Cadeia de Ising com campo transverso

Thales Freitas Macêdo

9 de janeiro de 2023

Modelo de Ising clássico

O modelo de Ising é um modelo de spins $S_i=\pm 1$ localizados, formando uma rede, sob ação de um campo magnético externo H, alinhado com os spins.

$$E = -J\sum_{\langle ij\rangle} S_i S_j - \mu H \sum_i S_i$$

Cadeia de Ising com campo transverso

O modelo de Ising com campo transverso é obtido ao impor que a direção do campo magnético seja transversa à direção dos spins. Agora, não podemos mais tratar o problema classicamente, e temos que usar a mecânica quântica. Vou abordar o problema unidimensional da cadeia de Ising.

$$H = -\sum_{i} \left[\Gamma S_{i}^{x} + J S_{i}^{z} S_{i+1}^{z} \right] = -\sum_{i} \left[S_{i}^{x} + \lambda S_{i}^{z} S_{i+1}^{z} \right]$$
 (1)

onde S^{α} é o operador de spin de Pauli na direção α , J é a constante de interação entre os spins, Γ é a constante do campo, e $\lambda=J/\Gamma$, com $\Gamma=1$.

Cadeia de Ising com campo transverso

Definimos o gap de massa $\Delta(\lambda)$ como a diferença de energia entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado. Numa transição de fase quântica, $\Delta=0$, e o comprimento de correlação $\xi=1/\Delta$ diverge.

Nesse método, diagonalizamos exatamente o Hamiltoniano para cadeias com $N=2,3,4,\ldots$ spins. A princípio, uma cadeia com muitos spins aproximaria o limite termodinâmico $N\to\infty$ mais adequadamente, mas pode ser numericamente muito custoso. Podemos usar a seguinte relação para estimar os parâmetros no limite termodinâmico:

$$\lambda_c(L) = \lambda_c + AL^{-1/\nu},\tag{2}$$

onde λ_c é valor crítico de λ para uma transição de fase quântica, L representa os tamanhos das cadeias, A é uma constante e ν é um expoente crítico relacionado ao comprimento de correlação ξ .

Na base de autovalores de S^{\times} , as representações matriciais de S^{α} para o espaço de 1 spin são

$$S^{\times} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{3}$$

е

$$S^z = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{4}$$

Temos agora que obter uma representação matricial dos operadores S_i^{α} .

No espaço de estados de N spins, temos que fazer o produto tensorial entre S_i^{α} e operadores identidade para os outros spins. A representação do produto tensorial desses operadores é obtido pelo produto de Kronecker:

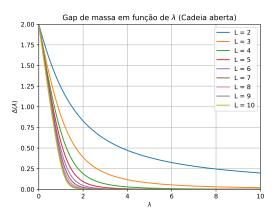
$$A \otimes B = \begin{pmatrix} a_{11}B & \dots & a_{1n}B \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}B & \dots & a_{mn}B \end{pmatrix}$$
 (5)

Por exemplo, se N = 4:

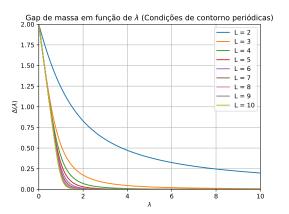
$$H = -(S_1^x + S_2^x + S_3^x + S_4^x) - \lambda(S_1^z S_2^z + S_2^z S_3^z + S_3^z S_4^z).$$
 (6)

Para estabelecer condições de contorno periódicas, basta adicionar o termo $-\lambda S_4^z S_1^z$.

Encontrei o gap de massa para os casos N = 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10:



Encontrei o gap de massa para os casos N = 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10:

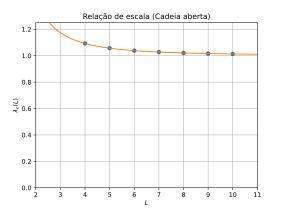


Os gaps de massa tendem a zero no infinito para cadeias finitas. Só há transição de fase quântica no limite termodinâmico. Temos que estimar de alguma forma λ_c para os casos finitos. Uso a razão de gap de massa:

$$R_{L} = \frac{L\Delta(\lambda, L)}{(L-1)\Delta(\lambda, L-1)}.$$
 (7)

O parâmetro crítico λ_c pode ser aproximado como a solução da equação $R_L(\lambda_c)=1$.

Calculei os λ_c e plotei em função de L:

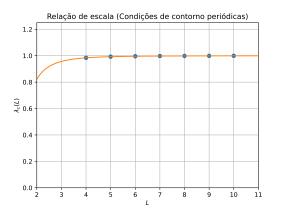


O ajuste à função $f(x) = c + Ax^k$ forneceu

$$c = 1.0013 \pm 0.0002$$
 $A = 1.98 \pm 0.03$ $k = -2.22 \pm 0.01$



Calculei os λ_c e plotei em função de L:



O ajuste à função $f(x) = c + Ax^k$ forneceu

$$c = 0.99984 \pm 0.00003$$
 $A = -2.01 \pm 0.05$ $k = -3.50 \pm 0.02$

A ideia por trás do método é gerar um procedimento iterativo que produza o Hamiltoniano (1) na n-ésima iteração

$$H^{(n)} = -\sum_{i} \left(J^{(n)} S_{i}^{z(n)} S_{i+1}^{z(n)} + \Gamma^{(n)} S_{i}^{x(n)} \right) + c^{(n)} \sum_{i} I_{i}^{(n)}, \quad (8)$$

com as condições iniciais $J^{(0)}=J$, $\Gamma^{(0)}=\Gamma$ e $c^{(0)}=0$.

Começamos dividindo a cadeia de N sítios em N/b blocos com b spins em cada bloco e reescrevemos o Hamiltoniano como a soma de uma parte intra-bloco H_B e outra inter-bloco H_{IB} , com

$$H_B = \sum_{p=1}^{N/b} H_p, \quad H_{IB} = \sum_{p=1}^{N/b-1} H_{p,p+1}$$
 (9)

com

$$H_p = -\sum_{i=1}^{b-1} J S_{i,p}^z S_{i+1,p}^z + \Gamma \sum_{i=1}^b S_{i,p}^x$$
 (10)

$$H_{p,p+1} = -JS_{n,p}^{z}S_{1,p+1}^{z} \tag{11}$$

onde os índices i e p se referem ao i-ésimo spin no p-ésimo bloco.

Diagonalizamos o Hamiltoniano H_p , obtendo os estados fundamental $|0\rangle$ e primeiro excitado $|1\rangle$, de energias E_0 e E_1 . Para efetuar o processo de renormalização, introduzimos um novo conjunto de operadores de spin $S_p^{\alpha(1)}$ associado ao bloco p, tal que os autoestados de $S_p^{x(1)}$ sejam $|0\rangle$ e $|1\rangle$. Assim, podemos reescrever H_p , na primeira iteração, na forma renormalizada

$$H_p^{(1)} = -\Gamma^{(1)} S_p^{\times (1)} + c^{(1)} I_p^{(1)}, \tag{12}$$

onde

$$\Gamma^{(1)} = \frac{E_1 - E_0}{2}, \quad c^{(1)} = \frac{E_1 + E_0}{2}.$$
 (13)

Para reescrever o Hamiltoniano total na forma renormalizada, incluímos a parte inter-bloco de forma perturbativa. Assim obtemos as relações de recursão para a (n+1)-ésima iteração,

$$\Gamma(n+1) = \frac{E_1^{(n)} - E_0^{(n)}}{2} \tag{14}$$

$$J(n+1) = \left(\eta_1^{(n)}\right)^2 J^{(n)} \tag{15}$$

$$c(n+1) = bc^{(n)} + \frac{E_1^{(n+1)} + E_0^{(n+1)}}{2}.$$
 (16)

Referências



C J Hamer and M N Barber.

Finite-lattice methods in quantum hamiltonian field theory. i. the ising model.

Journal of Physics A: Mathematical and General, 14(1):241, jan 1981.



R. Jullien, P. Pfeuty, J. N. Fields, and S. Doniach. Zero-temperature renormalization method for quantum systems. i. ising model in a transverse field in one dimension. Phys. Rev. B, 18:3568-3578, Oct 1978.



S. Suzuki, J. Inoue, and B.K. Chakrabarti. Quantum Ising Phases and Transitions in Transverse Ising Models.

Lecture Notes in Physics. Springer Berlin Heidelberg, 2012.