Universidade Federal do Pampa

Teoria de Campo Médio Aplicada ao Modelo de Ising Quântico

Jonas Maziero

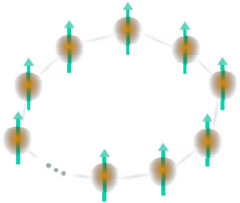
Bagé - RS, Novembro de 2012

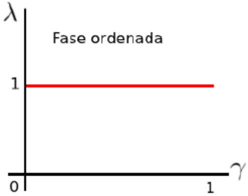
Modelo xy Quântico

Hamiltoniano (operador hermitiano em um espaço de estados $\mathcal{H}^{\otimes n}$, $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$)

$$\boldsymbol{H}_{xy} = -2^{-1} J \sum_{\langle i,j \rangle} \left((1+\gamma) \boldsymbol{\sigma}_i^x \boldsymbol{\sigma}_j^x + (1-\gamma) \boldsymbol{\sigma}_i^y \boldsymbol{\sigma}_j^y \right) - h \sum_i \boldsymbol{\sigma}_i^z,$$

Apresenta uma transição de fase quântica (de 2ª ordem) em $h_c/J = 1$ para $0 < \gamma \leq 1$. **Ising quântico** $\boldsymbol{H}_{iq} = \boldsymbol{H}_{xy}(\gamma = 1)$.





$\boldsymbol{\sigma}^x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$, $\boldsymbol{\sigma}^y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$, $\boldsymbol{\sigma}^z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ na base de $\boldsymbol{\sigma}^z$: $|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$, $|1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$

Por quê quântico? $[\boldsymbol{\sigma}_i^x, \boldsymbol{\sigma}_j^z] = -2i\boldsymbol{\sigma}_i^y \delta_{ij}$.

Lidando com as propriedades físicas de **um único spin** k, escrevemos

$$\boldsymbol{H}_{xy} = -2^{-1}J(1+\gamma)\boldsymbol{\sigma}_k^x \sum_{\langle k,j\rangle, k=\text{cte}} \boldsymbol{\sigma}_j^x - 2^{-1}J(1-\gamma)\boldsymbol{\sigma}_k^y \sum_{\langle k,j\rangle, k=\text{cte}} \boldsymbol{\sigma}_j^y - h\boldsymbol{\sigma}_k^z + \boldsymbol{H}_r.$$

$\boldsymbol{H}_r$ é a parte do Hamiltoniano que não comtêm termos de interação com o spin k.

Aproximação de **campo médio**

$$\boldsymbol{H}_{xy}^{cm} = -2^{-1}J(1+\gamma)\boldsymbol{\sigma}_k^x \sum_{\langle k,j\rangle, k=\text{cte}} \langle\boldsymbol{\sigma}_j^x\rangle - 2^{-1}J(1-\gamma)\boldsymbol{\sigma}_k^y \sum_{\langle k,j\rangle, k=\text{cte}} \langle\boldsymbol{\sigma}_j^y\rangle - h\boldsymbol{\sigma}_k^z + \boldsymbol{H}_r.$$

Significado físico de $\langle\boldsymbol{\sigma}_d\rangle$:

1. Preparamos um **ensemble** de sistemas de forma idêntica, medimos o valor do spin para cada elemento do ensemble e tomamos a média.
2. Em física estatística dizemos que a média de ensemble é igual à **média temporal**. Ou seja, se conseguirmos medir o valor de spin em cada instante de tempo e tomarmos a média destes valores, esta será idêntica à média sobre o ensemble.

Para um sistema **invariante por translação**, i.e.,

$$\langle \boldsymbol{\sigma}_i^d \rangle = \langle \boldsymbol{\sigma}_j^d \rangle := m_d \quad \forall i, j,$$

com $d = x, y, z$ e $z =$ nº de 1ºs vizinhos, temos

$$\begin{aligned} \boldsymbol{H}_{xy}^{cm} &= -2^{-1}J(1+\gamma)zm_x\boldsymbol{\sigma}_k^x - 2^{-1}J(1-\gamma)zm_y\boldsymbol{\sigma}_k^y - h\boldsymbol{\sigma}_k^z + \boldsymbol{H}_r \\ &= \boldsymbol{H}_k + \boldsymbol{H}_r. \end{aligned}$$

Como

$$[\boldsymbol{H}_k, \boldsymbol{H}_r] = [\boldsymbol{H}_k \otimes \mathbb{I}_r, \mathbb{I}_k \otimes \boldsymbol{H}_r] = 0,$$

o **operador densidade** (estado térmico) do spin k pode ser escrito como:

$$\boldsymbol{\rho}_k^{\mathrm{cm}} = Z^{-1} \exp(-\beta \boldsymbol{H}_k),$$

com $\beta = 1/kT$ e a **função de partição** dada por

$$Z = \mathrm{tr}(\exp(-\beta \boldsymbol{H}_k)).$$

Temos nesta aproximação que

$$m_d = \mathrm{tr}(\boldsymbol{\rho}_k^{\mathrm{cm}} \boldsymbol{\sigma}_k^d).$$

Para facilitar os cálculos vamos obter a decomposição espectral do Hamiltoniano.

Definindo os **coeficientes** das matrizes da Pauli que aparecem no Hamiltoniano $\boldsymbol{H}_k$ como

$$x := -2^{-1}J(1+\gamma)zm_x,\ y := -2^{1}J(1-\gamma)zm_y,\ z := -h$$

temos (na base de $\boldsymbol{\sigma}^z$)

$$\boldsymbol{H}_k = x\boldsymbol{\sigma}_k^x + y\boldsymbol{\sigma}_k^y + z\boldsymbol{\sigma}_k^z = \begin{bmatrix} z & x-iy \\ x+iy & -z \end{bmatrix}$$

Autovalores de $\boldsymbol{H}_k$:

$$\lambda_\pm = \pm\sqrt{x^2+y^2+z^2} = \pm r,$$

onde $r = ||\vec{r}||$ e $\vec{r} = (x,y,z)$. Note que $r = r(\gamma, J, h, z, m_x, m_y)$.
Autovetores ortonormais de $\boldsymbol{H}_k$:

$$\begin{aligned} |+r\rangle &= \sqrt{\frac{r+z}{2r}}\begin{bmatrix} 1 \\ \frac{x+iy}{r+z} \end{bmatrix} = \sqrt{\frac{r+z}{2r}}\left(|0\rangle + \frac{x+iy}{r+z}|1\rangle\right) \\ |-r\rangle &= \sqrt{\frac{r-z}{2r}}\begin{bmatrix} 1 \\ -\frac{x+iy}{r-z} \end{bmatrix} = \sqrt{\frac{r-z}{2r}}\left(|0\rangle - \frac{x+iy}{r-z}|1\rangle\right) \end{aligned}$$

com $|0\rangle, |1\rangle$ sendo, respectivamente, os autovetores de $\boldsymbol{\sigma}^z$ com autovalores $+1, -1$.

Decomposição espectral para o Hamiltoniano:

$$\boldsymbol{H}_k = +r|+r\rangle\langle +r| - r|-r\rangle\langle -r|$$

e

$$\exp(-\beta \boldsymbol{H}_k) = \exp(-\beta r)|+r\rangle\langle +r| + \exp(\beta r)|-r\rangle\langle -r|.$$

A **função de partição** pode ser escrita como

$$\begin{aligned} Z &= \exp(-\beta r) + \exp(\beta r) \\ &= 2\cosh(-\beta r). \end{aligned}$$

Estado térmico (estado de Gibbs) do spin k

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\rho}_k^{\text{cm}} &= \frac{\exp(-\beta r)}{2\cosh(-\beta r)}|+r\rangle\langle +r| + \frac{\exp(\beta r)}{2\cosh(-\beta r)}|-r\rangle\langle -r| \\ &= \text{pr}(+r)|+r\rangle\langle +r| + \text{pr}(-r)|-r\rangle\langle -r|. \end{aligned}$$

Acima usamos as **probabilidades** dos estados $|+r\rangle$ e $|-r\rangle$.

Usando o estado de Gibbs, vem que a **magnetização** do spin k na direção d é

$$\begin{aligned} m_d &= \mathrm{tr}(\boldsymbol{\sigma}_k^d \boldsymbol{\rho}_k^{\mathrm{cm}}) \\ &= \mathrm{pr}(+r)\mathrm{tr}(\sigma_k^d|+r\rangle\langle +r|) + \mathrm{pr}(-r)\mathrm{tr}(\sigma_k^d|-r\rangle\langle -r|) \\ &= \mathrm{pr}(+r)\langle +r|\sigma_k^d|+r\rangle + \mathrm{pr}(-r)\langle r-|\sigma_k^d|-r\rangle. \end{aligned}$$

Matrizes de Pauli na base $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ e suas ações nesta base:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}^x &= |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0| \Longrightarrow \boldsymbol{\sigma}^x|0\rangle = |1\rangle, \boldsymbol{\sigma}^x|1\rangle = |0\rangle \\ \boldsymbol{\sigma}^y &= -i|0\rangle\langle 1| + i|1\rangle\langle 0| \Longrightarrow \boldsymbol{\sigma}^y|0\rangle = i|1\rangle, \boldsymbol{\sigma}^y|1\rangle = -i|0\rangle \\ \boldsymbol{\sigma}^z &= |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1| \Longrightarrow \boldsymbol{\sigma}^z|0\rangle = |0\rangle, \boldsymbol{\sigma}^z|1\rangle = -|1\rangle \end{aligned}$$

Ação das matrizes de Pauli na base de autovetores de H_k:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}^x|+r\rangle &= \sqrt{\frac{r+z}{2r}}\left(|1\rangle + \frac{x+iy}{r+z}|0\rangle\right),\ \boldsymbol{\sigma}^x|-r\rangle = \sqrt{\frac{r-z}{2r}}\left(|1\rangle - \frac{x+iy}{r-z}|0\rangle\right) \\ \boldsymbol{\sigma}^y|+r\rangle &= \sqrt{\frac{r+z}{2r}}i\left(|1\rangle - \frac{x+iy}{r+z}|0\rangle\right),\ \boldsymbol{\sigma}^y|-r\rangle = \sqrt{\frac{r-z}{2r}}i\left(|1\rangle + \frac{x+iy}{r-z}|0\rangle\right) \\ \boldsymbol{\sigma}^z|+r\rangle &= \sqrt{\frac{r+z}{2r}}\left(|0\rangle - \frac{x+iy}{r+z}|1\rangle\right),\ \boldsymbol{\sigma}^z|-r\rangle = \sqrt{\frac{r-z}{2r}}\left(|0\rangle + \frac{x+iy}{r-z}|1\rangle\right) \end{aligned}$$

É fácil verificar que

$$\langle \pm r | \boldsymbol{\sigma}_k^d | \pm r \rangle = \pm \frac{d}{r} \text{ com } d = x, y, z.$$

Com isso vemos que

$$\begin{aligned} m_d &= \frac{d}{r}(\mathrm{pr}(+r) - \mathrm{pr}(-r)) \\ &= \frac{d}{r}\left(\frac{\exp(-\beta r)}{2\cosh(-\beta r)} - \frac{\exp(\beta r)}{2\cosh(-\beta r)}\right) \\ &= d\frac{\tanh(-\beta r)}{r}. \end{aligned}$$

Lembrando $x = -(J(1+\gamma)zm_x)/2,\ y = -(J(1-\gamma)zm_y)/2$, $z = -h$ e

$$r = \sqrt{\frac{J^2 z^2}{4}\left[(1+\gamma)^2 m_x^2 + (1-\gamma)^2 m_y^2\right] + h^2}.$$

Temos, portanto, que resolver um conjunto de equações transcendentais acopladas para calcular as magnetizações.

Sistema de Equações a ser Resolvido

Explicitamente, fixando J, γ, h, T, z teremos que resolver as seguintes equações

$$
\begin{aligned}
m_x &= m_x \frac{J(1+\gamma)z \tanh(r/kT)}{2r}; \\
m_y &= m_y \frac{J(1-\gamma)z \tanh(r/kT)}{2r}; \\
m_z &= h \frac{\tanh(r/kT)}{r}.
\end{aligned}
$$

É importante lembrar que

$$-1 \leq m_d \leq 1$$

e

$$r = r(m_x, m_y).$$

Ising Clássico ($h = 0$ e $\gamma = 1$)

$$\boldsymbol{H}_{ic} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \boldsymbol{\sigma}_i^x \boldsymbol{\sigma}_j^x .$$

Neste caso

$$m_y = m_z = 0$$

e

$$r = Jzm_x$$

e

$$\begin{aligned} m_x &= \tanh(Jzm_x/kT) \\ &\approx Jzm_x/kT_c \end{aligned}$$

que é a equação para o modelo de Ising clássico, que tem

$$\frac{kT_c}{J} = z.$$

$$\boldsymbol{H}_{iq} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \boldsymbol{\sigma}_i^x \boldsymbol{\sigma}_j^x - h \sum_j \boldsymbol{\sigma}_j^z$$

Neste caso $m_y = 0$,

$$r = \sqrt{J^2 z^2 m_x^2 + h^2} \tag{1}$$

e

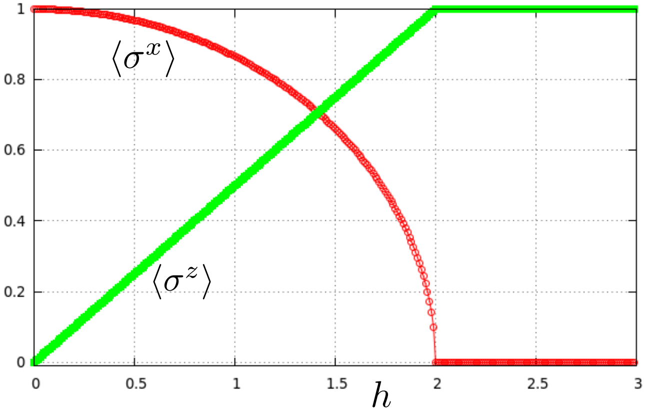
$$\begin{aligned} 0 &= m_x \left(1 - Jzr^{-1} \tanh(r/kT)\right) \\ m_z &= hr^{-1} \tanh(r/kT). \end{aligned} \tag{2}$$

Vamos resolver primeiro a equação transcendental para m_x, que é utilizada posteriormente para calcular m_z.
Uma solução da Eq. (2) é $m_x = 0$. Como o **menor autovalor** de $\boldsymbol{H}_k$ é $E_{min} = -r$ vemos, da Eq. (1), que qualquer solução de ($J = 1$)

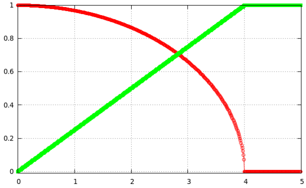
$$m_x \left(1 - z \frac{\tanh(r/kT)}{r}\right) = 0$$

com $|m_x| > 0$ deve ser escolhida em detrimento de $m_x = 0$.

Solução ($kT = 0$, $J = 1$, $\gamma = 1$, $z = 2$)



$z = 4$



$h_c = z?$

Expressão Geral para o Campo Crítico

Com $kT \to 0$ e $r = \sqrt{z^2 m_x^2 + h^2} > 0$ temos que $\tanh(r/kT) \to 1$. Então a equação

$$m_x \left(1 - z\frac{\tanh(r/kT)}{r}\right) = 0$$

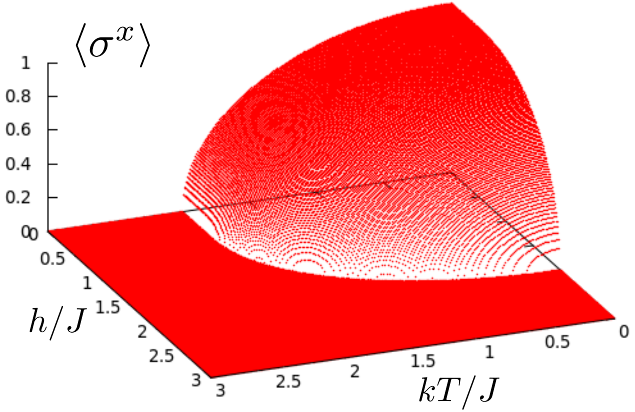
fica (faz $m_x \ll 1$ mas positivo e z não muito grande)

$$\begin{aligned} 1 - \frac{z}{r} &= 0 \\ 1 - \frac{z}{\sqrt{z^2 m_x^2 + h_c^2}} &= 0 \\ 1 - \frac{z}{h_c} &\approx 0 \end{aligned}$$

Ou seja,

$$\frac{h_c}{J} = z.$$

Solução do H_{iq} com $h > 0$, $T > 0$ e $z = 2$



Parece que o número de coordenação z dita a **escala de energia** para a transição de fase segundo a teoria de campo médio.

Eq. p/ a linha crítica

Temos

$$m_x \left(1 - z\frac{\tanh(h/kT)}{r}\right) = 0$$

Indo da fase ferromagnética ($m_x > 0$) para próximo da linha crítica de transição de fase ($m_x \ll 1$) temos

$$\begin{aligned} r &= \sqrt{z^2 m_x^2 + h_c^2} \\ &\approx h_c \end{aligned}$$

e (dividindo a 1ª Eq. por m_x)

$$1 - z\frac{\tanh(h_c/kT_c)}{h_c} = 0 \therefore h_c^2 + \frac{h_c^2}{\sinh^2(h_c/kT_c)} = z^2$$

Usando a expansão em série de Taylor de $\sinh x \approx x + x^3/3!$ temos

$$h_c^2 + (kT_c)^2 \approx z^2$$

a menos de correções da ordem de $(h_c/kT_c)^6/(3!)^2$.