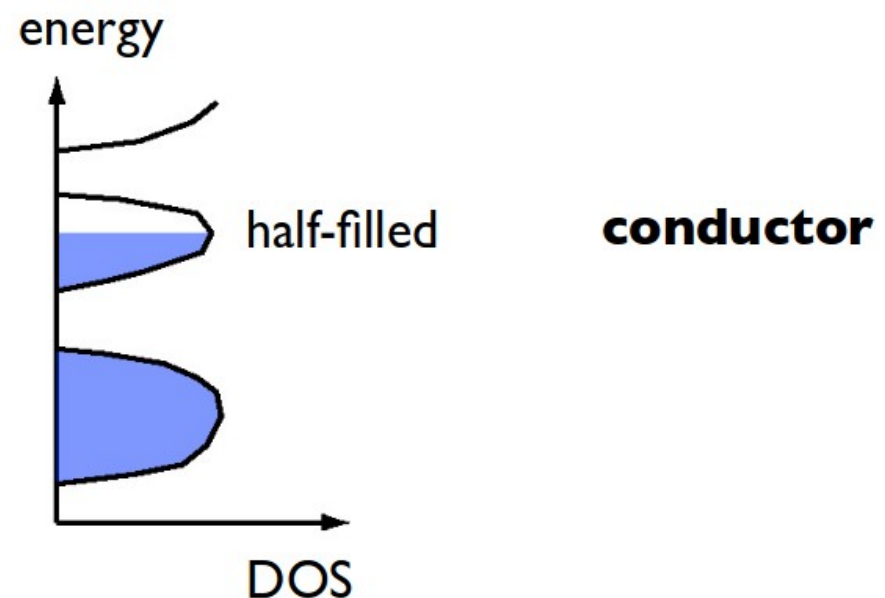
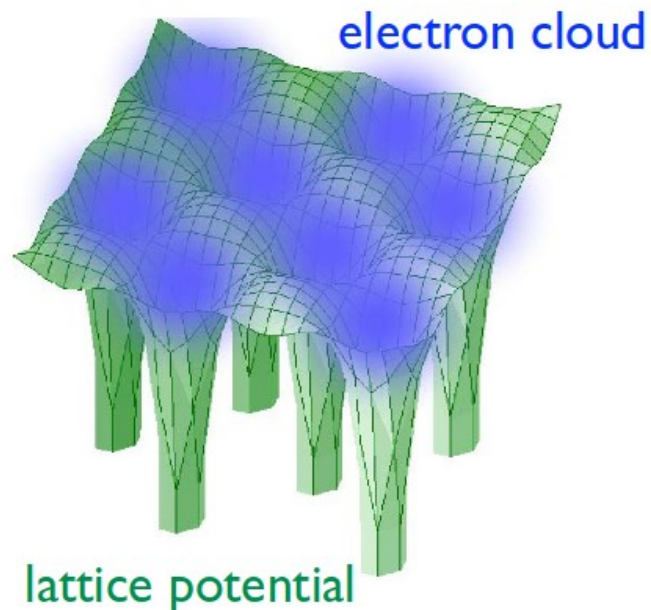


Matrix Product States(MPS)

Warum brauchen wir sowas ?

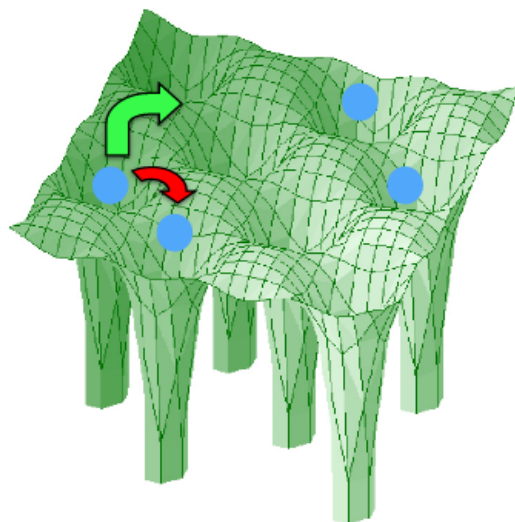
- Stark abgeschirmte Wechselwirkung

- 1-Teilchen-Bild ist OK
- Fermi-Flüssigkeit
- DFT ist König

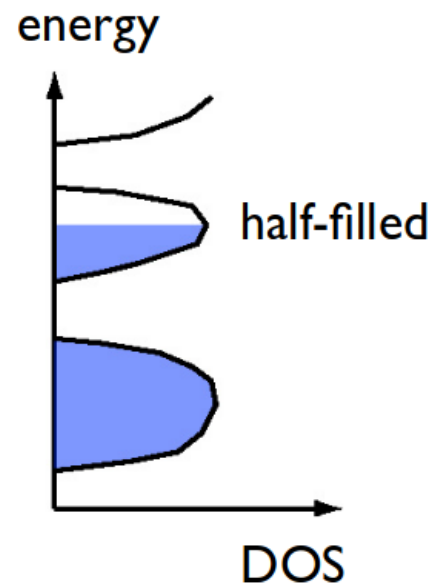


Warum brauchen wir sowas ?

- Starke Korrelationen
- Verschränkung
- Fermiflüssigkeit zerfällt
- Gute Modelle gesucht



lattice potential



insulator

eg. high- T_c
parent compounds

“Einfache” Spielzeugmodelle

- **Hubbard-Modell**

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle; \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c. + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

Zustände

$$\{|\emptyset\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle\}^{\otimes L} \quad d = 4$$

- **Heisenbergmodell**

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j = J \sum_{\langle i,j \rangle} \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_j^+ S_i^-) + S_i^z S_j^z$$

$$\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}^{\otimes L} \quad d = 2$$

- **Klassischer Spin**

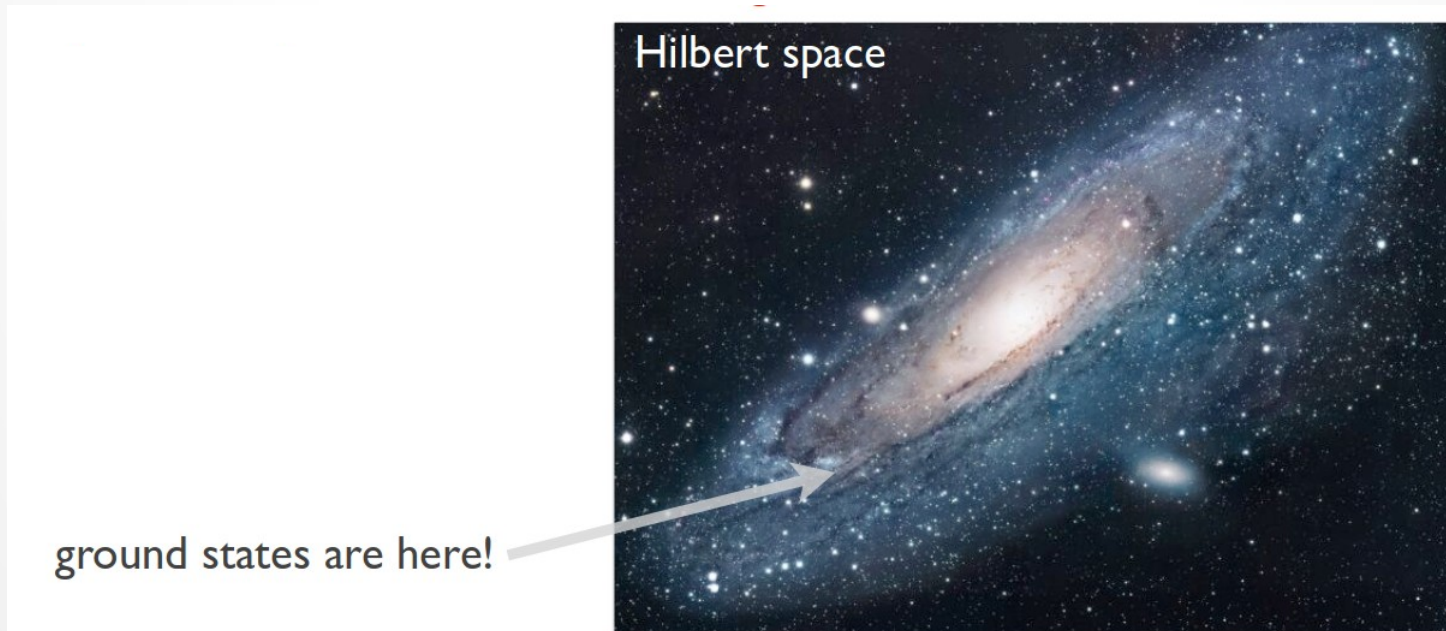
- 2N-Freiheitsgrade
- Up und Down

- **Quantenmech. Spin**

- 2^N-Freiheitsgrade
- **Verschrankung!**

Wie löst man das ?

- Exakte Diagonalisierung
Limitiert auf ~ 40 Spins / ~ 20 Elektronen
- Monte Carlo Sampling / Stochastische Methoden
“Sign-Problem” für Fermionen
- Physikalische Kompression des Hilbertspaces
/ Selektion eines Unterraums



Wie löst man das ?

- Exakte Diagonalisierung
Limitiert auf ~ 40 Spins / ~ 20 Elektronen
- Monte Carlo Sampling / Stochastische Methoden
“Sign-Problem” für Fermionen
- Physikalische Kompression des Hilbertspaces
/ Selektion eines Unterraums

Variationsrechnung

Renormalisierungsgruppentheorie

MPS finden einen passenden Unterraum!

Definitionen

quantum system living on L lattice sites

d local states per site $\{\sigma_i\}$ $i \in \{1, 2, \dots, L\}$

example: spin 1/2: $d=2$ $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$

Hilbert space:

$$\mathcal{H} = \bigotimes_{i=1}^L \mathcal{H}_i \quad \mathcal{H}_i = \{ |1_i\rangle, \dots, |d_i\rangle \}$$

most general state (not necessarily ID):

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} c^{\sigma_1 \dots \sigma_L} |\sigma_1 \dots \sigma_L\rangle$$

abbreviations: $\{\sigma\} = \sigma_1 \dots \sigma_L$ $c^{\{\sigma\}}$

Und jetzt die Matrizen

- Einfachste Herangehensweise (Mean-Field)

$$c^{\sigma_1 \dots \sigma_L} = c^{\sigma_1} \cdot c^{\sigma_2} \cdot \dots \cdot c^{\sigma_L} \quad d^L \rightarrow dL \text{ coefficients}$$

- Feature: Verschränkung fehlt
- Ersetze Koeffizienten durch Matrizen

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} M^{\sigma_1} M^{\sigma_2} \dots M^{\sigma_L} |\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_L\rangle$$

Matrizen sind nicht quadratisch!

1xn , nxm , mx... , ... xl , lx1

Beispiel für MPS

$$|\psi\rangle = c^{\uparrow\uparrow}|\uparrow\uparrow\rangle + c^{\uparrow\downarrow}|\uparrow\downarrow\rangle + c^{\downarrow\uparrow}|\downarrow\uparrow\rangle + c^{\downarrow\downarrow}|\downarrow\downarrow\rangle$$

singlet state: $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\downarrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow\uparrow\rangle$ $c^{\uparrow\downarrow} \neq c^{\uparrow}c^{\downarrow}$

$$c^{\sigma_1} \cdot c^{\sigma_2} \rightarrow M^{\sigma_1} \cdot M^{\sigma_2}$$

$$M^{\uparrow 1} = [1 \ 0]$$

$$M^{\uparrow 2} = \begin{bmatrix} 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$$

$$M^{\downarrow 1} = [0 \ 1]$$

$$M^{\downarrow 2} = \begin{bmatrix} +\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{bmatrix}$$

works!

- Außerdem: Neue Eichfreiheit!

$$X X^{-1} = 1 \quad M^{\sigma_i} \rightarrow M^{\sigma_i} X \quad M^{\sigma_{i+1}} \rightarrow X^{-1} M^{\sigma_{i+1}}$$

Eichung = SVD ?

- Neue Eichfreiheit nutzen!
→ Singular Value Decomposition

$$A = USV^\dagger \quad U^\dagger U = I \quad V^\dagger V = I$$

- S ist diagonal mit den "Singular values"
 - Voller Informationsgehalt (Verschränkung) bei evtl. Geringerer Dimension → Kompression
- Kurze Information SVD ist nicht EVD

$$A = USV^\dagger \quad AU = U\Lambda$$

Baukasten für MPS?

- Start mit einem Site und nimm den nächsten dazu
- Und nimm den nächsten dazu



$$|a_l\rangle = \sum_{a_{l-1}, \sigma_l} \langle a_{l-1}, \sigma_l | a_l \rangle |a_{l-1}\rangle |\sigma_l\rangle \equiv \sum_{a_{l-1}, \sigma_l} M_{a_{l-1}, a_l}^{\sigma_l} |a_{l-1}\rangle |\sigma_l\rangle$$

Wie sieht man Verschränkung?

- Nimm das System und teile es in A/B

$\{|i\rangle_A\}$ $\{|j\rangle_B\}$

1 l $l+1$ L

$\dim \mathcal{H}_A$ $\dim \mathcal{H}_B$

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{\dim \mathcal{H}_A} \sum_{j=1}^{\dim \mathcal{H}_B} \psi_{ij} |i\rangle_A |j\rangle_B$$

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha=1}^r s_{\alpha} |\alpha\rangle_A |\alpha\rangle_B$$

$$|\alpha\rangle_A = \sum_{i=1}^{\dim \mathcal{H}_A} U_{i\alpha} |i\rangle_A$$

Wie sieht man Verschränkung?

- Dichtematrix

$$\hat{\rho}_A = \text{tr}_B |\psi\rangle\langle\psi| = \sum_{\alpha=1}^r s_{\alpha}^2 |\alpha\rangle_A \langle\alpha| \quad |\psi\rangle = |\alpha\rangle_A |\alpha\rangle_B$$

- Verschränkungsentropie

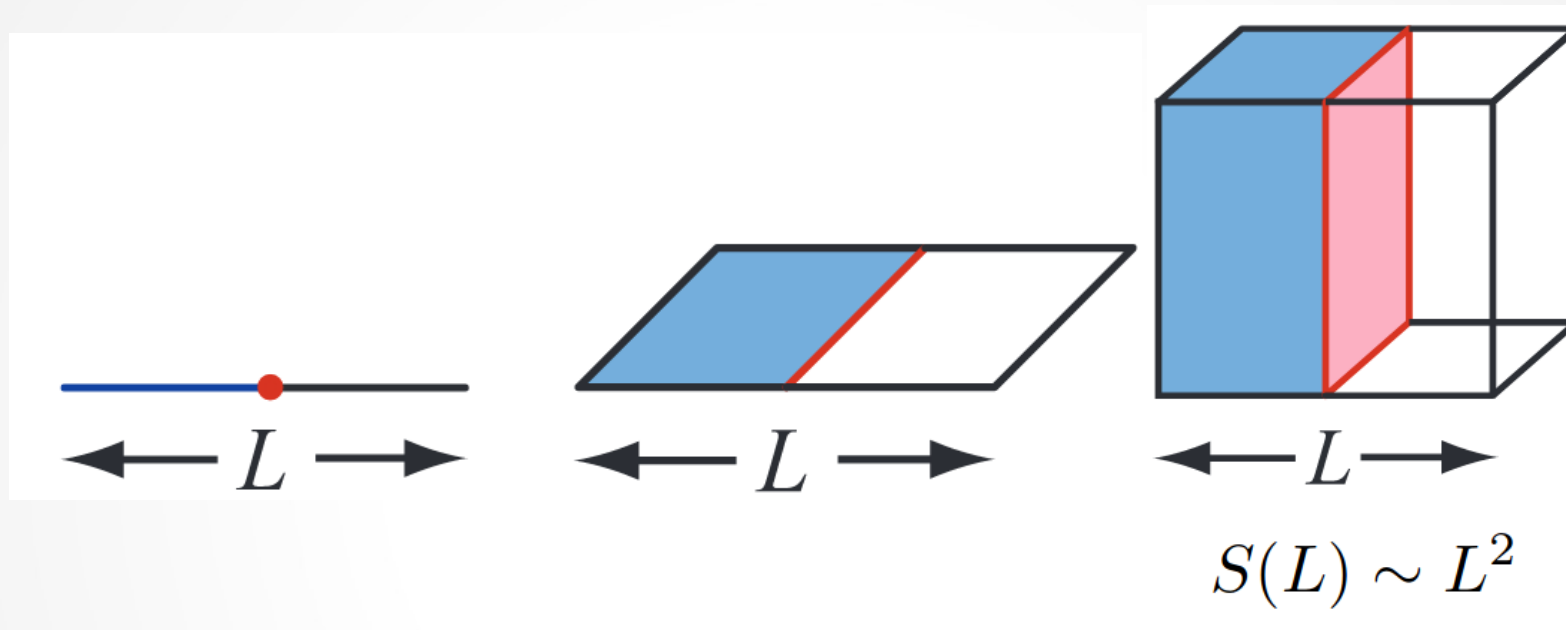
$$S_{A|B}(|\psi\rangle) = -\text{tr}_A \hat{\rho}_A \ln \hat{\rho}_A = -\text{tr}_B \hat{\rho}_B \ln \hat{\rho}_B = -\sum s_a^2 \ln s_a^2$$

- Singlet $\hat{\rho}_A = \hat{\rho}_B = \text{diag}\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \quad -2 \cdot \frac{1}{2} \ln \frac{1}{2} = \ln 2$

- Maximale Entropie $-D \cdot D^{-1} \ln D^{-1} = \ln D$

Warum ist 1D gut?

- Maximale Matrixgröße \sim Verschränkungsentropie



$$S \leq \ln D \Rightarrow D \geq e^S$$

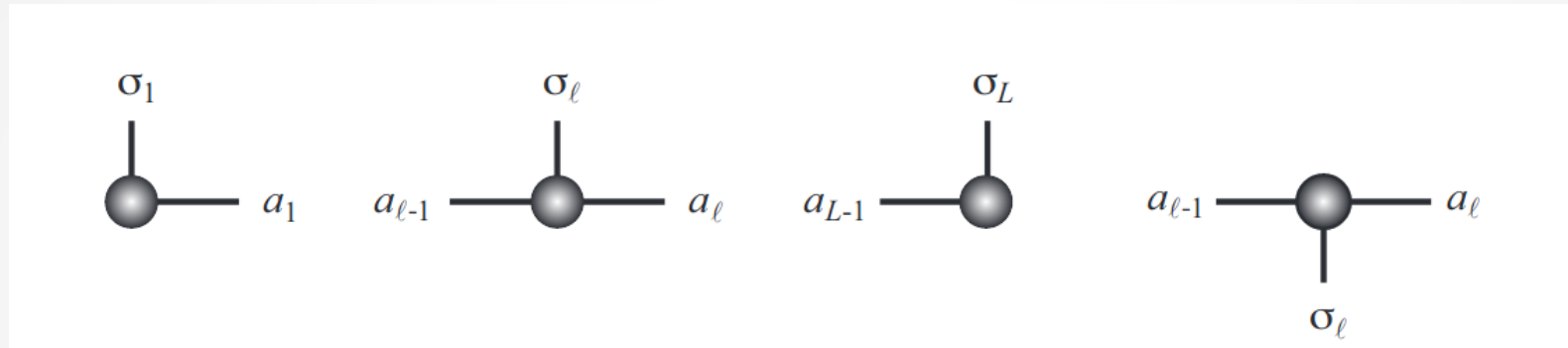
$$D \sim e^{\text{cst.}}$$

$$D > e^L$$

$$D > e^{L^2}$$

Viele Indizes hier und da

- Ein besserer Weg zur Kommunikation der Kalkulation

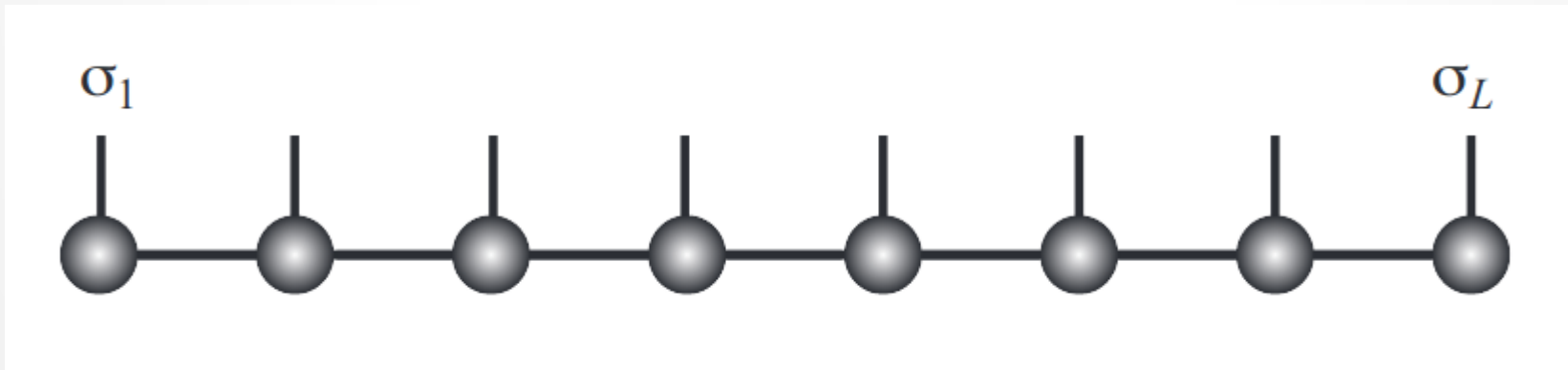


Links

Bulk

Rechts

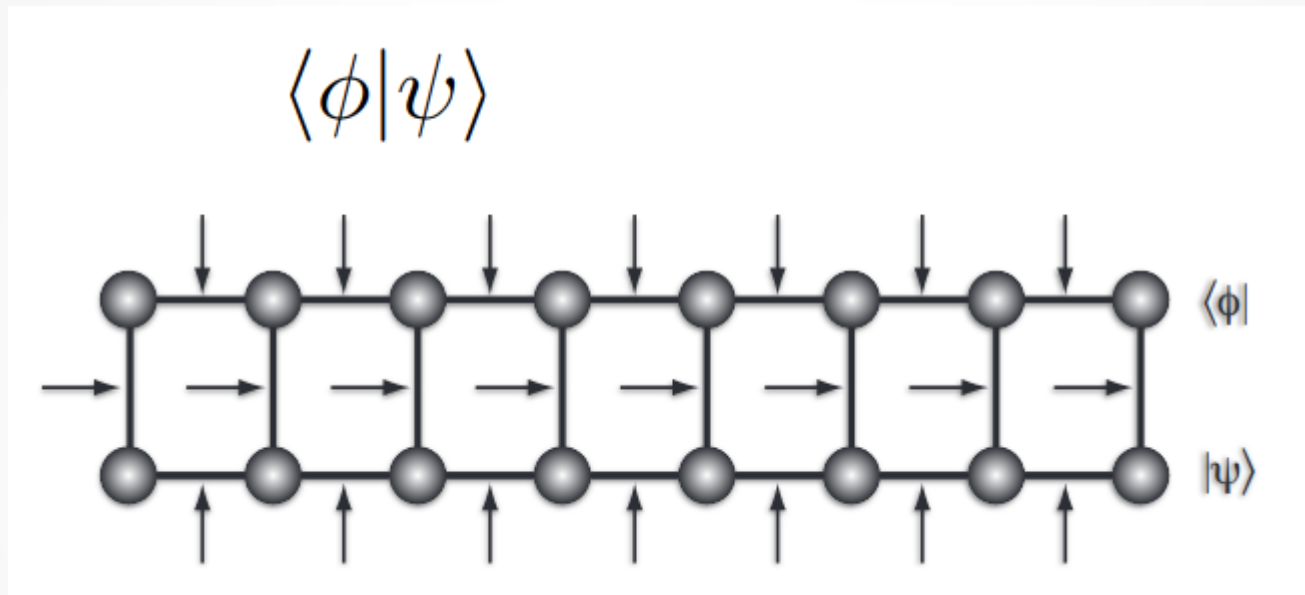
Konjugiert



Kompletter Zustand definiert!

Baukasten für Diagramme

- Skalarprodukt – jetzt als Diagramm



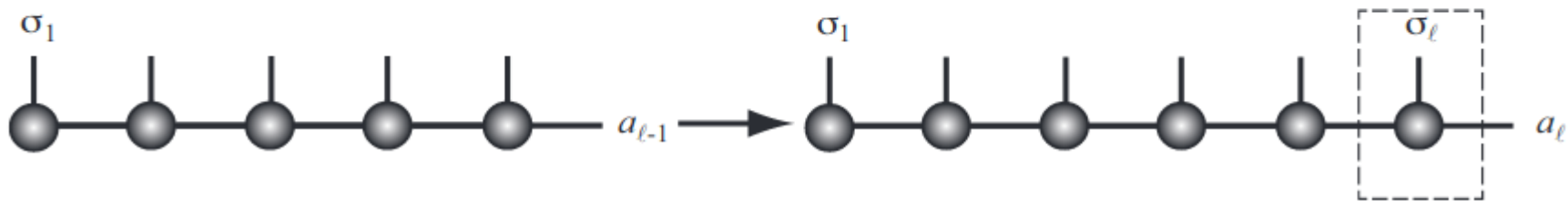
Baukasten für Diagramme

- Renormalisierungsgruppe – jetzt als Diagramm



$$|a_l\rangle = \sum_{a_{l-1}, \sigma_l} \langle a_{l-1}, \sigma_l | a_l \rangle |a_{l-1}\rangle |\sigma_l\rangle \equiv \sum_{a_{l-1}, \sigma_l} M_{a_{l-1}, a_l}^{\sigma_l} |a_{l-1}\rangle |\sigma_l\rangle$$

$$|a_l\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_l} (M^{\sigma_1} M^{\sigma_2} \dots M^{\sigma_l})_{1, a_l} |\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_l\rangle$$



Das waren Zustände

- Wir wissen jetzt wie wir unsere Zustände darstellen und aufbauen.
- Jetzt fehlen nur noch die Operatoren

Jetzt Matrix-Produkt-Operatoren

- Jetzt fehlen nur noch die Operatoren

general operator:

$$\hat{O} = \sum_{\{\sigma\}} \sum_{\{\sigma'\}} c^{\sigma_1 \dots \sigma_L, \sigma'_1 \dots \sigma'_L} |\sigma_1 \dots \sigma_L\rangle \langle \sigma'_1 \dots \sigma'_L|$$

matrix product operator:

$$\hat{O} = \sum_{\{\sigma\}} \sum_{\{\sigma'\}} M^{\sigma_1 \sigma'_1} M^{\sigma_2 \sigma'_2} \dots M^{\sigma_L \sigma'_L} |\sigma_1 \dots \sigma_L\rangle \langle \sigma'_1 \dots \sigma'_L|$$

$$\hat{S}_i^z \rightarrow \hat{I}_1 \otimes \hat{I}_2 \otimes \dots \otimes \hat{S}_i^z \otimes \dots \otimes \hat{I}_L$$

$$c^{\sigma_1 \sigma'_1 \sigma_2 \sigma'_2 \dots \sigma_L \sigma'_L} = \delta_{\sigma_1, \sigma'_1} \cdot \delta_{\sigma_2, \sigma'_2} \cdot \dots \cdot (\hat{S}^z)_{\sigma_i, \sigma'_i} \cdot \dots \cdot \delta_{\sigma_L, \sigma'_L}$$

Jetzt Matrix-Produkt-Operatoren

- Heisenberg-Modell

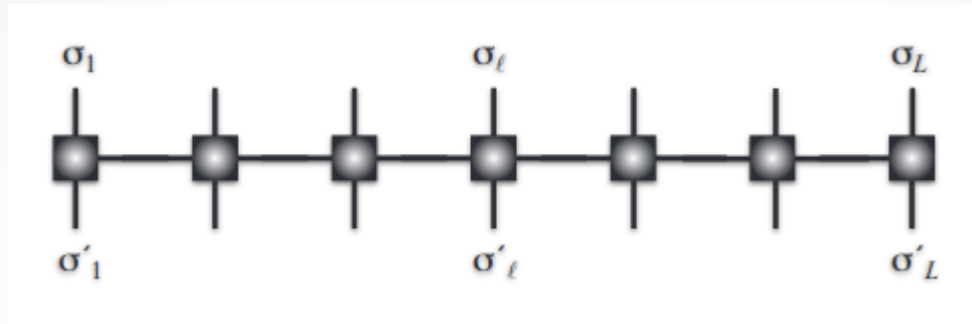
$$\hat{H} = \hat{M}^{[1]} \hat{M}^{[2]} \dots \hat{M}^{[L]} \quad \hat{M}^{[i]} = \sum_{\sigma_i, \sigma'_i} M^{\sigma_i, \sigma'_i} |\sigma_i\rangle \langle \sigma'_i|$$

$$\hat{H} = J \sum_{i=1}^{L-1} \frac{1}{2} (\hat{S}_i^+ \hat{S}_{i+1}^- + \hat{S}_i^- \hat{S}_{i+1}^+) + \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z + h \sum_{i=1}^L \hat{S}_i^z$$

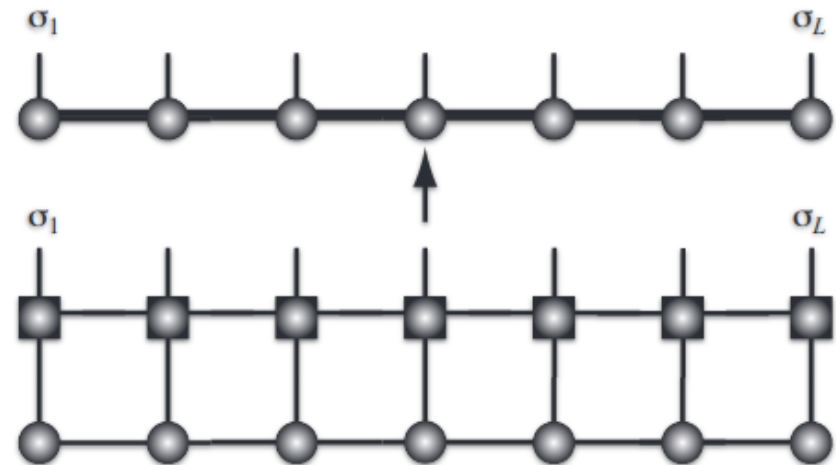
$$\hat{M}^{[i]} = \begin{bmatrix} \hat{I} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hat{S}^+ & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hat{S}^z & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hat{S}^- & 0 & 0 & 0 & 0 \\ h\hat{S}^z & (J/2)\hat{S}^- & J^z \hat{S}^z & (J/2)\hat{S}^+ & \hat{I} \end{bmatrix}$$

Jetzt Matrix-Produkt-Operatoren

- Viele Indizes \rightarrow Her mit den Diagrammen



$$\tilde{M}_{(ab),(a'b')}^{\sigma_i} = \sum_{\sigma'_i} N_{aa'}^{\sigma_i \sigma'_i} M_{bb'}^{\sigma'_i}$$



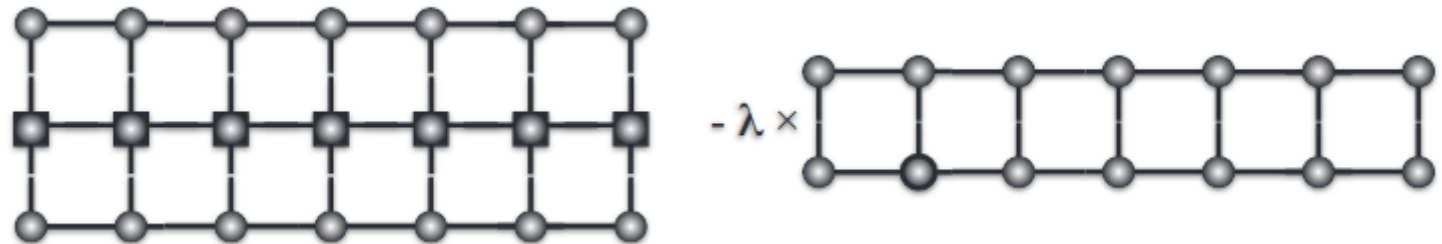
Jetzt kommt Physik

- Wie finden wir damit einen Grundzustand? DMRG

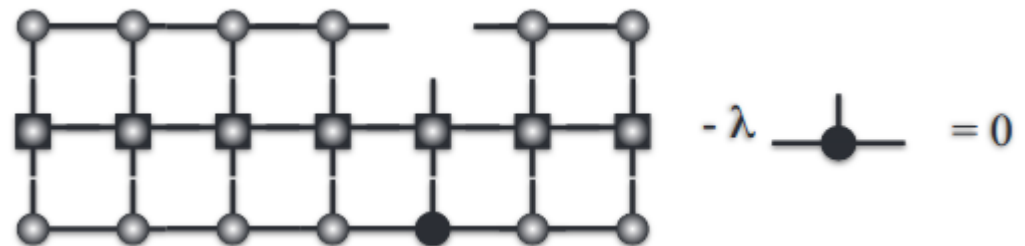
$$\min \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \Leftrightarrow \min \left(\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle - \lambda \langle \psi | \psi \rangle \right)$$

- Nicht so gut

Multilinear



- Sweep the Hotsite
Besser



Alles stationär

- Bis jetzt keine Zeitentwicklung!

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t}|\psi(0)\rangle$$

Alles dynamisch

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t} |\psi(0)\rangle$$

- Suzuki-Trotter

$$N \rightarrow \infty \quad \tau \rightarrow 0 \quad N\tau = T \quad \tau \sim 0.01$$

$$e^{-i\hat{H}T} = \prod_{i=1}^N e^{-i\hat{H}\tau} = \prod_{k=1}^N e^{-i\sum_{i=1}^{L-1} \hat{h}_i \tau} \stackrel{!}{=} \prod_{k=1}^N \prod_{i=1}^{L-1} e^{-i\hat{h}_i \tau}$$

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} e^{\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]}$$

$$\tau \rightarrow 0$$

$$[\hat{h}_i \tau, \hat{h}_{i+1} \tau] \propto \tau^2$$

Alles dynamisch

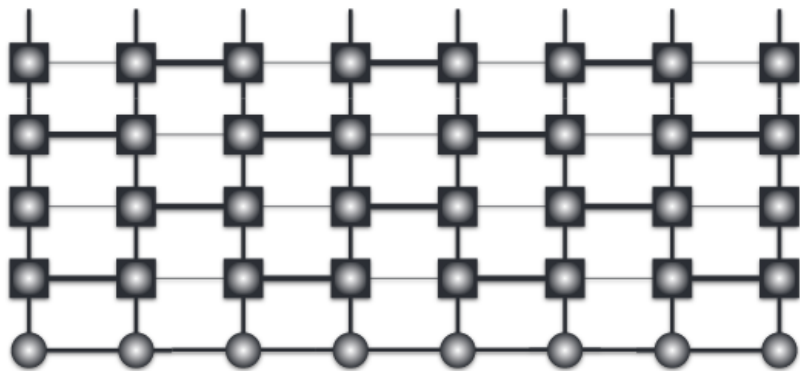
- Suzuki-Trotter meets Heisenberg

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{odd}} + \hat{H}_{\text{even}}; \quad \hat{H}_{\text{odd}} = \sum \hat{h}_{2i-1}, \quad \hat{H}_{\text{even}} = \sum \hat{h}_{2i}$$

$$e^{-i\hat{H}T} = e^{-i\hat{H}_{\text{even}}\tau} e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\tau}; \quad e^{-i\hat{H}_{\text{even}}\tau} = \prod_i e^{-i\hat{h}_{2i}\tau}, \quad e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\tau} = \prod_i e^{-i\hat{h}_{2i-1}\tau}$$

calculation of $e^{-i\hat{h}_i\tau}$ as $(d^2 \times d^2)$ matrix:

$$H_i U = U \Lambda \quad H_i = U \Lambda U^\dagger \Rightarrow e^{-iH_i\tau} = U e^{-i\Lambda\tau} U^\dagger = U \cdot \text{diag}(e^{-i\lambda_1\tau}, e^{-i\lambda_2\tau}, \dots) \cdot U^\dagger$$



even bonds

odd bonds

initial state

one time step: dimension grows as d^2

Alles dynamisch bis zu

- Grenzen der Zeitentwicklung in MPS

$$S(t) \leq S(0) + \text{cst.} \times 2vt$$

- Mehrere Dimensionen
→ Exponentiell mehr Rechenaufwand

Weitere Infos

09.11.1992 S.R.White: *Density Matrix Formulation for Quantum Renormalization Groups* (PRL 69, 2863 (1992))

„This new formulation appears extremely powerful and versatile, and we believe it will become the leading numerical method for 1D systems; and eventually will become useful for higher dimensions as well.“

~2004 old insight „DMRG is linked to MPS (Matrix Product States)“ goes viral

Östlund, Rommer, PRL 75, 3537 (1995), Dukelsky, Martin-Delgado, Nishino, Sierra, EPL43, 457 (1998)

Vidal, PRL 93, 040502 (2004), Daley, Kollath, Schollwöck, Vidal, J. Stat. Mech. P04005 (2004),

White, Feiguin, PRL 93, 076401 (2004), Verstraete, Porras, Cirac, PRL 93, 227205 (2004),

Verstraete, Garcia-Ripoll, Cirac, PRL 93, 207204 (2004), Verstraete, Cirac, cond-mat/0407066 (2004)

(some) reviews:

U. Schollwöck, Rev. Mod. Phys. 77, 259 (2005) - „old“ statistical physics perspective, applications

U. Schollwöck, Ann. Phys. 326, 96 (2011) - „new“ MPS perspective, technical

F.Verstraete, V. Murg, J. I. Cirac, Adv. Phys. 57, 143 (2008) - as seen from quantum information

Vielen Dank

Für eure Aufmerksamkeit

Alle Abbildungen sowie Quellen entstammen dem *Summerschool Script 2017*
U.Schollwöck