

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)»
Физтех-школа физики и исследований им. Ландау
Кафедра проблем теоретической физики

Направление подготовки / специальность: 03.03.01 Прикладные математика и физика
(бакалавриат)

Направленность (профиль) подготовки: Фундаментальная и прикладная физика

**ОДНОМЕРНОЕ КВАНТОВОЕ СПИНОВОЕ СТЕКЛО СО
ЗНАКОПЕРЕМЕННЫМ ДАЛЬНОДЕЙСТВУЮЩИМ
ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ ПРИ НАЛИЧИИ СЛАБОГО
ПОПЕРЕЧНОГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ**

(бакалаврская работа)

Студент:

Архипкин Владимир Сергеевич

(подпись студента)

Научный руководитель:

Фейгельман Михаил Викторович,
д-р физ.-мат. наук, проф.

(подпись научного руководителя)

Консультант (при наличии):

(подпись консультанта)

Москва 2020

Содержание

1. Введение	2
2. Вывод уравнения на статсумму	3
3. Численный анализ статистики метастабильных состояний	4
3.1. Решение уравнения на статсумму	4
3.2. Минимумы свободной энергии	5
3.2.1. Оценка распределения $M(\varepsilon)$	5
3.2.2. Зависимость числа минимумов $\varepsilon(\phi)$ от температуры	6
3.3. Ультраметричность	7
4. Квантовая задача	10
4.1. Вывод эффективного Гамильтониана	11
4.1.1. Большие функции $f(\tau)$	11
4.1.2. Малые функции $f(\tau)$	12
4.1.3. Динамический вклад	13
4.1.4. Статический вклад	13
4.1.5. Эффективный Гамильтониан	14

1. Введение

В данной работе изучается модель одномерного спинового стекла с дальнедействующим знакопеременным взаимодействием [1, 2]. Гамильтониан данной системы

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{ij} \hat{\sigma}_i^z V_{ij} \hat{\sigma}_j^z \quad (1.1)$$

$$V_{ij} = \gamma e^{-\gamma|x_i-x_j|} \cos Q(x_i - x_j)$$

Здесь x_i - координата i -ого спина. Радиус взаимодействия охватывает большое число спинов, а период осцилляций много меньше среднего расстояния между ними ($k \ll 1 \ll Q$).

Далее будет изучена структура метастабильных состояний данной системы в интервале температур $\gamma \ll T \ll 1$. Для этого запишем выражение для статсуммы, используя преобразование Хаббарда-Стратоновича

$$Z = \sum_{\sigma_i=\pm 1} \int D\psi D\psi^* \exp \left\{ -\frac{1}{T} \int [\psi(x) \hat{V}^{-1} \psi^*(x)] dx + \frac{1}{T} \sum_i \sigma_i (\psi(x_i) + \psi^*(x_i)) \right\} \quad (1.2)$$

Для нахождения обратного оператора \hat{V}^{-1} воспользуемся преобразованием Фурье исходного оператора \hat{V}

$$V^{-1}(p) = \left(\frac{p^2 - Q^2}{2Q\gamma} \right)^2 + 1$$

Характерный масштаб изменения функции $\psi \sim \frac{1}{Q}$. Но в ней можно явно выделить быструю часть $\sim \exp(iQx)$ и при действии на неё оператором V^{-1} первое слагаемое уйдёт. Для медленной части, масштаб изменения которой $\sim \frac{1}{\gamma}$, можно отбросить слагаемое с четвёртой производной в силу условия $\frac{\gamma}{Q} \ll 1$

$$Z = \sum_{\sigma_i=\pm 1} \int D\psi D\psi^* \exp \left\{ -\frac{1}{T} \int \left[\frac{1}{\gamma^2} \left| \left(i \frac{d}{dx} + Q \right) \psi \right|^2 + |\psi|^2 \right] dx + \frac{1}{T} \sum_i \sigma_i (\psi(x_i) + \psi^*(x_i)) \right\}$$

Проведя суммирование по конфигурациям спинов получим

$$Z = \int D\psi D\psi^* \exp \left(-\frac{1}{T} H_{eff}[\psi] \right) \quad (1.3)$$

где

$$H_{eff}[\psi] = \int \left[\frac{1}{\gamma^2} \left| \left(i \frac{d}{dx} + Q \right) \psi \right|^2 + |\psi|^2 - \sum_i \delta(x - x_i) \ln \cosh \left(\frac{\psi(x_i) + \psi^*(x_i)}{T} \right) \right] dx \quad (1.4)$$

Далее произведём замену $\psi = \rho \exp(i\phi + iQx)$. Амплитуду ρ можно просто заменить на постоянное значение ρ_0 , полученное минимизацией $H_{eff}[\psi]$. В итоге получим Гамильтониан, зависящий уже только от фазы ϕ

$$H[\phi] = \int dx \left(\frac{\rho_0^2}{\gamma^2} (\nabla\phi)^2 - T \sum_i \delta(x - x_i) \left[\ln \cosh \left(\frac{\cos(Qx + \phi)}{T} \right) \right] \right) \quad (1.5)$$

Введём свободную энергию системы с фиксированным значением фазы последнего спина $\varepsilon_n(\phi_n) = -T \ln Z_n(\phi_n)$. Согласно [1] ε_n удовлетворяет уравнению

$$\varepsilon_{n+1}(\phi) - \varepsilon_n(\phi) = -\frac{\gamma^2}{\rho_0^2} l_n \left(\frac{\partial \varepsilon_n}{\partial \phi} \right)^2 + \frac{T}{4} \frac{\gamma^2 l_n}{\rho_0^2} \frac{\partial^2 \varepsilon_n}{\partial \phi^2} - T \ln \cosh \left(\frac{2\rho_0 \cos(\alpha_n + \phi)}{T} \right) \quad (1.6)$$

В данном выражении присутствуют две случайные величины: $l_n = x_{n+1} - x_n$ и $\alpha_n = Qx_n$. Однако l_n можно заменить на её среднее значение $\langle l_n \rangle = 1$. Характерный вид функции $\varepsilon(\phi)$ представлен на Рис. 1. Данные графики получены в результате численного анализа Гамильтониана (1.5), который будет подробно обсуждаться в главе 3.

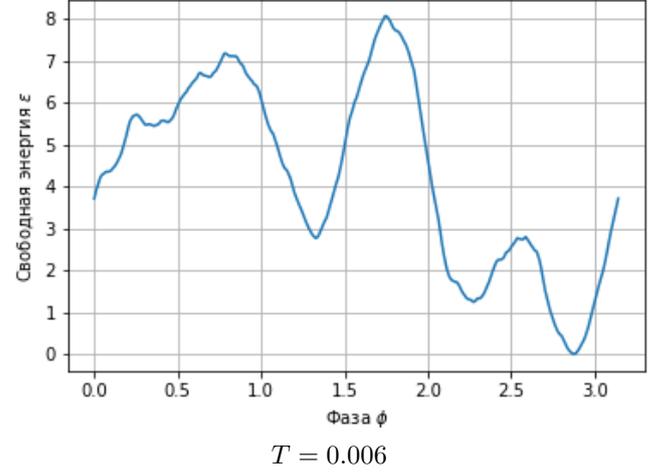
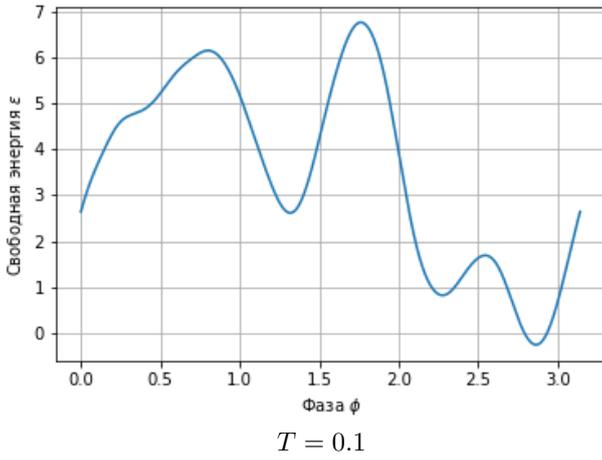


Рис. 1: Решение уравнения (1.6) при фиксированном беспорядке; $\rho_0 = 1$; $\gamma = 0.02$; $n = 1000$

На данных графиках видно, что с понижением температуры растёт число минимумов свободной энергии в системе. Из уравнения (1.6) можно получить соотношение на приращение $E(\Phi)$ свободной энергии от приращения фазы Φ [2]

$$E(\Phi) \sim \gamma^{-\frac{2}{3}} \Phi^{\frac{5}{3}} \quad (1.7)$$

При условии $\gamma \ll T$ видно, что минимальный энергетический барьер между двумя метастабильными состояниями $E_0 \sim T \left(\frac{T}{\gamma}\right)^{\frac{2}{3}} \gg T$, т. е. все минимумы разделены между собой бесконечно высокими барьерами по энергии. Из соотношения (1.7) получим вероятность перехода из одного минимума в другой при приращении фазы на Φ

$$P(\Phi) \sim \left(\frac{\Phi_0}{\Phi}\right)^{\frac{2}{3}} \quad (1.8)$$

где $\Phi_0 = T$. Проинтегрировав выражение (1.8) по всем приращениям получим общее число минимумов [2]

$$M_0 \sim T^{-\frac{1}{3}} \quad (1.9)$$

Получается, что число локальных минимумов свободной энергии растёт с понижением температуры, причём с образованием древесной структуры. Каждый из минимумов распадается на множество других, плотно расположенных друг к другу.

Данная работа посвящена исследованию этой системы в квантовом случае. Предполагается, что с понижением температуры вероятность квантового туннелирования через барьер E_0 станет достаточно большой, что приведёт к остановке роста числа метастабильных состояний.

Однако, результаты работы [1] получены нестрогими оценками, требующими проверки. Поэтому данная работа поделена на две части. В первой будет осуществлена численная проверка результата (1.9), а также исследована ультраметричность [4] в данной модели спинового стекла. Вторая часть будет посвящена поиску температуры, ограничивающей рост минимумов свободной энергии.

2. Вывод уравнения на статсумму

Рассмотрим подробнее Гамильтониан (1.5). Для вычисления статсуммы данной системы, воспользуемся методом трансфер матриц [3]

$$Z = \int \prod_k d\phi_k \exp \left(\sum_k \left[-\frac{1}{T} \frac{(\phi_k - \phi_{k-1})^2}{\gamma^2 (x_k - x_{k-1})} + \ln \cosh \left(\frac{\cos(Qx_k + \phi_k)}{T} \right) \right] \right) \quad (2.1)$$

Рассмотрим величину $\Psi_n(\phi_n)$ - вероятность того, что в системе размера n в n -ом узле решётки значение поля ϕ равно $\phi_n = \phi(x_n)$. Легко видеть, что эта вероятность пропорциональна выражению для статсуммы, в котором не проводится интегрирование по последней переменной ϕ_n . Исходя из этого мы можем записать уравнение на $\Psi_{n+1}(\phi_{n+1})$

$$\lambda_{n+1} \Psi_{n+1}(\phi_{n+1}) = \cosh \left(\frac{\cos(\phi_{n+1} + \alpha_{n+1})}{T} \right) \int_0^{2\pi} \frac{d\phi_n}{2\pi} \exp \left(-\frac{1}{\gamma^2 T} (\phi_{n+1} - \phi_n)^2 \right) \Psi_n(\phi_n) \quad (2.2)$$

Здесь λ_n - нормировочная константа; α_n - случайная величина, распределённая равномерно на отрезке $[0, 2\pi]$; T - температура; γ - малый параметр;

$$\hat{S}(\phi, \phi') = \cosh\left(\frac{\cos(\phi' + \alpha)}{T}\right) \exp\left(-\frac{1}{\gamma^2 T}(\phi' - \phi)^2\right) \quad (2.3)$$

добавляет в цепочку узел со значением ϕ' поля в нём и суммирует по всем значениям поля ϕ в предыдущем узле. Этот оператор и является искомой трансфер-матрицей.

Уравнение (2.2) задаёт Марковский процесс с дискретным временем и непрерывным набором состояний, в ходе эволюции которого будет получена функция $\Psi(\phi)$. Важно отметить, что эта функция зависит от полного набора случайных величин α_n . Однако нас интересует не сама эта функция, а величина $\varepsilon(\phi) = -T \ln \Psi(\phi)$ - свободная энергия системы. Её мы и будем усреднять по беспорядку.

3. Численный анализ статистики метастабильных состояний

Данный раздел посвящён численной проверке результатов, полученных в работе [1]. Моделирование исходного Гамильтониана системы (1.1) является вычислительно сложной задачей, поэтому будет произведён анализ уравнения (2.2), решение которого даёт всю необходимую информацию о структуре минимумов свободной энергии системы и зависимость их числа от температуры.

3.1. Решение уравнения на статсумму

Алгоритм решения уравнения (2.2):

- Будем решать данное уравнение методом последовательных итераций, на каждой из которых вычислять значение нормированной функции $\Psi_n(\phi_n)$ в N равномерно расположенных на отрезке $[0, 2\pi]$ точках.
- Как обсуждалось ранее, действие оператора \hat{S} заключается в добавлении узла (спина) в решётку. Поэтому число итераций n , необходимое для установления стационарного распределения, выберем с тем условием, что число спинов в решётке должно быть много больше длины корреляции фазы L_ϕ , т. е. $\langle \cos(\phi_n - \phi_1) \rangle \sim \exp(-nL_\phi^{-1})$. Согласно [1] $L_\phi \sim \gamma^{-\frac{4}{3}}$. В результате прохождения нужного числа итераций получим искомую функцию $\Psi(\phi)$.
- На Рис. 2 представлен увеличенный участок функции $\varepsilon(\phi) = -T \ln \Psi(\phi)$. Из него видно, что мелкость разбиения отрезка $[0, 2\pi]$ (число точек N) должна быть много меньше минимального расстояния между двумя локальными минимумами, т. к. в итоге нас интересует именно их количество. Поэтому N получим увеличением некоторого начального числа точек разбиения N_0 до тех пор, пока число минимумов функции $\varepsilon(\phi)$ не перестанет зависеть от мелкости разбиения. Предполагая, что число локальных минимумов действительно растёт с уменьшением температуры, выберем N одинаковым и равным 4000 для всех температур. Выбранная мелкость разбиения соответствует минимальной из исследуемых температур.
- Интегрирование в выражении (2.2) проведём методом Симпсона. Данный метод заключается в аппроксимации функции полиномом второго порядка на каждой тройке последовательно идущих точек, в которых функция определена. Нормировочная константа λ_n вычислялась также с использованием данного метода.

Отметим важную особенность в решении уравнения (2.2) при низких температурах. График некоторого решения $\Psi(\phi)$ представлен на Рис. 3. Как можно на нём увидеть функция $\Psi(\phi)$ имеет очень маленькое значение практически во всех точках, не считая области ярко выраженного пика. Это неудивительно, т. к. если внимательно посмотреть на решаемое уравнение, то видно, что перед интегралом стоит функция $\cosh\left(\frac{\cos(\phi_n + \alpha_n)}{T}\right)$ с острыми пиками в точках равенства единице $|\cos(\phi_n + \alpha_n)|$. Соответственно будут существовать две таких точки ϕ_n на отрезке $[0, 2\pi]$, для которых значение функции $\Psi_n(\phi_n)$ будет очень велико. Также видно, что положение пика будет меняться на каждой итерации в силу изменения случайной фазы α_n . Старый пик исчезнет, т. к. интеграл в уравнении (2.2) всегда набирается в узкой окрестности фазы ϕ_{n+1} , даже для функций $\Psi_n(\phi_n)$ вида Рис. 3. Это связано с тем, что экспонента под интегралом затухает гораздо быстрее, в силу малости параметра γ , чем растёт функция $\cosh\left(\frac{\cos(\phi_n + \alpha_n)}{T}\right)$. Всё это приводит к тому, что при достаточно малых температурах значения функции $\Psi_n(\phi_n)$ в некоторых точках становятся настолько маленькими, начиная с некоторой итерации, что стандартного типа данных перестаёт хватать для хранения нужного количества знаков после запятой. Однако важно хранить все эти

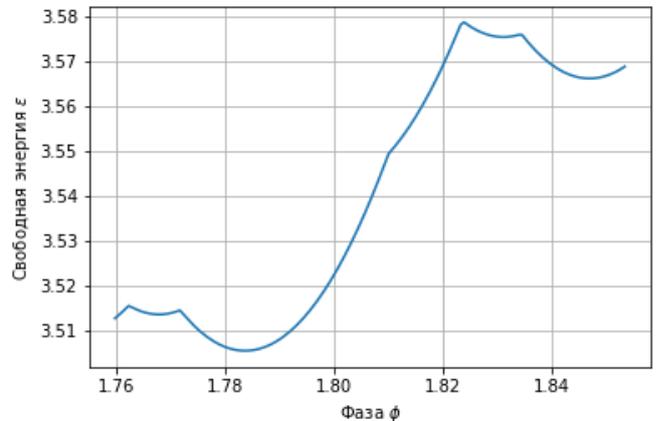
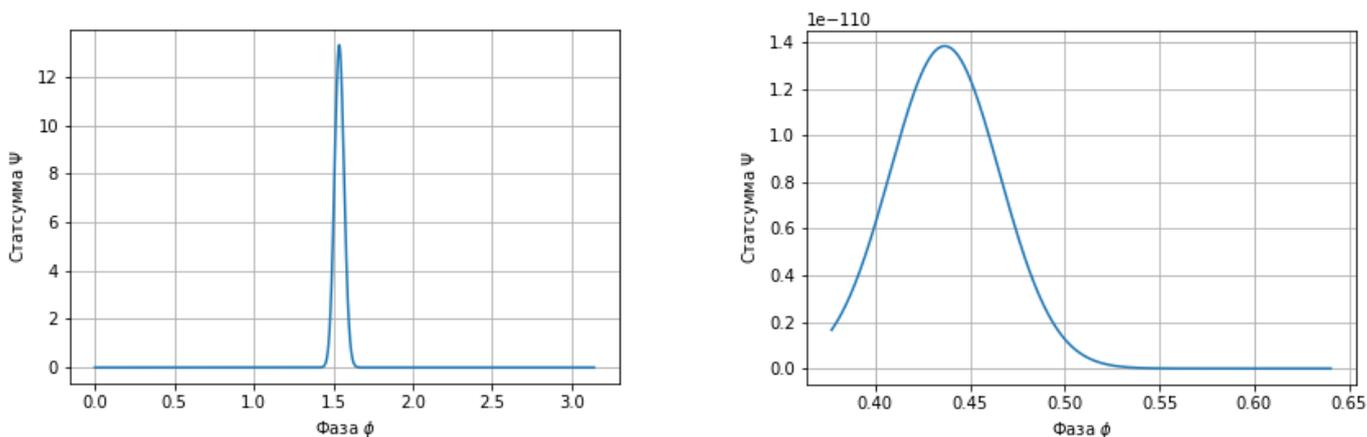


Рис. 2: Участок $\varepsilon(\phi)$, полученной при решении уравнения (2.2) с фиксированным беспорядком при $T = 0.001$, $\gamma = 0.02$

значения, т. к. нас интересует величина свободной энергии $\varepsilon(\phi) = -T \ln \Psi(\phi)$, которая в этих точках порядка единицы. Данная проблема была решена при помощи хранения чисел в строковом виде, что даёт практически бесконечную точность, но скорость выполнения всех арифметических операций начинает зависеть от размеров этих чисел.



Вид решения на отрезке $[0, \pi]$

Вид решения в узкой области, вдали от главного пика

Рис. 3: Характерный вид решения уравнения (2.2)

3.2. Минимумы свободной энергии

Рассмотри зависимость числа минимумов $M(\varepsilon)$ свободной энергии $\varepsilon(\phi)$, полученной в ходе решения уравнения (2.2), от температуры. Предполагается, что среднее число минимумов M_0 , которое получается усреднением по беспорядку свободной энергии, удовлетворяет соотношению (1.9) в области параметров $\gamma \ll T \ll 1$.

3.2.1. Оценка распределения $M(\varepsilon)$

Для начала рассмотрим распределение величины $M(\varepsilon)$. Вычисление проведём для температуры $T = 0.002$ и параметра $\gamma = 0.1$.

Результат представлен на Рис. 4. Среднее число минимумов $M_0 = \langle M \rangle = 14.95$, а дисперсия $\sqrt{\langle \delta M^2 \rangle} = 8.64$. Далее, при вычислении зависимости числа минимумов от температуры, будет проводить усреднение по 100 реализациям функции $\varepsilon(\phi)$. Согласно Центральной предельной теореме это даст ошибку $\frac{\sqrt{\langle \delta M^2 \rangle}}{10} \ll M_0$.

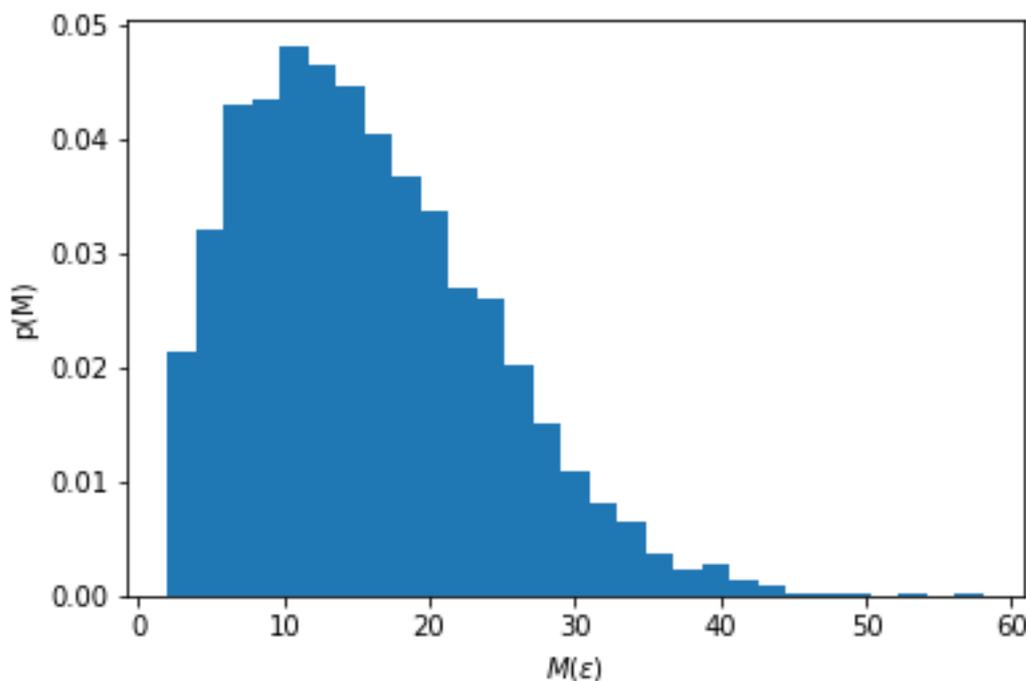


Рис. 4: Распределение числа минимумов $M(\varepsilon)$; $T = 0.002$; $\gamma = 0.1$; $\langle M \rangle = 14.95$; $\sqrt{\langle \delta M^2 \rangle} = 8.64$

3.2.2. Зависимость числа минимумов $\varepsilon(\phi)$ от температуры

На Рис. 5 приведены графики зависимости среднего числа минимумов M_0 свободной энергии $\varepsilon(\phi)$ от температуры T . Как можно заметить, полученные точки плохо ложатся на кривую вида $a_0 T^{-\frac{1}{3}} + b_0$, где параметры a_0 и b_0 подобраны так, чтоб наилучшим образом приближать полученные точки

$$\operatorname{argmin}_{a,b} \sum_T \left(aT^{-\frac{1}{3}} + b - M_0(T) \right)^2 = a_0, b_0$$

Но результат (1.9) был получен в области температур $\gamma \ll T \ll 1$, что в нашем случае не выполняется. Более того, из полученных графиков видно, что $M_0(T)$ имеет разные виды зависимости для разных областей температур. Далее будем называть их областями «высоких» и «низких» температур. Предполагая, что в обоих этих областях зависимость M_0 от температуры степенная, найдём температуру перехода между ними.

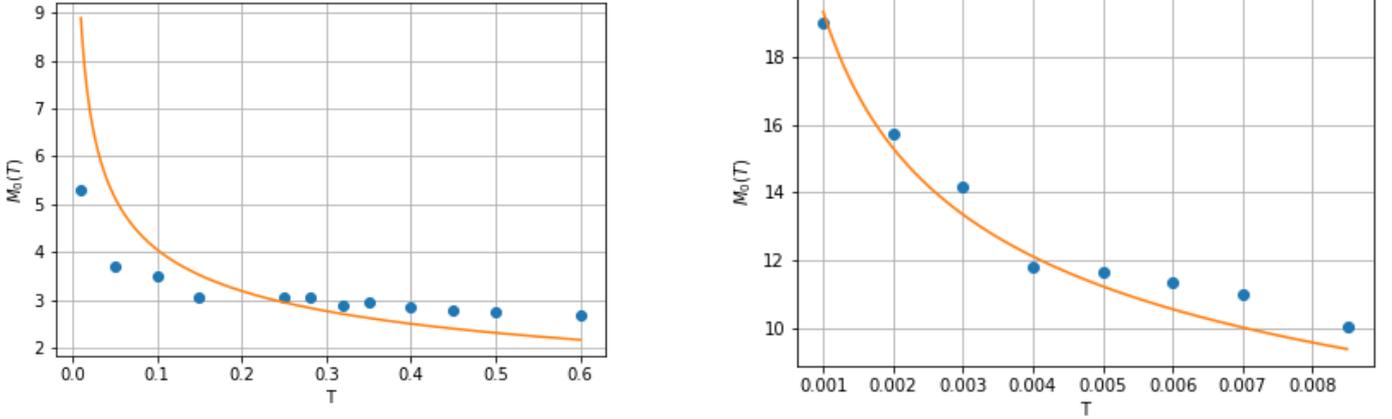


Рис. 5: Зависимость среднего числа минимумов от температуры для $\gamma = 0.02$. Синие точки - посчитанный результат. Оранжевая кривая - аппроксимирующая функция вида $a_0 T^{-\frac{1}{3}} + b_0$, построенная по всем точкам.

Предположение, что при «низких» и «высоких» температурах M_0 зависит от T степенным образом, делает удобным проводить дальнейшие исследования в $\log - \log$ координатах, где все зависимости будут линейными.

Поиск температуры перехода:

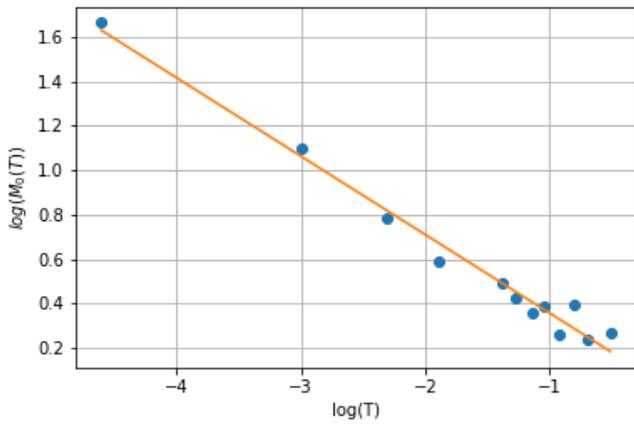
- Разбиваем все температуры на две области - «высокие» и «низкие».
- Предполагая, что для обеих областях температур, зависимость $\log(M_0 + \text{const}) (\log T)$ линейная, но с разными коэффициентами наклона, запишем функцию ошибки

$$Q = \sum_{T_{low}} (\log(M_0(T) - b_1) + k_1 \log(T))^2 + \sum_{T_{high}} (\log(M_0(T) - b_2) + k_2 \log(T))^2$$

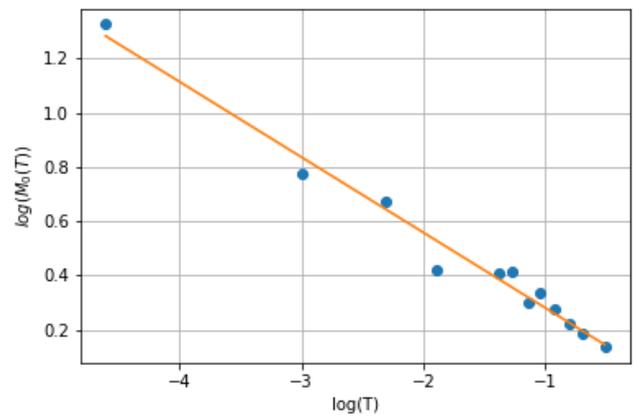
Здесь $\sum_{T_{low}}$ - суммирование по области низких температур, $\sum_{T_{high}}$ - по области высоких температур.

- Ищем минимум функции Q по параметрам k_1, k_2, b_1, b_2 и повторяем все пункты выше для всех разбиений области исследуемых температур.
- Оставляем то разбиение, где значение Q в минимуме оказалось наименьшим.

Данный метод не позволяет определить точно температуру перехода, но нам этого и не надо. Результаты для области «высоких» температур представлены на Рис. 6



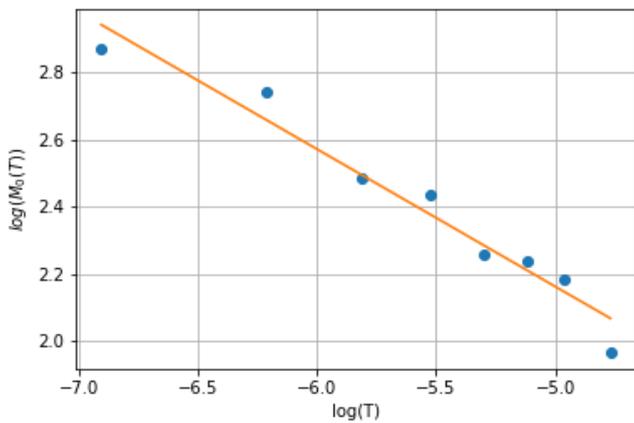
$\gamma = 0.1$; наклон = -0.353 ± 0.009



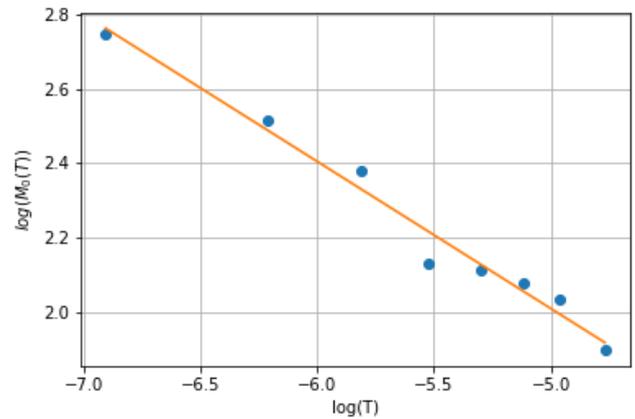
$\gamma = 0.02$; наклон = -0.278 ± 0.007

Рис. 6: Зависимость среднего числа минимумов от температуры в $\log - \log$ масштабе для «высоких» температур.

Как видно из представленных графиков, наклон для параметра $\gamma = 0.02$ оказался отличным от $-\frac{1}{3}$ в обеих областях. В то же время, для параметра $\gamma = 0.1$ близость наклона к $-\frac{1}{3}$ также непонятна, т. к. в этом случае γ больше исследуемых температур и, как видно на Рис. 7, в случае «низких» температур наклон прямых меньше.



$\gamma = 0.1$; наклон = -0.410 ± 0.009



$\gamma = 0.02$; наклон = -0.394 ± 0.005

Рис. 7: Зависимость среднего числа минимумов от температуры в $\log - \log$ масштабе.

В [1, 2] был получен результат, что при температурах меньших γ , рост минимумов прекращается, что также, на первый взгляд, не наблюдается в полученных результатах. Однако, при расчётах были получены данные, говорящие о том, что с понижением температуры, число минимумов перестаёт расти. Здесь они не приведены, т. к. их не хватает для установления этого факта. Если предположить, что это выполнено, тогда, как и предсказывалось в [1, 2], действительно имеется конечная область, в которой минимумы распадаются на большее их количество, но она существенно шире $\gamma \ll T \ll 1$ и зависимость числа минимумов от температуры неодинакова во всей этой области.

3.3. Ультраметричность

В данном разделе будет осуществлена проверка ультраметричности пространства метастабильных состояний системы (1.1) [4, 5].

Ультраметричными называются метрические пространства, для которых расстояния между тремя произвольными элементами α, β и γ удовлетворяют модифицированному неравенству треугольника $\rho_{\alpha\beta} \leq \max(\rho_{\alpha\gamma}, \rho_{\gamma\beta})$. Структура такого пространства проиллюстрирована на Рис. 8, где в качестве элементов пространства выступают листья дерева, а расстояния между ними зависят только от количество «поколений» до первого общего «предка».

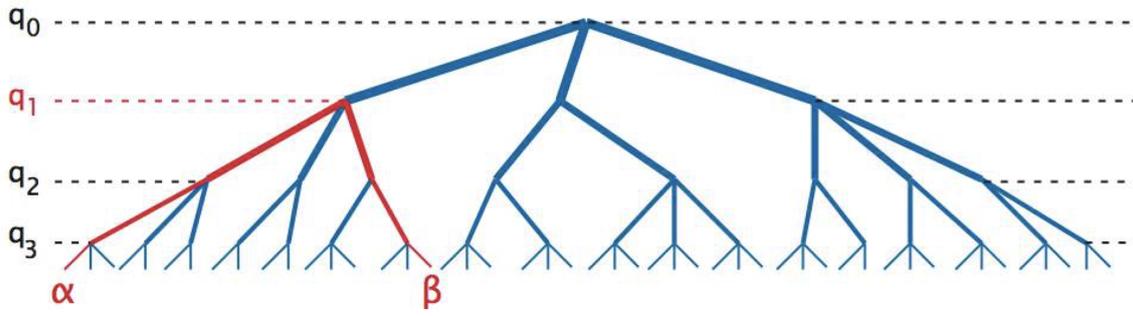


Рис. 8: Ультраметричное дерево [7]

В нашем случае элементами пространства являются метастабильные состояния системы (1.1) или, что то же самое, локальные минимумы свободной энергии $\varepsilon(\phi)$. В качестве расстояния между этим минимумами выступают величины $\rho_{\alpha\beta}$, определённые согласно (3.1) [1].

$$\rho_{\alpha\beta} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\langle \sigma_i \rangle_{\alpha} - \langle \sigma_i \rangle_{\beta} \right)^2, \text{ где } \alpha, \beta \text{ — метастабильные состояния} \quad (3.1)$$

$$\langle \sigma_i \rangle_{\alpha} = \tanh \left(\frac{2}{T} \cos(\varphi_i + \alpha_i) \right), \text{ где } \varphi_i \text{ — одинаковы для всех спинов в состоянии } \alpha$$

Однако, мы будем вычислять не величины (3.1), а перекрытия между состояниями

$$q_{\alpha\beta} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \sigma_i \rangle_{\alpha} \langle \sigma_i \rangle_{\beta} \quad (3.2)$$

Как видно из определения $|q_{\alpha\beta}| \leq 1$. В отличие от величин $\rho_{\alpha\beta}$ нас будут интересовать соотношение двух наименьших перекрытий.

Алгоритм проверки свойства ультраметричности пространства состояний спинового стекла (1.1):

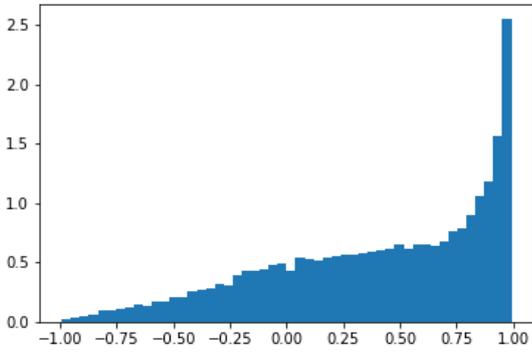
- Решая уравнение (2.2), получаем график $\varepsilon(\phi)$ и из него массив координат локальных минимумов ϕ_{α} , где $\alpha = \{1, 2, 3, \dots\}$, функции $\varepsilon(\phi)$.
- Находим всевозможные сочетания троек минимумов ϕ_{α} [6]:
 - Для всех сочетаний выполнено условие упорядочения по возрастанию индекса α .
 - В качестве начального сочетания берём первые три минимума из массива ϕ_{α} .
 - По некоторому сочетанию $\Phi = (\phi_{\alpha}, \phi_{\beta}, \phi_{\gamma})$ будем получать следующее сочетание $\Phi' = (\phi_{\alpha'}, \phi_{\beta'}, \phi_{\gamma'})$ путём нахождения в Φ самого правого элемента, который ещё не достиг своего крайнего значения. Заменяем этот элемент на идущий перед ним в массиве всех минимумов, а всем остальным элементам, которые стоят справа от него, присвоим минимально возможные по индексу значения, чтоб удовлетворялось второе условие. Приведём пример для числа минимумов равного 5.

$$(1, 2, 3) \rightarrow (1, 2, 4) \rightarrow (1, 2, 5) \rightarrow (1, 3, 4) \rightarrow (1, 3, 5) \rightarrow (1, 4, 5) \rightarrow (2, 3, 4) \rightarrow (2, 3, 5) \rightarrow (2, 4, 5) \rightarrow (3, 4, 5)$$

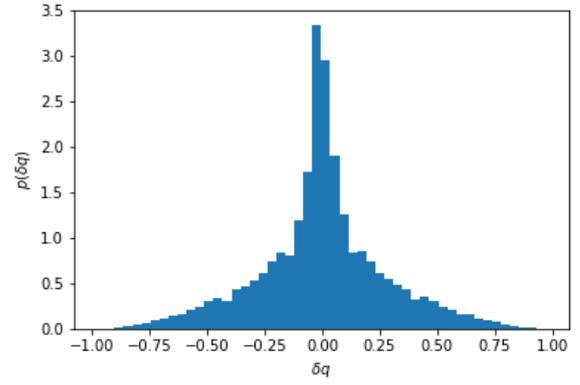
- Для каждой из полученных троек вычисляем перекрытия между всеми парами минимумов и сохраняем разность между двумя наименьшими из них δq .
- Повторяем все вышеперечисленные пункты, получаем распределение величины δq , которая в случае выполнения свойства ультраметричности должна всегда равняться нулю.

Алгоритм вычисления самих перекрытий q практически ничем не отличается от приведённого выше. Из массива минимумов свободной энергии ϕ_{α} будем сразу получать всевозможные пары минимумов и вычислять перекрытия между ними.

Результат вычислений приведён на Рис. 9. Здесь $E[\delta q]$ - среднее случайной величины δq , а $D[\delta q]$ - её дисперсия.



Плотность распределения q

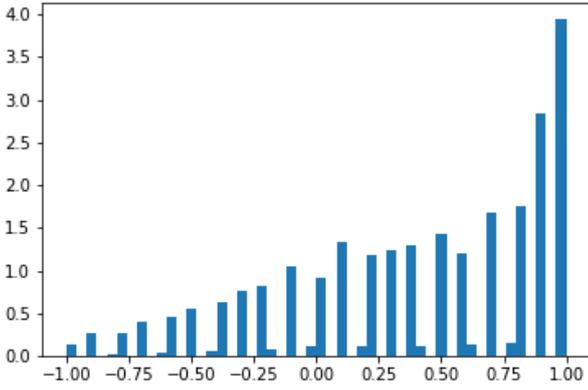


Плотность распределения $\delta q; E[\delta q] = 0.0; D[\delta q] = 0.28$

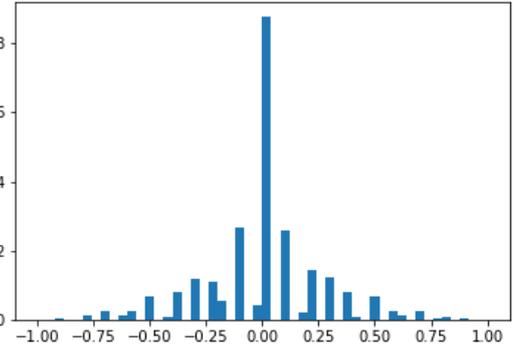
Рис. 9: Число спинов много больше длины корреляции, $\gamma = 0.1, T = 0.001$.

Как видно из приведённых графиков, разность двух наименьших перекрытий δq имеет достаточно широкое распределение, хотя и с ярко выраженным пиком в нуле. То есть ультраметричность в общем виде не сохраняется для любых трёх состояний. Как обсуждалось в [5] данное явление связано с конечностью радиуса взаимодействия в системе (1.1), что приводит к разбиению состояний на семейства, для которых свойство ультраметричности уже выполняется.

В связи с этим модифицируем алгоритм исследования ультраметричности в данной системе. Будем вычислять перекрытия не для всех спинов, в полученной цепочке, а только для числа спинов порядка длины корреляции L_ϕ в одной случаи и порядка длины взаимодействия в другом. Полученный результат представлен на Рис. 10 и Рис. 11.

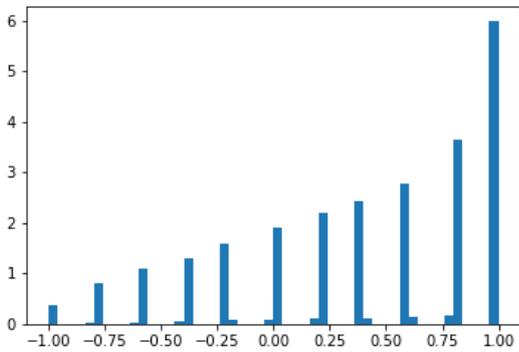


Плотность распределения q

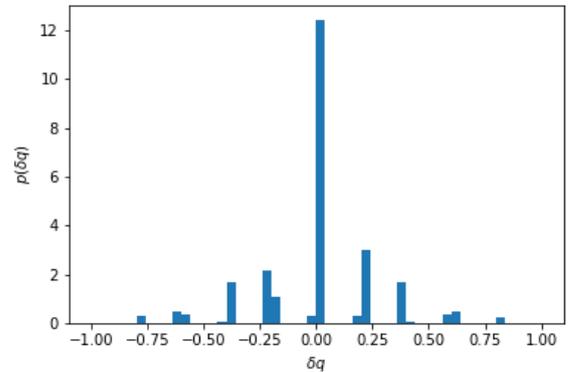


Плотность распределения $\delta q; E[\delta q] = 0.0; D[\delta q] = 0.27$

Рис. 10: Число спинов порядка длины корреляции L_ϕ , $\gamma = 0.1, T = 0.001$.



Плотность распределения q



Плотность распределения $\delta q; E[\delta q] = 0.0; D[\delta q] = 0.27$

Рис. 11: Число спинов порядка длины взаимодействия, $\gamma = 0.1, T = 0.001$.

Из этих распределений видно, что разности некоторых перекрытий действительно равны нулю, т. е. ультраметричность выполняется лучше. Интересно также сравнить, где ярче выражен пик в нуле для всех трёх случаев. Для этого

посмотрим на функции распределения разности перекрытий. Чем больше пик в нуле, тем сильнее будет скачок у функции распределения Рис. 12. Однако из полученных графиков нельзя сказать, что где-то пик выражен ярче.

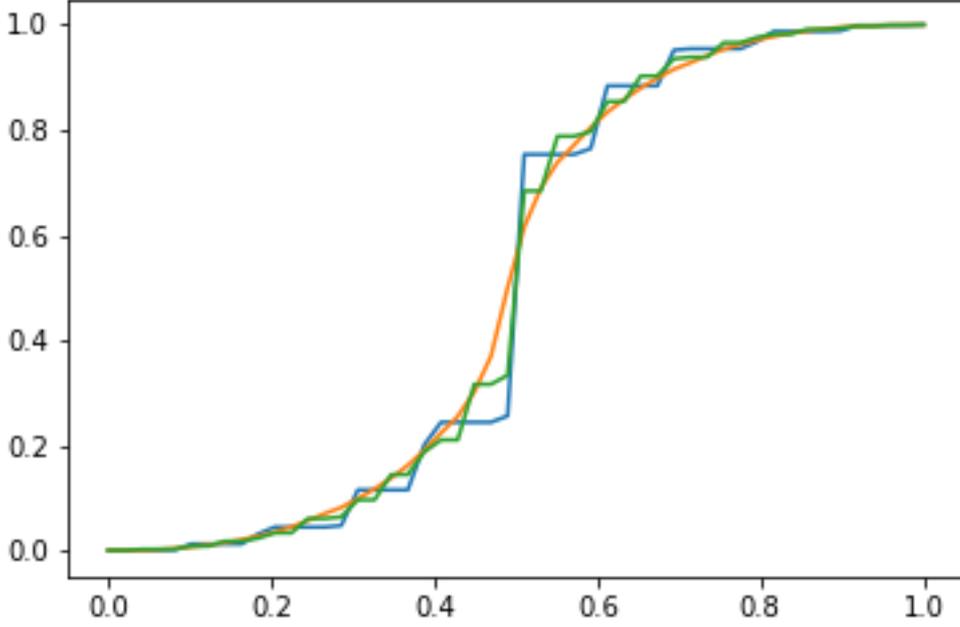


Рис. 12: Функции распределения разности перекрытий δq ; оранжевая - для полного числа спинов; зелёная - для числа спинов порядка длины корреляции L_ϕ ; синяя - для числа спинов порядка длины взаимодействия

4. Квантовая задача

Гамильтониан системы

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{ij} \hat{S}_i^z V_{ij} \hat{S}_j^z - h \sum_i \hat{S}_i^x \quad (4.1)$$

$$V_{ij} = \gamma e^{-\gamma|x_i-x_j|} \cos Q(x_i - x_j); \quad V(p) = \frac{1}{\left(\frac{p^2-Q^2}{2Q\gamma}\right)^2 + 1}; \quad \gamma \ll Q$$

Магнитное поле h здесь является малым. Критерий малости будет установлен далее.

Сделаем преобразование Хаббарда-Стратоновича для статсуммы системы (4.1)

$$Z = \int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\psi^* \exp \left\{ - \int_0^\beta d\tau \int dx \left[\frac{1}{\gamma^2} \left| \left(i \frac{d}{dx} + Q \right) \psi(x, \tau) \right|^2 + |\psi(x, \tau)|^2 \right] \right\} \prod_i Tr(\hat{U}_i) \quad (4.2)$$

$$\hat{U}_i = \exp \left(\int_0^\beta d\tau \left[\hat{S}_i^z (\psi(x_i, \tau) + \psi^*(x_i, \tau)) + h \hat{S}_i^x \right] \right)$$

След от произведения операторов мы можем разделить на произведения следов, т.к. \hat{U}_i действуют в пространствах разных спинов. Также видно, что оператор \hat{U}_i удовлетворяет уравнению

$$\frac{d\hat{U}_i}{d\tau} = \left(f_i(\tau) \hat{S}_i^z + h \hat{S}_i^x \right) \hat{U}_i \quad (4.3)$$

где $f_i(\tau) = f(x_i, \tau) = \psi(x_i, \tau) + \psi^*(x_i, \tau) = \rho(x_i, \tau) \cos(\phi(x_i, \tau) + Qx_i)$.

Также отметим, что нас интересует область $\gamma \ll T \ll 1$. Это даёт нам условие $f_0\beta \gg 1$, т.к. $\rho_0 \sim 1$ [1]. Здесь $f_0 \sim \rho_0$ - характерное значение функции $f(\tau)$.

4.1. Вывод эффективного Гамильтониана

Для определения $Tr(\hat{U}_i)$ будем решать уравнение (4.3) на волновую функцию спина χ с двумя начальными условиями

$$\chi(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \chi(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

Данная система уравнений не решается точно, но поле h является малым, поэтому почти всегда выполнено условие $f(x, \tau) \gg h$. Оно нарушается в случае, когда $f(x, \tau)$ проходит через 0 как функция координаты и поэтому является малой на всё временном промежутке. Такие события происходят достаточно редко, однако могут давать существенный вклад в эффективный Гамильтониан. Далее будем использовать обозначение $f(\tau) = f(x, \tau)$, т. к. нас будет интересовать только временная зависимость данной функции.

4.1.1. Большие функции $f(\tau)$

Введём параметризацию χ и будем считать функцию $f(\tau) > 0$ на всём промежутке $[0, \beta]$

$$\chi_1 = e^\rho \cos \theta \quad \chi_2 = e^\rho \sin \theta$$

После преобразований уравнения (4.3) с учётом, что $\hat{\mathbf{S}} = \frac{1}{2}\hat{\sigma}$, получим уравнения в новых переменных

$$\begin{cases} \dot{\theta} = \frac{1}{2}(-f(\tau) \sin 2\theta + h \cos 2\theta) \\ \dot{\rho} = \frac{1}{2}(f(\tau) \cos 2\theta + h \sin 2\theta) \end{cases} \quad (4.5)$$

В случае начального положения спина вдоль оси z , т.е. $\theta(0) = 0$, решение не будет сильно отклоняться от начального значения. С учётом этого линеаризуем первое уравнение системы (4.5)

$$\dot{\theta} = -f(\tau)\theta + \frac{h}{2}$$

$$\theta(\tau) = \frac{h}{2} \exp\left(-\int_0^\tau f(\tau') d\tau'\right) \int_0^\tau \exp\left(\int_0^{\tau'} f(\tau'') d\tau''\right) d\tau'$$

Линеаризованное второе уравнение

$$\dot{\rho} = \frac{1}{2}f(\tau) - f(\tau)\theta^2 + h\theta$$

$$\rho(\beta) = \frac{1}{2} \int_0^\beta f(\tau) d\tau + \frac{h^2}{4} \int_0^\beta d\tau \int_0^\tau d\tau' \exp\left(-\int_{\tau'}^\tau f(\tau'') d\tau''\right) + \frac{h^2}{8} \exp\left(-2 \int_0^\beta f(\tau) d\tau\right) \left(\int_0^\beta d\tau \exp\left(\int_0^\tau f(\tau') d\tau'\right)\right)^2$$

Отсюда находим выражение на $\chi_1(\beta) = e^\rho \cos \theta \approx e^{\rho - \frac{\theta^2}{2}}$

$$\chi_1(\beta) = \exp\left(\frac{1}{2} \int_0^\beta f(\tau) d\tau + \frac{h^2}{4} \int_0^\beta d\tau \int_0^\tau d\tau' \exp\left(-\int_{\tau'}^\tau f(\tau'') d\tau''\right)\right)$$

Теперь рассмотрим эволюцию из начального состояния, когда спин направлен противоположно оси z . В данном случае поведение системы разбивается на два этапа: $0 < \tau < \tau_0$ и $\tau_0 < \tau < \beta$. $\tau_0 \sim \frac{1}{f_0} \log\left(\frac{f_0}{h}\right)$ - это время за которое спин успевает перевернуться и принять положение по оси z . Далее будем считать $f_0 = f(0)$. На первом этапе мы можем считать функцию $f(\tau)$ постоянной. Хотя формально данная функция имеет произвольную зависимость от времени, т. к. по ней ведётся интегрирование, но, как мы увидим далее, основной вклад в статсумму дают медленно меняющиеся функции. На втором этапе уравнения уже могут быть линеаризованны, и нужно будет учитывать отличие функции $f(\tau)$ от постоянного значения. Рассмотрим два описанных этапа

1) $0 < \tau < \tau_0$

Решим первое уравнение системы (2.4) с начальным условием $\theta(0) = \frac{\pi}{2}$

$$\cos(2\theta(\tau) + \alpha) = \frac{1 - e^{-2\sqrt{f_0^2 + h^2}\tau} \cot^2 \frac{\alpha}{2}}{1 + e^{-2\sqrt{f_0^2 + h^2}\tau} \cot^2 \frac{\alpha}{2}}, \quad \text{где } \cos \alpha = -\frac{f_0}{\sqrt{f_0^2 + h^2}}$$

В момент времени τ_0 угол θ станет малым

$$\theta(\tau_0) \approx \frac{h}{2f_0}$$

Уравнение на ρ будет иметь вид

$$\dot{\rho} = \frac{\sqrt{f_0^2 + h^2}}{2} \cos(2\theta(\tau) + \alpha)$$

$$\rho(\tau_0) \approx \frac{1}{2} \left(-f_0 \tau_0 - \frac{h^2}{2f_0} \tau_0 + \ln \left(\frac{4f_0^2 + h^2 e^{2\sqrt{f_0^2 + h^2} \tau_0}}{4f_0^2 + h^2} \right) \right) \approx \frac{1}{2} \left(f_0 \tau_0 + \frac{h^2}{2f_0} \tau_0 + \ln \frac{h^2}{4f_0^2} \right)$$

2) $\tau_0 < \tau < \beta$

Линеаризуем уравнение на $\theta(\tau)$ в (4.5) и решаем его с начальным условием $\theta(\tau_0)$

$$\theta(\tau) = \frac{h}{2} \exp \left(- \int_0^\tau f(\tau') d\tau' \right) \int_0^\tau \exp \left(\int_0^{\tau'} f(\tau'') d\tau'' \right) d\tau'$$

Аналогично получим выражение для $\rho(\beta)$, воспользовавшись тем, что $f(\beta) = f(0) = f_0$ и $\theta(\beta) \approx \frac{h}{2f(\beta)}$

$$\rho(\beta) = \frac{1}{2} \int_0^\beta f(\tau) d\tau + \frac{h^2}{4} \int_0^\beta d\tau \int_0^\tau d\tau' \exp \left(- \int_{\tau'}^\tau f(\tau'') d\tau'' \right) + \ln \frac{h}{2f_0}$$

Отсюда найдём $\chi_2 = e^\rho \sin \theta \approx \theta e^\rho$

$$\chi_2(\beta) = \frac{h^2}{4f_0^2} \exp \left(\frac{1}{2} \int_0^\beta f(\tau) d\tau + \frac{h^2}{4} \int_0^\beta d\tau \int_0^\tau d\tau' \exp \left(- \int_{\tau'}^\tau f(\tau'') d\tau'' \right) \right)$$

$Tr(\hat{U})$ даётся просто суммой χ_1 и χ_2

$$Tr(\hat{U}) \approx \exp \left\{ \frac{1}{2} \int_0^\beta f(\tau) d\tau + \frac{h^2}{4f_0^2} + \frac{h^2}{8} \int_0^\beta d\tau \int_0^\tau d\tau' \exp \left(- \int_{\tau'}^\tau f(\tau'') d\tau'' \right) \right\}$$

В данном выражении функция $f(\tau)$ всюду положительна. Решение уравнений (4.5) для отрицательной функции $f(\tau)$ сводится к решению для положительной функции заменой $\theta \rightarrow \frac{\pi}{2} - \theta$, которая приводит к смене знака перед $f(\tau)$ в уравнениях. Учитывая это мы можем записать

$$Tr(\hat{U}) \approx \exp \left\{ \frac{1}{2} \int_0^\beta |f(\tau)| d\tau + \frac{h^2}{4f_0^2} + \frac{h^2}{4} \int_0^\beta d\tau \int_0^\tau d\tau' \exp \left(- \int_{\tau'}^\tau |f(\tau'')| d\tau'' \right) \right\} \quad (4.6)$$

Воспользуемся условием $\beta f(\tau) \gg 1$. Оно позволяет нам разложить выражение под экспонентой в (4.6)

$$\frac{h^2}{8} \int_0^\beta d\tau \int_0^\tau d\tau' \exp \left(- \int_{\tau'}^\tau |f(\tau'')| d\tau'' \right) \approx \int_0^\beta d\tau \left(\frac{h^2}{4|f(\tau)|} - \frac{h^2}{2|f^5(\tau)|} (f'(\tau))^2 \right) \quad (4.7)$$

Также отметим, что данное разложение применимо в случае, если характерная частота изменения функции $f(\tau)$ мала по сравнению с её средним значением, т. е. мала производная $f'(\tau)$. При этом условие $\beta f(\tau) \gg 1$ может быть не выполнено. В итоге получим выражение для $Tr(\hat{U})$

$$Tr(\hat{U}) \approx \exp \left\{ \frac{1}{2} \int_0^\beta \left(|f(\tau)| + \frac{h^2}{2|f(\tau)|} - \frac{h^2}{|f^5(\tau)|} (f'(\tau))^2 \right) d\tau + \frac{h^2}{4f_0^2} \right\} \quad (4.8)$$

4.1.2. Малые функции $f(\tau)$

Рассмотрим такие функции $f(\tau)$, которые много меньше поля h на всём промежутке $[0, \beta]$. Сделаем замену переменных $\theta \rightarrow \frac{\pi}{4} - \theta$. Начальные условия выберем как и ранее (4.4), тогда $Tr(\hat{U})$ будет даваться суммой $\chi_1 = e^{\rho_1} \cos \theta_1$ и $\chi_2 = e^{\rho_2} \sin \theta_2$, как в пункте 4.1.1

$$\begin{cases} \dot{\theta} = -\frac{1}{2} (f(\tau) \cos 2\theta + h \sin 2\theta) \\ \dot{\rho} = \frac{1}{2} (f(\tau) \sin 2\theta - h \cos 2\theta) \end{cases} \quad (4.9)$$

Данная задача была решена в работе [8]

$$Tr(\hat{U}) \approx \exp \left\{ \frac{1}{2} \int_0^\beta h d\tau + \frac{f_0^2}{4h^2} + \frac{1}{8} \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' f(\tau) f(\tau') \exp(-h|\tau - \tau'|) \right\} \quad (4.10)$$

Разложим последнее слагаемое под экспонентой в выражении (4.10) в ряд Фурье

$$\frac{1}{8} \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' f(\tau) f(\tau') \exp(-h|\tau - \tau'|) = \frac{\beta^2 h}{2} \sum_{\omega} \frac{1}{h^2 + \omega^2} f(\omega) f(-\omega) \quad (4.11)$$

Предполагая, что в статсумму (4.2) основной вклад дают функции, для которых поле h много больше характерной частоты их изменения, получим

$$\frac{\beta^2 h}{2} \sum_{\omega} \frac{1}{h^2 + \omega^2} f(\omega) f(-\omega) \approx \int_0^{\beta} d\tau \left(\frac{f^2(\tau)}{4h} - \frac{1}{4h^3} (f'(\tau))^2 \right) \quad (4.12)$$

Сделанное приближение будет проверено позднее. Подставим полученное приближение в выражение для следа (4.10)

$$\text{Tr}(\hat{U}) \approx \exp \left\{ \frac{1}{2} \int_0^{\beta} \left(h + \frac{f^2(\tau)}{2h} - \frac{1}{2h^3} (f'(\tau))^2 \right) d\tau + \frac{f_0^2}{4h^2} \right\} \quad (4.13)$$

4.1.3. Динамический вклад

Как видно из выражений (4.8) и (4.13) имеется два вклада в эффективный Гамильтониан:

- Статический вклад - не зависящий от производной функции $f(\tau)$;
- Динамический вклад - зависящий от $f'(\tau)$.

Рассмотрим подробнее динамический вклад.

Функция $f(\tau) = \psi(x_i, \tau) + \psi^*(x_i, \tau)$. Перейдём от поля $\psi(x, \tau)$ к коллективной переменной $\phi(x, \tau)$, сделав замену $\psi = \rho \exp(i\phi + i\alpha_x)$, α_x - случайная величина, принимающая случайное значение из равномерного распределения на отрезке $[0, 2\pi]$ на каждом спине. ρ будем считать постоянной ρ_0 , как в выражении (1.5)

$$(f'(\tau))^2 \rightarrow \rho_0^2 \sin^2(\phi + \alpha_x) \left(\frac{d\phi}{d\tau} \right)^2$$

Так как масштаб изменения функции $\phi(x, \tau)$ по координате охватывает большое число спинов $L_\phi \sim \gamma^{-\frac{4}{3}}$ [1], мы можем провести усреднение по этим спинам

- $h \gg f(\tau)$: данный случай реализуется достаточно редко, с вероятностью $\sim \frac{h}{\rho_0}$, в силу малости поля h . Поэтому проводить усреднение можно при условии $hL_\phi \gg 1$ ($\rho_0 \sim 1$)

$$\left\langle \frac{\rho_0^2 \sin^2(\phi + \alpha_x)}{2h^3} \left(\frac{d\phi}{d\tau} \right)^2 \right\rangle_{L_\phi} \sim \frac{h}{\rho_0} \left\langle \frac{\rho_0^2 \sin^2(\phi + \alpha_x)}{2h^3} \left(\frac{d\phi}{d\tau} \right)^2 \right\rangle_{\alpha_x} = \frac{\rho_0}{h^2} \left(\frac{d\phi}{d\tau} \right)^2 \quad (4.14)$$

- $h \ll f(\tau)$; в данном случае усреднение по спинам на длине L_ϕ совпадает с усреднением по случайной переменной α_x , но имеется расхожимость. Однако мы усредняем по тем спинам, на которых значение функции $f(\tau)$ велико. Это даёт нам возможность обрезать интеграл в сингулярных точках, отойдя от них на величину $\sim \frac{h}{\rho_0}$

$$\left\langle \frac{2h^2 \sin^2(\phi + \alpha_x)}{\rho_0^3 |\cos^5(\phi + \alpha_x)|} \left(\frac{d\phi}{d\tau} \right)^2 \right\rangle_{\alpha_x} = C_\phi \frac{\rho_0}{h^2} \left(\frac{d\phi}{d\tau} \right)^2 \quad (4.15)$$

Постоянная $C_\phi \sim 1$.

Видно, что оба случая дают одинаковый вклад в эффективный Гамильтониан. Осталось проверить, использованное в ходе вывода, предположение о малости частоты изменения функции $f(\tau)$, или, что то же самое, функции $\phi(\tau)$. Сделаем это, сравнивая полученную добавку с уже имеющимся кинетическим членом в выражении (1.5). Как обсуждалось ранее, масштаб изменения функции $\phi(x)$ равен L_ϕ . Поэтому, считая $\nabla\phi \sim L_\phi^{-1}$ в (1.5), а $\frac{d\phi}{d\tau} \sim \omega$

$$\frac{L_\phi^{-2}}{\gamma^2} \sim \frac{\omega^2}{h^2} \Rightarrow \omega \sim h\gamma^{\frac{1}{3}} \ll h \quad (4.16)$$

4.1.4. Статический вклад

Как говорилось выше, статический вклад не зависит от производных функции $f(\tau)$. Следовательно, в силу малости частот (4.16), его можно было бы получить при решении уравнений (4.3), считая функцию $f(\tau)$ постоянной и лишь в конце учесть её зависимость от времени. Тогда данные дифференциальные уравнения являются линейными с постоянными коэффициентами, решение которых известно

$$\text{Tr}(\hat{U}) = 2 \cosh \left(\int_0^{\beta} \sqrt{h^2 + f^2(\tau)} d\tau \right) \quad (4.17)$$

Из (4.8) и (4.13) видно, что статические вклады в них являются приближением полученного выражения (4.17) в двух соответствующих пределах $f(\tau) \gg h$ и $f(\tau) \ll h$. Так что мы можем заменить их выражением (4.17) и тогда статический вклад в эффективный Гамильтониан после перехода к переменной ϕ будет равен

$$V(\phi + Qx) = -T \ln \cosh \left(\int_0^{\beta} \sqrt{h^2 + \rho_0^2 \cos(\phi + Qx)} d\tau \right) \quad (4.18)$$

4.1.5. Эффективный Гамильтониан

Обобщая всё, изложенное выше, получаем эффективный Гамильтониан для фазовой переменной ϕ

$$H_{eff}[\phi] = \int dx \left[\frac{\rho_0^2}{\gamma^2} \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 + M_\phi \left(\frac{d\phi}{d\tau} \right)^2 - \sum_i \delta(x - x_i) T \ln \cosh \left(\int_0^\beta \sqrt{h^2 + \rho_0^2 \cos^2(\phi + Qx)} d\tau \right) \right] \quad (4.19)$$

Здесь $M_\phi = C_\phi \frac{\rho_0}{h^2}$, $C_\phi \sim 1$. Выражение (4.19) справедливо в случае $h\gamma^{-\frac{4}{3}} \gg 1$ и $h \ll 1$.

В [1, 2] факт того, что минимумы в области $\gamma \ll T \ll 1$ растут с понижением температуры, был связан с сингулярностью потенциала $V(\phi + Qx)$ при нулевом магнитном поле. Поэтому наличие его в выражении (4.19) говорит о том, что действительно скорее всего существует температура, ограничивающая рост минимумов и зависящая от магнитного поля h . Однако в (4.19) имеется также нетривиальная добавка к кинетической энергии, поэтому сразу ничего нельзя сказать о виде этой зависимости.

Список литературы

- [1] M. V. Feigel'man, L. B. Ioffe, Z. Phys. B - Condensed Matter 51, 237-249 (1983)
- [2] V. S. Dotsenko, M.V. Feigel'man, L. B. Ioffe, SPIN GLASSES AND RELATED PROBLEMS, Sov. Sci. Rev. A. Phys. Vol. 15, 1990, pp. 1-250
- [3] M. V. Feigel'man, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 79, 1095-1107
- [4] В. С. Доценко, УФН, Том 163, № 6
- [5] C. M. Newman, D. L. Stein, J. Phys.: Condens. Matter 15 R1319 (2003)
- [6] Т. И. Федоряева, Комбинаторные алгоритмы, Учебное пособие, Новосибирский Государственный Университет
- [7] A. Lucarelli, The ultrametric tree of states and computation of correlation functions in spin glasses, Università degli studi di Roma "La Sapienza"
- [8] И. В. Протопопов, Квантовые флуктуации в системах квазиклассических джозефсоновских контактов, ДИССЕРТАЦИЯ, Институт Теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН