



بازبهنجارش درهم‌تنیدگی در سیستم‌های فرمیونی برهمکنشی با استفاده از تبدیلات تک‌ذره‌ای

امیرحسین ساعدپناه و سید میرابوالحسن واعظی*

دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی شریف، تهران

پست الکترونیکی: vaezi@sharif.edu

(دریافت مقاله: ۱۴۰۰/۷/۱۷؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۴۰۰/۸/۲۲)

چکیده

یکی از قوی‌ترین و محبوب‌ترین روش‌های محاسباتی کوانتومی برای شبیه‌سازی و مطالعه سیستم‌های هم‌بسته قوی یک بعدی و شبه دو بعدی، روش گروه بازبهنجارش ماتریس چگالی (DMRG) است که بنیان آن درهم‌تنیدگی کوانتومی است. هر چه درهم‌تنیدگی کوانتومی میان درجات آزادی سیستم کمتر باشد، این روش دقت بالاتری دارد. در عین حال درهم‌تنیدگی کوانتومی میان دو جزء یک سیستم بسته به نحوه توزیع درجات آزادی میان آن دو وابسته است و بنا بر این در حالت کلی تحت تبدیلات یکانی دلخواه ناوردا نیست. درهم‌تنیدگی تنها تحت آن دسته از تبدیلات یکانی که درجات آزادی دو جزء را مخلوط نمی‌کنند، ثابت می‌ماند. با توجه به این مشاهدات، یک پرسش اساسی این است که آیا می‌توان به صورت روشمند تبدیلات یکانی خاصی طراحی کرد که درهم‌تنیدگی میان درجات آزادی سیستم را کمینه کند تا به واسطه آن دقت روش DMRG بیشینه شود. پاسخ این پرسش در حالت کلی بسیار سخت است. در این مقاله ما مدل‌های فرمیونی برهمکنشی را مطالعه می‌کنیم و با محدود کردن تبدیلات یکانی به تبدیلات یکانی تک‌ذره‌ای، روشی نوین و کارآمد را برای یافتن تبدیلات بهینه معرفی می‌کنیم. در این چارچوب نشان می‌دهیم که دقت روش DMRG به ازای یک بعد پیوندی ثابت با اعمال الگوریتم ما بیشتر می‌شود و انرژی اندازه‌گیری شده سیستم کاهش می‌یابد و به مقدار درست خود نزدیک‌تر می‌شود. روش ما راه را برای یافتن تبدیلات یکانی پیچیده‌تر (بس‌ذره‌ای) بهینه، باز می‌کند و به فهم بهتر رفتار فرمیون‌ها در سیستم‌های هم‌بسته قوی کمک می‌کند.

واژه‌های کلیدی: درهم‌تنیدگی، گروه بازبهنجارش ماتریس چگالی، بازبهنجارش درهم‌تنیدگی، سیستم‌های هم‌بسته قوی، مدل هابارد، تبدیلات یکانی تک‌ذره‌ای

۱. مقدمه

مختلف از جمله علوم مواد و اطلاعات، نظر بسیاری از فیزیکدانان ماده چگال را به خود جلب کرده‌اند. این رفتار نشأت گرفته از مفهومی به نام درهم‌تنیدگی بوده که ویژگی

امروزه سیستم‌های هم‌بسته قوی به واسطه وجود پیچیدگی، بروز پدیده‌های نوظهور و کاربردهای وسیع آنها در زمینه‌های

برای حالت پایه سیستم‌های کوانتومی با گاف انرژی و برهمکنش موضعی، تعداد زیادی از این ضرایب صفر و نزدیک به صفر هستند و تنها با مطالعه بخش کوچکی از فضای هیلبرت می‌توان حالت کوانتومی مورد نظر را توصیف کرد. این رفتار دقیقاً همان چیزی است که روش‌های عددی مبتنی بر شبکه‌های تانسوری بر پایه آن بنا شده‌اند [۵]. با این حال باید توجه کرد که ماتریس چگالی، طیف درهم‌تنیدگی و آنتروپی درهم‌تنیدگی کمیت‌هایی یکتا نیستند و تحت تبدیل یکانی (موضعی و یا غیرموضعی) تغییر کرده و به پایه‌های فضا وابسته هستند. برای درک بهتر این موضوع مدل تنگابست (۳) با دو جایگاه را در نظر می‌گیریم.

$$H = -(c_1^\dagger c_2 + c_2^\dagger c_1), \quad (3)$$

به طور مرسوم به منظور حل این مدل فضای تکانه را انتخاب می‌کنیم. با استفاده از تبدیل فوری، $\tilde{c}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{ik \cdot j} c_j$ هامیلتونی سیستم را در فضای تکانه به شکل زیر بازنویسی می‌کنیم:

$$H = -\tilde{c}_{k=\pi}^\dagger \tilde{c}_{k=0} + \tilde{c}_{k=\pi}^\dagger \tilde{c}_{k=\pi}, \quad (4)$$

که در آن $\tilde{c}_{k=\pi}$ و $\tilde{c}_{k=0}$ عبارتند از:

$$\tilde{c}_{k=0} = \frac{c_1 + c_2}{\sqrt{2}}, \quad \tilde{c}_{k=\pi} = \frac{c_1 - c_2}{\sqrt{2}}, \quad (5)$$

پایه‌های فضای فوک برای سیستم در دو فضای مکان و تکانه عبارتند از (نمایش برداری مربوط به فضای مکان است):

$$|0\rangle_1 |0\rangle_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}; \quad |0\rangle_1 |1\rangle_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (6)$$

$$|1\rangle_1 |0\rangle_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}; \quad |1\rangle_1 |1\rangle_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix},$$

$$|0\rangle_{k=0} |0\rangle_{k=\pi} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}; \quad |1\rangle_{k=0} |1\rangle_{k=\pi} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix},$$

$$|1\rangle_{k=0} |0\rangle_{k=\pi} = \frac{|1\rangle_1 |0\rangle_2 + |0\rangle_1 |1\rangle_2}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (7)$$

$$|0\rangle_{k=0} |1\rangle_{k=\pi} = \frac{|0\rangle_1 |1\rangle_2 - |1\rangle_1 |0\rangle_2}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix},$$

مختص سیستم‌های کوانتومی است. مفهوم درهم‌تنیدگی نه تنها در زمینه بازسازی (توموگرافی) حالت‌های کوانتومی، رایانش کوانتومی و یا سیستم‌های دارای نظم توپولوژیک اهمیت پیدا می‌کند [۱-۳] بلکه بر پایه این مفهوم به منظور کاهش پیچیدگی محاسباتی رهیافت‌های عددی در سیستم‌های هم‌بسته قوی، روش‌های مختلفی پیشنهاد شده که از جمله مهم‌ترین آنها روش‌های مبتنی بر رهیافت شبکه‌های تانسوری است که از مهم‌ترین آنها می‌توان به روش DMRG اشاره کرد.

در این پژوهش با استفاده از تبدیلات یکانی تک ذره‌ای مفهوم بازهنجارش درهم‌تنیدگی را در سامانه‌های بس ذره‌ای برهم‌کنشی معرفی می‌کنیم. این مفهوم نه تنها در تحلیل سیستم‌های هم‌بسته قوی به عنوان ابزاری جهت تفکیک فازهای کوانتومی و گذار فاز بین آنها قابل استفاده است، بلکه می‌تواند بازدهی روش‌های محاسباتی را که مبتنی بر کمینه کردن درهم‌تنیدگی هستند (برای نمونه رهیافت شبکه‌های تانسوری)، به طور بالقوه افزایش دهد. در ادامه به منظور درک دقیق‌تر مفهوم بازهنجارش درهم‌تنیدگی، در ابتدا به ارائه ساختار ریاضیاتی کمی سازی درهم‌تنیدگی موسوم به آنتروپی درهم‌تنیدگی پرداخته و در قالب یک مثال ساده اهمیت مسئله بازهنجارش درهم‌تنیدگی را نشان می‌دهیم.

یکی از روش‌های کمی سازی درهم‌تنیدگی، آنتروپی درهم‌تنیدگی است. می‌توان تعریف آنتروپی درهم‌تنیدگی را با استفاده از ضرایب اشمیت بیان کرد. بدین منظور از تجزیه طیفی اشمیت استفاده می‌کنیم. اگر یک سیستم را به دو زیر سیستم A و B تقسیم کنیم، خواهیم داشت [۴]:

$$|\psi_{AB}\rangle = \sum_{i=1}^k \lambda_i |\phi_i^A\rangle |\phi_i^B\rangle, \quad (1)$$

که λ_i ها ضرایب اشمیت، k مرتبه اشمیت و $|\phi_i^A\rangle$ و $|\phi_i^B\rangle$ به ترتیب پایه‌های اشمیت زیرسیستم A و B هستند. بدین ترتیب آنتروپی درهم‌تنیدگی عبارت است از:

$$S_{ent} = -\sum_{i=1}^k \lambda_i^2 \ln \lambda_i^2, \quad (2)$$

که ضرایب λ_i^2 مقادیر ویژه ماتریس چگالی کاهیده هستند.

خواهد بود و ضرایب اشمیت نیز برابر با $\lambda_{1,2} = 1/\sqrt{2}$ بوده که بیشینه مقدار آنتروپی درهم‌تنیدگی (یعنی $S_{ent} = \log 2$) را نتیجه می‌دهد. در این جا باید به این نکته اشاره کرد که یک برش موضعی در فضای تکانه معادل با یک برش غیرموضعی در فضای مکان است [۶]. بنابراین با تغییر پایه‌ها از فضای حقیقی به فضای تکانه با استفاده از تبدیل یکانی و غیر موضعی فوریه، حالتی با کمینه درهم‌تنیدگی به حالتی با بیشینه درهم‌تنیدگی تغییر می‌کند. در کنار این مثال می‌توان نوسانگر هماهنگ ساده را یادآور شد

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}k\hat{x}^2. \quad (12)$$

اگر تنها جمله جنبشی را داشته باشیم به وضوح حالت با تکانه $p = 0$ حالت پایه سیستم بوده و فضای تکانه بهترین فضا برای تحلیل سیستم است. حال اگر جمله پتانسیل غالب باشد کمینه انرژی در مکان $x = 0$ بوده و در فضای مکان سیستم را مطالعه می‌کنیم. اما در حالتی که هر دو جمله اهمیت داشته باشند از عملگرهای بالابرنده a^\dagger و پایین برند a استفاده کرده و هامیلتونی به شکل زیر قابل بازنویسی خواهد بود:

$$H = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right). \quad (13)$$

همانطور که مشاهده می‌شود با جایگزینی $a^\dagger a = n$ ، ویژه بردارهای عملگر تعداد، پایه‌های فضا بوده و عموماً در این پایه به مطالعه سیستم می‌پردازیم.

این محاسبات ساده در کنار نمایان کردن اهمیت پایه‌ای که در آن سیستم بررسی می‌شود، تأثیر تبدیلات یکانی غیر موضعی بر درهم‌تنیدگی را به وضوح نشان می‌دهد.

حال باید به این سؤال پاسخ داد که در حالت کلی چه تبدیلی ما را به فضایی با کمترین درهم‌تنیدگی خواهد برد. برای پاسخ به این سؤال مدل برهمکنشی هابارد را مورد مطالعه قرار می‌دهیم. بدین ترتیب در بخش بعدی به مرور مدل هابارد پرداخته و در ادامه روش دستیابی به پایه مطلوب را شرح می‌دهیم و در نهایت به بررسی نتایج و نتیجه‌گیری می‌پردازیم.

برای سیستمی با یک ذره حالت پایه طبق هامیلتونی (۳)، حالت با تکانه صفر است. بدین ترتیب با استفاده از تبدیل عکس فوریه حالت پایه در فضای مکان عبارت است از:

$$|gs\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle_{k=0} + |0\rangle_{k=\pi}), \quad (8)$$

یکی دیگر از راه‌های نمایش حالت سیستم‌های کوانتومی استفاده از ماتریس چگالی است. بر خلاف تابع موج، ماتریس چگالی آمیخته یا خالص بودن حالت سیستم را مشخص کرده و ارتباط بین اجزاء سیستم را برای ما نمایان می‌کند. برای حالت کوانتومی $|\psi\rangle$ ماتریس چگالی برابر است با $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ که مقادیر ویژه آن $p_i \geq 0$ بوده و $\sum_i p_i = 1$ است. بدین ترتیب حالت پایه سیستم در فضای تکانه عبارت است از:

$$\bar{\rho} = (|1\rangle_{k=0}\langle 1|_{k=0} + |0\rangle_{k=\pi}\langle 0|_{k=\pi}). \quad (9)$$

از آنجا که ماتریس چگالی تحت تبدیل یکانی تغییر می‌کند، به عنوان جایگزین از کمیتی به نام ماتریس چگالی کاهیده استفاده می‌شود که در کنار ناوردا بودن تحت تبدیل یکانی، با استفاده از آن می‌توان به صورت موضعی سیستم را مطالعه کرد. برای پیدا کردن ماتریس چگالی کاهیده، سیستم را به دو بخش تقسیم کرده و با گرفتن رد جزئی نسبت به یکی از زیر سیستم‌ها ماتریس چگالی کاهیده را می‌یابیم، $\rho_{A(B)} = Tr_{B(A)}(\rho)$ که مقادیر ویژه آن مجذور ضرایب اشمیت هستند [۴]. بدین ترتیب برای پیدا کردن درهم‌تنیدگی در هر یک از دو فضا، کافی است با برش سیستم به دو زیر سیستم و استفاده از رد جزئی نسبت به یکی از زیر سیستم‌ها ماتریس چگالی کاهیده را به دست آوریم. ماتریس چگالی کاهیده در فضای تکانه عبارت است از:

$$\bar{\rho}_{k=0} = Tr_{k=\pi}(\bar{\rho}) = |1\rangle_{k=0}\langle 1|_{k=0} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (10)$$

پس $\lambda_1 = 1$ و $\lambda_2 = 0$ و درهم‌تنیدگی نیز طبق رابطه (۲) برابر $S_{ent} = 0$ خواهد بود که به معنای ناهم‌تنیدگی حالت پایه در فضای تکانه است. این درحالی است که در فضای مکان درهم‌تنیدگی حالت پایه بیشینه خواهد بود. در واقع ماتریس چگالی کاهیده مربوط به حالت پایه در این فضا به شکل

$$\rho = Tr_{\tau}(\rho) = \frac{1}{2} (|1\rangle_1\langle 1|_1 + |0\rangle_1\langle 0|_1) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (11)$$

۲. مدل هابارد

مدل هابارد نقش اساسی در پیشبرد نظریه سیستم های همبسته فرمیونی ایفا کرده است. تقریباً با گذشت شصت سال پس از اولین توصیف، هنوز پرسش های اساسی حل نشده ای وجود دارد که از جمله آنها می توان به سیمای فاز مدل تحت تأثیر هندسه شبکه اشاره کرد. با پیشرفت های نظری حاصل شده، به نظر می رسد که این مدل ساده توان نشان دادن فازها و رژیم های شگفت انگیزی را دارد که بسیاری از آنها با رفتار مشاهده شده از طیف گسترده ای از مواد پیچیده، شباهت روشنی دارند. به عنوان مثال شواهد قانع کننده ای وجود دارد که نشان می دهد فازهایی چون ابررسانایی غیرمتعارف، فازهای توپوژیک (مثلاً مایع اسپینی) و کریستال های مایع الکترونی در گونه های مختلف مدل هابارد قابل ملاحظه است [۷-۹].

مدل هابارد از یک بخش جنبشی و یک بخش برهمکنشی تشکیل شده است که بخش برهم کنشی همان برهم کنش کولنی بین الکترون های هم مکان در اوربیتال d یا f در عناصر واسطه هستند. این مدل را می توان در قالب کوانتس دوم به صورت زیر نوشت:

$$H = -t_{ij} \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + h.c.) + U_i \sum_i \hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{i,\downarrow}, \quad (14)$$

که جمله جنبشی تنها شامل جهش به همسایه اول بوده و $c_{i,\sigma}^\dagger$ عملگر خلق الکترون با اسپین σ در مکان i و $c_{j,\sigma}$ عملگر نابودی الکترون با اسپین σ از مکان j است.

طبق رابطه (۱۴) در حالت $t=0$ بهترین فضا برای پیدا کردن حالت پایه سیستم فضای مکان بوده و در حالت $U=0$ بهترین فضا، فضای تکانه است که در هر دو حالت آنروپی درهم-تیندگی حالت پایه صفر است. بنابراین در حالت های میانی، $U, t \neq 0$ فضای مکان و تکانه کمترین درهم تیندگی را نخواهند داشت. برای رسیدن به فضایی با کمینه درهم تیندگی می توان تبدیل کلی زیر را در نظر گرفت:

$$\tilde{c}_i = U_{ij} c_j + \mathcal{M}_{imlk} c_m^\dagger c_l c_k + \mathcal{S}_{i\alpha\beta\gamma\zeta\lambda} c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\gamma c_\zeta c_\lambda + \dots, \quad (15)$$

که برای مشخص کردن حالت با کمینه درهم تیندگی ملزم به پیدا کردن عناصر تانسورهای $U, \mathcal{M}, \mathcal{S}, \dots$ با قید یکانی بودن تبدیل هستیم. به لحاظ محاسباتی، پیدا کردن تبدیل عام رابطه (۱۵) بسیار دشوار است، به همین خاطر روی تبدیلات تک ذره ای تمرکز می کنیم

$$\tilde{c}_i = U_{ij} c_j. \quad (16)$$

همان طور که در ادامه نشان می دهیم حتی با همین ساده سازی می توان به مقدار قابل ملاحظه ای نتایج حاصل از روش عددی گروه بازهنجارش ماتریس چگالی (DMRG) را بهبود بخشید. با اعمال تبدیل (۱۶) هامیلتونی تبدیل یافته به شکل زیر در می آید:

$$\tilde{H}(U) = \sum_{ij} \tilde{t}_{ij} \tilde{c}_i^\dagger \tilde{c}_j + \sum_{ijkl} \tilde{U}_{ijkl} \tilde{c}_i^\dagger \tilde{c}_j^\dagger \tilde{c}_k \tilde{c}_l, \quad (17)$$

که در آن ماتریس ضرایب از رابطه زیر قابل محاسبه اند [۱۰]:

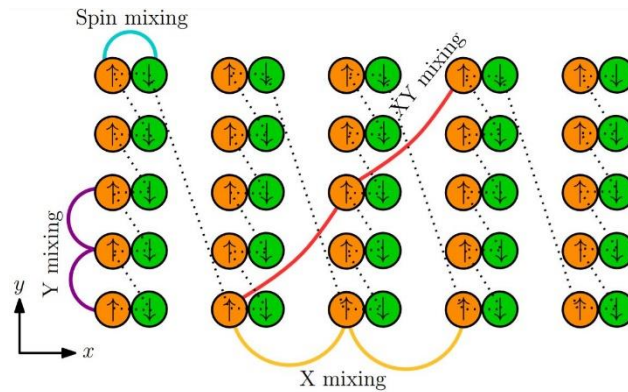
$$\begin{aligned} \tilde{t}(U) &= U t U^\dagger \\ U(U) &= (U \otimes U) U (U \otimes U)^\dagger. \end{aligned} \quad (18)$$

همان طور که در هامیلتونی (۱۷) قابل ملاحظه است تبدیل کلی (۱۶) موجب بروز برهمکنش غیرموضعی در سیستم شده و طبق آنچه در بخش قبل ملاحظه کردیم ناموضعی تبدیل یکانی موجب افزایش درهم تیندگی در سیستم می شود. بدین ترتیب یکی از پارامترهایی که باید در ادامه در نظر بگیریم بازه اثر تبدیل یکانی است.

۳. روش بهینه سازی

جهت دسترسی به مقدار آنروپی درهم تیندگی برای مقایسه فضاهای مختلف، نیازمند دسترسی به حالت پایه هستیم. روش گروه بازهنجارش ماتریس چگالی (DMRG) یکی از روش های پیش رو جهت به دست آوردن حالت پایه در سیستم های یک بعدی و شبه دو بعدی است که در آن به صورت وردشی حالت پایه را به دست می آوریم. از دیگر ویژگی های این روش که ما را مجاب به استفاده از آن می کند، وابستگی دقت آن به آنروپی

درهم تیندگی سیستم یا ضرایب اشمیت است $\epsilon = \sum_{i=\chi}^k \lambda_i$ که در آن χ تعداد ضرایب اشمیت نگهداری شده موسوم به بعد



شکل ۱. طرح‌واره‌ای از نحوه درآمیختگی‌های مختلف شامل درآمیختگی در راستای طول، عرض، قطر و درآمیختگی اسپینی به همراه مسیر حرکت روی سیستم در روش DMRG که با نقطه چین نشان داده شده است.

فرمیونی $i + 1$ تا $i + m$ با وزن x_i درآمیخته می‌شود. M یک ماتریس پایین مثلثی است اما یکانی نیست. برای رسیدن به ماتریس یکانی تبدیل، از پایین مثلثی بودن ماتریس درآمیختگی استفاده کرده و با استفاده از تجزیه کیو-آر (QR) (معادله (۲۰)) ماتریس یکانی را به دست می‌آوریم که پیچیدگی این محاسبه از مرتبه $O(n^3)$ است.

$$U_i^a = QR(M_i^a) \quad a = \{x, y, xy, spin\}. \quad (20)$$

در این رابطه، بالانویس a نحوه و زیرفضای درآمیختگی‌های موضعی را مشخص می‌کند، به این ترتیب که برای نمونه بالانویس x به معنای درآمیختگی اسپین‌های بالا و پایین (به طور جداگانه) در راستای x جایگاه‌های شبکه بوده (شکل ۱ را ببینید) و یا $spin$ به معنای درآمیختگی جایگاهی اسپین‌های بالا و پایین است.

حال با استفاده از تبدیلات فوق که با تعیین بازه درآمیختگی موضعی یا ناموضعی آنها قابل کنترل است، ماتریس یکانی نهایی را می‌سازیم. جهت ساخت ماتریس یکانی نهایی نحوه درآمیختگی‌های مختلف را به چهار دسته تقسیم می‌کنیم که در شکل (۱) قابل ملاحظه است. سپس تبدیل یکانی نهایی از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$U = (U_x \otimes U_y) \times U_{xy} \otimes U_{spin}, \quad (21)$$

که در آن

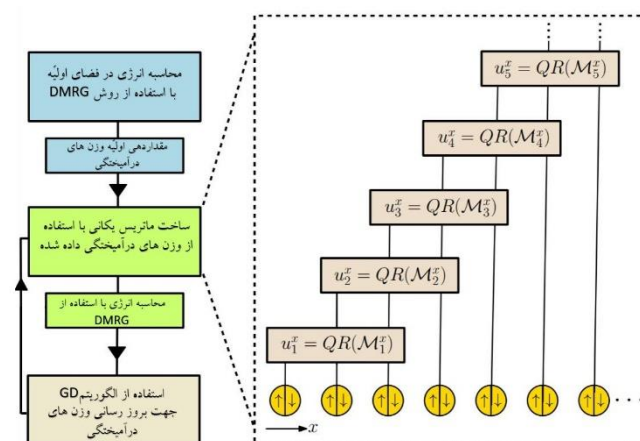
$$U_a = \prod_{i=1}^m U_i^a \quad a = \{x, y, xy, spin\}. \quad (22)$$

پیوندی و ϵ خطای برش است. می‌توان نشان داد بعد پیوندی مورد نیاز برای رسیدن به دقت مطلوب به صورت نمایی با آنتروپی درهم‌تنیدگی $s \sim \chi$ رابطه دارد [۴]. پس کاهش آنتروپی درهم‌تنیدگی در سیستم متناظر با افزایش دقت است که به واسطه ماهیت وردشی روش DMRG، به معنای کاهش انرژی خواهد بود. برای دسترسی به ماتریس تبدیل از حالت مکان به حالتی با کمینه انرژی نیاز به پیدا کردن درایه‌های تبدیل یکانی U داریم. بدین منظور با استفاده از روش بهینه‌سازی عددی تندترین نزول (Gradient Descent) و قرار دادن انرژی به عنوان تابع هزینه، بهترین تبدیل یکانی تک‌ذره‌ای را می‌یابیم. اما استفاده از روش‌های مرسوم بهینه‌سازی با قید یکانی پیچیدگی محاسباتی بالایی دارد و حتی برای سیستمی به ابعاد 2×2 باید زمان زیادی صرف شود [۱۱].

جهت کاهش پیچیدگی محاسباتی در اینجا روش خود را ارائه می‌کنیم. در این روش ابتدا ماتریس درآمیختگی M (معادله (۱۹)) را معرفی می‌کنیم:

$$M_i = \begin{bmatrix} 1 & & & & & & & & & & \\ 0 & 1 & & & & & & & & & \\ 0 & 0 & 1 & & & & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 1 & & & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & x_i & 1 & & & & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & x_i & 0 & \ddots & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots & 1 & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 & 1 & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 & 0 & 1 & & \\ & & & & & & & & & & 1 \end{bmatrix}, \quad (19)$$

در این ماتریس عملگر فرمیونی i با عملگرهای

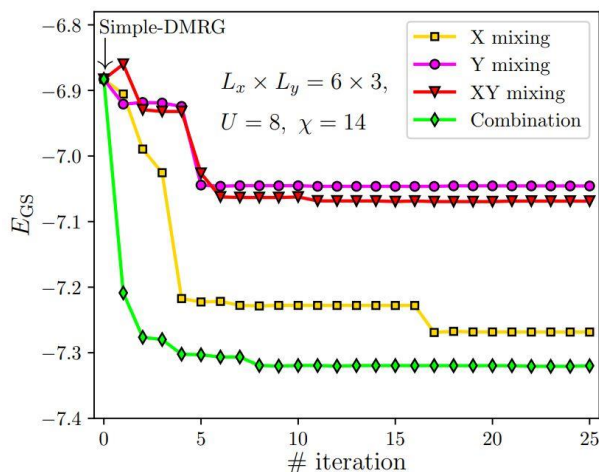


شکل ۲. نحوه اعمال الگوریتم بازهنجارش آنتروپی درهم تنیدگی و ترکیب آن با روش DMRG استاندارد به همراه نحوه ساخت تبدیل یکانی در راستای طول سیستم x . جهت ساخت تبدیل یکانی U_x ، از سمت چپ سیستم شروع کرده و ماتریس درآمیختگی M_i^x را می‌سازیم، سپس با استفاده از تجزیه QR ماتریس یکانی موضعی U_i^x را یافته و روی سیستم به اندازه یک ذره در جهت مشخص شده در شکل x حرکت می‌کنیم. در نهایت پس از جاروب سیستم در راستای طول با ضرب تبدیلات یکانی موضعی ماتریس U_x را می‌سازیم (رابطه (۱۸)).

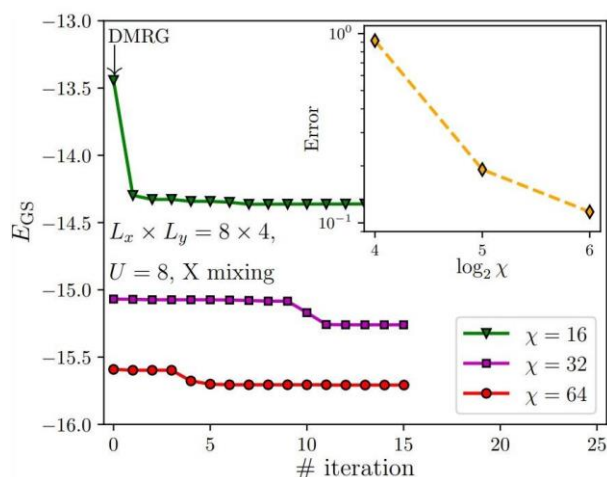
۴. نتایج

در ابتدا برای یک سیستم دو بعدی به ابعاد $6 \times 3 = L_x \times L_y$ ، قدرت برهمکنش $U = 8$ و بعدپیوندی $\chi = 14$ ، تأثیر درآمیختگی در راستاهای مختلف و استفاده همزمان از آنها محاسبه شده است. همان طور که در شکل ۳ قابل ملاحظه است درکنار تأثیر قابل ملاحظه این روش در کاهش انرژی با تعداد کمی گام در الگوریتم GD، شاهد تأثیر بیشتر این روش در راستای طول نسبت به بقیه راستاها هستیم که این اتفاق به ساختار روش DMRG و نحوه حرکت بر روی سیستم دوبعدی برمی‌گردد. اگر به نحوه حرکت بر روی سیستم توجه کنیم (شکل ۱)، شاهد بلند برد شدن برهمکنش‌ها در راستای طول (x) خواهیم بود. بدین ترتیب برهمکنش‌ها در این راستا سهم بیشتری در افزایش درهم تنیدگی را در سیستم داشته و با تبدیل پایه در این راستا شاهد تأثیر بیشتر در کاهش انرژی هستیم. نکته دیگر تأثیر بعد پیوندی در عملکرد این روش است. با توجه به این که در حالت پایه سیستم‌های مورد مطالعه ما ضرایب اشمیت به سرعت افت می‌کنند از جایی به بعد افزایش بعد پیوندی تأثیر کمی در افزایش دقت و کاهش انرژی سیستم خواهد گذاشت و به تبع آن تغییر توزیع و افزایش شیب کاهش ضرایب اشمیت تأثیر کمی در نتایج می‌گذارد (شکل ۴).

در شکل ۲ طرحواره‌ای از نحوه ساخت ماتریس یکانی در یکی از راستاها آورده شده است. باید به این نکته اشاره شود که در برهمکنش‌های بزرگ $U \gg 1$ که الکترون‌ها تمایل به جایگزیدگی دارند (عایق مات)، وزن‌های درآمیختگی با فاصله از قطر اصلی به سرعت نزول کرده و تنها نیاز به در نظر گرفتن چند وزن ابتدایی داریم که تعداد پارامترهای بهینه سازی را به شدت کاهش می‌دهد. این نوع تبدیلات قرابت زیادی با مفهوم تبدیل فوریه زمان کوتاه دارند که در آن به جای استفاده از پایه‌های تبدیل فوریه معمولی که ناموضعی هستند از پایه‌هایی موضعی استفاده می‌شود که بر خلاف تبدیل فوریه، وابستگی مکانی در آنها وجود داشته و ناحیه اثر محدودی دارند [۱۲]. حال برای پیدا کردن ماتریس یکانی مطلوب با استفاده از روش ارائه شده با مقداردهی اولیه وزن‌های درآمیختگی، ماتریس یکانی را ساخته و هامیتونی را در پایه جدید به دست می‌آوریم سپس با استفاده از روش DMEG تابع هزینه را، که همان انرژی است، حساب کرده و به الگوریتم GD می‌دهیم تا وزن‌های درآمیختگی را به روز رسانی کرده و به سمت کمینه کردن انرژی حرکت کنیم. طرحواره الگوریتم فرایند بهینه سازی در شکل ۲ آورده شده است. در ادامه به بررسی نتایج خواهیم پرداخت.



شکل ۳. نمودار کاهش انرژی با درآمیختگی‌های مختلف برای سیستمی با ابعاد 6×3 ، قدرت برهمکنش $U = 8$ و بعد پیوندی $\chi = 14$. در این روش تنها با چند گام از فرایند بهینه‌سازی، تأثیر به‌سزایی در کاهش انرژی دیده می‌شود. به واسطه بلند برد بودن برهم‌کنش در راستای طول (x) شاهد تأثیر بیشتر درآمیختگی در این راستا جهت کاهش انرژی هستیم.



شکل ۴. نمودار تأثیر بعد پیوندی بر میزان کاهش انرژی برای سیستمی با ابعاد 8×4 ، قدرت برهمکنش $U = 8$ و بعد پیوندی $\chi = 16, 32, 64$. همانطور که در تصویر الحاقی قابل ملاحظه است با افزایش بعد پیوندی میزان کاهش انرژی پس از بهینه‌سازی افت خواهد کرد که این اتفاق به کم‌اهمیت بودن ضرایب اشمیت کنار گذاشته شده برمی‌گردد.

در ادامه برای سیستمی با ابعاد $L_x \times L_y = 8 \times 4$ ، قدرت برهمکنش‌های $U = 1, 2, 4$ و میزان پرشدگی‌های $p = \frac{1}{2}, \frac{3}{8}, \frac{7}{16}$ ، روش بازبهنجارش آنتروپی با ترکیب درآمیختگی در راستای طول و عرض اعمال شد. جداول ۱ تا ۳ مقایسه‌ای از انرژی حالت پایه سیستم را با اعمال روش DMRG در فضای مکان و همچنین پس از اعمال روش بازبهنجارش آنتروپی نشان می‌دهد. این نتایج گواه تأثیر قابل ملاحظه این روش در کاهش

انرژی و به تبع آن کاهش درهم‌تندی هستند (بعد پیوندی برابر با ۳۲ است).

۵. سیستم‌های غیر فرمیونی

با توجه به جبر پادجابه‌جایی فرمیونی داریم:

$$f_i^\dagger f_j^\dagger + f_j^\dagger f_i^\dagger = 0, \quad (23)$$

که در آن عملگر خلق فرمیونی در مکان i است. اولین

جدول ۱. محاسبه انرژی برای دو فضای تبدیل یافته و مکان با درصد پرشدگی $p = \frac{1}{4}$ و قدرت برهمکنش های مختلف.

قدرت برهمکنش	فضای مکان	فضای تبدیل یافته
U=۱	-۴۰/۵۱۸۶	-۴۲/۲۹۴۸
U=۲	-۳۴/۳۴۷۸	-۳۵/۴۹۱۷
U=۴	-۲۴/۶۸	-۲۵/۳۲

جدول ۲. محاسبه انرژی برای دو فضای تبدیل یافته و مکان با درصد پرشدگی $p = \frac{3}{8}$ و قدرت برهمکنش های مختلف.

قدرت برهمکنش	فضای مکان	فضای تبدیل یافته
U=۱	-۴۰/۵۵۵۴	-۴۴/۲۶۴۸
U=۲	-۳۶/۷۲۲	-۴۰/۰۳۵
U=۴	-۳۱/۸۹۵۳	-۳۲/۴۷۷۹

جدول ۳. محاسبه انرژی برای دو فضای تبدیل یافته و مکان با درصد پرشدگی $p = \frac{5}{16}$ و قدرت برهمکنش های مختلف.

قدرت برهمکنش	فضای مکان	فضای تبدیل یافته
U=۱	-۴۱/۴۹۹	-۴۴/۳۲۵
U=۲	-۳۶/۶۳۰	-۳۹/۱۴۷
U=۳	-۲۸/۸۶۰	-۲۹/۷۲۴

برای سیستم های فرمیونی، به علت جبرپادجابه جایی عبارت داخل پرانتز صفر خواهد شد $b_k^\dagger b_k^\dagger + b_k^\dagger b_k^\dagger = 0$ ، پس در فضای جدید نیز رابطه (۲۵) برقرار است $\langle (b_{k=0}^\dagger)^2 | 0 \rangle = 0$. اما در سیستم های بوزونی و اسپینی، به علت جبر جابه جایی عبارت داخل پرانتز غیر صفر شده $b_k^\dagger b_k^\dagger + b_k^\dagger b_k^\dagger \neq 0$ و رابطه (۲۵) برقرار نخواهد بود $\langle (b_{k=0}^\dagger)^2 | 0 \rangle = \langle b_k^\dagger b_k^\dagger | 0 \rangle$. بدین ترتیب ابعاد فضای هیلبرت تک ذره ای بزرگ تر از دو شده و بسته به تبدیل می تواند بسیار بزرگ باشد. این اتفاق ممکن است باعث افزایش هزینه محاسباتی جهت اضافه کردن تک ذره در روش DMRG بیش از بهره به دست آمده از کاهش درهم تیدگی شود.

برای مواجهه با این مسئله برای سیستمی با اسپین یک دوم از فرمیون های شوئینگر استفاده کرده و عملگرهای اسپینی را به شکل زیر بازنویسی می کنیم [۱۳]:

$$S_j = \frac{1}{4} \sum_{\sigma, \sigma'} f_j^\dagger \sigma \bar{\tau}_{\sigma, \sigma'} f_{j\sigma'} \quad (27)$$

که در آن f عملگر فنانی فرمیون های شوئینگر بوده و $\bar{\tau}$ بردار

نتیجه حاصل از رابطه (۲۳) در حالت $i = j$ عبارت است از:

$$\langle (f_i^\dagger)^2 | 0 \rangle = 0. \quad (24)$$

با توجه به قید حاصل از جبر فرمیونی، مستقل از پایه، فضای هیلبرت تک ذره ای دوبعدی خواهد بود. اما برای سیستم های بوزونی سخت هسته مانند (اسپین یک دوم) روابط بالا تنها در فضای مکان صدق می کنند. برای نمونه یک سیستم بوزونی سخت هسته با دو جایگاه را در نظر بگیرید، داریم:

$$\langle (b_{12}^\dagger)^2 | 0 \rangle = 0. \quad (25)$$

حال تبدیل فوریه را بر روی آنها اعمال کرده و در فضای فوریه، رابطه (۲۵) را برای عملگرهای تبدیل یافته بررسی می کنیم.

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix},$$

$$b_{k=0} = \frac{b_1 + b_2}{\sqrt{2}},$$

$$\langle (b_{k=0}^\dagger)^2 | 0 \rangle = \frac{\langle (b_1^\dagger)^2 + (b_2^\dagger)^2 + (b_1^\dagger b_2^\dagger + b_2^\dagger b_1^\dagger) \rangle | 0 \rangle}{2}$$

$$= \frac{\langle (b_1^\dagger b_2^\dagger + b_2^\dagger b_1^\dagger) \rangle | 0 \rangle}{2}. \quad (26)$$

ماتریس‌های پائولی است. بدین ترتیب داریم:

$$\begin{aligned} S^z &= \frac{1}{\sqrt{2}}(f_{\uparrow}^{\dagger}f_{\uparrow} + f_{\downarrow}^{\dagger}f_{\downarrow}), \\ S^x &= \frac{1}{\sqrt{2}}(f_{\uparrow}^{\dagger}f_{\downarrow} + f_{\downarrow}^{\dagger}f_{\uparrow}), \\ S^y &= \frac{i}{\sqrt{2}}(-f_{\uparrow}^{\dagger}f_{\downarrow} + f_{\downarrow}^{\dagger}f_{\uparrow}). \end{aligned} \quad (28)$$

پس از بازنویسی عملگرهای اسپینی بر حسب فرمیون‌های شوئینگر، روش خود را بر روی آنها اعمال می‌کنیم. همان‌طور که قابل ملاحظه است اعمال روش در این سیستم‌ها جزئیات بیشتری داشته که می‌توان در گام‌های آتی به آنها پرداخت.

قدردانی

از هادی یارلو برای گفتگوهای مفید و خواندن متن سپاس‌گزاریم.

۶. نتیجه‌گیری

با توجه به نتایج به دست آمده در کنار تصدیق اهمیت انتخاب فضای مطالعه سیستم و وجود فضایی غیر از فضاها‌های آشنا برای

مراجع

1. C Kokail, *et al*, *Nat. Phys.* **17** (2021) 936.
2. X G Wen, *International Scholarly Research Notices*, **2013**, Article ID 198710, 20 pages, (2013).
3. S Ding and Z Jin, *CHINESE SCI BULL* **52** (2007) 2161.
4. U Schollwoeck, *Annal of physics* **326**, 1 (2011) 96.
5. J Eisert, M Cramer, and M B Plenio, *Phys. Rev. Mod. Phys.* **82** (2010) 277
6. R Thomale, D P Arovas, and B A Bernevig, *Phys. Rev. Lett.* **105** (2010) 116805.
7. S Wolf, T L Schmidt, and S Rachel, *Phys. Rev. B* **98** (2018) 174515.
8. A Szasz, *et al.*, *Phys. Rev. X* **10** (2020) 021042.
9. K Fang, *et al*, *J. Phys. Condens. Matter* **25** (2013) 205601.
10. S V Murg, *et al.*, *Phys. Rev. B* **82** (2010) 205105.
11. T E Abrudan, J Eriksson, and V Koivunen, *IEEE Transactions on Signal Processing* **56**, 3 (2008) 1134.
12. R Polikar, "The Wavelet Tutorial"(1996).
13. A A Abrikosov, *Physics Physique Fizika* **2** (1965) 5.