

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна
ННІ "Фізико-технічний факультет"
Кафедра фізики ядра та високих енергій імені О.І. Ахієзера

Пояснювальна записка

до дипломного проекту (роботи)

БАКАЛАВРА

на тему

укр. Дослідження магнітних станів у XY моделі Гейзенберга

на стільниковій ґратці

англ. Magnetic states in the XY Heisenberg model

on the honeycomb lattice

Виконав: студент 4-го курсу, групи ТЯ-41
спеціальності 105 прикладна фізика та
наноматеріали

освітня програма: Прикладна фізика

Луганько М.О. _____
(особистий підпис)

Керівник д.ф.-м.н., проф.

Сотніков А.Г. _____
(особистий підпис)

Рецензент к.ф.-м.н., старш. наук. співр.

Пелетминський О.С. _____
(особистий підпис)

АНОТАЦІЯ

У цій роботі досліджено використання теоретичного підходу проєктованих станів заплутаних пар для нескінченних систем (infinite projected entangled pair states, iPEPS) на стільниковій ґратці для визначення магнітних властивостей систем, що описують спіновою моделлю Гейзенберга у наближенні взаємодії між найближчими та наступними за найближчими спінами. Підходи опису систем на базі тензорних мереж є потужним інструментом у дослідженні квантових багаточастинкових систем, що дає змогу ефективно описувати основні та збуджені стани ґраткових моделей. Аналіз отриманих результатів дав можливість виявити критичну точку фазового переходу між двома впорядкованими фазами та характеризувати їх магнітні властивості, зокрема, обчислити намагніченість і кореляційну довжину. Методика iPEPS демонструє високу точність і ефективність у вивченні складних квантових систем, що робить її важливим інструментом у теоретичній фізиці конденсованого стану.

ABSTRACT

This paper investigates the use of the theoretical approach of infinite Projected Entangled Pair States (iPEPS) on a honeycomb lattice to determine the magnetic properties of systems described by the Heisenberg spin model in the approximation of nearest-neighbor and next-nearest-neighbor spin interactions. Tensor network approaches is a powerful tool in the study of quantum many-body systems, allowing for the efficient description of ground and excited states of lattice models. The analysis of the obtained results enabled the identification of the critical point of the phase transition between two ordered phases and the characterization of magnetic properties, particularly, the calculation of magnetization and correlation length. The iPEPS methodology demonstrates high accuracy and efficiency in studying complex quantum systems, making it an important tool in theoretical condensed matter physics.

ЗМІСТ

ВСТУП	5
РОЗДІЛ 1 Огляд літератури	6
1.1 Основні моделі взаємодійних квантових систем багатих частинок у фізиці конденсованого стану	6
1.2 Підходи до дослідження моделі Гейзенберга типу J_1 - J_2 .	8
1.3 Системи зі стільниковою геометрією ґратки	9
РОЗДІЛ 2 Теоретичний підхід тензорних мереж	11
2.1 Мотивація опису за допомогою тензорних мереж	11
2.2 Підхід проєктованих станів заплутаних пар	12
2.3 Особливості побудови підходу	13
2.4 Графічне подання та обчислення спостережуваних величин	15
2.5 Модифікація для нескінченних систем	15
РОЗДІЛ 3 Спінова модель і гамільтоніан на стільниковій ґратці	18
3.1 Гамільтоніан Гейзенберга типу J_1 - J_2	18
3.2 Особливості опису з огляду геометрії ґратки	20
РОЗДІЛ 4 Метод групи перенормувань матриці переносу	22
4.1 Загальні принципи підходу та різновиди тензорів	22
4.2 Основні перетворення тензорів	24
4.3 Приклад застосування	26
РОЗДІЛ 5 Застосування теоретичного підходу	29
5.1 Розрахунки енергії основного стану	29
5.2 Особливості оптимізації і чисельна стабільність	31
5.3 Границя нескінченних систем.	32
5.4 Обчислення градієнтів	32
5.5 Основний алгоритм	33
5.6 Особливості оптимізації	35
РОЗДІЛ 6 Аналіз результатів	36
ВИСНОВКИ	41
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	43

ВСТУП

Квантові ефекти відіграють вирішальну роль у поведінці багатьох фізичних систем, дослідження квантових багаточастинкових систем є ключовими для розвитку сучасної науки та техніки. Серед об'єктів досліджень квантової фізики значне місце займають квантові матеріали з унікальними властивостями, які використовуються в різних галузях.

Одним із найцікавіших напрямів квантово-механічних досліджень є вивчення двовимірних систем на ґратках зі стільниковою структурою. За останні десять років з'явилося багато теоретичних робіт, присвячених таким системам. Ці структури викликають особливий інтерес через свої унікальні електронні та магнітні властивості, що відкривають нові можливості для створення передових матеріалів і пристроїв.

Вивчення властивостей матеріалів зі структурою сот дозволяє поглибити знання про такі важливі характеристики, як провідність, магнітні властивості та інші фізичні параметри. Ці знання мають важливе значення для розвитку нових технологій у галузях електроніки, спінтроніки та нанотехнологій, забезпечуючи фундамент для подальших інновацій.

Метою даної роботи є дослідження фізичних властивостей характерної для зазначених систем теоретичної моделі Гейзенберга квантових спінів на стільниковій ґратці. Усі обчислення були проведені в рамках квантовомеханічного опису систем багатьох частинок з використанням чисельних методів. Отримані теоретичні результати порівнювалися з результатами інших робіт, що дозволяє підтвердити їх достовірність та розширити існуючі знання в цій галузі, роблячи внесок у подальший розвиток квантової фізики, фізики конденсованого стану та матеріалознавства.

РОЗДІЛ 1

Огляд літератури

1.1 Основні моделі взаємодійних квантових систем багатьох частинок у фізиці конденсованого стану

Фізика конденсованого стану речовини є важливою галуззю науки, що вивчає властивості матеріалів у різних фазових станах. Перші дослідження в цій галузі зосереджувалися на вивченні явища феромагнітного впорядкування в кристалічних структурах, і однією з перших моделей, запропонованих для цього, була модель Ленца–Ізінга, розроблена в 1920-х роках. Ця модель стала першим наближенням для вивчення багаточастинкових систем, описуючи ґратку з класичними спінами, що взаємодіють один з одним. Вона стала основою для нового напрямку досліджень у матеріалознавстві та фізиці конденсованого стану.

Після моделі Ізінга з'явилося кілька інших важливих моделей, кожна з яких зробила значний внесок у розуміння різних аспектів властивостей матеріалів [1]:

- **Модель Габбарда:** Ця модель, розроблена незалежно в 1963 році Мартіном Гутцвіллером [2], Джоном Габбардом [3] і Джульєро Канаморі [4], дає змогу вивчати електронні кореляції в системах, де взаємодія між електронами має одну з визначальних ролей. Модель успішно використовують у дослідженнях таких явищ, як локалізація Мотта, магнетизм, надпровідність, фазові переходи в електронних системах тощо [5]. Модель Габбарда (або Фермі–Габбарда) є базовою для вивчення поведінки електронів у вузьких енергетичних смугах і є ключовою для розуміння високотемпературної надпровідності, а також колективної поведінки холодних атомів зі статистикою Фермі–Дірака в оптичних ґратках [6].
- **Модель Андерсона:** Цю модель, запропоновану в 1957 році Філопінгом Андерсоном [7], використовують для вивчення локалізації електронів в неупорядкованих системах, таких як аморфні матеріали або сплави. Вона дає змогу досліджувати перехід метал–діелектрик, відомий як андерсонівська локалізація, де електрони перестають про-

водити струм через наявні хаотичні домішки або дефекти в матеріалі.

- **Модель Бозе-Габбарда:** Описує системи з бозе-частинками, такими як холодні атоми в оптичних ґратках [8]. За її допомогою досліджують різноманітні явища впорядкування дальнього діапазону на ґратках та фазові переходи типу надплинна рідина-ізолятор. Ця модель є важливою для розуміння властивостей ультрахолодних атомних систем і квантових симуляцій.
- **Модель Гейзенберґа:** Ця модель, розроблена Вернером Гейзенберґом у 1928 році [9], є ключовою для вивчення магнітних фазових переходів і критичних явищ. Вона описує взаємодію спінів у магнітних матеріалах і використовується для дослідження квантових спінових систем. За допомогою моделі Гейзенберґа вивчають такі явища, як квантові критичні точки та магнітні впорядковані стани, а також дослідження не обмежуються суто магнітними системами та модель ефективно застосовують, зокрема, в описі фазових переходів у фероелектриках [10].

У даній роботі викладено теоретичний підхід для вивчення фізичних властивостей основного стану системи квантових спінів у моделі Гейзенберґа на гексагональній ґратці. Застосування моделі Гейзенберґа є важливим для дослідження матеріалів, які природно мають стільникову геометрію ґратки. Вивчення спінових ґраток у цих моделях дає змогу досягти глибшого розуміння магнітних властивостей, фазових переходів та інших ключових характеристик матеріалів.

Для досягнення результатів, максимально наближених до реальних властивостей речовини, ми розглядаємо розширену модель Гейзенберґа зі спіном $1/2$ на гексагональній ґратці та зв'язками типу J_1 - J_2 , де враховано взаємодію кожного зі спінів не тільки з його трьома найближчими сусідами (NN взаємодія з відповідною амплітудою J_1), але й з наступними шістьма (NNN взаємодія з відповідною амплітудою J_2). Це дає змогу створювати більш точні та реалістичні моделі для вивчення складних квантових систем багатьох частинок.

1.2 Підходи до дослідження моделі Гейзенберга типу J_1 - J_2

Існує декілька підходів до дослідження властивостей моделі Гейзенберга зі зв'язками типу J_1 - J_2 . Деякі з них використовували апроксимуючі функції для обчислення властивостей ґратки, тоді як інші застосовували комп'ютерні алгоритми для оптимізації стану системи. Один із підходів побудовано в рамках теорії середнього поля, яка базується на самоузгодженому полі спінів на ґратці [11]. Цей метод дає змогу оцінювати властивості системи, враховуючи взаємодії між спінами на макроскопічному рівні.

Теоретичний підхід усередненого поля, що припускає існування впорядкування на великих масштабах, дає змогу аналітично визначити властивості системи [12]. Він полягає в розкладанні гамільтоніану системи відповідно до різних чинників впливу і поданні загальної системи, як хвилі, що розповсюджується системою. Цей спосіб особливо корисний для вивчення низькотемпературних фазових переходів та магнітних властивостей матеріалів.

Метод Монте-Карло є ще одним важливим підходом для дослідження моделі Гейзенберга зі структурою зв'язків типу J_1 - J_2 [13]. Цей метод базується на статистичних вибірках та дає змогу чисельно моделювати поведінку системи з великою кількістю частинок, забезпечуючи високу точність результатів.

Моделі нескінченного розміру можна розглядати двома способами: повну ґратку можна аналізувати цілісно або розбивати на маленькі повторювані плитки. Перший підхід зазвичай спирається на аналітичні методи, оскільки нескінченна система накладає трансляційні симетрії, а також системи мають спінові симетрії типу $SU(2)$. Деякі приклади застосування – підхід спінових хвиль [14].

Модель Гейзенберга з квадратною геометрією ґратки і структурою зв'язків типу J_1 - J_2 також привертає велику увагу дослідників [15]. Дослідження базуються як на повністю нескінченних моделях, так і на моделях обмеженого розміру.

Один з підходів до дослідження системи полягає в аналізі обмежених за розмірами її частин та екстраполяції результатів до всієї системи. Шоу-Шу Гонг та ін. запропонували метод [16], заснований на алгоритмі ренормалізаційної групи матриці густини (density matrix renormalization group,

DMRG). Гексагональну ґратку було відображено на торі, і вони встановили існування антиферомагнітної фази Нееля при $J_2 \leq 0.22$. Такий підхід є ефективним, коли немає необхідності в моделюванні властивостей нескінченної за розмірами ґратки (у так званій термодинамічній межі). Він також дає змогу зрозуміти поведінку системи з меншими обчислювальними витратами, хоча ефекти від граничних умов можуть вносити свій внесок у результати [16].

1.3 Системи зі стільниковою геометрією ґратки

Дослідження гамільтоніану на гексагональній ґратці зі взаємодією між найближчими і наступними за близькістю сусідами є надзвичайно важливим для розуміння ряду квантових матеріалів з унікальними фізичними властивостями. Один з найбільш відомих прикладів – графен, двовимірний матеріал з атомів вуглецю, розташованих у вигляді стільникової ґратки. Завдяки своїм електронним властивостям, графен має надзвичайно високу провідність і міцність, що робить його надзвичайно затребуваним для використання в електроніці та нанотехнологіях.

Крім графену, до матеріалів з гексагональною геометрією ґратки включають також гексагональний нітрид бору (h-BN) та різні дихалькогеніди перехідних металів, які демонструють широкий спектр електронних і магнітних властивостей. Вивчення цих матеріалів за допомогою моделей з найближчою і наступною за найближчою взаємодією дає змогу розкрити механізми їхньої провідності, магнетизму та інших фізичних характеристик.

Феромагнетики та антиферомагнетики зі стільниковою геометрією ґратки, такі як хромій трийодид CrI_3 або нікель-перехідні дихалькогеніди, також можна описати за допомогою подібних гамільтоніанів. Взаємодії між спінами сусідніх атомів в таких матеріалах визначають їхні магнітні властивості, включно з температурою Кюрі або Нееля, відповідно, та нелінійні магнітні явища.

Крім того, дослідження топологічних ізоляторів та квантових спінових рідин на гексагональній ґратці розкриває нові напрямки в квантовій фізиці. У цих матеріалах взаємодії між частинками можуть призводити до виникнення топологічних фаз і захищених крайових станів, які мають потенціал для використання в топологічних квантових комп'ютерах та інших

новітніх технологіях. На цей момент вже проведені дослідження топологічних властивостей для зазначеної моделі в рамках теорії середнього поля [17].

Таким чином, дослідження гамільтоніанів з найближчою і наступною за найближчою взаємодіями на стільникових ґратках є важливим кроком у розумінні та описі різноманітних квантових багаточастинкових систем, що мають значний потенціал для практичного застосування в сучасній науці та техніці.

РОЗДІЛ 2

Теоретичний підхід тензорних мереж

2.1 Мотивація опису за допомогою тензорних мереж

Цю роботу безпосередньо присвячено теоретичному дослідженню проблеми багатьох тіл для квантової системи. Квантова проблема багатьох тіл призвела до створення всеосяжного апарату для опису фазових переходів в термінах «ефективних теорій поля» і групи перенормування. Центральною проблемою проблеми багатьох тіл є можливість передбачити фазову діаграму для фізичних класів мікроскопічних гамільтоніанів і передбачити пов'язані з ними відповідні термодинамічні величини, фазові переходи, параметри порядку, спектри елементарних збуджень тощо. Ще одним викликом є передбачення пов'язаної з цим нерівноважної поведінки в термінах таких величин, як фактори структури, коефіцієнти переносу та швидкості термалізації [18].

Основна складність у питаннях фізики багатьох тіл випливає з особливостей масштабування фазового простору: кількість ступенів вільності експоненційно зростає в залежності від кількості компонентів та/або розміру системи. Центральною метою у цьому типі задач, зокрема, для квантових систем, є пошук ефективного подання для стиснення відповідних систем хвильових функцій таким чином, щоб всі термодинамічні величини, такі як енергія, намагніченість, ентропія тощо могли бути ефективно визначені з цього опису.

Опис повної тензорної мережі, записаної у вигляді коефіцієнтів хвильової функції, може бути не таким ефективним. Наприклад, для системи з N частинок зі спіном $1/2$, що розташовані на вузлах кристалічної ґратки, розмірність гільбертового простору дорівнює 2^N , тобто експоненційно зростає з кількістю частинок. Отже, опис квантової системи багатьох тіл коефіцієнтами хвильової функції в локальному базисі є сильно обмеженим і певною мірою неефективним. Але, оскільки гамільтоніан також накладає певні умови на систему, це також звужує простір станів, в якому потрібно шукати. Отже, можна використати інші механізми стиснення станів [19]. Одним з таких підходів є подання хвильової функції у вигляді проєктованих станів заплутаних пар (projected entangled pair states, PEPS).

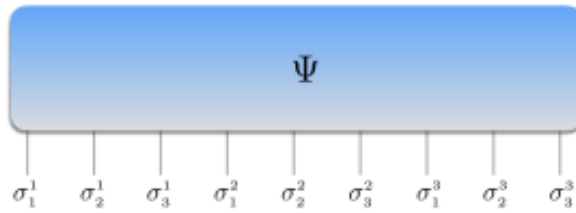


Рис. 2.1: Графічне подання тензора, що визначає повну хвильову функцію системи частинок зі спіном $1/2$ на ґратці розмірами 3×3 [20].

2.2 Підхід проєктованих станів заплутаних пар

Наприклад, якщо ми розглянемо систему з N спінів з абсолютним значенням спіну $\frac{1}{2}$, то коефіцієнт хвильової функції буде представлено тензором рангу N , що діє на вектор стану $|\sigma_1\rangle \otimes |\sigma_2\rangle \otimes \dots \otimes |\sigma_N\rangle$ (див. також рис. 2.1). У записі Дірака представлення хвильової функції можна записати як

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N} \Psi_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N} |\sigma_1\rangle \otimes |\sigma_2\rangle \otimes \dots \otimes |\sigma_N\rangle, \quad (2.1)$$

Такий запис має істотний недолік, який пов'язаний з експоненційним масштабуванням за розміром системи. Кількість окремих числових значень для зберігання хвильової функції у пам'яті комп'ютера у такому випадку буде d^N , де d – кількість станів для кожного спіну, а N – кількість спінів. Якщо розглядати приклад з електронами (з проєкціями спіну $\pm 1/2$) на вузлах ґратки, то розмірність простору для локального стану $d = 2$, а загальна розмірність для системи спінів стає 2^N , тобто, це стає задачею з експоненційним зростанням обчислювальних ресурсів із лінійним збільшенням розмірів системи. Відповідно за такого підходу, точно моделювати системи з великою кількістю спінів співзставними з есперементальними стає майже неможливою задачею з наявними обчислювальними можливостями.

Іншим підходом є метод проєктованих станів заплутаних пар (projected entangled pair states, PEPS), який уникає експоненціального зростання, замінюючи його поліноміальним масштабуванням. Це досягається розумінням того факту, що кореляційна довжина не є нескінченною і відповідно нескінченну систему можна замінити скінченною кількістю тензорів [19]. Якщо ж коефіцієнти розкладання представляти у записі Дірака, то ця ма-

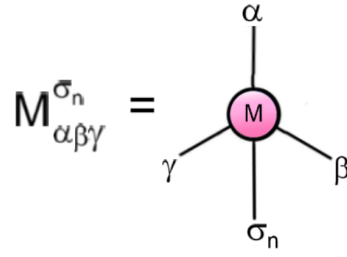


Рис. 2.2: Локальний тензор мережі, який відповідає одному вузлу гексагональної ґратки.

триця буде враховувати усі взаємодії, хоча через обмеженість кореляційної довжини дальні збурення не будуть робити внески.

Поліноміальна швидкість зростання досягається розкладанням великого тензора на малі, які зазвичай відповідають кожному спіну на вузлі та зв'язані між собою на за типом ґратки. Відповідно тензори можна зв'язати між собою, щоб отримати властивості взаємодійної системи [20].

У цій роботі ми розглянемо ґратку з гексагональною структурою. Для такого типу ґратки кожен тензор на вузлі з'єднаний з трьома сусідніми тензорами на сусідніх вузлах (див. рис. 2.2). Тоді подання одного тензору, що відповідає одному спіну у PEPS можна записати у такому вигляді:

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha_k \beta_l \gamma_m} \bigotimes_{i=1}^N M_{\alpha_k \beta_l \gamma_m}^{\sigma_n} |\sigma_i\rangle, \quad (2.2)$$

де $\alpha_k \beta_l \gamma_m$ – це ніжки, що відповідають взаємодії з іншими спінами, їх і називають уявними, а n – ві двідає фізичним ніжкам, які і використовуються для знаходження вимірювальних. Кожен тензор M має набір віртуальних індексів, які з'єднують тензори один з одним – на рис. 2.2 вони відповідають індексам α, β, γ , а також фізичні індекси σ^n , що відповідають локальним спіновим станам. Отже, віртуальні ніжки відповідають за обмін інформацією (кореляції) між спінами, наприклад, за запутаність та взаємодію з системою в цілому.

2.3 Особливості побудови підходу

В результаті опису системи за допомогою PEPS виникає важливий параметр – розмірність зв'язку D , що відповідає за врахування запутаності всередині системи. Його числове значення відповідає лінійним розмірам

простору кожної з віртуальних ніжок (тобто, вимірності відповідного векторного простору). Цей параметр також відомий як D -фактор. D -фактор визначає розмірність зв'язку, які відповідають за кожен зі спінів у системі. Чим більше ця розмірність, тим більше заплутаності та інформації про систему може зберігати PEPS. Водночас, збільшення цієї розмірності зменшує вплив на точність із кожним збільшенням через спадання заплутаності з віддаленням взаємодійних частин. Це є наслідком так званого правила площі, тобто зі збільшенням системи у випадку локальної взаємодії ентропія заплутаності зростає пропорційно площі, а не об'єму системи. Також варто зазначити, що чисельні обчислення стають більш вимогливими зі збільшенням розмірності D .

Підхід PEPS є потужним інструментом для розкладання станів для будь-якого типу системи, але за врахування усіх взаємодій у системі він не дає значної переваги порівняно з традиційним записом Дірака. Для отримання точного розв'язку після скорочення на $\alpha_k \beta_l \gamma_m$ всі матриці M мають перетворитись у $|\psi\rangle$. Це означає, що розмірність для великої системи зростатиме експоненційно, що робить обчислення вкрай складними для великих систем.

Для подолання цієї проблеми ми апроксимуємо взаємодію-заплутаність за допомогою проекторних матриць під час поглинань. Проекторні матриці дозволяють зменшити розмірність системи, зберігаючи при цьому основну інформацію про заплутаність. Це значно покращує ефективність обчислень і дозволяє працювати з більшими системами. Процес побудови та використання проекторних матриць буде докладно описаний у наступних параграфах.

Обмеження розмірності зв'язку тензорів M має свою ціну: лише підмножина станів може бути ефективно представлена за допомогою PEPS, оскільки D також обмежує максимальну кількість заплутаності, яка може бути відображена конструкцією. На щастя, це цілком відповідає закону розподілу ентропії заплутаності у двовимірному просторі, якому повністю задовольняє PEPS представлення. Отже, PEPS ідеально підходить для апроксимації низькоенергетичних станів, включаючи основний стан локальних розривних гамільтоніанів у двох вимірах. Хоча це твердження ще не можна покласти на такий математично строгий фундамент, як для одновимірних

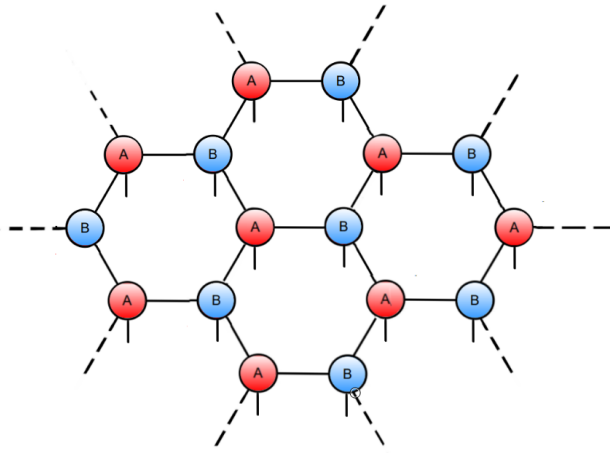


Рис. 2.3: PEPS представлення хвильової функції на гексагональній ґратці.

систем, воно має чітке підтвердження чисельними результатами.

2.4 Графічне подання та обчислення спостережуваних величин

У підході PEPS квантовий стан можна зобразити як показано на рис. 2.3. Згідно з цим, кожне коло представляє тензор стану спіну, а кожна лінія – індекси тензора. Лінії, які з'єднують тензори всередині стану, називають уявними ніжками, а лінії, які не з'єднуються – фізичними ніжками. Фізичні ніжки використовуються для зв'язку вимірювання спостережуваних величин, і кожна фізична ланка є індексом певного стану. Уявні ніжки представляють зв'язки між різними вузлами тензорної мережі.

Щоб знайти будь-яку спостережувану величину O потрібно обчислити

$$O = \frac{\langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (2.3)$$

де \hat{O} – оператор спостережуваної величини, а $|\Psi\rangle$ – стан. Наприклад, обчислення деякої змінної на двох сусідніх тензорах можна подати у вигляді

2.5 Модифікація для нескінченних систем

Якщо граничними ефектами можна або потрібно знехтувати, то можна використати анзац типу PEPS для нескінченних систем (infinite PEPS, iPEPS) [21]. Підхід iPEPS є продовженням ідеї PEPS, але з нескінченно великою системою. По-перше, потрібно вибрати елементарну комірку, це можна зробити за допомогою умов, що базуються на трансляційній інваріантності. У нашій системі елементарною коміркою є два сусідніх спіни

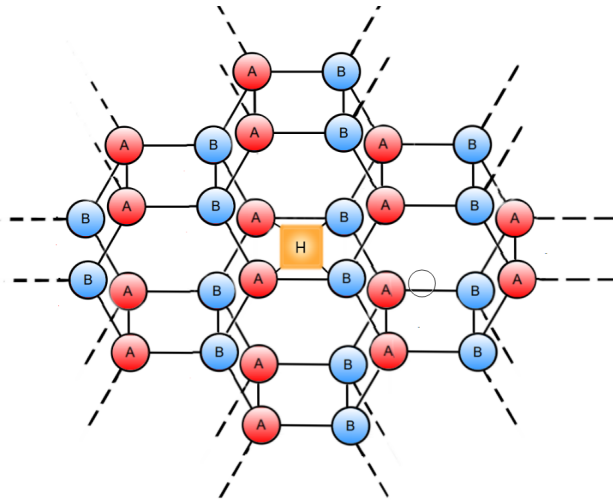


Рис. 2.4: Графічне зображення обчислення спостережуваних у підході PEPS на гексагональній ґратці з елементарною коміркою, що містить два вузли (тобто, два типи тезорів: A і B).

системи, оскільки система може мати антиферромагнітне впорядкування. Такою коміркою (дімером) можна заповнити всю систему.

Унікальною особливістю алгоритмів iPEPS є можливість використання симетрій. Симетрії можуть спростити тензори M та тензори оточення, які будуть докладніше обговорюватись нижче. З попередніх досліджень [22] було знайдено, що для таких типів взаємодії стільникової системи двовузлова плитка є оптимальною за таких інтервалів параметрів системи, коли NN взаємодія є домінуючою. Для J_2 , більших за 0.35, плитка з двома вузлами не може бути добрим наближенням системи через посилення NNN взаємодії. Наприклад, стільниковий, де на кожен тензор у вершинах гексагона відповідає кожному окремому тензору, який може зберігати більш складні взаємодії.

Підхід та відповідне подання iPEPS відрізняється від PEPS для скінченних систем такими характеристиками:

- iPEPs описує нескінченні за розмірами системи. Як наслідок, граничними ефектами можна знехтувати через обмежену відстань заплутання.
- Зазвичай нескінченно велику систему можна представити плиткою, яка набагато менша за всю систему, але може містити всю необхідну інформацію про систему.

Завдяки симетриям гамільтоніанів типу C_3 і U_2 нескінченна система мо-

же бути відтворена з невеликої підсистеми («плитки»). Плиткою зазвичай називають систему, яка представляє всю необхідну інформацію для реконструкції усієї системи. Плитка представляє всю необхідну інформацію для відтворення всієї системи з достатньою точністю, відображаючи всі необхідні взаємозв'язки всередині системи з достатньо високою точністю.

Для обчислення спостережуваного тільки на плитці та екстраполяції результату на всі вузли необхідно згорнути всі тензори з нескінченного середовища до обмеженої кількості тензорів, для чого було використано алгоритм групи перенормувань матриці переносу. Оскільки гамільтоніан зберігає лише взаємодію «сусід з сусідом» та «наступний сусід з сусідом», то далекі взаємодії будуть зменшувати вплив через зменшення заплутаності від кореляції між спінами. Отже, все оточення можна замінити кількома тензорами, які уявно замінять всі взаємодії всередині системи з плитки.

Таким чином, все оточення можна замінити кількома тензорами, які уявно замінюють всі взаємодії всередині системи з плитки. Це значно спрощує обчислення і дозволяє отримувати точні результати для великих систем за допомогою відносно невеликої кількості обчислень.

Загалом, використання iPEPS у поєднанні з алгоритмом групи перенормувань матриці переносу дає змогу ефективно моделювати нескінченні квантові системи, зберігаючи високу точність результатів і оптимізуючи обчислювальні ресурси.

РОЗДІЛ 3

Спінова модель і гамільтоніан на стільниковій ґратці

3.1 Гамільтоніан Гейзенберга типу J_1 - J_2

У нашому дослідженні використовується гамільтоніан Гейзенберга, специфічна форма, похідна від гамільтоніану Габбарда, коли на кожному вузлі ґратки може знаходитись лише один електрон [23]. Ми керуємось концепцією зменшення структурної складності, підкреслюючи, що не обов'язково розглядати всі елементи системи одночасно. Наприклад, ми можемо окремо розглядати магнітне впорядкування та взаємодії вищих порядків, що виходять за межі найближчих сусідів. За відсутності магнітного поля взаємодії між спінами є виключно парними. Ця специфіка спрощує вивчення динаміки системи [1].

Досліджувана система демонструє фрустрацію, зумовлену квантовою природою спінів. Прикметною особливістю є те, що поворот усіх спінів на довільний кут не змінює фізичних спостережуваних величин. Через відсутність виділеного напрямку (магнітного поля) важливим є лише відносний кут обертання спінів. Цей сценарій може призвести до того, що називається «порядок через безлад» – явища, яке потребує подальшої перевірки.

Далі ми обговорюємо гамільтоніан у термінах одночастинкових і дво-частинкових операторів. Ми зосередимось на взаємодії всередині та між найближчими і наступними найближчими сусідами, будуючи систему з багатьма тілами, впорядковану у вигляді стільникової ґратки.

Важливою частиною нашого аналізу є спіновий гамільтоніан Гейзенберга типу XXZ, який у нашому випадку має особливу умову $J_z = 0$. Таку модель ще називають спіноюю моделлю Гейзенберга типу XY. Це вказує на те, що спінова взаємодія відбувається лише у відповідній площині xy спінового простору. Таке спрощення призводить до суттєвих наслідків для симетрії системи та її теоретичного підґрунтя.

Таким чином, ми записуємо гамільтоніан

$$\mathcal{H} = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^+ \cdot S_j^- + h.c.) + J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} (S_i^+ \cdot S_j^- + h.c.), \quad (3.1)$$

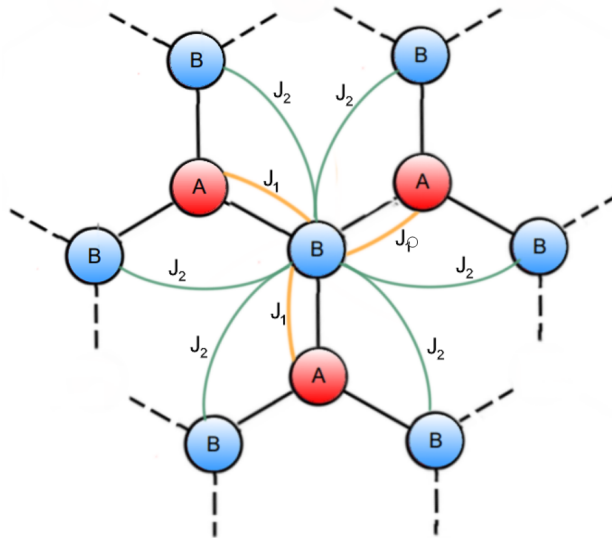


Рис. 3.1: Зображення основних взаємодій у моделі Гейзенберга типу J_1 - J_2 на стільниковій ґратці з двопідґратковою структурою

де позначення $\langle i, j \rangle$ і $\langle\langle i, j \rangle\rangle$ відповідають найближчій і наступній найближчій взаємодії. Відповідні зв'язки на гексагональній ґратці можна зобразити, як показано на рис. 3.1.

Гамільтоніан має різні типи симетрії, кожен з яких має свої фізичні наслідки:

1. **Трансляційна симетрія:** Якщо ґратка нескінченна або періодична (як у кристалі), цей гамільтоніан є інваріантним при зсувах.
2. **Симетрія спінового обертання $U(1)$ і відбиття \mathbb{Z}_2 :** За відсутності зовнішнього магнітного поля і за умови ізотропної взаємодії гамільтоніан є інваріантним при глобальних обертаннях усіх спінів у площині XY та зміни орієнтації вісі Z у спіновому просторі (дискретна симетрія \mathbb{Z}_2).
3. **Симетрія відбиття:** Якщо ґратка має симетрію відбиття (дзеркальну симетрію), то гамільтоніан також буде інваріантним при операціях відбиття.
4. **Симетрія обернення часу:** Якщо припустити, що немає складних фаз у константах зв'язку або магнітних полях, які порушують цю симетрію, то система є інваріантною при оберненні часу.

5. **Інверсійна симетрія:** Для певних конфігурацій ґратки, якщо існує точка інверсії, система може демонструвати інверсійну симетрію. Ця симетрія означає, що побудова просторово зворотної системи через цю точку не змінює енергію системи.

Кожна з вищеназваних симетрій представлення у нашому випадку.

3.2 Особливості опису з огляду геометрії ґратки

Стільникова (або гексагональна) ґратка задається просторовою структурою, що представлена у вигляді правильних шестикутинків. Така ґратка визначається тим, що у перетинах сторін (ребер), тобто, вузлах ґратки знаходяться спіни, а ребрам ґратки відповідають зв'язки між спінами (уявні ніжки тензорів). Стільникова ґратка є унікальною через свою геометрію, яка відрізняється від традиційних квадратних або трикутних ґраток. Основні характеристики стільникової ґратки включають:

- **Шестикутна структура:** На відміну від квадратної ґратки, де кожен вузол має чотири сусіди, у стільниковій ґратці кожен вузол має трьох сусідів. Це створює багатшу структуру взаємодій і дає змогу досліджувати нові квантові ефекти, які не можна спостерігати в інших типах ґраток.
- **Анізотропія взаємодій:** Шестикутна структура стільникової ґратки підтримує різні типи анізотропних взаємодій, що робить її ідеальною для вивчення складних магнітних фаз і фазових переходів, наприклад, моделі Кітаєва [24]. У випадку зі спіновим гамільтоніаном Гейзенберґа типу XXZ , це дає змогу вивчати як вплив взаємодії між найближчими, так і наступними за найближчими спінами.
- **Фрустрація спінів:** У стільниковій ґратці може виникати спінова фрустрація – розлад у виборі оптимальної просторової орієнтації для всіх спінів, коли енергії на всіх зв'язках між спінами не можуть бути одночасно мінімізовані. Це призводить до появи нових фаз і квантових станів, таких як спінові рідини, які є об'єктом інтенсивних досліджень у сучасній фізиці конденсованого стану [25].
- **Симетрії ґратки:** Стільникова ґратка має дискретні симетрії типу C_3 та U_2 і інші, які спрощують аналіз та моделювання системи. Ці

симетрії дають змогу зменшити розмірність задачі, використовуючи лише невелику підсистему для реконструкції всієї системи.

РОЗДІЛ 4

Метод групи перенормувань матриці переносу

4.1 Загальні принципи підходу та різновиди тензорів

Для обчислення фізичних величин у рамках анзацу типу PEPS для нескінченних систем (infinite PEPS, iPEPS) постає необхідність згорнути всю тензорну мережу, і це стає нетривіальною задачею з огляду нескінченних розмірів ґратки. Метод групи перенормувань матриці переносу (corner transfer renormalization group, CTMRG) [26–28], адаптований певною мірою для стільникової геометрії ґратки [22, 29], дає змогу уявно замінити середовище на обмежену кількість тензорів, що спрощує задачу. Таким чином, цей підхід ефективно враховує заплутаність та взаємодії у великих системах, що робить його потужним інструментом для вивчення властивостей таких матеріалів.

Основна ідея CTMRG полягає в тому, що якщо ми маємо нескінченне оточення однакових плиток, то можливо знайти такі тензори, що після поглинання оточуючого шару тензори CTMRG не зміняться. У цьому випадку, якщо ми обчислюємо енергію лише для двох заданих тензорів, то стиснення з нескінченним оточенням не змінить результат, якщо ми використовуємо кутові матриці переносу [28].

Як і в прямокутній CTMRG [26, 27], для стільникової геометрії ґратки [22, 29] задаються декілька типів тензорів. Деякі типи відповідають за перетворення кутових тензорів а інші відповідають за перетворення крайових станів матричних добутоків (boundary matrix product state, bMPS).

Крайові тензори. Спочатку розглянемо такі тензори, які відповідають за поглинання нескінченно довгої лінії (див. рис. 4.1 нижче). Тензори R_A та L_A – це деякі тензори що дозволяють поєднувати тензори A і B наступним чином, а їх властивості ми дізнаємося згодом.

Уявімо, що нам потрібно поглинути один ряд тензорів, як зображено на рис. 4.1(a). Якщо ми подивимось лише на ніжки, які не є внутрішніми, то отримаємо варіант, який зображено на рис. 4.1(b). Тоді такі пусті тензори треба замінити одним з вже відомих тензорів (A, B, L_A, R_B, L_B, R_B). Ми бачимо що єдиним варіантом є результат, який зображено на рис. 4.1(c). Тоді

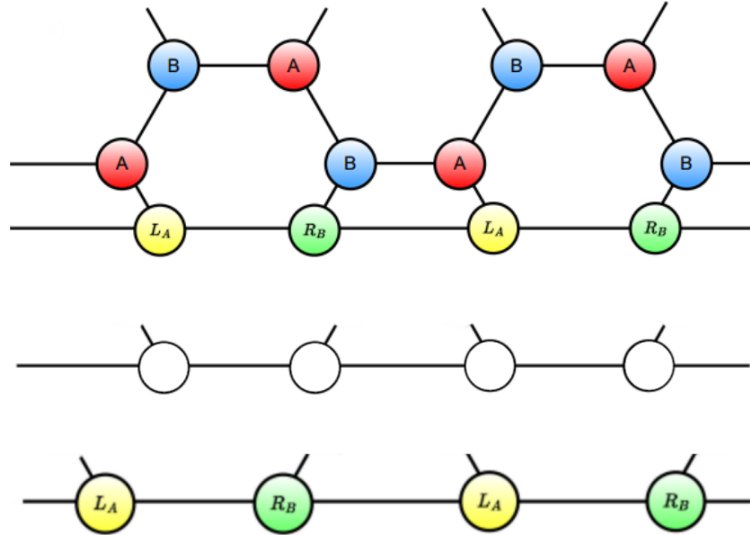


Рис. 4.1: Поглинання граничного ряду тензорів.

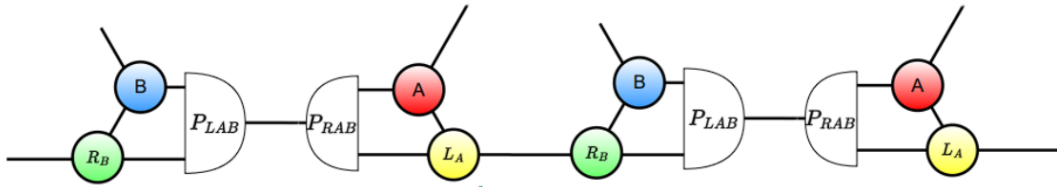


Рис. 4.2: Використання проекторів для поглинання граничного шару.

функція тензорів L_A, R_B, L_B, R_B полягає в поглинанні (заміні) граничних тензорів.

Тепер розглянемо покроково, як поглинаються тензори. Розмірність прямих, які з'єднують тензори L і R , дорівнює χ , а розмірність на прямій, яка з'єднує тензори A і B – D . Таким чином, якщо ми просто замінимо зв'язок AL_A на тензор R_B за одним з індексів розмірність R_B збільшиться з χ до $\chi + D$, яка після нескінченної кількості поглинань буде прямувати до нескінченності. Для запобігання цьому використовуються проекційні оператори. Проекційні оператори проєктують підпростір $\chi + D$ на розмірність χ . Такий крок контрольовано дозволяє втратити частину інформації про систему, але дає змогу обмежити зростання розмірності зв'язків. Для знаходження проекційних тензорів ми використовуємо метод, який графічно зображено на рис. 4.3, а також детально описано у роботі [22].

Кутові тензори. Всі кутові тензори (boundary MPS, bMPS) можуть бути тільки в трьох колінарних напрямках, тому кількість можливих перетинів bMPS обмежена. Розглянемо їх і подивимось, як вони трансформую-

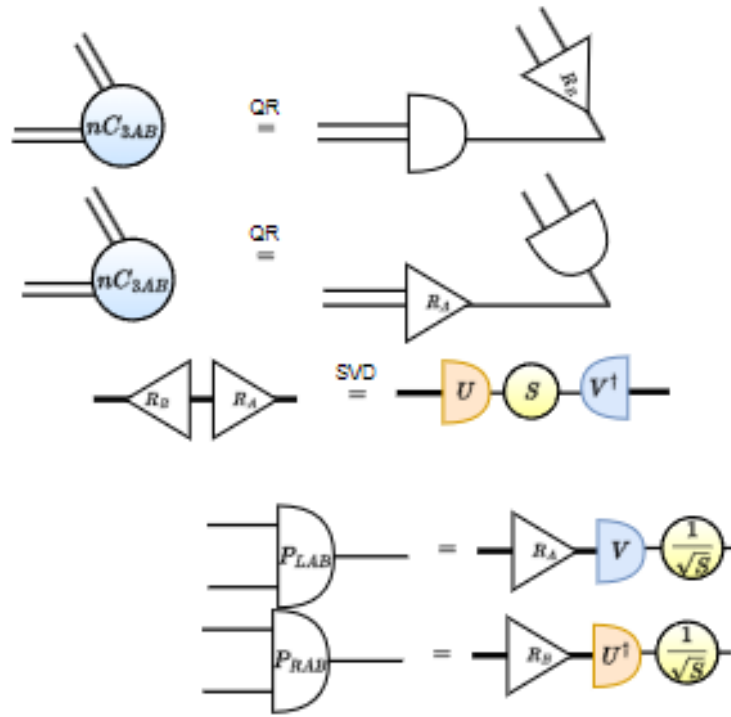


Рис. 4.3: Графічні зображення методів отримання проекторів.

ться. Три варіанти перетинів є можливими для bMPS, розглянемо нижче кожен з них з відповідними правилами.

4.2 Основні перетворення тензорів

Перетворення $C_{6,o,A} \rightarrow T_A$. Після поглинання тензорів кута стану необхідно зробити так, щоб даний кут перетворився в один з інших кутів структур або сам в себе за самореplikативним правилом. Розглянемо кутовий тензор типу $C_{6,o,A}$, як зображено на рис. 4.4. Як ми бачимо, після поглинання bMPS такий кут залишиться. Дивлячись на геометрію тензора, єдиним відповідним тензором буде T

Перетворення $T_A \rightarrow C_{6,i,A}$. Розглянемо інший перетин bMPS, де частиною його є тензор T_A , як зображено на рис. 4.5. Тензори зліва $B - R_b$ і справа $B - L_B$ перетворимо до L_A і R_A відповідно. Такий кут слід замінити на C_6 , але оскільки оточуючі тензори відрізняються від випадку $C_{6,o,A}$, то це має бути інший тип тензорів і, відповідно, перетворення матиме вигляд, як зображено на рис. 4.5.

Перетворення $C_{6,i,A} \rightarrow C_{6,,A}$. Розглянемо останній вид перетину bMPS для достатнього опису системи. Цей перетин зображено на рис. 4.6. Пі-

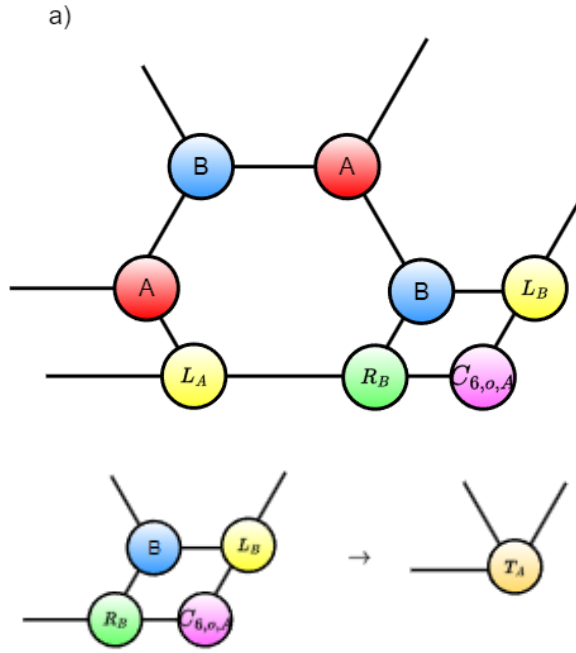


Рис. 4.4: Перетин vMPS з $C_{6,o,A}$ і правило переходу для $C_{6,o,A}$.

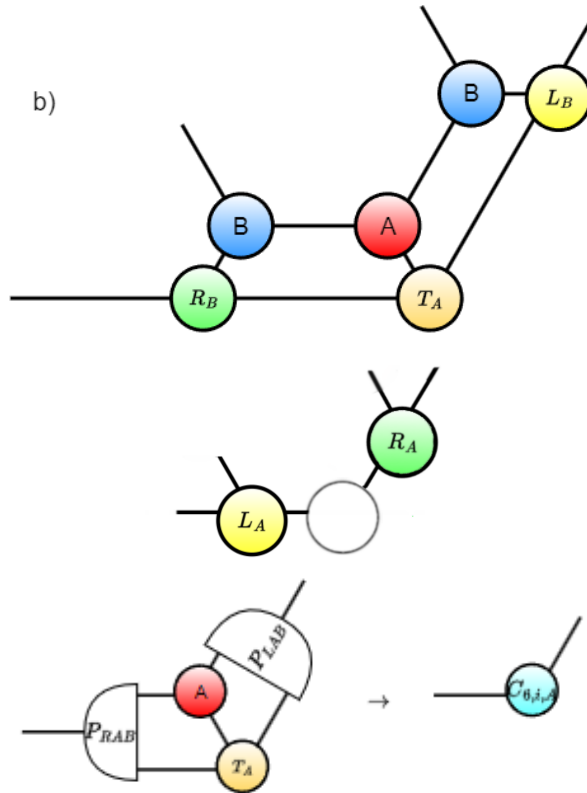
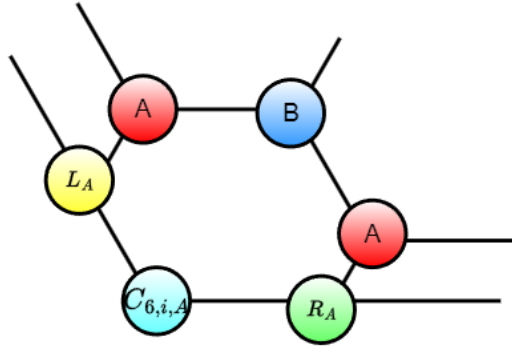
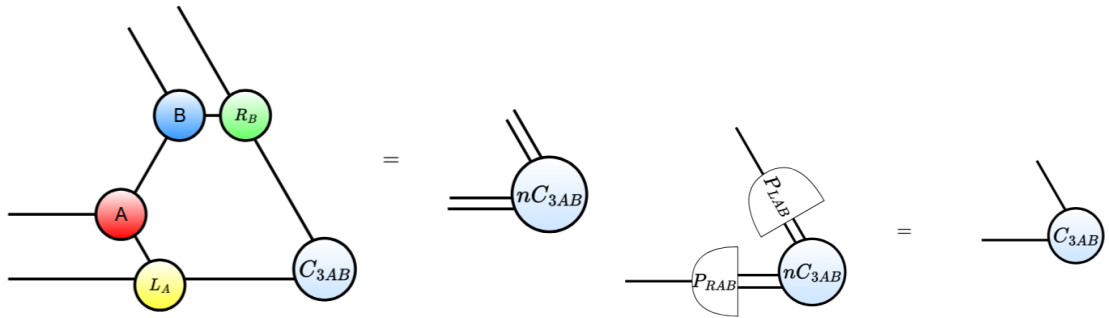


Рис. 4.5: Перетин vMPS з T_A , результуючий тензор після перетворення і перетворення $T_A \rightarrow C_{6,i,A}$

Рис. 4.6: Перетин bMPS з $C_{6,i,A}$.Рис. 4.7: Перетворення з $C_{3AB} \longleftrightarrow nC_{3AB}$.

для перетворення крайових тензорів вихідні лінії не мають змінюватись. Відповідно тензор $C_{6,i}$, має перетворитись на тензор $C_{6,o}$.

Перетворення $C_{3AB} \longleftrightarrow nC_{3AB}$. Розглянемо перетворення для bMPS під кутом у 60 градусів. Достатньо двох самоузгоджених тензорів, що дозволяють поглинути тензори A, B, L_A, R_B таким чином, як зображено на рис. 4.7.

В результаті ми отримали систему кутових перетворень, яка є замкненою.

4.3 Приклад застосування

Розглянемо заданий PEPS, як показано на рис. 4.8 аби отримати інтуїтивне розуміння роботи алгоритма, як приклад використання правил наведених вище. У цьому кроці рис. 4.9 червоною штрихованою лінією виділені тензори, що згортаються. Тут представлена згортка, як кутових тензорів, так і крайових тензорів.

Ми бачимо, що після останнього кроку кутові тензори перейшли так само у тензори оточення рис. 4.10, що дає змогу провести ще один крок

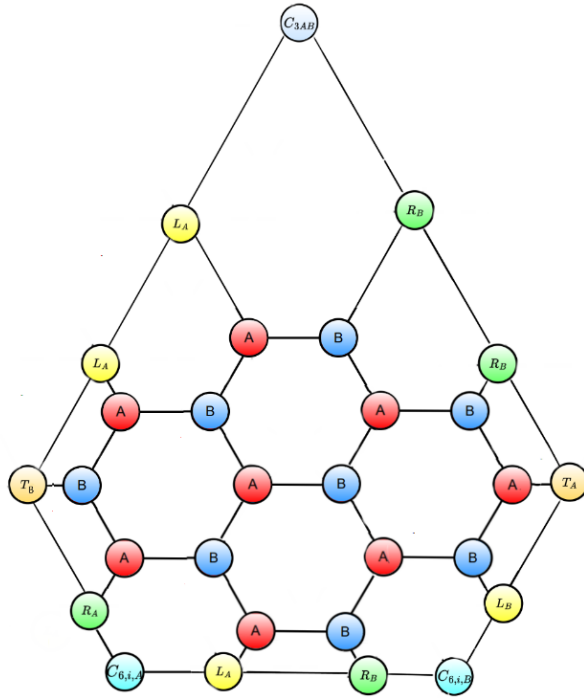


Рис. 4.8: Приклад конфігурації тензорної мережі на гексагональній ґратці для подальшої згортки.

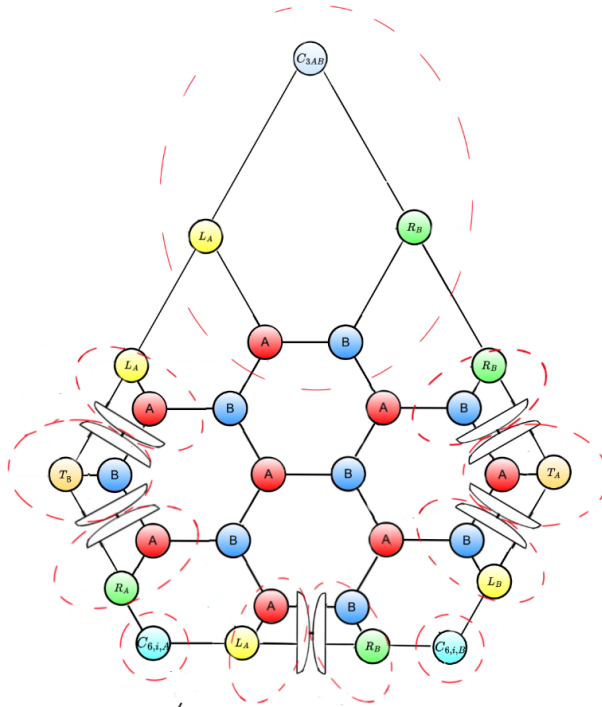


Рис. 4.9: Необхідні згортки на першому кроці.

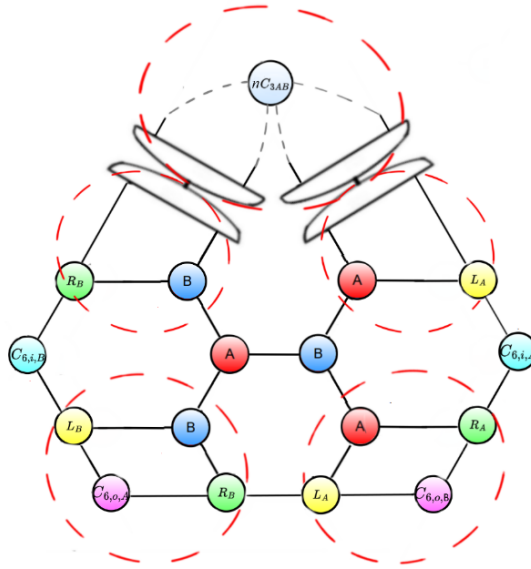


Рис. 4.10: Результат після першої ітерації.

згортки тензорів оточення з тензорами A і B . На останньому кроці ми отримуємо відповідні тензори оточення, що не мають правил, за якими можна їх згорнути, але в той же час все, що залишилося, – це лише два тензори A і B . Відповідно, це і було задано правилами на самому початку рис. 4.11.

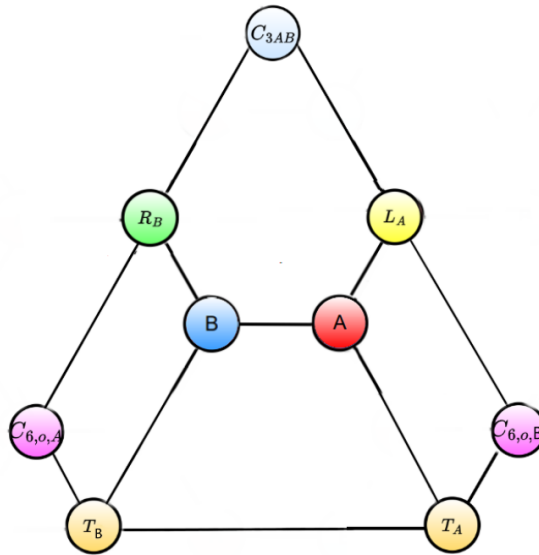


Рис. 4.11: Кінцева конфігурація тензорної мережі після проведення усіх можливих згорток.

РОЗДІЛ 5

Застосування теоретичного підходу

5.1 Розрахунки енергії основного стану

Система, яку ми досліджуємо, складається з двох типів взаємодій: між найближчими сусідами (NN) та між наступними за найближчими сусідами (NNN). Щоб обчислити енергію такої системи, ми маємо розглянути обидва ці типи взаємодій.

Спочатку розглянемо взаємодію типу NN. У цьому випадку спін у даній точці взаємодіє лише з найближчими сусідами. У нашому визначенні тензор певного типу (A) буде взаємодіяти з сусідніми тензорами на вузлах протилежного типу (B). Таким чином, плитка для знаходження найближчої енергії буде такою

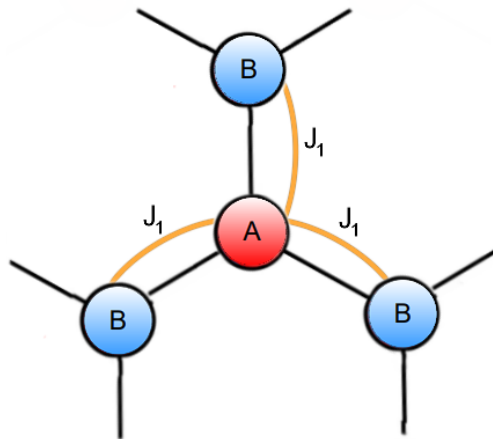


Рис. 5.1: Конфігурація для обчислення енергії взаємодії спіну з найближчими сусідами

Якщо енергія взаємодії між двома спінами дорівнює J , то енергія, що відноситься до одного з вузлів, дорівнює $J/2$, через симетрію взаємодії між двома спінами. А оскільки кожен вузол (тензор) має трьох сусідів (віртуальні ніжки), то енергія взаємодії для кожного вузла дорівнює $3/2$ завдяки симетрії $A \rightleftharpoons B$. Також для зменшення кількості обчислень можна використати обертальну симетрію на кут $2\pi/3$. Таким чином, всі три ніжки однакові, і якщо можна провести обчислення для однієї конфігурації ніжок з трьох, то інші конфігурації мають давати такий самий результат.

В результаті повна система може бути зведена до обчислення енергії

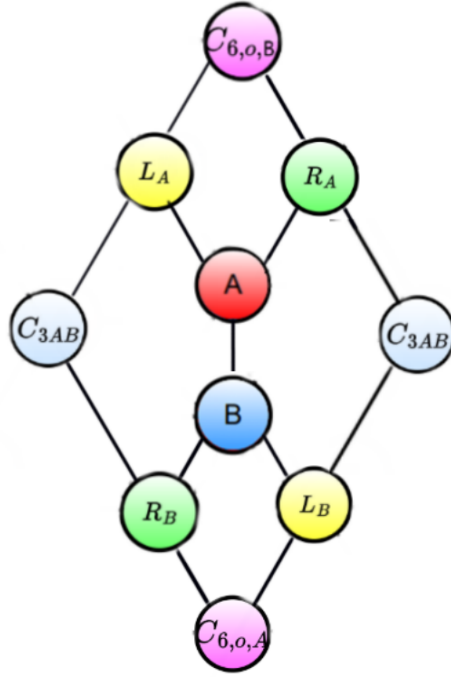


Рис. 5.2: Зведена матриця густини для обчислення енергії взаємодії спіну з найближчими сусідами.

взаємодії двох спінів, як зображено на рис. 5.2.

Для наступної найближчої взаємодії енергії можна знайти за тією ж схемою але в більшому масштабі. Якщо енергія взаємодії є J_2 , то плитка для знаходження найближчої енергії має вигляд, як зображено на рис. 5.3. У результаті енергія становитиме $3J_2$ для кожного тензора (вузла) А або В.

Ми віднормуємо повну енергію системи на кількість пар станів $2N$, де N – кількість вузлів. У нашому наближенні в основному стані вузли А і В відрізняються лише операцією ермітового спряження. Як наслідок, для обчислення енергії системи потрібно обчислювати перетин найближчих сусідів окремо для вузлів А та В. У результаті для обчислення достатньо обчислити лише один перетин окремо:

$$E^{(nn)} = \text{Tr}(\rho^{AB} S_i^+ \cdot S_j^- + h.c.), \quad (5.1)$$

так само і для наступної найближчої взаємодії,

$$E^{(nnn)} = \text{Tr}(\rho^{AA} S_i^+ \cdot S_j^- + h.c.). \quad (5.2)$$

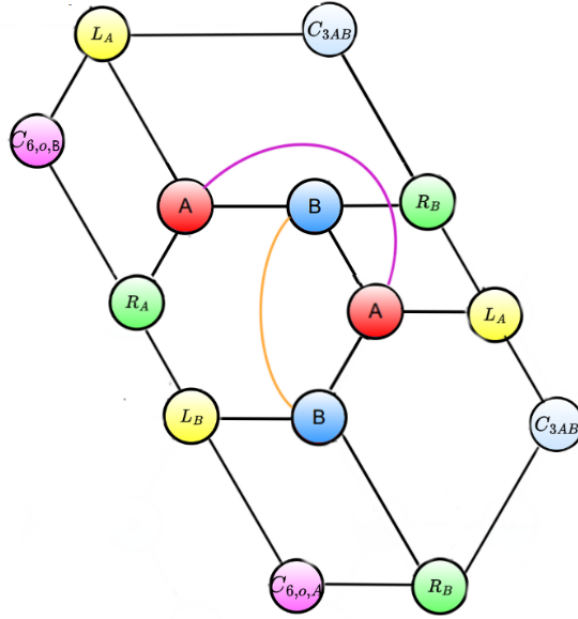


Рис. 5.3: Зведена матриця густини для обчислення енергії взаємодії спіну з наступними за найближчими сусідами.

Після нормування енергія буде такою:

$$E = 1.5 \cdot (E_{AB}^{(nn)} + E_{AA}^{(nnn)} + E_{BB}^{(nnn)}). \quad (5.3)$$

Ця енергія буде використана як функція втрат для знаходження енергії основного стану. Такий метод обчислень показав високу швидкість сходимості за великих значень розмірності χ і достатню стабільність [30].

5.2 Особливості оптимізації і чисельна стабільність

Для обчислення енергії системи спінів необхідно застосувати гамільтоніан, $\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle$. У результаті, якщо ми маємо систему з квантових спінів, використовуючи пряме представлення, стан квантової системи з N спінів буде задано тензором розмірності 2^N . Відповідно, гамільтоніан буде представляти матрицю $2^N \cdot 2^N$. У цьому випадку гамільтоніан містить усі зв'язки між усіма можливими спіновими парами, але більшість з них є нулями. Отже, більшість градієнтів будуть нульовими, а тензор, що визначає хвильову функцію з рівняння (2.1), потребуватиме величезних обчислень, що було обгрунтовано в першому розділі. Тому було використано представлення за допомогою тензорних мереж.

5.3 Границя нескінченних систем.

Відповідно аби знайти енергію у випадку нескінченної системи необхідно знайти енергію взаємодії лише трьох пар спінів (одна пара відповідає взаємодії NN (5.2) і дві відповідають NNN (5.3)). Аби обрахувати ці величини, виникає необхідність замкнути дані системи, щоб віртуальні ніжки не були не з'єднані. Або з фізичного боку задля обрахування енергії на заданій ланці необхідно врахувати як система впливає на цю енергію також. Використовуючі метод CTMRG, як було зазначено раніше можна віртуально замінити оточуюче нескінченне середовище обмеженою кількістю тензорів.

Таким чином аби обрахувати енергію, необхідно обрахувати тензора оточення, сконструювати відповідні плиткі для обрахування енергії $E^{(nn)}$ (5.2) і $E^{(nnn)}$ (5.3) і зібрати їх у остаточний вираз (5.3). За таких обставин збіжність тензорів середовища є вирішальним кроком у цьому випадку через структуру зходження тензорів оточення.

5.4 Обчислення градієнтів

Обчислювальний граф. Ми розглянули основні етапи знаходження функції втрат. Наступним кроком буде обчислення градієнтів. Єдиними параметрами, що вивчаються, є тензори одиничної плиткі (A і B), вони ж і визначають функцію втрат, через те що через них визначаються тензори оточення які були описані в розділі 4. Через це необхідно замінити компактне вид тензорів оточення на граф їх визначення з тензорів A і B. Тому що метод отримання тензорів оточення з тензорів A і B є ітеративною задачею, то відповідно потрібно враховувати градієнти з усіх дій знаходження цих тензорів.

Відповідно при кожному кроці CTMRG (оптимізації тензорів оточення) виникає нова гілка графа, що зв'язує поточні тензори оточення з тензорами оточення з попереднього кроку і тензорами A і B, відповідно. Тому обчислювальний граф розглянутої задачі росте лінійно з кількістю обчислень відповідно до ланцюгового правила, що використовується у алгоритмах автоматичного диференціювання.

Оптимізація. Після обчислення градієнту від усього обчислювального графу тензора A, B оновлюються спираючись на результати обчислень. Оптимізація відбувається за допомогою оптимізатора Adam [31].

5.5 Основний алгоритм

Основними будівельними блоками симетричних алгоритмів тензорних мереж є симетричні тензори вузлів. Ці тензори мають здатність зберігати симетрії системи на кожному кроці обчислень, що є важливим для підтримки точності та ефективності алгоритму.

Зберігаючи симетрію в тензорах на кожному алгоритмічному кроці, ми гарантуємо, що оптимізація залишається у фізичному підпросторі загального гільбертового простору системи багатьох тіл. Це означає, що всі обчислення проводяться в межах допустимих фізичних станів, що забезпечує точність результатів і їх фізичну коректність.

Використання симетричних тензорів значно підвищує ефективність обчислень. Завдяки симетрії зменшується розмірність простору станів, що знижує обчислювальні витрати. Це особливо важливо для великих систем, де розмір гільбертового простору може бути надзвичайно великим. Таким чином, симетричні тензори сприяють оптимізації ресурсів і зменшенню часу обчислень.

Використання симетричних тензорів також сприяє зменшенню кількості незалежних параметрів, необхідних для опису системи. Це спрощує процес оптимізації і робить його більш стабільним. Зменшення кількості параметрів не лише спрощує обчислення, але й підвищує їх стійкість до можливих помилок, що можуть виникати в процесі чисельних розрахунків.

Algorithm 1 Оптимізація стану

- 1: **Input:** Environment env , Initial state $state$
 - 2: **Output:** Updated state $state$ after optimization
 - 3: Initialize $state$ and env as leaf tensors
 - 4: Define loss function \mathcal{H}
 - 5:
 - 6: **while** $epoch < max_epoch$ or *not end condition* **do**
 - 7: Calculate loss using state and env $\mathcal{H}_{initial} \leftarrow \mathcal{H}(state, env)$
 - 8: Calculate gradients through env and state
 - 9: Calculate $\nabla_{state} \mathcal{H}_{initial}$ w.r.t. state
 - 10: Calculate $\nabla_{env} \mathcal{H}_{initial}$ w.r.t. env (for information only, not for update)
 - 11: Update $state$ weights using optimizer with $\nabla_{state} \mathcal{H}_{initial}$
 - 12: Optionally: save state, add noise etc.
 - 13: **end while**
-

Оновлення стану базується на методі градієнтного спуску. Основна мета цього методу полягає в тому, щоб знайти стан, який відповідає основному стану системи. Алгоритм градієнтного спуску здатний ітеративно шукати всередині множини станів, наближаючись до мінімуму енергії. Цей підхід дозволяє ефективно знаходити оптимальні значення параметрів, які мінімізують функцію енергії системи.

Однією з основних переваг методу градієнтного спуску є можливість використання автоградієнту, яке є частиною великої бібліотеки під назвою PyTorch. Автоградієнт дозволяє автоматично обчислювати похідні від функцій, що значно спрощує процес оптимізації. Цей метод знайшов широке розповсюдження в нейромережах завдяки здатності оптимізувати великі масиви ваг ітеративно.

Використання PyTorch для реалізації градієнтного спуску забезпечує високу стабільність та масштабованість алгоритму, що є важливим у випадку різних розмірів тензорів і їх параметрів (D і χ). PyTorch дозволяє легко налаштовувати та адаптувати алгоритм під конкретні потреби дослідження, забезпечуючи ефективність та точність обчислень.

Метод градієнтного спуску, поєднаний з автоградуванням, дозволяє ітеративно покращувати стан системи, забезпечуючи наближення до основного стану з мінімальною енергією. Це особливо важливо для складних квантових систем, де точний розрахунок основного стану є ключовим для розуміння фізичних властивостей системи.

Завдяки своїй здатності ефективно обробляти великі обчислювальні задачі та забезпечувати стабільність обчислень, метод градієнтного спуску став незамінним інструментом у дослідженнях квантової фізики та матеріалознавства. Його застосування дозволяє отримувати точні результати та робить процес моделювання складних систем більш доступним і надійним.

Основою автоматичного диференціювання є обчислювальний граф. Обчислювальні графи представляють математичні вирази у вигляді зв'язків між операціями. У нашому випадку, стан системи є входом для графа, а виходом є енергія, що відповідає даному стану. Прохід по графу вперед дає змогу обчислити всі необхідні операції для визначення енергії. Зворотній прохід пов'язаний з процесом оптимізації стану системи.

Якщо всі операції, що є вузлами графа, диференційовані, то за допомо-

гою ланцюгового правила можна обчислити градієнт. Ланцюгове правило дозволяє використовувати значення, обчислені на попередніх кроках, для знаходження градієнтів у попередніх шарах графа. Це забезпечує ефективне обчислення градієнтів і оптимізацію стану системи.

Для наших цілей алгоритм автоматичного диференціювання має важливі властивості, такі як масштабованість і динамічний розв'язок зворотного прогону. Через ітеративний характер процесу знаходження енергії стану змінюється довжина та кількість операцій всередині обчислювального графа. Однак автоградієнтні обчислення залежать лише від поточного вузла, а не від попередніх чи наступних, тому зміна структури графа не впливає на сам алгоритм.

Такий граф містить всі операції, необхідні для отримання енергії з заданого стану. Він слугує як транспортний засіб для градієнта через кожну операцію під час пошуку енергії. Цей підхід забезпечує стабільність обчислень, дозволяючи динамічно змінювати граф без втрати коректності.

В основі методу лежить градієнтна оптимізація, для виконання якої необхідно обчислити функцію втрат. У нашому випадку функція втрат - це енергія системи. Втрати слугують критерієм ефективності роботи алгоритму, визначаючи, наскільки добре поточний стан відповідає основному стану системи. Мінімізуючи втрати, алгоритм наближається до оптимального стану з найнижчою енергією, забезпечуючи точність і надійність отриманих результатів.

5.6 Особливості оптимізації

Оскільки за допомогою обчислювального графа можна знайти енергії системи, то такий граф містить оптимізовані тензори оточення. Як вже зазначено в підрозділі 5.3, оптимізація енергії відбувається шляхом проходження по всьому обчислювальному графу включно з тензорами оточення. Тензори оточення обраховують за допомогою наведених у підрозділі 4.2 правил перетворення та зазначених на рис. 4.3 операцій (сингулярне представлення матриці, згортка тензорів, QR-розкладання матриці тощо). Для цих операцій задля використання автоградієнту були побудовані додаткові функції обрахунку градієнтів, що описані у статті [32].

РОЗДІЛ 6

Аналіз результатів

Ми досліджували модель Гейзенберга типу J_1 - J_2 на стільниковій ґратці. Для розгляду такої задачі ми використовували iPEPS для представлення стану, який забезпечує універсальне та оптимізоване представлення квантової системи. Як результат дослідження і оптимізації було досягнуто такі покращення підходу: а) використовуючи симетрії, ми змогли зменшити складність задачі; б) за допомогою ефективного автоматичного диференціювання в режимі реверсу з функцією контрольних точок було отримано можливість досліджувати стани з більшою розмірністю зв'язків.

Ми розглядали системи з розмірностями зв'язків $D \in [4, 6]$, щоб інтерполювати результати на більші розмірності. Параметр χ зазвичай беруть близьким до D^2 , але для кращої збіжності було вирішено збільшити коефіцієнт у інтервалах від $1.5D^2$ до $4.5D^2$.

Енергія. З отриманих результатів можна побачити, що енергія зростає на початку, а далі починає виходити на насичення – цей результат є очікуваним через змагання між взаємодіями типу J_1 і J_2 , а також враховуючі антиферромагнітне впорядкування. Навіть якщо J_2 зростає лінійно, енергія зростає повільніше через те, що взаємодії конкурують між собою. Залежність енергії основного стану від амплітуди взаємодії J_2 зображено на рис. 6.1. На графіку зображено три лінії, що відповідають залежності загальної нормованої енергії системи в залежності J_2 . Кольорам ж відповідає від розмірності D тензорів A і B , а також розмірності χ тензорів оточення. Синя лінія відповідає системі з такими параметрами $D = 4$, $\chi = 32$. Помаранчева лінія відповідає системі з такими параметрами $D = 5$, $\chi = 36$. Зелена лінія відповідає системі з такими параметрами $D = 6$, $\chi = 90$. Збільшення розмірності A і B , а також відповідне збільшення χ дозволяє більш точно описувати систему і відповідно більш точно отримувати різні величини такі як енергія в цьому випадку.

Намагніченість. Зміна намагніченості є однією з основних ознак фазового переходу. Як і попереднього разу, розглянемо результати по намагні-

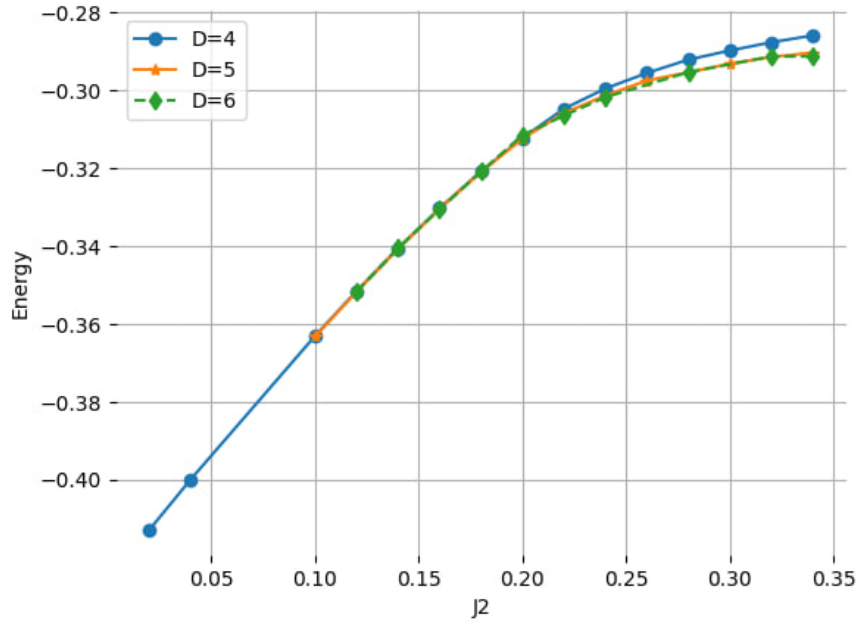


Рис. 6.1: Залежність енергії основного стану системи від амплітуди J_2 в одиницях $J_1 = 1$. Енергію віднормовано на подвійну кількість вузлів $2N$.

ченності з різними параметрами системи. На рис. 6.2 ми можемо побачити перехід від фази Нееля в площині XU до антиферромагнетика ізінговського типу в околі $J_2 \approx 0.21$. Слід зазначити, що перехід між фазами відбувається зі спонтанним порушенням дискретної симетрії \mathbb{Z}_2 . Цікавим є факт, що спіни спрямовані вздовж вісі Z , але в моделі немає взаємодії за цим напрямком, а також зовнішнє поле відсутнє. Також можна побачити, що у місці переходу \hat{S}_\pm також змінюється, але навпаки – спадає до нуля. Що також є аномальним ефектом, тому що всі взаємодії як раз відбуваються у площині XU .

Довжина запутаності. Довжина запутаності – це характерна довжина, на яку поширюється квантова кореляція між частинками або ступенями свободи в квантовій системі з багатьма тілами. Довжина кореляції є добрим способом знаходження фазового переходу завдяки її зростанню в області фазового переходу. Для знаходження довжини запутаності було побудовано зведену матрицю густини, що зображена на рис. 6.3. З цього RDM можна знайти матрицю кореляційної довжини використовуючі операцію переформатування тензорів. знаходжені найбільших власних значень даної матриці можна отримати кореляційну довжину. За наступною

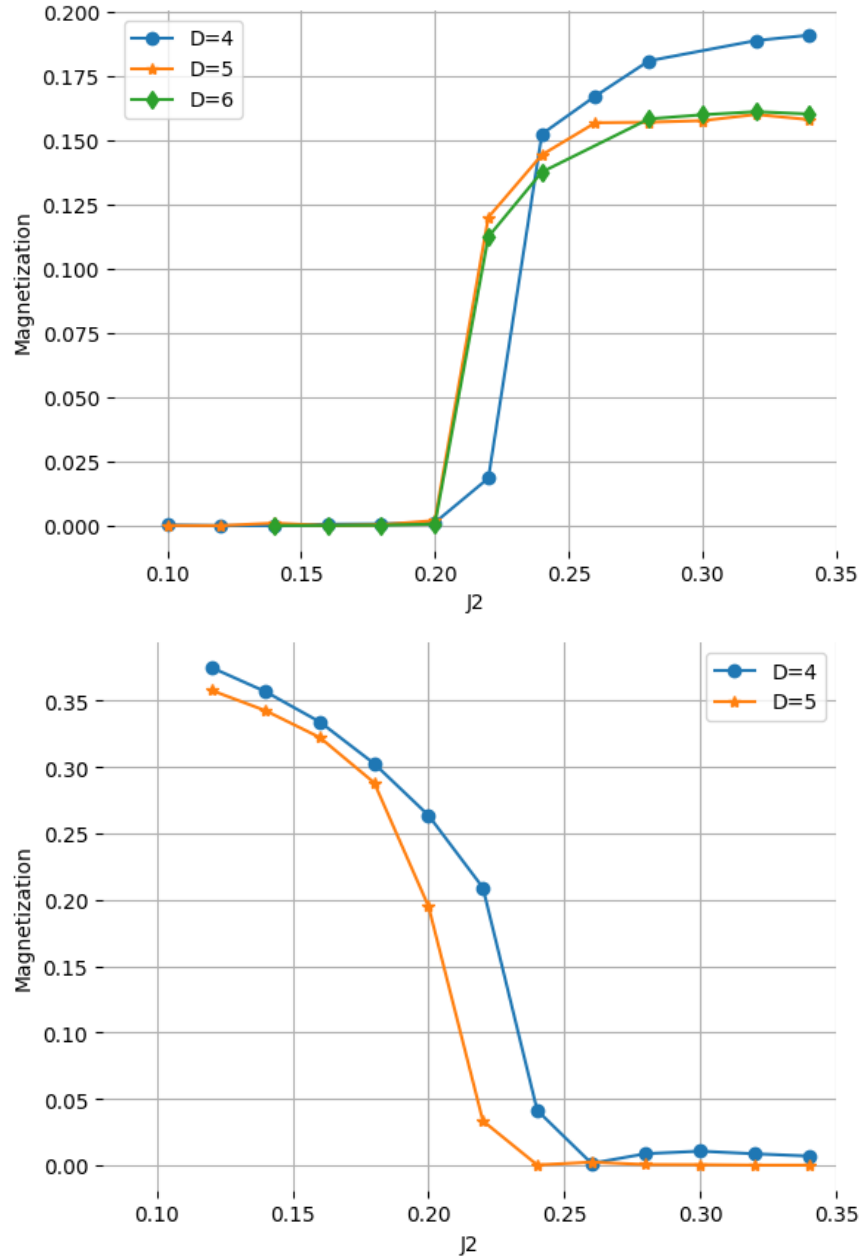


Рис. 6.2: Залежність абсолютних значень локальних намагніченостей $|\langle \hat{S}_z \rangle|$ (верхня панель) і $|\langle \hat{S}_\pm \rangle|$ (нижня панель) від амплітуди J_2 в одиницях $J_1 = 1$.

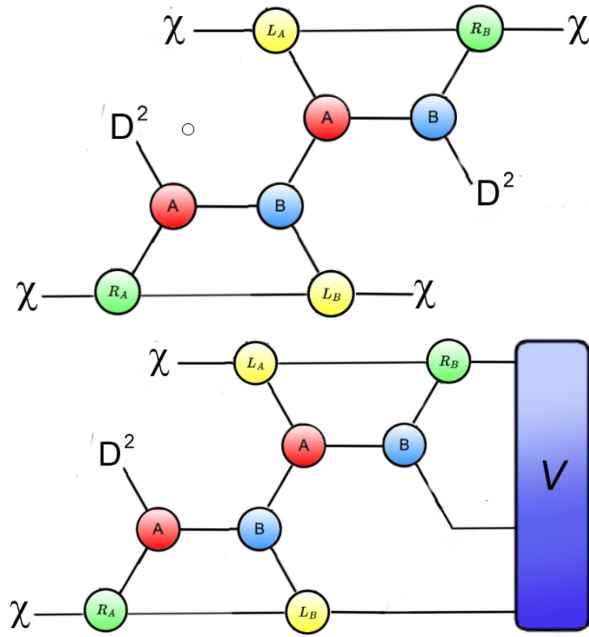


Рис. 6.3: Тензор кореляційної довжини та правило перетворення $v \mapsto Av$.

формулою

$$\xi = -\frac{1}{\log(|\lambda_2/\lambda_1|)} \quad (6.1)$$

де λ відповідає власним значенням матриці з $|\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq \dots$ [33]. Але такий підхід є неоптимальним через великі розміри матриці. Наприклад, для обрахунку кореляційної матриці з типом змінних `float64` і параметрами $D = 6$ і $\chi = 90$ об'єм оперативної пам'яті буде дорівнювати

$$\begin{aligned} RAM &= NumMatrixElements \cdot BitEachElement \\ &= (\chi^2 \cdot D^2)^2 \cdot 64bits \approx 5.5 \cdot 10^{12} \approx 680 \text{ GB}. \end{aligned} \quad (6.2)$$

Таким чином, знаходження власних векторів такої матриці є обчислювально неефективним. Задля оптимізації процесу отримання власних значень було використано переваги представлення PEPS. При використанні алгоритму Ланцоша достатньо обмежитися правилом використання заданої матриці на вектор $v \mapsto Av$ [34], як зображено на рис. 6.3. Тоді наступний тензор може бути сконструйовано і відповідно при згортці вектора v не з повною матрицею кореляційної довжини, а з окремими малими тензорами, можливо отримати перевагу. Як результат, обчислення можна проводити і навіть за більших D і χ . Як наслідок, були отримані кількісні

результати, які узгоджуються з очікуваними. У фазі Нееля з намагніченістю в площині XY, тобто в інтервалі $0 < J_2 \lesssim 0.21$, кореляційна довжина зростає з кожним збільшенням D , що є очікуваним для традиційних магнітних фаз з упорядкуванням дальнього діапазону. У фазі типу Ізінга ($J_2 \gtrsim 0.21$) кореляційна довжина залишається в обмеженому інтервалі та не має такого помітного зростання з розмірністю зв'язку D , що є типовою ознакою більш складних режимів з пригніченням (фрустрацією) орієнтації магнітних моментів у системі.

ВИСНОВКИ

У цій роботі були розглянуті методи дослідження квантових систем багатьох тіл, які можуть бути використані для аналізу матеріалів, таких як графен, гексагональний дігідрат бору тощо. Дослідження проведено на основі моделі Гейзенберга для стільникової ґратки з взаємодіями між найближчими та наступними за близькістю спінами у ґратці. Використано один з методів тензорних мереж, а саме підхід нескінченних проєктованих станів заплутаних пар (iPEPS) для представлення хвильової функції на стільниковій ґратці. Для чисельного аналізу системи реалізовано наступні алгоритми:

- Узагальнений код для тензорних мереж (iPEPS) для використання у випадку стільникової ґратки з елементарною коміркою, що включає два вузли.
- Алгоритм CTMRG для автоматичного знаходження тензорів оточення і відповідно знаходження різних спостережуваних.
- Метод автоматичного градієнтного спуску для оптимізації станів за енергіями і відповідно знаходження основного стану системи.

За допомогою розробленого теоретичного підходу, зроблено наступні висновки про фізичні характеристики основного стану системи:

- Енергія системи зростає при збільшенні взаємодії між спінами J_2 , проте зростання енергії сповільнюється через конкуренцію між взаємодіями J_1 і J_2 .
- Виявлено фазовий перехід з фази Нееля до антиферромагнітної фази Ізінга за допомогою порушення дискретної симетрії Z_2 у спіновому просторі (зміни намагніченості системи).
- Вивчено поведінку довжини заплутаності, яка є ключовою характеристикою для визначення фазових переходів у системах багатьох частинок.

Використання методу iPEPS у поєднанні з CTMRG і чисельною оптимізацією дало змогу ефективно дослідити властивості спінової моделі Гейзенберга типу J_1 - J_2 на стільниковій ґратці та запропонувати нові підходи

для вивчення квантових систем багатьох частинок. Таким чином, робота має суттєве практичне значення для дослідження двовимірних матеріалів зі стільниковою структурою, їх магнітних властивостей та фазових переходів.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. A. Altland and B. D. Simons, *Condensed matter field theory*. Cambridge University Press, 2010.
2. M. C. Gutzwiller, “Effect of correlation on the ferromagnetism of transition metals,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 10, pp. 159–162, Mar 1963.
3. J. Hubbard, “Electron correlations in narrow energy bands,” *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, vol. 276, no. 1365, pp. 238–257, 1963.
4. J. Kanamori, “Electron correlation and ferromagnetism of transition metals,” *Progress of Theoretical Physics*, vol. 30, pp. 275–289, 09 1963.
5. “The Hubbard model at half a century,” *Nat. Phys.*, vol. 9, no. 9, pp. 523–523, 2013.
6. T. Esslinger, “Fermi-Hubbard physics with atoms in an optical lattice,” *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.*, vol. 1, no. 1, pp. 129–152, 2010.
7. P. W. Anderson, “Absence of diffusion in certain random lattices,” *Phys. Rev.*, vol. 109, pp. 1492–1505, Mar 1958.
8. I. Bloch, J. Dalibard, and W. Zwerger, “Many-body physics with ultracold gases,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 80, pp. 885–964, Jul 2008.
9. W. Heisenberg, “Zur theorie des ferromagnetismus,” *Zeitschrift für Physik*, vol. 49, pp. 619–636, Sep 1928.
10. A. V. M. O. G. Maksimova and P. S. Vakhrameev, “Simulation of phase transitions in ferroelectric solid solutions by monte-carlo method,” *Ferroelectrics*, vol. 501, no. 1, pp. 70–74, 2016.
11. S. G. Saheli, J. Lin, H. Hu, and F. Krüger, “Majorana-fermion mean field theories of Kitaev quantum spin liquids,” *Phys. Rev. B*, vol. 109, p. 014407, Jan 2024.
12. T. Nakafuji and I. Ichinose, “Phase diagrams of bose-hubbard model and antiferromagnetic spin-1/2 models on a honeycomb lattice,” *Physical Review A*, vol. 96, July 2017.
13. S. Morita, R. Kaneko, and M. Imada, “Quantum spin liquid in spin-1/2 J_1 – J_2 Heisenberg model on square lattice: Many-variable variational monte carlo study combined with quantum-number projections,” *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. 84, no. 2, p. 024720, 2015.
14. E. Ghorbani, F. Shahbazi, and H. Mosadeq, “Quantum phase diagram of

- distorted J_1 - J_2 Heisenberg $s = 1/2$ antiferromagnet in honeycomb lattice: a modified spin wave study,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 28, p. 406001, Aug. 2016.
15. H. Li and L.-P. Yang, “Tensor network simulation for the frustrated J_1 - J_2 Ising model on the square lattice,” *Phys. Rev. E*, vol. 104, p. 024118, Aug 2021.
 16. S.-S. Gong, D. N. Sheng, O. I. Motrunich, and M. P. A. Fisher, “Phase diagram of the spin- $\frac{1}{2}$ J_1 - J_2 Heisenberg model on a honeycomb lattice,” *Phys. Rev. B*, vol. 88, p. 165138, Oct 2013.
 17. J. Liu, Y.-M. Quan, H. Lin, and L.-J. Zou, “Topologically different spin disorder phases of the $J_1 - J_2$ Heisenberg model on the honeycomb lattice,” *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 120, p. 114037, 2020.
 18. J. I. Cirac, D. Perez-Garcia, N. Schuch, and F. Verstraete, “Matrix product states and projected entangled pair states: Concepts, symmetries, theorems,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 93, no. 4, p. 045003, 2021.
 19. R. Orus, “A Practical Introduction to Tensor Networks: Matrix Product States and Projected Entangled Pair States,” *Annals Phys.*, vol. 349, pp. 117–158, 2014.
 20. B. Bruognolo, J.-W. Li, J. von Delft, and A. Weichselbaum, “A beginner’s guide to non-abelian iPEPS for correlated fermions,” *SciPost Phys. Lect. Notes*, p. 25, 2021.
 21. J. Jordan, R. Orús, G. Vidal, F. Verstraete, and J. I. Cirac, “Classical simulation of infinite-size quantum lattice systems in two spatial dimensions,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 101, p. 250602, Dec 2008.
 22. I. V. Lukin and A. G. Sotnikov, “Variational optimization of tensor-network states with the honeycomb-lattice corner transfer matrix,” *Phys. Rev. B*, vol. 107, p. 054424, Feb 2023.
 23. P. Fazekas, *Lecture Notes on Electron Correlation and Magnetism*. EBL-Schweitzer, World Scientific, 1999.
 24. J. Nasu and Y. Motome, “Nonequilibrium majorana dynamics by quenching a magnetic field in Kitaev spin liquids,” *Physical Review Research*, vol. 1, 10 2019.
 25. H. He, Z. Wang, C. Li, Y. Han, and G. Guo, “A study of highly frustrated

- spin systems with mixed peps in infinite honeycomb lattice,” 2013.
26. T. Nishino and K. Okunishi, “Corner transfer matrix renormalization group method,” *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. 65, no. 4, pp. 891–894, 1996.
 27. T. Nishino and K. Okunishi, “Corner transfer matrix algorithm for classical renormalization group,” *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. 66, no. 10, pp. 3040–3047, 1997.
 28. R. Orús and G. Vidal, “Simulation of two-dimensional quantum systems on an infinite lattice revisited: Corner transfer matrix for tensor contraction,” *Phys. Rev. B*, vol. 80, p. 094403, Sep 2009.
 29. S. Nyckees, A. Rufino, F. Mila, and J. Colbois, “Critical line of the triangular ising antiferromagnet in a field from a C_3 -symmetric corner transfer matrix algorithm,” *Phys. Rev. E*, vol. 108, p. 064132, Dec 2023.
 30. L. Vanderstraeten, J. Haegeman, P. Corboz, and F. Verstraete, “Gradient methods for variational optimization of projected entangled-pair states,” *Phys. Rev. B*, vol. 94, p. 155123, Oct 2016.
 31. D. P. Kingma and J. Ba, “Adam: A method for stochastic optimization,” 2017.
 32. H.-J. Liao, J.-G. Liu, L. Wang, and T. Xiang, “Differentiable programming tensor networks,” *Phys. Rev. X*, vol. 9, p. 031041, Sep 2019.
 33. M. Rader and A. M. Läuchli, “Finite correlation length scaling in lorentz-invariant gapless ipeps wave functions,” *Physical Review X*, vol. 8, July 2018.
 34. R. B. Lehoucq, D. C. Sorensen, and C. Yang, *ARPACK Users’ Guide*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 1998.