

UNIVERZA V LJUBLJANI
FAKULTETA ZA MATEMATIKO IN FIZIKO
ODDELEK ZA FIZIKO
MAGISTRSKI ŠTUDIJSKI PROGRAM 2. STOPNJE FIZIKA
MATEMATIČNA FIZIKA

Marko Medenjak

**Balistični transport v neintegrabilnih spinskih
verigah**

Magistrsko delo

MENTOR: prof. dr. Tomaž Prosen

Ljubljana, 2014

Izjava o avtorstvu in objavi elektronske oblike zaključnega dela:

Podpisani Marko Medenjak izjavljam:

- da sem magistrsko delo z naslovom Balistični transport v neintegrabilnih spinskih verigah izdelal samostojno pod mentorstvom prof. dr. Tomaža Prosenca,
- da Fakulteti za matematiko in fiziko Univerze v Ljubljani dovoljujem objavo elektronske oblike svojega dela na spletnih straneh.

Ljubljana, dne

Podpis:

Zahvala

Mentorju Tomažu Prosenu se zahvaljujem za vodenje in pomoč pri izdelavi magistrske naloge. Marku Žnidariču in Martinu Horvatu se zahvaljujem za tehnično pomoč, Magdi Prevc pa za lektoriranje. Za podporo se zahvaljujem tudi svoji družini in Ajdi.

Izvleček

V magistrski nalogi je s pomočjo eksaktne diagonalizacije in simulacije DMRG obravnavan vpliv zlomitve integrabilnosti v Heisenbergovem Hamiltonjanu XXZ z izotropno sklopitvijo z drugimi najbližjimi sosedi na spinski transport. Rezultati nakazujejo, da je za dovolj majhne perturbacije spinska Drudejeva utež neničelna tudi v primeru neskončne temperature. Za večje vrednosti sklopitve z drugimi najbližjimi sosedi se zdi, da pride do faznega prehoda med balističnim in difuzijskim transportom pri končni temperaturi.

Ključne besede: Zlomitev integrabilnosti v kvantnih sistemih, transportne lastnosti kvantnih sistemov, DMRG, eksaktna diagonalizacija, Heisenbergov model XXZ

Abstract

In the thesis we use the exact diagonalization and DMRG method to establish the effects of integrability breaking perturbation on the spin transport in the Heisenberg XXZ model, with the isotropic next-nearest-neighbour interaction. The value of the spin Drude weight seems to be non-zero for small enough perturbation even at infinite temperature. For larger values of the integrability breaking the phase transition from ballistic to diffusive transport seems to emerge at finite temperature.

Keywords: Integrability breaking in quantum systems, transport properties of quantum systems, DMRG, exact diagonalization, Heisenberg XXZ model

PACS: 75.10.pq, 5.60.Gg

Kazalo

1	Uvod	11
2	Teoretične osnove	13
2.1	Klasična in kvantna integrabilnost	13
2.2	Drudejeva utež	14
2.3	Model	17
3	Dosedanji rezultati	19
3.1	Eksperimentalni rezultati	19
3.2	Teoretični rezultati	19
3.3	Numerični rezultati	20
4	Metodi	23
4.1	Eksaktna diagonalizacija	23
4.2	DMRG	25
4.2.1	Matrično-produktna predstavitev kanoničnega ansambla . . .	26
4.2.2	Razcep Suzuki-Trotter	28
4.2.3	TEBD	31
4.2.4	Računanje Drudejeve uteži in fazne vsote	36
5	Rezultati	39
5.1	Odvisnost od perturbacije	39
5.2	Odvisnost od temperature	41
5.3	Odvisnost od anizotropije	43
5.4	Simulabilnost	44
6	Perturbacijski pristop	47
7	Zaključek	49
	Literatura	51

Poglavje 1

Uvod

Integrabilni sistemi so pogosto približek modela nekega naravnega sistema, kjer upoštevamo npr. zgolj interakcijo med najbližjimi sosedi, sklopitev le v eni dimenziji ali zanemarimo stanja, ki so energijsko manj ugodna. Vprašanje je, kako približki vplivajo na lastnosti modelov in s tem kako relevantni so rezultati teorije integrabilnih sistemov za fizikalne sisteme. Odgovor na vprašanje nam podaja teorija skoraj integrabilnih sistemov. Kolmogorov teorem pravi, da v končnih klasičnih sistemih dovolj majhne neintegrabilne perturbacije le deformirajo večino invariantnih torusov [1]. Podobnega rezultata v kvantni mehaniki še ni kakor tudi ne konsenza o tem, kaj se zgodi z ohranjenimi količinami in transportnimi lastnosti ob zlomitvi integrabilnosti [2].

Ohranjene količine imajo osrednjo vlogo v teoriji integrabilnih sistemov in so neposredno povezane s transportnimi lastnostmi tako v klasičnih kot tudi v kvantnih sistemih. Velja pa tudi obratno. Transportne lastnosti sistemov kažejo na to, kaj se zgodi z ohranjenimi količinami pri zlomitvi integrabilnosti.

V magistrski nalogi obravnavamo spinski transport v Heisenbergovi verigi XXZ , v kateri zlomimo integrabilnost z izotropno sklopitvijo z drugimi najbližjimi sosedi. Razlog za izbiro te perturbacije je rezultat v [2], ki pove, kaj se zgodi s spinskim transportom v obravnavanem modelu pri temperaturi $T = 0$. Namen magistrskega dela je numerično preveriti, kaj se dogaja s spinskim transportom pri neničelni temperaturi. Problem obravnavamo z eksaktno diagonalizacijo in simulacijo DMRG¹.

Delo je razdeljeno na sedem poglavij. V drugem poglavju predstavimo osnovne pojme, kot so: integrabilnost, teorija linearne odziva, Drudejeva utež in Heisenbergov model. V tretjem poglavju povzamemo dosedanje rezultate. V četrtem poglavju predstavimo uporabljeni metodi in v petem rezultate. V šestem poglavju opišemo metodo za konstrukcijo ohranjenih količin neintegrabilnega modela iz ohranjenih količin integrabilnega modela. Nalogo sklenemo s komentarjem rezultatov in nadaljnje razvoja področja.

¹Renormalizacijska grupa gostotnih matrik (Density matrix renormalization group).

Poglavje 2

Teoretične osnove

2.1 Klasična in kvantna integrabilnost

Klasičen hamiltonski sistem z $2n$ prostostnimi stopnjami je integrabilen, če obstaja vsaj n integralov gibanja [1]. Transport v klasičnih integrabilnih sistemih je navadno balističen [3]. Če je transport balističen, potem motnja, ki jo vzbudimo v sistemu, potuje po sistemu brez sipanja. Na balistični transport bistveno vpliva obstoj solitonov. To so stabilne rešitve, ki prosto potujejo skozi sistem [4]. Solitoni zato prenašajo energijo brez izgub.

V kvantnih sistemih ne moremo definirati integrabilnosti na enak način, saj za vsak končni sistem obstaja poln set ohranjenih količin, npr. projektorji na lastna stanja [5]. Za kvantne sisteme obstaja več definicij integrabilnosti [5]. Te temeljijo bodisi na analogiji z definicijo klasične integrabilnosti bodisi na porazdelitvi energijskih nivojev, ali pa na posledicah, ki jih ima obstoj ohranjenih količin na dinamične lastnosti¹ [5]. Za namene obravnave transportnih pojavov je neposredno uporabna definicija predstavljena v [5]. Po tej definiciji je sistem integrabilen v primeru, ko obstaja množica ortogonalnih ohranjenih količin, ki medsebojno komutirajo [5]. Število baznih operatorjev, ki sestavljajo ohranjene količine, z dodajanjem delcev narašča z enako potenco kot število baznih operatorjev, ki sestavljajo Hamiltonjan [5]. Poleg tega mora število ohranjenih količin divergirati v termodinamski limiti [5]. Kot bo razvidno v naslednjem podpoglavju, so tako definirane ohranjene količine neposredno povezane s transportnimi koeficienti sistema.

V nalogi obravnavamo zlomitev integrabilnosti v anizotropni Heisenbergovi verigi z izotropno sklopitvijo z drugimi najbližjimi sosedi. Število baznih operatorjev, ki sestavljajo Hamiltonjan, narašča linearno z velikostjo sistema. Anizotropni Heisenbergov Hamiltonjan je v eni dimenziji rešljiv z Bethejevim nastavkom [6]. Algebrajski Bethejev nastavek nam omogoča konstrukcijo množice integralov gibanja, ki jih sestavljajo lokalne gostote², in zadoščajo predstavljenemu pogoju za integrabilnost [5].

¹npr. prevodnost

²Lokalni operatorji iz katerih dobimo celoten operator tako, da seštejemo vse translacije lokalnega operatorja vzdolž verige.

2.2 Drudejeva utež

V tem poglavju bomo na kratko povzeli obravnavo prevodnosti v okviru teorije linearnega odziva [7] in vpeljali Drudejevo utež, ki je osrednja količina pri obravnavi balističnosti transporta.

Prevodnost σ je definirana kot sorazmernostna konstanta med induciranim tokom ter poljem. V okviru teorije linearnega odziva lahko izrazimo prevodnost s pomočjo avtokorelacijske funkcije toka. Zvežam med transportnimi koeficienti teorije linearnega odziva z avtokorelacijskimi funkcijami tokov pravimo Green-Kubo relacije [7]. Green-Kubo relacijo za primer prevodnosti v zunanem električnem polju je Kubo vpeljal v [8]. Izpeljava za diskretni sistem je analogna izpeljavi v primeru, ko je sistem zvezen, zato se pri izpeljavi opremo na [7]. Dodatna predpostavka je, enako kot v [9], kjer je vpeljana kanonična Drudejeva utež, da se magnetno polje h spreminja linearno vzdolž spinske verige. Če vzamemo ustrezno limito v izrazu za splošno Kubo-Nakano enačbo v [7] za zvezen primer, vidimo, da je izraz za Drudejevo utež enak tudi v primeru, ko gradient ni konstanten.

Zanima nas, ali je transport v sistemu balističen ali difuzijski. Preko Green-Kubove relacije bomo vpeljali Drudejevo utež, ki je ničelna v primeru difuzijskega transporta in neničelna v primeru, ko je transport balističen. Vzemimo Hamiltonjan, v katerem je poleg interakcije med sestavnimi deli sistema prisotna sklopitev magnetizacijo vzdolž z -osi s časovno in krajevno spreminjajočim se zunanjim magnetnim poljem [10]

$$H' = H_0 - \sum_r \sigma_r^z h_r(t), \quad (2.1)$$

kjer H_0 označuje nezmoten Hamiltonjan, glede na katerega računamo kanonični ansambel,

$$\sigma^z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad \sigma^x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma^y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma^+ = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma^- = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad (2.2)$$

so spinski operatorji, $h_r(t)$ pa je vrednost polja na r -tem mestu. Povprečen tok je v okviru teorije linearnega odziva [7] dan z

$$\frac{1}{N} \langle j(t) \rangle = \frac{1}{N} \sum_r \int_{-\infty}^{\infty} \chi_{j, \sigma_r^z}(t-t') h_r(t') dt', \quad (2.3)$$

kjer je [7]

$$\chi_{j, \sigma_r^z}(t) = i\theta(t) \langle [j(t), \sigma_r^z] \rangle, \quad (2.4)$$

j vsota spinskega toka na vseh mestih, N velikost sistema, $[\]$ označuje komutator, $\langle \ \rangle$ pa pričakovano vrednost opazljivke v kanoničnem ansamblu. Odzivno funkcijo lahko izrazimo s pomočjo Kubove kanonične korelacijske funkcije [7]

$$\chi_{j, \sigma_r^z}(t) = \theta(t) \int_0^\beta \langle \dot{\sigma}_r^z(-i\lambda) j(t) \rangle d\lambda. \quad (2.5)$$

$\hbar = 1$, $k_b = 1$ in $\beta = \frac{1}{T}$ tekem celotne magistrske naloge. Če vstavimo zgornji izraz v enačbo (2.3), dobimo

$$\frac{1}{N} \langle j(t) \rangle = \frac{1}{N} \sum_r \int_{-\infty}^{\infty} \theta(t-t') \int_0^\beta \langle \dot{\sigma}_r^z(-i\lambda) j(t-t') \rangle d\lambda h_r(t') dt'. \quad (2.6)$$

Z upoštevanjem kontinuitetne enačbe [11]

$$\frac{d\sigma_r^z}{dt} = i[H, \sigma_r^z] = j_{r-1} - j_r \quad (2.7)$$

in predpostavke, da se polje spreminja linearno v odvisnosti od lege, dobimo izraz

$$\frac{1}{N}\langle j(t) \rangle = \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{\infty} \theta(t-t') \int_0^\beta \sum_r \langle j_r(-i\lambda) j(t-t') \rangle d\lambda \Delta h(t') dt', \quad (2.8)$$

kjer je $\Delta h(t') = h_{r+1}(t') - h_r(t')$ in j_r tok na r -tem mestu. Prevodnost je v Fourierovi sliki enaka odzivni funkciji, saj je izraz (2.8) konvolucija in torej produkt v Fourierovi sliki

$$\sigma(\omega) = \frac{1}{N} \int_0^\infty \exp(i\omega t) \int_0^\beta \langle j(-i\lambda) j(t) \rangle d\lambda dt, \quad (2.9)$$

Če časovni integral v izrazu (2.9) regulariziramo³ dobimo isti izraz kot v [7]. Relevanten je le realni del prevodnosti. Kubovo korelacijsko funkcijo lahko izrazimo z običajno korelacijsko funkcijo [12, 13]

$$\Re\sigma(\omega) = \beta \frac{1 - \exp(-\beta\omega)}{N\beta\omega} \Re \left(\int_0^\infty \exp(i\omega t) \langle j(t) j(0) \rangle dt \right). \quad (2.10)$$

Izraz (2.10) je lahko divergenten, če polje ni odvisno od časa $\omega \rightarrow 0$

$$\Re\sigma(\omega \rightarrow 0) = \beta \frac{1}{N} \Re \left(\int_0^\infty \langle j(t) j(0) \rangle dt \right). \quad (2.11)$$

Če korelacijska funkcija $\langle j(t) j(0) \rangle$ ne konvergira k 0, potem prevodnost $\sigma(0)$ divergira. Izraz za Drudejevo utež dobimo tako, da v enačbi (2.11) namesto integracije avtokorelacijske funkcije izvedemo povprečenje po času [14]

$$D = \beta \frac{1}{2N} \lim_{t' \rightarrow \infty} \frac{1}{t'} \Re \left(\int_0^{t'} \langle j(t) j(0) \rangle dt \right), \quad (2.12)$$

kjer D označuje Drudejevo utež, normalizacija pa je izbrana tako, da se prevodnost izraža kot [11]

$$\Re\sigma(\omega) = 2\pi D \delta(\omega) + \sigma_{reg}(\omega). \quad (2.13)$$

Da se prevodnost res izraža z Drudejevo utežjo tako kot narekuje izraz (2.13) se lahko prepričamo, če zapišemo izraza za prevodnost (2.10) in Drudejevo utež (2.12) v lastni bazi neperturbiranega Hamiltonjana H_0 . Če je Drudejeva utež neničelna, je transport balističen, saj je prevodnost neskončna. Drudejeva utež nam pove, kako v povprečju narašča prevodnost v odvisnosti od časa pri konstantnem zunanem gradientu polja. Drudejeva utež je povezana s povprečno ukrivljenostjo energijskih nivojev glede na spreminjanje magnetnega pretoka pri ničelni vrednosti pretoka skozi sklenjeno verigo [15].

Avtokorelacijsko funkcijo v izrazu (2.12), lahko eksplicitno izvrednotimo v lastni bazi Hamiltonjana H_0 [15]

$$D = \beta \frac{1}{2N} \frac{\sum_{n,i, E_n=E_i} \exp(-\frac{E_n}{T}) |\langle n|J|i \rangle|^2}{\sum_n \exp(-\frac{E_n}{T})}. \quad (2.14)$$

³K frekvenci prištejemo imaginarni del, ki ga po integraciji postavimo na 0.

Poleg propagacije z metodo DMRG in eksaktne diagonalizacije, pa lahko vrednost Drudejeve uteži navzdol omejimo tudi s pomočjo Mazurejeve neenakosti [16]. Povzemimo izpeljavo neenakosti po [16]. Vzemimo operator A , od katerega odštejemo ohranjene količine, pomnožene z nekim vektorjem koeficientov, in upoštevajmo, da za vsak operator velja, da je časovno povprečena avtokorelacijska funkcija večja ali enaka 0 [16]

$$\lim_{t' \rightarrow \infty} \frac{1}{t'} \int_0^{t'} \left\langle \left(A - \sum_i c_i \mathcal{Q}_i \right) \left(A(t) - \sum_i c_i \mathcal{Q}_i(t) \right) \right\rangle dt \geq 0. \quad (2.15)$$

Če upoštevamo, da so \mathcal{Q}_i ohranjene količine, in od časa neodvisni del prenesemo na desno stran enačbe, nato pa maksimiziramo desno stran glede na koeficiente c_i , dobimo Mazurejevo neenakost [15, 16]

$$\bar{C}_{A,A} \geq \sum_i \frac{\langle A \mathcal{Q}_i \rangle^2}{\langle \mathcal{Q}_i^2 \rangle}, \quad (2.16)$$

Za končne sisteme je neenakost (2.16) enakost v primeru, če na desni strani upoštevamo vse ohranjene količine \mathcal{Q}_i ([17], citirano po [18]). Relacija (2.16) predstavlja neposredno povezavo med integrabilnostjo sistema in Drudejevo utežjo, ki je do predfaktorjev enaka časovno povprečeni avtokorelacijski funkciji. Neenakost (2.16) pove, da lahko v integrabilnih sistemih za večino opazljivk pričakujemo balistični transport tudi v termodinamski limiti, saj izraz v števcu (2.16) narašča kvadratično, v imenovalcu pa linearno v odvisnosti od velikosti sistema. Pri tem smo predpostavili, da število operatorjev, ki sestavljajo opazljivko A narašča linearno z velikostjo sistema, kar je smiselna predpostavka, saj imamo pri obravnavi transporta opravka z operatorjem toka, ki ga dobimo s translacijo lokalnih gostot. V izrazu za Drudejevo utež (2.12) je potrebno povprečeno avtokorelacijsko funkcijo še deliti s številom delcev. S tem dobimo tudi v termodinamski limiti končno vrednost Drudejeve uteži. Izraz (2.16) pa je lahko ničelen tudi v primeru, ko je opazljivka kljub integrabilnosti ortogonalna na vse ohranjene količine, katerih norma narašča linearno z dimenzijo sistema. Taka opazljivka je ergodična [5], saj se nahaja v delu operatorskega prostora, v katerem je po dovolj dolgem času verjetnostna porazdelitev skladna s kanonično porazdelitvijo neodvisno od začetnih pogojev.

V primeru, ko je sistem neintegrabilen, navadno ni mogoče s pomočjo ohranjenih količin omejiti Drudejeve uteži. Kot v vsakem kvantnem sistemu obstaja tudi v neintegrabilnem sistemu poln set ohranjenih količin, vendar je zaradi neintegrabilnosti število ohranjenih količin, ki lahko omejijo vrednost Drudejeve uteži, omejeno. Za ostale mora veljati, da narašča $\langle \mathcal{Q}_i^2 \rangle$ s številom delcev hitreje kot linearno. V tem primeru časovno povprečena avtokorelacijska funkcija za dovolj veliko število delcev narašča počasneje kot linearno in gre zato Drudejeva utež v termodinamski limiti proti 0.

Drudejeva utež nam preko relacije (2.16) pove, kaj se zgodi z ohranjenimi količinami, ko v sistemu zlomimo integrabilnost.

2.3 Model

V magistrski nalogi obravnavamo Heisenbergov model XXZ s sklopitvijo XXX med drugimi najbližjimi sosedi. Hamiltonjan vzamemo po vzoru [2]

$$H = \sum_r J(2(\sigma_r^+ \sigma_{r+1}^- + \sigma_r^- \sigma_{r+1}^+) + \Delta \sigma_r^z \sigma_{r+1}^z) + d \sum_r \boldsymbol{\sigma}_r \cdot \boldsymbol{\sigma}_{r+2}. \quad (2.17)$$

Δ je anizotropija, d pa amplituda sklopitve z drugimi najbližjimi sosedi. $\boldsymbol{\sigma}_r$ je vektor $(\sigma_r^x, \sigma_r^y, \sigma_r^z)$.

Omenimo še, da je v našem primeru $J = 4J'$, kjer je J' moč sklopitve v primeru, ko Hamiltonjan zapišemo s spinskimi operatorji. Posledično je naša časovna skala štirikrat krajša, temperaturna pa štirikrat daljša od časovne skale v člankih s katerimi bomo primerjali rezultate. Vrednost spinskega toka pa je 8-krat večja, saj dobimo še faktor 2 zaradi definicije magnetizacije. J postavimo na 1.

Za izračun spinske Drudejeve uteži potrebujemo izraz za spinski tok. V primeru, ko je magnetizacija v sistemu ohranjena količina, lahko tok definiramo s pomočjo kontinuitetne enačbe (2.7). Če razpišemo komutator v izrazu (2.7), dobimo $4i(\sigma_{r-1}^+ \sigma_r^- - \sigma_{r-1}^- \sigma_r^+ - \sigma_r^+ \sigma_{r+1}^- + \sigma_r^- \sigma_{r+1}^+ + d(\sigma_{r-2}^+ \sigma_r^- - \sigma_{r-2}^- \sigma_r^+ - \sigma_r^+ \sigma_{r+2}^- + \sigma_r^- \sigma_{r+2}^+))$. (2.18) Z definicijo toka

$$j_r = 4i(\sigma_r^+ \sigma_{r+1}^- - \sigma_r^- \sigma_{r+1}^+ + d(\sigma_r^+ \sigma_{r+2}^- - \sigma_r^- \sigma_{r+2}^+ + \sigma_{r-1}^+ \sigma_{r+1}^- - \sigma_{r-1}^- \sigma_{r+1}^+)), \quad (2.19)$$

zadostimo enačbi (2.7). V limiti $d \rightarrow 0$ dobimo izraz za neperturbiran Hamiltonjan [11]. Tok lahko za splošno interakcijo končnega dosega izračunamo s pomočjo izraza v [19]. Izraz za celoten tok, ki ga uporabimo pri simulaciji DMRG, ko obravnavamo sistem z odprtimi robnimi pogoji, je

$$j = 4i\left(\sum_{r=1}^{N-1} \sigma_r^+ \sigma_{r+1}^- - \sigma_r^- \sigma_{r+1}^+ + 2d\left(\sum_{r=1}^{N-2} \sigma_r^+ \sigma_{r+2}^- - \sigma_r^- \sigma_{r+2}^+\right)\right). \quad (2.20)$$

Poglavje 3

Dosedanji rezultati

3.1 Eksperimentalni rezultati

Transportne lastnosti kvazi-enodimenzionalnih spinskih sistemov so zanimive tudi z eksperimentalnega stališča. Opis eksperimentalnih rezultatov je povzet po [20]. Eksperimentalno je preučen vpliv spinske sklopitve na transport v materialih, ki jih sestavljajo 1D Heisebergove verige ali lestve s šibko sklopitvijo med verigami.

V eksperimentih je izmerjena vrednost toplotne prevodnosti v neravnovesnem stacionarnem stanju. Prevodnost v vzorcih ni neskončna, kar pa ni nujno posledica ničelne Drudejeve uteži, ampak je lahko povezana z neidealnostjo obravnavanega sistema. Poleg divergentnega dela prevodnosti v limiti $\omega \rightarrow 0$ je v tej limiti lahko prisotna tudi končna vrednost regularnega dela prevodnosti (2.13). Kot smo že omenili, transport ni neskončen, tako da je balistični transport v eksperimentih identificiran kot odstopanje prevodnosti pri $\omega = 0$ od regularnega dela. Spinski prispevek je od ostalih, npr. fononskega, ločen z meritvijo toplotne prevodnosti vzdolž spinskih verig in pravokotno nanje. Ker je sklopitev pravokotno na spinske verige praktično zanemarljiva, so zanemarljivi tudi prispevki spinskih vzbuditev. Eksperimenti nakazujejo na balistični transport energije v primeru Heisenbergovih spin- $\frac{1}{2}$ verig brez spektralne reže [20].

Čeprav v nalogi obravnavane perturbacije ni mogoče povezati s perturbacijo medsebojno sklopljenih verig, nam pridobljeni rezultati ponujajo indikacijo, kako bi lahko medverižna sklopitev vplivala na transportne lastnosti. Interakcijo z drugimi najbližjimi sosedi se da namreč zapisati kot ustrezno sklopljeno spinsko lestev [21].

3.2 Teoretični rezultati

Posvetimo najprej nekaj besed lastnostim Heisenbergovega modela XXZ . Ena od ohranjenih količin neperturbiranega Heisenbergovega Hamiltonjana XXZ je toplotni tok [15]. Posledično je vrednost termične Drudejeve uteži končna in termična prevodnost sistema v časovno neodvisnem polju neskončna¹ [11]. Vprašanje spinske Drudejeve uteži v neperturbiranem Hamiltonjanu je zahtevnejše, saj so vse ohranjene količine ortogonalne na spinski tok in je zato ne moremo omejiti s pomočjo Mazurejeve neenakosti. Vendar pa obstaja v primeru odprtih robnih pogojev dru-

¹Če npr. v sistemu vzbudimo motnjo, ki sestoji iz ene lokalne gostote energijskega toka, bo ta prosto potovala po sistemu. Amplituda se lahko pretaka le znotraj lokalnih gostot energijskega toka, saj je energijski tok ohranjena količina.

žina kvazilokalnih, skoraj ohranjenih količin [14, 22], ki niso ortogonalne na spinski tok in podobno kot lokalne ohranjene količine navzdol omejuje vrednost avtokorelacijske funkcije spinskega toka v termodinamski limiti z neenakostjo, ki je podobna Mazurejevi [9]. Skoraj ohranjene količine so operatorji, ki skoraj komutirajo s Hamiltonjanom, kar pomeni, da norma komutatorja pojema eksponentno hitro od koncev verige. Razlog, da za omejitev povprečene avtokorelacijske funkcije zadostujejo skoraj ohranjene količine, je Lieb-Robinsonov teorem [23]. Lieb-Robinsonov teorem pravi, da se informacija v kvantnem sistemu širi s končno grupno hitrostjo [23]. Preden lahko izvedemo časovno limito v izrazu za Drudejevo utež (2.12), je potrebno izvesti termodinamsko limito. Informacija o robnih pogojih zaradi izvedbe termodinamske limite ne vpliva bistveno na omejitev Drudejeve uteži [9].

Eden redkih analitičnih rezultatov, povezanih z zlomitvijo integrabilnosti, je predstavljen v članku [24]. Obravnavan je časovno perturbiran Heisenbergov model XXZ . Ugotovljeno je, da Drudejeva utež preživi zadosti majhno zlomitev integrabilnosti. Postavljena je tudi domneva, da obstaja fazni prehod med skoraj integrabilnimi sistemi, ki jih označujeta neergodičnost in nemešanje [24], in neintegrabilnimi sistemi.

Predhodno je bil numerično obravnavan predvsem primer, ko sklopitev z drugimi najbližjimi sosedi opisuje Hamiltonjan XXZ [19, 25]. Razloga za izbiro izotropne perturbacije, in ne morda fizikalno bolj smiselne perturbacije XXZ , je ta, da obstajata za izotropno sklopitev dva analitična rezultata [2, 26] in se zato zdi, da je analitično delo lažje v primeru izotropne sklopitve.

3.3 Numerični rezultati

Povzemimo še nekaj numeričnih rezultatov vpliva zlomitve integrabilnosti na transportne lastnosti spin- $\frac{1}{2}$ sistemov. V članku [19] je z eksaktno diagonalizacijo preučen vpliv sklopitve XXZ z drugimi najbližjimi sosedi, na Drudejevo utež Hamiltonjana XXZ . Obravnavana je izotropna točka, za katero tudi brez perturbacije ni znano ali je transport balističen ali difuzijski. Enak problem je obravnavan tudi v članku [27], pri čemer je s pomočjo metode DMRG propagirana motnja v sistemu. Spremljana je varianca magnetizacije v odvisnosti od časa. V primeru balističnega transporta skalira varianca kvadratično s časom, v primeru difuzijskega pa linearno [28]. Ugotovljeno je, da je za dovolj majhne vrednosti sklopitve z drugimi najbližjimi sosedi transport pri nizkih temperaturah balističen. Do prehoda med balističnim in difuzijskim transportom pride v kvantni kritični točki [27]. V primeru spinske lestve je ugotovljeno, da je transport difuzijski. V [21] so obravnavane različne spinske lestve, ki so na koncih sklopljene z Markovskima kopelma, tako da sta pričakovani vrednosti magnetizacije različni. Preučeno je skaliranje spinskega toka v odvisnosti od velikosti sistema. V primeru balističnega transporta pričakujemo, da tok ni odvisen od velikosti sistema [21]. Če je transport difuzijski, pada tok recipročno z velikostjo sistema [21], če je pričakovana vrednost magnetizacije spinov na robu neodvisna od velikosti sistema. V primeru integrabilne spinske lestve je ugotovljeno, da je transport anomalen, kar pomeni, da tok z velikostjo sistema pada, vendar počasneje, kot bi pričakovali v primeru difuzijskega transporta [21]. V primeru neintegrabilnih sistemov je ugotovljeno, da je transport verjetno difuzijski. V članku sicer niso obravnavane transportne lastnosti za majhne neintegrabilne perturbacije. V [29] je simulacija DMRG obravnavan vpliv zlomitve integrabilnosti v Heisenbergovem mo-

delu XXZ na energijski transport. Uporabljeni sta dve neintegrabilni perturbaciji. Prva je vzdolž verige alternirajoče magnetno polje, ki kaže vzdolž z -osi. V tem primeru Drudejeva utež ne konvergira h končni vrednosti v času simulacije, tudi če je perturbacija majhna. Druga obravnavana perturbacija je veriga s sklopitvijo XXZ , kjer pa je velikost sklopitve različna za sode in lihe vezi. V tem primeru se zdi, da je vrednost Drudejeve uteži končna. Rezultat v [29] nakazuje, da na transportne lastnosti ne vpliva le amplituda, ampak tudi oblika perturbacije, kot je ugotovljeno tudi v [26].

Poleg vprašanja, ali je Drudejeva utež neničelna, je zanimiva tudi njena temperaturna odvisnost in predvsem njena vrednost pri $T = \infty$, saj je, izvzemši nizkotemperaturno limito, v visokotemperaturni limiti verjetno najenostavneje priti tudi do analitičnega rezultata.

Poglavje 4

Metodi

V magistrski nalogi sta za določanje Drudejeve uteži uporabljeni dve komplementarni metodi. Eksaktna diagonalizacija, nam omogoča izvedenost izraza (2.12) do neskončnega časa, vendar je dosegljiva velikost omejena na ~ 20 spinov. Simulacija DMRG pa nam omogoča simulacijo dinamike spinskih sistemov velikosti ~ 100 , a je simulacija časovno omejena. Simulaciji sta napisani v programskem jeziku *C++*. Uporabljena je knjižnica Armadillo [30] skupaj s knjižnico intel MKL (Math Kernel Library). Za diagonalizacijo sistemov majhnih dimenzij, preverbo pravilnosti delovanja metod in risanje grafov je uporabljena Mathematica. Sheme so narisane v programu Inkscape, kvantna vezja pa s pomočjo paketa Q-circuit.

4.1 Eksaktna diagonalizacija

Metoda in obravnava sta prirejeni po [31, 32].

Eksaktna diagonalizacija je v nalogi uporabljena predvsem za preverbo delovanja metode DMRG. Diagonaliziramo lahko matrike dimenzije $\sim 10^4$. Dimenzija matrike, ki jo diagonaliziramo, je 2^N , kjer je N število spinov v verigi. Lastne vektorje zapišemo v lastni bazi σ^z operatorjev. Zaradi simetrije lahko problem razdelimo na manjše podprobleme. Hamiltonjan ohranja celotno magnetizacijo, zato lahko diagonaliziramo matriko znotraj podprostora s fiksno magnetizacijo, saj so ostali matrični elementi ničelni [32]. Hamiltonjan je tudi translacijsko invarianten. Zato je gibalna količina dobro kvantno število in lahko diagonaliziramo zgolj lastna stanja translacijskega operatorja z isto gibalno količino [31], npr.

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{2} (|0110\rangle - |0011\rangle + |1001\rangle - |1100\rangle) \quad (4.1)$$

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1010\rangle - |0101\rangle), \quad (4.2)$$

kjer je gibalna količina k dana z lastno vrednostjo translacijskega operatorja

$$T|\psi_k\rangle = \exp\left(i\frac{2\pi k}{N}\right) |\psi_k\rangle \quad (4.3)$$

Tudi Drudejevo utež (2.14) lahko izvednotimo v posameznem podprostoru, saj operator toka prav tako ohranja magnetizacijo in je translacijsko invarianten.

Na posameznih mestih je sistem dvonivojski, tako da lahko bazne vektorje zapišemo v računski bazi¹ [32] in obdržimo od vseh le generatorje ciklov [31]: stanja, iz katerih lahko s translacijami verige dobimo vsa stanja [31, 32]. Na tako dobljena stanja delujemo z izvendiagonalnim delom Hamiltonjana ter z operatorjem toka in zapišemo vsa dobljena stanja v vektor. Vzemimo za primer matrični element Hamiltonjana $h_{i,j}^{M,k}$, kjer M in k označujeta vrednost magnetizacije in gibalno količino podprostora, i in j pa sta indeksa matričnega elementa v izbranem podprostoru. Ker sta tako Hamiltonjan kot tudi operator toka Hermitska, se lahko omejimo zgolj na primere, ko je $i \geq j$. Če je $i = j$, ima matrični element dva prispevka. Prvi prispevek dobimo od diagonalnih členov Hamiltonjana. Ker so naši bazni vektorji lastna stanja σ^z operatorjev, se lahko omejimo le na predstavnike ciklov, saj so prispevki med različnimi elementi v ciklu ničelni. Če imata sosednja spina isto številko, je njun prispevek 1, v nasprotnem primeru pa prispevata -1 . Za interakcijo med najbližjimi sosedi dobimo ustrezni prispevek tako, da od števila spinov odštejemo število bitov v števkih, ki se ne prekrivajo, če napravimo ciklično translacijo za eno mesto, ter število pomnožimo z anizotropijo. Podobno dobimo prispevek sklopitve z drugimi najbližjimi sosedi, le da napravimo ciklično permutacijo za dve mesti, ter dobljeno število pomnožimo z velikostjo sklopitve z drugimi najbližjimi sosedi. Drugi prispevek dobimo, če se nahaja v ciklu stanja j stanje, ki je enak kateremu od stanj v vektorju Hamiltonjana stanja i . Za vsako tako prekrivanje dobimo prispevek $2 \cos(2\pi \frac{kl}{n})$, kjer je l število translacij med prvotnim elementom in elementom, ki se nahaja v vektorju Hamiltonjana. Na podoben način dobimo tudi izvendiagonalne elemente, s tem da imamo v tem primeru zgolj prispevek izvendiagonalnih elementov Hamiltonjana. Če se v vektorju Hamiltonjana števila i nahaja za l translirano število j , prištejemo k matričnemu elementu $h_{i,j}^{M,k}$ vrednost

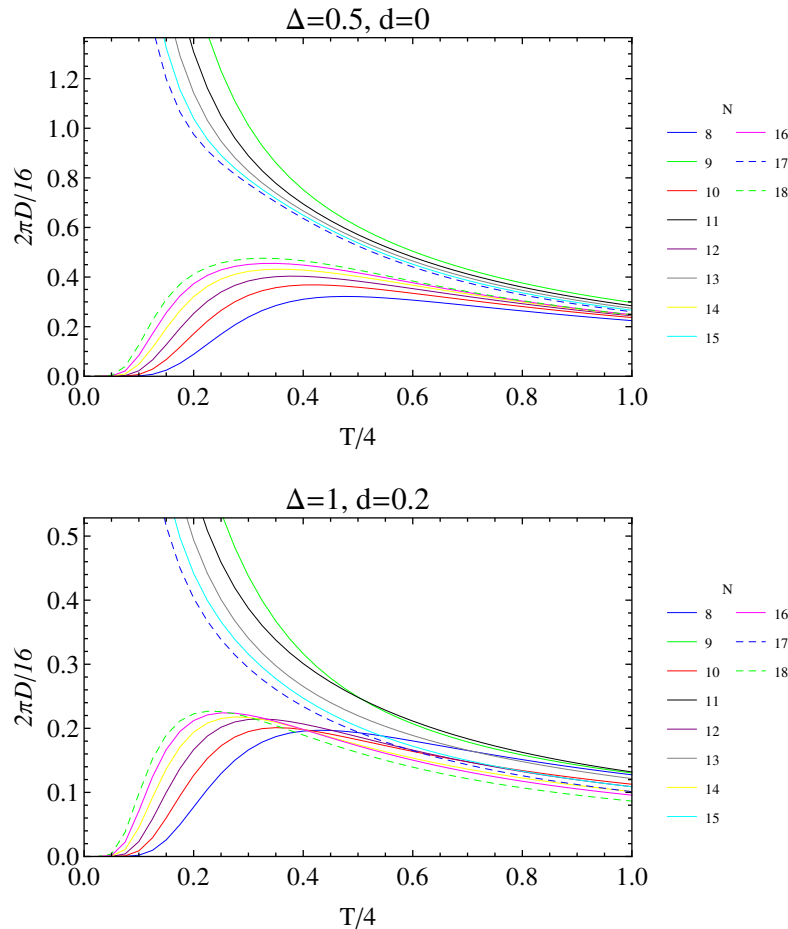
$$\sqrt{\frac{R(j)}{R(i)}} 2 \exp(2\pi i \frac{kl}{n}), \quad (4.4)$$

kjer označuje $R(j)$ red² cikla stanja j . Stanja so urejena tako, da je $R(j) \geq R(i)$. Prefaktor je posledica tega, da je za vsak neničelni prispevek, neničeln tudi prispevek ustrezno transliranega stanja, tako da dobimo isti element natanko $R(j)$ -krat. Ko upoštevamo normalizacijo, dobimo ravno prefaktor v (4.4). $\exp(2\pi i \frac{kl}{n})$ je razlika faz, 2 pa dobimo od Hamiltonjana. Elementu $h_{j,i}^{M,k}$ prištejemo kompleksno konjugiran člen. V primeru sklopitve z drugim najbližjim sosedom izraz (4.4) pomnožimo z d . Konstrukcija operatorja spinskega toka v izbrani bazi je analogna konstrukciji Hamiltonjana. Za iz vrednotenje izraza (2.14) moramo oceniti, katere energije so degenerirane, saj je potrebno sešteti le po prispevkih v degeneriranih podprostorih. V članku [19], lahko na sliki 3 vidimo, koliko nivojev je degeneriranih v odvisnosti od ocene razlike med nivoji, ki je še dovoljena, da dva nivoja razglasimo za degenerirana. Kot je ugotovljeno v [19], je število konstantno med $10^{-9}J'$ in $10^{-6}J'$ za velikosti verige do 18. Za degenerirane določimo lastne vrednosti, ki se razlikujejo za manj kot 10^{-7} .

Na sliki 4.1 je preverjeno, če metoda deluje pravilno z izbiro istih parametrov, kot so izbrani v [19].

¹Binarni zapis številke označuje bazni vektor, kjer 1 predstavlja lastno stanje σ^z operatorja z lastno vrednostjo -1 , stanje 0 pa lastno stanje z lastno vrednostjo 1.

²Število elementov.



Slika 4.1: Na slikah je prikazana vrednost Drudejeve uteži v odvisnosti od temperature, izračunana z eksaktno diagonalizacijo za primerjavo z [19]. Prikazana je temperaturna odvisnost Drudejeve uteži za različne velikosti sistema N . Zgoraj je rezultat diagonalizacije za integrabilen primer z vrednostjo anizotropije $\Delta = 0.5$, ki se ujema z rezultatom na 5. sliki članka [19]. Spodaj pa preverimo še, če dobimo pravi rezultat, tudi ko vključimo sklopitev z drugimi najbližjimi sosedi d pri izotropni sklopitvi z najbližjimi sosedi, za primerjavo s 13. sliki članka [19]. Preverjali smo rezultate za definicijo Drudejeve uteži, ki je v [19] označena z D_s^I . Definicija Drudejeve uteži v [19] se razlikuje za konstantni faktor, s katerim smo pomnožili skalo. Ustrezno je prirejena tudi temperaturna skala.

4.2 DMRG

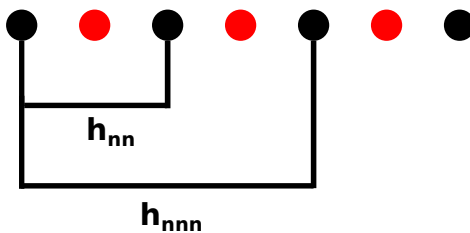
V tem podpoglavju je predstavljena metoda DMRG. Pri implementaciji in opisu te metode se opiramo predvsem na [13, 33]. Vpliv nekaterih parametrov, ki nastopajo v metodi DMRG, na rezultate za neperturbiran primer je predstavljen v [34]. Metodo DMRG je v osnovni obliki razvil Steven R. White ([35, 36] citirano po [33]). Uporabljena metoda temelji na zapisu vektorja stanja v obliki MPS-ja (matrično produktnega stanja) in na optimalnem približku časovnega razvoja³ [33].

³Aproksimacija je optimalna, če so MPS-ji levo in desno ortogonalni [13]. Zaradi zanemaritev oziroma delovanja na stanje z neunitarnim operatorjem MPS ni ortogonalen [13].

4.2.1 Matrično-produktna predstavitev kanoničnega ansambla

Izračunati želimo pričakovano vrednost avtokorelacijske funkcije toka v kanoničnem ansamblu. Metoda se imenuje "metoda očiščenja termičnega stanja" (purification method) [13, 33]. Kanonično stanje je, izvzemši temperaturo $T = 0$, statistična mešanica. To pomeni, da se stanja ne da zapisati kot projektor na čisto stanje, ampak le kot vsoto projektorjev. Ideja metode je zapis mešanega stanja, kot čisto stanje v razširjenem Hilbertovem prostoru. V razširjenem prostoru je izbrano takšno stanje, da je pričakovana vrednost opazljivk v kanoničnem stanju enaka pričakovani vrednosti opazljivk stanja v razširjenem prostoru [37]. Alternativna metoda bi bila računanje avtokorelacijske funkcije za naključno izbrano množico stanj, katerih zastojna točka je kanonično stanje [38, 39]. Prednost te metode je, da je dolžina sklopitve zaradi odsotnosti zunanjih spinov manjša, vendar pa je metoda odvisna od števila izbranih stanj. Za razliko od izbrane metode, pa narašča prepletenost in s tem dimenzija matrik vzdolž celotne verige. Uporabljena metoda se zdi obetavna tudi glede na dosedanje rezultate [13, 29, 34].

Za vsak fizikalni podsistem napravimo kopijo podsistema, tako da se ta nahaja poleg fizikalnega podsistema [13, 33]. Število spinov se s tem podvoji, pri čemer je le vsak drugi spin fizikalen. Če upoštevamo dodatne spine, ima interakcija doseg 5 spinov. Glej sliko 4.2.



Slika 4.2: Shematska predstavitev razširjenega sistema. Črne kroglice so spini, ki pripadajo fizikalnemu sistemu, rdeče pa so dodani spini. Ponazorjena je tudi interakcija med najbližjimi h_{nn} in drugimi najbližjimi sosedi h_{nnn} .

Postavimo sosednje spine v singletno stanje [13, 33]

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|10\rangle - |01\rangle), \quad |\Psi\rangle = \otimes^N |\psi_2\rangle. \quad (4.5)$$

Če izračunamo delno sled po nefizikalnem podsistemu O [13, 33]

$$\text{tr}_O(|\Psi\rangle\langle\Psi|) = \frac{1}{2^N} \otimes^N (|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|) = \frac{I}{2^N}, \quad (4.6)$$

dobimo kanonično stanje fizikalnega podsistema pri neskončni temperaturi. Spine bi lahko postavili tudi v kakšno drugo kombinacijo stanj, pomembno je le, da sta stanji zunanjega sistema, ki ustrezata stanjema fizikalnega sistema $|0\rangle$ ter $|1\rangle$, ortogonalni.

S propagacijo v imaginarnem času, lahko spremenimo kanonično stanje pri neskončni temperaturi, v kanonično stanje pri končni temperaturi

$$\rho_T = \frac{\sum_n \exp(-\beta E_n) |n\rangle\langle n|}{Z}, \quad (4.7)$$

kjer je Z fazna vsota, $|n\rangle$ pa lastno stanje, ki ustreza lastni energiji E_n . Stanje $\exp(-\frac{\beta H}{2})|\Psi\rangle$ lahko razpišemo v lastni bazi Hamiltonjana H [37]

$$\sum_{n,i} \exp(-\frac{\beta E_n}{2}) c_{n,i} |n\rangle |i\rangle_o \quad (4.8)$$

in izračunamo

$$\text{tr}_O \left(\exp(-\frac{\beta H}{2}) |\Psi\rangle \langle \Psi| \exp(-\frac{\beta H}{2}) \right) = \sum_{n,i} \exp(-\beta E_n) |c_{n,i}|^2 |n\rangle \langle n|. \quad (4.9)$$

$\sum_i |c_{n,i}|^2 = \frac{1}{2^N}$, kar najlažje vidimo, če razpišemo $I = \sum_n |n\rangle \langle n|$ v izrazu (4.6). Tako dobimo enakost [33]

$$\rho_T = \frac{\text{tr}_O \left(\exp(-\frac{\beta H}{2}) |\Psi\rangle \langle \Psi| \exp(-\frac{\beta H}{2}) \right)}{\text{tr} \left(\exp(-\frac{\beta H}{2}) |\Psi\rangle \langle \Psi| \exp(-\frac{\beta H}{2}) \right)}. \quad (4.10)$$

Pokazali smo, da lahko s primerno izbiro čistega stanja v razširjenem Hilbertovem prostoru pridemo do mešanega stanja, ki ustreza kanoničnemu ansamblu pri izbrani temperaturi.

Računanje pričakovanih vrednosti opazljivk za kanonični ansambel je z zgornjo metodo še lažje kot konstrukcija gostotnega operatorja. Pričakovano vrednost izračunamo kot $\text{tr}_S (Op \rho_T)$, kjer je Op operator, katerega pričakovano vrednost računamo, tr_S pa sled po prostostnih stopnjah fizikalnega sistema

$$\langle Op \rangle = \text{tr}_S (Op \rho_T) = \text{tr}_S \left(Op \frac{\text{tr}_O \left(\exp(-\frac{\beta H}{2}) |\Psi\rangle \langle \Psi| \exp(-\frac{\beta H}{2}) \right)}{\text{tr} \left(\exp(-\frac{\beta H}{2}) |\Psi\rangle \langle \Psi| \exp(-\frac{\beta H}{2}) \right)} \right). \quad (4.11)$$

Operator Op deluje trivialno na okolje in ga lahko prenesemo v tr_O . Če upoštevamo ciklično invariantnost sledi in izvedemo sled v bazi, v kateri za enega od baznih vektorjev izberemo stanje $|\Psi\rangle$, dobimo izraz [33]

$$\langle Op \rangle = \frac{\langle \Psi | \exp(-\frac{\beta H}{2}) Op \exp(-\frac{\beta H}{2}) | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \exp(-\beta H) | \Psi \rangle}. \quad (4.12)$$

Zanima nas vrednost avtokorelacijske funkcije spinskega toka [13]

$$\langle j(t)j \rangle = \frac{\langle \Psi | \exp(-\frac{\beta H}{2}) \exp(iHt) j \exp(-iHt) j \exp(-\frac{\beta H}{2}) | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \exp(-\beta H) | \Psi \rangle}, \quad (4.13)$$

ki jo iz vrednotimo tako, da najprej propagiramo stanje $|\Psi\rangle$ v imaginarnem času in ga nato pomnožimo s tokom. Nato propagiramo v realnem času tako stanje, ki je pomnoženo s tokom, kot tudi tisto, ki ni. Poslužimo se aproksimacije, ki olajša simulacijo [40]

$$\frac{1}{N} \langle j(t)j \rangle \cong \langle j(t)j_{\frac{N}{2}} \rangle. \quad (4.14)$$

Za $j_{\frac{N}{2}}$, uporabimo namesto izraza (2.19), kar izraz

$$j_{\frac{N}{2}} = 4i(\sigma_{N/2}^+ \sigma_{N/2+1}^- - \sigma_{N/2}^- \sigma_{N/2+1}^+ + 2d(\sigma_{N/2}^+ \sigma_{N/2+2}^- - \sigma_{N/2}^- \sigma_{N/2+2}^+)). \quad (4.15)$$

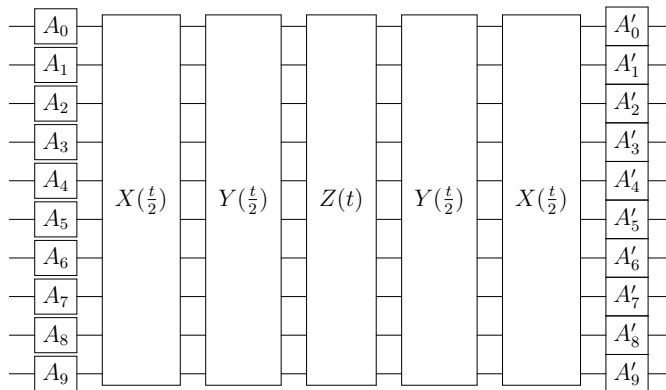
Pri približku (4.14) smo namreč predpostavili translacijsko invariantnost, ki ji v primeru odprtih robnih pogojev ni zadoščeno. Z enako predpostavko translacijske invariantnosti lahko namesto prvotnega izraza za $J_{\frac{N}{2}}$ uporabimo izraz (4.15).

4.2.2 Razcep Suzuki-Trotter

Prvi korak v implementaciji metode je razcep Suzuki-Trotter [13, 33]. Cilj razcepa Suzuki-Trotter je približek propagatorja $\exp(aH)$. Približek propagatorja sestavljajo lokalni operatorji. Hamiltonjan H razdelimo na čim manjše število delov, tako da lokalni operatorji znotraj posameznega dela komutirajo, saj to pomeni, da lahko eksponent vsote posameznega dela zapišemo kot produkt eksponentov. Ko izberemo ustrezno delitev, je potrebna še izbira sheme Suzuki-Trotter. V primeru sklopitve med najbližjimi sosedi navadno izberemo delitev na sode in lihe člene [13, 33]. V našem primeru to ni mogoče, tako da razdelimo Hamiltonjan glede na osi koordinatnega sistema $H = H_x + H_y + H_z$, kjer H_i sestojijo iz vseh členov, ki vsebujejo σ^i matrike. Operatorji znotraj H_i komutirajo, saj obstaja baza, v kateri so vsi diagonalni. Sedaj napravimo aproksimacijo propagatorja, ki je analogna primeru, ko imamo le sode in lihe člene [39]

$$\exp(a(H_x + H_y + H_z)) = \exp\left(a\frac{H_x}{2}\right) \exp\left(a\frac{H_y}{2}\right) \exp(aH_z) \exp\left(a\frac{H_y}{2}\right) \exp\left(a\frac{H_x}{2}\right) + O(a^3). \quad (4.16)$$

Na sliki 4.3 je ponazorjena izvedba enega koraka propagacije matrično produktnih stanj A_i s sosledjem operatorjev na desni strani izraza (4.16).



Slika 4.3: Predstavitev enega koraka časovne propagacije. A in A' ponazarjajo matrično produktna stanja, pred izvedbo enega koraka Suzuki-Trotter in po njej. Sosledje kvantnih vrat X , Y in Z predstavlja en korak Suzuki-Trotter.

Ko ne odčitavamo pričakovane vrednosti opazljivk, združimo prvi in zadnji propagator, s čimer zmanjša število izvedenih korakov. V naslednjem koraku lahko posamezni propagator, npr. $Z(t) = \exp(itH_z)$, razdelimo na lokalne člene $Z(t) = \Pi_i z^i(t)$, kjer je

$$z^i(t) = \exp(it(\Delta\sigma_i^z\sigma_{i+2}^z + d\sigma_i^z\sigma_{i+4}^z)), \quad (4.17)$$

saj ti komutirajo. Za sklopitev v smeri x in y ustrezno preimenujemo indekse in postavimo $\Delta = 1$. Dimenzije zgornjih matrik so 32×32 in smo jih izračunali s pomočjo Mathematice. Poleg tridelčnega propagatorja potrebujemo še dvodelčni propagator za sklopitev med zadnjima dvema delcema. Dobimo ga tako, da postavimo $d = 0$ v izrazu (4.17) in ga označimo z $z_2^i(t)$. Na sliki 4.4 je shematsko predstavljen razcep propagatorja. V primeru propagacije stanja v realnem času, propagiramo tudi zunanje spine, a s spremenjenim časovnim predznakom. Na zunanje spine lahko delujemo s poljubno unitarno transformacijo, pa s tem ne spremenimo vrednosti izraza (4.13)

[40]. Dodatnega naraščanja prepletenosti in s tem dimenzije matrik se znebimo, če propagiramo zunanje spine z istim propagatorjem, le v nasprotnem času [40]. Najbolj nedvoumno je viden vpliv, če propagiramo v času stanje $\exp(-\beta H)|\Psi\rangle$, saj se v tem primeru dimenzija matrik s časom praktično sploh ne spreminja (glej [13]). Prepletenost in z njo dimenzija matrik narašča le v okolici mesta, na katero smo delovali z netrivialnim operatorjem. To je posledica Lieb-Robinsonovega teorema, saj je časovna propagacija kanoničnega stanja trivialna, operator toka pa je pred propagacijo netrivialen le za nekaj spinov na sredini verige [13, 41]. Če prepletenost stanja $|\Psi\rangle$ s časom ne narašča se prepletenost produkta $j_{\frac{N}{2}}|\Psi\rangle$ širi s končno hitrostjo, saj lahko zapišemo $\exp(-iHt)j_{\frac{N}{2}}|\Psi\rangle = j_{\frac{N}{2}}(-t)|\Psi(t)\rangle$. V [13] je numerično preverjeno, da je propagacija zunanjih spinov z enakim Hamiltonjanom v nasprotnem času optimalna za enega od razredov interakcij. Če prepisemo transformacije, ki ustrezajo sistemu z zunanjimi prostostnimi stopnjami s transformacijami matrično produktnih operatorjev, postane jasno zakaj ravno propagacija v nasprotnem času z istim Hamiltonjanom zmanjša prepletenost in zakaj je razvoj stanja $\exp(-\beta H)|\Psi\rangle$ trivialen [41]. Pokazali bomo, zakaj je časovni razvoj stanja $\exp(-\beta H)|\Psi\rangle$ z razvojem zunanjega sistema trivialen. Omejimo se lahko zgolj na primer neskončne temperature, saj vsi obravnavani operatorji komutirajo s Hamiltonjanom H . Operator $T_X = \sum_{i \in O} \sigma_i^x$ spremeni stanja vseh zunanjih spinov $|0\rangle \longleftrightarrow |1\rangle$, tako da preide $|\Psi\rangle \rightarrow \frac{1}{2^{\frac{N}{2}}} \otimes^N (|11\rangle - |00\rangle)$ in lahko $T_X|\Psi\rangle$ zapišemo v lastni bazi Hamiltonjana H kot

$$T_X|\Psi\rangle = \sum_n c_n^2 |n\rangle_S \otimes |n\rangle_O. \quad (4.18)$$

Stanje (4.18) je lastno stanje operatorja $\exp(-itH_S)\exp(itH_O)$ z lastno vrednostjo 1, kar pomeni, da se stanje ob delovanju operatorja ne spremeni. Od tod vidimo, da se tudi stanje $|\Psi\rangle$ ne spremeni, saj Hamiltonjana H_S in H_O komutirata z operatorjem T_X in velja

$$\exp(-itH_S)\exp(itH_O)|\Psi\rangle = T_X \exp(-itH_S)\exp(itH_O)T_X|\Psi\rangle. \quad (4.19)$$

Poleg razumevanja, zakaj je uporabljena metoda učinkovita, je posledica zgornjega argumenta ugotovitev⁴, da stanja $|\Psi\rangle$ ni potrebno propagirati v času, ampak moramo propagirati zgolj stanje $j_{\frac{N}{2}}|\Psi\rangle$. S propagacijo zunanjih spinov ne povečamo števila korakov. Zgornji zaključek nam omogoča tudi, da s propagacijo stanja $j_{\frac{N}{2}}|\Psi\rangle$ pri neskončni temperaturi dobimo vrednost avtokorelacijske funkcije pri poljubni temperaturi. Izraz avtokorelacijske funkcije toka lahko, zaradi ciklične invariantnosti sledi, zapišemo kot

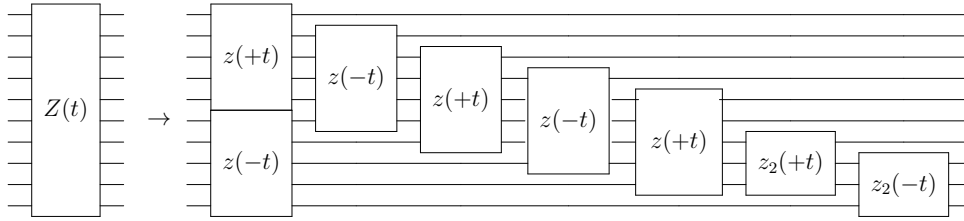
$$\langle j(t)j \rangle = \frac{\langle \Psi | \exp(-\beta H) \exp(iHt)j \exp(-iHt)j | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \exp(-\beta H) | \Psi \rangle}. \quad (4.20)$$

Z izračunom $\exp(-iH_E t)\exp(iH_O t)j_{\frac{N}{2}}|\Psi\rangle$ lahko pričakovano vrednost avtokorelacijske funkcije toka pri poljubni temperaturi dobimo tako, da v imaginarnem času⁵ propagiramo stanje $\langle \Psi |$ do željene temperature in na koncu izračunamo pričakovano vrednost toka. Propagacija v imaginarnem času je računsko manj zahtevna, saj je

⁴Isti zaključek sledi tudi iz izomorfizma med razvojem MPS v razširjenem prostoru in razvojem MPO (matrično produktnega operatorja) [41].

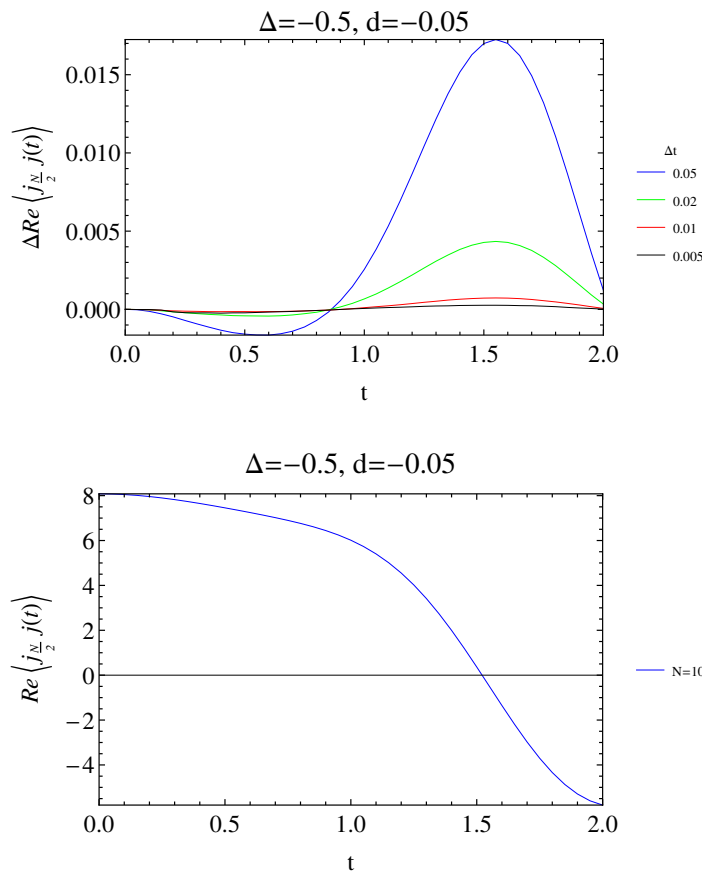
⁵Propagacija stanja v realnem času je dana z delovanjem operatorja $\exp(iHt)$ na stanju. Delovanje operatorja $\exp(\beta H)$ na stanju lahko zapišemo kot propagacijo v imaginarnem času.

prepletenost dveh delov verige, zaradi površinskega zakona [42] omejena s površino vmesne meje, ki je v eni dimenziji neodvisna od števila delcev.



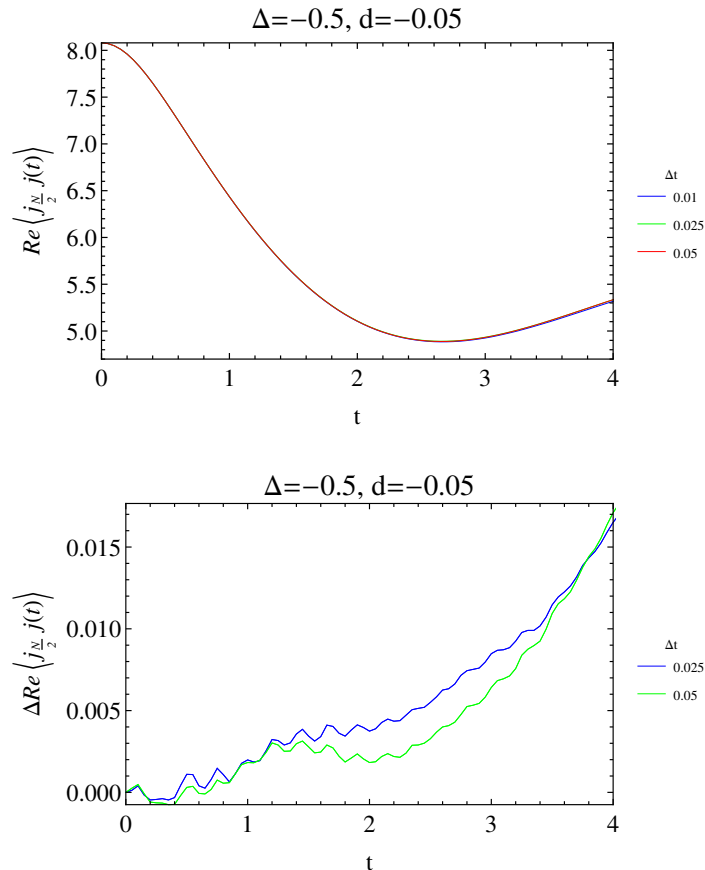
Slika 4.4: Razcep propagatorja Z na lokalne člene z . V primeru propagacije v realnem času propagiramo tudi stanja zunanjega sistema v nasprotnem času. V primeru propagacije v imaginarnem času ne vključimo propagatorjev, ki propagirajo stanja zunanjega sistema. Ti ustrezajo propagatorjem z z argumentom $-t$.

Propagacijo je mogoče tudi učinkovito paralelizirati, saj lahko v vsakem koraku hkrati izvajamo propagacije v posameznih stolpcih sheme 4.4. Na sliki 4.5 je prikazan vpliv velikosti koraka na avtokorelacijsko funkcijo.



Slika 4.5: Zgoraj je prikazana razlika med avtokorelacijsko funkcijo toka izračunano z DMRG in eksaktno diagonalizacijo, za različne velikosti koraka Suzuki-Trotter Δt , pri anizotropiji Δ , sklopitvi z drugimi najbližjimi sosedi d , $T = \infty$ in $N = 10$. Spodaj pa ustrezna vrednost Drudejeve uteži dobljena z eksaktno diagonalizacijo.

Na sliki 4.6 lahko vidimo, kako izbira koraka vpliva na rezultat.



Slika 4.6: Primerjava avtokorelacijske funkcije toka za 80 spinov z metodo DMRG v odvisnosti od koraka Suzuki-Trotter pri $T = \infty$ z zanemaritvijo $\delta = 2 \cdot 10^{-5}$ pri anizotropiji $\Delta = -0.5$ in majhni zlomitvi integrabilnosti d . Zgoraj je prikazana vrednost avtokorelacijske funkcije, spodaj pa razlika v primeru večjih korakov in korakom $\Delta t = 0.01$ v odvisnosti od časa t .

Poleg velikosti koraka na natančnost rezultata vpliva tudi zanemarjena utež (za definicijo glej (4.26)). V primeru večjega števila korakov zanemarimo tudi večje število singularnih vrednosti. Posledično je napaka v primeru manjšega koraka večja od tiste pri večjem koraku, kar je razvidno tudi iz tabele 4.1. V tabeli vidimo, da je napaka enakega velikostnega reda, kot relativna razlika⁶ za različne velikosti koraka. Pri nadaljnjem računanju izberemo za velikost koraka $\Delta t = 0.05$, razen v primerih, ko je navedeno drugače.

4.2.3 TEBD

Time-evolving block decimation (TEBD) je metoda za računanje časovnega razvoja MPS-ja ([43, 44], citirano po [33]).

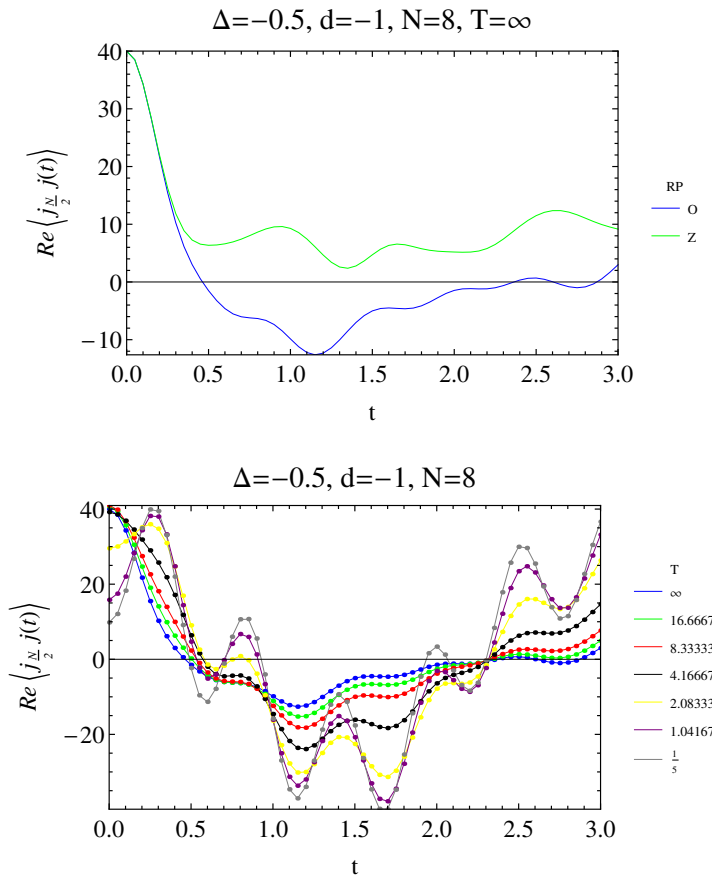
Predstavljena metoda je posplošitev metode TEBD in je analogna metodi, predstavljeni v [13]. Razlika je le ta, da ima obravnavana interakcija daljši doseg in

⁶Zanemarjena utež ni ne relativna, ne absolutna napaka, saj singularne vrednosti matrik normaliziramo potem, ko jih pomnožimo s tokom. Zaradi neortogonalnosti MPS-jev skupna zanemarjena utež tudi ni neposredno povezana z zgornjo oceno za napako. Da nam le oceno, kako različni parametri vplivajo na zanemaritev in ali je ta zadosti majhna glede na rezultat.

Δt	Skupna zanemaritev
0.01	$6.489 \cdot 10^{-4}$
0.025	$3.946 \cdot 10^{-4}$
0.05	$3.172 \cdot 10^{-4}$

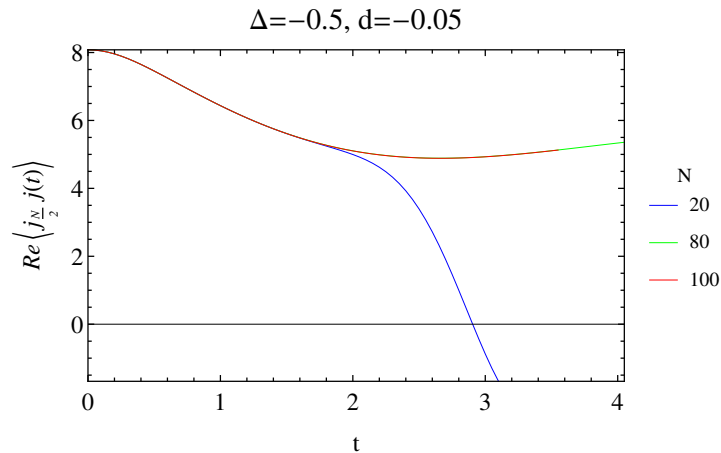
Tabela 4.1: Skupna zanemarjena utež glede na korak Δt pri zanemaritvi $\delta = 2 \cdot 10^{-5}$.

je potrebnih več korakov. Za učinkovito implementacijo metode DMRG izberemo odprte robne pogoje. V termodinamski limiti ni pomembno, kakšni so robni pogoji, vendar imamo opravka s končnimi sistemi. Zopet nam Lieb-Robinsonov teorem zagotavlja, da v primeru dovolj velikih verig in zadosti kratkega časa ne bo bistvenih vplivov na avtokorelacijsko funkcijo. Informacija o tem, kakšni so robni pogoji, potuje po sistemu s končno hitrostjo. Razlika med odprtimi in zaprtimi robnimi pogoji je prikazana na sliki 4.7. Prikazana je tudi primerjava rezultatov eksaktne diagonalizacije in metode DMRG.



Slika 4.7: Na zgornjem grafu je z eksaktno diagonalizacijo izračunana avtokorelacijska funkcija toka za zaprte in odprte robne pogoje za sistem 8 delcev v odvisnosti od časa, pri temperaturi $T = \infty$, anizotropiji $\Delta = -0.5$ in sklopitvi z drugimi najbližjimi sosedi $d = -1$. Spodaj je primerjana vrednost izračunana z metodo DMRG (točke) z eksaktno diagonalizacijo (zvezne črte) za različne temperature T .

Na sliki 4.8 je prikazano kako velikost sistema vpliva na vrednost avtokorelacijske funkcije.



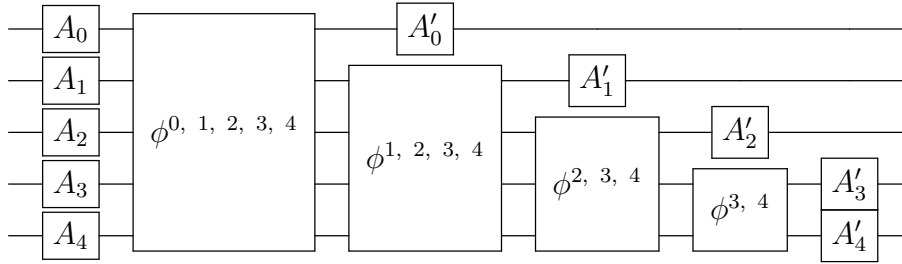
Slika 4.8: Časovna odvisnost avtokorelacijske funkcije toka za različne velikosti sistema N pri $T = \infty$, anizotropiji $\Delta = -0.5$ in sklopitvi z drugimi najbližjimi sosedi $d = -0.05$.

Vidimo lahko, da med izrazom za $N = 80$ in $N = 100$ ni razlike, medtem ko pride pri $N = 20$ do večjih odstopanj. Rezultat za $N = 20$ se dobro ujema z rezultatom za $N = 80$ in $N = 100$ do $t = 1.5$. Po Lieb-Robinsonovem teoremu lahko sklepamo, da bo izbira $N = 80$ zadostovala do $t \sim 6$.

Preden pričnemo s propagacijo, potrebujemo MPS začetnega stanja pri neskončni temperaturi $|\Psi\rangle$. Pri neskončni temperaturi so vsa stanja enako verjetna in je zato reducirana gostotna matrika identiteta. Zapisati želimo MPS stanja (4.5). Stanje $|\Psi\rangle$ lahko do predznaka natančno zapišemo kot [13, 33]

$$A_{2i+1}^0 = [1, 0], \quad A_{2i+1}^1 = [0, -1], \quad A_{2i}^0 = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}, \quad A_{2i}^1 = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (4.21)$$

kjer je A_i^s MPS na mestu i , ki mu ustreza kvantno število s . Algoritem TEBD je sestavljen iz dveh bistvenih delov. V prvem koraku algoritma propagiramo matrično produktno stanje. Iz MPS-jev napravimo kombinacije glede na njihove fizikalne indekse in jih pomnožimo z elementi propagatorja, ki ustrezajo fizikalnim indeksom. MPS ima po tem koraku pet fizikalnih indeksov, saj propagator v našem primeru deluje netrivialno na pet sosednjih mest. Če bi na tem koraku izračunali vektor stanja z množenjem MPS-jev, bi dobili enak vektor stanja, kot če bi z istim propagatorjem, ki smo ga uporabili pri propagaciji MPS-jev, propagirali začetni vektor stanja. V naslednjem koraku razcepimo MPS, ki pripada petim fizikalnim mestom na pet MPS-jev, pri čemer ima vsak MPS le en fizikalni indeks. To naredimo s pomočjo razcepa SVD, pri katerem napravimo dodaten približek in zanemarimo najmanjše singularne vrednosti. Postopek je shematsko prikazan na sliki 4.9.



Slika 4.9: Ponazoritev enega koraka algoritma TEBD, kjer predstavlja A_i MPS na ustreznem mestu na začetku algoritma TEBD. Temu sledijo ϕ^i , ki predstavljajo MPS-je po delovanju propagatorja. Ta stanja postopoma razcepimo na nove MPS-je A'_i .

Opišimo natančneje izvedbo algoritma. Opis priredimo po [13]. Začetno stanje zapišemo v obliki, ki vsebuje tudi singularne matrike

$$\Psi^{\underline{s}} = \prod_i \lambda_i A_i^{s_i}, \quad (4.22)$$

kjer \underline{s} označuje indeks baznega vektorja, ki mu ustreza koeficient $\Psi^{\underline{s}}$, λ_i pa so singularne matrike. Pred začetkom propagacije so matrike λ_i bodisi dvodimenzionalne bodisi enodimenzionalne identitete. V nadaljevanju povzemamo metodo, predstavljen v [13], prirejeno za daljšo interakcijo. Oglejmo si, kako propagiramo stanje z lokalnim propagatorjem, npr. $z^i(t)$. Najprej zmnožimo MPS, ki ustrezajo nosilcu operatorja⁷

$$\psi^{s_i \dots s_{i+4}} = \lambda_i A_i^{s_i} \lambda_{i+1} A_{i+1}^{s_{i+1}} \lambda_{i+2} A_{i+2}^{s_{i+2}} \lambda_{i+3} A_{i+3}^{s_{i+3}} \lambda_{i+4} A_{i+4}^{s_{i+4}} \lambda_{i+5}. \quad (4.23)$$

Tako dobimo 32 matrik⁸ ψ . Število stolpcev matrik je enako številu stolpcev matrike λ_{i+5} , število vrstic pa številu vrstic λ_i . Sedaj delujemo na stanje s propagatorjem $z^i(t)$, kar je povsem analogno primeru, ko imamo namesto matrik $\psi^{s_1 \dots s_5}$ kar koeficiente vektorja stanja

$$\phi^{s'_i \dots s'_{i+4}} = \sum_{s_i \dots s_{i+4}} z^i(t)_{s'_i \dots s'_{i+4}, s_i \dots s_{i+4}} \psi^{s_i \dots s_{i+4}}. \quad (4.24)$$

Nahajamo se na drugem koraku v shemi 4.9. ϕ je potrebno razstaviti na lokalne člene, kar napravimo z razcepom SVD [33]. Naj označuje a_i število vrstic matrike A_i . Matrične elemente matrik ϕ označimo z $\phi_{a_i, a_{i+5}}$. Na vsakem koraku izračunamo MPS za eno mesto. Kot je razvidno iz sheme 4.9, moramo narediti štiri razcepe SVD. Na posameznem koraku preuredimo matriko tako, da fizikalni indeks na i -tem mestu s_i postavimo za vrstični indeks a_i matrike ϕ . Ostale fizikalne indekse razvrstimo pred stolpični indeks. Na prvem koraku imamo matriko $\phi_{a_i s_i, s_{i+1} \dots s_{i+4} a_{i+5}}$. Temu sledi prvi razcep SVD

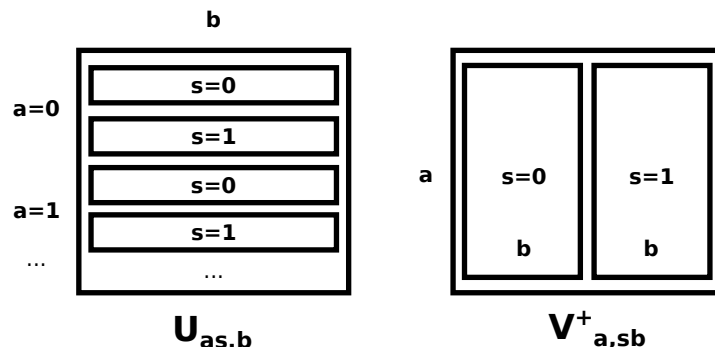
$$\phi_{a_i s_i, s_{i+1} \dots s_{i+4} a_{i+5}} = \sum_b U_{a_i s_i, b} \lambda_{b, b} V_{b, s_{i+1} \dots s_{i+4} a_{i+5}}^\dagger. \quad (4.25)$$

Matriko U razdelimo na dve matriki glede na vrednost kvantnega števila s_i , kot je prikazano na sliki 4.10, in oba dela pomnožimo z inverzom matrike λ_i , kar nam da

⁷Mesta v verigi, na katera deluje operator netrivialno.

⁸V splošnem 2^n matrik, kjer je n dolžina interakcije.

novo MPS na mestu i . Singularno matriko na mestu $i + 1$ nadomestimo z novo singularno matriko $\lambda_{i+1} \rightarrow \lambda_{b,b}$.

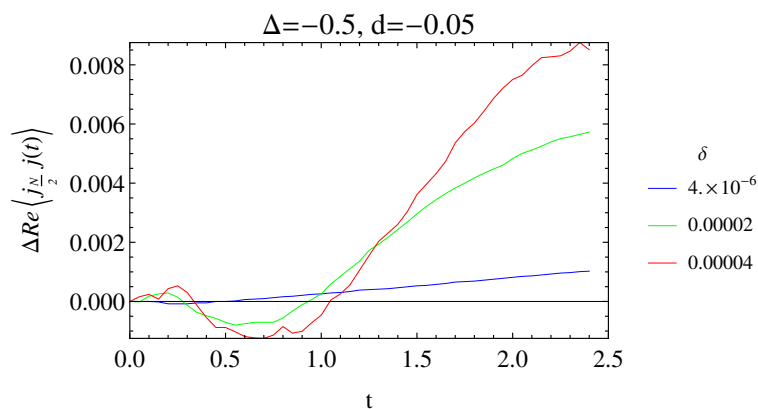


Slika 4.10: Shematski prikaz sestave matrik U in V po singularnih razcepkih. s so spinski indeksi, a in b pa matrični indeksi MPS-jev.

Če bi obdržali vse singularne vrednosti, bi zaradi naraščanja dimenzije matrik metoda odpovedala po kratkem času, zato moramo napraviti približek stanja. Učinkovit približek napravimo tako, da zanemarimo majhne singularne vrednosti v matriki $\lambda_{b,b}$. Skupno zanemarjeno utež definiramo z vsoto kvadratov zanemarjenih singularnih vrednosti

$$\sum_{i, \lambda_i < \delta} \lambda_i^2. \quad (4.26)$$

Navadno je zanemarjena utež definirana, kot vsota kvadratov vseh singularnih vrednosti, ki jih zanemarimo v enem koraku Suzuki-Trotter propagacije [13]. Približek lahko implementiramo tako, da z vsakim korakom konstantno povečamo dimenzijo matrik [13], obdržimo dimenzije matrik nespremenjene ali pa tako, da zanemarimo vse singularne vrednosti, ki so manjše od neke izbrane konstante δ . Izbrali smo slednjo možnost. V vsakem koraku zmanjšamo dimenziji matrik U in V , tako da se znebimo delov, ki so povezani z majhnimi singularnimi vrednostmi. Vpliv izbire napake na avtokorelacijsko funkcijo je prikazan na sliki 4.11.



Slika 4.11: Razlika med avtokorelacijsko funkcijo toka pri različnih spodnjih mejah δ in $\delta = 10^{-6}$ pri $T = \infty$ ter $N = 80$, pri anizotropiji Δ in sklopitvi z drugimi najbližjimi sosedi d .

V tabeli 4.2 je prikazana celotna zanemarjena utež v odvisnosti od dovoljene najmanjše singularne vrednosti.

δ	Skupna zanemaritev
10^{-6}	$3.642 \cdot 10^{-7}$
$4 \cdot 10^{-6}$	$3.614 \cdot 10^{-6}$
$2 \cdot 10^{-5}$	$5.001 \cdot 10^{-5}$
$4 \cdot 10^{-5}$	$1.534 \cdot 10^{-4}$

Tabela 4.2: Skupna zanemarjena utež za različne izbire zanemaritve δ .

V naslednjem koraku definiramo matriko

$$\phi_{bs_{i+1}, s_{i+2} \dots s_{i+4} a_{i+5}} = \lambda_{b,b} V_{b, s_{i+1} \dots s_{i+4} a_{i+5}}^\dagger, \quad (4.27)$$

in se s tem premaknemo v stanje, ponazorjeno s tretjim korakom v shemi 4.9. Ponovno izračunamo razcep SVD in posodobimo MPS na mestu $i + 1$. Analogno nadaljujemo do zadnjega koraka. Na koncu posodobimo še vrednost MPS-ja na zadnjem mestu. Matriko V^\dagger razdelimo glede na vrednost spina, kot je prikazano na sliki 4.10, in z leve pomnožimo z inverzom λ_{i+5} .

4.2.4 Računanje Drudejeve uteži in fazne vsote

Zadnji korak je izračun avtokorelacijske funkcije. Metodo računanja povzamemo po [33]. Preden pričnemo z računanjem pričakovane vrednosti, zapišemo MPS v standardni obliki, pri čemer MPS stanja A pomnožimo s sosednjimi singularnimi matrikami $\lambda_i A_i^{s_i} \rightarrow A_i^{s_i}$. Pričakovano vrednost operatorja J izračunamo po definiciji, kjer upoštevamo, da lahko skalarje v hermitsko konjugiranem vektorju transponiramo, pa se s tem vrednost izraza ne spremeni [33]

$$\langle \phi | J | \psi \rangle = \sum_{s^1, s^2} \left(\Pi_i A_i^{s_i} \right)^\dagger J_{s^1, s^2} \Pi_j B_j^{s_j^2}. \quad (4.28)$$

Za učinkovit izračun pričakovane vrednosti je potrebno preurediti vrstni red operacij v zgornjem izrazu. MPS-ja, ki ustrezata prvemu mestu sta vektorja. Zamenjati je potrebno vrstni red množenja matrik A in B ter seštevanja po fizikalnih indeksih. Najprej tenzorsko zmnožimo vektorja na prvem mestu in nato seštejemo po spinskih prostostnih stopnjah [33]

$$\sum_{s_1^1, s_1^2} J_{s_1^1, s_1^2} A_1^{s_1^1 \dagger} \otimes B_1^{s_1^2}. \quad (4.29)$$

Matrično množenje izvedemo z množenjem izraza (4.29) z matrikami A^\dagger z leve in B z desne [33]

$$\langle \phi | J | \psi \rangle = \sum_{s_N^1, s_N^2} J_{s_N^1, s_N^2} \left(A_n^{s_n^1 \dagger} \dots \left(\sum_{s_1^1, s_1^2} J_{s_1^1, s_1^2} A_1^{s_1^1 \dagger} \otimes B_1^{s_1^2} \right) \dots B_n^{s_n^2} \right). \quad (4.30)$$

Pokažimo, da sta izraza (4.28) in (4.30) res ekvivalentna. Če izvedemo najprej množenje matrik A in B v izrazu (4.30) in nato seštejmo dobimo

$$\sum_{\underline{s}^1, \underline{s}^2} J_{\underline{s}^1, \underline{s}^2} \left(\Pi_i A_i^{s_i^1} \right)^\dagger \otimes \left(\Pi_j B_j^{s_j^2} \right). \quad (4.31)$$

Če upoštevamo, da sta produkta matrik v tenzorskem produktu skalarja, linearnost tenzorskega produkta ter identifikacijo $1 \otimes 1 = 1$, reproduciramo izraz (4.28).

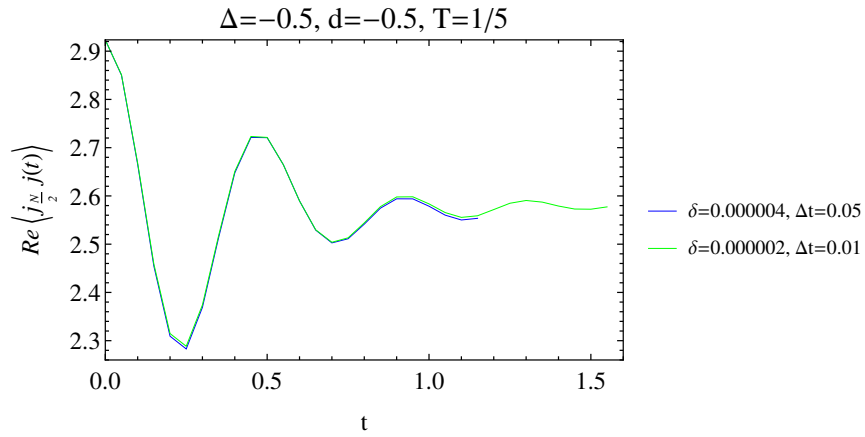
Iz izraza (4.20) je razvidno, da moramo izračunati še fazno vsoto

$$\langle \Psi | \exp(-\beta H) | \Psi \rangle. \quad (4.32)$$

Če izvajamo propagacijo v imaginarnem času kot $\exp(-\frac{\beta H}{2}) | \Psi \rangle$, je dovolj, da na vsakem koraku stanje normiramo. To pomeni, da na vsakem koraku singularno matriko, ki se spremeni, delimo z normo singularnih vrednosti. S tem dobimo stanje $\frac{\exp(-\frac{\beta H}{2}) | \Psi \rangle}{\sqrt{\langle \Psi | \exp(-\beta H) | \Psi \rangle}}$. Če izvedemo več korakov, moramo norme singularnih vrednosti množiti med seboj. Če pa želimo z eno časovno propagacijo izračunati vrednosti Drudejeve uteži pri več temperaturah, moramo propagirati v imaginarnem času le stanje, ki ga ne pomnožimo s tokom in ne propagiramo v realnem času. V tem primeru shranimo vrednost produkta singularnih vrednosti po polovici termičnih korakov in vrednost avtokorelacijske funkcije delimo s kvadratom tega števila ter pomnožimo s produktom singularnih vrednosti po vseh termičnih korakih. Če na vsakem termičnem koraku le normaliziramo lastne vrednosti, dobimo

$$\frac{\langle \Psi | \exp(-\beta H) j(t) j_{\frac{N}{2}} | \Psi \rangle}{\sqrt{\langle \Psi | \exp(-2\beta H) | \Psi \rangle}}. \quad (4.33)$$

Pred propagacijo v realnem času normiramo tudi izraz $j_{\frac{N}{2}} | \Psi \rangle$. Tok delimo s $4i$, preden delujemo na stanje $| \Psi \rangle$. Tako v primeru propagacije v imaginarnem času kakor tudi v primeru, ko pomnožimo stanje s tokom najprej zanemarimo utež in nato normiramo singularne vrednosti. Pri množenju s tokom vedno zanemarimo singularne vrednosti, ki so manjše od 10^{-5} . Tudi zanemarjene uteži v tabelah 4.2 in 4.1 so izračunane za normirane vrednosti matrik λ , na katere delujemo z operatorjem toka $j_{\frac{N}{2}}$ netrivialno. Doslej smo obravnavali le vpliv približkov na sistem pri neskončni temperaturi. Na sliki 4.12 pa je prikazan vpliv približkov na oceno Drudejeve uteži pri nizki temperaturi. Pri grafu z manjšo zanemaritvijo δ in manjšim časovnim korakom Δt je uporabljen nekoliko spremenjen vrstni red delovanja operatorjev na stanje. Stanje propagiramo v imaginarnem času, nato na to stanje delujemo z operatorjem toka in na koncu stanje propagiramo v realnem času.



Slika 4.12: Vpliv velikosti zanemaritve δ in velikosti Suzuki-Trotter koraka Δt na avtokorelacijsko funkcijo toka pri nizki temperaturi $T = \frac{1}{5}$, $N = 80$, anizotropiji Δ in sklopitvi z drugimi najbližjimi sosedi d .

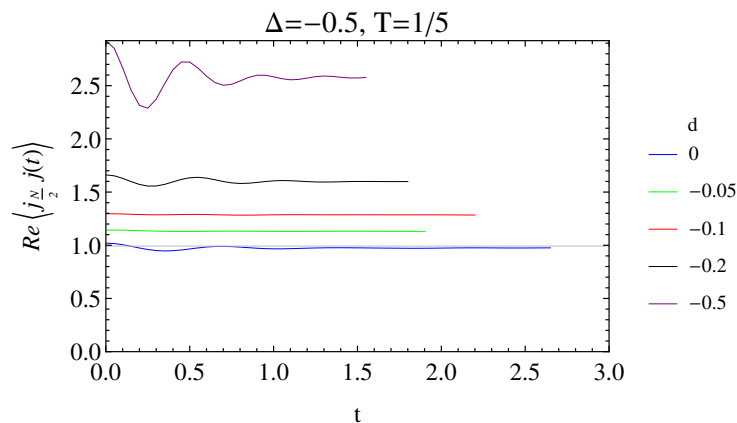
Poglavje 5

Rezultati

V tem poglavju so predstavljeni rezultati simulacij. V prvem delu si ogledamo, kako na potek avtokorelacijske funkcije toka vpliva velikost perturbacije. Vsi rezultati so dobljeni za Heisenbergovo feromagnetno sklopitev in z zlomitvijo integrabilnosti s feromagnetnim Hamiltonjanom. Ogledamo si rezultate za nizko temperaturo $T = \frac{1}{5}$ in $T = \infty$. Sledi preučitev vpliva temperature na avtokorelacijsko funkcijo. Tretji del je namenjen obravnavi odvisnosti od anizotropije, v zadnjem delu pa obravnavamo vpliv zlomitve integrabilnosti na zahtevnost simulacije.

5.1 Odvisnost od perturbacije

Na sliki 5.1 je prikazan potek ocene avtokorelacijske funkcije spinskega toka za različne vrednosti sklopitve med drugimi najbližjimi sosedi pri nizki temperaturi¹.



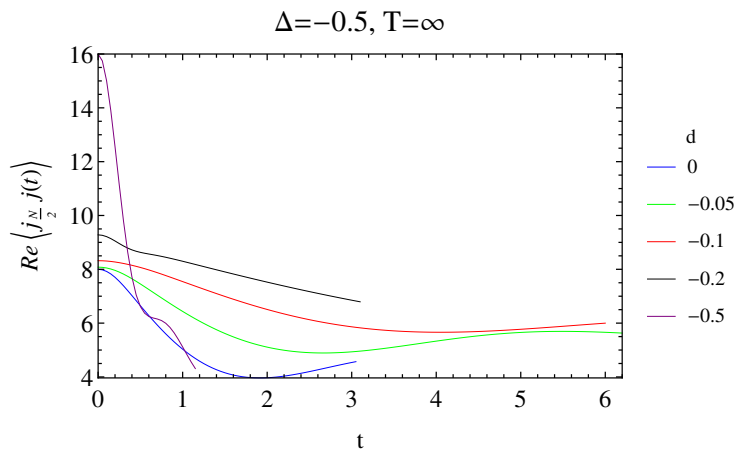
Slika 5.1: Vrednost avtokorelacijske funkcije toka pri nizki temperaturi $T = \frac{1}{5}$ ter $N = 80$ z zanemaritvijo $\delta = 2 \cdot 10^{-6}$, časovnim korakom $\Delta t = 0.01$ in anizotropiji Δ , za različne vrednosti zlomitve integrabilnosti d . Tako kot v [34] je za primerjavo podana še ustrezno reskalirana eksaktna vrednost Drudejeve uteži pri $T = 0$ za Heisenbergov model XXZ [45] (siva črta). Rezultat se v primeru $d = 0$ dobro ujema z rezultatom iz [34].

Zdi se, da je Drudejeva utež pri nizkih temperaturah neničelna za vse simulirane

¹Tudi v tem primeru je uporabljen drugačen vrstni red delovanja operatorjev. Ta se ujema z vrstnim redom uporabljenim pri zelenem grafu slike 4.12

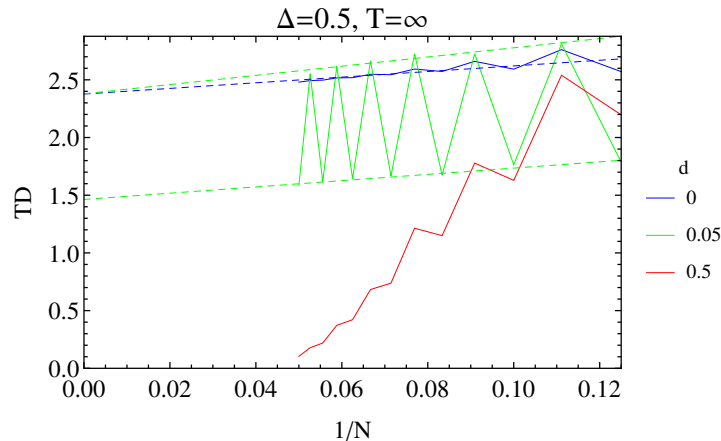
vrednosti d -ja. Vrednost Drudejeve uteži s sklopitvijo z drugimi najbližjimi sosedi narašča. Glede na rezultate lahko zaključimo, da Drudejeva utež ni neničelna zgolj za $T = 0$, kot je bilo dokazano v [2], ampak je tako tudi pri nizki temperaturi.

Drudejeva utež je pri neskončni temperaturi ničelna že zaradi prefaktorja $\frac{1}{T}$. Vseeno pa je avtokorelacijska funkcija toka zanimiva količina. Če je ta neničelna nam podaja indikacijo, ali je Drudejeva utež ničelna pri visokih temperaturah. Ko govorimo o $T = \infty$, mislimo z izrazom Drudejeva utež prefaktor $\Re\langle j(t)j \rangle_{\frac{1}{2N}}$. Na sliki 5.2 je prikazana odvisnost avtokorelacijske funkcije toka od časa pri $T = \infty$.



Slika 5.2: Vrednost avtokorelacijske funkcije toka pri neskončni temperaturi za različne vrednosti sklopitve z drugimi najbližjimi sosedi d pri anizotropiji Δ . Za $d = -0.5$ je zanemaritev $\delta = 4 \cdot 10^{-6}$, za ostale pa je $\delta = 4 \cdot 10^{-5}$.

Zdi se, da je Drudejeva utež neničelna v primeru dovolj majhne zlomitve integrabilnosti. Vsaj za vrednost $d = -0.05$ se zdi, da je Drudejeva utež neničelna. Pri večjih vrednostih tega ni mogoče z gotovostjo trditi. Pri večji vrednosti parametra $d = -0.5$ pa za razliko od nizke temperature pride do naglega upadanja avtokorelacijske funkcije toka. Tako obnašanje interpretiramo kot indikacijo ničelne vrednosti Drudejeve uteži. Dodatno potrditev, da je Drudejeva utež res ničelna za $d = -0.5$, sledi iz rezultatov eksaktne diagonalizacije na sliki 5.3.



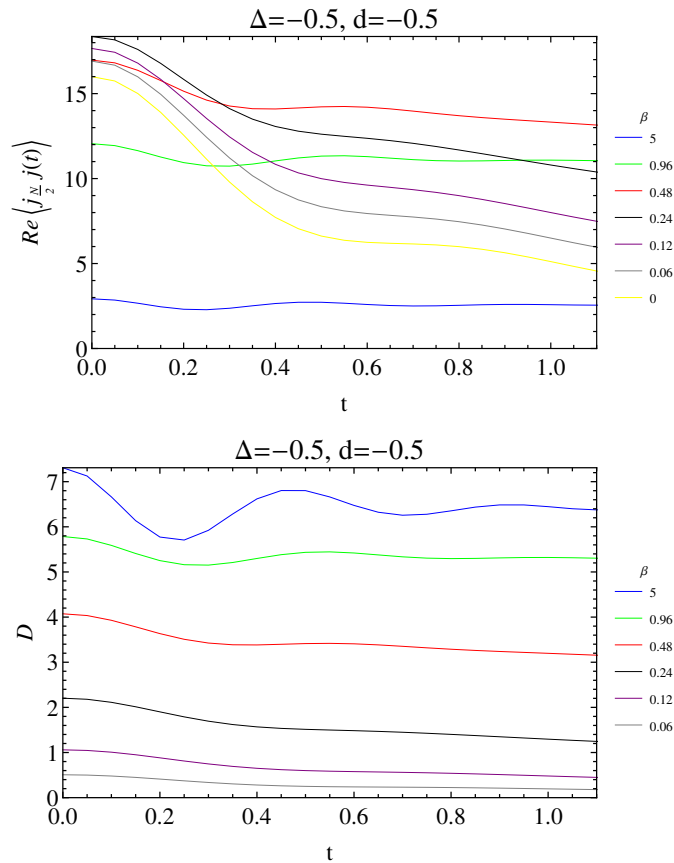
Slika 5.3: Na grafu je prikazana vrednost Drudejeve uteži, pomnožene s temperaturo TD za različne vrednosti sklopitve z drugimi najbližjimi sosedi v odvisnosti od recipročne vrednosti velikosti sistema $\frac{1}{N}$. Prekinjene črte so podatkom prilagojene premice za sklopitvi z drugimi najbližjimi sosedi $d = 0$ modra črta in 0.05 zeleni črti. V primeru neničelne sklopitve z drugimi najbližjimi sosedi sta premici prilagojeni posebej za lihe in sode velikosti sistema. Za primerjavo z rezultata avtokorelacijsko funkcijo toka je potrebno vrednost TD pomnožiti z 2.

Iz rezultatov eksaktne diagonalizacije vidimo tudi, da je Drudejeva utež verjetno neničelna za majhno zlomitev integrabilnosti. Iz rezultatov eksaktne diagonalizacije pa za neintegrabilni model zaradi premajhne velikosti sistema ne moremo določiti vrednosti Drudejeve uteži. Vidni so namreč veliki sodo-lihi skoki. Zaključiti ni mogoče niti, ali eksaktna diagonalizacija podpira rezultat metode DMRG, da se za dovolj majhne perturbacije vrednost Drudejeve uteži poveča.

Glede na rezultate lahko sklepamo, da pride pri neskončni temperaturi do faznega prehoda med difuzijskim in balističnim transportom pri končni vrednosti zlomitev integrabilnosti.

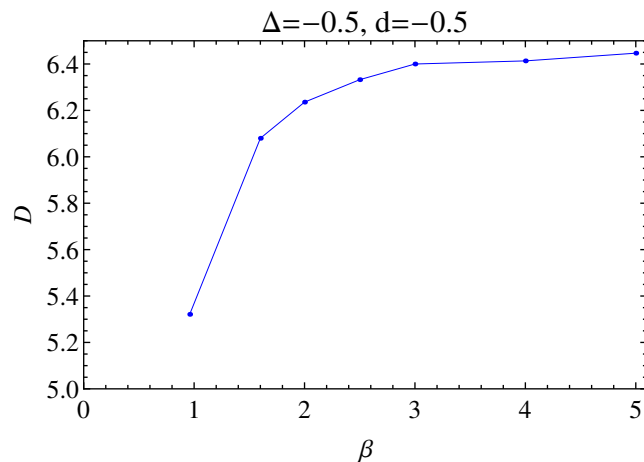
5.2 Odvisnost od temperature

V prejšnjem podpoglavju smo preučili obnašanje Drudejeve uteži pri visokih in nizkih temperaturah. Za dovolj veliko vrednost sklopitve z drugimi najbližjimi sosedi se zdi, da je Drudejeva utež ničelna pri visokih temperaturah in neničelna pri nizkih. Na sliki 5.4 je prikazana Drudejeva utež za različne temperature pri vrednosti $d = -0.5$.



Slika 5.4: Zgoraj je prikazana avtokorelacijska funkcija spinskega toka, spodaj pa ocena Drudejeve uteži $D = \frac{\beta}{2N} \langle j(t)j \rangle$ za različne temperature pri zanemaritvi $\delta = 4 \cdot 10^{-6}$, sklopitvi z drugimi najbližjimi sosedi d in vrednosti anizotropije Δ .

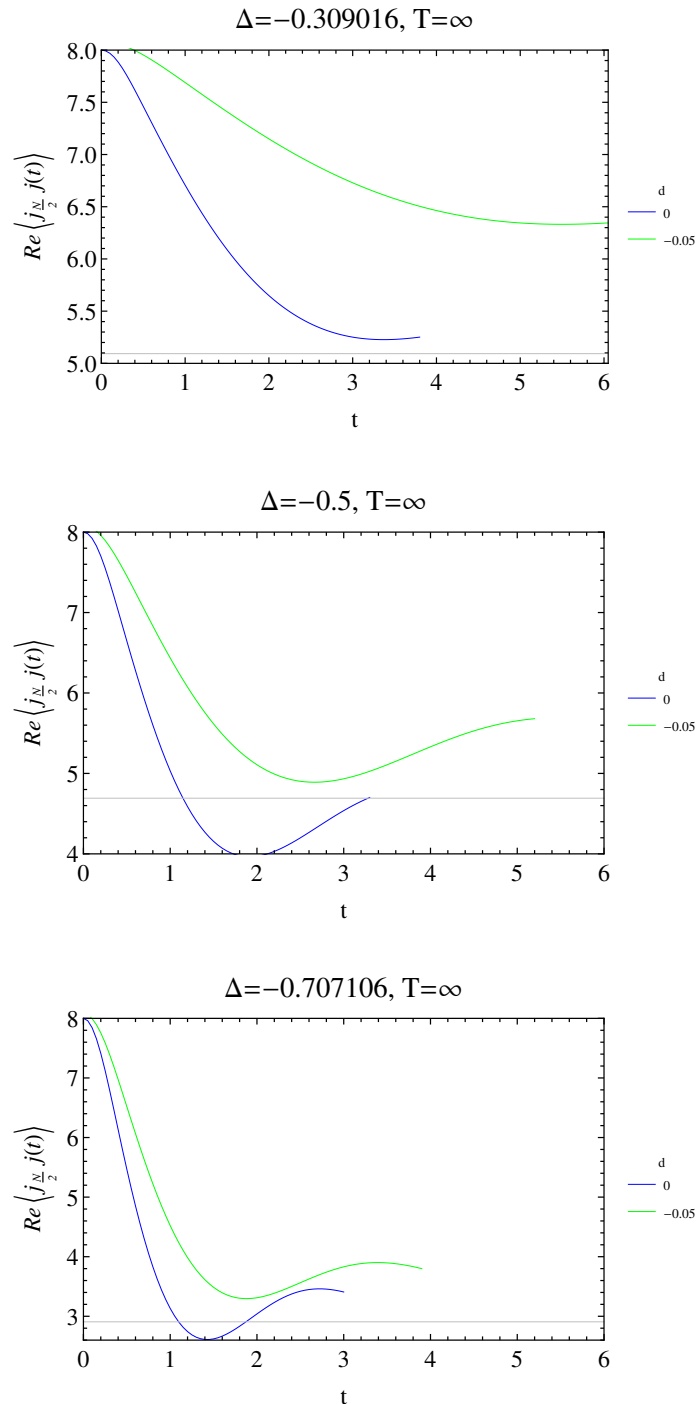
Zdi se, da za $d = -0.5$ res pride do faznega prehoda pri končni temperaturi, ki jo ocenimo na $0.5 < \beta < 1$. Na sliki 5.5 je prikazana odvisnost Drudejeve uteži od β . Glede na kratkost doseženega časa ne moremo z gotovostjo trditi, da Drudejeva utež za $d = -0.5$ ni ničelna za vse vrednosti temperature.



Slika 5.5: Vrednost Drudejeve uteži v odvisnosti od β ob času $t = 1$ pri anizotropiji in sklopitvi z drugimi najbližjimi sosedi $\Delta = d = -0.5$.

5.3 Odvisnost od anizotropije

Na slikah 5.6 je prikazana vrednost Drudejeve uteži v odvisnosti od anizotropije za integrabilen in rahlo neintegrabilen sistem.

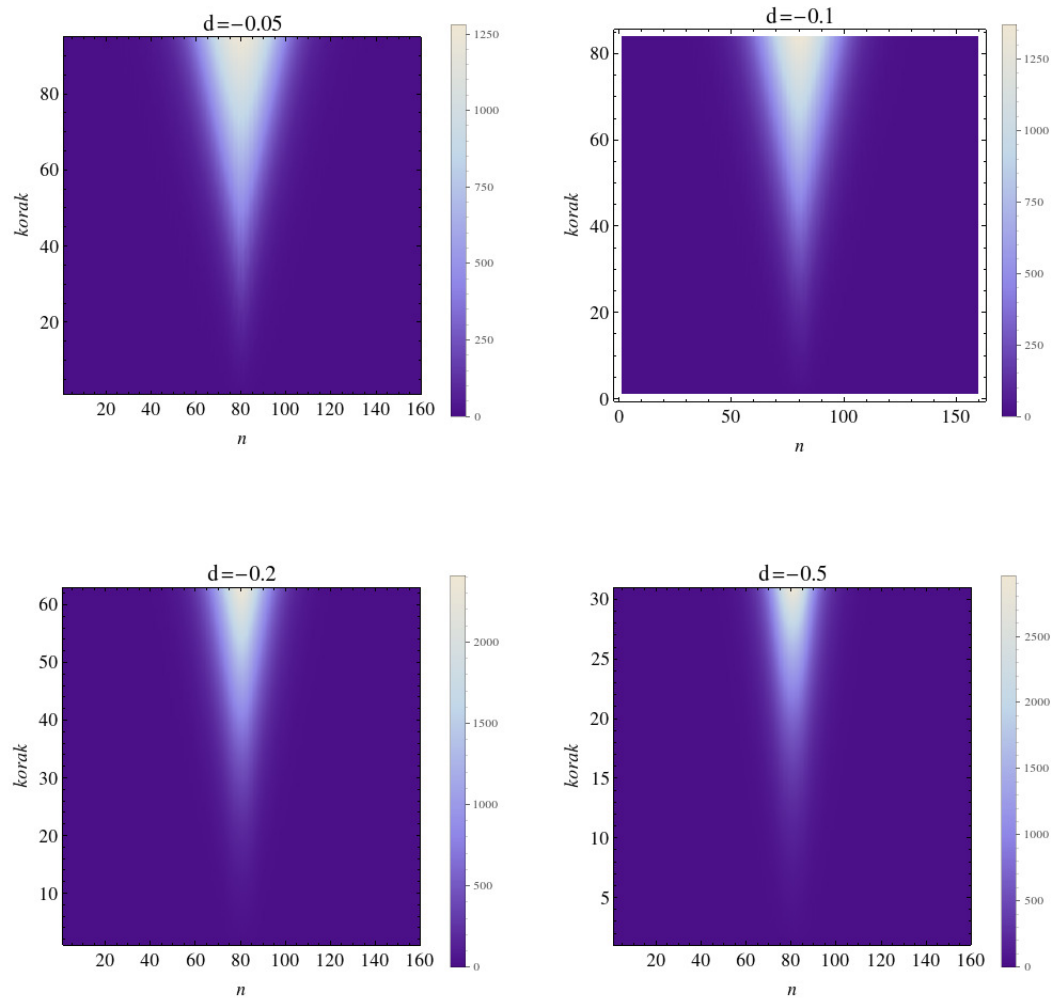


Slika 5.6: Avtokorelacijska funkcija toka za različne vrednosti anizotropije $\Delta = -0.309016$ (zgoraj), $\Delta = -0.5$ (na sredini) in $\Delta = -0.707106$ (spodaj) ter majhno oziroma ničelno vrednost sklopitve z drugimi najbližjimi sosedi d in $T = \infty$. Sive črte ponazarjajo vrednost spodnje meje za Drudejevo utež iz članka [22].

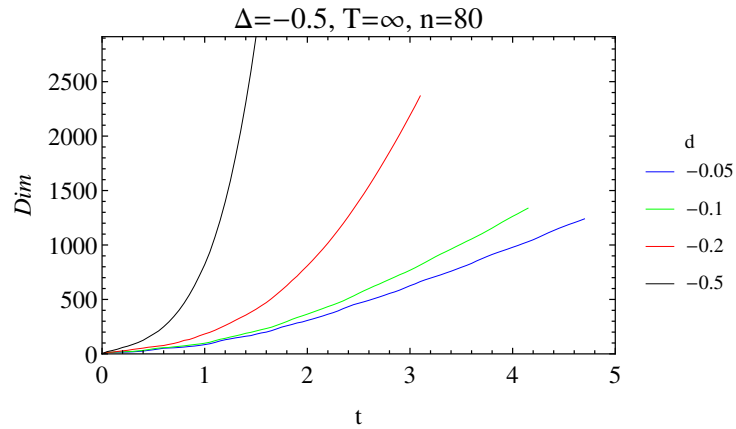
Za vse preučene vrednosti anizotropije se zdi, da je Drudejeva utež neničelna tudi v rahlo neintegrabilnem primeru.

5.4 Simulabilnost

Podrobna analiza, kako se širi motnja in narašča dimenzija MPS-jev v modelu XXZ za različne sheme DMRG lahko najdemo v [41]. V tem delu je prikazano, kako zlomitve integrabilnosti vpliva na dimenzije MPS-jev in s tem na učinkovitost simulacije. Na sliki 5.7 in 5.8 je prikazano, kako narašča dimenzija matrik za različne vrednosti sklopitve z drugimi najbližjimi sosedi.



Slika 5.7: Naraščanje dimenzije MPS pri $T = \infty$, $N = 80$ in anizotropiji $\Delta = -0.5$ v odvisnosti od koraka in mesta MPS-ja n , za različne vrednosti zlomitve integrabilnosti d .



Slika 5.8: Dimenzija MPS-ja na polovici verige pri $T = \infty$, $N = 80$ in anizotropiji $\Delta = -0.5$ v odvisnosti od časa t za različne vrednosti sklopitve med drugimi najbližjimi sosedi d .

Kot lahko vidimo, je vpliv neintegrabilnosti zelo izrazit in onemogoča natančno določitev dinamičnih lastnosti neintegrabilnega modela s pomočjo uporabljene metode DMRG.

Poglavje 6

Perturbacijski pristop

V poglavju predstavimo način za konstrukcijo ohranjenih količin neintegrabilnih modelov. Metoda za sedaj še ni dala konkretnih rezultatov. Naj bodo \mathcal{Q}_0^i ohranjene količine Hamiltonjana H_0 . Celoten Hamiltonjan je $H = H_0 + dH_1$. Ohranjeno količino celotnega Hamiltonjana H razvijemo po potencah d -ja

$$\mathcal{Q}^i = \sum_{n=0}^{\infty} d^n \mathcal{Q}_n^i. \quad (6.1)$$

Ohranjena količina komutira s Hamiltonjanom

$$[H, \mathcal{Q}^i] = 0. \quad (6.2)$$

Če razpišemo zgornji pogoj po potencah d -ja, dobimo rekurzivno zvezo za koeficiente \mathcal{Q}_n^i

$$[H_0, \mathcal{Q}_{n+1}^i] = -[H_1, \mathcal{Q}_n^i]. \quad (6.3)$$

Sedaj lahko za vsak red posebej rešujemo sistem enačb, tako da napravimo projekcije izraza (6.3) na operatorski podprostor. V splošnem rešujemo neskončno enačb z neskončno neznankami.

Ena od težav izraza (6.3) je ta, da je ohranjena količina v naslednjem redu izražena implicitno. Implicitnost lahko odpravimo tako, da izraz (6.3) propagiramo v času s Hamiltonjanom H_0 in identificiramo komutator na levi strani enačaja v izrazu (6.3) z odvodom po času¹

$$\dot{\mathcal{Q}}_{n+1}^i(t) = -i[H_1, \mathcal{Q}_n^i](t). \quad (6.4)$$

Časovna odvisnost je povezana z neperturbiranim Hamiltonjanom H_0 . Izraz (6.4) lahko sedaj integriramo od časa $t = 0$ do časa $t = \infty$ in izraza na obeh straneh regulariziramo, tako da dodamo k Hamiltonjanu H_0 imaginarni prispevek, ki ga po izvrednotenju integralov pošljemo proti 0. Na levi strani dobimo ohranjeno količino v redu $n + 1$

$$\mathcal{Q}_{n+1}^i = -i \lim_{\eta \rightarrow 0} \int_0^{\infty} \exp(-2\eta t) [H_1, \mathcal{Q}_n^i](t) dt. \quad (6.5)$$

Za končne sisteme lahko izraz (6.5) izvrednotimo v lastni bazi

$$\langle l | \mathcal{Q}_{n+1}^i | k \rangle = \frac{1}{E_l - E_k} \left(\sum_m \langle l | H_1 | m \rangle \langle m | \mathcal{Q}_n^i | k \rangle - \langle l | \mathcal{Q}_n^i | m \rangle \langle m | H_1 | k \rangle \right), \quad (6.6)$$

¹Predlagal T. Prosen

kjer so E_l in $|l\rangle$ lastne vrednosti ter lastni vektorji Hamiltonjana H_0 . Definirajmo operator \mathcal{H} , ki deluje na operatorskem prostoru

$$\langle l|\mathcal{H}(Q)|k\rangle = \frac{1}{E_l - E_k} \left(\sum_m (\langle l|H_1|m\rangle\langle m|Q|k\rangle - \langle l|Q|m\rangle\langle m|H_1|k\rangle) \right), \quad (6.7)$$

s katerim lahko ohranjeno količino Hamiltonjana H zapišemo kot

$$\mathcal{Q}^i = \sum_{n=0}^{\infty} d^n \mathcal{H}^n \mathcal{Q}_0^i. \quad (6.8)$$

Če so vse lastne vrednosti superoperatorja H manjše od $\frac{1}{d}$, zgornja vrsta konvergira in jo lahko kompaktneje zapišemo kot

$$\mathcal{Q}^i = (1 - d\mathcal{H})^{-1} \mathcal{Q}_0^i. \quad (6.9)$$

Obstoj ohranjenih količin je odvisen od spektralnih lastnosti superoperatorja \mathcal{H} . Ohranjene količine lahko dobimo v primeru, če obstaja $d > 0$, tako da so vse lastne vrednosti superoperatorja \mathcal{H} v podprostoru, ki ga razpenjajo vektorji $\mathcal{H}^n \mathcal{Q}_0^i$, manjše od $1/d$.

Bistveno vprašanje je, kako je norma ohranjenih količin odvisna od velikosti sistema.

Poglavje 7

Zaključek

V nalogi smo preučili vpliv zlomitve integrabilnosti v Heisenbergovem sistemu na vrednost Drudejeve uteži. Rezultati nakazujejo, da ta ni neničelna zgolj pri $T = 0$, ampak je tako tudi pri končni temperaturi in pri zadosti majhni zlomitvi integrabilnosti celo pri $T = \infty$. Za dovolj veliko motnjo se zdi, da pade Drudejeva utež na 0 pri končni temperaturi. Rezultat nakazuje na netrivialen fazni diagram. Videli smo, da lahko v primeru, ko je model neintegrabilen, s simulacijo dosežemo dosti krajše čase kakor v integrabilnem modelu. To je posledica hitrejšega naraščanja prepletenosti. V obravnavanem primeru je verjetno za to poleg neintegrabilnosti odgovoren tudi daljši doseg interakcije.

V nadaljevanju bi bilo zanimivo preučiti še toplotni transport v sistemu. Edina stvar, ki se spremeni v primeru toplotnega transporta je izraz toka.

Dodatna preverba balističnosti transporta bi bila mogoča s propagacije motnje v sistemu, kot je bilo v [27] narejeno za izotropni primer. Zanimivo bi bilo spremljati obnašanje neravnovesnega stacionarnega stanja, ko sistem sklopimo z okoljem na konceh, in preučiti, kako majhna zlomitev integrabilnosti vpliva na profil magnetizacije in skaliranje toka.

Za konec posvetimo nekaj besed še možnim analitičnim pristopom k obravnavi problema. Odsotnost le teh onemogoča nedvomne zaključke, saj je eksaktna diagonalizacija omejena na majhne sisteme, v primeru simulacije DMRG pa ne moremo biti gotovi, da avtokorelacijska funkcija ne pade na 0 po času, ki je izven trenutnih računskih zmogljivosti. Ena od možnosti je perturbativno reševanje¹. V prvem redu perturbacije obstaja za obravnavani primer rešitev za toplotni transport [26]. Rešitev je bilo mogoče poiskati, ker je sestavljena le iz lokalnih operatorjev, in je zato dovolj rešiti končni sistem linearnih enačb. Podobne rešitve ne poznamo v višjih redih in tudi ne v prvem redu za sklopitve XXZ z drugimi najbližjimi sosedi. Metoda torej v splošnem ni uporabna, saj je potrebno reševati neskončen sistem linearnih enačb za neskončno redov. Ker je sistem poddoločen, lahko obstaja tudi več rešitev, pri čemer norme le nekaterih skalirajo ustrezno s številom delcev.

Drugi možen pristop bi bilo iskanje neravnovesnega stacionarnega stanja, iz katerega bi bilo mogoče zaključiti, kako skalira tok v odvisnosti od velikosti sistema. Neravnovesno stacionarno stanje je poznano za nekaj integrabilnih modelov [46, 47, 48]. Za Heisenbergov model XXZ je obstoj množice skoraj ohranjenih količin posledica integrabilne strukture problema [22]. Vprašanje je torej, ali je mogoče metodo uporabiti tudi na neintegrabilnih modelih.

¹Predlagal T. Prosen.

Literatura

- [1] V. I. Arnold, *Mathematical methods of classical mechanics*, 2. izd., Graduate texts in mathematics št. 60, (Springer-Verlag, New York, 1997).
- [2] V. Mastropietro, “Conductivity in the Heisenberg chain with next-to-nearest-neighbor interaction”, *Phys. Rev. E* **87**, 042121 (2013), doi: 10.1103/PhysRevE.87.042121.
- [3] X. Zotos, “Ballistic transport in classical and quantum integrable systems”, *J. Low Temp. Phys.* **126**, 1185 (2002), doi: 10.1023/A:1013827615835.
- [4] M. Toda, “Solitons and heat conduction”, *Phys. Scr.* **20**, 424 (1979), doi: 10.1088/0031-8949/20/3-4/017.
- [5] J.-S. Caux in J. Mossel, “Remarks on the notion of quantum integrability”, *J. Stat. Mech* **2011**, P02023 (2011), doi: 10.1088/1742-5468/2011/02/P02023.
- [6] H. Bethe, “Zur Theorie der Metalle”, *Z. Phys.* **71**, 205 (1931), doi: 10.1007/BF01341708.
- [7] N. Pottier, *Nonequilibrium statistical physics: linear irreversible processes*, Oxford graduate texts, (Oxford University Press, Oxford, 2012).
- [8] R. Kubo, “Statistical-mechanical theory of irreversible processes. I. General theory and simple applications to magnetic and conduction problems”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **12**, 570 (1957), doi: 10.1143/JPSJ.12.570.
- [9] E. Ilievski in T. Prosen, “Thermodynamic bounds on Drude weights in terms of almost-conserved quantities”, *Commun. Math. Phys.* **318**, 809 (2013), doi: 10.1007/s00220-012-1599-4.
- [10] M. Sentef, M. Kollar in A. P. Kampf, “Spin transport in Heisenberg antiferromagnets in two and three dimensions”, *Phys. Rev. B* **75**, 214403 (2007), doi: 10.1103/PhysRevB.75.214403.
- [11] X. Zotos in P. Prelovšek, “Transport in one dimensional quantum systems”, v *Strong interactions in low dimensions*, Physics and chemistry of materials with low-dimensional structures št. 25, uredila D. Baeriswyl in L. Degiorgi (Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2004), str. 347–382.
- [12] P. Prelovšek, S. E. Shawish, X. Zotos in M. Long, “Anomalous scaling of conductivity in integrable fermion systems”, *Phys. Rev. B* **70**, 205129 (2004), doi: 10.1103/PhysRevB.70.205129.

- [13] C. Karrasch, J. H. Bardarson in J. E. Moore, “Reducing the numerical effort of finite-temperature density matrix renormalization group calculations”, *New J. Phys.* **15**, 083031 (2013), doi: 10.1088/1367-2630/15/8/083031.
- [14] T. Prosen, “Open XXZ spin chain: nonequilibrium steady state and a strict bound on ballistic transport”, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 217206 (2011), doi: 10.1103/PhysRevLett.106.217206.
- [15] X. Zotos, F. Naef in P. Prelovšek, “Transport and conservation laws”, *Phys. Rev. B* **55**, 11029 (1997), doi: 10.1103/PhysRevB.55.11029.
- [16] P. Mazur, “Non-ergodicity of phase functions in certain systems”, *Physica* **43**, 533 (1969), doi: 10.1016/0031-8914(69)90185-2.
- [17] M. Suzuki, “Ergodicity, constants of motion, and bounds for susceptibilities”, *Physica* **51**, 277 (1971), doi: 10.1016/0031-8914(71)90226-6.
- [18] J. Sirker, R. G. Pereira in I. Affleck, “Conservation laws, integrability, and transport in one-dimensional quantum systems”, *Phys. Rev. B* **83**, 035115 (2011), doi: 10.1103/PhysRevB.83.035115.
- [19] F. Heidrich-Meisner, A. Honecker, D. C. Cabra in W. Brenig, “Zero-frequency transport properties of one-dimensional spin- $\frac{1}{2}$ systems”, *Phys. Rev. B* **68**, 134436 (2003), doi: 10.1103/PhysRevB.68.134436.
- [20] A. V. Sologubenko, T. Lorenz, H. R. Ott in A. Freimuth, “Thermal conductivity via magnetic excitations in spin-chain materials”, *J. Low Temp. Phys.* **147**, 387 (2007), doi: 10.1007/s10909-007-9317-x.
- [21] M. Žnidarič, “Magnetization transport in spin ladders and next-nearest-neighbor chains”, *Phys. Rev. B* **88**, 205135 (2013), doi: 10.1103/PhysRevB.88.205135.
- [22] T. Prosen in E. Ilievski, “Families of quasilocal conservation laws and quantum spin transport”, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 057203 (2013), doi: 10.1103/PhysRevLett.111.057203.
- [23] E. Lieb in D. Robinson, “The finite group velocity of quantum spin systems”, *Commun. Math. Phys.* **28**, 251 (1972), doi: 10.1007/BF01645779.
- [24] T. Prosen, “Ergodic properties of a generic nonintegrable quantum many-body system in the thermodynamic limit”, *Phys. Rev. E* **60**, 3949 (1999), doi: 10.1103/PhysRevE.60.3949.
- [25] P. Jung in A. Rosch, “Spin conductivity in almost integrable spin chains”, *Phys. Rev. B* **76**, 245108 (2007), doi: 10.1103/PhysRevB.76.245108.
- [26] P. Jung, R. W. Helmes in A. Rosch, “Transport in almost integrable models: perturbed Heisenberg chains”, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 067202 (2006), doi: 10.1103/PhysRevLett.96.067202.

- [27] S. Langer, F. Heidrich-Meisner, J. Gemmer, I. P. McCulloch in U. Schollwöck, “Real-time study of diffusive and ballistic transport in spin- $\frac{1}{2}$ chains using the adaptive time-dependent density matrix renormalization group method”, Phys. Rev. B **79**, 214409 (2009), doi: 10.1103/PhysRevB.79.214409.
- [28] T. Prosen in D. K. Campbell, “Normal and anomalous heat transport in one-dimensional classical lattices”, Chaos **15**, 015117 (2005), doi: 10.1063/1.1868532.
- [29] C. Karrasch, R. Ilan in J. E. Moore, “Nonequilibrium thermal transport and its relation to linear response”, Phys. Rev. B **88**, 195129 (2013), doi: 10.1103/PhysRevB.88.195129.
- [30] C. Sanderson, *Armadillo: an open source C++ linear algebra library for fast prototyping and computationally intensive experiments*, (NICTA, Australia, 2010).
- [31] A. Weiße in H. Fehske, “Exact diagonalization techniques”, v *Computational many-particle physics*, Lecture notes in physics št. 739, uredili H. Fehske, R. Schneider in A. Weiße (Springer, Berlin, 2008), str. 529 – 544.
- [32] A. Läuchli, “Introduction to exact diagonalization”, ogleđ 22. 5. 2014, http://wiki.phys.ethz.ch/quantumsimulations/_media/quantumsimulation_ed_part_1.pdf.
- [33] U. Schollwöck, “The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states”, Ann. Phys. **326**, 96 (2011), doi: 10.1016/j.aop.2010.09.012.
- [34] C. Karrasch, J. Hauschild, S. Langer in F. Heidrich-Meisner, “Drude weight of the spin- $\frac{1}{2}$ XXZ chain: Density matrix renormalization group versus exact diagonalization”, Phys. Rev. B **87**, 245128 (2013), doi: 10.1103/PhysRevB.87.245128.
- [35] S. R. White, “Density matrix formulation for quantum renormalization groups”, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992), doi: 10.1103/PhysRevLett.69.2863.
- [36] S. R. White, “Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups”, Phys. Rev. B **48**, 10345 (1993), doi: 10.1103/PhysRevB.48.10345.
- [37] A. E. Feiguin in S. R. White, “Finite-temperature density matrix renormalization using an enlarged Hilbert space”, Phys. Rev. B **72**, 220401 (2005), doi: 10.1103/PhysRevB.72.220401.
- [38] S. R. White, “Minimally entangled typical quantum states at finite temperature”, Phys. Rev. Lett. **102**, 190601 (2009), doi: 10.1103/PhysRevLett.102.190601.
- [39] E. M. Stoudenmire in S. R. White, “Minimally entangled typical thermal state algorithms”, New J. Phys. **12**, 055026 (2010), doi: 10.1088/1367-2630/12/5/055026.
- [40] C. Karrasch, J. H. Bardarson in J. E. Moore, “Finite-temperature dynamical density matrix renormalization group and the Drude weight of spin- $\frac{1}{2}$ chains”, Phys. Rev. Lett. **108**, 227206 (2012), doi: 10.1103/PhysRevLett.108.227206.

-
- [41] T. Barthel, “Precise evaluation of thermal response functions by optimized density matrix renormalization group schemes”, *New J. Phys.* **15**, 073010 (2013), doi: 10.1088/1367-2630/15/7/073010.
- [42] J. Eisert, M. Cramer in M. B. Plenio, “*Colloquium*: Area laws for the entanglement entropy”, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 277 (2010), doi: 10.1103/RevModPhys.82.277.
- [43] G. Vidal, “Efficient classical simulation of slightly entangled quantum computations”, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 147902 (2003), doi: 10.1103/PhysRevLett.91.147902.
- [44] G. Vidal, “Efficient simulation of one-dimensional quantum many-body systems”, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 040502 (2004), doi: 10.1103/PhysRevLett.93.040502.
- [45] B. S. Shastry in B. Sutherland, “Twisted boundary conditions and effective mass in Heisenberg-Ising and Hubbard rings”, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 243 (1990), doi: 10.1103/PhysRevLett.65.243.
- [46] T. Prosen, “Exact nonequilibrium steady state of a strongly driven open XXZ chain”, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 137201 (2011), doi: 10.1103/PhysRevLett.107.137201.
- [47] E. Ilievski in T. Prosen, “Exact steady state manifold of a boundary driven spin-1 Lai–Sutherland chain”, *Nucl. Phys. B* **882**, 485 (2014), doi: 10.1016/j.nuclphysb.2014.03.016.
- [48] T. Prosen, “Exact nonequilibrium steady state of an open Hubbard chain”, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 030603 (2014), doi: 10.1103/PhysRevLett.112.030603.