

Cadeia de Ising com campo transverso

Thales Freitas Macêdo

26 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.

$$H = - \sum_i [\Gamma S_i^x + JS_i^z S_{i+1}^z] = - \sum_i [S_i^x + \lambda S_i^z S_{i+1}^z] \quad (1)$$

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.

Método *Finite-Size Scaling*

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

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

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 .

Método *Finite-Size Scaling*

Na base de autovalores de S^x , as representações matriciais de S^α para o espaço de 1 spin são

$$S^x = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3)$$

e

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

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

Método *Finite-Size Scaling*

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:

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

Método *Finite-Size Scaling*

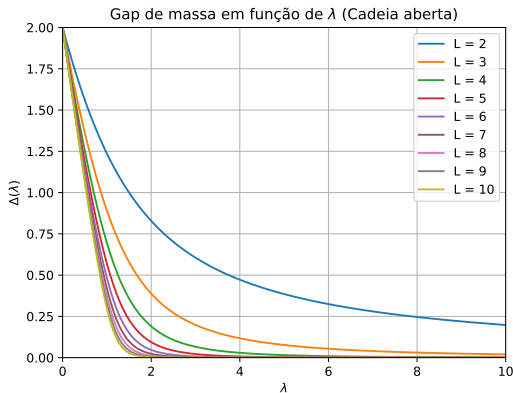
Por exemplo, se $N = 4$:

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

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

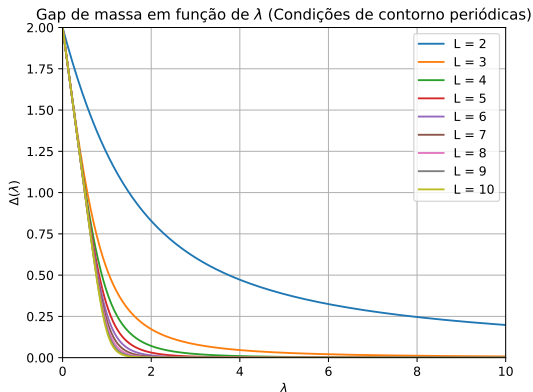
Método *Finite-Size Scaling*

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



Método *Finite-Size Scaling*

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



Método *Finite-Size Scaling*

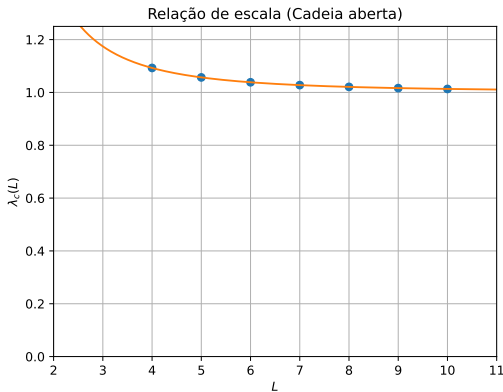
Os gaps de massa tendem a zero no infinito para cadeias finitas. Só há transição de fase quântica no limite termodinâmico. Temos que estimar de alguma forma λ_c para os casos finitos. Uso a razão de gap de massa:

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

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

Método *Finite-Size Scaling*

Calculei os λ_c e plotei em função de L :

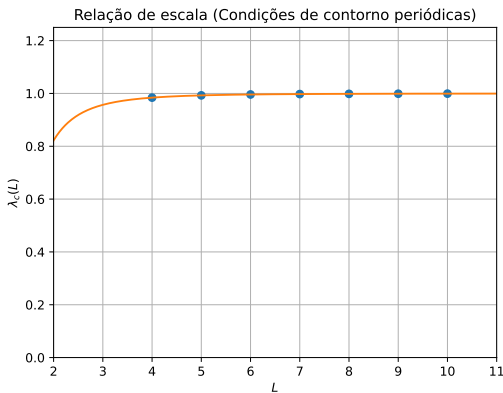


O ajuste à função $f(x) = c + Ax^k$ forneceu

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

Método *Finite-Size Scaling*

Calculei os λ_c e plotei em função de L :



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

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

Método *Block Renormalisation Group*

Os valores críticos do problema da cadeia de Ising transversa tem como propriedade ser invariante de escala: ou seja, alterar a escala do problema não altera o ponto crítico. O método iterativo *Block Renormalisation Group* altera a escala do problema em busca dos pontos críticos, que são os pontos fixos após as iterações.

O método consiste em um procedimento que produza o Hamiltoniano (1) na n -ésima iteração:

$$H^{(n)} = - \sum_i \left(J^{(n)} S_i^{x(n)} S_{i+1}^{x(n)} + h^{(n)} S_i^{z(n)} \right) + C^{(n)} \sum_i I_i^{(n)}, \quad (8)$$

com as condições iniciais $J^{(0)} = J$, $h^{(0)} = h$ e $C^{(0)} = 0$, e onde $I_i^{(n)}$ indica a matriz identidade 2×2 para o spin no sítio i .

Método *Block Renormalisation Group*

Para a n -ésima iteração, dividimos a cadeia em blocos com n_s spins em cada bloco. Usando os índices j para indicar o bloco, e p para indicar o spin dentro do bloco, reescrevemos o hamiltoniano sob a forma

$$H^{(n)} = \sum_j \left(H_j^{(n)} + H_{j,j+1}^{(n)} + C^{(n)} \sum_{p=1, \dots, n_s} I_{j,p}^{(n)} \right), \quad (9)$$

onde $H_j^{(n)}$ é o Hamiltoniano intra-bloco:

$$H_j^{(n)} = -J^{(n)} \sum_{p=1, \dots, n_s-1} S_{j,p}^{x(n)} S_{j,p+1}^{x(n)} - h^{(n)} \sum_{p=1, \dots, n_s} S_{j,p}^z \quad (10)$$

e $H_{j,j+1}^{(n)}$ é o Hamiltoniano inter-bloco:

$$H_{j,j+1}^{(n)} = -J^{(n)} S_{j,n_s}^{x(n)} S_{j+1,1}^{x(n)} \quad (11)$$

Método *Block Renormalisation Group*

Por exemplo, para uma cadeia de 4 spins e um bloco de 2 spins,

$$H^{(0)} = -J^{(0)}(S_1^x S_2^x + S_2^x S_3^x + S_3^x S_4^x) \quad (12)$$

$$- h^{(0)}(S_1^z + S_2^z + S_3^z + S_4^z) \quad (13)$$

$$= -J^{(0)}S_1^x S_2^x - h^{(0)}(S_1^z + S_2^z) \quad (14)$$

$$- J^{(0)}S_3^x S_4^x - h^{(0)}(S_3^z + S_4^z) \quad (15)$$

$$- J^{(0)}S_2^x S_3^x \quad (16)$$

onde podemos ver os termos intra-bloco e inter-bloco.

Método *Block Renormalisation Group*

Agora diagonalizamos o Hamiltoniano $H_j^{(n)}$ no espaço de estados do bloco gerado pela base de kets

$$|\epsilon_1, \epsilon_2, \dots, \epsilon_p, \dots, \epsilon_{n_s}\rangle, \quad (17)$$

com $\epsilon_p = \pm 1$ correspondendo aos autoestados de $S_{j,p}^{z(n)}$.

Somente usamos os estados fundamental $|+\rangle^{(n+1)}$ e primeiro excitado $|-\rangle^{(n+1)}$, de energias $E_+^{(n+1)}$ e $E_-^{(n+1)}$, respectivamente:

$$|+\rangle^{(n+1)} = \sum_{\epsilon_1, \epsilon_2, \dots, \epsilon_p, \dots, \epsilon_{n_s}}^+ \lambda_{\epsilon_1, \epsilon_2, \dots, \epsilon_p, \dots, \epsilon_{n_s}}^{+(n)} |\epsilon_1, \epsilon_2, \dots, \epsilon_p, \dots, \epsilon_{n_s}\rangle, \quad (18)$$

$$|-\rangle^{(n+1)} = \sum_{\epsilon_1, \epsilon_2, \dots, \epsilon_p, \dots, \epsilon_{n_s}}^- \lambda_{\epsilon_1, \epsilon_2, \dots, \epsilon_p, \dots, \epsilon_{n_s}}^{-(n)} |\epsilon_1, \epsilon_2, \dots, \epsilon_p, \dots, \epsilon_{n_s}\rangle. \quad (19)$$

Método *Block Renormalisation Group*

Introduzimos um novo conjunto de operadores de spin $S_j^{x(n+1)}$ associados ao bloco j , tal que os autoestados de $S_j^{z(n+1)}$ sejam $|+\rangle^{(n+1)}$ e $|-\rangle^{(n+1)}$. Assim, podemos reescrever $H_j^{(n)}$ na forma renormalizada

$$H_j^{(n)} = -h^{(n+1)} S_j^{z(n+1)} + \frac{1}{2} \left(E_+^{(n+1)} + E_-^{(n+1)} \right) I_j^{(1)}, \quad (20)$$

onde

$$h^{(n+1)} = \frac{1}{2} \left(E_-^{(n+1)} - E_+^{(n+1)} \right). \quad (21)$$

Método *Block Renormalisation Group*

Tomando os elementos de matriz do operador anterior $S_{j,p}^{x(n)}$ entre os estados $|+\rangle^{(n+1)}$ e $|-\rangle^{(n+1)}$, obtemos a relação de recursão de spins

$$S_{j,p}^{x(n)} = \xi_p^{x(n)} S_j^{x(n+1)}, \quad (22)$$

com

$$\xi_p^{x(n)} = \langle + | S_{j,p}^{x(n)} | - \rangle = \sum_{\epsilon_1, \dots, \epsilon_p, \dots, \epsilon_{n_s}}^+ \lambda_{\epsilon_1, \dots, \epsilon_p, \dots, \epsilon_{n_s}}^{+(n)} \lambda_{\epsilon_1, \dots, -\epsilon_p, \dots, \epsilon_{n_s}}^{-(n)}. \quad (23)$$

Assim podemos reescrever $H_{j,j+1}^{(n)}$ em termos dos novos operadores de spin:

$$H_{j,j+1}^{(n)} = -J^{(n+1)} S_j^{x(n+1)} S_{j+1}^{x(n+1)} \quad (24)$$

com $J^{(n+1)} = \left(\xi_1^{x(n)} \right)^2 J^{(n)}$.

Método *Block Renormalisation Group*

Ao colocar os termos (20) e (24) no Hamiltoniano (9), reobtemos um Hamiltoniano com a mesma forma de (8) para o iteração $n + 1$, com nova constante

$$C^{(n+1)} = n_s C^{(n)} + \frac{1}{2} \left(E_+^{(n+1)} + E_-^{(n+1)} \right). \quad (25)$$

Com essa constante, podemos calcular a energia por sítio do estado fundamental, dada pela relação

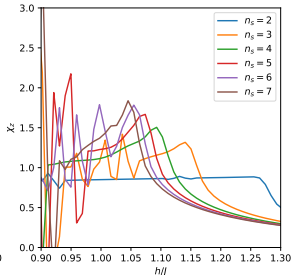
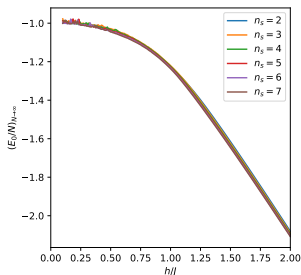
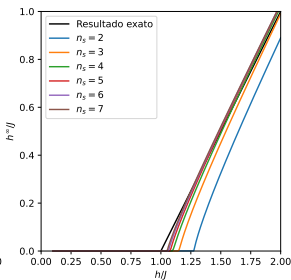
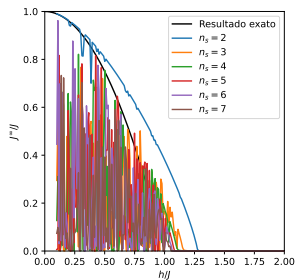
$$(E_0/N)_{N \rightarrow \infty} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(C^{(n)} / n_s^n \right), \quad (26)$$

e assim podemos calcular a susceptibilidade magnética no eixo z pela relação

$$\chi_z = -\frac{d^2}{dh^2} (E_0/N). \quad (27)$$

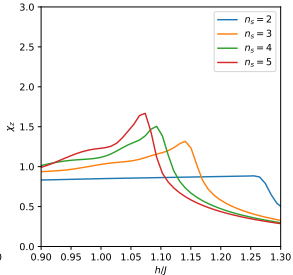
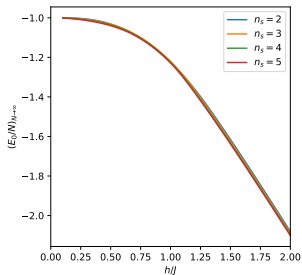
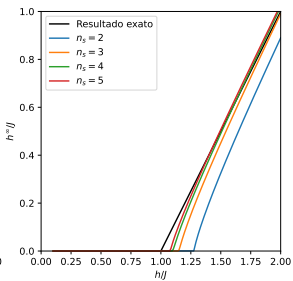
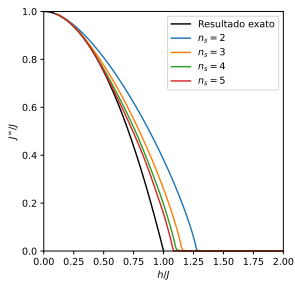
Método *Block Renormalisation Group*

NumPy/ SciPy



Método *Block Renormalisation Group*

mpmath



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.