

**UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI NAPOLI
“FEDERICO II”**



**Scuola Politecnica e delle Scienze di Base
Area Didattica di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali**

Dipartimento di Fisica “Ettore Pancini”

Laurea Magistrale in Fisica

**Monte Carlo Quantistico per modelli spin-boson
frustrati
Quantum Monte Carlo for frustrated spin-boson
models**

Relatore:
prof. Antonio De Candia

Candidato:
Francesco Giuseppe Capone
Matr. N94000689

Anno Accademico 2022/2023

Indice

Introduzione	2
1 Tecniche Monte Carlo	5
1.1 Campionamento semplice	5
1.2 Campionamento per importanza	6
1.3 Catene di Markov	7
1.4 Autocorrelazione e indipendenza delle misure	10
1.5 Algoritmi Monte Carlo per modello di Ising	11
1.5.1 Algoritmo di Metropolis	11
1.6 Algoritmi di clustering	13
1.6.1 Algoritmo di Swenden & Wang	14
1.6.2 Algoritmi di Kandel & Domany	16
2 Presentazione del modello	19
2.1 Transizione di fase quantistica	19
2.2 Approssimazione di Suzuki-Trotter	24
2.3 Transizioni di fase per sistemi unidimensionali	28
2.4 Hamiltoniana Spin-boson con tunneling	29
3 Approccio al problema e analisi dati	40
3.1 Placchette frustrate	40
3.2 Misure e condizione di presa dati	48
3.3 Analisi dati	50
Conclusioni	60
Riferimenti bibliografici	62

Introduzione

Lo scopo di questo lavoro di tesi è quello di implementare degli algoritmi Monte Carlo che siano quanto più efficienti possibile per sistemi di spin di Ising frustrati, attraverso l'applicazione ad un modello caratterizzato da una Hamiltoniana in cui le interazioni ferromagnetiche ed antiferromagnetiche siano di intensità confrontabile e che presenta transizione di fase paramagnete-ferromagnete.

Si è scelto di applicare queste tecniche ad un modello formato da una coppia di spin in campo trasverso, interagenti fra loro e con un gas di bosoni. L'approssimazione di Suzuki-Trotter permette di mappare il sistema originale in una equivalente classica doppia catena di spin unidimensionale, dove la dimensione aggiuntiva è rappresentata dai passi del tempo immaginario definito nell'ambito dell'approssimazione stessa.

In questo mapping classico, l'interazione antiferromagnetica iniziale viene distribuita tra le coppie di spin a tempo immaginario fissato (interazione istantanea), mentre l'interazione con i fononi e con il campo trasverso è equivalente ad una interazione ferromagnetica ritardata, cioè tra spin a tempo immaginario distinto lungo la doppia catena, di cui la seconda a soli primi vicini. Nel caso di bagno ohmico, l'interazione ferromagnetica a lungo range, decadendo come l'inverso del quadrato della distanza, rende possibile, al variare dei parametri dell'hamiltoniana, una transizione di fase paramagnete-ferromagnete di tipo Kosterlitz-Thouless[BUL][WIN][L1][L2][DF].

La competizione tra interazione ferromagnetica ed antiferromagnetica genera frustrazione nel mapping classico, dunque in questo lavoro si è applicato un approccio più generale di quello di Swendsen & Wang, ispirato all'approccio di Kandel & Domany per sistemi frustrati[CAT][CON][KD].

Nel primo capitolo è fatto un richiamo ai fondamenti dei processi stocastici e alle catene di Markov (1.3), su cui sono basati gli algoritmi Monte Carlo. In seguito (1.5.1), viene preso in analisi uno dei più semplici e diffusi algoritmi, implementato da Metropolis. Quest'ultimo non si mostra molto efficiente attorno al punto critico di una transizione di fase paramagnete-ferromagnete. Infatti, permettendo al più uno spin-flip a mossa Monte Carlo, rende molto lunghi i tempi necessari alla decorrelazione lungo la catena di Markov.

Come soluzione a questo problema sono stati proposti degli algoritmi di clustering (1.6): ad ogni step Monte Carlo sono creati con un certo criterio dei cluster inserendo degli open bond tra spin interagenti nella configurazione di partenza; per ogni cluster sono contemporaneamente ribaltati tutti gli spin ad esso appartenenti con probabilità $1/2$; cancellati tutti i bond, si ottiene la configurazione dello step Monte Carlo successivo.

Un primo algoritmo di clustering preso in analisi è quello proposto da Swendsen & Wang. Qui, vengono prese in considerazione coppie di spin interagenti e, per ciascuna coppia, è possibile inserire un bond con probabilità non nulla solo nel caso in cui l'interazione è soddisfatta¹. Questo procedimento, nel caso di assenza di frustrazione, tende a creare cluster tra spin fortemente dipendenti tra loro, permettendo, in una mossa Monte Carlo, di ribaltare isole di spin correlati e minimizzare i tempi di autocorrelazione. Tuttavia, in presenza di frustrazione, questo algoritmo non si mostra efficiente, dal momento che tendenzialmente sono creati cluster di dimensione maggiore rispetto a quelli desiderati, cioè si creano cluster che connettono anche spin tra loro non correlati.

In seguito, sono presentati gli algoritmi di Kandel & Domany, in cui il reticolo è suddiviso in placchette di spin con interazioni frustrate e che generalizzano il modello di Swendsen & Wang a più di una coppia interagente. La comodità di questa nuova classe di algoritmi è che, fissata la placchetta, non esiste un unico modo per determinare le probabilità con cui creare i bond (e dunque i cluster). Per questo motivo, essendoci più di una possibile soluzione al problema, si può implementare l'algoritmo in modo da creare cluster che tendono a contenere quanto più possibile solo spin tra loro correlati. In un eventuale transizione paramagnete-ferromagnete, si può decidere di fare ciò minimizzando la possibilità di inserire bond tra spin che soddisfano la reciproca interazione antiferromagnetica, dal momento che al punto critico si creano isole di spin paralleli, le cui dimensioni determinano la lunghezza di correlazione del sistema.

Nel secondo capitolo viene presentato il modello preso in analisi, noto come modello spin-boson. Questo tipo di modello e le sue generalizzazioni sono di un certo interesse fisico nello studio della decoerenza quantistica. L'hamiltoniana descrive l'interazione di una coppia di spin, tra loro in interazione antiferromagnetica, accoppiati con un gas di fononi e con un campo magnetico trasverso. È stato mostrato che presentata una transizione di fase quantistica di tipo Kosterlitz-Thouless.

Per tale motivo, nello stesso capitolo sono introdotti il concetto di transizione di fase quantistica (2.1) e le analogie con quella classica; in seguito (2.4), attraverso l'approssimazione di Suzuki-Trotter, si mapperà il problema in un equivalente classico, caratterizzato da una doppia catena di Ising di lunghezza N nel tempo immaginario e con interazioni frustrate. Si noti che per $\beta \approx N$, le medie statistiche del mapping classico sono differenti da quelle quantistiche del sistema originale; tuttavia l'intensità delle interazioni ferro-

¹Cioè se gli spin sono paralleli e l'interazione ferromagnetica; oppure se gli spin sono antiparalleli e l'interazione antiferromagnetica.

magnetiche e antiferromagnetiche sono comparabili ed è, dunque, possibile applicare il modello di Kandel & Domany.

Si noti che il caso in cui $N \gg \beta$ prevede che l'interazione ferromagnetica a primi vicini sia molto maggiore rispetto a quella antiferromagnetica, per cui andrebbero sviluppati nuovi algoritmi ad hoc, che esulano dallo scopo di questo studio.

Nel terzo capitolo sono presentate (3.1) le possibili suddivisioni in placchette del modello classico equivalente, l'analisi delle rispettive equazioni per le probabilità di inserire i bond e i risultati delle simulazioni (3.2) (3.3), in cui si è scelto di lavorare con i parametri $\beta = 1000$, $N = 1001$, $\Delta = 1$, in un range di valori variabili per α e J .

1 Tecniche Monte Carlo

Consideriamo un sistema caratterizzato da una hamiltoniana H_α . La funzione di partizione Z del sistema, a bagno termico a temperatura $T = \beta^{-1}$ è data da

$$Z = \sum_{\alpha} e^{-\beta H_\alpha} \quad (1)$$

dove α sono i possibili microstati del sistema. La probabilità di questi è data da

$$p_\alpha = \frac{e^{-\beta H_\alpha}}{Z} \quad (2)$$

A partire dalla funzione di partizione è possibile calcolare qualunque osservabile termodinamica associata alla grandezza fisica X , data dalla media pesata di X_α sulla distribuzione p_α :

$$\langle X \rangle_p = \frac{\sum_{\alpha} X_{\alpha} e^{-\beta H_{\alpha}}}{\sum_{\alpha} e^{-\beta H_{\alpha}}} \quad (3)$$

Questi valori medi possono essere calcolati direttamente a partire da questa ultima relazione, oppure differenziando la funzione di partizione Z rispetto alle variabili termodinamiche coniugate. In ogni caso, risulta centrale la conoscenza della funzione di partizione per ricavare informazioni sul sistema.

Non sempre siamo in grado di calcolare analiticamente l'espressione (1), per questo motivo è necessario trovare dei metodi numerici che ci permettano di calcolare i valori attesi (3) senza ricorrere alla funzione Z . Si noti che il calcolo numerico di Z non è di aiuto: le osservabili si otterrebbero attraverso la differenziazione di un risultato numerico e ciò sarebbe estremamente inaccurato, a meno che ciò non venisse fatto per un enorme range di parametri. Vediamo adesso un modo per stimare la (3) tramite campionamento semplice e campionamento per importanza, quest'ultimo alla base delle tecniche Monte Carlo.

1.1 Campionamento semplice

Il campionamento semplice prevede l'estrazione di un certo numero B di stati del sistema seguendo una distribuzione uniforme e su questi una stima del numeratore di (3) con una media aritmetica della quantità $X e^{-\beta H}$ e il denominatore con una media aritmetica di $e^{-\beta H}$. Cioè, utilizzare lo stimatore:

$$X_B = \frac{\frac{1}{B} \sum_{k=1}^B X_{\alpha_k} e^{-\beta H_{\alpha_k}}}{\frac{1}{B} \sum_{k=1}^B e^{-\beta H_{\alpha_k}}} \quad (4)$$

Supponendo che il sistema abbia A stati, la media $\langle \dots \rangle$ su questa distribuzione di probabilità uniforme risulta essere:

$$\begin{aligned}\langle X_B \rangle &= \frac{\frac{1}{B} \sum_{k=1}^B \sum_{\alpha_k=1}^A \frac{1}{A} X_{\alpha_k} e^{-\beta H_{\alpha_k}}}{\frac{1}{B} \sum_{k=1}^B \sum_{\alpha_k=1}^A \frac{1}{A} e^{-\beta H_{\alpha_k}}} = \\ &= \frac{\frac{1}{AB} \cdot BZ \langle X \rangle_p}{\frac{1}{AB} \cdot BZ} = \langle X \rangle_p\end{aligned}$$

Dove nella seconda eguaglianza, una volta portato $\frac{1}{A}$ fuori dalla somma su α_k si è utilizzato le definizioni (1) per il denominatore e (3) per il numeratore. Segue, dunque che (4) è un stimatore unbiased di (3). Questo approccio, tuttavia non è conveniente dal punto di vista computazionale. Il motivo è banale: possiamo aspettarci che a temperatura T l'energia del sistema sia localizzata attorno a un certo valor medio $\langle E \rangle_p$ con una certa varianza σ_E^2 . Si può facilmente capire che i contributi significativi alla somma (3) siano quelli relativi ai microstati nel range di energia centrato attorno all'energia media e di ampiezza la varianza di quest'ultima. Chiaramente, l'estrazione puramente casuale degli stati su cui eseguire la media pesa in egual misura sia i contributi realmente significativi per la somma sia quelli poco significativi, aumentando enormemente la varianza di X_B . Ciò è dovuto, in particolar modo per T piccolo, alla presenza del termine $e^{-\beta H}$. Poiché l'errore dello stimatore è dato dal prodotto della varianza di X_B moltiplicato per $B^{-1/2}$, la convergenza a 0 delle fluttuazioni è garantita, ma il numero di stati B da scegliere affinché si abbia un errore soddisfacente per basse temperature può essere estremamente grande.

1.2 Campionamento per importanza

Il campionamento per importanza prevede l'estrazione di un certo numero B di stati del sistema seguendo una distribuzione di probabilità tale da minimizzare la varianza dello stimatore. Si introduce, quindi una distribuzione di probabilità $\rho_\alpha \geq 0$ che sia normalizzata ($\sum_\alpha \rho_\alpha = 1$). A questo punto, si introduce una grandezza ξ che soddisfi la relazione: $\xi_\alpha \rho_\alpha = X_\alpha p_\alpha$. In questo modo segue immediatamente che:

$$\langle \xi \rangle_\rho = \sum_\alpha \xi_\alpha \rho_\alpha = \sum_\alpha X_\alpha p_\alpha = \langle X \rangle_p \quad (5)$$

Dunque si introduce lo stimatore

$$X_B^{(\rho)} = \frac{1}{B} \sum_{k=1}^B \xi_{\alpha_k} \quad (6)$$

Dove α_k sono estratti con probabilità ρ_{α_k} . Segue che, eseguendo la media dello stimatore sulla distribuzione ρ :

$$\langle X_B^{(\rho)} \rangle_\rho = \frac{1}{B} \sum_{k=1}^B \sum_{\alpha_k=1}^A \rho_{\alpha_k} \xi_{\alpha_k} = \frac{1}{B} \cdot B \langle \xi \rangle_\rho = \langle X \rangle_p \quad (7)$$

Essendo lo stimatore una media aritmetica, allora è evidente che la sua varianza sia $\text{VAR}(X_B^{(\rho)})_\rho = \frac{1}{B} \text{VAR}(\xi)_\rho$ dove

$$\text{VAR}(\xi)_\rho = \langle (\xi - \langle \xi \rangle_\rho)^2 \rangle_\rho = \sum_{\alpha} (\xi_{\alpha} - \langle X \rangle_p)^2 \rho_{\alpha} \quad (8)$$

Quindi è possibile minimizzare la varianza dello stimatore scegliendo ρ_{α} in modo tale $\xi_{\alpha} \simeq \langle X \rangle_p$. Ciò tuttavia è un problema. Infatti, dal momento in cui si sceglie ξ_{α} costante, se ci fossero cambiamenti di segno di X nel passaggio tra due stati α e α' , questi dovrebbero essere assorbiti in ξ e non in ρ , che è definito positivo. Quindi, la condizione di cui prima è difficilmente realizzabile. La strategia che si adotta è allora quella di porre $\xi_{\alpha} = X_{\alpha}$ e cercare una distribuzione ρ_{α} che imiti p_{α} . Ciò fa sì che possiamo valutare qualsiasi osservabile di nostro interesse estraendo gli stati una singola volta e alla stessa maniera. In secondo luogo, ρ sarà certamente definita positiva. Infine, dal momento che i grossi contributi alle variazioni di (3) provengono dal peso di Boltzmann, ciò permette di scegliere con molta probabilità gli stati con contributo più significativo e dunque ridurre la varianza.

L'obiettivo è, ora, quello di trovare un metodo che ci permetta di estrarre gli stati di un sistema con una probabilità desiderata. Per questo scopo ci viene incontro la teoria sui processi stocastici e il concetto di catena di Markov.

1.3 Catene di Markov

Dato uno spazio degli stati $\mathcal{S}$, un processo stocastico è una successione di variabili casuali $\alpha_t \in \mathcal{S}$ con $t \geq 0$ e discreto che assume il significato di variabile temporale. In un processo stocastico è definita per ogni valore del tempo t la distribuzione di probabilità $p(\alpha_t, \alpha_{t-1}, \dots, \alpha_0)$, che assume il seguente significato: la probabilità che sia estratta la variabile α_0 al tempo $t = 0$, la variabile α_1 al tempo $t = 1$ e così via. Se lo spazio $\mathcal{S}$ fosse lo spazio degli stati di un sistema fisico, un processo stocastico su esso definito descriverebbe la probabilità dell'evoluzione temporale del sistema attraverso i possibili stati dello stesso. Si può ovviamente generalizzare al caso di tempo continuo e di spazio continuo.

Una catena di Markov è un particolare processo stocastico in cui la probabilità di transizione dallo stato α_t allo stato α_{t+1} è indipendente dagli stati assunti dal sistema a tempi precedenti a t . Cioè la probabilità condizionata:

$$P(\alpha_{t+1}|\alpha_t, \alpha_{t-1}, \dots, \alpha_0) = P(\alpha_{t+1}|\alpha_t) \quad (9)$$

Inoltre, d'ora in poi si tratterà solo il caso in cui il processo di Markov è invariante per traslazione temporale, per cui $P(\alpha_{t+1}|\alpha_t) = P(\alpha_{t+1+\tau}|\alpha_{t+\tau})$. Ciò ci permette di dire che la probabilità di transizione in una tale catena di Markov dipende dal solo stato iniziale e finale ed è indipendente sia dalla storia del processo che dal tempo. D'ora in avanti, dati due stati $\mu, \nu \in \mathcal{S}$, si indicherà la probabilità di transizione dal primo al secondo come $P(\mu \rightarrow \nu)$. Per normalizzazione vale la proprietà

$$\sum_{\nu} P(\mu \rightarrow \nu) = 1 \quad (10)$$

Ora, assegnata la distribuzione di probabilità degli stati iniziali w_{ν}^0 , si può definire la distribuzione di probabilità $w_{\nu}(t)$ del generico stato ν al tempo t . Dal momento che le probabilità di transizione sono probabilità condizionate, allora vale che:

$$w_{\nu}(t+1) = \sum_{\mu} P(\mu \rightarrow \nu) w_{\mu}(t) \quad (11)$$

Che in forma matriciale diventa²

$$\mathbf{w}(t+1) = \mathbf{P} \cdot \mathbf{w}(t) \quad (12)$$

Diremo che la matrice di transizione è irriducibile se $(\mathbf{P}^n)_{\mu\nu} \neq 0$ per ogni coppia (μ, ν) e per qualche valore n ; periodica per lo stato ν se $(\mathbf{P}^n)_{\nu\nu}$ è non nulla se e solo se $n = kT_{\nu}$ con T_{ν} naturale e k intero. La matrice si dice aperiodica se la condizione di periodicità è negata per ogni ν . Si noti che nel caso in cui la matrice sia irriducibile, allora condizione sufficiente per l'aperiodicità è che $(\mathbf{P})_{\nu\nu} \neq 0$ per qualche ν . Infatti, è sempre possibile passare da μ a ν , persistere un tempo arbitrario ν e poi ritornare in μ con probabilità non nulla. In questo modo, il tempo di ritorno al generico stato μ non è multiplo di un periodo. Se una catena di Markov è irriducibile e aperiodica, allora la distribuzione $\mathbf{w}(t)$ converge per $t \rightarrow \infty$ ad un'unica distribuzione stazionaria $\mathbf{w}_{\infty}$, indipendente dalla condizione iniziale $\mathbf{w}^0$. Sotto queste due ipotesi, la matrice del processo di Markov è detta ergodica. Si noti che la

²Si è definito la matrice di transizione $\mathbf{P}$ con la convenzione $(\mathbf{P})_{\nu\mu} = P(\mu \rightarrow \nu)$

condizione di irriducibilità richiede che per ogni coppia di stati ci sia sempre una probabilità non nulla di passare dal primo al secondo (o viceversa) in un numero finito di passi. Osserviamo dunque che dall'equazione (12) nel limite di $t \rightarrow \infty$ segue che:

$$\mathbf{w}_\infty = \mathbf{P} \cdot \mathbf{w}_\infty \quad (13)$$

Si può sfruttare ciò per tentare di replicare una certa distribuzione di probabilità p_μ attraverso un processo di Markov.

Segue che qualsiasi distribuzione stazionaria del processo di Markov è un autovettore di autovalore 1 della matrice $\mathbf{P}$. Se il processo di Markov è ergodico, esiste un'unica distribuzione stazionaria e dunque un unico autovettore di autovalore 1 [BIN].

Assegniamo una catena di Markov ergodica e richiediamo che essa soddisfi l'equazione del bilancio dettagliato con una certa distribuzione di probabilità che vogliamo replicare

$$p_\mu P(\mu \rightarrow \nu) = p_\nu P(\nu \rightarrow \mu) \quad (14)$$

Allora, sommando l'equazione (14) sugli stati ν , tenuto conto della relazione di normalizzazione (10)

$$p_\mu = \sum_\nu p_\nu P(\nu \rightarrow \mu) \quad (15)$$

Quest'ultima, in forma matriciale diventa

$$\mathbf{p} = \mathbf{P} \cdot \mathbf{p} \quad (16)$$

Segue che $\mathbf{p}$ è autovettore di autovalore 1 di $\mathbf{P}$. Quest'ultima, essendo matrice ergodica, ammette un unico autovettore di questo genere, che quindi coincide con la distribuzione stazionaria.

$$\mathbf{w}_\infty = \mathbf{p} \quad (17)$$

Dal momento che la distribuzione di probabilità da riprodurre è del tipo (2), allora il nostro obiettivo è quello di generare un processo di Markov ergodico in cui il rapporto dei rate di transizione soddisfi la seguente equazione

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = e^{-\beta(H_\nu - H_\mu)} \quad (18)$$

In questo modo, per t sufficientemente grande avremo che la probabilità di estrarre lo stato μ al tempo t è data da

$$w_\mu(t) \approx \frac{e^{-\beta H_\mu}}{Z} \quad (19)$$

1.4 Autocorrelazione e indipendenza delle misure

Data una catena di Markov ergodica che soddisfi il bilancio dettagliato, la probabilità degli stati converge con un certo tempo di decadimento Monte Carlo τ_{eq} alla distribuzione desiderata. D'altra parte, si deve tener conto che una volta raggiunto l'equilibrio, la probabilità di estrarre uno stato non è indipendente dallo stato precedente. Questo perché, in genere, i più semplici algoritmi Monte Carlo sono costruiti in modo tale che gli stati accessibili μ_{t+1} da μ_t differiscano da quest'ultimo solo localmente (come si vedrà nel caso di Metropolis). Dunque, nel calcolo dell'estimatore (6), gli elementi da prendere in considerazione non sono da considerare ad ogni step Monte Carlo, ma dopo un tempo per cui gli stati si possano considerare indipendenti cioè, in un certo senso, sufficientemente diversi tra loro.

Un modo efficace per stimare questa quantità è quello di considerare la funzione di autocorrelazione:

$$C(t) = \frac{\langle X_{t_0} X_{t_0+t} \rangle - \langle X_{t_0} \rangle^2}{\langle X_{t_0}^2 \rangle - \langle X_{t_0} \rangle^2} \quad (20)$$

Questa è il rapporto tra la correlazione temporale tra gli stati al tempo t_0 e $t_0 + t$ e un fattore di normalizzazione. Infatti, si noti che $C(0) = 1$, quando gli stati sono completamente correlati e che per $t \rightarrow \infty$ allora $C(t) \rightarrow 0$ dal momento che, essendo t e $t_0 + t$ completamente decorrelati segue che $\langle X_{t_0} X_{t_0+t} \rangle \rightarrow \langle X_{t_0} \rangle \langle X_{t_0+t} \rangle = \langle X_{t_0} \rangle^2$.

Si può definire il tempo τ di autocorrelazione

$$\tau = \sum_{t=0}^{\infty} C(t) \quad (21)$$

Questa quantità assume il significato di una stima del tempo necessario per poter considerare due stati della catena come decorrelati. Ad esempio, in alcuni casi [NEW] l'andamento della funzione di autocorrelazione è della forma

$$C(t) \simeq e^{-\frac{t}{\tau}} \quad (22)$$

Allora, si osservi che in questo caso τ è il numero di step temporali necessari alla correlazione per decadere al valore di $1/e$.

In generale, al tempo di correlazione τ è associato un esponente critico z . Detta ξ la lunghezza di correlazione del sistema, si può mostrare che $\tau \propto \xi^z$. Quindi, l'obiettivo è quello di cercare un algoritmo che minimizzi l'esponente z e dunque il tempo di autocorrelazione.

1.5 Algoritmi Monte Carlo per modello di Ising

Supponiamo di considerare un sistema di N spin di Ising tra loro interagenti, la cui hamiltoniana è nella forma:

$$H = \sum_{i < j} J_{ij} s_i s_j \quad (23)$$

Dove J_{ij} è l'interazione tra gli spin i -mo e j -mo. In generale, data una qualunque coppia di spin, può essere di segno negativo (interazione ferromagnetica), di segno positivo (interazione antiferromagnetica) o nulla (assenza di interazione). D'ora in avanti, definiremo magnetizzazione del sistema la quantità

$$m = \left| \frac{\sum_i s_i}{N} \right| \quad (24)$$

In determinate condizioni, un tale sistema può essere caratterizzato da una transizione paramagnete-ferromagnete, per cui la magnetizzazione del sistema passa, al variare dei parametri dell'energia libera (come ad esempio la temperatura T) da un macrostato con $m = 0$ ad un macrostato in cui $m > 0$. È conseguenza naturale definire l'autocorrelazione in termini della magnetizzazione quando quest'ultima è il parametro d'ordine, quindi

$$C(t) = \frac{\langle m_0 m_t \rangle - \langle m_0 \rangle^2}{\langle m_0^2 \rangle - \langle m_0 \rangle^2} \quad (25)$$

1.5.1 Algoritmo di Metropolis

Per semplicità si consideri il caso in cui tutti gli spin primi vicini di un reticolo interagiscano tra loro con la stessa interazione³ ferromagnetica, cioè

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} J s_i s_j \quad (26)$$

dove $J > 0$. Il più semplice algoritmo è quello di Metropolis. A partire da uno stato μ si considera uno stato ν ottenuto flipando un unico spin scelto casualmente dalla configurazione μ . La probabilità di transizione da μ a ν viene presa come:

$$P(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} 1 & \text{se } H_\nu < H_\mu \\ e^{-\beta(H_\nu - H_\mu)} & \text{se } H_\nu > H_\mu \end{cases} \quad (27)$$

³Solo in seguito si considereranno algoritmi ottimali per l'hamiltoniana generale (23).

Si noti che la probabilità di transizione tra due stati che differiscono per più di uno spin flip è nulla. Tuttavia, la catena è ergodica. Infatti, c'è sempre una probabilità non nulla che la mossa Monte Carlo venga rigettata, per cui lo stato persista in μ . Allo stesso tempo, il singolo spin flip è sempre possibile, per cui, in un numero $n \geq k$ di mosse si ha sempre una probabilità non nulla di raggiungere uno stato che differisca dal primo per k spin flip. Inoltre vale l'equazione (14) del bilancio dettagliato: supponiamo senza perdere di generalità che $H_\nu < H_\mu$, allora

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{e^{-\beta(H_\nu - H_\mu)}}{1} = e^{-\beta(H_\nu - H_\mu)} \quad (28)$$

Definito un tempo Monte Carlo massimo T_{max} per l'esecuzione, operativamente, l'algoritmo può essere riassunto in queste righe:

1. Si fissa $t = 0$;
2. Si estrae casualmente lo stato iniziale del sistema α , inizializzando ciascuno degli N spin a valori 1 o -1 con eguale probabilità e si pone $\mu_t = \alpha$;
3. Si estrae casualmente uno spin, sia esso il k -mo, e si considera la configurazione $\hat{\mu}_t$ ottenuta dalla configurazione μ_t flipando il k -mo spin;
4. Si calcola $\Delta H = H_{\hat{\mu}_t} - H_{\mu_t} = -2s_k \sum_i J_{ki}s_i$ dove $\{s\}$ è la configurazione di spin dello stato μ_t ;
5. Si calcola $P = \min(1, e^{-\beta\Delta H})$;
6. Si estrae con probabilità uniforme un numero casuale $r \in [0, 1]$;
7. Se $r \leq P$, si definisce $\mu_{t+1} = \hat{\mu}_t$. Altrimenti $\mu_{t+1} = \mu_t$;
8. Se $t < T_{max}$ si ridefinisce $t \rightarrow t + 1$ e si torna al punto 3.

Nonostante la semplicità, l'algoritmo di Metropolis non è ottimale. Infatti, attorno alla transizione ferromagnete-paramagnete, si creano grandi "isole" di spin allineati fra loro e di entrambi i tipi, sia up che down. Ora, data una simile configurazione, per passare a uno stato indipendente da quello di partenza, bisognerebbe flipare buona parte degli spin di almeno una di queste isole. Ma non solo: queste isole sono stabili dal punto di vista energetico, per cui flipare un solo spin di queste non è favorito dall'algoritmo, nonostante, magari, la configurazione che si otterrebbe flipando tutta l'isola possa essere

energeticamente favorita. È chiaro allora che in questo caso, potendo realizzare uno spin flip per mossa, i tempi di autocorrelazione sono molto lunghi. Si può mostrare che l'esponente critico per questo algoritmo è $z = 2$.

Per questo motivo si vuole creare delle catene di Markov ergodiche e che soddisfino il bilancio dettagliato, ma che siano non locali. Quest'ultima caratteristica significa, nella pratica, la capacità di permettere spin flip di interi cluster di spin allineati alla transizione paramagnete-ferromagnete. Questa soluzione dovrebbe ridurre sensibilmente i tempi di autocorrelazione.

1.6 Algoritmi di clustering

L'idea alla base di questi algoritmi è quella di mappare il problema di Ising in un problema di percolazione ai legami. Cioè, in uno step Monte Carlo si passerà da una configurazione di Ising a una configurazione intermedia di cluster su reticolo e poi alla configurazione finale di Ising. Ogni configurazione finale è ottenuta flipping ogni cluster⁴ con probabilità $1/2$. Per le ragioni spiegate nel paragrafo precedente, l'idea è quella di creare cluster in cui due generici spin s_i e s_j ad esso appartenenti tendono ad essere tra loro dipendenti, cioè il prodotto $s_i s_j$ tende ad essere mediamente uguale ad uno (e quindi mediamente allineati) o uguale a meno uno (e quindi mediamente disallineati). In questo modo è possibile flippare in una sola mossa grandi isole di spin tra loro dipendenti e dunque ridurre al minimo i tempi di autocorrelazione. Quello che si chiede, cioè, è che

$$|\langle s_i s_j \rangle| = \langle \gamma_{ij} \rangle \quad (29)$$

Dove

$$\gamma_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{se } i \text{ e } j \text{ nello stesso cluster} \\ 0 & \text{se } i \text{ e } j \text{ in diverso cluster} \end{cases} \quad (30)$$

Si possono introdurre $\gamma_{ij}^{\parallel}$ e $\gamma_{ij}^{\perp}$ che sono rispettivamente uguali a 1 se i e j sono nello stesso cluster e gli spin paralleli (antiparalleli), 0 altrimenti. È banale osservare che

$$\langle \gamma_{ij} \rangle = \langle \gamma_{ij}^{\parallel} \rangle + \langle \gamma_{ij}^{\perp} \rangle \quad (31)$$

La condizione (29) non è sempre soddisfatta. In generale $|\langle s_i s_j \rangle| \leq \langle \gamma_{ij} \rangle$. Testare l'efficienza di un tale algoritmo può essere altresì fatto nel seguente

⁴Nel senso che se il cluster è flipato, allora ogni spin del cluster è flipato, viceversa se il cluster non è flipato, ogni spin del cluster rimarrà nella configurazione iniziale.

modo. Detto P il parametro d'ordine della percolazione, cioè la densità occupazionale del cluster di dimensioni maggiori, allora l'algoritmo Monte Carlo è tanto più efficiente quanto, al variare dei parametri termodinamici, le curve di P e della magnetizzazione m si sovrappongono. Nel limite in cui le curve coincidono l'equazione (29) è automaticamente soddisfatta.

1.6.1 Algoritmo di Swenden & Wang

Si consideri l'hamiltoniana con sole interazioni ferromagnetiche (26). L'algoritmo di Swendsen & Wang prevede che, data una certa configurazione iniziale μ , per ogni coppia (i, j) di spin interagenti sul reticolo, si inserisca con probabilità p_{ij} un bond tra i siti i e j nel seguente modo

$$p_{ij} = \begin{cases} 1 - e^{-2\beta J} & \text{se } s_i s_j = 1 \\ 0 & \text{se } s_i s_j = -1 \end{cases} \quad (32)$$

Cioè, si ha una probabilità non nulla di mettere un bond tra i e j quando l'interazione è soddisfatta⁵ ed è tanto più vicina ad 1 quanto è maggiore l'intensità J dell'interazione. Viceversa, se i e j non soddisfano l'interazione, allora la probabilità di mettere il bond è nulla. Una volta esaminate tutte le coppie di spin sul reticolo, si avrà una coppia di configurazioni: $(\mu, \bar{\mu})$, dove μ è la configurazione di spin iniziale, e $\bar{\mu}$ la configurazione di bond sul reticolo.⁶ La configurazione di bond $\bar{\mu}$ è caratterizzata dalla presenza di cluster, ossia di insiemi minimali di siti collegati fra loro da bond, con la convenzione che un sito isolato è un cluster di dimensione unitaria. Una volta ottenuta questa configurazione, si considera ciascun cluster del reticolo e gli spin appartenenti ad esso vengono tutti e contemporaneamente flippati con probabilità $1/2$. Si ottiene, così, una nuova coppia $(\nu, \bar{\mu})$ di spin e bond. Solo a questo punto i bond sono cancellati e si ottiene la configurazione finale di soli spin ν . Dunque, la mossa Monte Carlo ha permesso di passare dalla configurazione μ a alla configurazione ν passando attraverso la configurazione di bond e cluster $\bar{\mu}$.

Si noti che la catena di Markov associata a questo algoritmo è certamente ergodica⁷. Infatti, dal momento che è sempre non nulla la probabilità di non mettere un bond, si ha sempre una probabilità non nulla di passare per la configurazione $\bar{\mu}_0$ in cui ogni sito è isolato. Quindi, in linea di principio,

⁵In questo caso se gli spin sono paralleli, dato che l'interazione è ferromagnetica.

⁶Si usa la convenzione che le lettere greche barrate rappresentino le configurazioni di bond.

⁷È stato provato [G] che nel limite termodinamico l'algoritmo non è ergodico, per cui è buona norma concatenarlo ad un algoritmo Metropolis

in una singola mossa si potrebbero flippare tutti gli spin e quindi raggiungere qualunque altra configurazione possibile, così come rimanere in quella originale.

Vale l'equazione del bilancio dettagliato (14). Infatti, consideriamo le configurazioni α e α' . Se è possibile il passaggio $\alpha \rightarrow \alpha'$ attraverso $\bar{\epsilon}$, allora è possibile anche $\alpha' \rightarrow \alpha$ attraverso la stessa $\bar{\epsilon}$. Ora, si noti che affinché valga l'equazione (14) allora si deve avere che

$$\sum_{\bar{\epsilon}} p(\bar{\epsilon}|\alpha) p(\alpha'|\bar{\epsilon}) e^{-\beta H_\alpha} = \sum_{\bar{\epsilon}} p(\bar{\epsilon}|\alpha') p(\alpha|\bar{\epsilon}) e^{-\beta H_{\alpha'}} \quad (33)$$

È facile far vedere che (33) vale termine a termine. Consideriamo, infatti, una configurazione di bond $\bar{\epsilon}$ compatibile col passaggio da α a α' . Si capisce immediatamente che per passare dall'una all'altra e viceversa attraverso $\bar{\epsilon}$ è necessario lo stesso numero di cluster flip. Poiché la probabilità di ogni cluster flip è uguale, segue che $p(\alpha'|\bar{\epsilon}) = p(\alpha|\bar{\epsilon}) \equiv p = 2^{-N_c^\epsilon}$, dove N_c^ϵ è il numero di cluster della configurazione ϵ . Ora, la probabilità di passare alla configurazione $\bar{\epsilon}$ partendo da α è data dal prodotto delle probabilità complementari a (32) di non mettere il bond per ogni coppia (i, j)

$$p(\bar{\epsilon}|\alpha) = \exp(-2\beta J \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{s_i s_j})$$

Da ciò segue che

$$\frac{p(\bar{\epsilon}|\alpha) p(\alpha'|\bar{\epsilon})}{p(\bar{\epsilon}|\alpha') p(\alpha|\bar{\epsilon})} = \exp \left[-2\beta J \sum_{\langle ij \rangle} (\delta_{s_i s_j} - \delta_{s'_i s'_j}) \right]$$

Allo stesso tempo si ha che

$$\begin{aligned} e^{-\beta \Delta H} &= e^{-\beta(H_{\alpha'} - H_\alpha)} = \exp \left[\beta J \sum_{\langle ij \rangle} (s'_i s'_j - s_i s_j) \right] = \\ &= \exp \left[\beta J \sum_{\langle ij \rangle} (\delta_{s'_i s'_j} + (\delta_{s'_i s'_j} - 1) - \delta_{s_i s_j} - (\delta_{s_i s_j} - 1)) \right] = \\ &= \exp \left[-2\beta J \sum_{\langle ij \rangle} (\delta_{s_i s_j} - \delta_{s'_i s'_j}) \right] \end{aligned}$$

Dunque, è valida l'equazione (33).

In generale, l'algoritmo di Swendsen & Wang può essere generalizzato al caso di hamiltoniana (23), ponendo

$$p_{ij} = \begin{cases} 1 - e^{-2\beta |J_{ij}|} & \text{se } J_{ij} s_i s_j < 0 \\ 0 & \text{se } J_{ij} s_i s_j > 0 \end{cases} \quad (34)$$

In generale, ciò significa che la probabilità di mettere un bond tra due siti può non essere la stessa e varia a seconda dell'intensità dell'interazione. Inoltre, il bond ha una probabilità non nulla di essere aggiunto nel caso in cui l'interazione è soddisfatta, cioè se l'energia $E_{ij} = J_{ij}s_i s_j$ è negativa. Ciò significa che nel caso di accoppiamento antiferromagnetico $J_{ij} > 0$ tra due spin s_i e s_j , si ha una probabilità non nulla di aggiungere il bond solo se gli spin sono antiparalleli.

Si noti che in presenza di sole interazioni ferromagnetiche $J_{ij} < 0 \forall (i, j)$, allora

$$\langle s_i s_j \rangle = \langle \gamma_{ij}^{\parallel} \rangle \quad (35)$$

Mentre in presenza di sole interazioni antiferromagnetiche $J_{ij} > 0 \forall (i, j)$

$$\langle s_i s_j \rangle = - \langle \gamma_{ij}^{\parallel} \rangle \quad (36)$$

Nel caso generale, segue che

$$\langle s_i s_j \rangle = \langle \gamma_{ij}^{\parallel} \rangle - \langle \gamma_{ij}^{\parallel} \rangle \quad (37)$$

E quindi per la disuguaglianza triangolare si ha che⁸

$$|\langle s_i s_j \rangle| \leq \langle \gamma_{ij}^{\parallel} \rangle = \langle \gamma_{ij}^{\parallel} \rangle + \langle \gamma_{ij}^{\parallel} \rangle \quad (38)$$

Si noti che, nel momento in cui vale la disuguaglianza (38), la transizione di percolazione avverrà certamente a temperature più alte rispetto alla transizione paramagnete-ferromagnete. Infatti, integrando (38) si ottiene che la suscettività (che diverge alla transizione paramagnete-ferromagnete) del reticolo di Ising è sempre minore della mean cluster size (che diverge alla soglia di percolazione). Bisogna, dunque, cercare degli algoritmi che generalizzino quello di Swendsen & Wang e che minimizzino la connettività media, in modo da rendere le curve di magnetizzazione e di densità coincidenti o al limite quanto più vicine possibili.

1.6.2 Algoritmi di Kandel & Domany

L'idea alla base di questi algoritmi è di suddividere il reticolo di Ising in placchette e di decomporre l'hamiltoniana (23) in una somma di hamiltoniane di Ising delle relative placchette. Cioè, detta q la generica placchetta

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} s_i s_j = \sum_q \sum_{\langle ij \rangle_q} J_{ij}^{(q)} s_i^{(q)} s_j^{(q)} = \sum_q H^{(q)} \quad (39)$$

⁸Queste relazioni sono provate completamente in [CON]

Ogni placchetta sarà formata da un certo numero k di spin⁹. Ora, per ciascuna placchetta sono possibili $2^k/2 = 2^{k-1}$ possibili configurazioni, dove si è tenuto conto della simmetria per inversione dello spin. Si introdurrà, adesso, il concetto di grafo per la placchetta. Un grafo G è un insieme di bond b_{ij} tra gli spin della placchetta considerata. Diremo che il bond tra i siti i e j del grafo G è presente (o aperto) se $b_{ij} = 1$, oppure assente (o chiuso) se $b_{ij} = 0$. Si noti che, data una placchetta, se in essa sono presenti l interazioni, è possibile inserire al più l bond. D'altra parte, dal momento che un bond può essere presente o meno in un grafo, esistono 2^l possibili grafi costruibili sulla placchetta. Si noti che in una placchetta in cui sono presenti interazioni all-to-all, allora il numero di interazioni è $l = k(k-1)/2$. In questo caso, il numero di grafi possibili è maggiore di quello delle configurazioni di spin. In realtà, ciò che è necessario affinché valga questa affermazione è che ci siano più di $k-1$ interazioni per placchetta, cosa che è sempre rispettata se la placchetta contiene almeno un loop. Un grafo G è detto compatibile con una configurazione S di spin della placchetta se i bond aperti del grafo corrispondono a interazioni soddisfatte, cioè

$$\forall b_{ij} \in G \mid b_{ij} = 1, J_{ij}^{(q)} s_i^{(q)} s_j^{(q)} < 0 \quad (40)$$

Si noti, dunque, che un bond può essere sia aperto che chiuso se l'interazione è soddisfatta, viceversa solo chiuso se l'interazione non è soddisfatta. Ora, si assegna un peso $W(G) \geq 0$ a ciascun grafo G . Detto $B(S) = \exp(-\beta H^{(q)}(S))$ il peso di Boltzmann relativo alla configurazione S , si impone che, per ogni configurazione S

$$\sum_G W(G) \delta_{G,S} = B(S) \quad (41)$$

Dove

$$\delta_{G,S} = \begin{cases} 1 & \text{se } G \text{ e } S \text{ sono compatibili} \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} \quad (42)$$

Si definiscono, ora, le quantità

$$P(G|S) = \frac{W(G) \delta_{G,S}}{B(S)} \quad (43)$$

Si noti che le quantità (43) possono essere interpretate come probabilità di passare per il grafo di bond G data la configurazione S . Infatti, poiché i pesi

⁹In linea di principio è lecito scegliere anche placchette con numeri di spin differenti $k(p)$, ma qui per semplicità si fissa k uguale per tutte le placchette. Ciò che conta è che sia soddisfatta l'equazione (39)

sono non negativi, si ha che $P(G|S) \geq 0$ e per l'equazione (41) si ha che $\sum_G P(G|S) = 1$. Si osservi che, in questa interpretazione, le probabilità di estrarre G data una configurazione S con essa incompatibile è nulla.

Una volta scelto come suddividere il sistema in placchette, l'algoritmo Monte Carlo prevede a ogni step di passare da una configurazione μ a una configurazione ν del sistema nel seguente modo: per ciascuna placchetta q formata dagli spin $s_{i_1}^{(q)}, s_{i_2}^{(q)}, \dots, s_{i_k}^{(q)}$ stabiliti dalla configurazione μ del sistema, si individua la configurazione di placchetta S nella quale si trova. Si estrae un grafo G , con probabilità $P(G|S)$. Dunque, sulla placchetta saranno messi i bond del grafo G . Una volta fatto ciò per ciascuna placchetta ci si troverà in una coppia di configurazioni $(\mu, \bar{\mu})$, dove $\bar{\mu}$ è la configurazione di bond e cluster su tutto il reticolo appena ottenuta. A partire da questo punto si procede come nel caso di Swendsen & Wang. Il sistema di equazioni lineari (41) ha sempre almeno una soluzione. Si noti che, nel caso di placchetta formata da $k = 2$ siti i e j , la stessa ha solo due grafi possibili: uno in cui l'unico bond è chiuso ($G = 0$), l'altro in cui l'unico bond è aperto ($G = 1$).

È facile vedere che i pesi sono $W_0 = e^{-\beta|J_{ij}|}$ e $W_1 = e^{\beta|J_{ij}|} - e^{-\beta|J_{ij}|}$, da cui si trova che le probabilità sono

$$\begin{aligned} P(0|J_{ij}s_i s_j < 0) &= e^{-2\beta|J_{ij}|} \\ P(1|J_{ij}s_i s_j < 0) &= 1 - e^{-2\beta|J_{ij}|} \\ P(0|J_{ij}s_i s_j > 0) &= 1 \\ P(1|J_{ij}s_i s_j > 0) &= 0 \end{aligned} \tag{44}$$

Cioè la soluzione di Swendsen & Wang.

Dunque, il sistema (41) ha sempre almeno una soluzione, che è data dai prodotti dei pesi di Swendsen & Wang per le coppie di interazioni. Tuttavia, al crescere della placchetta, il numero di configurazioni S cresce più lentamente rispetto al numero di grafi G . Per questo motivo, il sistema lineare ammette sempre più soluzioni al crescere della dimensione della placchetta. Dunque, scegliendo placchette sempre più grandi, si può provare a scegliere i pesi in modo tale che la connettività media $\langle \gamma_{ij} \rangle$ del reticolo sia ottimizzata per i nostri scopi.

Il discorso sull'ergodicità è analogo a quello già fatto per l'algoritmo di Swendsen & Wang, così come il bilancio dettagliato si dimostra in maniera simile [KD].

2 Presentazione del modello

In questo capitolo si vuole presentare il sistema su cui applicare le tecniche di clustering studiate nel capitolo precedente. Infatti, si vuole provare la loro efficienza nello studio dei parametri termodinamici e della transizione quantistica paramagnete-ferromagnete di un modello spin-boson a temperatura zero.

Nella prossima sezione (2.1) verrà chiarito il concetto di transizione di fase quantistica (QPT). In seguito (2.2) sarà introdotta l'approssimazione di Suzuki-Trotter che permette di mappare un problema quantistico in un equivalente classico. Infine (2.4), sarà presentata l'hamiltoniana spin-boson H da studiare e su essa applicata l'approssimazione di Suzuki-Trotter, in modo da poter ottenere l'hamiltoniana classica $\mathcal{H}$ equivalente su cui applicare le tecniche di clustering.

2.1 Transizione di fase quantistica

In questa sezione si vuole chiarire il concetto di transizione di fase quantistica (*quantum phase transition* o d'ora in poi QPT). Il primo passo necessario per la completa comprensione di questo fenomeno è quella di rimarcare differenze e analogie con una transizione di fase classica (*thermal phase transition* o d'ora in poi TPT). Si può intuitivamente pensare a una TPT come ad un passaggio tra stati di equilibrio appartenenti a due classi distinte di macrostati e dovuta alle fluttuazioni termiche del sistema. Matematicamente, ciò è descritto dall'esistenza di punti di non analiticità nella funzione energia libera rispetto ai parametri da cui essa dipende. Similmente, considerando un sistema quantistico in assenza di fluttuazioni termiche (i.e. $T = 0$), si può pensare a una QPT come ad un passaggio tra due differenti ground state dovuto interamente alle fluttuazioni quantistiche previste dal principio di indeterminazione. In maniera simile alla TPT ciò è descritto nell'esistenza di un punto di non analiticità nella funzione energia del ground state del sistema rispetto ai parametri da cui essa dipende (che sono contenuti nell'hamiltoniana). In analogia col caso classico, in cui la TPT è del primo o del secondo ordine se la discontinuità è presente nella derivata prima o seconda dell'energia libera, così la QPT è del primo o del secondo ordine se è presente rispettivamente discontinuità nella derivata prima o seconda dell'energia di ground state. Ancora, come nel caso classico è possibile una transizione di Kosterlitz-Thouless, di ordine infinito, così essa sarà possibile nel caso quantistico.

Transizione del primo e secondo ordine

Si consideri una hamiltoniana nella forma $H(g) = H_0 + H_1(g)$. Per semplicità $[H_0, H_1(g)] = 0 \forall g$. Da ciò, segue che, pur essendo gli autovalori $E_i(g)$ di $H(g)$ dipendenti dal parametro g , i relativi autostati sono indipendenti da tale valore. Potrebbe esistere un valore $g = g_c$ corrispondente ad un crossing tra ground state e primo stato eccitato: sia E_a l'energia di ground state del sistema e E_b l'energia del primo stato eccitato, per $g < g_c$. Potrebbe accadere che E_b decresca al crescere di g e che, al contrario, E_a cresca, fino ad eguagliarsi per $g = g_c$. Accade dunque che per $g > g_c$ l'energia di ground state sia E_b e quella di primo stato eccitato sia E_a . Ciò causa una transizione di fase quantistica:

- $g < g_c$: ground state $|\psi_a\rangle$, stato eccitato $|\psi_b\rangle$;
- $g > g_c$: ground state $|\psi_b\rangle$, stato eccitato $|\psi_a\rangle$.

Questo tipo di transizione è una transizione del primo ordine. Per le transizioni del secondo ordine, lo scenario è differente. Supponiamo di considerare un sistema con un numero finito di gradi di libertà. È possibile che esista un minimo per il gap tra il ground state E_a e il primo stato eccitato E_b per un certo valore critico $g = g_c$. A temperatura $T = 0$, si può definire Δ come il gap tra i due livelli di energia. In caso di spettro continuo, Δ è definito come la scala di energia per cui esiste un cambiamento significativo tra il comportamento a bassa ed alta frequenza. Può capitare, allora, che nel limite termodinamico (i.e. infinito numero di gradi di libertà) tale gap si annulli, creando una discontinuità nel ground state. In tale limite, si può mostrare che attorno a g_c si ha che $\Delta \sim J |g - g_c|^{z\nu}$. Dove J è un parametro che dipende dalla scala di energia dell'accoppiamento microscopico e $z\nu$ è un esponente critico indipendente dalle caratteristiche microscopiche del sistema (espressione dell'universalità). Si noti che il valore di J può essere differente per $g < g_c$ (J_-) e per $g > g_c$ (J_+). In maniera del tutto analoga alle transizioni classiche del secondo ordine, si mostra che la lunghezza di correlazione diverge al punto critico con andamento del tipo $\xi^{-1} \sim \Lambda |g - g_c|^\nu$. Da cui segue immediatamente la relazione $\Delta \sim \xi^{-z}$. In generale, possono esistere altri tipi di transizione di fase quantistica che prendono il nome da quelle classiche per analogia del comportamento al punto critico delle grandezze fisiche di riferimento. Ciò detto, queste transizioni avvengono al solo $T = 0$, che corrispondono a un modello idealizzato; d'altra parte, comprendere le proprietà della transizione quantistica e del relativo punto critico permette di descrivere le proprietà termodinamiche del sistema per temperature non nulle nell'intorno dello stesso.

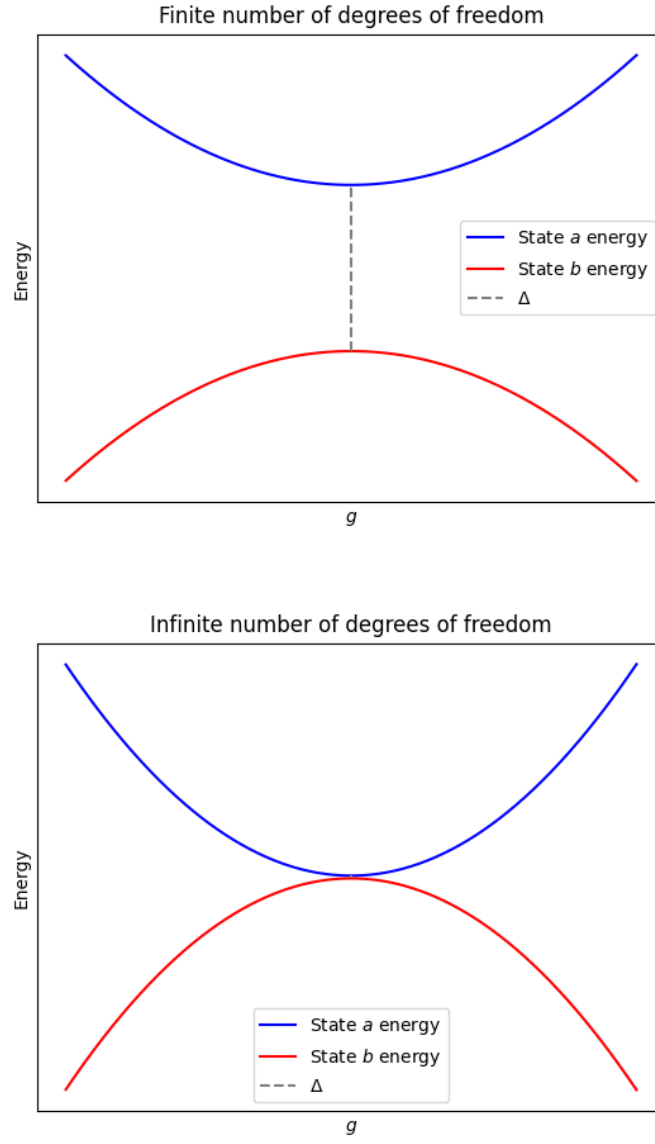


Figura 1: Discontinuità dell'energia del ground state nel parametro g nel limite termodinamico. Il gap $\Delta \rightarrow 0$ per $N \rightarrow \infty$.

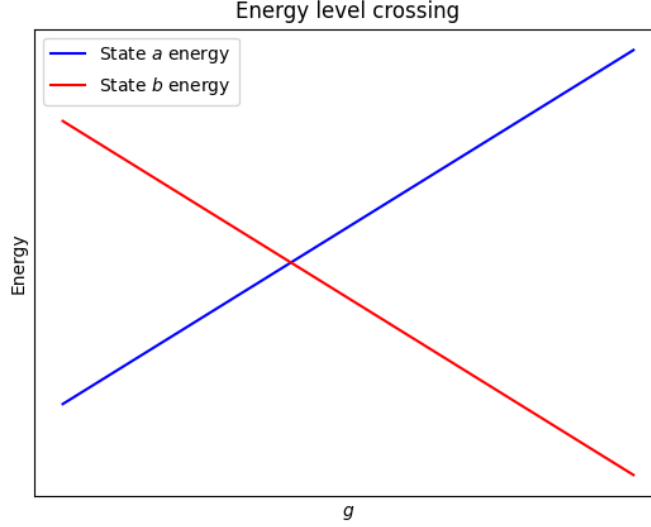


Figura 2: Discontinuità dell'energia di ground state nel parametro g dovuta al crossing dell'energia degli stati $|\psi_a\rangle$ e $|\psi_b\rangle$.

Temperature non nulle: diagramma di fase

Per semplicità supponiamo che l'hamiltoniana dipenda dal solo parametro g e che l'energia libera aggiunga la sola temperatura T come variabile. Allora il diagramma di fase del sistema è descritto dal piano $g-T$. Le regioni del piano non sono tutte equivalenti, infatti alcune di esse sono caratterizzate da una dinamica del sistema tipicamente classica, altre da una dinamica tipicamente quantistica. Infatti, se per $T = 0$ l'unica scala di energia rilevante è quella determinata da Δ , cioè dalle fluttuazioni quantistiche, per $T > 0$ esiste una scala di energia determinata dalle fluttuazioni classiche ed è dell'ordine di $k_B T$. È per questo possibile identificare due regioni nello spazio delle fasi:

- Regione classica: caratterizzata da $k_B T < \Delta$: le fluttuazioni classiche sono troppo piccole per indurre un passaggio tra livelli di energia dell'hamiltoniana H . Il tempo caratteristico necessario al sistema per approssimare l'equilibrio in seguito ad una perturbazione locale è dato da $\tau_{eq} \gg \frac{\hbar}{k_B T}$;
- Regione quantistica: caratterizzata da $k_B T > \Delta$: le fluttuazioni classiche riescono a determinare passaggi tra livelli energetici di H , per cui le fluttuazioni quantistiche sono poste sullo stesso piano di quelle

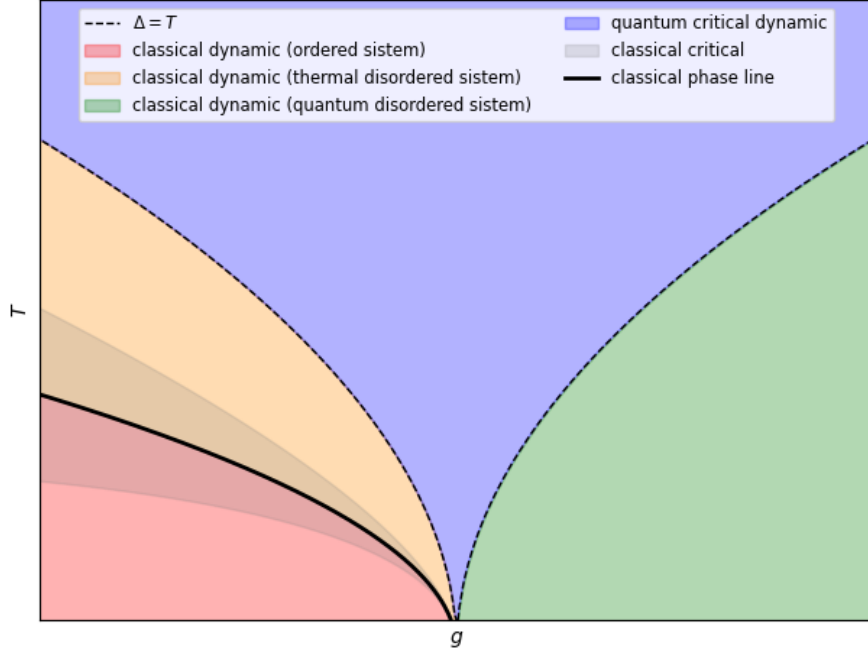


Figura 3: In figura, le regioni caratterizzate da una dinamica classica o quantistica. Si noti come la curva della TPT è tutta contenuta nella regione classica. In questo caso, g è un parametro che tende a disordinare il sistema. L'immagine potrebbe descrivere un modello di Ising 2D in campo trasverso, dove g è l'intensità di tale campo. Infatti, questo modello prevede sia una TPT che una QPT.

classiche. Il tempo necessario per approssimare l'equilibrio in seguito a una perturbazione locale è dato da $\tau_{eq} \sim \frac{\hbar}{k_B T}$ ed è indipendente dalla scala di energia delle interazioni microscopiche J .

Si noti che per perturbazione locale si intende una perturbazione che non coinvolga quantità conservate (i.e. carica o energia), e nel nostro caso è una perturbazione nei soli parametri g e T . I bordi delle due regioni sono delimitati dalla curva $T = \Delta$ (a meno della costante dimensionale k_B) che nell'intorno di $(g = g_c, T = 0)$ è nella forma: $T \sim |g - g_c|^{z\nu}$.

Considerando, ora, una transizione quantistica a $g = g_c$ esistono principalmente due casi:

- Analiticità dell'energia libera $\forall T > 0$ e $\forall g$;
- Non analiticità dell'energia libera per qualche T e g . Questi punti di non analiticità rappresentano transizioni di fase classica del secondo

ordine e la curva critica si raccorda col punto critico quantistico a $T = 0$ e $g = g_c$. In questo caso, la curva critica si trova tutta nella regione classica, tranne il punto critico quantistico che si trova sulla curva $\Delta = T$.

2.2 Approssimazione di Suzuki-Trotter

Nella ricerca di una transizione di fase quantistica è utile studiare il problema generale ad esso associato ($T > 0$ e $\forall g$) e in seguito effettuare il limite $\beta \rightarrow \infty$. Il primo passo è dunque quello di calcolare la funzione di partizione associata al sistema quantistico:

$$Z = \text{Tr}[e^{-\beta H}] \quad (45)$$

Nel caso sia nota la base di autovettori $|\phi_k\rangle$ relativa agli autovalori E_k dell'hamiltoniana, allora segue semplicemente che $Z = \sum_k e^{-\beta E_k}$. D'altra parte, spesso si ha a che fare con problemi in cui l'hamiltoniana è del tipo $H = H_1 + H_2$ con $[H_1, H_2] \neq 0$ e che si conosca la base di autovettori di H_1 (perché ad esempio l'hamiltoniana H_2 è un termine perturbativo per l'hamiltoniana H_1 che è associata a un problema noto). Si può decidere, quindi, di sviluppare il problema nella base di autovettori di H_1 e utilizzare l'approssimazione di Suzuki-Trotter, la quale mappa un problema quantistico d -dimensionale in un problema classico $(d+1)$ -dimensionale. Consideriamo una particella quantistica in moto $1d$ a temperatura T sottoposta a potenziale $U(x)$, caratterizzata dall'hamiltoniana:

$$H = U(x) + \frac{p^2}{2m}$$

Si noti immediatamente che $[x, p] = i\hbar$, per cui siamo nella situazione appena illustrata. Si può calcolare la funzione di partizione del sistema, sfruttando la base di autovettori di x :

$$Z = \sum_{|x\rangle} \langle x| e^{-\beta(U(x) + \frac{p^2}{2m})} |x\rangle$$

Definendo $\tau = \frac{\beta}{N}$, l'approssimazione di Suzuki-Trotter consiste nella seguente approssimazione:

$$\begin{aligned} e^{-\beta(H_1+H_2)} &= \left[e^{-\tau(H_1+H_2)} \right]^N = \left[e^{-\tau H_1} e^{-\tau H_2} \left(1 + o(\tau^2) \right) \right]^N \\ &\approx \left[e^{-\tau H_1} e^{-\tau H_2} \right]^N \end{aligned}$$

Si noti che l'espressione è esatta per $N \rightarrow \infty$, oppure se $[H_1, H_2] = 0$. Infatti, $\left(1 + o(\tau^2)\right) \equiv e^{-\tau[H_1, H_2]}$. In questo caso $H_1 = U(x)$ e $H_2 = \frac{p^2}{2m}$. Ridefinendo $|x\rangle \rightarrow |x_1\rangle$ ed introducendo $N-1$ operatori identità nella forma $\sum_{|x_i\rangle} |x_i\rangle \langle x_i|$ dove $i = 2, \dots, N$, allora la funzione di partizione:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{|x_1\rangle, |x_2\rangle, \dots, |x_N\rangle} \left[\langle x_1| e^{-\tau(U(x) + \frac{p^2}{2m})} |x_2\rangle \langle x_2| e^{-\tau(U(x) + \frac{p^2}{2m})} |x_3\rangle \times \right. \\ &\quad \times \dots \langle x_N| e^{-\tau(U(x) + \frac{p^2}{2m})} |x_1\rangle \left. \right] \approx \\ &\approx \sum_{|x_1\rangle, |x_2\rangle, \dots, |x_N\rangle} \left[e^{-\tau(U(x_1) + U(x_2) + U(x_N))} \langle x_1| e^{-\tau \frac{p^2}{2m}} |x_2\rangle \langle x_2| e^{-\tau \frac{p^2}{2m}} |x_3\rangle \times \right. \\ &\quad \times \dots \langle x_N| e^{-\tau \frac{p^2}{2m}} |x_1\rangle \left. \right] \end{aligned}$$

Ciascun termine $\langle x_i| e^{-\tau \frac{p^2}{2m}} |x_{i+1}\rangle$ può essere riscritto introducendo un operatore identità nella forma $\sum_{|p\rangle} |p\rangle \langle p|$, da cui:

$$\begin{aligned} \langle x_i| e^{-\tau \frac{p^2}{2m}} |x_{i+1}\rangle &= \sum_{|p\rangle} \langle x_i| p\rangle \langle p| e^{-\tau \frac{p^2}{2m}} |x_{i+1}\rangle = \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left\{ -\tau \frac{p^2}{2m} + \frac{ip}{\hbar}(x_i - x_{i+1}) \right\} dp \end{aligned}$$

Dove si è usato che $\langle x|p\rangle = \exp[\frac{ipx}{\hbar}]$ e $\sum_{|p\rangle} \rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} dp$. Ciascuno di questi termini può essere riscritto come integrale gaussiano.

$$\begin{aligned} \langle x_i| e^{-\tau \frac{p^2}{2m}} |x_{i+1}\rangle &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left\{ -\tau \frac{p^2}{2m} + \frac{ip}{\hbar}(x_i - x_{i+1}) \right\} dp = \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left\{ -\frac{\tau}{2m} \left[p^2 - \frac{2mi}{\tau\hbar} p(x_i - x_{i+1}) - \frac{m^2}{\tau^2\hbar^2} (x_i - x_{i+1})^2 \right] \right\} + \\ &\quad - \frac{m}{2\tau\hbar^2} (x_i - x_{i+1})^2 \left. \right\} dp = \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \exp\left\{ -\frac{m}{2\tau\hbar^2} (x_i - x_{i+1})^2 \right\} \times \\ &\quad \times \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left\{ -\frac{\tau}{2m} \left[p - \frac{m}{\tau\hbar} (x_i - x_{i+1}) \right]^2 \right\} dp = \\ &= \sqrt{\frac{m}{2\pi\tau\hbar^2}} \exp\left\{ -\frac{m}{2\tau\hbar^2} (x_i - x_{i+1})^2 \right\} \end{aligned}$$

Segue allora l'espressione finale per la funzione di partizione:

$$\begin{aligned} Z &\approx \left[\frac{m}{2\pi\tau\hbar^2} \right]^{\frac{N}{2}} \sum_{x_1, x_2, \dots, x_N} \exp \left\{ -\tau \sum_{i=1}^N \left[U(x_i) + \frac{m}{2} \left(\frac{x_i - x_{i+1}}{\tau\hbar} \right)^2 \right] \right\} = \\ &= \left[\frac{m}{2\pi\tau\hbar^2} \right]^{\frac{N}{2}} \sum_{x_1, x_2, \dots, x_N} \exp \left\{ -\tau \sum_{i=1}^N \left[U(x_i) + \frac{1}{2} m \bar{v}_i^2 \right] \right\} \end{aligned}$$

Dove si è definito $x_{N+1} \equiv x_1$ e $\bar{v}_i \equiv \frac{x_{i+1} - x_i}{\tau\hbar}$. Si noti che questa espressione può essere interpretata in due diversi modi. Il primo prevede di introdurre dei cammini di $N + 1$ passi discreti x_i con la condizione $x_1 \equiv x_{N+1}$, con τ che assume il ruolo di variabile temporale. Il sistema è caratterizzato da una nuova hamiltoniana nella forma $H \rightarrow U(x) + \frac{1}{2} m \bar{v}^2$. La funzione di partizione diventa così la somma sui cammini di Feynman con la condizione $it \rightarrow \hbar\tau$ equivalente a dire che il tempo reale viene mappato, a meno di costanti dimensionali, in un tempo immaginario τ . Si noti che questi cammini sono continui ma non differenziabili per $\tau \rightarrow 0$, perché, in questa condizione, $\frac{dx}{d\tau}$ diverge. Infatti, affinché il peso nell'esponenziale sia non trascurabile, si deve avere che $(x_{i+1} - x_i)^2 \sim \hbar^2\tau$, ovvero $x \propto \sqrt{\tau}$ e $\frac{dx}{d\tau} \propto \frac{1}{\sqrt{\tau}}$. La seconda interpretazione prevede invece di vedere Z come una funzione di partizione di un sistema classico di dimensione maggiore: si associa al sistema un nuovo valore più piccolo di β , cioè τ , corrispondente a una temperatura maggiore di quella originale ($T \rightarrow NT$) e si interpreta la quantità $\sum_{i=1}^N \left[U(x_i) + \frac{1}{2} \frac{m}{\hbar^2\tau^2} (x_{i+1} - x_i)^2 \right]$ come l'hamiltoniana classica del nuovo sistema a temperatura $1/\tau$. Questa è un'hamiltoniana di una catena di N particelle separate nella dimensione del tempo immaginario, con spaziatura τ , su assi paralleli unidimensionali, in interazione elastica a primi vicini $\left(\frac{1}{2} \frac{m}{\hbar^2\tau^2} (x_{i+1} - x_i)^2 \right)$. Il problema, da 0-d (singola particella), si è trasformato in un problema 1-d (catena di particelle). Il tutto deve essere pensato con condizioni al bordo periodiche, visto il vincolo $x_1 \equiv x_{N+1}$. Infine, si effettua la somma su tutte le possibili configurazioni $(x_1, x_2, \dots, x_N)$, come nel caso di un sistema classico. È interessante notare come venga introdotta una interazione lungo l'asse del tempo immaginario.

Si noti che nel limite classico ($\hbar \approx 0$) si ha che $x_i = x_1 \forall i$ da cui segue $Z \propto \sum_x e^{-\beta U(x)}$ come atteso. Dunque, è evidente che l'aumento di temperatura dovuto alle partizioni di β in intervalli di minore ampiezza τ è un modo di inglobare le fluttuazioni quantistiche all'interno delle fluttuazioni classiche di un nuovo sistema. Difatti, per un problema classico, la probabilità di saltare da uno stato di minimo ad uno di massimo del potenziale $U(x)$ è data da $e^{-\beta\Delta U}$. Nel caso quantistico, tale probabilità aumenta perché si riduce β :

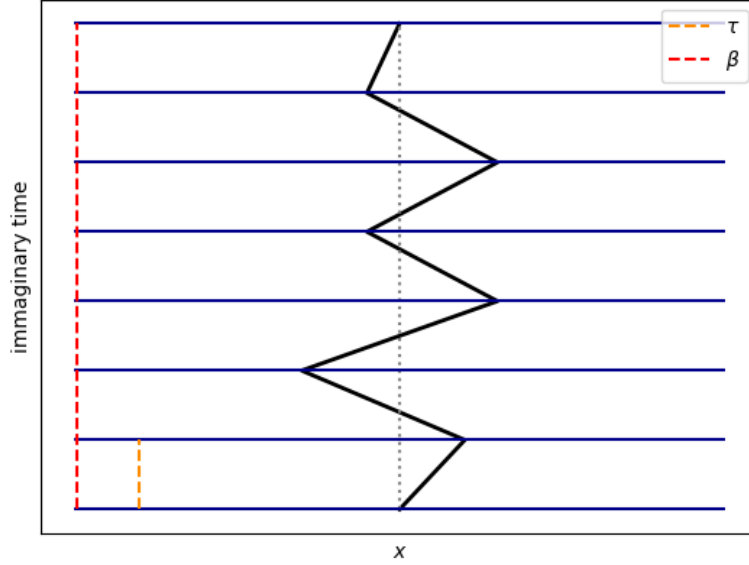


Figura 4: Rappresentazione di un possibile cammino nella rappresentazione di Suzuki-Trotter della particella nel tempo immaginario τ . Si noti che la posizione al tempo iniziale e finale coincide.

$e^{-\tau\Delta U}$. Ci si aspetta che tale probabilità debba aumentare: alla possibilità di salto dovuta agli effetti termici, si sovrappone quella di tunneling dovuta alla natura ondulatoria dei problemi quantomeccanici.

Una volta trovata la funzione di partizione, per studiare la transizione di fase quantistica bisogna considerare il limite $\beta \rightarrow \infty$. Questo rientra nella procedura di limite termodinamico, perché la catena diventa realmente infinita nell'asse del tempo immaginario solo se esso è soddisfatto, per cui ha senso cercare nuove transizioni di fase. Ricordiamo poi che l'approssimazione di Suzuki-Trotter è esatta per $\tau \rightarrow 0$. Si noti che la particella quantistica $0d$ in moto unidimensionale è mappata in una catena $1d$ infinita di particelle classiche con interazioni a corto range e dunque non presenta alcuna transizione di fase. D'altra parte, sistemi lineari quantistici che non presentano interazioni a lungo range sono mappati in problemi classici bidimensionali, con possibilità di transizione al solo $T = 0$. In generale tutti i casi di dimensioni superiori allo zero sono trattati con particolare attenzione: detta L la dimensione lineare del sistema, il limite termodinamico va preso nel senso:

$\beta \rightarrow \infty$ e $L \rightarrow \infty$. Si può mostrare che per motivi di scaling il giusto limite è preso se $\frac{L^z}{\beta} \rightarrow \text{cost.}$

2.3 Transizioni di fase per sistemi unidimensionali

Il sistema analizzato in questo lavoro, descritto in (2.4), è un modello adimensionale, in quanto formato da una sola coppia di spin. Nel paragrafo precedente si è visto come un sistema quantistico $0d$ possa essere mappato in un sistema classico $1d$ attraverso l'approssimazione di Suzuki-Trotter. Per questo motivo, ci aspettiamo che il modello da noi trattato sia mappato in una doppia catena di Ising, e quindi in un sistema unidimensionale.

In questo paragrafo si vuole dunque prendere in esame i comportamenti critici che caratterizzano la singola catena di N spin di Ising con interazioni ferromagnetiche a lungo range, di hamiltoniana

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \frac{s_i s_j}{|i - j|^\sigma} \quad (46)$$

Si noti che l'interazione decade con andamento $\frac{1}{|i-j|^\sigma}$, cioè con l'inverso della potenza σ della distanza lineare degli spin. Si noti che, nel limite termodinamico l'energia del modello scala con

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=1}^N \frac{1}{n^\sigma} \sim \lim_{N \rightarrow \infty} \int_1^N \frac{1}{x^\sigma} dx = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\sigma - 1} \left(1 - N^{1-\sigma} \right) \quad (47)$$

È necessario, allora, che $\sigma > 1$ affinché l'energia converga per $N \rightarrow \infty$.

Si può mostrare che per $\sigma > 2$, le interazioni sono equivalenti ad interazioni a corto range o a primi vicini e per tale motivo non è possibile transizione di fase e il sistema si comporta come paramagnete per ogni T .

Dunque, l'unico interesse è rivolto per i valori $1 < \sigma \leq 2$. In particolare, è stato provato che nel range $1 < \sigma < 2$ il modello esibisce una transizione di fase paramagnete-ferromagnete del secondo ordine ad un certo valore di $T = T_c$. In particolare, per $1 < \sigma \leq 3/2$ la transizione osservata è quella di campo medio, mentre per $3/2 < \sigma < 2$ gli esponenti critici dipendono dal valore di σ [L3].

Di particolare interesse è invece il caso in cui $\sigma = 2$. Ciò che accade è una transizione paramagnete-ferromagnete ad un certo valore critico di temperatura $T = T_c$, ma con una serie di peculiarità per il parametro d'ordine e per l'energia libera. È stato mostrato [A] che il valor medio del quadrato della magnetizzazione può essere approssimato alla forma del tipo

$$\langle m^2 \rangle \approx \frac{T}{J} \left\{ 1 + \left[\left(\frac{J}{T} - 1 \right)^2 - 2 \left(\frac{J}{T} (1 + C) \right) \right]^{1/2} \right\} \quad (48)$$

per valori di $\frac{J}{T} > (2 + C) + \sqrt{(2 + C)^2 - 1}$ e dove C è la costante di Eulero-Mascheroni;

$$\langle m^2 \rangle = 0 \quad (49)$$

per valori di $\frac{J}{T} < (2 + C) + \sqrt{(2 + C)^2 - 1}$.
Ciò individua la temperatura critica in

$$T_c = \frac{J}{(2 + C) + \sqrt{(2 + C)^2 - 1}} \quad (50)$$

Si noti che il valore del parametro d'ordine subisce un salto a $T = T_c$. D'altra parte, attorno al punto critico, nella regione ferromagnetica, l'andamento del parametro d'ordine è $\langle m^2 \rangle \propto |T - T_c|^{1/2}$ per cui si ha anche una divergenza nella derivata sinistra di quest'ultimo. D'altra parte, questo tipo di transizione non è ascrivibile alle transizioni del primo ordine. È provato infatti che il punto di non analiticità della funzione energia libera dà contributi nulli a tutte le funzioni di interesse termodinamico, le quali si mostrano di classe C^∞ [A]. Questa transizione a $\sigma = 2$ è nella stessa classe di universalità della transizione del modello di Ising $2d$ con spin planari e interazioni a corto range, noto anche come modello xy [K]. La transizione ad esso associata è stata oggetto di studio in numerosi lavori ed è nota come transizione di Kosterlitz-Thouless.

2.4 Hamiltoniana Spin-boson con tunneling

L'oggetto in esame in questo lavoro è un sistema formato da una coppia di spin $1/2$ in interazione antiferromagnetica, immersi in un campo magnetico ortogonale all'asse dell'interazione, il tutto a sua volta interagente con un gas di bosoni. Un modello in cui è presente interazione tra spin e bosoni è anche detto spin-boson. L'hamiltoniana associata a questo problema è

$$H = -\frac{\Delta}{2}(\sigma_1^x + \sigma_2^x) + \frac{J}{4}\sigma_1^z\sigma_2^z + (\sigma_1^z + \sigma_2^z) \sum_k \lambda_k \left(a_k^\dagger + a_k \right) + H_{HO} \quad (51)$$

Dove

$$H_{HO} = \sum_k \omega_k a_k^\dagger a_k \quad (52)$$

cioè l'hamiltoniana del gas di bosoni liberi.

Lo spazio di Hilbert su cui è definita questa Hamiltoniana è il prodotto tensore tra gli spazi di Hilbert bidimensionali $\mathbf{H}_1$ e $\mathbf{H}_2$ associati ai due spin

e lo spazio di Fock $\mathcal{F}$ associato al gas di bosoni. Gli operatori $\sigma_i^x, \sigma_i^y, \sigma_i^z$ sono operatori di Pauli sullo spazio $\mathbf{H}_i$ con $i = 1, 2$ e soddisfano l'algebra

$$\begin{aligned} [\sigma_i^l, \sigma_i^m] &= 2i\epsilon_{lmn}\sigma_i^n \\ \{\sigma_i^l, \sigma_i^m\} &= 2\delta_{lm}\mathbb{I}_i \end{aligned} \quad (53)$$

Dove l'indice in alto è intero e varia da 1 a 3 con la convenzione che $1 \rightarrow x$, $2 \rightarrow y$, $3 \rightarrow z$. Nel seguito, come base per lo spazio $\mathbf{H}_i$ si userà la base degli autovettori di σ_i^z , sia essa $\left[|1\rangle_i, |-1\rangle_i\right]$. Si ricordi che

$$\begin{aligned} \sigma_i^z |1\rangle_i &= |1\rangle_i \\ \sigma_i^z |-1\rangle_i &= -|-1\rangle_i \\ \sigma_i^x |1\rangle_i &= |-1\rangle_i \\ \sigma_i^x |-1\rangle_i &= |1\rangle_i \end{aligned}$$

Una base per il prodotto tensore $\mathbf{H}_1 \otimes \mathbf{H}_2$ è data dagli elementi

$$|s_1\rangle \otimes |s_2\rangle \in \left[|1\rangle_1 \otimes |1\rangle_2, |1\rangle_1 \otimes |-1\rangle_2, |-1\rangle_1 \otimes |1\rangle_2, |-1\rangle_1 \otimes |-1\rangle_2\right]$$

Per semplicità si ometterà d'ora in poi il prodotto tensore e si indicheranno gli elementi nella forma $|s_1, s_2\rangle$.

Gli operatori a_k e $a_k^\dagger$ sono definiti su $\mathcal{F}$ e sono rispettivamente gli operatori di creazione e distruzione dei bosoni con frequenza ω_k . Si ricordi che le regole di commutazione sono

$$\begin{aligned} [a_k, a_{k'}^\dagger] &= \delta_{kk'} \\ [a_k, a_{k'}] &= 0 \\ [a_k^\dagger, a_{k'}^\dagger] &= 0 \end{aligned}$$

Una base per lo spazio di Fock $\mathcal{F}$ è data da vettori della forma

$$|n_0, n_1, \dots, n_k, \dots\rangle = \bigotimes_k |n\rangle_k \text{ con } n \in \mathbb{N}_0 \ \forall k$$

dove il generico vettore $|n\rangle_k$ rappresenta lo stato il cui numero di bosoni di frequenza ω_k è n_k . Si ricordi che

$$\begin{aligned} a_k |n\rangle_k &= \sqrt{n} |n-1\rangle_k \\ a_k^\dagger |n\rangle_k &= \sqrt{n+1} |n+1\rangle_k \\ a_k^\dagger a_k |n\rangle_k &= n |n\rangle_k \end{aligned}$$

Dunque, come base per lo spazio complessivo si utilizzeranno vettori di base nella forma

$$|s_1, s_2; n_0, n_1, \dots\rangle \quad (54)$$

È importante ricordare per il seguito che gli operatori definiti su spazi diversi commutano. Dunque, gli operatori di Pauli associati ai due spazi distinti commutano fra loro, così come commutano con gli operatori di creazione e distruzione.

In seguito, si indicheranno con

$$H_J = \frac{J}{4} \sigma_1^z \sigma_2^z \quad (55)$$

il termine di interazione antiferomagnetica.

Con

$$H_\Delta = -\frac{\Delta}{2} (\sigma_1^x + \sigma_2^z) \quad (56)$$

il termine di tunneling, cioè l'interazione con il campo magnetico ortogonale alla direzione di interazione tra spin.

E infine

$$H_I = (\sigma_1^z + \sigma_2^z) \sum_k \lambda_k \left(a_k^\dagger + a_k \right) \quad (57)$$

il termine di interazione tra spin e bosoni.

Un accoppiamento con un gas di bosoni ben descrive l'interazione del sistema di spin con l'ambiente. Per questo motivo, l'analisi di questo sistema permette di studiare i fenomeni dissipativi e di decoerenza per tutti i sistemi la cui hamiltoniana di sistema isolato si mappa in $H_J + H_\Delta$.

Gli accoppiamenti λ_k sono determinati dalla funzione spettrale:

$$J(\omega) = \sum_k \lambda_k^2 \delta(\omega - \omega_k) = \frac{\alpha}{2} \omega_c^{1-s} \omega^s \Theta(\omega_c - \omega) \quad (58)$$

Il kernel di questa funzione è:

$$\chi(\tau) = \int_0^\infty d\omega J(\omega) \frac{\cosh[\omega(\frac{\beta}{2} - \tau)]}{\sinh(\frac{\beta\omega}{2})} \quad (59)$$

Si vuole considerare nello specifico il caso di bagno ohmico $s = 1$ e il caso in cui $\omega_c \rightarrow \infty$, per cui il kernel è:

$$\chi(\tau) = \frac{\alpha\pi^2}{2\beta^2} \sin^{-2} \left(\frac{\pi\tau}{\beta} \right) \quad (60)$$

Si può notare immediatamente che $[H_J, H_\Delta] \neq 0$, come conseguenza dell'algebra delle matrici di Pauli (53). Dunque, la presenza del termine di tunneling suggerisce l'applicazione dello sviluppo di Suzuki-Trotter. Da una coppia di spin interazione antiferromagnetica si mappera il tutto in un problema classico di una doppia catena di spin in interazione. Infatti, vedremo che l'effetto del termine spin-boson è quello di introdurre delle interazioni a lungo range su questa doppia catena. Dunque scrivendo la funzione di partizione sfruttando (45) nella base (54) si ha che

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{s_{10}} \sum_{s_{20}} \prod_k \sum_{n_{k0}=0}^{\infty} \langle s_{10}, s_{20}; n_{00}, n_{10}, \dots | e^{-\beta H} | s_{1N}, s_{2N}; n_{0N}, n_{1N}, \dots \rangle = \\ &= \sum_{\{s_{i0}\}} \sum_{\{b_0\}} \langle s_{10}, s_{20}; n_{00}, n_{10}, \dots | e^{-\beta H} | s_{1N}, s_{2N}; n_{0N}, n_{1N}, \dots \rangle \end{aligned}$$

Dove si pone la condizione $s_{i0} = s_{iN}$ e $n_{k0} = n_{kN}$ e in $\{b_0\}$ si considerano tutti i gradi di libertà fononici.

Ora, introducendo $\tau = \beta/N$, si ha che $e^{-\beta H} = (e^{-\tau H})^N$. Introducendo $N - 1$ operatori identità scritti nella stessa base tra gli N operatori $e^{-\tau H}$, si ottiene che:

$$Z = \sum_{\{s_{ij}\}} \sum_{\{b_j\}} \prod_{j=1}^N \langle s_{1j-1}, s_{2j-1}; n_{0j-1}, n_{1j-1}, \dots | e^{-\tau H} | s_{1j}, s_{2j}; n_{0j}, n_{1j}, \dots \rangle$$

Ora, commettendo un errore su Z dell'ordine di τ^2

$$\begin{aligned} Z &\approx \sum_{\{s_{ij}\}} \sum_{\{b_j\}} \prod_{j=1}^N \left[\langle s_{1j-1}, s_{2j-1}; n_{0j-1}, n_{1j-1}, \dots | e^{-\tau H_\Delta} \times \right. \\ &\quad \left. \times e^{-\tau(H_J + H_{HO} + H_I)} | s_{1j}, s_{2j}; n_{0j}, n_{1j}, \dots \rangle \right] \end{aligned} \quad (61)$$

Si vuole, quindi valutare il singolo termine del tipo

$$\langle s_{1j-1}, s_{2j-1}; n_{0j-1}, n_{1j-1}, \dots | e^{-\tau H_\Delta} e^{-\tau(H_J + H_{HO} + H_I)} | s_{1j}, s_{2j}; n_{0j}, n_{1j}, \dots \rangle \quad (62)$$

Introducendo un operatore di identità tra i due operatori esponenziali, la (62) diventa

$$\begin{aligned} &\sum_{\{s_{iu_i}\}} \sum_{b_{vj}} \left[\langle s_{1j-1}, s_{2j-1}; n_{0j-1}, n_{1j-1}, \dots | e^{-\tau H_\Delta} | s_{1u_1}, s_{2u_2}; n_{0v_0}, n_{1v_1}, \dots \rangle \times \right. \\ &\quad \left. \times \langle s_{1u_1}, s_{2u_2}; n_{0v_0}, n_{1v_1}, \dots | e^{-\tau(H_J + H_{HO} + H_I)} | s_{1j}, s_{2j}; n_{0j}, n_{1j}, \dots \rangle \right] \end{aligned} \quad (63)$$

Si noti che nel primo termine, l'operatore esponenziale è diagonale sullo spazio di Fock, quindi diagonale sulla proiezione della base su $\mathcal{F}$. Per questo, il primo termine è proporzionale a $\prod_k \delta_{n_{kv_k}, n_{k-1}}$. Allo stesso modo, il secondo operatore esponenziale contiene solo σ_i^z come operatori su $\mathbf{H}_i$, quindi anche esso è diagonale sulla proiezione della base su $\mathbf{H}_1 \otimes \mathbf{H}_2$. Per questo, il secondo fattore è proporzionale a $\prod_i \delta_{s_{iu_i}, s_{ij}}$. Dunque, (63) diventa

$$\begin{aligned} & \langle s_{1j-1}, s_{2j-1}; n_{0j-1}, n_{1j-1}, \dots | e^{-\tau H_\Delta} | s_{1j}, s_{2j}; n_{0j-1}, n_{1j-1}, \dots \rangle \times \\ & \times \langle s_{1j}, s_{2j}; n_{0j-1}, n_{1j-1}, \dots | e^{-\tau(H_J + H_{HO} + H_I)} | s_{1j}, s_{2j}; n_{0j}, n_{1j}, \dots \rangle \end{aligned} \quad (64)$$

Il primo termine di (64) si può calcolare facilmente tenendo conto che H_Δ è somma di due termini che agiscono solo e rispettivamente su $\mathbf{H}_1$ e $\mathbf{H}_2$, per cui si ha che $[e^{\tau \Delta \sigma_1^x}, e^{\tau \Delta \sigma_2^x}] = 0$ Cioè

$$\begin{aligned} & \langle s_{1j-1}, s_{2j-1}; n_{0j-1}, n_{1j-1}, \dots | e^{\frac{\tau \Delta}{2}(\sigma_1^x + \sigma_2^x)} | s_{1j}, s_{2j}; n_{0j-1}, n_{1j-1}, \dots \rangle = \\ & = \prod_{i=1,2} \langle s_{ij-1} | e^{\frac{\tau \Delta}{2} \sigma_i^x} | s_{ij} \rangle \end{aligned} \quad (65)$$

Esplicitando la serie di Taylor dell'operatore esponenziale e ricordando che $(\sigma^x)^{2n} = 1$ e $(\sigma^x)^{2n+1} = \sigma^x$ il singolo termine di (65) diventa

$$\begin{aligned} & \langle s_{ij-1} | \mathbb{I} + \frac{\tau \Delta}{2} \sigma_i^x + \frac{1}{2} \left(\frac{\tau \Delta}{2} \right)^2 \mathbb{I} + \frac{1}{3!} \left(\frac{\tau \Delta}{2} \right)^3 \sigma_i^x + \dots | s_{ij} \rangle = \\ & = \langle s_{ij-1} | \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{\tau \Delta}{2} \right)^2 + \dots \right] \mathbb{I} + \left[\frac{\tau \Delta}{2} + \frac{1}{3!} \left(\frac{\tau \Delta}{2} \right)^3 + \dots \right] \sigma_i^x | s_{ij} \rangle = \\ & = \cosh \left(\frac{\tau \Delta}{2} \right) \langle s_{ij-1} | s_{ij} \rangle + \sinh \left(\frac{\tau \Delta}{2} \right) \langle s_{ij-1} | \sigma_i^x | s_{ij} \rangle \end{aligned} \quad (66)$$

Dunque si ha che

$$\langle s_{ij-1} | e^{\frac{\tau \Delta}{2} \sigma_i^x} | s_{ij} \rangle = \begin{cases} \cosh \left(\frac{\tau \Delta}{2} \right) & \text{se } s_{ij-1} = s_{ij} \\ \sinh \left(\frac{\tau \Delta}{2} \right) & \text{se } s_{ij-1} \neq s_{ij} \end{cases} \quad (67)$$

Imponendo che $\langle s_{ij-1} | e^{\frac{\tau \Delta}{2} \sigma_i^x} | s_{ij} \rangle = A^{1/2} e^{K s_{ij-1} s_{ij}}$ da (67) si ottiene che

$$\begin{aligned} K &= -\frac{1}{2} \log \left[\tanh \left(\frac{\tau \Delta}{2} \right) \right] \\ A^{1/2} &= \left[\frac{\tanh \left(\frac{\tau \Delta}{2} \right)}{1 - \tanh \left(\frac{\tau \Delta}{2} \right)} \right]^{1/2} \end{aligned} \quad (68)$$

Dunque la (61) diventa

$$\begin{aligned}
Z &\approx A^N \sum_{\{s_{ij}\}} \exp \left\{ K \sum_{ij} s_{ij-1} s_{ij} \right\} \times \\
&\times \sum_{\{b_j\}} \prod_{j=1}^N \langle s_{1j}, s_{2j}; n_{0j-1}, n_{1j-1}, \dots | e^{-\tau(H_J + H_{HO} + H_I)} | s_{1j}, s_{2j}; n_{0j}, n_{1j}, \dots \rangle
\end{aligned} \tag{69}$$

Inoltre, $[H_J, H_{HO} + H_I] = 0$, allora $e^{-\tau(H_J + H_{HO} + H_I)} = e^{-\tau(H_{HO} + H_I)} e^{-\tau H_J}$. Quindi la precedente espressione si può riscrivere immediatamente come

$$\begin{aligned}
Z &\approx A^N \sum_{\{s_{ij}\}} \exp \left\{ K \sum_{ij} s_{ij-1} s_{ij} - \tau \frac{J}{4} \sum_j s_{1j} s_{2j} \right\} \times \\
&\times \sum_{\{b_j\}} \prod_{j=1}^N \langle s_{1j}, s_{2j}; n_{0j-1}, n_{1j-1}, \dots | e^{-\tau(H_{HO} + H_I)} | s_{1j}, s_{2j}; n_{0j}, n_{1j}, \dots \rangle
\end{aligned} \tag{70}$$

Ora, dal momento che gli operatori relativi agli oscillatori armonici di frequenza differente commutano fra loro, l'operatore esponenziale dell'equazione precedente si può scrivere come

$$\begin{aligned}
&\prod_k e^{-\tau \omega_k a_k^\dagger a_k - \tau(\sigma_1^z + \sigma_2^z) \lambda_k (a_k^\dagger + a_k)} \approx \prod_k e^{-\tau(\sigma_1^z + \sigma_2^z) \lambda_k (a_k^\dagger + a_k)} e^{-\tau \omega_k a_k^\dagger a_k} \approx \\
&\approx \prod_k \left(\mathbb{I} - \tau(\sigma_1^z + \sigma_2^z) \lambda_k (a_k^\dagger + a_k) \right) e^{-\tau \omega_k a_k^\dagger a_k} \equiv \prod_k O_k e^{-\tau \omega_k a_k^\dagger a_k}
\end{aligned} \tag{71}$$

Dove nelle due approssimazioni si sono trascurati i termini dello sviluppo dell'ordine di τ^2 o superiori, come già fatto. Allora, l'equazione (70) si riscrive come

$$\begin{aligned}
Z &\approx A^N \sum_{\{s_{ij}\}} \exp \left\{ K \sum_{ij} s_{ij-1} s_{ij} - \tau \frac{J}{4} \sum_j s_{1j} s_{2j} \right\} \times \\
&\times \prod_k \sum_{\{b_{jk}\}} \prod_{j=1}^N \langle s_{1j}, s_{2j}; n_{kj-1} | O_k | s_{1j}, s_{2j}; n_{kj} \rangle e^{-\tau n_{kj} \omega_k}
\end{aligned} \tag{72}$$

Dove b_{jk} sono le configurazioni dei bosoni dello step j e di frequenza ω_k . Consideriamo $\sum_{\{b_{jk}\}} \prod_{j=1}^N \langle s_{1j}, s_{2j}; n_{kj-1} | O_k | s_{1j}, s_{2j}; n_{kj} \rangle e^{-\tau n_{kj} \omega_k}$, cioè il singolo termine a frequenza ω_k fissata. Osserviamo che i termini di ordine τ possono agire se tra due stati consecutivi $j-1$ e j il numero di bosoni k è variato di

un'unità¹⁰. D'altra parte, il numero iniziale e finale di essi deve essere uguale, perché $n_{k0} = n_{kN}$. Ciò significa che, per ogni creazione allo step l_1 ci deve essere una distruzione allo step l_2 e viceversa. Ciò significa, che una volta fatto il prodotto su j e la somma su $\{b_{jk}\}$ si avrà una somma di potenza pari di τ . Per semplificare il calcolo allora si può scrivere che $\sum_{\{b_{jk}\}} = \sum_{\bar{n}_k=0}^{\infty} \sum_{\{\bar{b}_{jk}\}}$, dove con $\{\bar{b}_{jk}\}$ si intendono le configurazioni in cui $n_{k0} = n_{kN} = \bar{n}_k$. Fissato $\bar{n}_k$, l'unica configurazione che è compatibile con l'ordine 0 in τ è quella per cui $n_{jk} = \bar{n}_k \forall j$. Su queste configurazioni si ha che

$$\begin{aligned} &= \sum_{\bar{n}_k=0}^{\infty} \sum_{\{\bar{b}_{jk}\}} \prod_{j=1}^N \langle s_{1j}, s_{2j}; n_{kj-1} | O_k | s_{1j}, s_{2j}; n_{kj} \rangle e^{-\tau n_{kj} \omega_k} = \\ &= \sum_{\bar{n}_k=0}^{\infty} e^{-\beta \bar{n}_k \omega_k} \equiv Z_{0k} \end{aligned} \quad (73)$$

Si osservi che Z_{0k} è la funzione di partizione dei bosoni liberi. Le configurazioni che danno contributo di ordine τ^2 sono quelle per cui c'è una creazione (distruzione) per un certo istante l_1 e una distruzione (creazione) per un certo istante l_2 . Nel primo caso si ha che, fissato $\bar{n}_k$, $n_{kj} = \bar{n}_k$ per $j < l_1$, $n_{kj} = \bar{n}_k + 1$ per $l_1 \leq j < l_2$ e $n_{kj} = \bar{n}_k$ per $l_2 \leq j \leq N$. Per queste configurazioni abbiamo $N - 2$ azioni dell'identità contenuta in O_k , mentre c'è l'azione del termine a_k sul ket l_1 e una azione di $a_k^\dagger$ sul ket l_2 , cioè quindi si ha

$$\begin{aligned} &= \sum_{\bar{n}_k=0}^{\infty} \sum_{\{\bar{b}_{jk}\}} \prod_{j=1}^N \langle s_{1j}, s_{2j}; n_{kj-1} | O_k | s_{1j}, s_{2j}; n_{kj} \rangle e^{-\tau n_{kj} \omega_k} = \\ &= \sum_{\bar{n}_k=0}^{\infty} \sum_{l_1 < l_2} \left[\tau^2 \lambda_k^2 (\bar{n}_k + 1) (s_{1l_1} + s_{2l_1}) (s_{1l_2} + s_{2l_2}) \times \right. \\ &\quad \times (e^{-\tau \omega_k \bar{n}_k})^{(N-(l_2-l_1))} (e^{-\tau \omega_k (\bar{n}_k+1)})^{l_2-l_1} \Big] = \\ &= \sum_{\bar{n}_k=0}^{\infty} \sum_{l_1 < l_2} \left[\tau^2 \lambda_k^2 (\bar{n}_k + 1) (s_{1l_1} + s_{2l_1}) (s_{1l_2} + s_{2l_2}) (e^{-\tau \omega_k (\bar{n}_k+1)})^{N+1} (e^{\tau \omega_k})^N \times \right. \\ &\quad \times e^{-\tau \omega_k (l_2-l_1)} \Big] = \\ &= \sum_{\bar{n}_k=0}^{\infty} \sum_{l_1 < l_2} \tau^2 \lambda_k^2 \bar{n}_k (s_{1l_1} + s_{2l_1}) (s_{1l_2} + s_{2l_2}) e^{-\beta \omega_k \bar{n}_k} e^{\omega_k (\beta - \tau (l_2-l_1))} \end{aligned} \quad (74)$$

¹⁰Cioè si sta considerando un fenomeno di assorbimento-emissione lineare, in cui è possibile creare o distruggere un solo fonone alla volta per ciascuna frequenza ω_k .

Dove, la somma sulle configurazioni equivale a sommare sui possibili l_1 e l_2 , cioè i possibili istanti di creazione e distruzione. Similmente, il secondo caso compatibile con l'ordine τ^2 è quello per cui, fissato $\bar{n}_k, n_{kj} = \bar{n}_k$ per $j < l_1$, $n_{kj} = \bar{n}_k - 1$ per $l_1 \leq j < l_2$ e $n_{kj} = \bar{n}_k$ per $l_2 \leq j \leq N$. Per queste configurazioni abbiamo $N - 2$ azioni dell'identità contenuta in O_k , mentre c'è l'azione del termine $a_k^\dagger$ sul ket l_1 e una azione di a_k sul ket l_2 , quindi si ha

$$\begin{aligned}
&= \sum_{\bar{n}_k=0}^{\infty} \sum_{\{\bar{b}_{jk}\}} \prod_{j=1}^N \langle s_{1j}, s_{2j}; n_{kj-1} | O_k | s_{1j}, s_{2j}; n_{kj} \rangle e^{-\tau n_{kj} \omega_k} = \\
&= \sum_{\bar{n}_k=0} \sum_{l_1 < l_2} \left[\tau^2 \lambda_k^2 \bar{n}_k (s_{1l_1} + s_{2l_1}) (s_{1l_2} + s_{2l_2}) \times \right. \\
&\quad \times \left. (e^{-\tau \omega_k \bar{n}_k})^{(N-(l_2-l_1))} (e^{-\tau \omega_k (\bar{n}_k-1)})^{l_2-l_1} \right] = \\
&= \sum_{\bar{n}_k=0} \sum_{l_1 < l_2} \left[\tau^2 \lambda_k^2 \bar{n}_k (s_{1l_1} + s_{2l_1}) (s_{1l_2} + s_{2l_2}) (e^{-\tau \omega_k (\bar{n}_k)})^N \times \right. \\
&\quad \times \left. e^{\tau \omega_k (l_2-l_1)} \right] = \\
&= \sum_{\bar{n}_k=0} \sum_{l_1 < l_2} \tau^2 \lambda_k^2 \bar{n}_k (s_{1l_1} + s_{2l_1}) (s_{1l_2} + s_{2l_2}) e^{-\beta \omega_k \bar{n}_k} e^{\tau \omega_k (l_2-l_1)}
\end{aligned} \tag{75}$$

Sommando i contributi provenienti da (74) e (75) si ottiene che il contributo alla (72) di ordine τ^2 è

$$\begin{aligned}
&\sum_{l_1 < l_2} \tau^2 \lambda_k^2 (s_{1l_1} + s_{2l_1}) (s_{1l_2} + s_{2l_2}) \left[e^{\omega_k (\beta - \tau (l_2-l_1))} + e^{\tau \omega_k (l_2-l_1)} \right] \sum_{\bar{n}_k=0} \bar{n}_k e^{-\beta \omega_k \bar{n}_k} = \\
&= \tau^2 \lambda_k^2 Z_{0k} \sum_{l_1 < l_2} \frac{e^{\omega_k (\beta - \tau (l_2-l_1))} + e^{\tau \omega_k (l_2-l_1)}}{e^{\beta \omega_k} - 1} (s_{1l_1} + s_{2l_1}) (s_{1l_2} + s_{2l_2})
\end{aligned} \tag{76}$$

Dove nell'ultimo passaggio si è tenuto conto che per $x > 0$, $\sum_{n=0} n e^{-nx} = -\partial_x \sum_{n=0} e^{-nx}$ e che $\sum_{n=0} e^{-nx} = e^{-x}/(e^{-x} - 1)$. Ora, ripetendo lo stesso

ragionamento per i termini in τ^4 si ottiene esattamente

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2!} \tau^4 \lambda_k^4 Z_{0k} \sum_{l_1 < l_2} \frac{e^{\omega_k(\beta - \tau(l_2 - l_1))} + e^{\tau\omega_k(l_2 - l_1)}}{e^{\beta\omega_k} - 1} (s_{1l_1} + s_{2l_1})(s_{1l_2} + s_{2l_2}) \times \\
& \times \sum_{l_3 < l_4} \frac{e^{\omega_k(\beta - \tau(l_3 - l_4))} + e^{\tau\omega_k(l_3 - l_4)}}{e^{\beta\omega_k} - 1} (s_{1l_3} + s_{2l_3})(s_{1l_4} + s_{2l_4}) = \\
& = \frac{1}{2!} \left[\tau^2 \lambda_k^2 Z_{0k} \sum_{l_1 < l_2} \frac{e^{\omega_k(\beta - \tau(l_2 - l_1))} + e^{\tau\omega_k(l_2 - l_1)}}{e^{\beta\omega_k} - 1} (s_{1l_1} + s_{2l_1})(s_{1l_2} + s_{2l_2}) \right]^2 Z_{0k}
\end{aligned} \tag{77}$$

Dove il termine $\frac{1}{2!}$ è stato aggiunto perché le configurazioni non distinguono lo scambio tra l_1 e l_3 e tra l_2 e l_4 . Così via a tutti gli ordini. Si osservi, cioè che sommando su tutte le configurazioni $\{b_{jk}\}$ si ottiene uno sviluppo esponenziale della forma

$$Z_{0k} \exp \left\{ \tau^2 \lambda_k^2 \sum_{l_1 < l_2} \frac{e^{\omega_k(\beta - \tau(l_2 - l_1))} + e^{\tau\omega_k(l_2 - l_1)}}{e^{\beta\omega_k} - 1} (s_{1l_1} + s_{2l_1})(s_{1l_2} + s_{2l_2}) \right\} \tag{78}$$

Sostituendo quest'ultima in (72) e facendo il prodotto su tutte le possibili frequenze

$$\begin{aligned}
Z & \approx \sum_{\{s_{ij}\}} \exp \left\{ K \sum_{ij} s_{ij-1} s_{ij} - \tau \frac{J}{4} \sum_j s_{1j} s_{2j} + N \log(A) + \log(Z_0) + \right. \\
& \left. + \tau^2 \sum_{j < j'} G(j' - j) (s_{1j} + s_{2j})(s_{1j'} + s_{2j'}) \right\} \equiv \sum_{\{s_{ij}\}} e^{-\mathcal{H}'}
\end{aligned} \tag{79}$$

Dove $G(j' - j) = \sum_k \lambda_k^2 \frac{e^{\omega_k(\beta - \tau(j' - j))} + e^{\tau\omega_k(j' - j)}}{e^{\beta\omega_k} - 1}$ e $Z_0 = \prod_k Z_{0k}$. Dunque si è trasformato il sistema quantistico di due spin in un equivalente classico di una doppia catena di spin con condizioni periodiche al bordo nell'indice j e caratterizzata da hamiltoniana $\mathcal{H}'/\beta$. Si noti, tuttavia, che è più comodo considerare l'hamiltoniana $\mathcal{H} = \mathcal{H}' + N \log(A) + \log(Z_0)$. Infatti, queste due hamiltoniane differiscono per dei termini indipendenti dalla configurazione $\{s_{ij}\}$, per cui i contributi fisici alla funzione di partizione sono gli stessi. Segue che

$$Z \approx \sum_{\{s_{ij}\}} e^{-\mathcal{H}} \tag{80}$$

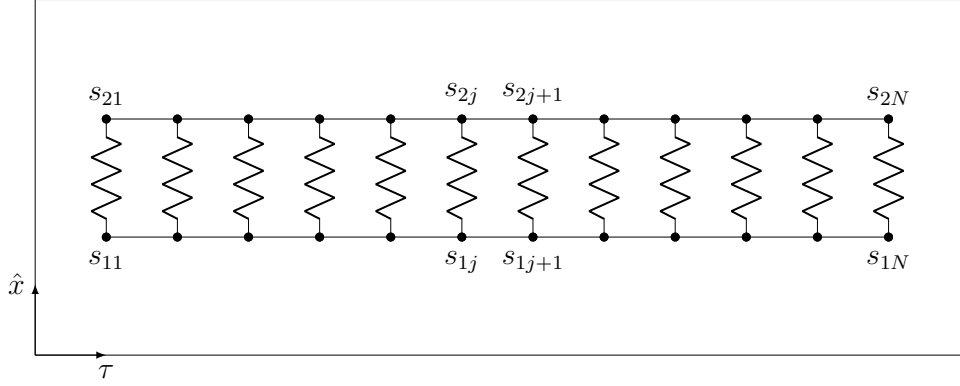


Figura 5: Rappresentazione dell'equivalente classico del sistema originale: due catene di N con condizioni periodiche al bordo $(s_{11}, s_{21}) = (s_{1N}, s_{2N})$ interagiscono fra loro con interazioni antiferromagnetiche lungo l'asse spaziale originale e con interazioni ferromagnetiche lungo l'asse temporale sia sulla stessa catena che non. Per ragioni di chiarezza nel disegno sono omesse le interazioni ferromagnetiche tra le due diverse catene, ma si deve immaginare una interazione aggiuntiva di ciascun sito $1j$ che termina in $2j'$ con $j \neq j'$.

dove $\mathcal{H}$ è data da:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -K \sum_{j=1}^N (s_{1j}s_{1j+1} + s_{2j}s_{2j+1}) + \frac{\beta J}{4N} \sum_{j=1}^N s_{1j}s_{2j} \\ & - \frac{\beta^2}{2N^2} \sum_{j \neq j'} \chi\left(\frac{\beta}{N} |j - j'|\right) (s_{1j} + s_{2j})(s_{1j'} + s_{2j'}) \end{aligned} \quad (81)$$

dove $K = -\frac{1}{2} \ln \left[\tanh\left(\frac{\beta \Delta}{2N}\right) \right]$ e si è sostituito il kernel χ a $G(j' - j)$. Infatti, confrontando l'espressione di quest'ultima con (59) e (60) è possibile notare che essa coincide col kernel di interazione spin-boson.

Si noti che la doppia catena è frustrata. Infatti, si ha interazione antiferromagnetica $K_a = \frac{\beta J}{4N}$ tra gli spin lungo l'asse reale spaziale, interazione ferromagnetica a corto range lungo la stessa catena K e interazione ferromagnetica a lungo range sia tra spin della stessa catena che di differenti catene nella forma:

$$K_{j,j'} = \frac{\alpha \pi^2}{4N^2} \sin^{-2} \left(\frac{\pi |j - j'|}{N} \right)$$

Osserviamo che questo sistema è unidimensionale ma con interazioni ferromagnetiche a lungo range. Si noti come nel caso di bagno ohmico consi-

derato, l'interazione ferromagnetica a lungo range decade con l'inverso del quadrato della distanza. Ciò è facilmente osservabile sviluppando il termine $\sin^2\left(\frac{\pi|j-j'|}{N}\right)$ di $K_{j,j'}$ per grandi valori di $|j-j'|$. Dunque, ci aspettiamo una transizione di fase paramagnete-ferromagnete di Kosterlitz-Thouless, al variare dei parametri J e α , come anticipato nel paragrafo (2.3) e come mostrato in [DF].

3 Approccio al problema e analisi dati

L'Hamiltoniana (81) rappresenta un sistema classico frustrato dato da una doppia catena di spin. Dall'analisi sugli algoritmi di clustering Monte Carlo, si vuole provare che i tempi di autocorrelazione ad essi associati sono notevolmente ridotti quando si scelgono algoritmi di Kandel & Domany rispetto al caso di algoritmi di Swendsen & Wang. In prima analisi, verrà presentata la suddivisione in placchette frustrate utilizzate in questo lavoro nell'ambito di algoritmi di Kandel & Domany. Ciò è stato fatto suddividendo il sistema in placchette di 3, 4, 6 spin e minimizzando la connettività tra spin interagenti antiferromagneticamente. In seguito verranno confrontati i risultati di questi modelli con quelli dell'algoritmo di Swendsen & Wang.

Le simulazioni sono state lanciate con i parametri $\beta = 1000$, $\Delta = 1$, con un numero di step $N = 1001$ e con valori di $\alpha = 0.0, 0.1, \dots, 1.0$ e $J = 0.0, 0.5, \dots, 4.5$. La durata complessiva delle simulazioni è stata di 3 ore ciascuna, di cui la prima come tempo di termalizzazione. Si noti che affinché le medie temporali Monte Carlo coincidano esattamente con quelle del sistema quantistico originale (51) sarebbe necessario avere $N \gg \beta$, vista l'approssimazione di Suzuki-Trotter. D'altra parte, ciò esula dallo scopo di questo lavoro. Infatti, in questi casi, l'interazione antiferromagnetica a primi vicini diventa molto intensa: ciò tende a creare dei domini di spin paralleli lungo l'asse del tempo immaginario dell'ordine di lunghezza di $N/(\beta\Delta)$, cosa che richiederebbe di implementare un algoritmo ad hoc per questa situazione [NU]. In ogni caso, anche per valori non troppo grandi di N si può fare un'analisi sullo scaling del sistema e predire i risultati per il limite termodinamico.

3.1 Placchette frustrate

In questa sezione saranno presentati gli algoritmi di Kandel & Domany utilizzati per le simulazioni sfruttando placchette di spin frustrate. Si richiederà, come già chiarito nei paragrafi precedenti che la suddivisione in placchette del reticolo di spin sia tale da soddisfare l'equazione (39) per l'hamiltoniana $\mathcal{H}$, cioè

$$\mathcal{H} = \sum_q \mathcal{H}^{(q)} \quad (82)$$

Dove $\mathcal{H}^{(q)} = \sum_{\langle ij \rangle_q} K_{ij}^{(q)} s_i^{(q)} s_j^{(q)}$

Nel primo caso in analisi, per la semplicità del calcolo, visti i pochi pesi in gioco, si sceglierà di suddividere il reticolo in sole placchette triangolari frustrate. Nei casi successivi di placchette di quadrati a 4 spin, o doppi

quadrati a 6 spin, ci sarà una combinazione di placchette frustrate Kandel & Domany con placchette semplici di due spin alla Swendsen & Wang¹¹. Si noti che, in generale, il calcolo dei pesi (41) può diventare arduo anche per un piccolo numero k di spin per placchetta. Infatti, si noti che il numero di configurazioni S indipendenti risulta essere $s_{max} = 2^{k-1}$. D'altra parte, in questo modello ogni spin interagisce con ciascun altro spin della placchetta, dal momento che $\mathcal{H}^{(q)}$ presenta interazioni all-to-all¹². Dunque nella ricerca dei possibili grafi, bisogna tener conto che bisognerà inserire un bond aperto o chiuso tra ogni coppia di spin, le quali, in totale sono date da $k(k-1)/2$. Dunque, ricordando che un grafo G sulla placchetta è una possibile configurazione di bond si ha che il numero di pesi presenti nel sistema lineare di s_{max} equazioni è dato da $c_{max} = 2^{\frac{k(k-1)}{2}}$. È semplice notare che nel caso di placchette triangolari ($k = 3$) il sistema si riduce a $s_{max} = 4$ equazioni e $c_{max} = 8$ incognite. Come si vedrà nel prossimo paragrafo, questo caso è risolvibile analiticamente nel caso si introducano dei vincoli per minimizzare la connettività $\langle \gamma_{ij}^{\parallel} \rangle$. Già a partire dal caso di placchette quadrate di $k = 4$ spin, il sistema diventa di $s_{max} = 16$ equazioni e $c_{max} = 64$ incognite, il che rende complicato il calcolo analitico. Nell'ultimo caso preso in analisi, per $k = 6$ spin si ha $s_{max} = 32$ e $c_{max} = 32768$.

Si noti che se da un lato ciò è uno svantaggio, perché rende più complesso il calcolo dei pesi, dall'altro ha un evidente vantaggio: maggiori sono le incognite rispetto alle equazioni, maggiore è la possibilità di scegliere una particolare soluzione che soddisfi il nostro scopo, cioè che minimizzi quanto più possibile $\langle \gamma_{ij}^{\parallel} \rangle$.

In questi tre casi, dunque, si è scelto di affrontare la ricerca dei pesi come un problema di ottimizzazione vincolata. Si è scelto, in pratica, di massimizzare la funzione

$$z = - \sum_G W(G) F(G) \quad (83)$$

Dove $F(G)$

$$F(G) = \sum_{\langle ij \rangle} b_{ij}^{(G)} \Theta(K_{ij}^{(q)}) \quad (84)$$

Cioè, $F(G)$ conta il numero di coppie di spin $\langle ij \rangle$ del grafo G connessi fra loro da un open bond (e quindi $b_{ij}^{(G)} = 1$) interagenti antiferromagneticamente

¹¹Si noti che, per convenzione, per "placchetta" di spin si intende un gruppo di 3 o più spin interagenti. Tuttavia, per semplificare il discorso, in questo lavoro ci si riferirà a un gruppo di due soli spin interagenti come placchetta lineare o placchetta di Swendsen & Wang.

¹²Dal momento che il reticolo completo presenta interazioni fra ogni coppia di spin, anche le placchette condivideranno con esso la stessa proprietà.

(cioè $K_{ij}^{(q)} > 0$). I vincoli scelti per il problema di ottimizzazione sono proprio le q_{max} equazioni (41). Si noti che il massimo assoluto possibile per la funzione libera z è data da $z_{max} = 0$, dal momento che i pesi sono semidefiniti positivi. Dunque, i pesi $W(G)$ associati ad un costo $F(G)$ maggiore, e dunque ad una maggiore connettività tra siti in interazione antiferromagnetica, tenderanno ad essere più piccoli, riducendo la probabilità di scegliere il grafo G per la placchetta. L'algoritmo utilizzato per il calcolo dei pesi in ottimizzazione vincolata è l'algoritmo simplex [P].

Placchetta triangolare frustrata ($k = 3$ spin)

Si vuole suddividere il grafo in placchette della forma triangolare di vertici $T_{jj'}^L = \{(1, j), (2, j), (1, j')\}$ e $T_{jj'}^R = \{(1, j), (2, j), (2, j')\}$, più un insieme di placchette lineari residue $P_{j_{res}} = \{(1, j), (2, j)\}$. Si noti che viste le condizioni periodiche al bordo, per ricoprire completamente il reticolo basta considerare $j = 1, \dots, N$ e con $j' = j+1 \mod N, \dots, j+(N-1)/2 \mod N$. A ciascuna delle placchette L e R sono assegnate le hamiltoniane

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{jj'}^L &= -K_{1jj'}^L s_{1j} s_{1j'} - K_{2jj'}^L s_{2j} s_{1j'} + K_{3jj'}^L s_{1j} s_{2j} \\ \mathcal{H}_{jj'}^R &= -K_{1jj'}^R s_{2j} s_{2j'} - K_{2jj'}^R s_{1j} s_{2j'} + K_{3jj'}^R s_{1j} s_{2j} \\ \mathcal{H}_{res_j} &= K_{res_j} s_{1j} s_{2j}\end{aligned}\tag{85}$$

Deve valere allora che

$$\sum_{j,j'} [\mathcal{H}_{jj'}^L + \mathcal{H}_{jj'}^R] + \sum_j \mathcal{H}_{res_j} = \mathcal{H}\tag{86}$$

dove j e j' variano nei range sopra indicati. Dal momento che ogni interazione ferromagnetica è coperta da una sola placchetta, allora si ha

$$\begin{aligned}K_{1jj'}^{L,R} &= K_{j,j'} + K\delta_{|j-j'|,1} \\ K_{2jj'}^{L,R} &= K_{j,j'}\end{aligned}\tag{87}$$

D'altra parte, l'interazione antiferromagnetica di $\mathcal{H}$ tra $(1j)$ e $(2j)$ è distribuita tra le hamiltoniane $H_{jj'}^L, H_{jj'}^R$ e $\mathcal{H}_{res_j}$ con j fissato. Per cui si ha

$$\sum_{j'} [K_{3jj'}^L + K_{3jj'}^R] + K_{res_j} = K_a\tag{88}$$

Si noti che non esiste una scelta univoca per le interazioni antiferromagnetiche della placchetta, ragion per cui verranno scelte, dallo studio delle equazioni (41), quelle più convenienti ai nostri scopi.

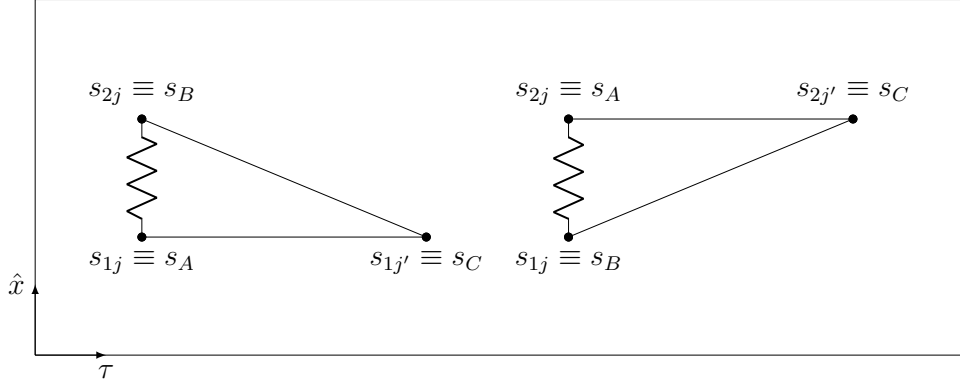


Figura 6: A sinistra la placchetta triangolare (L, j, j') , a destra la placchetta triangolare (R, j, j') .

Assegnata, l'interazione residua, i pesi per le placchetta residua sono quelli di Swendsen & Wang¹³. Si noti che $K_{res} < K_a$, quindi sulla placchetta residua j -ma, la probabilità di mettere un bond sull'interazione antiferromagnetica tra $(1, j)$ e $(2, j)$ è data da $P_j = 1 - e^{-2K_{res_j}}$ se $s_{1j} \neq s_{2j}$, zero altrimenti. Assegnata una certa placchetta triangolare¹⁴ q di Hamiltoniana

$$\mathcal{H}^{(q)} = -K_1^{(q)} s_A s_C - K_2^{(q)} s_B s_C + K_3^{(q)} s_A s_B \quad (89)$$

è facile verificare che le equazioni (41) sono

$$\begin{aligned} W_0^{(q)} &= e^{-K_1^{(q)} - K_2^{(q)} - K_3^{(q)}} \\ W_0^{(q)} + W_1^{(q)} + W_2^{(q)} + W_{12}^{(q)} &= e^{K_1^{(q)} + K_2^{(q)} - K_3^{(q)}} \\ W_0^{(q)} + W_1^{(q)} + W_3^{(q)} + W_{13}^{(q)} &= e^{K_1^{(q)} + K_3^{(q)} - K_2^{(q)}} \\ W_0^{(q)} + W_2^{(q)} + W_3^{(q)} + W_{23}^{(q)} &= e^{K_2^{(q)} + K_3^{(q)} - K_1^{(q)}} \end{aligned} \quad (90)$$

Osserviamo che le 4 equazioni di cui sopra presentano 8 incognite: 7 pesi e l'interazione $K_3^{(q)}$ che non è univocamente determinata. Dal momento che si vuole minimizzare la connettività tra due spin in interazione antiferromagnetica, si vuole porre a 0 ogni peso associato ad un grafo con un bond

¹³Dal momento che è una placchetta di due soli siti

¹⁴ q è rappresentato in questo caso da (j, j', L) o (j, j', R) e usando le convenzioni di Figura 6

sull'interazione 3. Dunque si chiede che $W_3^{(q)} = W_{13}^{(q)} = W_{23}^{(q)} = 0$, da cui

$$\begin{aligned}
W_0^{(q)} &= e^{-K_1^{(q)} - K_2^{(q)} - K_3^{(q)}} \\
W_0^{(q)} + W_1^{(q)} + W_2^{(q)} + W_{12}^{(q)} &= e^{K_1^{(q)} + K_2^{(q)} - K_3^{(q)}} \\
W_0^{(q)} + W_1^{(q)} &= e^{K_1^{(q)} + K_3^{(q)} - K_2^{(q)}} \\
W_0^{(q)} + W_2^{(q)} &= e^{K_2^{(q)} + K_3^{(q)} - K_1^{(q)}}
\end{aligned} \tag{91}$$

Dal momento che non necessariamente $K_3^{(q)}$ è determinato, potremmo chiedere che anche $W_{12}^{(q)} = 0$. Infatti, questo termine inserisce contemporaneamente i bond 1 e 2 ed è equivalente al grafo con il bond 3. Ciò vincola il valore dell'interazione 3 a $K_{3_{best}}^{(q)}$. Per cui le equazioni (91) diventano

$$\begin{aligned}
W_0^{(q)} &= e^{-K_1^{(q)} - K_2^{(q)} - K_{3_{best}}^{(q)}} \\
W_0^{(q)} + W_1^{(q)} + W_2^{(q)} &= e^{K_1^{(q)} + K_2^{(q)} - K_{3_{best}}^{(q)}} \\
W_0^{(q)} + W_1^{(q)} &= e^{K_1^{(q)} + K_{3_{best}}^{(q)} - K_2^{(q)}} \\
W_0^{(q)} + W_2^{(q)} &= e^{K_2^{(q)} + K_{3_{best}}^{(q)} - K_1^{(q)}}
\end{aligned} \tag{92}$$

La cui soluzione è

$$\begin{aligned}
W_1^{(q)} &= e^{-K_2^{(q)}} \left(e^{(K_1^{(q)} + K_{3_{best}}^{(q)})} - e^{-(K_1^{(q)} + K_{3_{best}}^{(q)})} \right) = 2e^{-K_2^{(q)}} \sinh \left[K_1^{(q)} + K_{3_{best}}^{(q)} \right] \\
W_2^{(q)} &= e^{-K_1^{(q)}} \left(e^{(K_2^{(q)} + K_{3_{best}}^{(q)})} - e^{-(K_2^{(q)} + K_{3_{best}}^{(q)})} \right) = 2e^{-K_1^{(q)}} \sinh \left[K_2^{(q)} + K_{3_{best}}^{(q)} \right] \\
K_{3_{best}}^{(q)} &= \frac{1}{2} \ln \left\{ \frac{\cosh [K_1^{(q)} + K_2^{(q)}]}{\cosh [K_1^{(q)} - K_2^{(q)}]} \right\}
\end{aligned} \tag{93}$$

L'idea è quella di scegliere, per ciascuna placchetta $K_3^q = K_{3_{best}}^{(q)}$. Tuttavia non è sempre possibile, visto il vincolo di (88). Richiediamo allora una condizione meno stringente per le equazioni (91), richiedendo che $W_{12}^{(q)} > 0$. Si ottiene allora

$$\begin{aligned}
W_1^{(q)} &= e^{-K_2^{(q)}} \left(e^{(K_1^{(q)} + K_3^{(q)})} - e^{-(K_1^{(q)} + K_3^{(q)})} \right) = 2e^{-K_2^{(q)}} \sinh \left[K_1^{(q)} + K_3^{(q)} \right] \\
W_2^{(q)} &= e^{-K_1^{(q)}} \left(e^{(K_2^{(q)} + K_3^{(q)})} - e^{-(K_2^{(q)} + K_3^{(q)})} \right) = 2e^{-K_1^{(q)}} \sinh \left[K_2^{(q)} + K_3^{(q)} \right] \\
W_{12}^{(q)} &= e^{-K_3^{(q)}} \left[e^{(K_1^{(q)} + K_2^{(q)})} - e^{-(K_1^{(q)} + K_2^{(q)})} \right] - e^{K_3^{(q)}} \left[e^{(K_1^{(q)} - K_2^{(q)})} - e^{-(K_1^{(q)} - K_2^{(q)})} \right]
\end{aligned} \tag{94}$$

Si noti che imponendo $W_{12}^{(q)} > 0$ si può vedere che $K_3^{(q)} < K_{3_{best}}^{(q)}$.

Allora, il calcolo dei pesi delle placchette triangolari per il nostro algoritmo può essere fatto così osservando che in generale, i pesi delle placchette sono invarianti per traslazione lungo il reticolo¹⁵:

1. Si considera un certo valore di j
2. Si definisce $K_{res_j} = K_a$ e si pone $k = 1$
3. Si considera la placchetta triangolare $q = (j, j', L)$ con $j' = j + k$ e si calcola $K_{3_{best}}^{(q)}$
4. Se $K_{3_{best}}^{(q)} < K_{res}$, si pone $K_3^{(q)} = K_{3_{best}}^{(q)}$, e si procede nel calcolo dei pesi visti nel caso $W_3 = W_{12} = W_{13} = W_{23} = 0$; altrimenti si pone $K_3^{(q)} = K_{res_j}$ e si procede come nel caso $W_3 = W_{13} = W_{23} = 0$
5. Si riduce K_{res_j} della quantità $K_3^{(q)}$
6. Si considera la placchetta triangolare $q = (j, j', R)$ si calcola $K_{3_{best}}^{(q)}$
7. Se $K_{3_{best}}^{(q)} < K_{res}$, si pone $K_3^{(q)} = K_{3_{best}}^{(q)}$, e si procede nel calcolo dei pesi visti nel caso $W_3 = W_{12} = W_{13} = W_{23} = 0$; altrimenti si pone $K_3^{(q)} = K_{res_j}$ e si procede come nel caso $W_3 = W_{13} = W_{23} = 0$
8. Si riduce K_{res_j} della quantità $K_3^{(q)}$
9. Se $k < (N - 1)/2$ si aumenta k di un'unità e si torna a 3.

Si noti che in questo modo per ciascuna placchetta è preso il valore ottimale dell'interazione 3, fin quando è possibile.

In fase di simulazione Monte Carlo, per ciascuna placchetta triangolare, una volta nota la configurazione di spin S , sarà inserito il giusto grafo G di peso $W(G)$ con probabilità data da (43). In ciascuna placchetta triangolare il bond 3 non è mai inserito. Solo alla fine ci si trova davanti alla possibilità residua di inserire un bond con una probabilità di Swendsen & Wang $P_{res} = 1 - e^{-K_{res_j}}$ se gli spin sono antiparalleli, minore rispetto alla probabilità di Swendsen & Wang di inserirlo nell'algoritmo originale, dove essa è $P_a = 1 - e^{-K_a}$.

¹⁵I pesi di (L, j, j') sono identici a quelli di $(L, j+t, j'+t)$ vista la simmetria traslazionale. Per questo, i pesi saranno calcolati solo per un certo j fissato, al variare di j' .

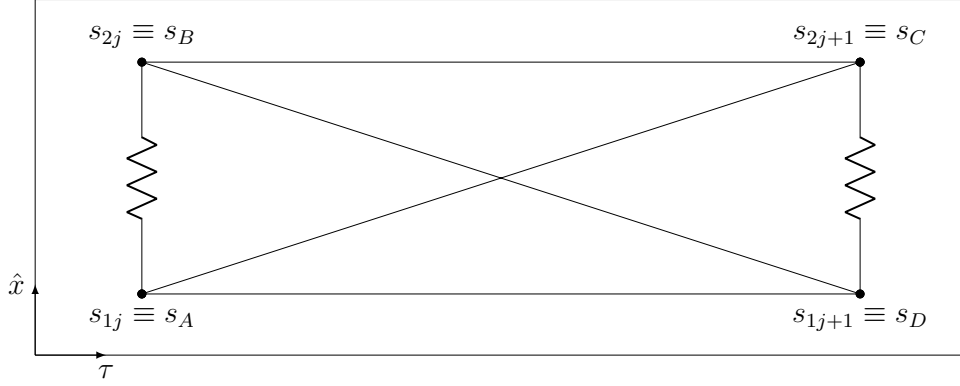


Figura 7: Placchetta rettangolare frustrata.

Placchetta rettangolare frustrata ($k = 4$ spin)

Come secondo approccio si è scelto di suddividere il reticolo con placchette rettangolari di vertici $Q_j = \{(1, j)(2, j), (1, j+1), (2, j+1)\}$ con $j = 1, \dots, N$ e $j+1 \bmod N$. Si noti che queste placchette non coprono interamente il reticolo, dal momento che, a differenza del caso delle placchette triangolari, si è scelto di considerare solo placchette di altezza unitaria. Dunque, le interazioni a lungo range tra gli spin di siti (i, j) e (i', j') con $j' > j+1$ saranno coperte con placchette lineari a due siti $L_{(i,j),(i',j')}$ che hanno banalmente pesi di Swendsen & Wang. Con questo tipo di ricoprimento, le interazioni ferromagnetiche del reticolo sono associate ad un'unica placchetta rettangolare o lineare, mentre ciascuna interazione antiferromagnetica K_a tra i siti $(1, j)$ e $(2, j)$ è suddivisa tra le due placchette rettangolari Q_{j-1} e Q_j .

Indicando con q la generica placchetta Q_j con le convenzioni in Figura 7, le hamiltoniane associate ad ogni placchetta sono¹⁶

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{(q)} &= -K_1^{(q)}(s_A s_D + s_B s_C) - K_2^{(q)}(s_A s_C + s_B s_D) + K_3^{(q)}(s_A s_B + s_C s_D) \\ \mathcal{H}_{L_{(i,j),(i',j')}} &= -K_{L_{(i,j),(i',j')}} s_{ij} s_{i'j'} \end{aligned} \quad (95)$$

Indicando con q' la generica placchetta $L_{(i,j),(i',j')}$ deve valere che

$$\sum_q \mathcal{H}^{(q)} + \sum_{q'} \mathcal{H}^{(q')} = \mathcal{H} \quad (96)$$

¹⁶Per evidente simmetria, come si vede in Figura 7, si è assegnata a priori la stessa interazione tra (s_A, s_D) e (s_B, s_C) , tra (s_A, s_C) e (s_B, s_D) , tra (s_A, s_B) e (s_C, s_D) .

Da ciò segue immediatamente che

$$\begin{aligned}
K_1^{(q)} &= K_{j,j+1} + K \\
K_2^{(q)} &= K_{j,j+1} \\
K_3^{(q=Q_{j-1})} + K_3^{(q=Q_j)} &= K_a \\
K_{L_{(i,j),(i',j')}} &= K_{j,j'}
\end{aligned} \tag{97}$$

Per invarianza per traslazione si è posto, dunque, $K_3^{(q)} = K_a/2 \forall j$.

Come già riportato in precedenza, le (41) per le placchette rettangolari sono 16 equazioni in 64 incognite. Si può provare che non è possibile trovare una soluzione a queste equazioni soltanto richiedendo che i pesi relativi a grafi che includano uno o due bond tra spin in interazione antiferromagnetica siano nulli. Per tale motivo si è proceduto massimizzando la funzione (83) con i vincoli imposti da (41), in modo favorire bond tra siti in interazione ferromagnetica e sfavorire i restanti.

In fase di simulazione Monte Carlo, per ciascuna placchetta quadrata, una volta nota la configurazione di spin S , sarà inserito il giusto grafo G di peso $W(G)$ con probabilità data da (43). Viceversa, per le placchette di soli due spin saranno inseriti i bond con probabilità di Swendsen & Wang.

Placchetta rettangolare doppia frustrata ($k = 6$ spin)

Questo approccio suddivide il reticolo con placchette rettangolari doppie di vertici $DQ_j = \{(1, j), (2, j), (1, j+1), (2, j+1), (1, j+2), (2, j+2)\}$ con $j = 1, \dots, N$ e $j+1$ e $j+2$ sono da intendersi modulo N . Anche queste placchette non coprono interamente il reticolo, dunque, le interazioni a lungo range tra gli spin di siti (i, j) e (i', j') con $j' > j+2$ saranno anche qui coperte con placchette lineari a due siti $L_{(i,j),(i',j')}$ i cui pesi sono ancora quelli di Swendsen & Wang. Con questo tipo di ricoprimento, le interazioni ferromagnetiche tra i siti (i, j) , (i', j') del reticolo sono associate ad un'unica placchetta lineare se $j' > j+2$, e ad un'unica rettangolare se $j' = j+2$, mentre se $j' = j+1$ l'interazione è suddivisa tra due placchette rettangolari consecutive DQ_{j+1} e DQ_j . Invece, ciascuna interazione antiferromagnetica K_a tra i siti $(1, j)$ e $(2, j)$ è suddivisa tra le tre placchette rettangolari DQ_{j-2} , DQ_{j-1} e DQ_j . Indicando con q la generica placchetta DQ_j , con le convenzioni di Figura 8, l'hamiltoniana di q è

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}^{(q)} &= -K_1^{(q)}(s_A s_D + s_B s_C + s_C s_F + s_D s_E) - K_2^{(q)}(s_A s_C + s_B s_D + \\
&\quad + s_C s_E + s_D s_F) + K_3^{(q)}(s_A s_B + s_C s_D + s_F s_E) - K_4^{(q)}(s_A s_E + s_A s_F + \\
&\quad + s_B s_F + s_B s_E)
\end{aligned} \tag{98}$$

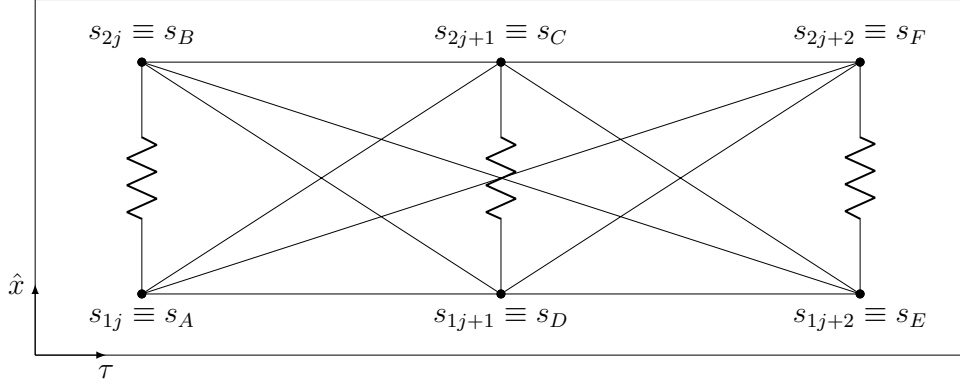


Figura 8: Placchetta rettangolare doppia frustrata. Si noti che esiste anche un'interazione ferromagnetica tra s_B e s_F e tra s_A ed s_E .

Mentre la forma delle hamiltoniane delle placchette lineare rimane uguale al caso precedente.

Labellando queste ultime con l'indice q' vale la stessa equazione (96), da cui segue che

$$\begin{aligned}
K_1^{(q=DQ_{j-1})} + K_1^{(q=DQ_j)} &= K_{j,j+1} + K \\
K_2^{(q=DQ_{j-1})} + K_2^{(q=DQ_j)} &= K_{j,j+1} \\
K_2^{(q=DQ_{j-2})} + K_2^{(q=DQ_{j-1})} + K_2^{(q=DQ_j)} &= K_a \\
K_4^{(q)} &= K_{j,j+2} \\
K_{L(i,j),(i',j')} &= K_{j,j'}
\end{aligned} \tag{99}$$

Per invarianza per traslazione si è posto $K_1^{(q)} = (K_{j,j+1} + K)/2$, $K_2^{(q)} = K_{j,j+1}/2$ e $K_3^{(q)} = K_a/3 \forall q$.

Come per la placchetta rettangolare frustrata, l'approccio alle equazioni (41) è stato quello di massimizzare la funzione (83) e ottenere i pesi della placchetta, minimizzando la possibilità di bond tra spin interagenti antiferromagneticamente. In fase di simulazione Monte Carlo il modo di procedere è assolutamente analogo a quello già discusso alla fine della sezione precedente.

3.2 Misure e condizione di presa dati

In questa sezione sono riportati i risultati delle simulazioni. Dopo una prima fase di termalizzazione della durata di un'ora, ad ogni step Monte Carlo i è stata misurata la magnetizzazione m_i del sistema e la densità del cluster di dimensioni maggiori P_i per un totale di A step variabili da simulazione in



Figura 9: Esempio di plot per l'autocorrelazione nel caso di $(\alpha, J) = (0.8, 4.5)$. Si può notare il rumore tipico di un algoritmo di clustering.

simulazione¹⁷. Al termine della simulazione sono state calcolate la magnetizzazione media del sistema $m = (1/A) \sum_{i=1}^A m_i$ e la media della densità del cluster maggiore $P = (1/A) \sum_{i=1}^A P_i$. Inoltre, è stata calcolata la funzione di autocorrelazione normalizzata $C(t)$ della magnetizzazione definita da

$$C(t) = \frac{\langle m_0 m_t \rangle - \langle m_0 \rangle^2}{\langle m_0^2 \rangle - \langle m_0 \rangle^2} \quad (100)$$

Essa è stata calcolata per sequenze di $A_{max} = 8192$ step, utilizzando ciascuno degli step Monte Carlo da $i = 1$ a $i = A - A_{max}$ come punto iniziale. Per tale motivo, nella formula (100) si è usato $\langle m_0 \rangle = \frac{1}{A - A_{max}} \sum_{i=1}^{A - A_{max}} m_i$ e $\langle m_0 m_t \rangle = \frac{1}{A - A_{max}} \sum_{i=1}^{A - A_{max}} m_i m_{i+t}$. Per ottenere informazioni interessanti riguardo all'efficienza degli algoritmi di clustering, è necessario estrapolare il tempo di autocorrelazione τ di ciascuna di queste sequenze o, al più, un tempo ad esso proporzionale. Si noti che nelle ipotesi in cui $C(t) \propto e^{-t/\tau}$ il parametro τ potrebbe essere stimato eseguendo un fit lineare tra $\ln[C(t)]$ e t . D'altra parte, non è sempre corretta l'ipotesi che l'andamento della funzione

¹⁷Per ciascuna simulazione è stato fissato il tempo solare. Dunque, il numero di passi Monte Carlo A compiuti è dipeso dalla complessità dell'algoritmo e dalla capacità della macchina di eseguire più o meno velocemente i calcoli necessari ad esso.

di autocorrelazione sia esponenziale. Inoltre, essendo $C(t)$ per gli algoritmi di clustering fortemente affetto da rumore, seppure fosse vera l'ipotesi di andamento esponenziale, le stime di τ attraverso un fit lineare sarebbero fortemente condizionate da quest'ultimo. Una più semplice stima di una quantità proporzionale a τ è il tempo t_1 , cioè il tempo minimo necessario a $C(t)$ per decadere al di sotto della soglia di 0.1. Infatti, nell'ipotesi in cui la funzione di autocorrelazione dipenda sola da t/τ , allora deve esistere una relazione di proporzionalità tra t_1 e τ . Si noti che per ciascuna simulazione, le quantità m e P sono stimate senza errore, mentre t_1 è misurata con errore massimo $\Delta t_1 = 1$. In definitiva, i valori di m_{best} , P_{best} e t_{1best} associati a una certa coppia (α, J) sono ottenuti come media aritmetica $\bar{m}$, $\bar{P}$ e $\bar{t}_1$ di simulazioni Monte Carlo ottenute con la stessa coppia; gli errori $\sigma_{m_{best}}$ e $\sigma_{P_{best}}$ sono stati stimati come la deviazione standard della media di tali simulazioni, cioè $\sigma_{m_{best}} = \sigma_m/\sqrt{\mathcal{N}}$, $\sigma_{P_{best}} = \sigma_P/\sqrt{\mathcal{N}}$, dove $\mathcal{N}$ è il numero di simulazioni indipendenti associate a una certa coppia (α, J) . Per l'errore su t_{1best} si è scelto di utilizzare l'errore massimo $\Delta t_1 = 1$ qualora $\sigma_{t_{1best}} = \sigma_{t_1}/\sqrt{\mathcal{N}} < 1$, viceversa, si è scelto $\sigma_{t_{1best}}$.

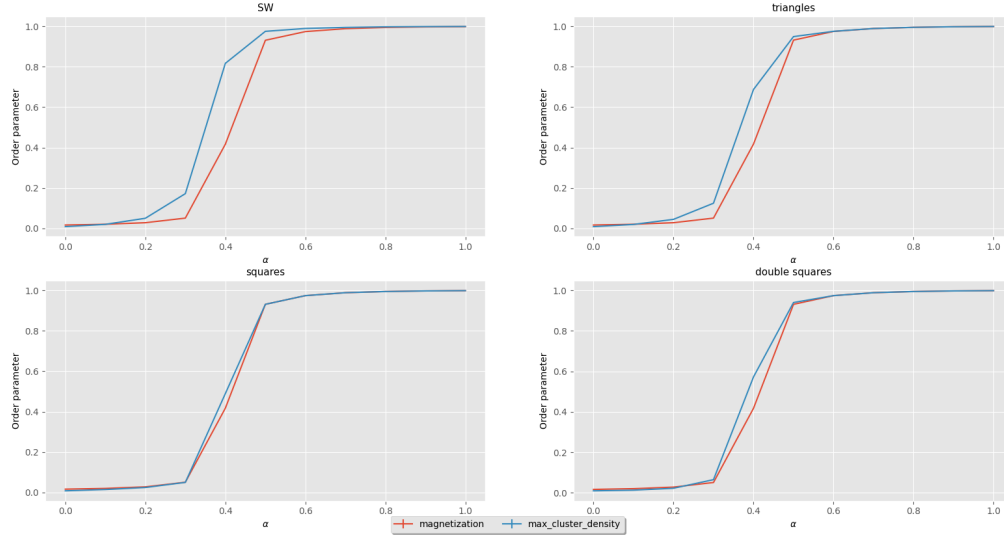
3.3 Analisi dati

I grafici in Fig. 10 mostrano l'andamento del parametro d'ordine di magnetizzazione e percolazione per diversi valori di J al variare di α , nei quali è possibile osservare la presenza di una transizione di fase sia per il sistema di Ising originale, sia per l'equivalente percolazione ai legami indotta dagli algoritmi di Swendsen & Wang e Kandel & Domany. Si ricordi che l'algoritmo pienamente efficiente¹⁸ dovrebbe richiedere che $P = m$. Per l'algoritmo di Swendsen & Wang¹⁹ la transizione di percolazione avviene a valori di J minori di quella per la magnetizzazione, con una differenza che diviene sempre più evidente al crescere di J . Questo problema affligge anche gli algoritmi ottimizzati, ma in maniera minore, segno per il quale ci si aspetta un miglioramento dei tempi di autocorrelazione. Da una prima analisi qualitativa dei grafici dei parametri d'ordine, sembra che alcune scelte di suddivisioni in placchette sono più efficienti per alcuni valori di J , altre scelte sono più efficienti per altri valori. Con ciò si intende che non esiste, nell'ambito delle possibilità analizzate, una suddivisione in placchette che sia ottimale per tutti i valori di J . Nel complesso, infatti, sembra che i casi di placchette quadrate e a doppi quadrati abbiano un comportamento leggermente migliore rispetto a quello di placchette triangolari. D'altra parte, osservando la Fig.

¹⁸Per il quale ci si aspetterebbe di trovare un tempo di correlazione pari a poche unità

¹⁹A meno del caso banale $J = 0$ che rende il sistema non frustrato.

Order parameters vs α , $J = 1.5$



Order parameters vs α , $J = 3.5$

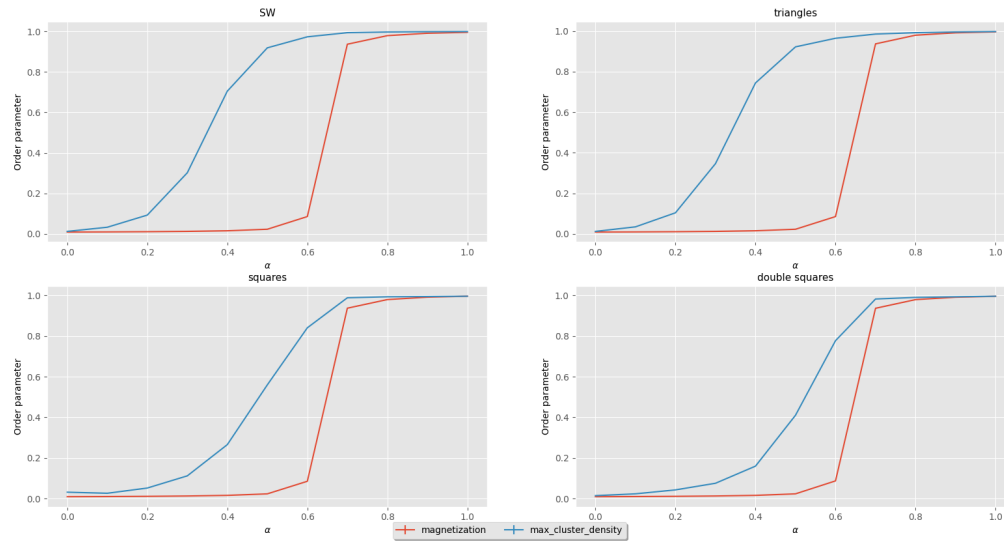


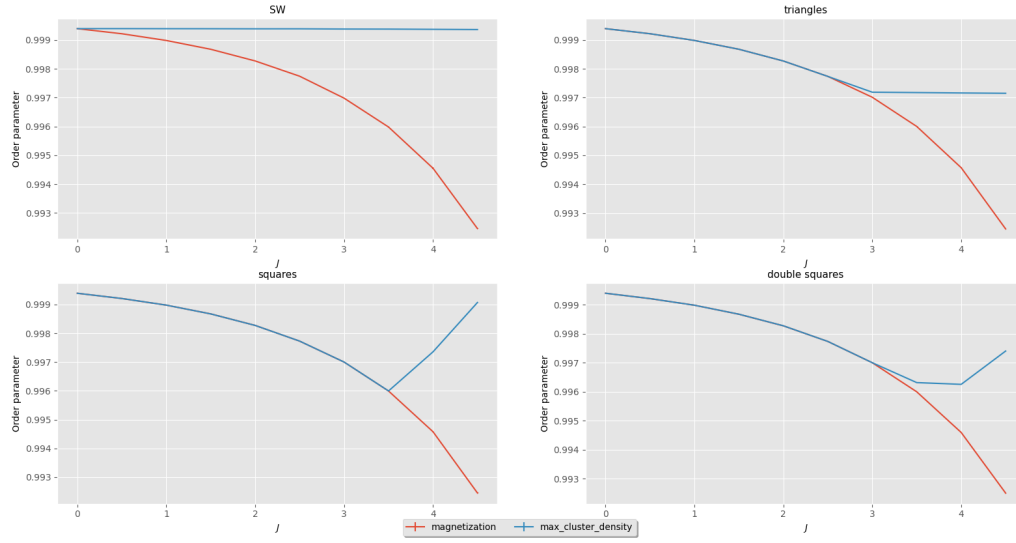
Figura 10: Plot i parametri d'ordine di magnetizzazione (in rosso) e di (percolazione) in blue per valori $J = 2.5, 3.5$. Si noti come le due curve tendono ad essere più vicine rispetto al caso originale, per gli algoritmi con placchette frustrate

11, per grandi valori di J ed α , la densità del cluster maggiore non cresce al variare di J , cosa che invece avviene velocemente nei casi delle placchette a $k = 4$ o $k = 6$ spin. Questo comportamento è dovuto alla differenza degli algoritmi rispetto al caso $k = 3$. Infatti, per $k = 4$ e $k = 6$, i pesi relativi ai bond su interazioni antiferromagnetiche non sono posti a 0. Dunque, a fissata interazione ferromagnetica, qui determinata da α , all'aumentare di J l'importanza dei pesi con bond su interazioni antiferromagnetiche non può essere totalmente ignorata dall'algoritmo di massimizzazione di (83), il quale tende ad assegnare pesi non nulli a grafi che li contengono e con ampiezza crescente con J . Viceversa, per $k = 3$ al crescere di J , ci sarà certamente un valore residuo K_{res} per le placchette triangolari, che introdurrà la possibilità di inserire un bond sul legame antiferromagnetico, ma con una probabilità che rimane costante al crescere di J . In definitiva, ci si aspetta un miglioramento dei tempi di autocorrelazione per gli algoritmi con placchette frustrate, soprattutto nel caso di $k = 4$ e $k = 6$, ma con una attenzione a $k = 3$ per grandi valori di α e J .

Verranno qui omessi i grafici dei tempi t_1 al variare di J e $\alpha = 0.0, 0.1, 0.2$ in cui tutti gli algoritmi mostrano tempo t_1 identicamente uguale ad 1 e per $\alpha = 0.3$, per cui tutti godono di tempi t_1 dell'ordine delle unità. È interessante osservare l'andamento di t_1 al variare di J a partire da $\alpha = 0.4$.

Per ciascuna simulazione, i tempi t_1 per gli algoritmi con placchette frustrate, sono sempre molto minori di quelli di Swendsen & Wang. A titolo di esempio, si vedano Fig. 12 e Fig. 13, dove il picco di ciascuno dei tempi t_1 è presente intorno alla transizione di fase del sistema e, in ogni caso, la curva associata a Swendsen & Wang, risulti al di sopra delle altre, a meno di un comportamento anomalo dell'algoritmo per placchette quadrate, come si nota nella seconda immagine di Fig. 13.

Order parameters vs J , $\alpha = 1.0$



Order parameters vs J , $\alpha = 0.5$

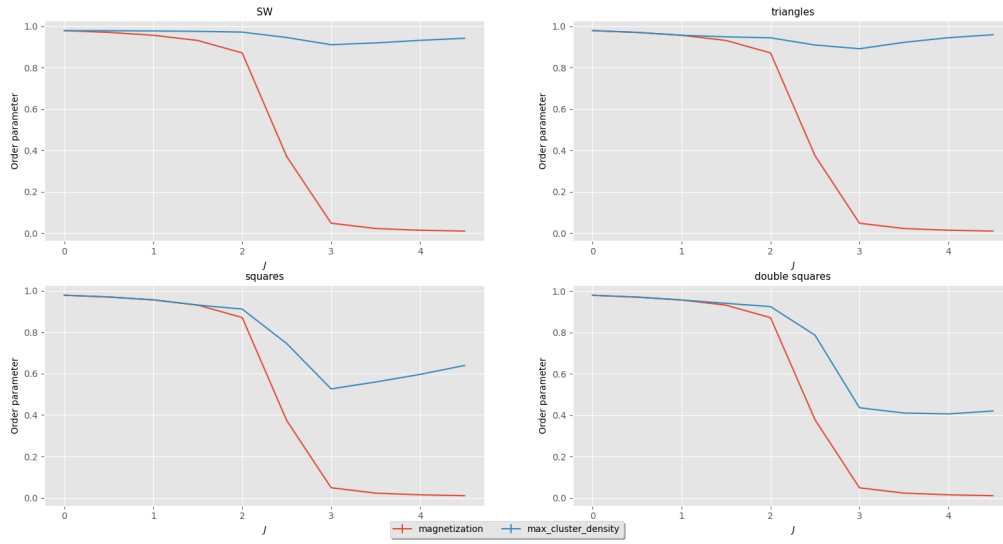


Figura 11: Si noti come per le placchette triangolari, la discrepanza tra P ed m è minore per grandi valori di J e α

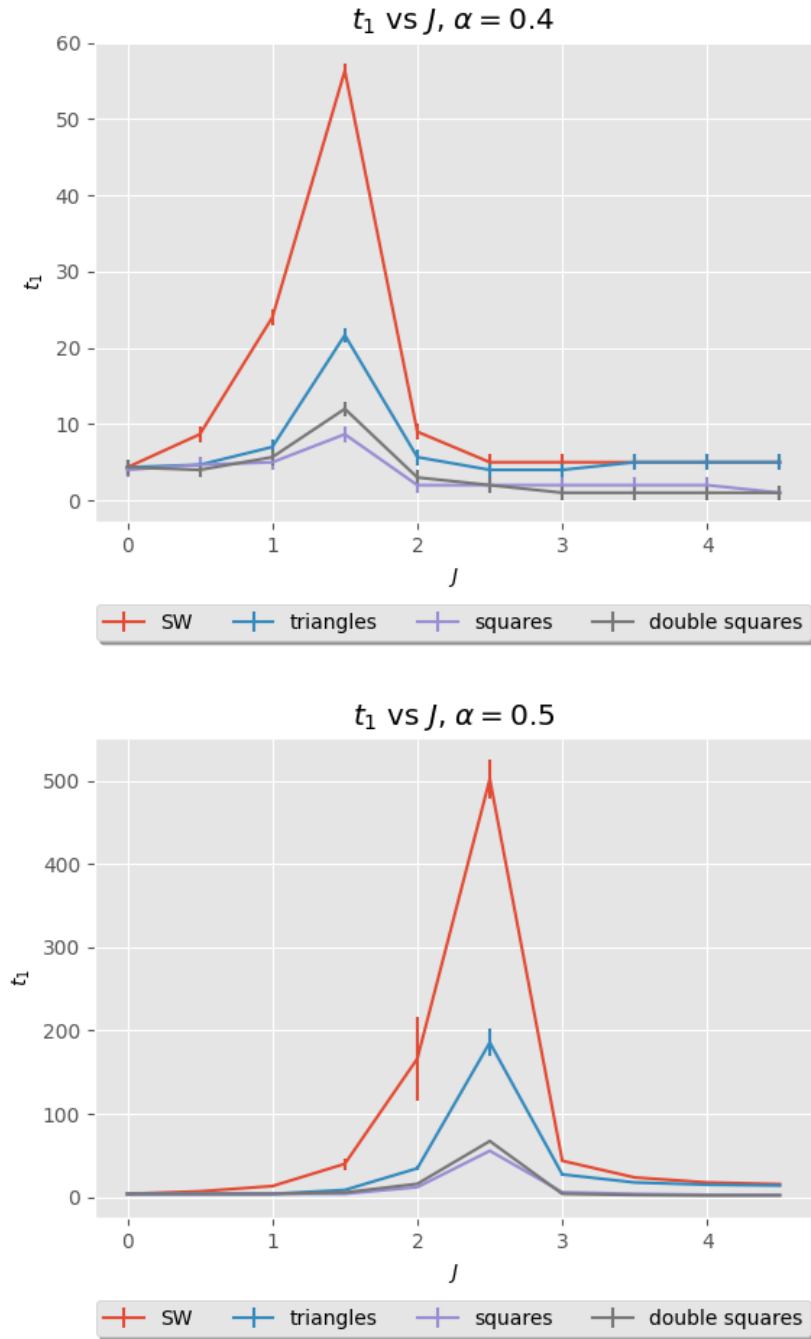


Figura 12: Plot dei tempi t_1 . Si noti come in prossimità della transizione di fase il tempo sia massimo per ciascuno degli algoritmi, ma con valori decisamente differenti

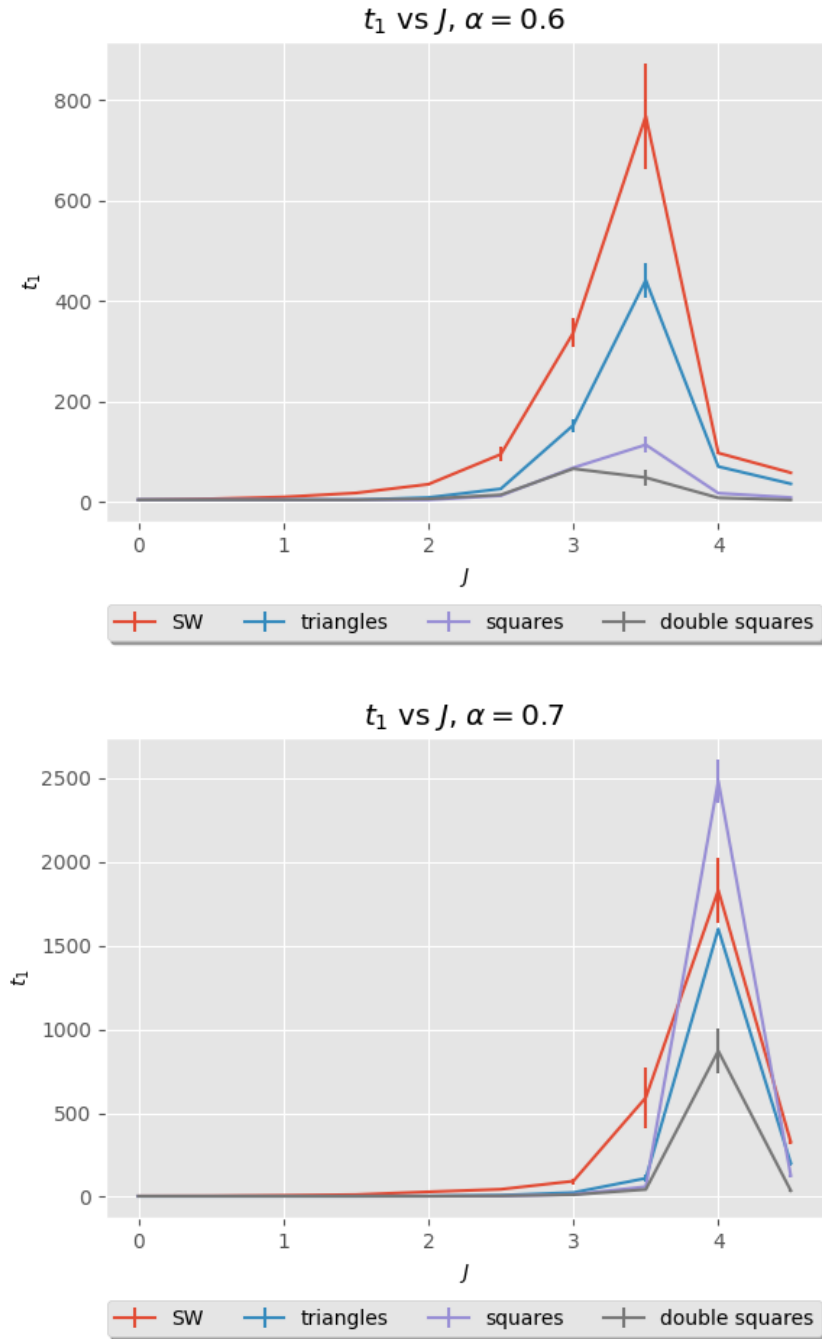


Figura 13: Plot dei tempi t_1 . Si noti come rispetto a Fig. 12, i tempi di correlazione dei doppi rettangoli siano minori. Si noti il cattivo funzionamento dell'algoritmo a rettangoli per α e J grandi.

Osservato che attorno al punto critico i tempi di autocorrelazione sono notevolmente ridotti per gli algoritmi ottimizzati, si sono ripetute delle simulazioni di durata variabile²⁰ per valori di α e J per cui t_1 presenta dei picchi. In particolare per la coppia ($\alpha = 0.5, J = 2.5$) il numero di step dopo la termalizzazione usati per la simulazione sono stati $T_k = k \cdot 21500$, per la coppia ($\alpha = 0.6, J = 3.5$) si è usato $T_k = k \cdot 24500$ e per la coppia ($\alpha = 0.7, J = 4$) si è usato $T_k = k \cdot 21500$ con $k = 1, 2, \dots, 10$. Si noti che il tempo effettivo dopo la termalizzazione, in questa analisi, è stato scelto in unità di step Monte Carlo e non in tempo solare. Ciò è stato fatto scegliendo i tempi T_k in modo tale che T_{10} coincidesse circa col numero di step fatti dall'algoritmo con il minor t_1 in circa due ore dopo la termalizzazione, e che quindi avesse le stesse prestazioni delle simulazioni viste nell'analisi precedente. In questo modo, ciascuna simulazione per algoritmi differenti ha la stessa terna di parametri α, J, T_k , in modo da rendere più semplice il confronto, compiendo tutti lo stesso numero di step, cosa non necessariamente vera se si fosse fissato il solo tempo solare. Per ciascuna terna sono state lanciate simulazioni indipendenti e calcolato la magnetizzazione m_k come media e il relativo errore σ_{m_k} come deviazione standard della media, come già fatto precedentemente. Si vuole osservare lo scarto medio relativo d_k della magnetizzazione m_k misurata per ciascun algoritmo a tempi ridotti, rispetto a m_{ref} , cioè quella misurata con l'algoritmo che minimizza t_1 e di durata di 3 ore.

$$d_k = \frac{|m_k - m_{ref}|}{m_{ref}}$$

$$\sigma_{d_k} = \frac{1}{m_{ref}} \sqrt{\sigma_{m_k}^2 + \left(\frac{m_k}{m_{ref}}\right)^2 \sigma_{m_{ref}}^2} \quad (101)$$

Con tale criterio si è scelto di usare il valore di magnetizzazione di riferimento m_{ref} misurato per l'algoritmo a doppi rettangoli per ($\alpha = 0.6, J = 3.5$) e ($\alpha = 0.7, J = 4$), mentre quello misurato per l'algoritmo a semplici rettangoli per ($\alpha = 0.5, J = 2.5$).

Si noti come da una prima analisi qualitativa di Fig. 14 e Fig. 15 si veda come la deviazione relativa d per l'algoritmo di Swendsen & Wang tenda a maggiore nettamente quella relativa agli algoritmi ottimizzati. Nel caso ($\alpha = 0.5, J = 2.5$), i tre algoritmi ottimizzati hanno una deviazione d che si attesta sempre al di sotto dell'1% già per tempi Monte Carlo t inferiori ai 50000 step. Si noti inoltre che per l'algoritmo a placchette rettangolari, i valori ottenuti per d sono quasi tutti compatibili entro lo 0 entro l'errore o entro il doppio dell'errore già a partire da $t \geq 43000$. In maniera simile, ma

²⁰Dopo un'ora di termalizzazione.

con risultati leggermente peggiori anche gli altri due algoritmi ottimizzati. Similmente, il caso $(\alpha = 0.6, J = 3.5)$ dove però si nota come l'algoritmo per placchette triangolari non abbia ottimi risultati, come atteso anche osservando Fig. 13. In questo caso, così come per Swendsen & Wang, la deviazione d presenta forti oscillazioni rispetto ai restanti algoritmi. Infine, per $(\alpha = 0.7, J = 4)$, come atteso, si osservano forti oscillazioni di d per l'algoritmo di Swendsen & Wang e per quello a placchette rettangolari, mentre una veloce convergenza per i restanti due.

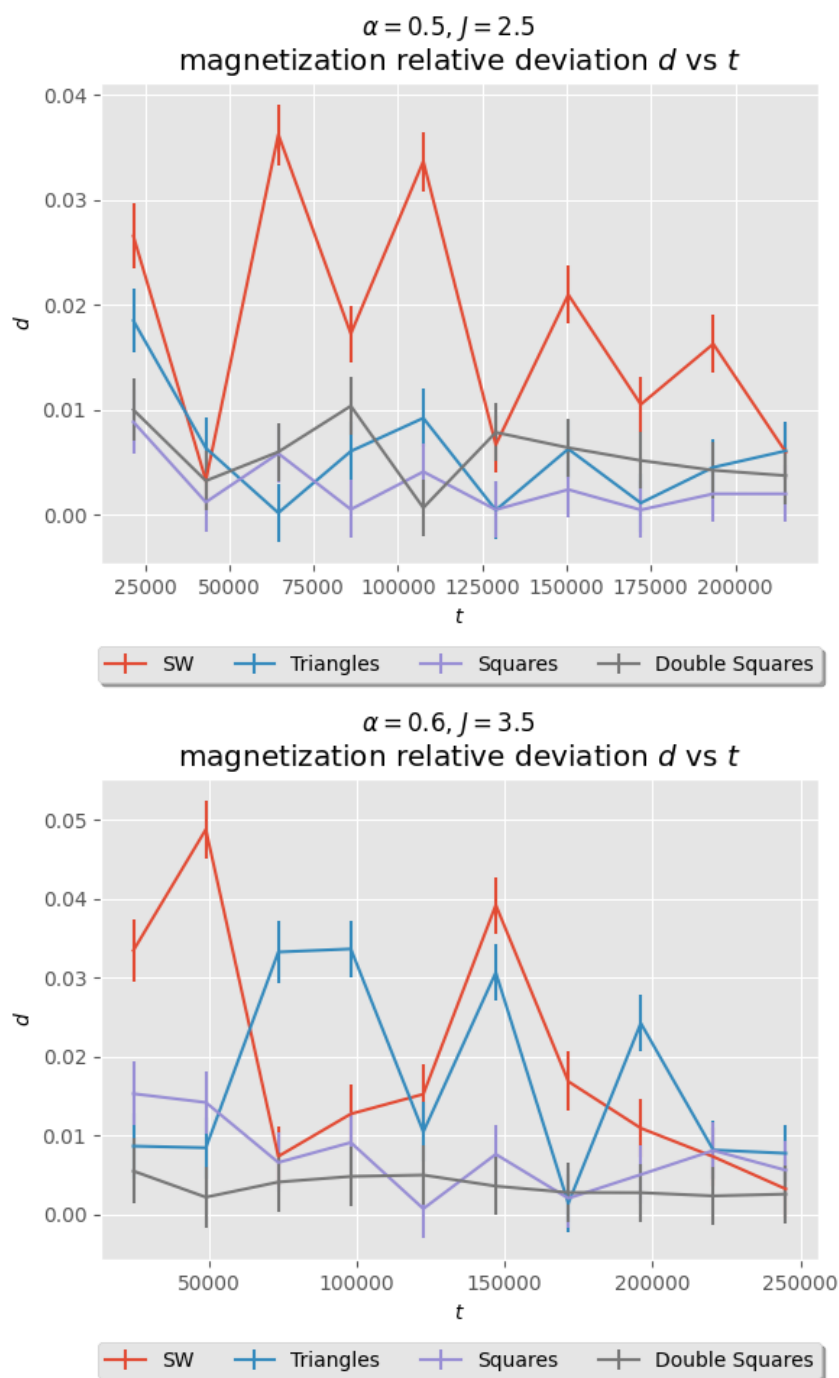


Figura 14: Deviazione relativa d al variare del numero di step Monte Carlo

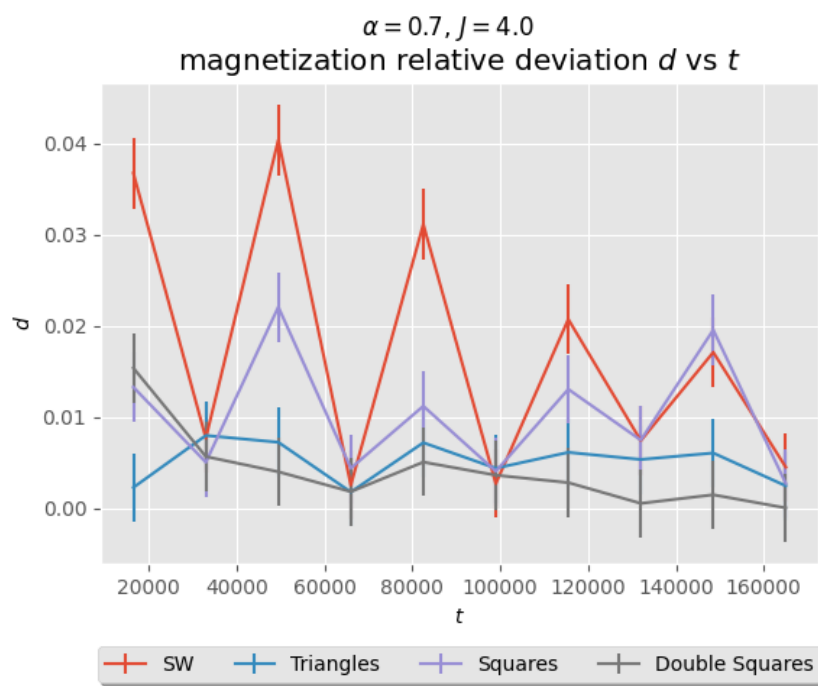


Figura 15

Conclusioni

In questo lavoro, si è voluto testare l'efficienza di algoritmi ispirati al lavoro originale di Kandel & Domany per sistemi di spin di Ising frustrati. Il modello a cui è stata applicata la suddivisione in placchette frustrate non è altro che un mapping classico di un sistema quantistico di due spin interagenti antiferromagneticamente e in campo trasverso, interagenti a loro volta con un bagno ohmico di fononi. Si ribadisce, ancora una volta, che l'interesse principale di questo lavoro non è tanto la ricerca della transizione di fase quantistica, già ben nota [DF], ma l'implementazione di algoritmi di clustering efficienti per sistemi frustrati. D'altronde, la scelta $\beta \approx N$ certamente non mappa le medie quantistiche nelle medie statistiche del modello classico equivalente, ma ci permette di analizzare un sistema con interazioni frustrate di intensità comparabile.

Dall'analisi dati presentata nel capitolo 3, sono stati osservati significativi miglioramenti per quanto riguarda i tempi di autocorrelazione, per le diverse implementazioni dell'algoritmo di Kandel & Domany. Ciò è evidente osservando i plot per i tempi t_1 in Fig. 12 e Fig. 13. In particolare, in corrispondenza dei picchi del tempo t_1 , quest'ultimo appare ridursi di valori significativi che si attestano intorno all'85%–90%. D'altra parte, osservando Fig. 10 e Fig. 11 si può vedere come in realtà le due curve dei parametri d'ordine di Ising e di percolazione non siano perfettamente sovrapposte intorno alla transizione di fase. Ciò significa che, nonostante la connettività tra spin non correlati sia stata ridotta, questa è ancora significativa ed eventualmente nuovi approcci al problema possono migliorare ulteriormente i risultati. D'altra parte, per il modello di Ising 2D completamente frustrato, esiste un algoritmo che risolve esattamente il problema e nel quale sono state scelte placchette frustrate quadrate a scacchiera [KD]. Per tale motivo, si spera si possa risolvere esattamente il problema anche per altre classi di modelli.

Allora, possibili nuovi scenari per lo studio di algoritmi di clustering per sistemi di Ising frustrati potrebbero essere i seguenti:

- A parità di placchette, risolvere le equazioni per i pesi dei grafi ad esse associati cercando di minimizzare la connettività tra spin non correlati, magari sfruttando tecniche differenti da quelle qui proposte.
- Trovare, sia fissando che variando i parametri dell'hamiltoniana, un ricoprimento in placchette che minimizzi la connettività tra spin indipendenti.

Si noti come per il primo punto, una possibilità potrebbe essere quella di studiare le equazioni per i pesi dei grafi come problema di massimo vincolato

come fatto in questo lavoro, magari trasformando la forma della funzione da massimizzare. Il secondo punto potrebbe essere affrontato cercando di aumentare il numero di spin k della placchetta. Tuttavia, si noti che facendo ciò, il numero $c_{max} = 2^{k(k-1)/2}$ di grafi (e dunque di pesi) diverrebbe presto molto maggiore rispetto al numero $s_{max} = 2^{k-1}$ di equazioni, con tempi enormi per la risoluzione e quindi per la ricerca dei pesi.

Riferimenti bibliografici

- [BIN] Binney, J. J.; Dowrick, N. J.; Fisher, A. J.; Newman, M. E. J.. *The Theory of Critical Phenomena: An Introduction to the Renormalization Group*. Clarendon Press, 1996.
- [NEW] Newman, M. E. J; Barkema G. T.. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Oxford University Press, 1999.
- [KAM] Kampen, N. G. van. *Stochastic processes in physics and chemistry*. Third Edition. North Holland, 2007.
- [G] Gore, V. K.; Jerrum, M. R. (1999-10-01). *The Swendsen–Wang Process Does Not Always Mix Rapidly*. Journal of Statistical Physics. 97 (1): 67–86.
- [CAT] Cataudella, V.; Franzese, G.; Nicodemi, M.; Scala, A.; Coniglio, A. (1994-03-07). *Critical clusters and efficient dynamics for frustrated spin models*. Physical Review Letters. 72 (10): 1541–1544.
- [CON] Coniglio, A.; di Liberto, F.; Monroy, G.; Peruggi F.. *Cluster approach to spin glasses and the frustrated-percolation problem*. Phys. Rev. B 44, 12605 (1991).
- [KD] Kandel, D; Domany, E.. *General cluster Monte Carlo dynamics*. Phys. Rev. B 43, 8539 (1991).
- [DF] De Filippis G.; de Candia A.; Mishchenko A. S.; Cangemi L. M.; Nocera A.; Mishchenko P. A.; Sassetti M.; Fazio R.; Nagaosa N.; Cataudella V.. *Quantum phase transition of many interacting spins coupled to a bosonic bath: Static and dynamical properties*. Phys. Rev. B 104, L060410 (2021).
- [NU] Nightingale M. P.; Umrigar C. J.. *Quantum Monte Carlo Methods in Physics and Chemistry*. Kluwer Academic Pub, 1999.
- [S] Sachdev S.. *Quantum Phase Transition. Second edition*. Cambridge University Press, 2011.
- [P] H. W. Press *et al.*. *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing (Second Edition)*. Cambridge University Press, 1992.
- [BUL] Bulla R; Tong N.; Vojta M.. *Numerical Renormalization Group for Bosonic Systems and Application to the Sub-Ohmic Spin-Boson Model*. Phys. Rev. Lett. 91, 170601 (2003).

- [WIN] Winter A; Rieger H; Vojta M.; Bulla R.. *Quantum Phase Transition in the Sub-Ohmic Spin-Boson Model: Quantum Monte Carlo Study with a Continuous Imaginary Time Cluster Algorithm*. Phys. Rev. Lett. 102, 030601 (2009).
- [L1] Luijten E.; Blöte H. W. J.. *Classical critical behavior of spin models with long-range interactions*. Phys. Rev. B 56, 8945 (1997).
- [L2] Luijten E.; Meßingfeld H.. *Criticality in One Dimension with Inverse Square-Law Potentials*. Phys. Rev. Lett. 86, 5305 (2001).
- [L3] Luijten E.; *Monte Carlo Simulations of Spin Models with Long-Range Interactions*. Computetr Simulation Studies in Condensed-Matter Physics XII. Springer, 2000.
- [A] Anderson P. W.; Yuval G.. *Some numerical results on the Kondo problem and the inverse square one-dimensional Ising model*. J. Phys. C: Solid State Phys. 4 607 (1971).
- [K] Kosterlitz J. M; *Phase Transitions in Long-Range Ferromagnetic Chains*. Phys. Rev. Lett. 37, 1577 (1976).