

Algebra lineare su spazi di dimensione finita

↳ manipolazione di matrici (quadrate)
diagonallizzazione, decomposizioni varie

↳ interpretazione numerica di eq. differenziali lineari

■ pre-requisiti "computazionali":

- è utile avere a disposizione librerie per la diagonallizzazione di matrici (simmetriche / hermitiche)

[Fortran \rightarrow LAPACK (linear algebra package)]

■ Referenze:

\rightarrow Quantum Phase Transitions, S. Sachdev (Cambridge)

\rightarrow Polkovnikov, Sengupta, Vengalattore, Silver, Rev. Mod. Phys. 83, 863 (2011)

R. Nandkishore, D. Huse, Annual Rev. Condensed matter physics 5, 15 (2015)

- Quantum Information

↳ Nielsen & Chuang, (Cambridge, 2000)

↳ J. Preskill, www.theory.caltech.edu/people/preskill/ph22

↳ Benenti, Cesati, Rossini, Strini (cap. 11, World Scientific)

- Problemi di sistemi quantistici a molti corpi non relativistici

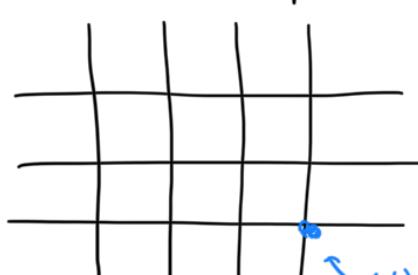
$$\hat{H}|\psi\rangle = i \frac{d}{dt} |\psi\rangle \quad (\hbar=1) \quad \rightarrow |\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t} |\psi(0)\rangle$$

obiettivo
 \uparrow
 \rightarrow trovare gli autostati di \hat{H} (se H non dipende da t)

sistemi finito-dimensionali \rightarrow spazi di Hilbert finiti,

$\hat{H} \leftrightarrow$ matrice $\dim \hat{H} = N \times N$ dimensione N grande

situazioni tipiche: sistemi su reticolo
a geometria variabile



sito spazio di Hilbert "locale"
di dimensione d

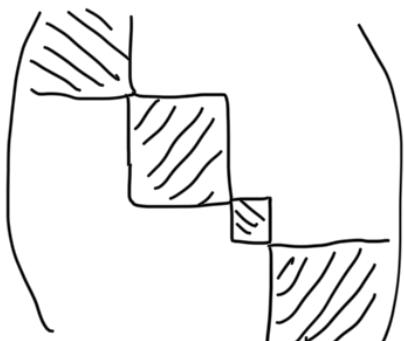
\nwarrow
 n siti \rightarrow spazio di Hilbert "totale"
di dimensione $N = d^n$ cresce esponenzialmente con il n° di siti

$$n=10 \quad N = d^{10} \quad (\text{se } d=2, \quad N=1024)$$

$$n=20 \quad N = d^{20} \quad (\text{se } d=2, \quad N \sim 10^6 \text{ enorme!})$$

- simmetriche \rightarrow matrici a blocchi

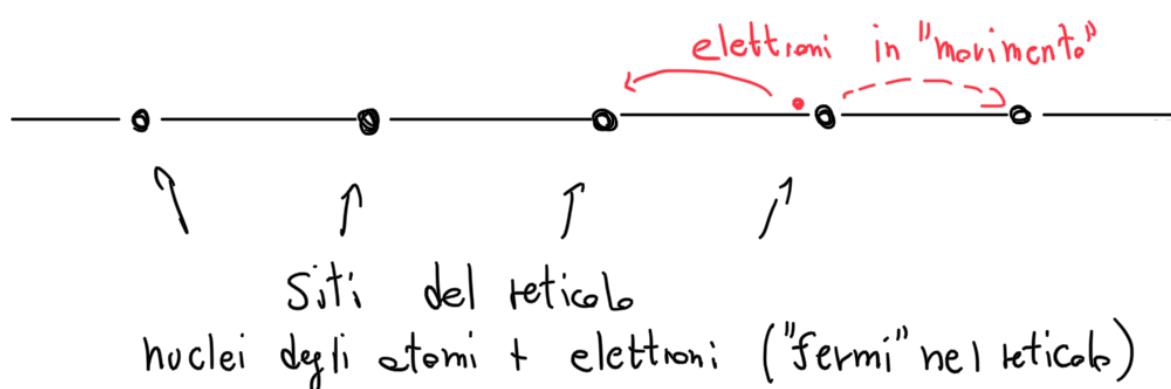
$$H =$$



- matrici sparse (piene di zeri)
 $\sim N \times N \quad O(N) \neq 0$

- solo stato fondamentale di H (Non tutto lo spettro)
 - describe la fisica a temperatura zero
 - \rightarrow diagonalizzazione Lanczos

\Rightarrow modello di Hubbard $\left(\text{Proc. Roy. Soc. London } \underline{276}, 238 \text{ (1963)} \right)$



- Hubbard descrive solo il moto degli elettroni che possono saltare da un sito all'altro...

1) elettroni che "saltano" da un sito a quello adiacente

($t > 0$) 2) due elettroni su uno stesso sito tendono a terpingersi

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} \left(\hat{c}_{i,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j,\sigma} + \hat{c}_{j,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{i,\sigma} \right) + U \sum_i \hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{i,\downarrow} \quad (U > 0)$$

$\hat{c}, \hat{c}^{\dagger}$ operatori di creazione/distruzione di un elettrone su un sito e con un certo spin

π orbitazione

$i, j = 1, \dots, n$ indici di sito nel reticolo

$\sigma = \uparrow, \downarrow$ spin dell'elettrone

$$\left\{ \begin{array}{l} \{\hat{c}_{i,\sigma}, \hat{c}_{j,\tau}^\dagger\} = \delta_{ij} \delta_{\sigma\tau} \\ \{\hat{c}_{i,\sigma}, \hat{c}_{j,\tau}\} = 0 \\ \{\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger, \hat{c}_{j,\tau}^\dagger\} = 0 \end{array} \right.$$

Regole di anticommutazione per operatori fermionici in II quantizzazione

$$\hat{c}_{i,\sigma} \hat{c}_{j,\tau}^\dagger = -\hat{c}_{j,\tau}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma} \quad \text{se } i=j \text{ e } \sigma \neq \tau$$

$$\hat{c}_{i,\sigma} \hat{c}_{j,\tau}^\dagger = 1 - \hat{c}_{j,\tau}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma} \quad \text{se } i=j \text{ e } \sigma = \tau$$

$$\hat{c}_{2,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{1,\uparrow}^\dagger |S\rangle \neq \hat{c}_{1,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{3,\downarrow}^\dagger |S\rangle \quad \begin{pmatrix} |S\rangle \text{ stato} \\ \text{di vuoto} \end{pmatrix}$$

$\hat{n}_{i,\sigma} \equiv \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma}$ operatore n° di fermioni sul sito i e con spin σ

$$n_{i,\sigma} = 0 \text{ o } 1 \quad \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma} = 0 = -\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma} \quad \text{Pauli ok}$$

simmetrie immediatamente visibili:

$$\hat{N}_\sigma \equiv \sum_i \hat{n}_{i,\sigma} \quad \hat{N}_{\text{tot}} = \hat{N}_\uparrow + \hat{N}_\downarrow \quad \begin{cases} \text{n° elettroni spin-tirati} \\ \text{Conservato} \end{cases}$$

$$[\hat{H}, \hat{N}_\sigma] = 0 \quad (\forall \sigma = \uparrow, \downarrow)$$

basis in comune per \hat{H} e per $\hat{N}_\sigma \rightarrow \hat{H}$ diagonale a blocchi

— Teorie delle perturbazioni — fisica a basse energie

$U \gg t$ situazione tipica

$$\hat{H} = U \sum_i \hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{i,\downarrow} - t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} + \text{h.c.})$$

(hermitiano coniugato)

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \delta \hat{H}$$

perturbazioni in $\delta \hat{H}$

Studio il regime di Half Filling: se ho n siti reticolari, metto n elettroni

■ considero $n=2$, per semplicità

→ posso scegliere una base che descrive 2 elettroni in 2 siti

↳ stadi di tripletta e di singletto (senza stadi di doppia occupazione)

$$t \begin{cases} |1,1\rangle = |\uparrow,\uparrow\rangle \\ |1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow,\downarrow\rangle + |\downarrow,\uparrow\rangle) \\ |1,-1\rangle = |\downarrow,\downarrow\rangle \end{cases} \quad \begin{matrix} \text{Stato} \\ \text{elettroni} \\ \text{occupati} \\ \text{dei due siti} \end{matrix}$$

$$s \begin{cases} |0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow,\downarrow\rangle - |\downarrow,\uparrow\rangle) \\ |s\rangle \end{cases}$$

(oppure: $\{|0,1\rangle; |1,b\rangle; |b,0\rangle; |b,b\rangle\}$)

è un'altra base...
base computazionale, qui meno utile per la teoria delle perturbazioni

- Ordine 0: $t=0 \rightarrow H_0 = V \sum_i h_{ii} h_{ii}$

tutti gli elementi della base scelta hanno energie zero

\rightarrow ho trascurato gli stadi di doppia occupazione, $\{|1b,0\rangle; |0,1b\rangle\}$
perché hanno energie V

- Ordine 1: $\delta \hat{H} \rightarrow \langle 1,1 | \delta \hat{H} | 1,1 \rangle = \langle 1,-1 | \delta \hat{H} | 1,-1 \rangle = 0$

$$\delta \hat{H} |1,1\rangle = \delta \hat{H} |1,-1\rangle = 0$$

$$\langle 1,0 | \delta \hat{H} | 1,0 \rangle = 0 \quad \langle 0,0 | \delta \hat{H} | 0,0 \rangle = 0$$

$$\delta \hat{H} |1,0\rangle \neq 0 (?)$$

1 elettrone per sito

zelettroni su un sito
e o sull'altro

$$\delta \hat{H} |1,0\rangle = \delta \hat{H} \left[\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow,\downarrow\rangle + |\downarrow,\uparrow\rangle) \right] = \left[-t \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} + \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma} \right] \dots =$$

$$= -t \left(\hat{c}_{1,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{2,\uparrow} + \hat{c}_{1,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{2,\downarrow} + \hat{c}_{2,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{1,\uparrow} + \hat{c}_{2,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{1,\downarrow} \right) \dots$$

$$\hat{c}_{1,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{2,\uparrow} |1,0\rangle = |\uparrow b,0\rangle$$

Ordine 1 la perturbazione $\delta \hat{H}$ non fa nulla sui gli stadi t, s

- Ordine 2: $\delta E_m^{(2)} = \sum_{n+m} \frac{\langle m | \delta \hat{H} | n \rangle \langle n | \delta \hat{H} | m \rangle}{E_m^{(1)} - E_n^{(1)}} \quad |m\rangle \in \{t, s\}$

N.B. quando creo particelle devo prestare attenzione all'ordine in cui le creo/distruggo

$$\dots \hat{c}^\dagger \hat{c}^\dagger \hat{c}^\dagger |S\rangle$$

I • prima metto i fermioni sui siti e poi sui siti I

$$\hat{c}_1^\dagger \hat{c}_2^\dagger |SC\rangle = -\hat{c}_2^\dagger \hat{c}_1^\dagger |SC\rangle$$

II • prima creo spin \uparrow , poi spin \downarrow

$$\hat{c}_{1\uparrow}^\dagger \hat{c}_{1\downarrow}^\dagger |SC\rangle = -\hat{c}_{1\downarrow}^\dagger \hat{c}_{1\uparrow}^\dagger |SC\rangle$$

$$\delta\hat{H} |\uparrow, \downarrow\rangle = -t (\hat{c}_{1\uparrow}^\dagger \hat{c}_{2\uparrow} + \hat{c}_{1\downarrow}^\dagger \hat{c}_{2\downarrow} + \hat{c}_{2\uparrow}^\dagger \hat{c}_{1\uparrow} + \hat{c}_{2\downarrow}^\dagger \hat{c}_{1\downarrow}) : \hat{c}_{1\uparrow}^\dagger \hat{c}_{2\downarrow}^\dagger |SC\rangle =$$

$$= -t (\cancel{\hat{c}_{1\uparrow}^\dagger \hat{c}_{2\uparrow} \hat{c}_{1\downarrow}^\dagger \hat{c}_{2\downarrow}} + \cancel{\hat{c}_{1\downarrow}^\dagger \hat{c}_{2\downarrow} \hat{c}_{1\uparrow}^\dagger \hat{c}_{2\uparrow}} + \hat{c}_{2\uparrow}^\dagger \hat{c}_{1\uparrow} \hat{c}_{1\downarrow}^\dagger \hat{c}_{2\downarrow} + \cancel{\hat{c}_{2\downarrow}^\dagger \hat{c}_{1\downarrow} \hat{c}_{1\uparrow}^\dagger \hat{c}_{2\uparrow}}) |SC\rangle$$

$$= -t (\hat{c}_{1\uparrow}^\dagger \hat{c}_{1\downarrow}^\dagger + \hat{c}_{2\uparrow}^\dagger \hat{c}_{2\downarrow}^\dagger) |SC\rangle$$

$$\delta\hat{H} |\downarrow, \uparrow\rangle = -t (---) \hat{c}_{1\downarrow}^\dagger \hat{c}_{2\uparrow}^\dagger |SC\rangle$$

$$= -t (\hat{c}_{1\uparrow}^\dagger \hat{c}_{1\downarrow}^\dagger + \hat{c}_{2\uparrow}^\dagger \hat{c}_{2\downarrow}^\dagger) |SC\rangle$$

$$\delta\hat{H} (|1,0\rangle) = \delta\hat{H} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow, \downarrow\rangle + |\downarrow, \uparrow\rangle) \right) = 0 \quad \text{inoltre } \delta\hat{H} (|1,1\rangle) = \delta\hat{H} (|1,-1\rangle) = 0 \Rightarrow \text{il tripletto NON cambia energia neanche al II ordine}$$

$$\delta\hat{H} (|0,0\rangle) = -\frac{zt}{\sqrt{2}} (|1\downarrow, 0\rangle + |0, 1\rangle) \neq 0$$

il singuletto scende in energia: $\delta E_{|0,0\rangle}^{(2)} = \frac{zt \cdot zt}{Q-U} = -\frac{4t^2}{U}$

\hat{S}_1, \hat{S}_2 op. di spin dei due elettroni

$$\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 = \frac{1}{2} \left[\left(\hat{S}_1^z + \hat{S}_2^z \right)^2 - \hat{S}_1^z \hat{S}_2^z - \hat{S}_2^z \hat{S}_1^z \right] = \begin{cases} \frac{1}{2} \left(0 - 2 \cdot \frac{3}{4} \right) = -\frac{3}{4} & \text{singuletto} \\ \frac{1}{2} \left(\frac{1}{4} - 2 \cdot \frac{3}{4} \right) = \frac{1}{4} & \text{tripletto} \end{cases}$$

$\stackrel{S_{\text{tot}}(S_{\text{tot}}+1)}{\downarrow} \quad \stackrel{S(S+1)}{\uparrow} \quad (S=1/2)$

$$\hat{H}_{\text{eff}} \sim -\langle \hat{J} \cdot \hat{P}_{\text{singuletto}}(1,2) \rangle = -\frac{4t^2}{U} \underbrace{\left(\frac{1}{4} - \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 \right)}_{\hat{P}_{\text{singuletto}}} \quad \text{Hamiltoniana efficace}$$

$\stackrel{\text{proiettore}}{\uparrow} \quad \stackrel{S_0 \parallel 0 \text{ stato}}{\downarrow} \quad \stackrel{\text{di singuletto}}{\downarrow}$

$$\hat{H}_{\text{eff}} \sim \frac{4t^2}{U} \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$$

fin qui abbiamo preso solo 2 siti, 2 elettroni

■ Ora se prendiamo n siti

modelli d'

$$\hat{H}_{\text{eff}} \sim \frac{4t^2}{U} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{\hat{s}}_i \cdot \vec{\hat{s}}_j$$

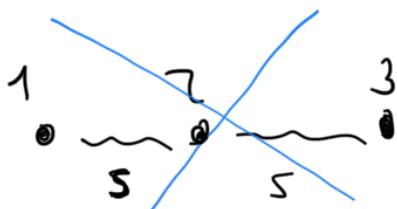
Heisenberg

$$\vec{\hat{s}}_i = \frac{1}{2} (\hat{\sigma}_{ix}, \hat{\sigma}_{iy}, \hat{\sigma}_{iz})$$

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\vec{\hat{s}}_i \cdot \vec{\hat{s}}_j \equiv \hat{\sigma}_{ix} \hat{\sigma}_{jx} + \hat{\sigma}_{iy} \hat{\sigma}_{jy} + \hat{\sigma}_{iz} \hat{\sigma}_{jz}$$

$$\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{matrici di Pauli}$$



$$\hat{H}_{\text{eff}}^{(3)} = \frac{4t^2}{U} \sum_{i=1}^2 \vec{\hat{s}}_i \cdot \vec{\hat{s}}_{i+1}$$

• frustrazione quantistica

(monogamia dell'entanglement)

• Coffman, Kundu, Wootters, Phys. Rev. A 61, 052306 (2000)

$$\begin{aligned} \text{es: } |\psi^{(3)}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\downarrow, 1\rangle - |1\uparrow, 1\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\downarrow, 1\rangle_1 - |1\uparrow, 1\rangle_1) \otimes |1\rangle_3 \end{aligned}$$

1-2 singoletto
3 è scaricato

$$\text{es: } |\tilde{\psi}^{(3)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\uparrow, 1\rangle - |1\downarrow, 1\rangle)$$

non abbiamo singoletti

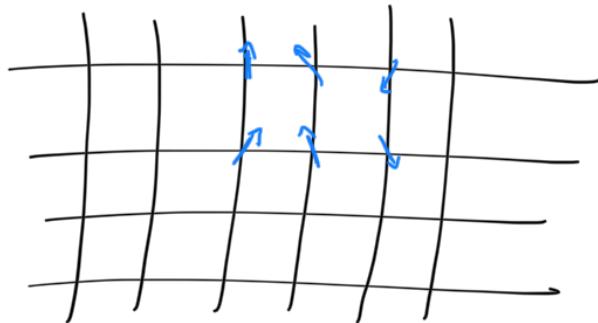
NON è possibile trovare alcuno stato $|\psi^{(3)}\rangle$ che sia in grado di descrivere simultaneamente due legami di singoletto 1-2 e 2-3

Cioè NON è mai possibile che $\text{Tr}_3 |\psi^{(3)}\rangle \langle \psi^{(3)}|$
e $\text{Tr}_1 |\psi^{(3)}\rangle \langle \psi^{(3)}|$

siano entrambi degli stati di singoletto

(segue dalle proprietà geometriche degli spazi di Hilbert)

Catene/teticoli di spin quantistici



sulla stessa sit.

$$[\hat{\sigma}_i^\alpha, \hat{\sigma}_j^\beta] = 2i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{\sigma}_i^\gamma$$

i: indice di sit,

$$\alpha = x, y, z$$

su siti differenti i+j

$$[\hat{\sigma}_i^\alpha, \hat{\sigma}_j^\beta] = 0$$

SU ogni sito impegno di avere uno spin quantistico

$$\text{es. } S=\frac{1}{2}$$

$$H_{\text{locale}} = \text{Span} \{ | \uparrow \rangle, | \downarrow \rangle \}$$

$$| \psi \rangle_i = \alpha | \uparrow \rangle_i + \beta | \downarrow \rangle_i$$

qubit (quantum bit)

$$| \uparrow \rangle \equiv | 0 \rangle$$

$$| \downarrow \rangle \equiv | 1 \rangle$$

- sistemi in 1D quantistici possono presentare caratteristiche peculiari (sono interessanti) e si prestano meglio a trattamenti numerici di diagonalizzazione esatta
- 2D complicato sia numericamente che analiticamente
- 3D e oltre \rightarrow fisica studiabile con altre tecniche (per certi versi più banale)

es. • Hubbard 1D è risolvibile analiticamente (\rightarrow Bethe ansatz)
MA soluzione non è del tutto trasparente

• Hubbard 2D \rightarrow problema difficile da trattare
(fisica dei superconduttori ad alte temperature...)

① 1D catene di spin / fermioni

Trasformazione di Jordan-Wigner

passate da fermioni a spin (e viceversa)

anticomutano

commutano

ipotesi:	fermionico	spin
	$ 0 \rangle \leftrightarrow \downarrow \rangle$	
	$ 1 \rangle \leftrightarrow \uparrow \rangle$	

(trascurano il grado di libertà dello spin nei fermioni)

→ fermioni "spinless"

$\hat{c}_i^\dagger, \hat{c}_i$ i: indice di site

$\hat{c}_i \sim \hat{\sigma}_i^-$ intuitivamente dovei fare questo mapping

$$\begin{cases} \hat{c}_i |1\rangle_i = |0\rangle_i \\ \hat{c}_i |0\rangle_i = 0 \end{cases} \Rightarrow \text{posso associare } \hat{c}_i \sim \hat{\sigma}_i^-$$

$$\hat{\sigma}_i^- |1\rangle_i = |0\rangle_i \quad \text{operatore di abbassamento dello spin-1/2}$$

$$\hat{\sigma}_i^- |0\rangle_i = 0$$

$$\hat{\sigma}_i^- = \frac{1}{2} (\hat{\sigma}_i^x + i\hat{\sigma}_i^y)$$

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \sigma^- = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

analogamente

$\hat{c}_i^\dagger \sim \hat{\sigma}_i^+$

operatore di innalzamento dello spin-1/2

$$\hat{c}_i^\dagger |0\rangle_i = |1\rangle_i$$

$$\hat{c}_i^\dagger |1\rangle_i = 0$$

$$\hat{\sigma}_i^+ |0\rangle_i = |1\rangle_i$$

$$\hat{\sigma}_i^+ |1\rangle_i = 0$$

$$\hat{\sigma}_i^+ = \frac{1}{2} (\hat{\sigma}_i^x - i\hat{\sigma}_i^y) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

→ se ho più di un sito, queste cose NON va più bene! ($|S\rangle \equiv |0,0\rangle$)

$$\hat{c}_1^\dagger \hat{c}_1^\dagger |S\rangle \neq \hat{c}_1^\dagger \hat{c}_1^\dagger |S\rangle$$

$$\hat{c}_2^\dagger \hat{c}_1^\dagger |S\rangle = |1,1\rangle$$

$$\hat{\sigma}_2^+ \hat{\sigma}_1^+ |b,b\rangle = \hat{\sigma}_1^+ \hat{\sigma}_2^+ |b,b\rangle = |1,1\rangle$$

$$\hat{c}_2^\dagger \hat{c}_1^\dagger |S\rangle = \underline{-} |1,1\rangle$$

differente

ricetta di
Jordan-Wigner
(*)

$$\hat{c}_i = \left(\prod_{k < i} \hat{\sigma}_k^z \right) \hat{\sigma}_i^-$$

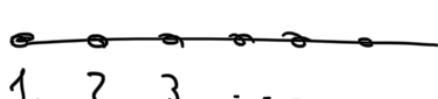
operatore di "stringa" di Jordan-Wigner

$$\hat{c}_i^\dagger = \hat{\sigma}_i^+ \left(\prod_{k < i} \hat{\sigma}_k^z \right)$$

$$(n_i = \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i \equiv \hat{\sigma}_i^+ \hat{\sigma}_i^-)$$

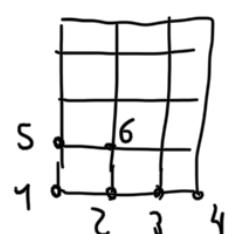
• presuppone un ordinamento tra i vari siti ($k < i$)

→ in 1D è naturale



→ in D>1 è meno immediato

qui la trasc. J-W è meno utile...



$$(*) \quad \left\{ \begin{array}{l} \{\hat{c}_i, \hat{c}_j^\dagger\} = \delta_{ij} \\ \{\hat{c}_i, \hat{c}_j\} = \{\hat{c}_i^\dagger, \hat{c}_j^\dagger\} = 0 \end{array} \right. \Leftrightarrow \sum \sigma_i^a \sigma_j^b \delta_{ij} \delta_{ab}$$

si dimostra

$$\text{es: } \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_{i+1} = \left[\hat{G}_i^\dagger \left(\prod_{k < i} \hat{G}_k^z \right) \right] \left[\left(\prod_{e > i+1} \hat{G}_e^z \right) \hat{G}_{i+1}^- \right] = \\ = \hat{G}_i^\dagger \left(\hat{G}_1^z \hat{G}_2^z \dots \hat{G}_{i-1}^z \right) \left(\hat{G}_1^z \hat{G}_2^z \dots \hat{G}_{i-1}^z \hat{G}_i^z \right) \hat{G}_{i+1}^- - \hat{G}_i^\dagger \hat{G}_i^z \hat{G}_{i+1}^-$$

$$\hat{c}_{i+1} \hat{c}_i^\dagger = \hat{G}_{i+1}^- \hat{G}_i^z \hat{G}_i^\dagger \text{ differiscono per un segno meno}$$

Nelle simulazioni numeriche conviene sempre implementare sistemi di spin (il problema degli anticommutatori fermionici si risolve con la trasformazione J-W)

Invece di Hubbard prendiamo un modello di fermioni SENZA spin (il grado di libertà di spin è "congelato")

$$\hat{H}_{t-V} = -t \sum_j (\hat{c}_j^\dagger \hat{c}_{j+1} + \hat{c}_{j+1}^\dagger \hat{c}_j) + V \underbrace{\sum_j \hat{n}_j \hat{n}_{j+1}}_{\text{repulsione a primi vicini}} \quad (t, V > 0)$$

Modello t-V in 1D

risolubile analiticamente con Bethe ansatz

$$\hat{H}_{t-V} = -\frac{t}{2} \sum_j \underbrace{\left(\hat{\sigma}_j^x \hat{\sigma}_{j+1}^x + \hat{\sigma}_j^y \hat{\sigma}_{j+1}^y \right)}_{\text{prodotto tensoriale}} + \frac{V}{4} \sum_j \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z - \frac{V}{2} \sum_j \hat{\sigma}_j^z + \text{cost.}$$

$$\text{repulsivo} \quad \downarrow$$

$$\text{modello XXZ} \quad (+ \text{campo magnetico})$$

$$\hat{\sigma}_j^x \hat{\sigma}_{j+1}^x = \hat{\sigma}_j^x \otimes \hat{\sigma}_{j+1}^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \left[\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right] \cdot 2$$

$$(*) \quad \hat{n}_j \hat{n}_{j+1} = \underbrace{\hat{\sigma}_j^+ \hat{\sigma}_j^- \hat{\sigma}_{j+1}^+ \hat{\sigma}_{j+1}^-}_{\downarrow} = \frac{1}{4} (1 - \hat{\sigma}_j^z) (1 - \hat{\sigma}_{j+1}^z) = \frac{1}{4} + \frac{1}{4} \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z - \frac{1}{4} (\hat{\sigma}_j^z + \hat{\sigma}_{j+1}^z)$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} (\mathbb{1} - \hat{\sigma}_z)$$

Heisenberg (XXX)

$$\hat{H}_{XXX} \sim J \sum_j (\hat{\sigma}_j^x \hat{\sigma}_{j+1}^x + \hat{\sigma}_j^y \hat{\sigma}_{j+1}^y + \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z)$$

XXZ

$$\hat{H}_{XXZ} \sim J_z \sum_j (\hat{\sigma}_j^x \hat{\sigma}_{j+1}^x + \hat{\sigma}_j^y \hat{\sigma}_{j+1}^y) + J_z \sum_j \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z$$

- \Rightarrow Nella JWT di $\hat{C}_i^{\dagger} \hat{C}_{i+1} + \hat{C}_{i+1}^{\dagger} \hat{C}_i$ l'operatore \hat{G}_i^z nella stringa può essere riasorbito

$$\hat{C}_i^{\dagger} \hat{C}_{i+1} = \underbrace{\hat{G}_i^+ \hat{G}_i^z \hat{G}_{i+1}^-}_{\hat{G}_i^z \text{ agisce a destra sullo stato } | \downarrow \rangle} \quad \text{in tutti e due i casi}$$

$$\hat{C}_{i+1}^{\dagger} \hat{C}_i = \hat{G}_{i+1}^+ \underbrace{\hat{G}_i^z \hat{G}_i^-}_{\hat{G}_i^z \text{ agisce a sinistra sullo stato } | \downarrow \rangle}$$

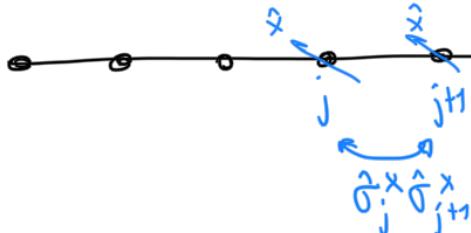
- Il segno davanti a t nel modello t-V può essere cambiato facendo una trasformazione unitaria

$$\begin{array}{c} \hat{U} = \prod_j \hat{R}_j(\hat{z}, \pi) \\ \left(\hat{U} \hat{H}_{xxz} \hat{U}^\dagger = \hat{H}_{xxz} \right) \end{array} \quad \begin{array}{c} \underline{\hat{J}_z \rightarrow \hat{J}_z} \\ \underline{\hat{J}_\perp \rightarrow -\hat{J}_\perp} \end{array} \quad \begin{array}{c} (\hat{J}_x \rightarrow \hat{J}_x) \\ (\hat{J}_y \rightarrow -\hat{J}_y) \end{array}$$

I sing quantistico 1D, in campo trasverso

$$\hat{H}_{IS} = -J \sum_j \hat{\sigma}_j^x \hat{\sigma}_{j+1}^x - g \sum_j \hat{\sigma}_j^z$$

↑ ortogonale alla direzione
dell'accoppiamento tra spin



$J > 0$ accoppiamento ferromagnetico
 $g > 0$ senza perdita di generalità

→ trasformato in modello fermionario (Jordan Wigner) $^{-1}$

$$\hat{H}_f = -J \sum_j \left[(\hat{c}_j^\dagger \hat{c}_{j+1} + \hat{c}_{j+1}^\dagger \hat{c}_j) + (\hat{c}_j^\dagger \hat{c}_{j+1}^\dagger + \hat{c}_{j+1} \hat{c}_j) \right] - 2g \sum_j \left(\hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j - \frac{1}{2} \right)$$

- Non conserva la magnetizzazione lungo \hat{z} : $[\hat{H}_{IS}, \hat{S}^z] \neq 0$

$$\hat{S}^z = \sum_j \hat{\sigma}_j^z$$

(in linguaggio fermionario: $\hat{S}^z \rightarrow \hat{N}_f = \sum_j \hat{n}_j$ $[\hat{H}_f, \hat{N}_f] \neq 0$)
 $\hat{n}_j = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_j^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

- MA conserva la parità fermionica/degli spin lungo \hat{z}

$$\hat{P} = \prod_j \hat{\sigma}_j^z$$

$$[\hat{H}_{IS}, \hat{P}] = 0$$

\hat{H}_f è quadratico negli op. fermionici

⇒ Ci permette di diagonalizzarla in modo "analitico"

facendo un cambiamento della base su cui si scrivono gli op. fermionici (trasformazione di Bogoliubov)

$$\vec{\psi}^T = (\hat{c}_1^\dagger, \hat{c}_2^\dagger, \dots, \hat{c}_n^\dagger, \hat{c}_1, \hat{c}_2, \dots, \hat{c}_n) \quad \text{vettore } 2n\text{-dimensionale}$$

$$\hat{H}_f = \hat{\psi}^T \hat{H} \hat{\psi}$$

\hat{H} matrice $2n \times 2n$ (la cui dimensione scale)
 → diagonalizzabile \hat{H} linearmente in n

$$\Rightarrow \hat{H}_f = 2 \sum_k \epsilon_k \left(\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k - \frac{1}{2} \right)$$

operatori di Bogoliubov che diagonalizzano \hat{H}_f
fermionici

$$\epsilon_k = J \sqrt{1 + \frac{g^2}{J^2} + \frac{2g}{J} \cos\left(\frac{2\pi k}{n}\right)}$$

$$k: -\frac{n}{2} + 1, -\frac{n}{2} + 2, \dots, \frac{n}{2}$$

dipende dalle
parità di n
e da quelle
dei \hat{b}_k

- Lo stato fondamentale di \hat{H}_f è il vuoto rispetto agli operatori \hat{b}, \hat{b}^\dagger $\rightarrow |\Omega_b\rangle : \hat{b}_k |\Omega_b\rangle = 0 \forall k$
- $E_{\text{g.s.}} = - \sum_k \epsilon_k$

- gli operatori $\hat{b}_k^\dagger / \hat{b}_k$ creano/ distruggono delle "quasi-particelle" (ne ho n , pari al numero di siti)
- gli stessi eccitati sono costruiti a partire del vuoto $|\Omega_b\rangle$ e creando quasi-particelle: $\dots \hat{b}_s^\dagger \hat{b}_1^\dagger |\Omega_b\rangle$

l'energia associata a quell'autostato è data dalle leggi di dispersione ϵ_k

→ "integrità" del modello di Ising 1D

\exists costanti del moto NON banali

$$\hat{n}_k = \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k : [\hat{H}, \hat{n}_k] = 0 \quad \forall k$$

- in sistemi arbitrari NON integrabili, posso sempre trovare delle costanti del moto, ne sono "ovvie" $\hat{P}_j = |\psi_j \rangle \langle \psi_j|$ proiettori sui vari autostati (in numero pari a 2^n) $|\psi_j\rangle$ è autostato di \hat{H} $[\hat{P}_j, \hat{H}] = 0 \Leftrightarrow \hat{H}|\psi_j\rangle = \epsilon_j |\psi_j\rangle$

→ distinguere numericamente tra un sistema "integrabile" e un sistema "non integrabile" è fattibile guardando le LEVEL SPACINGS STATISTICS (LSS)

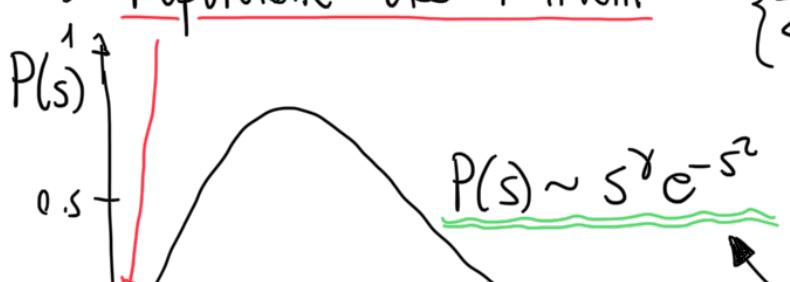
$$\hat{H} \rightarrow \{E_j\}_{j=1 \dots 2^n} \text{ spettro energetico} \quad E_1 \leq E_2 \leq E_3 \leq \dots \leq E_{2^n}$$

$$\delta E_j \equiv E_{j+1} - E_j \quad (j=1 \dots 2^n-1) \quad [\text{spaziature tra livelli adiacenti}]$$

istogramma dei $\delta E_j / \langle \delta E_j \rangle$ (normalizzati sul valor medio delle spaziature)

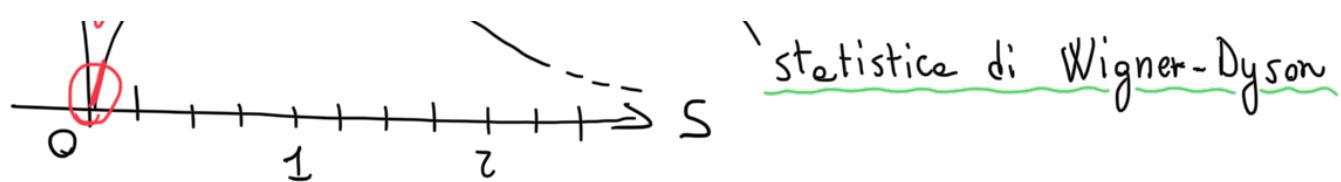
(A)

se il sistema Non è integrabile
 \Rightarrow repulsione tra i livelli

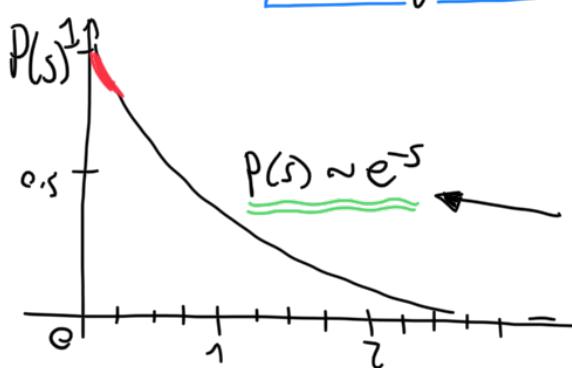


$$\left\{ \frac{\delta E_j}{\langle \delta E_j \rangle} \right\}_{j=1 \dots 2^n-1} \quad \text{non sono mai nulli}$$

(γ dipende da alcune proprietà di \hat{H})



- (B) se il sistema **è integrabile** $\Rightarrow p(s)$ in $s=0$ è diverso da zero ed è grande



se le spazieture sono distribuite in modo random \Rightarrow **statistica poissoniana**

\Rightarrow **level crossing**
(moltissime degenerazioni)

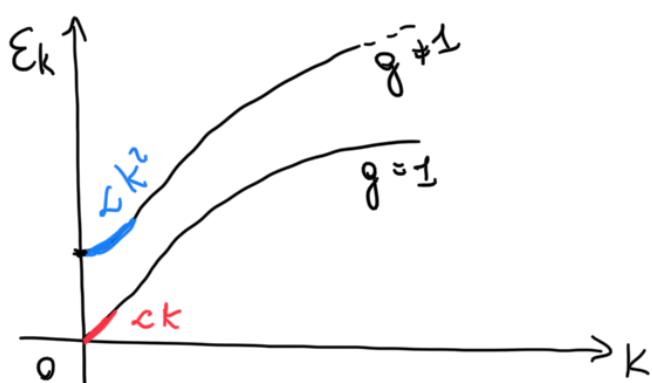
Torniamo a Ising

$$\hat{H}_I = \sum_k \varepsilon_k (\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k - \frac{1}{2})$$

$$\varepsilon_k = \sqrt{1+g^2 - 2g \cos\left(\frac{2\pi k}{n}\right)}$$

il segno -
è ininfluente

$(J=1$ fissa le scale
di energia)

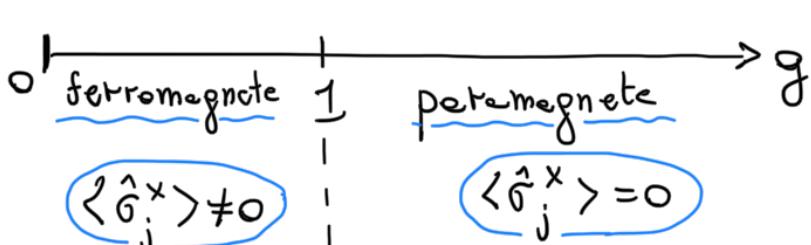


$$\varepsilon_k \xrightarrow{k \rightarrow \infty} \begin{cases} \varepsilon_0 & \text{se } g \neq 1 \\ 0 & \text{se } g = 1 \end{cases}$$

- gap tra ground state e 1° eccitato
è nullo se $g=1$ (nel limite)
 >0 se $g \neq 1$ $n \rightarrow +\infty$

- **g=1** punto critico di Ising

E' transizione di fase quantistica sul ground state (temperatura zero)
al variare del parametro g



$$\hat{H}_{Is} = -\sum_j \hat{\sigma}_j^x \hat{\sigma}_{j+1}^x - g \sum_j \hat{\sigma}_j^z$$

$$\langle \psi_{gs.} | \hat{\sigma}_j^x | \psi_{gs.} \rangle = M_j^x$$

- Analiticamente: $\hat{\sigma}_j^x \xrightarrow{\text{J.W.}} \hat{c}_j \hat{c}_j^\dagger \xrightarrow{\text{Bog.}} \hat{b}_k^\dagger, \hat{b}_k$ $|\psi_{gs.}\rangle \equiv |\psi_k\rangle$ tale che:

è più semplice

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle \hat{\sigma}_j^x \hat{\sigma}_{j+t}^x \rangle$$

... \hat{H}_C è un sistema

$$\langle \hat{b}_k | \hat{b}_k \rangle = 0$$

$$\langle \hat{b}_k^\dagger | \hat{b}_k^\dagger \rangle = 0$$

Teorema di Wick
di FERMIONI LIBERI)

$$\begin{cases} \langle b_k^{\dagger} b_k \rangle_0 = 0 \\ \langle b_k^{\dagger} b_k \rangle_0 = 1 \end{cases}$$

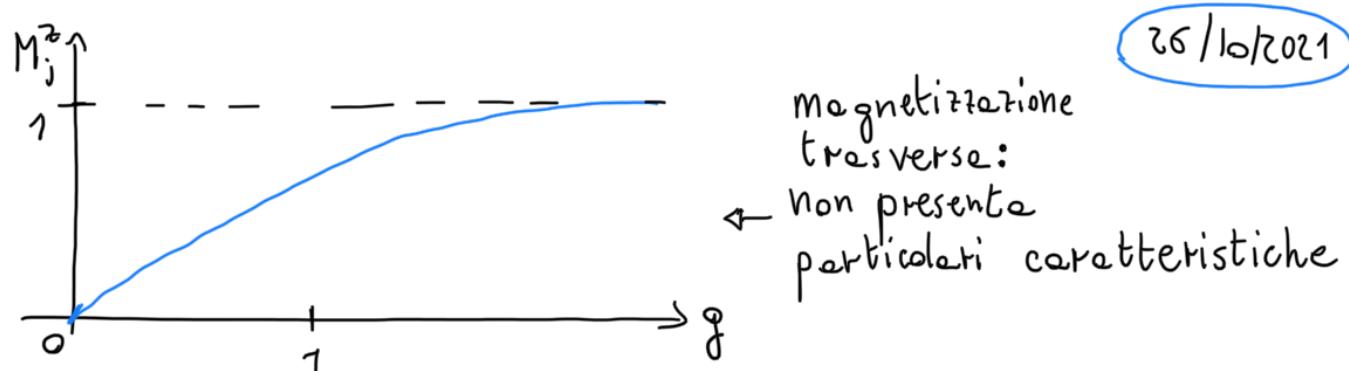
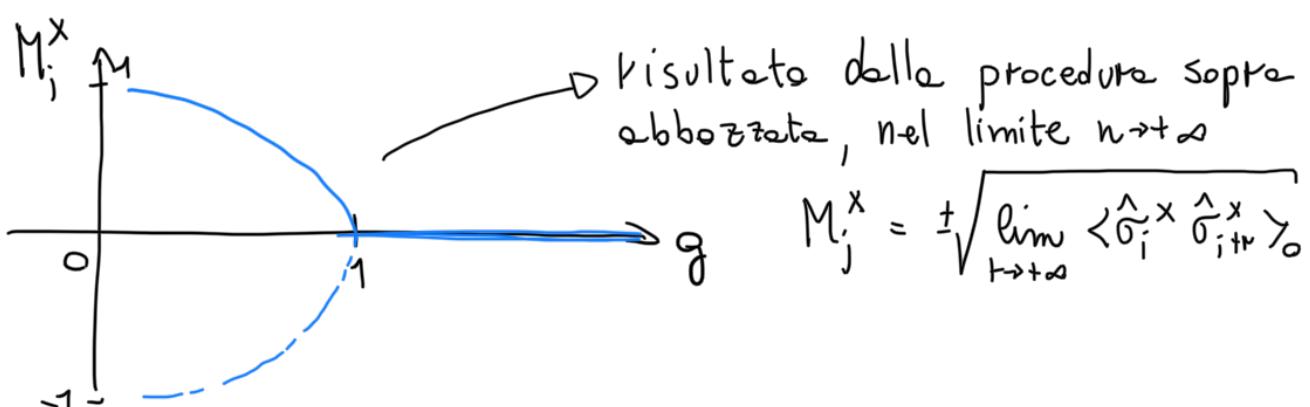
determinante di matrice antisimmetrica

$M_{je} = \langle \hat{c}_j^{\dagger} \hat{c}_e \rangle$ e altri blocchi simili, del tipo
 $\langle \hat{c}_j^{\dagger} \hat{c}_e^{\dagger} \rangle; \langle \hat{c}_j^{\dagger} \hat{c}_e \rangle; \langle \hat{c}_j \hat{c}_e \rangle$
 $\forall j, e = 1 \dots n$

Ulteriori dettagli in:

→ Sachdev, "Quantum Phase Transitions" (Cambridge, 1998)

→ Benenti, Casati, Rossini, Strini, "Principles of quantum computation and information: a comprehensive review", Chap. 11 (World Scientific)



→ Riprendiamo Ising 1D in campo trasverso:

$$\hat{H}_{IS} = -J \sum_j \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z - g \sum_j \hat{\sigma}_j^x$$

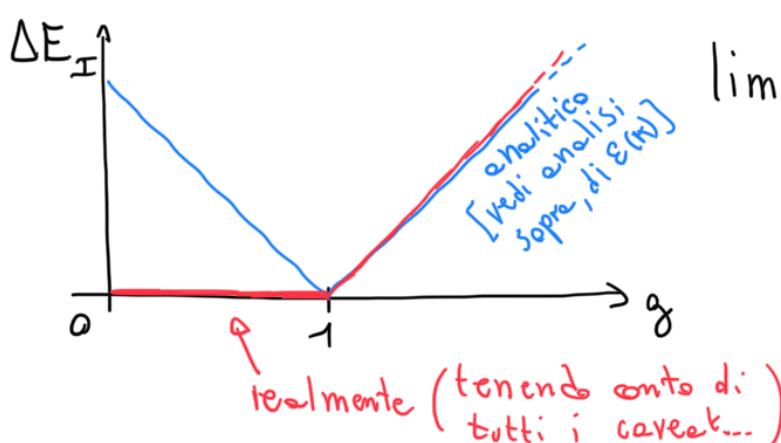
• Note: scambio X con Z

Z: coupling

X: campo trasverso

● ENERGIE del g.s. e primo stato eccitato

Analitico: $\Delta E_I = E_I - E_0 = 2|g-1|$ (cond. al contorno aperto)

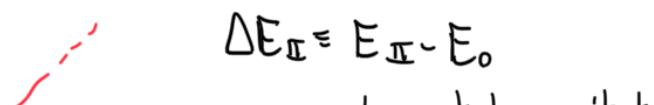


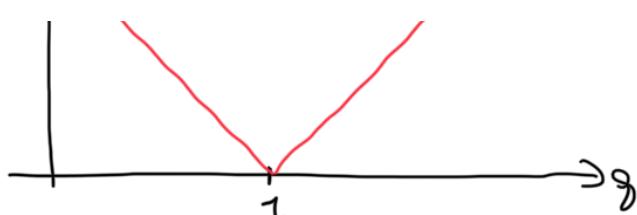
limite termodinamico ($N \rightarrow +\infty$)

→ per $g < 1$ il ground state è degenero (2 stati degeneri)

$$\Delta E_{II}$$

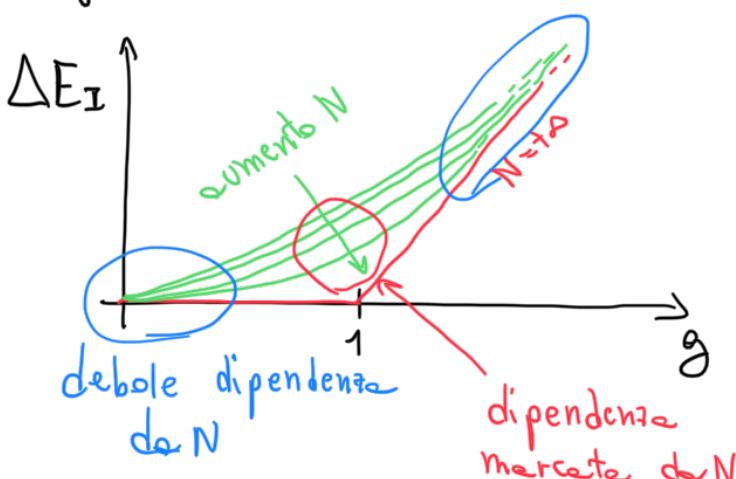
$$\Delta E_{II} = E_{II} - E_0$$





gep col II sielo eccellere

A taglia N finita si osserva:



se $g \neq 1$ ci aspettiamo dipendenza ESPOENZIALE da N

- $g < 1 \Rightarrow \Delta E_I \sim e^{-\alpha(g) \cdot N}$
 $\alpha(g)$ cresce allontanandosi da $g=1$
- $g > 1 \Rightarrow \Delta E_I \sim 2|g-1| + e^{-\tilde{\alpha}(f) \cdot N}$
- Se $g=1$ ci aspettiamo dipendenza POLINOMIALE da N
 $\Delta E_I \sim N^{-z}$ ($z=1$ per Ising 1D - esponente critico dinamico)

● Simmetrie di Ising:

$$[\hat{H}_{IS}, \hat{P}_z] = 0$$

\uparrow $\underbrace{\prod_j \hat{\sigma}_j^x}_{\text{ovvio}}$
 $-\sum_j \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z - g \sum_j \hat{\sigma}_j^x$

$$\hat{P}_z = \prod_{j=1}^N \hat{\sigma}_j^x$$

inversione di tutti gli spin $|1\rangle \rightarrow |0\rangle$
 $|0\rangle \rightarrow |1\rangle$

$$(*) [\hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z, \hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x \dots \hat{\sigma}_j^x \hat{\sigma}_{j+1}^x \dots] = 0$$

$$\Leftrightarrow [\hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z, \hat{\sigma}_j^x \hat{\sigma}_{j+1}^x] = 0$$

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A}\hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}$$

$$\begin{aligned} \hat{A} &\equiv \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z, \\ \hat{B} &\equiv \hat{\sigma}_j^x, \\ \hat{C} &\equiv \hat{\sigma}_{j+1}^x, \end{aligned}$$

$$\hat{\sigma}_j^x [\hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z, \hat{\sigma}_{j+1}^x] + [\hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z, \hat{\sigma}_j^x] \hat{\sigma}_{j+1}^x =$$

$$= \hat{\sigma}_j^x \hat{\sigma}_j^z [\hat{\sigma}_{j+1}^z, \hat{\sigma}_{j+1}^x] + [\hat{\sigma}_j^z, \hat{\sigma}_j^x] \hat{\sigma}_{j+1}^z \hat{\sigma}_{j+1}^x = -i \hat{\sigma}_j^x (i \hat{\sigma}_{j+1}^y) +$$

$$\underbrace{-i \hat{\sigma}_{j+1}^y}_{2i \hat{\sigma}_j^y} \underbrace{+ (i \hat{\sigma}_j^y) (i \hat{\sigma}_{j+1}^y)}_{=0} = 0$$

$$\hat{\sigma}_j^x \hat{\sigma}_j^z = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = -i \hat{\sigma}_j^y$$

$$\hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_j^x = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = i \hat{\sigma}_j^y$$

stati a magnetizzazione massime e minime

→ supponiamo che $|n_1\rangle$ e $|n_2\rangle$ siano i due autostati del sottospazio a energia minima (fondamentale) → vero per $N \rightarrow \infty$ e $g < 1$

$$|n_1\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

$|\bar{n}\rangle$ si ottiene da $|n\rangle$ invertendo gli spin lungo z

$$|n_2\rangle = \sum_n c_n |\bar{n}\rangle$$

$$|n\rangle = |11110000\rangle \rightarrow |\bar{n}\rangle = |00001111\rangle$$

(*)

$$\langle \psi | \hat{H}^z | \psi \rangle \text{ dove } |\psi\rangle = \alpha |\psi_1\rangle + \beta |\psi_2\rangle$$

$$\hookrightarrow = (\langle \psi_1 | \alpha^* + \langle \psi_2 | \beta^*) \left(\sum_j \hat{\sigma}_j^z \right) (\alpha |\psi_1\rangle + \beta |\psi_2\rangle) =$$

$$= |\alpha|^2 \sum_n |c_n|^2 \sum_j \langle n | \hat{\sigma}_j^z | n \rangle + |\beta|^2 \sum_n |c_n|^2 \sum_j \langle \bar{n} | \hat{\sigma}_j^z | \bar{n} \rangle$$

$$+ \alpha^* \beta \sum_n |c_n|^2 \sum_j \cancel{\langle n | \hat{\sigma}_j^z | \bar{n} \rangle} + \cancel{\dots \langle \bar{n} | \hat{\sigma}_j^z | n \rangle} = 0$$

$$\sum_j \langle n | \hat{\sigma}_j^z | n \rangle = - \sum_j \langle \bar{n} | \hat{\sigma}_j^z | \bar{n} \rangle \quad \text{perché vale \#}$$

$$\Rightarrow \langle \psi | \hat{H}^z | \psi \rangle = \sum_n |c_n|^2 \sum_j \langle n | \hat{\sigma}_j^z | n \rangle (|\alpha|^2 - |\beta|^2)$$

Se $\alpha = \pm \beta \Rightarrow \langle \hat{H}^z \rangle = 0$

- Se $\alpha = +\beta \Rightarrow |\psi_s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_n |c_n|^2 (|n\rangle + |\bar{n}\rangle)$
stato simmetrico rispetto a $|\psi_1\rangle$ e $|\psi_2\rangle$

$$\hat{P}_z |\psi_s\rangle = |\psi_s\rangle \quad \text{perché } \hat{P}_z |n\rangle = |\bar{n}\rangle ; \quad \hat{P}_z |\bar{n}\rangle = |n\rangle$$

- se $\alpha = -\beta \Rightarrow |\psi_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_1\rangle - |\psi_2\rangle) \quad \hat{P}_z |\psi_A\rangle = -|\psi_A\rangle$
stato antisimmetrico

- Numericamente, se N finito, si trova sempre che $|\psi_A\rangle$ e $|\psi_s\rangle$ sono i due autostati quasi-degeneri di energia più bassa (autostati comuni ad \hat{H}_{Is} e \hat{P}_z)

→ Per "rompere" la simmetria \hat{P}_z si può

1) romperla fisicamente

→ aggiungo un termine in \hat{H} che fa in modo da non commutare più con \hat{P}_z

• es: $-\hbar \sum_j \hat{\sigma}_j^z$

Modello di Ising in campo trasverso + longitudinale:

$$\hat{H}_{Is, s.b.} = -J \sum_j \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z - g \sum_j \hat{\sigma}_j^x - h \sum_j \hat{\sigma}_j^z$$

fluttuazioni quantistiche tutture di simmetria

$$[\hat{H}_{Is, s.b.}, \hat{P}_z] \neq 0$$

2) • Calcolare una quantità che è insensibile al verso degli spin Jungs

$$\tilde{M}_z = \sum_n |d_n|^2 \left| \sum_j \langle n | \hat{\sigma}_j^z | n \rangle \right| =$$

(prendo il modulo)

$$\left(\langle \psi \rangle = \sum_n d_n |n\rangle \right)$$

$$\left(|n\rangle = |\uparrow\downarrow\downarrow\dots\rangle ; |\bar{n}\rangle = |\downarrow\uparrow\downarrow\dots\rangle \right)$$

$$\sum_j \langle n | \hat{\sigma}_j^z | n \rangle = - \sum_j \langle \bar{n} | \hat{\sigma}_j^z | \bar{n} \rangle$$

$$= \sum_n |d_n|^2 \left[|\alpha|^2 \left| \sum_j \langle n | \hat{\sigma}_j^z | n \rangle \right| + |\beta|^2 \left| \sum_j \langle \bar{n} | \hat{\sigma}_j^z | \bar{n} \rangle \right| \right] =$$

\uparrow sono uguali \uparrow

$$= \sum_n |d_n|^2 \cdot \underbrace{(|\alpha|^2 + |\beta|^2)}_1 \cdot \left| \sum_j \langle n | \hat{\sigma}_j^z | n \rangle \right| \neq 0$$

Esempio banale, per $g=0$

$\text{Se } g=0 \quad \hat{H}_{Is} = -J \sum_j \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z \Rightarrow$ $ \psi_1\rangle = \uparrow\uparrow\dots\rangle$ $ \psi_2\rangle = \downarrow\downarrow\dots\rangle$	$\langle \psi_1 \hat{M}^z \psi_1 \rangle = 0$ $\langle \psi_2 \hat{M}^z \psi_2 \rangle = 0$
$ \psi_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow\downarrow\rangle - \downarrow\uparrow\rangle)$ $ \psi_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow\downarrow\rangle + \downarrow\uparrow\rangle)$	$M_A \quad \langle \psi_1 \hat{M}^z \psi_1 \rangle = +1$ $\langle \psi_2 \hat{M}^z \psi_2 \rangle = -1$
$\tilde{M}^z = \sum_n d_n ^2 \cdot \left \sum_j \langle n \hat{\sigma}_j^z n \rangle \right =$ $= \alpha_{\uparrow\uparrow} ^2 \cdot \left \sum_j \langle \uparrow\uparrow \hat{\sigma}_j^z \uparrow\uparrow \rangle \right +$ $+ \alpha_{\downarrow\downarrow} ^2 \cdot \left \sum_j \langle \downarrow\downarrow \hat{\sigma}_j^z \downarrow\downarrow \rangle \right = 1$	\leftarrow sovrapposizione generica $ \psi\rangle = d_{\uparrow\uparrow} \uparrow\uparrow\rangle + d_{\downarrow\downarrow} \downarrow\downarrow\rangle$

3) • Calcolare le f. di correlazione $C^{zz}(r) = \langle \psi | \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+r}^z | \psi \rangle$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} C^{zz}(r) = (\langle \psi | \hat{\sigma}_j^z | \psi \rangle)^2 = (\tilde{M}^z)^2$$

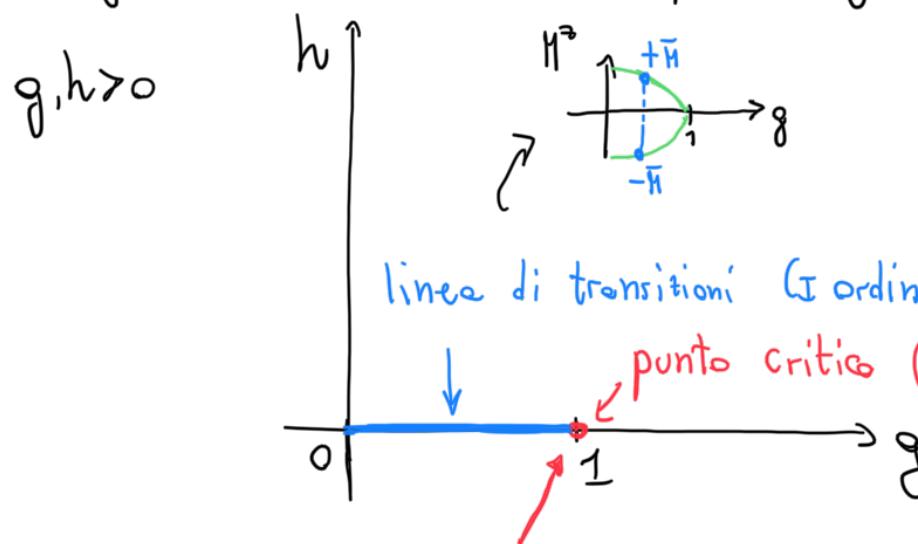
Approfondimenti • Cabrera, Jullien, Phys. Rev. B 35, 7002 (1987)
• Kitaev, cond-mat/0010440

$$\rightarrow \hat{H}_{Is, \text{s.b.}} = -J \sum_j \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z - g \sum_j \hat{\sigma}_j^x - h \sum_j \hat{\sigma}_j^z$$

il modello NON è più integrabile!

⇒ interessante dal punto di vista numerico

Diagramme di fase nel piano g-h (Temperatura nulla)



associato a esponenti critici
uguali al modello classico 2D

quantum-to-classical
mapping
d quantum \leftrightarrow (d+1) classic

Valgono le stesse considerazioni
di Ising classico 2D (fenomeni critici)

Temperature (classic) \leftrightarrow campo trasverso g (quantistico)

→ Finite-site scaling

- es: suscettività magnetica: $\chi = \frac{\partial M}{\partial h} \Big|_{h=0}$

numericamente si fa
il rapporto incrementale
con Δh piccolo

$$\chi \sim |t|^{-\gamma} \sim \xi^{\gamma/\nu} \quad (\xi \sim |t|^{-\nu})$$

$$t = g^{-1}$$

a taglie finite $\xi \sim N \Rightarrow \chi_{\max} \sim N^{\gamma/\nu}$ (el punto critico
efficace - N finito)

$$\rightarrow \text{vicino a } N: \chi(g, N) = N^{\gamma/\nu} \cdot \phi(N, \xi)$$

andamento di χ intorno al picco χ_{\max}

intorno al punto critico conta solo il rapporto N/ξ

$$\chi(g, N) = N^{\gamma/\nu} \phi\left(\frac{N}{\xi}\right) = N^{\gamma/\nu} \tilde{\phi}\left(|t| \cdot N^{1/\nu}\right) = N^{\gamma/\nu} \phi\left(|g^{-1}| N^{1/\nu}\right)$$

$\xi \sim |t|^{-\nu}$

assunto di
variazione g

Ising 2D classico: $\gamma = 7/4$; $\nu = 1 \Rightarrow \chi(g, N) \sim N^{7/4} \phi(|g^{-1}| \cdot N)$

analogamente: $M^z(g, N) \sim N^{-\beta/\nu} \cdot M\left(|g^{-1}| N^{1/\nu}\right) \sim N^{-1/8} M(|g^{-1}| \cdot N)$

Ising 2D classico: $\beta = 1/8$

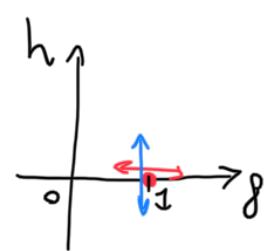
$$M^z \cdot N^{1/8}$$

el variazione di N

Qui abbiamo g (equivalente di T)

ma potremo variare anche h

punto critico: $(g, h) = (1, 0)$



→ fisso $g=1$ e prendo $\tau = h - 0 = h$

(prima avevo $t=g-1$)

campo longitudinale - symmetry breaking

$$m^z(h, N) \sim N^{-\beta/\nu} M \left(\sum N^{Y_t} \right) \quad Y_t = \frac{15}{8} \quad (\text{RG})$$

$$m^z(g, N) \sim N^{-\beta/\nu} M \left(t N^{Y_t} \right) \quad Y_t = 1$$

campo trasverso - fluttuazioni quantistiche

- Oltre alla suscettività magnetica ordinaria $(\chi = \frac{\partial M^z}{\partial h} \Big|_{h=0})$

si può analizzare la suscettività

rispetto al campo trasverso delle magnetizzazioni trasverse: $\chi^x = \frac{\partial M^x}{\partial g}$

$$H = - \sum_j \hat{G}_j^z \hat{G}_{j+1}^z - g \sum_j \hat{G}_j^x - h \sum_j \hat{G}_j^z$$

classicamente $g \rightarrow T$

$$C_V = -T \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \quad \text{classicamente}$$

(fluttuazioni quantistiche
fluttuazioni termiche)

$$C_V = g \chi^x \quad \text{quantisticamente}$$

- Cioè χ^x è strettamente connessa col calore specifico, che per $g \rightarrow 1$, $h \rightarrow 0$ presenta un picco e diverge logaritmicamente in N (analogie col modello di Ising 2D classico)

$d=0$ - esponente critico

4/11/2021

→ Scaling attorno a una transizione del I ordine (quantistica)

(Capostrini, Nespolo, Polissetto, Vicari, PRL 113, 070402 (2013))

h campo longitudinale $\rightarrow K = h N^{\alpha}$ (II ordine)
 g " transverso

$$K_I = \frac{E_h(N)}{\Delta_0(N)} \quad (\text{I ordine})$$

$E_h(N)$: variazione di energie associate alla presenza di un campo longitudinale piccolo

$$\underline{E_h(N) \sim 2 m_0 h N^d}$$

d : dimensione fisica del sistema ($d=1$)
 $m_0 = (1-g^2)^{1/8}$ parametro d'ordine ad $h=0$

$$\hat{H} = - \sum_j \hat{G}_j^z \hat{G}_{j+1}^z - g \sum_j \hat{G}_j^x - h \sum_j \hat{G}_j^z \quad \begin{array}{l} \text{dove } 0 < g < 1 \\ |h| < 1 \end{array}$$

$\Delta_0(N)$: gap tra E_{excitato} e $E_{\text{gs.}}$ per $h=0$

se $g < 1$ chiude esponenzialmente in N

$$\underline{m^z(g|<1, h) \sim m_0 \cdot M(K_I)}$$

- Per studiare le dinamiche, introduco un tempo riscalato

$$\underline{\vartheta = t \cdot \Delta_0(N)}$$

$$\underline{m^z(g|<1, h_i, h_f, t) \sim m_0 M(K_{I,i}, K_{I,f}, \vartheta)}$$

↑ ↑
prima del dopo il
quenach quenach

Implementazione numericacodice di diagonalizzazione esatta (ED)

exact diagonalization

Spazi di Hilbert \mathcal{H} e dimensione FINITA \rightarrow sistemi di spin- $1/2$ su reticolo unidimensionale N siti $\Rightarrow \dim \mathcal{H} = 2^N$

- 1 sito $\mathcal{H}^{(1)} = \text{span} \left\{ | \uparrow \rangle, | \downarrow \rangle \right\}$, rispetto all'asse z

 $\text{spin-}1/2 \leftrightarrow \text{quantum bit (qubit)}$

$$|\uparrow\rangle \equiv |0\rangle \quad |\downarrow\rangle \equiv |1\rangle \quad \dim \mathcal{H}^{(1)} = 2^1 = 2$$

base computazionale

- 2 siti $\mathcal{H}^{(2)} = \mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(1)} = \text{span} \left\{ |\uparrow, \uparrow\rangle, |\uparrow, \downarrow\rangle, |\downarrow, \uparrow\rangle, |\downarrow, \downarrow\rangle \right\}$

$$|\uparrow, \uparrow\rangle = |00\rangle \quad |\uparrow, \downarrow\rangle = |01\rangle \quad |\downarrow, \uparrow\rangle = |10\rangle \quad |\downarrow, \downarrow\rangle = |11\rangle$$

$$\dim \mathcal{H}^{(2)} = 2^2 = 4$$

• N siti: $\mathcal{H}^{(N)} = \underbrace{\mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(1)} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}^{(1)}}_{N \text{ volte}}$

$$\dim \mathcal{H}^{(N)} = 2^N$$

indice di sito $i=1, \dots, 2^N$ $i \rightarrow$ convertire in notazione binaria \rightarrow base computazionale

- Operatori hanno una struttura tensoriale

$$\hat{H}_{Is} = -J \sum_j \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z - g \sum_j \hat{\sigma}_j^x - h \sum_j \hat{\sigma}_j^z$$

$$\hat{\sigma}_i^\alpha = \underset{\text{I sito}}{\overset{\uparrow}{\hat{\sigma}^\alpha}} \otimes \underset{\text{II sito}}{\overset{\uparrow}{\hat{1}_2}} \otimes \underset{\text{III sito}}{\overset{\uparrow}{\hat{1}_2}} \otimes \dots \otimes \underset{\text{N-sito}}{\overset{\uparrow}{\hat{1}_2}} \quad (\alpha = x, y, z)$$

matrici 2×2 $\hat{1}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

$$\hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z = \underset{j\text{-sito}}{\overset{\uparrow}{\hat{1}_2}} \otimes \dots \otimes \underset{(j-1)\text{-sito}}{\overset{\uparrow}{\hat{1}_2}} \otimes \underset{(j+1)\text{-sito}}{\overset{\uparrow}{\hat{\sigma}^z}} \otimes \underset{(j+2)\text{-sito}}{\overset{\uparrow}{\hat{\sigma}^z}} \otimes \underset{N\text{-sito}}{\overset{\uparrow}{\hat{1}_2}} \otimes \dots \otimes \underset{N\text{-sito}}{\overset{\uparrow}{\hat{1}_2}}$$

prodotto tensoriale: $\hat{A} \otimes \hat{B} = \begin{pmatrix} A_{11}B & A_{12}B & A_{13}B & \dots \\ A_{21}B & A_{22}B & A_{23}B & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}$

\hat{A} matrice $n_A \times n_A$
 \hat{B} " $n_B \times n_B$

$\Rightarrow \hat{A} \otimes \hat{B}$ matrice $n_A n_B \times n_A n_B$

es. $\hat{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \quad \hat{B} = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}$

$$\Rightarrow \hat{A} \otimes \hat{B} = \begin{pmatrix} a_{11}b_{11} & a_{11}b_{12} & a_{12}b_{11} & a_{12}b_{12} \\ a_{11}b_{21} & a_{11}b_{22} & a_{12}b_{21} & a_{12}b_{22} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{21}b_{11} & a_{21}b_{12} & a_{22}b_{11} & a_{22}b_{12} \\ a_{21}b_{21} & a_{21}b_{22} & a_{22}b_{21} & a_{22}b_{22} \end{pmatrix}$$

se $\hat{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \rightarrow \hat{A} \otimes \hat{B} = \begin{pmatrix} * & * & | & 0 \\ * & * & | & \vdots \\ \vdots & \vdots & | & 0 \\ 0 & 1 & | & * \\ 0 & 0 & | & * \end{pmatrix}$

↑ blochi di zeri
↓ non nulli

Le Hamiltoniane con cui abbiamo a che fare sono tipicamente SPARSE (ci sono tanti zeri)

\rightarrow somme di termini a "uno" e a "due corpi"

\rightarrow Costruzione delle matrici \hat{H} sulla base computazionale

(III) campo longitudinale: $-h \sum_{j=1}^N \hat{\sigma}_j^z$ matrice DIAGONALE

$$\hat{\sigma}_j^z | \dots \dots 1_j \dots \dots \rangle = - | \dots \dots 1_j \dots \dots \rangle$$

$$\hat{\sigma}_j^z | \dots \dots 0_j \dots \dots \rangle = + | \dots \dots 0_j \dots \dots \rangle$$

es: $N=3 \quad i=1,2,3,\dots \quad \mathbb{C}^8 = |000\rangle, |001\rangle, |010\rangle, \dots, |111\rangle$

$$\hat{\sigma}_1^z = \hat{\sigma}^z \otimes \hat{1} \otimes \hat{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} =$$

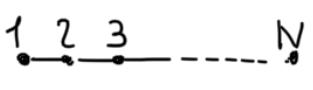
$$= \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & 1 & & & \\ & & 1 & & \\ & & & -1 & \\ & & & & -1 \\ & & & & & -1 \end{pmatrix}$$

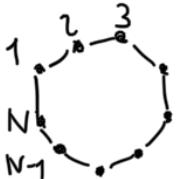
$$\sim \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & \\ & 1 & & & & & & \\ & & 1 & & & & & \\ & & & 1 & & & & \\ & & & & 1 & & & \\ & & & & & 1 & & \\ & & & & & & 1 & \\ & & & & & & & -1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{G}_j^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \dots \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & -1 \end{pmatrix}$$

I Interazione: $\sum_j \hat{G}_j^z \hat{G}_{j+1}^z$ diagonale

gli estremi della sommatoria dipendono dalle condizioni al contorno

aperte  $\Rightarrow j = 1, \dots, N-1$

chiuse  $\Rightarrow j = 1, \dots, N$ $\hat{G}_{N+1}^z \equiv \hat{G}_1^z$

$$\begin{aligned} \hat{G}_1^z \otimes \hat{G}_2^z \otimes \hat{I} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} \quad \text{base computazionale su 3 siti} \end{aligned}$$

$\left\{ |000\rangle, |001\rangle, |010\rangle, |011\rangle, |100\rangle, |101\rangle, |110\rangle, |111\rangle \right\}$

$$\hat{G}_j^z \otimes \hat{G}_{j+1}^z | \dots 0_j 0_{j+1} \dots \rangle = + | \dots 0_j 0_{j+1} \dots \rangle$$

$$\hat{G}_j^z \otimes \hat{G}_{j+1}^z | \dots 1_j 1_{j+1} \dots \rangle = + | \dots 1_j 1_{j+1} \dots \rangle$$

$$\hat{G}_j^z \otimes \hat{G}_{j+1}^z | \dots 0_j 1_{j+1} \dots \rangle = - | \dots 0_j 1_{j+1} \dots \rangle$$

$$\hat{G}_j^z \otimes \hat{G}_{j+1}^z | \dots 1_j 0_{j+1} \dots \rangle = - | \dots 1_j 0_{j+1} \dots \rangle$$

II campo trasverso: $-g \sum_{j=1}^N \hat{G}_j^x$ Non diagonale

$$\hat{G}_j^x | \dots 0_j \dots \rangle = | \dots 1_j \dots \rangle$$

$$\hat{G}_j^x | \dots 1_j \dots \rangle = | \dots 0_j \dots \rangle$$

$$\begin{aligned} \hat{G}_1^x &\equiv \hat{G}_1^x \otimes \hat{I}_2 \otimes \hat{I}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

→ Osservabili: $A = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$

$$= \sum_{\substack{i_1 \dots i_N \\ j_1 \dots j_N}} c_{j_1 \dots j_N}^* c_{i_1 \dots i_N} \underbrace{\langle j_1 \dots j_N | \hat{A} | i_1 \dots i_N \rangle}_{\text{tipicamente } \hat{A} \text{ è una matrice sparsa}}$$

⇒ NON occorre calcolare tutti i $(2^N)^2$ valori di aspettazione, ma solo quelli non nulli.

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_n c_n |n\rangle \rightarrow \text{convertito in binario} \\ &= \sum_{i_1, \dots, i_N=0}^1 c_{i_1, i_2, \dots, i_N} |i_1, i_2, \dots, i_N\rangle \end{aligned}$$

28/10/2021

Lanczos (Arnoldi, Davidson)

principio di funzionamento ~1950 (utile per matrici \hat{H} sparse)

→ tecniche Variazionali per trovare il ground state. $|\psi_{\text{g.s.}}\rangle$, E.g.s.

- 1) • prendo uno stato $|\psi_0\rangle$ (e priori arbitrario)
- 2) • costruisco un secondo stato $|\tilde{\psi}_1\rangle$ a partire da $|\psi_0\rangle$

$$|\tilde{\psi}_1\rangle = \hat{K} |\psi_0\rangle \quad \hat{K} \text{ è "generico"}$$

- 3) • orto-normalizzo $|\tilde{\psi}_1\rangle$ rispetto a $|\psi_0\rangle$

$$|\psi_1\rangle = \frac{\hat{K} - \langle \psi_0 | \hat{K} | \psi_0 \rangle}{\sqrt{\langle \psi_0 | \hat{K}^\dagger \hat{K} | \psi_0 \rangle - |\langle \psi_0 | \hat{K} | \psi_0 \rangle|^2}} |\psi_0\rangle \quad \left(\begin{array}{l} \langle \psi_1 | \psi_0 \rangle = 0 \\ |\langle \psi_1 | \psi_1 \rangle|^2 = 1 \end{array} \right)$$

- 4) • costruisce $H_1 = \text{span} \{ |\psi_0\rangle, |\psi_1\rangle \}$

e diagonalizza \hat{H} su questo spazio:

$$\hat{H}_{\text{ridotto}} = \begin{pmatrix} \langle \psi_0 | \hat{H} | \psi_0 \rangle & \langle \psi_1 | \hat{H} | \psi_0 \rangle \\ \langle \psi_0 | \hat{H} | \psi_1 \rangle & \langle \psi_1 | \hat{H} | \psi_1 \rangle \end{pmatrix}$$

[NOTA: occorre solo saper applicare \hat{H} ad un generico stato $|\psi\rangle$
 $|\psi\rangle \rightarrow \hat{H}|\psi\rangle$]

- 5) • stato a energia minima: $|\psi_0^{(1)}\rangle = \alpha |\psi_0\rangle + \beta |\psi_1\rangle$

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

- 6) • Itero la procedura $|\psi_0\rangle \mapsto |\psi_0^{(1)}\rangle$

→ Test: Ising 1D in campo trasverso

$$H = - \sum_j \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z - g \sum_j \hat{\sigma}_j^x$$

OBC Eq.s. ($N, g=1$) = $1 - \left[\sin\left(\frac{\pi}{2(N+1)}\right) \right]^{-1}$

(Pfeuty, Ann. Phys. 57, 79 (1970))

• $N \rightarrow +\infty$

$$M^x = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \frac{dq}{w(q, q^{-1})} + \frac{1}{g} \cdot \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \frac{g q dq}{w(q, q^{-1})}$$

Se $g=1$:

$$\begin{cases} M^x = \frac{2}{\pi} \\ \langle \hat{\sigma}_j^x \hat{\sigma}_{j+r}^x \rangle - (M^x)^2 = \frac{4}{\pi^2} \cdot \frac{1}{4r^2-1} \end{cases}$$

con $w(q, g) = \sqrt{1+g^2 + 2g \cos q}$

MAGNETIZZAZIONE
TRASVERSA

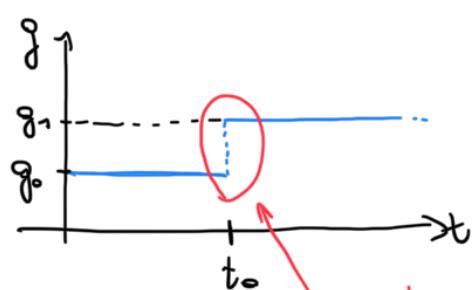
Dinamica di sistemi quantistici e multi corpi (su reticolo)

(quantum simulators - Feynman 1982)

→ QUANTUM QUENCH

modifica brusca di uno dei parametri dell' Hamiltoniana (e.g. campo magnetico)

$$g(t) = \begin{cases} g_0 & t < t_0 \\ g_1 & t > t_0 \end{cases}$$



Immagino di essere a temperatura $T=0$

per $t < t_0$ → sono nello stato fondamentale

$$|\psi(t < t_0)\rangle = |\psi_{\text{gs.}}(g_0)\rangle$$

per $t > t_0$ → dinamica NON banale: $|\psi(t > t_0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(g_1)(t-t_0)} |\psi_{\text{gs.}}(g_0)\rangle$

- Universalità nella DINAMICA in tempo reale, vicino ad una transizione di fase:

la variabile temporale t può essere riscalata:

$$\rightarrow \theta = t \cdot N^{-z}$$

$\Delta_I \sim N^{-z}$ gap tra i livelli
e state fondamentale

\exists : esponente dinamico della transizione
(Ising 2D classico $z=1$
 \Leftrightarrow 1D quantistico)

$$\hat{H} = - \sum_j \hat{\sigma}_j^x \hat{\sigma}_{j+1}^x - g \sum_j \hat{\sigma}_j^x - h \sum_j \hat{\sigma}_j^z ; \quad m^z = \langle \hat{\sigma}_j^z \rangle$$

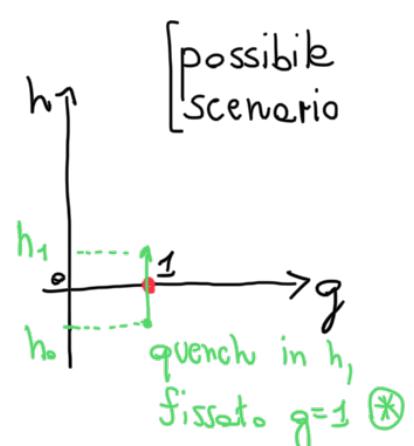
$$\rightarrow all'equilibrio: m^z(g, h, N) \sim N^{-\beta \nu} \cdot M \left[(g-g_c) N^{y_g}, (h-h_c) N^{y_h} \right]$$

per Ising:
1D q.
 $g \rightarrow$ campo trasverso
 $h \rightarrow$ campo longitudinale

punto critico ($g=1; h=0$)

y_g, y_h : dimensioni di g, h secondo la teoria RG

(Ising 1D q.: $\beta = 1/8$; $\nu = 1$; $y_g = 1$; $y_h = 1/8$)



→ fuori equilibrio: $m^z(g, h, N; t) \sim N^{-\beta \nu} M \left[(g-g_c) N^{y_g}, (h-h_c) N^{y_h}, t N^{-z} \right]$
(dopo un quench)

$$M^z(h_0, h_1, N; t) \sim N^{-P/N} M \left[(h_0 - h_c) N^{\frac{1}{N}}, (h_1 - h_c) N^{\frac{1}{N}}, t N^{-\frac{1}{N}} \right]$$

↑ ↑
 campo h campo h
 prima del dopo il
 quenche quenche

Rossini, Vicari, Phys. Rep. 936, 1 (2021)

Pelissetto, Rossini, Vicari, Phys. Rev. E 97, 052148 (2018)

- **Tecniche numeriche** per studiare la dinamica in tempo reale : $| \psi(t) \rangle = e^{-i\hat{H}t} | \psi(0) \rangle$ ($\hbar=1$)

1) Esponentiale \hat{H} : scrivo esplicitamente $\hat{U} = e^{-i\hat{H}t}$
 → diagonalizzo \hat{H} esattamente (full spectrum) - ^{moltissime} inefficiente
 → espando l'esponentiale in serie di potenze:

$$\hat{U} = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(-i\hat{H}t)^n}{n!}$$
 - si chiederebbe solo l'applicazione $| \psi \rangle \rightarrow \hat{H}^n | \psi \rangle$ (n volte)

2) Metodo di Runge-Kutta: (integrazione di eq. differenziali, numerico)

$$i \frac{d| \psi \rangle}{dt} = \hat{H}(t) | \psi(t) \rangle : \quad \begin{cases} y'(t) = f(t, y(t)) \\ y(t_0) = y_0 \end{cases} \quad \begin{array}{l} y(t) \equiv | \psi(t) \rangle \\ f(t, y(t)) = -i \hat{H}(t) y(t) \end{array}$$

dove

discretizzo il tempo
 $t \in [t_0, t_f]$ $t_j = t_0 + jh$ con $h = \frac{t_f - t_0}{n}$ h : n° di step temporali

Runge-Kutta IV ordine:

$$y_{n+1} \equiv y(t_{n+1}) = y_n + \frac{h}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \quad \boxed{t_{n+1} = t_n + h}$$

$$\begin{cases} k_1 = f(t_n, y_n) \\ k_2 = f\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + k_1 \frac{h}{2}\right) \\ k_3 = f\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + k_2 \frac{h}{2}\right) \\ k_4 = f(t_n + h, y_n + k_3 h) \end{cases} \quad \begin{array}{l} \text{per noi serve solo} \\ \text{fare } | \psi \rangle \rightarrow -i \hat{H} | \psi \rangle \\ (\text{moltiplicazione di } \hat{H} \text{ per uno stato } | \psi \rangle \text{ arbitrario}) \end{array}$$

3) Decomposizione di Suzuki-Trotter:

$$\hat{H} = \hat{H}_A + \hat{H}_B \quad \text{dove è semplice applicare } e^{-i\hat{H}_A t} \text{ (o } e^{-i\hat{H}_B t} \text{ separatamente)} \\ \text{su uno stato generico } | \psi \rangle \\ \text{Ma non è semplice applicare } e^{-i(\hat{H}_A + \hat{H}_B)t}$$

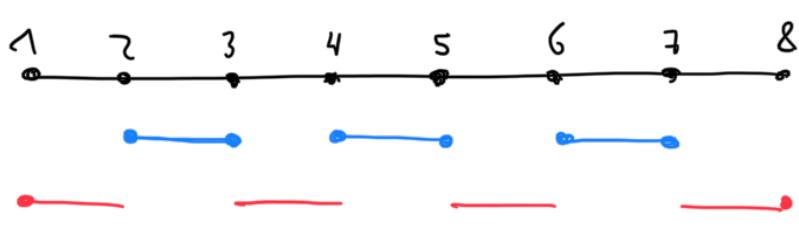
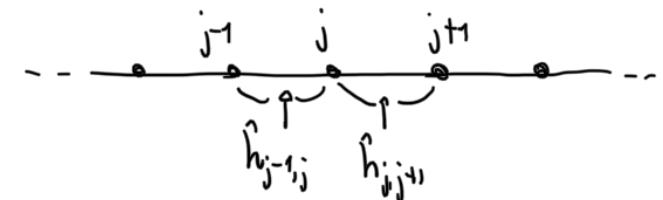
In generale $[H_A, H_B] \neq 0 \Rightarrow e^{-i(H_A+H_B)t} \neq e^{-iH_A t} e^{-iH_B t}$

si può essere più precisi usando lo sviluppo di Baker-Campbell-Hausdorff (BCH)

$$e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = e^{\hat{Z}} \quad \text{dove} \quad \hat{Z} = \hat{A} + \hat{B} + \frac{1}{2} [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{12} \left\{ [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + [\hat{B}, [\hat{B}, \hat{A}]] \right\} + \dots$$

Nel nostro caso:

$$\hat{H} = \sum_j \hat{h}_{j,j+1}$$



esempio di decomposizione:

$$\hat{H}_A = \sum_{j \text{ pari}} \hat{h}_{j,j+1}$$

$$\hat{H}_B = \sum_{j \text{ dispari}} \hat{h}_{j,j+1}$$

$[\hat{H}_A, \hat{H}_B] \neq 0 \rightarrow$ difficile fare $e^{-i(\hat{H}_A+\hat{H}_B)t}$

MA: $e^{-i\hat{H}_A t} = \prod_{j \text{ pari}} e^{-i\hat{h}_{j,j+1} t}$

facili da fare
separatamente

$$e^{-i\hat{H}_B t} = \prod_{j \text{ dispari}} e^{-i\hat{h}_{j,j+1} t}$$

$$\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}t} = \left(\underbrace{e^{-i\hat{H}dt}}_{\text{BCH}} \right)^{t/dt} \quad \text{con } dt \text{ piccolo}$$

$$\text{BCH: } e^{t(\hat{A}+\hat{B})} = \prod_{i=1}^k e^{c_i t \hat{A}} e^{d_i t \hat{B}} + o(t^n)$$

k indice che dipende da n (n : ordine dello sviluppo)

$\{c_i\}, \{d_i\}$ sono numeri in \mathbb{R}

$$(n=1) \Rightarrow k=1; c_1=d_1=1 \rightarrow e^{t(\hat{A}+\hat{B})} = e^{t\hat{A}} e^{t\hat{B}} + o(t)$$

$$(n=2) \Rightarrow k=2; c_1=c_2=\frac{1}{2}; d_1=1; d_2=0$$

$$\rightarrow e^{t(\hat{A}+\hat{B})} = e^{\frac{1}{2}t\hat{A}} e^{t\hat{B}} e^{\frac{1}{2}t\hat{A}} + o(t^2)$$

$$(n=4) \Rightarrow k=4; c_1=c_4=\left[2\left(z-z^{\frac{1}{3}}\right)\right]^{-1}, c_2=c_3=(1-z^{\frac{1}{3}})c_1$$

$$d_1=d_3=z c_1, d_2=-z^{\frac{4}{3}} c_1, d_4=0$$

$$\text{esempio (h=2)}: \hat{U} = e^{-i\hat{H}t} \simeq \left[e^{-\frac{1}{2}i\hat{H}_A t} e^{-i\hat{H}_B t} e^{-\frac{1}{2}i\hat{H}_A t} \right]^{t/\hat{H}}$$

$$\simeq \left[\left(\prod_{j \text{ pari}} e^{-\frac{1}{2}i\hat{H}_{j,j+1} t} \right) \left(\prod_{j \text{ dispari}} e^{-i\hat{H}_{j,j+1} t} \right) \left(\prod_{j \text{ pari}} e^{-\frac{1}{2}i\hat{H}_{j,j+1} t} \right) \right]^{t/\hat{H}}$$

$\hat{h}_{j,j+1}$ per Ising è una matrice $4 \times 4 \rightarrow e^{\alpha h_{j,j+1}}$ si calcola facilmente...

[H. Yoshida, Phys. Lett. A 150, 262 (1990)]

Simulazioni a temperature finite

3/11/2021

- Stati termici: $\rho = \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}}$ $\beta = \frac{1}{k_B T}$ ensemble canonico (N fisso)

$Z = \text{Tr}[e^{-\beta \hat{H}}]$ funzione di partizione

Su spazi di Hilbert finito-dimensionali ($\dim \mathcal{H} = 2^N$)

ρ è una matrice hermitiana di dimensioni $2^N \times 2^N = 2^{2N}$ elementi

Purificazione di uno stato misto $\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$

→ "allarga" lo spazio di Hilbert \mathcal{H} del sistema S introducendo uno spazio auxiliare A

$\rho \rightarrow$ stato puro su \mathcal{H}_{S+A}

$$\dim \mathcal{H}_A = \dim \mathcal{H}_S \Rightarrow \dim \mathcal{H}_{S+A} = (\dim \mathcal{H}_S)^2$$

stato termico $\rho_\beta = \frac{1}{Z} e^{-\frac{\beta}{2}\hat{H}} \cdot \mathbb{1} \cdot e^{-\frac{\beta}{2}\hat{H}}$

$$\left(\begin{array}{l} \mathbb{1} = \widetilde{Z(\beta=0)} \cdot \rho_{\beta=0} \\ \rho_{\beta=0} = \begin{pmatrix} 1/2^n & & & \\ & 1/2^n & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1/2^n \end{pmatrix} \end{array} \right)$$

- Immaginiamo di poter scrivere

✳ $\rho_{\beta=0} = \text{Tr}_A |\psi_0\rangle\langle\psi_0|$

$|\psi_0\rangle \in \mathcal{H}_{S+A}$

a temperature infinite

✳ $\rho_\beta = \frac{1}{Z(\beta)} e^{-\frac{\beta}{2}\hat{H}} \underbrace{\left\{ Z(\beta=0) \rho_0 \right\}}_{\mathbb{1}} e^{-\frac{\beta}{2}\hat{H}} = \left[\hat{U}_\beta \equiv e^{-\beta \hat{H}} \right]$

$$= \frac{Z(\beta_\infty)}{Z(\beta)} \cdot e^{-\frac{\beta}{k} \hat{H}} \cdot \text{Tr}_A [|\psi_\beta\rangle\langle\psi_\beta|] \cdot e^{-\frac{\beta}{k} \hat{H}}$$

evolut. temporale di un
tempo $t = -\frac{\beta}{k} i$ immaginario

$$(e^{-i\hat{H}t} \equiv e^{-\frac{\beta}{k} \hat{H}})$$

$$\Rightarrow \rho_\beta = \frac{Z(0)}{Z(\beta)} \text{Tr}_A [|\psi_\beta\rangle\langle\psi_\beta|]$$

segue dal fatto che $e^{-\frac{\beta}{k} \hat{H}}$ agisce solo su S
si può portare dentro $\text{Tr}_A [\cdot]$

media termica di una data osservabile \hat{O}

$$\rightarrow \langle \hat{O} \rangle_\beta = \text{Tr}_S [\rho_\beta \hat{O}] = \frac{Z(0)}{Z(\beta)} \text{Tr}_S \left[\text{Tr}_A [|\psi_\beta\rangle\langle\psi_\beta|] \hat{O} \right] =$$

$$= \frac{Z(0)}{Z(\beta)} \text{Tr}_{S+A} [|\psi_\beta\rangle\langle\psi_\beta| \hat{O}] = \frac{Z(0)}{Z(\beta)} \langle \psi_\beta | \hat{O}_S \otimes \hat{I}_A | \psi_\beta \rangle$$

$$1 = \langle \hat{1} \rangle_\beta = \text{Tr}_\beta [\rho_\beta] = \frac{Z(0)}{Z(\beta)} \langle \psi_\beta | \psi_\beta \rangle \Rightarrow \frac{1}{\langle \psi_\beta | \psi_\beta \rangle}$$

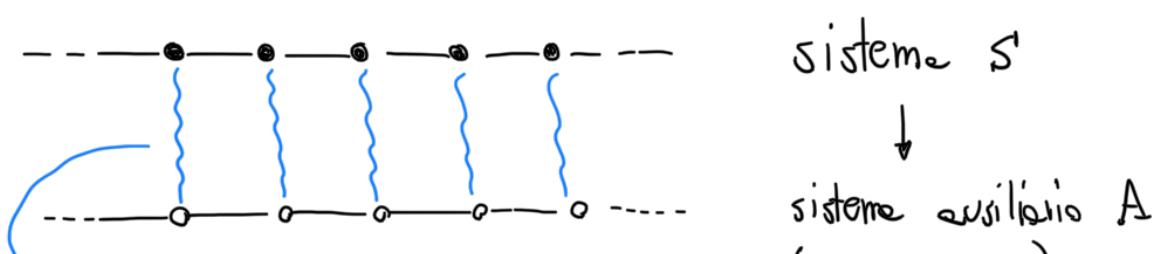
$$\langle \hat{O} \rangle_\beta = \frac{\langle \psi_\beta | \hat{O}_S \otimes \hat{I}_A | \psi_\beta \rangle}{\langle \psi_\beta | \psi_\beta \rangle} \quad \begin{cases} \text{da notare che} \\ \| \psi_\beta \|^2 \neq 1 \end{cases}$$

identica media su stato puro $|\psi_\beta\rangle$

che vive nello spazio \mathcal{H}_{S+A}

⊕ Ci serve $|\psi_0\rangle_{S+A}$ t.c. $\text{Tr}_A [|\psi_0\rangle\langle\psi_0|] = \frac{1}{2^N} \hat{1}_S$

$$\rho_0 = \frac{1}{2^N} \hat{1} \quad \text{dimensione di } \mathcal{H}_S$$



è stato massimamente entangled
tra due siti

(es. per spin-1/2 \rightarrow coppie di Bell)

4 stati di Bell
massimamente entangled

$$\left\{ |\psi^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow, \downarrow\rangle \pm |\downarrow, \uparrow\rangle) \right.$$

$$|\phi^{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (| \uparrow, \uparrow \rangle \pm | \downarrow, \downarrow \rangle)$$

$$\text{Tr}_{z^*_{\text{spin}}} |\phi^+ \times \phi^+| = \frac{1}{2} \hat{1}_{\text{1o spin}} \quad (\forall \text{ state } d: \text{ Bell})$$

base computations: $\{| \uparrow, \uparrow \rangle, | \uparrow, \downarrow \rangle, | \downarrow, \uparrow \rangle, | \downarrow, \downarrow \rangle\}$
 (2 spin-1/2)

$$|\phi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (| \uparrow, \uparrow \rangle + | \downarrow, \downarrow \rangle) = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 0 \\ 0 \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

$$|\phi^+ \times \phi^+| = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 0 \\ 0 \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 0 & 0 & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 1/\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/\sqrt{2} & 0 \\ 1/\sqrt{2} & 0 & 0 & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 & 0 \\ 1/2 & 0 & 0 & 1/2 \end{pmatrix}$$

$$\text{Tr}_{z^*_{\text{spin}}} |\phi^+ \times \phi^+| = \langle \uparrow | \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 & 0 \\ 1/2 & 0 & 0 & 1/2 \end{pmatrix} | \uparrow \rangle_2 + \langle \downarrow | \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 & 0 \\ 1/2 & 0 & 0 & 1/2 \end{pmatrix} | \downarrow \rangle_2 =$$

$$= \langle \uparrow | \frac{1}{2} (| \uparrow \uparrow \rangle + | \downarrow \downarrow \rangle) (\langle \uparrow \uparrow | + \langle \downarrow \downarrow |) | \uparrow \rangle_2 + \langle \downarrow | \frac{1}{2} (| \uparrow \uparrow \rangle + | \downarrow \downarrow \rangle) (\langle \uparrow \uparrow | + \langle \downarrow \downarrow |) | \downarrow \rangle_2$$

$$= \frac{1}{2} (\langle \uparrow \uparrow |, \langle \uparrow \uparrow |) + \frac{1}{2} (\langle \downarrow \downarrow |, \langle \downarrow \downarrow |) = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix} \stackrel{\text{state at temperature infinite}}{\equiv} \frac{1}{2} \hat{1}_{\text{1o spin}}$$

$\beta=0$ (1^*_{spin})