2/11/2021

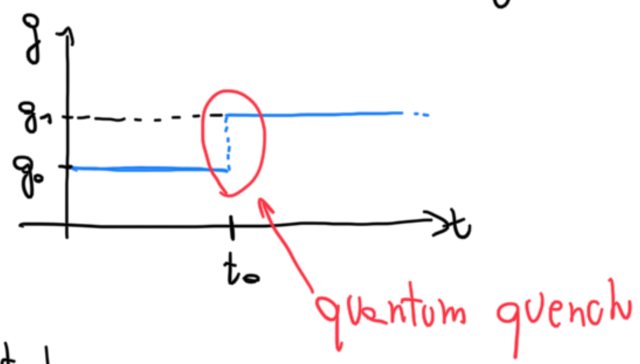
$\boxed{\text{Dinamica di sistemi quantistici a molti corpi (su reticolo)}}$

(quantum simulators - Feynman 1982)

→ **QUANTUM QUENCH**

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

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



Immagino di essere a temperatura $T=0$ per $t<t_0$ → sono nello stato fondamentale

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

per $t>0$ → dinamica NON banale: $|\psi(t>t_0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(g_1)(t-t_0)}|\psi_{g.s.}(g_0)\rangle$

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

  la variabile temporale t può essere riscalata:

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

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

$\Delta_I \sim N^{-z}$ gap tra I eccitato e stato fondamentale

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

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

per Ising 1D q.: g → campo trasverso

h → campo longitudinale

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

[possibile scenario]

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

(Ising 1D q.: $\beta = 1/8$; $\nu = 1$; $y_g = 1$; $y_h = 15/8$)

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

$$m^{z}(h_0, h_1, N; t) \sim N^{-\beta/\nu}\, \mathcal{M}\left[(h_0 - h_c)N^{y_h}, (h_1 - h_c)N^{y_h}, t N^{-z}\right]$$

campo h prima del quench — campo h dopo il quench

[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: $|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t}|\psi(0)\rangle$ $\quad(\hbar = 1)$

1) Esponenziare $\hat{H}$: scrivo esplicitamente $\hat{U} = e^{-i\hat{H}t}$

   → diagonalizzo $\hat{H}$ esattamente (full spectrum) – molto inefficiente

   → espando l'esponenziale in serie di potenze:

$$\hat{U} = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(-i\hat{H}t)^n}{n!}$$

   – richiederebbe solo l'applicazione $|\psi\rangle \to \hat{H}|\psi\rangle$ (n volte)

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

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

dove $y(t) \equiv |\psi(t)\rangle$, $f(t, y(t)) = -i\hat{H}(t)\, y(t)$

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

Runge-Kutta IV ordine:

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

$$\begin{cases} k_1 = f(t_n, y_n) \\ k_2 = f\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + k_1\frac{h}{2}\right) \\ k_3 = f\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + k_2\frac{h}{2}\right) \\ k_4 = f(t_n + h, y_n + k_3 h) \end{cases}$$

per noi serve saper fare $|\psi\rangle \to -i\hat{H}|\psi\rangle$ (moltiplicazione di $\hat{H}$ per uno stato $|\psi\rangle$ arbitrario)

3) Decomposizione di Suzuki-Trotter:

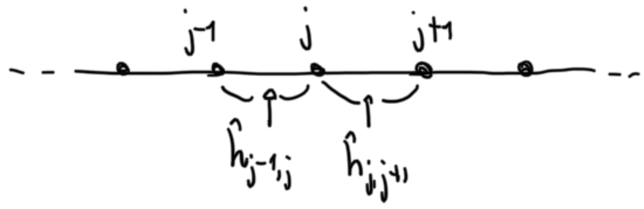
$\hat{H} = \hat{H}_A + \hat{H}_B$ dove è semplice applicare $e^{-i\hat{H}_A t}$ (o $e^{-i\hat{H}_B t}$ separatamente) su uno stato generico $|\psi\rangle$
MA non è semplice applicare $e^{-i(\hat{H}_A + \hat{H}_B)t}$

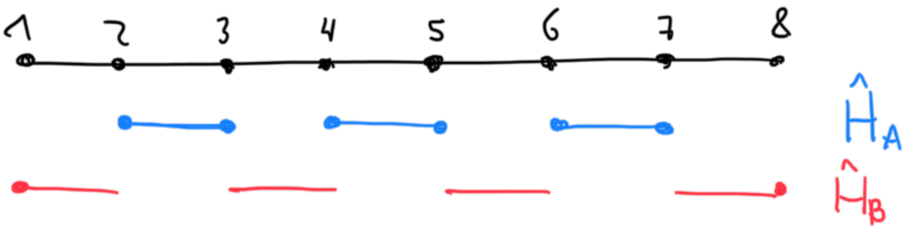
In generale $[H_A, H_B] \neq 0 \Rightarrow e^{-i(\hat H_A + \hat H_B)t} \neq e^{-iH_A t} e^{-iH_B t}$

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: $\underbrace{\hat H = \sum_j \hat h_{j,j+1}}$





esempio di decomposizione:

$$\hat H_A = \sum_{j \text{ pari}} \hat h_{j,j+1}$$

$$\hat H_B = \sum_{j \text{ dispari}} \hat h_{j,j+1}$$

$[\hat H_A, \hat H_B] \neq 0 \Longrightarrow$ difficile fare $e^{-i(\hat H_A + \hat H_B)t}$

MA: $e^{-i\hat H_A t} = \prod_{j \text{ pari}} e^{-i\hat h_{j,j+1} t}$

$e^{-i\hat H_B t} = \prod_{j \text{ dispari}} e^{-i\hat h_{j,j+1} t}$

facili da fare separatamente

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

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

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

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

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

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

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

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

$d_1 = d_3 = 2c_1, \quad d_2 = -2^{4/3} c_1, \quad d_4 = 0$

esempio ($h=2$): $\hat U = e^{-i\hat H t} \simeq \left[e^{-\frac{1}{2} i\, dt\, \hat H_A} e^{-i\, dt\, \hat H_B} e^{-\frac{1}{2} i\, dt\, \hat H_A} \right]^{t/dt}$

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

$\hat h_{j,j+1}$ per Ising è una matrice 4×4 $\to e^{\alpha\, h_{j,j+1}}$ 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 fissato)

operatore densità (stato misto, non puro)

$Z = \mathrm{Tr}[e^{-\beta \hat H}]$ 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 $\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$

$\rho \to \sum_i p_i |\psi_i\rangle_S \otimes |\psi_i\rangle_A$

↳ "allargo" lo spazio di Hilbert $\mathcal{H}$ del sistema S introducendo uno spazio ausiliare A

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

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

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

$$\mathbb{1} = \overbrace{Z(\beta=0)}^{2^N} \cdot \rho_{\beta=0}$$

$$\rho_{\beta=0} = \begin{pmatrix} 1/2^N & & & \\ & 1/2^N & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1/2^N \end{pmatrix}$$

a temperatura infinita

- Immaginiamo di poter scrivere

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

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

$$\Rightarrow \rho_\beta = \frac{1}{Z(\beta)} e^{-\frac{\beta}{2}\hat H} \underbrace{\{ Z(\beta=0)\, \rho_0 \}}_{\mathbb{1}} e^{-\frac{\beta}{2}\hat H} =$$

$[\hat U_\beta \equiv e^{-\beta \hat H}]$

$$= \frac{Z(\beta=0)}{Z(\beta)} \cdot e^{-\frac{\beta}{2}\hat{H}} \cdot \mathrm{Tr}_A\left[|\psi_0\rangle\langle\psi_0|\right] \cdot e^{-\frac{\beta}{2}\hat{H}} \qquad \left[(\hat{U}_\beta)^\dagger = \hat{U}_\beta \right]$$

definisco $\boxed{|\psi_\beta\rangle = e^{-\frac{\beta}{2}\hat{H}}|\psi_0\rangle}$ evoluto temporale di un tempo $t = -\frac{\beta}{2} i$ immaginario

$$\left(e^{-i\hat{H}t} \equiv e^{-\frac{\beta}{2}\hat{H}} \right)$$

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

segue dal fatto che $\underbrace{e^{-\frac{\beta}{2}\hat{H}}}_{\text{si può portare dentro } \mathrm{Tr}_A[\cdot]}$ agisce solo su S

media termica di una data osservabile $\hat{O}$

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

$$= \frac{Z(0)}{Z(\beta)} \mathrm{Tr}_{S+A}\left[|\psi_\beta\rangle\langle\psi_\beta|\hat{O}\right] = \frac{Z(0)}{Z(\beta)} \langle\psi_\beta|\hat{O}_S \otimes \hat{\mathbb{1}}_A|\psi_\beta\rangle$$

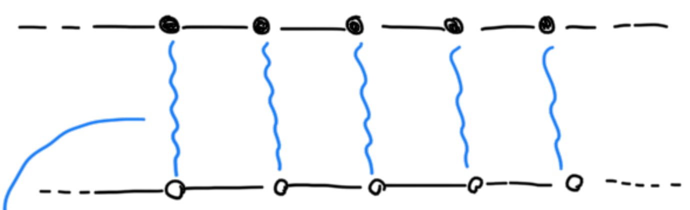
$$1 = \langle\hat{\mathbb{1}}\rangle_\beta = \mathrm{Tr}_\beta\left[\rho_\beta\right] = \frac{Z(0)}{Z(\beta)} \langle\psi_\beta|\psi_\beta\rangle \Rightarrow \frac{1}{\langle\psi_\beta|\psi_\beta\rangle}$$

$$\boxed{\langle\hat{O}\rangle_\beta = \frac{\langle\psi_\beta|\hat{O}_S \otimes \hat{\mathbb{1}}_A|\psi_\beta\rangle}{\langle\psi_\beta|\psi_\beta\rangle}} \qquad \left(\text{da notare che } \||\psi_\beta\rangle\| \neq 1 \right)$$

identica a media su stato puro $|\psi_\beta\rangle$ che vive nello spazio $\mathcal{H}_{S+A}$

(*) Ci serve $|\psi_0\rangle_{S+A}$ t.c. $\mathrm{Tr}_A|\psi_0\rangle\langle\psi_0| = \frac{1}{2^N}\hat{\mathbb{1}}_S$

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



sistema S

↓

sistema ausiliario A (identico a S)

stato massimamente entangled tra due siti

(es. per spin-1/2 → coppie di Bell)

↓

2 spin-1/2

4 stati di Bell massimamente entangled

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

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

$$\mathrm{Tr}_{2^\circ\,\text{spin}} |\phi^+\rangle\langle\phi^+| = \frac{1}{2}\, \hat{\mathbb{1}}_{1^\circ\,\text{spin}} \qquad (\forall \text{ stato di Bell})$$

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

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

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

$$\mathrm{Tr}_{2^\circ\,\text{spin}} |\phi^+\rangle\langle\phi^+| = {}_2\langle\uparrow| \begin{pmatrix} 1/2 & & & \\ & 0 & & \\ & & 0 & \\ & & & 1/2 \end{pmatrix} |\uparrow\rangle_2 + {}_2\langle\downarrow| \begin{pmatrix} 1/2 & & & \\ & 0 & & \\ & & 0 & \\ & & & 1/2 \end{pmatrix} |\downarrow\rangle_2 =$$

$$= {}_2\langle\uparrow| \frac{1}{2} \left(|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle \right) \left(\langle\uparrow\uparrow| + \langle\downarrow\downarrow| \right) |\uparrow\rangle_2 + {}_2\langle\downarrow| \frac{1}{2} \left(|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle \right) \left(\langle\uparrow\uparrow| + \langle\downarrow\downarrow| \right) |\downarrow\rangle_2$$

$$= \frac{1}{2} \left(|\uparrow\rangle_1\, {}_1\langle\uparrow| \right) + \frac{1}{2} \left(|\downarrow\rangle_1\, {}_1\langle\downarrow| \right) = \underbrace{\begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix}}_{\substack{\text{stato a temperatura infinita} \\ \rho_{\beta=0}\ (1^\circ\,\text{spin})}} \equiv \frac{1}{2}\, \mathbb{1}_{1^\circ\,\text{spin}}$$