



Modello di Ising Quantistico 1D in campo trasverso

A. Caliendo, D. Cafasso

Università di Pisa,
Corso di metodi numerici,
Modulo 2 : [Link al Repository](#)

23 luglio 2023

Sommario

Nella presente relazione è descritto lo studio del modello di Ising quantistico unidimensionale mediante simulazione numerica. In particolare, implementando diverse tecniche di diagonalizzazione si ricavano l'energia dello stato fondamentale e l'andamento dei gap energetici tra il ground state e i primi due livelli eccitati intorno alla transizione di fase quantistica. Si analizza inoltre il comportamento di alcune grandezze fisiche del sistema intorno alla transizione e si verifica l'effetto di finite-size scaling. Infine, si verifica l'integrabilità del modello di Ising con campo trasverso esaminando la statistica del level spacing.

Introduzione

I modelli di spin quantistici sono modelli utili per studiare sistemi fermionici interagenti. Più nello specifico, congelando alcuni gradi di libertà e utilizzando la trasformata di Jordan-Wigner, è possibile creare un mapping tra il sistema fermionico di interesse e un sistema le cui componenti sono operatori di spin quantistici. Si ricavano quindi informazioni sul sistema originale studiando il comportamento di un reticolo d-dimensionale i cui nodi sono degli spin quantistici interagenti. In questa classe di modelli rientra il modello di *Ising quantistico in campo trasverso*. In una dimensione esso presenta una transizione di fase continua in corrispondenza di un determinato valore del campo trasverso, che distingue la fase *ferromagnetica*, in cui gli spin sono allineati in modo ordinato, da quella *paramagnetica*, in cui essi hanno orientazione casuale. E' possibile studiare questo comportamento tramite simulazione numerica. Si analizza così l'andamento di alcune grandezze fisiche al variare del campo trasverso. Per un sistema di taglia finita, l'andamento delle osservabili è caratterizzato dall'effetto di *finite-size scaling*. Questo può essere verificato tramite le relazioni di scaling conoscendo il valore degli esponenti critici. Inoltre, esaminando la statistica del *level spacing*, è possibile verificare l'integrabilità del modello considerato.

La prima sezione della relazione è dedicata alla descrizione degli aspetti teorici del modello studiato; la seconda è riservata all'esposizione delle procedure utilizzate nelle simulazioni; infine, nella terza vengono illustrati i risultati ottenuti.

1 Teoria

I modelli di spin quantistici sono costituiti da un reticolo di dimensione e geometria generica, in cui ogni nodo è associato a uno spin con uno spazio di Hilbert $\mathcal{H}^{(2)}$ di dimensione $d = 2$. Lo spazio di Hilbert per un sistema di N spin è dato dal prodotto tensoriale dei singoli spazi di Hilbert come

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{(2)} \otimes \mathcal{H}^{(2)} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}^{(2)} , \quad (1)$$

e ha dimensione $d_N = 2^N$. Un esempio di modello di spin è il modello di *Ising quantistico in campo trasverso* in una dimensione, descritto dall'hamiltoniana

$$\hat{\mathcal{H}}_I = -g_z \sum_j \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z - h_x \sum_j \hat{\sigma}_j^x , \quad (2)$$

in cui gli accoppiamenti si assumono costanti su tutto il reticolo e gli operatori $\hat{\sigma}_j^x$ e $\hat{\sigma}_j^z$ sono le matrici di Pauli agenti sul j -esimo sito del reticolo,

$$\sigma_j^x = \mathbb{1}_1 \otimes \dots \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_j \otimes \dots \otimes \mathbb{1}_N, \quad \sigma_j^z = \mathbb{1}_1 \otimes \dots \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}_j \otimes \dots \otimes \mathbb{1}_N . \quad (3)$$

Il primo termine di $\hat{\mathcal{H}}_I$ descrive l'accoppiamento degli spin lungo l'asse z . Per $g_z > 0$, l'accoppiamento viene chiamato *ferromagnetico* e la configurazione privilegiata dal sistema è quella con spin allineati parallelamente; per $g_z < 0$, l'accoppiamento viene detto *antiferromagnetico* e la configurazione preferita è quella con spin antiparalleli. Il secondo termine invece descrive l'effetto del campo trasverso h_x lungo l'asse x . Entrambi i termini commutano con l'operatore parità rispetto all'asse z ,

$$\hat{P}_z = \prod_{j=1}^N \hat{\sigma}_j^x . \quad (4)$$

La sua azione sugli operatori di spin è definita dalle relazioni

$$\hat{\sigma}^z \rightarrow -\hat{\sigma}^z, \quad \hat{\sigma}^x \rightarrow \hat{\sigma}^x, \quad (5)$$

da cui è evidente che esso commuta anche con l'hamiltoniana del sistema,

$$[\hat{\mathcal{H}}_I, \hat{P}_z] = 0 . \quad (6)$$

Esiste quindi una base comune in cui entrambi gli operatori sono diagonali e il sistema possiede una simmetria per trasformazioni di parità rispetto all'asse z .

1.1 Gap energetici

Dall'inversa della trasformata di Jordan-Wigner, a meno di una rotazione, si osserva che l'operatore parità \hat{P}_z corrisponde all'operatore parità fermionica del modello. La simmetria per trasformazioni di parità rispetto all'asse z corrisponde quindi al fatto che il modello preserva la parità fermionica. Lo spazio di Hilbert si può dunque esprimere come somma

diretta dei due sottospazi $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{PARI} \oplus \mathcal{H}_{DISP}$, ognuno di dimensione $2^N/2$. Ad essi corrispondono, in termini di operatori fermionici, le hamiltoniane $\hat{\mathcal{H}}_{ABC}$ e $\hat{\mathcal{H}}_{PBC}$; la prima con condizioni al bordo antiperiodiche e la seconda con condizioni periodiche. Nei singoli settori di parità, l'espressione della relazione di dispersione è del tipo

$$\epsilon_k = \sqrt{g_z^2 + h_x^2 - 2g_z h_x \cos\left(\frac{2\pi k}{N}\right)}. \quad (7)$$

Da questa relazione si deduce che l'andamento dei gap energetici tra lo stato fondamentale e i primi due livelli eccitati è tale che

$$\Delta E_1 := E_0 - E_1 \rightarrow 0, \quad \Delta E_2 := E_0 - E_2 \rightarrow 0 \quad \text{per} \quad h_x/g_z \rightarrow 1. \quad (8)$$

Questa proprietà è una caratteristica delle transizioni di fase quantistiche: al punto critico e nel limite termodinamico, lo stato fondamentale diventa degenere. Si rimanda la discussione sul concetto di punto critico e di transizione di fase alla sezione successiva.

Analizzando gli spettri energetici delle hamiltoniane dei due settori, si osserva che ci sono dei range di valori degli accoppiamenti per cui si può verificare competizione tra i due livelli ad energia minima. In particolare, ciò avviene per $g_z = 1$ e $0 < h_x < 1$. Ciò significa che il gap tra questi due livelli diminuisce esponenzialmente con la lunghezza della catena N , secondo la relazione

$$\Delta E_1 \sim e^{-\alpha(h_x)N}. \quad (9)$$

Pertanto, nel limite termodinamico, in questo range del campo trasverso il gap ΔE_1 si annulla, mentre per $h_x > 1$ è diverso da zero, i.e. non c'è competizione tra i livelli. Analogamente, per $h_x = 1$, l'andamento è a potenza secondo la relazione

$$\Delta E_1 \sim N^{-z}, \quad (10)$$

in cui z è un esponente critico del modello. In conclusione, nel limite termodinamico l'andamento atteso del primo gap energetico è quindi

$$\Delta E_1 = 2|h_x - 1| \quad \text{per} \quad h_x > 1, \quad \Delta E_1 = 0 \quad \text{per} \quad 0 < h_x \leq 1, \quad (11)$$

mentre l'andamento atteso del secondo gap energetico è proporzionale a $|h_x - 1|$.

1.2 Caso ferromagnetico

Di seguito si assume $g_z = 1$, $h_x > 0$ e si considera il sistema a temperatura $T = 0K$, ossia nello stato fondamentale. Il termine dominante nell'hamiltoniana per $h_x \gg 1$ è quello associato al campo trasverso, per cui le componenti x degli spin tendono ad allinearsi alla direzione del campo h_x . In tale situazione, la correlazione delle componenti z degli spin decade esponenzialmente e la magnetizzazione media sull'asse z è nulla. Ciò caratterizza la fase *paramagnetica*. Nel caso in cui $h_x \ll 1$, la componente dominante è quella che descrive l'accoppiamento lungo z e gli spin tendono ad allinearsi con esso. Ne consegue che, in accordo con la relazione (6), lo stato fondamentale è descritto sia dalla configurazione con tutti gli spin up che da quella con tutti gli spin down. Questa configurazione simmetrica caratterizza

la fase *ferromagnetica*, in cui la magnetizzazione media lungo l'asse z , denotata con M_j^z , è diversa da zero. In particolare, osservando che $\langle \hat{\sigma}_j^z \rangle = 0$ in entrambi i casi, si può definire la magnetizzazione media tramite il correlatore degli operatori $\hat{\sigma}_j^z$ come

$$M_j^z := \pm \sqrt{\lim_{r \rightarrow +\infty} \langle \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+r}^z \rangle_0} . \quad (12)$$

Nel limite termodinamico, la simmetria del modello può essere esplicitamente rotta introducendo un piccolo campo longitudinale h_z . In tal caso, l'hamiltoniana diventa

$$\hat{\mathcal{H}}_I = -g_z \sum_j \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z - h_x \sum_j \hat{\sigma}_j^x - h_z \sum_j \hat{\sigma}_j^z , \quad (13)$$

portando il sistema a scegliere una delle due configurazioni.

Al variare del campo trasverso h_x il sistema passa dalla fase *paramagnetica* a quella *ferromagnetica* con una transizione di fase quantistica continua; il punto in cui si verifica la transizione è detto *punto critico* e si ha per $h_x = 1$. Inoltre, nel limite termodinamico, la lunghezza di correlazione ξ , definita dalla relazione

$$\langle \hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j \rangle \sim e^{-\frac{|i-j|}{\xi}} , \quad (14)$$

diverge con andamento a potenza. Analogamente, anche altre grandezze fisiche del sistema come la magnetizzazione lungo z , denotata con M^z , e la suscettività, denotata con χ^z , hanno un andamento a potenza descritto dai così detti *esponenti critici*. Esprimendo queste grandezze in funzione della distanza di h_x dal punto critico, ossia $\tilde{h}_x := h_x - 1$, si ha

$$\begin{aligned} \xi &\simeq |\tilde{h}_x|^{-\nu} , \\ \langle M^z \rangle &\simeq |\tilde{h}_x|^\beta \quad \text{per } h_x < 1 , \\ \chi^z &:= \frac{\partial \langle M^z \rangle}{\partial h} \simeq |\tilde{h}_x|^{-\gamma} . \end{aligned} \quad (15)$$

Secondo l'ipotesi di scaling, l'andamento della lunghezza di correlazione durante la transizione di fase implica che essa sia l'unica lunghezza caratteristica del sistema, ovvero tutte le grandezze esprimibili come potenze di una lunghezza sono ad essa proporzionali con un esponente opportuno. Pertanto, le equazioni precedenti si possono riscrivere come

$$\begin{aligned} |\tilde{h}_x| &\sim \xi^{-1/\nu} , \\ \langle M^z \rangle &\sim \xi^{-\beta/\nu} , \\ \chi^z &\sim \xi^{\gamma/\nu} . \end{aligned} \quad (16)$$

Si può dimostrare che la statistica che si estrae da un sistema quantistico di dimensione d è equivalente a quella di un sistema classico con dimensione $d + 1$. Questa corrispondenza è detta *quantum to classical mapping*. Da essa segue anche che i valori degli esponenti critici del modello di Ising $2d$ classico sono gli stessi del modello di Ising $1d$ quantistico, con il campo trasverso che gioca il ruolo della temperatura.

1.3 Integrabilità del modello

Rispetto a quanto avviene in fisica classica, in meccanica quantistica è difficile definire il concetto di integrabilità di un sistema. In generale, un modello si definisce integrabile quando è possibile individuare un numero sufficiente di costanti del moto che permettono di descriverne completamente la dinamica. In meccanica quantistica questo concetto si può declinare come la possibilità di trovare un set sufficientemente grande di operatori non banali che commutano con l'hamiltoniana. Al contrario, in un sistema non integrabile l'unico set di questo tipo è quello di operatori banali come, ad esempio, i proiettori sugli autostati dell'hamiltoniana. Nel caso del modello di *Ising quantistico in campo trasverso* in una dimensione, si determinano delle costanti del moto non banali grazie agli operatori numero delle quasi-particelle di Bogolyubov. Queste sono definite dalla rotazione di Bogolyubov come combinazioni degli operatori di creazione e distruzione fermionici; pertanto, l'hamiltoniana fermionica espressa in termini di quasi particelle risulta diagonale.

Da un punto di vista numerico, si può studiare l'integrabilità di un modello analizzando la statistica del *level spacing*, ossia la distribuzione delle spazature tra i livelli energetici adiacenti. Si supponga noto lo spettro dell'hamiltoniana del sistema,

$$\{E_j\}_{j=1,\dots,2^N} \quad \text{con} \quad E_1 \leq E_2 \leq \dots \leq E_{2^N} . \quad (17)$$

Si può studiare la distribuzione delle spazature tra i livelli costruendo il set

$$\left\{ \frac{\delta E_j}{\langle \delta E_j \rangle} \right\}_{j=1,\dots,2^N-1} \quad \text{in cui} \quad \delta E_j := E_{j+1} - E_j . \quad (18)$$

Se il sistema è non integrabile, allora la distribuzione delle spazature è descritta dalla statistica di *Wigner-Dyson* e si osserva il fenomeno di *level repulsion*, ossia non ci sono regioni dello spettro in cui i livelli tendono ad addensarsi. Indicando con s il *level spacing*, l'andamento della distribuzione in questo caso è

$$P(s) \sim s^\gamma e^{-s^2} , \quad (19)$$

in cui il parametro γ è definito positivo e il suo valore è legato alle simmetrie dell'hamiltoniana. Se invece il sistema è integrabile, la distribuzione delle spazature è data da una Poissoniana come

$$P(s) \sim e^{-s} , \quad (20)$$

e si osserva il fenomeno di *level crossing*, in cui i livelli energetici sono molto vicini tra loro, ammettendo anche numerose degenerazioni. Ciò è legato al fatto che lo spettro energetico si ottiene dalla combinazione degli autovalori di operatori non banali - tipicamente di numero inferiore rispetto alla dimensione dell'hamiltoniana del sistema.

Nel caso del modello di *Ising quantistico in campo trasverso*, a causa delle numerose simmetrie presenti, ci si aspetta di osservare un andamento che assomiglia più a una funzione delta in $s = 0$ che a una Poissoniana, mentre aggiungendo un campo longitudinale h_z il modello diventa non integrabile e ci si aspetta una statistica di Wigner-Dyson.

2 Procedure

In questa sezione vengono descritte le tecniche numeriche impiegate per la simulazione del modello di Ising quantistico $1d$. In particolare, dopo aver implementato numericamente il modello - costruendo esplicitamente l'hamiltoniana o descrivendo come questa agisce su un vettore della base [2.1], si procede nel primo caso alla diagonalizzazione esatta [2.2] e nel secondo alla diagonalizzazione con metodo Lanczos [2.3]. Lo scopo è osservare l'andamento dell'energia di *ground state* e dei gap energetici rispetto ai primi due livelli eccitati durante la transizione di fase. Con le stesse procedure utilizzate nella diagonalizzazione si determina lo stato fondamentale del sistema e su esso vengono valutate magnetizzazione e suscettività.

2.1 Implementazione numerica del modello

Si consideri lo spazio di Hilbert di singolo spin $\mathcal{H}^{(2)}$; una sua base è data dall'insieme $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$, ovvero quella in cui lo spin si trova in configurazione up $|\uparrow\rangle$ o down $|\downarrow\rangle$ rispetto all'asse z . In generale, per uno spazio di Hilbert \mathcal{H} associato ad un sistema di N spin e di dimensione $d_N = 2^N$, una base è data dall'insieme $\{|\uparrow \cdots \uparrow\rangle; |\uparrow \cdots \uparrow \downarrow\rangle, \dots, |\downarrow \cdots \downarrow\rangle\}$, in cui lo stato $|\uparrow \cdots \uparrow\rangle$ è dato dal prodotto tensoriale $|\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle \otimes \dots \otimes |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle$. Per la simulazione numerica di un modello di spin è utile introdurre la base computazionale $\{|0\rangle, |1\rangle\}$, che nel caso di singolo spin si ottiene identificando gli stati di spin come segue

$$|\uparrow\rangle := |0\rangle \quad |\downarrow\rangle := |1\rangle . \quad (21)$$

Da questa relazione è possibile costruire una base computazionale anche per lo spazio di Hilbert $2^N - \text{dimensionale}$. Ciò avviene attraverso la creazione di una corrispondenza tra i vettori di quest'ultima e gli stati della base di spin di partenza. In particolare, si introduce un indice n , con $n = 0, \dots, 2^N - 1$, che individua uno stato nella base di spin, e si considera il valore di n in rappresentazione binaria, ottenendo così una stringa di N elementi, 0 e 1, che corrisponde alla data configurazione di spin della base computazionale. Con questi vettori si può costruire una matrice $2^N \times N$, la cui riga $n - \text{esima}$ corrisponde al vettore $n - \text{esimo}$ della base di spin. Una volta determinata la base computazionale si costruisce la matrice $\hat{\mathcal{H}}_I$ del modello, considerando l'azione degli operatori di Pauli sui vettori di base. Il termine di interazione tra spin $\hat{\sigma}_j^z \otimes \hat{\sigma}_{j+1}^z$ è diagonale, dal momento che i vettori di base sono definiti partendo dagli autostati di $\hat{\sigma}_j^z$, e che che gli operatori $\hat{\sigma}_j^z$ e $\hat{\sigma}_{j+1}^z$ agiscono sugli spin in j e $j + 1$ in modo indipendente. L'operatore associato al campo trasverso non è diagonale; infatti, l'operatore $\hat{\sigma}_j^x$ agisce sul $j - \text{esimo}$ spin invertendone l'orientazione,

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_j^x |\dots 0_j \dots\rangle &= |\dots 1_j \dots\rangle , \\ \hat{\sigma}_j^x |\dots 1_j \dots\rangle &= |\dots 0_j \dots\rangle . \end{aligned} \quad (22)$$

Più in generale, seguendo ragionamenti analoghi per tutti i termini a uno e a due spin, è stata definita una classe chiamata *Hamiltoniana*. Una volta implementata la base computazionale, questa classe calcola tutti i termini di interazione con il campo esterno h_α come $h_\alpha \hat{\sigma}_j^\alpha$, e i termini di accoppiamento g_α tra le componenti di spin come $g_\alpha \hat{\sigma}_j^\alpha \hat{\sigma}_{j+1}^\alpha$, con $\alpha = x, y, z$. Questi termini vengono utilizzati per costruire una matrice intera o una sua rappresentazione

sparsa, a seconda del caso. Inoltre, è stato implementato un metodo chiamato *action()*, che restituisce l'azione dell'hamiltoniana su uno stato in input senza utilizzare la matrice associata. Infine, la classe presenta un metodo chiamato *diagonalize()*, che a seconda del caso effettua una diagonalizzazione esatta o ricerca i primi k autovalori e autovettori. Nel caso in esame, è possibile istanziare un oggetto corrispondente all'hamiltoniana utilizzata richiedendo condizioni periodiche al bordo, $g_z = 1$ e tutti gli altri termini uguali a zero.

2.2 Diagonalizzazione esatta con ZHEEV

Un modo per diagonalizzare la matrice $\hat{\mathcal{H}}_I$ quando è completamente salvata in memoria è utilizzare la subroutine ZHEEV della libreria LAPACK. Questa subroutine viene chiamata tramite la libreria LAPACK, che fornisce un'interfaccia in C++ per LAPACK. Le tecniche di diagonalizzazione che utilizzano ZHEEV e procedure simili sono note come *diagonalizzazione esatta*. Questo perché l'errore prodotto dall'algoritmo può essere richiesto dell'ordine dell'errore macchina. La routine ZHEEV calcola gli autovalori e, se richiesto, gli autovettori destri di matrici hermitiane di dimensione $2^N \times 2^N$. Essa opera sull'intera matrice, il che significa che la matrice deve essere completamente allocata in memoria. L'utilizzo della ZHEEV diventa inefficiente man mano che la dimensione del sistema aumenta. Pertanto, il metodo è efficace solo fino a dimensioni N limitate in base alle capacità della macchina. Nel caso in cui la matrice sia sparsa, ossia con molti termini nulli, la subroutine ZHEEV non è la tecnica più efficiente: in questo caso è più utile considerare procedure che operano in modo diverso, riuscendo a trattare matrici più grandi, come con il metodo *Lanczos*.

2.3 Diagonalizzazione con metodo Lanczos

Per il calcolo dei primi 3 autovalori e autovettori si utilizza un'implementazione C++ dell'algoritmo Lanczos, disponibile su GitHub come *lambda-lanczos*. L'algoritmo Lanczos permette di determinare alcuni autovalori e autovettori di una matrice hermitiana $2^N \times 2^N$. Si tratta di una tecnica variazionale che risulta efficiente nel calcolo dei valori estremali dello spettro. Viene dunque utilizzato di frequente per determinare lo stato fondamentale e i primi livelli eccitati. Questa è meno performante per valori intermedi dello spettro e può presentare problemi se l'energia ammette minimi locali in cui l'algoritmo potrebbe arrestarsi senza raggiungere l'autovalore cercato. Il vantaggio principale del metodo Lanczos consiste nel fatto che non richiede l'allocazione della matrice da diagonalizzare, e si possono quindi studiare sistemi con un numero di spin maggiore rispetto a quelli trattabili con la diagonalizzazione esatta. Infatti, lo spazio di memoria occupato dal Lanczos è dell'ordine di 2^N , mentre la routine ZHEEV necessita di uno spazio di memoria dell'ordine di 2^{2N} .

L'algoritmo procede iterativamente nella determinazione del *ground state* $|\psi_{gs}\rangle$ attraverso i seguenti step:

- si considera uno stato di partenza $|\psi_0\rangle$, che può essere scelto arbitrariamente;
- si determina un nuovo stato $|\tilde{\psi}_1\rangle$ a partire dal precedente applicando un operatore generico \tilde{K} , come $|\tilde{\psi}_1\rangle = \tilde{K}|\psi_0\rangle$, a patto che l'azione di \tilde{K} sia non banale;

- si ortonormalizza lo stato ottenuto rispetto a $|\psi_0\rangle$ come

$$|\psi_1\rangle = \frac{\hat{K} - \langle\psi_0|\hat{K}|\psi_0\rangle}{\sqrt{\langle\psi_0|\hat{K}^\dagger\hat{K}|\psi_0\rangle - |\langle\psi_0|\hat{K}|\psi_0\rangle|^2}}|\psi_0\rangle ;$$

- si costruisce uno spazio di Hilbert \mathcal{H}_1 come $\mathcal{H}_1 = \text{span}\{|\psi_0\rangle, |\psi_1\rangle\}$ e si determina la matrice $\hat{\mathcal{H}}_{ridotta}$ associata ;
- si diagonalizza la matrice ottenendo lo stato ad energia minima in questo sottospazio come $|\psi_0^{(1)}\rangle = \alpha|\psi_0\rangle + \beta|\psi_1\rangle$, e si itera la procedura sostituendo a $|\psi_0\rangle$ lo stato $|\psi_0^{(1)}\rangle$.

In sostanza, per implementare l'algoritmo serve specificare come la matrice da diagonalizzare agisce su uno stato e per questo non è necessario costruirla esplicitamente. Inoltre, la procedura garantisce, per costruzione, che l'energia degli stati ottenuti con le varie iterazioni non aumenti, ma che, al limite, rimanga la stessa.

3 Analisi dei risultati

La simulazione del modello di Ising quantistico unidimensionale è stata eseguita con l'implementazione di condizioni al contorno periodiche. Sono state effettuate misure delle quantità di interesse per il numero di spin nella catena N che va da 4 a 14, al variare del campo trasverso h_x nell'intervallo $[0, 2]$, ossia intorno al punto critico $h_{x_c} = 1$, con passo 0.02. Per ciascun valore del campo trasverso, sono stati determinati il ground state e i primi due livelli eccitati utilizzando la routine ZHEEV per $4 \leq N \leq 9$, e l'algoritmo Lanczos per $10 \leq N \leq 14$. In particolare, è stato studiato il comportamento del gap energetico tra il ground state e il primo livello eccitato ΔE_1 , e tra il ground state e il secondo stato eccitato ΔE_2 [3.1]. Sul ground state, sono state misurate le magnetizzazioni rispetto agli assi x e z , e la suscettibilità magnetica lungo l'asse z [3.2]. È stata inoltre verificata l'ipotesi di *finite-size scaling* per queste grandezze [3.3]. Infine, è stata analizzata la statistica del *level spacing* per il modello di Ising con campo trasverso e con campo longitudinale, al fine di verificare l'integrabilità del modello da un punto di vista numerico [3.4].

3.1 Gap energetici

Si determina l'energia dello stato fondamentale e quella dei primi due livelli eccitati per studiare l'andamento dei gap ΔE_1 e ΔE_2 in funzione del campo trasverso h_x .

Dalla simulazione numerica si osserva come ΔE_1 riproduce l'andamento descritto dalla relazione (11), tendendo all'andamento atteso all'aumentare della dimensione del sistema. Tale andamento è mostrato nel grafico in figura 1.

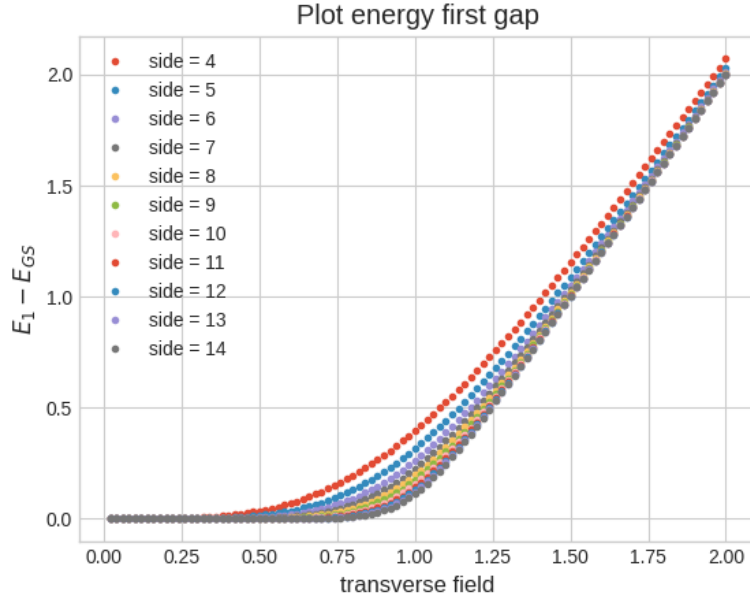


Figura 1: ΔE_1 in funzione di h_x al variare di N .

Un fit dei valori di $\Delta E_1(N)$ per $h_x = 1$ con la funzione $f(N) = N^{-z}$ fornisce il valore dell'esponente critico z , riportato nella tabella a seguire.

z teorico	z fit
1	1.011 ± 0.001

Si ricava α in funzione del campo trasverso h_x nell'intervallo $(0, 1)$ dalla relazione (9), tramite un fit dei valori di $\Delta E_1(N)$ con la funzione $f(N) = ae^{-Nb}$. Il risultato è illustrato nel grafico in figura 2.

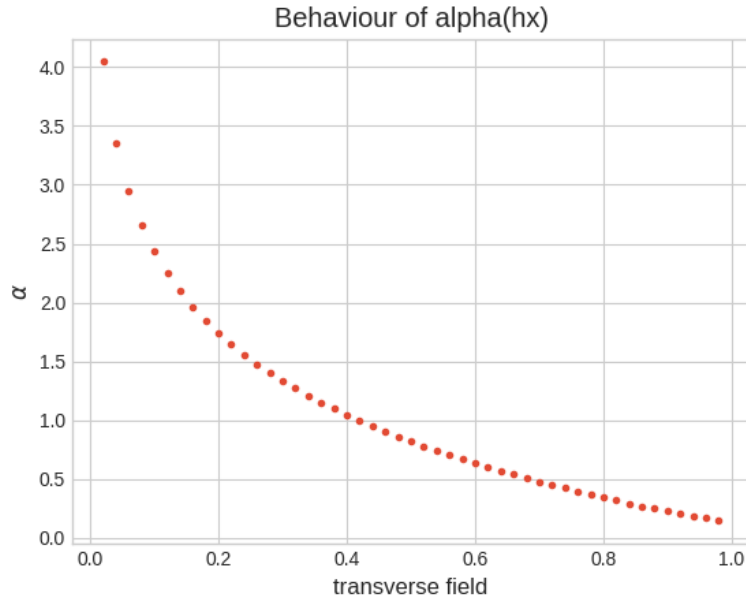


Figura 2: Valori fittati di α in funzione del campo trasverso h_x .

L'andamento teorico di ΔE_2 prevede l'annullamento del gap in corrispondenza del punto critico, mentre rimane diverso da zero per ogni altro valore del campo trasverso. Dalla simulazione del modello si osserva come, all'aumentare di N , ΔE_2 converge all'andamento atteso. Ciò è illustrato nel grafico in figura 3.

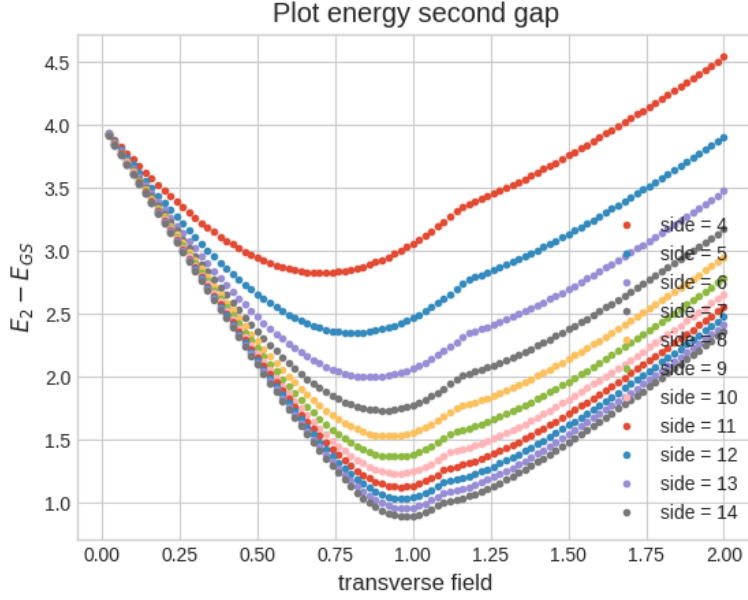


Figura 3: ΔE_2 in funzione di h_x al variare di N .

3.2 Magnetizzazioni relative

Le osservabili studiate sono le magnetizzazioni lungo gli assi x e z valutate sullo stato fondamentale. Valutare un'osservabile M su uno stato $|\psi\rangle$, espresso nella base computazionale come

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle = \sum_{i_1, \dots, i_N=0}^1 c_{i_1, \dots, i_N} |i_1, \dots, i_N\rangle, \quad (23)$$

fornisce l'espressione

$$M = \sum_{i_1 \dots i_N j_1 \dots j_N} c_{j_1, \dots, j_N}^* c_{i_1, \dots, i_N} \langle j_1, \dots, j_N | \hat{M} | i_1, \dots, i_N \rangle. \quad (24)$$

In assenza di un campo longitudinale h_z , il sistema presenta una magnetizzazione M^z sempre nulla. Per osservare una magnetizzazione media diversa da zero sull'asse z si richiama l'equazione (12) e si considera la quantità

$$\tilde{M}^z := \sum_n |c_n|^2 \sum_j |\langle n | \hat{\sigma}_j^z | n \rangle|. \quad (25)$$

Questa funge da parametro d'ordine per la transizione di fase, assumendo valore 1 nella fase ordinata e 0 nella fase disordinata. L'andamento descritto viene recuperato in figura 4 nel limite termodinamico.

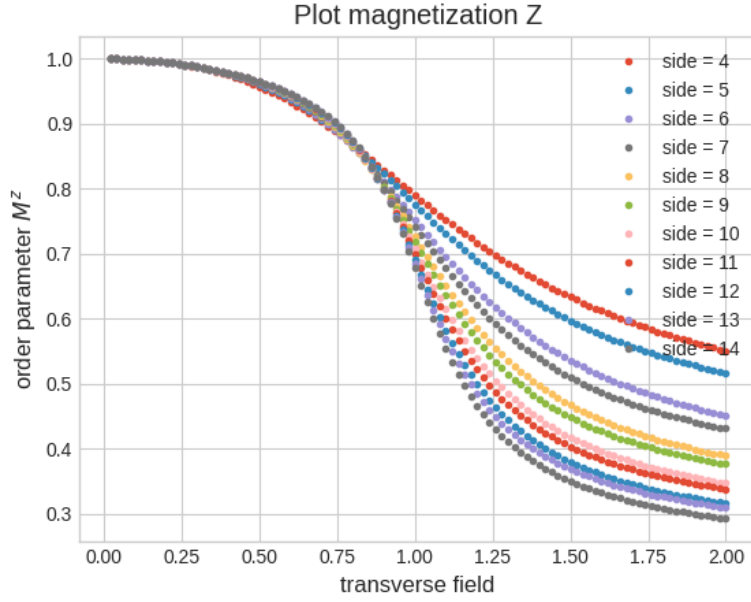


Figura 4: Modulo della magnetizzazione media lungo l'asse z al variare del campo trasverso.

L'osservabile M^x non ha un comportamento particolarmente interessante: all'aumentare dell'intensità del campo trasverso, gli spin tendono ad allinearsi lungo la direzione individuata da h_x . Il risultato ottenuto è riportato in figura 5.

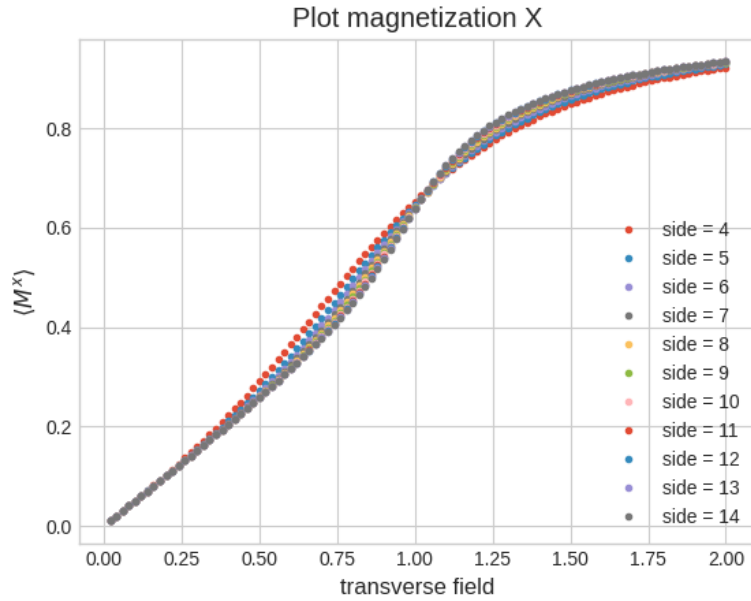


Figura 5: Magnetizzazione media lungo l'asse x al variare del campo trasverso.

3.3 Effetti di taglia finita

Come evidenziato dalle relazioni (16), le grandezze caratteristiche del sistema mostrano un andamento a potenza intorno alla transizione di fase quantistica, espresso in termini della lunghezza di correlazione ξ . Questo andamento può essere verificato anche per sistemi di taglia finita, in cui $\xi \sim N$. Considerando la suscettività magnetica lungo l'asse z si ha

$$\chi^z(h_x, N) = N^{\gamma/\nu} \tilde{\phi}(\xi, N) . \quad (26)$$

Vicino al punto critico efficace, la lunghezza di correlazione raggiunge il suo valore massimo e l'unica quantità significativa del sistema è il rapporto N/ξ , per cui

$$\chi^z(\xi, N) = N^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}^z(N/\xi) = N^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}^z(|h_x| N^{1/\nu}) . \quad (27)$$

Le stesse considerazioni valgono anche per la magnetizzazione media M^z , come

$$M^z(\xi, N) = N^{-\beta/\nu} \tilde{M}(|h_x| N^{1/\nu}) . \quad (28)$$

Questo effetto, dovuto alla taglia finita del reticolo, è detto *finite-size scaling*. Esso può essere verificato numericamente tramite un plot di

$$\chi^z N^{-\gamma/\nu} \quad e \quad M^z N^{\beta/\nu} , \quad (29)$$

in funzione di $\tilde{h}_x N^{1/\nu}$. I valori degli esponenti critici si deducono dalla soluzione analitica del modello di Ising classico $2d$ per via del *quantum to classical mapping*:

$$\nu = 1 , \quad \beta = \frac{1}{8} , \quad \gamma = \frac{7}{4} . \quad (30)$$

I risultati ottenuti sono riportati in figure 6 e 7.

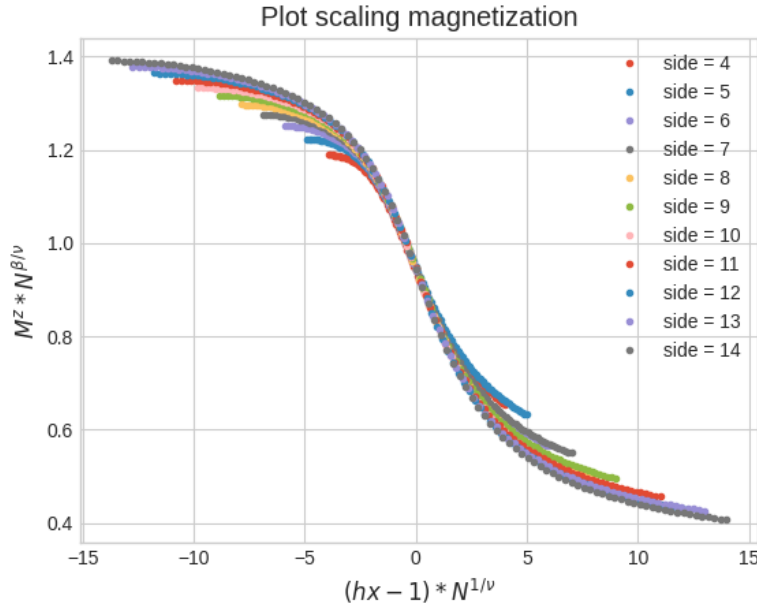


Figura 6: Plot della magnetizzazione media del sistema lungo l'asse z opportunamente riscalata.

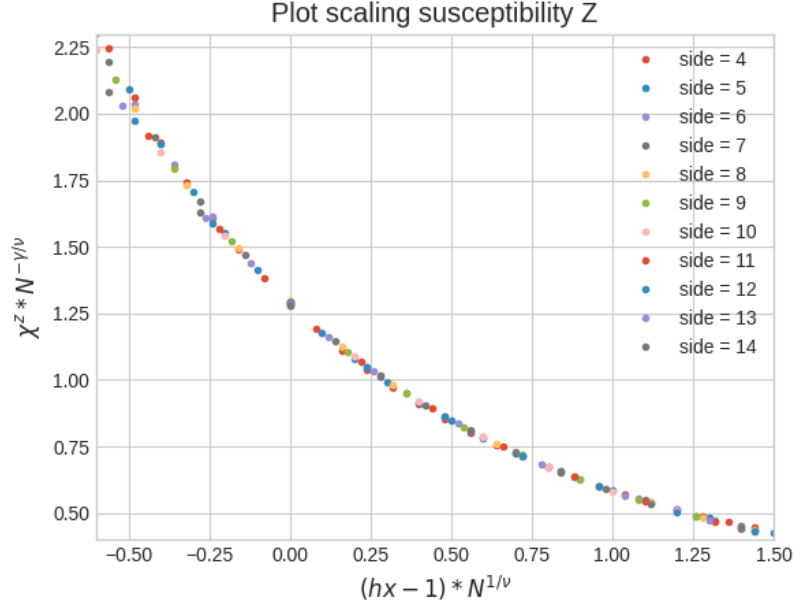


Figura 7: Plot della suscettività magnetica lungo l'asse z opportunamente riscalata.

L'andamento delle grandezze in esame non dipende dal numero di spin della catena N , e dunque dalla dimensione del reticolo, come atteso teoricamente.

3.4 Integrabilità del modello

Come descritto in sezione 1.3, è possibile studiare l'integrabilità di un modello da un punto di vista numerico analizzando la statistica del level spacing. La statistica del modello di Ising in campo trasverso (2) valutato al punto critico viene confrontata con quella dello stesso modello in presenza di un campo longitudinale (13) della stessa intensità di quello trasverso. Per ottenere dei risultati più chiari, sono stati scartati i primi e gli ultimi N^2 autovalori ottenuti dalla diagonalizzazione esatta. Inoltre, per rompere quante più simmetrie possibile, sono state adottate condizioni aperte al bordo ed è stata introdotta una perturbazione

$$\hat{\mathcal{H}}_\epsilon = -0.001 \sum_{i=0}^{N-1} \epsilon_i \sigma_i^z, \quad (31)$$

in cui ϵ_i è un numero random estratto tra -1 e 1 per ogni sito del reticolo. I risultati ottenuti per $N = 10, 11, 12$ sono riportati in figure 8, 9 e 10 rispettivamente. I risultati per $N = 10, 12$ sono in accordo con quanto osservato in sezione 1.3, mentre per $N = 11$ il profilo ottenuto nel caso integrabile non soddisfa le caratteristiche attese. In particolare, per $N = 10$ sono ben delineati sia il profilo della delta in zero che il profilo della statistica associata al sistema non integrabile. Vale lo stesso per $N = 12$ a meno di un picco isolato nella statistica del modello integrabile. I risultati ottenuti sono praticamente gli stessi del caso in cui, invece di introdurre un piccolo campo longitudinale random su ogni sito, si considera un campo longitudinale di intensità circa 0.1 sul primo spin.

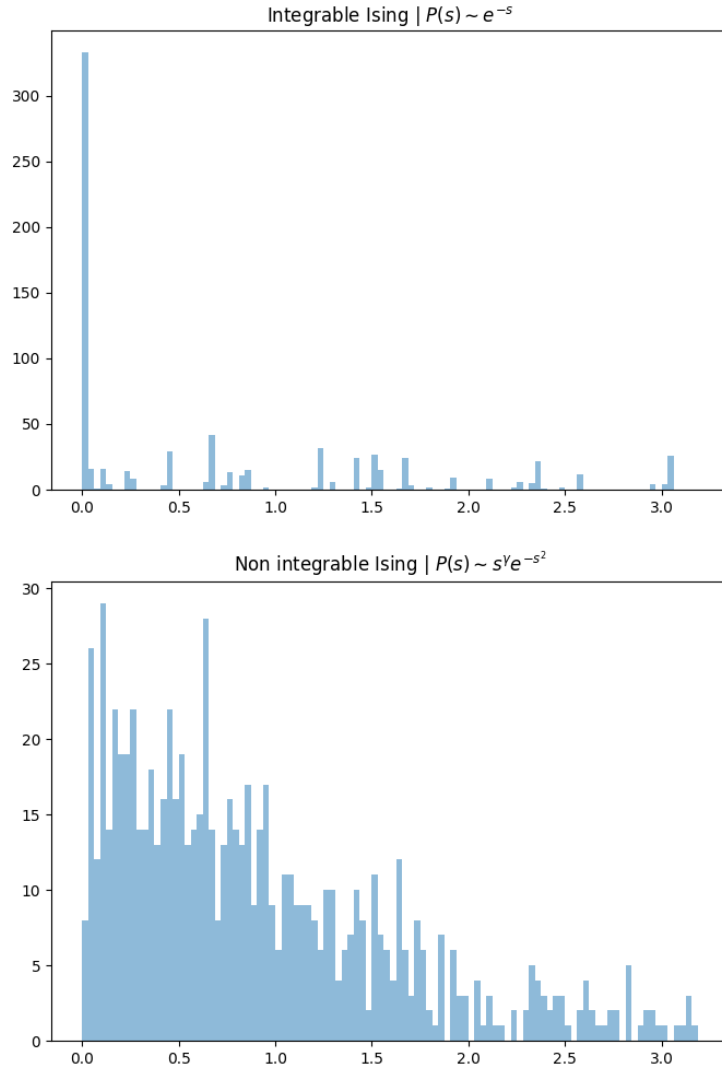


Figura 8: Confronto della statistica del level spacing tra Ising in campo trasverso valutato al punto critico e lo stesso modello in presenza di un campo longitudinale $h_z = 1$ con $N = 10$.

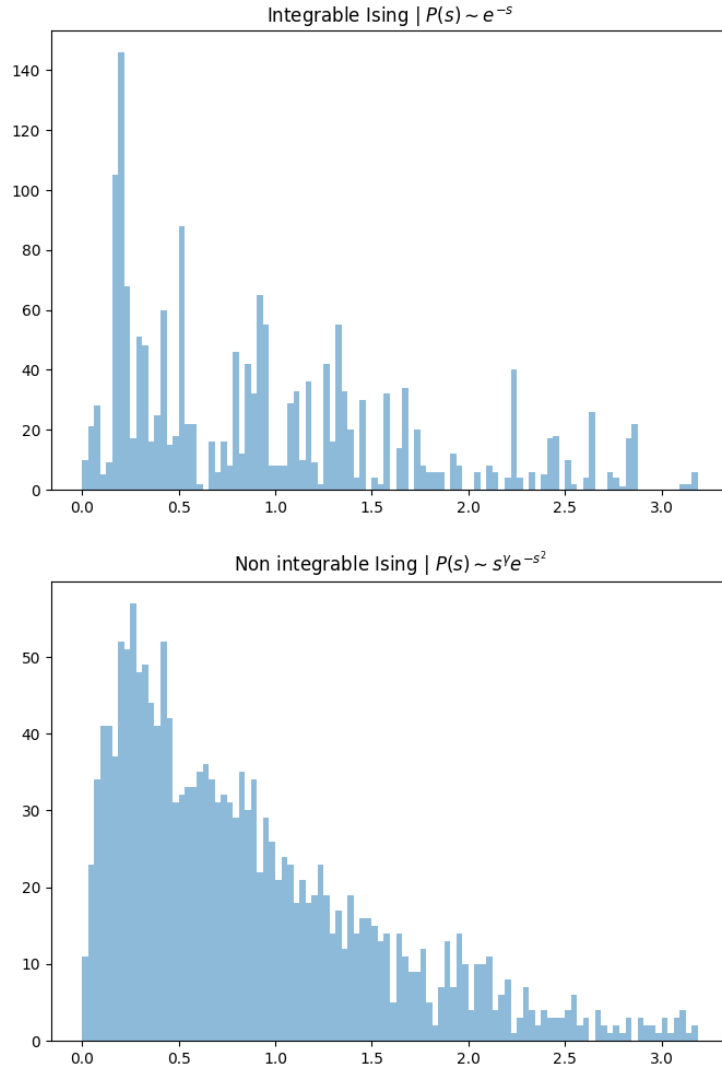


Figura 9: Confronto della statistica del level spacing tra Ising in campo trasverso valutato al punto critico e lo stesso modello in presenza di un campo longitudinale $h_z = 1$ con $N = 11$.

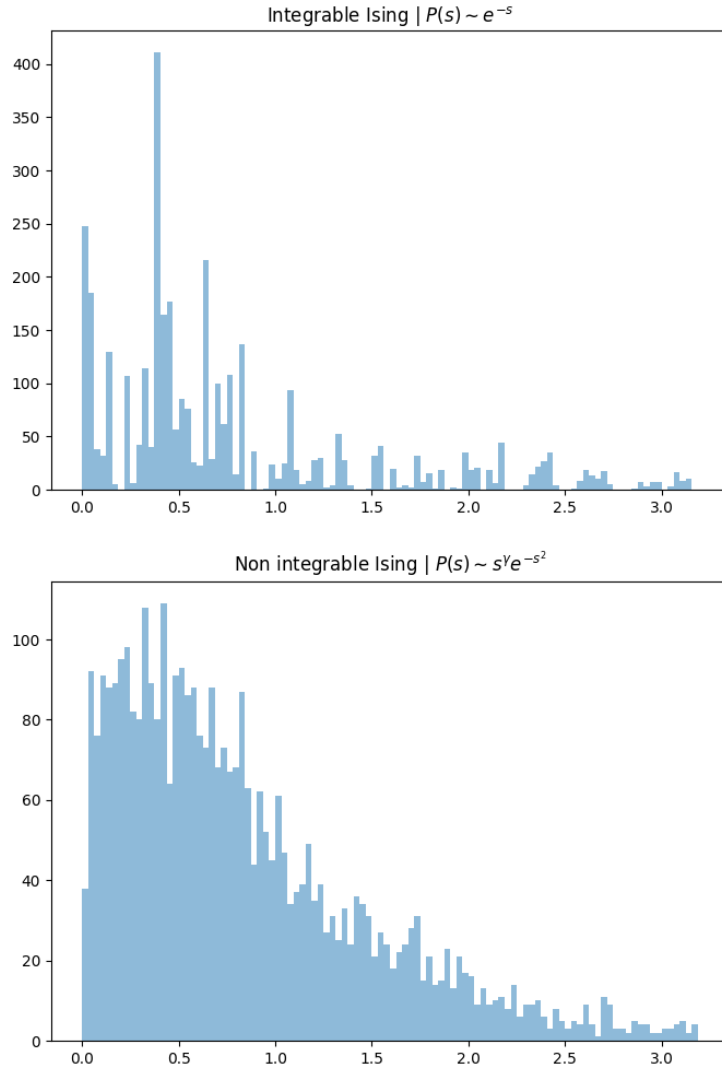


Figura 10: Confronto della statistica del level spacing tra Ising in campo trasverso valutato al punto critico e lo stesso modello in presenza di un campo longitudinale $h_z = 1$ con $N = 12$.