

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI GENOVA



DIPARTIMENTO DI FISICA
CURRICULUM DI FISICA TEORICA

Tesi di Laurea Magistrale

**Catena XY di spin con
condizioni al bordo frustrate**

Relatore

Dr. Niccolò Traverso Ziani
Prof. Maura Sassetti

Candidato

Daniel Sacco Shaikh

Correlatore

Prof. Riccardo Ferrando

Anno accademico 2021/2022

...alla fine è solo una catena...
— *G. Rebola*

Indice

Introduzione	6
1 Transizioni di fase e transizioni di fase quantistiche	11
1.1 Transizioni di fase	11
1.1.1 Punti critici e universalità	11
1.1.2 Fasi, confini di fase e transizioni di fase	14
1.2 <i>Classical to quantum mapping</i>	21
1.3 Transizioni di fase quantistiche	26
1.3.1 Generalità	26
1.4 Realizzazione sperimentale	29
1.4.1 Modello	29
1.4.2 Realizzazione sperimentale del modello	30
1.4.3 Le misure	31
1.5 Conclusioni	32
2 Catena XY ferromagnetica	33
2.1 Il modello	33
2.2 Soluzione esatta	35
2.3 Caso ferromagnetico	41
2.3.1 Livelli energetici	41
2.3.2 Funzione di partizione	45
2.3.3 Diagramma di fase a temperatura nulla	45
2.3.4 Funzioni di correlazione	48
3 Catena XY frustrata senza campo magnetico esterno	53
3.1 Il modello e le sue simmetrie	53
3.1.1 Parità	55
3.1.2 Traslazioni	55
3.1.3 Riflessioni	56
3.2 Soluzione esatta	57
3.3 Transizione di fase quantistica	59
3.4 Stato fondamentale	62
3.4.1 Confronto col caso non frustrato	65
3.5 Magnetizzazione	66
3.5.1 Regioni yFM e xAFM	66
3.5.2 Regione AFM	67

4	Catena di Ising frustrata	71
4.1	Il modello	71
4.2	Risultati	73
4.2.1	N pari	74
4.2.2	N dispari	75
4.3	Effetto della temperatura	76
4.4	Discussione	76
5	Catena XY frustrata	79
5.1	Il modello	79
5.2	Stato fondamentale e primi livelli eccitati	80
5.2.1	Regione $h > 1, \gamma \geq 0$	81
5.2.2	Regione $0 < h < 1, \gamma > 0$	82
5.2.3	Regione $0 < h < 1, \gamma = 0$	86
5.2.4	Regione $h = 0, \gamma \geq 0$	86
5.3	Transizioni di fase quantistiche	89
5.3.1	Caso con $h = 1$	90
5.3.2	Caso $h = 0$	90
5.3.3	Caso $0 \leq h < 1$ con $\gamma = 0$	91
5.3.4	Caso $\gamma = \sqrt{1-h}$ con $0 < h \leq 1$	92
5.3.5	Confronto col caso non frustrato	93
	Conclusioni	94
A	Dimostrazione dell'equivalenza tra modello di Ising e <i>lattice gas</i>	99
B	Argomento di Peierls	101
C	Teoria di Ginzburg-Landau	103
C.1	<i>Coarse graining</i>	103
C.2	Energia libera di Ginzburg-Landau	104
C.3	Teoria di campo medio	106
C.4	Transizione di fase continua a $B = 0$	108
C.5	Transizione di fase a $B \neq 0$	109
C.6	Punto critico	111
C.7	Bontà dell'approssimazione di campo medio	112
D	Dimostrazione Eq. (2.2.18)	113
E	Funzione di partizione del modello XY	115
F	Calcolo dei correlatori a due spin nel modello XY ferromagnetico	119
G	Proprietà degli operatori di traslazione e riflessione	123
G.1	Dimostrazione Eq.(3.1.17)	123
G.2	Dimostrazione Eq.(3.1.18)	124
G.3	Traslazione degli stati fermionici	124
G.4	Riflessione degli stati fermionici	125

H	Calcolo della magnetizzazione nelle regioni yFM, xAFM e AFM	127
H.1	Magnetizzazione ferromagnetica mesoscopica: dimostrazione	127
H.2	Calcolo della funzione di correlazione e della magnetizzazione lungo z nella regione xAFM	129
H.3	Magnetizzazione nella regione AFM: dimostrazione	130

Introduzione

La materia con la quale ci si confronta quotidianamente è costituita da numeri straordinariamente elevati di costituenti elementari. L'ordine di grandezza tipico in questo contesto è infatti fornito dal numero di Avogadro [1]. Inoltre, ogni elemento di questa moltitudine interagisce con gli altri, generando così la diversità e la complessità che caratterizzano il mondo macroscopico [2]. In questo contesto, dal punto di vista della fisica, un fenomeno appare particolarmente sorprendente: le transizioni di fase [3, 4]. Qualitativamente parlando, si ha una transizione di fase ogniqualvolta, variando di poco la temperatura, un aggregato di costituenti elementari cambia radicalmente le sue proprietà. Esempi comuni di transizioni di fase sono i passaggi di stato di aggregazione, come l'acqua che ghiaccia, le transizioni magnetiche tra stato ferromagnetico e stato paramagnetico e la transizione metallo-superconduttore. Anche i sistemi disordinati, come i vetri e i vetri di spin, esibiscono transizioni di fase - sebbene di natura più complicata [5] - la cui analisi è recentemente valsa l'assegnazione del premio Nobel a Giorgio Parisi [6].

Oltre all'interesse insito nel fatto che un sistema possa cambiare radicalmente quando è sottoposto a piccole variazioni della temperatura, ciò che risulta di grande rilevanza nelle transizioni di fase, e specialmente in quelle dette continue (o del secondo ordine) è la loro universalità [4]. Con universalità in questo contesto si intende che, in prossimità della temperatura a cui avviene la transizione, detta temperatura critica T_c , le proprietà del sistema dipendono solamente dal *range* delle interazioni, dalle simmetrie e dalla dimensionalità. Tutte le transizioni di fase possono quindi essere classificate in poche "classi di universalità" [4]. I dettagli relativi ai campioni, o la natura stessa del sistema, non appaiono invece decisivi. Ad esempio, la larghezza della regione di coesistenza tra fase liquida e fase gassosa in un diagramma densità-temperatura e la magnetizzazione di un ferromagnete, nuovamente in funzione della temperatura, hanno, intorno a T_c , lo stesso andamento: sono entrambe proporzionali a $(T - T_c)^{0.32}$ [7].

La base teorica per la comprensione di tale universalità risiede nel concetto di Gruppo di Rinormalizzazione [3], valso a Kenneth Wilson il premio Nobel, e il modello che viene impiegato maggiormente è quello di Ginzburg-Landau [4], che essenzialmente mira a dare una descrizione efficace delle fasi della materia in base a potenziali termodinamici lentamente variabili con la posizione, dipendenti solamente dalla temperatura e da parametri d'ordine locali che riflettono le simmetrie - e le loro rotture - nei vari sistemi. Ad esempio, il parametro d'ordine nella transizione ferromagnete-paramagnete è la magnetizzazione, mentre quello della transizione da metallo a superconduttore è legato alla funzione d'onda collettiva delle coppie di Cooper [8].

La classificazione delle fasi e delle transizioni tra esse che emerge dalla teoria di Ginzburg-Landau deve essere estesa, a livello quantistico, per accomodare anche

le transizioni di fase topologiche [9], nelle quali a un repentino cambiamento delle proprietà del sistema non corrisponde nessuna significativa variazione di parametri d'ordine. Anche in queste si osserva comunemente universalità [4].

Un concetto affine a quello di transizione di fase è quello di transizione di fase quantistica [10]. In questo caso, l'oggetto di studio si sposta dalla ricerca e caratterizzazione dei repentini cambiamenti che possono caratterizzare sistemi costituiti da moltissime particelle al variare della temperatura, a cambiamenti repentini dell'energia dello stato fondamentale del sistema in funzione dei parametri della Hamiltoniana. L'interesse nelle transizioni di fase quantistiche risiede nel fatto che esse possono influenzare in modo netto le proprietà dei sistemi quantistici anche a temperatura finita. Come le transizioni di fase, anche le transizioni di fase quantistiche possono essere descritte da parametri d'ordine o avere natura topologica. Transizioni di fase quantistiche sono state ad esempio inferite in sistemi bosonici in reticoli periodici [11], in funzione dell'ampiezza del potenziale periodico, e nelle fasi magnetiche dei superconduttori ad alta temperatura critica in funzione del drogaggio [12]. Nel primo caso la transizione di fase avviene tra un condensato di Bose-Einstein e un isolante di Mott, mentre nel secondo tra una fase antiferromagnetica e una paramagnetica. È opportuno notare che anche le transizioni di fase quantistiche mostrano universalità, nello stesso senso descritto precedentemente [10].

Il concetto di universalità, oltre a essere interessante per il suo contenuto fisico, è anche utile dal punto di vista metodologico. Infatti, esso implica che per indagare una determinata classe di universalità è sufficiente rifarsi a un modello, anche irrealistico, che faccia parte di tale classe. Se è quindi sempre vero che i modelli rappresentano per la fisica quello che le metafore rappresentano nella letteratura [13], per l'indagine delle transizioni di fase, anche quelle quantistiche, i modelli sono metafore decisamente calzanti. In quest'ottica, nell'ambito classico si è quindi profuso un notevole sforzo per lo studio del modello di Ising classico in due e tre dimensioni [14]. Sul versante quantistico, il modello di Ising quantistico unidimensionale in campo trasverso e più in generale le catene quantistiche di spin sono state indagate con grande dettaglio [15]. In particolare, il modello di Ising quantistico unidimensionale in campo trasverso mostra una transizione di fase quantistica continua tra una fase ferromagnetica e una paramagnetica in funzione del campo trasverso, e tale transizione di fase quantistica diventa discontinua se viene aggiunta una componente longitudinale al campo magnetico [16]. È da notare che, utilizzando il cosiddetto *Suzuki-Trotter slicing* [17], è possibile mostrare che le transizioni di fase del modello classico in due dimensioni sono in relazione uno a uno con le transizioni di fase quantistiche del modello quantistico in una dimensione.

È quindi estremamente sorprendente che il concetto di universalità nelle transizioni di fase venga recentemente messo in discussione proprio da modelli estremamente simili ai modelli di Ising classici e quantistici. Quanto discusso fino a questo punto a riguardo, infatti, trova una eccezione in un contesto che viene analizzato a partire dalla fine del 2019 [18]. Ciò che si è dimostrato è che esistono catene di spin quantistiche, su cui vengono poste condizioni periodiche al contorno e con almeno un accoppiamento antiferromagnetico, in cui il sistema è *gappato* se è costituito da un numero pari di spin, e *gapless* altrimenti. Inoltre, nel caso dispari sono presenti transizioni di fase che non sussistono nel caso pari. Le proprietà del sistema e le transizioni di fase che lo caratterizzano dipendono quindi da un dettaglio fine, violando così il principio di universalità in modo netto. L'argomentazione fisica che rende

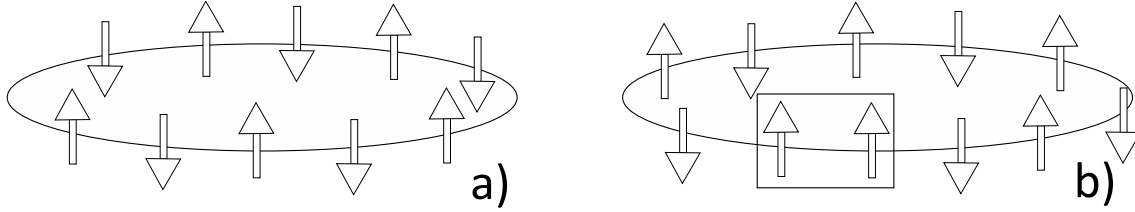


Figura 1: Schema per l'effetto pari-dispari. In a) il caso pari e in b) il caso dispari.

particolare il caso dispari è semplice ed è la seguente. Se si hanno interazioni antiferromagnetiche, condizioni periodiche al contorno, e un numero pari di spin (come in Fig. 1a), lo stato fondamentale è simile allo stato di Néel, ovvero spin su siti adiacenti sono opposti. Inoltre, nelle catene di spin di interesse, in cui l'accoppiamento è anisotropo, i livelli eccitati sono separati in energia da tale stato fondamentale da un gap. Nel caso dispari, invece, almeno un legame antiferromagnetico non è soddisfatto (si veda la Fig. 1b). Tuttavia, data l'invarianza per traslazioni del sistema, il legame non soddisfatto può trovarsi ovunque nel sistema dando luogo classicamente a un'alta degenerazione dello stato fondamentale, e quantisticamente a una banda di energie *gapless*.

Sebbene l'idea alla base del fenomeno sia semplice, dimostrare la presenza di ordini differenti nel caso pari e nel caso dispari e l'originarsi di transizioni di fase quantistiche aggiuntive è tutt'altro che immediato. A riprova di questo fatto, in letteratura è stato analizzato solamente il caso, molto particolare, di catene di spin non soggette a campi magnetici esterni. La transizione di fase quantistica è in questo caso fornita da anisotropie negli accoppiamenti tra spin.

In questa Tesi si comincia a colmare questa lacuna. Verrà infatti mostrato come il modello di Ising quantistico unidimensionale in campo trasverso mostri, nel caso di un numero dispari di spin, una transizione di fase quantistica in funzione del campo applicato che non è presente nel caso pari. Inoltre, il caso dispari è *gapless* anche a campo applicato finito mentre il caso pari è *gappato*. Successivamente, considerando l'estensione del modello di Ising nota come catena XY, si mostrerà come il punto di transizione di fase trovato in precedenza si estenda a un'intera linea nello spazio dei parametri e, ancora più sorprendentemente, si dimostrerà che la transizione di fase quantistica continua che caratterizza il modello con un numero pari di spin diventa discontinua nel caso dispari. Questa fenomenologia rappresenta, al meglio delle nostre conoscenze, un caso unico degno di ulteriore approfondimento.

Da un punto di vista più generale, questa Tesi mira ad arricchire la conoscenza della fenomenologia di queste strane transizioni di fase che emergono solamente per un numero dispari di costituenti. Il seguito della Tesi si articola in cinque capitoli.

Nel **Capitolo 1**, e nelle relative Appendici, si introducono le transizioni di fase e le transizioni di fase quantistiche. Per fare ciò, dopo una breve descrizione generale, si fa cenno al modello di Ising classico. A partire da questo, si motiva l'introduzione del funzionale di Ginzburg-Landau e se ne discute l'approssimazione di punto sella, con riferimento sia alle transizioni di fase continue, sia a quelle non continue. Si passa poi a introdurre le transizioni di fase quantistiche, prima fornendo la loro relazione con le transizioni di fase, e successivamente fornendo un esempio di realizzazione sperimentale.

Nel **Capitolo 2** si introduce la catena di spin detta modello XY, e se ne fornisce una diagonalizzazione analitica. La trattazione si basa su un *mapping* tra gli operatori di

spin e operatori fermionici detto trasformazione di Wigner-Jordan. Successivamente, ci si concentra sul caso ferromagnetico, illustrando la complessa derivazione di numerose funzioni di correlazione. Il formalismo utilizzato in questo Capitolo rappresenta la base per la trattazione dei successivi tre Capitoli, tra i quali gli ultimi due che rappresentano la parte originale della Tesi.

Nel **Capitolo 3** ci si rivolge al caso antiferromagnetico, in assenza di campo esterno. In questo contesto viene svolta una attenta analisi - non necessaria nel caso ferromagnetico - del caso con un numero dispari di spin e si mostra che il diagramma di fase è estremamente più ricco rispetto al caso pari. Esistono infatti regimi che non sono permessi nel caso pari, e addirittura una transizione di fase in più. In questo Capitolo viene quindi di fatto introdotto e discusso il fenomeno alla base di questa Tesi: la mancata universalità delle transizioni di fase rispetto a variazioni microscopiche.

Nel **Capitolo 4** sono contenuti i risultati originali riguardanti il modello di Ising antiferromagnetico in presenza di campo esterno. Si mostra che per un numero dispari di siti si ha una transizione di fase quantistica assente nel caso pari. I risultati riportati in questo Capitolo sono stati pubblicati sulla rivista Symmetry [19].

Nel **Capitolo 5** sono contenuti i risultati originali riguardanti il modello XY in presenza di campo magnetico esterno applicato. In particolare, si mostra come la frustrazione della catena da una parte induca l'esistenza di nuove transizioni di fase quantistiche e dall'altra modifichi l'ordine delle transizioni di fase già presenti nel caso non frustrato.

Infine si riportano dettagli relativi ai calcoli nelle Appendici e si delineano le Conclusioni.

Capitolo 1

Transizioni di fase e transizioni di fase quantistiche

In questo Capitolo verranno introdotte le transizioni di fase e le transizioni di fase quantistiche. Le prime sono cambiamenti repentini delle proprietà di un sistema al variare della temperatura. Esempi sono i passaggi di stato, la transizione ferromagnete-paramagnete, la transizione metallo-superconduttore e la condensazione di Bose-Einstein. I punti nello spazio dei parametri in cui avvengono tali transizioni sono detti punti di transizione di fase. Se il passaggio avviene in assenza di calore latente, allora la transizione è detta continua (torneremo sul motivo più avanti) e i punti di transizione di fase sono allora chiamati punti critici. Lo studio della fisica intorno ai punti critici ha un'enorme rilevanza nella fisica della materia condensata e qualche importante concetto verrà discusso in questo Capitolo.

Le transizioni di fase quantistiche sono invece cambiamenti repentini delle proprietà dei sistemi quantistici in funzione dei parametri della Hamiltoniana che avvengono a temperatura nulla. Esse sono in forte relazione con le transizioni di fase e sono state mostrate sperimentalmente attraverso il loro effetto a temperatura finita.

Nel Capitolo verranno introdotte, prima qualitativamente e successivamente più quantitativamente, le transizioni di fase, per poi virare alla descrizione delle transizioni di fase quantistiche. L'introduzione alle transizioni di fase è riadattato utilizzando la Ref.[7], mentre per la discussione delle transizioni di fase quantistiche i testi rilevanti verranno citati di volta in volta.

1.1 Transizioni di fase

1.1.1 Punti critici e universalità

Le transizioni di fase, che verranno definite con precisione più avanti nel Capitolo ma di cui tutti abbiamo un'idea intuitiva, hanno una proprietà davvero particolare: l'universalità. Per motivare l'interesse negli argomenti della Tesi, ho deciso di iniziare illustrando qualitativamente tale fenomeno, sebbene questa scelta imponga di menzionare concetti che verranno definiti in modo preciso soltanto in seguito.

Molti sistemi, anche apparentemente completamente differenti uno dall'altro, esibiscono lo stesso comportamento in prossimità di un punto critico di una transizione di fase nonostante la loro diversa composizione microscopica. Ciò è vero non solo qualitativamente ma anche quantitativamente! Il più celebre esempio è quello del-

l'equivalenza tra i punti critici delle transizioni di fase liquido-gas e ferromagnete-paramagnete.

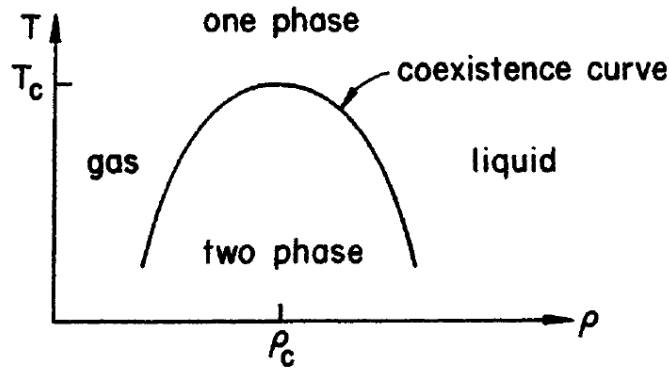


Figura 1.1: Diagramma di fase di un fluido a pressione fissata (tratto da [7]). Gli assi sono la temperatura T e la densità ρ . Dalla Figura è evidente che per $T < T_c$ non è possibile passare dalla fase gassosa a quella liquida senza attraversare un regime in cui il contenitore del fluido contenga una miscela di liquido e gas.

Dalla Figura 1.1, dove è riportato il diagramma di fase di un fluido a pressione fissata, osserviamo l'esistenza di una temperatura critica T_c al di sotto della quale se aumentiamo la densità ρ tenendo fissa la temperatura T non è possibile passare dalla fase gassosa a quella liquida senza attraversare un regime in cui il contenitore del fluido contenga una miscela di liquido e gas. La presenza di questa regione di coesistenza tra le due fasi ha interessanti conseguenze sulle proprietà termodinamiche del fluido. Al di sopra della temperatura critica è invece possibile passare con continuità da una fase all'altra. Ciò ci suggerisce una certa ambiguità nella definizione delle differenti fasi della materia, la quale verrà affrontata successivamente in questo Capitolo.

Sperimentalmente, per l'esaffluoruro di zolfo fu trovato che [20]

$$|\rho_+ - \rho_-| \propto |T - T_c|^{0.327 \pm 0.006}, \quad (1.1.1)$$

dove abbiamo denotato con $\rho_+(T) \geq \rho_c$ e $\rho_-(T) \leq \rho_c$ le densità sulla curva di coesistenza. Il numero 0.327 ± 0.006 è un esempio di esponente critico e ha la particolarità di non dipendere dal tipo di fluido che si sta considerando. Ad esempio, le misure di [21] su ${}^3\text{He}$ hanno dato un valore 0.321 ± 0.006 per l'esponente critico. L'evidenza sperimentale dell'irrazionalità di tale esponente critico fu un'importante conferma dell'erroneità del valore $\frac{1}{2}$ previsto teoricamente sulla base di ragionamenti basati sull'analisi dimensionale.

Spostiamo ora l'attenzione sul punto critico magnetico. Un magnete può essere, per esempio, pensato come costituito da un set di dipoli magnetici situati sui siti del reticolo di un cristallo. D'ora in avanti, chiameremo spin i momenti magnetici di tali dipoli. Gli spin possono interagire sia tra loro che con altri gradi di libertà del sistema (un esempio è l'interazione spin-orbita). Per semplicità, assumeremo che il sistema raggiunga, dopo un certo intervallo di tempo, l'equilibrio termodinamico. Ciò ci consente di definire una temperatura T .

Ad alte temperature e in assenza campo magnetico esterno applicato, il sistema si trova in una fase paramagnetica, cioè se concentriamo l'attenzione su un qualsiasi

spin e ne seguiamo l'evoluzione temporale, osserviamo che esso punta in tutte le direzioni con la stessa probabilità. Quindi in questa fase non esiste una direzione privilegiata e il momento magnetico e la magnetizzazione complessivi del sistema sono zero.

Si osserva che esiste una temperatura critica T_c al di sotto della quale gli spin tenderanno ad allinearsi lungo una particolare direzione, anche in assenza di campo magnetico esterno. In questo regime c'è una magnetizzazione spontanea complessiva $M(T) \neq 0$ e il sistema si trova in una fase ferromagnetica.

Il passaggio dalla regione paramagnetica a quella ferromagnetica avviene attraverso una transizione di fase continua in $T = T_c$. L'andamento della magnetizzazione in

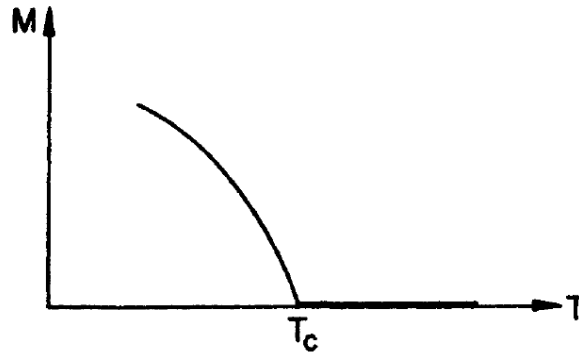


Figura 1.2: Magnetizzazione M del ferromagnete in funzione della temperatura T a campo magnetico esterno nullo. La Figura è tratta da [7].

funzione della temperatura è in Figura 1.2, dalla quale osserviamo che essa è nulla al di sopra della temperatura critica e aumenta con continuità (a partire da zero) al diminuire della temperatura al di sotto del valore critico T_c . Questo comportamento è tipico dei parametri d'ordine.

Nel sistema appena commentato, a basse temperature le interazioni tra i dipoli magnetici degli atomi del reticolo vincolano gli spin a orientarsi tutti paralleli (o antiparalleli) a una determinata direzione. In questi sistemi, detti *ferromagneti di Ising*, gli spin non possono ruotare e puntano solo lungo la particolare direzione privilegiata. L'energia di interazione tra gli spin primi vicini di un ferromagnete di Ising è minimizzata quando essi puntano nella stessa direzione. Esiste anche un'altra classe di sistemi, noti come *antiferromagneti di Ising*, nei quali l'energia di interazione tra spin primi vicini è minimizzata quando essi sono antiparalleli. Sperimentalmente, Holmes *et al.* [22] hanno misurato che nel caso dell'antiferromagnete di Ising DyAlO_3 in assenza di campo magnetico esterno e per $T \rightarrow T_c^-$ si ha

$$M \propto (T_c - T)^{0.311 \pm 0.005}. \quad (1.1.2)$$

Questo risultato vale anche nel caso ferromagnetico. Osserviamo che l'esponente critico 0.311 ± 0.005 è molto simile a quello di $|\rho_+ - \rho_-|$ del punto critico liquido-gas (Eq.(1.1.1)). Chiamiamo quindi β tale esponente e scriviamo

$$|\rho_+ - \rho_-| \propto |T - T_c|^\beta \quad M \propto (T_c - T)^\beta. \quad (1.1.3)$$

In generale, molte altre quantità osservabili hanno associato un corrispondente esponente critico. Esse possono essere di due tipi: variabili termodinamiche (come, ad

esempio, il calore specifico) oppure quantità che ci danno informazioni sulla correlazione spaziale di tali variabili. È possibile che due sistemi fisici apparentemente completamente diversi tra loro possiedano gli stessi esponenti critici. Questo è, ad esempio, il caso dei punti critici liquido-gas e ferromagnetico, i cui esponenti critici sono compatibili all'interno delle incertezze sperimentali. Fenomeni che condividono lo stesso set di esponenti critici si dicono appartenenti alla stessa *classe di universalità*. L'utilità del concetto di classe di universalità sta, in generale, nel fatto che membri della stessa classe hanno in comune solo tre cose: il gruppo di simmetria dell'Hamiltoniana, la dimensionalità e il fatto che le interazioni siano o meno a corto raggio.

L'universalità è un concetto affascinante che sta alla base della Fisica Statistica: in prossimità di punti critici appartenenti alla stessa classe di universalità tutta la memoria della fisica microscopica sottostante è lavata via! C'è quindi una singola teoria che descrive la fisica al punto critico della transizione liquido-gas, del ferromagnete di Ising e di molti altri sistemi! In generale, quando ci si avvicina allo studio di un fenomeno fisico una delle prime cose che si fa è capire quali sono i dettagli irrilevanti ai fini di comprendere la natura essenziale del fenomeno. In corrispondenza di un punto critico, la Natura fa ciò per noi!

1.1.2 Fasi, confini di fase e transizioni di fase

Lo scopo di questa Sezione è presentare una definizione più precisa di fasi e transizioni di fase. Per far ciò, è necessario riprendere preliminarmente alcuni concetti di base di meccanica statistica, i quali costituiranno la base del formalismo adottato in questa Tesi.

Elementi di base di meccanica statistica

Sia E l'energia classica che definisce il sistema fisico in esame, possiamo sempre scrivere

$$-\beta E \equiv \sum_n K_n \Theta_n, \quad (1.1.4)$$

dove:

$$\beta \equiv \frac{1}{k_B T}; \quad (1.1.5)$$

le $\{K_n\}$, dette *costanti di accoppiamento*, sono parametri esterni come temperatura, campi, parametri di interazione, ...; $\{\Theta_n\}$, detti *operatori locali*, sono combinazioni dei gradi di libertà dinamici.

Lo scopo della meccanica statistica è calcolare la funzione di partizione Z , definita da

$$Z(\mathbf{K}) \equiv \text{Tr} e^{-\beta E} \quad (1.1.6)$$

dove

$$\mathbf{K} \equiv \{K_n\} \quad (1.1.7)$$

e dove con l'operatore Tr indichiamo la somma su tutte le possibili configurazioni del set di gradi di libertà del sistema.

Conoscere Z equivale a conoscere l'energia libera di Helmholtz

$$F(\mathbf{K}) = -k_B T \log Z \quad (1.1.8)$$

nelle cui derivate $\frac{\partial F}{\partial K_n}, \frac{\partial^2 F}{\partial K_n \partial K_m}, \dots$ sono contenute tutte le informazioni sulla termodinamica del sistema in esame.

In poche parole, una transizione di fase avviene quando una quantità termodinamica che descrive il sistema cambia in maniera discontinua, perciò se $F(\mathbf{K})$ è una funzione analitica allora non ci sono transizioni di fase. Dalle (1.1.8) e (1.1.6) è evidente che $Z(\mathbf{K})$ può presentare punti di non analiticità solo se l'insieme delle configurazioni possibili su cui sommiamo è infinito. Di conseguenza, nel caso di modelli di spin (i sistemi trattati in questa Tesi) una transizione di fase vera e propria si può manifestare solo quando il numero N di siti del reticolo tende all'infinito, cioè nel limite termodinamico.

Poiché nel limite termodinamico si ha che $F \propto N$, ci converrà lavorare con

$$f(\mathbf{K}) \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{F(\mathbf{K})}{N} \quad (1.1.9)$$

ai fini di definire e studiare fasi e transizioni di fase.

Il formalismo introdotto in questa Sezione è classico, tuttavia la sua estensione al caso quantistico è immediata. Dall'energia classica (Eq. (1.1.4)) si passa alla Hamiltoniana quantistica

$$-\beta \hat{H} \equiv \sum_n K_n \hat{\Theta}_n, \quad (1.1.10)$$

dove si osservi che i gradi di libertà dinamici sono ora operatori quantistici.

La funzione di partizione nel caso quantistico diventa

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}} = \sum_{\{|\alpha\rangle\}} \langle \alpha | e^{-\beta \hat{H}} | \alpha \rangle, \quad (1.1.11)$$

dove \hat{H} è l'Hamiltoniana quantistica mentre $\{|\alpha\rangle\}$ è una qualsiasi base dello spazio degli stati (si ricordi che la traccia di un operatore è indipendente dalla scelta della base).

La definizione classica dell'energia libera (Eq. (1.1.8)) si estende inalterata al caso quantistico.

Definizione di fase

Consideriamo un sistema la cui energia contiene D costanti di accoppiamento. Il diagramma di fase ha quindi dimensione D e assi K_1, K_2, \dots, K_D . In termini delle costanti di accoppiamento, f è analitica quasi su tutto il dominio: i possibili luoghi geometrici di non-analiticità sono punti, linee, piani, iperpiani, etc. nel diagramma di fase.

Sia D_s la dimensione di un generico luogo di singolarità, definiamo sua *codimensione* come

$$C \equiv D - D_s \quad (1.1.12)$$

Chiamiamo *fasi* le regioni di analiticità per f e *confini di fase* i luoghi singolari (nello spazio delle costanti di accoppiamento) di codimensione $C = 1$. Luoghi di codimensione $C > 1$ non possono essere confini tra fasi: si pensi, ad esempio, allo spazio delle costanti di accoppiamento come a una stanza ($D = 3$); è evidente che per separare due fasi differenti nella stanza sono necessari dei piani ($D_s = 2$).

La definizione di fase appena data ci può risultare un po' ambigua: ad esempio, dal diagramma di fase liquido-gas-solido (mostrato in Figura 1.3) osserviamo che è

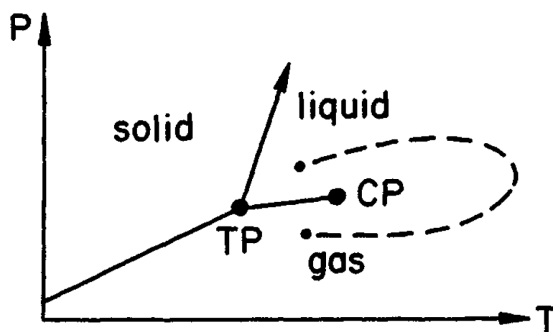


Figura 1.3: Diagramma di fase tipico di una sostanza sul piano p, T (pressione-temperatura), tratto da [7]. TP e CP sono, rispettivamente, il punto triplo e quello critico (entrambi hanno codimensione $C = 2$). Il confine tra fase solida e liquida si estende fino a pressioni arbitrariamente alte, a differenza di quello tra gli stati liquido e gassoso, che termina nel punto critico. La curva tratteggiata rappresenta un percorso sul diagramma di fase che porta da stato liquido a gassoso senza incontrare alcuna transizione di fase.

possibile scegliere un percorso sul piano p, T che porti da stato liquido a gassoso senza oltrepassare alcun confine di fase, cioè senza il manifestarsi di alcuna discontinuità nelle quantità termodinamiche. Questo è il riflesso del fatto che gli stati liquido e gassoso possiedono le stesse simmetrie. Al contrario, si osservi dalla Figura 1.3 che non è possibile passare da stato liquido a solido senza una transizione di fase. In termini di simmetrie, la distinzione tra queste due fasi è figlia del fatto che lo stato solido ha un numero inferiore di gradi di simmetria rispetto allo stato liquido.

Per ricapitolare, secondo la definizione di fase che abbiamo dato, liquido e gas sono parte della stessa fase di materia. L'unica situazione in cui è possibile distinguere senza ambiguità un liquido da un gas è quando siamo in prossimità del luogo di singolarità che ha come estremi il punto triplo e quello critico. Nella vita di tutti i giorni, la temperatura e la pressione sono molto distanti dai punti critici, di conseguenza ci viene naturale parlare di fase liquida e fase gassosa.

La definizione di fase basata sulle porzioni dello spazio delle costanti di accoppiamento delimitate da luoghi geometrici di non-analiticità della funzione di partizione è matematicamente ineccepibile, ma ha un contenuto fisico non del tutto trasparente. Per ovviare a questo problema, Landau propose una classificazione delle fasi della materia basata sulle simmetrie: fasi differenti sono caratterizzate da diverse simmetrie. Le due definizioni di fase sono compatibili in quanto si osserva che fasi della materia con differenti simmetrie risultano sempre essere separate da una transizione di fase¹. Intuitivamente, il motivo è che non si può cambiare la simmetria in modo continuo, cioè una simmetria o è presente o è assente. Ad esempio, nel passaggio da fase liquida a fase solida c'è una rottura delle simmetrie continue di traslazione e rotazione (le quali diventano discrete), di conseguenza un liquido e un solido sono sempre separati da una transizione di fase. Al contrario, la linea di transizione di fase tra un liquido e un gas può fermarsi al punto critico proprio perché liquido e gas possiedono le stesse simmetrie.

Una volta definito cosa si intende per fase, bisogna affrontare il problema della classificazione delle transizioni tra le fasi.

¹Non è necessariamente vero invece il contrario[9].

Classificazione delle transizioni di fase

Nel 1933 Ehrenfest propose una classificazione secondo la quale una transizione di fase può essere classificata come “dell’ n -esimo ordine” se esiste almeno una derivata n -esima dell’energia libera rispetto a una costante di accoppiamento con una discontinuità a salto in corrispondenza della transizione di fase. Sebbene la classificazione di Ehrenfest contenga l’idea giusta per cominciare a spiegare l’universalità che caratterizza le transizioni di fase e sia ancora comunemente utilizzata, essa non è completa. Il primo esempio di transizione di fase non compatibile con tale classificazione fu quella del modello di Ising 2d in assenza di campo magnetico esterno, che fu risolto esattamente da Onsager nel 1944 [23]. Tale modello è particolarmente rilevante perché è il primo modello microscopico risolto esattamente che presenti una transizione di fase. In questo modello si ha infatti che il calore specifico non presenta una semplice discontinuità a salto alla temperatura critica (come era previsto dalle teorie di campo medio) bensì una divergenza logaritmica. La ragione del fallimento della classificazione di Ehrenfest è dovuta all’inesattezza delle teorie di campo medio, che introdurremo nelle prossime sezioni.

La moderna classificazione delle transizioni di fase definisce due possibili scenari²

1. Almeno una tra le derivate prime $\{\frac{\partial f}{\partial K_i}\}_{i=1,\dots,D}$ è discontinua presso un confine di fase. In questo caso si parla di *transizioni di fase del primo ordine*.
2. Tutte le $\frac{\partial f}{\partial K_i}$ sono continue su tutto lo spazio \mathbf{K} e si verifica un comportamento singolare (discontinuità o divergenza) in derivate di ordine superiore. In questo caso si parla di *transizioni di fase continue*.

Per proseguire, è utile discutere brevemente il modello di Ising, per capire come “funzionino” le transizioni di fase.

Il modello di Ising classico

Il modello di Ising è probabilmente il più noto e studiato modello della meccanica statistica.

La sua importanza è alimentata dal fatto che questo modello non è utile solamente per il magnetismo o in virtù dell’universalità, infatti esso, nella sua formulazione microscopica, può descrivere il cosiddetto *lattice gas* (come mostrato in Appendice A) e moltissimi altri modelli, sia in ambito fisico che in ambito sociale ed economico, possono essere mappati sul modello di Ising.

La sua versione unidimensionale è il più semplice dei *modelli integrabili*, i quali hanno un ruolo di fondamentale importanza in meccanica statistica. Prima di focalizzare l’attenzione su questo modello, spendiamo qualche parola sul ruolo dei modelli in Fisica, dove esistono sostanzialmente due modi in cui questi vengono utilizzati per la descrizione di un fenomeno. Il primo è il metodo “tradizionale”, che consiste nel costruire una rappresentazione più fedele possibile del sistema fisico in esame, la quale include quindi il maggior numero possibile di dettagli. In questa metodologia, quando una teoria non è in grado di spiegare i risultati sperimentali si effettua un *fine-tuning* dei parametri del modello, aggiungendo, se necessario, nuovi parametri. Un esempio di branca della scienza in cui si adotta questo modo di procedere è la chimica quantistica. Tuttavia, non sempre i dettagli microscopici sono necessari a

²L’energia libera è continua per motivi di stabilità termodinamica.

descrivere il particolare fenomeno fisico al quale si è interessati. Questo è il caso della fisica statistica, dove il modo di approcciarsi alla spiegazione teorica di un fenomeno è costruire un modello minimale, ossia un modello che catturi la fisica essenziale nel modo più semplice ed efficace possibile, utilizzando il minor numero possibile di parametri e costanti fenomenologiche. Questa seconda metodologia è ovviamente legata al concetto di universalità introdotto nella Sezione 1.1.1.

Il modello di Ising fu studiato per la prima volta da Lenz e Ising nel 1925 come modello per un magnete (ferro o antiferro) su un reticolo.

Consideriamo un reticolo ipercubico in dimensione d i cui siti sono enumerati da un indice $i = 1, \dots, N$. Sul sito reticolare i -esimo è situata una variabile classica $S_i = \pm 1$, che è uno degli N gradi di libertà dinamici del modello. Il numero complessivo di configurazioni diverse che può assumere il sistema è quindi 2^N . Gli spin interagiscono con un campo magnetico esterno B_i (a priori diverso da sito a sito) e tra loro attraverso interazioni di intensità J_{ij} , K_{ijk}, \dots rispettivamente a due, tre, ... spin. L'energia più generale che possiamo scrivere con le interazioni appena enunciate è la seguente

$$E = \sum_{i,j=1}^N J_{ij} S_i S_j - \sum_{i=1}^N B_i S_i + \sum_{i,j,k=1}^N K_{ijk} S_i S_j S_k + \dots \quad (1.1.13)$$

dove le costanti di accoppiamento hanno le dimensioni di un'energia.

La fisica di questo modello è ricchissima, e per introdurre le transizione di fase è possibile limitarsi a considerare la seguente energia di Ising

$$E = J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - B \sum_{i=1}^N S_i, \quad (1.1.14)$$

dove con la notazione $\langle ij \rangle$ indichiamo che i siti i e j sono primi vicini. Nella (1.1.14) abbiamo assunto che il campo magnetico esterno B sia uniforme nello spazio e che l'unica interazione tra spin sia quella tra primi vicini e abbia un'intensità J uniforme nello spazio.

Definiamo la *magnetizzazione media* come

$$M \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle S_i \rangle, \quad (1.1.15)$$

dove

$$\langle S_i \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} \{ S_i e^{-\beta E} \}, \quad (1.1.16)$$

con Z la funzione di partizione.

A partire dall'energia libera

$$F(T, B, J) = -\frac{1}{\beta} \log \text{Tr} e^{-\beta E} \quad (1.1.17)$$

è facile verificare che

$$M = -\frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial B} = -\frac{\partial f_N}{\partial B}, \quad (1.1.18)$$

dove si è definita l'energia libera per sito

$$f_N \equiv \frac{F}{N} \quad (1.1.19)$$

La funzione di partizione del modello è

$$Z(T, B, J) = \sum_{n=1}^{2^N} e^{-\beta E_n}, \quad (1.1.20)$$

dove con E_n è stata denotata l'energia della configurazione n -esima. Dalla (1.1.14) segue che $E_n(T, B, J)$ è una funzione analitica nelle costanti di accoppiamento, di conseguenza anche $Z(T, B, J)$, a N finito e $T > 0$, lo è. Ritroviamo quindi che possiamo avere transizioni di fase a temperatura finita solo nel limite termodinamico ($N \rightarrow \infty$).

Diagramma di fase: una considerazione intuitiva

Una delle tecniche più utili per ricavare il diagramma di fase di un determinato sistema è il cosiddetto *energy-entropy argument*, il quale ha origine dalla definizione di energia libera di Helmholtz

$$F \equiv U - TS, \quad (1.1.21)$$

dove U ed S sono, rispettivamente, l'energia e l'entropia del sistema.

Il ragionamento, il quale si basa sul fatto che dal secondo principio della termodinamica segue che l'energia libera di Helmholtz è minimizzata all'equilibrio termodinamico, è il seguente: ad alte temperature, l'energia libera è minimizzata massimizzando l'entropia mentre a temperature sufficientemente basse U domina su TS e, di conseguenza, l'energia libera è minimizzata minimizzando l'energia. Se gli stati macroscopici del sistema ottenuti in questi due limiti di temperatura hanno simmetrie diverse, allora concludiamo che esiste almeno una temperatura intermedia alla quale è avvenuta una transizione di fase.

Diagramma di fase a $T > 0$ e $B = 0$ in $d \geq 2$

Si può mostrare che il modello di Ising unidimensionale in assenza di campo magnetico esterno non presenta transizioni di fase a temperatura finita. Infatti, utilizzando, ad esempio, l'*energy-entropy argument* si può dimostrare che a $T > 0$ in $d = 1$ le fluttuazioni termiche distruggono completamente l'ordine (ferromagnetico) a lungo raggio presente a $T = 0$.

Nel 1936 Peierls [24] dimostrò che il modello di Ising ferromagnetico in due o più dimensioni in assenza di campo magnetico esterno presenta un regime di bassa temperatura in cui la magnetizzazione spontanea è non nulla. Dato che ad alte temperature il sistema è disordinato (paramagnetico), deve esistere una temperatura critica alla quale avviene una transizione di fase.

Incominciamo col considerare il caso in dimensione $d = 2$ (dato che il ragionamento si estenderà facilmente al caso in dimensione generica $d \geq 2$), dove, per comodità, etichetteremo ogni sito reticolare con una coppia di interi (i, j) con $i = 1, \dots, N_x$ e $j = 1, \dots, N_y$.

L'energia che definisce il modello è quindi scritta come

$$E = J \sum_{i,j} (S_{i,j} S_{i+1,j} + S_{i,j} S_{i,j+1}), \quad (1.1.22)$$

dove $J < 0$ e dove, per semplicità, abbiamo imposto condizioni periodiche al contorno

$$S_{i, N_y+1} = S_{i,1} \quad S_{N_x+1, j} = S_{1, j}. \quad (1.1.23)$$

L'argomento proposto da Peierls, che è riportato in Appendice B, dimostra l'esistenza di una temperatura critica finita $T_c > 0$ in corrispondenza della quale il modello di Ising bidimensionale esibisce una transizione di fase, passando da una fase ferromagnetica ordinata (a $T < T_c$) a una paramagnetica (a $T > T_c$). Dal ragionamento in dimensione $d = 2$, riportato in Appendice B, è evidente che esso si possa estendere inalterato anche al caso $d > 2$. In conclusione, per $0 < T < T_c$ il modello di Ising bidimensionale in assenza di campo magnetico esterno esibisce una magnetizzazione spontanea $M(T) \neq 0$ (che, essendo in assenza di campo magnetico esterno, può essere sia positiva che negativa) mentre per $T > T_c$ si ha che le fluttuazioni termiche distruggono l'ordine e il sistema si trova in una fase paramagnetica, dove $M(T) = 0$ (Figura 1.4).

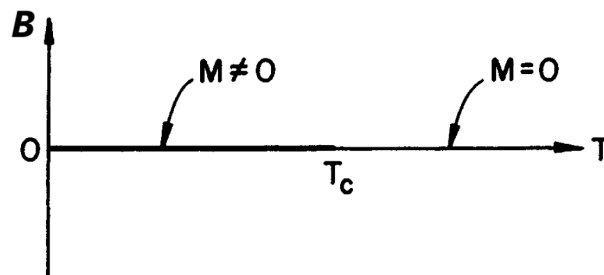


Figura 1.4: Diagramma di fase del modello di Ising ferromagnetico 2d, tratto da [7].

Se partiamo da $T = 0$ e alziamo la temperatura, il valore della magnetizzazione decrescerà a causa dell'azione delle fluttuazioni termiche che, diventando sempre più importanti, renderanno il sistema sempre più disordinato fino a distruggere completamente l'ordine ferromagnetico alla temperatura critica T_c . Un andamento qualitativo della magnetizzazione spontanea in funzione della temperatura è riportato in Figura 1.5.

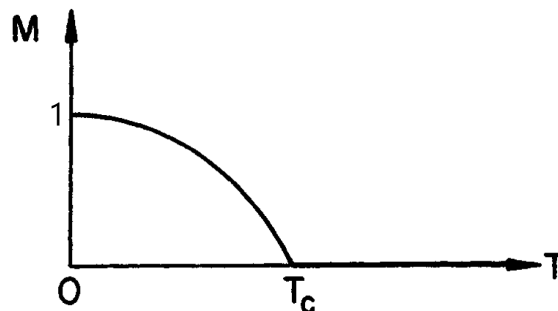


Figura 1.5: Grafico della magnetizzazione spontanea M in funzione della temperatura T , tratto da [7].

In conclusione, questo paragrafo abbiamo dimostrato che modello di Ising in dimensionalità $d \geq 2$ è caratterizzato dalla presenza di una transizione di fase³. La soluzione esatta di tale modello fornisce quindi uno strumento utilissimo per lo studio delle transizioni di fase. Considerata però la complessità di tale soluzione, spesso si intraprende una strada diversa, ovvero quella del *coarse graining* e, quindi,

³Nel caso unidimensionale e a temperatura finita tale transizione di fase è invece assente in quanto le fluttuazioni termiche distruggono la fase ordinata.

della teoria di Ginzburg-Landau, che è riportata in Appendice C. I tratti salienti di tale teoria sono la definizione di una teoria di campo per il calcolo della funzione di partizione. La quantità che rappresenta il campo è il parametro d'ordine locale a cui si è accennato, ovvero la magnetizzazione nel caso in esame. La forma del funzionale è determinata dalle simmetrie del sistema fisico e rende conto quindi dell'universalità delle transizioni di fase.

Dal momento che la Tesi si concentra su fenomeni relativi allo stato fondamentale di un sistema quantistico, è lecito chiedersi il senso di una introduzione alle transizioni di fase. Il motivo è che le transizioni di fase quantistiche e quelle classiche possono essere messe in relazione tra loro. Le considerazioni sviluppate fino a questo momento possono essere quindi tradotte nel contesto della Tesi. Nella prossima Sezione forniamo un esempio di tale *mapping*, e successivamente le transizioni di fase quantistiche verranno introdotte in maggior dettaglio.

1.2 Classical to quantum mapping

Si mostra in questa Sezione, attraverso il caso paradigmatico del modello di Ising, come le transizioni di fase classiche in d dimensioni siano legate alle transizioni di fase quantistiche in $d - 1$ dimensioni [17].

Esempio⁴: modello di Ising $2d$

Consideriamo il modello di Ising $2d$ classico in presenza di un campo magnetico esterno uniforme H e definito su un reticolo quadrato avente un numero totale $N = N_x \times N_y$ di siti, dove N_x è il numero di righe del reticolo, mentre N_y il numero di colonne. Indicheremo con J_x e J_y le costanti di accoppiamento tra spin primi vicini, rispettivamente, verticali e orizzontali. Infine, per semplicità, imporremo condizioni periodiche al contorno. Il modello appena definito è descritto dalla seguente energia:

$$E = - \sum_{i,j} (J_x \sigma_{i,j} \sigma_{i+1,j} + J_y \sigma_{i,j} \sigma_{i,j+1}) - H \sum_{i,j} \sigma_{i,j} \quad (1.2.1)$$

con

$$\sigma_{N_x+1,j} = \sigma_{1,j} \quad \sigma_{i,N_y+1} = \sigma_{i,1}. \quad (1.2.2)$$

In meccanica statistica, l'oggetto di maggiore interesse è la funzione di partizione del sistema, data da

$$Z = \sum_{\{\sigma_{i,j}\}} e^{-\beta E(\{\sigma_{i,j}\})}. \quad (1.2.3)$$

Per comodità futura (che sarà presto chiara), denotiamo la configurazione degli spin sulla j -esima colonna del reticolo con

$$\sigma_A^j \equiv (\sigma_{1,j}, \dots, \sigma_{N_x,j}), \quad (1.2.4)$$

dove il pedice $A = 1, \dots, 2^{N_x}$ ci ricorda che per ogni colonna ho 2^{N_x} configurazioni possibili.

⁴La principale referenza utilizzata per la trattazione di questo esempio è [25].

Sarà utile rappresentare σ_A^j con un vettore colonna di $\mathbb{R}^{2^{N_x}}$, che denoteremo con $|\sigma_A^j\rangle$ e che sceglieremo in modo tale che

$$\langle \sigma_A^j | \sigma_B^{j'} \rangle = \delta_{A,B} \quad j, j' = 1, \dots, N_y. \quad (1.2.5)$$

Quindi, per ogni j fissato ne rappresento l'insieme delle configurazioni possibili con una base ortonormale di $\mathbb{R}^{2^{N_x}}$. Per semplicità, sceglieremo la base canonica di $\mathbb{R}^{2^{N_x}}$. Si dimostra che la seguente matrice $2^{N_x} \times 2^{N_x}$

$$\langle \sigma_{A_{j+1}}^{j+1} | T | \sigma_{A_j}^j \rangle \equiv \exp \left\{ \beta \sum_{i=1}^{N_x} [J_y \sigma_{i,j} \sigma_{i,j+1} + \frac{J_x}{2} (\sigma_{i,j} \sigma_{i+1,j} + \sigma_{i,j+1} \sigma_{i+1,j+1}) + \frac{H}{2} (\sigma_{i,j} + \sigma_{i,j+1})] \right\} \quad (1.2.6)$$

soddisfa

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{A_1=1}^{2^{N_x}} \dots \sum_{A_{N_y}=1}^{2^{N_x}} \langle \sigma_{A_1}^1 | T | \sigma_{A_{N_y}}^{N_y} \rangle \langle \sigma_{A_{N_y}}^{N_y} | T | \sigma_{A_{N_y-1}}^{N_y-1} \rangle \dots \langle \sigma_{A_2}^2 | T | \sigma_{A_1}^1 \rangle = \\ &= \sum_{A_1=1}^{2^{N_x}} \langle \sigma_{A_1}^1 | T^{N_y} | \sigma_{A_1}^1 \rangle = \text{Tr} \{ T^{N_y} \} \end{aligned} \quad (1.2.7)$$

dove, affinché valga la prima uguaglianza, sono cruciali le condizioni al bordo periodiche mentre nella seconda uguaglianza si utilizza la relazione di completezza

$$\sum_A |\sigma_A^j\rangle \langle \sigma_A^j| = \mathbb{1}_{2^{N_x}}. \quad (1.2.8)$$

Una matrice T che soddisfa una relazione come la (1.2.7) è detta matrice di trasferimento. Dalla (1.2.6) osserviamo che essa è reale, positiva e simmetrica (e quindi diagonalizzabile).

Osserviamo che la matrice T , essendo reale e simmetrica, è diagonalizzabile per il teorema spettrale. Ciò significa che esiste una matrice ortogonale $U \in O(2^{N_x})$ tale che

$$UTU^T = \text{diag}\{\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_{2^{N_x}-1}\} \quad \lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_{2^{N_x}-1} \in \mathbb{R}. \quad (1.2.9)$$

Quindi

$$Z = \text{Tr} \{ TU^T UT \dots TU^T U \} = \text{Tr} \{ \text{diag}^{N_y} \{ \lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_{2^{N_x}-1} \} \} = \sum_{k=0}^{2^{N_x}-1} \lambda_k^{N_y}. \quad (1.2.10)$$

Dalla positività di T segue, per il teorema di Perron-Frobenius, che tra i suoi autovalori ne esista uno (che identificheremo con λ_0) positivo e maggiore del modulo di tutti gli altri autovalori. Quindi, nel limite termodinamico, la funzione di partizione è semplicemente

$$Z \sim \lambda_0^{N_y}, \quad (1.2.11)$$

da cui segue che l'energia libera vale

$$F = -\frac{N_y}{\beta} \log \lambda_0. \quad (1.2.12)$$

Tipicamente si definisce

$$\beta E_0 \equiv -\log \lambda_0. \quad (1.2.13)$$

in modo da poter scrivere l'energia libera nel limite termodinamico così:

$$F = N_y E_0. \quad (1.2.14)$$

Ora interpretiamo le configurazioni classiche⁵ σ^j come stati quantistici $|\sigma^j\rangle_Q$ di una catena di spin quantistica. In particolare, $|\sigma^j\rangle_Q$ è definito così:

$$2\hat{S}_i^z |\sigma^j\rangle_Q \equiv \sigma_{i,j} |\sigma^j\rangle_Q, \quad (1.2.15)$$

dove \hat{S}_i^z sono le componenti z degli operatori di spin $\hat{\mathbf{S}}_i$, definiti dalla seguente algebra

$$[\hat{S}_j^\alpha, \hat{S}_k^\beta] = i\epsilon^{\alpha\beta\gamma} \hat{S}_j^\gamma \delta_{jk}, \quad (1.2.16)$$

dove $\alpha, \beta, \gamma = x, y, z$ e $j, k = 1, \dots, N_y$.

La (1.2.15) ci permette di scrivere

$$|\sigma^j\rangle_Q = |\sigma_{1,j}, \sigma_{2,j}, \dots, \sigma_{N_x,j}\rangle_Q. \quad (1.2.17)$$

D'ora in avanti, sceglieremo la seguente rappresentazione

$$\sigma_i^z |\sigma^j\rangle_Q \equiv \sigma_{i,j} |\sigma^j\rangle_Q, \quad (1.2.18)$$

dove

$$\sigma_i^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad i = 1, \dots, N_x \quad (1.2.19)$$

e

$$\{|\sigma_{i,j}\rangle_Q\} = \{|+1\rangle_Q, |-1\rangle_Q\} \rightarrow \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}. \quad (1.2.20)$$

L'idea che ci spinge a fare questa identificazione tra stati classici e quantistici è trovare un operatore quantistico \hat{T}_Q tale che

$$\text{Tr}\{T^{N_y}\} = \text{Tr}\{\hat{T}_Q^{N_y}\}. \quad (1.2.21)$$

Questo operatore, nella rappresentazione scelta, è rappresentato dalla seguente matrice:

$$T_Q = \underbrace{e^{\frac{\beta}{2} \sum_{i=1}^{N_x} (J_x \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z)}}_L \underbrace{\prod_{i=1}^{N_x} (e^{\beta J_y} \mathbb{1}_2 + e^{-\beta J_y} \sigma_i^x)}_C \underbrace{e^{\frac{\beta}{2} \sum_{i=1}^{N_x} (J_x \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z)}}_R. \quad (1.2.22)$$

Dimostrazione. Dimostriamo che quello appena scritto è l'operatore che cercavamo. Osserviamo che:

⁵D'ora in avanti ometterò il pedice A per alleggerire la notazione.

- $R|\sigma^j\rangle_Q = e^{\frac{\beta}{2}\sum_{i=1}^N x(J_x\sigma_{i,j}\sigma_{i+1,j}+h\sigma_{i,j})}|\sigma^j\rangle_Q$;
- ${}_Q\langle\sigma^{j+1}|L = e^{\frac{\beta}{2}\sum_{i=1}^N x(J_x\sigma_{i,j+1}\sigma_{i+1,j+1}+h\sigma_{i,j+1})}{}_Q\langle\sigma^{j+1}|$;
- infine

$$\begin{aligned} {}_Q\langle\sigma^{j+1}|\prod_{i=1}^{N_x}(e^{\beta J_y}\mathbb{1}_2 + e^{-\beta J_y}\sigma_i^x)|\sigma^j\rangle_Q &= ({}_Q\langle\sigma_{1,j+1}| \otimes {}_Q\langle\sigma_{2,j+1}| \otimes \dots \otimes {}_Q\langle\sigma_{N_x,j+1}|) \times \\ &\times \prod_{i=1}^{N_x}(e^{\beta J_y}\mathbb{1}_2 + e^{-\beta J_y}\sigma_i^x) \times \\ &\times (|\sigma_{1,j+1}\rangle_Q \otimes |\sigma_{2,j+1}\rangle_Q \otimes \dots \otimes |\sigma_{N_x,j+1}\rangle_Q) \end{aligned}$$

dove è sufficiente interessarsi a studiare:

$${}_Q\langle\sigma_{i,j+1}|(e^{\beta J_y}\mathbb{1}_2 + e^{-\beta J_y}\sigma_i^x)|\sigma_{i,j}\rangle_Q = \begin{cases} e^{\beta J_y} & \text{se } \sigma_{i,j+1} = \sigma_{i,j} \\ e^{-\beta J_y} & \text{se } \sigma_{i,j+1} \neq \sigma_{i,j} \end{cases} = e^{\beta J_y\sigma_{i,j+1}\sigma_{i,j}}.$$

Mettendo assieme i tre pezzi soprastanti si ha che

$${}_Q\langle\sigma^{j+1}|\hat{T}_Q|\sigma^j\rangle_Q = \langle\sigma^{j+1}|T|\sigma^j\rangle,$$

che implica

$$Z = \text{Tr}\{T^{N_y}\} = \text{Tr}\{\hat{T}_Q^{N_y}\},$$

come volevasi dimostrare.

Saremmo tentati di scrivere \hat{T}_Q come

$$\hat{T}_Q \sim e^{-\beta\hat{H}_Q}, \quad (1.2.23)$$

dove \hat{H}_Q è un'Hamiltoniana efficace quantistica. Per far ciò iniziamo con lo scrivere C come esponenziale di matrice. Per farlo, partiamo dalla seguente nota identità che coinvolge le matrici di Pauli

$$e^{a\sigma^x} = \cosh(a)\mathbb{1}_2 + \sinh(a)\sigma^x \quad a \in \mathbb{R} \quad (1.2.24)$$

e definiamo

$$\begin{cases} e^{\beta J_y} \equiv C \cosh(a) \\ e^{-\beta J_y} \equiv C \sinh(a) \end{cases} \quad (1.2.25)$$

che implica

$$\begin{cases} \tanh(a) = e^{-2\beta J_y} \\ C^2 = e^{2\beta J_y} - e^{-2\beta J_y} = \frac{\cosh(a)}{\sinh(a)} - \frac{\sinh(a)}{\cosh(a)} = \frac{2}{\sinh(2a)}. \end{cases} \quad (1.2.26)$$

Segue che

$$e^{a\sigma^x} = \frac{1}{C}(e^{\beta J_y}\mathbb{1}_2 + e^{-\beta J_y}\sigma^x), \quad (1.2.27)$$

pertanto

$$T_Q = C^{N_x} L e^{a \sum_{i=1}^{N_x} \sigma_i^x} R = C^{N_x} e^{\frac{\beta}{2} \sum_{i=1}^{N_x} (J_x \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z)} e^{a \sum_{i=1}^{N_x} \sigma_i^x} e^{\frac{\beta}{2} \sum_{i=1}^{N_x} (J_x \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z)}. \quad (1.2.28)$$

Ora, in modo da riuscire a scrivere T_Q come in (1.2.23), ci mettiamo nel limite di forte anisotropia, cioè

$$\begin{cases} \beta J_x \simeq \epsilon J \\ \beta H \simeq \epsilon H_{\parallel} \\ \tanh(a) = e^{-2\beta J_y} \simeq \tanh(\epsilon H_{\perp}) \Rightarrow \beta J_y \simeq -\frac{1}{2} \log(\epsilon H_{\perp}) \end{cases} \quad (1.2.29)$$

dove $\epsilon \ll 1$ e dove il motivo dei nomi dei pedici di H sarà presto ovvio. Si osservi che, in questo limite, ho due couplings piccoli (J_x e H) e uno grande (J_y). Il vantaggio computazionale dell'esserci messi in questo limite si apprezza immediatamente una volta che si considera il prodotto

$$e^{\epsilon \hat{X}} e^{\epsilon \hat{Y}} = e^{\epsilon(\hat{X} + \hat{Y}) + \frac{1}{2} \epsilon^2 [\hat{X}, \hat{Y}] + \mathcal{O}(\epsilon^3)} \simeq e^{\epsilon(\hat{X} + \hat{Y})} e^{\frac{1}{2} \epsilon^2 [\hat{X}, \hat{Y}]} + \mathcal{O}(\epsilon^3) \quad (1.2.30)$$

dove \hat{X} e \hat{Y} sono due qualsiasi operatori e dove, nella seconda uguaglianza, si è sfruttato il fatto che $\epsilon \ll 1$. Dunque, se ci fermiamo all'ordine $\mathcal{O}(\epsilon)$ nella (1.2.28), possiamo scrivere

$$T_Q \simeq C^{N_x} e^{\epsilon \sum_{i=1}^{N_x} (J \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z + H_{\parallel} \sigma_i^z + H_{\perp} \sigma_i^x)} \equiv C^{N_x} e^{-\epsilon H_Q}, \quad (1.2.31)$$

dove abbiamo definito

$$H_Q \equiv -J \sum_{i=1}^{N_x} \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - H_{\parallel} \sum_{i=1}^{N_x} \sigma_i^z - H_{\perp} \sum_{i=1}^{N_x} \sigma_i^x, \quad (1.2.32)$$

che è l'Hamiltoniana del modello di Ising 1D quantistico in un campo magnetico trasverso H_{\perp} . Si osservi che, rispetto al modello classico di partenza, abbiamo perso una dimensione (y) e preso una variabile non commutante (σ^x).

Finalmente possiamo quindi scrivere

$$Z = \text{Tr}\{T^{N_y}\} = \text{Tr}\{\hat{T}_Q^{N_y}\} = C^N \text{Tr}\{e^{-N_y \epsilon \hat{H}_Q}\}. \quad (1.2.33)$$

Per ricapitolare, abbiamo identificato la traccia della matrice T^{N_y} nella traccia di un operatore quantistico $\hat{T}_Q^{N_y}$, che abbiamo espresso come esponenziale di un'Hamiltoniana efficace quantistica \hat{H}_Q di una catena di spin in una dimensione in meno rispetto al problema classico da cui siamo partiti.

A questo punto cerchiamo di legare le proprietà della catena di spin quantistica con quelle del modello di spin classico di partenza.

Anzitutto osserviamo che

$$H_Q = \sum_{i=1}^{N_y} H_i \quad \text{dove} \quad H_i = -J \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - H_{\parallel} \sigma_i^z - H_{\perp} \sigma_i^x \quad (1.2.34)$$

da cui osserviamo che poiché $[H_i, H_j] = 0$ e le $\{H_i\}$ hanno stesso spettro, allora lo stato fondamentale di H ha energia

$$E_0 \equiv N_y \epsilon_0 \quad (1.2.35)$$

dove abbiamo denotato con ϵ_0 l'energia dello stato fondamentale di H_i .

Dunque

$$Z = C^N \text{Tr} \left\{ e^{-N_y \epsilon \hat{H}_Q} \right\} = C^N \sum_i e^{-N_y \epsilon E_i}, \quad (1.2.36)$$

dove nella seconda uguaglianza è stato utilizzato il fatto che la traccia di un operatore è indipendente dalla scelta della base sulla quale lo si rappresenta.

Nel limite termodinamico ($N_y \rightarrow \infty$) si ha che

$$Z \sim C^N e^{-N_y \epsilon E_0} = C^N e^{-N \epsilon \epsilon_0}, \quad (1.2.37)$$

da cui l'energia libera per sito vale

$$f = -\frac{\log(C)}{\beta} + \frac{\epsilon \epsilon_0}{\beta} \quad (1.2.38)$$

Da questa equazione osserviamo che le eventuali transizioni di fase possono nascere esclusivamente da non analiticità di ϵ_0 rispetto ai parametri dell'Hamiltoniana quantistica \hat{H}_Q . Quando si ha non analiticità del ground state E_0 di \hat{H}_Q rispetto a uno dei suoi parametri abbiamo una transizione di fase quantistica. Abbiamo quindi trovato un collegamento tra le transizioni di fase del modello classico di partenza e le transizioni di fase quantistiche del modello quantistico in cui abbiamo mappato quello classico tramite il metodo della matrice di trasferimento.

Si può calcolare che lo stato fondamentale quantistico E_0 presenta non analiticità in corrispondenza di $J = h_\perp$. Sia $\beta_c(J_x, J_y)$ la temperatura alla quale si ha la transizione di fase, si ricava che il suo andamento in funzione dell'anisotropia $\frac{J_x}{J_y}$ è quello della curva rossa nel grafico in Figura 1.6. In teoria, avendo ricavato l'andamento di $\beta_c(\frac{J_x}{J_y})$ esclusivamente in regime di forte anisotropia (dove $\frac{J_x}{J_y} \ll 1$), non potremmo fidarci di tutto il grafico (in rosso) in Figura 1.6, tuttavia, come si può osservare sempre nella stessa Figura, la soluzione da noi trovata coincide (miracolosamente) praticamente esattamente con l'andamento $\beta_c(\frac{J_x}{J_y})$ ricavabile dalla soluzione esatta del modello di Ising classico 2d proposta da Onsager. Di conseguenza, i risultati trovati in approssimazione di forte anisotropia hanno in realtà valenza generale!

1.3 Transizioni di fase quantistiche

1.3.1 Generalità

Il fenomeno alla base di quanto scritto nelle Sezioni precedenti, come detto, è la tendenza dei sistemi all'equilibrio alla minimizzazione dell'energia libera F . Tale quantità possiede una struttura composita: la relazione $F = U - TS$ suggerisce che lo stato più favorevole per il sistema sia dato, a temperatura fissata, dal compromesso tra la minimizzazione dell'energia interna e la massimizzazione dell'entropia. A basse temperature, la minimizzazione dell'energia domina lo scenario, mentre ad alte temperature gli effetti entropici diventano più rilevanti. Alcuni sistemi, quelli che esibiscono transizioni di fase per l'appunto, a una data temperatura passano in modo repentino da uno stato ordinato in cui domina la minimizzazione dell'energia a uno disordinato dominato dall'entropia. Tale paradigma si applica sia a sistemi in

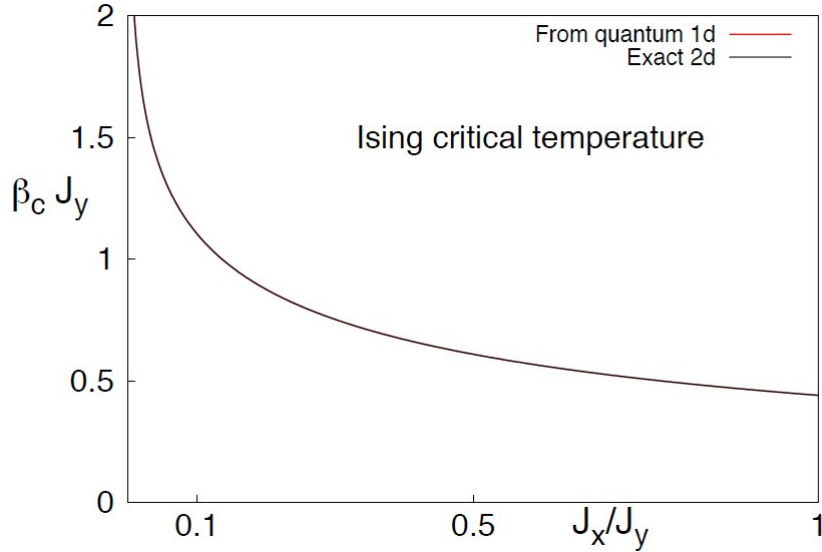


Figura 1.6: Grafico dell'accoppiamento critico $\beta_c J_y$ in funzione dell'anisotropia $\frac{J_x}{J_y}$. Il grafico in rosso è quello ricavato dallo studio del modello quantistico $1d$ in cui abbiamo mappato il modello classico di partenza, mentre il grafico in nero è ricavato dalla soluzione esatta di Onsager del modello di Ising $2d$. La Figura è tratta da [25].

cui i gradi di libertà rilevanti siano classici, sia al caso in cui si abbia a che fare con situazioni eminentemente quantistiche.

Nel caso quantistico, tuttavia, esiste anche una controparte di tale scenario che avviene a temperatura nulla. L'energia dello stato fondamentale di un sistema quantistico a molti corpi può non essere analitica rispetto ai parametri della Hamiltoniana. Quando questo avviene, si dice che il sistema presenta una transizione di fase quantistica [10].

Per essere più precisi, si supponga che un sistema di N particelle, o analogamente, un sistema reticolare che consti di N siti, sia descritto da una Hamiltoniana $H(g)$ dipendente dal parametro g . A tale Hamiltoniana è associata una energia $E(g)$ dello stato fondamentale. Lo stato fondamentale può indifferentemente essere o meno degenerare. Si ha una transizione di fase quantistica di ordine n se la derivata n -esima di $E(g)$ rispetto al parametro g presenta una discontinuità o una divergenza che sopravvive nel limite $N \rightarrow \infty$. La discontinuità (o il prefattore della divergenza) devono dunque essere almeno di ordine zero in N . Questa definizione è dovuta alla necessità di includere tra le transizioni di fase quantistiche le così dette *boundary phase transitions* [10, 26].

Senza perdere eccessivamente in generalità, si può pensare che la Hamiltoniana sia della forma $H(g) = H_0 + gV^6$. In questo caso la analogia tra transizioni di fase e transizioni di fase quantistiche appare evidente: come la temperatura aumenta la rilevanza dell'entropia, l'aumentare di g aumenta la rilevanza di V nel determinare lo stato fondamentale. In effetti, in numerosi contesti è stato dimostrato che le transizioni di fase di modelli reticolari in D dimensioni possono essere messe in relazione biunivoca con le transizioni di fase quantistiche [17] in modelli reticolari in $D - 1$

⁶Sono da escludere, in quanto banali, i casi in cui H_0 e V commutino tra loro.

dimensioni⁷. Tutte le metodologie presentate nelle Sezioni precedenti sono quindi riutilizzabili per l'analisi delle transizioni di fase quantistiche!

Esiste però un'obiezione forte all'idea di transizione di fase quantistica: avvenendo essa a temperatura nulla, dal momento che afferisce allo stato fondamentale, come può essa influenzare misure sperimentali?

La risposta è solitamente - ma non sempre - la seguente [10]: le transizioni di fase quantistiche segnano, così come le transizioni di fase, il passaggio tra stati con proprietà estremamente diverse. A bassa temperatura le proprietà del sistema assomigliano a quelle del sistema a temperatura nulla, e quindi mostrano anche esse una variazione rapida intorno al valore di g corrispondente alla transizione di fase quantistica. Talvolta a questa variazione si accompagna la presenza di una linea di transizione di fase, mentre a volte il comportamento a temperatura finita è analitico. L'attenzione è quindi rivolta alle transizioni di fase quantistiche perché esse forniscono indicazioni forti della presenza di fenomeni fisici interessanti, che vanno successivamente indagati attraverso il calcolo delle funzioni di risposta o di altre proprietà del sistema.

Per convincersi di quanto detto fino ad ora, è utile menzionare due transizioni di fase quantistiche estremamente famose, che hanno formato l'intuizione riguardante i sistemi elettronici [26]: le transizioni metallo-isolante indotte dal disordine o dalle interazioni. Nel primo caso, detto transizione di Anderson, si ha una transizione di fase quantistica all'aumentare del disordine presente in un cristallo che, in assenza di disordine, sia un metallo. Nel secondo caso, bande energetiche metalliche diventano *gappate* a causa delle interazioni tra gli elettroni. Altri esempi di transizione di fase quantistica dovuti all'interazione elettronica sono la cristallizzazione di Wigner in una dimensione e la formazione delle diverse fasi relative all'effetto Hall quantistico. Una menzione particolare riguarda le transizioni di fase quantistiche relative al magnetismo. Da un lato, è utile ricordare che la superconduttività ad alta temperatura critica è interconnessa a numerose transizioni di fase magnetiche che avvengono al variare della concentrazione di sostituzioni reticolari nei cuprati. Ad esempio il composto $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, che diventa un superconduttore ad alta temperatura critica per $x=0.12$, ha una transizione di fase probabilmente legata alla comparsa di superconduttività già a $x=0.05$; la transizione avviene tra una fase antiferromagnetica e una paramagnetica. Dall'altro, esiste un intero campo di studio che si occupa delle transizioni di fase quantistiche nei modelli unidimensionali di spin [15]. Questo campo di ricerca, all'interno del quale si iscrive anche questa Tesi, è interessante per diversi motivi. Il primo è puramente teorico: molti dei modelli di magnetismo in una dimensione ammettono una soluzione esatta, cosa più unica che rara per i modelli quantistici interagenti, e quindi rappresentano una grande opportunità per la comprensione di fenomeni più complessi. La seconda è che esistono materiali magnetici fortemente anisotropi che sono descritti da tali modelli. Un esempio in questo senso è il composto LiHoF_4 [26]. La terza motivazione è che tali modelli possono essere realizzati sperimentalmente utilizzando gas di atomi o ioni confinati attraverso l'applicazione di laser [27]. Questa tecnica verrà brevemente descritta nella prossima Sezione in relazione ad un esempio di dimostrazione sperimentale di una transizione di fase quantistica. Alternativamente tali sistemi possono essere

⁷Questo fatto si riferisce a transizioni di fase in cui l'esponente critico dinamico sia uguale a uno [26]. Inoltre è da notare che non tutte le transizioni di fase quantistiche hanno analogo classico: non è così ad esempio per quelle topologiche [26].

realizzati all'interno di matrici di diamante [28]. Quest'ultimo punto ha permesso, in connessione con la possibilità di avere soluzioni esatte, di avere accesso a fasi della materia del tutto nuove, come i cosiddetti *time crystals* [29], di rivoluzionare la nostra comprensione del fenomeno della termalizzazione in meccanica quantistica [30], e di realizzare sperimentalmente il concetto della *many body localization* [31], che ha un enorme potenziale nel campo delle tecnologie quantistiche. Lo studio delle transizioni di fase nelle catene di spin quantistiche unidimensionali è quindi tutt'altro che un esercizio matematico.

Per concludere la presentazione delle transizioni di fase quantistiche, nella prossima Sezione verrà brevemente esposto il primo esperimento in cui si sia dimostrata in modo del tutto convincente una transizione di fase quantistica per mezzo di atomi intrappolati attraverso laser.

1.4 Realizzazione sperimentale

Dal punto di vista degli esperimenti, una delle più convincenti prove dell'esistenza di una transizione di fase quantistica è stata ottenuta da Markus Greiner, Olaf Mandel, Tilman Esslinger, Theodor W. Haensch e Immanuel Bloch nel 2002 [32]. In questa Sezione verranno raccontati gli aspetti salienti del loro esperimento. Dal momento che essa è autoconsistente rispetto al resto della Tesi, i simboli qui utilizzati sono, per maggiore chiarezza, quelli dell'articolo originale (nonché quelli utilizzati usualmente nel campo). Un punto va menzionato prima di cominciare: nell'articolo non viene mai menzionata la temperatura a cui vengono svolte le misure. Si fa invece l'affermazione che non sono mai visibili popolazioni relative a eccitazioni termiche.

1.4.1 Modello

Il punto di partenza per il disegno dell'esperimento è il modello di Hubbard bosonico tridimensionale. Vedremo nella prossima Sezione come venga realizzato sperimentalmente. La Hamiltoniana di tale sistema è

$$H_u = -J \sum_{\langle i,j \rangle} a_i^\dagger a_j + \sum_i \epsilon_i a_i^\dagger a_i + \frac{U}{2} \sum_i n_i(n_i - 1). \quad (1.4.1)$$

Si tratta quindi di un modello reticolare, con $\langle i, j \rangle$ che indicizzano siti primi vicini, e il reticolo in esame è cubico. J parametrizza la probabilità di saltare tra siti primi vicini, a_j è l'operatore di distruzione bosonico associato al sito j , U è l'energia di interazione, e si è posto $n_i = a_i^\dagger a_i$ (operatore numero di occupazione associato all' i -esimo sito). Infine, ϵ_i è un potenziale di singola particella dipendente dalla posizione i . Anche se non esplicito dalla Hamiltoniana, il numero di siti verrà denotato nel seguito con M . Crucialmente, assumeremo che il numero totale di bosoni sia uguale al numero di siti.

Detto a parole, il sistema è costituito da bosoni spinless che possono muoversi su un reticolo con "facilità" J . Per occupare uno stesso sito, il costo energetico è pari all'energia U . Il carattere a lungo raggio dell'interazione non è qui incluso poiché non sussiste nel sistema analizzato nell'esperimento. In aggiunta a questi due elementi, si tiene aperta la possibilità di aggiungere un potenziale esterno dipendente dal sito parametrizzato da ϵ_i .

La fenomenologia di questo modello è la seguente.

Per $\epsilon_i = 0$ e $U = 0$, il sistema non è altro che un gas di bosoni liberi che si muove su un reticolo. Come è noto, tale sistema a basse temperature realizza un condensato di Bose-Einstein (BEC). Lo stato fondamentale $|GSb\rangle$ in questo regime è dato da

$$|GSb\rangle \propto \left(\sum_{i=1}^M a_i^\dagger \right)^M |0\rangle, \quad (1.4.2)$$

con $|0\rangle$ lo stato di vuoto dei bosoni. Ogni bosone è quindi delocalizzato su tutto il reticolo, e il numero di bosoni per sito può fluttuare fortemente. Inoltre, il sistema dei bosoni in questo regime è caratterizzato da una forte coerenza di fase. Infine, è utile dire che le eccitazioni rispetto allo stato fondamentale sono *gapless*. Le caratteristiche delineate si estendono, sempre mantenendo $\epsilon_i = 0$, a U non-nullo e fino a un valore critico che verrà discusso a breve.

Per $\epsilon_i = 0$ e $J = 0$, dal momento che il numero di bosoni è uguale al numero di siti, i bosoni tendono a disporsi uno per sito. Non vi è quindi più coerenza di fase, ma coerenza nell'occupazione dei siti. Lo stato fondamentale $|GSm\rangle$ in questo regime è

$$|GSm\rangle \propto \prod_i^M a_i^\dagger |0\rangle. \quad (1.4.3)$$

In questo regime, le eccitazioni hanno un *gap* di grandezza U rispetto allo stato fondamentale. Il sistema in questo regime realizza un così detto isolante di Mott (MI). Le caratteristiche delineate si estendono, sempre mantenendo $\epsilon_i = 0$, a J non-nullo e fino a un valore critico che verrà discusso a breve.

Il punto di passaggio tra BEC e MI si verifica, a temperatura nulla e per $\epsilon_i = 0$, in modo drastico, come transizione di fase del secondo ordine, in corrispondenza di $U = 5.8zJ$, con z numero di coordinazione del reticolo.

L'ultimo punto da discutere per comprendere l'esperimento è il ruolo di ϵ_i nel regime di MI. In questo caso, se due siti adiacenti hanno ϵ che differiscono per più di U , allora può diventare energeticamente favorevole occupare doppiamente il sito con ϵ minore rispetto all'occupazione con un singolo bosone di ciascuno dei due siti. Si ottiene così uno stato significativamente diverso da $|GSm\rangle$.

1.4.2 Realizzazione sperimentale del modello

Il modo in cui la transizione descritta nel paragrafo precedente viene realizzata sperimentalmente è paradigmatica per la simulazione di un gran numero di modelli integrabili [27]. L'idea è intrappolare atomi o ioni, attraverso campi elettromagnetici, in una piccola regione di spazio, e raffreddarli a temperature prossime allo zero assoluto. La tecnica utilizzata nel caso specifico va sotto il nome di *Forced radio-frequency evaporation*. Successivamente, si può modulare l'interazione tra i vari componenti attraverso le cosiddette risonanze di Feshbach. Infine, utilizzando laser opportunamente disposti spazialmente, si può creare un potenziale periodico di forma essenzialmente arbitraria a cui gli atomi siano soggetti. Si possono dunque generare con grande precisione simulatori analogici di modelli quantistici interagenti

su reticolo.

Le tecniche per osservare lo stato quantistico che caratterizza il sistema quantistico interagente creato sono molteplici. Quella di maggior interesse per questa discussione è la spettroscopia in assorbimento dopo un tempo di volo. Questa tecnica consiste nello spegnere tutti i potenziali di confinamento e lasciar cadere gli atomi precedentemente intrappolati. Durante la loro caduta, si utilizza luce di frequenza opportuna per fare spettroscopia in assorbimento e ottenere così informazioni sulla distribuzione spaziale e nello spazio dei momenti.

Più specificamente, nell'esperimento in esame si genera un condensato di Bose-Einstein senza eccitazioni nel sistema (e quindi prossimo allo zero assoluto) con atomi di Rubidio 87 polarizzati in spin, aventi momento angolare $J = 2$ e componente z del momento angolare $m = 2$ (in unità di $\hbar/2$). Il condensato consta di $2 \cdot 10^5$ atomi. Tre laser contro-propaganti sono successivamente impiegati per creare un reticolo cubico con passo reticolare di 852 nm . L'accensione di tale potenziale periodico, come tutte le operazioni di preparazione del sistema, è adiabatica. L'ampiezza dei laser contro-propaganti determina l'ampiezza del potenziale periodico e quindi regola il parametro J . Maggiore è l'ampiezza del potenziale, minore è il J corrispondente. Una volta scelto lo stato di spin degli atomi, U risulta fissato. La transizione di fase quantistica si ottiene quindi variando l'ampiezza dei laser che generano il potenziale periodico.

1.4.3 Le misure

Discutiamo ora le misure presentate nell'articolo, che sono essenzialmente tre.

1) Si prepara il sistema portandolo ad avere una determinata profondità del potenziale periodico e si misura l'assorbimento dopo un tempo di volo. Si ripete la misura per diversi valori della profondità di tale potenziale. Finché gli atomi formano un condensato è visibile un forte picco di assorbimento. Tale picco è corredato da picchi secondari se il potenziale periodico è significativamente non nullo. Quando il sistema entra nella fase di isolante di Mott, il forte picco scompare e lascia spazio a una figura incoerente. La transizione avviene in modo drastico, in accordo con la presenza di una transizione di fase. Questo effetto è mostrato in Fig. 1.7.

2) Si prepara il sistema nella fase di condensato, lo si porta nella fase di isolante di Mott, e lo si riporta in quella di condensato. Si effettua poi la stessa misura del punto precedente. Questa procedura serve a dimostrare la possibilità sperimentale di poter ottenere la transizione di fase quantistica nel verso opposto al caso precedente, e a mostrare che anche lo stato di isolante di Mott è uno stato puro. Si mostra nell'articolo che l'esito di tale procedura è positivo.

3) Infine, si porta il sistema nella fase di isolante di Mott e si introduce il termine ϵ_i in modo che sia favorita la doppia occupazione dei siti. Così facendo, come discusso sopra, lo stato fondamentale del sistema non è più quello proprio dell'isolante di Mott, che ha un solo atomo per sito. A questo punto si diminuisce l'ampiezza del potenziale periodico per tornare nella fase superfluida, ma adesso ci si aspetta che il sistema non torni nello stato fondamentale e quindi mostri figure di assorbimento diverse da quelle del punto 1), ammesso che la differenza tra i potenziali su siti vicini

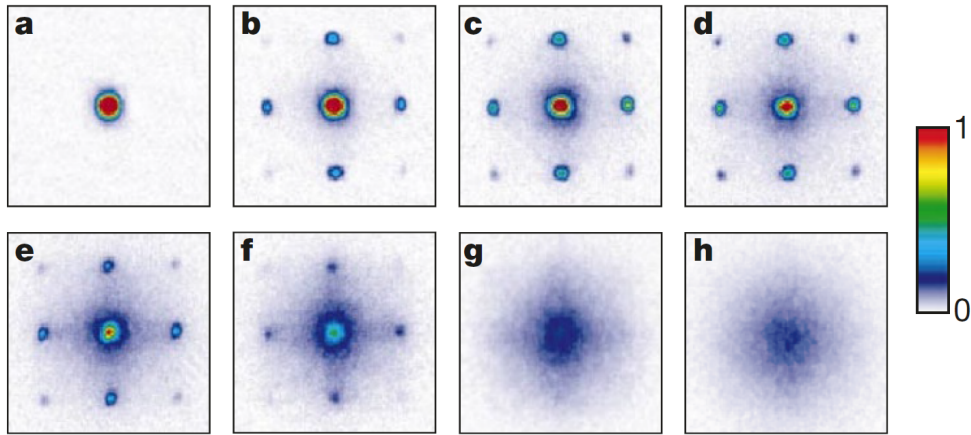


Figura 1.7: Figure di assorbimento dopo tempo di volo all'aumentare dell'intensità del potenziale periodico. Si vede chiaramente il passaggio da un picco molto marcato, tipico del condensato di Bose-Einstein, a una struttura più diffusa, attesa per l'isolante di Mott. La figura è tratta da [32].

ecceda U . Questo fatto risulta in effetti sperimentalmente verificato, come mostrato in Fig. 1.8.

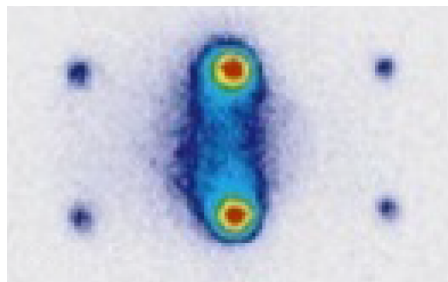


Figura 1.8: Figure di assorbimento dopo tempo di volo relative alla procedura descritta nel punto 3). Si nota chiaramente che la figura è molto diversa da Fig. 1.7(a) e che quindi lo stato non si trova nello stato fondamentale del condensato di Bose Einstein. La scala colore è la stessa di Fig. 1.7. La figura è tratta da [32].

1.5 Conclusioni

In questo Capitolo si è fornita una introduzione alle transizioni di fase, sia del primo che del secondo ordine. Lo si è fatto sia in modo fenomenologico sia utilizzando il modello di Ising. Successivamente si è discusso il concetto di transizione di fase quantistica in termini generali e si è descritto un esperimento in cui si è osservata sperimentalmente una tale transizione di fase. La trattazione è tenuta volontariamente a livello relativamente qualitativo, tralasciando quindi aspetti importanti nel campo come lo *scaling*, il gruppo di rinormalizzazione, e la formalizzazione dell'analogia tra transizione di fase e transizioni di fase quantistiche.

Capitolo 2

Catena XY ferromagnetica

Lo scopo di questo Capitolo è introdurre la catena XY in campo magnetico trasverso, diagonalizzarne esattamente la Hamiltoniana, e discuterne il diagramma di fase nel caso ferromagnetico. Il motivo per cui viene scelto proprio tale sistema è che esso rappresenta il più semplice modello con transizioni di fase quantistiche che presenti altresì diverse fasi ordinate, fatto che giocherà un ruolo importante nel seguito della Tesi. Il contenuto di questo Capitolo non è originale.

Nelle prime due sezioni introdurremo il modello che descrive la catena XY mostrando che esso, con condizioni periodiche al contorno, si può ricondurre a un problema di fermioni liberi. Ricaveremo quindi tale modello di fermioni liberi. La procedura che verrà adottata si basa sulla trasformazione di Wigner-Jordan, che implementa un *mapping* tra operatori di spin e operatori fermionici. Gli aspetti non banali di questa trasformazione sono molteplici: essa è non locale e rompe esplicitamente l'invarianza per traslazioni. Inoltre, il sistema fermionico che corrisponde alla catena XY descrive un superconduttore (topologico), e quindi parte della trattazione sarà analoga a quella relativa alla teoria BCS.

Nella restante parte del Capitolo ci interesseremo esclusivamente al caso più studiato in letteratura, quello ferromagnetico. Ricaveremo i livelli energetici, mostrando come lo stato fondamentale passi da essere due volte, degenerare a bassi campi applicati, a essere non degenerare, a campi più alti. Mostreremo poi, attraverso il calcolo della funzione di partizione, che il sistema a temperatura finita non presenta transizioni di fase. Le considerazioni fatte ci permetteranno quindi di tracciare il diagramma di fase quantistico. Infine discuteremo brevemente le funzioni di correlazione. Lo scopo di tale calcolo è duplice: da un lato permetterà di approfondire la comprensione del diagramma di fase, e dall'altro ci imporrà di descrivere le tecniche che saranno necessarie nel seguito della Tesi. La base per la trattazione svolta in questo Capitolo è rappresentata dalla Ref.[15] e dalle referenze in essa indicate.

2.1 Il modello

La catena XY è un modello di spin quantistico caratterizzato dalla Hamiltoniana

$$H = J \sum_{j=1}^N [(1 + \gamma) S_j^x S_{j+1}^x + (1 - \gamma) S_j^y S_{j+1}^y + h S_j^z]. \quad (2.1.1)$$

Qui, j indicizza i siti reticolari, N è la numerosità di tali siti, S_j^α con $\alpha = x, y, z$ sono gli operatori di spin sul j -esimo sito, per spin $1/2$ e direzione α , definiti dalle

regole di commutazione

$$[S_j^\alpha, S_k^\beta] = i\epsilon^{\alpha\beta\gamma} S_j^\gamma \delta_{jk}, \quad (2.1.2)$$

con $\epsilon^{\alpha\beta\gamma}$ il simbolo di Levi-Civita. Inoltre, il parametro reale J , che fornisce la scala di energia naturale, distingue il carattere ferromagnetico ($J < 0$) o antiferromagnetico ($J > 0$) del modello per piccoli γ , γ parametrizza l'anisotropia tra gli accoppiamenti tra spin e h è un parametro adimensionato gioca il ruolo di campo magnetico esterno. Imponiamo infine condizioni periodiche al contorno (PBC), ovvero

$$S_{N+1}^\alpha = S_1^\alpha. \quad (2.1.3)$$

Il modello contiene come sottocasi il modello XX, che si ottiene per $\gamma = h = 0$, e il modello di Ising unidimensionale in campo trasverso ($\gamma = 1$), il più famoso e usato modello integrabile, il quale sarà oggetto di analisi nel Capitolo 4.

Per analizzare il modello è, in primo luogo, utile scegliere una base dello spazio di Hilbert di singolo sito a cui riferirsi. Qui impiegheremo la base $\{|\uparrow_j\rangle, |\downarrow_j\rangle\}$ per lo spazio di Hilbert relativo al sito j -esimo, definita da ($\hbar = 1$)

$$S_j^z |\uparrow_j\rangle \equiv \frac{1}{2} |\uparrow_j\rangle \quad S_j^z |\downarrow_j\rangle \equiv -\frac{1}{2} |\downarrow_j\rangle \quad \langle \uparrow_i | \uparrow_j \rangle = \langle \downarrow_i | \downarrow_j \rangle = \delta_{ij}, \quad (2.1.4)$$

in modo tale da poter rappresentare

$$S_j^\alpha \rightarrow \frac{\sigma_j^\alpha}{2} \quad \alpha = x, y, z, \quad (2.1.5)$$

dove con σ_j^α denoteremo le matrici di Pauli definite sul sito j .

La scelta di base effettuata ci permette di scrivere

$$H = \frac{J}{2} \sum_{j=1}^N \left[\left(\frac{1+\gamma}{2} \right) \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \left(\frac{1-\gamma}{2} \right) \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y + h \sigma_j^z \right]. \quad (2.1.6)$$

Questa forma sarà la base delle analisi svolte nella Tesi.

Per ricapitolare, la (2.1.6) descrive un anello di N spin che interagiscono tra loro sul piano xy e con un campo magnetico h lungo z . Le interazioni tra spin sono, in generale, anisotrope e tale anisotropia è controllata dal parametro γ . J è un parametro con le dimensioni di un'energia e discrimina tra accoppiamento ferromagnetico e antiferromagnetico.

Per ridurre lo spazio dei parametri da studiare, osserviamo che:

- mandare γ in $-\gamma$ equivale a effettuare una rotazione di $\frac{\pi}{2}$ nel piano xy degli spin, cioè $\sigma_j^{x(y)} \rightarrow \sigma_j^{y(x)}$;
- mandare h in $-h$ equivale a effettuare una riflessione rispetto al piano xy degli spin, ossia è analogo a $\sigma_j^z \rightarrow -\sigma_j^z$.

Queste simmetrie del modello dicono che, per studiare la (2.1.6), è sufficiente interessarsi alla regione $h, \gamma \geq 0$. D'ora in avanti, salvo indicazione contraria, ci limiteremo quindi a questa regione nello spazio dei parametri.

2.2 Soluzione esatta

Per risolvere il modello, ci piacerebbe mapparlo in uno equivalente di particelle bosoniche o fermioniche. Volendo raggiungere una soluzione esatta, il mapping su bosoni non sembra promettente, in quanto la dimensione dello spazio di Hilbert dei bosoni risulta infinito su ogni singolo sito reticolare, mentre quello degli spin ha dimensione due. Proviamo quindi a mappare il modello (2.1.6) di partenza in uno di fermioni spinless ψ_j , definiti dalle regole di commutazione

$$\{\psi_i, \psi_j^\dagger\} = \delta_{ij}\mathbb{1} \quad \{\psi_i, \psi_j\} = 0. \quad (2.2.1)$$

Sia \mathcal{H} lo spazio di Hilbert su cui è definita la Hamiltoniana XY. Esso può essere scritto come

$$\mathcal{H} = \bigotimes_{j=1}^N \mathcal{H}_j, \quad (2.2.2)$$

dove \mathcal{H}_j è lo spazio di Hilbert relativo al sito j -esimo, di dimensione 2. Sia $\{|0\rangle_j, |1\rangle_j\}$ la base ortonormale di \mathcal{H}_j definita da

$$\psi_j |0\rangle_j \equiv 0 \quad \psi_j^\dagger |0\rangle_j \equiv |1\rangle_j \quad \psi_j |1\rangle_j \equiv |0\rangle_j \quad \psi_j^\dagger |1\rangle_j \equiv 0, \quad (2.2.3)$$

per la quale scegliamo la seguente rappresentazione

$$|0\rangle_j \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_j \quad |1\rangle_j \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_j. \quad (2.2.4)$$

Seguono quindi le relazioni

$$\psi_j \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}_j = \sigma_j^+ \quad \psi_j^\dagger \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_j = \sigma_j^-, \quad (2.2.5)$$

dove

$$\sigma_j^\pm \equiv \frac{\sigma_j^x \pm i\sigma_j^y}{2}. \quad (2.2.6)$$

Il ragionamento appena fatto ci spingerebbe a definire la trasformazione

$$\sigma_j^+ \equiv \psi_j \quad j = 1, \dots, N,$$

che tuttavia non è corretta, dal momento che porta all'assurdo

$$0 \neq [\psi_i, \psi_{j \neq i}^\dagger] = [\sigma_i^+, \sigma_{j \neq i}^-] = 0.$$

Per fare in modo di rispettare le regole di commutazione tra siti diversi bisogna quindi raffinare la trasformazione appena ipotizzata con un termine non locale. La trasformazione corretta è

$$\sigma_j^+ \equiv \exp\left\{i\pi \sum_{l=1}^{j-1} \psi_l^\dagger \psi_l\right\} \psi_j \quad j = 1, \dots, N, \quad (2.2.7)$$

che è detta *trasformazione di Wigner-Jordan*.

Utilizzando

$$[\sigma_j^+, \sigma_j^-] = \sigma_j^z, \quad (2.2.8)$$

si ha che

$$\sigma_j^z = \left[e^{i\pi \sum_{l=1}^{j-1} \psi_l^\dagger \psi_l} \psi_j, \psi_j^\dagger e^{-i\pi \sum_{l=1}^{j-1} \psi_l^\dagger \psi_l} \right] = [\psi_j, \psi_j^\dagger] = \mathbb{1} - 2\psi_j^\dagger \psi_j. \quad (2.2.9)$$

D'altra parte, osserviamo che

$$\exp\left\{-i\pi \psi_j^\dagger \psi_j\right\} = \exp\left\{-i\pi \left(\frac{\mathbb{1} - \sigma_j^z}{2}\right)\right\} = e^{-i\frac{\pi}{2}\mathbb{1} + i\frac{\pi}{2}\sigma_j^z} = e^{-i\frac{\pi}{2}\mathbb{1}} e^{i\frac{\pi}{2}\sigma_j^z} = \quad (2.2.10)$$

$$= (e^{-i\frac{\pi}{2}}\mathbb{1}) \left[\mathbb{1} \cos\left(\frac{\pi}{2}\right) + i\sigma_j^z \sin\left(\frac{\pi}{2}\right) \right] = -i[i\sigma_j^z] = \sigma_j^z, \quad (2.2.11)$$

dove abbiamo utilizzato la relazione

$$\exp\left\{\frac{i\alpha\sigma^z}{2}\right\} = \mathbb{1}_2 \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) + i\sigma^z \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \quad \alpha \in \mathbb{R}. \quad (2.2.12)$$

Per ricapitolare, la trasformazione di Wigner-Jordan si può riscrivere come

$$\begin{cases} \sigma_j^+ \equiv \exp\left\{i\pi \sum_{l<j} \psi_l^\dagger \psi_l\right\} \psi_j = \bigotimes_{l=1}^{j-1} (\mathbb{1} - 2\psi_l^\dagger \psi_l) \psi_j \\ \sigma_j^- = \psi_j^\dagger \exp\left\{-i\pi \sum_{l<j} \psi_l^\dagger \psi_l\right\} = \psi_j^\dagger \bigotimes_{l=1}^{j-1} (\mathbb{1} - 2\psi_l^\dagger \psi_l) \\ \sigma_j^z = \mathbb{1} - 2\psi_j^\dagger \psi_j \end{cases} \quad j = 1, \dots, N. \quad (2.2.13)$$

Dal punto di vista qualitativo, la trasformazione di Wigner-Jordan si può presentare nel seguente modo: dal momento che lo spazio di Hilbert dei singoli siti nelle catene di spin 1/2 ha la stessa dimensione di quello di fermioni spinless, si può tentare una identificazione. Per farlo si associano gli operatori scaletta con gli operatori di creazione e distruzione fermionici. La matrice di Pauli non presente negli operatori scaletta viene quindi scritta in termini del numero di fermioni. Si ha tuttavia una correzione da fare: gli spin su siti diversi commutano, mentre i fermioni anti-commutano. È quindi necessario inserire una stringa non locale per completare la trasformazione.

Per proseguire, esprimiamo l'Hamiltoniana in termini di σ_j^\pm, σ_j^z in modo da poterla scrivere, successivamente, in termini dei fermioni di Wigner-Jordan ψ_j . Invertendo la (2.2.6) si ha

$$\sigma_j^x = \sigma_j^+ + \sigma_j^- \quad \sigma_j^y = -i(\sigma_j^+ - \sigma_j^-), \quad (2.2.14)$$

da cui

$$\sigma_j^x \sigma_{j+1}^x = \sigma_j^+ \sigma_{j+1}^+ + \sigma_j^+ \sigma_{j+1}^- + \sigma_j^- \sigma_{j+1}^+ + \sigma_j^- \sigma_{j+1}^- \quad (2.2.15)$$

$$\sigma_j^y \sigma_{j+1}^y = -\sigma_j^+ \sigma_{j+1}^+ + \sigma_j^+ \sigma_{j+1}^- + \sigma_j^- \sigma_{j+1}^+ - \sigma_j^- \sigma_{j+1}^-. \quad (2.2.16)$$

La Hamiltoniana di Eq. 2.1.1 diventa quindi

$$H = \frac{J}{2} \sum_{j=1}^N [\sigma_j^+ \sigma_{j+1}^- + \sigma_j^- \sigma_{j+1}^+ + \gamma \sigma_j^+ \sigma_{j+1}^+ + \gamma \sigma_j^- \sigma_{j+1}^- + h \sigma_j^z], \quad (2.2.17)$$

Si può mostrare che (dettagli in Appendice D)

$$H = \frac{J}{2} \sum_{j=1}^{N-1} (\psi_{j+1}^\dagger \psi_j + \psi_j^\dagger \psi_{j+1} + \gamma \psi_{j+1} \psi_j + \gamma \psi_j^\dagger \psi_{j+1}^\dagger) + \frac{JhN}{2} - Jh \sum_{j=1}^N \psi_j^\dagger \psi_j + \frac{J}{2} \Pi^z (\psi_1^\dagger \psi_N + \psi_N^\dagger \psi_1 + \gamma \psi_1 \psi_N + \gamma \psi_N^\dagger \psi_1^\dagger). \quad (2.2.18)$$

Qui abbiamo definito l'operatore z -parità

$$\Pi^z \equiv \bigotimes_{j=1}^N \sigma_j^z. \quad (2.2.19)$$

Come evidente dalla trasformazione di Wigner-Jordan, questo operatore rappresenta la parità del numero di fermioni nel sistema. Si ha infatti, dalla (2.2.9), che

$$\Pi^z = \bigotimes_{j=1}^N (\mathbb{1} - 2\psi_j^\dagger \psi_j) = \begin{cases} 1 & \text{su stati con numero pari di fermioni } \psi \\ -1 & \text{su stati con numero dispari di fermioni } \psi. \end{cases} \quad (2.2.20)$$

La Hamiltoniana espressa nella forma fermionica appare favorevole nell'ottica di ottenere la soluzione esatta in quanto essa è sostanzialmente bilineare negli operatori fermionici, con l'eccezione del termine nella seconda riga. Questo termine è tuttavia estremamente complicato in quanto Π^z è altamente non lineare nei fermioni.

Dalla (2.1.6) è tuttavia evidente che

$$[H, \Pi^z] = 0. \quad (2.2.21)$$

È quindi possibile separare la Hamiltoniana in due settori H^\pm come

$$H = \frac{1 + \Pi^z}{2} H^+ + \frac{1 - \Pi^z}{2} H^-, \quad (2.2.22)$$

dove

$$H^\pm = \frac{J}{2} \sum_{j=1}^{N-1} (\psi_{j+1}^\dagger \psi_j + \psi_j^\dagger \psi_{j+1} + \gamma \psi_{j+1} \psi_j + \gamma \psi_j^\dagger \psi_{j+1}^\dagger) + \frac{JhN}{2} - Jh \sum_{j=1}^N \psi_j^\dagger \psi_j + \frac{J}{2} (\psi_1^\dagger \psi_N + \psi_N^\dagger \psi_1 + \gamma \psi_1 \psi_N + \gamma \psi_N^\dagger \psi_1^\dagger) \quad (2.2.23)$$

$$\equiv \frac{J}{2} \sum_{j=1}^N (\psi_{j+1}^{(\pm)\dagger} \psi_j^{(\pm)} + \psi_j^{(\pm)\dagger} \psi_{j+1}^{(\pm)} + \gamma \psi_{j+1}^{(\pm)} \psi_j^{(\pm)} + \gamma \psi_j^{(\pm)\dagger} \psi_{j+1}^{(\pm)\dagger} - 2h \psi_j^{(\pm)\dagger} \psi_j^{(\pm)}) + \frac{JhN}{2}. \quad (2.2.24)$$

Qui, sono stati definiti

$$\begin{cases} \psi_j^{(\pm)} \equiv \psi_j \\ \psi_{j+N}^{(\pm)} \equiv \mp \psi_j^{(\pm)} \end{cases} \quad j = 1, \dots, N. \quad (2.2.25)$$

Ora passiamo in trasformata di Fourier. I fermioni $\psi_j^{(-)}$ soddisfano PBC pertanto possiamo definirne senza problemi la trasformata di Fourier. Scegliamo la convenzione

$$\psi_j^{(-)} \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\frac{\pi}{4}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{i\frac{2\pi}{N}kj} \tilde{\psi}_k^{(-)}. \quad (2.2.26)$$

Per quanto riguarda invece $\psi_j^{(+)}$, bisogna ricordare che le condizioni al contorno opportune sono quelle antiperiodiche. Segue che

$$\psi_j^{(+)} = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\frac{\pi}{4}} \sum_{k=0}^{N-1} e^{i\frac{2\pi}{N}(k+\frac{1}{2})j} \tilde{\psi}_k^{(+)}. \quad (2.2.27)$$

Le Eq. (2.2.26) e (2.2.27) possono essere compattate come

$$\psi_j^{(\pm)} = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\frac{\pi}{4}} \sum_{q \in \Gamma^\pm} e^{iqj} \tilde{\psi}_q^{(\pm)}, \quad (2.2.28)$$

dove

$$\Gamma^+ \equiv \left\{ \frac{2\pi}{N} \left(k + \frac{1}{2} \right) \right\} \quad \Gamma^- \equiv \left\{ \frac{2\pi}{N} k \right\} \quad k = 0, \dots, N-1. \quad (2.2.29)$$

Questi due insiemi ricorrono spesso nel seguito della Tesi.

Ora scriviamo H^\pm in termini di $\psi_q^{(\pm)}$ ¹ Per far ciò è necessario calcolare

$$\sum_{j=1}^N \psi_{j+1}^{(\pm)\dagger} \psi_j^{(\pm)} = \sum_{q,q' \in \Gamma^\pm} e^{iq'} \tilde{\psi}_q^{(\pm)\dagger} \tilde{\psi}_{q'}^{(\pm)} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N e^{-i(q-q')j} = \sum_{q \in \Gamma^\pm} e^{iq} \tilde{\psi}_q^{(\pm)\dagger} \tilde{\psi}_q^{(\pm)}, \quad (2.2.30)$$

$$\sum_{j=1}^N \psi_j^{(\pm)\dagger} \psi_j^{(\pm)} = \sum_{q,q' \in \Gamma^\pm} \tilde{\psi}_q^{(\pm)\dagger} \tilde{\psi}_{q'}^{(\pm)} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N e^{-i(q-q')j} = \sum_{q \in \Gamma^\pm} \tilde{\psi}_q^{(\pm)\dagger} \tilde{\psi}_q^{(\pm)}, \quad (2.2.31)$$

$$\sum_{j=1}^N \psi_{j+1}^{(\pm)} \psi_j^{(\pm)} = i \sum_{q,q' \in \Gamma^\pm} e^{iq} \tilde{\psi}_q^{(\pm)} \tilde{\psi}_{q'}^{(\pm)} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N e^{i(q+q')j},$$

dove, per quanto riguarda il calcolo di $\sum_{j=1}^N \psi_{j+1}^{(\pm)} \psi_j^{(\pm)}$, si faccia attenzione al fatto che

$$\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N e^{i(q+q')j} = \begin{cases} \delta_{q', 2\pi-q} & \text{se } q, q' \in \Gamma^+, \Gamma^- \setminus \{0\} \\ \delta_{q', q} & \text{se } qq' = 0. \end{cases} \quad (2.2.32)$$

Si ha quindi

$$\sum_{j=1}^N \psi_{j+1}^{(+)} \psi_j^{(+)} = i \sum_{q,q' \in \Gamma^+} e^{iq} \tilde{\psi}_q^{(+)} \tilde{\psi}_{2\pi-q}^{(+)} \quad (2.2.33)$$

$$\sum_{j=1}^N \psi_{j+1}^{(-)} \psi_j^{(-)} = i \sum_{q,q' \in \Gamma^- \setminus \{0\}} e^{iq} \tilde{\psi}_q^{(-)} \tilde{\psi}_{2\pi-q}^{(-)}. \quad (2.2.34)$$

¹I calcoli sono macchinosi ma vengono lasciati nel corpo della Tesi perché sono prototipici per moltissimi effetti che verranno discussi nel seguito. Volendo saltare i passaggi, il risultato è fornito nelle Eq.(2.2.49), (2.2.57), e (2.2.58).

D'ora in avanti denoteremo

$$\tilde{\psi}_{2\pi}^{(-)} \equiv \tilde{\psi}_0^{(-)}, \quad (2.2.35)$$

in modo da poter scrivere

$$\sum_{j=1}^N \psi_{j+1}^{(\pm)} \psi_j^{(\pm)} = i \sum_{q, q' \in \Gamma^\pm} e^{iq} \tilde{\psi}_q^{(\pm)} \tilde{\psi}_{2\pi-q}^{(\pm)}. \quad (2.2.36)$$

Si può giungere quindi alla scrittura compatta

$$H^\pm = -J \sum_{q \in \Gamma^\pm} (h - \cos q) \tilde{\psi}_q^{(\pm)\dagger} \tilde{\psi}_q^{(\pm)} - \frac{J\gamma}{2i} \sum_{q \in \Gamma^\pm} (e^{iq} \tilde{\psi}_q^{(\pm)} \tilde{\psi}_{2\pi-q}^{(\pm)} + \text{h.c.}) + \frac{JhN}{2}. \quad (2.2.37)$$

Qui osserviamo che

$$\sum_{q \in \Gamma^\pm} e^{iq} \tilde{\psi}_q^{(\pm)} \tilde{\psi}_{2\pi-q}^{(\pm)} = \sum_{p \in \Gamma^\pm} e^{i(2\pi-p)} \tilde{\psi}_{2\pi-p}^{(\pm)} \tilde{\psi}_p^{(\pm)} = \sum_{p \in \Gamma^\pm} (-e^{-ip}) \tilde{\psi}_p^{(\pm)} \tilde{\psi}_{2\pi-p}^{(\pm)}, \quad (2.2.38)$$

dove nella seconda uguaglianza è stata utilizzata ancora l'identificazione tra $q = 0$ e $q = 2\pi$.

L'osservazione appena fatta ci permette di scrivere

$$H^\pm = -J \sum_{q \in \Gamma^\pm} (h - \cos q) \tilde{\psi}_q^{(\pm)\dagger} \tilde{\psi}_q^{(\pm)} - \frac{J\gamma}{2} \sum_{q \in \Gamma^\pm} \sin q (\tilde{\psi}_q^{(\pm)} \tilde{\psi}_{2\pi-q}^{(\pm)} + \tilde{\psi}_{2\pi-q}^{(\pm)\dagger} \tilde{\psi}_q^{(\pm)\dagger}) + \frac{JhN}{2}. \quad (2.2.39)$$

Si giunge infine alla forma tipo Bogoliubov-de Gennes dell'Hamiltoniana, espressa in forma matriciale come

$$H^\pm = -\frac{J}{2} \sum_{q \in \Gamma^\pm} \begin{pmatrix} \tilde{\psi}_q^{(\pm)\dagger} & \tilde{\psi}_{2\pi-q}^{(\pm)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h - \cos q & -\gamma \sin q \\ -\gamma \sin q & \cos q - h \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\psi}_q^{(\pm)} \\ \tilde{\psi}_{2\pi-q}^{(\pm)\dagger} \end{pmatrix} \quad (2.2.40)$$

$$\equiv -\frac{J}{2} \sum_{q \in \Gamma^\pm} \begin{pmatrix} \tilde{\psi}_q^{(\pm)\dagger} & \tilde{\psi}_{2\pi-q}^{(\pm)} \end{pmatrix} H_q^{(\pm)} \begin{pmatrix} \tilde{\psi}_q^{(\pm)} \\ \tilde{\psi}_{2\pi-q}^{(\pm)\dagger} \end{pmatrix}. \quad (2.2.41)$$

Per diagonalizzare l'Hamiltoniana, effettuiamo la seguente trasformazione canonica:

$$\tilde{\psi}_{q \neq 0, \pi}^{(\pm)} \equiv \cos \theta_q \chi_q^{(\pm)} + \sin \theta_q \chi_{2\pi-q}^{(\pm)\dagger}, \quad (2.2.42)$$

$$\tilde{\psi}_{2\pi-q}^{(\pm)\dagger} \equiv -\sin \theta_q \chi_q^{(\pm)} + \cos \theta_q \chi_{2\pi-q}^{(\pm)\dagger}, \quad (2.2.43)$$

$$\tilde{\psi}_{q=0, \pi}^{(\pm)} \equiv \chi_q^{(\pm)}, \quad (2.2.44)$$

dove la (2.2.42) è motivata dal fatto che le matrici $H_{q=0, \pi}^\pm$ sono già diagonali.

In forma matriciale, la trasformazione appena definita si può scrivere come

$$\begin{pmatrix} \tilde{\psi}_q^{(\pm)} \\ \tilde{\psi}_{2\pi-q}^{(\pm)\dagger} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta_q & \sin \theta_q \\ -\sin \theta_q & \cos \theta_q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_q^{(\pm)} \\ \chi_{2\pi-q}^{(\pm)\dagger} \end{pmatrix} \quad q \neq 0, \pi. \quad (2.2.45)$$

Sostituendo quest'ultima relazione in (2.2.40) si trova che la matrice

$$H_{q \neq 0, \pi}^{\pm'} \equiv \begin{pmatrix} \cos \theta_q & \sin \theta_q \\ -\sin \theta_q & \cos \theta_q \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} h - \cos q & -\gamma \sin q \\ -\gamma \sin q & \cos q - h \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta_q & \sin \theta_q \\ -\sin \theta_q & \cos \theta_q \end{pmatrix} \quad (2.2.46)$$

è diagonale solo se l'angolo θ_q è tale che

$$e^{i2\theta_q} = \frac{h - \cos q + i\gamma \sin q}{\sqrt{(h - \cos q)^2 + \gamma^2 \sin^2 q}}. \quad (2.2.47)$$

In particolare, per tale angolo si ha che

$$H_{q \neq 0, \pi}^{\pm} = \text{diag}\{\epsilon(q), -\epsilon(q)\}, \quad (2.2.48)$$

dove

$$\epsilon(q) \equiv \sqrt{(h - \cos q)^2 + \gamma^2 \sin^2 q}. \quad (2.2.49)$$

Questa relazione di dispersione ricorrerà sovente nella Tesi.

Dalla (2.2.29) osserviamo che $0 \in \Gamma^-$ per tutti gli N , mentre

$$\pi \in \begin{cases} \Gamma^- & \text{se } N \text{ pari} \\ \Gamma^+ & \text{se } N \text{ dispari,} \end{cases} \quad (2.2.50)$$

quindi:

- se N è pari

$$H^+ = -J \sum_{q \in \Gamma^+} \epsilon(q) \left(\chi_q^{(+)\dagger} \chi_q^{(+)} - \frac{1}{2} \right) \quad (2.2.51)$$

$$H^- = -J \sum_{q \in \Gamma^- \setminus \{0\}} \epsilon(q) \left(\chi_q^{(-)\dagger} \chi_q^{(-)} - \frac{1}{2} \right) - J(h-1) \left(\chi_0^{(-)\dagger} \chi_0^{(-)} - \frac{1}{2} \right) + \\ - J(h+1) \left(\chi_{\pi}^{(+)\dagger} \chi_{\pi}^{(+)} - \frac{1}{2} \right); \quad (2.2.52)$$

- se N è dispari

$$H^+ = -J \sum_{q \in \Gamma^+ \setminus \{\pi\}} \epsilon(q) \left(\chi_q^{(+)\dagger} \chi_q^{(+)} - \frac{1}{2} \right) - J(h+1) \left(\chi_{\pi}^{(+)\dagger} \chi_{\pi}^{(+)} - \frac{1}{2} \right) \quad (2.2.53)$$

$$H^- = -J \sum_{q \in \Gamma^- \setminus \{0\}} \epsilon(q) \left(\chi_q^{(-)\dagger} \chi_q^{(-)} - \frac{1}{2} \right) - J(h-1) \left(\chi_0^{(-)\dagger} \chi_0^{(-)} - \frac{1}{2} \right). \quad (2.2.54)$$

Dalla (2.2.49)

$$\epsilon(\pi) = |h+1| = h+1 \quad \text{se } h \geq 0 \quad (2.2.55)$$

$$\epsilon(0) = |h-1| = \begin{cases} h-1 & \text{se } h > 1 \\ -(h-1) & \text{se } 0 \leq h < 1, \end{cases} \quad (2.2.56)$$

quindi concludiamo che, indipendentemente dalla parità di N , si ha

$$H^+ = -J \sum_{q \in \Gamma^+} \epsilon(q) \left(\chi_q^{(+)\dagger} \chi_q^{(+)} - \frac{1}{2} \right) \quad \text{se } h \geq 0 \quad (2.2.57)$$

$$H^- = \begin{cases} -J \sum_{q \in \Gamma^-} \epsilon(q) \left(\chi_q^{(-)\dagger} \chi_q^{(-)} - \frac{1}{2} \right) & \text{se } h > 1 \\ -J \sum_{q \in \Gamma^- \setminus \{0\}} \epsilon(q) \left(\chi_q^{(-)\dagger} \chi_q^{(-)} - \frac{1}{2} \right) + J\epsilon(0) \left(\chi_0^{(-)\dagger} \chi_0^{(-)} - \frac{1}{2} \right) & \text{se } 0 \leq h < 1, \end{cases} \quad (2.2.58)$$

che sono Hamiltoniane di fermioni liberi.

In questa Sezione abbiamo quindi mappato esattamente la Hamiltoniana della catena XY su un sistema di fermioni liberi attraverso una trasformazione non locale. Sebbene ciò permetta di avere accesso agli autovalori, come vedremo, la complessità del mapping renderà molto difficile il calcolo analitico delle funzioni di correlazione. Un altro commento è qui d'obbligo. Alla luce della trasformazione risulta ora evidente il motivo per cui l'interazione tra spin si limita a due matrici di Pauli e il campo applicato si accoppia con la terza. Interazione su tutte le direzioni genererebbe un modello di fermioni interagenti, mentre campi magnetici non trasversi darebbero origine a modelli in cui la parità fermionica non è conservata. Entrambe le estensioni richiederebbero quindi tecniche analitiche differenti o l'utilizzo di metodi approssimati.

2.3 Caso ferromagnetico

Nella parte restante di questo Capitolo ci interesseremo al caso $J < 0$, cioè alla catena XY ferromagnetica. Ne calcoleremo i livelli energetici, la funzione di partizione, il diagramma di fase a temperatura nulla e alcune funzioni di correlazione. Si troverà che a temperatura finita il modello non presenta transizioni di fase, mentre è caratterizzato da due transizioni di fase quantistiche del secondo ordine per $h = 1$ e per $\gamma = 0$ con $h < 1$. La transizione di fase per $h = 1$ separa la fase ferromagnetica ($h < 1$), caratterizzata da uno stato fondamentale doppiamente degenere da quella paramagnetica ($h > 1$), il cui stato fondamentale è non degenere). La transizione di fase a $\gamma = 0$ separa invece fasi ferromagnetiche con magnetizzazione spontanea lungo assi differenti (lungo x per $\gamma > 0$ e lungo y per $\gamma < 0$). Uno schema del diagramma di fase è mostrato in Fig. 2.1. In tale Figura, per maggiore immediatezza di confronto con la letteratura, è mostrato tutto lo spazio dei parametri e non soltanto quello ristretto attraverso l'analisi delle simmetrie.

2.3.1 Livelli energetici

Per ottenere i livelli energetici è utile definire lo stato di vuoto $|0\rangle$ dei fermioni di Wigner-Jordan, dato da

$$\psi_j |0\rangle \equiv 0 \quad \forall j. \quad (2.3.1)$$

Dalla trasformazione di Wigner-Jordan (2.2.13) si ha

$$\psi_j = \sigma_j^+ \bigotimes_{l=1}^{j-1} \sigma_l^z \quad (2.3.2)$$

e, di conseguenza,

$$|0\rangle = \bigotimes_{j=1}^N |\uparrow_j\rangle. \quad (2.3.3)$$

Indicheremo con $|0^\pm\rangle$ i vuoti di fermioni $\chi^{(\pm)}$, definiti da

$$\chi_q^{(\pm)} |0^\pm\rangle \equiv 0 \quad q \in \Gamma^\pm. \quad (2.3.4)$$

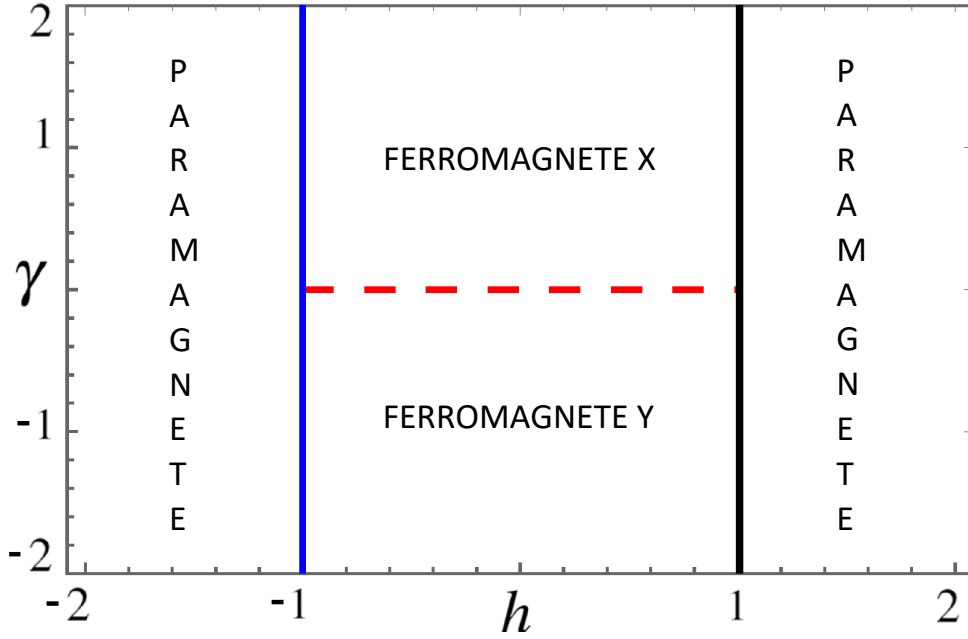


Figura 2.1: Diagramma di fase a temperatura nulla della catena XY ferromagnetica con PBC.

Si può verificare che

$$|0^+\rangle = \bigotimes_{k=1}^{\lfloor (N-1)/2 \rfloor} \left(1 + \tan \theta_{q(k)} \psi_{q(k)}^\dagger \psi_{2\pi - q(k+1)}^\dagger \right) |0\rangle \quad \text{dove} \quad q(k) \equiv \frac{2\pi}{N} \left(k + \frac{1}{2} \right) \quad (2.3.5)$$

e

$$|0^-\rangle = \bigotimes_{k=1}^{\lfloor N/2 \rfloor} \left(1 + \tan \theta_{q(k)} \psi_{q(k)}^\dagger \psi_{2\pi - q(k+1)}^\dagger \right) |0\rangle \quad \text{dove} \quad q(k) \equiv \frac{2\pi}{N} k \quad (2.3.6)$$

soddisfano la (2.3.4). Si noti la stretta analogia con lo stato fondamentale della teoria BCS.

D'altra parte, dalla (2.2.9) (e come già espresso) segue che

$$\Pi^z = \bigotimes_{j=1}^N (\mathbb{1} - 2\psi_j^\dagger \psi_j) = \begin{cases} 1 & \text{su stati con numero pari di fermioni } \psi \\ -1 & \text{su stati con numero dispari di fermioni } \psi. \end{cases} \quad (2.3.7)$$

Di conseguenza, essendo $|0^+\rangle$ e $|0^-\rangle$ combinazioni lineari di stati con numero pari di fermioni ψ_j , si ha

$$\Pi^z |0^\pm\rangle = |0^\pm\rangle. \quad (2.3.8)$$

Infine si noti che le (2.2.44), (2.2.45) ci dicono che la parità del numero di fermioni χ coincide con la parità del numero di fermioni ψ , cioè

$$\Pi^z = \bigotimes_{j=1}^N (\mathbb{1} - 2\psi_j^\dagger \psi_j) = \bigotimes_{q \in \Gamma^\pm} (\mathbb{1} - 2\chi_q^{(\pm)\dagger} \chi_q^{(\pm)}). \quad (2.3.9)$$

Fatte queste considerazioni preliminari, possiamo ora trovare i livelli energetici di H . Chiameremo $|GS^+\rangle$ e $|GS^-\rangle$ gli stati fondamentali, con energia E_0^+ e E_0^- , di,

rispettivamente, $\frac{1+\Pi z}{2}H^+$ e $\frac{1-\Pi z}{2}H^-$, e chiameremo $|GS\rangle$ lo stato fondamentale di H , ovvero della Hamiltoniana del sistema, data in Eq. 2.1.1, ristretta a $J > 0$.

Dalla (2.2.58) è evidente che dobbiamo discutere separatamente i casi $h > 1$ e $0 < h < 1$.

- Per $h > 1$ la forma di $\epsilon(q)$ è quella in Figure 2.2a e 2.2b. Il minimo si trova per $q = 0$.

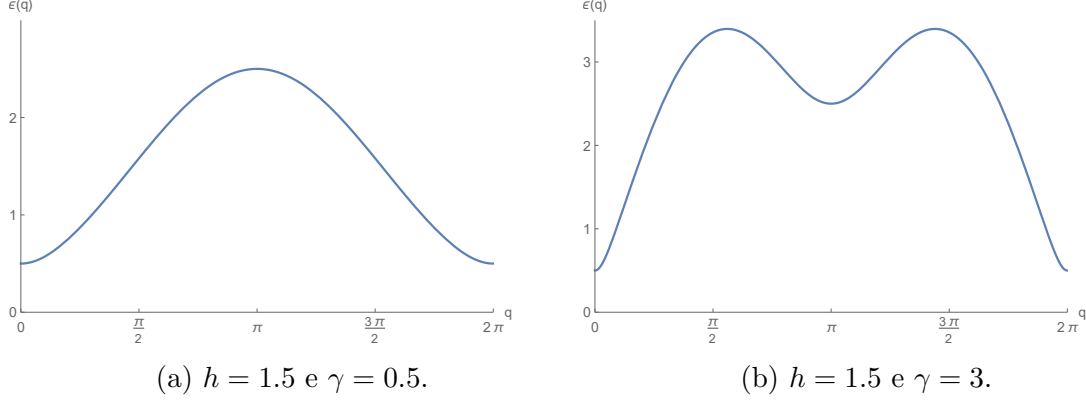


Figura 2.2: Andamento di $\epsilon(q)$ in funzione di $q \in [0, 2\pi)$ per $|h| > 1$ nei casi $|\gamma| < 1$ (a) e $|\gamma| > 1$ (b).

Indipendentemente dalla parità di N , si ha che

$$|GS^+\rangle = |0^+\rangle \quad (2.3.10)$$

$$|GS^-\rangle = \chi_0^{(-)\dagger} |0^-\rangle. \quad (2.3.11)$$

Le rispettive energie sono (si ricordi che abbiamo posto $J < 0$)

$$E_+^0 = \frac{J}{2} \sum_{q \in \Gamma^+} \epsilon(q), \quad (2.3.12)$$

$$E_-^0 = \frac{J}{2} \sum_{q \in \Gamma^-} \epsilon(q) - J\epsilon(0). \quad (2.3.13)$$

I primi stati eccitati nei due settori di parità opposta sono

$$\chi_{\frac{\pi}{N}}^{(+)} \chi_{2\pi - \frac{\pi}{N}}^{(+)\dagger} |0^+\rangle, \quad (2.3.14)$$

$$\chi_0^{(-)\dagger} \chi_{\frac{2\pi}{N}}^{(-)\dagger} \chi_{2\pi - \frac{2\pi}{N}}^{(-)\dagger} |0^-\rangle, \quad (2.3.15)$$

le cui rispettive energie sono

$$E'_+ = \frac{J}{2} \sum_{q \in \Gamma^+} \epsilon(q) - 2J\epsilon\left(\frac{\pi}{N}\right), \quad (2.3.16)$$

$$E'_- = \frac{J}{2} \sum_{q \in \Gamma^-} \epsilon(q) - J\epsilon(0) - 2J\epsilon\left(\frac{2\pi}{N}\right). \quad (2.3.17)$$

Quindi, nel limite termodinamico ($N \rightarrow \infty$), lo stato fondamentale della Hamiltoniana complessiva per $h > 1$ è

$$|GS\rangle = |0^+\rangle, \quad (2.3.18)$$

con energia

$$E^0 \simeq \frac{JN}{4\pi} \int_0^{2\pi} \epsilon(q) dq, \quad (2.3.19)$$

mentre il primo livello eccitato è $|GS^- \rangle$ che, nel limite termodinamico, ha energia

$$E' \simeq E^0 - J\epsilon(0). \quad (2.3.20)$$

Abbiamo dunque un gap che separa lo stato fondamentale dal primo livello eccitato e che non si chiude nel limite termodinamico. Inoltre, ogni livello energetico non è degenero, neanche nel limite termodinamico.

- La regione $0 < h < 1$ si può studiare facilmente guardando le equazioni (2.2.57), (2.2.58). Si ha che

$$|GS^+ \rangle = |0^+ \rangle, \quad (2.3.21)$$

$$|GS^- \rangle = \chi_0^{(-)\dagger} |0^- \rangle \quad (2.3.22)$$

le cui energie sono, rispettivamente,

$$E_+^0 = \frac{J}{2} \sum_{q \in \Gamma^+} \epsilon(q), \quad (2.3.23)$$

$$E_-^0 = \frac{J}{2} \sum_{q \in \Gamma^-} \epsilon(q). \quad (2.3.24)$$

Nel limite termodinamico si ha che

$$\begin{aligned} E_+^0 - E_-^0 &= \frac{J}{2} \sum_{k=0}^{N-1} \left[\epsilon \left(\frac{2\pi}{N}k + \frac{\pi}{N} \right) - \epsilon \left(\frac{2\pi}{N}k \right) \right] \\ &= \frac{J}{2} \sum_{k=0}^{N-1} \left[\left. \frac{\partial \epsilon}{\partial q} \right|_{\frac{2\pi}{N}k} \cdot \frac{\pi}{N} + \mathcal{O} \left(\frac{1}{N^2} \right) \right] = \mathcal{O} \left(\frac{1}{N^2} \right), \end{aligned} \quad (2.3.25)$$

quindi lo stato fondamentale è doppiamente degenero e il suo elemento generico è dato da

$$|GS \rangle = \alpha |0^+ \rangle + \beta \chi_0^{(-)\dagger} |0^- \rangle, \quad (2.3.26)$$

dove $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ tali che $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. L'energia corrispondente è data dalla (2.3.19).

Inoltre, gli stati eccitati si ottengono applicando coppie di operatori $\chi_q^{(\pm)\dagger} \chi_{q' \neq q}^{(\pm)\dagger}$ a $|GS \rangle_{\pm}$, di conseguenza essi sono separati da $|GS^{\pm} \rangle$ da gap che non si chiudono nel limite termodinamico.

Per riassumere, abbiamo mostrato che a temperatura $T = 0$ nel limite termodinamico le due fasi $h > 1$ e $0 < h < 1$ sono gapped e sono, rispettivamente, non degenero e doppiamente degenero, con stessa energia (2.3.19). Questo è in accordo con quanto mostrato in Fig. 2.1 Come prossimo passo, mostriamo ora che a temperatura finita non vi sono transizioni di fase. Per farlo, procediamo al calcolo della funzione di partizione.

2.3.2 Funzione di partizione

Nonostante nelle Sezioni successive ci interesseremo esclusivamente alle proprietà della catena XY a $T = 0$, ora calcoleremo la funzione di partizione (e quindi l'energia libera per sito) del modello XY, da cui ricaveremo l'energia libera, a partire dalla quale si possono calcolare tutte le quantità termodinamiche. Dalla forma esplicita che verrà ricavata sarà chiaro che il modello non presenta transizioni di fase termiche, in accordo con il teorema di Mermin-Wagner [4].

Il calcolo, riportato in Appendice E, è, essenzialmente, quello di una funzione di partizione di fermioni liberi. Si ottiene che l'energia libera per sito nel limite termodinamico $N \rightarrow \infty$ è data da

$$f = -\frac{1}{\beta} \log 2 - \frac{1}{\pi\beta} \int_0^\pi \log \cosh \left[\frac{\beta}{2} J\epsilon(q) \right] dq. \quad (2.3.27)$$

Tale forma è analitica rispetto alla temperatura, di conseguenza non sono presenti transizioni di fase. In definitiva, abbiamo mostrato che lo stato fondamentale cambia degenerazione per $h = 1$, fatto che porterebbe a pensare che si possa avere una transizione di fase, ma che in realtà tale transizione di fase non avvenga. Per approfondire la nostra comprensione del modello, dobbiamo allora esaminare più in dettaglio ciò che succede a temperatura nulla e, quindi, le transizioni di fase quantistiche.

2.3.3 Diagramma di fase a temperatura nulla

In questa Sezione commenteremo le interessanti caratteristiche del diagramma di fase della catena XY ferromagnetica a temperatura nulla, ovvero le sue transizioni di fase quantistiche. Abbiamo infatti appena mostrato che a temperatura finita non vi sono transizioni di fase.

Incominciamo con l'osservare dalla (2.1.6) che quando $\gamma = 1$ la Hamiltoniana della catena XY si riduce a quella del modello di Ising 1D quantistico:

$$H|_{\gamma=1} = \frac{J}{2} \sum_{j=1}^N (\sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + h\sigma_j^z). \quad (2.3.28)$$

In particolare, nel punto $(0, 1)$ del piano (h, γ) abbiamo il modello di Ising 1D in assenza di campo esterno, che è un modello classico. Lo stato fondamentale del sistema in tale punto è ovviamente una combinazione lineare dei due seguenti stati

$$|GS_1\rangle = \bigotimes_{j=1}^N |\rightarrow_j\rangle = \bigotimes_{j=1}^N \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_j\rangle + |\downarrow_j\rangle) \quad |GS_2\rangle = \bigotimes_{j=1}^N |\leftarrow_j\rangle = \bigotimes_{j=1}^N \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_j\rangle - |\downarrow_j\rangle), \quad (2.3.29)$$

dove

$$\sigma_j^x |\rightarrow_j\rangle \equiv |\rightarrow_j\rangle \quad \sigma_j^x |\leftarrow_j\rangle \equiv -|\leftarrow_j\rangle. \quad (2.3.30)$$

Nel seguito, per comodità, denoteremo

$$|\rightarrow\rangle \equiv \bigotimes_{j=1}^N |\rightarrow_j\rangle \quad |\leftarrow\rangle \equiv \bigotimes_{j=1}^N |\leftarrow_j\rangle. \quad (2.3.31)$$

Si noti che, essendo $|\rightarrow\rangle$ e $|\leftarrow\rangle$ separati da una barriera di energia, il sistema a $T = 0$ "sceglierà" uno di questi due stati, rompendo così spontaneamente la simmetria \mathbb{Z}_2 dello stato fondamentale. Tale scelta è ovviamente influenzata da perturbazioni infinitesime esterne.

Sia

$$m_\alpha(j) \equiv \langle \psi | \sigma_j^\alpha | \psi \rangle \quad (2.3.32)$$

la magnetizzazione lungo $\alpha \in \{x, y, z\}$ sullo stato $|\psi\rangle$. È evidente che $|GS_1\rangle$ e $|GS_2\rangle$ hanno, rispettivamente, $\mathbf{m}_1 = (1, 0, 0)$ e $\mathbf{m}_2 = (-1, 0, 0)$.

Si osservi che la degenerazione tra gli stati $|GS_1\rangle$ e $|GS_2\rangle$ è in questo caso esatta anche per N finito. Come già osservato nelle Sezioni precedenti, quando ci spostiamo dal punto $(h, \gamma) = (0, 1)$ la doppia degenerazione dello stato fondamentale è esatta solo nel limite termodinamico. Tuttavia si può mostrare che la doppia degenerazione esatta dello stato fondamentale in $(h, \gamma) = (0, 1)$ si preserva se ci spostiamo lungo la circonferenza $h^2 + \gamma^2 = 1$. In particolare, si calcola che lungo tale circonferenza lo stato fondamentale è generato da

$$|GS_1\rangle = \prod_{j=1}^N (\cos \theta |\uparrow_j\rangle + \sin \theta |\downarrow_j\rangle) \quad |GS_2\rangle = \prod_{j=1}^N (\cos \theta |\uparrow_j\rangle - \sin \theta |\downarrow_j\rangle), \quad (2.3.33)$$

dove

$$\cos^2(2\theta) = \frac{1 - \gamma}{1 + \gamma}. \quad (2.3.34)$$

Osserviamo che se ci mettiamo in $(h, \gamma) = (0, 1)$ e ci muoviamo verso $(h, \gamma) = (1, 0)$ lungo il percorso $h^2 + \gamma^2 = 1$, passiamo in maniera continua da un punto iniziale con magnetizzazione $\mathbf{m} = (\pm 1, 0, 0)$ a uno finale con $\mathbf{m} = (0, 0, 1)$.

Se invece consideriamo la Hamiltoniana del modello XY (2.1.6) quando $h \rightarrow \infty$, il contributo dominante è dato da

$$H|_{h \rightarrow \infty} = \frac{Jh}{2} \sum_{j=1}^N \sigma_j^z. \quad (2.3.35)$$

In questo limite, lo stato fondamentale è

$$|GS\rangle|_{h \rightarrow \infty} = \bigotimes_{j=1}^N |\uparrow_j\rangle \equiv |\uparrow\rangle. \quad (2.3.36)$$

Per ricapitolare, abbiamo che

$$|GS\rangle|_{h=0, \gamma=1} = \alpha |\rightarrow\rangle + \beta |\leftarrow\rangle \quad \alpha, \beta \in \mathbb{C} : |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \quad (2.3.37)$$

$$|GS\rangle|_{h \rightarrow \infty} = |\uparrow\rangle, \quad (2.3.38)$$

da cui osserviamo che, regolando il solo h , possiamo stravolgere completamente la natura dello stato fondamentale. Gli unici punti del piano h, γ in cui può avvenire un cambiamento così radicale dello stato fondamentale sono quelli in corrispondenza dei quali il minimo dello spettro (2.2.49) è zero. Cerchiamo quindi per quali (h, γ)

esiste sempre, nel limite termodinamico, almeno un $\bar{q} \in [0, 2\pi)$ tale che $\epsilon(\bar{q}) = 0$, imponiamo cioè (dalla (2.2.49))

$$\begin{cases} h - \cos \bar{q} = 0 \\ \gamma \sin \bar{q} = 0, \end{cases} \quad (2.3.39)$$

la quale, nel primo quadrante ($h, \gamma \geq 0$), è soddisfatta in

$$h = 1 \quad (2.3.40)$$

con $\bar{q} = 0$ e in

$$\begin{cases} \gamma = 0 \\ 0 \leq h \leq 1 \end{cases} \quad (2.3.41)$$

con $\bar{q} \in \{\arccos h, 2\pi - \arccos h\}$.

Quindi, $h_C = 1$ corrisponde al valore critico del campo magnetico in corrispondenza del quale, a $T = 0$, il sistema passa dall'essere magneticamente ordinato (del tipo (2.3.37)) a disordinato (del tipo (2.3.38)). Di conseguenza, chiameremo $0 \leq h < 1$ *fase ordinata*, ferromagnetica, e $h > 1$ *fase disordinata*, paramagnetica (si veda Figura 2.3). Possiamo finalmente disegnare il diagramma di fase nella regione $h, \gamma \geq 0$ (Figura (2.3)).

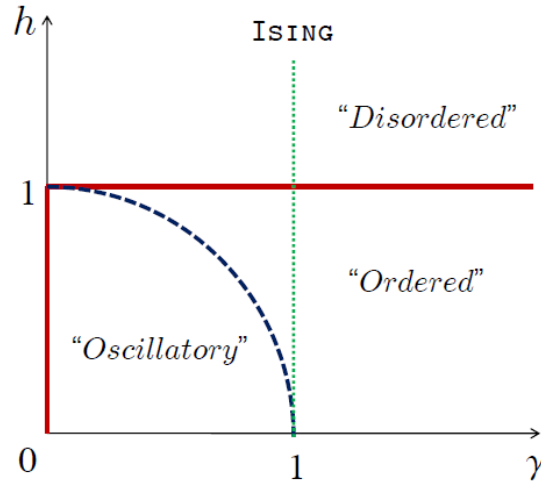


Figura 2.3: Diagramma di fase della catena XY ferromagnetica con PBC nella sola regione $h, \gamma \geq 0$, tratto da [15]. Le linee rosse corrispondono ai punti in cui può avvenire la transizione tra le fasi ordinata e disordinata. La linea verde tratteggiata è il modello di Ising in campo trasverso. L'arco di circonferenza tratteggiato in blu rappresenta la curva lungo la quale lo stato fondamentale è fattorizzabile nel prodotto di singoli stati di spin. Il comportamento oscillatorio nella regione $h^2 + \gamma^2 < 1$ verrà dedotto nella prossima Sezione dal comportamento asintotico delle funzioni di correlazione a due spin.

La (2.3.41) è il segmento attraversato il quale il sistema, a $T = 0$, passa da una fase ordinata x ferromagnetica ($0 \leq h < 1$ e $\gamma > 0$) a un'altra fase ordinata y ferromagnetica ($0 \leq h < 1$ e $\gamma < 0$).

Ci aspettiamo quindi che in corrispondenza di (2.3.40) e (2.3.41) si abbiano delle transizioni di fase quantistiche. Per avere la certezza che queste transizioni di fase

siano effettivamente presenti bisogna però studiare le derivate dell'energia dello stato fondamentale nel limite termodinamico. Si calcola (Ref. [33]) che in corrispondenza di tali linee *gapless* la derivata seconda (ma non la derivata prima) dell'energia dello stato fondamentale presenta discontinuità, di conseguenza concludiamo che in (2.3.40) e (2.3.41) si hanno transizioni di fase quantistiche del secondo ordine.

2.3.4 Funzioni di correlazione

In questa Sezione calcoleremo i correlatori a due spin sugli stati fondamentali fisici a temperatura nulla. Studiare il comportamento delle funzioni di correlazione è utile perché ci permette di affinare l'interpretazione fisica delle differenti fasi del modello. Inoltre, effettuare questo calcolo sarà utile per il prossimo Capitolo. Prima di partire col calcolo, è necessario dire chi sono gli stati fondamentali fisici in termini di $|GS^+\rangle$ e $|GS^-\rangle$. Per far ciò è conveniente partire dal punto classico $(h, \gamma) = (0, 1)$ dove lo stato fondamentale fisico è $|\rightarrow\rangle$ oppure $|\leftarrow\rangle$. Incominciamo con l'esprimere questi due stati in termini di $|GS^+\rangle|_{(h,\gamma)=(0,1)}$ e $|GS^-\rangle|_{(h,\gamma)=(0,1)}$. Osserviamo che

$$\Pi^z |\leftarrow\rangle = \Pi^z \bigotimes_{j=1}^N \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_j\rangle + |\downarrow_j\rangle) = \bigotimes_{j=1}^N \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_j\rangle - |\downarrow_j\rangle) = |\rightarrow\rangle, \quad (2.3.42)$$

da cui

$$\Pi^z \frac{1}{\sqrt{2}} (|\rightarrow\rangle \pm |\leftarrow\rangle) = \pm \frac{1}{\sqrt{2}} (|\rightarrow\rangle \pm |\leftarrow\rangle). \quad (2.3.43)$$

Possiamo quindi fare l'identificazione

$$|GS^\pm\rangle|_{(h,\gamma)=(0,1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\rightarrow\rangle \pm |\leftarrow\rangle), \quad (2.3.44)$$

che implica che nel punto classico sono vere le seguenti relazioni:

$$|\rightarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|GS^+\rangle|_{(h,\gamma)=(0,1)} + |GS^-\rangle|_{(h,\gamma)=(0,1)}), \quad (2.3.45)$$

$$|\leftarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|GS^+\rangle|_{(h,\gamma)=(0,1)} - |GS^-\rangle|_{(h,\gamma)=(0,1)}). \quad (2.3.46)$$

A noi, tuttavia, non interessa studiare solo il punto classico, bensì tutte le fasi del modello. Ci poniamo quindi, per ovvie ragioni, l'obiettivo di calcolare

$$\rho_{lm}^\alpha \equiv \langle GS | \sigma_l^\alpha \sigma_m^\alpha | GS \rangle \quad \alpha = x, y, z, \quad (2.3.47)$$

con

$$|GS\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (|GS^+\rangle \pm |GS^-\rangle). \quad (2.3.48)$$

L'invarianza per traslazioni inoltre impone

$$\rho_{lm}^\alpha = \rho_{l-m,0}^\alpha \equiv \rho^\alpha(l-m). \quad (2.3.49)$$

Il comportamento asintotico ($n \equiv |m-l| \rightarrow \infty$) dei correlatori della catena XY ferromagnetica è stato calcolato da Barouch e McCoy in [34]. Tale calcolo è affrontato, nei suoi aspetti fondamentali, in Appendice F e coinvolge le così dette Matrici

di Toeplitz, i cui determinanti hanno grande rilevanza in Fisica-Matematica. Qui riportiamo solo i risultati:

$$h > 1 : \begin{cases} \rho^x(n) \simeq X_D \frac{\lambda_+^{-n}}{n^{1/2}} \\ \rho^y(n) \simeq Y_D \frac{\lambda_+^{-n}}{n^{3/2}} \\ \rho^z(n) \simeq \frac{1}{4} - \frac{1}{8\pi} \frac{\lambda_+^{-2n}}{n^2} \end{cases} \quad (2.3.50)$$

$$h = 1 : \begin{cases} \rho^x(n) \simeq C_x \frac{\gamma}{1+\gamma} \frac{1}{(\gamma n)^{1/4}} \\ \rho^y(n) \simeq C_y \frac{\gamma(1+\gamma)}{(\gamma n)^{9/4}} \\ \rho^z(n) \simeq m_z^2 - \frac{1}{4(\pi n)^2} \end{cases} \quad (2.3.51)$$

$$\text{Re}\{\sqrt{1-\gamma^2}\} < h < 1 : \begin{cases} \rho^x(n) \simeq m_x^2 \left(1 + X_O^+ \frac{\lambda_+^{2n}}{n^2}\right) \\ \rho^y(n) \simeq Y_{Or} \frac{\lambda_+^{2n}}{n^3} \\ \rho^z(n) \simeq m_z^2 - \frac{1}{8\pi} \frac{\lambda_+^{2n}}{n^2} \end{cases} \quad (2.3.52)$$

$$h^2 = 1 - \gamma^2 : \begin{cases} \rho^x(n) \simeq \frac{1}{2} \frac{\gamma}{1+\gamma} \\ \rho^y(n) \simeq 0 \\ \rho^z(n) \simeq m_z^2 \end{cases} \quad (2.3.53)$$

$$h^2 < 1 - \gamma^2 : \begin{cases} \rho^x(n) \simeq m_x^2 \left(1 + X_O^+ \frac{\lambda_+^{2n}}{n^2} + X_O^- \frac{\lambda_-^{2n}}{n^2}\right) \\ \rho^y(n) \simeq Y_{Os} \frac{\lambda_+^n \lambda_-^n}{n} \\ \rho^z(n) \simeq m_z^2 - \frac{1}{4\pi} \frac{(\lambda_+^n + Z_{Os} \lambda_-^n)(\lambda_+^n + Z_{Os}^{-1} \lambda_-^n)}{n^2} \end{cases} \quad (2.3.54)$$

$$\gamma = 0, |h| < 1 : \begin{cases} \rho^x(n) \simeq C(1-h^2)^{1/4} \frac{1}{n^{1/2}} \\ \rho^y(n) \simeq C(1-h^2)^{1/4} \frac{1}{n^{1/2}} \\ \rho^z(n) \simeq m_z^2 - \frac{\sin^2(n \arccos h)}{\pi^2 n^2} \end{cases} \quad (2.3.55)$$

dove

$$\lambda_{\pm}(h, \gamma) \equiv \frac{h \pm \sqrt{\gamma^2 + h^2 - 1}}{1 + \gamma} \quad (2.3.56)$$

e

$$C_x = \frac{1}{2A^3} e^{1/4} 2^{1/12} \quad C_y = -\frac{1}{32A^3} e^{1/4} 2^{1/12} \quad C = \frac{1}{A^6} e^{1/2} 2^{2/3} \quad (2.3.57)$$

$$m_x^2 = \frac{1}{4} [(1 - \lambda_-^2)(1 - \lambda_+^2)(1 - \lambda_+ \lambda_-)^2]^{1/4} \quad m_z = \int_0^\pi \frac{p_1(e^{iq}) + p_2(e^{iq})}{\sqrt{p_1(e^{iq})p_2(e^{iq})}} \frac{dq}{2\pi} \quad (2.3.58)$$

$$X_D = \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \left[\frac{1 - \lambda_-^2}{1 - \lambda_+^{-2}} (1 - \lambda_- \lambda_+)^2 \right]^{1/4} \quad (2.3.59)$$

$$Y_D = -\frac{1}{8\sqrt{\pi}} \left[\frac{(1 - \lambda_+^{-2})^3 (1 - \lambda_-^2)}{(1 - \lambda_- \lambda_+)^2} \right]^{1/4} \frac{1}{1 - \lambda_- \lambda_+^{-1}} \quad (2.3.60)$$

$$X_O^\pm = \frac{1}{2\pi} \frac{\lambda_\pm^2}{1 - \lambda_\pm^2} \quad Y_{Or} = -\frac{1}{8\pi} \left[\frac{1 - \lambda_-^2}{(1 - \lambda_+^2)^3 (1 - \lambda_- \lambda_+)^2} \right]^{1/4} \frac{1}{1 - \lambda_- \lambda_+^{-1}} \quad (2.3.61)$$

$$Z_{Os} = \frac{\lambda_+}{\lambda_-} \sqrt{\frac{1 - \lambda_+^2}{1 - \lambda_-^2}} \quad Y_{Os} = \frac{[(1 - \lambda_- \lambda_+^{-1})(1 - \lambda_-^{-1} \lambda_+)]^{1/2}}{4\pi [(1 - \lambda_-^2)(1 - \lambda_+^2)(1 - \lambda_+ \lambda_-)^2]^{1/4}} \quad (2.3.62)$$

con $A = 1.282\dots$ la costante di Glaisher.

Si noti che il comportamento asintotico dei correlatori è determinato praticamente solo dai parametri λ_\pm , il cui valore svolge il ruolo decisivo. Questo fatto non stupisce: questi parametri, che giocano il ruolo di lunghezze caratteristiche, sono gli zeri della relazione di dispersione sul piano complesso, una volta fatta l'identificazione $e^{iq} = z$. Laddove si ha un gap, i λ_\pm compaiono nelle espressioni delle correlazioni, mentre essi non compaiono dove non si hanno gap. In particolare, ci interessa se λ_\pm siano o meno all'interno della circonferenza unitaria nel piano complesso e se hanno parte immaginaria. Dalla (2.3.56) si può mostrare facilmente che

$$\lambda_\pm(-h, \gamma) = -\lambda_\mp(h, \gamma) \quad \lambda_\pm(h, -\gamma) = \lambda_\mp^{-1}(h, \gamma) \quad \lambda_\pm(-h, -\gamma) = -\lambda_\pm^{-1}(h, \gamma) \quad (2.3.63)$$

dove la terza equazione segue dalle prime due. Queste tre relazioni ci dicono che per avere l'andamento asintotico delle funzioni di correlazione su tutto il piano h, γ è sufficiente conoscere λ_\pm e λ_\pm^{-1} nella regione $h, \gamma \geq 0$ (si veda il cartoon di Figura 2.4).

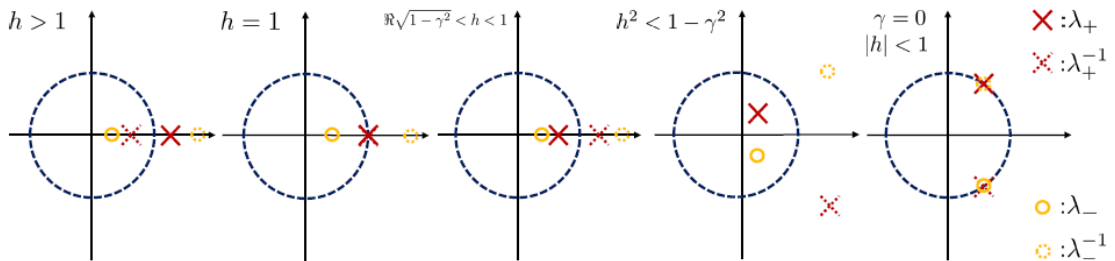


Figura 2.4: Posizioni "medie" di λ_\pm e λ_\pm^{-1} per $h, \gamma \geq 0$ rispetto alla circonferenza unitaria del piano complesso (tratteggiata). La Figura è tratta da [15].

Ora abbiamo tutto il necessario per commentare il comportamento asintotico dei correlatori: per $h > 1$ abbiamo una fase disordinata (dato che $\rho^x(n) \sim 0$) invece per

$0 < h < 1$ abbiamo una fase ordinata (dato che $\rho^x(n) \sim m_x^2$, con m_x^2 il quadrato del valor medio della magnetizzazione). Si osservi che nel passaggio dalla regione esterna alla circonferenza unitaria a quella interna λ_+ e λ_- acquistano parte immaginaria e diventano uno il complesso coniugato dell'altro (per un supporto grafico si veda la Figura 2.4), di conseguenza i correlatori asintotici acquisiscono una modulazione periodica. Per questo motivo, la regione $h^2 + \gamma^2 < 1$ del piano h, γ viene detta *fase oscillatoria*.

Arrivati a questo punto, sorge spontaneo chiedersi: perché non abbiamo calcolato direttamente la magnetizzazione? Essa è data, per definizione, da

$$\begin{aligned}
m_x(j) &= \langle GS | \sigma_j^x | GS \rangle \\
&= \pm \frac{1}{2} (\langle GS^+ | \sigma_j^x | GS^- \rangle + \langle GS^- | \sigma_j^x | GS^+ \rangle) \\
&= \pm \frac{1}{2} \langle GS^+ | \sigma_j^x | GS^- \rangle + \text{c.c.} \\
&= \pm \text{Re} \{ \langle GS^+ | \sigma_j^x | GS^- \rangle \}
\end{aligned} \tag{2.3.64}$$

tuttavia, ad oggi, non è ancora stato ideato un metodo per calcolare la (2.3.64), quindi le uniche informazioni sulla magnetizzazione lungo x le dobbiamo dedurre dai correlatori nel limite asintotico.

Capitolo 3

Catena XY frustrata senza campo magnetico esterno

Nel 2020 Marić, Franchini *et al.* [35], [36] hanno mostrato che le condizioni al bordo frustrate (cioè con condizioni al bordo periodiche in anelli con un numero dispari di siti) possono dare origine a inaspettati e stupefacenti comportamenti delle catene di spin antiferromagnetiche, i quali non si verificano con altri tipi di condizioni al bordo (come, ad esempio, *open boundary conditions* o PBC con numero pari di siti). In particolare in [35] e [36] essi hanno dimostrato che la frustrazione può, rispettivamente, distruggere il parametro d'ordine del sistema (espresso dalla magnetizzazione spontanea) e indurre transizioni di fase quantistiche che non sono presenti con altri tipi di condizioni al bordo!

In questo Capitolo ripercorreremo i passaggi effettuati da Marić, Franchini *et al.* in [35] e [36] nel caso di catena XY frustrata in assenza di campo magnetico esterno, con lo scopo di illustrare un esempio emblematico di come le condizioni al bordo possano influenzare pesantemente il comportamento del sistema, persino nel limite termodinamico! Cominceremo con il restringere l'attenzione a $J > 0$ e $h = 0$, riparametrizzando opportunamente il modello. Discuteremo quindi le simmetrie e il ruolo che esse svolgono nel determinare la degenerazione del ground state, che, fatto decisamente controintuitivo, può essere differente nel caso di N pari o N dispari. Discuteremo successivamente nel dettaglio le diverse fasi del modello, costruendone le relative funzioni di correlazione. Mostriamo inoltre che, straordinariamente, nel caso di N dispari, emerge una transizione di fase aggiuntiva.

Sebbene la discussione sia necessariamente tecnica, la motivazione fisica alla base del comportamento peculiare delle catene di spin antiferromagnetiche con condizioni periodiche al contorno e un numero dispari di siti è semplice: il sistema non può avere un ordinamento tipo stato di Néel, dovendo essere presente almeno un kink. L'invarianza per traslazioni del sistema, tuttavia, rende gli stati con un kink una banda gapless, rendendo il sistema radicalmente diverso dal caso con N pari.

3.1 Il modello e le sue simmetrie

Come già anticipato, ci interessiamo alla catena XY antiferromagnetica ($J > 0$) (2.1.6) in assenza di campo magnetico esterno con condizioni al bordo frustrate (FBC), cioè con numero totale N dispari di spin e condizioni periodiche al contorno.

In questo regime, l'Hamiltoniana del modello è data da

$$H = \sum_{j=1}^N \left[\frac{J(1+\gamma)}{4} \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \frac{J(1-\gamma)}{4} \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y \right], \quad (3.1.1)$$

dove si ricordi che le condizioni al contorno sono periodiche, cioè

$$\sigma_j^\alpha = \sigma_{j+N}^\alpha \quad \alpha = x, y, z. \quad (3.1.2)$$

Per comodità futura e per rimanere fedeli alle Ref. [35] e [36], in questo Capitolo utilizzeremo la seguente parametrizzazione per l'Hamiltoniana

$$H = \sum_{j=1}^N \left[\cos(\phi) \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \sin(\phi) \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y \right], \quad (3.1.3)$$

dove, per passare dalla (3.1.1) alla (3.1.3), è necessario richiedere che

$$\cos \phi = \frac{J(1+\gamma)}{4}, \quad \sin \phi = \frac{J(1-\gamma)}{4}. \quad (3.1.4)$$

Dato che $\sin^2 \phi + \cos^2 \phi = 1$, questa riparametrizzazione è possibile solo per scale di energia J che soddisfano la seguente relazione

$$J(\gamma) = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{1+\gamma^2}}. \quad (3.1.5)$$

Scegliendo J in modo tale che soddisfi la (3.1.5), si ha che

$$\cos \phi = \frac{1+\gamma}{\sqrt{2(1+\gamma^2)}}, \quad \sin \phi = \frac{1-\gamma}{\sqrt{2(1+\gamma^2)}}. \quad (3.1.6)$$

In questo Capitolo ci interesseremo alla (3.1.3) limitatamente all'intervallo $\phi \in (-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{4})$, che divideremo in tre regioni:

- Per $\phi \in (-\frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{4})$ si ha che $|\sin \phi| > |\cos \phi|$ e $\sin \phi < 0$ pertanto l'accoppiamento dominante è ferromagnetico lungo y . Di conseguenza, parleremo di regione y-ferromagnetica (yFM).
- Per $\phi \in (-\frac{\pi}{4}, 0)$ si ha che $|\sin \phi| < |\cos \phi|$ e $\cos \phi > 0$ pertanto l'accoppiamento dominante è antiferromagnetico lungo x . Di conseguenza, parleremo di regione x-antiferromagnetica (xAFM).
- Per $\phi \in (0, \frac{\pi}{4})$ si ha che $\sin \phi, \cos \phi > 0$ pertanto c'è accoppiamento antiferromagnetico sia lungo x che lungo y . Di conseguenza, parleremo di regione antiferromagnetica (AFM).

Per lo studio del modello è utile preliminarmente individuare e discutere le simmetrie dell'Hamiltoniana (3.1.3) che lo definisce.

3.1.1 Parità

L'assenza di un campo magnetico esterno implica che tutti gli operatori di parità

$$\Pi^\alpha \equiv \bigotimes_{j=1}^N \sigma_j^\alpha \quad \alpha = x, y, z \quad (3.1.7)$$

commutano con la Hamiltoniana

$$[H, \Pi^\alpha] = 0. \quad \forall \alpha \quad (3.1.8)$$

Crucialmente, tuttavia, fatto che N sia dispari implica che gli operatori di parità non commutino tra loro, bensì anticommutino

$$\{\Pi^\alpha, \Pi^\beta\} = 2\delta_{\alpha\beta}\mathbb{1}. \quad (3.1.9)$$

Le (3.1.8), (3.1.9) hanno un'immediata implicazione di capitale importanza: ogni autostato di H a parità definita è almeno due volte degenere in energia.

Dimostrazione. Scegliamo il sistema di osservabili compatibili $\{H, \Pi^z\}$ e consideriamo un autostato $|\psi\rangle$ di H con energia E e z-parità P :

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad \Pi^z|\psi\rangle = P|\psi\rangle. \quad (3.1.10)$$

Ricordando le (3.1.8), (3.1.9), osserviamo che sono valide le relazioni

$$H(\Pi^{x(y)}|\psi\rangle) = \Pi^{x(y)}H|\psi\rangle = E(\Pi^{x(y)}|\psi\rangle) \quad (3.1.11)$$

$$\Pi^z(\Pi^{x(y)}|\psi\rangle) = -\Pi^{x(y)}\Pi^z|\psi\rangle = -P(\Pi^{x(y)}|\psi\rangle). \quad (3.1.12)$$

Abbiamo cioè che $\Pi^x|\psi\rangle$ e $\Pi^y|\psi\rangle$ hanno la stessa energia di $|\psi\rangle$ ma z-parità opposta. Quindi per ogni autostato di H nel settore a $\Pi^z = \pm 1$ ci sarà sempre almeno un altro autostato con stessa energia nel settore a $\Pi^z = \mp 1$, come volevasi dimostrare.

Un'ultima proprietà utile dell'operatore Π^α è la sua iniettività, cioè

$$\Pi^\alpha|\psi\rangle = \Pi^\alpha|\phi\rangle \iff |\psi\rangle = |\phi\rangle. \quad (3.1.13)$$

Dimostrazione. La \Leftarrow è ovvia, mentre la \Rightarrow segue moltiplicando ambo i membri a sinistra per Π^α .

3.1.2 Traslazioni

Scegliamo la base per lo spazio di Hilbert di un sistema a N spin (su cui è definita la nostra Hamiltoniana (3.1.3)) in modo tale che il vettore di base generico sia

$$|\psi\rangle = \bigotimes_{j=1}^N (\sigma_j^-)^{n_j} |\uparrow_j\rangle \quad \text{con} \quad n_j \in \{0, 1\}, \quad (3.1.14)$$

dove σ_j^- e $|\uparrow_j\rangle$ sono definiti, rispettivamente, da (2.2.6) e (2.1.4). Definiamo l'operatore di traslazione

$$T|\psi\rangle \equiv \bigotimes_{j=1}^N (\sigma_j^-)^{n_{j+1}} |\uparrow_j\rangle, \quad (3.1.15)$$

con $n_{N+1} = n_1$, derivante dalle PBC.

Vediamo alcune proprietà dell'operatore appena definito.

- Dalla (3.1.15) segue immediatamente che $\langle \psi | T^\dagger T | \psi \rangle = 1 \quad \forall |\psi\rangle$, di conseguenza T è unitario, cioè

$$T^\dagger T = \mathbb{1}. \quad (3.1.16)$$

Fisicamente ciò significa che T^\dagger gioca il ruolo di operatore di traslazione nella direzione opposta di T .

- Dalla (3.1.15) segue immediatamente che $T^N |\psi\rangle = |\psi\rangle \quad \forall |\psi\rangle$, di conseguenza gli autovalori di T sono $\{e^{iq}\}_{q \in \Gamma^-}$ dove Γ^- lo avevamo definito in (2.2.29).
- Dalla (3.1.15) segue che

$$T^\dagger \sigma_j^\alpha T = \sigma_{j+1}^\alpha \quad \alpha = x, y, z, \quad (3.1.17)$$

con $\sigma_{N+1}^\alpha = \sigma_1^\alpha$.

La dimostrazione di questa proprietà è istruttiva perché ci permette di acquisire familiarità con l'operatore T ed è riportata in Appendice G.1.

La (3.1.17) ci consente di osservare facilmente che T è una simmetria di (3.1.3), cioè

$$[T, H] = 0 \quad (3.1.18)$$

la cui dimostrazione si trova in Appendice G.2.

Infine, la (3.1.17) implica che l'operatore di traslazione commuta coi tre operatori di parità, cioè

$$[T, \Pi^\alpha] = 0 \quad \alpha = x, y, z \quad (3.1.19)$$

la cui dimostrazione, per la quale è sufficiente sfruttare la (3.1.17) e l'unitarietà di T , è la seguente

$$T^\dagger \Pi^\alpha T = (T^\dagger \sigma_1^\alpha T) (T^\dagger \sigma_2^\alpha T) \dots (T^\dagger \sigma_{N-1}^\alpha T) (T^\dagger \sigma_N^\alpha T) = \Pi^\alpha.$$

3.1.3 Riflessioni

Scegliamo la base (3.1.14) per lo spazio di Hilbert ed effettuiamo il seguente ragionamento: prendiamo un generico vettore $|\psi\rangle$ di tale base, fissiamo un sito $k \in \{1, \dots, N\}$, mandiamo $\forall j = 1, \dots, N$ lo spin che sta sul j -esimo sito nel $(2k - j)$ -esimo sito. È facile osservare che non abbiamo fatto altro che una riflessione dell'anello rispetto al sito k . Chiamiamo $M_k |\psi\rangle$ il nuovo vettore che si ottiene a seguito di tale procedimento, dove abbiamo definito implicitamente l'operatore M_k di riflessione rispetto al sito k :

$$M_k |\psi\rangle = M_k \bigotimes_{j=1}^N (\sigma_j^-)^{n_j} |\uparrow_j\rangle \equiv \bigotimes_{j=1}^N (\sigma_j^-)^{n_{2k-j}} |\uparrow_j\rangle, \quad (3.1.20)$$

dove, come sempre, $n_{j+N} = n_j$ dalle PBC (3.1.2).

Dalla (3.1.20) osserviamo che:

- M_k lascia invariate le interazioni tra primi vicini, pertanto, in quanto a z-parità ed energia, $M_k |\psi\rangle$ è equivalente a $|\psi\rangle$, per ogni $|\psi\rangle$ della base (3.1.14). In formule

$$\begin{aligned} HM_k |\psi\rangle &= M_k H |\psi\rangle \\ \Pi^\alpha M_k |\psi\rangle &= M_k \Pi^\alpha |\psi\rangle, \end{aligned}$$

$\forall |\psi\rangle$ della base (3.1.14) dello spazio di Hilbert. Seguono quindi le seguenti regole di commutazione:

$$[M_k, H] = 0 \quad (3.1.21)$$

$$[M_k, \Pi^\alpha] = 0 \quad \alpha = x, y, z. \quad (3.1.22)$$

- Esattamente come per T , è evidente che si abbia $\langle \psi | M_k^\dagger M_k | \psi \rangle = 1$, $\forall |\psi\rangle$ della base (3.1.14), pertanto M_k è unitario, cioè

$$M_k^\dagger M_k = \mathbb{1}. \quad (3.1.23)$$

D'altra parte si ha anche che

$$M_k^2 = \mathbb{1}, \quad (3.1.24)$$

di conseguenza M_k è hermitiano, cioè

$$M_k^\dagger = M_k, \quad (3.1.25)$$

con autovalori ± 1 .

- Gli operatori di riflessione sono legati a quelli di traslazione dalla relazione

$$T^\dagger M_k T = M_{k+1}. \quad (3.1.26)$$

Convinciamoci della validità di tale relazione con un esempio:

$$|\psi\rangle = |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle \xrightarrow{T} |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle \xrightarrow{M_2} |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle \xrightarrow{T^\dagger} |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle \xleftarrow{M_3} |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle = |\psi\rangle.$$

Il ragionamento è facilmente generalizzabile al caso di generico $|\psi\rangle$ della base (3.1.14).

Si osservi che dalla (3.1.26) segue che

$$[M_k, T] \neq 0. \quad (3.1.27)$$

3.2 Soluzione esatta

La (3.1.3) è il caso particolare della (2.1.6) con $h = 0$ e J dato dalla (3.1.5).

Il ragionamento che seguiamo per diagonalizzare la Hamiltoniana è ovviamente lo stesso che abbiamo intrapreso nella Sezione 2.2, quindi si rimanda a quel Capitolo per i dettagli.

Nella Sezione 2.2 abbiamo già commentato che la Hamiltoniana è scrivibile come

$$H = \frac{1 + \Pi^z}{2} H^+ + \frac{1 - \Pi^z}{2} H^-, \quad (3.2.1)$$

dove, dalla (2.2.24),

$$H^\pm = \frac{J(\gamma)}{2} \sum_{j=1}^N \left[\psi_{j+1}^{(\pm)\dagger} \psi_j^{(\pm)} + \gamma \psi_{j+1}^{(\pm)} \psi_j^{(\pm)} + \text{h.c.} \right]. \quad (3.2.2)$$

Dalla (3.1.4) segue che

$$\cos \phi + \sin \phi = \frac{J}{2} \quad \cos \phi - \sin \phi = \frac{J}{2} \gamma, \quad (3.2.3)$$

quindi

$$H^\pm = \sum_{j=1}^N \left[(\cos \phi + \sin \phi) \psi_{j+1}^{(\pm)\dagger} \psi_j^{(\pm)} + (\cos \phi - \sin \phi) \gamma \psi_{j+1}^{(\pm)} \psi_j^{(\pm)} + \text{h.c.} \right]. \quad (3.2.4)$$

Seguendo [35] e [36], usiamo le seguenti convenzioni per la trasformata di Fourier

$$\psi_j^{(\pm)} \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q \in \Gamma^\pm} b_q e^{iqj} \quad (3.2.5)$$

$$b_q = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N \psi_j^{(\pm)} e^{-iqj}. \quad q \in \Gamma^\pm \quad (3.2.6)$$

e per la trasformazione di Bogoliubov

$$a_q \equiv \begin{cases} \cos \theta_q b_q + i \sin \theta_q b_{2\pi-q}^\dagger & \text{se } q \in \Gamma^+ \setminus \{\pi\}, \Gamma^- \setminus \{0\} \\ b_q & \text{se } q = 0, \pi, \end{cases} \quad (3.2.7)$$

dove, al fine di poter scrivere H^\pm come Hamiltoniane di fermioni liberi, scegliamo l'angolo di Bogoliubov θ_q tale che

$$\theta_q = \frac{|\sin \phi + \cos \phi e^{i2q}| - (\sin \phi + \cos \phi) \cos q}{(\cos \phi - \sin \phi) \sin q}, \quad (3.2.8)$$

o, equivalentemente,

$$e^{i2\theta_q} = e^{iq} \frac{\cos \phi + \sin \phi e^{-i2q}}{|\cos \phi + \sin \phi e^{-i2q}|}. \quad (3.2.9)$$

Arriviamo dunque a

$$H^\pm = \sum_{q \in \Gamma^\pm} \bar{\epsilon}(q) \left(a_q^{(\pm)\dagger} a_q^{(\pm)} - \frac{1}{2} \right), \quad (3.2.10)$$

dove, utilizzando le (3.1.4) e (3.1.5), si può mostrare facilmente per computo diretto che si ha

$$\bar{\epsilon}(q \neq 0, \pi) = 2 |\sin \phi + e^{i2q} \cos \phi| = 2 \sqrt{1 + \sin(2\phi) \cos(2q)} \quad (3.2.11)$$

$$\bar{\epsilon}(0) = -\bar{\epsilon}(\pi) = 2(\sin \phi + \cos \phi). \quad (3.2.12)$$

Si osservi che i momenti $0 \in \Gamma^-$ e $\pi \in \Gamma^+$ sono particolari perché sono gli unici che possono avere un'energia associata negativa. In particolare, per ogni settore di parità c'è sempre un solo stato a energia negativa.

Ora cerchiamo il ground state $|GS\rangle$ di H nelle tre fasi definite a inizio Capitolo. Denoteremo con $|GS'^\pm\rangle$ e $|GS^\pm\rangle$ il ground state di, rispettivamente, H^\pm e $\frac{1 \pm \Pi^z}{2} H^\pm$. In questo Capitolo chiameremo $|0^\pm\rangle$ i vuoti per i fermioni di Bogoliubov a . In formule

$$a_q |0^\pm\rangle \equiv 0 \quad q \in \Gamma^\pm. \quad (3.2.13)$$

Utilizzando questa definizione, si può verificare che

$$|0^\pm\rangle = \prod_{q \in \Gamma^\pm, q \neq 0, \pi} \left(\cos \theta_q - i \sin \theta_q b_q^\dagger b_{2\pi-q}^\dagger \right) |0\rangle, \quad (3.2.14)$$

da cui osserviamo che $|0^+\rangle$ e $|0^-\rangle$ sono stati a numero pari di fermioni di Wigner-Jordan, di conseguenza hanno z-parità $+1$, cioè

$$\Pi^z |0^\pm\rangle = |0^\pm\rangle. \quad (3.2.15)$$

3.3 Transizione di fase quantistica

In questa Sezione mostreremo che il sistema (3.1.3), nel passaggio dalla regione xAFM alla regione AFM, esibisce una transizione di fase quantistica del primo ordine, la quale osserveremo essere indotta dalle condizioni al bordo frustrate. In particolare, la dimostrazione dell'esistenza di questa transizione di fase si baserà su un'analisi perturbativa effettuata intorno al punto classico $\phi = 0$, in corrispondenza del quale il modello si riduce alla catena di Ising 1D frustrata in assenza di campo magnetico esterno, cioè

$$H|_{\phi=0} = \sum_{j=1}^N \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x, \quad (3.3.1)$$

con condizioni al bordo frustrate (FBC).

Prima di incominciare è interessante capire cosa significa studiare (3.1.3) in un intorno di $\phi = 0$ in termini del parametro d'anisotropia γ di (2.1.6). Quest'ultimo è legato a ϕ tramite le (3.1.6), dalle quali osserviamo che

$$\phi \sim 0^\pm \iff \gamma \sim 1^\mp \quad (3.3.2)$$

cioè

$$(h, \gamma) = (0, 1^-) \in \text{regione AFM} \quad (h, \gamma) = (0, 1^+) \in \text{regione xAFM}. \quad (3.3.3)$$

Nella base $\{|\sigma_1, \dots, \sigma_N\rangle\}$ dello spazio di Hilbert, definita da

$$\sigma_j^x |\sigma_1, \dots, \sigma_j, \dots, \sigma_N\rangle \equiv \sigma_j |\sigma_1, \dots, \sigma_j, \dots, \sigma_N\rangle \quad j = 1, \dots, N \quad (3.3.4)$$

si ha che

$$GS|_{\phi=0} = \text{span}\{|j\rangle, \Pi^z |j\rangle\}_{j=1, \dots, N} \quad (3.3.5)$$

dove

$$|j\rangle \equiv |\dots, 1, -1, \underbrace{1}_{\text{sito } j}, 1, -1, 1, \dots\rangle \quad (3.3.6)$$

$$\Pi^z |j\rangle = |\dots, -1, 1, \underbrace{-1}_{\text{sito } j}, -1, 1, -1, \dots\rangle, \quad (3.3.7)$$

i quali hanno un solo legame ferromagnetico tra gli spin sui siti j e $j+1$ e legami antiferromagnetici tra tutti gli altri primi vicini. Chiameremo *kink states* gli stati

di questo tipo e *domain wall* il legame ferromagnetico.

Si osservi che

$$\Pi^x |j\rangle = (-1)^{\frac{N-1}{2}} |j\rangle \quad \Pi^x \Pi^z |j\rangle = (-1)^{\frac{N+1}{2}} \Pi^z |j\rangle \quad (3.3.8)$$

Dalla (3.3.5) osserviamo che lo stato fondamentale è $2N$ -volte degenere e ha energia

$$E_0 = -N + 2. \quad (3.3.9)$$

Il primo livello eccitato è generato dagli stati della base (3.3.4) che si ottengono a partire dai kink states aggiungendo un domain wall. Esso ha energia $E_1|_{\phi=0} = -N + 6$ dato che all'aggiunta di un domain wall corrisponde un aumento di energia $\Delta E = 4$.

Ora studiamo come si modifica il ground state di (3.1.3) quando ci muoviamo in un intorno del punto classico $\phi = 0$ (cioè $0 \neq \phi \ll 1$), dove possiamo trattare $\sin \phi \sum_{j=1}^N \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y$ come perturbazione di $H|_{\phi=0}$. Dalla teoria delle perturbazioni indipendenti dal tempo nel caso degenere [37] sappiamo che per trovare le correzioni perturbative al ground state dobbiamo diagonalizzare la seguente matrice

$$\left(\sum_{l=1}^N \sigma_l^y \sigma_{l+1}^y \right)_{ij} \equiv \langle i | \sum_{l=1}^N \sigma_l^y \sigma_{l+1}^y | j \rangle \quad i, j = 1, \dots, N, \quad (3.3.10)$$

dove abbiamo implicitamente osservato che poiché la perturbazione conserva la x -parità, è sufficiente studiarla in uno dei due sottospazi del ground state a x -parità definita. Nel settore a x -parità opposta rispetto a quello che abbiamo deciso di considerare, le correzioni agli autovalori di H saranno esattamente le stesse e gli autovettori corrispondenti saranno gli stessi a meno di una moltiplicazione a sinistra per Π^z .

Iniziamo col cercare un'espressione esplicita per la matrice (3.3.10). Essendo generica la dimensione di tale matrice, far ciò non è a priori banale, quindi partiremo da un esempio a N fissato e, successivamente, generalizzeremo per un N generico.

Scegliamo, ad esempio, di fissare $N = 7$. In questo caso la base imperturbata a x -parità negativa è, esplicitamente, la seguente:

$$\begin{aligned} |1\rangle &= \left| \boxed{1, 1}, -1, 1, -1, 1, -1 \right\rangle \\ |2\rangle &= \left| -1, \boxed{1, 1}, -1, 1, -1, 1 \right\rangle \\ |3\rangle &= \left| 1, -1, \boxed{1, 1}, -1, 1, -1 \right\rangle \\ |4\rangle &= \left| -1, 1, -1, \boxed{1, 1}, -1, 1 \right\rangle \\ |5\rangle &= \left| 1, -1, 1, -1, \boxed{1, 1}, -1 \right\rangle \\ |6\rangle &= \left| -1, 1, -1, 1, -1, \boxed{1, 1} \right\rangle \\ |7\rangle &= \left| \boxed{1}, -1, 1, -1, 1, -1, \boxed{1} \right\rangle \end{aligned} \quad (3.3.11)$$

dove ho riquadrato i domain walls.

D'altra parte si ha che

$$\sum_{l=1}^7 \sigma_l^y \sigma_{l+1}^y = \sigma_1^y \sigma_2^y + \sigma_2^y \sigma_3^y + \sigma_3^y \sigma_4^y + \sigma_4^y \sigma_5^y + \sigma_5^y \sigma_6^y + \sigma_6^y \sigma_7^y + \sigma_7^y \sigma_1^y, \quad (3.3.12)$$

dove

$$\sigma_l^y \sigma_{l+1}^y = (\tilde{\sigma}_l^+ + \tilde{\sigma}_l^-)(\tilde{\sigma}_{l+1}^+ + \tilde{\sigma}_{l+1}^-), \quad (3.3.13)$$

con

$$\tilde{\sigma}_l^\pm \equiv \frac{\sigma_l^y \pm i\sigma_l^z}{2}. \quad (3.3.14)$$

Quindi è evidente che l'azione di $\sigma_l^y \sigma_{l+1}^y$ su un generico kink state $|j\rangle$ sia semplicemente quella di cambiare il segno agli spin lungo x sui siti l ed $l+1$. Di conseguenza se, ad esempio, consideriamo $\sum_{l=1}^7 \sigma_l^y \sigma_{l+1}^y |1\rangle$, gli unici addendi della perturbazione (3.3.12) che mi fanno rimanere nel sottospazio generato da $\{|1\rangle, \dots, |7\rangle\}$ sono $\sigma_2^y \sigma_3^y$ e $\sigma_7^y \sigma_1^y$, dato che tutti gli altri operatori mappano $|1\rangle$ in uno stato con due domain walls. Facendo lo stesso identico ragionamento per i restanti sei kink states, si conclude che la matrice che rappresenta la perturbazione (3.3.12) nella base $\{|1\rangle, \dots, |7\rangle\}$ è la seguente

$$\sum_{j=1}^7 \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y \longrightarrow \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.3.15)$$

Il ragionamento fatto per $N = 7$ si può ovviamente applicare inalterato al caso di N generico, dove è semplice convincersi che

$$\sum_{j=1}^N \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y \longrightarrow \begin{pmatrix} c_0 & c_{N-1} & \dots & c_2 & c_1 \\ c_1 & c_0 & \dots & c_3 & c_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ c_{N-2} & c_{N-1} & \dots & c_0 & c_{N-1} \\ c_{N-1} & c_{N-2} & \dots & c_1 & c_0 \end{pmatrix}, \quad (3.3.16)$$

dove

$$c_i = \delta_{i,2} + \delta_{i,N-2} \quad i = 0, \dots, N-1. \quad (3.3.17)$$

Si osservi che la perturbazione è rappresentata sulla base $\{|1\rangle, \dots, |N\rangle\}$ da una matrice circolante, cioè una matrice quadrata in cui la differenza tra una riga e la successiva consiste in uno shift di una posizione verso destra di tutte le entrate. Si noti che le matrici circolanti sono un tipo particolare di matrici di Toeplitz. Il fatto che la perturbazione sia rappresentata da una matrice circolante è favorevole perché molte delle proprietà di tali matrici, tra cui autovettori e autovalori, sono note dalla Matematica [38].

Gli autovettori normalizzati a 1 di una qualsiasi matrice circolante non dipendono dalle entrate c_i e sono dati da

$$|s_q\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}(|0\rangle + e^{iq}|1\rangle + e^{i2q}|2\rangle + \dots + e^{i(N-1)q}|N-1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{iqj}|j\rangle \quad q \in \Gamma^-. \quad (3.3.18)$$

Gli autovalori corrispondenti sono

$$\begin{aligned} \lambda_k &= c_0 + c_{N-1} e^{i\frac{2\pi}{N}k} + c_{N-2} e^{i\frac{2\pi}{N}2k} + \dots + c_1 e^{i\frac{2\pi}{N}(N-1)k} \\ &= e^{i\frac{2\pi}{N}2k} + e^{i\frac{2\pi}{N}(N-2)k} = e^{i\frac{2\pi}{N}2k} + e^{i\frac{-2\pi}{N}2k} = 2 \cos\left(2\frac{2\pi k}{N}\right) \quad k = 0, \dots, N-1, \end{aligned}$$

cioè

$$\lambda_q = 2 \cos(2q) \quad q \in \Gamma^-. \quad (3.3.19)$$

Per ricapitolare, abbiamo trovato che, al primo ordine in teoria delle perturbazioni nella variabile $\sin \phi$, il ground state imperturbato $2N$ -volte degenerare con energia (3.3.9) è splittato in $2N$ stati $\{|s_q\rangle, \Pi^z |s_q\rangle\}_{q \in \Gamma^-}$, degeneri a coppie ognuna delle quali è indicizzata da un $q \in \Gamma^-$, formata da $|s_q\rangle$ e $\Pi^z |s_q\rangle$ e ha energia

$$E_q = E_0 \cos \phi + \lambda_q \sin \phi = -(N-2) \cos \phi + 2 \cos(2q) \sin \phi \quad q \in \Gamma^-. \quad (3.3.20)$$

Dall'espressione di E_q appena scritta osserviamo che per $\phi < 0$ l'energia è minima quando $q = 0$ mentre per $\phi > 0$ lo è quando $q = p$, quindi il ground state nell'intorno di $\phi = 0$ ha la seguente energia

$$E_{GS}(\phi) = \begin{cases} -(N-2) \cos \phi + 2 \sin \phi & \text{per } \phi \rightarrow 0^- \\ -(N-2) \cos \phi + 2 \sin \phi \cos(2p) & \text{per } \phi \rightarrow 0^+, \end{cases} \quad (3.3.21)$$

la cui derivata prima rispetto a ϕ è

$$\frac{dE_{GS}}{d\phi} = \begin{cases} (N-2) \sin \phi + 2 \cos \phi \simeq 2 & \text{per } \phi \rightarrow 0^- \\ (N-2) \sin \phi + 2 \cos \phi \cos(2p) \simeq 2 \cos(2p) & \text{per } \phi \rightarrow 0^+, \end{cases} \quad (3.3.22)$$

dove, sostituendo la (3.4.11), si ha che

$$\cos(2p) = \cos \left[\pi \left(1 + (-1)^{\frac{N+1}{2}} \frac{1}{N} \right) \right] = -\cos \left(\frac{\pi}{N} \right).$$

In conclusione, abbiamo trovato che

$$\left. \frac{dE_{GS}}{d\phi} \right|_{\phi \rightarrow 0^-} - \left. \frac{dE_{GS}}{d\phi} \right|_{\phi \rightarrow 0^+} = 2 \left(1 + \cos \left(\frac{\pi}{N} \right) \right), \quad (3.3.23)$$

cioè la derivata prima dell'energia dello stato fondamentale è discontinua in $\phi = 0$ e tale punto di discontinuità sopravvive anche nel limite termodinamico! Abbiamo quindi dimostrato l'esistenza di una transizione di fase quantistica del primo ordine nel passaggio da $\phi < 0$ a $\phi > 0$. Il punto fondamentale è che questa transizione di fase è indotta dalla frustrazione! Per convincerci di ciò, consideriamo lo stesso modello ma con N pari. In tal caso, il ground state nel punto classico (3.3.1) ha degenerazione due ed è generato da

$$|E_0\rangle \equiv |1, -1, 1, -1, \dots, 1, -1\rangle \quad \Pi^z |E_0\rangle = |-1, 1, -1, 1, \dots, -1, 1\rangle. \quad (3.3.24)$$

Osserviamo che gli stati $\sigma_j^y \sigma_{j+1}^y |E_0\rangle$ e $\sigma_j^y \sigma_{j+1}^y \Pi^z |E_0\rangle$ contengono ben due domain walls di segno opposto in corrispondenza delle coppie di primi vicini $(j-1, j)$ e $(j+1, j+2)$, di conseguenza la correzione ai livelli al primo ordine perturbativo in $\sin \phi$ è nulla, a differenza del caso frustrato. In conclusione, in assenza di frustrazione la transizione di fase quantistica del primo ordine non si ha.

3.4 Stato fondamentale

In questa Sezione determineremo lo stato fondamentale del sistema e, in particolare, mostreremo che esso è soggetto a un cambio di degenerazione nel passaggio dalla fase xAFM a quella AFM. Infine confronteremo i risultati del caso frustrato con quelli in assenza di frustrazione (N pari).

Regione yFM

Per $\phi \in (-\frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{4})$ l'unico stato a energia negativa è $a_0^\dagger |0^- \rangle$, quindi

$$|GS'^+\rangle = |0^+\rangle \quad |GS'^-\rangle = a_0^\dagger |0^- \rangle,$$

che hanno z-parità, rispettivamente, +1 e -1, quindi

$$|GS^+\rangle = |0^+\rangle \quad |GS^-\rangle = a_0^\dagger |0^- \rangle. \quad (3.4.1)$$

Sapendo che il ground state di H è formato da coppie di stati a opposta z-parità, concludiamo che $|GS\rangle$ è doppiamente degenero e dato da

$$GS = \text{span} \left\{ |0^+\rangle, a_0^\dagger |0^- \rangle \right\}. \quad (3.4.2)$$

Gli stati eccitati si ottengono applicando coppie di operatori di creazione a $|GS^+\rangle$ e $|GS^-\rangle$. Poiché nella regione $(-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ il minimo dello spettro (3.2.11) è maggiore di zero, concludiamo che $|GS\rangle$ è sempre separato dagli stati eccitati da un gap, anche nel limite termodinamico.

Regione xAFM

Per $\phi \in (-\frac{\pi}{4}, 0)$ invece l'unico stato a energia negativa è $a_\pi^\dagger |0^+\rangle$, quindi

$$|GS'^+\rangle = a_\pi^{(+)\dagger} |0^+\rangle \quad |GS'^-\rangle = |0^- \rangle, \quad (3.4.3)$$

che hanno z-parità uguale a, rispettivamente, -1 e +1. Quindi $|GS'^{\pm}\rangle \neq |GS^{\pm}\rangle$ e questi ultimi si trovano applicando a $|GS'^{\pm}\rangle$ l'operatore di creazione che dà la minima eccitazione possibile. Dalla (3.2.11) osserviamo che nella regione xAFM i minimi dello spettro sono in corrispondenza di $q = 0 \in \Gamma^-$ e $q = \pi \in \Gamma^+$, dove $\bar{\epsilon}(q)$ assume lo stesso valore. Quindi sicuramente

$$|GS^-\rangle = a_0^\dagger |0^- \rangle, \quad (3.4.4)$$

mentre è meno banale trovare $|GS^+\rangle$, i cui candidati sono $|0^+\rangle$ e

$$\text{span} \left\{ a_{\frac{\pi}{N}}^\dagger a_\pi^\dagger |0^+\rangle, a_{2\pi - \frac{\pi}{N}}^\dagger a_\pi^\dagger |0^+\rangle \right\}$$

con energie, rispettivamente,

$$E_0^+ \equiv -\frac{1}{2} \sum_{q \in \Gamma^+, q \neq \pi, \frac{\pi}{N}} \bar{\epsilon}(q) - \frac{1}{2} \bar{\epsilon}\left(\frac{\pi}{N}\right) - \frac{1}{2} \bar{\epsilon}(\pi) \quad (3.4.5)$$

$$E_2^+ \equiv -\frac{1}{2} \sum_{q \in \Gamma^+, q \neq \pi, \frac{\pi}{N}} \bar{\epsilon}(q) + \frac{1}{2} \bar{\epsilon}\left(\frac{\pi}{N}\right) + \frac{1}{2} \bar{\epsilon}(\pi). \quad (3.4.6)$$

La differenza di energia tra i due stati è

$$E_2^+ - E_0^+ = \bar{\epsilon}\left(\frac{\pi}{N}\right) + \bar{\epsilon}(\pi) > 0, \quad (3.4.7)$$

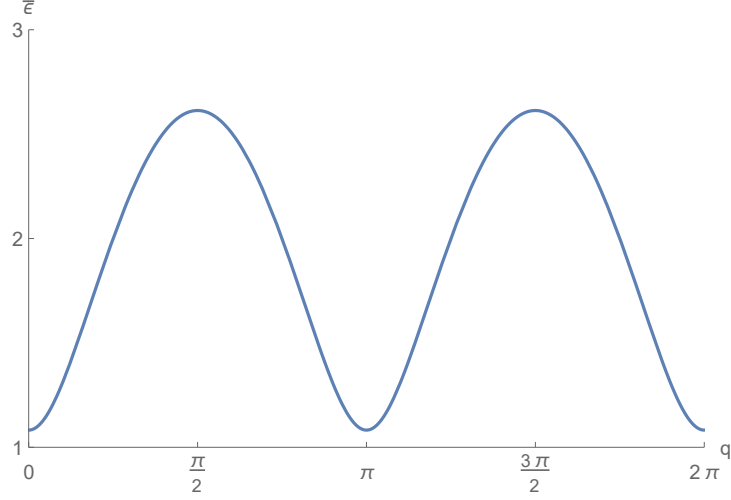


Figura 3.1: $\bar{\epsilon}(q)$ in funzione di $q \in [0, 2\pi)$ per $\phi = -\frac{\pi}{8}$.

quindi

$$|GS^+\rangle = |0^+\rangle. \quad (3.4.8)$$

Concludiamo quindi che il ground state della regione xAFM è doppiamente degenere ed è dato da

$$GS = \text{span} \left\{ |0^+\rangle, a_0^\dagger |0^-\rangle \right\}, \quad (3.4.9)$$

che è lo stesso della regione yFM (eq. (3.4.2)). La regione xAFM presenta tuttavia un'importante differenza rispetto alla yFM: dalla (3.4.7) deduciamo che nel limite termodinamico gli stati formano una banda gapless. Altre differenze tra regione yFM e xAFM si possono osservare studiando il comportamento delle funzioni di correlazione e della magnetizzazione nelle due regioni.

Regione AFM

Per $\phi \in (0, \frac{\pi}{4})$ l'unico stato a energia negativa è ancora $a_\pi^\dagger |0^+\rangle$, quindi $|GS'^+\rangle$ e $|GS'^-\rangle$ sono gli stessi della regione xAFM (eq. (3.4.3)) e hanno z-parità uguali a, rispettivamente, -1 e $+1$. Quindi $|GS'^\pm\rangle \neq |GS^\pm\rangle$. Per trovare $|GS^\pm\rangle$ (e, di conseguenza, $|GS\rangle$) dovremo trovare le eccitazioni minime di (3.4.3) che siano compatibili col settore di parità in cui ci troviamo. Graficando $\bar{\epsilon}(x)$ (cioè l'estensione a funzione della successione (3.2.11)) nell'intervallo $x \in [0, 2\pi)$ si osserva che essa è simmetrica rispetto a $x = \pi$ e presenta due minimi uguali in corrispondenza di $x = \frac{\pi}{2}$ e $x = \frac{3\pi}{2}$ (si veda Figura 3.2).

Concentriamoci su $\frac{1-\Pi^z}{2}H^-$ e osserviamo anzitutto che $\frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2} \notin \Gamma^-$. Di conseguenza, definiamo p come il momento in Γ^- più vicino a $\frac{\pi}{2}$. È facile convincersi che (la prova è per induzione):

$$p = \begin{cases} \frac{\pi}{2} \left(1 - \frac{1}{N}\right) & \text{se } N \bmod 4 = 1 \\ \frac{\pi}{2} \left(1 + \frac{1}{N}\right) & \text{se } N \bmod 4 = 3 \end{cases} \quad (3.4.10)$$

$$= \frac{\pi}{2} \left(1 + (-1)^{\frac{N+1}{2}} \frac{1}{N}\right) \quad (3.4.11)$$

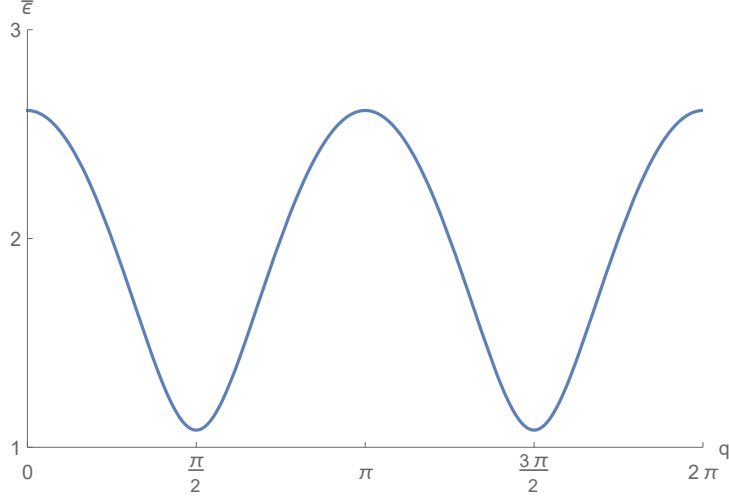


Figura 3.2: $\bar{\epsilon}(q)$ in funzione di $q \in [0, 2\pi)$ nel caso di $\phi = \frac{\pi}{8}$.

Dalla simmetria di $\bar{\epsilon}(x)$ rispetto a $x = \pi$ e dal fatto che $\Gamma^- \setminus \{0\} = 2\pi - (\Gamma^- \setminus \{0\})$ segue che il momento in Γ^- più vicino a $\frac{3}{2}\pi$ è $2\pi - p$. Quindi

$$GS^- = \text{span} \left\{ a_p^\dagger |0^-\rangle, a_{2\pi-p}^\dagger |0^-\rangle \right\} \quad (3.4.12)$$

da cui

$$GS^+ = \text{span} \left\{ \Pi^x a_p^\dagger |0^-\rangle, \Pi^x a_{2\pi-p}^\dagger |0^-\rangle \right\}. \quad (3.4.13)$$

Quindi concludiamo che nella regione AFM il ground state è quattro volte degenero ed è il seguente:

$$GS = \text{span} \left\{ a_p^\dagger |0^-\rangle, a_{2\pi-p}^\dagger |0^-\rangle, \Pi^x a_p^\dagger |0^-\rangle, \Pi^x a_{2\pi-p}^\dagger |0^-\rangle \right\} \quad (3.4.14)$$

Scriveremo il suo elemento generico come

$$|GS\rangle = u_1 |p\rangle + u_2 |2\pi - p\rangle + u_3 \Pi^x |2\pi - p\rangle + u_4 \Pi^x |p\rangle, \quad (3.4.15)$$

dove abbiamo utilizzato la seguente notazione

$$|q\rangle \equiv a_q^\dagger |0^\pm\rangle \quad q \in \Gamma^\pm \quad (3.4.16)$$

e dove $\{u_i\} \in \mathbb{C}$ tali che $\sum_i |u_i|^2 = 1$.

3.4.1 Confronto col caso non frustrato

La sostanziale differenza tra il caso frustrato (trattato in questo Capitolo) e quello non frustrato (N pari) è la seguente: $\pi \in \Gamma^+$ (Γ^-) quando N è dispari (pari). In altre parole, quando N è dispari si ha che l'insieme Γ^- sia 0 che π . È facile mostrare che questo fatto implica che in assenza di frustrazione si ha il seguente stato fondamentale doppiamente degenero

$$GS = \begin{cases} \text{span} \left\{ |0^+\rangle, a_0^\dagger |0^-\rangle \right\} & \text{se } \phi \in \left(-\frac{\pi}{2}, 0\right) \\ \text{span} \left\{ |0^+\rangle, a_\pi^\dagger |0^-\rangle \right\} & \text{se } \phi \in \left(0, \frac{\pi}{4}\right), \end{cases} \quad (3.4.17)$$

che, nel limite termodinamico, è *gapped* e ha energia per sito data da

$$\frac{E_0}{N} = -\frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} |\epsilon(q)| dq. \quad (3.4.18)$$

3.5 Magnetizzazione

In questa Sezione estrarremo interessanti informazioni sul comportamento fisico del sistema a temperatura nulla a partire dallo studio della magnetizzazione nelle varie regioni.

3.5.1 Regioni yFM e xAFM

Nelle Sezioni 3.4 e 3.4 abbiamo mostrato che per $\phi \in (-\frac{\pi}{2}, 0)$ (cioè nelle regioni yFM e xAFM) lo stato fondamentale è dato da (3.4.2), da cui segue che il suo elemento generico è scrivibile così

$$|GS\rangle = [\cos\theta + \sin\theta e^{i\psi}\Pi^x] |GS^+\rangle \quad \theta \in [0, 2\pi), \psi \in \mathbb{R}. \quad (3.5.1)$$

In questa Sezione concentreremo la nostra attenzione sulla magnetizzazione

$$m_\alpha(j) \equiv \langle GS | \sigma_j^\alpha | GS \rangle \quad \alpha = x, y, z \quad (3.5.2)$$

nelle regioni yFM e xAFM.

Per quanto riguarda la componente x si ha che

$$\begin{aligned} m_x(j) &= \langle GS | \sigma_j^x | GS \rangle \\ &= \cos^2\theta \langle GS^+ | \sigma_j^x | GS^+ \rangle + \sin^2\theta \langle GS^+ | \Pi^x \sigma_j^x \Pi^x | GS^+ \rangle + \\ &\quad + \frac{1}{2} \sin(2\theta) [e^{i\psi} \langle GS^+ | \sigma_j^x \Pi^x | GS^+ \rangle + e^{-i\psi} \langle GS^+ | \Pi^x \sigma_j^x | GS^+ \rangle] \\ &= \sin(2\theta) \cos\psi \langle GS^+ | \tilde{\Pi}_j^x | GS^+ \rangle, \end{aligned} \quad (3.5.3)$$

dove ho definito

$$\tilde{\Pi}_j^\alpha \equiv \bigotimes_{l=1, l \neq j}^N \sigma_l^\alpha \quad (3.5.4)$$

e dove, nel passaggio dalla seconda alla terza uguaglianza, ho osservato che i primi due addendi sono nulli perché σ_j^x cambia segno alla z-parità dello stato su cui agisce. Procedendo in maniera analoga, si può mostrare che

$$m_y(j) \propto \langle GS^+ | \tilde{\Pi}_j^y | GS^+ \rangle. \quad (3.5.5)$$

Quindi, per determinare $m_x(j)$ e $m_y(j)$ è sufficiente calcolare, rispettivamente, $\langle GS^+ | \tilde{\Pi}_j^x | GS^+ \rangle$ e $\langle GS^+ | \tilde{\Pi}_j^y | GS^+ \rangle$.

Utilizzando la (3.1.17), si dimostra che (dettagli in Appendice H.1)

$$\langle GS^+ | \tilde{\Pi}_j^x | GS^+ \rangle = \langle GS^+ | \tilde{\Pi}_1^x | GS^+ \rangle \quad (3.5.6)$$

$$\langle GS^+ | \tilde{\Pi}_j^y | GS^+ \rangle = \langle GS^+ | \tilde{\Pi}_1^y | GS^+ \rangle, \quad (3.5.7)$$

le quali implicano che le magnetizzazioni $m_x(j)$ ed $m_y(j)$ sono indipendenti dal sito j , ossia sono ferromagnetiche e costanti! Si osservi che, nonostante l'accoppiamento lungo x sia antiferromagnetico (addirittura dominante per $\phi \in (-\frac{\pi}{4}, 0)$), la componente x della magnetizzazione sorprendentemente non è antiferromagnetica. Questo fatto è ovviamente figlio delle FBC.

Per stabilire il valore di m_x ed m_y è necessario calcolare $\langle GS^+ | \tilde{\Pi}_1^x | GS^+ \rangle$ e $\langle GS^+ | \tilde{\Pi}_1^y | GS^+ \rangle$.

Il loro calcolo dettagliato si trova in Appendice H.1, dove si mostra che essi sono proporzionali a determinanti di matrici di Toeplitz di dimensione $\frac{N-1}{2} \times \frac{N-1}{2}$. I teoremi relativi al comportamento asintotico dei Determinanti di Toeplitz [15] ci permettono di calcolare m_x ed m_y solo nel limite termodinamico ($N \rightarrow \infty$). Si trova che [35]

$$m_x \underset{\infty}{\overset{N \gg 1}{\propto}} \begin{cases} \frac{\cot \frac{N-1}{2} \phi}{(1 - \cot^2 \phi)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\pi(N-1)/2}} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0 & \text{in yFM} \\ (-1)^{\frac{N-1}{2}} \frac{1}{N} (1 - \tan^2 \phi)^{\frac{1}{4}} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0 & \text{in xAFM} \end{cases} \quad (3.5.8)$$

e

$$m_y \underset{\infty}{\overset{N \gg 1}{\propto}} \begin{cases} (1 - \cot^2 \phi)^{\frac{1}{4}} & \text{in yFM} \\ \frac{2}{N} \frac{(1 - \tan \phi)^{\frac{1}{4}}}{(1 + \tan \phi)^{\frac{3}{4}}} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0 & \text{in xAFM.} \end{cases} \quad (3.5.9)$$

Si osservi che la componente x della magnetizzazione ferromagnetica nella regione xAFM diventa sempre più piccola all'aumentare delle dimensioni del sistema. La magnetizzazione nella regione xAFM è detta *magnetizzazione ferromagnetica mesoscopica* e la regione stessa del modello (3.1.3) è chiamata *Fase Ferromagnetica Mesoscopica (MFP)*.

In Appendice H.2 è riportato anche il calcolo della componente z della magnetizzazione. Si trova che

$$m_z \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0 \quad (3.5.10)$$

in entrambe le regioni yFM e xAFM.

3.5.2 Regione AFM

Abbiamo mostrato che il generico vettore dello stato fondamentale nella regione AFM è dato dalla (3.4.15). Tra le possibilità che abbiamo, scegliamo di considerare per i nostri calcoli futuri uno stato fondamentale che non sia invariante per traslazioni. In particolare, assumeremo che il sistema si trovi nel seguente stato quantistico

$$|\tilde{g}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|p\rangle + e^{i\theta} \Pi^x |2\pi - p\rangle) \quad \theta \in \mathbb{R} \quad (3.5.11)$$

che non è invariante per traslazioni, dato che

$$T |\tilde{g}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (T |p\rangle + e^{i\theta} \Pi^x T |2\pi - p\rangle) = e^{ip} \frac{1}{\sqrt{2}} (|p\rangle + e^{-2ip} e^{i\theta} \Pi^x |2\pi - p\rangle) \neq |\tilde{g}\rangle, \quad (3.5.12)$$

dove sono state usate la (3.1.19) e la (G.3.4).

In questa Sezione vogliamo studiare la dipendenza dal sito j delle componenti x e y della magnetizzazione, date da

$$m_\gamma(j) \equiv \langle \tilde{g} | \sigma_j^\gamma | \tilde{g} \rangle \quad \gamma = x, y \quad (3.5.13)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2} (\langle p | \sigma_j^\gamma | p \rangle + \langle 2\pi - p | \Pi^x \sigma_j^\gamma \Pi^x | 2\pi - p \rangle + e^{i\theta} \langle p | \sigma_j^\gamma \Pi^x | 2\pi - p \rangle + e^{-i\theta} \langle 2\pi - p | \Pi^x \sigma_j^\gamma | p \rangle) \\ &= \frac{1}{2} (e^{i\theta} \langle p | \sigma_j^\gamma \Pi^x | 2\pi - p \rangle + \text{c.c}) \\ &= \text{Re} \{ e^{i\theta} \langle p | \sigma_j^\gamma \Pi^x | 2\pi - p \rangle \}, \end{aligned} \quad (3.5.14)$$

dove nella seconda uguaglianza ho osservato che due addendi della riga precedente sono nulli perché prodotto scalare tra due stati a Π^z opposta ($|p\rangle$ e $|2\pi - p\rangle$ hanno z -parità -1 mentre $\sigma_j^\gamma |p\rangle$ e $\sigma_j^\gamma |2\pi - p\rangle$ hanno z -parità $+1$). Per avere le magnetizzazioni desiderate è dunque sufficiente calcolare $\langle p | \sigma_j^\gamma \Pi^x | 2\pi - p \rangle$. Il calcolo completo di tale prodotto interno, che necessita della conoscenza delle proprietà degli operatori di riflessione e traslazione, si trova in Appendice H.3, dove è dimostrato che

$$m_x(j) = (-1)^j \cos \left[\pi \frac{j}{N} + (-1)^{\frac{N-1}{2}} \theta \right] \langle p | \sigma_N^x \Pi^x | 2\pi - p \rangle \quad (3.5.15)$$

$$m_y(j) = (-1)^j \cos \left[\pi \frac{j}{N} + (-1)^{\frac{N-1}{2}} \theta + \frac{\pi}{2} \right] \langle p | \sigma_N^y \Pi^y | 2\pi - p \rangle, \quad (3.5.16)$$

che possiamo compattare, più elegantemente, in

$$m_\gamma(j) = (-1)^j \cos \left[\pi \frac{j}{N} + \lambda(\gamma, \theta, N) \right] \tilde{f}_\gamma, \quad (3.5.17)$$

dove

$$\lambda(\gamma, \theta, N) \equiv \begin{cases} (-1)^{\frac{N-1}{2}} \theta & \text{se } \gamma = x \\ (-1)^{\frac{N-1}{2}} \theta + \frac{\pi}{2} & \text{se } \gamma = y \end{cases} \quad (3.5.18)$$

e

$$\tilde{f}_\gamma \equiv \langle p | \sigma_N^\gamma \Pi^\gamma | 2\pi - p \rangle. \quad (3.5.19)$$

Dal risultato appena scritto osserviamo che: le magnetizzazioni sono antiferromagnetiche con l'inevitabile presenza di un legame ferromagnetico, figlio del fatto che N è dispari (si veda la Figura 3.3); $m_x(j)$ e $m_y(j)$ sono sempre sfasate di $\frac{\pi}{2}$ (cioè di metà anello) mentre le fasi di m_x e m_y , prese singolarmente, dipendono da N ; le ampiezze \tilde{f}_γ delle magnetizzazioni, in generale, dipendono dalle dimensioni del sistema.

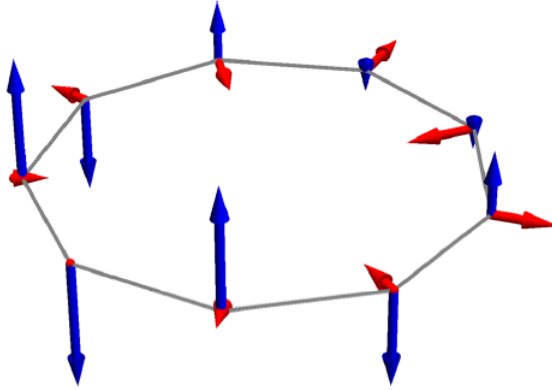


Figura 3.3: Cartoon 3D delle componenti x (in blu) e y (in rosso) della magnetizzazione (3.5.17) nel caso di catena XY a 9 spin con $\phi = \frac{\pi}{8}$ (Figura tratta da [36]). Numericamente, si calcola [36] che in questo caso $f_x \simeq 0.613$ e $f_y \simeq 0.329$, dove f_x e f_y sono definite dalla (3.5.20).

Per poter concludere, è necessario determinare le ampiezze \tilde{f}_γ . La (H.3.9) ci dice che entrambe le \tilde{f}_γ si possono ottenere a partire da

$$f_\gamma \equiv \langle p | \sigma_N^\gamma \Pi^x | 2\pi - p \rangle, \quad (3.5.20)$$

il cui studio si trova in Appendice H.3, dove è mostrato che il calcolo di f_γ si riduce a quello di complicati determinanti che siamo in grado di calcolare solo numericamente. Dai risultati numerici in Figura (3.4) si osserva che le ampiezze f_x ed f_y delle componenti x e y della magnetizzazione presentano comportamenti completamente diversi. In particolare, si osserva che

$$|f_x| \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{2}{\pi} (1 - \tan^2 \phi)^{\frac{1}{4}} \quad (3.5.21)$$

$$|f_y| \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0, \quad (3.5.22)$$

di conseguenza m_y (a differenza di m_x) tende a 0 nel limite termodinamico.

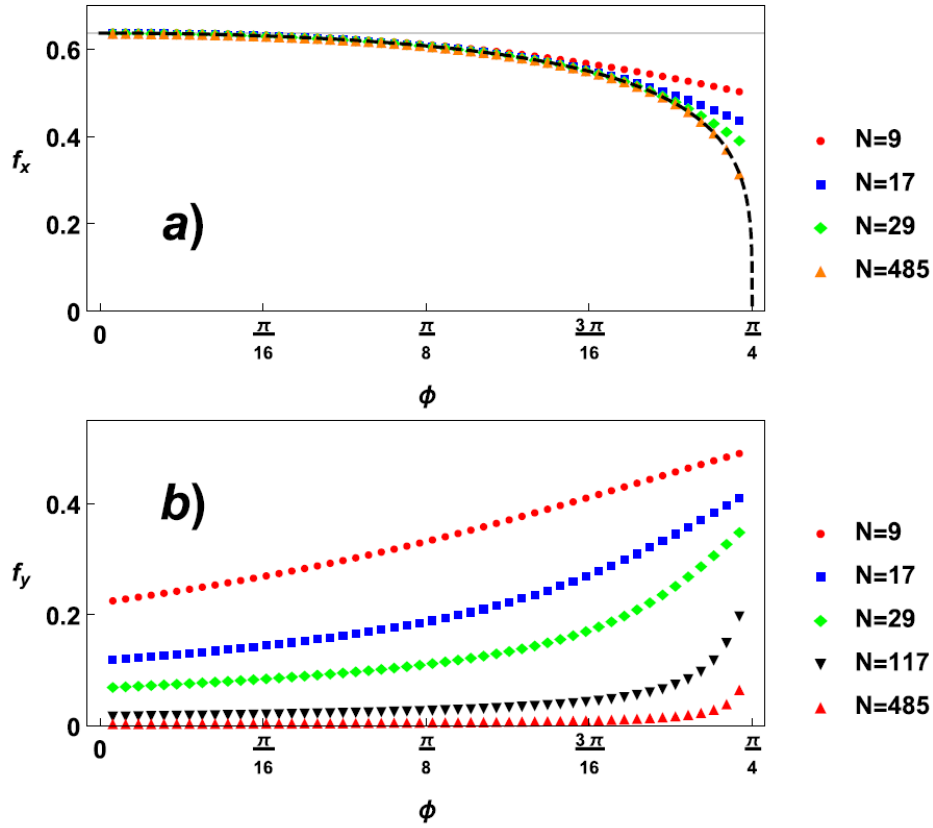


Figura 3.4: Dipendenza del modulo delle ampiezze di magnetizzazione f_γ in (3.5.17) da ϕ ed N (Figura tratta da [36]).

Più precisamente, dai risultati numerici in Figura 3.5 si osserva che

$$|m_y| \stackrel{N \gg 1}{\approx} \frac{1}{N} \quad (3.5.23)$$

Infine, la Figura 3.6 riassume la dipendenza spaziale delle componenti x e y della magnetizzazione quando il sistema si trova nel vettore di stato $|\tilde{g}\rangle$ dello stato fondamentale.

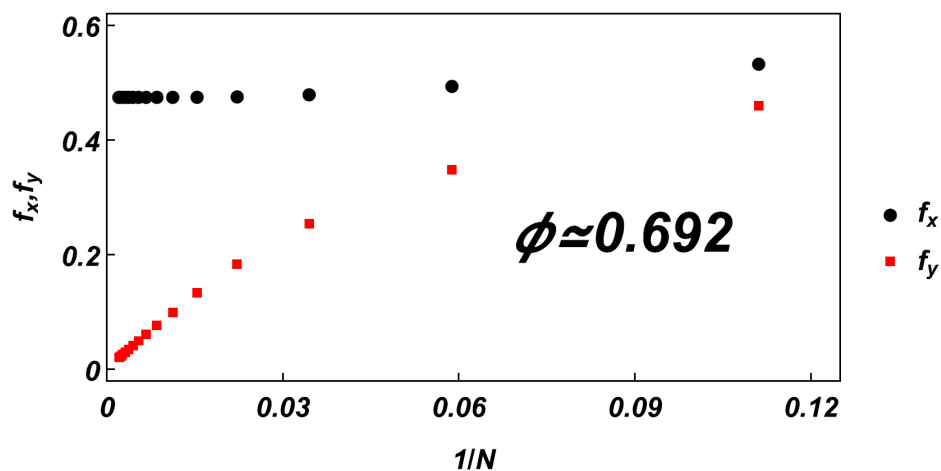


Figura 3.5: $|f_x|$ (in nero) e $|f_y|$ (in rosso) in funzione dell'inverso del numero di siti ($1/N$) a $\phi \simeq 0.692$ fissato (la Figura è tratta da [36]).

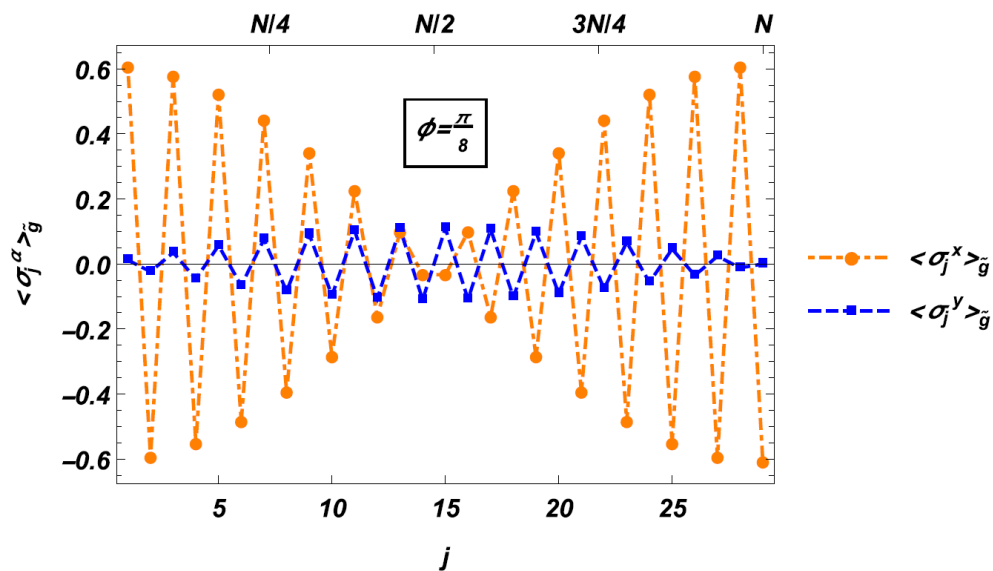


Figura 3.6: Magnetizzazioni $m_x(j) \equiv \langle \sigma_j^x \rangle_{\bar{g}}$ (in arancione) e $m_y(j) \equiv \langle \sigma_j^y \rangle_{\bar{g}}$ (in blu) in funzione del sito j nel caso di $\phi = \frac{\pi}{8}$ e $N = 29$ (Figura tratta da [36]).

Capitolo 4

Catena di Ising frustrata

Lo scopo di questo Capitolo è mostrare che le condizioni al bordo frustrate alterano il comportamento anche della più semplice catena di spin quantistica: il modello di Ising in un campo magnetico trasverso. In particolare, a partire dalla soluzione esatta del modello, dimostreremo l'esistenza di una transizione di fase quantistica del primo ordine che si manifesta quando il campo magnetico esterno tende a zero e che è caratteristica della catena frustrata. Allo stesso tempo mostreremo che nel caso frustrato il sistema è *gapless* mentre nel caso non frustrato è *gappato*.

Così come per la transizione di fase quantistica del primo ordine incontrata nel Capitolo precedente, anche in questo caso l'origine del comportamento va ricercata nella differenza di degenerazione del stato fondamentale nel punto classico tra i casi di anello con N pari (degenerazione 2) e dispari (degenerazione $2N$).

La significatività del risultato ottenuto è duplice: da un lato rappresenta il primo esempio di transizione di fase quantistica indotta dalle condizioni frustrate in funzione di campi esterni, dall'altro porta la fenomenologia di tali transizioni nell'ambito del più semplice modello integrabile quantistico.

I risultati riportati in questo Capitolo sono tutti originali e sono stati pubblicati sulla rivista *Symmetry* [19].

4.1 Il modello

In questo Capitolo studieremo la catena di Ising antiferromagnetica in campo esterno trasverso. La Hamiltoniana è data da

$$H = \frac{J}{2} \sum_{j=1}^N (\sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + h \sigma_j^z), \quad (4.1.1)$$

con accoppiamento antiferromagnetico tra primi vicini (cioè $J > 0$) e condizioni periodiche al contorno. Ricordiamo che, come nei Capitoli precedenti, N è il numero totale di spin, h parametrizza il campo esterno applicato e $\sigma^{x,y,z}$ sono le matrici di Pauli nella rappresentazione usuale.

In questo Capitolo studieremo le differenze tra lo stato fondamentale dell'Hamiltoniana (4.1.1) nel caso non frustrato (cioè N pari) e in quello frustrato (cioè N dispari). Tale differenza è evidente nel punto classico $h = 0$, dove quando N è pari lo stato fondamentale ha degenerazione 2 mentre quando è dispari la degenerazione è $2N$. Per convincersi di quanto appena detto, può essere utile la Figura 4.1.

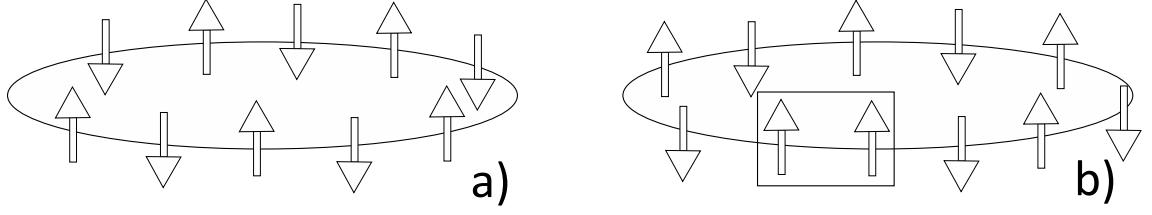


Figura 4.1: Configurazioni dello stato fondamentale nel caso non frustrato (N pari) in a) e frustrato (N dispari) in b).

Come già anticipato nell'abstract del Capitolo, siamo interessati a studiare questo modello nell'intorno di $h = 0$, pertanto sarà sufficiente considerare (4.1.1) per $|h| < 1$. Si noti che l'Hamiltoniana (4.1.2) è il sottocaso del modello XY (2.1.6) corrispondente ad anisotropia $\gamma = 1$. La diagonalizzazione esatta del modello di Ising è quindi già nota dalla Sezione 2.2. In particolare si può scrivere

$$H = \frac{1 + \Pi^z}{2} H^+ + \frac{1 - \Pi^z}{2} H^-, \quad (4.1.2)$$

dove H^+ e H^- sono date da

$$H^+ = -J \sum_{q \in \Gamma^+} \epsilon(q) \left(\chi_q^{(+)\dagger} \chi_q^{(+)} - \frac{1}{2} \right), \quad (4.1.3)$$

$$H^- = -J \sum_{q \in \Gamma^- \setminus \{0\}} \epsilon(q) \left(\chi_q^{(-)\dagger} \chi_q^{(-)} - \frac{1}{2} \right) - J(h-1) \left(\chi_0^{(-)\dagger} \chi_0^{(-)} - \frac{1}{2} \right) + \\ - J(h+1) \left(\chi_\pi^{(+)\dagger} \chi_\pi^{(+)} - \frac{1}{2} \right) \quad (4.1.4)$$

quando N è pari, e da

$$H^+ = -J \sum_{q \in \Gamma^+ \setminus \{\pi\}} \epsilon(q) \left(\chi_q^{(+)\dagger} \chi_q^{(+)} - \frac{1}{2} \right) - J(h+1) \left(\chi_\pi^{(+)\dagger} \chi_\pi^{(+)} - \frac{1}{2} \right), \quad (4.1.5)$$

$$H^- = -J \sum_{q \in \Gamma^- \setminus \{0\}} \epsilon(q) \left(\chi_q^{(-)\dagger} \chi_q^{(-)} - \frac{1}{2} \right) - J(h-1) \left(\chi_0^{(-)\dagger} \chi_0^{(-)} - \frac{1}{2} \right) \quad (4.1.6)$$

quando N è dispari, con

$$\epsilon(q) = \sqrt{(h - \cos q)^2 + \sin^2 q}, \quad (4.1.7)$$

il cui andamento nell'intervallo $h \in (-1, 1)$ è riportato in Fig. 4.2 per diversi valori di h .

Si osservi che per $|h| < 1$

$$\epsilon(\pi) = h + 1 \quad (4.1.8)$$

$$\epsilon(0) = -h + 1. \quad (4.1.9)$$

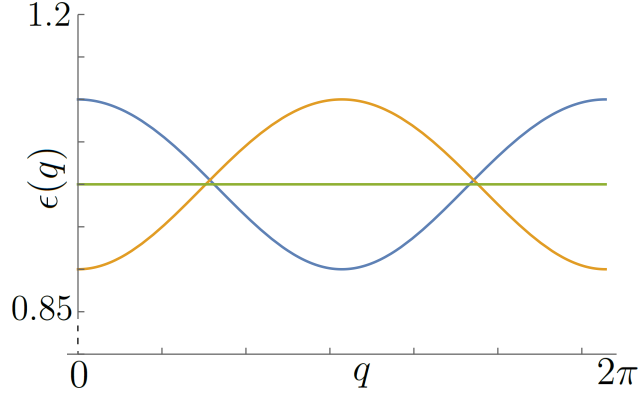


Figura 4.2: $\epsilon(q)$ in funzione di q per $h = 0$ (verde), $h = 0.1$ (arancione) e $h = -0.1$ (blu).

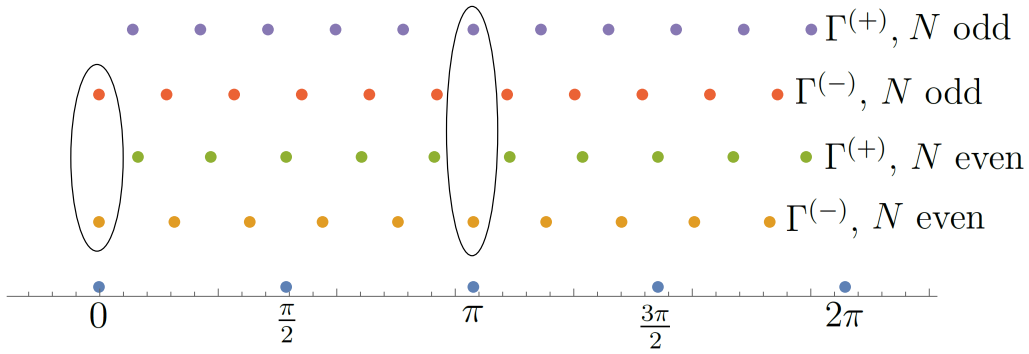


Figura 4.3: Gli insiemi $\Gamma^{(+)}$ e $\Gamma^{(-)}$ per N pari e dispari. Qui, nel caso pari, abbiamo scelto $N = 10$, mentre nel caso dispari abbiamo adottato $N = 11$. I valori $q = 0$ e $q = \pi$ sono messi in evidenza.

pertanto le espressioni per H^+ e H^- sono indipendenti dalla parità di N e sono, esplicitamente, le seguenti

$$H^+ = -J \sum_{q \in \Gamma^+} \epsilon(q) \left(\chi_q^{(+)\dagger} \chi_q^{(+)} - \frac{1}{2} \right) \quad (4.1.10)$$

$$H^- = -J \sum_{q \in \Gamma^- \setminus \{0\}} \epsilon(q) \left(\chi_q^{(-)\dagger} \chi_q^{(-)} - \frac{1}{2} \right) + J\epsilon(0) \left(\chi_0^{(-)\dagger} \chi_0^{(-)} - \frac{1}{2} \right) \quad (4.1.11)$$

È utile qui ricordare che $\chi_q^{(\pm)}$ sono operatori fermionici spinless. Inoltre è utile, per convincersi dei risultati relativi alla prossima Sezione, discutere nuovamente gli insiemi Γ^+ e Γ^- . Esplicitamente, essi sono dati da $\Gamma^{(+)} \equiv \left\{ \frac{\pi}{N} (2k+1) \right\}$ e $\Gamma^{(-)} \equiv \left\{ \frac{2\pi}{N} k \right\}$, con $k = 0, \dots, N-1$. Gli insiemi $\Gamma^{(+)}$ e $\Gamma^{(-)}$, per N pari e dispari, sono mostrati per chiarezza in Fig. 4.3. Di particolare importanza è notare come lo stato a momento nullo appartenga a Γ^- indipendentemente dalla parità di N .

4.2 Risultati

Al fine di dimostrare la presenza di una transizione di fase quantistica, dobbiamo calcolare l'espressione dell'energia dello stato fondamentale di H in funzione del

parametro h .

Denoteremo con $|GS_{>}^{\pm}\rangle$ il generico vettore dello stato fondamentale di $\frac{1\pm\Pi^z}{2}H^{\pm}$ per $0 < h < 1$ e con $|GS_{<}^{\pm}\rangle$ il generico vettore dello stato fondamentale di $\frac{1\pm\Pi^z}{2}H^{\pm}$ per $-1 < h < 0$.

4.2.1 N pari

Iniziamo la discussione considerando un numero totale N pari di spin. Aiutandosi con la Figura 4.2, è facile osservare che

$$|GS_{>}^+\rangle = \prod_{q \in \Gamma^+} \chi_q^{(+)\dagger} |0^+\rangle \quad (4.2.1)$$

$$|GS_{>}^-\rangle = \prod_{q \in \Gamma^- \setminus \{0\}} \chi_q^{(-)\dagger} |0^-\rangle \quad (4.2.2)$$

$$|GS_{<}^+\rangle = \prod_{q \in \Gamma^+} \chi_q^{(+)\dagger} |0^+\rangle \quad (4.2.3)$$

$$|GS_{<}^-\rangle = \prod_{q \in \Gamma^- \setminus \{0\}} \chi_q^{(-)\dagger} |0^-\rangle, \quad (4.2.4)$$

con energie

$$E_{>}^+ = -\frac{J}{2} \sum_{q \in \Gamma^+} \epsilon(q) \quad (4.2.5)$$

$$E_{>}^- = -\frac{J}{2} \sum_{q \in \Gamma^-} \epsilon(q) \quad (4.2.6)$$

$$E_{<}^+ = -\frac{J}{2} \sum_{q \in \Gamma^+} \epsilon(q) \quad (4.2.7)$$

$$E_{<}^- = -\frac{J}{2} \sum_{q \in \Gamma^-} \epsilon(q). \quad (4.2.8)$$

Osserviamo che gli stati $|GS_{>}^+\rangle$ e $|GS_{>}^-\rangle$ sono degeneri nel limite termodinamico, così come gli stati $|GS_{<}^+\rangle$ e $|GS_{<}^-\rangle$. In questo limite, lo stato fondamentale in $0 < h < 1$ e in $-1 < h < 0$ è dunque doppiamente degenero e separato dal primo livello eccitato da un gap di energia di valore, rispettivamente, $2J\epsilon(0) = 2J(1-h)$ e $2J\epsilon(\pi) = 2J(1+h)$.

In conclusione, quando N è pari, nel limite termodinamico, lo stato fondamentale per $-1 < h < 1$ è doppiamente degenero, *gappato* (con gap di valore $2J(1-|h|)$) e ha energia per sito data da

$$\frac{E}{N} = -\frac{J}{2N} \sum_{k=0}^{N-1} \epsilon\left(\frac{2\pi}{N}k\right) = -\frac{J}{2N} \frac{N}{2\pi} \sum_{k=0}^{N-1} \epsilon\left(\frac{2\pi}{N}k\right) \frac{2\pi}{N} = -\frac{J}{4\pi} \int_0^{2\pi} \epsilon(q) dq. \quad (4.2.9)$$

Si noti che tale espressione è analitica in $-1 < h < 1$, di conseguenza non abbiamo transizioni di fase quantistiche in tale intervallo.

4.2.2 N dispari

Ora passiamo allo studio dello stato fondamentale nel caso di numero totale N dispari di spin.

Aiutandosi con la Figura 4.2, è facile osservare che si trova

$$|GS_{>}^+\rangle = \alpha \prod_{q \in \Gamma^+ \setminus \{\frac{\pi}{N}\}} \chi_q^{(+)\dagger} |0^+\rangle + \beta \prod_{q \in \Gamma^+ \setminus \{2\pi - \frac{\pi}{N}\}} \chi_q^{(+)\dagger} |0^+\rangle \quad (4.2.10)$$

$$|GS_{>}^-\rangle = \prod_{q \in \Gamma^-} \chi_q^{(-)\dagger} |0^-\rangle \quad (4.2.11)$$

$$|GS_{<}^+\rangle = \prod_{q \in \Gamma^+ \setminus \{\pi\}} \chi_q^{(+)\dagger} |0^+\rangle \quad (4.2.12)$$

$$|GS_{<}^-\rangle = \alpha \prod_{q \in \Gamma^- \setminus \{0, p\}} \chi_q^{(-)\dagger} |0^-\rangle + \beta \prod_{q \in \Gamma^+ \setminus \{0, 2\pi - p\}} \chi_q^{(-)\dagger} |0^-\rangle \quad (4.2.13)$$

dove $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ tali che $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ e p è l'elemento di Γ^- più vicino a π .

Le energie degli stati appena scritti sono

$$E_{>}^+ = -\frac{J}{2} \sum_{q \in \Gamma^+} \epsilon(q) + J\epsilon\left(\frac{\pi}{N}\right) \quad (4.2.14)$$

$$E_{>}^- = -\frac{J}{2} \sum_{q \in \Gamma^-} \epsilon(q) + J\epsilon(0) \quad (4.2.15)$$

$$E_{<}^+ = -\frac{J}{2} \sum_{q \in \Gamma^+} \epsilon(q) + J\epsilon(\pi) \quad (4.2.16)$$

$$E_{<}^- = -\frac{J}{2} \sum_{q \in \Gamma^-} \epsilon(q) + J\epsilon(p). \quad (4.2.17)$$

Quindi nel limite termodinamico lo spettro energetico è una banda di eccitazioni gapless in contatto col stato fondamentale, il quale ha energia per sito data da

$$\frac{E}{N} = \begin{cases} -\frac{J}{4\pi} \int_0^{2\pi} \epsilon(q) dq + \frac{J}{N} \epsilon(0) & \text{per } 0 < h < 1 \\ -\frac{J}{4\pi} \int_0^{2\pi} \epsilon(q) dq + \frac{J}{N} \epsilon(\pi) & \text{per } -1 < h < 0, \end{cases} \quad (4.2.18)$$

dove $\epsilon(0)$ ed $\epsilon(\pi)$ sono date, rispettivamente, dalle equazioni (4.1.8) e (4.1.9).

Esplicitamente, per $|h| < 1$, si ha

$$\frac{E}{N} = -\frac{J}{4\pi} \int_0^{2\pi} \sqrt{(h - \cos q)^2 + \sin^2 q} dq + \frac{J}{N} (-|h| + 1). \quad (4.2.19)$$

La derivata prima rispetto a h dell'energia per sito nello stato fondamentale è data da

$$\frac{\partial_h E}{N} = \begin{cases} -\frac{J}{4\pi} \partial_h \int_0^{2\pi} \epsilon(q) dq - \frac{J}{N} & \text{per } 0 < h < 1 \\ -\frac{J}{4\pi} \partial_h \int_0^{2\pi} \epsilon(q) dq + \frac{J}{N} & \text{per } -1 < h < 0 \end{cases} \quad (4.2.20)$$

(dove abbiamo denotato $\partial_h \equiv \frac{\partial}{\partial h}$) da cui osserviamo che

$$\frac{1}{N} (\partial_h E|_{h \rightarrow 0^+} - \partial_h E|_{h \rightarrow 0^-}) = -\frac{2J}{N},$$

ossia

$$\partial_h E|_{h \rightarrow 0^+} - \partial_h E|_{h \rightarrow 0^-} = -2J. \quad (4.2.21)$$

Dunque nel caso frustrato (N dispari), nel limite termodinamico la derivata prima dell'energia dello stato fondamentale esibisce una discontinuità in corrispondenza di $h = 0$. Abbiamo quindi dimostrato che la catena di Ising frustrata è caratterizzata dall'esistenza di una transizione di fase quantistica del primo ordine in $h = 0$.

4.3 Effetto della temperatura

L'osservabilità dell'effetto pari-dispari appena descritto (a temperatura nulla) richiede un'analisi dei suoi effetti a temperatura finita. Dal punto di vista dell'esistenza della transizione di fase quantistica, è difficile identificare gli effetti senza il calcolo dei correlatori, che non è ancora stato effettuato. Decisamente più drastico è invece l'effetto del fatto che per un numero pari di spin il sistema sia *gappato* mentre esso sia *gapless* per un numero dispari. Dal punto di vista della termodinamica, infatti, i due sistemi sono equivalenti, rispettivamente, a un superconduttore con gap indipendente dalla temperatura e a un metallo (sebbene con relazione di dispersione piatta all'energia di Fermi). Tali analogie sono fornite dalla trasformazione di Wigner-Jordan. Nel primo caso ci si aspetta quindi, per basse temperature, un aumento molto più lento dell'energia interna rispetto al secondo. Corrispondentemente, il calore specifico del primo caso cresce, nello stesso range di temperature, molto più lentamente del secondo, in quanto esso è esponenzialmente soppresso per energie più piccole del gap tra stato fondamentale e stati eccitati. Queste considerazioni trovano in effetti un riscontro quantitativo.

Le energie interne $U^{(P/D)}$ per particella per il caso pari/dispari sono date, vista l'analogia con i fermioni liberi di Wigner-Jordan e fissando a zero l'energia dello stato fondamentale, da

$$U^{(P)} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{2J + \epsilon(q)}{e^{(2J + \epsilon(q))/k_B T} - 1} dq, \quad (4.3.1)$$

$$U^{(D)} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{\epsilon(q) - \min_q(\epsilon(q))}{e^{(\epsilon(q) - \min_q(\epsilon(q)))/k_B T} - 1} dq. \quad (4.3.2)$$

Qui k_B è la costante di Boltzmann, che verrà d'ora in avanti posta uguale a uno. La relazione è valida nel limite termodinamico a temperatura T . Questa relazione per l'energia interna non è altro che quella relativa a fermioni liberi.

Il calore specifico, che è una quantità osservabile, può essere ottenuto semplicemente derivando l'energia interna per particella rispetto alla temperatura. I grafici relativi a $U^{(P)}(T)$, $U^{(D)}(T)$, $C^{(P)}(T) = dU^{(P)}(T)/dT$ e $C^{(D)}(T) = dU^{(D)}(T)/dT$ sono riportati in Fig. 4.4 e confermano quanto discusso su base fisica. Le quantità menzionate sono graficate in funzione della temperatura, e sono stati posti $J = 1$ e $h = 0.2$.

4.4 Discussione

Nelle Sezioni precedenti abbiamo in primo luogo dimostrato analiticamente che, quando il campo magnetico esterno cambia segno (cioè per $h \rightarrow 0^+$ o $h \rightarrow 0^-$), la catena di Ising antiferromagnetica esibisce una transizione di fase quantistica del

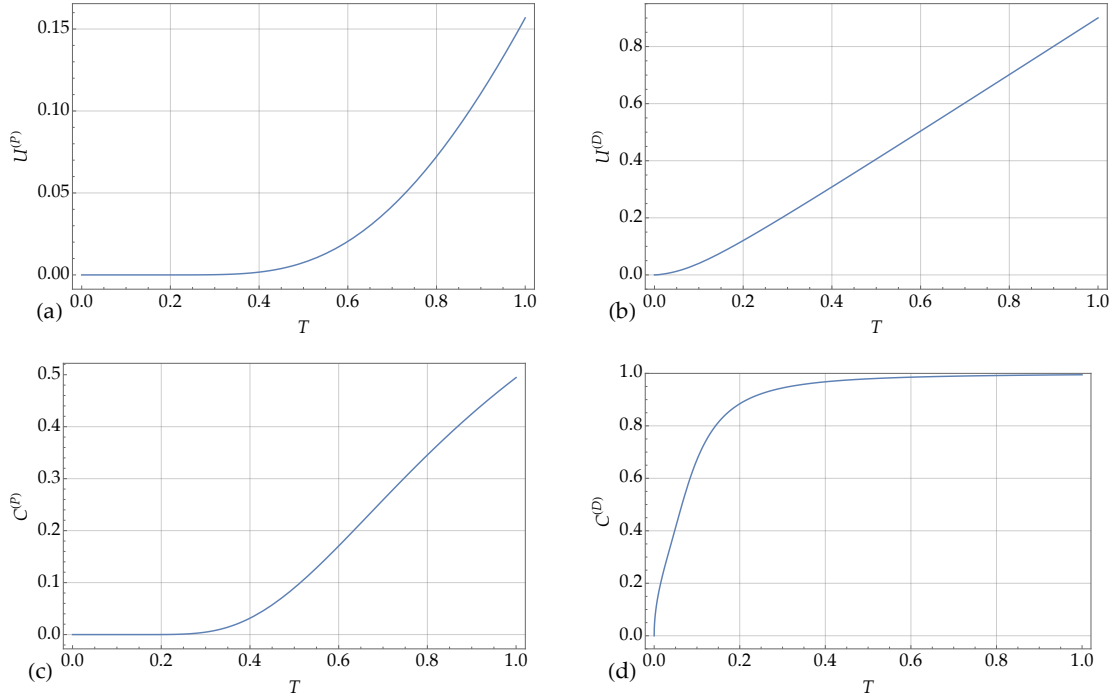


Figura 4.4: (a) $U^{(P)}(T)$, (b) $U^{(D)}(T)$, (c) $C^{(P)}(T)$ e (d) $C^{(D)}(T)$ in funzione della temperatura. Per realizzare i grafici, si sono posti $J = 1$ e $h = 0.2$.

primo ordine esclusivamente in presenza di condizioni al bordo frustrate, cioè condizioni periodiche al contorno con numero totale dispari di spin.

Cruciali affinché si verifichi la transizione di fase appena dimostrata sono il cambiamento improvviso del minimo di $\epsilon(q)$ da $\epsilon(0)$ a $\epsilon(\pi)$ nel passaggio da h negativo a positivo e il fatto che per N dispari, a differenza del caso pari, la geometria del sistema impedisce l'occupazione degli stati (4.2.1), (4.2.2), (4.2.3) e (4.2.4), in corrispondenza dei quali le Hamiltoniane H^+ e H^- possiedono i loro autovalori minimi. La seconda causa può essere riassunta, più elegantemente, in incompatibilità tra interazioni locali e struttura globale del sistema. Le conseguenze di tale incompatibilità possono essere visualizzate facilmente nel punto classico $h = 0$ con N dispari dove, a differenza del caso di N pari, il sistema non può avere un ordinamento tipo stato di Néel, dovendo essere presente almeno un domain wall (Figura 4.1). I kink states del caso frustrato generano a campo nullo uno stato fondamentale $2N$ volte degenere, il quale per $h \neq 0$ si splitta in una banda metallica. La situazione nel caso non frustrato è completamente diversa: lo stato fondamentale è sempre doppiamente degenere e gappato.

Nella seconda parte del Capitolo abbiamo mostrato che, anche a temperatura finita, il caso pari e il caso dispari mostrano differenze qualitative: la forma dell'energia interna e del calore specifico sono infatti profondamente diverse. Il caso dispari è infatti analogo a un metallo, sebbene unidimensionale e con relazione di dispersione piatta all'energia di Fermi, mentre il caso pari è analogo a un superconduttore in cui il gap non dipenda dalla temperatura.

Capitolo 5

Catena XY frustrata

In questo Capitolo, studieremo finalmente come la frustrazione altera il comportamento dello stato fondamentale della catena XY antiferromagnetica con condizioni periodiche al contorno. Per far ciò, utilizzeremo quanto esposto nel Capitolo 2 partendo dalla diagonalizzazione esatta trattata in Sezione 2.2.

In particolare, calcoleremo l'energia dello stato fondamentale (in funzione di campo magnetico esterno e anisotropia) dimostrando come esso sia *gapless* nel caso frustrato e *gapped* nel caso non frustrato. Ci interesseremo quindi alle transizioni di fase quantistiche, dimostrando che le condizioni al bordo frustrate (FBC) da una parte ne inducono di nuove (sia del primo che del secondo ordine) e dall'altra cambiano l'ordine di quelle già esistenti nel caso non frustrato, le quali passano da essere del secondo a diventare del primo ordine.

I risultati di questo Capitolo sono interamente originali. I fattori di maggiore novità sono la trasmutazione dell'ordine delle transizioni di fase quantistiche e l'esistenza di una transizione di fase del secondo ordine indotta dalle FBC. Questi due fenomeni non erano mai stati riscontrati e ampliano largamente la fenomenologia delle transizioni di fase quantistiche legate alle FBC.

5.1 Il modello

Consideriamo la catena XY

$$H = \frac{J}{2} \sum_{j=1}^N \left[\left(\frac{1+\gamma}{2} \right) \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \left(\frac{1-\gamma}{2} \right) \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y + h \sigma_j^z \right] \quad (5.1.1)$$

nel caso frustrato, cioè $J > 0$, con condizioni periodiche al contorno (3.1.2) e numero di siti N dispari. Per le ragioni di simmetria spiegate in Sezione 2.1, senza perdita di generalità ci limiteremo, salvo indicazione contraria, a studiare il modello nella regione $h, \gamma \geq 0$.

La soluzione esatta è stata già ricavata nella Sezione 2.2, dove abbiamo dimostrato che l'Hamiltoniana totale H , che definisce il modello, può esser scritta come

$$H = \frac{1 + \Pi^z}{2} H^+ + \frac{1 - \Pi^z}{2} H^-, \quad (5.1.2)$$

dove Π^z è l'operatore di parità lungo z , detto z -parità e definito da

$$\Pi^z \equiv \bigotimes_{j=1}^N \sigma_j^z. \quad (5.1.3)$$

mentre H^+ e H^- sono date (in termini degli operatori fermionici spinless $\chi_q^{(\pm)}$), rispettivamente, dalla (2.2.57) e dalla (2.2.58), che, per comodità futura, riportiamo anche qui

$$H^+ = -J \sum_{q \in \Gamma^+} \epsilon(q) \left(\chi_q^{(+)\dagger} \chi_q^{(+)} - \frac{1}{2} \right) \quad \text{se } h \geq 0, \quad (5.1.4)$$

$$H^- = \begin{cases} -J \sum_{q \in \Gamma^-} \epsilon(q) \left(\chi_q^{(-)\dagger} \chi_q^{(-)} - \frac{1}{2} \right) & \text{se } h > 1 \\ -J \sum_{q \in \Gamma^- \setminus \{0\}} \epsilon(q) \left(\chi_q^{(-)\dagger} \chi_q^{(-)} - \frac{1}{2} \right) + J \epsilon(0) \left(\chi_0^{(-)\dagger} \chi_0^{(-)} - \frac{1}{2} \right) & \text{se } 0 \leq h < 1 \end{cases} \quad (5.1.5)$$

dove

$$\Gamma^+ = \left\{ \frac{2\pi}{N} k \right\}, \quad \Gamma^- = \left\{ \frac{2\pi}{N} \left(k + \frac{1}{2} \right) \right\} \quad \text{con } k = 0, \dots, N-1 \quad (5.1.6)$$

e

$$\epsilon(q) = \sqrt{(h - \cos q)^2 + \gamma^2 \sin^2 q}. \quad (5.1.7)$$

5.2 Stato fondamentale e primi livelli eccitati

In questa Sezione studieremo lo stato fondamentale (GS) del sistema focalizzando l'attenzione su come cambia la sua energia al variare della posizione nello spazio dei parametri. Esattamente come nei precedenti Capitoli, chiameremo $|GS'^{\pm}\rangle$ il vettore generico dello stato fondamentale di H^{\pm} e $|GS^{\pm}\rangle$ il vettore generico dello stato fondamentale di $\frac{1 \pm \Pi^z}{2} H^{\pm}$, denotando con E^{\pm} l'energia di quest'ultimo. Inoltre denoteremo con E_{exc}^{\pm} l'energia del primo livello eccitato di $\frac{1 \pm \Pi^z}{2} H^{\pm}$ e con $|0^+\rangle$ e $|0^-\rangle$ gli stati di vuoto per i fermioni $\chi^{(+)}$ e $\chi^{(-)}$, la cui espressione esplicita in termini del vuoto $|0\rangle$ dei fermioni di Wigner-Jordan è data, rispettivamente, dalla (2.3.5) e dalla (2.3.6).

La strategia per trovare lo stato fondamentale e il primo livello eccitato consiste in quattro passaggi:

1. individuare lo stato fondamentale $|GS'^{\pm}\rangle$ e il primo livello eccitato di H^{\pm} ;
2. estrarre gli stati fondamentali $|GS^+\rangle$ e $|GS^-\rangle$ e i primi livelli eccitati di, rispettivamente, $\frac{1+\Pi^z}{2} H^+$ e $\frac{1-\Pi^z}{2} H^-$ dagli stati trovati al punto precedente;
3. confrontare l'energia E^+ di $|GS^+\rangle$ con l'energia E^- di $|GS^-\rangle$. $|GS\rangle$ sarà, tra i due stati $|GS^+\rangle$ e $|GS^-\rangle$, quello con energia minore;
4. confrontare l'energia del primo livello eccitato con la stessa z-parità di $|GS\rangle$ con l'energia dello stato fondamentale nel settore a z-parità opposta. L'energia minore sarà quella del primo livello eccitato.

Per determinare $|GS^+\rangle$ e $|GS^-\rangle$ (che è il passaggio meno facile della procedura) si utilizzeranno i grafici della relazione di dispersione $\epsilon(q)$ assieme ai seguente fatti:

- stati con numero pari (dispari) di fermioni $\chi^{(+)}$ o $\chi^{(-)}$ hanno z-parità $+1$ (-1). Per dettagli rimandiamo alla Sezione 2.3.1 (e, in particolare, all'equazione (2.3.9));

- $0 \in \Gamma^-$ indipendentemente dalla parità di N mentre $\pi \in \Gamma^+$ solo nel caso di N dispari (Figura 4.3);
- gli insiemi Γ^+ e Γ^- sono a numero dispari N di elementi;
- lo spettro $\epsilon(q)$ è semidefinito positivo. In particolare, come già osservato in Sezione 2.3.3, esso può annullarsi solo quando $|h| = 1$ oppure quando $|h| \leq 1$ e $\gamma = 0$.

Terminate queste premesse, possiamo finalmente dedicarci a ricavare lo stato fondamentale della catena XY frustrata. Considerata la differente forma di H^+ , H^- ed $\epsilon(q)$ al variare della regione di interesse nello spazio dei parametri h e γ , dovremo dapprima individuare tali regioni e, successivamente, studiare ivi lo stato fondamentale.

5.2.1 Regione $h > 1, \gamma \geq 0$

In questa regione dello spazio dei parametri H^- ha la stessa forma di H^+ , quindi

$$|GS'^+\rangle = \prod_{q \in \Gamma^+} \chi_q^{(+)\dagger} |0^+\rangle \quad |GS'^-\rangle = \prod_{q \in \Gamma^-} \chi_q^{(-)\dagger} |0^-\rangle, \quad (5.2.1)$$

i quali, essendo entrambi a N fermioni, hanno z-parità uguale a -1 .

In questo caso avremo che $|GS^+\rangle$ dovrà essere uno stato a $N - 1$ fermioni $\chi^{(+)}$ e, in particolare, dal grafico della relazione di dispersione nella regione $h > 1$ (Figura 2.2) è evidente che

$$|GS^+\rangle = \alpha \prod_{q \in \Gamma^+ \setminus \{\frac{\pi}{N}\}} \chi_q^{(+)\dagger} |0^+\rangle + \beta \prod_{q \in \Gamma^+ \setminus \{2\pi - \frac{\pi}{N}\}} \chi_q^{(+)\dagger} |0^+\rangle, \quad (5.2.2)$$

dove $\alpha, \beta \in \mathbb{C} : |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. La corrispondente energia vale

$$E^+ = -\frac{J}{2} \sum_{q \in \Gamma^+} \epsilon(q) + J\epsilon\left(\frac{\pi}{N}\right). \quad (5.2.3)$$

Dalla Figura 2.2 è evidente che il primo livello eccitato è dato dalle seguenti combinazioni

$$\text{span}\left\{ \prod_{q \in \Gamma^+ \setminus \{\frac{3\pi}{N}\}} \chi_q^{(+)\dagger} |0^+\rangle, \prod_{q \in \Gamma^+ \setminus \{2\pi - \frac{3\pi}{N}\}} \chi_q^{(+)\dagger} |0^+\rangle \right\}$$

e ha energia pari a

$$E_{exc}^+ = -J \sum_{q \in \Gamma^+} \epsilon(q) + J\epsilon\left(\frac{3\pi}{N}\right). \quad (5.2.4)$$

Poiché $\Pi^z |GS'^-\rangle = -|GS'^-\rangle$, possiamo concludere immediatamente che

$$|GS^-\rangle = |GS'^-\rangle = \prod_{q \in \Gamma^-} \chi_q^{(-)\dagger} |0^-\rangle, \quad (5.2.5)$$

il quale ha energia

$$E^- = -\frac{J}{2} \sum_{q \in \Gamma^-} \epsilon(q). \quad (5.2.6)$$

Il relativo primo livello eccitato è a $N - 2$ fermioni $\chi^{(-)}$ e, in particolare, dal grafico di $\epsilon(q)$ in Figura 2.2, è evidente che esso è dato da

$$\text{span}\left\{ \prod_{q \in \Gamma^- \setminus \{0, \frac{2\pi}{N}\}} \chi_q^{(-)\dagger} |0^-\rangle, \prod_{q \in \Gamma^- \setminus \{0, 2\pi - \frac{2\pi}{N}\}} \chi_q^{(-)\dagger} |0^-\rangle \right\},$$

con energia

$$E_{exc}^- = -\frac{J}{2} \sum_{q \in \Gamma^-} \epsilon(q) + J\epsilon(0) + J\epsilon\left(\frac{2\pi}{N}\right). \quad (5.2.7)$$

In conclusione, nel limite termodinamico si ha che $|GS\rangle = |GS^-\rangle$ (dato che $E^- < E^+$) la cui energia per sito è data da

$$\frac{E}{N} = -\frac{J}{4\pi} \int_0^{2\pi} \epsilon(q) dq. \quad (5.2.8)$$

Inoltre GS^+ è il primo livello eccitato e, di conseguenza, lo stato fondamentale è *gapped*.

5.2.2 Regione $0 < h < 1$, $\gamma > 0$

Dai grafici di $\epsilon(q)$ in questa regione (Figure 5.2 e 5.1) osserviamo che deve esistere una curva $f(h)$ tale che per $0 < \gamma < f(h)$ la relazione di dispersione $\epsilon(q)$ con $q \in [0, 2\pi)$ ha minimo assoluto in $q = p(h, \gamma)$ e $q = 2\pi - p(h, \gamma)$, dove $p(h, \gamma) \in (0, \frac{\pi}{2})$ ed $\epsilon(p(h, \gamma)) = \epsilon(2\pi - p(h, \gamma)) \in (0, \epsilon(0))$. Inoltre si osserva che $\lim_{h \rightarrow 1} p(h, \gamma) = 0$ e $\lim_{h \rightarrow 0} p(h, \gamma) = \frac{\pi}{2}$.

Incominciamo col cercare $p(h, \gamma)$ imponendo che si tratti di un punto stazionario (ossia tale per cui $\frac{\partial \epsilon(q)}{\partial q} \Big|_{q=p(h, \gamma)} = 0$). Si calcola facilmente che q è un punto stazionario solo se risolve l'equazione

$$[h - (1 - \gamma^2) \cos q] \sin q = 0. \quad (5.2.9)$$

Questa è risolta da $q = 0$ e da $q = \arccos \frac{h}{1 - \gamma^2}$. Quindi abbiamo trovato che nella regione $0 < h < 1$ e $\gamma > 0$ lo spettro $\epsilon(q)$ ha il minimo assoluto in

$$p(h, \gamma) = \arccos \frac{h}{1 - \gamma^2} \quad (5.2.10)$$

e in $2\pi - p(h, \gamma)$.

Resta da determinare $f(h)$, ossia cerchiamo il vincolo sul valore di γ affinché il minimo di $\epsilon(q)$ sia in $q = p(h, \gamma)$. Per far ciò osserviamo che i valori di $p(h, \gamma)$ sono in $(0, \frac{\pi}{2})$ e ciò implica che la condizione su (h, γ) necessaria e sufficiente affinché la relazione di dispersione abbia un andamento come in Figura 5.2 è la seguente:

$$0 < \frac{h}{1 - \gamma^2} < 1. \quad (5.2.11)$$

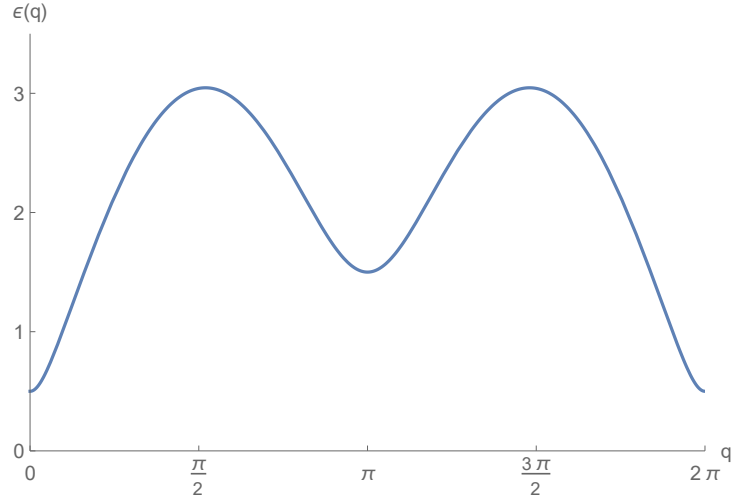


Figura 5.1: $\epsilon(q)$ in funzione di $q \in [0, 2\pi)$ per $h = 0.5$ e $\gamma = 3$.

Questo risultato ci permette di concludere che quando $\gamma > 1$ non esiste $p(h, \gamma) \in (0, \pi/2)$, ossia nella regione $\{(h, \gamma) \in (0, 1) \times (1, \infty)\}$ la relazione di dispersione ha minimo assoluto in $q = 0$ nell'intervallo $q \in [0, 2\pi)$ (Figura 5.1). Invece, quando $0 < \gamma < 1$ la condizione (5.2.11) equivale a

$$\gamma < \sqrt{1-h} = f(h). \quad (5.2.12)$$

In conclusione, per studiare lo stato fondamentale della regione $(0, 1) \times (0, \infty)$ dello spazio dei parametri h e γ è necessario discutere separatamente le sottoregioni

1. $(h, \gamma) \in (0, 1) \times [\sqrt{1-h}, \infty)$, dove $\epsilon(q)$ è minima in $q = 0$ e ha l'andamento in Figura 5.1.
2. $(h, \gamma) \in (0, 1) \times (0, \sqrt{1-h})$, dove $\epsilon(q)$ è minima in $q = p(h, \gamma), 2\pi - p(h, \gamma)$ con $p(h, \gamma)$ dato dalla (5.2.10) e ha l'andamento in Figura 5.2.

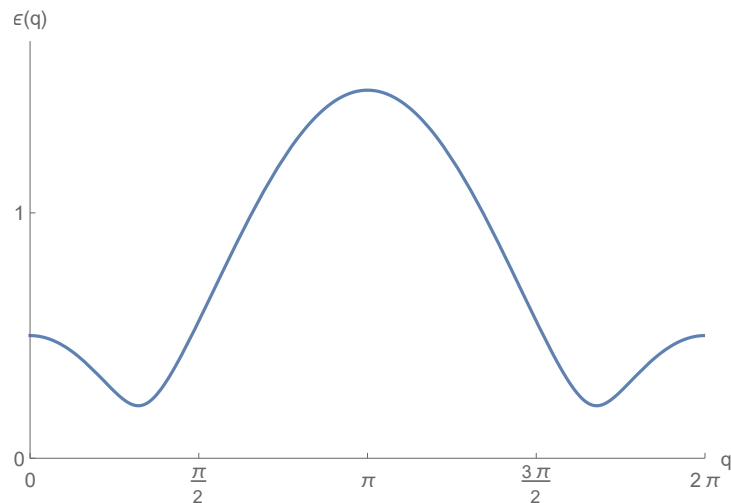


Figura 5.2: $\epsilon(q)$ in funzione di $q \in [0, 2\pi)$ per $h = 0.5$ e $\gamma = 0.25$.

Nel seguito studieremo separatamente queste due regioni dello spazio dei parametri, discutendo prima $0 < h < 1$, $\gamma \geq \sqrt{1-h}$ e, successivamente, $0 < h < 1$, $0 < \gamma < \sqrt{1-h}$.

Sottoregione $0 < h < 1$, $\gamma \geq \sqrt{1-h}$

In questa regione, lo stato fondamentale di H^+ è sempre quello a N fermioni $\chi^{(+)}$, dato da

$$|GS'^+\rangle = \prod_{q \in \Gamma^+} \chi_q^{(+)\dagger} |0^+\rangle, \quad (5.2.13)$$

il quale, essendo N dispari, ha z-parità -1. Di conseguenza, $|GS^+\rangle$ è uno stato a $N-1$ fermioni $\chi^{(+)}$. In particolare, dal grafico di $\epsilon(q)$ (Figura 5.1) osserviamo che

$$|GS^+\rangle = \alpha \prod_{q \in \Gamma^+ \setminus \{\frac{\pi}{N}\}} \chi_q^{(+)\dagger} |0^+\rangle + \beta \prod_{q \in \Gamma^+ \setminus \{2\pi - \frac{\pi}{N}\}} \chi_q^{(+)\dagger} |0^+\rangle, \quad (5.2.14)$$

(dove $\alpha, \beta \in \mathbb{C} : |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$) la cui energia è

$$E^+ = -\frac{J}{2} \sum_{q \in \Gamma^+} \epsilon(q) + J\epsilon\left(\frac{\pi}{N}\right). \quad (5.2.15)$$

Il primo livello eccitato di $\frac{1+\Pi z}{2}H^+$ è

$$\text{span}\left\{ \prod_{q \in \Gamma^+ \setminus \{\frac{3\pi}{N}\}} \chi_q^{(+)\dagger} |0^+\rangle, \prod_{q \in \Gamma^+ \setminus \{2\pi - \frac{3\pi}{N}\}} \chi_q^{(+)\dagger} |0^+\rangle \right\},$$

che ha energia

$$E_{exc}^+ = -\frac{J}{2} \sum_{q \in \Gamma^+} \epsilon(q) + J\epsilon\left(\frac{3\pi}{N}\right). \quad (5.2.16)$$

Lo stato fondamentale di H^- è

$$|GS'^-\rangle = \prod_{q \in \Gamma^- \setminus \{0\}} \chi_q^{(-)\dagger} |0^-\rangle \quad (5.2.17)$$

che però è a numero pari ($N-1$) di fermioni, di conseguenza $|GS^-\rangle$ è uno stato a N fermioni oppure a $N-2$ fermioni (in quest'ultimo caso uno dei due stati liberi è ovviamente $q=0$). Dal grafico della relazione di dispersione (Figura 5.1) è evidente che tra le due possibilità quella corretta è la prima, cioè

$$|GS^-\rangle = \prod_{q \in \Gamma^-} \chi_q^{(-)\dagger} |0^-\rangle, \quad (5.2.18)$$

che ha energia

$$E^- = -\frac{J}{2} \sum_{q \in \Gamma^-} \epsilon(q) + J\epsilon(0). \quad (5.2.19)$$

Il primo livello eccitato con z-parità negativa è

$$\text{span}\left\{ \prod_{q \in \Gamma^- \setminus \{0, \frac{2\pi}{N}\}} \chi_q^{(-)\dagger} |0^-\rangle, \prod_{q \in \Gamma^- \setminus \{0, 2\pi - \frac{2\pi}{N}\}} \chi_q^{(-)\dagger} |0^-\rangle \right\},$$

che ha energia

$$E_{exc}^- = -\frac{J}{2} \sum_{q \in \Gamma^-} \epsilon(q) + J\epsilon\left(\frac{2\pi}{N}\right). \quad (5.2.20)$$

In conclusione, nella regione dei parametri $0 < h < 1$, $\gamma > \sqrt{1-h}$ lo stato fondamentale è quello dettato da H^- , cioè

$$|GS\rangle = |GS^-\rangle = \prod_{q \in \Gamma^-} \chi_q^{(-)\dagger} |0^-\rangle \quad (5.2.21)$$

che, nel limite termodinamico, è *gapless* e doppiamente degenera con energia per sito data da

$$\frac{E}{N} = -\frac{J}{4\pi} \int_0^{2\pi} \epsilon(q) dq + \frac{J}{N} \epsilon(0). \quad (5.2.22)$$

Sottoregione $0 < h < 1$, $0 < \gamma < \sqrt{1-h}$

Lo stato fondamentale di H^+ , che è

$$|GS'^+\rangle = \prod_{q \in \Gamma^+} \chi_q^{(+)\dagger} |0^+\rangle, \quad (5.2.23)$$

è a numero dispari (N) di fermioni $\chi^{(+)}$, di conseguenza $|GS^+\rangle$ dovrà essere a $N - 1$ fermioni $\chi^{(+)}$. In particolare, essendo in questa sottoregione la relazione di dispersione minimizzata in $p(h, \gamma)$ e $2\pi - p(h, \gamma)$, si ha che

$$|GS^+\rangle = \alpha \prod_{q \in \Gamma^+ \setminus \{p_+(h, \gamma)\}} \chi_q^{(+)\dagger} |0^+\rangle + \beta \prod_{q \in \Gamma^+ \setminus \{2\pi - p_+(h, \gamma)\}} \chi_q^{(+)\dagger} |0^+\rangle, \quad (5.2.24)$$

dove $\alpha, \beta \in \mathbb{C} : |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. La corrispondente energia vale

$$E^+ = -\frac{J}{2} \sum_{q \in \Gamma^+} \epsilon(q) + J\epsilon(p_+(h, \gamma)), \quad (5.2.25)$$

dove abbiamo denotato con $p_+(h, \gamma)$ l'elemento di Γ^+ più vicino a $p(h, \gamma)$.

Lo stato fondamentale di H^- è

$$|GS'^-\rangle = \prod_{q \in \Gamma^- \setminus \{0\}} \chi_q^{(-)\dagger} |0^-\rangle \quad (5.2.26)$$

ed è uno stato a numero pari ($N - 1$) di fermioni, di conseguenza $|GS^-\rangle$ dovrà essere a N oppure a $N - 2$ fermioni (in quest'ultimo caso uno dei due stati liberi è ovviamente $q = 0$). Dal grafico in Figura 5.2 è evidente che tra le due possibilità quella corretta è la seconda e, in particolare,

$$|GS^-\rangle = \alpha \prod_{q \in \Gamma^- \setminus \{0, p_-(h, \gamma)\}} \chi_q^{(-)\dagger} |0^-\rangle + \beta \prod_{q \in \Gamma^- \setminus \{0, 2\pi - p_-(h, \gamma)\}} \chi_q^{(-)\dagger} |0^-\rangle, \quad (5.2.27)$$

dove $\alpha, \beta \in \mathbb{C} : |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. La corrispondente energia vale

$$E^- = -\frac{J}{2} \sum_{q \in \Gamma^-} \epsilon(q) + J\epsilon(p_-(h, \gamma)), \quad (5.2.28)$$

dove abbiamo denotato con $p_-(h, \gamma)$ l'elemento di Γ^- più vicino a $p(h, \gamma)$.

In conclusione, lo stato fondamentale in questa regione è doppiamente degenero e nel limite termodinamico ha energia per sito data da

$$\frac{E}{N} = -\frac{J}{4\pi} \int_0^{2\pi} \epsilon(q) dq + \frac{J}{N} \epsilon(p(h, \gamma)) \quad (5.2.29)$$

ed è *gapless*.

Si calcola che

$$\epsilon(p(h, \gamma)) = \gamma \sqrt{\frac{h^2 + \gamma^2 - 1}{\gamma^2 - 1}}. \quad (5.2.30)$$

5.2.3 Regione $0 < h < 1, \gamma = 0$

In questa regione dello spazio dei parametri, la relazione di dispersione ha, al variare di h , l'andamento riportato in Figura 5.3. Da questa Figura osserviamo che lo spettro in questa regione ha lo stesso andamento del caso $0 < h < 1, \gamma > 0$ (Figura 5.2), quindi ripercorrendo gli stessi identici passaggi della Sezione 5.2.2, si mostra che lo stato fondamentale è doppiamente degenero e nel limite termodinamico ha energia per sito data da

$$\frac{E}{N} = -\frac{J}{4\pi} \int_0^{2\pi} \epsilon(q) dq + \frac{J}{N} \epsilon(p(h, 0)) \quad (5.2.31)$$

ed è *gapless*.

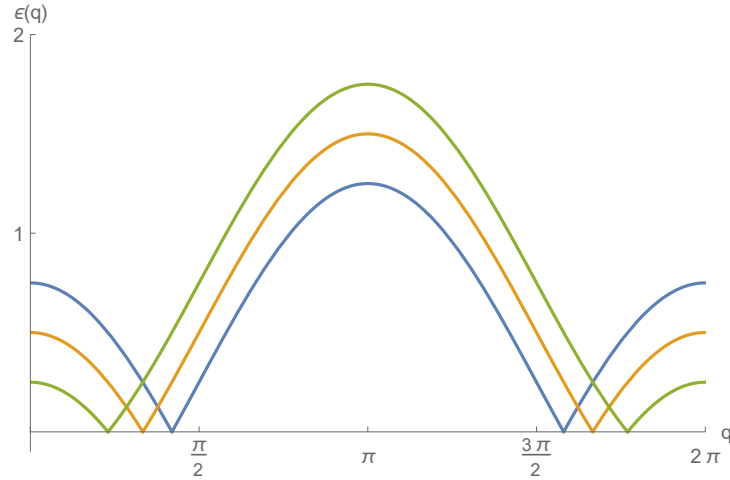


Figura 5.3: $\epsilon(q)$ in funzione di $q \in [0, 2\pi)$ per $\gamma = 0$ e $h = 0.25$ (in blu), $h = 0.5$ (in arancione) e $h = 0.75$ (in verde).

5.2.4 Regione $h = 0, \gamma \geq 0$

Dal grafico dello spettro $\epsilon(q)$ in questa regione per diversi valori di γ (Figura 5.4) è evidente la necessità di dover discutere separatamente tre regimi: $0 \leq \gamma < 1$, $\gamma = 1$ e $\gamma > 1$.

Nella trattazione che seguirà utilizzeremo spesso la seguente proprietà (ricavata nella Sezione 3.1.1 del Capitolo 3): la disparità di N e l'assenza di campo magnetico esterno implicano che se $|\psi\rangle$ è un vettore di stato tale che

$$H |\psi\rangle = E |\psi\rangle \quad \Pi^z |\psi\rangle = \pi |\psi\rangle, \quad (5.2.32)$$

allora

$$H\Pi^x |\psi\rangle = E\Pi^x |\psi\rangle \quad \Pi^z\Pi^x |\psi\rangle = -\pi\Pi^x |\psi\rangle. \quad (5.2.33)$$

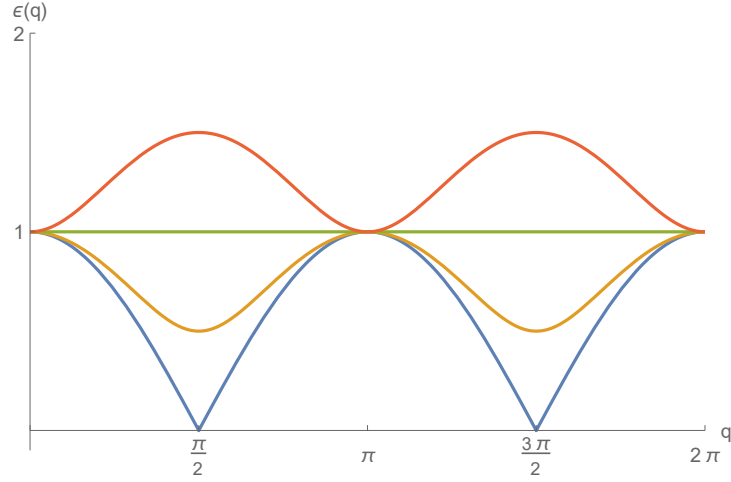


Figura 5.4: $\epsilon(q)$ in funzione di $q \in [0, 2\pi)$ per $h = 0$ e $\gamma = 0$ (in blu), $\gamma = 0.5$ (in arancione), $\gamma = 1$ (in verde) e $\gamma = 1.5$ (in rosso).

Regime $0 \leq \gamma < 1$

Dal grafico di $\epsilon(q)$ in questo regime (Figura 5.4) osserviamo che lo stato fondamentale di $\frac{1+\Pi^z}{2}H^+$ è

$$GS^+ = \text{span} \left\{ \prod_{q \in \Gamma^+ \setminus \{p\}} \chi_q^{(+)\dagger} |0^+\rangle, \prod_{q \in \Gamma^+ \setminus \{2\pi-p\}} \chi_q^{(+)\dagger} |0^+\rangle \right\}. \quad (5.2.34)$$

Sfruttando la (5.2.33) e l'iniettività dell'operatore di parità, si ha che lo stato fondamentale di $\frac{1-\Pi^z}{2}H^-$ è

$$GS^- = \text{span} \left\{ \Pi^x \prod_{q \in \Gamma^+ \setminus \{p\}} \chi_q^{(+)\dagger} |0^+\rangle, \Pi^x \prod_{q \in \Gamma^+ \setminus \{2\pi-p\}} \chi_q^{(+)\dagger} |0^+\rangle \right\} \quad (5.2.35)$$

e ha la stessa energia di GS^+ .

In conclusione, lo stato fondamentale in questo regime è

$$GS = \text{span} \left\{ \prod_{q \in \Gamma^+ \setminus \{p\}} \chi_q^{(+)\dagger} |0^+\rangle, \prod_{q \in \Gamma^+ \setminus \{2\pi-p\}} \chi_q^{(+)\dagger} |0^+\rangle, \right. \\ \left. \Pi^x \prod_{q \in \Gamma^+ \setminus \{p\}} \chi_q^{(+)\dagger} |0^+\rangle, \Pi^x \prod_{q \in \Gamma^+ \setminus \{2\pi-p\}} \chi_q^{(+)\dagger} |0^+\rangle \right\} \quad (5.2.36)$$

che è quattro volte degenera e nel limite termodinamico ha energia per sito pari a

$$\frac{E}{N} = -\frac{J}{4\pi} \int_0^{2\pi} \epsilon(q) dq + \frac{J}{N} \epsilon\left(\frac{\pi}{2}\right) = -\frac{J}{4\pi} \int_0^{2\pi} \epsilon(q) dq + \frac{J}{N} |\gamma|. \quad (5.2.37)$$

È facile verificare che esso è *gapless*.

Regime $\gamma = 1$

In questo regime l'Hamiltoniana (5.1.1) si riduce a

$$H = \frac{J}{2} \sum_{j=1}^N \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x \quad (5.2.38)$$

con FBC, che è la catena di Ising 1D frustrata in assenza di campo esterno già studiata nel dettaglio nei Capitoli 3 e 4. In questi Capitoli abbiamo mostrato che nel regime $h = 0$ e $\gamma = 1$ lo stato fondamentale è $2N$ -volte degenere, *gapped* e ha energia per sito pari a

$$\frac{E}{N} = \frac{1}{N} \frac{J}{2} (-N + 2) = -\frac{J}{2} + \frac{J}{N}. \quad (5.2.39)$$

Regime $\gamma > 1$

Dal grafico di $\epsilon(q)$ in questo regime (Figura 5.4) osserviamo che lo stato fondamentale di $\frac{1+\Pi^z}{2} H^+$ è

$$|GS^+\rangle = \prod_{q \in \Gamma^+ \setminus \{\pi\}} \chi_q^{(+)\dagger} |0^+\rangle \quad (5.2.40)$$

e che il primo stato eccitato di $\frac{1+\Pi^z}{2} H^+$ è

$$\text{span} \left\{ \prod_{q \in \Gamma^+ \setminus \{\frac{\pi}{N}\}} \chi_q^{(+)\dagger} |0^+\rangle, \prod_{q \in \Gamma^+ \setminus \{2\pi - \frac{\pi}{N}\}} \chi_q^{(+)\dagger} |0^+\rangle \right\}. \quad (5.2.41)$$

Sfruttando la (5.2.33), possiamo concludere che lo stato fondamentale di H nel regime $h = 0$, $\gamma > 1$ è

$$GS = \text{span} \left\{ \prod_{q \in \Gamma^+ \setminus \{\pi\}} \chi_q^{(+)\dagger} |0^+\rangle, \Pi^x \prod_{q \in \Gamma^+ \setminus \{\pi\}} \chi_q^{(+)\dagger} |0^+\rangle \right\} \quad (5.2.42)$$

che è doppiamente degenere. Nel limite termodinamico, esso ha energia per sito pari a

$$\frac{E}{N} = -\frac{J}{4\pi} \int_0^{2\pi} \epsilon(q) dq + \frac{J}{N} \epsilon(\pi) = -\frac{J}{4\pi} \int_0^{2\pi} \epsilon(q) dq + \frac{J}{N} \quad (5.2.43)$$

ed è *gapless*.

In questa Sezione abbiamo dimostrato che, nel limite termodinamico, lo stato fondamentale ha energia per sito data da

$$\frac{E(h, \gamma)}{N} = \begin{cases} -\frac{J}{4\pi} \int_0^{2\pi} \epsilon(q) dq & \text{se } h \geq 1, \gamma \geq 0 \\ -\frac{J}{4\pi} \int_0^{2\pi} \epsilon(q) dq + \frac{J}{N} \gamma \sqrt{\frac{h^2 + \gamma^2 - 1}{\gamma^2 - 1}} & \text{se } 0 \leq h < 1, 0 \leq \gamma < \sqrt{1-h} \\ -\frac{J}{4\pi} \int_0^{2\pi} \epsilon(q) dq + \frac{J}{N} (1-h) & \text{se } 0 \leq h < 1, \gamma \geq \sqrt{1-h}. \end{cases} \quad (5.2.44)$$

Sfruttando le simmetrie del modello per $h \rightarrow -h$ e $\gamma \rightarrow -\gamma$ si può estendere facilmente quanto appena trovato a tutto il piano h, γ . Si ha che

$$\frac{E(h, \gamma)}{N} = \begin{cases} -\frac{J}{4\pi} \int_0^{2\pi} \epsilon(q) dq & \text{se } |h| \geq 1 \\ -\frac{J}{4\pi} \int_0^{2\pi} \epsilon(q) dq + \frac{J}{N} |\gamma| \sqrt{\frac{h^2 + \gamma^2 - 1}{\gamma^2 - 1}} & \text{se } |h| < 1, |\gamma| < \sqrt{1 - |h|} \\ -\frac{J}{4\pi} \int_0^{2\pi} \epsilon(q) dq + \frac{J}{N} (1 - |h|) & \text{se } |h| < 1, |\gamma| \geq \sqrt{1 - |h|}. \end{cases} \quad (5.2.45)$$

Si noti che

$$\lim_{(h, \gamma) \rightarrow (0, 1)} |\gamma| \sqrt{\frac{h^2 + \gamma^2 - 1}{\gamma^2 - 1}} = 1 \quad (5.2.46)$$

per cammini interni alla regione $|h| < 1, |\gamma| < \sqrt{1 - |h|}$.

5.3 Transizioni di fase quantistiche

In questa Sezione studieremo l'eventuale presenza di curve nel piano h, γ in corrispondenza delle quali il sistema va incontro a transizioni di fase quantistiche.

Dalla (5.2.45) osserviamo che, nel limite termodinamico, l'energia dello stato fondamentale è scrivibile così:

$$E \equiv E_0 + \Delta E, \quad (5.3.1)$$

dove

$$\frac{E_0}{N} \equiv -\frac{J}{4\pi} \int_0^{2\pi} \epsilon(q) dq \quad (5.3.2)$$

è l'energia per sito dello stato fondamentale nel caso non frustrato (calcolata nel Capitolo 2) mentre ΔE è la differenza tra le energie degli stati fondamentali frustrato e non frustrato ed è data da (in unità J)

$$\frac{\Delta E(h, \gamma)}{J} = \begin{cases} 0 & \text{se } |h| \geq 1 \\ |\gamma| \sqrt{\frac{h^2 + \gamma^2 - 1}{\gamma^2 - 1}} & \text{se } |h| < 1, |\gamma| < \sqrt{1 - |h|} \\ 1 - |h| & \text{se } |h| < 1, |\gamma| \geq \sqrt{1 - |h|}. \end{cases} \quad (5.3.3)$$

La definizione (5.3.1) è comoda perché le eventuali differenze (in quanto a transizioni di fase quantistiche) tra il caso frustrato e quello non frustrato hanno origine da non analiticità di ΔE nello spazio dei parametri.

Quindi, la parte restante del Capitolo sarà dedicata allo studio di ΔE , che, per comodità, consideriamo in unità J . Tale studio ci consentirà di ottenere per la prima volta le possibili transizioni di fase quantistiche. In Figura 5.5 è riportato il grafico tridimensionale di $\Delta E/J$ in funzione di h e γ . Per comodità ma senza perdita di generalità ($\Delta E/J$ è invariante per $h \rightarrow -h$ e per $\gamma \rightarrow -\gamma$), ci limiteremo a studiare i luoghi geometrici di non analiticità per $\Delta E/J$ nel primo quadrante dello spazio dei parametri ($h, \gamma \geq 0$).

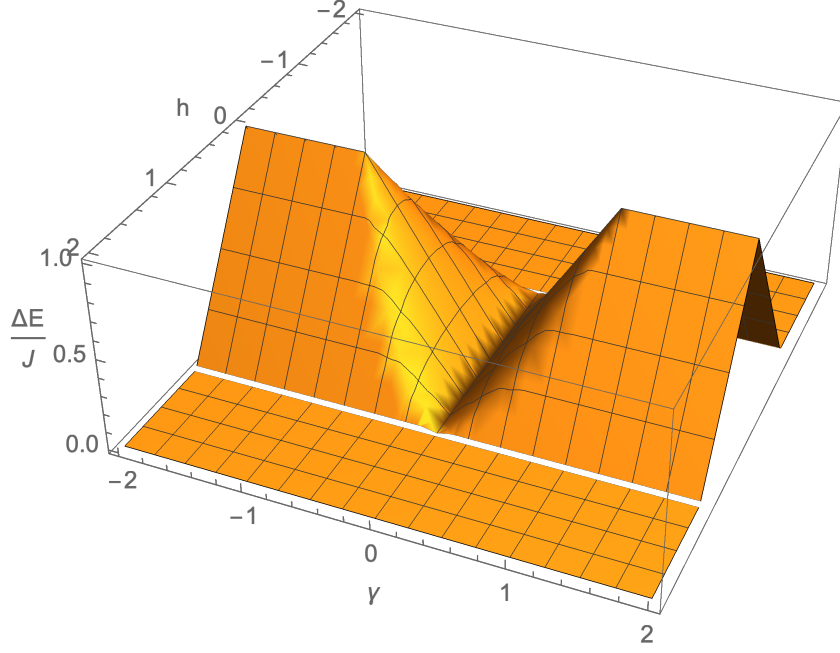


Figura 5.5: $\Delta E/J$ in funzione di h e γ nel caso frustrato. In assenza di frustrazione $\Delta E/J = 0$.

5.3.1 Caso con $h = 1$

Dalla (5.3.3) si ha che

$$\frac{\Delta E}{J} = \begin{cases} -h + 1 & \text{per } h \sim 1^-, \gamma > 0 \\ 0 & \text{per } h \sim 1^-, \gamma = 0 \\ 0 & \text{per } h \sim 1^+, \gamma \geq 0 \end{cases} \quad (5.3.4)$$

indipendentemente dal valore di γ .

Per $\gamma > 0$ si ha quindi

$$\frac{1}{J} \frac{\partial \Delta E}{\partial h} = \begin{cases} -1 & \text{per } h \sim 1^- \\ 0 & \text{per } h \sim 1^+, \end{cases} \quad (5.3.5)$$

che implica

$$\left. \frac{\partial E}{\partial h} \right|_{h \rightarrow 1^+} - \left. \frac{\partial E}{\partial h} \right|_{h \rightarrow 1^-} = J, \quad (5.3.6)$$

ossia in $h = 1, \gamma > 0$ si ha una transizione di fase quantistica del primo ordine.

5.3.2 Caso $h = 0$

Regime con $\gamma \geq 1$

Negli intorno destro e sinistro di $h \rightarrow 0$ (per ogni $\gamma \in [1, \infty)$ fissato), la relazione di dispersione ha sempre un andamento come quello in Figura 5.6, che, anche in quanto a minimi, è analogo a quello per $\gamma = 1$ (in Figura 4.2), già discusso nel

capitolo precedente. Di conseguenza, possiamo recuperare il risultato della Sezione 4.2.2, che ricordiamo essere il seguente:

$$\left. \frac{\partial E}{\partial h} \right|_{h \rightarrow 0^+} - \left. \frac{\partial E}{\partial h} \right|_{h \rightarrow 0^-} = -2J, \quad (5.3.7)$$

quindi in $h = 0$, $\gamma \geq 1$ abbiamo una transizione di fase quantistica del primo ordine.

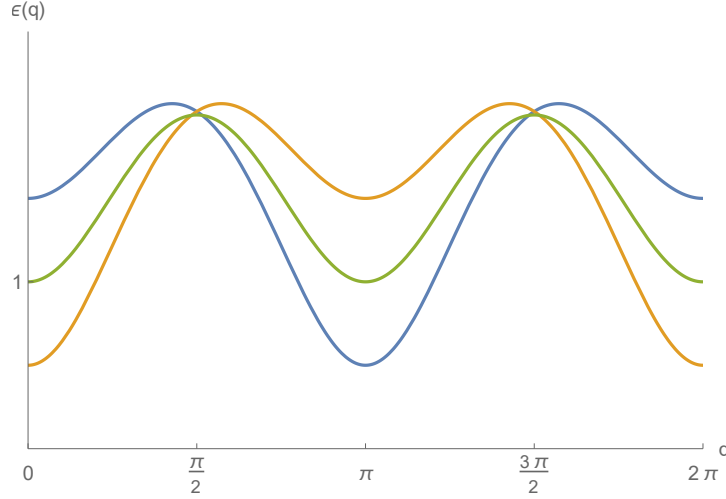


Figura 5.6: $\epsilon(q)$ in funzione di $q \in [0, 2\pi)$ per $\gamma = 1.2$ e $h = 0$ (verde), $h = 0.1$ (arancione), $h = -0.1$ (blu). Si osservi che per $h = \pm 0.1$ l'andamento di $\epsilon(q)$ e la posizione dei suoi minimi sono gli stessi nel caso $\gamma = 1$ (Figura 4.2) già studiato nel Capitolo 4, invece, quando $h = 0$ e $\gamma > 1$ non abbiamo più la banda costante che si ha nel punto classico della catena di Ising frustrata.

Regime con $0 < \gamma < 1$

In questo regime, l'andamento della relazione di dispersione nell'intorno di $h = 0$ è quello riportato in Figura 5.7. Fissato $\gamma = \bar{\gamma} \in (0, 1)$, in un intorno di $h = 0$ si ha che

$$\frac{\Delta E(h, \gamma = \bar{\gamma})}{J} = \bar{\gamma} \sqrt{\frac{h^2 + \bar{\gamma}^2 - 1}{\bar{\gamma}^2 - 1}}, \quad (5.3.8)$$

la quale è analitica (in h) nell'intorno di $h = 0$, pertanto concludiamo che in $h = 0$ con $0 < \gamma < 1$ non ci sono transizioni di fase quantistiche.

5.3.3 Caso $0 \leq h < 1$ con $\gamma = 0$

Fissato $h = \bar{h} \in [0, 1)$, nell'intorno di $\gamma = 0$ si ha che

$$\frac{\Delta E(h = \bar{h}, \gamma)}{J} = |\gamma| \sqrt{\frac{\bar{h}^2 + \gamma^2 - 1}{\gamma^2 - 1}}, \quad (5.3.9)$$

dalla cui forma funzionale (in Figura 5.8 è riportato il grafico ad $\bar{h} = 0.2$) osserviamo che essa presenta un punto angoloso in $\gamma = 0$. Si calcola infatti che

$$\left. \frac{\partial E}{\partial \gamma} \right|_{\gamma \rightarrow 0^+} - \left. \frac{\partial E}{\partial \gamma} \right|_{\gamma \rightarrow 0^-} = 2J\sqrt{1 - h^2}, \quad (5.3.10)$$

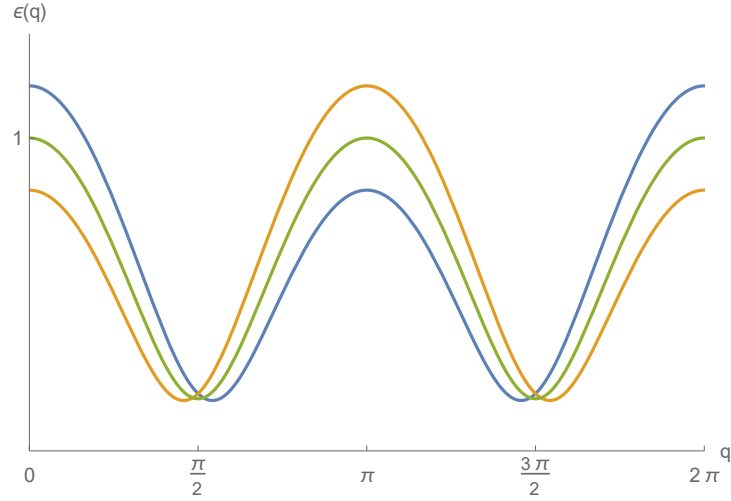


Figura 5.7: $\epsilon(q)$ in funzione di $q \in [0, 2\pi)$ per $\gamma = 0.5$ e $h = 0$ (verde), $h = 0.1$ (arancione), $h = -0.1$ (blu).

pertanto in $0 < 1$ con $\gamma = 0$ si ha una transizione di fase quantistica del primo ordine.

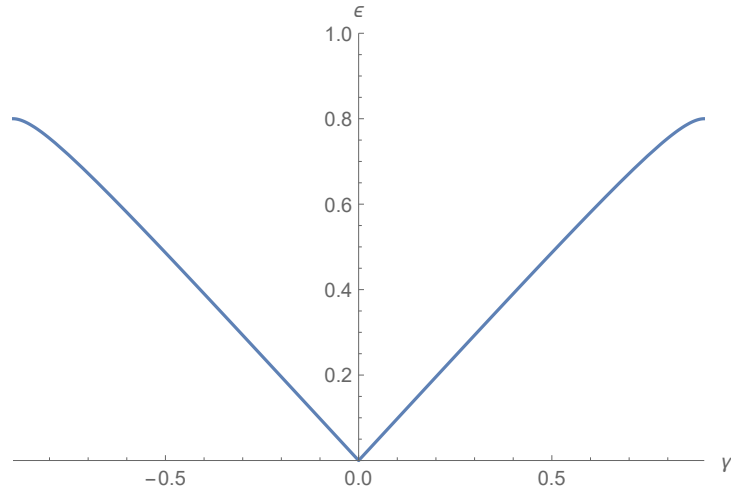


Figura 5.8: $\epsilon(p(\bar{h} = 0.2, \gamma))$ in funzione di $\gamma \in (-\sqrt{1-\bar{h}}, \sqrt{1-\bar{h}})$.

5.3.4 Caso $\gamma = \sqrt{1-h}$ con $0 < h \leq 1$

Regime $0 < h < 1$

Dalla (5.3.3) si ha che

$$\frac{\Delta E}{J} = \begin{cases} \gamma \sqrt{\frac{h^2 + \gamma^2 - 1}{\gamma^2 - 1}} & \text{se } 0 < \gamma < \sqrt{1-h} \\ -h + 1 & \text{se } \gamma \geq \sqrt{1-h} \end{cases} \quad (5.3.11)$$

le cui derivate parziali prima e seconda rispetto a γ sono, rispettivamente,

$$\frac{1}{J} \frac{\partial \Delta E}{\partial \gamma} = \begin{cases} \frac{(\gamma^2 - 1)^2 - h^2}{(\gamma^2 - 1)^{3/2} \sqrt{h^2 + \gamma^2 - 1}} & \text{se } 0 < \gamma < \sqrt{1-h} \\ 0 & \text{se } \gamma \geq \sqrt{1-h} \end{cases} \quad (5.3.12)$$

e

$$\frac{1}{J} \frac{\partial^2 \Delta E}{\partial \gamma^2} = \begin{cases} \frac{h^2 \gamma (\gamma^4 + 2\gamma^2 + 3h^2 - 3)}{(\gamma^2 - 1)^{5/2} (h^2 + \gamma^2 - 1)^{3/2}} & \text{se } 0 < \gamma < \sqrt{1-h} \\ 0 & \text{se } \gamma \geq \sqrt{1-h}. \end{cases} \quad (5.3.13)$$

L'andamento di $\Delta E/J$ e delle sue derivate rispetto a γ , ad h fissato in $(0, 1)$, è riportato nelle Figure 5.9, 5.10 e 5.11.

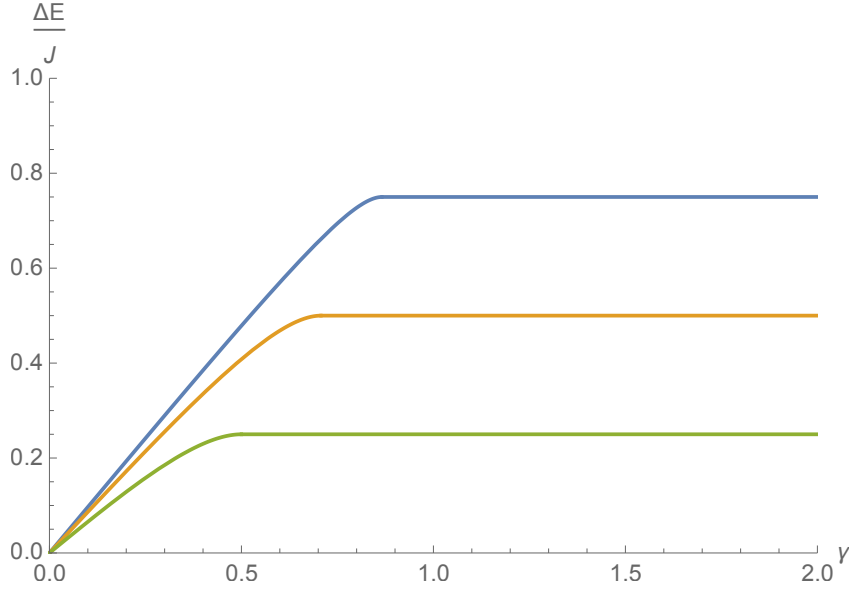


Figura 5.9: $\frac{\Delta E}{J}$ in funzione di γ ad $h = 0.25$ (blu), $h = 0.5$ (arancione) e $h = 0.75$ (verde).

Osserviamo che $\frac{1}{J} \frac{\partial \Delta E}{\partial \gamma}$ presenta un punto angoloso in $\gamma = \sqrt{1-h}$. Si calcola infatti che

$$\left. \frac{\partial^2 E}{\partial \gamma^2} \right|_{\gamma \rightarrow (\sqrt{1-h})^+} - \left. \frac{\partial^2 E}{\partial \gamma^2} \right|_{\gamma \rightarrow (\sqrt{1-h})^-} = \frac{4J}{h}, \quad (5.3.14)$$

da cui concludiamo che in corrispondenza della curva $\gamma = \sqrt{1-h}$ con $0 < h < 1$ il sistema esibisce una transizione di fase quantistica del secondo ordine.

Caso $h = 1$

Si può verificare che in questo punto dello spazio dei parametri h, γ la funzione $\Delta E/J$ è differenziabile, pertanto in corrispondenza di $(h, \gamma) = (1, 0)$ il sistema esibisce una transizione di fase quantistica del secondo ordine, esattamente come in assenza di frustrazione.

5.3.5 Confronto col caso non frustrato

Nel caso non frustrato (facilmente deducibile dal Capitolo 2), dato da $J < 0$ oppure $J > 0$ con N pari, avevamo trovato che lo spettro era *gapped* e con $\frac{\Delta E}{J} = 0$. In particolare, avevamo mostrato che (si veda Sezione 2.3.3) la catena XY non frustrata esibisce solo transizioni di fase del secondo ordine in $|h| = 1$ oppure in $\gamma = 0$ con $|h| < 1$, come mostrato nel diagramma di fase in Figura 5.12.

In questo Capitolo, abbiamo mostrato che nel caso frustrato ($J > 0$ con N dispari) lo stato fondamentale è *gapped* in $(h, \gamma) = (0, \pm 1)$ e in $|h| > 1$ ed è *gapless*

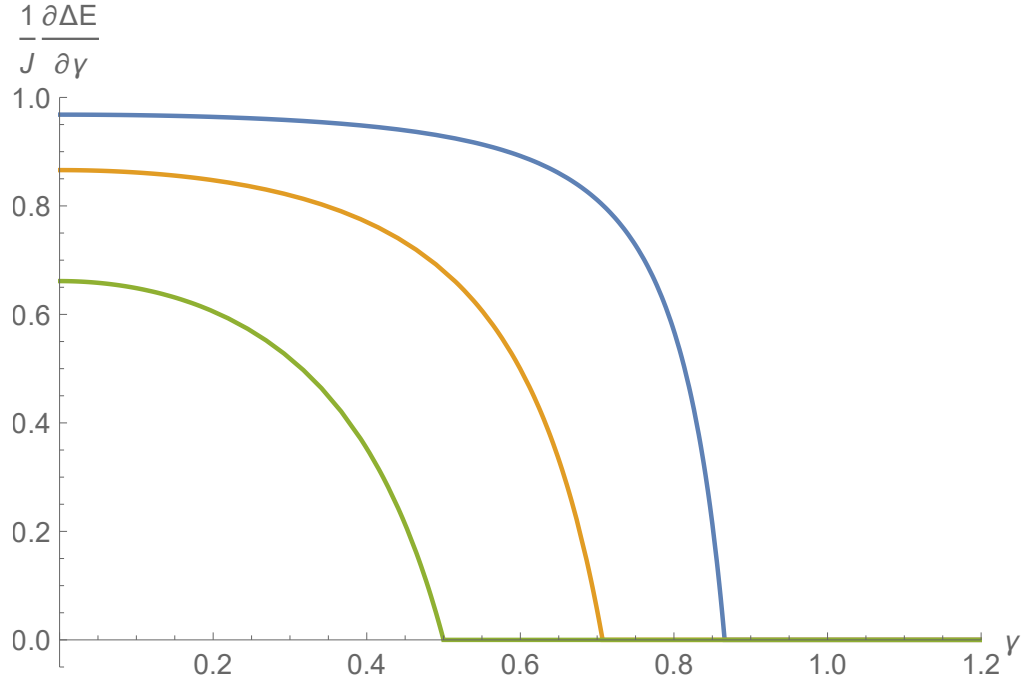


Figura 5.10: $\frac{1}{J} \frac{\partial \Delta E}{\partial \gamma}$ in funzione di γ ad $h = 0.25$ (blu), $h = 0.5$ (arancione) e $h = 0.75$ (verde).

in tutti gli altri punti dello spazio dei parametri. Inoltre abbiamo mostrato che $\frac{\Delta E}{J} = \frac{\Delta E}{J}(h, \gamma) \neq 0$, la cui espressione esplicita è data dalla (5.3.3), il cui grafico è riportato in Figura 5.5. La particolare forma funzionale di $\frac{\Delta E}{J}(h, \gamma)$, indotta dalla frustrazione, induce transizioni di fase quantistiche che sono assenti nel caso non frustrato (quella del primo ordine in $h = 0$, $|\gamma| \geq 1$ e quella del secondo ordine in $\gamma = \pm \sqrt{1 - |h|}$ con $|h| \leq 1$ e $h \neq 0$) e cambia l'ordine di quelle già presenti nel caso non frustrato, che passano da essere del secondo ordine a diventare del primo ordine. La Figura 5.13 evidenzia molto bene come il diagramma di fase del caso frustrato ($J > 0$ con N dispari) presenti nuove transizioni di fase quantistiche e cambi l'ordine di quelle già evidenziate in assenza di frustrazione.

Lo studio della fisica che contraddistingue ciascuna fase non è ancora stato effettuato e necessita della conoscenza dei correlatori a due spin.

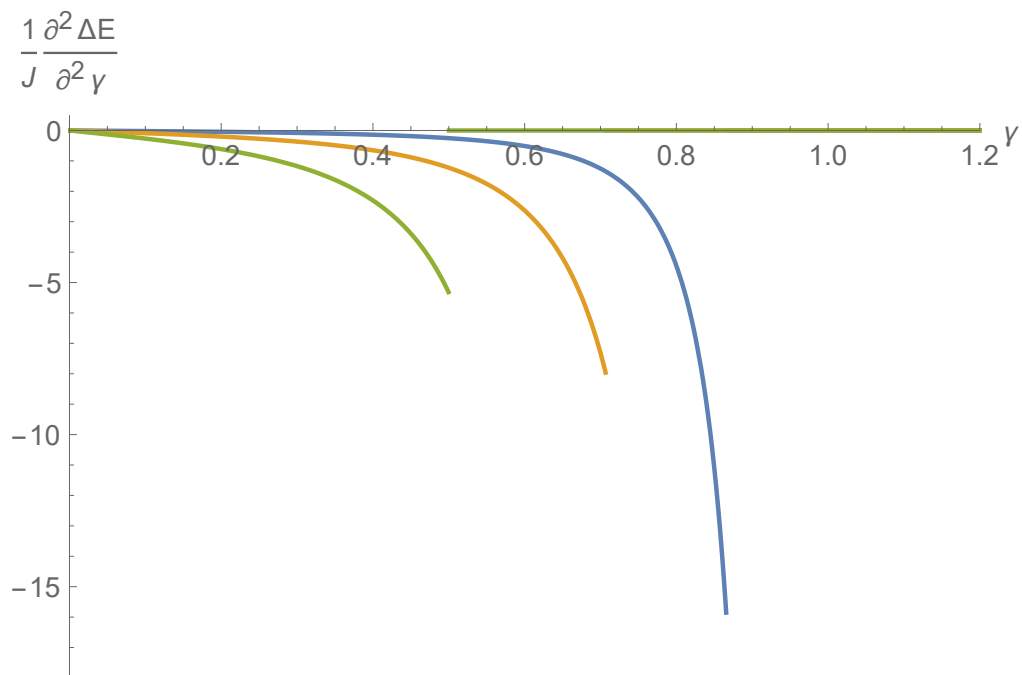


Figura 5.11: $\frac{1}{J} \frac{\partial^2 \Delta E}{\partial \gamma^2}$ in funzione di γ ad $h = 0.25$ (blu), $h = 0.5$ (arancione) e $h = 0.75$ (verde).

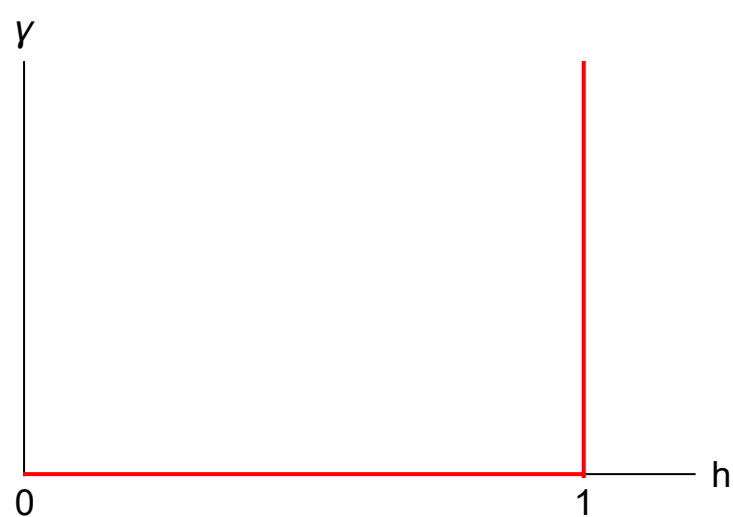


Figura 5.12: Diagramma di fase della catena XY non frustrata ($J < 0$ oppure $J > 0$ con N pari), già discusso nel Capitolo 2. In corrispondenza delle linee rosse si hanno transizioni di fase quantistiche del secondo ordine.

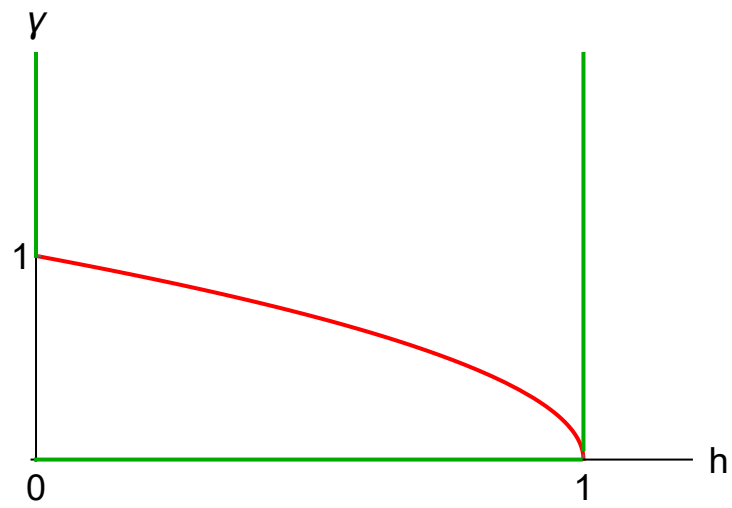


Figura 5.13: Diagramma di fase della catena XY frustrata ($J > 0$ con N dispari), discusso in questo Capitolo. In corrispondenza delle linee verdi si hanno transizioni di fase quantistiche del primo ordine, mentre le linee rosse rappresentano transizioni di fase quantistiche del secondo ordine.

Conclusioni

In questa Tesi ho studiato il sistema unidimensionale quantistico di spin detto catena XY, in presenza di campo trasverso. Tale modello rappresenta una catena spin con interazione tra primi vicini anisotropa e non nulla solamente in due direzioni. La terza direzione risulta invece accoppiata a un campo magnetico esterno. Una peculiarità di questo modello risiede nel fatto che gli autostati e le energie possono essere ricavati analiticamente per mezzo di un *mapping* che traduce la Hamiltoniana di spin in una di fermioni non interagenti.

Il motivo iniziale di interesse è legato al fatto che, nel 2019, è stato mostrato che, in assenza di campo applicato e con l'imposizione di condizioni periodiche al contorno, il sistema è *gappato* se la catena consta di un numero pari di spin, mentre è *gapless* se tale numero è dispari. Inoltre nel caso dispari è presente una transizione di fase quantistica (ovvero una non-analiticità dell'energia dello stato fondamentale in funzione dei parametri della Hamiltoniana, in questo caso dell'anisotropia tra gli accoppiamenti) aggiuntiva rispetto al caso pari. Con condizioni al bordo libere (nessuna interazione tra primo e ultimo spin), il sistema si comporta invece in modo qualitativamente analogo al caso pari. Questi risultati sono di grande rilevanza. Sembrano infatti estendere la classificazione delle transizioni di fase proprie dei sistemi quantistici. Infatti, sia le transizioni di fase legate alla rottura spontanea delle simmetrie, come la transizione ferromagnete-paramagnete, sia le transizioni di fase topologiche, come la transizione di Berezinskii, Kosterlitz e Thouless, sono insensibili rispetto a piccole variazioni che avvengono a livello microscopico, come la parità dei costituenti. Essendo la scoperta estremamente recente, gli effetti a temperatura finita della transizione di fase quantistica, l'inserimento in un quadro esaustivo del fenomeno, e il calcolo sistematico degli effetti della transizione di fase sulle funzioni di correlazione, sono tematiche aperte e attualmente oggetto di indagine.

Il contributo originale apportato da questa Tesi è stato caratterizzare le differenze, a livello di energia dello stato fondamentale, tra caso pari e dispari, in presenza di un campo magnetico finito. Sono stati analizzati sia la catena di Ising che il modello XY.

In primo luogo si è mostrato che il modello di Ising esibisce una transizione di fase quantistica del primo ordine - una discontinuità della derivata dell'energia dello stato fondamentale - in funzione del campo magnetico applicato nel caso particolare in cui l'accoppiamento di spin avvenga solamente lungo una direzione. Tale risultato è significativo perché si riferisce al modello integrabile più semplice e utilizzato. I risultati corrispondenti sono stati pubblicati sulla rivista internazionale e *peer reviewed* "Symmetry" [19]. Per completezza, si è anche mostrato come il calore specifico del sistema a temperatura finita sia molto diverso per numeri pari o dispari di spin.

Successivamente, nell'ambito più generale del modello XY in campo trasverso, si è

mostrato che non solo il caso pari e il caso dispari possono differire per la presenza di transizioni di fase del primo ordine, ma che le transizioni di fase del secondo ordine nel caso pari possono diventare del primo ordine nel caso dispari. Un articolo relativo a tali risultati è attualmente in fase di stesura.

Le possibili estensioni del lavoro presentato in questa Tesi sono molteplici. Doverose sono il calcolo (numerico) delle funzioni di correlazione e di ulteriori proprietà a temperatura finita. Queste informazioni permetterebbero rispettivamente di avere una maggiore caratterizzazione dei risultati trovati riguardo all'energia e di poterne giudicare l'osservabilità sperimentale.

Estensioni ulteriori potrebbero essere la ricerca di questo tipo di effetti nell'ambito delle transizioni di fase termiche, la caratterizzazione topologica del fenomeno attraverso limiti di grande spin, e l'estensione a sistemi non basati sugli spin, come ad esempio insiemi di elettroni e fononi accoppiati tra loro.

Appendice A

Dimostrazione dell'equivalenza tra modello di Ising e *lattice gas*

Consideriamo un reticolo d -dimensionale dove su ogni sito può essere presente o meno al più una particella. Sia $n_i \in \{0, 1\}$ il numero di occupazione del sito i -esimo. Particelle su siti primi vicini interagiscono attrattivamente con scala dell'energia di accoppiamento $U < 0$. L'energia che definisce il lattice gas è la seguente

$$E = 4U \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j + \mu \sum_i n_i \quad (\text{A.0.1})$$

dove μ è il potenziale chimico.

Definendo

$$n_i \equiv \frac{S_i + 1}{2} \quad (\text{A.0.2})$$

si può vedere che la forma dell'energia del lattice gas è quella dell'Ising:

$$\begin{aligned} E &= 4U \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j + \mu \sum_i n_i \\ &= 4U \sum_{\langle ij \rangle} \left(\frac{S_i + 1}{2} \right) \left(\frac{S_j + 1}{2} \right) + \mu \sum_i \frac{S_i + 1}{2} \\ &= U \sum_{\langle ij \rangle} (S_i S_j + S_j + S_i + 1) + \frac{\mu}{2} \sum_i S_i + \frac{\mu N}{2} \\ &= U \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j + 2qU \sum_i S_i + NqU + \frac{\mu}{2} \sum_i S_i + \frac{\mu N}{2} \\ &= U \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j + \left(2qU + \frac{\mu}{2} \right) \sum_i S_i + N \left(qU + \frac{\mu}{2} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.0.3})$$

che è proprio (a meno di una costante irrilevante) l'energia che definisce un modello di Ising (1.1.14) con

$$J = U \quad B = -2qU + \frac{\mu}{2}. \quad (\text{A.0.4})$$

Abbiamo quindi dimostrato che esiste un'equivalenza esatta tra il modello di Ising e il *lattice gas*. Si noti che questo tipo di equivalenza è differente da quella che caratterizza sistemi che al punto critico appartengono alla stessa classe di universalità. Quest'ultima è infatti un'equivalenza approssimata e che vale solo al punto critico.

Appendice B

Argomento di Peierls

In questa Appendice riportiamo l'argomento proposto da Peierls per dimostrare l'esistenza di una transizione di fase a temperatura finita $T > 0$ nel modello di Ising bidimensionale (1.1.22) con condizioni al bordo periodiche.

Consideriamo il modello a basse temperature e supponiamo che esso si trovi nello stato ordinato $\{S_{ij} = +1\}$, che minimizza l'energia. Le fluttuazioni termiche danno origine a domini con spin -1 , come ad esempio quello in Figura B.1

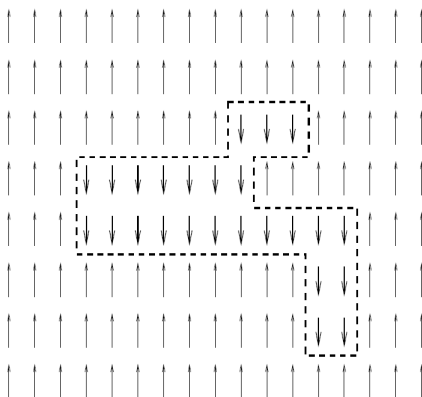


Figura B.1: Esempio di dominio a spin -1 indotto dalle fluttuazioni termiche. La Figura è tratta da [39].

Sia L il numero totale di legami antiferromagnetici, allora il costo energetico ΔE per la creazione di un dominio del tipo quello in Figura B.1 è

$$\Delta E = -2JL. \quad (\text{B.0.1})$$

In generale, fissato L , esisteranno più configurazioni con quel numero di legami antiferromagnetici. Infatti il dominio in Figura B.1 può essere traslato nel reticolo ($N_x \times N_y$ possibilità) ma può essere anche deformato. Per trovare l'entropia del caso con L legami antiferromagnetici è necessario calcolare il numero totale di configurazioni possibili con un L fissato, che chiamerò Ω_L . Al fine di capire se la fase ferromagnetica ordinata di partenza può sopravvivere all'azione delle fluttuazioni termiche, è sufficiente calcolare la differenza di energia libera $\Delta F(T)$ tra il caso con L legami antiferromagnetici e lo stato ordinato iniziale. Essa è data da

$$\Delta F = \Delta E - T\Delta S = -2JL - k_B T \log \Omega_L, \quad (\text{B.0.2})$$

da cui

$$\Delta F \geq 0 \iff T \leq -\frac{2JL}{k_B \log \Omega_L} \equiv T_c. \quad (\text{B.0.3})$$

Resta da stimare Ω_L . Sia Λ_L una sovrastima di Ω_L , allora

$$T_c \geq -\frac{2JL}{k_B \log \Lambda_L}, \quad (\text{B.0.4})$$

dove una buona (sovra)stima di Ω_L si può ottenere mediante il seguente ragionamento: partiamo dalla configurazione ordinata $\{S_{ij} = +1\}$, scegliamo un sito qualunque e cambiamo segno allo spin ivi situato; ora abbiamo 4 direzioni possibili in cui muoverci per mettere il prossimo spin negativo; una volta effettuata la scelta, abbiamo 3 possibili direzioni in cui poter andare... Il ragionamento si itera fino a quando non abbiamo una configurazione con un numero L di legami antiferromagnetici.

È facile convincersi che

$$\Omega_L \leq 3^L \equiv \Lambda_L, \quad (\text{B.0.5})$$

quindi il sistema è stabile (cioè $\Delta F \geq 0$) rispetto alla creazione di un dominio come quello in Figura B.1 approssimativamente quando siamo a temperature inferiori di $T < T_c$ con

$$T_c > -\frac{2J}{k_B \log 3}. \quad (\text{B.0.6})$$

Si osservi che questo ragionamento si può estendere inalterato anche al caso di dimensione $d > 2$, dove si troverà [7]

$$T_c > -\frac{2J}{k_B \log(2d - 1)}. \quad (\text{B.0.7})$$

Appendice C

Teoria di Ginzburg-Landau

Delineerò ora, avendo in mente il modello di Ising, un metodo per il calcolo approssimato delle transizioni di fase.

C.1 *Coarse graining*

Consideriamo un modello di spin definito su un reticolo quadrato d -dimensionale con N siti e dividiamolo in tanti ipercubi (box) di lato a (come mostrato in Figura C.1).

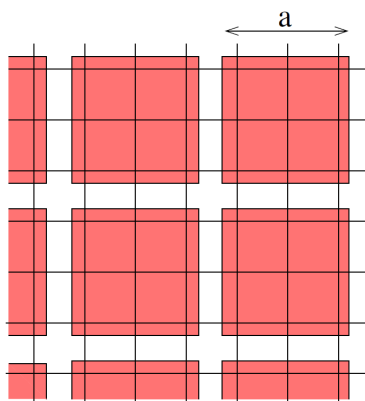


Figura C.1: *Coarse graining*. La Figura è tratta da [40].

Sia N' il numero di siti reticolari contenuti in ogni box, ognuno dei quali è individuato da un vettore \mathbf{x} (con punta nel centro del box). Al generico box in \mathbf{x} associamo una magnetizzazione media

$$m(\mathbf{x}) \equiv \frac{1}{N'} \sum_{i \in \mathbf{x}} S_i, \quad (\text{C.1.1})$$

dove abbiamo indicato con $S_{i \in \mathbf{x}} = \pm 1$ lo spin situato sul sito i -esimo del box centrato in \mathbf{x} . Questa procedura è nota come *coarse graining*.

La funzione di partizione del generico modello di spin di partenza può essere ora scritta così

$$Z = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta E(\{S_i\})} = \sum_{m(\mathbf{x})} \sum_{\{S_i\} | m(\mathbf{x})} e^{-\beta E(\{S_i\})} \equiv \sum_{m(\mathbf{x})} e^{-\beta F(m(\mathbf{x}))}, \quad (\text{C.1.2})$$

dove con la notazione $\{S_i\}|m(\mathbf{x})$ indichiamo che sommiamo su tutte le configurazioni di spin che danno una magnetizzazione *coarse grained* $m(\mathbf{x})$. La magnetizzazione $m(\mathbf{x})$ è detta, nel contesto delle transizioni di fase, parametro d'ordine. Infatti, essa distingue, se esistenti, la fase ordinata (ferromagnetica), dove è non nulla, da quella disordinata (paramagnetica), dove è nulla. Il concetto di parametro d'ordine è intrinsecamente legato a quello di classificazione delle fasi a seconda delle simmetrie. Dalla meccanica statistica sappiamo che la probabilità che il sistema si trovi nella configurazione di spin $\{S_i\}$ è data da

$$P(\{S_i\}) = \frac{e^{-\beta E(\{S_i\})}}{Z}, \quad (\text{C.1.3})$$

di conseguenza, la probabilità che il sistema si trovi in una configurazione con magnetizzazione *coarse grained* $m(\mathbf{x})$ è

$$P(m(\mathbf{x})) = \sum_{\{S_i\}|m(\mathbf{x})} P(\{S_i\}) = \frac{1}{Z} \sum_{\{S_i\}|m(\mathbf{x})} e^{-\beta E(\{S_i\})} = \frac{e^{-\beta F(m(\mathbf{x}))}}{Z}. \quad (\text{C.1.4})$$

Osserviamo che, rispetto al modello reticolare dal quale siamo partiti, ora il grado di libertà dinamico $m(\mathbf{x})$ è definito solo su un insieme minore di punti nello spazio (dato che $N' < N$ per costruzione). Per ovviare a ciò, ci mettiamo nel limite

$$\frac{N}{N'} \gg 1 \quad (\text{C.1.5})$$

in modo tale da poter trattare \mathbf{x} come una variabile continua.

Dalla (C.1.1) osserviamo che $m(\mathbf{x})$ è quantizzata in unità $1/N'$, pertanto scegliamo

$$N' \gg 1 \quad (\text{C.1.6})$$

in modo tale che $m(\mathbf{x})$ possa assumere qualsiasi valore nell'intervallo $[-1, 1]$.

Assumendo che $m(\mathbf{x})$ sia una funzione continua, possiamo finalmente scrivere la funzione di partizione come un *path integral*

$$Z = \int \mathcal{D}m(\mathbf{x}) e^{-\beta F[m(\mathbf{x})]}, \quad (\text{C.1.7})$$

dove la notazione $\mathcal{D}m$ ci ricorda che la somma è su tutte le configurazioni $m(\mathbf{x})$ (che sono funzioni) ed $F[m(\mathbf{x})]$ è un funzionale, noto come *energia libera di Ginzburg-Landau*.

C.2 Energia libera di Ginzburg-Landau

In questa Sezione imporreemo dei vincoli sulla forma dell'energia libera di Ginzburg-Landau, la maggior parte dei quali hanno origine dalle simmetrie del modello reticolare di partenza. Essi ci permetteranno di scrivere la forma funzionale più generale dell'energia libera di Ginzburg-Landau e sono i seguenti:

- *Località*. Nel modello di Ising, la presenza di sole interazioni a primi vicini tra spin fa sì che uno spin su un sito non influenzi direttamente il comportamento

di un altro spin situato su un sito molto lontano, bensì al più indirettamente attraverso gli spin sui siti intermedi. Per la magnetizzazione $m(\mathbf{x})$ vale lo stesso discorso, pertanto possiamo scrivere l'energia libera di Ginzburg-Landau come

$$F[m(\mathbf{x})] = \int d^d x f(m(\mathbf{x})), \quad (\text{C.2.1})$$

dove $f(m(\mathbf{x}))$ è una funzione che, in generale, dipende da $m(\mathbf{x})$ e dalle sue derivate. I termini di gradiente controllano come il valore della magnetizzazione in un punto \mathbf{x} influenza quello in un punto vicino $\mathbf{x} + \delta\mathbf{x}$, dove $|\delta\mathbf{x}|/|\mathbf{x}| \ll 1$.

- *Invarianza per traslazioni e rotazioni.* Il reticolo di partenza ha una simmetrie discrete di traslazione e rotazione. Avendo scelto a molto maggiore del passo reticolare (cioè $N' \gg 1$), a seguito del *coarse graining* possiamo trattare tali simmetrie come continue, di conseguenza richiediamo che

$$F[m(\mathbf{x} + \mathbf{v})] = F[m(\mathbf{x})] \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbb{R}^d \quad (\text{C.2.2})$$

$$F[m(R\mathbf{x})] = F[m(\mathbf{x})] \quad \forall R \in O(d). \quad (\text{C.2.3})$$

- *Simmetria \mathbb{Z}_2 .* In assenza di campo magnetico esterno, il modello di Ising originale (1.1.14) è invariante per $\{S_i\} \rightarrow \{-S_i\}$. Dalla (C.1) osserviamo che tale trasformazione corrisponde a $m(\mathbf{x}) \rightarrow -m(\mathbf{x})$, pertanto richiediamo che

$$F[-m(\mathbf{x})] = F[m(\mathbf{x})]. \quad (\text{C.2.4})$$

Quando $B \neq 0$ il modello di Ising (1.1.14) è invariante sotto la trasformazione

$$\begin{cases} \{S_i\} \rightarrow \{-S_i\} \\ B \rightarrow -B, \end{cases} \quad (\text{C.2.5})$$

quindi, nella teoria di Ginzburg-Landau, richiediamo che

$$F[m(\mathbf{x})]|_B = F[-m(\mathbf{x})]|_{-B}. \quad (\text{C.2.6})$$

- *Analiticità.* Assumiamo che $F[m(\mathbf{x})]$ sia una funzione analitica in $m(\mathbf{x})$ e nelle sue derivate. Tale richiesta nasce dalla volontà di poter espandere in serie di Taylor in m l'energia libera di Ginzburg-Landau quando si studia l'intorno di un punto in cui avviene una transizione di fase.
- Restringiamo il nostro interesse a situazioni in cui $m(\mathbf{x})$ varia apprezzabilmente solo su distanze molto maggiori della scala di coarse graining a . Questo ci giustifica a considerare solo le derivate di ordine minore.

Dalle osservazioni e dalle assunzioni appena fatte, concludiamo che la forma più generale per l'energia libera di Ginzburg-Landau per un modello di spin scalari su un reticolo quadrato d -dimensionale (che è quello che interessa a noi) è

$$F[m(\mathbf{x})] = F_0(T) + \int d^d \mathbf{x} \left[-B(\mathbf{x})m(\mathbf{x}) + \frac{1}{2}\alpha_2(T)m^2(\mathbf{x}) + \frac{1}{4}\alpha_4(T)m^4(\mathbf{x}) + \frac{1}{2}\gamma(T)(\nabla m(\mathbf{x}))^2 + \dots \right], \quad (\text{C.2.7})$$

dove $F_0(T)$ è una funzione della sola temperatura, $B(\mathbf{x})$ è il campo magnetico esterno e i couplings $\alpha_2(T)$, $\alpha_4(T)$, $\gamma(T)$, ... sono funzioni della temperatura e la loro forma dipenderà dal problema in esame. A questo stadio, è chiaro che la forma ottenuta è essenzialmente solamente legata alla dimensionalità del sistema, al tipo di parametro d'ordine (ovvero al fatto che abbiamo scelto $m(x)$ come oggetto a una componente, ma avremmo potuto scegliere diversamente), e alle simmetrie del sistema. Questa è la ragione fisica per cui le transizioni di fase sono classificabili in classi di universalità.

C.3 Teoria di campo medio

Torniamo alla funzione di partizione (C.1.7) e assumiamo che il path integral sia dominato dalla configurazione che minimizza il funzionale $F[m(\mathbf{x})]$, ossia

$$Z \approx e^{-\beta \min F[m(\mathbf{x})]}, \quad (\text{C.3.1})$$

detta approssimazione di *punto sella*.

Dalla (C.1.4), è evidente che l'assunzione appena fatta implica che la configurazione di equilibrio del sistema è quella che minimizza $F[m(\mathbf{x})]$.

Per trovare qual è la magnetizzazione che minimizza l'energia libera di Ginzburg-Landau utilizziamo i metodi variazionali [41]. Condizione necessaria affinché $m(\mathbf{x})$ minimizzi F è la seguente

$$\delta F[m(\mathbf{x})] \equiv F[m(\mathbf{x}) + \delta m(\mathbf{x})] - F[m(\mathbf{x})] = 0 \quad (\text{C.3.2})$$

per ogni variazione a estremi fissati $\delta m(\mathbf{x})$ tale che $|\delta m(\mathbf{x})| \ll |m(\mathbf{x})|$.

In assenza di campo magnetico esterno si ha che

$$\begin{aligned} \delta F[m(\mathbf{x})] &= \int d^d x [-B(\mathbf{x})\delta m + \alpha_2(T)m(\mathbf{x})\delta m + \alpha_4(T)m^3(\mathbf{x})\delta m + \gamma(T)\nabla m \cdot \nabla \delta m] \\ &= \int d^d x [-B(\mathbf{x}) + \alpha_2(T)m(\mathbf{x}) + \alpha_4(T)m^3(\mathbf{x}) - \gamma(T)\nabla^2 m] \delta m(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (\text{C.3.3})$$

Dal lemma fondamentale del calcolo variazionale [41]

$$\delta F[m(\mathbf{x})] = 0 \iff -B(\mathbf{x}) + \alpha_2(T)m(\mathbf{x}) + \alpha_4(T)m^3(\mathbf{x}) - \gamma(T)\nabla^2 m = 0, \quad (\text{C.3.4})$$

che è l'equazione di Eulero-Lagrange, della quale ora consideriamo la soluzione più semplice, ossia quella costante

$$m(\mathbf{x}) \equiv m = \text{cost.} \quad (\text{C.3.5})$$

In questo caso particolare

$$f(m) = f_0(T) - Bm + \frac{1}{2}\alpha_2(T)m^2 + \frac{1}{4}\alpha_4(T)m^4 + \dots \quad (\text{C.3.6})$$

e l'equazione di Eulero-Lagrange in assenza di campo magnetico si riduce a

$$[\alpha_2(T) + \alpha_4(T)m^2]m = 0, \quad (\text{C.3.7})$$

dove si ricordi che i coefficienti $\alpha_2(T)$ e $\alpha_4(T)$ sono caratteristici del sistema fisico che stiamo trattando. Noi, per ovvie ragioni, ci interessiamo a studiare il modello di Ising (1.1.14).

Se, brutalmente, nel modello reticolare (1.1.14) sostituiamo S_i per ogni $i = 1, \dots, N$ con

$$\eta \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i, \quad (\text{C.3.8})$$

allora l'energia del modello si scrive

$$E = J \sum_{\langle ij \rangle} \eta^2 - B \sum_{i=1}^N \eta. \quad (\text{C.3.9})$$

Questa approssimazione è un esempio di *teoria di campo medio*.

Per comodità, imponiamo condizioni al bordo periodiche, in modo tale da poter scrivere l'energia per sito come

$$\frac{E}{N} = \frac{q}{2} J \eta^2 - B \eta, \quad (\text{C.3.10})$$

dove ho chiamato q il numero di primi vicini a ogni spin.

Ora, in totale analogia con la (C.1.2), definiamo

$$\sum_{\{S_i\}_\eta} e^{-\beta E(\{S_i\})} \equiv e^{-\beta F(\eta)} \equiv e^{-\beta N f(\eta)}. \quad (\text{C.3.11})$$

In approssimazione di campo medio

$$e^{-\beta N f(\eta)} \approx \sum_{\{S_i\}_\eta} e^{-\beta E(\eta)} = \Omega(\eta) e^{-\beta E(\eta)}, \quad (\text{C.3.12})$$

dove $\Omega(\eta)$ è il numero totale di configurazioni di spin $\{S_i\}$ tali che la magnetizzazione sia η . Per calcolare $\Omega(\eta)$, è utile osservare preliminarmente che

$$\eta = \frac{N_\uparrow - N_\downarrow}{N} = \frac{2N_\uparrow - N}{N}, \quad (\text{C.3.13})$$

dove con N_\uparrow (N_\downarrow) ho chiamato il numero di spin positivi (negativi). Dalla (C.3.13) è evidente che $\eta \leftrightarrow N_\uparrow$, da cui segue che $\Omega(\eta)$ è uguale al numero di configurazioni che hanno esattamente $N_\uparrow(\eta)$ spin positivi, cioè

$$\Omega = \frac{N!}{N_\uparrow!(N - N_\uparrow)!}. \quad (\text{C.3.14})$$

Torniamo quindi alla (C.3.12), che riscriviamo così

$$f(\eta) = -\frac{1}{\beta N} [\log \Omega(\eta) - \beta E(\eta)], \quad (\text{C.3.15})$$

dove $\log \Omega(\eta)$ si semplifica facilmente utilizzando la formula di Stirling ($\log(N!) \simeq N \log N$ per $N \gg 1$). Quindi, in approssimazione di campo medio, si ha che

$$f(\eta) \simeq -B\eta + \frac{1}{2} J q \eta^2 - T \left(\log 2 - \frac{1}{2} (1 + \eta) \log(1 + \eta) - \frac{1}{2} (1 - \eta) \log(1 - \eta) \right) \quad (\text{C.3.16})$$

che, nel limite $|\eta| \ll 1$, diventa

$$f(\eta) \approx -T \log 2 - B\eta + \frac{1}{2}(T + Jq)\eta^2 + \frac{1}{12}T\eta^4 + \dots \quad (\text{C.3.17})$$

detta *energia libera di Landau*, la quale ha esattamente la stessa forma dell'energia libera di Ginzburg-Landau in approssimazione di punto sella (C.3.6). In altre parole, se scegliamo

$$f_0(T) = -T \log 2 \quad \alpha_2(T) = T + Jq \quad \alpha_4(T) = \frac{T}{3} \quad (\text{C.3.18})$$

nella (C.2.7), allora è evidente che la teoria di campo medio è il punto sella della teoria di Ginzburg-Landau. Quindi, in approssimazione di punto sella, la magnetizzazione di equilibrio m (nel regime $|m| \ll 1$) è quella che minimizza la (C.3.17).

Ora studiamo il diagramma di fase in approssimazione di campo medio.

C.4 Transizione di fase continua a $B = 0$

Incominciamo col considerare l'energia libera di Landau (C.3.17) in assenza di campo magnetico esterno

$$f(m) \approx -T \log 2 + \frac{1}{2}(T - T_c)m^2 + \frac{1}{12}Tm^4 + \dots, \quad (\text{C.4.1})$$

dove abbiamo definito la temperatura critica

$$T_c \equiv -Jq. \quad (\text{C.4.2})$$

Dalla Figura C.2 osserviamo che per $T > T_c$ la magnetizzazione di equilibrio (che si ricordi essere il valore che minimizza $f(m)$) si annulla, mentre quando $T < T_c$ essa è non nulla. Troncando la (C.4.1) all'ordine m^4 , si trova facilmente che la

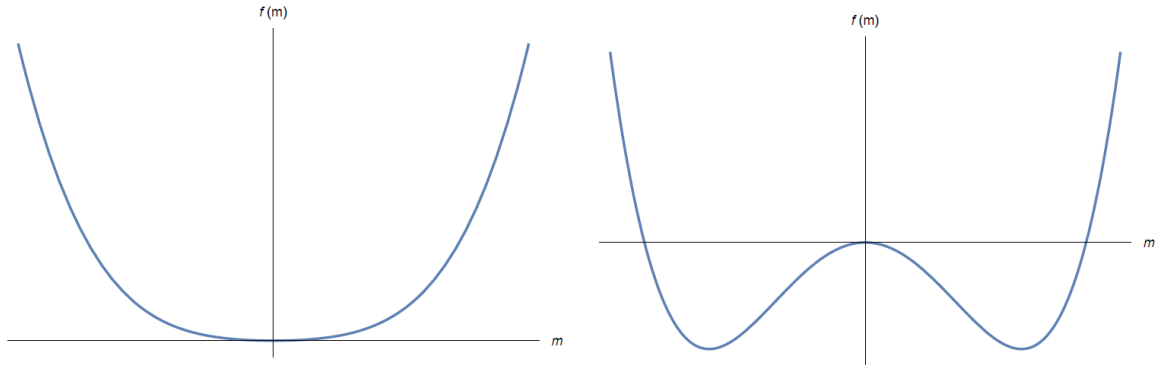


Figura C.2: Energia libera di Landau $f(m)$ in funzione della magnetizzazione m quando $T > T_c$ (a sinistra) e quando $T < T_c$ (a destra). I grafici sono tratti da [40] e in essi è stato omesso il pezzo $f_0(T) = -T \log 2$ il quale, essendo indipendente m , è irrilevante ai fini della nostra discussione.

magnetizzazione di equilibrio è data da

$$m_0(T) = \begin{cases} 0 & \text{se } T > T_c \\ \pm \sqrt{\frac{3(T_c - T)}{T}} & \text{se } T \rightarrow T_c^- \end{cases} \quad (\text{C.4.3})$$

dove siamo stati attenti al fatto che, per costruzione, la teoria di Landau funziona solo per $|m| \ll 1$.

L'andamento qualitativo della magnetizzazione di equilibrio in funzione della temperatura è riportato in Figura C.3.

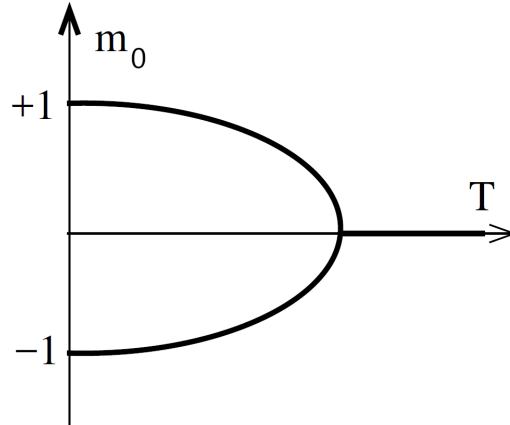


Figura C.3: Magnetizzazione di equilibrio $m_0(T)$ in funzione della temperatura T in assenza di campo magnetico esterno. La fonte del grafico è [40]. La teoria di campo medio dà predizioni solo per le regioni in cui $|m| \ll 1$.

All'equilibrio, si calcola facilmente che

$$f(T) = \begin{cases} -T \log 2 & \text{se } T > T_c \\ -T \log 2 - \frac{3}{4} \frac{(T_c - T)^2}{T} & \text{se } T \rightarrow T_c^- \end{cases} \quad (\text{C.4.4})$$

da cui segue che il calore specifico in approssimazione di campo medio vale

$$c = \frac{1}{N} \beta^2 \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \log Z \approx \frac{1}{N} \beta^2 \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} [-\beta N f(m_0(T))] = \begin{cases} 0 & \text{se } T > T_c \\ 3/2 & \text{se } T \rightarrow T_c^- \end{cases} \quad (\text{C.4.5})$$

Dato che in $T = T_c$ la magnetizzazione di equilibrio è continua a differenza del calore specifico che è discontinuo, abbiamo appena dimostrato che l'approssimazione di campo medio predice una transizione di fase continua a $T = T_c$.

C.5 Transizione di fase a $B \neq 0$

Studiamo ora ciò che accade in presenza di campo magnetico esterno, ossia quando l'energia libera di Landau è data da

$$f(m) \approx -T \log 2 - Bm + \frac{1}{2}(T - T_c)m^2 + \frac{1}{12}Tm^4 + \dots \quad (\text{C.5.1})$$

Per $B > 0$, l'andamento di $f(m)$ è quello riportato in Figura C.4.

Dalla Figura C.4 osserviamo che a basse temperature ($T \ll T_c$) l'energia libera esibisce due minimi, separati da una barriera di energia. Tra questi due minimi, solo quello globale è il ground state del sistema. L'altro minimo (detto *stato metastabile*) scompare al di sopra di una temperatura inferiore a quella critica dipendente dal

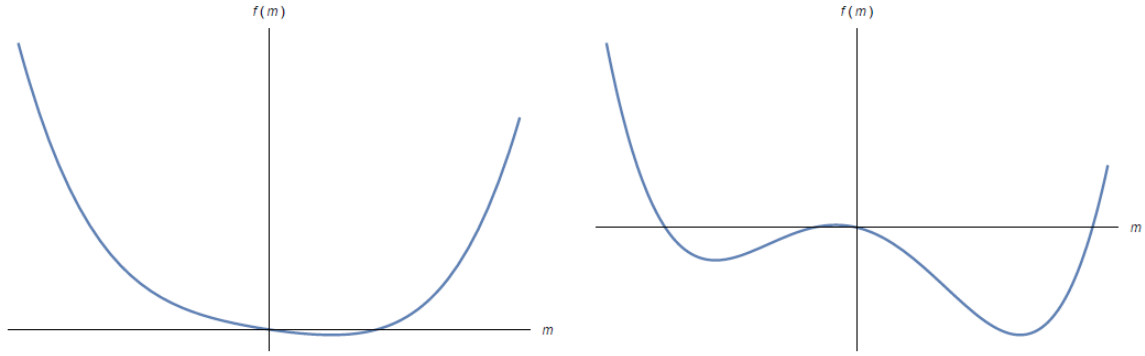


Figura C.4: Energia libera di Landau $f(m)$ in funzione della magnetizzazione m a $T \gg T_c$ (a sinistra) e a $T \ll T_c$ (a destra). Nei grafici, tratti da [40], abbiamo omesso il termine $f_0(T) = -T \log 2$ il quale, essendo indipendente m , sarà irrilevante ai fini della nostra discussione.

valore del campo magnetico esterno.

Ad alte temperature ($T \gg T_c$) la magnetizzazione tende ad annullarsi. In particolare, minimizzando l'energia libera (C.5.1) si calcola facilmente che

$$m_0 \sim \frac{B}{T} \quad \text{per} \quad T \gg T_c. \quad (\text{C.5.2})$$

A temperatura $T \rightarrow 0$ il sistema asintoterà allo stato $m_0 = +1$ ($m_0 = -1$) se $B > 0$ ($B < 0$), quindi in presenza di campo magnetico esterno non c'è ambiguità sulla configurazione ordinata di equilibrio a temperatura nulla, a differenza del caso $B = 0$ dove il sistema rompe spontaneamente la simmetria \mathbb{Z}_2 ($m \rightarrow -m$) dell'energia libera di Landau.

L'andamento qualitativo della magnetizzazione di equilibrio in funzione della temperatura è riportato in Figura C.5. Dal confronto tra le Figure C.3 e C.5 è chiaro

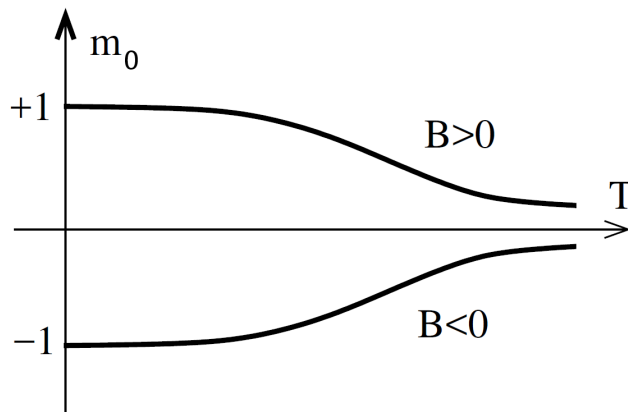


Figura C.5: Magnetizzazione di equilibrio $m_0(T)$ in funzione della temperatura T in presenza di campi magnetici esterni positivi o negativi (grafico tratto da [40]). Si ricordi che la teoria di campo medio dà predizioni solo per le regioni in cui $|m| \ll 1$.

che la presenza di un campo magnetico esterno $B \neq 0$ fa scomparire la transizione di fase continua a $T = T_c$ che si osserva a $B = 0$.

L'ultima cosa che ci resta per completare lo studio del diagramma di fase è commentare l'andamento della magnetizzazione di equilibrio a temperatura fissata e al variare del campo magnetico esterno. Mentre per $T \geq T_c$ si osserva che il minimo globale di $f(m)$ si comporta in maniera regolare al variare di B , quando $T < T_c$ esso presenta un comportamento discontinuo quando cambio il segno di B (Figura C.6). È dunque chiara la presenza di una transizione di fase del primo ordine quando, a

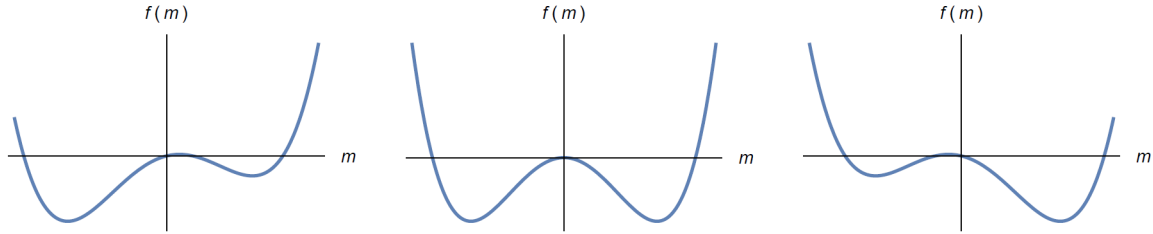


Figura C.6: Energia libera di Landau $f(m)$ in funzione della magnetizzazione m a $T < T_c$ e $B < 0$ (a sinistra), $B = 0$ (al centro) e $B > 0$ (a destra). I grafici sono tratti da [40].

temperatura $T < T_c$, il campo magnetico B cambia segno.

C.6 Punto critico

Nelle due sottosezioni precedenti abbiamo mostrato che, in campo medio, il diagramma di fase è quello in Figura C.7. In questa Sezione ci interessiamo al compor-

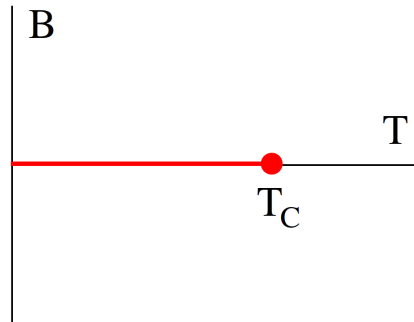


Figura C.7: Diagramma di fase del modello di Ising in approssimazione di campo medio, tratto da [40]. Quando si attraversa la linea rossa, il sistema va incontro a un transizione di fase del primo ordine. In $T = T_c$ si ha una transizione di fase continua.

tamento del sistema nell'intorno del punto critico $T = T_c$. Si calcola (si veda, ad esempio, [40]) che per $T \sim T_c$ si ha

$$c \sim c_{\pm} |T - T_c|^{-\alpha} \quad \text{con} \quad \alpha = 0 \quad (\text{C.6.1})$$

$$m \sim (T_c - T)^{\beta} \quad \text{con} \quad \beta = \frac{1}{2} \quad (\text{C.6.2})$$

$$\chi \sim \frac{1}{|T - T_c|^{\gamma}} \quad \text{con} \quad \gamma = 1 \quad (\text{C.6.3})$$

$$m \sim B^{1/\delta} \quad \text{con} \quad \delta = 3, \quad (\text{C.6.4})$$

dove χ è la suscettività magnetica (definita da $\chi \equiv \left. \frac{\partial m}{\partial B} \right|_T$). I coefficienti α , β , γ e δ sono alcuni degli esponenti critici, i quali, in generale, ci riassumono le predizioni della teoria riguardo al comportamento del sistema nell'intorno del punto critico.

C.7 Bontà dell'approssimazione di campo medio

Si noti che, per costruzione, l'approssimazione di campo medio è cieca alla dimensionalità del modello.

In generale, la correttezza di questa approssimazione dipende fortemente dalla dimensione d della teoria. Per la classe di universalità del modello di Ising si ha che:

- In $d = 1$ il campo medio fallisce completamente dato che, come già osservato nella Sezione 1.1.2, in $d = 1$ non ci sono punti critici.
- Confrontando con le soluzioni analitica in $d = 2$ e numerica in $d = 3$ (le quali sono in buon accordo con gli esperimenti) si può osservare che la struttura di base del diagramma di fase è corretta ma gli esponenti critici no. Il confronto di alcuni esponenti critici è riportato nella seguente tabella

	Campo Medio	$d = 2$	$d = 3$	Esperimenti
α	0(disc.)	0(log.)	0.1101	0.110-0.116
β	1/2	1/8	0.3264	0.316-0.327
γ	1	7/4	1.2371	1.23-1.25
δ	3	15	4.7898	4.6-4.9

dove con “0(disc.)” intendiamo una vera e propria discontinuità a salto mentre con “0(log.)” una divergenza logaritmica.

- In $d \geq 4$ si dimostra che la teoria di campo medio dà i risultati corretti [40].

In conclusione, in questa Sezione sulle transizioni, di fase ho mostrato alcuni aspetti salienti delle transizioni di fase, come il motivo qualitativo per cui possono emergere a causa della competizione tra energia e entropia, il loro apparire in modelli microscopici, la loro forma nelle teorie in cui sia stato effettuato *coarse graining* e, quindi, il motivo della loro universalità.

Appendice D

Dimostrazione Eq. (2.2.18)

In questa Appendice sono riportati i calcoli relativi alla scrittura fermionica della Hamiltoniana di spin in Eq. 2.2.17:

$$\begin{aligned}\sigma_j^+ \sigma_{j+1}^- &= \bigotimes_{l=1}^{j-1} (\mathbb{1} - 2\psi_l^\dagger \psi_l) \psi_j \bigotimes_{m=1}^j (\mathbb{1} - 2\psi_m^\dagger \psi_m) \psi_{j+1}^\dagger = \psi_j \bigotimes_{l=1}^{j-1} \sigma_l^z \bigotimes_{m=1}^j \sigma_m^z \psi_{j+1}^\dagger = \\ &= \psi_j (\mathbb{1} - 2\psi_j^\dagger \psi_j) \psi_{j+1}^\dagger = \psi_{j+1}^\dagger \psi_j\end{aligned}\quad (\text{D.0.1})$$

$$\begin{aligned}\sigma_j^+ \sigma_{j+1}^+ &= \bigotimes_{l=1}^{j-1} (\mathbb{1} - 2\psi_l^\dagger \psi_l) \psi_j \bigotimes_{m=1}^j (\mathbb{1} - 2\psi_m^\dagger \psi_m) \psi_{j+1} = \psi_j \bigotimes_{l=1}^{j-1} \sigma_l^z \bigotimes_{m=1}^j \sigma_m^z \psi_{j+1} = \\ &= \psi_j (\mathbb{1} - 2\psi_j^\dagger \psi_j) \psi_{j+1} = \psi_{j+1} \psi_j\end{aligned}\quad (\text{D.0.2})$$

$$\sigma_N^+ \sigma_{N+1}^- = \sigma_N^+ \sigma_1^- = \bigotimes_{l=1}^{N-1} (\mathbb{1} - 2\psi_l^\dagger \psi_l) \psi_N \psi_1^\dagger = \Pi^z (\mathbb{1} - 2\psi_N^\dagger \psi_N) \psi_N \psi_1^\dagger = -\Pi^z \psi_1^\dagger \psi_N\quad (\text{D.0.3})$$

$$\sigma_N^+ \sigma_{N+1}^+ = \sigma_N^+ \sigma_1^+ = \bigotimes_{l=1}^{N-1} (\mathbb{1} - 2\psi_l^\dagger \psi_l) \psi_N \psi_1 = \Pi^z (\mathbb{1} - 2\psi_N^\dagger \psi_N) \psi_N \psi_1 = -\Pi^z \psi_1 \psi_N.\quad (\text{D.0.4})$$

Appendice E

Funzione di partizione del modello XY

In questa Appendice, calcoleremo la funzione di partizione del modello XY, dalla quale ricaveremo l'energia libera, a partire dalla quale si possono calcolare tutte le quantità termodinamiche. Dalla forma esplicita che verrà ricavata, sarà chiaro che il modello non presenta transizioni di fase termiche, in accordo con il teorema di Mermin-Wagner.

La funzione di partizione per $0 < h < 1$ è

$$\begin{aligned}
 Z &= \sum_i e^{-\beta E_i} = e^{-\beta E_+^0} + e^{-\beta E_+'} + e^{-\beta E_+''} + \dots + e^{-\beta E_-^0} + e^{-\beta E_-'} + e^{-\beta E_-''} + \dots \\
 &= e^{-\beta E_+^0} \left[1 + e^{-\beta(E_+' - E_+^0)} + e^{-\beta(E_+'' - E_+^0)} + \dots \right] + e^{-\beta E_-^0} \left[1 + e^{-\beta(E_-' - E_-^0)} + e^{-\beta(E_-'' - E_-^0)} + \dots \right],
 \end{aligned} \tag{E.0.1}$$

dove le differenze di energia ($E_{\pm}^j - E_{\pm}^0$) tra gli stati eccitati e lo stato fondamentale del rispettivo settore di parità sono la somma di un numero pari di eccitazioni (ognuna delle quali è del tipo $-J\epsilon(q)$). Questa osservazione ci permette di scrivere:

$$\begin{aligned}
 Z &= \frac{1}{2} e^{-\beta E_+^0} \left[\prod_{q \in \Gamma^+} (1 + e^{\beta J \epsilon(q)}) + \prod_{q \in \Gamma^+} (1 - e^{\beta J \epsilon(q)}) \right] + \\
 &\quad + \frac{1}{2} e^{-\beta E_-^0} \left[\prod_{q \in \Gamma^-} (1 + e^{\beta J \epsilon(q)}) + \prod_{q \in \Gamma^-} (1 - e^{\beta J \epsilon(q)}) \right].
 \end{aligned}$$

Qui osserviamo che

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{2} e^{-\beta E_{\pm}^0} \prod_{q \in \Gamma^{\pm}} (1 + e^{\beta J \epsilon(q)}) &= \frac{1}{2} e^{-\beta E_{\pm}^0} \prod_{q \in \Gamma^{\pm}} \cosh \left[\frac{\beta}{2} J \epsilon(q) \right] \prod_{q \in \Gamma^{\pm}} e^{\beta \frac{J}{2} \epsilon(q)} \cdot 2^N \\
 &= 2^{N-1} \prod_{q \in \Gamma^{\pm}} \cosh \left[\frac{\beta}{2} J \epsilon(q) \right] \\
 \frac{1}{2} e^{-\beta E_{\pm}^0} \prod_{q \in \Gamma^{\pm}} (1 - e^{\beta J \epsilon(q)}) &= 2^{N-1} \prod_{q \in \Gamma^{\pm}} \sinh \left[\frac{\beta}{2} J \epsilon(q) \right],
 \end{aligned}$$

dove abbiamo utilizzato le identità

$$\cosh x = \frac{1 + e^{-2x}}{2e^{-x}} \quad \sinh x = \frac{1 - e^{-2x}}{2e^{-x}}. \quad (\text{E.0.2})$$

Si ha quindi

$$\begin{aligned} Z = & 2^{N-1} \left\{ \prod_{q \in \Gamma^+} \cosh \left[\frac{\beta}{2} J \epsilon(q) \right] + \prod_{q \in \Gamma^+} \sinh \left[\frac{\beta}{2} J \epsilon(q) \right] \right\} + \\ & + 2^{N-1} \left\{ \prod_{q \in \Gamma^-} \cosh \left[\frac{\beta}{2} J \epsilon(q) \right] + \prod_{q \in \Gamma^-} \sinh \left[\frac{\beta}{2} J \epsilon(q) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (\text{E.0.3})$$

Nel limite termodinamico

$$Z = 2^N \prod_{q \in \Gamma^-} \cosh \left[\frac{\beta}{2} J \epsilon(q) \right] \left\{ 1 + \prod_{q \in \Gamma^-} \tanh \left[\frac{\beta}{2} J \epsilon(q) \right] \right\}. \quad (\text{E.0.4})$$

Ora che abbiamo la funzione di partizione, possiamo calcolare l'energia libera. Essendo interessati al limite termodinamico, porremo l'attenzione sull'energia libera per sito

$$\begin{aligned} f \equiv -\frac{1}{\beta N} \log Z = & -\frac{1}{\beta} \log 2 - \frac{1}{\beta N} \log \prod_{q \in \Gamma^-} \cosh \left[\frac{\beta}{2} J \epsilon(q) \right] + \\ & - \frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \underbrace{\left(\frac{1}{N} \log \left\{ 1 + \prod_{q \in \Gamma^-} \tanh \left[\frac{\beta}{2} J \epsilon(q) \right] \right\} \right)}_0, \end{aligned} \quad (\text{E.0.5})$$

dove

$$\frac{1}{N} \log \prod_{q \in \Gamma^-} \cosh \left[\frac{\beta}{2} J \epsilon(q) \right] = \frac{1}{N} \sum_{q \in \Gamma^-} \log \cosh \left[\frac{\beta}{2} J \epsilon(q) \right] = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \log \cosh \left[\frac{\beta}{2} J \epsilon(q) \right] dq.$$

In conclusione, l'energia libera per sito nel limite termodinamico nella fase $0 < h < 1$ è data da

$$f = -\frac{1}{\beta} \log 2 - \frac{1}{\pi\beta} \int_0^\pi \log \cosh \left[\frac{\beta}{2} J \epsilon(q) \right] dq. \quad (\text{E.0.6})$$

Ora ci interessiamo alla regione $h > 1$. Poiché, a differenza del $|GS^- \rangle$, il $|GS^+ \rangle$ in questa fase è lo stesso di $0 < h < 1$, la funzione di partizione differirà da quella appena calcolata solo per il secondo addendo di (E.0.1), dato da

$$\begin{aligned} e^{-\beta E_-^0} \left[1 + e^{-\beta(E'_- - E_-^0)} + \dots \right] &= e^{-\beta \frac{J}{2} \sum_{q \in \Gamma^-} \epsilon(q)} \left[1 + e^{-\beta(E'_- - E_-^0)} + e^{-\beta(E''_- - E_-^0)} + \dots \right] e^{\beta J \epsilon(0)} \\ &= \frac{1}{2} e^{-\beta \frac{J}{2} \sum_{q \in \Gamma^-} \epsilon(q)} \left[\prod_{q \in \Gamma^-} (1 + e^{\beta J \epsilon(q)}) - \prod_{q \in \Gamma^-} (1 - e^{\beta J \epsilon(q)}) \right] \\ &= 2^{N-1} \left\{ \prod_{q \in \Gamma^-} \cosh \left[\frac{\beta}{2} J \epsilon(q) \right] - \prod_{q \in \Gamma^-} \sinh \left[\frac{\beta}{2} J \epsilon(q) \right] \right\}, \end{aligned}$$

dove abbiamo fatto gli stessi passaggi del caso $0 < h < 1$.
 Quindi la funzione di partizione della catena XY per $h > 1$ è

$$\begin{aligned}
 Z = & 2^{N-1} \left\{ \prod_{q \in \Gamma^+} \cosh \left[\frac{\beta}{2} J \epsilon(q) \right] + \prod_{q \in \Gamma^+} \sinh \left[\frac{\beta}{2} J \epsilon(q) \right] \right\} + \\
 & + 2^{N-1} \left\{ \prod_{q \in \Gamma^-} \cosh \left[\frac{\beta}{2} J \epsilon(q) \right] - \prod_{q \in \Gamma^-} \sinh \left[\frac{\beta}{2} J \epsilon(q) \right] \right\}. \quad (\text{E.0.7})
 \end{aligned}$$

Nel limite termodinamico otteniamo

$$Z = 2^N \prod_{q \in \Gamma^-} \cosh \left[\frac{\beta}{2} J \epsilon(q) \right], \quad (\text{E.0.8})$$

da cui si ritrova l'energia libera per sito della regione $0 < h < 1$, data dalla (E.0.6).
 A temperatura finita non vi sono quindi transizioni di fase.

Appendice F

Calcolo dei correlatori a due spin nel modello XY ferromagnetico

In questa Appendice si ripercorrono i calcoli che portano da 2.3.47 alle espressioni per i valori asintotici dei correlatori. Il punto di partenza è la valutazione di

$$\langle GS | \sigma_l^\alpha \sigma_m^\alpha | GS \rangle = \frac{1}{2} (\langle GS^+ | \sigma_l^\alpha \sigma_m^\alpha | GS^+ \rangle + \langle GS^- | \sigma_l^\alpha \sigma_m^\alpha | GS^- \rangle), \quad (\text{F.0.1})$$

dove abbiamo utilizzato il fatto che l'operatore $\sigma_l^\alpha \sigma_m^\alpha$ conserva la z -parità, essendo scrivibile come

$$\sigma_l^x \sigma_m^x = (\sigma_l^+ + \sigma_l^-)(\sigma_m^+ + \sigma_m^-) \quad (\text{F.0.2})$$

$$\sigma_l^y \sigma_m^y = -(\sigma_l^+ + \sigma_l^-)(\sigma_m^+ + \sigma_m^-), \quad (\text{F.0.3})$$

coi σ_j^\pm definiti dalla (2.2.6).

Dal momento che si può mostrare che

$$\langle GS | \sigma_l^\alpha \sigma_m^\alpha | GS \rangle = \langle GS^+ | \sigma_l^\alpha \sigma_m^\alpha | GS^+ \rangle, \quad (\text{F.0.4})$$

calcoliamo ora, ad esempio, il correlatore a due spin lungo la direzione x

$$\rho_{lm}^x = \langle GS^+ | (\sigma_l^+ + \sigma_l^-)(\sigma_m^+ + \sigma_m^-) | GS^+ \rangle, \quad (\text{F.0.5})$$

dove, senza perdita di generalità assumeremo $m > l$.

Ricordando la trasformazione di Wigner-Jordan (2.2.13) si ha

$$\begin{aligned} \rho_{lm}^x &= \langle GS^+ | (\psi_l + \psi_l^\dagger) \bigotimes_{i=1}^{l-1} \sigma_i^z \bigotimes_{j=1}^{m-1} \sigma_j^z (\psi_m + \psi_m^\dagger) | GS^+ \rangle \\ &= \langle GS^+ | (\psi_l + \psi_l^\dagger) \bigotimes_{j=l}^{m-1} \sigma_j^z (\psi_m + \psi_m^\dagger) | GS^+ \rangle \\ &= \langle GS^+ | (\psi_l + \psi_l^\dagger) (\mathbb{1} - 2\psi_l^\dagger \psi_l) \bigotimes_{j=l+1}^{m-1} (\mathbb{1} - 2\psi_j^\dagger \psi_j) (\psi_m + \psi_m^\dagger) | GS^+ \rangle \\ &= \langle GS^+ | (\psi_l^\dagger - \psi_l) \bigotimes_{j=l+1}^{m-1} (\psi_j^\dagger + \psi_j) (\psi_j^\dagger - \psi_j) (\psi_m + \psi_m^\dagger) | GS^+ \rangle. \end{aligned} \quad (\text{F.0.6})$$

Qui definiamo

$$A_j \equiv \psi_j^\dagger + \psi_j, \quad (\text{F.0.7})$$

$$B_j \equiv i(\psi_j^\dagger - \psi_j). \quad (\text{F.0.8})$$

È facile verificare che

$$A_j^2 = B_j^2 = \mathbb{1} \quad (\text{F.0.9})$$

$$A_j^\dagger = A_j \quad B_j^\dagger = B_j \quad (\text{F.0.10})$$

$$\{A_i, A_j\} = \{B_i, B_j\} = \{A_i, B_j\} = 2\delta_{ij}\mathbb{1} \quad (\text{F.0.11})$$

cioè A_j e B_j sono fermioni di Majorana.

In termini degli operatori appena definiti, la funzione di correlazione si può scrivere come

$$\rho_{lm}^x = (-i)^{m-l} \langle GS^+ | B_l A_{l+1} B_{l+1} \dots A_{m-1} B_{m-1} A_m | GS^+ \rangle. \quad (\text{F.0.12})$$

Seguendo un procedimento del tutto analogo, si trova [15]:

$$\rho_{lm}^y = (-1)^{m-1} (-i)^{m-l} \langle GS^+ | A_l B_{l+1} A_{l+1} \dots B_{m-1} A_{m-1} B_m | GS^+ \rangle, \quad (\text{F.0.13})$$

$$\rho_{lm}^z = - \langle GS^+ | A_l B_l A_m B_m | GS^+ \rangle. \quad (\text{F.0.14})$$

Arrivati a questo punto, vorremmo calcolare questi valori di aspettazione utilizzando il teorema di Wick [42]. Per far ciò, è necessario calcolare preliminarmente i seguenti correlatori

$$\langle GS^+ | A_l A_m | GS^+ \rangle \quad \langle GS^+ | B_l B_m | GS^+ \rangle \quad \langle GS^+ | A_l B_m | GS^+ \rangle. \quad (\text{F.0.15})$$

Dalla definizione degli operatori A_j e B_j è evidente che per calcolare questi correlatori sono necessari i correlatori a due punti degli operatori fermionici di Wigner-Jordan:

$$\langle GS^+ | \psi_l \psi_m | GS^+ \rangle \quad \langle GS^+ | \psi_l \psi_m^\dagger | GS^+ \rangle \quad \langle GS^+ | \psi_l^\dagger \psi_m | GS^+ \rangle, \quad (\text{F.0.16})$$

il cui calcolo è facilitato se si conoscono già

$$\langle GS^+ | \tilde{\psi}_q^{(+)} \tilde{\psi}_k^{(+)} | GS^+ \rangle \quad \langle GS^+ | \tilde{\psi}_q^{(+)} \tilde{\psi}_k^{(+)\dagger} | GS^+ \rangle \quad \langle GS^+ | \tilde{\psi}_q^{(+)\dagger} \tilde{\psi}_k^{(+)} | GS^+ \rangle, \quad (\text{F.0.17})$$

che si calcolano a partire dai correlatori a due fermioni χ , dati da

$$\langle GS^+ | \chi_q^{(+)} \chi_k^{(+)\dagger} | GS^+ \rangle = \delta_{k,q} \quad \langle GS^+ | \chi_q^{(+)} \chi_k^{(+)} | GS^+ \rangle = \langle GS^+ | \chi_q^{(+)\dagger} \chi_k^{(+)} | GS^+ \rangle = 0. \quad (\text{F.0.18})$$

Ricordando la (2.2.42), si trova facilmente che

$$\begin{aligned} \langle GS^+ | \tilde{\psi}_q^{(+)\dagger} \tilde{\psi}_k^{(+)} | GS^+ \rangle &= \frac{1 - \cos(2\theta_q)}{2} \delta_{k,q} & \langle GS^+ | \tilde{\psi}_q^{(+)} \tilde{\psi}_k^{(+)\dagger} | GS^+ \rangle &= \frac{1 + \cos(2\theta_q)}{2} \delta_{k,q} \\ \langle GS^+ | \tilde{\psi}_q^{(+)} \tilde{\psi}_k^{(+)} | GS^+ \rangle &= -\frac{\sin(2\theta_q)}{2} \delta_{2\pi-k,q}, & & \end{aligned} \quad (\text{F.0.19})$$

per la cui espressione finale sono utili le seguenti identità che seguono da (2.2.47):

$$\sin \theta_{2\pi-k} = -\sin \theta_k \quad \cos \theta_{2\pi-k} = -\cos \theta_k. \quad (\text{F.0.20})$$

Dai correlatori appena trovati si calcolano facilmente (utilizzando la (2.2.28)) i correlatori a due fermioni di Wigner-Jordan, dati da

$$\langle GS^+ | \psi_j \psi_l | GS^+ \rangle = - \langle GS^+ | \psi_j^\dagger \psi_l^\dagger | GS^+ \rangle = - \frac{i}{N} \sum_{q \in \Gamma^+} e^{iq(j-l)} \frac{\sin(2\theta_q)}{2} \quad (\text{F.0.21})$$

$$\langle GS^+ | \psi_j \psi_l^\dagger | GS^+ \rangle = - \langle GS^+ | \psi_j^\dagger \psi_l | GS^+ \rangle = \frac{1}{N} \sum_{q \in \Gamma^+} e^{iq(j-l)} \frac{1 + \cos(2\theta_q)}{2}. \quad (\text{F.0.22})$$

Qui, per mostrare la prima uguaglianza di entrambe le righe sono utili le (F.0.20) e il fatto che $\Gamma^+ = 2\pi - \Gamma^+$. Dai correlatori appena calcolati segue che

$$\langle GS^+ | A_l A_m | GS^+ \rangle = \langle GS^+ | B_l B_m | GS^+ \rangle = 0. \quad (\text{F.0.23})$$

L'unico correlatore rimasto da calcolare è il seguente

$$\begin{aligned} \langle GS^+ | A_m B_l | GS^+ \rangle &= i \langle GS^+ | (\psi_m^\dagger + \psi_m)(\psi_l^\dagger - \psi_l) | GS^+ \rangle \\ &= 2i (\langle GS^+ | \psi_m^\dagger \psi_l^\dagger | GS^+ \rangle + \langle GS^+ | \psi_m \psi_l | GS^+ \rangle) \\ &= - \frac{1}{N} \sum_{q \in \Gamma^+} e^{iq(m-l)} \sin(2\theta_q) + \underbrace{\frac{i}{N} \sum_{q \in \Gamma^+} e^{iq(m-l)} + \frac{i}{N} \sum_{q \in \Gamma^+} e^{iq(m-l)} \cos(2\theta_q)}_0 \\ &= \frac{i}{N} \sum_{q \in \Gamma^+} e^{iq(m-l)} e^{i2\theta_q}. \end{aligned} \quad (\text{F.0.24})$$

Denoteremo

$$G(m-l) \equiv -i \langle GS^+ | A_m B_l | GS^+ \rangle. \quad (\text{F.0.25})$$

Ora possiamo finalmente calcolare ρ_{lm}^α servendoci del teorema di Wick. Partiamo dalla funzione di correlazione più semplice, ossia

$$\begin{aligned} \rho_{lm}^z &= - \langle GS^+ | A_l B_l A_m B_m | GS^+ \rangle \\ &= - \langle GS^+ | A_l B_l | GS^+ \rangle \langle GS^+ | A_m B_m | GS^+ \rangle + \\ &\quad + \langle GS^+ | A_l B_m | GS^+ \rangle \langle GS^+ | A_m B_l | GS^+ \rangle \\ &= G^2(0) - G(l-m)G(m-l). \end{aligned} \quad (\text{F.0.26})$$

Ragionando analogamente, è facile convincersi che

$$\rho_{lm}^x = (-1)^n \det \begin{pmatrix} G(1) & G(0) & G(-1) & \dots & G(2-n) \\ G(2) & G(1) & G(0) & \dots & G(3-n) \\ G(3) & G(2) & G(1) & \dots & G(4-n) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ G(n) & G(n-1) & G(n-2) & \dots & G(1) \end{pmatrix} \quad (\text{F.0.27})$$

$$\rho_{lm}^y = (-1)^{m-1} \det \begin{pmatrix} G(-1) & G(0) & G(1) & \dots & G(n-2) \\ G(-2) & G(-1) & G(0) & \dots & G(n-3) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ G(-n) & G(1-n) & G(2-n) & \dots & G(-1) \end{pmatrix} \quad (\text{F.0.28})$$

dove $n \equiv m - l$. Abbiamo quindi trovato che le funzioni di correlazioni a due spin lungo le direzioni x e y sono date dal determinante di matrici di Toeplitz $n \times n$, ossia matrici in cui ogni diagonale discendente da sinistra a destra è costante. Per il fatto che compaiano nei modelli di Ising e XY e per la loro affascinante struttura matematica, le matrici di Toeplitz hanno catturato l'interesse di molti matematici e fisici matematici, i cui sforzi hanno portato ad un'impressionante comprensione delle proprietà di tali matrici. In particolare, una vasta letteratura di matematica è stata dedicata allo studio del comportamento asintotico dei loro determinanti, detti Determinanti di Toeplitz (per dettagli si veda Appendice A di [15]).

Appendice G

Proprietà degli operatori di traslazione e riflessione

In questa Appendice, dimostreremo alcune delle proprietà degli operatori di traslazione e riflessione, definiti nel Capitolo 3.

G.1 Dimostrazione Eq.(3.1.17)

Sia $|\psi\rangle$ un generico elemento della base (3.1.14). Esso è sicuramente del tipo

$$|\psi\rangle = |\sigma_1\rangle \otimes \dots \otimes |\sigma_j\rangle \otimes \dots \otimes |\sigma_N\rangle \quad \text{con} \quad \sigma_k \in \{\uparrow_k, \downarrow_k\}, \quad k = 1, \dots, N. \quad (\text{G.1.1})$$

Dalla definizione di T (3.1.15) segue che

$$T|\psi\rangle = |\sigma_2\rangle \otimes \dots \otimes |\sigma_j\rangle \otimes |\sigma_{j+1}\rangle \otimes \dots \otimes |\sigma_N\rangle \otimes |\sigma_1\rangle, \quad (\text{G.1.2})$$

dove al RHS gli spin σ_j e σ_{j+1} stanno, rispettivamente, sul $(j-1)$ -esimo sito e sul j -esimo.

Al fine di evitare confusione di notazione tra operatori e autovalori di spin, limitatamente a questa dimostrazione indicherò gli operatori di Pauli con $\hat{\sigma}_j^\alpha$.

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_j^\alpha T|\psi\rangle &= |\sigma_2\rangle \otimes \dots \otimes |\sigma_j\rangle \otimes \hat{\sigma}_j^\alpha |\sigma_{j+1}\rangle \otimes \dots \otimes |\sigma_N\rangle \otimes |\sigma_1\rangle \\ &= |\sigma_2\rangle \otimes \dots \otimes |\sigma_j\rangle \otimes \sigma_{j+1} |\sigma_{j+1}\rangle \otimes \dots \otimes |\sigma_N\rangle \otimes |\sigma_1\rangle. \end{aligned}$$

In conclusione

$$\begin{aligned} T^\dagger \hat{\sigma}_j^\alpha T|\psi\rangle &= |\sigma_1\rangle \otimes |\sigma_2\rangle \dots \otimes |\sigma_j\rangle \otimes \sigma_{j+1} |\sigma_{j+1}\rangle \otimes \dots \otimes |\sigma_N\rangle \\ &= |\sigma_1\rangle \otimes |\sigma_2\rangle \dots \otimes |\sigma_j\rangle \otimes \hat{\sigma}_{j+1}^\alpha |\sigma_{j+1}\rangle \otimes \dots \otimes |\sigma_N\rangle = \hat{\sigma}_{j+1}^\alpha |\psi\rangle \quad \forall |\psi\rangle, \end{aligned}$$

come volevasi dimostrare.

G.2 Dimostrazione Eq.(3.1.18)

$$\begin{aligned}
T^\dagger H T &= \sum_{j=1}^N [\cos \phi (T^\dagger \sigma_j^x T) (T^\dagger \sigma_{j+1}^x T) + \sin \phi (T^\dagger \sigma_j^y T) (T^\dagger \sigma_{j+1}^y T)] \\
&= \sum_{j=1}^N [\cos(\phi) \sigma_{j+1}^x \sigma_{j+2}^x + \sin(\phi) \sigma_{j+1}^y \sigma_{j+2}^y] \\
&= \cos(\phi) (\sigma_2^x \sigma_3^x + \sigma_3^x \sigma_4^x + \dots + \sigma_N^x \sigma_{N+1}^x + \sigma_1^x \sigma_2^x) + \sin(\phi) (x \leftrightarrow y) = H.
\end{aligned}$$

Qui, nella seconda e terza uguaglianza abbiamo utilizzato, rispettivamente, la (3.1.17) e la (3.1.2). La dimostrazione si conclude sfruttando l'unitarietà di T .

G.3 Traslazione degli stati fermionici

In questa Sezione enunciamo un teorema che ci permette di conoscere l'azione dell'operatore di traslazione su stati a m fermioni di Bogoliubov a del tipo $\prod_{k=1}^m a_{q_k}^\dagger |0^\pm\rangle$. Il teorema che si dimostra [36] è il seguente:

$$T \prod_{k=1}^m b_{q_k}^\dagger |0\rangle = e^{i \sum_{k=1}^m q_k} \prod_{k=1}^m b_{q_k}^\dagger |0\rangle, \quad (\text{G.3.1})$$

dove $q_k \in \Gamma^-$ (Γ^+) se m è dispari (pari).

Noi useremo il teorema appena enunciato nella seguente forma:

$$T \prod_{k=1}^m a_{q_k}^\dagger |0^\pm\rangle = e^{i \sum_{k=1}^m q_k} \prod_{k=1}^m a_{q_k}^\dagger |0^\pm\rangle, \quad (\text{G.3.2})$$

dove $q_k \in \Gamma^-$ (Γ^+) se m è dispari (pari).

Mostriamo come si procede per passare da (G.3.1) a (G.3.2).

Dimostrazione. Senza perdita di generalità mettiamoci nel caso in cui $q_k \neq 0, \pi$, dove

$$\prod_{k=1}^m a_{q_k}^\dagger |0^\pm\rangle = \prod_{k=1}^m (\cos \theta_{q_k} b_{q_k}^\dagger + i \sin \theta_{q_k} b_{2\pi-q_k}) \prod_{0 < q < \pi, q \in \Gamma^\pm} (\cos \theta_q - i \sin \theta_q b_q^\dagger b_{2\pi-q}^\dagger) |0\rangle. \quad (\text{G.3.3})$$

Per studiare questo stato conviene inizialmente mettersi nel caso più semplice non banale, ossia $m = 2$, e successivamente generalizzare a m generico.

Per $m = 2$ e $q \in \Gamma^+ \setminus \{\pi\}$, si ha che

$$\prod_{k=1}^2 a_{q_k}^\dagger \sim b_{q_1}^\dagger b_{q_2}^\dagger + b_{q_1}^\dagger b_{2\pi-q_2} + b_{2\pi-q_1} b_{q_2}^\dagger + b_{2\pi-q_1} b_{2\pi-q_2}$$

dove, una volta che si farà agire questo operatore su $|0^+\rangle$, gli operatori di distruzione $b_{2\pi-q_k}$ si contrarranno coi creatori corrispondenti presenti in $|0^+\rangle$. Si arriva quindi a (G.3.2) con $m = 2$. È banale estendere il ragionamento appena fatto al caso di m generico.

In questa Tesi ci limitiamo a utilizzare il teorema per $m = 1$, dove la (G.3.2) diventa

$$T a_q^\dagger |0^-\rangle = e^{iq} a_q^\dagger |0^-\rangle. \quad (\text{G.3.4})$$

G.4 Riflessione degli stati fermionici

In questa Sezione enunciamo un teorema che ci permette di conoscere l'azione dell'operatore di riflessione su stati a m fermioni di Bogoliubov a del tipo $\prod_{k=1}^m a_{q_k}^\dagger |0^\pm\rangle$. Il teorema che si dimostra è il seguente (la prova del teorema è simile a quella di (G.3.1) [36]):

$$M_N b_{q_1}^\dagger b_{q_2}^\dagger \dots b_{q_m}^\dagger |0\rangle = b_{-q_m}^\dagger b_{-q_{m-1}}^\dagger \dots b_{-q_1}^\dagger |0\rangle \quad (\text{G.4.1})$$

con $\{q_k\} \in \Gamma^-$ ($\{q_k\} \in \Gamma^+$) se m è dispari (pari)¹. La dimostrazione del teorema è simile a quella di (G.3.1).

Procedendo in maniera simile a come siamo passati dalla (G.3.1) alla (G.3.2), si può mostrare che il teorema (G.4.1) può essere riscritto nella seguente forma:

$$M_N a_{q_1}^\dagger a_{q_2}^\dagger \dots a_{q_m}^\dagger |0^\pm\rangle = a_{-q_m}^\dagger a_{-q_{m-1}}^\dagger \dots a_{-q_1}^\dagger |0^\pm\rangle \quad (\text{G.4.2})$$

dove $q_k \in \Gamma^-$ (Γ^+) se m è dispari (pari).

In questa Tesi ci limitiamo a utilizzare il teorema per $m = 1$, dove la (G.4.2) diventa

$$M_N a_q^\dagger |0^-\rangle = a_{2\pi-q}^\dagger |0^-\rangle \quad q \in \Gamma^-. \quad (\text{G.4.3})$$

¹Si può dimostrare che la (G.4.1) vale anche per un generico M_k , modulo un fattore di fase aggiuntivo al RHS. Per dettagli si veda [36].

Appendice H

Calcolo della magnetizzazione nelle regioni yFM, xAFM e AFM

In questa Appendice, riportiamo il calcolo esplicito di alcune delle componenti della magnetizzazione commentate nel Capitolo 3. Le notazioni adottate sono le stesse del Capitolo 3.

H.1 Magnetizzazione ferromagnetica mesoscopica: dimostrazione

In questa Sezione dell'Appendice calcoleremo esplicitamente il valore della componente x della magnetizzazione sul generico sito j della catena quando il sistema si trova nello stato fondamentale delle regioni yFM e xAFM

$$m_x(j) \equiv \langle GS | \sigma_j^x | GS \rangle. \quad (\text{H.1.1})$$

Nelle Sezioni 3.4 e 3.4 abbiamo dimostrato che lo stato fondamentale nelle regioni di attuale interesse è dato dalla (3.4.2), pertanto il suo generico elemento è scrivibile così

$$|GS\rangle = [\cos \theta + \sin \theta e^{i\psi} \Pi^x] |GS^+\rangle \quad \theta \in [0, 2\pi), \psi \in \mathbb{R}. \quad (\text{H.1.2})$$

Di conseguenza, $m_x(j)$ è data da

$$\begin{aligned} m_x(j) &= \cos^2 \theta \langle GS^+ | \sigma_j^x | GS^+ \rangle + \sin^2 \theta \langle GS^+ | \Pi^x \sigma_j^x \Pi^x | GS^+ \rangle + \\ &\quad + \frac{1}{2} \sin(2\theta) [e^{i\psi} \langle GS^+ | \sigma_j^x \Pi^x | GS^+ \rangle + e^{-i\psi} \langle GS^+ | \Pi^x \sigma_j^x | GS^+ \rangle] \\ &= \sin(2\theta) \cos \psi \langle GS^+ | \tilde{\Pi}_j^x | GS^+ \rangle, \end{aligned} \quad (\text{H.1.3})$$

dove ho definito

$$\tilde{\Pi}_j^\alpha \equiv \bigotimes_{l=1, l \neq j}^N \sigma_l^\alpha \quad (\text{H.1.4})$$

e dove, nel passaggio dalla seconda alla terza uguaglianza, ho osservato che i primi due addendi sono nulli perché σ_j^x cambia segno alla z -parità dello stato su cui agisce.

Quindi, per determinare $m_x(j)$ è sufficiente calcolare $\langle GS^+ | \tilde{\Pi}_j^x | GS^+ \rangle$. Utilizzando la (3.1.17), osserviamo che

$$T^\dagger \tilde{\Pi}_{j-1}^x T = \tilde{\Pi}_j^x, \quad (\text{H.1.5})$$

da cui

$$\tilde{\Pi}_j^x = (T^{j-1})^\dagger \tilde{\Pi}_1^x T^{j-1}. \quad (\text{H.1.6})$$

Quindi

$$\langle GS^+ | \tilde{\Pi}_j^x | GS^+ \rangle = \langle GS^+ | (T^\dagger)^{j-1} \tilde{\Pi}_1^x T^{j-1} | GS^+ \rangle = \langle GS^+ | \tilde{\Pi}_1^x | GS^+ \rangle, \quad (\text{H.1.7})$$

dove, nell'ultima uguaglianza, ho osservato che

$$T | GS^+ \rangle = T | 0^+ \rangle = | 0^+ \rangle = | GS^+ \rangle. \quad (\text{H.1.8})$$

Si noti che la (H.1.7) implica che la magnetizzazione $m_x(j)$ è indipendente dal sito j , ossia è ferromagnetica e costante!

Ora resta da calcolare $\langle GS^+ | \tilde{\Pi}_1^x | GS^+ \rangle$. Utilizzando la (2.2.13), le (F.0.7) e (F.0.8) possono esser riscritte così:

$$A_j = \left(\bigotimes_{l=1}^{j-1} \sigma_l^z \right) \sigma_j^x \quad B_j = \left(\bigotimes_{l=1}^{j-1} \sigma_l^z \right) \sigma_j^y \quad j = 1, \dots, N \quad (\text{H.1.9})$$

da cui osserviamo che

$$B_j A_{j+1} = \sigma_j^y \sigma_j^z \sigma_{j+1}^x = i \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x \quad j = 1, \dots, N-1. \quad (\text{H.1.10})$$

Possiamo quindi scrivere

$$\langle GS^+ | \tilde{\Pi}_1^x | GS^+ \rangle = (-i)^{\frac{N-1}{2}} \langle GS^+ | B_2 A_3 B_4 \dots B_{N-1} A_N | GS^+ \rangle, \quad (\text{H.1.11})$$

che calcoleremo servendoci del teorema di Wick.

Si osservi che il valor medio al RHS di (H.1.11) è estremamente simile a quelli incontrati nella Sezione 2.3.4 per il calcolo delle funzioni di correlazione a due spin. Ragionando in maniera del tutto analoga a quanto fatto in quella Sezione, si calcola che

$$\langle GS^\pm | A_{j+r} A_j | GS^\pm \rangle = \langle GS^\pm | B_{j+r} B_j | GS^\pm \rangle = \delta_{r,0} \quad (\text{H.1.12})$$

$$\langle GS^\pm | A_{j+r} B_j | GS^\pm \rangle = \frac{i}{N} \sum_{q \in \Gamma^\pm} e^{i2\theta_q} e^{-iqr} + \frac{2i}{N} f^\pm(r), \quad (\text{H.1.13})$$

dove

$$f^\pm(r) = 0 \quad \text{in yFM} \quad (\text{H.1.14})$$

$$f^+(r) = (-1)^r \quad f^-(r) = -1 \quad \text{in xAFM}. \quad (\text{H.1.15})$$

Applicando il teorema di Wick, si arriva a

$$\langle GS^+ | \tilde{\Pi}_1^x | GS^+ \rangle = (-1)^{\frac{N-1}{2}} \det \rho_x \quad (\text{H.1.16})$$

con

$$\rho_{xx} = \begin{pmatrix} G(1) & G(-1) & G(-3) & \dots & G(4-N) \\ G(3) & G(1) & G(-1) & \dots & G(6-N) \\ G(5) & G(3) & G(1) & \dots & G(8-N) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ G(N-2) & G(N-4) & G(N-6) & \dots & G(1) \end{pmatrix}, \quad (\text{H.1.17})$$

dove abbiamo definito

$$G(r) \equiv -i \langle GS^\pm | A_{j+r} B_j | GS^\pm \rangle. \quad (\text{H.1.18})$$

Osserviamo che ρ_{xx} è una matrice di Toeplitz $\frac{N-1}{2} \times \frac{N-1}{2}$.

Arrivati a questo punto, utilizzando i teoremi relativi al comportamento asintotico dei Determinanti di Toeplitz [15], siamo in grado di calcolare m_x nel limite termodinamico. Si trova che [35]

$$\langle GS^+ | \tilde{\Pi}_1^x | GS^+ \rangle \stackrel{N \gg 1}{\simeq} \begin{cases} \frac{\cot \frac{N-1}{2} \phi}{(1 - \cot^2 \phi)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\pi(N-1)/2}} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0 & \text{in yFM} \\ (-1)^{\frac{N-1}{2}} \frac{1}{N} (1 - \tan^2 \phi)^{\frac{1}{4}} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0 & \text{in xAFM.} \end{cases} \quad (\text{H.1.19})$$

H.2 Calcolo della funzione di correlazione e della magnetizzazione lungo z nella regione xAFM

Incominciamo col calcolare la funzione di correlazione

$$C_{zz} \equiv \langle GS^+ | \sigma_j^z \sigma_{j+r}^z | GS^+ \rangle. \quad (\text{H.2.1})$$

Osserviamo subito che, dalla (H.1.9), si ha

$$A_j B_j = \sigma_j^x \sigma_j^y = i \sigma_j^z. \quad (\text{H.2.2})$$

Utilizzando quest'ultima identità e, successivamente, il teorema di Wick:

$$C_{zz} = - \langle GS^+ | A_j B_j A_{j+r} B_{j+r} | GS^+ \rangle \quad (\text{H.2.3})$$

$$\begin{aligned} &= - \langle GS^+ | A_j B_j | GS^+ \rangle \langle GS^+ | A_{j+r} B_{j+r} | GS^+ \rangle + \\ &\quad - \langle GS^+ | B_j A_{j+r} | GS^+ \rangle \langle GS^+ | A_j B_{j+r} | GS^+ \rangle \\ &= G^2(0) - G(r)G(-r) = \det \rho_{zz}, \end{aligned} \quad (\text{H.2.4})$$

dove

$$\rho_{zz} \equiv \begin{pmatrix} G(0) & G(-r) \\ G(r) & G(0) \end{pmatrix}. \quad (\text{H.2.5})$$

Dalla (H.1.18), nella regione xAFM si ha che

$$G(r) = \frac{2}{N} (-1)^r + \frac{1}{N} \sum_{q \in \Gamma^\pm} \frac{\cos \phi + e^{-i2q} \sin \phi}{|\cos \phi + e^{-i2q} \sin \phi|} e^{-iq(r-1)} \quad (\text{H.2.6})$$

$$\stackrel{N \gg 1}{\approx} \frac{2}{N} (-1)^r + \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{\cos \phi + e^{-i2q} \sin \phi}{|\cos \phi + e^{-i2q} \sin \phi|} e^{-iq(r-1)} dq. \quad (\text{H.2.7})$$

La difficoltà è solo tecnica e consiste nel calcolare gli integrali del tipo (H.2.7). Nella regione xAFM per $N \gg 1$ si trova che¹

$$G(r) = \frac{2}{N}(-1)^r \quad \text{per } r \text{ pari} \quad (\text{H.2.8})$$

$$G(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\simeq} \frac{2}{N}(-1)^r + \sqrt{2(1 - \tan^2 \phi)} \frac{(-\tan \phi)^{\frac{r-1}{2}}}{\sqrt{\pi r}} \quad \text{per } r \text{ dispari} \quad (\text{H.2.9})$$

$$G(-r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\simeq} \frac{2}{N}(-1)^r - \sqrt{\frac{2}{1 - \tan^2 \phi}} \frac{(-\tan \phi)^{\frac{r+1}{2}}}{\sqrt{\pi r^3}} \quad \text{per } r \text{ dispari.} \quad (\text{H.2.10})$$

Questi risultati ci permettono di concludere che

$$C_{zz}(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\simeq} \begin{cases} 0 & \text{per } r \text{ pari} \\ -\frac{2}{\pi} \frac{\tan^r \phi}{r^2} + 2^{\frac{3}{2}} \sqrt{1 - \tan^2 \phi} \frac{(-\tan \phi)^{\frac{r-1}{2}}}{N\sqrt{\pi r}} + \dots & \text{per } r \text{ dispari} \end{cases} \quad (\text{H.2.11})$$

e

$$\langle GS^+ | \sigma_j^z | GS^+ \rangle = -i \langle GS^+ | A_j B_j | GS^+ \rangle = G(0) = \frac{2}{N}. \quad (\text{H.2.12})$$

Per la regione yFM il ragionamento da fare è analogo e anche in quel caso si trova che

$$m_z(j) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0. \quad (\text{H.2.13})$$

H.3 Magnetizzazione nella regione AFM: dimostrazione

In questa Sezione dell'Appendice calcoleremo esplicitamente la dipendenza dal sito j delle magnetizzazioni lungo le direzioni x e y

$$m_\gamma \equiv \langle \tilde{g} | \sigma_j^\alpha | \tilde{g} \rangle \quad \gamma = x, y \quad (\text{H.3.1})$$

dove, come già motivato nella Sezione 3.5.2,

$$|\tilde{g}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|p\rangle + e^{i\theta} \Pi^x |2\pi - p\rangle) \quad \theta \in \mathbb{R}. \quad (\text{H.3.2})$$

Nella Sezione 3.5.2 abbiamo già dimostrato che

$$m_\gamma(j) = \text{Re} \{ e^{i\theta} \langle p | \sigma_j^\gamma \Pi^x | 2\pi - p \rangle \}, \quad (\text{H.3.3})$$

da cui osserviamo che per avere le magnetizzazioni desiderate è sufficiente calcolare $\langle p | \sigma_j^\gamma \Pi^x | 2\pi - p \rangle$. Per ciò ci serviremo dell'identità

$$(T^\dagger)^k \sigma_N^\alpha T^k = \sigma_k^\alpha \quad \alpha = x, y, z, \quad (\text{H.3.4})$$

¹ Può essere utile consultare [34],[43] e [44] per il calcolo di tali integrali.

che si dimostra partendo dalla (3.1.17) con $j = N$ e moltiplicandone ambo i membri a destra per T^{k-1} e a sinistra per $(T^\dagger)^{k-1}$.

Utilizzando l'identità appena enunciata,

$$\begin{aligned} \langle p | \sigma_j^\gamma \Pi^x | 2\pi - p \rangle &= \langle p | (T^\dagger)^j \sigma_N^\gamma T^j \Pi^x | 2\pi - p \rangle \\ &= (e^{-ijp} \langle p |) \sigma_N^\gamma \Pi^x (e^{-ijp} | 2\pi - p \rangle) \\ &= e^{-i2jp} \langle p | \sigma_N^\gamma \Pi^x | 2\pi - p \rangle , \end{aligned} \quad (\text{H.3.5})$$

dove nella seconda uguaglianza ho usato la (G.3.4) e la (3.1.19). Dunque:

$$m_\gamma(j) = \text{Re}\{e^{i(\theta-2jp)} \langle p | \sigma_N^\gamma \Pi^x | 2\pi - p \rangle\} \quad \gamma = x, y. \quad (\text{H.3.6})$$

Questa forma è comoda dato che $\langle p | \sigma_N^x \Pi^x | 2\pi - p \rangle$ è reale mentre $\langle p | \sigma_N^y \Pi^x | 2\pi - p \rangle$ è immaginario puro.

Dimostrazione. Utilizzando le (3.1.25), (G.4.2) e (3.1.22), si ha

$$\langle p | \sigma_N^\alpha \Pi^x | 2\pi - p \rangle = \langle 2\pi - p | M_N \sigma_N^\alpha \Pi^x M_N | p \rangle = \langle 2\pi - p | M_N \sigma_N^\alpha M_N \Pi^x | p \rangle \quad \alpha = x, y.$$

Osserviamo che

$$\begin{cases} [M_N, \sigma_N^\alpha] = 0 \\ M_N^{-1} = M_N \end{cases} \implies M_N \sigma_N^\alpha M_N = \sigma_N^\alpha \quad \alpha = x, y, z. \quad (\text{H.3.7})$$

Per $\gamma = x$

$$\langle p | \sigma_N^x \Pi^x | 2\pi - p \rangle = \langle 2\pi - p | \sigma_N^x \Pi^x | p \rangle = \langle 2\pi - p | \Pi^x \sigma_N^x | p \rangle = \langle p | \sigma_N^x \Pi^x | 2\pi - p \rangle^* ,$$

come volevasi dimostrare.

Per $\gamma = y$

$$\langle p | \sigma_N^y \Pi^x | 2\pi - p \rangle = \langle 2\pi - p | \sigma_N^y \Pi^x | p \rangle = -\langle 2\pi - p | \Pi^x \sigma_N^y | p \rangle = -\langle p | \sigma_N^y \Pi^x | 2\pi - p \rangle^* ,$$

come volevasi dimostrare.

In realtà, il fatto che $\langle p | \sigma_N^y \Pi^x | 2\pi - p \rangle$ sia immaginario puro si può mostrare essere una conseguenza del fatto che $\langle p | \sigma_N^x \Pi^x | 2\pi - p \rangle$ è reale. Preliminarmente, osserviamo che $\sigma_j^y \sigma_j^z = i \sigma_j^x$ implica la seguente identità:

$$\Pi^x = (-i)^N \Pi^y \Pi^z , \quad (\text{H.3.8})$$

che utilizziamo subito

$$\langle p | \sigma_N^y \Pi^x | 2\pi - p \rangle = (-i)^N \langle p | \sigma_N^y \Pi^y \Pi^z | 2\pi - p \rangle = -(-i)^N \langle p | \sigma_N^y \Pi^y | 2\pi - p \rangle , \quad (\text{H.3.9})$$

dove nella seconda uguaglianza si è utilizzato il fatto che $\Pi^z | p \rangle = -| p \rangle$. Osservando che $\langle p | \sigma_N^y \Pi^y | 2\pi - p \rangle$ è reale per lo stesso identico argomento per cui anche $\langle p | \sigma_N^x \Pi^x | 2\pi - p \rangle$ lo è e che N dispari implica $-(-i)^N \in \{\pm i\}$, concludiamo che $\langle p | \sigma_N^y \Pi^x | 2\pi - p \rangle$ è immaginario puro, come volevasi dimostrare.

Quindi

$$m_x(j) = \cos(2jp - \theta) \langle p | \sigma_N^x \Pi^x | 2\pi - p \rangle , \quad (\text{H.3.10})$$

mentre, utilizzando la (H.3.9),

$$\begin{aligned} m_y(j) &= i \sin(\theta - 2jp) (-1) (-i)^N \langle p | \sigma_N^y \Pi^y | 2\pi - p \rangle = \\ &= -\sin(2jp - \theta) i^{N+1} \langle p | \sigma_N^y \Pi^y | 2\pi - p \rangle \\ &= -\sin(2jp - \theta) \sin\left(\pi + N\frac{\pi}{2}\right) \langle p | \sigma_N^y \Pi^y | 2\pi - p \rangle = \\ &= \cos\left(2jp - \theta + \pi + N\frac{\pi}{2}\right) \langle p | \sigma_N^y \Pi^y | 2\pi - p \rangle , \end{aligned} \quad (\text{H.3.11})$$

dove, ricordando la (3.4.11),

$$\begin{aligned} \cos(2jp - \theta) &= \cos\left(j\pi + (-1)^{\frac{N+1}{2}} j \frac{\pi}{N} - \theta\right) \\ &= (-1)^j \cos\left((-1)^{\frac{N+1}{2}} j \frac{\pi}{N} - \theta\right) \\ &= (-1)^j \cos\left[(-1)^{\frac{N+1}{2}} \left(j \frac{\pi}{N} + (-1)^{\frac{N-1}{2}} \theta\right)\right] \\ &= (-1)^j \cos\left[\pi \frac{j}{N} + (-1)^{\frac{N-1}{2}} \theta\right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \cos\left(2jp - \theta + N\frac{\pi}{2} + \pi\right) &= (-1)^j \cos\left((-1)^{\frac{N+1}{2}} j \frac{\pi}{N} - \theta + N\frac{\pi}{2} + \pi\right) \\ &= (-1)^j \cos\left[\pi \frac{j}{N} + (-1)^{\frac{N-1}{2}} \theta + (-1)^{\frac{N+1}{2}} \left(N\frac{\pi}{2} + \pi\right)\right] \\ &= (-1)^j \cos\left[\pi \frac{j}{N} + (-1)^{\frac{N-1}{2}} \theta + \frac{\pi}{2}\right] . \end{aligned}$$

Quindi concludiamo che

$$m_x(j) = (-1)^j \cos\left[\pi \frac{j}{N} + (-1)^{\frac{N-1}{2}} \theta\right] \langle p | \sigma_N^x \Pi^x | 2\pi - p \rangle \quad (\text{H.3.12})$$

$$m_y(j) = (-1)^j \cos\left[\pi \frac{j}{N} + (-1)^{\frac{N-1}{2}} \theta + \frac{\pi}{2}\right] \langle p | \sigma_N^y \Pi^y | 2\pi - p \rangle . \quad (\text{H.3.13})$$

Per concludere il calcolo, dobbiamo determinare le ampiezze

$$f_\gamma \equiv \langle p | \sigma_N^\gamma \Pi^\gamma | 2\pi - p \rangle . \quad (\text{H.3.14})$$

Per far ciò iniziamo col definire:

$$|u_1, u_2\rangle \equiv u_1 |p\rangle + u_2 |2\pi - p\rangle , \quad (\text{H.3.15})$$

dove $u_1, u_2 \in \mathbb{C}$ tali che $|u_1|^2 + |u_2|^2 = 1$. In termini del ket appena definito, si ha che:

$$\langle p | \sigma_N^\gamma \Pi^\gamma | 2\pi - p \rangle = \frac{1}{2} \left(\left\langle \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \middle| \sigma_N^\gamma \Pi^\gamma \middle| \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle - \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} \middle| \sigma_N^\gamma \Pi^\gamma \middle| \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle \right) . \quad (\text{H.3.16})$$

Dimostrazione. Partiamo da

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \sigma_N^\gamma \Pi^x \right| \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle &= \frac{1}{2} (\langle p | \sigma_N^\gamma \Pi^x | p \rangle + \langle p | \sigma_N^\gamma \Pi^x | 2\pi - p \rangle + \\ &\quad + \langle 2\pi - p | \sigma_N^\gamma \Pi^x | p \rangle + \langle 2\pi - p | \sigma_N^\gamma \Pi^x | 2\pi - p \rangle) \\ \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} \left| \sigma_N^\gamma \Pi^x \right| \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle &= \frac{1}{2} (\langle p | \sigma_N^\gamma \Pi^x | p \rangle - \langle p | \sigma_N^\gamma \Pi^x | 2\pi - p \rangle + \\ &\quad - \langle 2\pi - p | \sigma_N^\gamma \Pi^x | p \rangle + \langle 2\pi - p | \sigma_N^\gamma \Pi^x | 2\pi - p \rangle) \end{aligned}$$

e sottraiamo le due equazioni membro a membro:

$$\begin{aligned} &\left\langle \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \sigma_N^\gamma \Pi^x \right| \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle - \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} \left| \sigma_N^\gamma \Pi^x \right| \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle = \\ &= \langle p | \sigma_N^\gamma \Pi^x | 2\pi - p \rangle + \langle 2\pi - p | \sigma_N^\gamma \Pi^x | p \rangle, \end{aligned}$$

dove, utilizzando la (G.4.3) e la (3.1.22), si arriva a

$$\begin{aligned} \langle 2\pi - p | \sigma_N^\gamma \Pi^x | p \rangle &= \langle p | M_N \sigma_N^\gamma \Pi^x M_N | 2\pi - p \rangle = \langle p | M_N \sigma_N^\gamma M_N \Pi^x | 2\pi - p \rangle = \\ &= \langle p | \sigma_N^\gamma \Pi^x | 2\pi - p \rangle, \end{aligned} \quad (\text{H.3.17})$$

che conclude la dimostrazione.

Convieni, nell'ottica di utilizzare il teorema di Wick, scrivere $\sigma_N^\gamma \Pi^x$ in termini di operatori di Majorana A_j e B_j (definiti da (F.0.7) e (F.0.8)):

$$\sigma_N^x \Pi^x = (-1)^{\frac{N-1}{2}} \prod_{l=1}^{\frac{N-1}{2}} (-i A_{2l} B_{2l-1}) \quad \sigma_N^y \Pi^x = -i (-1)^{\frac{N-1}{2}} \prod_{l=1}^{\frac{N-1}{2}} (-i A_{2l} B_{2l-1}) (-i A_N B_N). \quad (\text{H.3.18})$$

Dimostrazione. Dalle (H.1.9) segue che

$$A_j B_{j-1} = \sigma_{j-1}^z \sigma_j^x \sigma_{j-1}^y = -\sigma_{j-1}^y \sigma_{j-1}^z \sigma_j^x = -i \sigma_{j-1}^x \sigma_j^x, \quad (\text{H.3.19})$$

da cui

$$\begin{aligned} \sigma_N^x \Pi^x &= (\sigma_1^x \sigma_2^x) (\sigma_3^x \sigma_4^x) \dots (\sigma_{N-2}^x \sigma_{N-1}^x) = (i A_2 B_1) (i A_4 B_3) \dots (i A_{N-1} B_{N-2}) = \\ &= \prod_{l=1}^{\frac{N-1}{2}} (i A_{2l} B_{2l-1}) = (-1)^{\frac{N-1}{2}} \prod_{l=1}^{\frac{N-1}{2}} (-i A_{2l} B_{2l-1}), \end{aligned}$$

come volevasi dimostrare.

Per $\sigma_N^y \Pi^x$ si procede in maniera analoga.

Ora, per calcolare $\langle \sigma_N^\gamma \Pi^x \rangle_{u_1, u_2} \equiv \langle u_1, u_2 | \sigma_N^\gamma \Pi^x | u_1, u_2 \rangle$ con $u_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}$ e $u_2 = \pm \frac{1}{\sqrt{2}}$ utilizzando il teorema di Wick, l'ultima cosa che resta da fare è calcolare i correlatori a due punti dei fermioni di Majorana A e B sullo stato $|u_1, u_2\rangle = \left| \frac{1}{\sqrt{2}}, \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \right\rangle$. Per far ciò, è conveniente scrivere $\sigma_N^\gamma \Pi^x$ in termini dei seguenti nuovi operatori:

$$\begin{aligned} \alpha_p &\equiv u_1 a_p^\dagger + u_2 a_{2\pi-p}^\dagger \\ \alpha_{2\pi-p} &\equiv u_2 a_p - u_1 a_{2\pi-p} \\ \alpha_q &\equiv a_q \quad \text{per } q \in \Gamma^-, q \neq p, 2\pi - p, \end{aligned} \quad (\text{H.3.20})$$

che abbiamo definito in modo tale che siano ancora fermioni e soddisfino la relazione

$$|u_1, u_2\rangle = \alpha_p |0^-\rangle, \quad (\text{H.3.21})$$

dalla quale segue che

$$\alpha_q |u_1, u_2\rangle = 0 \quad q \in \Gamma^-, \quad (\text{H.3.22})$$

ossia $|u_1, u_2\rangle$ è il vuoto dei fermioni α . Inoltre dalle equazioni (F.0.7),(F.0.8), (3.2.6), (3.2.7), (H.3.20) osserviamo che i fermioni di Majorana A e B possono essere scritti come una combinazione lineare dei fermioni α . Quindi, applicando il teorema di Wick [45], si calcola che

$$\langle A_j A_l \rangle_{u_1, u_2} = \langle B_j B_l \rangle_{u_1, u_2} = \delta_{jl} - \frac{2i}{N} (|u_1|^2 - |u_2|^2) \sin[p(j-l)] \quad (\text{H.3.23})$$

$$-i \langle A_j B_l \rangle_{u_1, u_2} = \frac{1}{N} \sum_{q \in \Gamma^-} e^{i2\theta_q} e^{-ip(j-l)} - \frac{2}{N} \cos[p(j-l) - 2\theta_p] - \frac{2}{N} (u_1^* u_2 e^{-ip(j+l)} + \text{c.c.}), \quad (\text{H.3.24})$$

dove θ_q è l'angolo di Bogoliubov (3.2.8). In particolare, noi siamo interessati ai casi in cui $u_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}$ e $u_2 = \pm \frac{1}{\sqrt{2}}$, per i quali osserviamo che si ha

$$\langle A_j A_l \rangle_{\frac{1}{\sqrt{2}}, \pm \frac{1}{\sqrt{2}}} = \langle B_j B_l \rangle_{\frac{1}{\sqrt{2}}, \pm \frac{1}{\sqrt{2}}} = 0 \quad (\text{H.3.25})$$

$$-i \langle A_j B_l \rangle_{\frac{1}{\sqrt{2}}, \pm \frac{1}{\sqrt{2}}} = \frac{1}{N} \sum_{q \in \Gamma^-} e^{i2\theta_q} e^{-ip(j-l)} - \frac{2}{N} \cos[p(j-l) - 2\theta_p] \mp \frac{2}{N} \cos[p(j+l)]. \quad (\text{H.3.26})$$

Applicando il teorema di Wick [42] e ragionando analogamente a quanto fatto nelle Sezioni precedenti, si arriva a

$$\langle \sigma_N^y \Pi^x \rangle_{\frac{1}{\sqrt{2}}, \pm \frac{1}{\sqrt{2}}} = -i(-1)^{\frac{N-1}{2}} \det C, \quad (\text{H.3.27})$$

dove C è la seguente matrice $\frac{N+1}{2} \times \frac{N+1}{2}$

$$C = \begin{pmatrix} F(2, 1) & F(2, 3) & F(2, 5) & \dots & F(2, N-2) & F(2, N) \\ F(4, 1) & F(4, 3) & F(4, 5) & \dots & F(4, N-2) & F(4, N) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ F(N-1, 1) & F(N-1, 3) & F(N-1, 5) & \dots & F(N-1, N-2) & F(N-1, N) \\ F(N, 1) & F(N, 3) & F(N, 5) & \dots & F(N, N-2) & F(N, N) \end{pmatrix}, \quad (\text{H.3.28})$$

dove

$$F(j, l) \equiv -i \langle A_j B_l \rangle_{\frac{1}{\sqrt{2}}, \pm \frac{1}{\sqrt{2}}}. \quad (\text{H.3.29})$$

Per $\gamma = x$ si procede in maniera del tutto analoga e si arriva a

$$\langle \sigma_N^x \Pi^x \rangle_{\frac{1}{\sqrt{2}}, \pm \frac{1}{\sqrt{2}}} = (-1)^{\frac{N-1}{2}} \det C', \quad (\text{H.3.30})$$

dove C' è la matrice $\frac{N-1}{2} \times \frac{N-1}{2}$ che si ottiene da C rimuovendole l'ultima riga e l'ultima colonna, cioè

$$C' = \begin{pmatrix} F(2,1) & F(2,3) & F(2,5) & \dots & F(2,N-2) \\ F(4,1) & F(4,3) & F(4,5) & \dots & F(4,N-2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ F(N-2,1) & F(N-2,3) & F(N-2,5) & \dots & F(N-2,N-2) \\ F(N-1,1) & F(N-1,3) & F(N-1,5) & \dots & F(N-1,N-2) \end{pmatrix}. \quad (\text{H.3.31})$$

Per ricapitolare, abbiamo mostrato che il calcolo delle f_γ in (3.5.17) si riduce al calcolo dei determinanti delle matrici C e C' appena definite. Questi determinanti sono più complicati di quelli incontrati nelle Sezioni precedenti (i quali, essendo di Toeplitz, avevano un comportamento asintotico noto) a tal punto che siamo in grado di calcolarli solo numericamente (si vedano le Figure 3.6, 3.4 e 3.5, tratte da [36]).

Bibliografia

- [1] Hugh D. Young, Roger A. Freedman, A. Lewis Ford, and Francis Weston Sears. *Relativity*, chapter 37, pages 1223–1260. Pearson Addison-Wesley, San Francisco, thirteenth edition, 2012.
- [2] Piers Coleman. *Introduction to Many-Body Physics*. Cambridge University Press, 2015.
- [3] Michael E. Fisher. The renormalization group in the theory of critical behavior. *Rev. Mod. Phys.*, 46:597–616, Oct 1974.
- [4] Mehran Kardar. *Statistical Physics of Fields*. Cambridge University Press, 2007.
- [5] Giorgio Parisi. Infinite number of order parameters for spin-glasses. *Phys. Rev. Lett.*, 43:1754–1756, Dec 1979.
- [6] Giorgio Parisi. Nobel prize lecture. nobelprize.org. nobel prize outreach ab 2022. tue. 17 may 2022.
- [7] Nigel Goldenfeld. *Lectures On Phase Transitions And The Renormalization Group*. CRC Press, 2018.
- [8] Michael Tinkham. *Introduction to Superconductivity*. Dover Publications, 2 edition, June 2004.
- [9] John Michael Kosterlitz. Nobel lecture: Topological defects and phase transitions. *Rev. Mod. Phys.*, 89:040501, Oct 2017.
- [10] Subir Sachdev. *Quantum Phase Transitions*. Cambridge University Press, 2 edition, 2011.
- [11] Markus Greiner, Olaf Mandel, Tilman Esslinger, Theodor W. Hänsch, and Immanuel Bloch. Quantum phase transition from a superfluid to a mott insulator in a gas of ultracold atoms. *Nature*, 415(6867):39–44, Jan 2002.
- [12] Jennifer E. Hoffman, Eric W. Hudson, K. M. Lang, Vidya Madhavan, Hiroshi Eisaki, Shin'ichi Uchida, and J. C. Séamus Davis. A four unit cell periodic pattern of quasi-particle states surrounding vortex cores in $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$. *Science*, 295(5554):466–469, 2002.
- [13] Giorgio Parisi. *In un volo di storni*. Rizzoli, 2021.
- [14] Giuseppe Mussardo. *Il Modello di Ising introduzione alla teoria dei campi e delle transizioni di fase*. Bollati Boringhieri, 2021.

- [15] Fabio Franchini. *An Introduction to Integrable Techniques for One-Dimensional Quantum Systems*. Springer International Publishing, 2017.
- [16] Massimo Campostrini, Jacopo Nespolo, Andrea Pelissetto, and Ettore Vicari. Finite-size scaling at the first-order quantum transitions of quantum potts chains. *Phys. Rev. E*, 91:052103, May 2015.
- [17] Masuo Suzuki. Generalized trotter’s formula and systematic approximants of exponential operators and inner derivations with applications to many-body problems. *Communications in Mathematical Physics*, 51(2):183–190, Jun 1976.
- [18] Salvatore Marco Giampaolo, Flavia Brága Ramos, and Fabio Franchini. The frustration of being odd: universal area law violation in local systems. *Journal of Physics Communications*, 3(8):081001, aug 2019.
- [19] Daniel Sacco Shaikh, Maura Sassetti, and Niccolò Traverso Ziani. Parity-dependent quantum phase transition in the quantum ising chain in a transverse field. *Symmetry*, 14(5), 2022.
- [20] Marcos Ley-Koo and Melville S. Green. Revised and extended scaling for coexisting densities of sf_6 . *Phys. Rev. A*, 16:2483–2487, Dec 1977.
- [21] Charles Pittman, Theodore Doiron, and Horst Meyer. Equation of state and critical exponents of ^3He and a ^3He - ^4He mixture near their liquid-vapor critical point. *Phys. Rev. B*, 20:3678–3689, Nov 1979.
- [22] L.M. Holmes, L.G. Van Uitert, and G.W. Hull. Magnetoelectric effect and critical behavior in the ising-like antiferromagnet, dysal_3 . *Solid State Communications*, 9(16):1373–1376, 1971.
- [23] Lars Onsager. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys. Rev.*, 65:117–149, Feb 1944.
- [24] Rudolf Peierls. On ising’s model of ferromagnetism. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 32(3):477–481, 1936.
- [25] Giuseppe Santoro. *Statistical Mechanics - Lecture Notes*. 2018.
- [26] Matthias Vojta. Quantum phase transitions. *Reports on Progress in Physics*, 66(12):2069–2110, nov 2003.
- [27] Immanuel Bloch, Jean Dalibard, and Wilhelm Zwerger. Many-body physics with ultracold gases. *Rev. Mod. Phys.*, 80:885–964, Jul 2008.
- [28] Romana Schirhagl, Kevin Chang, Michael Loretz, and Christian L. Degen. Nitrogen-vacancy centers in diamond: Nanoscale sensors for physics and biology. *Annual Review of Physical Chemistry*, 65(1):83–105, 2014. PMID: 24274702.
- [29] J. Zhang, P. W. Hess, A. Kyprianidis, P. Becker, A. Lee, J. Smith, G. Pagano, I.-D. Potirniche, A. C. Potter, A. Vishwanath, N. Y. Yao, and C. Monroe. Observation of a discrete time crystal. *Nature*, 543(7644):217–220, Mar 2017.

- [30] Lev Vidmar and Marcos Rigol. Generalized gibbs ensemble in integrable lattice models. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2016(6):064007, jun 2016.
- [31] Dmitry A. Abanin, Ehud Altman, Immanuel Bloch, and Maksym Serbyn. Colloquium: Many-body localization, thermalization, and entanglement. *Rev. Mod. Phys.*, 91:021001, May 2019.
- [32] Markus Greiner, Olaf Mandel, Tilman Esslinger, Theodor W. Hänsch, and Immanuel Bloch. Quantum phase transition from a superfluid to a mott insulator in a gas of ultracold atoms. *Nature*, 415(6867):39–44, Jan 2002.
- [33] Antonella De Pasquale and Paolo Facchi. Xy model on the circle: diagonalization, spectrum, and forerunners of the quantum phase transition. *Physical Review A*, 80(3), sep 2009.
- [34] Eytan Barouch and Barry M. McCoy. Statistical mechanics of the xy model. ii. spin-correlation functions. *Phys. Rev. A*, 3:786–804, Feb 1971.
- [35] Vanja Marić, Salvatore Marco Giampaolo, Domagoj Kuić, and Fabio Franchini. The frustration of being odd: how boundary conditions can destroy local order. *New Journal of Physics*, 22(8):083024, Aug 2020.
- [36] Vanja Marić, Salvatore Marco Giampaolo, and Fabio Franchini. Quantum phase transition induced by topological frustration. *Communications Physics*, 3(1), Dec 2020.
- [37] Kenichi Konishi and Gianpiero Paffuti. *Quantum Mechanics: A New Introduction*. OUP Oxford, 2009.
- [38] Robert M. Gray. Toeplitz and circulant matrices: A review. *Found. Trends Commun. Inf. Theory*, 2(3), 2005.
- [39] Giuseppe Mussardo. *Statistical field theory: an introduction to exactly solved models in statistical physics; 1st ed.* Oxford graduate texts. Oxford Univ. Press, New York, NY, 2010.
- [40] David Tong. *Statistical Field Theory*. 2017.
- [41] Lev Elsgolts. *Differential Equations and the Calculus of Variations*. 1970.
- [42] Luca Guido Molinari. Notes on wick’s theorem in many-body theory, 2017.
- [43] Barry M. McCoy. Spin correlation functions of the $x - y$ model. *Phys. Rev.*, 173:531–541, Sep 1968.
- [44] Tai Tsun Wu. Theory of toeplitz determinants and the spin correlations of the two-dimensional ising model. i. *Phys. Rev.*, 149:380–401, Sep 1966.
- [45] Carlo Maria Becchi. Dispense del corso di fisica teorica.
- [46] Vanja Marić and Fabio Franchini. Topologically frustrated quantum spin chains. Oct 2021.

Ringraziamenti

Anzitutto vorrei ringraziare i miei relatori Niccolò Traverso Ziani e Maura Sassetti per avermi seguito costantemente e con entusiasmo, per le preziose discussioni, per avermi introdotto al mondo della ricerca e per aver creduto in me fin dal primo giorno. A Niccolò anche un grande grazie per aver avuto la pazienza di sopportare la mia testardaggine e il mio pessimismo praticamente ogni giorno. Sappi che senza di te tutto questo non sarebbe stato possibile.

Tra gli altri professori che ho avuto in questi anni, ci tengo particolarmente a ringraziare Andrea Amoretti, per avermi introdotto alla fisica statistica, per le interessanti discussioni e per esser sempre stato disponibile e gentile nei miei confronti.

Un grande grazie agli amici dottorandi Giacomo, per le sue perle di saggezza, e Simone, per avermi sempre aiutato a dare la giusta importanza alle cose.

In particolare, un ringraziamento speciale va a Lucia, il mio alter ego femminile, che mi è sempre stata vicina in questi ultimi mesi. Sono davvero fortunato di aver conosciuto una persona come te, sei fantastica.

Un grande grazie a Giulia, compagna di cinque anni e mia vicina di scrivania, per avermi sempre fatto ritrovare la lucidità nei momenti di maggiore sconforto.

Un grandissimo grazie al mio carissimo amico Alessandro, per essermi sempre stato vicino nei momenti più difficili, per le infinite chiamate su Teams e, soprattutto, per tutte le cazzate che abbiamo sparato in questi anni. Grazie di tutto Ale, sei immenso.

Grazie anche a Davide per tutte le leggendarie, interessantissime e divertenti call durante il lockdown... ore e ore volate a condividere la stessa passione per la Fisica Teorica, dalla meccanica quantistica alla teoria dei campi. Sono certo che diventerai un fisico fortissimo.

Grazie a Francesca, per essersi sempre preoccupata di me, a Filippo e Simone, leggendari compagni di laboratorio, e a Vitto, per gli indimenticabili giri a Matematica. Infine vorrei ringraziare la mia famiglia: non so se tutto ciò sarebbe stato possibile senza il vostro costante supporto nei momenti più complicati. Un enorme grazie alla nonna Lilli, che ha sempre creduto in me anche, e soprattutto, quando io stesso avevo smesso di farlo.

Un ringraziamento a mio zio Antonio, per il continuo sostegno e per avermi sempre trattato come un figlio.

Concludo ringraziando i miei genitori, che si sono sempre fatti in quattro per me e che mi hanno dato l'opportunità di seguire la mia sconfinata passione per la Fisica.