19/10/2021

Algebra lineare su spazi di dimensione finita

↳ manipolazione di matrici (quadrate)

diagonalizzazione, decomposizioni varie

↳ integrazione numerica di eq. differenziali lineari

■ pre-requisiti "computazionali":

- è utile avere a disposizione librerie per la diagonalizzazione di matrici (simmetriche / hermitiane)

[Fortran → LAPACK (linear algebra package)]

■ Referenze:

→ Quantum Phase Transitions, S. Sachdev (Cambridge)

→ Polkovnikov, Sengupta, Vengalattore, Silva, Rev. Mod. Phys. 83, 863 (2011)

R. Nandkishore, D. Huse, Annual Rev. condensed matter physics 6, 15 (2015)

- Quantum Information
  - ↳ Nielsen & Chuang, (Cambridge, 2000)
  - ↳ J. Preskill, www.theory.caltech.edu/people/preskill/ph229
  - ↳ Benenti, Casati, Rossini, Strini (cap. 11, World Scientific)

- Problemi di sistemi quantistici a molti corpi non relativistici

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

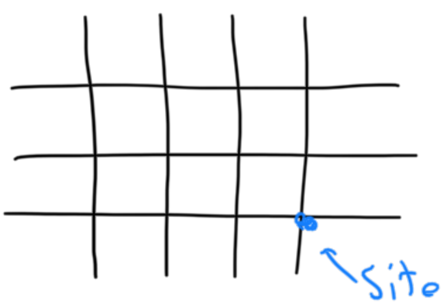
(se H non dipende da t)

objettivo → trovare gli autostati di $\hat{H}$

sistemi finito-dimensionali → spazi di Hilbert finiti, dimensione N grande

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

situazioni tipiche: sistemi su reticolo a geometria variabile



spazio di Hilbert "locale" di dimensione d

"

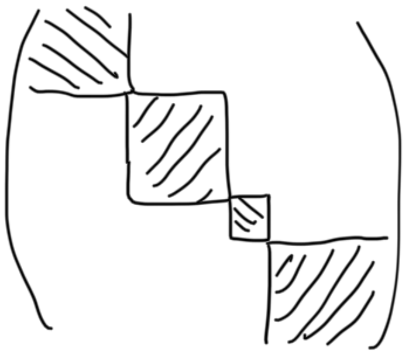
$\Downarrow$

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

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

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

- simmetrie $\to$ matrici a blocchi $H =$

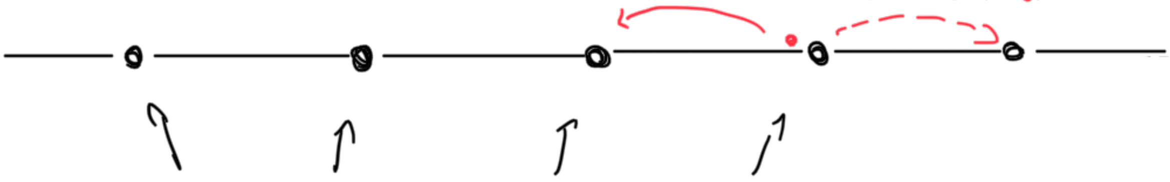


- matrici sparse (piene di zeri)
  $\sim N \times N \quad O(N) \neq$ da zero

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

$\rightarrow$ modello di Hubbard (Proc. Roy. Soc. London 276, 238 (1963))

elettroni in "movimento"



Siti del reticolo
nuclei degli atomi + elettroni ("fermi" nel reticolo)

- 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 respingersi $(U>0)$

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

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

II quantizzazione

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

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

$$\begin{cases} \{\hat{c}_{i,\sigma}, \hat{c}^\dagger_{j,\tau}\} = \delta_{ij}\delta_{\sigma\tau} \\ \{\hat{c}_{i,\sigma}, \hat{c}_{j,\tau}\} = 0 \\ \{\hat{c}^\dagger_{i,\sigma}, \hat{c}^\dagger_{j,\tau}\} = 0 \end{cases}$$

$\hat{c}_{i,\sigma}\hat{c}^\dagger_{j,\tau} = -\hat{c}^\dagger_{j,\tau}\hat{c}_{i,\sigma}$ se $i \neq j$ o $\sigma \neq \tau$

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

regole di anticommutazione per operatori fermionici in II quantizzazione

$$\hat{c}^\dagger_{2,\downarrow}\hat{c}^\dagger_{1,\uparrow}|\Omega\rangle \neq \hat{c}^\dagger_{1,\uparrow}\hat{c}^\dagger_{2,\downarrow}|\Omega\rangle$$ ($|\Omega\rangle$ stato di vuoto)

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

$n_{i,\sigma} = 0$ o 1 $\qquad \hat{c}^\dagger_{i,\sigma}\hat{c}^\dagger_{i,\sigma} = 0 = -\hat{c}^\dagger_{i,\sigma}\hat{c}^\dagger_{i,\sigma}$ Pauli ok

simmetrie immediatamente visibili:

$\hat{N}_\sigma \equiv \sum_i \hat{n}_{i,\sigma} \qquad \hat{N}_{TOT} = \hat{N}_\uparrow + \hat{N}_\downarrow$ [n° elettroni spin-risolti conservato

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

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

— Teoria delle perturbazioni - fisica a basse energie

$U \gg t$ situazione tipica

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

(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 descriva 2 elettroni in 2 siti

↳ stati di tripletta e di singoletto (senza stati di doppia occupazione)

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

occupazioni dei due siti

$$
s\left\{ |\underset{S_z}{\overset{S_{totale}}{0,0}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow,\downarrow\rangle - |\downarrow,\uparrow\rangle\right) \right.
$$

(oppure: $\{|\uparrow,\uparrow\rangle ; |\uparrow,\downarrow\rangle ; |\downarrow,\uparrow\rangle ; |\downarrow,\downarrow\rangle\}$
è un'altra base...
base computazionale, qui meno utile per la teoria delle perturbazioni)

- <u>Ordine 0</u>: $t=0 \Rightarrow H_0 = U\sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$

  tutti gli elementi della base scelta hanno <u>energia zero</u>

  → ho trascurato gli stati di doppia occupazione, $\{|\uparrow\downarrow,0\rangle ; |0,\uparrow\downarrow\rangle\}$ perché hanno energia U

- <u>Ordine 1</u>: $\delta\hat{H} \Rightarrow \langle 1,1|\delta\hat{H}|1,1\rangle = \langle 1,-1|\delta\hat{H}|1,-1\rangle = 0$

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

1 elettrone per sito; 2 elettroni su un sito e 0 sull'altro

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

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

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

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

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

Ordine 1: la perturbazione $\delta\hat{H}$ <u>non fa nulla</u> sugli stati t, s

- <u>Ordine 2</u>: $\delta E_m^{(2)} = \sum_{n\neq m} \frac{\langle m|\delta\hat{H}|n\rangle\langle n|\delta\hat{H}|m\rangle}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}} \qquad |m\rangle \in \{t,s\}$

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

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

(I) • prima metto i fermioni sul sito 2, poi sul sito 1

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

(II) • prima creo spin ↑, poi spin ↓

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

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

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

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

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

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

$$\delta\hat{H}\left(|1,0\rangle\right) = \delta\hat{H}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow,\downarrow\rangle + |\downarrow,\uparrow\rangle\right)\right) = 0$$

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

⇒ il tripletto NON cambia energia neanche al II ordine

$$\delta\hat{H}\left(|0,0\rangle\right) = -\frac{2t}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow,0\rangle + |0,\uparrow\downarrow\rangle\right) \neq 0$$

il singoletto scende in energia: $\delta E^{(2)}_{|0,0\rangle} = \frac{2t\cdot 2t}{0-U} = -\frac{4t^2}{U}$

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

$$\vec{\hat{S}}_1\cdot\vec{\hat{S}}_2 = \frac{1}{2}\Big[\underbrace{(\vec{\hat{S}}_1+\vec{\hat{S}}_2)^2}_{S_{Tot}(S_{Tot}+1)} - \underbrace{\hat{S}_1^2}_{s(s+1)\ (s=1/2)} - \hat{S}_2^2\Big] = \begin{cases} \frac{1}{2}\Big(0 - \overbrace{2\cdot\frac{3}{4}}^{2S_i^2}\Big) = -\frac{3}{4} & \text{singoletto} \\ \frac{1}{\cancel{2}}\left(\cancel{2} - \cancel{2}\cdot\frac{3}{4}\right) = \frac{1}{4} & \text{tripletto} \end{cases}$$

$$\hat{H}_{eff} \sim -J\cdot \underbrace{\hat{P}_{singoletto}(1,2)}_{\text{proiettore sullo stato di singoletto}} = -\frac{4t^2}{U}\underbrace{\left(\frac{1}{4} - \vec{\hat{S}}_1\cdot\vec{\hat{S}}_2\right)}_{\hat{P}_{singoletto}}$$

Hamiltoniana efficace

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

fin qui abbiamo preso solo 2 siti, 2 elettroni

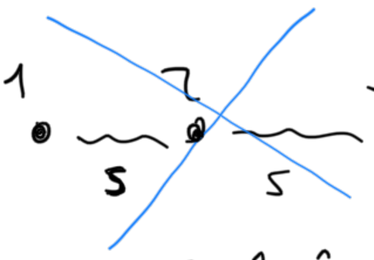
■ Ora se prendiamo n siti

... modello di

$$\hookrightarrow \underbrace{\hat{H}_{eff} \sim \frac{4t^2}{U} \sum_{\langle ij \rangle} \hat{\vec{S}}_i \cdot \hat{\vec{S}}_j}$$ modello di Heisenberg

$$\hat{\vec{S}}_i = \frac{1}{2}\left(\hat{\sigma}_{ix}, \hat{\sigma}_{iy}, \hat{\sigma}_{iz}\right) \qquad \hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{\vec{S}}_1 \cdot \hat{\vec{S}}_2 \equiv \hat{\sigma}_{1x}\hat{\sigma}_{2x} + \hat{\sigma}_{1y}\hat{\sigma}_{2y} + \hat{\sigma}_{1z}\hat{\sigma}_{2z} \qquad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$ matrici di Pauli



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

- frustrazione quantistica

(monogamia dell'entanglement)

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

es: $$|\psi^{(3)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow,\downarrow,\uparrow\rangle - |\downarrow,\uparrow,\uparrow\rangle\right)$$ 1-2 singoletto, 3 è scorrelato

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow,\downarrow\rangle_{12} - |\downarrow,\uparrow\rangle_{12}\right) \otimes |\uparrow\rangle_3$$

es: $$|\tilde{\psi}^{(3)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow,\downarrow,\uparrow\rangle - |\downarrow,\uparrow,\downarrow\rangle\right)$$ 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 $\mathrm{Tr}_3 |\psi^{(3)}\rangle\langle\psi^{(3)}|$

e $\mathrm{Tr}_1 |\psi^{(3)}\rangle\langle\psi^{(3)}|$

siano entrambi degli stati di singoletto

(segue dalle proprietà geometriche degli spazi di Hilbert)