

UNIVERSITEIT ANTWERPEN

MASTER THESIS

---

Vergelijkende theoretische studie van  
vlakke band BCS supergeleiding

---

*Auteur:*  
Tom Stoops

*Promotor:*  
Prof. Dr. J. Tempere

*Proefschrift ter verkrijging van  
de graad van Master in de Fysica*

Theory of Quantum Systems and Complex Systems  
Departement Fysica, Faculteit Wetenschappen

Academiejaar 2021-2022



**Universiteit  
Antwerpen**

# Inhoudsopgave

<b>Abstract</b>	<b>1</b>
<b>Samenvatting</b>	<b>2</b>
<b>Dankwoord</b>	<b>3</b>
<b>Inleiding</b>	<b>4</b>
<b>I Theoretische achtergrond</b>	<b>6</b>
<b>1 BCS theorie</b>	<b>8</b>
<b>2 Het modelsysteem</b>	<b>12</b>
2.1 Naaste naburen interacties . . . . .	14
2.2 Model voor kinetische energie . . . . .	14
2.3 Concrete parameters . . . . .	15
<b>3 Inleiding tot tensor netwerken</b>	<b>17</b>
3.1 Penrose grafische notatie . . . . .	17
3.2 Algemene tensor netwerken . . . . .	18
3.3 Index conventies . . . . .	20
3.4 Matrix product toestanden . . . . .	20
3.5 Matrix product operatoren . . . . .	22
3.6 Bepalen van de grondtoestand . . . . .	23
3.7 Waarom tensor netwerken? . . . . .	24
<b>II Berekeningen: Analytisch &amp; Numeriek</b>	<b>25</b>
<b>4 Exacte oplossing</b>	<b>27</b>
4.1 Numerieke diagonalisatie . . . . .	28
4.2 Dichtheidsmatrices . . . . .	32
4.2.1 Allen-met-allen dichtheidsmatrix . . . . .	33
4.2.2 Naaste naburen dichtheidsmatrix . . . . .	35
4.2.3 Bespreking van thermodynamische grootheden . . . . .	37

<b>5</b>	<b>Gemiddelde veld theorie</b>	<b>38</b>
5.1	Gemiddelde veld Hamiltoniaan . . . . .	38
5.1.1	Allen-met-allen interacties . . . . .	39
5.1.2	Naaste naburen interacties . . . . .	40
5.1.3	Algemeen geval . . . . .	41
5.2	Energie optimalisatie, aantalvergelijking, en de bandkloofvergelijking . . . . .	42
5.3	Geëxciteerde toestanden . . . . .	46
5.4	Temperatuur in rekening brengen . . . . .	47
5.5	Bespreking: Kwalitatieve verschillen tussen de modellen . . . . .	51
5.6	Kinetische energie in rekening brengen . . . . .	53
5.6.1	Eerste orde storingsrekening . . . . .	53
5.6.2	Tweede orde storingsrekening . . . . .	54
<b>6</b>	<b>Tensor netwerk beschrijving</b>	<b>56</b>
6.1	Een bespreking van Quimb . . . . .	56
6.2	Constructie van de MPO . . . . .	57
6.2.1	De interactie bijdrage . . . . .	59
6.2.2	De kinetische bijdrage . . . . .	60
6.2.3	De totale Hamiltoniaan . . . . .	60
6.3	Implementatie van het modelsysteem in quimb . . . . .	60
6.4	DMRG berekeningen . . . . .	61
6.5	Bindingsentropie . . . . .	63
6.5.1	Simuleerbaarheid van het modelsysteem . . . . .	64
<b>III</b>	<b>Bespreking</b>	<b>66</b>
<b>7</b>	<b>Vergelijking van technieken &amp; bespreking</b>	<b>67</b>
7.1	Allen-met-allen interacties . . . . .	67
7.2	Naaste nabuur interacties . . . . .	68
7.2.1	Tensor netwerk behandeling . . . . .	69
7.3	Concrete verschillen tussen tensor netwerk bibliotheken . . . . .	70
<b>8</b>	<b>Conclusie</b>	<b>71</b>
<b>IV</b>	<b>De Appendix</b>	<b>73</b>
<b>A</b>	<b>Bogoliubov operatoren</b>	<b>74</b>
	<b>Bibliografie</b>	<b>76</b>

## Abstract

Since the discovery of superconductivity in the early twentieth century [1], physicists have been fascinated by the phenomenon. The applications for conductivity without loss to friction are virtually endless. However, the main issue that persists to this day are the incredibly low temperatures at which a superconducting system needs to operate with currently known superconductors.

A first successful theoretical description of the phenomenon was given by J. Bardeen, L.N. Cooper, and J.R. Schrieffer [2] in 1957. The new insight incorporated in this theory is that the contribution of the kinetic energy is negligible when compared to the interaction, contrary to virtually all other theoretical treatments of quantum systems. This theory, the BCS theory named after its creators, is to this day a prominent description for superconductivity. Subsequently, there is a large amount of work available for comparing our results, we are however especially interested in [3,4] where a particular toy model is studied in the BCS limit of vanishing kinetic contributions.

In recent work [5], it was shown that flat band superconductors, i.e. superconductors with a flat bandstructure, allow many pair-scattering channels for Cooperpairs which could be used to enhance the critical temperature of the material. Although the kinetic energy contribution does not vanish in these materials, for sufficiently flat bandstructures it may be possible to construct a model in which the BCS theory can be used to approximate the system and introduce a kinetic contribution.

In this thesis we will aim to construct a more realistic model Hamiltonian to describe the BCS interaction term using nearest neighbour scattering and introduce the kinetic energy through the kinetic term in the Hubbard model. We will then study this system using exact (numerical) diagonalisation, mean field theory, perturbation theory, and finally we will attempt to quantify the system using a tensor network description.

In previous work it has been shown that tensor networks are a very powerful tool in quantum many body physics [6-9] and have been used [4] to describe the BCS model in absence of kinetic contributions.

## Samenvatting

In deze thesis wordt een uitbreiding voor de theoretische onderbouwing van supergeleiding onderzocht. Aangezien dit niet langer exact opgelost kan worden, zal er gebruik gemaakt worden van drie benaderende technieken om resultaten te verkrijgen: storingstheorie, gemiddelde veld theorie, en een tensor netwerk beschrijving.

Supergeleiders zijn materialen waarbij de elektrische weerstand nul wordt wanneer deze gekoeld worden onder een bepaalde kritische temperatuur, welke tot op heden te laag zijn om op grote schaal toe te kunnen passen. Daarom is men op zoek naar materialen met een hoge kritische temperatuur, waar de groep van “vlakke band supergeleiders” een goede kandidaat voor is. Deze materialen hebben een relatief zwakke bijdrage van de kinetische energie, wat voordelige eigenschappen heeft voor supergeleiding.

De eenvoudigste theoretische beschrijving voor supergeleiding, de BCS theorie, verwaarloost de bijdrage van de kinetische energie ten opzichte van de interactie energie. In realiteit is de kinetische bijdrage echter wel van belang. Het doel van deze thesis is dan om deze kleine kinetische bijdrage in rekening te brengen.

Door toevoeging van de kinetische energie aan het systeem zullen de bestaande beschrijvingen voor een BCS systeem niet langer volstaan. We zullen daarom benaderende technieken moeten gebruiken om resultaten te bekomen. Voor kleine systemen is het mogelijk om een exacte oplossing van het systeem (zonder kinetische bijdrage) te bepalen. Hiermee kunnen we de kinetische bijdrage beschouwen als een kleine storing op dit resultaat, waar we ook zullen afschatten wat “voldoende klein” precies omvat.

Om een uitbreiding naar grotere systemen te maken, zal de gemiddelde veld theorie gebruikt worden. Hiermee worden de complexe interacties tussen ieder individueel deeltje en alle andere deeltjes vereenvoudigd tot een reeks interacties van ieder deeltje met een “gemiddeld veld” opgewekt door alle andere deeltjes. Hier wordt opnieuw de kinetische bijdrage als storing toegevoegd.

Als laatste methode zal er gebruik gemaakt worden van tensor netwerken om het systeem te beschrijven. Door eerder werk werd reeds getoond dat deze enorm krachtige numerieke methode geschikt is voor de beschrijving van de BCS theorie. Hier zal dan onderzocht worden of deze ook gebruikt kan worden om een BCS supergeleider met kinetische bijdrage te beschrijven.

In conclusie toont de thesis dat storingstheorie en de gemiddelde veld theorie goede beschrijvingen leveren voor een BCS supergeleider met een kleine kinetische bijdrage voor zowel een systeem waarin alle deeltjes interageren met alle andere deeltjes, als ook een systeem waar deeltjes enkel interageren met hun naaste naburen. Er worden ook grenzen gelegd op de maximale relatieve bijdrage van de kinetische energie ten opzichte van de interactie energie waar de gemaakte benaderingen geldig zijn.

De tensor netwerk beschrijving voor het systeem faalt echter wanneer de kinetische bijdrage in rekening gebracht wordt. Onderzoeken van de simuleerbaarheid van het systeem geeft geen sluitende conclusies, al is het duidelijk dat de resultaten niet in overeenstemming zijn met de resultaten verkregen met de andere methoden.

## Dankwoord

Eerst en vooral wil ik mijn promotor, prof. dr. J. Tempere, bedanken om mij de mogelijkheid te bieden om dit onderzoek uit te voeren. Zonder zijn ondersteuning en raad was dit werk niet tot stand gekomen. Eveneens wil ik graag Bert bedanken voor zijn hulp om me op weg te zetten met Python en zijn goede raad, en de hele TQC onderzoeksgroep waar ik steeds warm ontvangen werd en me meteen thuis voelde.

Tot slot wil ik graag mijn vrienden bedanken om mij te steunen wanneer het wat minder ging, en waar mogelijk een handje te helpen. In het bijzonder wil ik Kevin bedanken voor onze eindeloze discussies waar ik veel uit opgestoken heb; en Kelly voor het zorgvuldig nalezen en de waardevolle suggesties om de leesbaarheid van deze thesis te verbeteren!

## Inleiding

Sinds de ontdekking van supergeleiding in 1911 [1] is men gefascineerd door het fenomeen. Helaas wordt de toepassing op grote schaal gehinderd door de enorm lage kritische temperaturen waaronder de supergeleiders gekoeld moet worden om het effect waar te nemen.

De eerste succesvolle theoretische beschrijving werd geformuleerd in 1957 door J. Bardeen, L.N. Cooper, en J.R. Schrieffer [2], de BCS theorie. Hierin werd de bijdrage van de kinetische energie verwaarloosd ten opzichte van de interactie om de paring van elektronen te beschrijven. Deze theorie, is tot op heden een zeer interessant model om te onderzoeken zoals in voorgaande werken gebeurde [3, 4]. Zo werd door [3, 10] het model onderzocht in het canonisch ensemble waar dit systeem analytisch oplosbaar is.

Een nieuwe klasse veelbelovende materialen voor hoge temperatuur supergeleiders zijn de zogenaamde vlakke band supergeleiders. In deze materialen is de kinetische energie niet-verwaarloosbaar aanwezig in de bandenstructuur [5]. Wel is de kromming van de banden zwak genoeg opdat deze voldoende verstrooiingskanalen toelaten om de BCS theorie goed te kunnen benaderen.

In deze thesis is het doel om de kinetische energie voor voldoende vlakke banden (dit wil zeggen dat de kinetische bijdrage klein is ten opzichte van de interactie) in rekening te brengen. Dit wordt gedaan op verschillende manieren. Als eerste methode is voor kleine systemen de exacte numerieke diagonalisatie computationeel mogelijk. Een volgende aanpak is om de gemiddelde veld theorie te gebruiken om de grondtoestand op variationele wijze te bepalen. In deze twee voorgaande oplossingen is het dan mogelijk om de kinetische energie te introduceren met behulp van storingstheorie.

Tot slot zal onderzocht worden of tensor netwerken een geschikte kandidaat zijn om het systeem te beschrijven. Deze netwerken bleken immers al zeer krachtig numeriek werktuig in de beschrijving van kwantum veeldeeltjes fysica [6–9]. In eerder werk [4] werd reeds getoond dat matrix product toestanden gebruikt kunnen worden om het BCS model (zonder kinetische bijdrage) te beschrijven voor systemen waar alle deeltjes met alle andere deeltjes interageren.

**Waarom tensor netwerken?** Waar in de klassieke mechanica het aantal toestanden van een systeem eenvoudig schaalt in de grootte van het systeem, is dit voor de kwantummechanica een stuk complexer omwille van de verstrengelingen. Deze verstrengelingen zorgen ervoor dat toestanden beschouwd kunnen worden als elementen in een vectorruimte (de Hilbertruimte). Immers zijn nu lineaire combinaties van toestanden *ook* geldige toestanden. De dimensie van de Hilbertruimte zal ook snel groeien, voor een systeem van  $N$  subsystemen met  $M$  toestanden per subsysteem zal de Hilbertruimte  $M^N$  dimensionaal zijn. In de veeldeeltjes fysica loopt deze exponentiële groei van dimensies al snel uit de hand.

Gelukkig kan de vloek van exponentieel groeiende dimensie genuanceerd worden. Veelal is men geïnteresseerd in de grondtoestand van een systeem of andere toestanden die niet al te complex zijn. Dit wil zeggen dat niet de volledige ruimte van verstrengelingen nodig is voor de essentie van de meeste berekeningen. Het is zelfs zo dat de grondtoestand veelal in een speciaal hoekje van de Hilbertruimte ligt, namelijk de verzameling van alle toestanden die voldoen aan de oppervlakte wet voor de bindingsentropie, waar de verstrengeling relatief klein blijft. Toestanden die in dit kleine hoekje van de Hilbertruimte liggen of hier slechts licht van afwijken kunnen beschreven worden met matrix product toestanden [4, 8, 11].

**Structuur van de thesis:** Deze thesis is opgedeeld in drie grote delen. In het eerste deel zal de theoretische onderbouwing behandeld worden. Hier zal de BCS theorie beschreven worden en volgt de constructie van het modelsysteem met een kinetische energie bijdrage. We introduceren hier ook een nieuwe, realistischere vorm voor de interactie term met behulp van naaste naburen interacties. Tot slot van dit deel volgt een elementaire beschrijving van de nodige tensor netwerken en de toepasbaarheid voor het modelsysteem.

In het tweede deel worden de verschillende berekeningen: exacte diagonalisatie, gemiddelde veld theorie, storingstheorie, en een tensor netwerk beschrijving behandeld. Hier volgt een kwalitatieve bespreking van het modelsysteem met behulp van een studie van de thermodynamische eigenschappen en wordt de toepasbaarheid van storingstheorie op de resultaten van de exacte diagonalisatie in de BCS limiet voor de eerste keer afgetoetst. Het deel wordt afgesloten met de resultaten bepaald met behulp van de tensor netwerk beschrijving waar ook de simuleerbaarheid van het systeem met matrix product toestanden besproken wordt.

In het derde en laatste deel worden de verschillende methoden met elkaar vergeleken om de geldigheid en correctheid van de resultaten te bepalen als functie van de bijdrage van de kinetische energie.



Deel I

# Theoretische achtergrond

Voor het modelsysteem beschreven wordt, is het belangrijk om een goed begrip te vormen van supergeleiding en de BCS theorie waarop deze thesis steunt. Dit wordt behandeld in in Hoofdstuk 1.

Vervolgens stelt Hoofdstuk 2 het modelsysteem voor waarin de berekeningen uitgevoerd worden. Dit systeem is gebaseerd op het model in de literatuur [3, 10] waar een extra term aan de Hamiltoniaan toegevoegd wordt om de kinetische energie in rekening te brengen.

Aan het einde van dit deel volgt een elementaire beschrijving van tensor netwerken, welke in Deel II (Hoofdstuk 6) toegepast wordt om het modelsysteem te beschrijven op numerieke wijze.

# Hoofdstuk 1

## BCS theorie

Het fenomeen supergeleiding werd in 1911 ontdekt door Nobellaureaat H. Kamerlingh Onnes [1], waar metingen toonden dat de elektrische weerstand van kwik verwaarloosbaar of zelfs nul werd wanneer het metaal gekoeld werd met vloeibaar helium ( $\approx 4.2$  K). De theoretische verklaring voor dit fenomeen bleek een moeilijk vraagstuk voor lange tijd, tot J. Bardeen, L.N. Cooper, en J.R. Schrieffer in 1957 een theorie postuleerden [2] waarin het opparen van elektronen centraal staat.

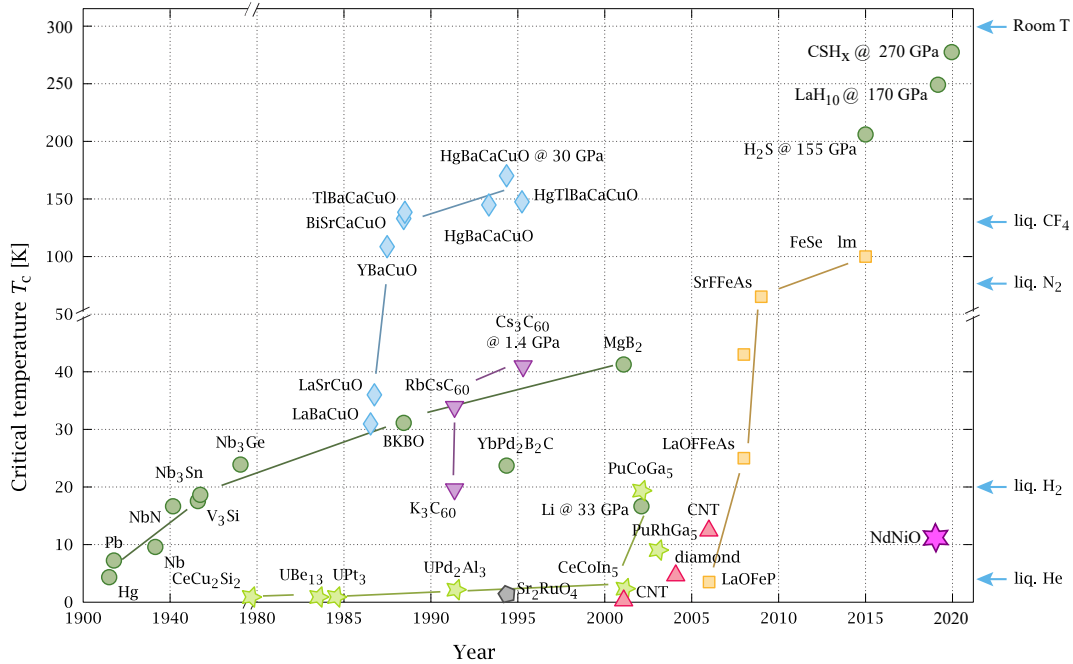
De mogelijke toepassingen voor supergeleiding zijn eindeloos: elektrische geleiding zonder weerstand, toepassingen in maglev treinen, ... De grootste beperking op de toepassingen is de lage kritische temperatuur waaronder men het systeem moet koelen. Voor een experimentele opstelling is dit geen probleem, maar wel voor grootschalige toepassingen. De zoektocht naar hoge temperatuur supergeleiders (HTc of HTS) vond zijn eerste resultaat in 1986 [12] waar J.G. Bednorz en K.A. Müller toonden dat perovskiet-achtige structuren een goede onderzoekspiste vormden. Tot op heden loopt de zoektocht naar supergeleiding op kamertemperatuur.<sup>I</sup> Figuur 1.1 toont de tijdslijn met ontdekkingen van bekende supergeleiders met hun kritische temperatuur [15].

In de theoretische fysica is men ook volop op zoek naar deze HTS in het veld van “flat band superconductors,” hier beschrijft men materialen met een vlakke bandenstructuur [5]. De vlakke bandenstructuur promoot op twee belangrijke punten supergeleiding, wat veelbelovend is voor HTS.

1. Vlakke banden laten veel kanalen toe om elektron paren te laten verstrooien; de kromming van de band geeft immers de groepssnelheid van deeltjes met dit golfgetal. Indien de groepssnelheden van initiële toestand en finale toestand dicht bij elkaar liggen, is groot dit de verstrooiingsamplitudo tussen deze toestanden.
2. De vlakke banden tonen hoge verstrengeling en topologische supergeleiding. Hoewel dit werk niet dieper in zal gaan op topologische supergeleiders is er wel een rijke literatuur [16] beschikbaar.

---

<sup>I</sup>In 2020 werd een kandidaat gevonden [13] met een kritische temperatuur van  $14^\circ\text{C}$  op een (enorm hoge) druk van 267 GPa, al worden de resultaten en methoden van het onderzoek betwist [14].



**Figuur 1.1:** Een weergave van de ontdekking van supergeleiders, waar de kritische temperatuur geplot is in functie van de ontdekking; voor hoge druk supergeleiders is ook de nodige druk aangegeven. Figuur overgenomen uit [15] (CC BY-SA 4.0, 2021).

Volgende experimentele waarnemingen staan centraal in de onderbouwing van de BCS theorie [17–19].

1. Absorptie van microgolven; de absorptie wijst op de aanwezigheid van een bandkloof in het spectrum. De frequentie van geabsorbeerde straling geeft aan dat de grootte van de bandkloof van de orde van microelektronvolt is.
2. De fluxkwantisatie in een ring van supergeleidend materiaal toont dat de elektrische lading van de ladingsdragers gegeven is door  $2e$ .
3. De warmtecapaciteit vertoont een anormale piek welke karakteristiek is voor een Bose-Einstein condensaat.
4. Het isotoopeffect toont dat de kritische temperatuur (de temperatuur waaronder het materiaal supergeleiding vertoont) invers gerelateerd is aan de atomaire massa van het materiaal. Dit verband wijst erop dat fononen een belangrijke rol zullen spelen in de beschrijving van het fenomeen.

Uit voorgaande experimentele “hints” volgen de drie belangrijkste eisen voor het theoretisch model. Met behulp van deze eisen volgt ook de Hamiltoniaan voor het systeem waarmee supergeleiding beschreven wordt.

1. De meeste elektronen zullen niet kunnen verstrooien naar onbezette toestanden omdat ze te diep in de Fermi-zee liggen. De theorie beschouwt daarom enkel elektronen in het Debeye venster  $\mathcal{D} = [E_F - \hbar\omega_D, E_F + \hbar\omega_D]$ , waar  $\hbar\omega_D$  de typische energie van een fonon is ( $\approx 10 - 100$  meV). Dit zijn dus enkel de elektronen in een dunne schil ( $\hbar\omega_D \ll E_F$ ) rond het Fermi-niveau  $E_F$  welke een fonon kunnen absorberen/uitzenden.
2. Om de invloed van kinetische energie zo klein mogelijk te houden paart de Hamiltoniaan elektronen met tegengestelde momenta  $\mathbf{k} = -\mathbf{k}'$  om een zo laag mogelijke netto kinetische energie te verkrijgen.
3. Tot slot is geweten dat elektronen met tegengestelde spin  $\sigma = -\sigma'$  de sterkste interactie toelaten, gezien een tegengestelde spin geen rekening meer moet houden met het Pauli exclusie principe, waardoor deze een grotere overlap toelaten in de golffuncties en sterker binden.

De BCS Hamiltoniaan die men daarmee kan voorstellen in tweede kwantisatie is gegeven door

$$\hat{H}_{BCS} = \underbrace{\sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}}_{\text{Kinetisch}} - V \underbrace{\sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{D}} \sum_{\mathbf{k}' \in \mathcal{D}} \hat{c}_{\mathbf{k}',\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}',\downarrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}}_{\text{Interactie}}, \quad (1.1)$$

waar  $\varepsilon_{\mathbf{k}}$  de kinetische energie is voor een niet-interagerend Fermigas gemeten ten opzichte van het Fermi-niveau en  $\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger$ ,  $\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}$  respectievelijk de elektron creatie en annihilatie operatoren. Deze operatoren voldoen aan de anticommutatierelaties voor fermionen

$$\left\{ \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger, \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma'}^\dagger \right\} = 0 = \left\{ \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}, \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma'} \right\}; \quad (1.2)$$

$$\left\{ \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger, \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma'} \right\} = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta_{\sigma,\sigma'}. \quad (1.3)$$

Een benadering die gemaakt kan worden om dit systeem te vereenvoudigen en de oplossing te bepalen, is om de bijdrage van de kinetische energie te verwaarlozen ten opzichte van de interactie energie.

Later in dit werk zal de kinetische energie perturbatief terug in rekening gebracht worden met behulp van een alternatieve beschrijving voor de kinetische energie, het Hubbard model [20]. Deze aanpak is onconventioneel in storingsrekening; het is immers intuïtief om de interactieterm als storing te beschouwen op de kinetische bijdrage waar men de energie ontwikkelt in een reeks in de interactiesterkte  $V$ . Echter heeft de BCS theorie aangetoond [2, 17] dat energie een essentiële singulariteit bevat in  $V = 0$  waarrond reeksontwikkelingen falen [21] en is deze aanpak gedoemd om te falen.

In de alternatieve aanpak waarbij de kinetische energie als storing beschouwd wordt zal de kromming van de energieband ( $\sim 1/m^*$  [19]) klein beschouwd worden en beschrijft het formalisme dus vlakke band supergeleiders.

De (ongestoorde) Hamiltoniaan wordt dus gegeven door de interactie term welke de verstrooiing van elektronen van golfgetallen  $\mathbf{k}$ ,  $-\mathbf{k}$  naar  $\mathbf{k}'$ ,  $-\mathbf{k}'$  met amplitudo  $V$  beschijft

$$\hat{H} = -V \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{D}} \sum_{\mathbf{k}' \in \mathcal{D}} \hat{c}_{\mathbf{k}',\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}',\downarrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}. \quad (1.4)$$

Om de grondtoestand van dit systeem te beschrijven maken Bardeen, Cooper, en Schrieffer gebruik van de volgende variationele golffunctie [2]

$$|\Psi_{BCS}\rangle = \prod_{\mathbf{k}} \left( u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} \right) |\emptyset\rangle, \quad (1.5)$$

waar  $|\emptyset\rangle$  het elektronen vacuum beschrijft. De golffunctie is genormaliseerd indien voor de variationele parameters  $u, v$  geldt dat

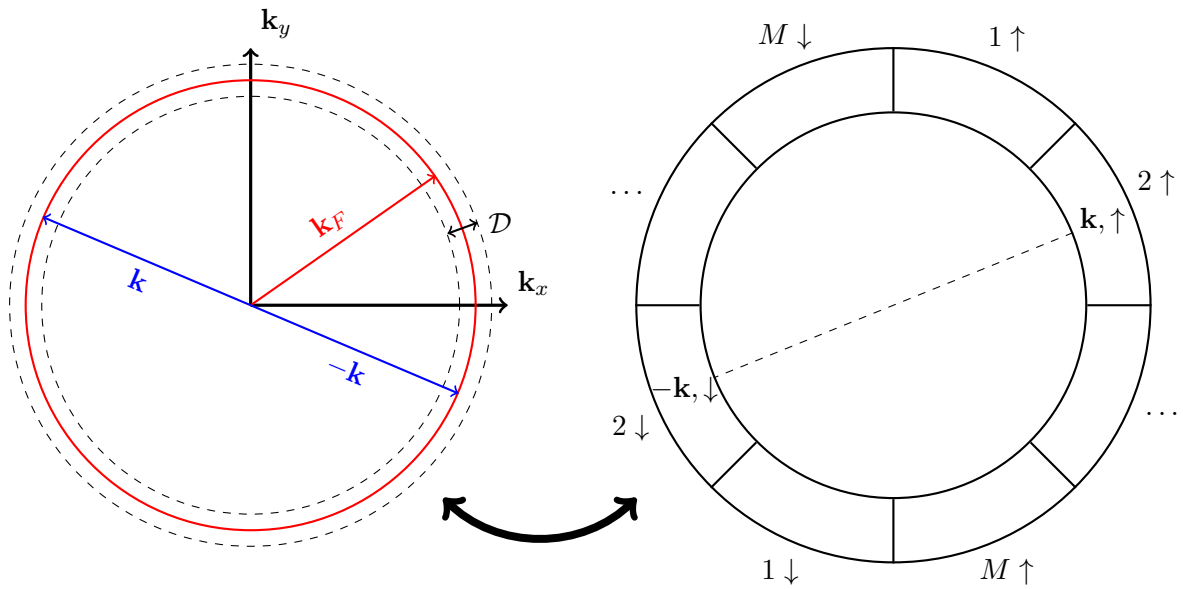
$$\forall \mathbf{k} \in \mathcal{D}: \quad |u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1. \quad (1.6)$$

Kwalitatief wil dit zeggen dat de golffunctie opgebouwd wordt door superposities van bezetting en vacuum op de golfgetallen  $\pm \mathbf{k}$ ; wat een verstrengeling tussen de toestanden  $\mathbf{k}, \uparrow$  en  $-\mathbf{k}, \downarrow$  oplevert voor iedere toegelaten waarde van de golfvector  $\mathbf{k}$ .

## Hoofdstuk 2

# Het modelsysteem

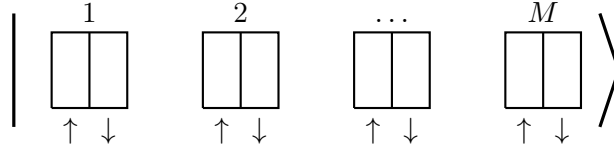
Om BCS theorie effectief te implementeren wordt het model uit Hoofdstuk 1 geabstraheerd en vereenvoudigd. In plaats van een overaftelbare verzameling van golfvectoren te beschouwen, wordt het systeem opgedeeld in  $2M$  “vakjes” waar ieder vakje overeen komt met een zekere golfvector  $\mathbf{k}$ . Deze wordt grafisch voorgesteld voor in Figuur 2.1.



**Figuur 2.1:** Grafische weergave van de omzetting tussen de (tweedimensionale) reciproke ruimte (links) naar het vereenvoudigd model (rechts). Figuur sterk geïnspireerd door figuur 1.1 en figuur 2.1 in [3].

Met behulp van de bezettingsgetallen van deze  $2M$  vakjes kunnen de berekeningen uitgevoerd worden. De toestand wordt dus gegeven in de vorm van de ket in Figuur 2.2, waar er  $M$  vakjes zijn waarbinnen er vier toestanden zijn (of twee per subvakje). Door deze keuze van vakjes per twee elektronen levert dit een vierdimensionale Hilbertruimte per vakje, namelijk

$$\left\{ |00\rangle, |\uparrow 0\rangle, |0\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle \right\}. \quad (2.1)$$



**Figuur 2.2:** Conceptuele voorstelling van de ket die een toestand beschrijft met behulp van bezettingsgetallen. Figuur sterk geïnspireerd door figuur 2.2 in [3].

De Hamiltoniaan overeenkomstig met dit formalisme kan geschreven worden als

$$\hat{H} = -V \sum_{i \neq j=1}^M \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow}, \quad (2.2)$$

waar de zelfinteracties uitsluiten worden aangezien deze slechts een verschuiving van de nul-puntsenergie leveren. Merk overigens op dat in het voorgaande impliciet een Fouriertransformatie [22] uitgevoerd werd. Dit kan ook expliciet getoond worden, hiervoor gebruikt men de Fouriertransformatie van de creatie en annihilatie operatoren voor discrete ruimte punten  $x_j = j \cdot a$  voor een roosterconstante  $a$

$$\begin{cases} \hat{c}_{k,\sigma} = \sum_j e^{-ikx_j} \hat{c}_{x_j,\sigma}; \\ \hat{c}_{k,\sigma}^\dagger = \sum_j e^{ikx_j} \hat{c}_{x_j,\sigma}^\dagger. \end{cases} \quad (2.3a)$$

$$\begin{cases} \hat{c}_{k,\sigma} = \sum_j e^{-ikx_j} \hat{c}_{x_j,\sigma}; \\ \hat{c}_{k,\sigma}^\dagger = \sum_j e^{ikx_j} \hat{c}_{x_j,\sigma}^\dagger. \end{cases} \quad (2.3b)$$

Deze invullen in uitdrukking (1.4) levert direct het gezochtte resultaat (2.2) indien de zelfinteracties opnieuw buiten beschouwing gelaten worden. De indices  $1, 2, \dots, M$  kunnen dus geïnterpreteerd worden als roosterpunten in reële ruimte waarop de elektronen verzameld worden. De BCS variationele golffunctie kan nu ook geschreven worden als

$$|\Psi_{BCS}\rangle = \prod_{i=1}^M \left( u + v \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \right) |\emptyset\rangle, \quad (2.4)$$

of equivalent

$$|\Psi_{BCS}\rangle = \bigotimes_{i=1}^M (u |00\rangle + v |\uparrow\downarrow\rangle). \quad (2.5)$$



## 2.1 Naaste naburen interacties

Merk op dat de interactieterm (2.2) paren verstrooit naar alle andere roosterpunten. In plaats daarvan kan de interactie beperkt worden tot naaste naburen, welke in deze thesis besproken en vergeleken wordt met de allen-met-allen (AMA) interacties. Om deze naaste nabuur (NN) interactie te beschrijven kan (2.2) herschreven worden tot

$$\hat{H} = -V \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow}. \quad (2.6)$$

Dit systeem zal uitvoerig bestudeerd en vergeleken worden met het allen-met-allen interactie systeem in Deel II. In het bijzonder kan dit naaste nabuur interactie model beschreven worden in de taal van tensor netwerken met behulp van de Python bibliotheek quimb, zoals getoond in Hoofdstuk 6.

## 2.2 Model voor kinetische energie

Hoewel de kinetische energie initieel verwaarloosd werd ten opzichte van de interactie energie in het voorgaande, zal er later toch een kinetische bijdrage aan de energie in rekening gebracht worden. Hiervoor kiezen we om de kinetische term van het Hubbard model te gebruiken, deze wordt veelal gebruikt in vastestoffysica om tunneling van deeltjes van het ene roosterpunt naar een nabijgelegen roosterpunt te beschrijven [20, 23]. Concreet beschrijft volgende uitdrukking voor  $\hat{H}_1$  deze bijdrage

$$\hat{H}_1 = -t \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} = -t \sum_{j=1}^M \left( \underbrace{\hat{c}_{j+1,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\uparrow} + \hat{c}_{j+1,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow}}_{\text{hopping } j \rightarrow (j+1)} + \underbrace{H.C.}_{(j+1) \rightarrow j} \right), \quad (2.7)$$

waar  $H.C.$  het Hermitisch toegevoegde van de voorgaande termen beschrijft. Voor het vervolg van de thesis zal de Hamiltoniaan voor het modelsysteem genoteerd worden als

$$\hat{H} = \underbrace{-V \sum_{\langle i,j \rangle \text{ of } i \neq j} \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow}}_{\hat{H}_0} - t \underbrace{\sum_{j=1}^M \left( \hat{c}_{j+1,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\uparrow} + \hat{c}_{j+1,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow} + H.C. \right)}_{\hat{H}_1}. \quad (2.8)$$

De toevoeging van de Hubbard term  $\hat{H}_1$  laat toe om Cooperparen te breken en om ongepaarde elektronen op te paren. Voor voldoende kleine kinetische parameter  $t \ll V$  zal deze term perturbatief in rekening gebracht worden. De relevantie van de term  $\hat{H}_1$  om kinetische energie te beschrijven kan ook wiskundig verklaard worden. Met behulp van de inverse Fouriertransformatie van (2.3)

$$\begin{cases} \hat{c}_{j,\sigma} = \frac{1}{M} \sum_l e^{ik_l x_j} \hat{c}_{k_l,\sigma}; & (2.9a) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger = \frac{1}{M} \sum_l e^{-ik_l x_j} \hat{c}_{k_l,\sigma}^\dagger, & (2.9b) \end{cases}$$

is het eenvoudig te tonen dat het invullen hiervan in (2.7) en toepassen van gekende identiteiten voor de Kroneckerdelta resulteert in

$$\begin{aligned}\hat{H}_1 &= -t \sum_{j,\sigma} \left( \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j+1,\sigma} + \hat{c}_{j+1,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \right) \\ &= -t \sum_{l,\sigma} 2 \cos(k_l a) \hat{c}_{k_l,\sigma}^\dagger \hat{c}_{k_l,\sigma},\end{aligned}\quad (2.10)$$

wat inderdaad van de vorm van de kinetische energie operator (1.1) is, waar de amplitudo  $\varepsilon_{\mathbf{k}}$  nu beschreven wordt door

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = -2t \cos(ka) \approx -2t \left[ 1 - \frac{1}{2}(ka)^2 \right], \quad (2.11)$$

waar voor kleine golfvectoren  $k$  de cosinus benaderd wordt in tweede orde. De parameter  $t$  wordt dan vastgelegd met behulp van de effectieve bandmassa [19] van het systeem  $t \sim 1/m^*$  opdat er inderdaad de vorm van de kinetische energie verschijnt [20,24]. Voor kleine  $t$  beschrijft dit model dus inderdaad vlakke banden.

Een belangrijke aanvulling is dat in de literatuur [20] het Hubbard model conventioneel niet enkel een kinetische term bevat maar ook een potentiële energie. In dit werk zal deze potentiële bijdrage dus vervangen worden door de term  $\hat{H}_0$  (2.8). Het is belangrijk om dit in het achterhoofd te houden wanneer resultaten vergeleken worden met de literatuur.

## 2.3 Concrete parameters

Voor de berekeningen uitgevoerd in deze thesis wordt een systeem met 4 sites gebruikt en een totaal van 4 elektronen. Dit kleine systeem zal nog simuleerbaar zijn op klassieke wijze, hiervoor zullen de operatoren bestaan uit  $256 \times 256$  matrices, een systeem van 5 sites zou hier al  $1024 \times 1024$  matrices voor nodig hebben. Dit is een aanzienlijke toename in computationele kost zonder kwalitatieve verschillen in effectief gedrag.

De keuze van een opvulling van 4 elektronen (voor de 4 sites) wordt gemotiveerd doordat deze opvulling overeen zal komen met de sterkste elektronenparing; en de exacte grondtoestand in het canonisch ensemble voor 4 elektronen [3, 10].<sup>1</sup> In Hoofdstuk 5 zal nog getoond worden dat de halve vulling de energie inderdaad optimaliseert, voorlopig volstaat de intuïtie dat in deze toestand de balans tussen het aantal plaatsen waaruit een hoppend paar kan vertrekken en het aantal plaatsen waar een hoppend paar kan aankomen optimaal is om een maximale hoeveelheid mogelijke hops toe te laten. Dit is dus de toestand waar de interactie Hamiltoniaan zijn grootste bijdrage zal leveren. Voor het systeem van 4 sites en 4 elektronen komt deze exacte grondtoestand dus overeen met

$$|\psi_g\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \left( \begin{aligned} &|\uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow, 00, 00\rangle + |\uparrow\downarrow, 00, \uparrow\downarrow, 00\rangle + |00, \uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow, 00\rangle \\ &+ |\uparrow\downarrow, 00, 00, \uparrow\downarrow\rangle + |00, \uparrow\downarrow, 00, \uparrow\downarrow\rangle + |00, 00, \uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow\rangle \end{aligned} \right). \quad (2.12)$$

Interessant hieraan is dat het beschreven systeem exact oplosbaar is en dus een goed ijkpunt geeft voor de validiteit van de BCS benaderingen zoals beschreven in [3, 10].

---

<sup>1</sup>In het vervolg van de thesis zal deze toestand eenvoudigweg de “exacte grondtoestand” of  $|\psi_g\rangle$  genoemd worden.

Uit inspectie van deze grondtoestand is het ook eenvoudig in te zien waarom de BCS variationale golffunctie (2.4) zo'n goede resultaten oplevert ondanks dat deze niet beperkt is tot een constant aantal elektronen. Deze golffunctie expliciet uitschrijven voor het geval  $M = 4$  levert

$$\begin{aligned}
 |\Psi_{BCS}\rangle = & v^4 |00, 00, 00, 00\rangle \\
 & + uv^3 (|\uparrow\downarrow, 00, 00, 00\rangle + |00, \uparrow\downarrow, 00, 00\rangle + |00, 00, \uparrow\downarrow, 00\rangle + |00, 00, 00, \uparrow\downarrow\rangle) \\
 & + u^2v^2 \left( |\uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow, 00, 00\rangle + |\uparrow\downarrow, 00, \uparrow\downarrow, 00\rangle + |00, \uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow, 00\rangle \right. \\
 & \left. + |\uparrow\downarrow, 00, 00, \uparrow\downarrow\rangle + |00, \uparrow\downarrow, 00, \uparrow\downarrow\rangle + |00, 00, \uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow\rangle \right) \sim |\psi_g\rangle \\
 & + u^3v (|\uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow, 00\rangle + |\uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow, 00, \uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow, 00, \uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow\rangle + |00, \uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow\rangle) \\
 & + u^4 |\uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow\rangle .
 \end{aligned} \tag{2.13}$$

Dit illustreert slechts wat al duidelijk was uit het voorschrift voor de golffunctie in (2.4), de variationele BCS golffunctie is opgesteld als een binomiale verdeling “rond” de exacte golffunctie  $|\psi_g\rangle$ . Voor grotere systemen zullen zo de bijdragen van de exacte grondtoestand en de toestanden hier dicht bij<sup>I</sup> domineren in de resultaten. De steeds minder fysische resultaten zoals  $|00, 00, \dots, 00\rangle$  en  $|\uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow, \dots, \uparrow\downarrow\rangle$  liggen in de staarten van deze binomiale verdeling en zullen snel verwaarloosbaar worden.

---

<sup>I</sup>Met slechts enkele elektronparen meer of minder.

## Hoofdstuk 3

# Inleiding tot tensor netwerken

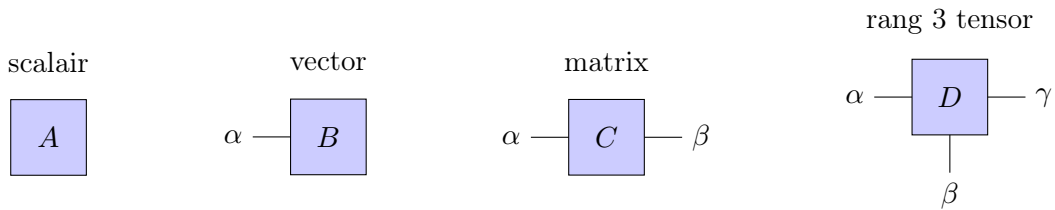
Dit hoofdstuk heeft als doel om een overzicht te geven van de basisconcepten van tensor netwerken. Hiervoor is Penrose grafische notatie zeer handig, het is een enorm eenvoudige en toch krachtige manier om complexe tensor berekeningen visueel weer te geven. Daarna volgt de praktische kant die toegepast zal worden in Hoofdstuk 6. Specifiek hoe kwantummechanische toestanden voorgesteld worden met behulp van de matrix product toestand, alsook een manier om operatoren voor te stellen met matrix product operatoren, en welke numerieke voordelen dit heeft. Tot slot volgt een korte bespreking van een algoritme dat op variationele wijze de grondtoestandsenergie van een systeem kan bepalen en waarom deze zo geschikt is voor de tensor netwerken dat hier besproken worden.

Deze thesis beperkt zich tot de meest noodzakelijke concepten, voor verdere uitdieping verwijzen we naar de literatuur [4, 6–9, 11, 25–32]. Het voornaamste doel van dit hoofdstuk is om de lezer bekend te maken met elementaire tensor netwerken, waarom deze zinvol zijn, en hoe deze toegepast worden om toestanden en operatoren weer te geven.

### 3.1 Penrose grafische notatie

De notatie voorgesteld door R. Penrose in 1971 [33] geeft een eenvoudige visuele weergave van ingewikkelde tensor berekeningen. Hoewel tensoren een veralgemening zijn van matrices en vectoren welke op een specifieke wijze transformeren onder coördinatentransformaties [34], zullen in de context van kwantummechanische berekeningen (zoals in deze thesis) deze eigenschappen niet gebruikt worden. In plaats daarvan wordt een tensor beschouwd als een multidimensionaal array om getalwaarden bij te houden. In deze voorstelling zal een tensor van rang  $N$  een  $N$  dimensionale “blok van getallen” voorstellen. Tensoren van lage rang ( $< 3$ ) zijn ook gekend als scalaires, vectoren, en matrices; deze worden als voorbeelden getoond in Figuur 3.1.

Initieel zal er zeer informeel omgegaan worden met de plaatsing van indices en hun betekenis. In Sectie 3.3 zullen enkele conventies hiervoor geïntroduceerd worden welke voor de rest van de thesis (na Sectie 3.3) gehanteerd worden.



**Figuur 3.1:** Van links naar rechts zijn tensoren van rang nul tot drie getoond; de getallen uit deze tensoren voor een ingevulde index zijn dus respectievelijk gegeven door  $A$ ,  $B_\alpha$ ,  $C_{\alpha\beta}$ ,  $D_{\alpha\beta\gamma}$ .

Een tensor wordt dus voorgesteld als een figuur<sup>I</sup> met  $N$  aantal “beentjes” overeenkomstig met de indices van de array. Contracties tussen deze objecten worden dan weergegeven door de indices met elkaar te verbinden. Dit zal dan een som over de verbonden index weergeven als visuele voorstelling van de Einstein sommatie conventie. Volgende uitdrukkingen zijn dus equivalent

$$C_{i,j} = \sum_{\alpha=1}^{d_\alpha} A_{i,\alpha} B_{\alpha,j} = A_{i,\alpha} B_{\alpha,j} \Leftrightarrow i \text{ --- } [C] \text{ --- } j = i \text{ --- } [A] \text{ --- }^\alpha [B] \text{ --- } j \quad , \quad (3.1)$$

hierin wordt ook de bindingsdimensie genoteerd voor de index  $\alpha$  als  $d_\alpha$ . De bindingsdimensie  $d_\alpha$  geeft het aantal waarden aan welke de index  $\alpha$  kan aannemen.

Op geheel gelijkaardige manier aan (3.1) kunnen ook het spoor, het scalair product van vectoren, matrixproducten, en andere tensorcontracties visueel weergegeven worden.

### 3.2 Algemene tensor netwerken

In algemene termen kan men stellen dat een tensor netwerk gebouwd wordt door het verbinden van de indices. Concreet komt dit veelal neer op een reeks van contracties uitgevoerd over verschillende tensoren. Deze contracties moeten niet noodzakelijk een scalair opleveren en kunnen ook een tensor van arbitraire rang vormen. Een voorbeeld van een tensor netwerk is

$$\begin{array}{c}
 k \\
 | \\
 \textcircled{C} \\
 / \quad \backslash \\
 \beta \quad \alpha \\
 \textcircled{A} \quad \textcircled{B} \\
 | \quad | \\
 i \quad \gamma \quad j
 \end{array}
 =
 \begin{array}{c}
 [D] \\
 | \quad | \quad | \\
 i \quad j \quad k
 \end{array}
 , \quad (3.2)$$

<sup>I</sup>Veelal wijst men in de literatuur bepaalde eigenschappen toe aan de gebruikte figuren en kleuren, in deze thesis zal hier geen extra betekenis aan geven worden. Het gebruik van kleur en vorm zal hooguit gebruikt worden om tensoren eenvoudiger van elkaar te kunnen onderscheiden.

dit tensor netwerk uitschrijven als som is een eenvoudige oefening voor de lezer. Overigens kan de volgorde van de contracties de numerieke rekentijd veranderen [4,6,25,26], veelal zullen numerieke pakketten en bibliotheken dit al optimaliseren.

Het is eenvoudig om in te zien dat een netwerk van tensoren gecontraheerd kan worden tot één finale tensor. Dit kan ook andersom, waar een tensor effectief opgesplitst wordt in “kleinere” tensoren welke na contractie opnieuw de oorspronkelijke tensor opleveren

$$\begin{array}{c} \boxed{A} \\ | \quad | \quad | \\ i \quad j \quad k \end{array} \cong \begin{array}{c} \boxed{B} \text{---} \alpha \text{---} \boxed{C} \\ | \quad \quad | \quad | \\ i \quad \quad j \quad k \end{array}, \tag{3.3}$$

waarin er enorm veel vrijheid is in de concrete uitvoering deze splitsing maken. Het is uiteraard logisch dat er op de splitsing  $\alpha$  zonder problemen de eenheidsmatrix tussen geplaatst kan worden

$$\begin{array}{c} \boxed{B} \text{---} \alpha \text{---} \boxed{C} \\ | \quad \quad | \quad | \\ i \quad \quad j \quad k \end{array} = \begin{array}{c} \boxed{B} \text{---} \beta \text{---} \boxed{\mathbb{1}} \text{---} \gamma \text{---} \boxed{C} \\ | \quad \quad \quad | \quad | \quad | \\ i \quad \quad \quad j \quad k \end{array}. \tag{3.4}$$

Voor een reguliere matrix  $D$  kan geschreven worden dat  $\mathbb{1} = DD^{-1}$ . Contractie over  $\beta$  en  $\gamma$  levert dan  $B'_{i\zeta} = \sum_{\beta} B_{i\beta} D_{\beta\zeta}$  en  $C'_{\zeta jk} = \sum_{\gamma} D_{\zeta\gamma}^{-1} C_{\gamma jk}$  zodat er volgt dat

$$\begin{array}{c} \boxed{B} \text{---} \beta \text{---} \boxed{\mathbb{1}} \text{---} \gamma \text{---} \boxed{C} \\ | \quad \quad \quad | \quad | \quad | \\ i \quad \quad \quad j \quad k \end{array} = \begin{array}{c} \boxed{B'} \text{---} \zeta \text{---} \boxed{C'} \\ | \quad \quad | \quad | \\ i \quad \quad j \quad k \end{array}. \tag{3.5}$$

Aangezien er een enorme vrijheid is in de keuze van de matrix  $D$ , is er ook een enorme vrijheid in de numerieke waarden van de componenten in tensoren  $B$  en  $C$ . Deze vrijheid zal men gebruiken in matrix product toestanden om het netwerk te schrijven als een systeem van unitaire matrices.<sup>II</sup> Voor meer details verwijzen we naar de literatuur [4, 6, 25, 26].

Echter zal in de meeste gevallen proberen de bovenstaande splitsing van tensoren *niet* exact verlopen. In plaats daarvan kan er gebruik gemaakt worden van singuliere waarden ontbinding (Singular Value Decomposition; SVD) [4, 6, 25, 26] om de splitsing te schrijven als een benadering van de originele tensor, wat uiteraard niet triviaal is. Op deze manier kan het aantal nodige componenten significant gereduceerd worden wat een groot numeriek voordeel met zich meebrengt. Uiteraard heeft dit ook een nadeel, namelijk dat er in deze decompositie informatie verloren zal gaan. Echter kan dit verlies geoptimaliseerd worden door te selecteren op grootte van de singuliere waarden die verwijderd worden uit het systeem, zo zal dit mits klein verlies van informatie toch een goede benadering vormen.

<sup>II</sup>Op hoogstens de tensoren aan de randen van het netwerk na; er kan een “sweep” uitgevoerd worden over het netwerk van links naar rechts wat garandeert dat alle matrices unitair worden op de uiterst rechtse matrix na.

### 3.3 Index conventies

Tot nu toe werden alle indices of visuele “beentjes” van de tensoren op gelijke voet behandeld. Voor het vervolg van deze thesis zal dit niet langer het geval zijn. Het eerste belangrijke onderscheid tussen indices is dat tussen de *fysische indices* en de *virtuele indices*. De eerste hiervan zullen gelabeld worden met letters  $i, j, k, \dots$  deze komen overeen met fysisch relevante waarden; fysische indices zijn inherent verbonden aan het fysisch meetbaar systeem en zullen bijvoorbeeld overeenkomen met de kwantumgetallen van het model.

Anderzijds kunnen de virtuele indices niet noodzakelijk gekoppeld worden aan fysische grootheden, deze worden genoteerd met griekse letters. Waar de waarden van de fysische indices bepaald kunnen worden op experimentele wijze kan dit niet voor virtuele indices; deze zijn intern in het systeem en eigen aan de keuzes waarmee het numeriek model opgesteld werd.

Ook de plaatsing van de indices op de weergave van een tensor (netwerk) is nu van belang. De virtuele indices zullen steeds horizontaal geschreven worden. Fysische indices komen steeds langs boven of onder uit de tensor. Tussen deze laatste twee kan nog een onderscheid gemaakt worden. De indices getekend langs onder zullen geassocieerd worden met een toestand of *ket* terwijl een index langs boven zullen geassocieerd wordt met een duale toestand of *bra*. Dit geeft meteen ook een logische wijze om indices met elkaar te verbinden; om een contractie uit te voeren over fysische indices zal er dus steeds een ket verbonden worden met een bra. In volgende secties zal dit snel duidelijk worden met behulp van enkele expliciete voorschriften.

### 3.4 Matrix product toestanden

In het algemeen kan de golffunctie van een veeldeeltjes systeem steeds beschreven worden als een lineaire combinatie van product toestanden

$$|\psi\rangle = \sum_{j_1, \dots, j_N} C_{j_1, \dots, j_N} |\varphi_{j_1}\rangle \otimes \dots \otimes |\varphi_{j_N}\rangle. \quad (3.6)$$

Waar  $\{|\varphi_n\rangle\}$  een ééndeeltjesbasis is voor de ééndeeltjes Hilbertruimte. Hoewel het object  $C_{j_1, \dots, j_N}$  veelal gezien wordt als een generische naam voor een lijst van coëfficiënten, is dit niets anders dan een  $N$ -tensor. De golffunctie kan dus voorgesteld worden als

$$|\psi\rangle = \begin{array}{c} \boxed{C} \\ | \\ j_1 \quad j_2 \quad \dots \quad j_N \end{array}, \quad (3.7)$$

Nu zal voor systemen met lage verstrengeling deze tensor  $C$  opdeelbaar zijn in kleinere componenten met behulp van SVD zonder groot verlies van informatie. Met behulp van SVD kan deze tensor gefactoriseerd worden op periodische of niet-periodische wijze. De niet-periodische vorm wordt gegeven door

$$|\psi\rangle = \sum_{\substack{i_1, \dots, i_N \\ \alpha_1, \dots, \alpha_{N-1}}} (\tilde{M}_1)_{\alpha_1}^{i_1} (\tilde{M}_2)_{\alpha_1, \alpha_2}^{i_2} \dots (\tilde{M}_N)_{\alpha_{N-1}}^{i_N} |\varphi_{i_1}\rangle \otimes \dots \otimes |\varphi_{i_N}\rangle, \quad (3.8)$$

hierin geven  $\tilde{M}_n$  de 2-tensoren of 3-tensoren (afhankelijk van hun positie) voor waarin de tensor gefactoriseerd werd. Dit komt overeen met volgende schematische voorstelling

$$|\psi\rangle = \begin{array}{c} \boxed{\tilde{M}_1} \xrightarrow{\alpha_1} \boxed{\tilde{M}_2} \xrightarrow{\alpha_2} \dots \xrightarrow{\alpha_{N-1}} \boxed{\tilde{M}_N} \\ | \quad | \quad | \\ i_1 \quad i_2 \quad i_N \end{array} . \quad (3.9)$$

Merk op dat de tensoren aan de randen één rang lager zijn dan de tensoren in de “bulk” van het diagram. Er kan ook gekozen worden om de de tensoren aan de rand van gelijke rang te maken als deze in de bulk, dit resulteert in de periodische voorstelling van een matrix producttoestand

$$|\psi\rangle = \sum_{\substack{i_1, \dots, i_N \\ \alpha_1, \dots, \alpha_N}} (M_1)_{\alpha_N, \alpha_1}^{i_1} (M_2)_{\alpha_1, \alpha_2}^{i_2} \dots (M_N)_{\alpha_{N-1}, \alpha_N}^{i_N} |\varphi_{i_1}\rangle \otimes \dots \otimes |\varphi_{i_N}\rangle . \quad (3.10)$$

Hier worden de 3-tensoren waarin de tensor  $C$  gefactoriseerd werd als  $M_n$ . Nu is het aantal getallen dat nodig zijn om dit systeem te beschrijven met een matrix product toestand sterk verminderd is ten opzichte van de originele tensor voorstelling omwille van volgende twee redenen.

- Met behulp van SVD kan op numerieke wijze een tensor geschreven worden als contracties over lagere (of gelijke) rang tensoren waar de componenten met kleine bijdrage verwaarloosd worden. Een zekere hoeveelheid informatie zal zo verloren raken maar op zo’n manier dat het systeem nog wel correct, als is het benaderend, beschreven wordt.
- Ook zonder numerieke methoden laat dit toe om het aantal nodige componenten te verminderen indien verondersteld wordt dat de toestand op iedere site gelijk is. Voor enkele voorbeelden verwijzen we naar de literatuur, in het bijzonder §5.1.2 in [11].

Voor een systeem van  $m$  sites met een  $n$  dimensionale basis van ééndeeltjetoestanden zal het aantal elementen van  $\mathcal{O}(n^m)$  naar de orde  $\mathcal{O}(\text{poly}(n)\text{poly}(m))$  gaan in deze numerieke benaderingen. Het voorschrift voor een periodisch matrix product toestand (3.10) wordt visueel voorgesteld door

$$|\psi\rangle = \begin{array}{c} \quad \quad \quad \alpha_N \\ \overbrace{\boxed{M_1} \xrightarrow{\alpha_1} \boxed{M_2} \xrightarrow{\alpha_2} \dots \xrightarrow{\alpha_{N-1}} \boxed{M_N}} \\ | \quad | \quad | \\ i_1 \quad i_2 \quad i_N \end{array} . \quad (3.11)$$



### 3.5 Matrix product operatoren

Een logische verderzetting van het factoriseren van een toestand naar een matrix product toestand is het proberen factoriseren van operatoren. De argumentatie hiervoor is dat veeldeeltjes operatoren veelal geschreven kunnen worden als een samenstelling van veel ééndeltjes operatoren.

Een eenvoudig voorbeeld van een veeldeeltjes operator die eenvoudig te schrijven is met behulp van ééndeltjes operatoren is de kinetische energie operator  $\hat{T}$ , gegeven door

$$\hat{T} = \sum_{j=1}^N -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_j^2 = \sum_{j=1}^N \hat{t}_j. \quad (3.12)$$

Nu is geweten dat in een systeem van  $N$  deeltjes deze operator voorgesteld wordt door een  $(N, N)$ -tensor. Al is het snel duidelijk dat er slechts een fractie van de volledige tensor nodig is om het systeem goed te beschrijven; de operator  $\hat{T}$  voert individuele metingen per deeltje uit en telt deze resultaten op. Zolang de operator voldoende “eenvoudig” is, waarmee bedoeld wordt dat deze weinig verstrengeling opwekken in de toestanden waarop ze inwerken, kan SVD gebruikt worden om de tensor overeenkomstig met de operator te herschrijven als een aaneenschakeling van tensoren met slechts klein verlies aan informatie.

De factorisatie van de operator tensor kan opnieuw visueel weergegeven worden. Neem een operator  $\hat{O}$  ten opzichte van de ééndeltjes basis  $\{|\varphi_n\rangle\}$ . Dan wordt de operator geschreven als

$$\hat{O} = \sum_{\substack{i_1, \dots, i_N \\ i'_1, \dots, i'_N}} O_{i_1, \dots, i_N}^{i'_1, \dots, i'_N} |\varphi_{i'_N}\rangle \otimes \dots \otimes |\varphi_{i'_1}\rangle \langle \varphi_{i_1}| \otimes \dots \otimes \langle \varphi_{i_N}|, \quad (3.13)$$

waar de  $(N, N)$ -tensor  $O$  nu voorgesteld kan worden door

$$O_{i_1, \dots, i_N}^{i'_1, \dots, i'_N} = \begin{array}{c} i'_1 \quad i'_2 \quad \dots \quad i'_N \\ | \quad | \quad \dots \quad | \\ \boxed{O} \\ | \quad | \quad \dots \quad | \\ i_1 \quad i_2 \quad \dots \quad i_N \end{array} . \quad (3.14)$$

Deze kan nu gefactoriseerd worden met SVD om het aantal elementen te verminderen met minimaal verlies aan informatie. De factorisatie kan (net zoals voor een MPS) op periodische en niet-periodische vorm waarvan hier enkel de laatste geïllustreerd wordt. Formeel wordt dit genoteerd als

$$O_{i_1, \dots, i_N}^{i'_1, \dots, i'_N} = \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_{N-1}} (W_1)_{\alpha_1}^{i_1, i'_1} (W_2)_{\alpha_1, \alpha_2}^{i_2, i'_2} \dots (W_N)_{\alpha_{N-1}}^{i_N, i'_N}, \quad (3.15)$$

waar  $W_n$  de 3-tensoren of 4-tensoren (afhankelijk van de positie) weergegeven waarin de tensor

$O$  gefactoriseerd werd. Grafisch wordt de matrix product operator gegeven als

$$O_{i_1, \dots, i_N}^{i'_1, \dots, i'_N} = \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} i'_1 & i'_2 & i'_N \\ | & | & | \\ \boxed{W_1} & \boxed{W_2} & \dots & \boxed{W_N} \\ | & | & | \\ i_1 & i_2 & i_N \end{array} \end{array} . \quad (3.16)$$

### 3.6 Bepalen van de grondtoestand

Nu de matrix product toestanden en matrix product operatoren geïntroduceerd werden, begint uiteraard ook de zoektocht naar een manier om voor een gegeven Hamiltoniaan de grondtoestandsenergie en (indien mogelijk) de grondtoestandsgolffunctie bepalen

$$E_{gs} = \langle \psi_{gs} | \hat{H} | \psi_{gs} \rangle = \begin{array}{c} \boxed{|\psi_{gs}\rangle} \\ | \quad \dots \quad | \\ \boxed{\hat{H}} \\ | \quad \dots \quad | \\ \boxed{\langle \psi_{gs}|} \end{array} . \quad (3.17)$$

Een veelgebruikt algoritme toegepast in tensor netwerken is Density Matrix Renormalisation Group (DMRG) [28, 29], hoewel dit algoritme niet inherent verbonden is met de tensor netwerk beschrijving van veeldeeltjes kwantumsystemen is het wel opmerkelijk compatibel indien de MPS en MPO voorstellingen gebruikt worden [29]. Het DMRG algoritme kan in enkele stappen samegevat worden als volgt [6].<sup>III</sup>

Men kan dan voor twee naburige sites, op plaatsen  $n$  en  $n + 1$ , de variationele grondtoestandsenergie  $\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle$  optimaliseren terwijl de rest van de keten constant blijft. Om dit te doen wordt de initiële golffunctie voorgesteld als de twee-site tensor door contractie over alle andere sites. Waarna er (na projectie op een goed gekozen basis) met behulp van een iteratief algoritme de energie geoptimaliseerd kan worden. Herhalen van deze stappen voor alle burens in “sweeps” over het hele netwerk in beide richtingen (links en rechts) zal de toestand doen convergeren naar de grondtoestand.

Dit algoritme kan niet uitgevoerd worden op periodische matrix product operator voorstellingen. Daarom zal er in de latere berekeningen (zie Hoofdstuk 6) steeds gewerkt worden met de niet-periodische vorm.

Belangrijk om te onthouden is dat dit een variationele methode is, waarbij de grondtoestandsgolffunctie gevonden wordt door het numeriek optimaliseren van een initiële willekeurige (genormaliseerde) toestand. Hoewel het variationeel principe geldig is op de energie die ermee bepaald wordt [24] geeft deze methode *geen* garanties op de overeenkomstige golffunctie.

<sup>III</sup>Er zijn enkele variaties van het algoritme, DMRG1, DMRG2, DMRGX, ... de focus van deze sectie ligt hier op het algoritme dat als “standaard” methode gebruikt wordt, DMRG2. De andere algoritmes hebben uiteraard ook hun eigen interessante toepassingen, voor de details en verschillen met de alternatieve algoritmes verwijzen we naar de literatuur [35–37].

Veelal wordt er echter wel aangenomen dat deze toch zeer gelijkaardig zal zijn aan de *echte* golffunctie van de grondtoestand.

### 3.7 Waarom tensor netwerken?

De literatuur [4, 38] toont immers dat matrix product toestanden suboptimaal zijn voor systemen met sterke verstrengeling tussen de sites; ze zullen veelal een grote bindingsdimensie nodig hebben om het systeem correct te beschrijven. Ondertussen is ook duidelijk dat de verstrengeling cruciaal is om supergeleiding te beschrijven zoals afgeleid kan worden uit de interactie term (2.2) en de BCS variationele golffunctie (2.4).

Echter is ook duidelijk dat de grote verstrengeling in dit geval “behandelbaar” is voor het modelsysteem. Belangrijk is om op te merken dat het modelsysteem in Hoofdstuk 2 net zo opgesteld werd dat op iedere site de tweedeeltjesbasis (2.1) beschouwd wordt en de BCS variationele golffunctie (2.4) net zijn sterke verstrengeling binnen een site toont. Hiermee motiveren we het gebruik van tensor netwerken om een toch sterk verstrengelde golffunctie te modelleren; de grootste verstrengeling blijft binnen een site van de matrix product toestand en de bindingsdimensie ook behapbaar blijft voor numerieke analyse.

## Deel II

# Berekeningen: Analytisch & Numeriek

Na de elementaire beschrijvingen van de BCS theorie en het model systeem in Hoofdstuk 1 en Hoofdstuk 2 is het mogelijk om hiermee aan de slag te gaan om deze te bestuderen. Hiervoor zullen verschillende methoden gebruikt worden om dit systeem te simuleren.

Eerst is het mogelijk om voor een klein systeem de numerieke diagonalisatie uit te voeren in MATLAB. Het systeem schaalt exponentieel met het aantal gesimuleerde deeltjes waardoor deze berekeningen snel op hun limieten botsen. Echter geeft dit wel een goed ijkpunt voor de vergelijking met andere methoden aangezien wel geweten is dat de resultaten voor dit systeem exact zijn voor het model systeem.

Een tweede krachtige methode is deze van de gemiddelde veld theorie, waar de complexe interacties tussen alle deeltjes vereenvoudigd worden doormiddel van een symmetrie argument. Immers is het systeem isotroop en worden alle interacties gelijkwaardig beschouwd. Dit laat toe om het aantal bestudeerde vrijheidsgraden sterk te verminderen door de interacties te beschrijven als ontstrengelde deeltjes, welke als producttoestand geschreven kunnen worden, waar ieder deeltje interageert met een “gemiddeld veld” opgewekt door alle andere deeltjes.

Tot slot worden tensor netwerken gebruikt om dit systeem te beschrijven. Hier wordt uitgelegd hoe het systeem praktisch geïmplementeerd wordt in de Python bibliotheek quimb en de resultaten als functie van de kinetische parameter  $t$  onderzocht worden.

## Hoofdstuk 4

# Exacte oplossing

Een diagonalisatie voor het systeem zonder de kinetische bijdrage werd uitgevoerd in [3, 10]. In het huidige geval, met kinetische energie, hebben we geen analytische oplossing meer maar is een exacte numerieke diagonalisatie nog wel mogelijk.

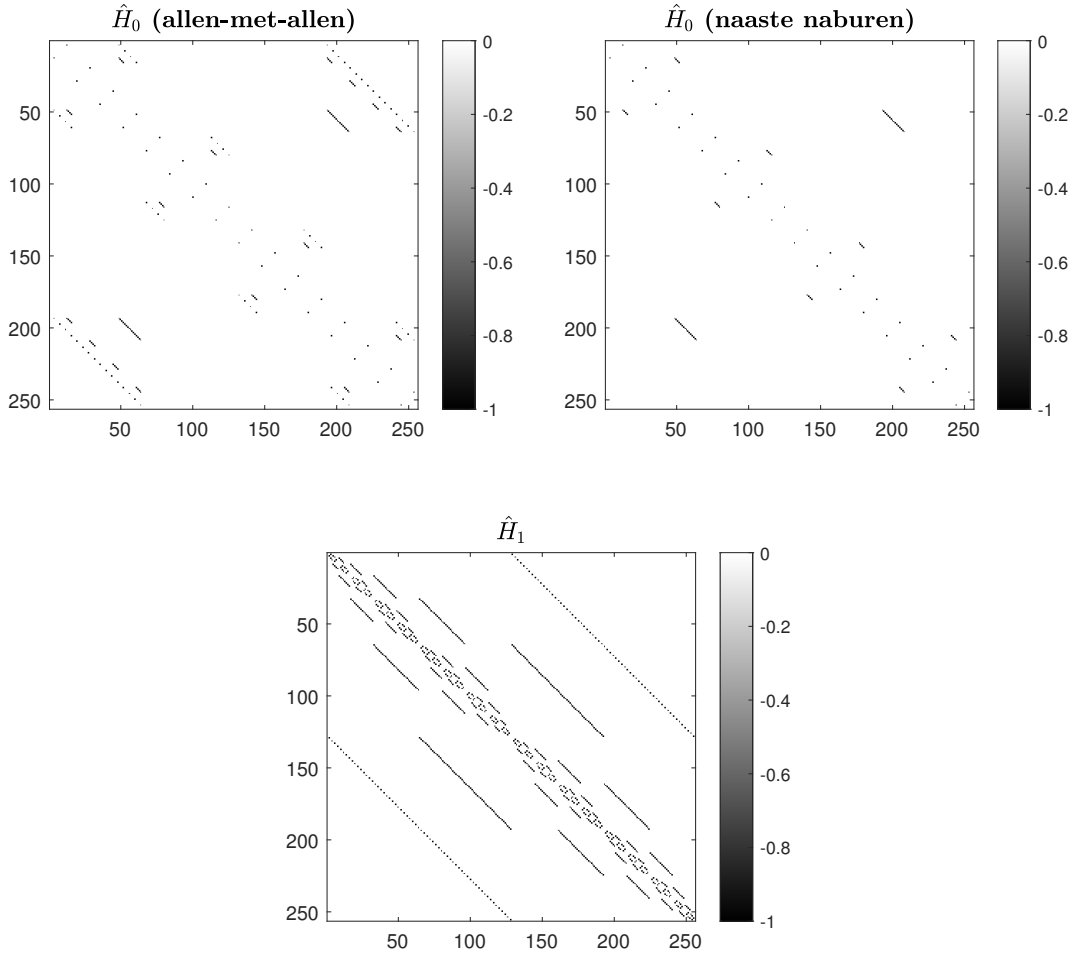
Voor een voldoende klein aantal roosterpunten  $M$  werd het systeem geïmplementeerd in MATLAB. De belangrijkste keuzes om te maken zijn de basis en het aantal roosterpunten om te bestuderen. De basis is gegeven door de basis van bezettingsgetallen zodat een systeem met  $M$  roosterpunten weergegeven wordt door een kolomvector met  $2M$  elementen. Het is handig om een nieuwe notationale voorstelling van de basis kets (2.1) en Figuur 2.2 te gebruiken zodat de bezetting nu gegeven wordt door

$$|00\rangle \mapsto |00\rangle, \quad |\uparrow 0\rangle \mapsto |10\rangle, \quad |0\downarrow\rangle \mapsto |01\rangle, \quad |\uparrow\downarrow\rangle \mapsto |11\rangle. \quad (4.1)$$

Merk op dat de spin van een elektron nu geïmpliceerd wordt enkel door de positie in de ket, het is belangrijk om dit in het achterhoofd te houden tijdens de berekeningen.

Om een goede keuze voor het aantal roosterpunten  $M$  te maken is het belangrijk om de dimensie van de matrix voorstellingen voor de operatoren in gedachten te houden, deze zal immers zéér snel groeien. Voor ieder roosterpunt zijn er vier basistoestanden, waardoor de toestanden voor het volledige systeem in een  $4^M$  dimensionale ruimte leven. De operatoren zullen dan weergegeven worden als  $4^M \times 4^M$  matrices. Er wordt dan gekozen om  $M = 4$  te beschouwen als referentie wat vergelijking met eerder werk [3, 10] eenvoudig houdt en de operatoren beschrijft als  $256 \times 256$  matrices zodat ook de berekeningen relatief snel kunnen verlopen. De operatoren die geïmplementeerd worden zijn de interactie Hamiltoniaan  $\hat{H}_0$  (voor allen-met-allen en naaste naburen interacties) en de kinetische energie  $\hat{H}_1$  welke visueel weergegeven worden door de matrices als plots te tonen. Op Figuur 4.1 worden deze matrices getoond als plots welke de interne structuur duidelijk weergeven.

De weergave van de operatoren en toestanden heeft nood aan een duidelijke labeling van de basistoestanden. Hiervoor kan eenvoudig de link gelegd worden tussen de bezettingsgetallen en de binaire getallen. De toestanden worden gelabeld volgens de overeenkomstige decimale waarde, bijvoorbeeld wordt de toestand  $|11, 00, 11, 00\rangle$  gelabeld met het getal  $(11001100)_2 = (204)_{10}$ .



**Figuur 4.1:** Een weergave van de interactie Hamiltoniaan  $\hat{H}_0$  (bovenaan) gemeten in eenheden  $V$  voor de allen-met-allen interactie (links) en de naaste naburen interactie (rechts). Onderaan is de weergave van de kinetische term  $\hat{H}_1$  gemeten in eenheden  $t$  getoond, overeenkomstig met de literatuur [39].

## 4.1 Numerieke diagonalisatie

Nu er een eenduidige definitie is van de matrices  $\hat{H}_0$  en  $\hat{H}_1$  kunnen numerieke methoden [40,41] gebruikt worden om de eigenwaarden en bijhorende eigenvectoren van  $\hat{H} = \hat{H}_0(V) + \hat{H}_1(t)$  te bepalen voor alle waarden van  $t, V$ . Met kennis van de eigentoestanden en energieën van  $\hat{H}_0$  is het eenvoudig om voor kleine waarden van  $t$  stringtheorie toe te passen. Uiteraard is men hier niet beperkt tot enkel benaderende methoden aangezien ook voor arbitraire  $t$  de numerieke diagonalisatie uitgevoerd kan worden. Op deze manier kan de validiteit van stringtheorie getest worden.

Op Figuur 4.2 is de energie van de grondtoestand, eerste geëxciteerde toestand, en de bandkloof geplot als functie van de kinetische parameter  $t$ . Het is duidelijk dat voor grote waarden van  $t$  de resultaten voor het Hubbard model verschijnen, een lineair verloop van de energie als functie van  $t$  waar de verhoudingen tussen de energie niveau's constant worden. Interessant is de knik in het verloop van de eerste geëxciteerde energie; verdere analyse toont

dat hier twee energie niveau's snijden.

Deze knik in de grafiek toont zich ook zeer duidelijk in het verloop van de bandkloof van het systeem. We halen hier de drie regimes die duidelijk onderscheidbaar zijn op Figuur 4.2 aan, de numerieke waarden voor  $t$  overeenkomstig met deze regimes zijn afhankelijk van het interactie model (AMA of NN).

- $t/V$  klein: De bandkloof blijft relatief constant met een lichte toename tot een niet-afleidbare knik in de grafiek.
- $t/V$  tussenin: De bandkloof neemt significant af als functie van de kinetische parameter  $t$ . Hier vermoeden we dat supergeleiding verloren gaat al is er meer werk nodig om dit aan te tonen.
- $t/V$  groot: De bandkloof groeit, in de limiet voor grote  $t$  verloopt deze lineair omdat  $\hat{H}_1$  hier dominant is.

Om de geldigheid van tweede orde storingstheorie af te toetsen aan het resultaat van de exacte diagonalisatie worden de twee resultaten als functie van  $t$  voor beide modellen in Figuur 4.3 getoond. De ongestoorde grondtoestandsenergie is gegeven door<sup>1</sup>

$$E_{gs}^{(0)} = \begin{cases} -4.00000 V & \text{AMA;} \\ -2.23607 V & \text{NN.} \end{cases} \quad (4.2a)$$

$$(4.2b)$$

We verwaarlozen de bijdrage van de eerste orde correctie op de energie, deze zijn immers klein genoeg om te verklaren als numerieke artefacten

$$\Delta E_{gs}^{(1)} = \begin{cases} 1.00075 \times 10^{-32} V & \text{AMA;} \\ -1.04109 \times 10^{-33} V & \text{NN.} \end{cases} \quad (4.3a)$$

$$(4.3b)$$

Voor de tweede orde correctie vinden we

$$\Delta E_{gs}^{(2)} = \begin{cases} -0.88889 V & \text{AMA;} \\ -1.05095 V & \text{NN.} \end{cases} \quad (4.4a)$$

$$(4.4b)$$

Zodat de tweede orde gecorrigeerde energie gegeven is door

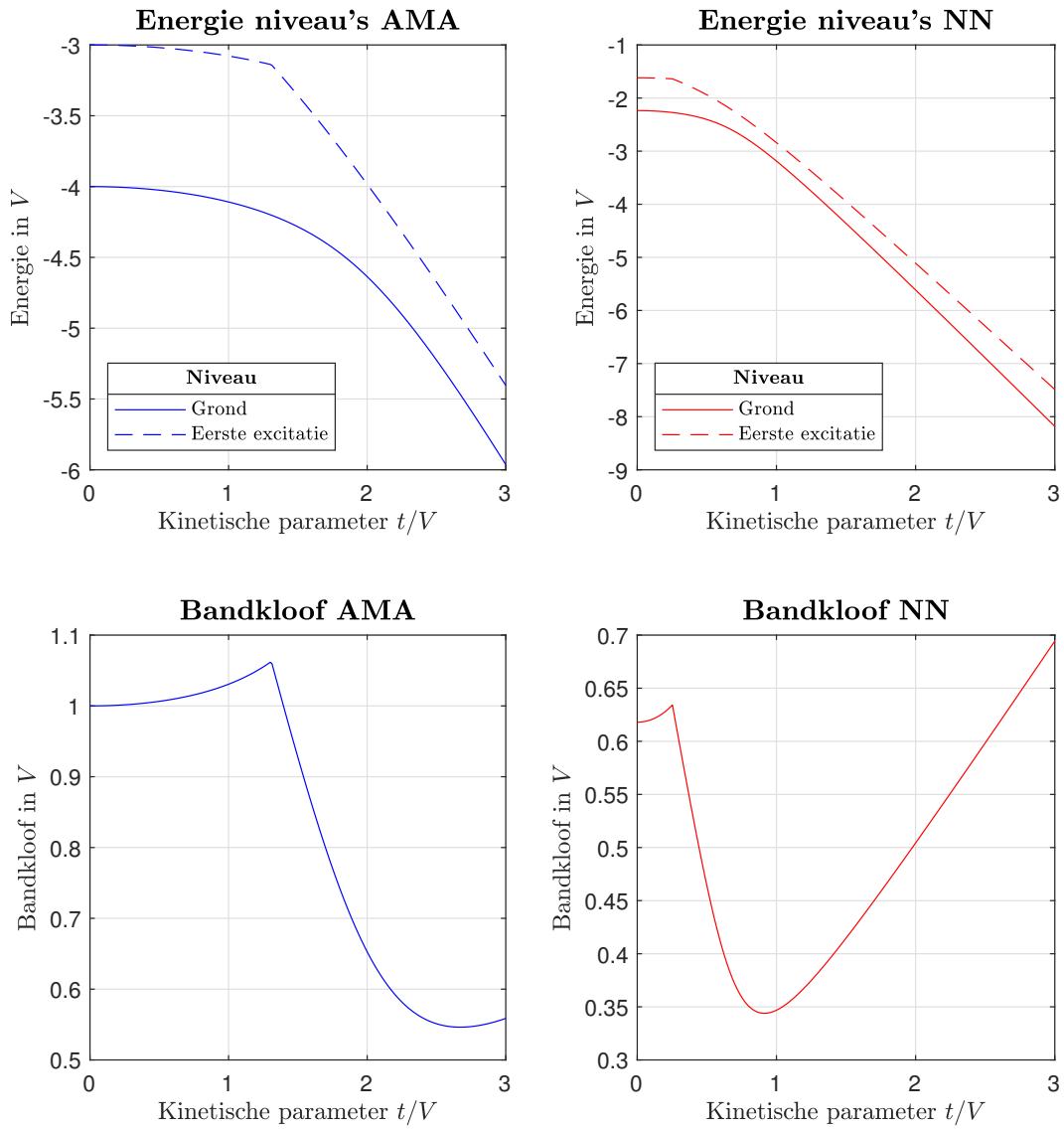
$$E_{gs}^{(2)} = E_{gs}^{(0)} + \underbrace{\frac{t}{V} \Delta E_{gs}^{(1)}}_{\approx 0} + \frac{|t|^2}{V^2} \Delta E_{gs}^{(2)}, \quad (4.5)$$

welke getoond wordt op Figuur 4.3.

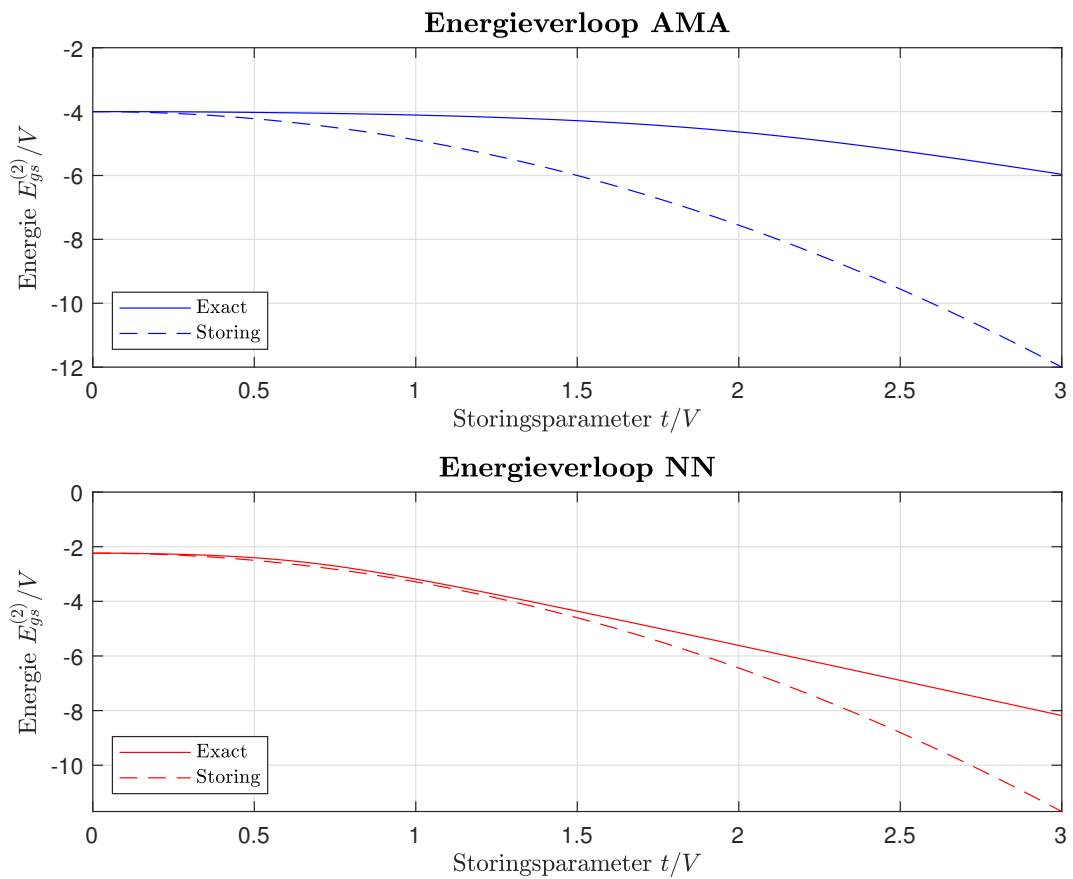
---

<sup>1</sup>Alle numerieke resultaten in deze sectie zullen we afronden op vijf decimalen.





**Figuur 4.2:** Het verloop van de grondtoestandsenergie (bovenaan) en de bandkloof (onderaan) voor de allen-met-allen interacties (links) en de naaste nabuur interacties (rechts) als functie van de kinetische parameter  $t$ . De bandkloof is eenvoudigweg bepaald door het verschil in de energie niveau's op bovenstaande plots.



**Figuur 4.3:** Een vergelijking van het verloop van de exacte grondtoestand en de tweede orde gecorrigeerde grondtoestand als functie van de kinetische parameter (hier ook de storingsparameter)  $t$  voor de allen-met-allen interacties (AMA, bovenaan) en de naaste naburen interacties (NN, onderaan).

Op Figuur 4.3 is er een opvallend verschil zichtbaar in het geldigheidsdomein van de storingstheorie (voor de grondtoestandsenergie) voor de twee interactie modellen (AMA of NN). Voor de allen-met-allen interacties stellen we dat storingstheorie geldig is voor  $0 \leq t \leq 0.5 V$  en voor naaste nabuur interacties is deze geldig voor  $0 \leq t \leq 1.5 V$ .

Merk hieraan op dat de validiteitsdomeinen net omgekeerd zijn aan wat men intuïtief zou verwachten met behulp van het verloop van de bandkloof in Figuur 4.2. Het is hier belangrijk om in acht te nemen dat hier *enkel* de validiteit beschouwd wordt voor de grondtoestandsenergie en er dus geen garanties zijn op de correctheid van de resultaten voor storingstheorie op andere niveau's. Het blijft echter wel handige kennis om in het achterhoofd te houden wanneer de resultaten later vergeleken worden met andere oplossingsmethoden.

## 4.2 Dichtheidsmatrices

De thermische dichtheidsmatrix is gedefinieerd [42] als

$$\hat{\rho}_{th} = e^{-\beta \hat{H}} = \sum_n e^{-E_n/(k_B T)} |\phi_n\rangle \langle \phi_n|, \quad (4.6)$$

waar  $|\phi_n\rangle$  de eigentoestanden van  $\hat{H}$  zijn met bijhorende energieën  $E_n$ . Aangezien er in dit hoofdstuk de exacte numeriek bepaalde eigentoestanden gebruikt worden kan hiermee ook de dichtheidsmatrix geconstrueerd worden voor alle waarden van de temperatuur  $T$ . Deze dichtheidsmatrix kan gebruikt worden om de toestandssom  $\mathcal{Z}$  te bepalen, immers geldt

$$\text{tr}(\hat{\rho}_{th}) = \sum_n e^{-E_n/(k_B T)} \underbrace{\text{tr}(|\phi_n\rangle \langle \phi_n|)}_{=1} = \mathcal{Z}, \quad (4.7)$$

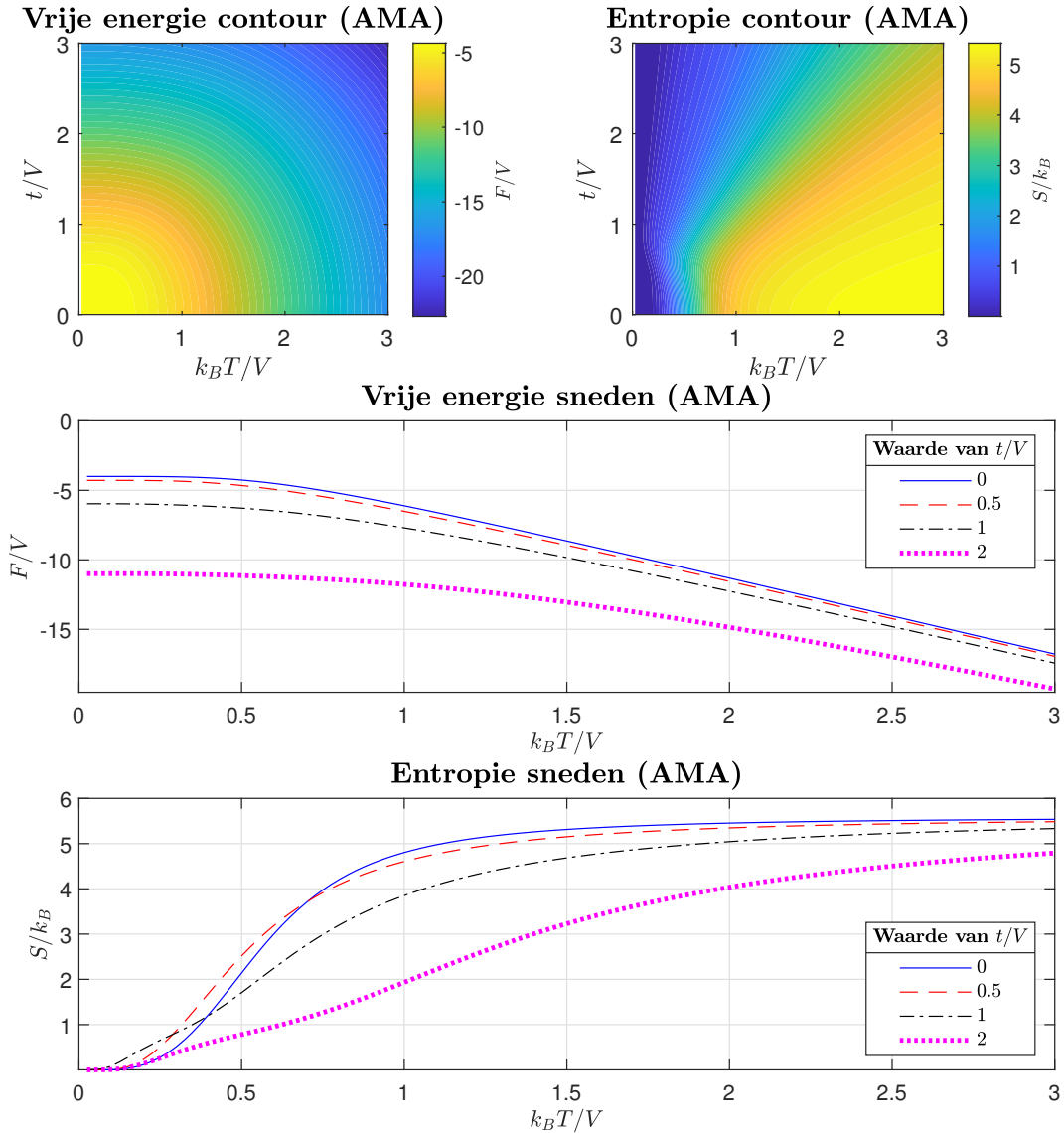
wat toelaat om thermodynamische eigenschappen van het systeem af te leiden [43]. Interessant is bovendien dat de energieën en eigentoestanden afhankelijk zijn van de kinetische parameter  $t$  zodat ook de invloed van  $t$  onderzocht kan worden. De grootheden die we zullen bestuderen zijn

$$\left\{ \begin{array}{ll} F = -k_B T \ln \mathcal{Z} & \text{vrije energie;} \\ S = -\frac{\partial F}{\partial T} & \text{entropie;} \\ C = T \frac{\partial S}{\partial T} & \text{warmtecapaciteit.} \end{array} \right. \quad (4.8a) \quad (4.8b) \quad (4.8c)$$

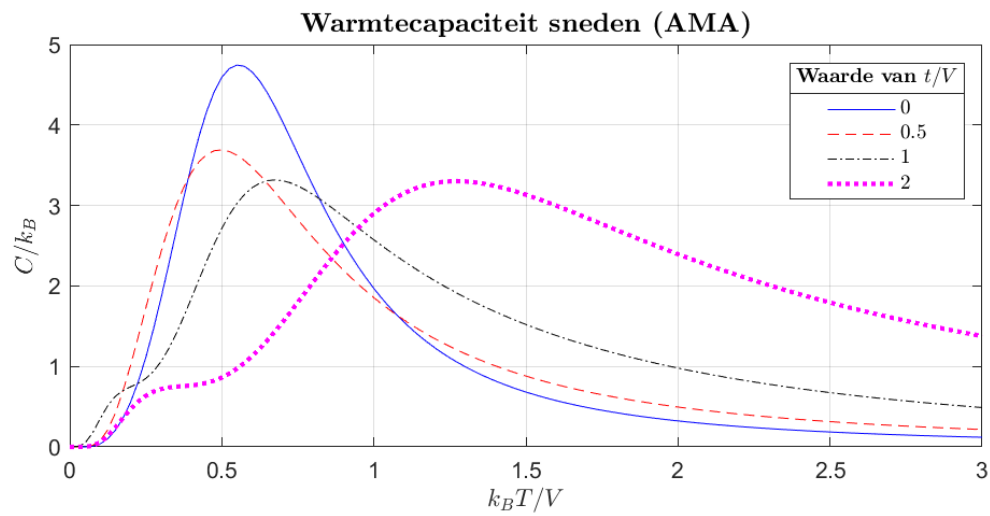
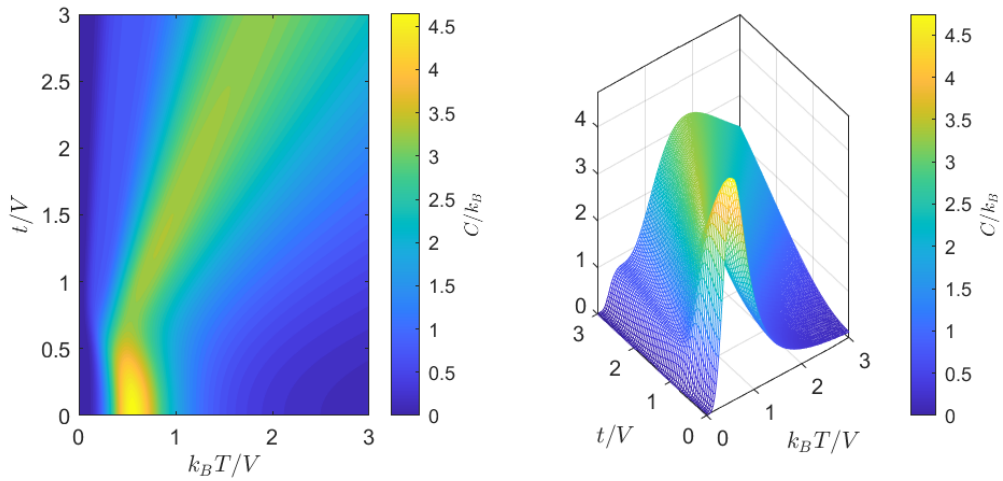
In volgende secties (Sectie 4.2.1 en Sectie 4.2.2) worden de resultaten verzameld voor bovenstaande thermodynamische grootheden. Een bespreking hiervan volgt in Sectie 4.2.3.

### 4.2.1 Allen-met-allen dichtheidsmatrix

In onderstaande figuren worden de thermodynamische grootheden (4.8) getoond, welke berekend werden met behulp van de exacte (numeriek bepaalde) toestandssom voor de AMA interacties als functies van de temperatuur  $T$  en de kinetische parameter  $t$ . Figuur 4.4 toont het verloop van de vrije energie  $F$  en de entropie  $S$  als contourplots en sneden bij enkele gekozen waarden voor  $t/V$ . Op Figuur 4.5 wordt de warmtecapaciteit getoond met een contourplot, een oppervlak waar de structuur van de piek zeer duidelijk zichtbaar is, en enkele sneden voor gekozen waarden van  $t/V$ .



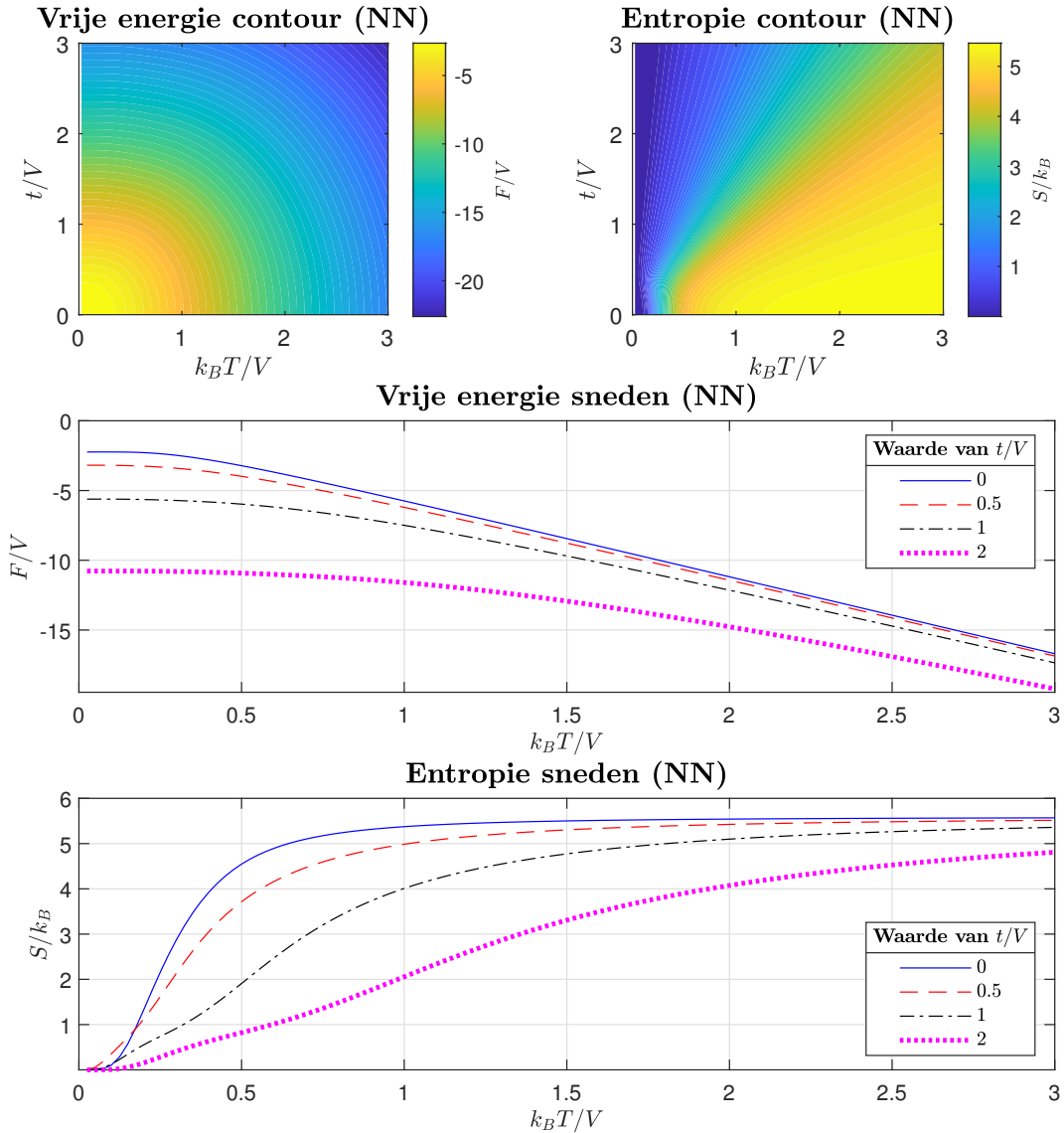
**Figuur 4.4:** De vrije energie  $F$  (contour links boven, sneden midden) en de entropie  $S$  (contour rechts boven, sneden onderaan) als functie van de temperatuur  $T$  en kinetische parameter  $t$  voor de allen-met-allen (AMA) interacties.



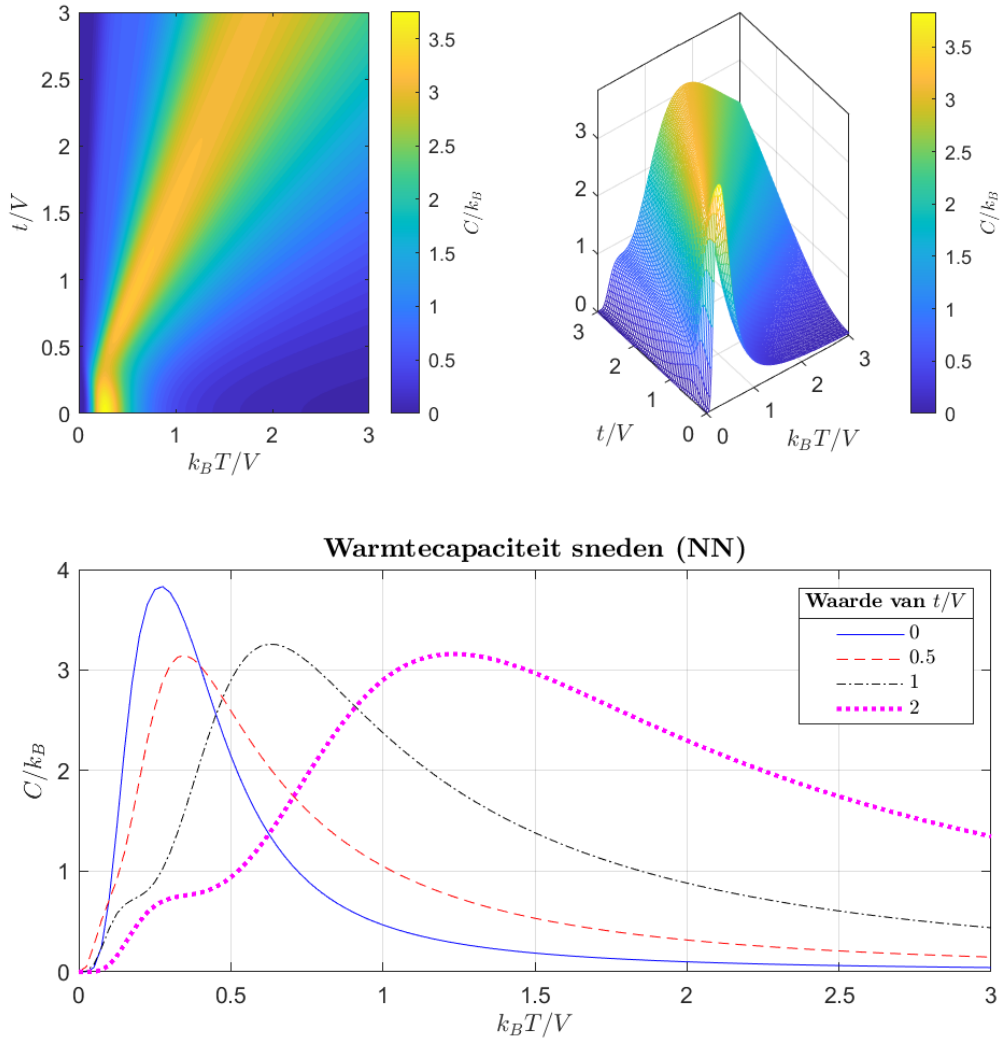
**Figuur 4.5:** De warmtecapaciteit als functie van de temperatuur  $T$  en kinetische parameter  $t$  voor de allen-met-allen (AMA) interacties.

## 4.2.2 Naaste naburen dichtheidsmatrix

In onderstaande figuren worden de thermodynamische grootheden (4.8) getoond, welke berekend werden met behulp van de exacte (numeriek bepaalde) toestandssom voor de NN interacties als functies van de temperatuur  $T$  en de kinetische parameter  $t$ . Figuur 4.6 toont het verloop van de vrije energie  $F$  en de entropie  $S$  als contourplots en voor sneden bij enkele gekozen waarden van  $t/V$ . Op Figuur 4.7 wordt de warmtecapaciteit getoond met een contour plot, een oppervlak waarbij de structuur van de piek zeer duidelijk is, en enkele sneden van het oppervlak voor gekozen waarden van  $t/V$ .



**Figuur 4.6:** De vrije energie  $F$  (contour links boven, sneden midden) en de entropie  $S$  (contour rechts boven, sneden onderaan) als functie van de temperatuur  $T$  en kinetische parameter  $t$  voor de naaste nabuur (NN) interacties.



**Figuur 4.7:** De warmtecapaciteit als functie van de temperatuur  $T$  en kinetische parameter  $t$  voor de naaste nabuur (NN) interacties.

### 4.2.3 Bespreking van thermodynamische grootheden

Het is duidelijk af te lezen op de figuren van voorgaande secties dat de kwalitatieve resultaten voor AMA en NN interacties nagenoeg dezelfde zijn. De numerieke waarden verschillen maar het verloop toont dezelfde invloeden van de kinetische parameter  $t$ .

In de analyse van de invloed van  $t$  is het interessant om de limietgevallen voor  $t \rightarrow 0$  en  $t \gg V$  te beschouwen. Voor  $0 \leq t \ll V$  hopen we een regime te vinden waarin de storing van de kinetische term klein genoeg is om de supergeleiding niet te breken. Dit laatste zullen we voornamelijk bespreken in de context van de warmtecapaciteit weergegeven in Figuur 4.5 en Figuur 4.7 in een volgende paragraaf.

**Limietgeval  $t \rightarrow 0$ :** In de limiet waar de kinetische parameter  $t$  nul wordt (de BCS limiet), wordt verwacht dat de resultaten gepresenteerd door [3] terug zichtbaar worden. Op een keuze van eenheden na zien we in [3] precies hetzelfde gedrag verschijnen op figuren 3.2, 3.4, en 3.6 op pagina's 34-37.

**Limietgeval  $t \gg V$ :** Voor de limiet van grote kinetische bijdrage; of overeenkomstig een kleine invloed van de interactie term, wordt er verwacht resultaten te vinden gelijkaardig aan de literatuur voor het Hubbard model [44, 45]. Hier moeten we in het achterhoofd houden dat de interactie term verschilt in de twee modellen (conventioneel Hubbard model vs. het model  $\hat{H}(V, t)$  uit Hoofdstuk 2) al zal dit verschil kleiner worden naarmate  $t$  groeit ten opzichte van  $V$ .

Een directe vergelijking van de grafieken voor de vrije energie, entropie, en warmtecapaciteit in de literatuur voor ééndimensionale Hubbard modellen [44, 45] tonen kwalitatief hetzelfde gedrag voor  $t/V \gtrsim 0.5$  als functie van de temperatuur, hier zien we de vorming van extra “bulten” in de grafieken voor de entropie en de warmtecapaciteit bij voldoende hoge  $t/V$ .

**Vlakke band regime:** Het vlakke band regime definiëren we hier als het regime waar  $0 < t \ll V$  opdat de effecten van kinetische energie klein zijn ten opzichte van de bijdrage van de supergeleidende interactie. In dit regime zullen we met de kleine kinetische bijdrage dus effectief de vlakke, realistischere bandenstructuur kunnen bestuderen.

In dit regime wijken de resultaten slechts licht af van de resultaten op  $t = 0$  wat aangeeft dat storingstheorie een goede kandidaat is om het systeem te benaderen vanuit de exacte oplossingen voor het systeem in de BCS limiet [3, 10].

**Bespreking van de warmtecapaciteit:** Onze voornaamste interesse ligt bij de bespreking van de warmtecapaciteit aangezien deze piek cruciaal is in de experimentele vaststelling en theoretische beschrijving van supergeleiding [17, 19].

Waar de theoretische en experimentele resultaten een scherpe piek vinden, geven de resultaten in dit hoofdstuk (en de resultaten in de literatuur [3, 10]) een afgeronde bult. Deze afwijking kunnen we toewijzen aan de eindigheid van het bestudeerde systeem. In de limiet voor een oneindig groot systeem (in de bulk van een materiaal) verwachten we dat de piek scherper wordt zoals ook gedemonstreerd wordt in figuur 3.6 op p.37 [3].



## Hoofdstuk 5

# Gemiddelde veld theorie

Als een volledig theoretische uitwerking van het modelsysteem zal de gemiddelde veld theorie behandeling een zeer waardevolle beschrijving leveren voor het probleem. In het geval van de allen-met-allen interactie term kan er vergeleken worden met eerder werk [3, 46]. In de berekeningen van dit hoofdstuk wordt de kern herhaald maar zal er niet in groot detail getreden worden; de stappen worden in deze thesis verklaard maar het rekenwerk wordt achterwege gelaten. Voor deze uitwerkingen zal gebruik gemaakt worden van de Bogoliubov operatoren  $\hat{\alpha}_{i,\sigma}$  en  $\hat{\alpha}_{i,\sigma}^\dagger$  welke respectievelijk een excitatie in de golffunctie zullen annihilieren of creëren. Deze operatoren werden gedefinieerd door N.N. Bogoliubov in 1958 [47] en worden voor het discreet modelsysteem (Hoofdstuk 2) genoteerd als

$$\hat{\alpha}_{i,\sigma} = u\hat{c}_{i,\sigma} - \sigma v\hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger \quad \Leftrightarrow \quad \hat{c}_{i,\sigma} = u\hat{\alpha}_{i,\sigma} + \sigma v\hat{\alpha}_{i,-\sigma}^\dagger, \quad (5.1)$$

waar  $\sigma \in \{\uparrow = +, \downarrow = -\}$ , de parameters  $u, v$  zijn dezelfde als gebruikt in de definitie van de variationele BCS golffunctie (2.4) en zullen in dit hoofdstuk bepaald worden. Voor enkele handige rekenregels, commutatierelaties, en eigenschappen van de Bogoliubov operatoren refereren we naar de Appendix A.

In het eerste deel van dit hoofdstuk (tot Sectie 5.6) wordt de invloed van de interactie Hamiltoniaan  $\hat{H}_0$  onderzocht voor de twee soorten interacties (allen-met-allen of naaste naburen). Hier worde de  $\hat{H}_1$  term nog niet expliciet in rekening gebracht aangezien er geldt dat (dit zal aangetoond worden in Sectie 5.6)

$$\forall t : \quad \left\langle \Psi_{BCS} \left| \hat{H}_1 \right| \Psi_{BCS} \right\rangle = 0, \quad (5.2)$$

de variationele grondtoestandsgolffunctie voelt deze term dus niet. Als gevolg zal deze term ook niet bijdragen in de optimalisatie van de variationele parameters  $u$  en  $v$ ; zonder verlies van algemeenheid bestuderen wordt de BCS variationele grondtoestand  $|\Psi_{BCS}\rangle$  dus onderzocht bij  $t = 0$ . De bijdrage van  $\hat{H}_1$  zal later (in Sectie 5.6) perturbatief in rekening gebracht worden.

### 5.1 Gemiddelde veld Hamiltoniaan

De eerste opdracht in het beschrijven van het modelsysteem is om de Hamiltoniaan te herschrijven als een gemiddelde veld Hamiltoniaan. Nu zal blijken dat dit voor de allen-met-allen interacties (Sectie 5.1.1) en naaste naburen interacties (Sectie 5.1.2) zeer gelijkaardige Hamiltonianen zal opleveren. Dit laat toe om het probleem te abstraheren naar een algemenere

interactieterm welke voorgesteld wordt in Sectie 5.1.3. De berekeningen zullen dan uitgevoerd worden voor deze abstractere vorm van de interactie waarin later de correcte waarden voor het interactiegetal  $Q$  (zie Sectie 5.1.3) gesubstitueerd worden om de allen-met-allen of naaste nabuur interacties te bestuderen en zo de gezochte resultaten te produceren.

### 5.1.1 Allen-met-allen interacties

Beschouw de Hamiltoniaan voor interacties met alle andere deeltjes in het systeem

$$\hat{H}_0 = -V \sum_{i \neq j=1}^M \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow}, \quad (5.3)$$

waar de paren van creatie en annihilatie operatoren herschreven worden als een gemiddelde bijdrage met een fluctuatie

$$\hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger = \left\langle \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \right\rangle + \underbrace{\left( \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger - \left\langle \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \right\rangle \right)}_{\text{fluctuatie}}; \quad (5.4)$$

$$\hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow} = \left\langle \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow} \right\rangle + \underbrace{\left( \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow} - \left\langle \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow} \right\rangle \right)}_{\text{fluctuatie}}. \quad (5.5)$$

Zodat de term in de Hamiltoniaan voor arbitraire  $i$  en  $j$  herschreven kan worden door

$$\begin{aligned} \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow} &= \left\langle \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \right\rangle \left\langle \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow} \right\rangle + \left\langle \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \right\rangle \left( \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow} - \left\langle \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow} \right\rangle \right) \\ &\quad + \left\langle \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow} \right\rangle \left( \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger - \left\langle \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \right\rangle \right) + 0 \\ &= \left\langle \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \right\rangle \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow} + \left\langle \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow} \right\rangle \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger - \left\langle \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \right\rangle \left\langle \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow} \right\rangle, \end{aligned} \quad (5.6)$$

waar de term kwadratisch in de fluctuatie verwaarloosd wordt en de overige termen vereenvoudigd. De gemiddelde veld Hamiltoniaan wordt nu gegeven door

$$\hat{H}_0^{GV} = -V \sum_{i \neq j=1}^M \left[ \left\langle \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \right\rangle \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow} + \left\langle \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow} \right\rangle \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger - \left\langle \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \right\rangle \left\langle \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow} \right\rangle \right], \quad (5.7)$$

waar nu de bandkloofvergelijking [17, 18, 46] geïntroduceerd wordt die het ‘‘anomale gemiddelde’’ genoemd wordt, genoteerd als  $\Delta$ . Deze is gegeven door

$$\Delta := \frac{(M-1)V}{M} \sum_{i=1}^M \left\langle \hat{c}_{i,\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow} \right\rangle, \quad (5.8)$$

intuïtief zou men verwachten dat de verwachtingswaarde  $\left\langle \hat{c}_{i,\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow} \right\rangle$  nul zou zijn, echter blijkt dit niet het geval zijn voor dit systeem. Alsook wordt de aantalvergelijking [17, 18, 46] ingevoerd met behulp van de tel operator voor elektronen

$$N = \left\langle \hat{N} \right\rangle = \sum_{i=1}^M \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left\langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma} \right\rangle, \quad (5.9)$$

welke niets anders stelt dan dat de verwachte waarde van de tel operator voor de elektronen gelijk moet zijn aan het aantal elektronen in het systeem. De gemiddelde veld Hamiltoniaan is nu dus gegeven door

$$\hat{H}_0^{GV} = -\Delta^* \sum_{i=1}^M \hat{c}_{i,\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow} - \Delta \sum_{j=1}^M \hat{c}_{j,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger + \frac{M|\Delta|^2}{(M-1)V}. \quad (5.10)$$

Echter tonen eenvoudige berekeningen dat deze Hamiltoniaan het aantal deeltjes niet behoudt, de Hamiltoniaan commuteert immers niet met de tel operator;  $[\hat{H}_0^{GV}, \hat{N}] \neq 0$ , waardoor deze operatoren niet gelijktijdig diagonaliseerbaar zijn [24,42]. Om dit probleem te verhelpen wordt een extra term toegevoegd met een Lagrange multiplicator  $\mu$  om het aantal deeltjes in het systeem vast te leggen. Deze Lagrange multiplicator kan fysisch geïnterpreteerd worden als de chemische potentiaal. De uiteindelijke Hamiltoniaan die in dit hoofdstuk bestudeerd zal worden (voor de allen-met allen interactie) is dus gegeven door

$$\hat{H}_0^{GV,\mu} = -\mu \sum_{i=1}^M \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma} - \Delta^* \sum_{i=1}^M \hat{c}_{i,\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow} - \Delta \sum_{j=1}^M \hat{c}_{j,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger + \frac{M|\Delta|^2}{(M-1)V}. \quad (5.11)$$

### 5.1.2 Naaste naburen interacties

Het herschrijven van de Hamiltoniaan voor naaste nabuur interacties verloopt nagenoeg op dezelfde manier als voor de allen-met-allen interacties. De berekeningen vertrekken nu vanuit

$$\hat{H}_0 = -V \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow} = -V \sum_{j=1}^M \left( \hat{c}_{j,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j-1,\downarrow} \hat{c}_{j-1,\uparrow} + \hat{c}_{j,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j+1,\downarrow} \hat{c}_{j+1,\uparrow} \right), \quad (5.12)$$

waar de som van naaste naburen meteen herschreven wordt voor het modelsysteem. Schrijven van de creatie en annihilatie operatoren als een bijdrage van een gemiddeld veld plus een fluctuatie levert

$$\hat{c}_{j,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger = \langle \hat{c}_{j,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger \rangle + \underbrace{\left( \hat{c}_{j,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger - \langle \hat{c}_{j,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger \rangle \right)}_{\text{fluctuatie}}; \quad (5.13)$$

$$\hat{c}_{j+1,\downarrow} \hat{c}_{j+1,\uparrow} = \langle \hat{c}_{j+1,\downarrow} \hat{c}_{j+1,\uparrow} \rangle + \underbrace{\left( \hat{c}_{j+1,\downarrow} \hat{c}_{j+1,\uparrow} - \langle \hat{c}_{j+1,\downarrow} \hat{c}_{j+1,\uparrow} \rangle \right)}_{\text{fluctuatie}}; \quad (5.14)$$

$$\hat{c}_{j-1,\downarrow} \hat{c}_{j-1,\uparrow} = \langle \hat{c}_{j-1,\downarrow} \hat{c}_{j-1,\uparrow} \rangle + \underbrace{\left( \hat{c}_{j-1,\downarrow} \hat{c}_{j-1,\uparrow} - \langle \hat{c}_{j-1,\downarrow} \hat{c}_{j-1,\uparrow} \rangle \right)}_{\text{fluctuatie}}. \quad (5.15)$$

De gemiddelde veld Hamiltoniaan is dan eenvoudig te bepalen als de producten van bovenstaande termen. Hierin worden de termen kwadratisch in fluctuaties zodat verwaarloosd

$$\hat{H}_0^{GV} = -V \sum_{j=1}^M \left[ \begin{aligned} & \langle \hat{c}_{j,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger \rangle \left( \hat{c}_{j+1,\downarrow} \hat{c}_{j+1,\uparrow} + \hat{c}_{j-1,\downarrow} \hat{c}_{j-1,\uparrow} \right) \\ & + \hat{c}_{j,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger \left( \langle \hat{c}_{j+1,\downarrow} \hat{c}_{j+1,\uparrow} \rangle + \langle \hat{c}_{j-1,\downarrow} \hat{c}_{j-1,\uparrow} \rangle \right) \\ & - \langle \hat{c}_{j,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger \rangle \left( \langle \hat{c}_{j+1,\downarrow} \hat{c}_{j+1,\uparrow} \rangle + \langle \hat{c}_{j-1,\downarrow} \hat{c}_{j-1,\uparrow} \rangle \right) \end{aligned} \right]. \quad (5.16)$$

Hoewel deze Hamiltoniaan initi el veel verschillende termen lijkt te bevatten, kan deze nog enigzinds vereenvoudigd worden. Uit periodiciteit en gelijkwaardigheid van de roosterpunten in het systeem kan verondersteld worden dat

$$\forall i, j : \quad \langle \hat{c}_{i,\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow} \rangle = \langle \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow} \rangle \quad \text{en} \quad \langle \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \rangle = \langle \hat{c}_{j,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger \rangle, \quad (5.17)$$

zodat het anormale gemiddelde  $\Delta$  gedefini erd wordt met behulp van

$$\Delta \sim V \langle \hat{c}_{i,\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow} \rangle \quad \forall i. \quad (5.18)$$

Uit symmetrie overwegingen en met oog op veralgemening in de volgende sectie wordt deze meteen op een gelijkwaardige maar handigere vorm geschreven

$$\Delta = \frac{2V}{M} \sum_{i=1}^M \langle \hat{c}_{i,\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow} \rangle. \quad (5.19)$$

Dit laat toe om de Hamiltoniaan te vereenvoudigen tot

$$\hat{H}_0^{GV} = -\frac{\Delta^*}{2} \sum_{j=1}^M \left[ \hat{c}_{j+1,\downarrow} \hat{c}_{j+1,\uparrow} + \hat{c}_{j-1,\downarrow} \hat{c}_{j-1,\uparrow} \right] - \Delta \sum_{j=1}^M \hat{c}_{j,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger + \frac{M}{2V} |\Delta|^2. \quad (5.20)$$

Nu kan er gebruikmakend van de periodiciteit van het systeem de eerste term nog vereenvoudigd worden door een index herlabeling door te voeren waardoor de Hamiltoniaan gegeven wordt door

$$\hat{H}_0^{GV} = -\Delta^* \sum_{j=1}^M \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow} - \Delta \sum_{j=1}^M \hat{c}_{j,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger + \frac{M}{2V} |\Delta|^2. \quad (5.21)$$

Als laatste stap wordt opnieuw de Lagrange multiplicator  $\mu$  toegevoegd, de chemische potentiaal, opdat in de nieuwe Hamiltoniaan het aantal elektronen behoudt. Er volgt dat de gemiddelde veld Hamiltoniaan voor naaste naburen interacties gegeven wordt door

$$\hat{H}_0^{GV,\mu} = -\mu \sum_{j=1}^M \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} - \Delta^* \sum_{j=1}^M \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow} - \Delta \sum_{j=1}^M \hat{c}_{j,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger + \frac{M}{2V} |\Delta|^2. \quad (5.22)$$

### 5.1.3 Algemeen geval

Inspectie van de definities van  $\Delta$  in vergelijkingen (5.8) & (5.19) en de gemiddelde veld Hamiltonianen in vergelijkingen (5.11) & (5.22) tonen sterke gelijkenissen dat ons inspireren om de abstractie te maken naar een algemeen ‘‘interactie getal’’  $Q$ . Dit interactiegetal kan achteraf terug ingevuld worden als 2 (voor NN) of  $M - 1$  (voor AMA) om de algemene oplossingen te herleiden tot de oplossingen voor de specifieke Hamiltonianen. In de rest van dit hoofdstuk zal dus gewerkt worden met de gemiddelde veld Hamiltoniaan

$$\hat{H}_{0,Q}^{GV,\mu} = -\mu \sum_{j=1}^M \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} - \Delta^* \sum_{j=1}^M \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow} - \Delta \sum_{j=1}^M \hat{c}_{j,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger + \frac{M}{QV} |\Delta|^2, \quad (5.23)$$

met bijhorende uitdrukking voor  $\Delta$ , de bandkloofvergelijking

$$\Delta = \frac{QV}{M} \sum_{i=1}^M \langle \hat{c}_{i,\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow} \rangle. \quad (5.24)$$

De energie van de variationele grondstoestandsgolffunctie  $|\Psi_{BCS}\rangle$  is eenvoudig bepalen met behulp van de transformatie naar de Bogoliubov operatoren (5.1) (zie ook Appendix A). Het rekenwerk is dan triviaal om te tonen dat de energie gegeven wordt door

$$E_{0,Q}^{GV,\mu}(u, v) = -2\mu M v^2 - (\Delta + \Delta^*) M u v + \frac{M}{QV} |\Delta|^2. \quad (5.25)$$

## 5.2 Energie optimalisatie, aantalvergelijking, en de bandkloofvergelijking

In deze sectie zal de variationeel bepaalde energie van het gemiddelde veld model (5.25) geoptimaliseerd worden. Deze energie is gegeven als functie van de variationele parameters  $u$  en  $v$ , echter is geweten dat er nog een extra restrictie op deze parameters ligt omwille van de normalisatie van de golffunctie,  $u^2 + v^2 = 1$ , er volgt dus dat

$$u = \cos \theta \quad \text{en} \quad v = \sin \theta \quad \text{voor} \quad 0 \leq \theta < 2\pi. \quad (5.26)$$

Zodat de zoektocht naar de variationele parameters herleid wordt tot het bepalen van de optimale waarde voor  $\theta$  in

$$E_{0,Q}^{GV,\mu}(\theta) = -2\mu M \sin^2 \theta - (\Delta + \Delta^*) M \cos \theta \sin \theta + \frac{M}{QV} |\Delta|^2. \quad (5.27)$$

De minimalisatie is eenvoudigweg bepaald door het oplossen van

$$0 \stackrel{\text{eis}}{=} \frac{d}{d\theta} E_{0,Q}^{GV,\mu} = -4\mu M \sin \theta \cos \theta - (\Delta + \Delta^*) M (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta), \quad (5.28)$$

naar  $\theta$ . Het is eenvoudig te tonen dat dit probleem herschreven kan worden tot de vergelijking

$$0 = \tan^2 \theta - \frac{4\mu}{\Delta + \Delta^*} \tan \theta - 1, \quad (5.29)$$

een kwadratische vergelijking in  $\tan \theta$ . Deze vergelijking is eenvoudig op te lossen zodat de finale oplossing gegeven is door<sup>I</sup>

$$\left\{ \theta = \arctan \left\{ \frac{2\mu}{\Delta + \Delta^*} \left[ 1 + \sqrt{1 + \left( \frac{\Delta + \Delta^*}{2\mu} \right)^2} \right] \right\} + n\pi \quad \text{minimum}; \quad (5.30a)$$

$$\left\{ \theta = \arctan \left\{ \frac{2\mu}{\Delta + \Delta^*} \left[ 1 - \sqrt{1 + \left( \frac{\Delta + \Delta^*}{2\mu} \right)^2} \right] \right\} + n\pi \quad \text{maximum}. \quad (5.30b)$$

Voor  $n \in \mathbb{Z}$  echter kan zonder verlies van algemeenheid gekozen worden om te stellen dat  $n = 0$  voor alle verdere berekeningen. Invullen van (5.30a) in de uitdrukking voor de energie (5.27) geeft de energie in functie van de chemische potentiaal  $\mu$  en  $\Delta$ . Deze twee parameters

<sup>I</sup>Voor het bepalen van minima en maxima gebruiken we de tweede afgeleide van de energie naar  $\theta$ . Echter zijn deze berekeningen omslachtig dus laten we deze hier achterwege.

moeten nog zelfconsistent bepaald worden om de finale uitdrukking voor de energie te vinden. Allereerst tonen berekeningen dat het aantal deeltjes gegeven wordt door

$$N = \langle \Psi_{BCS} | \hat{N} | \Psi_{BCS} \rangle = \left\langle \Psi_{BCS} \left| \sum_{j=1}^M \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \right| \Psi_{BCS} \right\rangle = 2Mv^2, \quad (5.31)$$

waar de berekening eenvoudig worden door de transformatie naar de Bogoliubov operatoren. Indien de vullingsfactor  $\nu$  gedefiniëerd wordt als

$$\nu = \frac{N}{2M}, \quad (5.32)$$

waar meteen duidelijk is dat  $0 \leq \nu \leq 1$  omdat er nooit meer dan  $2M$  elektronen in het systeem kunnen zijn omwille van Pauli's exclusieprincipe [24]; er kunnen hoogstens twee elektronen per site zijn (één spin-up en één spin-down). Dan volgt uit (5.31) dat

$$v^2 = \frac{N}{2M} = \nu. \quad (5.33)$$

In combinatie met de normalisatievoorwaarde  $u^2 + v^2 = 1$  volgt dan

$$\begin{cases} u = \pm\sqrt{1-\nu}; \\ v = \pm\sqrt{\nu}, \end{cases} \quad (5.34a)$$

$$(5.34b)$$

waar zonder verlies van algemeenheid gekozen wordt om de positieve wortels te gebruiken.

De berekening van het anomale gemiddelde  $\Delta$ , gegeven in vergelijking (5.24), is dan een eenvoudige berekening na transformatie naar de Bogoliubov operatoren

$$\Delta = \frac{QV}{M} \sum_{i=1}^M \langle \Psi_{BCS} | \hat{c}_{i,\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow} | \Psi_{BCS} \rangle = QVuv. \quad (5.35)$$

Met behulp van de vullingsfactor  $\nu$  volgt

$$\Delta = QV\sqrt{\nu(1-\nu)}. \quad (5.36)$$

Merk overigens op dat  $\Delta \in \mathbb{R}$  zodat ook  $\Delta = \Delta^*$  wat enige vereenvoudigingen zal toelaten in het vervolg van de berekeningen.

Nu de bandkloofvergelijking opgelost is en een uitdrukking voor  $\Delta$  gevonden werd kan ook de aantalvergelijking opgelost worden door de chemische potentiaal  $\mu$  te bepalen. Dit volgt eenvoudig uit

$$\nu = v^2 = \sin^2 \theta, \quad (5.37)$$

waar  $\theta$  gegeven is door (5.30a). Met behulp van de goniometrische eigenschap

$$\sin^2 \arctan x = \frac{x^2}{x^2 + 1}, \quad (5.38)$$

kan de volgende vergelijking opgelost worden naar de chemische potentiaal

$$\nu = \sin^2 \arctan \left\{ \frac{\mu}{\Delta} \left[ 1 + \sqrt{1 + \left( \frac{\Delta}{\mu} \right)^2} \right] \right\}. \quad (5.39)$$

Na lange berekeningen volgt dat de chemische potentiaal gegeven wordt door

$$\mu = \frac{QV}{2}(2\nu - 1). \quad (5.40)$$

De energie als functie van de vullingsfactor is dus na enige vereenvoudiging gegeven door

$$E_{0,Q}^{GV,\mu}(\nu) = -\mu N - MQV\nu(1 - \nu). \quad (5.41)$$

Om de optimale energie te bepalen als functie van de vullingsfactor moet er gemeten worden vanaf het Fermi-niveau, hiervoor wordt de nieuwe energie gedefiniëerd

$$\tilde{E}_{0,Q}^{GV,\mu}(\nu) = E_{0,Q}^{GV,\mu}(\nu) + \mu N = -\frac{M}{QV}\Delta^2 = -MQV\nu(1 - \nu). \quad (5.42)$$

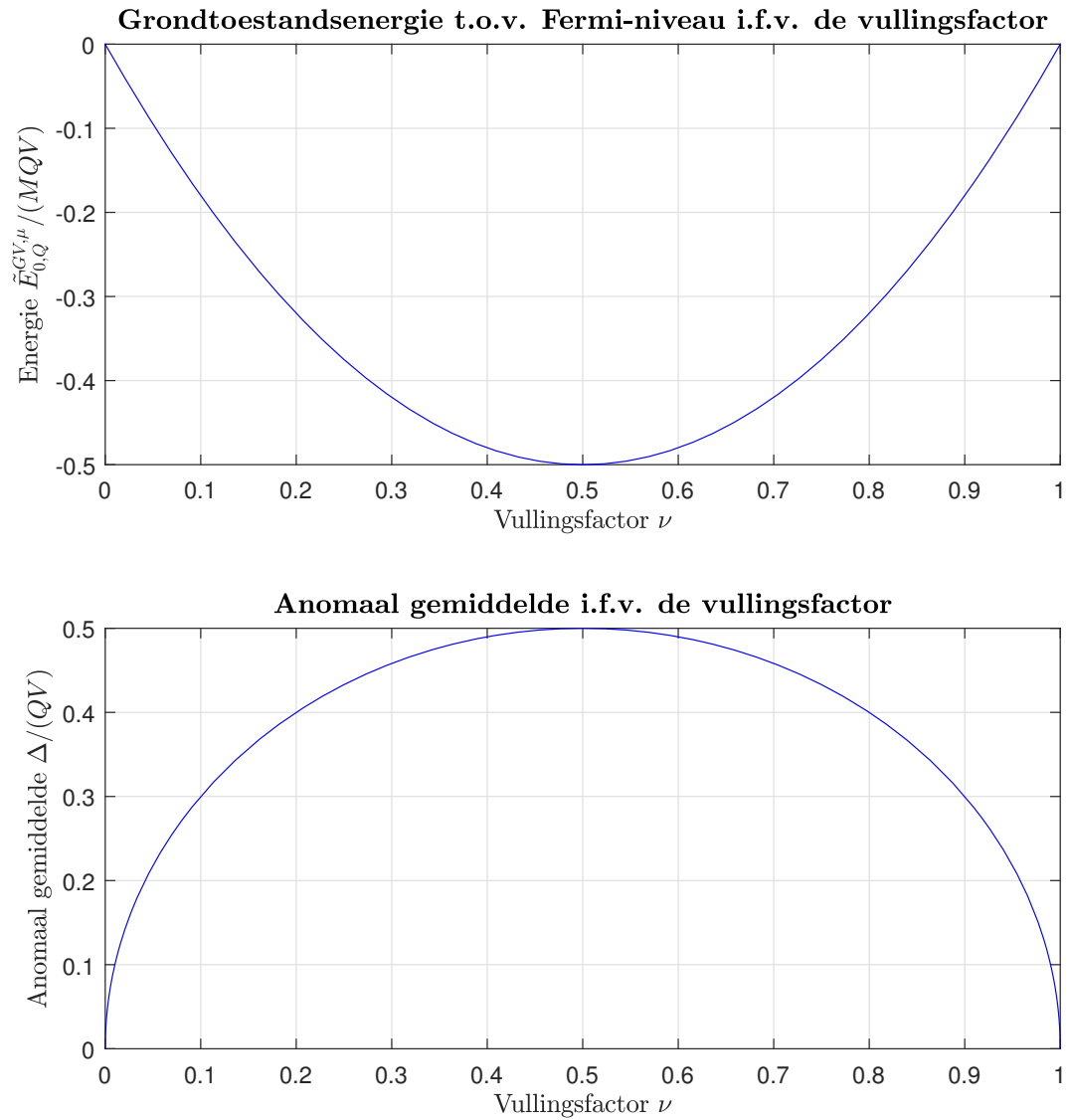
De optimalisatie in  $\nu$  is dan gegeven door<sup>II</sup>

$$0 \stackrel{\text{eis}}{=} \frac{d}{d\nu} \tilde{E}_{0,Q}^{GV,\mu}(\nu) = -MQV(1 - 2\nu) \Leftrightarrow \nu = \frac{1}{2}. \quad (5.43)$$

Geheel analoog kan getoond worden dat  $\Delta$  maximaal is voor de halve vulling. Het verloop van de energie (ten opzichte van het Fermi-niveau) en  $\Delta$  is gegeven in Figuur 5.1.

---

<sup>II</sup>Het is eenvoudig te tonen dat dit inderdaad een minimum is door de tweede afgeleide te bepalen in  $\nu = 1/2$ .



**Figuur 5.1:** De energie  $\tilde{E}_{0,Q}^{GV,\mu}$  gemeten ten opzichte van het Fermi-niveau (bovenaan) en het anormale gemiddelde  $\Delta$  (onderaan) geplots als functie van de vullingsfactor  $\nu$ .



### 5.3 Geëxciteerde toestanden

Om de energie van een geëxciteerde toestand te bepalen moet uiteraard eerst onderzocht worden hoe zo'n geëxciteerde toestand eruitziet. Hiervoor werken de Bogoliubov creatie operatoren in op de BCS variationele grondtoestandsgolffunctie. Voor het eerste geëxciteerde niveau wordt dus één paar opgebroken

$$|\Psi_{EXC}\rangle = \hat{\alpha}_{i,\sigma}^\dagger |\Psi_{BCS}\rangle = \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \prod_{j \neq i} \left( u + v \hat{c}_{j,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger \right) |\emptyset\rangle. \quad (5.44)$$

Hierin werd dus het paar op positie  $i$  gebroken en vervangen door een ongepaard elektron met spin  $\sigma$ . Door de isotropie van het systeem maakt het overigens ook niet uit welk elektron geëxciteerd wordt en zal de eerste geëxciteerde energie  $(2M)$ -voudig ontaard zijn. Voor deze berekeningen kan dan zonder verlies van algemeenheid gekozen worden dat  $\{i, \sigma\} = \{1, \uparrow\}$  zodat

$$|\Psi_{EXC}\rangle = \hat{\alpha}_{1,\uparrow}^\dagger |\Psi_{BCS}\rangle = |\uparrow 0\rangle \otimes \prod_{i=2}^M \left( u + v \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \right) |\emptyset\rangle. \quad (5.45)$$

De overeenkomstige energie wordt genoteerd als

$$E_{0,Q,EXC}^{GV,\mu} = \langle \Psi_{EXC} | \hat{H}_{0,Q}^{GV,\mu} | \Psi_{EXC} \rangle. \quad (5.46)$$

Om de energie te bepalen moet de Hamiltoniaan  $\hat{H}_{0,Q}^{GV,\mu}$  opnieuw herschreven worden in Bogoliubov operatoren en deze geëvalueerd worden in de gekozen golffunctie van een éénmaal geëxciteerd systeem. Hieruit volgt initieel

$$E_{0,Q,EXC}^{GV,\mu} = -\mu(u^2 - v^2) - 2\mu v^2 M - 2\Delta uv(M-1) + \frac{M}{QV} \Delta^2, \quad (5.47)$$

wat met behulp van de eerder gevonden waarden voor  $u$ ,  $v$ ,  $\nu$ , en  $\Delta$  vereenvoudigt tot

$$E_{0,Q,EXC}^{GV,\mu} = -\mu \left( N - \frac{N}{M} + 1 \right) - \frac{\Delta^2}{QV} (M-2). \quad (5.48)$$

Nu de energie van de grondtoestand en eerste geëxciteerde toestand gekend zijn is het eenvoudig om de energiekloof tussen de toestanden te bepalen met het verschil. Met enig rekenwerk volgt

$$E_{0,Q}^{GV,\mu} = -\mu N - \frac{M}{QV} \Delta^2, \quad (5.49)$$

zodat de energie kloof, overeenkomstig met de nodige energie om een Cooperpaar op te breken, gegeven is door

$$E_{0,Q,EXC}^{GV,\mu} - E_{0,Q}^{GV,\mu} = -\mu \left( N - \frac{N}{M} + 1 \right) - \frac{\Delta^2}{QV} (M-2) - \left( -\mu N - \frac{M\Delta^2}{QV} \right), \quad (5.50)$$

wat na vereenvoudiging oplevert dat<sup>III</sup>

$$E_{0,Q,EXC}^{GV,\mu} - E_{0,Q}^{GV,\mu} = \frac{1}{2} QV = \sqrt{\Delta^2 + \mu^2}. \quad (5.51)$$

<sup>III</sup>Om de laatste gelijkheid aan te tonen kan het eenvoudigst in de andere richting gewerkt worden. Hier volgt immers dat  $\sqrt{\Delta^2 + \mu^2} = \sqrt{V^2 Q^2 \nu(1-\nu) + \frac{1}{4} V^2 Q^2 (2\nu-1)^2} = \frac{1}{2} VQ \underbrace{\sqrt{4\nu(1-\nu) + (2\nu-1)^2}}_{=1}$ .

Voor de optimale vulling (welke de grondtoestandsenergie minimaliseert)  $\nu = \frac{1}{2}$  is de chemische potentiaal  $\mu = 0$  zodat het energie verschil exact gegeven wordt door  $\Delta$ . Het anomale gemiddelde kan dus geïnterpreteerd worden als de bandkloof in het spectrum van het model-systeem.

## 5.4 Temperatuur in rekening brengen

De voorgaande berekeningen werden uitgevoerd bij temperatuur  $T = 0$  K, het is zinvol om ook eindige temperaturen te beschouwen en de kritische temperatuur  $T_c$  van het systeem te bepalen. De berekeningen in dit hoofdstuk zullen de berekeningen in hoofdstuk 6.6 uit [18] en [46] nauw volgen. Om de eindige temperaturen in rekening te brengen moeten de geëxciteerde toestanden ook bezet kunnen worden met een waarschijnlijkheid bepaald door de Fermi-Dirac verdeling [43] opdat de verwachtingswaarden gegeven zijn door

$$\begin{cases} \langle \hat{\alpha}_{i,\sigma}^\dagger \hat{\alpha}_{i,\sigma} \rangle = f_i = \frac{1}{\exp\{\beta\sqrt{\Delta^2 + \mu^2}\} + 1}; & (5.52a) \\ \langle \hat{\alpha}_{i,\sigma} \hat{\alpha}_{i,\sigma}^\dagger \rangle = 1 - f_i. & (5.52b) \end{cases}$$

Hierin noteert  $\langle \bullet \rangle$  nu de kwantumstatistische verwachtingswaarde en  $\beta = 1/(k_B T)$  voor de Boltzmann constante  $k_B$ . Uit isotropie van het systeem kunnen we eenvoudig argumenteren dat  $f_i$  onafhankelijk is van de site  $i$ , in het vervolg van de berekeningen zal gewoon de factor  $f$  gebruikt worden

Belangrijk is dat in de limiet  $T \rightarrow 0$  en dus  $f \rightarrow 0$  opnieuw de resultaten uit de voorgaande berekeningen moeten volgen, wat een goede check is voor de resultaten dat in dit hoofdstuk bepaald worden.

Het is eenvoudig te tonen dat de ‘‘anomale’’ kwantumstatistische verwachtingswaarden van de Bogoliubov operatoren nul zullen zijn<sup>IV</sup>

$$\langle \hat{\alpha}_{i,\sigma} \hat{\alpha}_{i,-\sigma} \rangle = 0 = \langle \hat{\alpha}_{i,\sigma}^\dagger \hat{\alpha}_{i,-\sigma}^\dagger \rangle. \quad (5.53)$$

Met bovenstaande ‘‘rekenregels’’ kan men aan de slag voor alle temperaturen  $0 \leq T \leq T_c$  om de temperatuursafhankelijkheden van  $\Delta = \Delta(T)$  en  $\mu = \mu(T)$  in kaart te brengen.

Een laatste opmerking alvorens de berekeningen uitgevoerd kunnen worden is dat er nu niet langer de verwachtingswaarde  $\langle \Psi_{BCS} | \hat{H}_{0,Q}^{GV,\mu} | \Psi_{BCS} \rangle$  bepaald wordt om de energie te vinden maar de kwantumstatistische verwachtingswaarde  $\langle \hat{H}_{0,Q}^{GV,\mu} \rangle$ ; dit is immers wat toelaat om de bezettingen van geëxciteerde toestanden in rekening te brengen. Net zoals voorheen is het een eenvoudige opgave om de energie hieruit te bepalen als

$$E_{0,Q}^{GV,\mu}(u, v, f) = -2\mu M [v^2 + (u^2 - v^2) f] + 2M\Delta uv(2f - 1) + \frac{M}{QV} \Delta^2. \quad (5.54)$$

Hier volgt inderdaad het voorgaande resultaat (5.25) in de limiet  $f \rightarrow 0$ . Ook hier kan gesteld worden dat  $u = \cos \theta$  en  $v = \sin \theta$  om de energie te minimaliseren voor willekeurige parameter  $f$ , dit levert de optimale waarde voor  $\theta$

$$\theta = \arctan \left\{ \frac{\mu}{\Delta} \left[ 1 + \sqrt{1 + \left( \frac{\Delta}{\mu} \right)^2} \right] \right\}. \quad (5.55)$$

---

<sup>IV</sup>Wat uiteraard *niet* het geval zal zijn voor de enkel-elektron creatie en annihilatie operatoren.

De verdere oplossing van het probleem is opnieuw analoog aan het voorgaande door de aantalvergelijking en bandkloofvergelijking zelfconsistent op te lossen.

**The aantalvergelijking:** De berekening van het aantal deeltjes is eenvoudigweg op te lossen door de creatie en annihilatie operatoren van elektronen om te zetten naar de Bogoliubov operatoren waaruit volgt dat

$$N = \langle \hat{N} \rangle = \sum_{i=1}^M \sum_{\sigma=\uparrow\downarrow} \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma} \rangle = 2M[v^2 + (u^2 - v^2)f], \quad (5.56)$$

zodat na substitutie van de vullingsfactor volgt dat

$$\nu = \frac{N}{2M} = \sin^2 \theta + [\cos^2 \theta - \sin^2 \theta]f. \quad (5.57)$$

Met behulp van de goniometrische eigenschappen

$$\sin^2 \arctan x = \frac{x^2}{x^2 + 1} \quad \text{en} \quad \cos^2 \arctan x = \frac{1}{x^2 + 1}, \quad (5.58)$$

volgt dat de aantalvergelijking zich herleidt tot

$$\nu = \frac{x^2}{x^2 + 1} + \left( \frac{2}{x^2 + 1} - 1 \right) f \quad \text{voor} \quad x := \frac{\mu}{\Delta} \left[ 1 + \sqrt{1 + \left( \frac{\Delta}{\mu} \right)^2} \right]. \quad (5.59)$$

Om een definitieve uitdrukking voor de chemische potentiaal  $\mu$  te vinden moet er eerst een uitdrukking voor  $\Delta$  bepaald worden.

**De bandkloofvergelijking:** Per definitie is  $\Delta$  gegeven door

$$\Delta = \frac{QV}{M} \sum_{i=1}^M \langle \hat{c}_{i,\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow} \rangle, \quad (5.60)$$

welke opgelost kan worden met behulp van de Bogoliubov transformatie. Er volgt dat

$$\Delta = QVuv(1 - 2f), \quad (5.61)$$

zodat na substitutie voor  $u$  en  $v$ , en gebruik van de goniometrische eigenschappen

$$\sin \arctan x = \frac{x}{\sqrt{x^2 + 1}} \quad \text{en} \quad \cos \arctan x = \frac{1}{\sqrt{x^2 + 1}}, \quad (5.62)$$

volgt dat

$$\Delta = QV \frac{x}{x^2 + 1} (1 - 2f) \quad \text{voor} \quad x := \frac{\mu}{\Delta} \left[ 1 + \sqrt{1 + \left( \frac{\Delta}{\mu} \right)^2} \right]. \quad (5.63)$$

**Finale oplossing:** De resultaten uit vorige paragrafen komen dan samen om het volgende stelsel op te lossen

$$\left\{ \begin{array}{l} x := \frac{\mu}{\Delta} \left[ 1 + \sqrt{1 + \left( \frac{\Delta}{\mu} \right)^2} \right]; \\ \Delta = QV \frac{x}{x^2 + 1} (1 - 2f); \\ \nu = \frac{x^2}{x^2 + 1} + \left( \frac{2}{x^2 + 1} - 1 \right) f. \end{array} \right. \quad (5.64a)$$

$$\Delta = QV \frac{x}{x^2 + 1} (1 - 2f); \quad (5.64b)$$

$$\nu = \frac{x^2}{x^2 + 1} + \left( \frac{2}{x^2 + 1} - 1 \right) f. \quad (5.64c)$$

Lang maar eenvoudig rekenwerk toont dat de chemische potentiaal gegeven is door

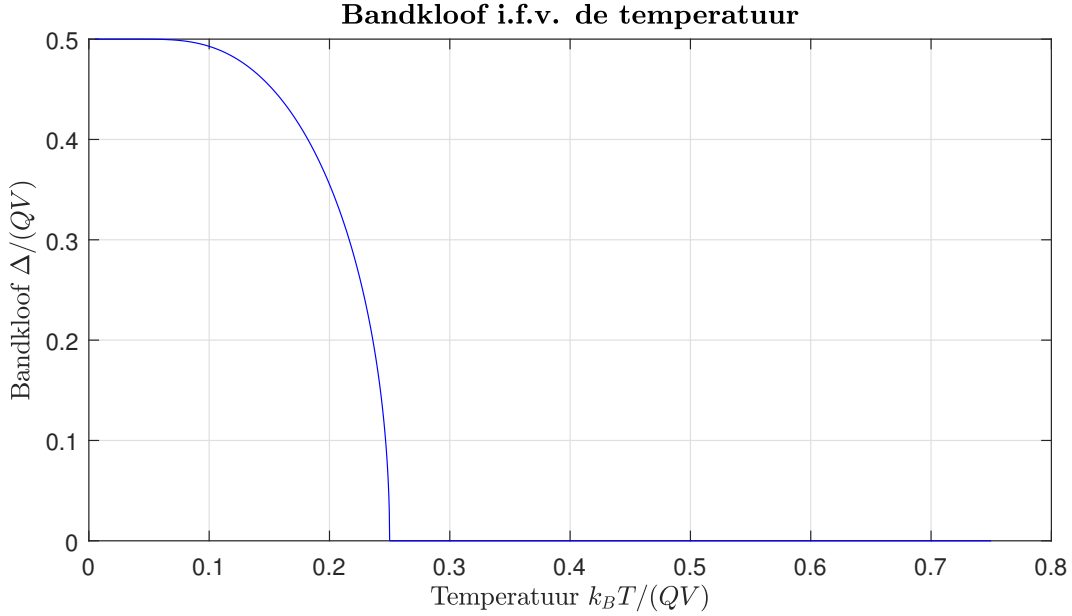
$$\mu = \frac{1}{2} QV (2\nu - 1), \quad (5.65)$$

en de bandkloof door

$$\Delta = QV \sqrt{\nu(1 - \nu) + f(f - 1)}. \quad (5.66)$$

Zo volgt ook de finale uitdrukking voor de energie als functie van de vullingsfactor en de temperatuur (via de factor  $f$ ) waar in de limiet  $f \rightarrow 0$  inderdaad het voorgaande resultaat volgt. De uitdrukking vereenvoudigt echter weinig en geeft geen diepere inzichten en laten we hier dus achterwege.

De gevonden uitdrukking voor de bandkloof  $\Delta$  laat ook toe om deze te plotten als functie van de temperatuur, weergegeven op Figuur 5.2. Hier volgt het verwachte resultaat volgens de literatuur voor het gedrag van de bandkloof in functie van de temperatuur. Het toont de maximale bandkloof op temperatuur  $T = 0$  en de waarde van de kritische temperatuur (5.70) (welke in volgende paragraaf analytisch bepaald wordt) welke hier duidelijk zichtbaar als de knik in de grafiek waar  $\Delta$  nul wordt. Hier sluit de bandkloof en zal er geen supergeleiding plaatsvinden aangezien de energie nodig om een Cooperpaar te breken hier nul is.



**Figuur 5.2:** Plot van de bandkloof  $\Delta$  als functie van de temperatuur voor vullingsfactor  $\nu = 1/2$ .

**Kritische temperatuur:** Tot slot van de analyse van het systeem kan de uitdrukking voor de kritische temperatuur van het systeem bepaald worden. Deze wordt gedefinieerd als de temperatuur waarop de bandkloof zich sluit

$$\Delta(T_c) = 0. \quad (5.67)$$

Er rest dus, na invullen van de chemische potentiaal, om het volgende op te lossen

$$0 = QV \sqrt{\nu(1-\nu) + \frac{1}{\exp\left\{\frac{QV(2\nu-1)}{2k_B T_c}\right\} + 1} \left( \frac{1}{\exp\left\{\frac{QV(2\nu-1)}{2k_B T_c}\right\} + 1} - 1 \right)}. \quad (5.68)$$

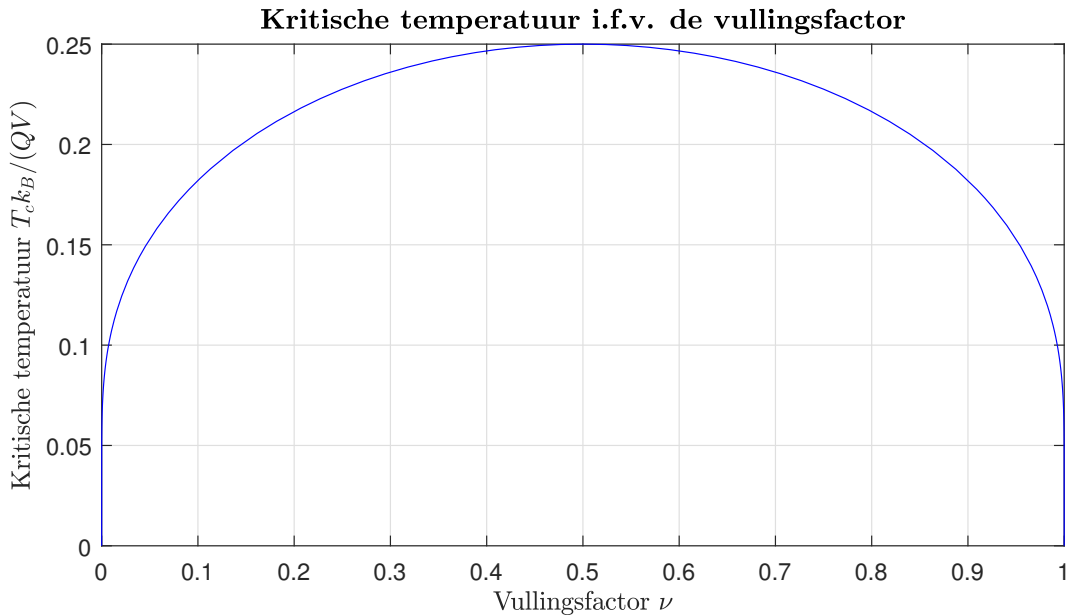
De algemene oplossing van deze vergelijking naar  $T_c$  wordt gegeven door

$$T_c = \frac{QV}{2k_B} \frac{2\nu - 1}{2\pi i n + \ln\left(\frac{1-\nu}{\nu}\right)} \quad \text{of} \quad T_c = \frac{QV}{2k_B} \frac{2\nu - 1}{2\pi i n + \ln\left(\frac{\nu}{1-\nu}\right)} \quad \text{voor} \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (5.69)$$

Het is echter duidelijk dat  $n = 0$  opdat er een reëel resultaat volgt. Alsook moet gelden dat  $0 \leq \nu \leq 1$  waardoor het eerste resultaat negatief zou zijn en uitgesloten wordt. Dit levert dus de finale uitdrukking voor de kritische temperatuur

$$T_c = \frac{QV}{2k_B} \frac{2\nu - 1}{\ln\left(\frac{\nu}{1-\nu}\right)}, \quad (5.70)$$

welke grafisch weergegeven wordt op Figuur 5.3.



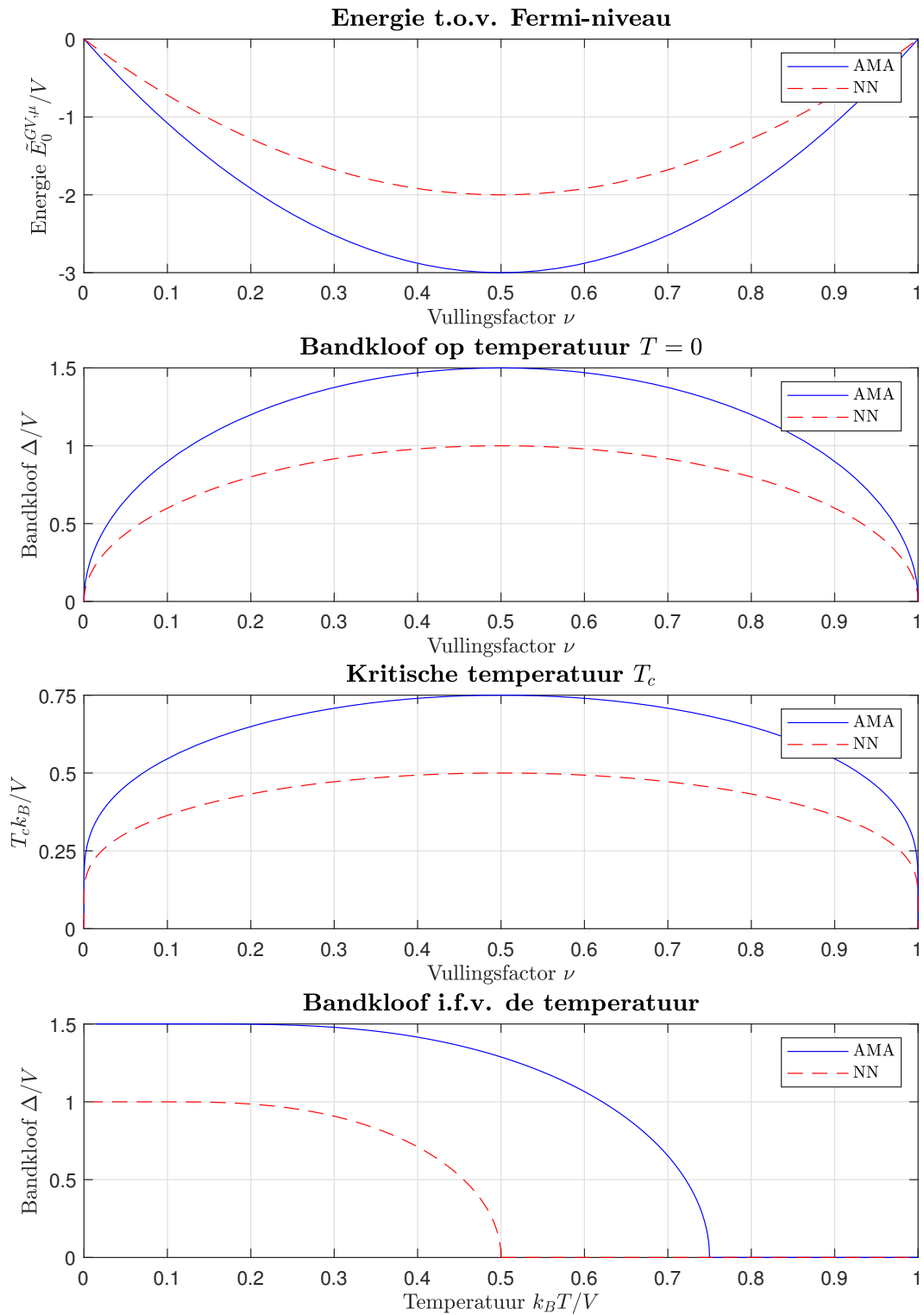
**Figuur 5.3:** Het verloop van de kritische temperatuur  $T_c$  als functie van de vullingsfactor  $\nu$ .

## 5.5 Bespreking: Kwalitatieve verschillen tussen de modellen

Uit de afleiding voor de gemiddelde veld Hamiltonianen voor het model systemen voor interacties met alle andere sites (AMA) en de interacties uitsluitend met de naaste naburen (NN) in Secties 5.1.1 en 5.1.2 zagen we snel dat deze systemen zich kwalitatief op dezelfde wijze gedroegen.

Introductie van een nieuwe parameter, het interactie getal  $Q$ , in Sectie 5.1.3 leverde een abstractie van het model waarmee we aan de slag konden om de berekeningen voor beide interactiemodellen te bepalen als specifieke gevallen voor  $Q$ . Vervolgens werden voor dit algemeen systeem de energie geoptimaliseerd, de bandkloof bepaald, de geëxciteerde toestanden besproken, en de temperatuur in rekening gebracht om de kritische temperatuur te bepalen.

Hoewel de systemen op een parameter  $Q$  na exact hetzelfde gedrag vertonen kan het toch zinvol zijn om deze voor dit specifiek modelsysteem met elkaar te vergelijken. Hiervoor wordt net zoals in Hoofdstuk 4 een systeem met vier sites ( $M = 4$ ) genomen en onderzoeken we de twee gevallen voor  $Q = M - 1$  (AMA) en  $Q = 2$  (NN). In Figuur 5.4 tonen we dan het verloop van de energie (ten opzichte van het Fermi-niveau) als functie van de vullingsfactor, de bandkloof  $\Delta$  zowel in functie van de vullingsfactor als in functie van de temperatuur, en tot slot ook de kritische temperatuur in functie van de vullingsfactor. Hoewel het gedrag inderdaad exact hetzelfde is voor de twee interactie soorten, zien we dat er voor de allen-met-allen interacties een netto hogere bandkloof en kritische temperatuur verkregen wordt waardoor we kunnen stellen dat de supergeleiding robuuster is voor een hoger aantal interacties.



**Figuur 5.4:** Voor de twee interactietermen worden het gedrag van de energie gemeten t.o.v. het Fermi-niveau, de bandkloof op temperatuur nul, en de kritische temperatuur geplot als functie van de vullingsfactor weergegeven. Tot slot wordt ook het sluiten van de bandkloof als functie van stijgende temperatuur afgebeeld.

## 5.6 Kinetische energie in rekening brengen

Nu het gedrag van de modelsystemen (voor naaste naburen en allen-met-allen interacties) bestudeerd werd zonder bijdrage van de kinetische energie ( $t = 0$ ) kunnen we ook de kinetische energie in rekening brengen met behulp van storingsrekening [24].

Hier wordt verwacht dat de resultaten voor de gemiddelde veld theorie gelijkaardig zijn aan wat reeds gevonden werd in de numerieke diagonalisatie van het systeem in Hoofdstuk 4, de verschillende oplossingen zullen later besproken en vergeleken worden in Hoofdstuk 7. Het zal al snel duidelijk worden dat eerste orde niet voldoende zal zijn (zie Sectie 5.6.1) om de kinetische energie in rekening te brengen. We zullen daarom tweede orde storingstheorie gebruiken om de energie te bepalen.

Voor deze sectie wordt dus de volgende Hamiltoniaan beschouwd

$$\hat{H} = -V \underbrace{\sum_{\langle i,j \rangle \text{ of } i \neq j} \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow}}_{\hat{H}_0} - t \underbrace{\sum_{j=1}^M \left( \hat{c}_{j+1,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\uparrow} + \hat{c}_{j+1,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow} + H.C. \right)}_{\hat{H}_1}, \quad (5.71)$$

waar nu gebruik gemaakt wordt van de variationele grondtoestandsgolffuncties  $|\Psi_{BCS}\rangle$ , welke voor de vullingsfactor  $\nu = 1/2$  een minimale energie oplevert. Hierbij moet uiteraard aangehaald worden dat het variationeel principe alleen een bovengrens legt op de energie, deze levert dus *geen* informatie over de golffunctie. Echter kan men veronderstellen dat de exacte grondtoestand wel vervat zit in deze variationele golffunctie en hierrond gepiekt is (zie Sectie 2.3). Daarom benaderen we de storingstheorie met deze variationeel bepaalde golffunctie en verwachten we toch enigszins betrouwbare resultaten, al moet deze opmerking steeds in het achterhoofd gehouden worden.

### 5.6.1 Eerste orde storingsrekening

De eerste orde correctie op de energie is eenvoudigweg de verwachte waarde van de storing  $\hat{H}_1$ , welke eenvoudig berekenbaar is met behulp van de transformatie naar Bogoliubov operatoren. Hier volgt meteen dat

$$\Delta E_{gs}^{(1)} = \langle \Psi_{BCS} | \hat{H}_1 | \Psi_{BCS} \rangle = 0. \quad (5.72)$$

We weten immers dat iedere term in  $\hat{H}_1$  geschreven kan worden evenredig met<sup>V</sup>

$$\begin{aligned} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} &= \left( u \hat{\alpha}_{i,\sigma}^\dagger + \sigma v \hat{\alpha}_{i,-\sigma} \right) \left( u \hat{\alpha}_{j,\sigma} + \sigma v \hat{\alpha}_{j,-\sigma}^\dagger \right) \\ &= u^2 \hat{\alpha}_{i,\sigma}^\dagger \hat{\alpha}_{j,\sigma} + \sigma u v \hat{\alpha}_{i,\sigma}^\dagger \hat{\alpha}_{j,-\sigma}^\dagger + \sigma u v \hat{\alpha}_{i,-\sigma} \hat{\alpha}_{j,\sigma} + v^2 \hat{\alpha}_{i,-\sigma} \hat{\alpha}_{j,-\sigma}^\dagger. \end{aligned} \quad (5.73)$$

Als er nu ingevuld wordt dat  $i = j \pm 1$  om de specifieke termen voor  $\hat{H}_1$  te verkrijgen is het eenvoudig in te zien dat alle bijdragen nul zijn. Hieronder lijsten we de redenen nog even op, voor meer details verwijzen we naar Appendix A.

<sup>V</sup>Voor de eenvoud wordt hier de spin algemeen als  $\sigma$  genoteerd en de posities met  $i$  en  $j$ . Achteraf kunnen deze ingevuld worden om de correcte vorm te bekomen maar dit resultaat is algemeen geldig voor  $i \neq j$ .



- Voor de eerste en derde term zal een annihilatie operator inwerken op de grondtoestand.
- In de tweede term werkt de duale (Hermitisch toegevoegde) van de annihilatie operator op de duale grondtoestandsgolffunctie (de bra), dit is dus essentieel hetzelfde argument als hierboven.
- In de laatste term kan gebruikt worden dat  $i \neq j$  zodat met de commutatierelaties de annihilatie operator op kan schuiven naar de ket. Ook hier zal dus een annihilatie operator inwerken op de grondtoestandsgolffunctie.

We hebben dus getoond dat de kinetische energie niet in rekening gebracht kan worden met de eerste orde correctie op de grondtoestandsenergie. Er zal dus overgeschakeld worden naar de tweede orde storingsrekening.

### 5.6.2 Tweede orde storingsrekening

De tweede orde correctie op de grondtoestandsenergie [24] is gegeven door

$$\Delta E_{gs}^{(2)} = \sum_{n \neq gs} \frac{\left| \langle \psi_n^{(0)} | \hat{H}_1 | \Psi_{BCS}^{(0)} \rangle \right|^2}{E_{gs}^{(0)} - E_n^{(0)}}, \quad (5.74)$$

waar de som over  $n \neq gs$  aangeeft dat over alle toestanden gesommeerd wordt behalve de grondtoestand. De toestanden  $|\psi_n^{(0)}\rangle$  zullen dus overeenkomen met de (enkelvoudig of meermaals) geëxciteerde toestanden.

De opdracht is dan om het matrixelement in de teller van de som te bepalen en de energie voor de geëxciteerde toestanden. Met behulp van de vorm van  $\hat{H}_1$  beredeneren we welke termen niet nul zullen zijn. Inspectie van (5.73) toont dat enkel de tweede term hiervan zal bijdragen. Dit is immers de enige term die niet reduceert tot iets evenredig met  $\hat{\alpha}_{i,\sigma} |\Psi_{BCS}\rangle = 0$ . Dit toont dat enkel geëxciteerde toestanden waar exact twee paren gebroken zijn een bijdrage leveren. Bovendien volgt ook dat  $i = j \pm 1$  om opdat de gebroken paren buuren moeten zijn waardoor opnieuw minder termen in rekening moeten brengen,  $M$  combinaties van roosterpunten in plaats van de oorspronkelijke  $\binom{M}{2}$ . Uiteraard moet nog rekening gehouden worden met de elektron spin waardoor er in totaal  $2M$  termen bijdragen.

Met behulp van de isotropie op de roosterpunten (en tegengestelde spins) volgt dat

$$\Delta E_{gs}^{(2)} = 2M \frac{\left| \langle \Psi_{BCS} | \hat{H}_1 | \Psi_{EXC}(1, \uparrow; 2, \downarrow) \rangle \right|^2}{E_{gs}^{(0)} - E_{EXC(1, \uparrow; 2, \downarrow)}^{(0)}}, \quad (5.75)$$

waar de notatie

$$\Psi_{EXC}(1, \uparrow; 2, \downarrow) = \hat{\alpha}_{1,\uparrow}^\dagger \hat{\alpha}_{2,\downarrow}^\dagger |\Psi_{BCS}\rangle = |\uparrow 0\rangle_1 \otimes |0 \downarrow\rangle_2 \otimes \prod_{j=3}^M \left( u + v \hat{c}_{j,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger \right) |\emptyset\rangle, \quad (5.76)$$

gebruikt wordt, met overeenkomstige ongestoorde energie  $E_{EXC(1, \uparrow; 2, \downarrow)}^{(0)}$ . Met behulp van de Bogoliubov operatoren volgt dat het matrixelement gegeven is door

$$\langle \Psi_{BCS} | \hat{H}_1 | \Psi_{EXC}(1, \uparrow; 2, \downarrow) \rangle = 2u^2 v^2 t = 2\nu(1 - \nu)t = \frac{t}{2}, \quad (5.77)$$

in de grondtoestand waar  $\nu = 1/2$ . Het verschil van de energieën volgt ook uit een eenvoudige berekening met de Bogoliubov operatoren. We kunnen ook opmerken dat eerder aangetoond werd dat het breken van een Cooperpaar exact gegeven werd door  $\Delta$ . Nu er twee Cooperparen gebroken worden volgt dat

$$E_{EXC(1,\uparrow;2,\downarrow)}^{(0)} = E_{gs}^{(0)} + 2\Delta \quad \Leftrightarrow \quad E_{gs}^{(0)} - E_{EXC(1,\uparrow;2,\downarrow)}^{(0)} = -2\Delta, \quad (5.78)$$

waar voor de grondtoestand geldt dat

$$\Delta = QV \sqrt{\nu(1-\nu)} = \frac{QV}{2}. \quad (5.79)$$

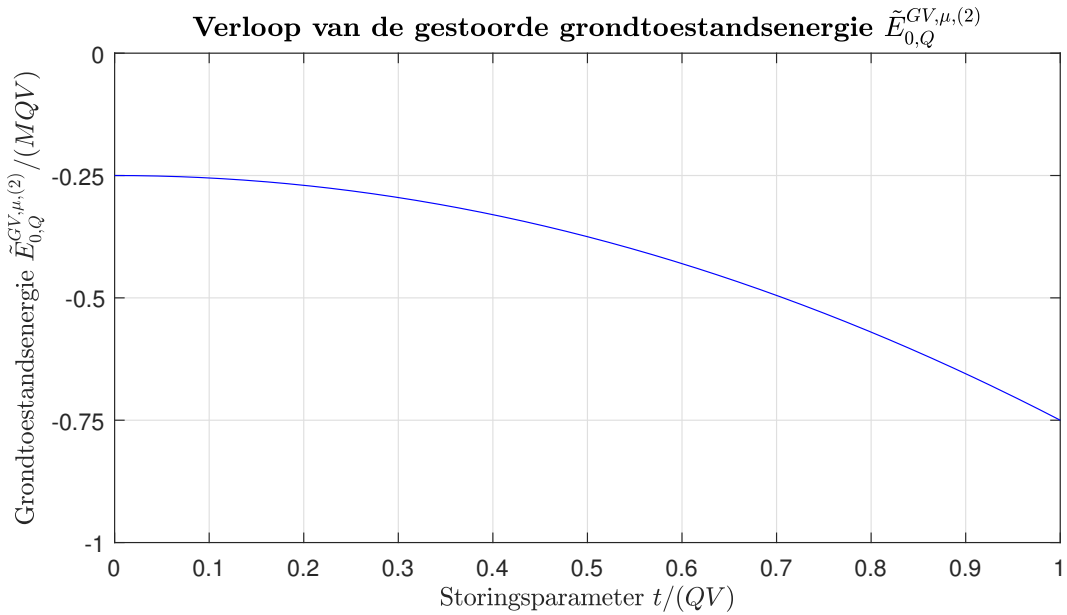
Alle nodige onderdelen om de tweede orde correctie op de grondtoestandsenergie te bepalen zijn nu gekend. De correctie op de energie wordt dus gegeven door

$$\Delta E_{gs}^{(2)} = -\frac{M|t|^2}{2QV}. \quad (5.80)$$

Zo is de tweede orde gestoorde energie gemeten vanaf het Fermivolume voor vullingsfactor  $\nu = 1/2$  gegeven door

$$\tilde{E}_{0,Q}^{GV,\mu,(2)}(t) = -\frac{1}{4}MQV - \frac{Mt^2}{2QV} = -\frac{1}{2}MQV \left[ \frac{1}{2} + \left( \frac{t}{QV} \right)^2 \right]. \quad (5.81)$$

Het verloop voor kleine storingsparameter  $t/(QV)$  wordt getoond in Figuur 5.5. In Hoofdstuk 7 zal de validiteit van deze benaderende resultaten onderzocht worden.



**Figuur 5.5:** Het verloop van de tweede orde gecorrigeerde grondtoestandsenergie als functie van de storingsparameter  $t/(QV)$ .

Om het verloop van de bandkloof te bepalen als functie van de storingsparameter  $t/(QV)$  moet men de correctie bepalen op de eerste geëxciteerde toestand. Voor deze berekeningen kan men gebruik maken van ontwaarde storingstheorie [48] maar dit valt buiten het bereik van deze thesis.

## Hoofdstuk 6

# Tensor netwerk beschrijving

In vorige hoofdstukken werd de conventionele behandeling voor de beschrijving van supergeleiding gebruikt, met de numerieke diagonalisatie in Hoofdstuk 4 en de gemiddelde veld theorie in Hoofdstuk 5 zoals ook beschreven werd in [3, 10], voor het geval waar de kinetische energie volledig verwaarloosd wordt ( $t = 0$ ). In een voorgaande studie van het modelsysteem [4] werden tensor netwerken reeds bestudeerd om de interactie term  $\hat{H}_0$  te beschrijven voor verschillende roosterlengtes (waarden voor  $M$ ) voor de allen-met-allen interactie. In eerder werk [4] werd getoond dat matrix product toestanden geschikt waren voor de beschrijving van supergeleiding ondanks dat het systeem logaritmisch afwijkt van de oppervlaktewet voor het AMA model.

Ook hier zal het doel zijn om de kinetische energie, gegeven door  $\hat{H}_1$  (2.7), in rekening te brengen voor voldoende kleine kinetische parameter  $t$ .

Een verschil met de voorgaande berekeningen uitgevoerd door [4] is dat we nu zullen werken in de Python bibliotheek quimb [49], welke een eenvoudige en snelle implementatie van tensor netwerken toelaat voor de beschrijving van kwantum veeldeeltjes systemen.

### 6.1 Een bespreking van Quimb

De gebruikte Python bibliotheek, quimb, is een snelle en eenvoudig te gebruiken bibliotheek voor berekeningen in kwantum informatietheorie en veeldeeltjes systemen. De bibliotheek prijst zich op zijn eenvoud en interactiviteit zonder verlies van snelheid en efficiëntie; waardoor leren werken met deze bibliotheek een veel lagere instapdrempel heeft in tegenstelling tot andere beschikbare bibliotheken.

Hieronder worden enkele belangrijke kwaliteiten van de bibliotheek opgesomd welke de keuze om met deze bibliotheek te werken sterk beïnvloeden. Voor een compleet overzicht van de functionaliteiten van de bibliotheek verwijzen we naar de online documentatie [50].

- Constructie van operatoren is eenvoudig en intuïtief.
- Beschikbaarheid van een groot aantal voorgeprogrammeerde functies, kwantumtoestanden, operatoren, en algoritmes.
- Optimaliseert automatisch de berekeningen en gebruikt efficiënte algoritmes om de uitkomsten te bepalen.

- Kan DMRG berekeningen (DMRG2, DMRG1, DMRGX)<sup>1</sup> uitvoeren voor matrix product toestanden.
- Grote compatibiliteit met andere veelgebruikte bibliotheken zoals numpy, scipy, tensorflow, en pytorch.
- De mogelijkheid om tensor netwerken visueel weer te geven, wat zeer handig is in het begrijpen van algoritmes en foutmeldingen.

Eén van de grootste “beperkingen” op de bibliotheek is dat de voorgeprogrammeerde code zich toespitst op de beschrijving van spin systemen. De opdracht voor de beschrijving van het modelsysteem is dus om een nieuwe klasse te schrijven om het BCS systeem te beschrijven met de creatie en annihilatie operatoren voor elektronen.

Hoewel de bibliotheek in principe allerlei complexe operatoren kan behandelen bleek de behandeling van het allen-met-allen model voorbij het bereik van quimb; we zullen dus enkel de naaste nabuur interactie beschouwen in de code. Voor een tensor netwerk beschrijving van de allen-met-allen interacties verwijzen we naar de literatuur [4]. Bovendien werd reeds in Hoofdstuk 4 en Hoofdstuk 5 getoond dat deze interactietermen zich identiek gedragen (op een factor  $Q$  na).

## 6.2 Constructie van de MPO

Om de matrix product operator voor de Hamiltoniaan  $\hat{H}(V, t)$  te contrueren moet er een basis gekozen worden welke gebruikt wordt in de code. Hiervoor is de eenvoudigste keuze om voor iedere tweedeeltes basistoestand (2.1) met een vector te associëren volgens de afbeelding

$$\begin{aligned} |00\rangle &\mapsto (1 \ 0 \ 0 \ 0)^T & |\uparrow 0\rangle &\mapsto (0 \ 1 \ 0 \ 0)^T \\ |0\downarrow\rangle &\mapsto (0 \ 0 \ 1 \ 0)^T & |\uparrow\downarrow\rangle &\mapsto (0 \ 0 \ 0 \ 1)^T \end{aligned} \quad (6.1)$$

hieruit volgen ook de annihilatie operatoren per spin als

$$\hat{c}_\uparrow = \begin{pmatrix} 0 & 1 & & \\ 0 & 0 & & \\ & & 0 & 1 \\ & & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{en} \quad \hat{c}_\downarrow = \begin{pmatrix} & & 1 & 0 \\ & & 0 & -1 \\ 0 & 0 & & \\ 0 & 0 & & \end{pmatrix} \quad (6.2)$$

waar de niet-getoonde blokken nul zijn. De creatie operatoren volgen dan uit de Hermitische toevoeging van de annihilatie operatoren. Het is nu een eenvoudige oefening om te tonen dat deze matrices inderdaad voldoen aan de commutatierelaties voor fermionen. De tel operator op de site is ook eenvoudig gegeven door  $\hat{N} = \hat{N}_\uparrow + \hat{N}_\downarrow = \hat{c}_\uparrow^\dagger \hat{c}_\uparrow + \hat{c}_\downarrow^\dagger \hat{c}_\downarrow$ .

---

<sup>1</sup>Deze drie algoritmes volgen allemaal dezelfde principes zoals besproken in Sectie 3.7 met lichte verschillen in exacte uitvoering. Zo zal DMRG2 twee sites in rekening brengen gedurende de optimalisatie wat voor snelle convergentie van het resultaat zorgt. DMRG1 gebruikt slechts één site, waardoor de berekeningen trager convergeren, het voordeel van dit algoritme is dat het moeilijker vast komt te zitten in lokale minima (in plaats van het globale minimum) [35, 36]. Tot slot gebruikt DMRGX [37] een algoritme waarbij overlap van de eigentoestanden gemaximaliseerd wordt met een voorgaande stap.

Definieer nu voor notationale eenvoud<sup>II</sup> in volgende sectie ook de annihilatie en creatie operatoren voor een Cooperpaar conform [2]

$$\hat{b} = \hat{c}_\downarrow \hat{c}_\uparrow \quad \text{en} \quad \hat{b}^\dagger = \hat{c}_\uparrow^\dagger \hat{c}_\downarrow^\dagger. \quad (6.3)$$

**Optellen van matrix product operatoren:** Volgende secties illustreren hoe de matrix product operatoren opgesteld kunnen worden voor de verschillende termen van de Hamiltoniaan ( $\hat{H}_0, \hat{H}_1$ ). Het is niet meteen duidelijk hoe de som van matrix product operatoren gedefinieerd moet worden zodat de finale vorm van de Hamiltoniaan correct weerspiegeld wordt.

De literatuur [27] toont aan dat de som van matrix product operatoren weldegelijk goed gedefinieerd is. Indien een operator  $\hat{C}$  geschreven is als  $\hat{C} = \hat{A} + \hat{B}$ , kan men stellen dat de MPO componenten<sup>III</sup>  $\{A_i\}, \{B_i\}, \{C_i\}$  (voor  $1 \leq i \leq L$ ) geschreven kunnen worden als

$$R_1 = \begin{pmatrix} A_1 & B_1 \end{pmatrix}; \quad (6.4)$$

$$R_{1 < j < L} = \begin{pmatrix} A_j & 0 \\ 0 & B_j \end{pmatrix}; \quad (6.5)$$

$$R_L = \begin{pmatrix} A_L \\ B_L \end{pmatrix}. \quad (6.6)$$

Of indien de gelijkwaardigheid van alle sites benadrukt wordt kan gekozen worden om de tensoren aan de randen te herschrijven als

$$(6.7)$$

waar nu  $R'_1$  en  $R'_L$  geschreven worden in dezelfde vorm als  $R_{1 < j < L}$  voor een goede keuzes voor de vectoren  $v_L$  en  $v_R$  (zoals duidelijk zal worden in volgende secties). In volgende secties zal dit gebruikt worden om de MPO voorstellingen duidelijker weer te geven.

**Opmerking:** In deze sectie wordt de theorie en praktijk achter de constructie van de matrix product operator getoond, echter zal de code van quimb deze reeds zelf (op een efficiëntere wijze) construeren; de voorstelling van een MPO is immers niet uniek. Het doel van deze sectie is dus niet om de effectief gebruikte operator te bouwen maar om toe te lichten hoe een MPO geconstrueerd kan worden en zo meer voeling te krijgen met de tensor netwerk beschrijving.

<sup>II</sup>In Sectie 6.3 zal ook duidelijk worden dat de Cooperpaar creatie en annihilatie operatoren nodig zullen zijn om binnen de beperkingen van quimb te werken.

<sup>III</sup>Dit zijn de matrices van operatoren waaruit de MPO geconstrueerd wordt.

### 6.2.1 De interactie bijdrage

Herinner de uitdrukking voor de MPO (3.15), waar het doel nu is om de matrices van operatoren  $W_n$  te bepalen. De interactie term  $\hat{H}_0$  voor NN is gegeven door

$$\hat{H}_0 = -V \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j = -V \sum_{j=1}^M \left( \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_{j+1} + \hat{b}_{j+1}^\dagger \hat{b}_j \right), \quad (6.8)$$

Volledig uitschrijven naar analogie van [6] levert

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 = -V \left( \hat{b}^\dagger \otimes \hat{b} \otimes \mathbb{1} \cdots \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \hat{b}^\dagger \otimes \hat{b} \otimes \mathbb{1} \cdots \otimes \mathbb{1} + \dots \right. \\ \left. + \hat{b} \otimes \hat{b}^\dagger \otimes \mathbb{1} \cdots \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \hat{b} \otimes \hat{b}^\dagger \otimes \mathbb{1} \cdots \otimes \mathbb{1} + \dots \right). \end{aligned} \quad (6.9)$$

waarin de eerste lijn de termen  $\hat{b}_j^\dagger \hat{b}_{j+1}$  (paar hopping naar links) beschrijft en de tweede lijn de termen  $\hat{b}_{j+1}^\dagger \hat{b}_j$  (paar hopping naar rechts). Hierin is het duidelijk dat de twee lijnen als aparte MPO's opgesteld kunnen worden en dat de tweede lijn de Hermitisch toegevoegde is van de eerste lijn wat de hoeveelheid rekenwerk sterk vereenvoudigt.

Voor de eerste lijn in (6.9) vinden we dat de MPO componenten geschreven kunnen worden als

$$A_{1 \leq j \leq M} = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & \hat{b}^\dagger & 0 \\ 0 & 0 & \hat{b} \\ 0 & 0 & \mathbb{1} \end{pmatrix} \quad \text{voor} \quad v_L^A = (1 \ 0 \ 0) \quad \text{en} \quad v_R^A = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (6.10)$$

een berekening van

$$\begin{aligned} v_L^A \cdot \left[ \prod_{j=1}^M A_j \right] \cdot v_R^A &= (1 \ 0 \ 0) \cdot \left[ \prod_{j=1}^M \begin{pmatrix} \mathbb{1} & \hat{b}^\dagger & 0 \\ 0 & 0 & \hat{b} \\ 0 & 0 & \mathbb{1} \end{pmatrix} \right] \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= \hat{b}^\dagger \otimes \hat{b} \otimes \mathbb{1} \cdots \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \hat{b}^\dagger \otimes \hat{b} \otimes \mathbb{1} \cdots \otimes \mathbb{1} + \dots, \end{aligned} \quad (6.11)$$

levert inderdaad het resultaat voor het eerste deel van de MPO voorstelling van  $\hat{H}_0$ . De tweede component is dan geheel gelijkaardig te bepalen als

$$B_{1 \leq j \leq M} = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & \hat{b} & 0 \\ 0 & 0 & \hat{b}^\dagger \\ 0 & 0 & \mathbb{1} \end{pmatrix} \quad \text{voor} \quad v_L^B = (1 \ 0 \ 0) \quad \text{en} \quad v_R^B = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (6.12)$$

Dan kan (6.9) dus gebruikmakende van [27] geschreven worden als

$$\hat{H}_0 = -V (1 \ 0 \ 0 \ 1 \ 0 \ 0) \cdot \left[ \prod_{j=1}^M \begin{pmatrix} \mathbb{1} & \hat{b}^\dagger & 0 & & & \\ 0 & 0 & \hat{b} & & & \\ 0 & 0 & \mathbb{1} & & & \\ & & & \mathbb{1} & \hat{b} & 0 \\ & & & 0 & 0 & \hat{b}^\dagger \\ & & & 0 & 0 & \mathbb{1} \end{pmatrix} \right] \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (6.13)$$

wat inderdaad zal herleiden tot (6.9).

### 6.2.2 De kinetische bijdrage

Geheel analoog aan het voorgaande kunnen volgt ook de voorstelling van  $\hat{H}_1$  bepalen. Hiervoor wordt de operator opnieuw voluit geschreven als

$$\begin{aligned} \hat{H}_1 = -t & \left( \hat{c}_\uparrow^\dagger \otimes \hat{c}_\uparrow \otimes \mathbb{1} \cdots \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \hat{c}_\uparrow^\dagger \otimes \hat{c}_\uparrow \otimes \mathbb{1} \cdots \otimes \mathbb{1} + \dots \right. \\ & - \hat{c}_\uparrow \otimes \hat{c}_\uparrow^\dagger \otimes \mathbb{1} \cdots \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \hat{c}_\uparrow \otimes \hat{c}_\uparrow^\dagger \otimes \mathbb{1} \cdots \otimes \mathbb{1} + \dots \\ & + \hat{c}_\downarrow^\dagger \otimes \hat{c}_\downarrow \otimes \mathbb{1} \cdots \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \hat{c}_\downarrow^\dagger \otimes \hat{c}_\downarrow \otimes \mathbb{1} \cdots \otimes \mathbb{1} + \dots \\ & \left. - \hat{c}_\downarrow \otimes \hat{c}_\downarrow^\dagger \otimes \mathbb{1} \cdots \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes \hat{c}_\downarrow \otimes \hat{c}_\downarrow^\dagger \otimes \mathbb{1} \cdots \otimes \mathbb{1} + \dots \right). \end{aligned} \quad (6.14)$$

Hierin herkennen we precies dezelfde structuur als in (6.9) nu herhaald voor spin-up en spin-down. Zonder veel rekenwerk volgt dus dat  $\hat{H}_1$  geschreven wordt als

$$\hat{H}_1 = -t \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}^T \cdot \left[ \prod_{j=1}^M \begin{pmatrix} \mathbb{1} & \hat{c}_\uparrow^\dagger & 0 \\ 0 & 0 & \hat{c}_\uparrow \\ 0 & 0 & \mathbb{1} \\ & & & \mathbb{1} & \hat{c}_\uparrow & 0 \\ & & & 0 & 0 & \hat{c}_\uparrow^\dagger \\ & & & 0 & 0 & \mathbb{1} \\ & & & & & & \mathbb{1} & \hat{c}_\downarrow^\dagger & 0 \\ & & & & & & 0 & 0 & \hat{c}_\downarrow \\ & & & & & & 0 & 0 & \mathbb{1} \\ & & & & & & & & & \mathbb{1} & \hat{c}_\downarrow & 0 \\ & & & & & & & & & 0 & 0 & \hat{c}_\downarrow^\dagger \\ & & & & & & & & & 0 & 0 & \mathbb{1} \end{pmatrix} \right] \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (6.15)$$

### 6.2.3 De totale Hamiltoniaan

De finale uitdrukking voor de MPO componenten van de Hamiltoniaan  $\hat{H}(V, t) = \hat{H}_0(V) + \hat{H}_1(t)$  kan bekomen worden door (6.4)-(6.6) [27] opnieuw toe te passen.

## 6.3 Implementatie van het modelsysteem in quimb

Voor de implementatie van het BCS model baseren we ons op de klasse `SpinHam1D`. Deze klasse is uiterst geschikt om onze implementatie naar te modeleren aangezien deze op een intuïtieve wijze toelaat om een spin systeem op een één dimensionaal rooster met zelf- en/of naaste nabuur interacties te implementeren. De bibliotheek `quimb` is overigens ook uitgerust om arbitraire waarden voor spin te beschrijven. Hieruit volgt dat we de vierdimensionale basis per site eenvoudig kunnen implementeren. De voornaamste opdracht is dus om de klasse te herschrijven om de operatoren en toestanden gedefinieerd in het begin van Sectie 6.2 te accepteren.

De voornaamste restricties waarbinnen het model zal werken zijn

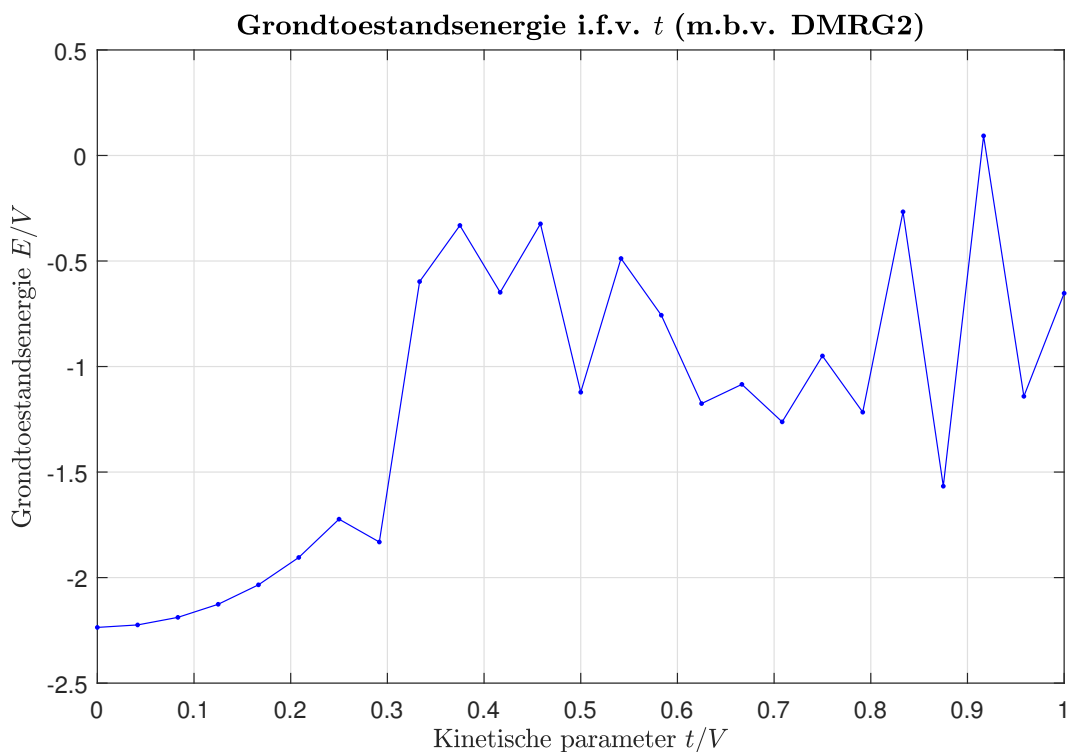
1. Interacties kunnen enkel zelf- of naaste nabuur interacties zijn.
2. Interactietermen bevatten hoogstens twee operatoren.

De tweede restrictie lijkt enigzins problematisch omwille van de vorm van de interactieterm  $\hat{H}_0$  als deze uitschreven wordt in elektron operatoren. Echter kunnen we hier ook de Cooperpaar operatoren (6.3) gebruiken om dit probleem te verhelpen.

## 6.4 DMRG berekeningen

Voor de berekening van de grondtoestandsenergie met behulp van DMRG is het mogelijk om de nauwkeurigheid van het resultaat in te stellen. Hiervoor werd gekozen om  $10^{-8} V$  te gebruiken, te bereiken binnen 250 sweeps over het netwerk, waar een goede balans tussen nauwkeurigheid en convergentie snelheid gevonden werd voor de berekeningen.

Nu kan met behulp van het DMRG2 algoritme geprobeerd worden om de grondtoestandsenergie te bepalen voor het systeem als functie van de kinetische parameter  $t$ . De berekeningen worden hier net zoals voor voorgaande behandelingen uitgevoerd voor een systeem met  $M = 4$  roosterpunten, voor een studie van de effecten bij variabele  $M$  verwijzen we naar de literatuur [4]. De resultaten van de DMRG2 berekeningen voor de grondtoestandsenergie voor arbitraire waarden van  $t$  worden weergegeven op Figuur 6.1.



**Figuur 6.1:** De gevonden grondtoestandsenergie voor een systeem met vier roosterpunten als functie van de kinetische parameter  $t$  gemeten in eenheden  $V$ .



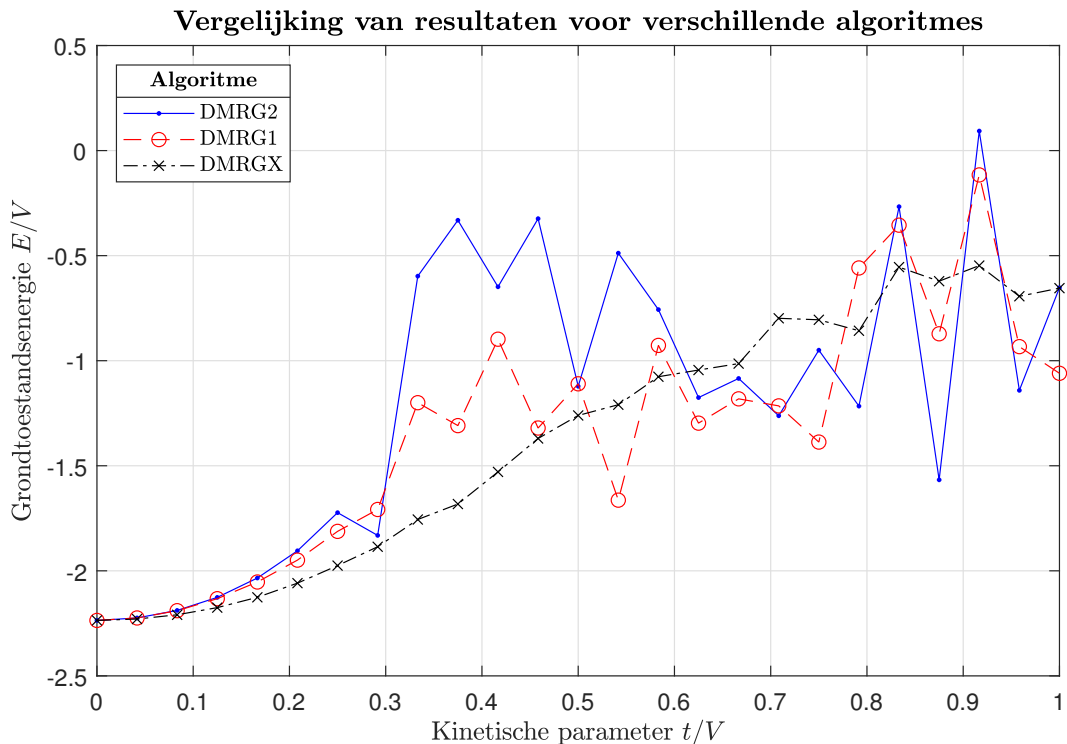
Het is meteen duidelijk dat het resultaat voor  $t = 0$  in overeenstemming is met de voorgaande analyse in Hoofdstuk 4

$$E_{gs}(t = 0) = -2.23607 V, \quad (6.16)$$

wat precies overeenkomt met het resultaat (4.2b). Echter loopt het mis voor  $t > 0$ , hier stijgt de energie als functie van  $t$  waar deze in voorgaande analyses daalt. Alsook zijn de resultaten niet (werkelijk)<sup>IV</sup> geconvergeerd voor  $t/V \gtrsim 0.25$ .

Een eerste optie is om DMRG1 te gebruiken om de grondtoestandsenergie te bepalen. Hoewel dit algoritme minder efficiënt is, is het een goed alternatief wanneer DMRG2 in een lokaal minimum terechtkomt. De resultaten bepaald met DMRG1 vergelijken we met deze bepaald door DMRG2 in Figuur 6.2.

Alternatief kan ook gebruik gemaakt worden van het DMRGX algoritme. Hierbij worden eerst met behulp van DMRG2 de grondtoestandsenergie voor  $t = 0$  en de bijhorende matrix product toestand bepaald. Dan wordt verondersteld nu dat deze matrix product toestand binnen het bereik van storingstheorie ligt voor de berekening van de energie van  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$ . Deze resultaten worden vergeleken met de eerder bepaalde resultaten in deze sectie op Figuur 6.2.



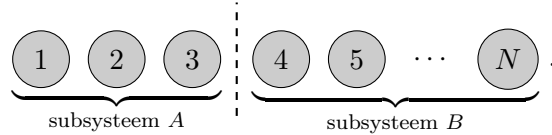
**Figuur 6.2:** Een vergelijking van de resultaten bekomen met behulp van de algoritmes DMRG2, DMRG1, en DMRGX.

<sup>IV</sup>Volgens het numerieke algoritme zijn de resultaten in sommige gevallen gemarkeerd als “geconvergeerd” maar blijkt dit een numerieke fout te zijn waarbij de resultaten *toevallig* dichtgenoeg bij elkaar liggen. Door manuele inspectie van de data kunnen deze valse convergenties ontmaskerd worden.

Zoals Figuur 6.2 duidelijk toont is het resultaat in de BCS limiet, ook correct voor de behandeling met DMRG1.<sup>V</sup> Al tonen alle drie curves hetzelfde gedrag<sup>VI</sup> voor  $t > 0$  waar uit de voorgaande analyses in dit werk volgt dat de energie zal dalen als functie van de kinetische parameter  $t$ . Het is duidelijk dat er iets mis loopt.

## 6.5 Bindingsentropie

Verstrengeling is een zuiver kwantummechanisch fenomeen en impliceert dat de verschillende vrijheidsgraden van een systeem niet afzonderlijk beschreven kunnen worden [6]. Concreter kan de verstrengelingsentropie gebruikt worden om de simuleerbaarheid van kwantum veeldeeltjes systemen te onderzoeken, door de schaling van de verstrengelingsentropie als functie van de systeemgrootte te bestuderen. De verstrengelingsentropie is eenvoudig te begrijpen aan de hand van onderstaande uitwerking voor een ééndimensionaal systeem,<sup>VII</sup> beschouw een systeem met  $M$  roosterpunten en deel deze op in subsystemen  $A$  en  $B$



De Hilbertruimte dat dit volledige systeem beschrijft  $\mathcal{H}$  kan dan geschreven worden als  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ , waar  $\mathcal{H}_{A(B)}$  alle toestanden van substelsysteem  $A(B)$  beschrijft [22]. Een toestand  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  kan dan ontbonden worden met behulp van de Schmidt decompositie [22] tot

$$|\psi\rangle = \sum_n \lambda_n |\alpha_n\rangle \otimes |\beta_n\rangle, \quad (6.17)$$

waar  $\{|\alpha_n\rangle\}$  en  $\{|\beta_n\rangle\}$  orthonormale basissen vormen voor hun respectievelijke deelruimten  $\mathcal{H}_{A(B)}$ . Nu kan deze ontbinding gebruikt worden om inzicht te krijgen in de verstrengeling tussen de twee subsystemen, specifiek de verstrengeling tussen de vrijheidsgraden van de twee systemen. Om de hoeveelheid verstrengeling te meten gebruikt men de verstrengelingsentropie gedefinieerd als de Von Neumann entropie<sup>VIII</sup>

$$S = -\text{tr} [\rho^B \log(\rho^B)], \quad (6.18)$$

voor de gereduceerde dichtheidsmatrix

$$\rho^B = \text{tr}_A (|\psi\rangle \langle\psi|) = \sum_n \lambda_n^2 |\beta_n\rangle \langle\beta_n|. \quad (6.19)$$

De entropie volgt dan als

$$S = -\sum_n \lambda_n^2 \log(\lambda_n^2). \quad (6.20)$$

---

<sup>V</sup>Uiteraard ook voor DMRGX, aangezien deze eerst de ongestoorde energie (bij  $t = 0$ ) bepaalt met behulp van DMRG2; waarvan reeds geweten is dat dit het correcte resultaat levert.

<sup>VI</sup>Waar de resultaten van de berekeningen geconvergeerd zijn tonen deze een stijgend verloop.

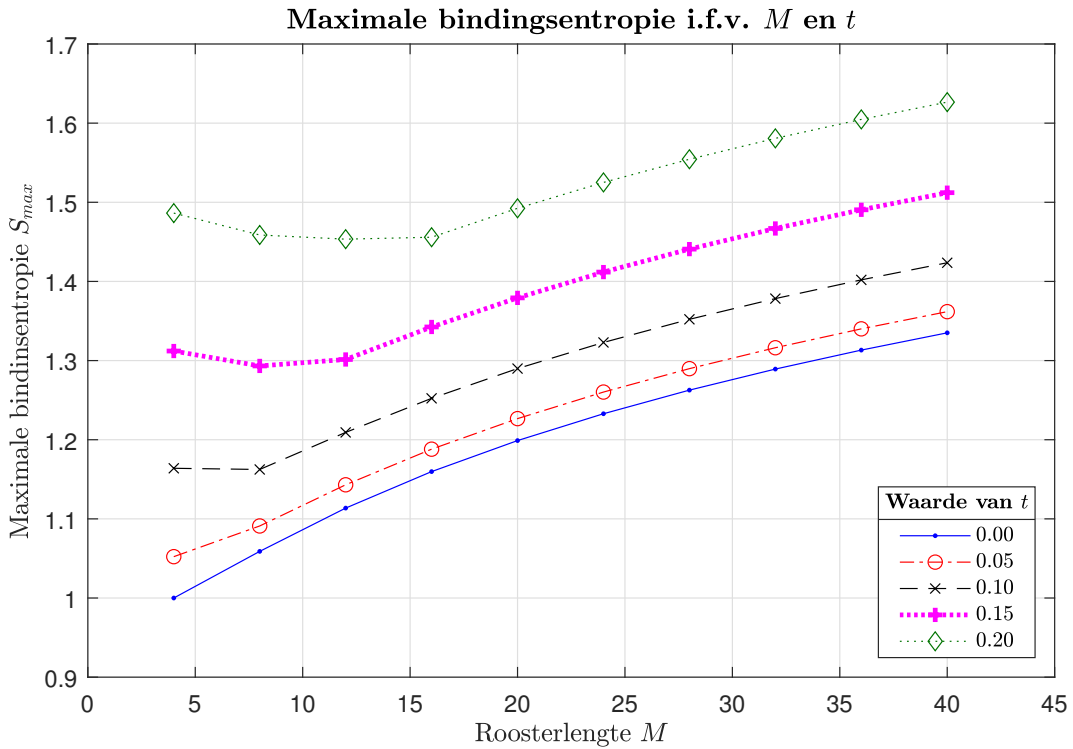
<sup>VII</sup>Een 1D systeem is uiteraard relevant voor het modelsysteem beschouwd in dit werk, uiteraard kan dit veralgemeend worden naar hogere dimensies.

<sup>VIII</sup>Zonder verlies van algemeenheid wordt de berekening hier gemaakt met behulp van de gereduceerde dichtheidsmatrix  $\rho^B$ , de berekening kan evengoed gemaakt worden met  $\rho^A$ .

Indien er geen verstrengeling is tussen de twee systemen is  $S = 0$  en is de enige niet-nul decompositie waarde  $\lambda_1 = 1$  [6]. Het verloop van de maximale bindingsentropie voor variabele groottes van systemen kan dan een inzicht geven in het gedrag van de verstrengeling in het systeem.

### 6.5.1 Simuleerbaarheid van het modelsysteem

Hoewel de nodige eisen voor de simuleerbaarheid van een MPS nog niet volledig begrepen zijn [38], wordt de oppervlaktewet<sup>IX</sup> veelal succesvol gehanteerd als “zwak” criterium. Hiermee wordt bedoeld dat dit criterium een voldoende voorwaarde geeft maar geen nodige voorwaarde. Zoals reeds getoond werd in [38] kan een systeem dat voldoende zwak afwijkt (bijvoorbeeld logaritmisch) van deze wet veelal ook goed beschreven worden.

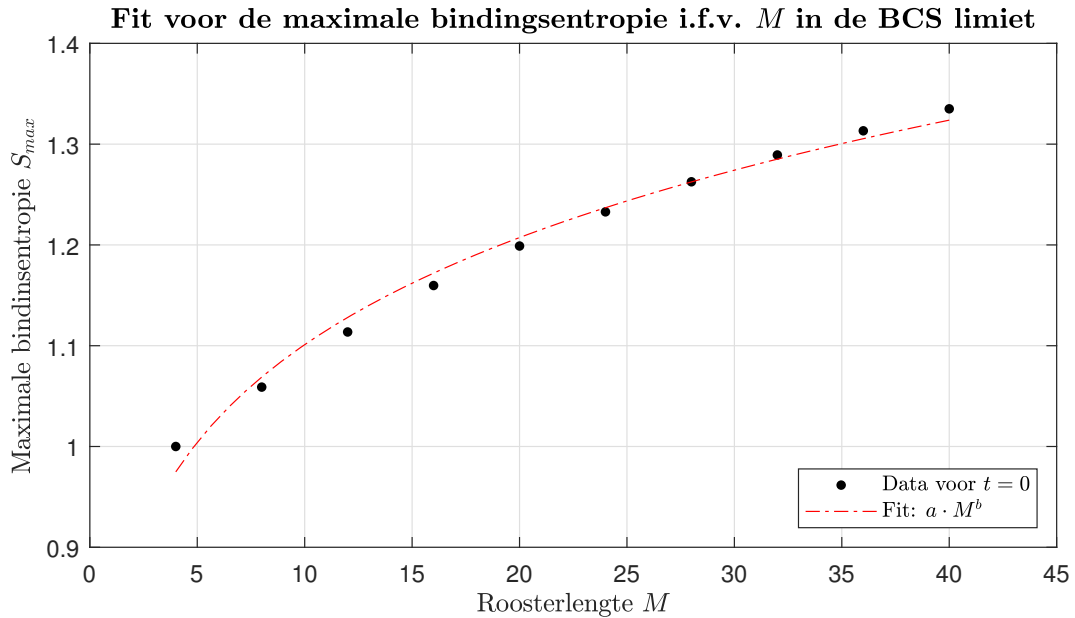


**Figuur 6.3:** Het verloop van de maximale bindingsentropie als functie van de roosterlengte  $M$  voor enkele waarden van de kinetische parameter  $t$ .

In Figuur 6.3 wordt het verloop van de maximale bindingsentropie weergegeven als functie van de roosterlengte  $M$  bij verschillende gekozen waarden van  $t$ . Voor de BCS limiet waar de kinetische parameter  $t$  nul is, is duidelijk een traag stijgend verband zichtbaar, gelijkaardig aan wat bepaald werd door [4] voor de AMA interacties, analyse van de data toont dat de bindingsentropie sneller stijgt dan logaritmisch maar trager dan lineair. We kiezen om de data te fitten met behulp van een machtsfunctie voor de NN interacties zoals getoond in Figuur 6.4.

<sup>IX</sup>Voor een ééndimensionaal systeem wil dit dus zeggen dat de verstrengelingsentropie constant moet zijn voor arbitraire roosterlengte.

Voor de gevallen waar  $t > 0$  zien we een ingewikkelder verband verschijnen. Voor voldoende grote roosterlengte  $M$  is er opnieuw een traag stijgend verband zichtbaar gelijkaardig aan het gedrag in de BCS limiet echter wordt dit verstoord voor voldoende korte roosters.



**Figuur 6.4:** Het verloop van de maximale bindingsentropie als functie van de roosterlengte  $M$  in de BCS limiet ( $t = 0$ ). De bepaalde fit-parameters zijn  $a = 0.8108$  en  $b = 0.1329$ .

Vergelijken met de literatuur [38] toont dat voor systemen waar de Von Neumann bindingsentropie trager stijgt dan lineair in de roosterlengte, de simuleerbaarheid van het systeem met behulp van matrix product toestanden onbepaald is. Het gedrag van de maximale bindingsentropie levert ons dus onvoldoende informatie om hierover een sluitende conclusie te formuleren.

Deel III  
Bespreking

# Hoofdstuk 7

## Vergelijking van technieken & bespreking

Na een theoretische inleiding in Deel I en de berekeningen in Deel II (analytisch in Hoofdstuk 5 en numeriek in Hoofdstuk 4 en Hoofdstuk 6) kan een bespreking en vergelijking van de resultaten geproduceerd door de verschillende technieken niet ontbreken.

Er is overigens geweten dat de resultaten bepaald met de numerieke diagonalisatie uit Hoofdstuk 4 exact zijn opdat de betrouwbaarheid van de andere methoden hieraan afgetoetst kunnen worden. Uit de bespreking in Hoofdstuk 6 volgt dat de tensor netwerk beschrijving faalt voor  $t > 0$  voor de verschillende DMRG algoritmes. Hier worden daarom enkel de resultaten van DMRG2<sup>I</sup> getoond in dit hoofdstuk.

### 7.1 Allen-met-allen interacties

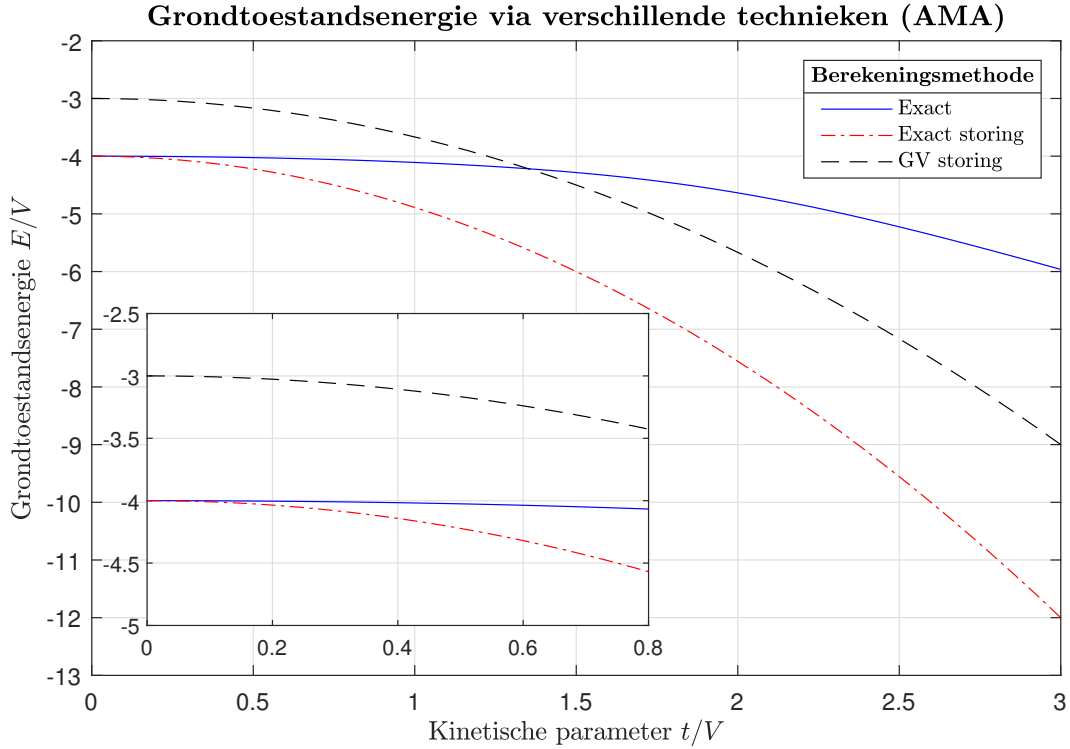
Hoewel er geen resultaten verkregen werden voor de tensor netwerk behandeling van de AMA interactie term in deze thesis, is het toch interessant om de gemiddelde veld theorie (Hoofdstuk 5) te vergelijken met de exacte numerieke diagonalisatie (Hoofdstuk 4). Dit laat toe om de validiteit van sturingstheorie zowel voor de exacte oplossing in de BCS limiet (zie Sectie 4.1), als de variationele gemiddelde veld oplossing bij  $t = 0$  (zie Sectie 5.6).

Het is duidelijk uit Figuur 7.1 dat sturingstheorie op de exacte oplossing bij  $t = 0$  een goede benadering is voor het systeem voor  $t/V \lesssim 0.25$ . Het verloop van de gemiddelde veld sturingstheorie is zeer gelijkaardig aan de sturingstheorie op de exacte oplossing, mits een verschuiving in het resultaat voor de grondtoestandsenergie op  $t = 0$ . Inspectie van de uitdrukking voor deze energie (5.42) (bij optimale vullingsfactor) toont dat deze afwijking afkomstig is uit  $Q = M - 1 = 3$ . Voor grotere systemen zal de gemiddelde veld benadering beter worden.

De resultaten dat we hier vinden in de BCS limiet komen ook goed overeen met de resultaten uit de literatuur [3, 4]. Waar interessant is dat ook hier [4] voor  $t = 0$  goede resultaten gevonden werden wat toont dat de tensor netwerk behandeling weldegelijk geschikt is voor de beschrijving van BCS theorie in afwezigheid van de kinetische bijdrage.

---

<sup>I</sup>Welke het *go-to* algoritme is voor de bepaling van de grondtoestandsenergie voor matrix product toestanden in de literatuur.

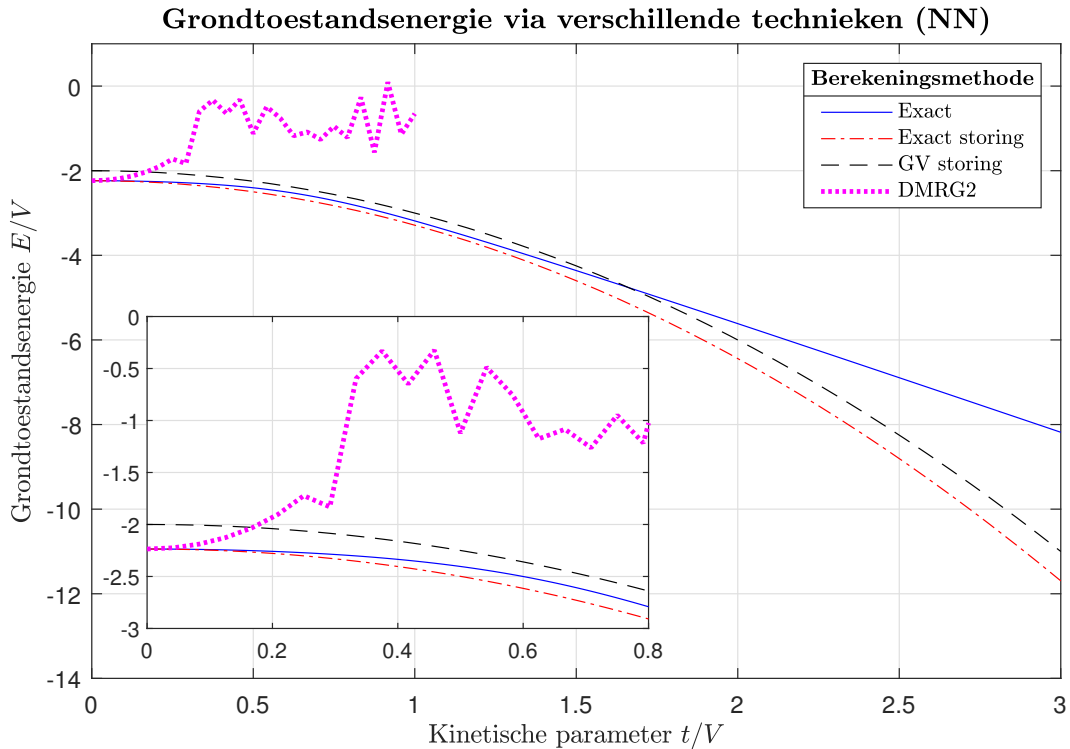


**Figuur 7.1:** Een vergelijking van de resultaten voor de behandeling van het allen-met-allen interactie (AMA) model voor de exacte oplossing (label: “Exact”), de storingstheorie bepaald met behulp van de exacte oplossing bij  $t = 0$  (label: “Exact storing”), en de gemiddelde veld storingstheorie (label: “GV Storing”). De inset toont de grafiek ingezoomd voor kleine waarden van  $t$ .

## 7.2 Naaste nabuur interacties

Op Figuur 7.2 worden de resultaten voorheen verkregen doorheen dit werk voor het NN model met elkaar vergeleken. Hier is het meteen duidelijk dat de storingstheorie toegepast op de exacte grondtoestand in de BCS limiet zeer geschikt is om het systeem te beschrijven. Voor de grondtoestand blijft deze zeer nauw bij de exacte resultaten voor  $t/V \lesssim 1.5$ , wat een relatief groot bereik is. Al werd eerder getoond bij de thermodynamische eigenschappen in Sectie 4.2.2 dat het systeem zich hier duidelijk niet meer in het BCS regime bevindt. Om deze nuance in rekening te brengen beschouwen we  $t/V \lesssim 0.25$  als convergentiedomein.

Ook de storingstheorie met behulp van de gemiddelde veld theorie toont goede resultaten in vergelijking met de exacte oplossing. Waar voor het AMA model de verschuiving van de grondtoestandsenergie op  $t = 0$  relatief groot was is deze voor het NN model een veel betere benadering. Ook hier loopt het verdere gedrag van de storingstheorie op de exacte oplossing bepaald in de BCS limiet en het gedrag van de gemiddelde veld storingstheorie zeer gelijkaardig.



**Figuur 7.2:** Een vergelijking van de resultaten voor de behandeling van het naaste nabuur interactie (NN) model voor de exacte oplossing (label: “Exact”), de storingstheorie bepaald met behulp van de exacte oplossing bij  $t = 0$  (label: “Exact storing”), de gemiddelde veld storingstheorie (label: “GV Storing”), en de tensor netwerk behandeling berekend met behulp van DMRG2 (label: “DMRG2”). De inset toont de grafiek ingezoomd voor kleine waarden van  $t$  waar ook de tensor netwerk berekeningen uitgevoerd werden.

### 7.2.1 Tensor netwerk behandeling

Voor de tensor netwerk berekeningen met behulp van DMRG(2) loopt het anders. Hier is duidelijk dat de MPS toestand zeker geschikt is voor de beschrijving in de BCS limiet waar  $t = 0$ . Echter faalt de beschrijving voor  $t > 0$  waar er een *stijgende* trend zichtbaar wordt in tegenspraak met alle andere resultaten. We kunnen hieruit concluderen dat de matrix product toestanden *geen* goede beschrijving leveren voor het systeem indien  $t > 0$ .

Er zijn hier twee punten dat we in het bijzonder willen aanhalen: de “ruis” voor hoge  $t$ , en de kromming van het resultaat voor kleine  $t$ .

**Ruizig resultaat:** Op Figuur 6.2 en Figuur 7.2 is het duidelijk dat voor  $t/V > 0.25$  het verloop van de bepaalde grondtoestandsenergie niet langer stabiel is. Verdere analyse toont dat hoewel volgens het script deze datapunten voldoen aan de eisen van convergentie, dit in realiteit niet het geval is. Door het verloop van de energie per sweep te bestuderen is duidelijk dat voor deze datapunten er geen convergerend verloop naar de gevonden energie liep, maar dat deze door statistische toeval binnen de tolerantie viel. Anderzijds werd in sommige berekeningen het resultaat ook gegeven door bereiken van het maximaal aantal sweeps over



het netwerk. Verdere analyse toont ook hier dat tussentijdse resultaten van DMRG niet leken te convergeren.

Aanpassen van de parameters zoals het verhogen van de maximale bindingsdimensie, het aantal sweeps, of de tolerantie geven geen verbetering in de resultaten. In het geval van de laatste twee parameters verhogen we enkel de kans op een “toevallige convergentie” waar de tolerantie bereikt wordt zonder *werkelijke* convergentie. Arbitrair verhogen van de bindingsdimensie vergroot enkel de computationele last.

**Het stijgende resultaat:** Voor voldoende kleine  $t/V$  lijkt de absolute waarde van de kromming goed overeen te komen met deze van de andere beschrijvingen (exacte diagonalisatie, gemiddelde veld, storingstheorie). Dit doet vermoeden dat er een tekenfout gemaakt werd tijdens de implementatie. Echter is dit niet het geval, we kunnen dit op twee manieren onderbouwen.

1. Door de parameter  $t$  als negatieve waarde in te geven in het script bekomen we dezelfde resultaten.
2. Storingstheorie suggereert dat het teken van  $t$  niet bijdraagt tot de finale oplossing. We vonden immers enkel een bijdrage evenredig met  $|t|^2$ , wat suggereert dat (voor kleine waarden van  $t$ ) het teken niet bijdraagt.

### 7.3 Concrete verschillen tussen tensor netwerk bibliotheken

Waar voorheen door [4] de implementatie voor het allen-met-allen model gemaakt werd in de Python bibliotheek TeNPy, werd in deze thesis gebruik gemaakt van de bibliotheek quimb.

De TeNPy bibliotheek kan aangepast worden [4] om de allen-met-allen interacties goed te beschrijven. Echter is deze bibliotheek moeilijk te doorgronden waardoor deze minder vlot is in gebruik.

De quimb bibliotheek aan de andere kant is goed voor de beschrijving van systemen met naaste nabuur interactie en zeer transparant in de berekeningen. Dit zorgt ervoor dat zoeken naar problemen in de code, begrijpen van de operaties, ... veel natuurlijker volgen; met alle voordelen opgelijst in Sectie 6.1. Het nadeel blijkt hier echter dat de beschrijving van allen-met-allen interacties gecompliceerd is en in deze thesis dus niet behandeld kon worden.

Om na te gaan of de allen-met-allen interactie in de tensor netwerk beschrijving de kinetische energie beter in rekening zou kunnen brengen is meer onderzoek nodig.

## Hoofdstuk 8

# Conclusie

In deze thesis werd een eerder gebruikt modelsysteem voor de beschrijving van BCS theorie [3,4,10] gemodificeerd om de kinetische energie in rekening te brengen. Hiervoor werd gekozen om de kinetische term uit het Hubbard model [20] te gebruiken. Met deze vorm voor de kinetische energie was het mogelijk om de sterkte van de kinetische bijdrage, welke evenredig is met de bandkromming  $t \sim 1/m^*$ , als parameter te beschouwen en zo een vlakke bandenstructuur te beschrijven.

Het gedrag van het systeem was reeds gekend in de BCS limiet waar  $t \rightarrow 0$  [3,4,10], en in limiet voor  $t \gg V$  [20] als ééndimensionaal vrij elektronengas op een eindig rooster. Om het gedrag van het systeem voor kleine kinetische bijdrage in kaart te brengen werd gebruik gemaakt van enkele verschillende technieken. Buiten de introductie van de kinetische bijdrage werd de interactie term ook gemodificeerd om enkel naaste nabuur interacties te beschouwen. Ook deze nieuwe interactie term werd steeds vergeleken met de allen-met-allen interacties waar mogelijk.

Als eerste werd de exacte oplossing van het systeem in de BCS limiet gebruikt om de kinetische bijdrage in rekening te brengen met behulp van storingstheorie. Alsook is de exacte numerieke diagonalisatie mogelijk voor arbitraire waarden van  $t$  indien het systeem voldoende klein is. Dit liet toe om een bovengrens af te schatten voor de verhouding  $t/V$  waaronder storingstheorie voldoende accuraat is. De exacte diagonalisatie liet ook toe om de dichtheidsmatrix te bepalen voor het systeem, hieruit werden thermodynamische grootheden afgeleid opdat er ook een kwalitatieve bespreking volgde van de overgang tussen het BCS regime, het vlakke band regime, en het vrij elektronengas (op een eindig rooster).

De volgende gebruikte methode was de gemiddelde veld theorie. Hier werd al snel duidelijk dat de interactie termen voor AMA en NN interacties geabstraheerd konden worden naar een algemeen interactie getal  $Q$ . Hiermee werden de energie en grondtoestandsgolffunctie voor het systeem bepaald op variationele wijze. Dit liet ook toe om de bandkloof en de kritische temperatuur te bepalen. Ook hier werd storingstheorie gebruikt om de kinetische energie in rekening te brengen.

Tot slot werd geprobeerd om de tensor netwerk beschrijving te gebruiken om het systeem te beschrijven. Voorgaand werk [4] toont immers dat de matrix product toestand geschikt is voor de beschrijving van een allen-met-allen interactie in de BCS limiet, waar de kinetische energie verwaarloosd wordt.

Vergelijken van de resultaten bekomen door de verschillende modellen toont dat storingstheorie een zeer betrouwbare methode is indien de kinetische parameter  $t$  voldoende klein

is ten opzichte van de interactie sterkte  $V$ . Belangrijk is echter wel dat de gemiddelde veld theorie een verschuiving ziet van de energie in de BCS limiet, welke het sterkst aanwezig is voor het AMA model. Het is echter wel duidelijk dat deze verschuiving in relatieve termen zal krimpen voor het AMA model voor grotere roosters.

Voor de tensor netwerk behandeling werd gedemonstreerd dat deze een goede beschrijving leveren voor het naaste nabuur interactie model in de BCS limiet. Echter divergeren de resultaten van de verwachtingen voor  $t > 0$ . Er werd geprobeerd om het falen van de gebruikte algoritmes te onderzoeken door naast de initieel gebruikte DMRG2 ook DMRG1 en DMRGX toe te passen maar zonder succes; voor  $t > 0$  bleef het gedrag afwijken van het eerder bepaalde verloop. Onderzoeken van de maximale bindingsentropie als functie van de roosterlengte  $M$  toonde een traag stijgende functie evenredig met  $M^\alpha$  voor  $0 < \alpha < 1$ . Hoewel deze inderdaad afwijkt van de oppervlakte wet waarbinnen MPS toepasbaar zijn is het geweten dat voor licht afwijkende systemen de simuleerbaarheid met matrix product toestanden niet noodzakelijk uitgesloten is, is dit niet gegarandeerd. De literatuur [38] geeft aan voor het verloop van de bindingsentropie van het modelsysteem ook geen sluitende rede voor het falen van de MPS beschrijving levert.

In toekomstig werk zou men andere tensor netwerk structuren kunnen onderzoeken, zoals MERA (multi-scale entanglement renormalization ansatz) welke beter is in de beschrijving van systemen waar de dracht van interacties en/of verstrengeling groot is [31]. Alsook zouden andere vormen voor de kinetische energie voorgesteld kunnen worden om het systeem te beschrijven.

Deel IV  
De Appendix

## Appendix A

# Bogoliubov operatoren

Voor veel van de berekeningen gemaakt in Hoofdstuk 5 is het zinvol om over te stappen van de traditioneel gebruikte creatie en annihilatie operatoren voor fermionen naar de Bogoliubov operatoren. Eerst geïntroduceerd door N.N. Bogoliubov in 1958 [47] worden deze operatoren gegeven door

$$\begin{cases} \hat{\alpha}_{\mathbf{k},\uparrow} = u\hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow} - v\hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger; \\ \hat{\alpha}_{-\mathbf{k},\downarrow} = u\hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow} + v\hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger, \end{cases} \quad \begin{matrix} \text{(A.1a)} \\ \text{(A.1b)} \end{matrix}$$

voor de variationele parameters  $u, v$  besproken in Hoofdstuk 1. Gebruik van deze operatoren voert een canonische transformatie uit waardoor de diagonalisatie van de Hamiltoniaan sterk vereenvoudigd wordt. De concrete interpretatie van deze operatoren kan bepaald worden door deze in te laten werken op verschillende toestanden van het bestudeerde systeem. Merk eerst en vooral op dat deze operatoren opnieuw eenvoudig vertalen naar het discrete modelsysteem als

$$\begin{cases} \hat{\alpha}_{i,\uparrow} = u\hat{c}_{i,\uparrow} - v\hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger; \\ \hat{\alpha}_{i,\downarrow} = u\hat{c}_{i,\downarrow} + v\hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger, \end{cases} \quad \begin{matrix} \text{(A.2a)} \\ \text{(A.2b)} \end{matrix}$$

en de inverse transformatie geeft ons

$$\begin{cases} \hat{c}_{i,\uparrow} = u\hat{\alpha}_{i,\uparrow} + v\hat{\alpha}_{i,\downarrow}^\dagger; \\ \hat{c}_{i,\downarrow} = u\hat{\alpha}_{i,\downarrow} - v\hat{\alpha}_{i,\uparrow}^\dagger. \end{cases} \quad \begin{matrix} \text{(A.3a)} \\ \text{(A.3b)} \end{matrix}$$

Het is eenvoudig te tonen dat deze operatoren de anticommutatierelaties van de elektron creatie en annihilatie operatoren overerven

$$\begin{cases} \left\{ \hat{\alpha}_{i,\sigma}, \hat{\alpha}_{j,\zeta}^\dagger \right\} = \delta_{i,j} \delta_{\sigma,\zeta}; \\ \left\{ \hat{\alpha}_{i,\sigma}, \hat{\alpha}_{j,\zeta} \right\} = 0; \\ \left\{ \hat{\alpha}_{i,\sigma}^\dagger, \hat{\alpha}_{j,\zeta}^\dagger \right\} = 0, \end{cases} \quad \begin{matrix} \text{(A.4a)} \\ \text{(A.4b)} \\ \text{(A.4c)} \end{matrix}$$

deze zijn eenvoudig aan te tonen. Als voorbeeld tonen we dit expliciet voor relatie (A.4b), de andere relaties zijn een oefening voor de lezer. De berekening begint vanuit het invullen van

de definitie van de Bogoliubov operatoren

$$\begin{aligned} \{\hat{\alpha}_{i,\sigma}, \hat{\alpha}_{j,\zeta}\} &= \left\{ \left( u\hat{c}_{i,\sigma} - \sigma v\hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger \right), \left( u\hat{c}_{j,\zeta} - \zeta v\hat{c}_{j,-\zeta}^\dagger \right) \right\} \\ &= u^2 \underbrace{\{\hat{c}_{i,\sigma}, \hat{c}_{j,\zeta}\}}_{=0} - uv\zeta \{\hat{c}_{i,\sigma}, \hat{c}_{j,-\zeta}^\dagger\} - uv\sigma \{\hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger, \hat{c}_{j,\zeta}\} + v^2\sigma\zeta \underbrace{\{\hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger, \hat{c}_{j,-\zeta}^\dagger\}}_{=0}, \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

waarin de fermionische commutatierelaties toegepast worden. Dit levert dus

$$\{\hat{\alpha}_{i,\sigma}, \hat{\alpha}_{j,\zeta}\} = -uv\delta_{i,j} \underbrace{(\zeta\delta_{\sigma,-\zeta} + \sigma\delta_{\zeta,-\sigma})}_{=0, \forall\sigma,\zeta} = 0. \quad (\text{A.6})$$

Met enkele eenvoudige berekeningen kunnen ook de effecten van de Bogoliubov operatoren op de variationele golffunctie

$$|\Psi_{BCS}\rangle = \prod_{i=1}^M \left( u + v\hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger\hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \right) |\emptyset\rangle, \quad (\text{A.7})$$

bepaald worden. Hier volgen immers onderstaande eigenschappen

$$\bullet \quad \hat{\alpha}_{i,\sigma}^\dagger \left( u + v\hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger\hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \right) |\emptyset\rangle = \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger |\emptyset\rangle \quad (\text{A.8})$$

$$\bullet \quad \hat{\alpha}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger |\emptyset\rangle = 0 \quad (\text{A.9})$$

$$\bullet \quad \hat{\alpha}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger |\emptyset\rangle = \left( u\hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger\hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger + v \right) |\emptyset\rangle \quad (\text{A.10})$$

$$\bullet \quad \hat{\alpha}_{i,\sigma} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger |\emptyset\rangle = \left( u + v\hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger\hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \right) |\emptyset\rangle \quad (\text{A.11})$$

$$\bullet \quad \hat{\alpha}_{i,\sigma} \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger |\emptyset\rangle = 0 \quad (\text{A.12})$$

$$\bullet \quad \hat{\alpha}_{i,\sigma} \left( u + v\hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger\hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \right) |\emptyset\rangle = 0 \quad (\text{A.13})$$

wat aantoont dat de Bogoliubov operator  $\hat{\alpha}^\dagger$  een Cooperpaar breekt (A.8) en dus het systeem exciteert, en analoog dat  $\hat{\alpha}$  een geëxciteerd elektron terug in een Cooperpaar brengt (A.11) (en dus naar de grondtoestand voor die site). Dit wordt visueel weergegeven voor  $\sigma = \uparrow$ , geïnspireerd door [18]

$$0 \xleftarrow{\hat{\alpha}_{i,\uparrow}} \left[ \begin{array}{c} \text{Cooperpaar} \\ \left( u + v\hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger\hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \right) |\emptyset\rangle \end{array} \right] \xleftarrow{\hat{\alpha}_{i,\uparrow}} \left[ \begin{array}{c} \text{Gebroken paar} \\ \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger |\emptyset\rangle \end{array} \right] \xrightarrow{\hat{\alpha}_{i,\uparrow}} 0, \quad (\text{A.14})$$

uiteraard volgt op geheel analoge wijze een identieke structuur voor  $\sigma = \downarrow$ .

# Bibliografie

- [1] H. Kamerlingh Onnes, “Further experiments with liquid helium. D. On the change of electric resistance of pure metals at very low temperatures, etc. V. The disappearance of the resistance of mercury,” *Comm. Phys. Lab. Univ. Leiden*, no. 112b, 1911.
- [2] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, “Theory of Superconductivity,” *Phys. Rev.*, vol. 108, pp. 1175–1204, Dec 1957.
- [3] D. Huybrechts, *BCS-theorie in het canonisch ensemble*. UAntwerpen, 2017.
- [4] B. Jorissen, *Matrix Product Toestand voor Supergeleiding*. UAntwerpen, 2020.
- [5] H. Aoki, “Theoretical possibilities for flat band superconductivity,” *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, vol. 33, no. 8, pp. 2341–2346, 2020.
- [6] J. Hauschild and F. Pollmann, “Efficient numerical simulations with tensor networks: Tensor Network Python (TeNPy),” *SciPost Physics Lecture Notes*, p. 005, 2018.
- [7] R. Orús, “Tensor networks for complex quantum systems,” *Nature Reviews Physics*, vol. 1, no. 9, pp. 538–550, 2019.
- [8] J. C. Bridgeman and C. T. Chubb, “Hand-waving and interpretive dance: an introductory course on tensor networks,” *Journal of physics A: Mathematical and theoretical*, vol. 50, no. 22, p. 223001, 2017.
- [9] J. I. Cirac, D. Perez-Garcia, N. Schuch, and F. Verstraete, “Matrix product states and projected entangled pair states: Concepts, symmetries, theorems,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 93, no. 4, p. 045003, 2021.
- [10] J. Tempere and D. Huybrechts, “Canonical pair condensation in a flat-band BCS superconductor,” *The European Physical Journal B*, vol. 92, no. 6, pp. 1–9, 2019.
- [11] R. Orús, “A practical introduction to tensor networks: Matrix product states and projected entangled pair states,” *Annals of physics*, vol. 349, pp. 117–158, 2014.
- [12] J. G. Bednorz and K. A. Müller, “Possible high  $T_c$  superconductivity in the Ba-La-Cu-O system,” *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, vol. 64, no. 2, pp. 189–193, 1986.
- [13] E. Snider, N. Dasenbrock-Gammon, R. McBride, M. Debessai, H. Vindana, K. Vencatasamy, K. V. Lawler, A. Salamat, and R. P. Dias, “Room-temperature superconductivity in a carbonaceous sulfur hydride,” *Nature*, vol. 586, no. 7829, pp. 373–377, 2020.

## BIBLIOGRAFIE

---

- [14] J. Hirsch and F. Marsiglio, “Unusual width of the superconducting transition in a hydride,” *Nature*, vol. 596, no. 7873, pp. E9–E10, 2021.
- [15] P. J. Ray, *Structural investigation of  $La_{2-x}Sr_xCuO_{4+y}$* . Master’s thesis (University of Copenhagen, 2015), 2015.
- [16] M. Sato and Y. Ando, “Topological superconductors: a review,” *Reports on Progress in Physics*, vol. 80, no. 7, p. 076501, 2017.
- [17] J. Tempere, *Course notes Bose-Einstein Condensation, Superfluidity and Superconductivity*. (Master in Physics) UAntwerpen, 2021.
- [18] J. Tempere, *Course notes Solid State Physics*. (Master of Physics) UAntwerpen, 2021.
- [19] C. Kittel, *Introduction to solid state physics*. Wiley, 2005.
- [20] F. H. Essler, H. Frahm, F. Göhmann, A. Klümper, and V. E. Korepin, *The one-dimensional Hubbard model*. Cambridge University Press, 2005.
- [21] M. Wouters, *Cursus Complexe Analyse*. (Master in de Fysica) UAntwerpen, 2020.
- [22] D. Eelbode and W. Vanroose, *Cursus Hilbertruimten en Fourierreeksen*. (Bachelor in de Fysica) UAntwerpen, 2020.
- [23] F. Peeters and L. Covaci, *Course notes Physics of low dimensional systems*. (Master in Physics) UAntwerpen, 2021.
- [24] J. J. Sakurai, *Modern quantum mechanics revised edition*. Addison-Wesley Pub. Co., 1994.
- [25] “Tensor Network.” <https://tensornetwork.org/>. [Online; geraadpleegd op 17 mei 2022].
- [26] “Tensors.net.” <https://www.tensors.net/>. [Online; geraadpleegd op 17 mei 2022].
- [27] C. Hubig, I. McCulloch, and U. Schollwöck, “Generic construction of efficient matrix product operators,” *Physical Review B*, vol. 95, no. 3, p. 035129, 2017.
- [28] S. R. White, “Density matrix formulation for quantum renormalization groups,” *Physical review letters*, vol. 69, no. 19, p. 2863, 1992.
- [29] U. Schollwöck, “The density-matrix renormalization group,” *Reviews of modern physics*, vol. 77, no. 1, p. 259, 2005.
- [30] D. Perez-Garcia, F. Verstraete, M. M. Wolf, and J. I. Cirac, “Matrix product state representations,” *arXiv preprint quant-ph/0608197*, 2006.
- [31] G. Evenbly and G. Vidal, “Tensor network states and geometry,” *Journal of Statistical Physics*, vol. 145, no. 4, pp. 891–918, 2011.
- [32] U. Schollwöck, “The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states,” *Annals of physics*, vol. 326, no. 1, pp. 96–192, 2011.



## BIBLIOGRAFIE

---

- [33] R. Penrose, “Applications of negative dimensional tensors,” *Combinatorial mathematics and its applications*, vol. 1, pp. 221–244, 1971.
- [34] B. Partoens, *Cursus Analytische Mechanica*. (Bachelor in de Fysica) UAntwerpen, 2019.
- [35] S. R. White, “Density matrix renormalization group algorithms with a single center site,” *Physical Review B*, vol. 72, no. 18, p. 180403, 2005.
- [36] C. Hubig, I. P. McCulloch, U. Schollwöck, and F. A. Wolf, “Strictly single-site DMRG algorithm with subspace expansion,” *Physical Review B*, vol. 91, no. 15, p. 155115, 2015.
- [37] V. Khemani, F. Pollmann, and S. L. Sondhi, “Obtaining highly excited eigenstates of many-body localized hamiltonians by the density matrix renormalization group approach,” *Physical review letters*, vol. 116, no. 24, p. 247204, 2016.
- [38] N. Schuch, M. M. Wolf, F. Verstraete, and J. I. Cirac, “Entropy scaling and simulability by matrix product states,” *Physical review letters*, vol. 100, no. 3, p. 030504, 2008.
- [39] A. Weiße and H. Fehske, *Exact Diagonalization Techniques*, vol. 739, pp. 529–544. 12 2007.
- [40] M. Milosevic, *Cursus Numeric Methods*. (Bachelor in de Fysica) UAntwerpen, 2018.
- [41] A. Kharab and R. B. Guenther, *An Introduction to Numerical Methods: A MATLAB Approach*. CRC Press, Inc., 2001.
- [42] J. Tempere, *Cursus Kwantummechanica*. (Bachelor in de Fysica) UAntwerpen, 2020.
- [43] J. Tempere, *Cursus Statistische Fysica*. (Bachelor in de Fysica) UAntwerpen, 2019.
- [44] K. A. Sidorov, N. V. Tikhonov, and S. G. Ovchinnikov, “Exact solution for the thermodynamics of the one-dimensional Hubbard model with infinite repulsion in a magnetic field,” *Theoretical and Mathematical Physics*, vol. 180, no. 1, pp. 835–849, 2014.
- [45] E. Calegari, C. Lobo, S. Magalhaes, C. Chaves, and A. Troper, “Specific heat of a non-local attractive Hubbard model,” *Physics Letters A*, vol. 377, no. 25-27, pp. 1637–1642, 2013.
- [46] T. Stoops, *Bare bones of the BCS theory*. UAntwerpen, assignment for the course Solid State Physics, 2021.
- [47] N. N. Bogoliubov, “A new method in the theory of superconductivity. 1.,” *SOVIET PHYSICS JETP-USSR*, vol. 7, no. 1, pp. 41–46, 1958.
- [48] B. Partoens, *Cursus Gevorderde Kwantummechanica*. (Master in de Fysica) UAntwerpen, 2020.
- [49] J. Gray, “quimb: a python library for quantum information and many-body calculations,” *Journal of Open Source Software*, vol. 3, no. 29, p. 819, 2018.
- [50] “QUIMB.” <https://quimb.readthedocs.io/en/latest/index.html>. [Online; geraadpleegd op 17 mei 2022].