



Doctoral Thesis

Numerical simulations of condensed matter From eigensolvers to quantum spin glass

Author(s):

Dayal, Prakash

Publication Date:

2006

Permanent Link:

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-005244156> →

Rights / License:

[In Copyright - Non-Commercial Use Permitted](#) →

This page was generated automatically upon download from the [ETH Zurich Research Collection](#). For more information please consult the [Terms of use](#).

Diss. ETH No. 16588

**NUMERICAL SIMULATIONS OF CONDENSED MATTER:
FROM EIGENSOLVERS TO QUANTUM SPIN GLASS**

A dissertation submitted to the
SWISS FEDERAL INSTITUTE
OF TECHNOLOGY ZURICH
(ETH Zurich)

for the degree of
Doctor of Sciences

presented by

PRAKASH DAYAL

M.E. Chem. Engg., I.I.Sc. Bangalore
born December 04, 1973
citizen of India

accepted on the recommendation of
Prof. Dr. Matthias Troyer, examiner
Prof. Dr. Ulrich Schollwöck, co-examiner

2006

Abstract

The research covered in this thesis is broadly divided in three parts, dealing with: first, The Iterative Eigensolver Template Library (IETL) and its applications; second, performance of flat-histogram Monte Carlo sampling methods; and third, simulation of the 2-dimensional ($2D$) quantum Ising spin glass.

1. IETL: we have developed the Iterative Eigensolver Template Library (IETL) which is a generic, extensible C++ library for the solution of large sparse linear eigenvalue problems. The library implements algorithms of the power method, inverse iteration method, Rayleigh-quotient method, Lanczos method and the band-Lanczos method for Hermitian eigenvalue problems. Furthermore, we have used the IETL to calculate ground- and excited-state energies near the minimal energy state of a proposed design of superconducting tetrahedral quantum bit. We have also solved the eigenvalue problems that appeared in the case of applied magnetic fluxes to the quantum bit.

2. Performance of flat-histogram Monte Carlo sampling methods: we have determined the optimal scaling of local-update flat-histogram methods with system size by using a perfect flat-histogram scheme based upon the exact density of states of $2D$ Ising models. The typical tunneling time needed to sample the entire bandwidth does not scale with the number of spins N as the minimal N^2 of an unbiased random walk in energy space. While the scaling is power law for the ferromagnetic and fully frustrated Ising models, for the $\pm J$ nearest-neighbor spin glass the distribution of tunneling times is governed by a fat-tailed Fréchet extremal value distribution that obeys exponential scaling. Furthermore, the shape parameters of these distributions indicate that statistical sample means become ill-defined already for moderate system sizes within these complex energy landscapes.

3. Simulation of the $2D$ quantum Ising spin glass: we have investigated zero-temperature quantum phase transition of the $2D$ quantum Ising spin glass in a transverse magnetic field. The critical exponents are calculated using finite-size scaling analysis. We have found no activated dynamical scaling relationship of the characteristic length and time scales, contrary to the activated dynamical scaling in $2D$ random transverse magnetic field quantum Ising Ferromagnet. We

have studied the effect of three different ways of disorder average implementations in the definition of the dimensionless combination of moments, better known as the Binder ratio, and found that the effects are non-trivial and beyond statistical fluctuations. Using parallel tempering Monte Carlo (MC) simulation method and fast clusters of computers, we study a large number of realizations of the systems of various sizes. We have formulated a new equilibration test based upon link overlap for our quantum systems simulated under parallel tempering MC. Furthermore correlation lengths and correlation functions are calculated.

Kurzfassung

Diese Doktorarbeit besteht aus drei Teilen: der “Iterative Eigensolver Template Library (IETL)” und ihrer Anwendungen, der Leistungsfähigkeit von “Flat-Histogram Monte Carlo Sampling Methods” und der Simulation von zweidimensionalen ($2D$) Quanten-Ising Spin Gläsern.

1. IETL: wir haben die “Iterative Eigensolver Template Library (IETL)” entwickelt. Es handelt sich um eine generische, erweiterbare C++ Bibliothek zum Lösen grosser, dünn besetzter linearer Eigenwertprobleme. Gegenwärtig sind die folgenden Algorithmen implementiert: Power Methode, Inverse Iterationen, Rayleigh Quotienten, Lanczos Methode und Band-Lanczos Methode für Hermitesche Eigenwertprobleme. Darüber hinaus haben wir die IETL Bibliothek in einem Projekt eingesetzt, welches sich mit dem Design eines supraleitenden, tetrahedralen Quanten-Bits befasst: wir haben die Energien von sowohl Grundzustand als auch angeregten Zuständen nahe des minimalen Energiezustandes berechnet. Zudem haben wir Eigenwertprobleme gelöst welche im Falle eines äusseren Magnetfeldes auftreten.

2. Leistungsfähigkeit von “Flat-Histogram Monte Carlo Sampling Methods”: wir haben die optimale Skalierung von “Local-Update Flat-Histogram Methods” mit der Systemgrösse unter Verwendung einer perfekten “Flat-Histogram” Methode bestimmt. Die Methode basiert auf der exakten Zustandsdichte des $2D$ Ising Modells. Die typische Zeit (“tunneling time”), die benötigt wird um die gesamte Bandbreite zu simulieren, skaliert nicht mit der Anzahl der Spins im Quadrat. Stattdessen tritt im Falle von ferromagnetischen und frustrierten Ising-Modellen ein Potenzgesetz in Abhängigkeit der Systemgrösse auf, wohingegen für das $\pm J$ nächste Nachbarn Spin Glas die Verteilung (bezüglich verschiedener Realisierungen des Spin Glasses bei fester Systemgrösse) durch eine Fréchet Extremwertverteilung gegeben ist. Ausserdem weist der Parameter dieser Verteilungen darauf hin, dass in diesen komplexen Energielandschaften statistische Mittelwerte schon fuer moderate Systemgrössen schlecht definiert sind.

3. Simulation des $2D$ Quanten-Ising Spin Glasses: wir haben den Quantenphasenübergang am Temperaturnullpunkt des $2D$ Quanten-Ising Spin Glasses in einem transversalen Magnetfeld untersucht sowie die kritischen Exponenten unter

Verwendung von “Finite-Size Scaling” berechnet. Wir haben kein aktiviertes dynamisches Skalierungsgesetz der charakteristischen Längen- und Zeitskalen eines $2D$ Quanten-Ferromagneten in einem zufälligen transversalen Magnetfeld gefunden. Zudem haben wir drei verschiedene Arten des Unordnungsmittelwertes implementiert, um die dimensionslose Kombination von Momenten (auch als Binder-Kumulante bekannt), zu bestimmen. Unsere Resultate zeigen, dass die Effekte nicht trivial sind und über das Mass statistischer Fluktuationen hinausgehen. Unter Verwendung von “Parallel Tempering Monte Carlo (MC) Simulation Method” und schnellen Computer-Clusters haben wir eine grosse Anzahl von Systemen zahlreicher Grössen untersucht. Wir haben einen neuen Equilibrierungstest formuliert, der auf dem “Link Overlap” unseres Quantensystems basiert. Korrelationslängen und Korrelationsfunktionen wurden berechnet.