangle$ naaste naburen aanduidt. In de basis $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ van $|\varphi_r\rangle$ zijn deze gegeven als

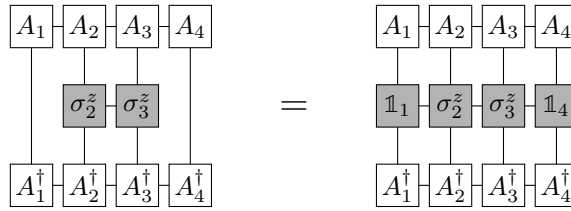
$$(21) \quad \hat{\sigma}^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

De operator van de Hamiltoniaan \hat{H}_I kan omgezet worden naar een tensor door vergelijking (19) toe te passen, en deze te evalueren in de gekozen basis voor de basistoestanden $|\varphi_r\rangle$. Dit geeft volgende tensor

$$(22) \quad (H_I)_{i_1, \dots, i_M, i'_1, \dots, i'_M} = -J \sum_{\langle l,k \rangle} (\sigma_l^z \sigma_k^z)_{(i'_l, i_k)} - Jg \sum_{l=1}^M (\sigma_l^x)_{(i'_l, i_l)},$$

met $(\sigma_l^z \sigma_k^z)_{(i'_l, i_k)} = \langle \varphi_{i'_l} | \hat{\sigma}_l^z \hat{\sigma}_k^z | \varphi_{i_k} \rangle$, bijvoorbeeld $(\sigma_l^z \hat{\sigma}_k^z)_{(\uparrow\downarrow)} = \langle \uparrow_l | \sigma_l^z \hat{\sigma}_k^z | \downarrow_k \rangle = -1$. Voor de gekozen basis van $|\varphi_r\rangle$ zijn deze coëfficiënten terug de Pauli matrices. De indices i_r en i'_r van de Hamiltoniaan uit vergelijking (22) kunnen weggelaten worden om de notatie simpeler te maken. De Hamiltoniaan is dan gegeven als

$$(23) \quad H_I = -J \sum_{\langle l,k \rangle} \sigma_l^z \sigma_k^z - Jg \sum_{l=1}^M \sigma_l^x$$



Figuur 22: De term $\sigma_2^z \sigma_3^z$ in diagramnotatie. Om de tensor over heel de MPS te laten lopen, kan er gebruik gemaakt worden van de eenheidsmatrix $\mathbb{1}$ op de posities waar de term niet met de MPS koppelt. De bindingsdimensie voor de MPO is hier 1.

Deze Hamiltoniaan kan expliciet uitgeschreven worden voor een systeem met $M = 4$. Dit geeft

$$(24) \quad H_I = -J (\sigma_1^z \sigma_2^z \mathbb{1}_3 \mathbb{1}_4 + \mathbb{1}_1 \sigma_2^z \sigma_3^z \mathbb{1}_4 + \mathbb{1}_1 \mathbb{1}_2 \sigma_3^z \sigma_4^z) \\ - gJ (\sigma_1^x \mathbb{1}_2 \mathbb{1}_3 \mathbb{1}_4 + \mathbb{1}_1 \sigma_2^x \mathbb{1}_3 \mathbb{1}_4 + \mathbb{1}_1 \mathbb{1}_2 \sigma_3^x \mathbb{1}_4 + \mathbb{1}_1 \mathbb{1}_2 \mathbb{1}_3 \sigma_4^x).$$

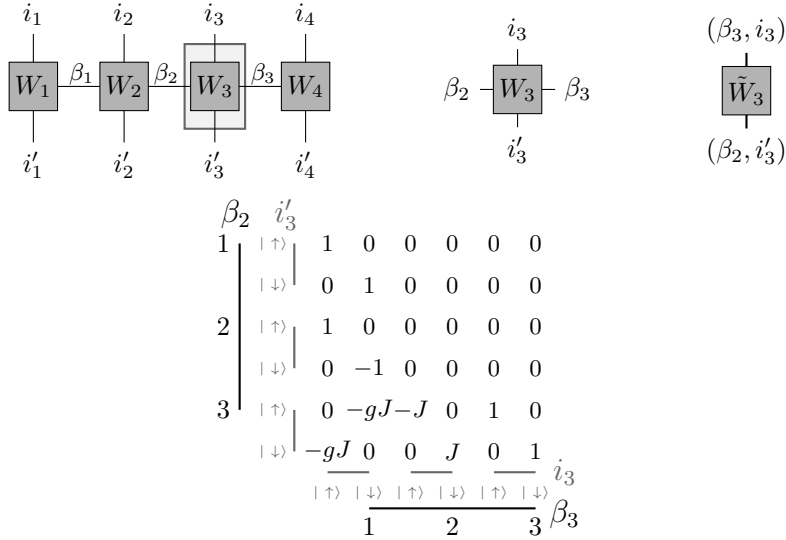
De tweede term van deze Hamiltoniaan, $\sigma_2^z \sigma_3^z$, is weergegeven in figuur 22. De extra eenheidsmatrices zijn toegevoegd om de term over heel de MPS te laten

lopen en stellen een *volle lijn* voor in het diagram. De bindingsdimensie van de MPO voor deze term is 1. De Hamiltoniaan uit vergelijking (24) kan herschreven worden met matrices als

$$(25) \quad H_I = \begin{pmatrix} -Jg\sigma_1^x & -J\sigma_1^z & \mathbb{1}_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbb{1}_2 & 0 & 0 \\ \sigma_2^z & 0 & 0 \\ -Jg\sigma_2^x & -J\sigma_2^z & \mathbb{1}_2 \end{pmatrix} \\ \times \begin{pmatrix} \mathbb{1}_3 & 0 & 0 \\ \sigma_3^z & 0 & 0 \\ -Jg\sigma_3^x & -J\sigma_3^z & \mathbb{1}_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbb{1}_4 \\ \sigma_4^z \\ g\sigma_4^x \end{pmatrix},$$

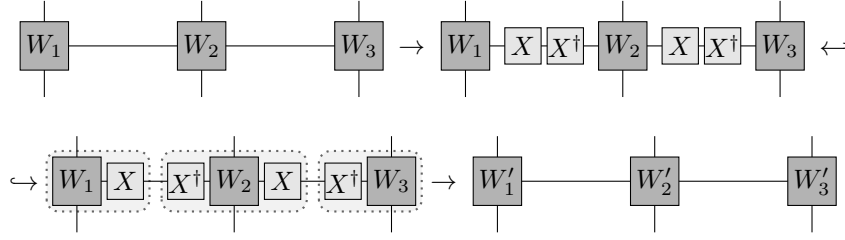
waarbij de verschillende tensoren van de MPO duidelijk zichtbaar worden. Deze zijn gegeven als

$$(26) \quad W_1 = \begin{pmatrix} -Jg\sigma_1^x & -J\sigma_1^z & \mathbb{1}_1 \end{pmatrix} \quad W_2 = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_2 & 0 & 0 \\ \sigma_2^z & 0 & 0 \\ -Jg\sigma_2^x & -J\sigma_2^z & \mathbb{1}_2 \end{pmatrix} \\ W_3 = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_3 & 0 & 0 \\ \sigma_3^z & 0 & 0 \\ -Jg\sigma_3^x & -J\sigma_3^z & \mathbb{1}_3 \end{pmatrix} \quad W_4 = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_4 \\ \sigma_4^z \\ g\sigma_4^x \end{pmatrix}.$$

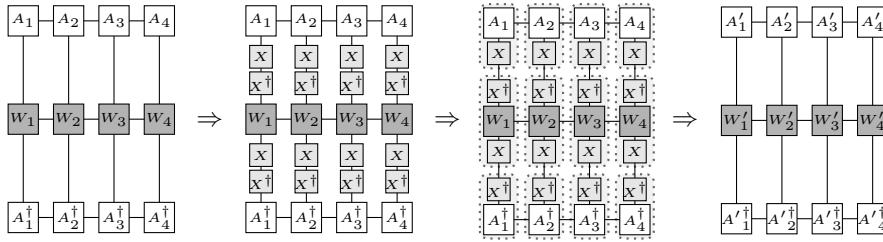


Figuur 23: De elementen van de tensor W_3 van de MPO volledig uitgeschreven. De gemaakte stappen om de tensor W_3 te schrijven als een matrix zijn tevens getoond.

Hierboven zijn de verschillende delen van de MPO uitgeschreven als *matrices*. Echter zijn dit geen matrices maar tensoren. In figuur 23 is de tensor W_3 volledig uitgeschreven. Hierbij is de gekozen basis voor de externe index goed te zien.



Figuur 24: De MPO kan zoals de MPS een transformatie ondergaan. Bij deze transformatie zal getracht worden de MPO te schrijven met reële diagonaalmatrices.



Figuur 25: De basis van de externe indices $|\varphi_r\rangle$ kan getransformeerd worden naar een andere basis $|\varphi'_r\rangle$ door gebruik te maken van de unitaire transformatiematrix U .

Net als bij de MPS zal de MPO tevens een vrijheid hebben door te vernieuwvuldigen met unitaire matrices, zoals getoond in figuur 24. Hierbij kunnen de unitaire matrices tussen de verschillende tensoren van de MPO geplaatst worden, of op de externe indices tussen de MPO en de MPS, zoals getoond in figuur 25. Door de unitaire transformatie op de externe indices te plaatsen kan er overgegaan worden van basistoestand $|\varphi_r\rangle \rightarrow |\varphi'_r\rangle$.

Een Hamiltoniaan met lange drachtsinteracties, zoals

$$(27) \quad H = J \sum_{i < j} \sigma_i^z \sigma_j^z$$

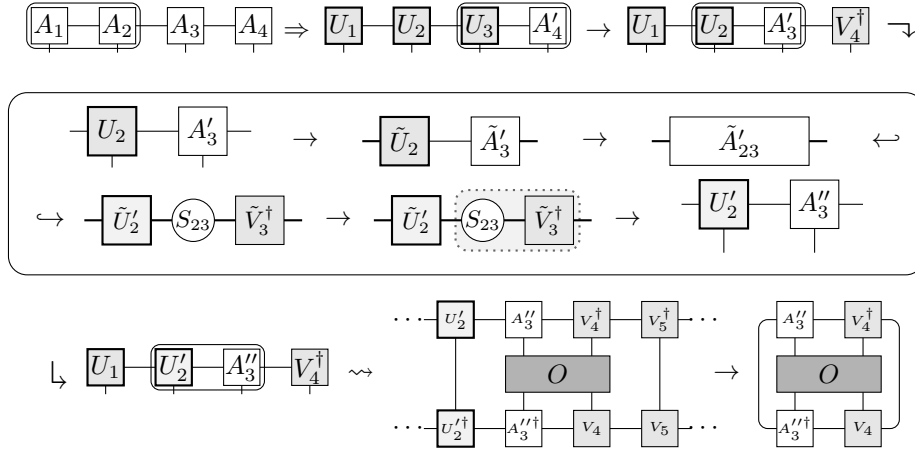
kan tevens omgezet worden naar een MPO door de tensor te schrijven als

$$(28) \quad W_r = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_r & 0 & 0 \\ \sigma_r^z & \mathbb{1}_r & 0 \\ 0 & J\sigma_r^z & \mathbb{1}_r \end{pmatrix}.$$

Er bestaan regels [26] om de transformaties binnen de MPO en de MPS uit te voeren zodat er enkel nog diagonale, reële matrices overblijven. Als deze optimale MPO vervolgens zal gebruikt worden in een algoritme om een MPS te laten convergeren naar de grondtoestand, en de MPS bevat in de begintoestand enkel reële waarden, zal het algoritme steeds verder werken met reële waarden. Werken met reële waarden in plaats van complexe waarden zorgt voor minder afrondingen en de diagonale MPO zorgt voor minder operaties, wat beide zorgt voor een verlaging van de *kost*. In dit werk zal *geen* gebruik gemaakt worden van deze techniek om het netwerk te optimaliseren.

3.6 Operatoren evalueren

Een canoniek netwerk bevat tensoren die afgeleid zijn van unitaire matrices. Hierdoor kan een verwachtingswaarde eenvoudig uitgerekend worden door het centrum van orthogonaliteit op de plaats te kiezen waar de operator inwerkt. De meeste tensoren zullen *tegen elkaar wegvallen* bij een berekening doordat deze unitaire tensoren gecontraheerd worden met hun hermitisch toegevoegde. Er moeten dan zeer weinig operaties tussen tensoren uitgevoerd worden.



Figuur 26: Vanuit een MPS kan een centrum van orthogonaliteit gemaakt worden door het netwerk eerst links orthogonaal te maken en vervolgens rechts orthogonaal. Door de matrices $S_{r-1,r}$ en tensoren V_r^\dagger op te slaan kan efficiënt de verwachtingswaarde van een operator berekend worden.

Om dit centrum van orthogonaliteit te vinden wordt de MPS eerst naar een links orthogonaal netwerk omgezet, zoals te zien in figuur 26. Daarna moet de MPS omgezet worden naar een rechts orthogonaal netwerk, waarbij de singuliere matrices $S_{r,r+1}$ op elke bindingsindex α_r opgeslagen wordt, samen met alle nieuwe verkregen tensoren V_r^\dagger .

Als een verwachtingswaarde van een operator gezocht wordt die inwerkt op toestanden $r, \dots, r+n$, moet de uiterst linkse tensor V_r^\dagger eerst een contractie ondergaan op de bindingsindex α_{r-1} met de matrix met singuliere waarden $S_{r-1,r}$ links van die tensor. De nieuwe tensor is A''_r . Voor de andere tensoren aan de operator worden de matrices uit het rechts orthogonaal netwerk gebruikt. A''_r kan beschouwd worden als het centrum van orthogonaliteit. De tensoren links van A''_r worden niet bepaald, $U_1 \cdots U_{r-1}$ zijn niet gekend. Er kan verondersteld worden dat deze tensoren U_r afkomstig zijn van unitaire matrices, zodat ze bij een contractie wegvallen.

In het DMRG algoritme zullen de matrices $S_{r,r+1}$ en tensoren V_r^\dagger reeds uitgerekend worden. Door de matrices met singuliere waarden op te slaan kan efficiënt de verwachtingswaarde berekend worden voor een rechts orthogonaal netwerk.

4 Algoritmes

Er bestaan verschillende soorten algoritmes die gebruik maken van een MPS. Ze kunnen opgedeeld worden in hun functionaliteit of hun doel. Een algoritme kan bijvoorbeeld als doel hebben de tijdsevolutie van een systeem te simuleren of de grondtoestand te vinden. Een variationele methode of een tijdsevolutie kan aan de basis liggen van dit algoritme.

Een variationeel algoritme om de grondtoestand te bepalen is de dichtheidsmatrix renormalisatie groep [7] (*Density Matrix Renormalization Group* - DMRG). Dit algoritme heeft een vrij goede convergentie naar de correcte grondtoestand, is snel en kan zeer nauwkeurige resultaten geven.

Een ander vaak gebruikt algoritme is tijdsevolutie blokdecimering [27] (*Time Evolving Block Decimation* - TEBD). Dit algoritme gebruikt de tijdsevolutie om een systeem te laten evolueren of een imaginaire tijdsevolutie om de grondtoestand te vinden. Dit algoritme heeft meer moeite om te convergeren naar resultaten en is trager dan DMRG. Echter laat TEBD wel toe meer algemenere netwerken te onderzoeken. Het heeft een Hamiltoniaan nodig die op te delen is in de Suzuki-Trotter decompositie en die dus enkel naaste nabuur interacties bevat. DMRG werkt hoofdzakelijk op een MPS maar maakt gebruik van een MPO.

De twee bovengenoemde algoritmes zijn reeds geïmplementeerd in TeNPy. Bij een berekening op een MPS wordt bij voorkeur gewerkt met een DMRG. Als dit niet mogelijk is, kan er gebruik gemaakt worden van TEBD.

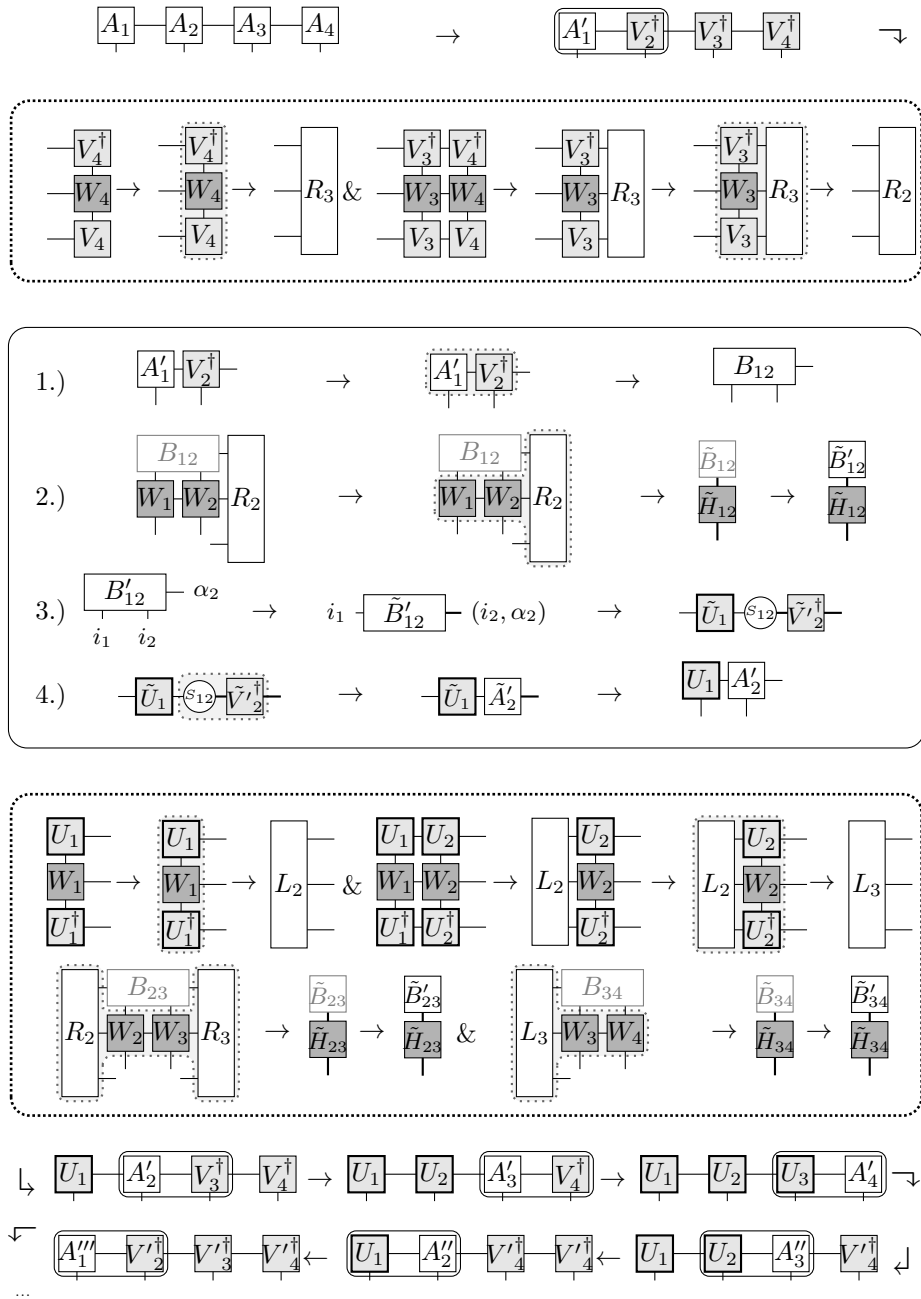
In dit werk zal hoofdzakelijk het DMRG algoritme gebruikt worden. Het TEBD algoritme convergeert moeilijk naar de grondtoestand, het heeft veel tijd nodig om een resultaat te krijgen en het resultaat zelf is minder nauwkeurig dan hetgeen verkregen met de DMRG.

4.1 DMRG

Het DMRG algoritme berekent iteratief de grondtoestand door herhaaldelijk de grondtoestand te berekenen voor twee tensoren van de MPO en vervolgens de dichtheidsmatrix van de berekende tensoren te gebruiken om het netwerk te vernieuwen. De bekomen waarden worden gebruikt in een volgende stap van het algoritme.

De naam *dichtheidsmatrix renormalisatie groep* komt enerzijds van het herhaaldelijk uitrekenen van de dichtheidsmatrix en anderzijds van het samennemen van twee tensoren om de grondtoestand van beide te berekenen met bijvoorbeeld het Lanczos algoritme. Het berekenen van deze gecombineerde toestand komt overeen met het formalisme van de renormalisatie groep.

Het algoritme werkt tevens als er maar één tensor genomen wordt om de grondtoestand te berekenen. Hierbij wordt er niet gewerkt met een renormalisatie groep. De resultaten zijn echter slechter. Bij het nemen van twee toestanden is het Lanczos algoritme trager, maar de renormalisatie groep compenseert dit verlies door sneller te convergeren naar het correcte resultaat.



Figuur 27: Het DMRG algoritme schematisch weergegeven. De gestippelde kaders bevatten stappen die voor en na een stap uitgevoerd worden. De tensoren L_r en R_r worden steeds opgeslagen om later te gebruiken. Er wordt begonnen van een rechts orthogonaal netwerk.

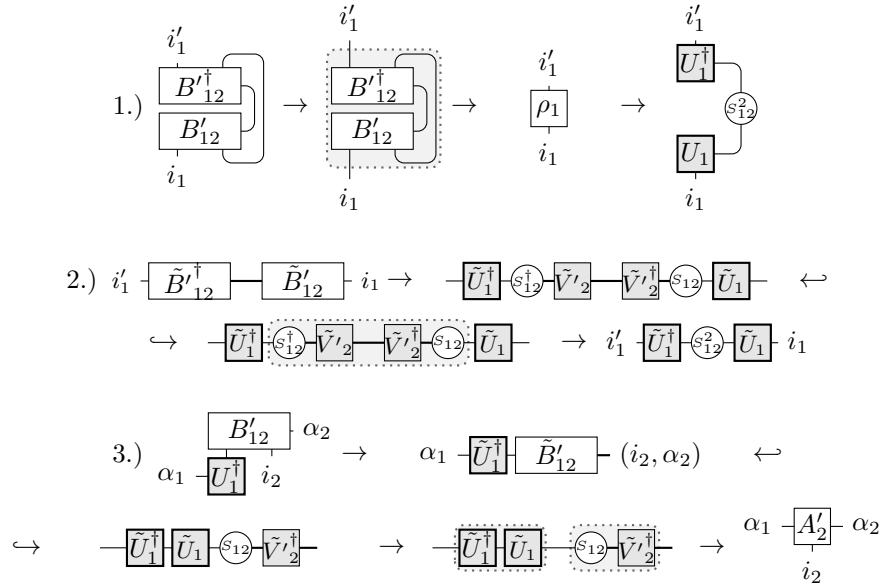
Het algoritme begint met een MPS met willekeurige waarden in de tensoren en een Hamiltoniaan in een MPO vorm. In figuur 27, aangepast uit [19] en [28], staan de stappen van het algoritme weergegeven in diagram notatie. Deze

stappen zijn:

1. Bereken het rechts orthogonale netwerk (in figuur: lengte $L = 4$). Het algoritme werkt tevens wanneer het start van een links orthogonaal netwerk. Implementaties van DMRG werken veelal met een rechts orthogonaal netwerk.
2. Bereken de rechter omgeving van de laatste tensor van de MPS $R_{L-1} = R_3$ door de contractie te nemen tussen V_4^\dagger , W_4 en V_4 langs externe indices i_4 en i'_4 . Sla deze tensor op voor later.
3. Bereken de rechter omgeving van de andere tensoren van de MPS, gebruik makende van de voorgaande berekende rechter omgevingen, door de contractie te nemen tussen V_r^\dagger , W_r , V_r en R_r langs externe indices i_r , i'_r en interne indices α_r , β_r en α'_r . Bereken al de rechter omgevingen tot aan R_2 en sla deze tensoren op voor later.
4. Neem de contractie van de eerste twee tensoren A'_1 en V_2^\dagger langs index α_1 en noem de nieuwe tensor B_{12} .
5. Bereken de effectieve Hamiltoniaan die inwerkt op de tensor B_{12} door een contractie te nemen met W_1 en W_2 van de MPO en R_2 langs indices β_1 en β_2 . Noem deze nieuwe tensor H_{12} .
6. Bereken iteratief de eigentoestand van H_{12} met Lanczos. Gebruik als gok de tensor B_{12} . Noem de verkregen nieuwe eigentoestand B'_{12} .
7. Zet de verkregen tensor om in een matrix met de indices van de twee originele tensoren aan de verschillende zijden van de matrix. Noem deze matrix \tilde{B}'_{12} .
8. Voer SVD uit op deze nieuwe matrix.
9. Neem enkel het aantal χ_{max} grootste waarden van S_{12} . Er kan tevens opgelegd worden dat deze waarden een minimale grootte moeten hebben.
10. Vermenigvuldig de ingekorte matrix met singuliere waarden S_{12} met de matrix \tilde{V}'_2 met de indices van de tweede tensor. Noem deze nieuwe matrix \tilde{A}'_2 .
11. Zet de matrices terug om in tensoren U_1 en A'_2 . Deze tensoren vervangen de originele tensor A'_1 en V_2^\dagger .
12. Bereken de linker omgeving L_2 door de contractie te nemen tussen U_1 , W_1 en U_1^\dagger langs externe indices i_1 en i'_1 .
13. Gebruik regels 4 tot 12 om het nieuwe paar tensoren U_2 en A'_3 uit te rekenen, het paar rechts van de vorige stap. De linker omgeving L_3 wordt tevens bepaald. Bij de berekening moet de effectieve Hamiltoniaan H_{23} gebruikt worden, verkregen door de contractie van R_2 , W_2 , W_3 en R_3 langs de indices β_1 , β_2 en β_3 .
14. Gebruik regels 4 tot 12 om alle andere rechter paren tensoren (U_r, A'_{r+1}) en linker omgevingen L_{r+1} uit te rekenen, tot aan tensoren U_{L-2} en A'_{L-1} (niet van toepassing op figuur 27).

15. Bereken het laatste paar U_3 en A'_4 en linker omgeving L_3 door de effectieve Hamiltoniaan H_{34} te gebruiken, verkregen door de contractie van R_3 , W_3 en W_4 langs de indices β_2 en β_3 .
16. Op hetzelfde laatste paar U_3 en A'_4 , gebruik de matrices van de SVD uit de vorige stap, \tilde{U}_3 , S_{34} en $\tilde{V}'_4{}^\dagger$ om de matrix \tilde{A}'_3 uit te rekenen door de contractie te nemen tussen \tilde{U}_3 en S_{34} . Zet de matrices \tilde{A}'_3 en $\tilde{V}'_4{}^\dagger$ om tot tensoren en gebruik de nieuwe tensoren om de nieuwe rechter omgeving R'_3 uit te rekenen.
17. Neem het paar links van de vorige stap en bereken gebruikmakend van de regels 4 tot 12 het nieuwe paar tensoren A''_r en $V''_{r+1}{}^\dagger$. Maak hiervoor gebruik van de nieuwe effectieve Hamiltoniaan $H_{r,r+1}$ die de nieuwe rechter omgeving R_{r+1} gebruikt. Gebruik de resultaten om de nieuwe rechter omgeving R_r te berekenen.
18. Neem het laatste linkse paar tensoren (U_1, A'_1) en bereken $(A''_1, V''_2{}^\dagger)$ door gebruik te maken van de nieuwe effectieve Hamiltoniaan H_{12} .
19. Een volledige *sweep* van het netwerk is gebeurd. Bereken de energie door de contractie van de MPS met de MPO van de Hamiltoniaan.
20. (vanaf de tweede *sweep*) Bereken de relatieve fout op de energie $E_r = \frac{E_i - E_{i-1}}{E_i}$. Indien de relatieve fout te groot is, $|E_r| > E_{r,max}$, gebruik dan de voorgaande stappen beginnende van 4 om terug een *sweep* over de MPS uit te voeren.
21. De MPS stelt nu de grondtoestand voor van de Hamiltoniaan, met een relatieve nauwkeurigheid op de grondtoestandsenergie $E_{r,max}$.

Afhankelijk van de complexiteit van de Hamiltoniaan, de lengte van de MPS, en de vereiste nauwkeurigheid zal de berekening een duur hebben van een minuut, een uur of zelfs langer. De *kost* voor een berekening schaal ongeveer met $O(\chi^3)$. Een nauwkeurigere energie zal een grotere waarde χ nodig hebben.



Figuur 28: In het algoritme voor de DMRG kan de SVD vervangen worden door de eigenwaarden en eigentoestanden te bepalen van de dichtheidsmatrix ρ_2 . De tensor A'_2 kan verkregen worden door een contractie van de tensoren B'_{12} en U_1^\dagger of door de eigenwaarden en eigentoestanden van ρ_2 te bepalen.

De SVD uit stap 8 kan vervangen worden door dichtheidsmatrices, zoals weergegeven in figuur 28. Deze methode wordt echter minder gebruikt dan SVD, het vereist meer *dure* contracties dan een SVD.

Het algoritme kan geëxciteerde toestanden uitrekenen door te zoeken naar toestanden die loodrecht op de grondtoestand staan. Hiervoor moet eerst de grondtoestand berekend worden, en kan deze gebruikt worden om steeds loodrecht op de grondtoestand de geëxciteerde toestand met laagste energie te zoeken.

Op de website van TeNPy⁴ is een voorbeeldprogramma gegeven dat een DMRG toepast op een Ising keten. Dit programma is een voorbeeldprogramma van TeNPy. Deze code gebruikt *niet* de DMRG *engine* van het TeNPy softwarepakket, maar toont hoe een DMRG geïmplementeerd kan worden voor een specifiek probleem waarbij het aantal gebruikte functies beperkt wordt.

⁴<https://tenpy.readthedocs.io/en/latest/intro/toycodes.html>

5 BCS-theorie

Deze sectie volgt hoofdzakelijk de cursus van J. Tempere [29][30].

5.1 BCS-Hamiltoniaan

Barden, Cooper en Schrieffer zochten met het BCS-model naar een minimalistisch systeem dat nog steeds supergeleiding bevat. Hiervoor bestudeerden ze de eenvoudigste Hamiltoniaan die aanleiding geeft voor het vormen van Cooperparen. Ze wisten dat het isotoopeffect wees naar een sterke elektron-fonon interactie. Hierdoor zochten ze naar de elektronen die de sterkste interactie ondervonden.

$\mathbf{k} \in \mathcal{D}$ Een groot deel van de elektronen in een supergeleider kan geen fonon uitwisselen omdat ze te diep in de Fermi zee liggen en geen onbezette toestanden hebben om naar te verstrooien. Enkel elektronen in de energieband $\mathcal{D} = [E_F - \hbar\omega_D, E_F + \hbar\omega_D]$ kunnen een fonon verstrooien met een energie $\hbar\omega_D$. De Fermi energie is van de orde $10eV$ en de Debye energie $\hbar\omega_D$ van de orde $10 - 100meV$, dus $\hbar\omega_D \ll E_F$

$\mathbf{k}' = -\mathbf{k}$ Elektronen met tegengestelde impuls zullen paren vormen met de laagste kinetische energie, want $\mathbf{k}' = -\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + \mathbf{k}' = 0$.

$\sigma' = -\sigma$ De interactie zal het sterkst zijn voor elektronen met tegengestelde spin. Volgens het Pauli exclusie principe kunnen twee elektronen met dezelfde spin zich niet op dezelfde positie bevinden. Elektronen met tegengestelde spin zullen éénelektrongolffuncties hebben die meer overlappen en bijgevolg een sterkere bindingsenergie hebben.

Bardeen, Cooper en Schieffer stelden uit deze punten de volgende Hamiltoniaan voor:

$$(29) \quad \hat{H}_{BCS} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} - V \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{D}} \sum_{\mathbf{k}' \in \mathcal{D}} \hat{c}_{\mathbf{k}',\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}',\downarrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow},$$

waarbij de Hamiltoniaan in de tweede kwantisatie is geschreven, met $\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}$ de fermionische creatie operator en $\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger$ de fermionische annihilatie operator die voldoen aan $\{\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger, \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma'}\} = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta_{\sigma\sigma'}$. De creatie operator maakt een elektron met spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$ als vlakke golf met een golfvector \mathbf{k} .

De eerste term van de Hamiltoniaan is de energie van een niet-interagerend Fermi gas met $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar k^2}{2m} - \mu$ de ééndeeltjes energie van een vlakke golf met impuls $\hbar\mathbf{k}$, gemeten van het Fermi niveau, $\mu = E_F$. Met de chemische potentiaal kan het aantal deeltjes in het systeem vastgelegd worden. De tweede term is de interactieterm, waarbij V de interactiesterkte is voor het systeem.

In het BCS model interageren enkel de elektronen met even grote maar tegengestelde impuls, tegengestelde spin en met $\mathbf{k} \in \mathcal{D}$, met steeds dezelfde interactiesterkte V . Deze simplificatie zorgt ervoor dat het BCS-model makkelijk uit te rekenen is met gemiddeld-veld benadering.

5.2 BCS-Grondtoestand

De BCS-Hamiltoniaan heeft een grondtoestand die een lagere energie heeft dan de toestand van een gevulde Fermibol, de Fermibol is *niet* de grondtoestand. BCS vonden dat een variationele golffunctie, die een superpositie toelaat, de grondtoestand van het systeem is. Hiervoor stelden ze de volgende golffunctie voor

$$(30) \quad |\Psi_{BCS}\rangle = \prod_{\mathbf{k}} \left(u_{\mathbf{k}}^* + v_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle,$$

met $|0\rangle$ het elektronenvacuum. De variationele parameters $u_{\mathbf{k}}$ en $v_{\mathbf{k}}$ moeten aan de volgende relatie voldoen

$$(31) \quad |u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1.$$

Voor elke waarde \mathbf{k} stelde de tweedeeltjesgolffunctie

$$(32) \quad \left(u_{\mathbf{k}}^* + v_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle$$

een kwantum superpositie voor van een toestand waar het paar $\{(\mathbf{k}, \uparrow); (-\mathbf{k}, \downarrow)\}$ bezet is met elektronen en het paar niet bezet is. Door deze superpositie kunnen *anomale gemiddelden* zoals $\langle \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \rangle$ een waarde geven verschillend van nul.

5.3 Exact oplosbaar systeem

De BCS-Hamiltoniaan kan exact opgelost worden [31] onder de veronderstelling dat de BCS-limiet geldt, $\hbar\omega_D \ll E_F$. Het Debye venster \mathcal{D} laat in de limiet toestanden toe op het Fermi-niveau, $|\mathbf{k}| = k_F$. De BCS-Hamiltoniaan uit vergelijking (29) kan geschreven worden als

$$(33) \quad \hat{H} = -V \sum_{|\mathbf{k}|, |\mathbf{k}'|=k_F} \hat{c}_{\mathbf{k}',\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}',\downarrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow},$$

waarbij de Fermi energie als nulpunt van de energie gekozen werd, $E_F = 0 = \mu$.

Het aantal éénelektrontoestanden met energie in het smalle Debye-venster is gelijk aan $2\hbar\omega_D D(E_F) = 2\hbar\omega_D \frac{2}{3} \frac{N_e}{E_F} = 2M$, met $D(E_F)$ de toestandsdichtheid aan het Fermi-niveau, N_e het totaal aantal elektronen en M het aantal elektronenparen. Een toestand $|n_1, n_2, \dots, n_{2M}\rangle$, waarbij $n_i = \{0, 1\}$, stelt een algemene configuratie van dit systeem voor. Een andere indexering geeft deze toestand eenvoudiger weer. Nummer de éénelektrontoestanden met een index $i \in [1, M]$, welk paar het elektron toe behoort, en een index σ , de spin van de elektrontoestand in dat paar. De herordening geeft dat

$$(34) \quad |n_1, n_2, \dots, n_{2M}\rangle \rightarrow |1 \uparrow, 1 \downarrow; 2 \uparrow, 2 \downarrow; \dots; M \uparrow, M \downarrow\rangle.$$

De Hamiltoniaan kan in een nieuwe vorm geschreven worden met de ingevoerde herordening

$$(35) \quad \hat{H} = -V \sum_{i,j(\neq i)=1}^M \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow},$$

hierbij is de zelfinteractie niet meegenomen, de interactiesterkte voor de verstrooiing van een Cooperpaar naar zichzelf is gelijk aan nul.

5.4 gemiddeld-veld Hamiltoniaan

De gemiddeld-veld methode laat toe de interactieterm van de Hamiltoniaan uit vergelijking (35) te herschrijven als het product van twee operatoren op dezelfde positie i in plaats van het product van vier operatoren op verschillende posities i en j . De gemiddeld-veld benadering neemt het zelfconsistent gemiddeld-veld Δ , de som van anomale gemiddelden

$$(36) \quad \Delta = -V \sum_{j=1}^M \langle \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow} \rangle,$$

wat toelaat de Hamiltoniaan uit vergelijking (35) te herschrijven naar

$$(37) \quad \hat{H}_{GV} = -V \sum_{i,j=1}^M \left[\Delta^* \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow} + \hat{c}_{j,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger \Delta \right] + \frac{|\Delta|^2}{V}.$$

Deze Hamiltoniaan bevat tevens de zelfinteractieterm, waar de Hamiltoniaan uit vergelijking (35) deze niet bevat. Er moet in vergelijking (35) een zelfinteractieterm ($i = j$) toegevoegd worden om een vergelijking met de gemiddeld-veld Hamiltoniaan te kunnen maken.

6 Resultaten

Deze sectie bevat de toepassing van de Hamiltoniaan gegeven in vergelijking (35) op een MPS. Door middel van DMRG zal de grondtoestand van dit systeem onderzocht worden. Hierna volgt een discussie over de verkregen resultaten.

6.1 Implementatie

Met de TeNPy bibliotheek [19] werd een programma geschreven dat de Hamiltoniaan uit vergelijking (35) omzet naar een MPO en met behulp van DMRG de grondtoestand kan vinden.

De geprogrammeerde MPS heeft als deelsysteem een elektronenpaar dat kan bezet worden met één spin-op en één spin-neer elektron, het biedt plaats voor twee fermionische deeltjes. De *plaats* r stelt de locatie van het deelsysteem in de MPS voor. Het deelsysteem wordt beschreven in volgende basis

$$(38) \quad |\varphi_r\rangle = \{|00\rangle_r, \quad |\uparrow 0\rangle_r, \quad |0 \downarrow\rangle_r, \quad |\uparrow\downarrow\rangle_r\},$$

de eerste toestand komt overeen met *het vacuüm*, een toestand zonder elektronen in het deelsysteem op *plaats* r in de MPS keten, de tweede en derde toestand met slechts één elektron in respectievelijk spin-op $|\uparrow 0\rangle$ en spin-neer $|0 \downarrow\rangle$, de laatste toestand is bezet door een elektronenpaar met één spin-op en één spin-neer $|\uparrow\downarrow\rangle$.

Met behulp van deze basis en samen met vergelijking (19) kan de operator $\hat{c}_{\uparrow,r}$ die inwerkt op plaats r van de MPS keten uitgedrukt worden als

$$(39) \quad (c_{\uparrow,r})_{i_1,\dots,i_M,i'_1,\dots,i'_M} = (\langle\varphi_{i'_1}| \otimes \dots \otimes \langle\varphi_{i'_r}| \otimes \dots \otimes \langle\varphi_{i'_M}|) \hat{c}_{\uparrow,r} \times (|\varphi_{i_1}\rangle \otimes \dots \otimes |\varphi_{i_r}\rangle \otimes \dots \otimes |\varphi_{i_M}\rangle)$$

$$(40) \quad = (\langle\varphi_{i'_1}|\hat{\mathbb{1}}_1|\varphi_{i_1}\rangle) \dots (\langle\varphi_{i'_r}|\hat{c}_{\uparrow,r}|\varphi_{i_r}\rangle) \times (\langle\varphi_{i'_M}|\hat{\mathbb{1}}_M|\varphi_{i_M}\rangle)$$

$$(41) \quad (c_{\uparrow,r})_{i_r,i'_r} = \langle\varphi_{i'_r}|\hat{c}_{\uparrow,r}|\varphi_{i_r}\rangle$$

$$(42) \quad = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

waarbij in vergelijking (40) de operator uitgebreid werd met eenheidsoperatoren op de andere plaatsen zodat de operator op de hele MPS kan inwerken. In vergelijking (41) zijn de indices op de andere plaatsen weggelaten, deze geven een eenheidsmatrix. Analoog kunnen de operatoren $\hat{c}_{\downarrow,r}$, $\hat{c}_{\uparrow,r}^\dagger$ en $\hat{c}_{\downarrow,r}^\dagger$ bepaald worden. Met deze operatoren kunnen ook de bezettingsoperatoren $\hat{n}_\uparrow = \hat{c}_\uparrow^\dagger \hat{c}_\uparrow$ en $\hat{n}_\downarrow = \hat{c}_\downarrow^\dagger \hat{c}_\downarrow$ uitgewerkt worden. Hierbij moet rekening gehouden worden met het fermionische karakter van de operatoren, een omwisseling van twee operatoren geeft een minteken $\hat{c}_\uparrow \hat{c}_\downarrow = -\hat{c}_\downarrow \hat{c}_\uparrow$.

De geprogrammeerde Hamiltoniaan is gegeven als

$$(43) \quad H = \sum_{i=1}^M [(E_{\uparrow i} - \mu) n_{\uparrow i} + (E_{\downarrow i} - \mu) n_{\downarrow i}]$$

$$- V \sum_{1=i < j}^M \left[c_{\uparrow i}^{\dagger} c_{\downarrow i}^{\dagger} c_{\downarrow j} c_{\uparrow j} + c_{\uparrow i} c_{\downarrow i} c_{\downarrow j}^{\dagger} c_{\uparrow j}^{\dagger} \right] - qV \sum_{i=1}^M \left[c_{\uparrow i}^{\dagger} c_{\downarrow i}^{\dagger} c_{\downarrow i} c_{\uparrow i} \right]$$

met: $\begin{cases} q = 0 & \text{zonder zelfinteractie} \\ q = 1 & \text{mét zelfinteractie,} \end{cases}$

waarbij $E_{\sigma i}$ de kinetische energie is voor het elektron met spin σ in het paar op plaats $r = i$ en μ de chemische potentiaal. Bij deze Hamiltoniaan is tevens een extra term toegevoegd die de zelfinteractie kan beschrijven.

De interactieterm van de Hamiltoniaan heeft twee termen waarbij de operatoren $\hat{c}_{\sigma, i}$ van volgorde veranderd zijn. Dit zorgt voor een betere convergentie naar de toestand. In de zelfinteractieterm kan de volgorde niet veranderd worden, niet alle operatoren *commuteren* met elkaar.

6.2 Berekening

Met de Hamiltoniaan uit vergelijking (43) kan een systeem beschreven worden dat enkel interacties bevat. Hierbij zijn er geen bijdragen van de kinetische energie ($E_{\uparrow, i} = 0 = E_{\downarrow, i}$) noch de chemische potentiaal ($\mu = 0$) en is er geen zelfinteractie ($q = 0$).

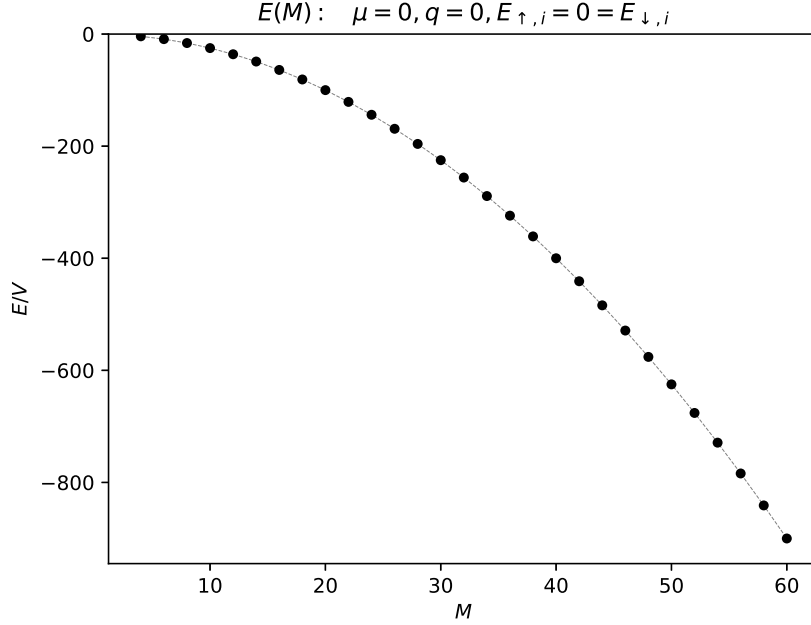
Bij het bepalen van de grondtoestand kan de lengte van de MPS keten M , de nauwkeurigheid op de energie $E_{r, max}$ en de maximale bindingsdimensie χ_{max} veranderd worden. De berekening zal eerst uitgevoerd worden voor MPS ketens met een even lengte M . Dit resultaat kan vergeleken worden met het exacte resultaat uit het canonisch ensemble [31].

De nauwkeurigheid op de energie $E_{r, max}$ kan invloed hebben op de convergentie van het resultaat. Deze werd relatief klein gekozen, $E_{r, max} = 10^{-5}$, en de maximale bindingsdimensie relatief groot, $\chi_{max} = 200$. Het systeem zal steeds convergeren waarbij het steeds een kleine bindingsdimensie χ heeft. Deze lage bindingsdimensie χ laat toe relatief snel resultaten te berekenen, ook voor grote ketens. In de berekening zal de bindingsdimensie χ niet over de gestelde grens van $\chi_{max} = 200$ gaan.

Het gebruikte programma TeNPy en het algoritme DMRG hebben geen limiet voor de grootte van de MPS keten M . Voor een langere MPS keten zal de berekening langer duren en zal een groter geheugen van de computer nodig zijn om de berekening uit te voeren (meestal tussen 100MB en 1GB). Bij het berekenen van ketens langer dan $M \gtrsim 60$ wordt het programma onstabiel en *crasht* het regelmatig.

6.3 Energie

Om de energie van de grondtoestand te bepalen werd een netwerk gecontraheerd analoog als het laatste netwerk uit figuur 21. De overblijvende scalair na het contraheren van alle tensoren is de energie van de grondtoestand.



Figuur 29: De energie van de grondtoestand voor het systeem met de Hamiltoniaan uit vergelijking (43) in functie van de even lengte van de MPS keten M . Hierbij er geen zelfinteractie, $\mu = 0$, geen kinetische energie en $E_{r,max} = 10^{-5}$.

In figuur 29 is de energie van de grondtoestand gegeven in functie van de even lengte van de MPS keten M . De energie gevonden door de MPS in dit systeem komt overeen met

$$(44) \quad E = -\frac{V}{4}M^2$$

6.4 Aantal elektronenparen

Het aantal elektronen kan gevonden worden door de teloperator $\hat{N} = \sum_{i=1}^M \hat{n}_i$ te gebruiken. Daarnaast kan het aantal elektronenparen bepaald worden door de operator $\hat{N}_P = \sum_{i=1}^M \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow}$ te laten inwerken op de toestand. We vinden met de MPS dat het aantal elektronen N en het aantal elektronenparen N_P in

een keten van even lengte M gegeven wordt door:

$$(45) \quad N = M,$$

$$(46) \quad N_P = \frac{M}{2}.$$

De resultaten voor het aantal paren N_P en de energie E werden bepaald met een hoge precisie voor de onderzochte MPS ketens met een even lengte M . Deze resultaten komen overeen met hetgeen gevonden in [31]. Het systeem bevindt zich in de supergeleidende toestand.

6.5 Fluctuatie aantal elektronenparen

De fluctuaties van het aantal elektronen ΔN kan bepaald worden door

$$(47) \quad \Delta N = \sqrt{\langle \hat{N}^2 \rangle - \langle \hat{N} \rangle^2}$$

$$(48) \quad = \sqrt{\langle \left(\sum_i \hat{n}_i \right) \left(\sum_j \hat{n}_j \right) \rangle - \langle \left(\sum_i \hat{n}_i \right) \rangle^2}$$

$$(49) \quad = \sqrt{\sum_{i,j} \langle \hat{n}_i \hat{n}_j \rangle - N^2}$$

$$(50) \quad = \sqrt{\sum_{i,j} C_{ij} - N^2},$$

door $C_{i,j} = \langle \hat{n}_i \hat{n}_j \rangle$ te bepalen kan de fluctuatie ΔN berekend worden.

Analoog aan vergelijking (47) kan de fluctuatie op het aantal elektronenparen ΔN_P bepaald worden door

$$(51) \quad \Delta N = \sqrt{\sum_{i,j} \tilde{C}_{ij} - N_P^2},$$

met $\tilde{C}_{i,j} = \langle \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow} \hat{c}_{j,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow} \rangle$.

We vinden met ons numeriek algoritme dat binnen de gebruikte precisie de fluctuatie op het aantal elektronen ΔN en het aantal elektronenparen ΔN_P nul is:

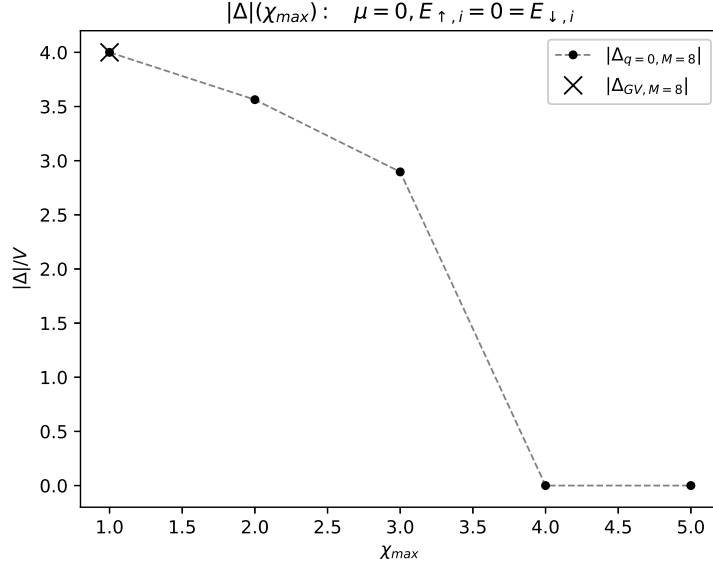
$$(52) \quad \Delta N = 0,$$

$$(53) \quad \Delta N_P = 0.$$

Het behoud van het aantal elektronen N en het aantal elektronenparen N_P betekent dat het systeem zich in het canonisch ensemble bevindt.

De BCS gemiddeld-veld golf functie is geen eigenfunctie van de teloperator, bijgevolg zal het aantal deeltjes niet precies bepaald zijn in de BCS theorie. De relatieve fluctuatie op het aantal deeltjes neemt wel af als functie van N , maar wordt nooit nul.

6.6 Anomale gemiddelde



Figuur 30: het anomale gemiddelde $|\Delta|$ voor een MPS keten met lengte $M = 8$ in functie van de maximale bindingsdimensie χ_{max} . Er is tevens het BCS gemiddeld-veld resultaat getoond.

De maximale bindingsdimensie χ_{max} kan veranderd worden om te kijken hoe de MPS verandert als er minder correlaties mogelijk zijn. Het systeem met een $\chi_{max} = 1$ bindingsdimensie komt overeen met het maken van een gemiddeld-veld benadering.

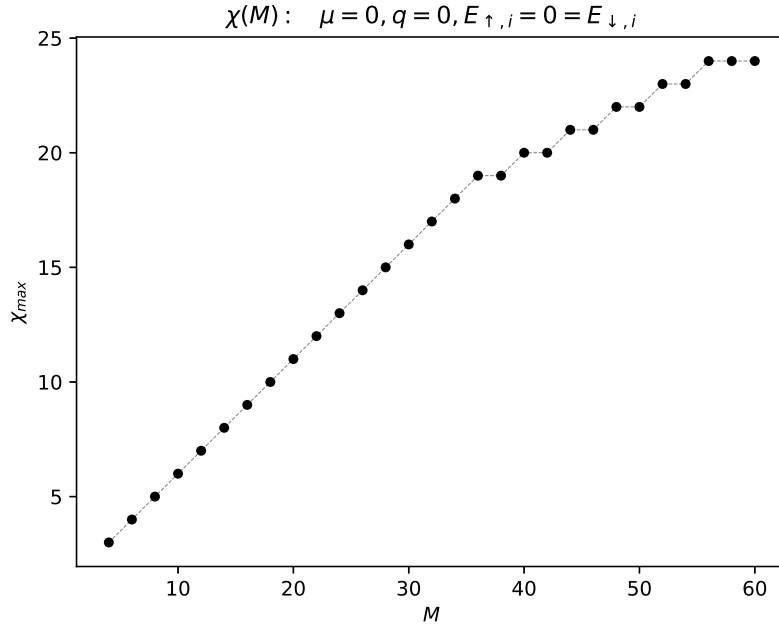
Het anomale gemiddelde Δ uit vergelijking (36) werd berekend voor het systeem waarbij de maximale bindingsdimensie χ_{max} toeneemt van een minimale waarde $\chi_{max} = 1$ tot een optimale waarde. In figuur 30 is te zien dat het anomale gemiddelde $|\Delta|$ voor $\chi_{max} = 1$ overeenkomt met de BCS gemiddeld-veld benadering.

Bij het toenemen van de maximale bindingsdimensie χ_{max} zal dit anomale gemiddelde $|\Delta|$ afnemen in waarde, en nul worden wanneer het systeem een optimale maximale bindingsdimensie kan aannemen. Het afnemen van het anomale gemiddelde toont aan dat de correcte veeldeeltjes grondtoestand voor het canonisch ensemble bereikt wordt. Immers, wanneer de grondtoestand een eigenfunctie is van de teloperator, heeft die een vast aantal deeltjes en moet de anomale verwachtingswaarde verdwijnen. Het is enkel omdat de BCS golf functie geen eigenfunctie van N is, dat de anomale verwachtingswaarde verschilt van nul. Aangezien de volledige Hamiltoniaan (voor het maken van de gemiddeld-veld benadering) commuteert met N , kan de BCS golf functie de grondtoestand enkel benaderen maar nooit bereiken. Het wegvallen van de anomale verwachtingswaarde in de echte grondtoestand betekent *niet* dat er geen spectroscopie

pische bandkloof bestaat, die is er wel. De spectroscopische bandkloof en de anomale verwachtingswaarde Δ vallen enkel samen binnen de BCS benadering. We komen terug op dit punt in de discussie.

6.7 Bindingsdimensie

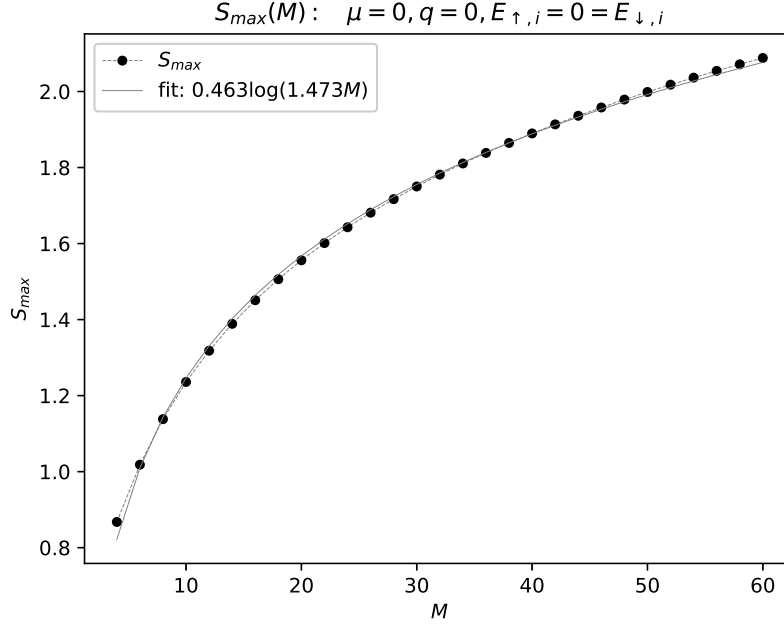
De bindingsdimensie χ_r tussen de tensoren is een maat voor de verstrengeling tussen de verschillende deelsystemen van de MPS. Een grotere bindingsdimensie χ_r neemt meer correlaties mee in de berekening en is bijgevolg nauwkeuriger maar heeft een grote *kost*. Met de gekozen waarde voor de relatieve energie bleef de bindingsdimensie χ_r steeds klein.



Figuur 31: De maximale waarde van de bindingsdimensie χ_r voor ketens met verschillende lengten M , voor de relatieve positie in de MPS keten, $\nu = r/M$.

In figuur 31 is de maximale bindingsdimensie χ_{max} gegeven voor MPS ketens met verschillende lengten M . De maximale bindingsdimensie χ_{max} neemt ongeveer lineair toe met de lengte van de MPS keten, $\chi \propto M$. De MPS neemt bij een grotere keten M meer correlaties in rekening doordat het een grotere bindingsdimensie χ_{max} aanneemt.

6.8 Bindingsentropie



Figuur 32: De maximale bindingsentropie S_{max} voor ketens met verschillende lengten M . De maximale bindingsentropie S_{max} neemt ongeveer toe als een log-functie met de lengte van de MPS keten M .

In figuur 32 is de maximale bindingsentropie S_{max} gegeven als functie van de lengte van de MPS keten M . De bindingsentropie neemt nagenoeg logaritmisches toe met M .

Merk op dat de oppervlaktewet geschonden is door dit systeem. Volgens de oppervlaktewet zou een systeem met 1 dimensie een constante bindingsentropie moeten hebben. Hier neemt de bindingsentropie logaritmisches toe met de lengte van de MPS keten M .

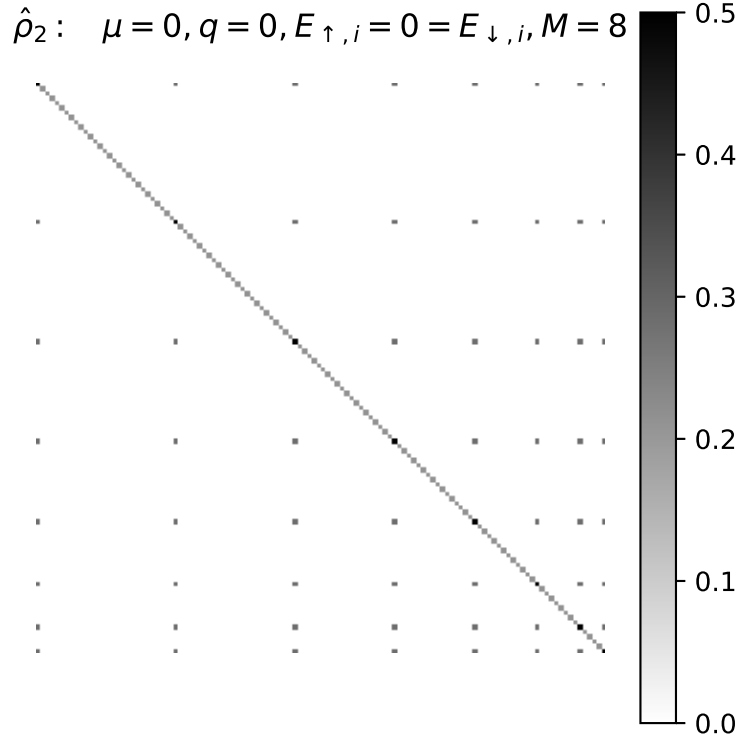
6.9 Paarcondensatie

Het Penrose-Onsager criterium [32] voor Bose-Einstein condensatie (BEC) zegt dat BEC kan plaatsvinden als en slechts als één van de eigenwaarden van de gereduceerde dichtheidsmatrix $\hat{\rho}_1$ macroscopisch groot wordt.

Een boson kan opgebouwd zijn uit fermionen. Een dergelijk samengesteld boson voldoet tevens aan de Bose statistiek. Er werd door C.N. Yang [33] een uitbreiding op het Penrose-Onsager criterium geformuleerd door gebruik te maken van de tweede-orde gereduceerde dichtheidsmatrix $\hat{\rho}_2$

Dit criterium werd door Leggett [34] geformuleerd voor elektronen die paarvorming ondergaan. Hij stelt dat voor *simpele* BEC één en slechts één eigenwaarde van $\hat{\rho}_2$ van de orde N groter is dan alle andere eigenwaarden.

De dichtheidsmatrix wordt gegeven door $\hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi|$, met $|\Psi\rangle$ de grondtoestand. De tweede-orde gereduceerde dichtheidsmatrix $\hat{\rho}_2$ kan gevonden worden door het spoor van $\hat{\rho}$ te nemen over alle deeltjes op twee na.



Figuur 33: De tweede-orde gereduceerde dichtheidsmatrix ρ_2 voor een keten met lengte $M = 8$. De grote waarde op de diagonaal is 0.5, de kleine waarde op de diagonaal 0.21. De niet-nul waarde naast de diagonaal is 0.29

De tweede-orde gereduceerde dichtheidsmatrix kan eenvoudig berekend worden door

$$(54) \quad \rho_2(r_i, r_j | r'_i, r'_j) = \langle \Psi | \hat{c}_{r_i}^\dagger \hat{c}_{r_j}^\dagger \hat{c}_{r'_j} \hat{c}_{r'_i} | \Psi \rangle,$$

met $|\Psi\rangle$ de grondtoestand en $r_i \neq r_j \in \{1, \dots, 2M\}$, waarbij de indexering

overeenkomt met

$$(55) \quad |1 \uparrow, 1 \downarrow; 2 \uparrow, 2 \downarrow; \dots; M \uparrow, M \downarrow\rangle = |1, 2, 3, 4, \dots, 2M - 1, 2M\rangle.$$

De dichtheidsmatrix voor een keten met lengte $M = 8$ is gegeven in figuur 33. De matrix is gegeven in de basis

$$(56) \quad \begin{aligned} & |\uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow, 00, 00, 00, 00, 00, 00\rangle \\ & |\uparrow\downarrow, \uparrow 0, \uparrow 0, 00, 00, 00, 00, 00\rangle \\ & \dots \\ & |\uparrow\downarrow, \uparrow 0, 00, 00, 00, 00, 00, 0 \uparrow\rangle \\ & |\uparrow\downarrow, 0 \downarrow, \uparrow, 00, 00, 00, 00, 00\rangle \\ & \dots \\ & |00, 00, 00, 00, 00, 00, 00 \uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow\rangle. \end{aligned}$$

De matrix ρ_2 voor $M = 8$ heeft één macroscopische eigenwaarde 2.5, de andere eigenwaarden zijn 0.21. De toestanden met de grote eigenwaarden voor ρ_2 komen overeen met toestanden die elektronenparen bevatten

$$(57) \quad |\uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow, 00, 00, 00, 00, 00, 00\rangle, \quad \dots \quad |00, 00, 00, 00, 00, 00, 00, \uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow\rangle.$$

Deze bevindingen tonen aan dat de grondtoestand van het systeem een BEC is van elektronenparen.

7 Discussie

7.1 Even en oneven lengte

In de vorige sectie werd de berekening voor de energie E , het aantal deeltjes N en elektronenparen N_P en hun fluctuaties, het anomale gemiddelde $|\Delta|$ en de bindingsentropie S bepaald. Deze berekeningen kunnen tevens gemaakt worden voor een keten met een oneven lengte M .

Voor de MPS keten met de oneven lengte M wordt gevonden dat het aantal elektronen N en elektronenparen N_P terug hetzelfde resultaat geeft als uit vergelijkingen (52) en (53). De fluctuaties hierop zijn echter anders, en gegeven door

$$(58) \quad \Delta N = 1$$

$$(59) \quad \Delta N_P = 1/2.$$

Het systeem bevindt zich niet meer in het canonisch ensemble, maar zal in een superpositie zitten waarbij het $N = M - 1$ of $N = M + 1$ elektronen bevat. Het aantal elektronenparen is gegeven door $N_P = M-1/2$ of $N_P = M+1/2$.

Het systeem zal proberen een toestand te vinden die de energie in het systeem verlaagt. Deze laagste energie toestand is gegeven door het vormen van paren. De tweede orde gereduceerde dichtheidsmatrix, zoals gezien in figuur 33, zal een macroscopische eigenwaarde bevatten voor de toestanden die paren vormen. In een keten met een oneven lengte bij halve vulling ($\mu = 0$) zal er nog een elektron over zijn dat niet gepaard is. Door een superpositie te maken van een toestand met een elektron minder, $N = M - 1$, en een elektron meer, $N = M + 1$, kunnen nog steeds elektronenparen gevormd worden én kan de grondtoestandsenergie geminimaliseerd worden.

Door de superpositie wordt de energie voor een keten met een oneven lengte gegeven door

$$(60) \quad E_{oneven} = -\frac{V}{4} \times (M - 1)(M + 1).$$

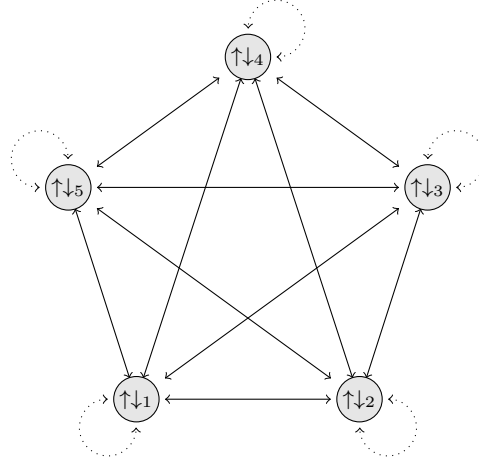
Het anomale gemiddelde $|\Delta|$ is door de superpositie niet nul. Voor een MPS keten met een oneven lengte M zal $|\Delta|$ lineair toenemen met M .

7.2 Zelfinteractie

De Hamiltoniaan uit vergelijking (43) laat tevens zelfinteractie toe. De verkregen resultaten voor een MPS keten van lengte M met zelfinteractie komen overeen met een systeem zonder zelfinteractie van lengte $M + 1$. Het lijkt alsof de zelfinteractie een extra deelsysteem in de MPS keten toelaat. Dit is het meeste opvallende bij de berekening voor het anomale gemiddelde, waar voor een keten met een oneven lengte M met zelfinteractie het anomale gemiddelde nul is, $\Delta = 0$.

7.3 Interactieterm

De interactieterm in de Hamiltoniaan uit vergelijking (43) is geen Hamiltoniaan die enkel de naaste nabuur interacties meeneemt. De interactieterm is gegeven van een deelsysteem naar *elk ander* deelsysteem.



Figuur 34: De interacties uit de Hamiltoniaan uit vergelijking (43). Iedere pijl stelt twee termen voor van de Hamiltoniaan. De zelfinteractie is voorgesteld met een gestippelde pijl.

In figuur 34 is de interactieterm van de Hamiltoniaan (43) schematisch weergegeven. Ieder deelsysteem interageert met elk ander deelsysteem, ze zijn allemaal naaste burenen van elkaar. Dit is een heel ander systeem dat hetgeen voorgesteld wordt met een MPS.

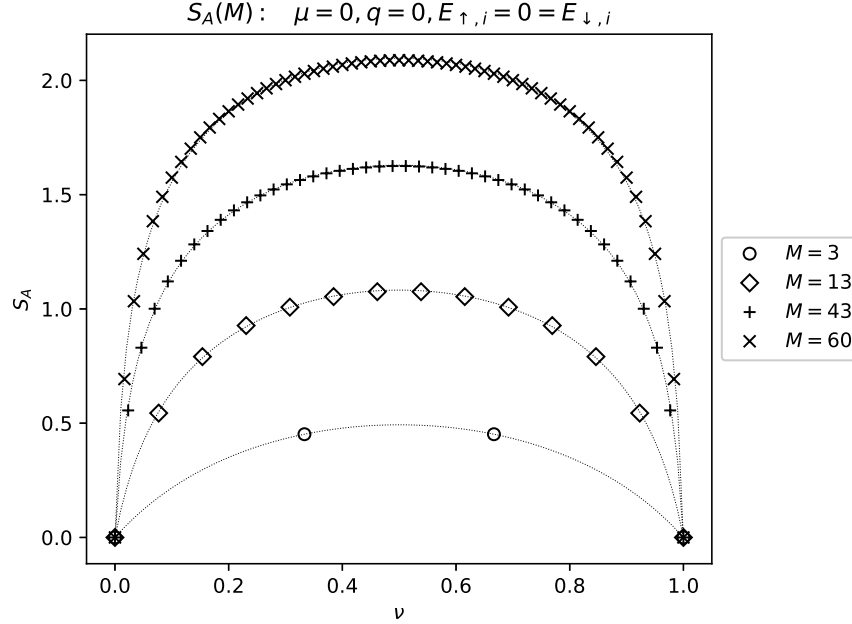
Een MPS beschrijft hoofdzakelijk een systeem dat maar 1 dimensie bezit, waardoor de verstrengeling hoofdzakelijk tussen naburen verloopt. Hierdoor zou normaal voldaan worden aan de oppervlaktewet voor de schaling van de bindingsentropie. Doordat de Hamiltoniaan een complexere interactieterm heeft, het koppelt elk deelsysteem met elk ander deelsysteem, zal de entropie toenemen met het aantal deelsystemen.

Om de verstrengeling uit te breiden, gaat het algoritme de bindingsdimensie χ van de MPS verhogen - dit genereert verstrengeling op langere dracht. Dit doet tevens vermoeden dat door het gebruik van een andere geometrie van het tensor netwerk de bindingsdimensies χ_r lager kunnen gehouden worden. Een MERA netwerk is bijvoorbeeld goed geschikt om bindingsentropie te beschrijven die toeneemt met de lengte van de keten.

Het aantal bindingen α dat moet verbroken worden om een subsysteem van A deelsystemen te hebben uit een systeem met in totaal M deelsystemen, is gelijk aan

$$(61) \quad \alpha_A = A(M - A).$$

De bindingsentropie zou moeten schalen met α_A .



Figuur 35: De bindingsentropie S_A voor een subsysteem van A deelsystemen uit een MPS met in totaal M deelsystemen, met $\nu = A/M$. De een fit van de functie $\log[A(M-A)]$ is tevens getoond.

In figuur 35 is te zien dan de bindingsentropie van een subsysteem met A deelsystemen schaalt met het aantal gebroken bindingen, $S_A \propto \log \alpha_A$. Hieruit volgt tevens dat

$$(62) \quad S_A \propto \log M,$$

wat reeds gevonden was uit figuur 32.

Formule (15) gaf een relatie tussen de bindingsdimensie χ en de maximale bindingsentropie S . Doordat de bindingsentropie logaritmisch toeneemt met de het aantal deelsystemen M , kan dit in de vergelijking ingevuld worden

$$(63) \quad S(M) < \log \chi$$

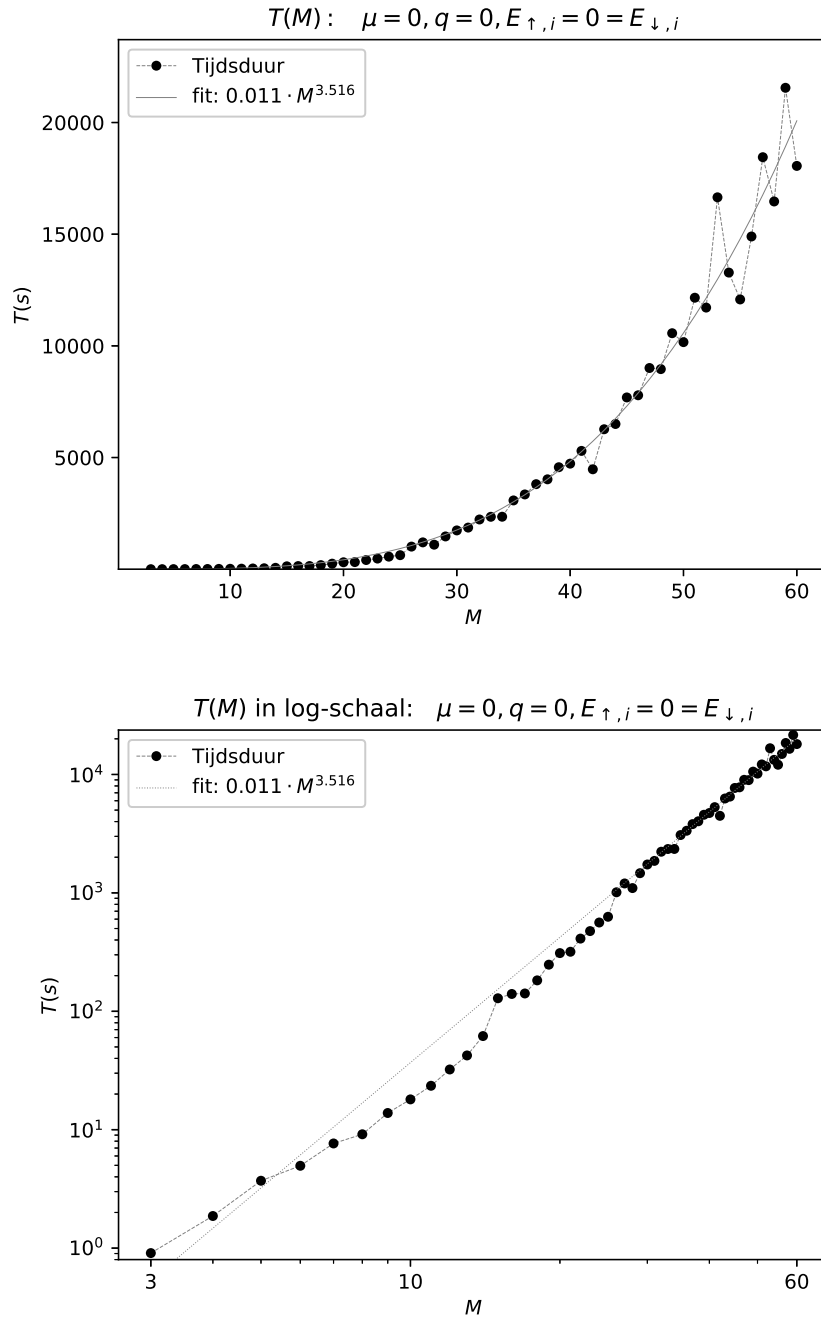
$$(64) \quad \log M < \log \chi$$

$$(65) \quad O(M) < \chi,$$

voor een correcte beschrijving van het systeem met een MPS zal de bindingsdimensie χ lineair toenemen met de lengte van de MPS keten M , wat ook werd gevonden in figuur 31

Volgens [15] is het onbepaald of het systeem efficiënt kan berekend worden met een MPS. De bindingsentropie neemt hier logaritmisch toe met de lengte van de MPS keten. Een lineaire stijging van de bindingsentropie zou een zeer slechte benadering met een MPS opleveren.

7.3.1 Computatieve kost



Figuur 36: De tijdsduur T in seconden voor de berekening van een keten met lengte M , (boven) op lineaire schaal voor T , (onder) op logaritmische schaal voor T .

De computationele *kost* van de berekening kan bepaald worden door de tijdsduur T voor een berekening van een MPS keten met een lengte M te bepalen. In figuur 36 is de tijdsduur T weergegeven op een lineaire en logaritmische schaal voor T . De tijdsduur neemt ongeveer toe als een machtsfunctie met exponent $\alpha \approx 3.5$. De computationele kost schaalt als $O(M^{3.5})$.

Daar het systeem ongeveer $O(Mp\chi^2)$ elementen bevat, en uit vergelijking (65) volgt dat $\chi \propto O(M)$, zal de computationele kost ongeveer toenemen met $O(M^3)$. Ook zal het DMRG algoritme ongeveer schalen met $O(\chi^3) \approx O(M^3)$. Er werd een grotere waarde gevonden voor de exponent daar het algoritme voor een grotere keten meer bewerkingen moet uitvoeren. Daarnaast moet het algoritme meer *sweeps* uitvoeren bij een lang netwerk om de correcte grondtoestand te vinden.

De fluctuaties in de tijdsduur T komen doordat het berekenen van verschillende lengtes van het netwerk M gedaan werd door meerdere computers. Op iedere computer werden er nog programma's in de achtergrond uitgevoerd, wat de tijdsduur van de berekening kan beïnvloeden.

Het systeem is nog steeds goed uit te rekenen met een MPS, ondanks dat de oppervlaktewet voor de bindingsentropie niet wordt gevolgd voor dit systeem. Doordat het slechts een logaritmische afwijking heeft van deze wet, kan het systeem nog steeds goed beschreven worden met een MPS.

7.4 Kinetische energie en chemische potentiaal

In de Hamiltoniaan voor het systeem uit vergelijking (43) kan een term voor de kinetische energie $E_{i,\sigma}$ en de chemische potentiaal μ gekozen worden.

Uit berekeningen met de chemische potentiaal blijkt dat het systeem voor een keten met een oneven lengte M met een halve vulling, $\mu = 0$, net tussen twee niveaus zit waar het aantal elektronen N en elektronenparen N_P constant is. Een kleine afwijking van $\mu = 0$ zorgt ervoor dat de superpositie wegvalt en het systeem naar het canonisch ensemble gaat.

De kinetische energie veranderen kan ervoor zorgen dat bepaalde deelsystemen bevoordeeld worden. Deze deelsystemen zouden een lagere kinetische energie kunnen krijgen dan de andere deelsystemen. Bij een grote kinetische energie ($E_{i,\sigma} > V$) kan het tevens paarvorming voorkomen. De Hamiltoniaan uit vergelijking (43) is echter afgeleid voor een systeem met een kleine kinetische energie, veel kleiner dan de interactiesterke V .

8 Conclusie

In deze thesis werd een matrix product toestand geprogrammeerd om een eenvoudig model voor supergeleiding te bestuderen. Aan de hand van het dichtheidsmatrix renormalisatiegroep algoritme kon efficiënt de grondtoestand van dit systeem gevonden worden. Het voordeel van dit numerieke algoritme is dat de nauwkeurigheid eenvoudig kan ingesteld worden. Een systeem met grote verstrengeling kan opgelost worden door een hogere bindingsdimensie op te leggen. De bindingsdimensie kan begrensd worden om een toestand te verkrijgen die dicht bij de correcte toestand ligt maar sneller uitgerekend kan worden.

Een exacte oplossing van een kwantumsysteem heeft een exponentiële kost. De kost van de berekening met de matrix product toestand schaal polynomisch met de lengte van de MPS keten. In de thesis werd bepaald dat het eenvoudige modelsysteem voor supergeleiding een kost heeft die schaal als $\propto O(M^{3.5})$, met M de lengte van de matrix product toestand.

Het bestudeerde model voor supergeleiding kan goed beschreven worden met een matrix product toestand en laat tevens toe een kinetische energie en chemische potentiaal toe te voegen. Het bekomen resultaat is beter dan het resultaat verkregen uit de gemiddeld-veld benadering. Een matrix product toestand beschrijft tevens de verstrengelingen die in het systeem aanwezig zijn tussen de verschillende paren, de gemiddeld-veld beschrijving neemt geen verstrengeling in rekening.

De matrix product toestand bestaat uit verschillende deelsystemen. De deelsystemen kunnen leeg zijn of bezet worden door een spin-op of spin-neer elektron of een elektronenpaar. De tweede-orde gereduceerde dichtheidsmatrix heeft een macroscopische eigenwaarde. In het systeem beschreven door de matrix product toestand treedt paarvorming op onder de vorm van Cooperparen. Hierbij zal het deelsysteem een superpositie van een lege toestand en een elektronenpaar bevatten.

Er werd opgelegd dat het systeem het aantal deeltjes behoudt, het zit in het canonisch ensemble. De exacte oplossing voor dit systeem in het canonisch ensemble voor een klein aantal deelsystemen komen overeen met de gevonden waarden met de matrix product toestand.

Ondanks dat ieder deelsysteem verbonden is met elk ander deelsysteem, wordt gevonden dat het systeem nog goed te beschrijven is met een matrix product toestand. Een matrix product toestand wordt normaal toegepast op systemen die voldoen aan de oppervlaktewet voor bindingsentropie. Het bestudeerde systeem zal deze wet niet volgen, maar logaritmisch hiervan afwijken. Deze logaritmische afwijking laat toe nog steeds een efficiënte benadering te maken.

Deze bestudeerde numerieke methode kan een handig werktuig zijn om modelsystemen te bestuderen. Doordat de matrix product toestand de originele toestand onderverdeeld heeft in kleinere delen, blijft de grootte van het netwerk zeer klein. Het netwerk kan opgeslagen worden om later terug te vergelijken.

Daarnaast laat de methode toe een systeem met een grote verstrengeling efficiënt te beschrijven.

Het gebruikte programma voor de matrix product toestand te implementeren gebruikte Python, een scripttaal. Door het programma eerst te compileren, kan de berekening aanzienlijk versneld worden. Ook kunnen enkele operaties gelijktijdig uitgevoerd worden, zoals de contractie van twee tensoren. Een beschrijving met een ander type tensor netwerk dat langedrahts interacties beter kan beschrijven, zoals *multi-scale entanglement renormalization ansatz* (MERA), zou een efficiëntere beschrijving van het probleem kunnen geven.

Referenties

- [1] K. Onnes, KNAW **13**, 1274 (1910)
- [2] W. Meissner, R. Ochsenfeld, Naturwissenschaften **21**, 787 (1933)
- [3] J. Bardeen, L.N. Cooper, J.R. Schrieffer, Phys. Rev. **106**, 162 (1957)
- [4] L.N. Cooper, Phys. Rev. **104**, 1189 (1956)
- [5] R.W. Richardson, Phys. Lett. **3**, 277 (1963)
- [6] M. Fannes, B. Nachtergaele, R.F. Werner, Comm. Math. Phys. **144** 443 (1992)
- [7] S.R. White, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992)
- [8] H.A. Gersch, G.C. Knollmann, Phys. Rev. **129**, 959 (1963)
- [9] T.D Kühner, H. Monien, Phys. Rev. B **58**, 14741 (1998)
- [10] J. Tempere, *Cursus: Inleiding tot de Statistische Mechanica*, (Universiteit Antwerpen, België, 2012)
- [11] J. Tempere, *Cursus: Kwantummechanica*, (Universiteit Antwerpen, België, 2015)
- [12] R. Orús, Ann. Phys. **349**, 117 (2014)
- [13] M. Srednicki, Phys. Rev. Lett. **71**, 666 (1993)
- [14] M.M. Wolf, F. Verstraete, M.B. Hastings, J.I. Cirac, Phys. Rev. Lett. **100**, 070502 (2008)
- [15] N. Schuch, M.M. Wolf, F. Verstraete, J.I. Cirac, Phys. Rev. Lett. **100**, 030504 (2008)
- [16] F. Verstraete, J.I. Cirac, cond-mat/0407066 (2004)
- [17] G. Vidal, Phys. Rev. Lett. **99**, 220405 (2007)
- [18] B. Swingle, Phys. Rev. D **86**, 065007 (2012)
- [19] J. Hauschild, F. Pollmann, SciPost Phys. Lect. Notes **5**, (2018)
- [20] M. Milošević, *Cursus: Numerical methods*, (Universiteit Antwerpen, België, 2015)
- [21] G. Stewart, SIAM Rev. **35**, 551 (1993)
- [22] C. Lanczos, J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol. **45**, 255 (1950)
- [23] P.E. Dargel, A. Wöllert, A. Honecker, I.P. McCulloch, U. Schollwöck, T. Pruschke, Phys. Rev. B **85**, 205119 (2012)
- [24] G. Vidal, Phys. Rev. Lett. **91**, 147902 (2003)
- [25] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions* (Cambridge University Press, Cambridge, 2011), 10

-
- [26] B. Pirvu, V. Murg, J.I. Cirac, F. Verstraete, *New J. Phys.* **12**, 025012 (2010)
- [27] G. Vidal, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 070201 (2007)
- [28] E.M. Stoudenmire, D.J. Schwab, *Adv. Neural. Inf. Process. Syst.* **29**, 4799 (2016)
- [29] J. Tempere, *Cursus: Course notes for Solid State Physics II*, (Universiteit Antwerpen, België, 2013)
- [30] J. Tempere, *Cursus: Bose-Einstein Condensation, Superfluidity and Superconductivity*, (Universiteit Antwerpen, België, 2014)
- [31] J. Tempere, D. Huybrechts, *Eur. Phys. J. B* **92**, 129 (2019)
- [32] O. Penrose, L. Onsager, *Phys. Rev.* **104**, 576 (1956)
- [33] C.N. Yang, *Rev. Mod. Phys.* **34**, 694 (1962)
- [34] A. Leggett, *Quantum Liquids* (Oxford University Press, Oxford, VK, 2006), 48