

Uniwersytet Jagielloński w Krakowie

Wydział Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej



Michał Białończyk

Nierównowagowa dynamika kwantowych układów spinowych w pobliżu punktów krytycznych

Praca doktorska
Dyscyplina: Fizyka

Rozprawa napisana pod kierunkiem dr hab. Bogdana Damskiego

Instytut Fizyki Teoretycznej
Zakład Optyki Atomowej

Kraków 2021

Wydział Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej
Uniwersytet Jagielloński

Oświadczenie

Ja niżej podpisany *Michał Białończyk* (nr indeksu: 1064088), doktorant Wydziału Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej Uniwersytetu Jagiellońskiego oświadczam, że przedłożona przeze mnie rozprawa doktorska pt. „*Nierównowagowa dynamika kwantowych układów spinowych w pobliżu punktów krytycznych*” jest oryginalna i przedstawia wyniki badań wykonanych przeze mnie osobiście, pod kierunkiem dra hab. *Bogdana Damskiego*. Pracę napisałem samodzielnie.

Oświadczam, że moja rozprawa doktorska została opracowana zgodnie z Ustawą o prawie autorskim i prawach pokrewnych z dnia 4 lutego 1994 r. (Dziennik Ustaw 1994 nr 24 poz. 83 wraz z późniejszymi zmianami).

Jestem świadom, że niezgodność niniejszego oświadczenia z prawdą ujawniona w dowolnym czasie, niezależnie od skutków prawnych wynikających z ww. ustawy, może spowodować unieważnienie stopnia nabytego na podstawie tej rozprawy.

Kraków, dnia

.....
podpis doktoranta

Podziękowania

Dziękuję mojemu Promotorowi, dr. hab. Bogdanowi Damskiemu, za sugestie tematyki, wsparcie merytoryczne podczas pisania pracy oraz cierpliwość w kształtowaniu mojego warsztatu pracy naukowej.

Pragnę podziękować mojej Rodzinie - mojej Mamie, mojej Babci i mojemu śp. Dziadkowi za nieustanne wspieranie mnie w moich wyborach i działaniach oraz stworzenie mi możliwości rozwoju na wielu płaszczyznach. Bez nich rozwijanie moich zainteresowań związanych z fizyką i dojście do tego etapu nie byłoby możliwe.

Mojej Narzeczonej, Agnieszce Proszewskiej, dziękuję za nieustrudzone motywowanie mnie do wyznaczania coraz ambitniejszych celów i budowanie wiary w możliwość ich realizacji. Dziękuję Jej również za wielogodzinne dyskusje i ukazanie innego spojrzenia na wiele problemów, co znacznie pogłębiło moje podejście do uprawiania nauki.

„Everything should be made as simple as possible, but no simpler”

Albert Einstein

Spis treści

Wstęp	8
1 Wprowadzenie do teorii kwantowych przejść fazowych i mechanizmu Kibbła-Zurka	10
1.1 Kwantowe przejścia fazowe w równowadze	10
1.2 Nierównowagowe kwantowe przejścia fazowe i mechanizm Kibbła-Zurka	14
2 Całkowalne sieci spinowe	18
2.1 Całkowalne sieci spinowe z okresowymi warunkami brzegowymi	19
2.1.1 Przypadek równowagowy	19
2.1.2 Dynamika nierównowagowa	23
2.2 Sieci spinowe z otwartymi warunkami brzegowymi	25
2.2.1 Przypadek stacjonarny	25
2.2.2 Dynamika nierównowagowa	28
2.3 Rozszerzony model XY	29
3 Przejścia zatrzymane w punkcie krytycznym - „połowa” mechanizmu Kibbła-Zurka	32
3.1 Ewolucja magnetyzacji poprzecznej	33
3.2 Dynamika echa Loschmidta	38
3.3 Podsumowanie	43
4 Dynamika magnetyzacji podłużnej i łamanie symetrii	44
4.1 Wprowadzenie	45
4.1.1 Przypadek dwóch spinów	47
4.2 Okresowe warunki brzegowe	48
4.3 Otwarte warunki brzegowe	51
4.4 Przejścia doprowadzone do punktu krytycznego	54
4.5 Podsumowanie	57
5 Wyznaczanie punktu krytycznego za pomocą dwustronnych przejść nierównowagowych	60
5.1 Metoda	60
5.2 Rozszerzony model XY	63
5.3 Model Isinga	67
5.4 Podsumowanie	68

Wstęp

Kwantowe przejścia fazowe są zjawiskiem, które polega na zmianie własności stanu podstawowego układu fizycznego wskutek zmiany zewnętrznego parametru, takiego jak np. pole magnetyczne. Fazy są oddzielone tzw. punktem krytycznym. Zainteresowanie kwantowymi przejściami fazowymi wzrosło w ostatnim czasie, głównie ze względu na rozwój technologii kwantowych i pojawienie się możliwości eksperymentalnej kontroli coraz większych układów. Duży wysiłek badawczy jest wkładany w zrozumienie dynamiki kwantowych przejść fazowych, kiedy zewnętrzny parametr jest dynamicznie zmieniany w czasie. Możliwość ilościowego opisu procesów istotnych dla tych zjawisk może mieć znaczenie w ocenie dokładności działania adiabatycznych komputerów kwantowych - technologii, która w ostatnich latach dynamicznie się rozwija. Jednakże, precyzyjny opis układów konstruowanych eksperymentalnie jest zazwyczaj bardzo trudny z uwagi na stopień ich skomplikowania. Dlatego w teorii kwantowych przejść fazowych rozważa się rodziny modeli, które mają analityczne rozwiązanie - wnioski uzyskane z ich analizy można rozszerzyć na bardziej złożone układy z wykorzystaniem własności uniwersalności.

Niniejsza praca ma za zadanie w konkretny i zwarty sposób przedstawić użyteczne metody analizy dynamiki kwantowych przejść fazowych w wielociałowych układach spinowych, które mają analityczne rozwiązanie. Pierwsze dwa rozdziały stanowią ogólny wstęp teoretyczny przedstawiający współczesny stan wiedzy w dziedzinie dynamiki kwantowych przejść fazowych oraz sieci spinowych, zaś kolejne trzy zawierają oryginalne wyniki Autora. Skupiają się one na różnych obserwablach: magnetyzacji poprzecznej (w stosunku do kierunku oddziaływania spinów), podłużnej (wzdłuż kierunku oddziaływania spinów) oraz podatności magnetycznej. Analiza ewolucji każdej z rozpatrywanych obserwabl pozwala uchwycić inne aspekty dynamiki oraz pokazuje różnego typu problemy techniczne, zarówno od strony obliczeń analitycznych, jak i numerycznych.

Praca składa się z pięciu rozdziałów. Rozdział pierwszy przedstawia kluczowe koncepcje fizyczne istotne dla zrozumienia wyników przedstawionych w dalszych rozdziałach. Zawiera definicję kwantowego przejścia fazowego w równowadze, przykłady układów wielociałowych wykazujących takie przejścia oraz wprowadzenie narzędzi potrzebnych do ich analizy, takich jak wykładniki krytyczne, pojęcie uniwersalności i mechanizm Kibbla-Zurka. Rozdział ten ma charakter jakościowy (bez przytaczania szczegółów technicznych) oraz zawiera zestawienie odniesień do pozycji bibliograficznych, które były i są istotne dla rozwoju tej dziedziny fizyki.

W przeciwieństwie do rozdziału pierwszego, rozdział drugi ma charakter techniczny i zawiera opisaną krok po kroku procedurę diagonalizacji kwantowego modelu XY oraz numerycznego wyznaczania dynamiki nierównowagowej tego modelu. Wyniki z tego rozdziału mogą być wprost zastosowane do modeli rozważanych w dalszych rozdziałach, takich jak model Isinga w polu poprzecznym czy rozszerzony model XY. Szczególny nacisk położono na zagadnienia często pomijane, takie jak problem parzystości stanów własnych czy przerwę energetyczną związaną z łamaniem symetrii. Rozważane są układy o skończonym rozmiarze.

Pozostałe rozdziały bazują na następującym cyklu publikacji Autora:

- M. Białończyk and B. Damski. *One-half of the Kibble-Zurek quench followed by free evolution*. J.

Stat. Mech., 2018:073105, 2018.

- M. Białończyk and B. Damski. *Dynamics of longitudinal magnetization in transverse-field quantum Ising model: from symmetry-breaking gap to Kibble-Zurek mechanism*. J. Stat. Mech., 2020:013108, 2020.
- M. Białończyk and B. Damski. *Locating quantum critical points with Kibble-Zurek quenches*. Phys. Rev. B, 102:134302, 2020.

Publikacje powyższe, a zarazem rozdziały niniejszej pracy, są ze sobą powiązane i uzupełniają się wzajemnie. W rozdziałach trzecim oraz czwartym analizowany jest podobny schemat dynamiki, w którym nierównowagowe przejście jest zatrzymane a następnie układ ewoluuje swobodnie. Dalej prezentowane są odmienne podejścia do analizy ewolucji swobodnej, w zależności od informacji które chcemy uzyskać. W rozdziale trzecim analizowana jest magnetyzacja poprzeczna - jej periodyczna struktura stanowi swoisty „odcisk” dynamiki nierównowagowej, na podstawie którego można wyciągnąć wiele wniosków dotyczących szczegółów przejścia. Rozdział czwarty natomiast zawiera drobiazgową analizę magnetyzacji podłużnej, co z kolei daje możliwość zbadania zjawiska łamania symetrii.

Schematy przejścia w opisanych powyżej rozdziałach różnią się kierunkiem zmian pola; w rozdziale trzecim rozważane są przejścia gdy zewnętrzne pole maleje, zaś w rozdziale czwartym gdy rośnie. Rozdział piąty łączy idee przedstawione w poprzednich rozdziałach. Zaprezentowano w nim metodę, pozwalającą na wyznaczanie punktu krytycznego z wykorzystaniem nierównowagowych przejść dwustronnych oraz podano sposób oceny dokładności wyznaczenia punktu krytycznego za pomocą teorii Kibbla-Zurka.

Pracę zamyka podsumowanie, w którym przedstawiono możliwe kierunki rozszerzenia niniejszej rozprawy oraz informacje o dalszych badaniach Autora.

Rozdział 1

Wprowadzenie do teorii kwantowych przejść fazowych i mechanizmu Kibbla-Zurka

Przejścia fazowe w fizyce wiążą się z drastyczną zmianą własności układu przy zmianie fazy, wywołanej zazwyczaj zmianą wartości pewnego parametru. W przypadku znanych z doświadczenia codziennego klasycznych przejść fazowych, parametrem tym jest temperatura i przejście fazowe jest związane z nieanalitycznością energii swobodnej. Może to na przykład manifestować się poprzez nieciągłość ciepła właściwego w punkcie krytycznym, co powoduje, że układ jest tam bardzo czuły w tym sensie, że mała zmiana temperatury w gwałtowny sposób może zmienić jego własności. W ogólności nieanalityczność energii swobodnej może mieć bardziej złożoną postać, jak w przypadku paradygmatycznego przejścia w ciekłym helu [1].

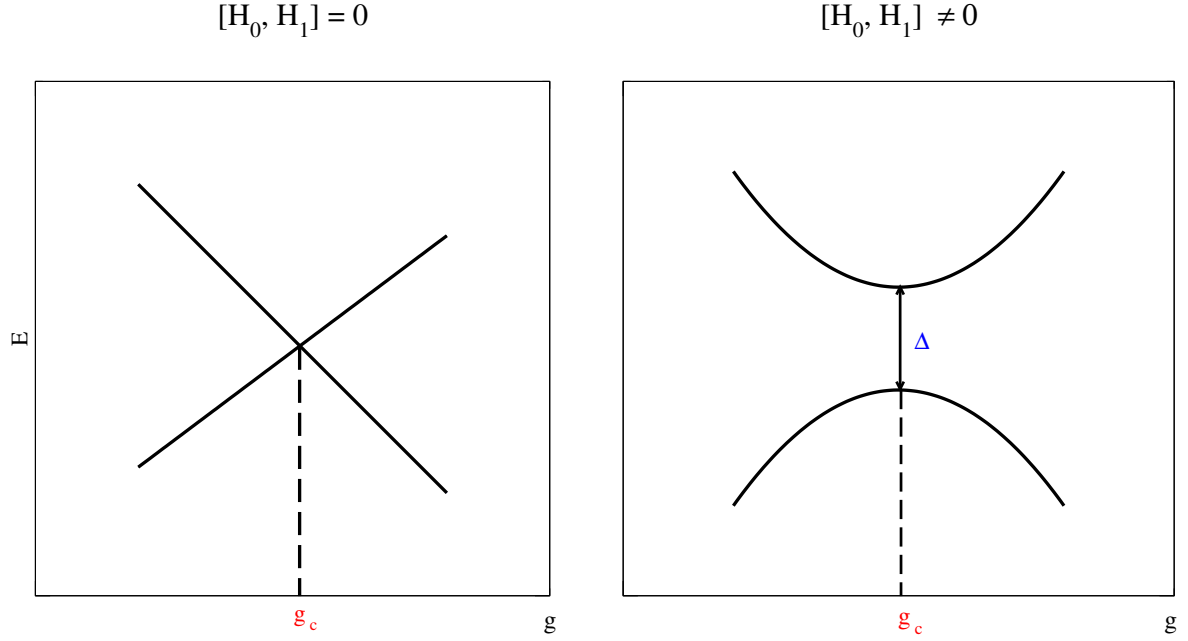
Z teoretycznego punktu widzenia, kwantowe przejścia fazowe zachodzą w temperaturze zera bezwzględnego, choć mogą być obserwowane w temperaturze bliskiej zera bezwzględnego. Zazwyczaj są indukowane zmianą parametru, takiego jak np. zewnętrzne pole magnetyczne. Przy zmianie faz następuje zasadnicza zmiana własności stanu podstawowego (np. paramagnetyk-ferromagnetyk, izolator-stan nadciekły). W punkcie krytycznym energia stanu podstawowego jest nieanalityczna.

Celem tego rozdziału jest przedstawienie, w możliwie zwarty i przystępny sposób, głównych idei które będą istotne w pracy, z naciskiem na uniwersalność obserwowaną w układach w pobliżu punktu krytycznego: zarówno w stanie podstawowym, jak i podczas dynamiki nierównowagowej. W podrozdziale 1.1 przedstawiamy przykłady układów wykazujących kwantowe przejście fazowe oraz opisujemy podstawowe koncepcje dotyczące przejść fazowych w stanie podstawowym (w równowadze). Przywołamy definicje wykładników krytycznych oraz związki między nimi. W podrozdziale 1.2 zajmiemy się dynamiką nierównowagową, która ma miejsce, gdy zmiana parametru wywołującego przejście fazowe odbywa się w skończonym czasie. Przedstawimy podstawowe wnioski z tzw. mechanizmu Kibbla-Zurka, który pozwala opisać nierównowagowe własności układu przy pomocy równowagowych wykładników krytycznych.

1.1 Kwantowe przejścia fazowe w równowadze

Typowa sytuacja, w której zachodzi kwantowe przejście fazowe, ma miejsce gdy w układzie istnieje współzawodnictwo między różnymi typami oddziaływań. Hamiltonian zazwyczaj można wtedy sprowadzić do postaci [2]:

$$H = H_0 + g H_1, \tag{1.1}$$



Rysunek 1.1: Schematyczna ilustracja struktury najniższych poziomów energetycznych Hamiltonianu (1.1) w zależności od relacji komutacji H_0 i H_1 . Po lewej przypadek *krzyżowania poziomów*, który może zachodzić dla układu o skończonym rozmiarze. Po prawej przypadek *anty-krzyżowania* poziomów, w którym nieanalityczność energii stanu podstawowego pojawia się w granicy termodynamicznej, gdy przerwa energetyczna Δ znika. Szybkość jej zaniku wraz z odległością od punktu krytycznego g_c jest ważnym wyznacznikiem, który może być użyty w celu określenia klasy uniwersalności, do której należy dany model.

gdzie g jest parametrem indukującym przejście fazowe. Możliwe są tu dwa przypadki: (i) operatory H_0 i H_1 komutują, oraz (ii) H_0 oraz H_1 nie komutują. W pierwszym przypadku istnieje możliwość, że dojdzie do *krzyżowania poziomów*, gdzie stan podstawowy przechodzi w stan wzbudzony po przekroczeniu punktu krytycznego $g = g_c$ (rysunek 1.1). Bardziej powszechny, i dający bogatsze możliwości jest przypadek, gdy $[H_0, H_1] \neq 0$. Przerwa energetyczna w punkcie krytycznym (oznaczona na rysunku 1.1 przez Δ), która w układzie o skończonym rozmiarze jest niezerowa, znika w granicy termodynamicznej. Mogą wtedy pojawić się różnego rodzaju nieanalityczności w energii stanu podstawowego $E_0(g)$. W niniejszej pracy będziemy zajmować się jedynie przejściami z tej drugiej grupy (sytuacja z prawego wykresu rysunku 1.1). Aby uczynić dalszą dyskusję bardziej konkretną, poniżej podajemy przykłady układów wykazujących tego typu kwantowe przejście fazowe:

- Kwantowy model Isinga w polu poprzecznym jest zadany Hamiltonianem:

$$H = - \sum_i \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x - g \sum_i \sigma_i^z, \quad (1.2)$$

gdzie σ_i^x oraz σ_i^z są macierzami Pauliego. Stany własne σ_i^x i σ_i^z będziemy oznaczać odpowiednio $|\rightarrow\rangle$, $|\leftarrow\rangle$ oraz $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$. Hamiltonian modeluje układ spinów na jednowymiarowej sieci, które oddziałują ze sobą w kierunku x oraz z zewnętrznym polem g w kierunku z . Przejście fazowe jest kontrolowane poprzez parametr g . Dla $g \gg g_c$ dominuje człon $\sum_i \sigma_i^z$ i stan podstawowy można schematycznie zapisać w postaci $|\uparrow\uparrow\ldots\uparrow\rangle$ - układ jest w fazie paramagnetycznej. Z kolei dla $g \rightarrow 0$ dominuje człon oddziaływania spinów i układ jest w jednym ze stanów $|\rightarrow\rightarrow\ldots\rightarrow\rangle$ lub $|\leftarrow\leftarrow\ldots\leftarrow\rangle$. Fazy są oddzielone punktem krytycznym $g_c = 1$. Jest to sztandarowy model rozważany w teorii przejść fazowych, szeroko analizowany również w niniejszej pracy. Jego kluczową

zaletą jest fakt, że za jego pomocą można badać bardzo szeroki wachlarz zjawisk związanych z kwantowymi przejściami fazowymi, przy jednoczesnej możliwości analitycznego wyznaczenia energii oraz stanów własnych Hamiltonianu.

- Trójwymiarowy model Bosego-Hubbarda:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (a_i^\dagger a_j + a_j^\dagger a_i) + \frac{1}{2} \sum_i n_i(n_i - 1), \quad (1.3)$$

gdzie $\langle i,j \rangle$ oznacza parę najbliższych sąsiadów na trójwymiarowej sieci, zaś a_i jest operatorem anihilacji bozonów w i -tym oczku:

$$[a_i, a_j] = 0, \quad [a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}, \quad n_i = a_i^\dagger a_i. \quad (1.4)$$

Dla $J < J_c$ dominuje człon oddziaływania $\frac{1}{2} \sum_i n_i(n_i - 1)$ i układ jest w fazie izolatora Motta, zaś dla $J > J_c$ dominuje człon tunelowania bozonów $-J \sum_{\langle i,j \rangle} (a_i^\dagger a_j + a_j^\dagger a_i)$ i układ jest w fazie nadciekłej [3, 4]. W przeciwieństwie do modelu Isinga, w tym przypadku nie istnieje analityczny sposób znalezienia poziomów energetycznych, stanów własnych i określenia dokładnej lokalizacji punktu krytycznego - w celu określenia przybliżonej wartości J_c stosowane są różnego rodzaju techniki numeryczne, które prowadzą do $J_c \approx 0.03$ [5].

Aby scharakteryzować ilościowo własności przejścia fazowego, wprowadza się wykładniki krytyczne, które określają jak różne wielkości zależą od odległości od punktu krytycznego (w bliskim jego sąsiedztwie):

- Skalowanie przerwy energetycznej jest dane przez iloczyn wykładników $z\nu$:

$$\Delta \sim |g - g_c|^{z\nu}. \quad (1.5)$$

- Skalowanie długości korelacji jest dane przez wykładnik ν :

$$\xi \sim \frac{1}{|g - g_c|^\nu}. \quad (1.6)$$

Dla typowego układu spinowego długość korelacji jest określona poprzez zanik dwupunktowych funkcji korelacji $C(r)$:

$$C(r) \sim \frac{1}{r^n} \exp\left(-\frac{r}{\xi}\right), \quad r \rightarrow \infty, \quad n > 0. \quad (1.7)$$

Funkcja korelacji określa jak mocno skorelowane są obiekty w odległych punktach układu. Jej dokładna postać zależy od operatorów użytych do definicji $C(r)$. Przykładowo, w modelu Isinga (1.2) można rozważyć [6, 7]:

$$C(r) = \langle \sigma_i^x \sigma_{i+r}^x \rangle - \langle \sigma_i^x \rangle \langle \sigma_{i+r}^x \rangle = \frac{1}{2\pi r^2} \frac{g^2}{(1 - g^2)^{7/4}} e^{-2r|\ln g|}, \quad r \gg 1, \quad g \neq 1. \quad (1.8)$$

W punkcie krytycznym zależność korelacji od odległości między spinami jest następująca [7]:

$$C(r) \sim \frac{1}{r^{1/4}} \quad (1.9)$$

Z powyższych wzorów jest widoczne, że poza punktem krytycznym korelacje zanikają wykładniczo jak we wzorze (1.7), zaś w punkcie krytycznym (gdzie długość korelacji staje się nieskończona) zanik ma algebraiczny charakter, zapisywany zazwyczaj w następujący sposób [8]:

$$C(r) \sim \frac{1}{r^{d+z-2+\eta}}, \quad (1.10)$$

co definiuje wykładnik η .

- Łącząc równania (1.5) oraz (1.6) otrzymuje się definicję wykładnika z :

$$\Delta \sim \left(\frac{1}{\xi}\right)^z. \quad (1.11)$$

Jeżeli poziomy energetyczne układu mogą być opisane za pomocą wzbudzeń kwazicząstek o określonym pędzie k , powyższa relacja ma interpretację relacji dyspersji: analiza wymiarowa pokazuje, że skala pędów jest dana przez odwrotność długości korelacji, zaś przerwa energetyczna jest proporcjonalna do częstości:

$$\omega \sim k^z. \quad (1.12)$$

- Nieanalityczność gęstości energii stanu podstawowego zwyczajowo jest określana przez wykładnik $2 - \alpha$:

$$E_0 \sim |g - g_c|^{2-\alpha}. \quad (1.13)$$

Powyżej przytoczyliśmy najważniejsze wykładniki krytyczne, które będziemy wykorzystywać w niniejszej pracy. Ważną cechą układów w pobliżu punktu krytycznego jest to, że skalowanie wielu wielkości jest *uniwersalne*, tzn. niezależne od szczegółów mikroskopowych danego układu i określone przez wykładniki krytyczne. Zestaw wykładników krytycznych określa *klasę uniwersalności* - modele, które są w tej samej klasie uniwersalności wykazują podobne właściwości fizyczne w pobliżu punktów krytycznych. Od konkretnego układu zależą jedynie stałe proporcjonalności w równaniach (1.5), (1.6). Uniwersalność jest hipotezą, która ma ugruntowane podstawy opierające się na technikach grupy renormalizacji [9, 10, 11]. Używając tych technik można pokazać wiele związków pomiędzy wykładnikami krytycznymi. W rozdziale 5 skorzystamy z tzw. relacji hiperskalowania [8, 12]:

$$\alpha = 2 - \nu(d + z), \quad (1.14)$$

gdzie d jest wymiarem przestrzeni, w której określony jest układ.

W tym miejscu warto poczynić dwie uwagi:

1. Relacje skalowania takie jak (1.13) zawierają jedynie informacje o algebraicznej rozbieżności w punkcie krytycznym. Jak zobaczymy w rozdziale 5, możliwa jest sytuacja, że rozbieżność jest innego typu, np. logarytmiczna (jak to ma miejsce w przypadku drugiej pochodnej gęstości energii stanu podstawowego w modelu Isinga).
2. Relacje (1.5), (1.6), (1.8), (1.13) zawierają założenie, że układ jest nieskończony. Dana obserwabla O , która w nieskończonym układzie jest rozbieżna w punkcie krytycznym, w skończonym układzie ma maksimum dla pewnego $g = g_{max}(O)$ w pobliżu punktu krytycznego (w ogólności jest to ekstremum, lecz dla ustalenia uwagi zakładamy, że jest to maksimum). W punkcie krytycznym długość korelacji jest porównywalna z rozmiarem układu (zakładając, że stała sieci jest równa 1). Zajmuje się tym tzw. teoria skalowania skończonego rozmiaru [13, 14]. Wynika z niej m.in., że

$$|g_{max}(O) - g_c| \sim N^{-\phi(O)}, \quad (1.15)$$

gdzie $\phi(O)$ jest całkowitą wielokrotnością $1/\nu$, zaś N oznacza rozmiar układu. Ponieważ ϕ zależy od konkretnej wielkości O , teoretycznie punkt krytyczny nie istnieje w układzie o skończonym rozmiarze. Można jednak zdefiniować efektywny punkt krytyczny poprzez ekstremum obserwabli rozbieżnych w granicy $N \rightarrow \infty$. Takie rozumienie punktu krytycznego jest powszechnie stosowane zarówno w symulacjach numerycznych, jak i eksperymentach. Aby efektywny punkt krytyczny dobrze odzwierciedlał zachowanie układu przewidywane teoretycznie (w szczególności relacje skalowania typu (1.5)), rozmiar układu powinien być odpowiednio duży. Stanowi to poważną trudność w symulacjach numerycznych modeli, które nie posiadają analitycznego rozwiązania (takich

jak model Bosego-Hubbarda). Dlatego w badaniach nad kwantowymi przejściami fazowymi dużą rolę odgrywają modele całkowalne, takie jak jednowymiarowy model Isinga - dzięki koncepcji klas uniwersalności pozwalają przewidywać zachowanie bardziej skomplikowanych układów, które są realizowane eksperymentalnie.

1.2 Nierównowagowe kwantowe przejścia fazowe i mechanizm Kibbla-Zurka

Z dynamiką nierównowagową układu mamy do czynienia, gdy parametr wywołujący przejście fazowe jest stopniowo zmieniany. W przypadku klasycznych przejść fazowych parametrem tym jest zazwyczaj temperatura lub ciśnienie [1]. Nierównowagowe przejścia przez punkt krytyczny mogą prowadzić do bardzo ciekawych zjawisk, takich jak np. formacja defektów topologicznych [15]. W dalszej części pracy koncentrujemy się na nierównowagowych przejściach kwantowych - będziemy analizować układ poddany stopniowej zmianie parametru g .

Przypuśćmy, że chcemy przeprowadzić układ wykazujący anty-krzyżowanie poziomów (jak na prawym wykresie rysunku 1.1) przez punkt krytyczny g_c . Układ na początku jest przygotowany w stanie podstawowym daleko od punktu krytycznego. Gdy przerwa energetyczna Δ jest duża, wzbudzenia są mało prawdopodobne i układ pozostaje w stanie bardzo bliskim stanu podstawowego - mówimy że przejście jest adiabatyczne. W miarę zbliżania się do punktu krytycznego (gdy g rośnie), przerwa energetyczna maleje, prawdopodobieństwo wzbudzeń jest coraz większe i utrzymanie adiabatyczności wymaga wolniejszych zmian parametru g . Można na to też patrzeć wprowadzając pojęcie *czasu reakcji* w kwantowych przejściach fazowych τ , który rośnie odwrotnie proporcjonalnie do przerwy energetycznej:

$$\tau \sim \frac{1}{\Delta}. \quad (1.16)$$

W tym miejscu zasadna jest uwaga odnośnie terminologii. We wcześniejszej literaturze (patrz np. [16]) τ często jest określane jako *czas relaksacji*. Termin ten sugeruje jednak związek z czasem potrzebnym do osiągnięcia stanu równowagi termodynamicznej, co nie jest adekwatne w analizowanych w niniejszej pracy sytuacjach. W dalszej części wyводу τ należy rozumieć jako czas, który układ potrzebuje, aby dostosować się zmian zewnętrznego pola - stąd termin *czas reakcji*. Warto zaznaczyć, że do tej pory przedstawione rozważania nie wykraczają poza standardowe ujęcie twierdzenia adiabatycznego [17]. Aby efektywnie przybliżać skomplikowaną dynamikę nierównowagową w pobliżu punktu krytycznego potrzebne są narzędzia teoretyczne wykraczające poza twierdzenie adiabatyczne - gdy układ zbliża się do punktu krytycznego czas reakcji rośnie i odpowiedź układu jest opóźniona w stosunku do zmian parametru g . Prowadzi to do koncepcji tzw. *przybliżenia adiabatyczno-impulsowego*, które w kontekście dynamiki układów kwantowych zostało po raz pierwszy wprowadzone w [18]. Koncepcja została później rozwinięta m.in w [16, 19]. Przybliżenie to zakłada, że ewolucja dzieli się na trzy etapy. Poniżej, przez $|g(t)\rangle$ oznaczamy stan podstawowy Hamiltonianu $H[g(t)]$ oraz zakładamy, że wartość pola g wzrasta.

1. Zakładamy, że stan początkowy układu jest stanem podstawowym. W pierwszym etapie ewolucja jest adiabatyczna, układ pozostaje w stanie podstawowym, czyli jego funkcja falowa spełnia $|\psi(t)\rangle = e^{i\varphi(t)} |g(t)\rangle$, gdzie $\varphi(t)$ jest fazą, daną przez jego energię:

$$\varphi(t) = - \int_{t_0}^t E_0(g(t)) dt. \quad (1.17)$$

Etap ten trwa do momentu, gdy parametr g spełnia warunek $g < g_c - \hat{g}$, tzn. gdy układ znajduje się w pewnej odległości $\hat{g}$ od anty-skrzyżowania poziomów (sprecyzowaniem $\hat{g}$ zajmiemy się później).

2. W drugim etapie zachodzi impulsowa ewolucja dookoła punktu krytycznego, tzn. dla $|g - g_c| < \hat{g}$. Układ pozostaje w stanie „zamrożonym” z końca pierwszego etapu, jego stan może uzyskać tylko dodatkową fazę $\lambda(t)$:

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\lambda(t)} |g_c - \hat{g}\rangle. \quad (1.18)$$

Intuicyjnie, czas reakcji τ układu w tym przedziale wartości g jest tak duży, że układ nie nadąża za zmianami parametru.

3. W trzecim etapie, dla $g > g_c + \hat{g}$ ewolucja jest ponownie adiabatyczna. Układ nie jest w stanie podstawowym, ale nie pojawiają się dodatkowe wzbudzenia - wartość $|\langle\psi(t)|g(t)\rangle|$ jest stała.

Aby określić wartość parametru, dla której zachodzi przejście od ewolucji adiabatycznej do impulsowej, rozważmy szczególną sytuację, gdy parametr dany jest wzorem:

$$g(t) = g_c + \frac{t}{\tau_Q}. \quad (1.19)$$

Parametr $\tau_Q > 0$ jest nazywany czasem przejścia i odpowiada za jego szybkość. Jeżeli τ_Q jest większe, przejście jest wolniejsze i ewolucja adiabatyczna trwa dłużej (tzn. $\hat{g}$ jest mniejsze).

W tak określonej ewolucji występują dwie skale czasowe, zależne od aktualnej wartości parametru $g(t)$:

1. Czas reakcji $\tau \sim 1/\Delta[g(t)]$.
2. Skala czasowa na jakiej wartość pola zbliża się do punktu krytycznego:

$$\tilde{\tau} = \frac{g(t) - g_c}{\frac{d}{dt}[g(t) - g_c]}. \quad (1.20)$$

Skala czasowa $\tilde{\tau}$ zapisana w powyższej postaci jest wygodna do obliczeń. Aby wyjaśnić sens fizyczny $\tilde{\tau}$ zauważmy, że można ją również zapisać w postaci:

$$\tilde{\tau} \sim \frac{\Delta[g(t)]}{\frac{d}{dt}\Delta[g(t)]}. \quad (1.21)$$

Zatem $\tilde{\tau}$ jest skalą czasową, na jakiej zmienia się najważniejszy parametr układu, odpowiadający za dynamikę: równowagowa przerwa energetyczna. Podczas ewolucji adiabatycznej czas reakcji jest mały, zaś $\tilde{\tau}$ jest duże (układ znajduje się daleko od punktu krytycznego). Z kolei w obszarze impulsowym czas reakcji jest duży, zaś $\tilde{\tau}$ jest mały, gdyż układ znajduje się blisko punktu krytycznego. Zmiana zachowania układu z adiabatycznej na impulsową następuje, gdy te dwie skale czasowe stają się porównywalne:

$$\frac{1}{\Delta(g_c \pm \hat{g})} \sim \frac{g(t) - g_c}{\frac{d}{dt}(g(t) - g_c)} \Big|_{g=g_c \pm \hat{g}}. \quad (1.22)$$

Podstawiając relacje skalowania (1.5) oraz (1.19) otrzymujemy:

$$\hat{g} \sim \tau_Q^{-\frac{1}{1+z\nu}}. \quad (1.23)$$

Jest to wyrażenie na nierównowagową skalę parametru przejścia fazowego. Korzystając z niego można otrzymać nierównowagową skalę czasową oraz nierównowagową długość korelacji:

$$\hat{t} = \tau_Q \hat{g} \sim \tau_Q^{\frac{z\nu}{1+z\nu}}, \quad (1.24)$$

$$\hat{\xi} = \xi(\hat{g}) \sim \tau_Q^{\frac{\nu}{1+z\nu}}. \quad (1.25)$$

Przybliżenie adiabatyczno-impulsowe oraz relacje (1.23), (1.24), (1.25) stanowią podstawowe wyniki tzw. kwantowej teorii Kibbla-Zurka (lub kwantowego mechanizmu Kibbla-Zurka), który pierwotnie pojawił się w kosmologii [20] i potem znalazł swoje zastosowanie w fizyce fazy skondensowanej, głównie dzięki pracom W.H. Zurka [15]. Oryginalnie, mechanizm ten został zaproponowany w kontekście formacji wirów (defektów topologicznych) w nadciekłym helu w klasycznym (tzn. inicjowanym zmianą temperatury) przejściu fazowym. Formacja defektów topologicznych w kwantowym przejściu fazowym została po raz pierwszy kompletnie opisana w [21]. Jest ona związana z powstawaniem domen o przeciwnych orientacjach spinów po nierównowagowym przejściu z fazy paramagnetycznej do ferromagnetycznej. Aby pokrótce wyjaśnić ideę przypomnijmy, że w modelu Isinga dla $g = 0$ stan podstawowy jest dwukrotnie zdegenerowany (w granicy termodynamicznej degeneracja występuje w całej fazie ferromagnetycznej dla $0 \leq g < 1$). Po przejściu idealnie adiabatycznym do $g = 0$ układ znalazłby się w superpozycji stanów $|\leftarrow\leftarrow \dots \leftarrow\rangle$ lub $|\rightarrow\rightarrow \dots \rightarrow\rangle$. Po przejściu nierównowagowym do fazy ferromagnetycznej stan układu można schematycznie przedstawić jako superpozycję stanów o naprzemiennych sekwencjach domen:

$$|\dots \rightarrow\rightarrow\rightarrow\leftarrow\leftarrow\rightarrow\rightarrow\leftarrow\leftarrow\leftarrow \dots\rangle. \quad (1.26)$$

Mechanizm Kibbla-Zurka przewiduje, że średni rozmiar domen skaluje się zgodnie z nierównowagową długością korelacji $\hat{\xi}$, co zostało ściśle potwierdzone w [21].

Zaznaczamy, że powyżej opisaliśmy najbardziej podstawową wersję przybliżenia adiabatyczno-impulsowego, która już w tej formie daje bardzo dobre przewidywania. W literaturze można znaleźć rozwinięcia tej koncepcji [22]. Odstępstwa od ewolucji adiabatycznej można systematycznie analizować za pomocą tzw. adiabatycznego rachunku zaburzeń [23, 24].

Wprowadzenie do mechanizmu Kibbla-Zurka kończymy kilkoma istotnymi uwagami:

1. Należy pamiętać, że podział na etapy: adiabatyczny i impulsowy jest konstrukcją teoretyczną, użytą w celu wyprowadzenia relacji skalowania i pozwalającą uzyskać pewne przewidywania ilościowe (patrz uwaga 4). W rzeczywistości nie istnieje ostra granica między tymi etapami (a zatem precyzyjnie określona wartość $\hat{g}$). Relacje (1.23), (1.24) i (1.25) dają informację o skalowaniu z szybkością przejścia, więc mają wartość porównawczą (pomiędzy różnymi układami i różnymi czasami przejścia).
2. Stałe ukryte w relacjach (1.23), (1.24), (1.25) mogą różnić się w zależności od tego, po której stronie punktu krytycznego badamy dynamikę (tzn. przed, czy po tym jak parametr przejścia przekroczy punkt krytyczny). W szczególności punkt krytyczny niekoniecznie znajduje się w środku obszaru impulsowego. Istotą mechanizmu Kibbla-Zurka jest to, że przewiduje jednakowe *skalowanie* $\hat{g}$ po obu stronach punktu krytycznego.
3. Mimo bardzo szczególnej postaci, (1.19) dobrze opisuje również ogólniejsze schematy przejść (patrz rozdział 5), w których parametr przejścia można zlinearyzować w otoczeniu punktu krytycznego. Dlatego przejście (1.19) opisuje szeroką klasę zjawisk. Skalowania (1.23), (1.24), (1.25) mają również taką samą postać dla przejść „w dół”, które można zapisać w postaci:

$$g(t) = g_c - \frac{t}{\tau_Q}. \quad (1.27)$$

W przypadku takich przejść kolejność etapów dynamiki przewidywanej przez przybliżenie adiabatyczno-impulsowe odwraca się. Początkowy etap adiabatyczny (gdy układ jest w chwilowym stanie własnym) trwa do $g(t) = g_c + \hat{g}$, pomiędzy $g_c + \hat{g}$ i $g_c - \hat{g}$ mamy ewolucję impulsową, zaś dla $g < g_c - \hat{g}$ ewolucja zachowuje wartość $|\langle\psi(t)|g(t)\rangle|$. Wielkość $\hat{g}$ skaluje się zgodnie z (1.23).

4. Przybliżenie adiabatyczno-impulsowe daje bardzo wygodny sposób przybliżania wartości dowolnej nierównowagowej obserwacji O w okolicy punktu krytycznego. Mianowicie, korzystając z (1.18), można zapisać:

$$O(g_c) \approx O^{eq}(g \pm \hat{g}) \quad (1.28)$$

Lewa stronę powyższej relacji należy interpretować jako wartość średnią obserwacji obliczaną podczas nierównowagowego przejścia, zaś prawą w stanie podstawowym. Obliczenie stanu podstawowego jest na ogół prostsze niż znalezienie pełnego stanu nierównowagowego, dlatego wykorzystanie (1.28) wraz z (1.23) stanowi wygodny sposób określania skalowania obserwacji nierównowagowych w punkcie krytycznym. Przykłady zastosowania tego typu relacji w praktyce można znaleźć m.in. w rozdziale 5 niniejszej pracy.

5. Stosowalność teorii Kibbla-Zurka w układach o skończonym rozmiarze jest zależna od relacji nierównowagowej długości korelacji $\hat{\xi}$ do rozmiaru układu N . Standardowo zakłada się, że dla

$$\hat{\xi} \ll N. \quad (1.29)$$

efekty skończonego rozmiaru są nieistotne, gdyż wtedy spodziewany średni rozmiar defektów jest dużo mniejszy niż rozmiar układu.

6. W przypadku, gdy układ posiada opis z użyciem kwazicząstek w przestrzeni pędów, odwrotność nierównowagowej długości korelacji określa skalę, na której pędy są wzbudzane. Mianowicie, wzbudzeniom ulegają mody o pędach spełniających:

$$k \lesssim \frac{1}{\hat{\xi}} \sim \tau_Q^{\frac{-\nu}{1+\nu}}. \quad (1.30)$$

Rozdział 2

Całkowalne sieci spinowe

W tym rozdziale przedstawiamy kluczowe dla dalszych części pracy metody i wyniki dotyczące jednowymiarowych całkowalnych sieci spinowych. W niniejszej pracy będziemy rozpatrywać skończone układy N spinów, w zależności od potrzeby odwołując się do granicy termodynamicznej, czyli $N \rightarrow \infty$. Spiny mogą oddziaływać ze sobą oraz z zewnętrznym polem. Za pomocą odpowiedniej transformacji mogą być sprowadzone do układu nieoddziałujących fermionów, co pozwala na znalezienie pełnego spektrum Hamiltonianu za pomocą wydajnej analitycznej metody. Jako metodę wydajną rozumiemy tu taką, której czas wykonania oraz zasoby pamięciowe skalują się wielomianowo z rozmiarem układu (w typowym przypadku diagonalizacja układu N spinów wymaga czasu rosnącego wykładniczo z N). W wielu przypadkach takich układów jest również możliwe znalezienie zwężonych formuł analitycznych na wiele istotnych wielkości związanych z układem, a także efektywne symulowanie dynamiki nierównowagowej.

Mimo, że układy, które można badać eksperymentalnie (takie jak np. model Bosego-Hubbarda czy model Isinga z dalekozasięgowym oddziaływaniem) zazwyczaj nie dają się w pełni wydajnie symulować numerycznie, modele całkowalne są niezastąpionym narzędziem w badaniach teoretycznych. Ich analiza pozwala zidentyfikować główne zasady fizyczne, które rządzą zachowaniem układów wykazujących przejście fazowe, a uzyskane wyniki są punktem wyjścia do testowania koncepcji fizycznych, które w dalszej perspektywie są wykorzystywane do badania bardziej złożonych układów i projektowania eksperymentów.

Organizacja rozdziału jest następująca. W pierwszym podrozdziale szczegółowo przedstawiamy diagonalizację kwantowego modelu XY w polu poprzecznym z periodycznymi warunkami brzegowymi (ang. PBC). Następnie przytaczamy dokładną analizę dla szczególnego przypadku modelu XY, mianowicie modelu Isinga w polu poprzecznym. Szczegółowo wprowadzamy, istotne dla dalszej części pracy, własności przerwy energetycznej oraz równań różniczkowych zadających dynamikę. W podrozdziale drugim opisujemy diagonalizację modelu XY z otwartymi warunkami brzegowymi, zaś w podrozdziale trzecim rozwiązanie modelu będącego uogólnieniem modelu XY (jednakże dla parametrów wybranych w pewien szczególny sposób). Model ten ma szczególne wartości wykładników z i ν , co będzie wykorzystane w rozdziale piątym.

2.1 Całkowalne sieci spinowe z periodycznymi warunkami brzegowymi

2.1.1 Przypadek równowagowy

Kwantowy model XY w polu poprzecznym ma postać:

$$H(\gamma, g) = - \sum_{i=1}^N \left(\frac{1+\gamma}{2} \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \frac{1-\gamma}{2} \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y \right) - g \sum_{i=1}^N \sigma_i^z. \quad (2.1)$$

Operatory $\sigma_i^{x,y,z}$ są dane standardowymi macierzami Pauliego, całkowitą przestrzeń Hilberta w której działa powyższy Hamiltonian będziemy oznaczać $\mathcal{H}$. Ponieważ niniejsza praca ma głównie charakter teoretyczny, dla przejrzystości zakładamy, że współczynniki γ, g są bezwymiarowe. Przyjmujemy również, że $\hbar = 1$. Współczynnik $-1 \leq \gamma \leq 1$ jest tzw. *współczynnikiem anizotropii*, g jest zewnętrznym polem magnetycznym wzdłuż osi z , zaś N jest rozmiarem układu. Model posiada dwie tzw. linie krytyczne: $\gamma \neq 0, g = 1$ oraz $\gamma = 0$ oraz $0 \leq g \leq 1$. Na przecięciu tych linii znajduje się tzw. punkt multikrytyczny ($\gamma = 0, g = 1$).

Szczególnym przypadkiem modelu XY jest szeroko analizowany w niniejszej pracy kwantowy model Isinga w zewnętrznym polu (wprowadzony już w rozdziale 1), który otrzymuje się dla $\gamma = 1$. Jego Hamiltonian ma postać:

$$H(g) = - \sum_{i=1}^N \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x - g \sum_{i=1}^N \sigma_i^z. \quad (2.2)$$

Periodyczne warunki brzegowe oznaczają, że

$$\sigma_{N+1}^{x,y,z} = \sigma_1^{x,y,z}. \quad (2.3)$$

Opisana poniżej metoda bazuje na klasycznych pracach [25, 26]. Narzędziem używanym do diagonalizacji takich Hamiltonianów jest transformacja Jordana-Wignera, mapująca układ spinów na układ fermionów:

$$\begin{aligned} \sigma_i^z &= 1 - 2c_i^\dagger c_i, \quad \sigma_i^x = (c_i + c_i^\dagger) \prod_{j<i} (1 - 2c_j^\dagger c_j), \quad \sigma_i^y = i(c_i - c_i^\dagger) \prod_{j<i} (1 - 2c_j^\dagger c_j), \\ \{c_i, c_j\} &= 0, \quad \{c_i, c_j^\dagger\} = \delta_{ij}, \end{aligned} \quad (2.4)$$

gdzie $\{\cdot, \cdot\}$ oznacza antykomutator. W reprezentacji położeniowej, Hamiltonian przyjmuje postać [21, 27]:

$$\begin{aligned} H(g, \gamma) &= - \sum_{i=1}^{N-1} \left[c_i^\dagger c_{i+1} + c_{i+1}^\dagger c_i + \gamma (c_i^\dagger c_{i+1}^\dagger + c_{i+1} c_i) \right] \\ &\quad + P \left[c_N^\dagger c_1 + c_1^\dagger c_N + \gamma (c_N^\dagger c_1^\dagger + c_1 c_N) \right] - g \sum_{i=1}^N (1 - 2c_i^\dagger c_i), \end{aligned} \quad (2.5)$$

gdzie P jest operatorem parzystości, zdefiniowanym jako:

$$P = \prod_{i=1}^N \sigma_i^z = \prod_{i=1}^N (1 - 2c_i^\dagger c_i). \quad (2.6)$$

Następnym krokiem jest wykorzystanie periodycznych warunków brzegowych i transformacji Fouriera:

$$c_j = \frac{\exp(-i\pi/4)}{\sqrt{N}} \sum_{k \in \mathbf{K}} c_k \exp(ikj), \quad (2.7)$$

gdzie zakres pędów $\mathbf{K}$ zostanie doprecyzowany w trakcie dalszej dyskusji. Hamiltonian (2.5) nie jest jeszcze w postaci nieoddziałujących fermionów, gdyż zawiera człony wyższe niż kwadratowe w operatorach c_i poprzez operator P . Ponieważ $P^2 = 1$, operator P ma wartości własne 1 oraz -1. Można to powiązać z parzystą i nieparzystą liczbą kwazicząstek kreowanych przez operatory $c_i^\dagger$. Przestrzeń Hilberta zatem jest sumą prostą dwóch przestrzeni, określonych przez wartości własne operatora P :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^+ \oplus \mathcal{H}^- \quad (2.8)$$

Ponieważ Hamiltonian komutuje z P (co można sprawdzić bezpośrednim rachunkiem), może być zdiaagonalizowany oddzielnie w każdej podprzestrzeni. Można na to patrzeć w ten sposób, że Hamiltonian rozkłada się na dwa bloki:

$$H(\gamma, g) = \hat{H}^+(\gamma, g) \oplus \hat{H}^-(\gamma, g). \quad (2.9)$$

W powyższym wzorze operatory $\hat{H}^+(\gamma, g)$ i $\hat{H}^-(\gamma, g)$ działają w podprzestrzeniach 2^{N-1} wymiarowych. Z technicznego punktu widzenia wygodniej jest jednak operować w pełnej przestrzeni Hilberta z uwagi na definicję operatorów fermionowych c_i . W tym celu zapisujemy Hamiltonian w postaci:

$$H(\gamma, g) = H^+(\gamma, g)P^+ + H^-(\gamma, g)P^-, \quad P^\pm = \frac{1}{2}(1 \pm P). \quad (2.10)$$

Celem będzie znalezienie energii oraz stanów własnych każdego z Hamiltonianów $H^+(\gamma, g)$ i $H^-(\gamma, g)$. Główna trudność polega na tym, że w zależności od sektora przestrzeni Hilberta, różne są warunki brzegowe, które trzeba narzucić na operatory c_i i w konsekwencji inne są zbiory pędów, które trzeba użyć do transformaty Fouriera. Poniżej analizujemy szczegółowo dwa przypadki. We wszystkich rachunkach zakładamy, że liczba spinów N w układzie jest *parzysta* - w przypadku, gdy N jest nieparzyste wprowadzone poniżej zbiory pędów $\mathbf{K}^+$ i $\mathbf{K}^-$ zamieniają się względem siebie. Sposób postępowania jest analogiczny, lecz wymaga należytej uwagi, w szczególności przy obliczaniu energii stanu podstawowego [27]. Ponieważ parzystość rozmiaru układu nie ma wpływu na wnioski fizyczne, w symulacjach numerycznych w całej pracy ograniczamy się do układów o parzystej liczbie spinów.

Podprzestrzeń o dodatniej parzystości $P = 1$. W tej podprzestrzeni należy położyć $c_{N+1} = -c_1$ (aby znaki przy wyrażeniach typu $c_i c_{i+1}$ we wzorze (2.5) były zgodne dla $1 \leq i \leq N$). Prowadzi to do następującego zbioru pędów:

$$\mathbf{K}^+ = \left\{ \pm \frac{\pi}{N}, \pm \frac{3\pi}{N}, \dots, \pm \left(\pi - \frac{\pi}{N} \right) \right\} = \mathbf{k}^+ \cup -\mathbf{k}^+, \quad (2.11)$$

gdzie $\mathbf{k}^+$ jest zbiorem wszystkich dodatnich pędów:

$$\mathbf{k}^+ = \left\{ \frac{\pi}{N}, \frac{3\pi}{N}, \dots, \pi - \frac{\pi}{N} \right\}. \quad (2.12)$$

Po wykonaniu transformacji Fouriera Hamiltonian przyjmuje postać:

$$H^+(\gamma, g) = 2 \sum_{k \in \mathbf{k}^+} \left[\left(c_k^\dagger c_k - c_{-k} c_{-k}^\dagger \right) (g - \cos k) + \gamma \left(c_k^\dagger c_{-k}^\dagger + c_k c_{-k} \right) \sin k \right]. \quad (2.13)$$

Po wykonaniu transformacji Bogoliubova, Hamiltonian może być zapisany w postaci:

$$H^+(\gamma, g) = \sum_{k \in \mathbf{k}^+} 2\varepsilon_k \left(\gamma_k^\dagger \gamma_k + \gamma_{-k}^\dagger \gamma_{-k} - 1 \right), \quad (2.14)$$

gdzie

$$\begin{aligned} \varepsilon_k &= \sqrt{(g - \cos k)^2 + (\gamma \sin k)^2}, \\ \gamma_k &= \cos \left(\frac{\vartheta_k}{2} \right) c_k + \sin \left(\frac{\vartheta_k}{2} \right) c_{-k}^\dagger, \\ (\sin \vartheta_k, \cos \vartheta_k) &= \left(\frac{\gamma \sin k}{\varepsilon_k}, \frac{g - \cos k}{\varepsilon_k} \right). \end{aligned} \quad (2.15)$$

Stan podstawowy w tej podprzestrzeni jest równy:

$$|\gamma, g\rangle^+ = \prod_{k \in \mathbf{k}^+} \left[\cos\left(\frac{\vartheta_k}{2}\right) - \sin\left(\frac{\vartheta_k}{2}\right) c_k^\dagger c_{-k}^\dagger \right] |\text{vac}\rangle, \quad (2.16)$$

gdzie $|\text{vac}\rangle$ jest stanem anihilowanym przez wszystkie operatory c_k dla $k \in \mathbf{K}^+$. Energia stanu (2.16) wynosi:

$$E_0^+ = -2 \sum_{k \in \mathbf{k}^+} \varepsilon_k. \quad (2.17)$$

Podprzestrzeń o ujemnej parzystości $P = -1$. W tej podprzestrzeni należy położyć $c_{N+1} = c_1$. Prowadzi to do następującego zbioru pędów:

$$\mathbf{K}^- = \left\{ 0, \pm \frac{2\pi}{N}, \pm \frac{4\pi}{N}, \dots, \pm \left(\pi - \frac{2\pi}{N} \right), \pi \right\} = \mathbf{k}^- \cup -\mathbf{k}^- \cup \{0, \pi\}, \quad (2.18)$$

gdzie $\mathbf{k}^-$ jest zbiorem dodatnich pędów różnych od $0, \pi$:

$$\mathbf{k}^- = \left\{ \frac{2\pi}{N}, \frac{4\pi}{N}, \dots, \pi - \frac{2\pi}{N} \right\}. \quad (2.19)$$

Procedura diagonalizacji jest taka sama jak dla podprzestrzeni o dodatniej parzystości, dodatkowej uwagi wymagają mody o pędach 0 i π - dlatego te pędy w dalszych rachunkach zazwyczaj będziemy traktować oddzielnie. W tej podprzestrzeni Hamiltonian po wykonaniu transformacji Fouriera ma postać

$$\begin{aligned} H^-(\gamma, g) = 2 \sum_{k \in \mathbf{k}^+} & \left[(c_k^\dagger c_k - c_{-k} c_{-k}^\dagger) (g - \cos k) + \gamma (c_k^\dagger c_{-k}^\dagger + c_{-k}) \sin k \right] + \\ & (g-1)(c_0^\dagger c_0 - c_0 c_0^\dagger) + (g+1)(c_\pi^\dagger c_\pi - c_\pi c_\pi^\dagger). \end{aligned} \quad (2.20)$$

Po transformacji Bogoliubova otrzymuje się:

$$H^-(\gamma, g) = \sum_{k \in \mathbf{k}^-} 2\varepsilon_k \left(\gamma_k^\dagger \gamma_k + \gamma_{-k}^\dagger \gamma_{-k} - 1 \right) + \varepsilon_0 (c_0^\dagger c_0 - c_0 c_0^\dagger) + \varepsilon_\pi (c_\pi c_\pi - c_\pi c_\pi^\dagger), \quad (2.21)$$

gdzie, dla wszystkich pędów $k \in \mathbf{k}^-$ prawdziwe są wzory (2.15). Dodatkowo, dla pędów $0, \pi$ mamy:

$$\begin{aligned} \varepsilon_0 &= g - 1, & \varepsilon_\pi &= g + 1, \\ \vartheta_0 &= 0, & \vartheta_\pi &= 0. \end{aligned} \quad (2.22)$$

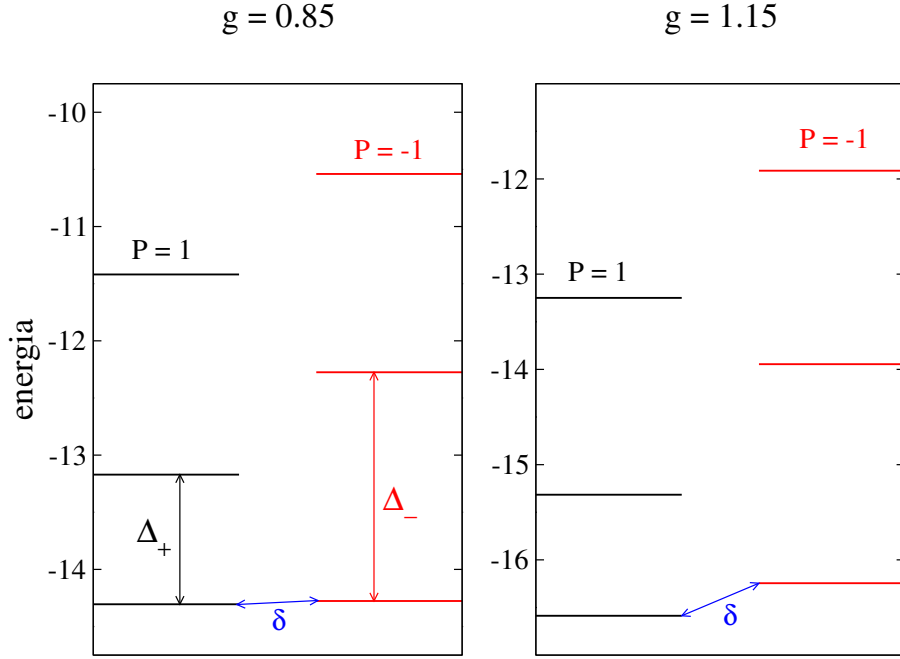
Najniższy energetycznie stan w tej podprzestrzeni jest dany wzorem:

$$|\gamma, g\rangle^- = c_0^\dagger \prod_{k \in \mathbf{k}^-} \left[\cos\left(\frac{\vartheta_k}{2}\right) - \sin\left(\frac{\vartheta_k}{2}\right) c_k^\dagger c_{-k}^\dagger \right] |\text{vac}\rangle, \quad (2.23)$$

zaś jego energia:

$$E_0^- = -2 \sum_{k \in \mathbf{k}^-} \varepsilon_k - 2. \quad (2.24)$$

Można pokazać [27], że dla modelu Isinga ($\gamma = 1$) stan podstawowy pełnego Hamiltonianu z parzystą liczbą spinów zawsze leży w podprzestrzeni o dodatniej parzystości. Alternatywna metoda pokazania, że stan podstawowy znajduje się w podprzestrzeni o dodatniej parzystości polega na wykorzystaniu twierdzenia Perrona-Frobeniusa [28]. W przypadku ogólnego modelu XY nie musi to być prawdą [29]. Jak zobaczymy później, nie jest to też w ogólności prawdą w przypadku rozszerzonego modelu XY.



Rysunek 2.1: Struktura poziomów energetycznych dla modelu Isinga z periodycznymi warunkami brzegowymi dla $N = 12$. Linie czarne i czerwone oznaczają poziomy energetyczne w podprzestrzeniach odpowiednio o dodatniej i ujemnej parzystości. Zaznaczono przerwę energetyczną związaną z łamaniem symetrii δ oraz przerwę dynamiczną w dodatniej i ujemnej podprzestrzeni (Δ_+ i Δ_-).

W celu podania najważniejszych faktów dotyczących przerwy energetycznej skoncentrujemy się teraz na modelu Isinga ($\gamma = 1$). Model posiada dwie fazy: fazę ferromagnetyczną ($0 \leq g < 1$) oraz fazę paramagnetyczną ($g > 1$). Fazy oddzielone są punktem krytycznym w $g = 1$. Poglądowe przedstawienie poziomów energetycznych dla faz ferromagnetycznej i paramagnetycznej znajduje się na rysunku 2.1. Najniższe poziomy w obu podprzestrzeniach oddzielone są od siebie przerwą energetyczną:

$$\delta = E_0^- - E_0^+, \quad (2.25)$$

którą będziemy nazywać *przerwą energetyczną związaną z łamaniem symetrii*. Łamanie symetrii jest ważną koncepcją związaną z kwantowymi przejściami fazowymi. W przypadku modelu Isinga łamanie symetrii jest związane z tym, że stan podstawowy w fazie ferromagnetycznej nie jest na ogół symetryczny względem zamiany $|\rightarrow\rangle$ na $|\leftarrow\rangle$, podczas gdy Hamiltonian posiada symetrię $\sigma_i^x \rightarrow -\sigma_i^x$ (własność ta dotyczy ogólnie modelu XY). Ściśle rzecz biorąc, łamanie symetrii nie zachodzi w fazie paramagnetycznej (również w granicy termodynamicznej). Jednak dla ujednolicenia dyskusji, będziemy używać terminu „przerwa energetyczna związana z łamaniem symetrii” oraz oznaczenia δ również w fazie paramagnetycznej.

Oprócz przerwy energetycznej związanej z łamaniem symetrii, istotna jest również tzw. *dynamiczna przerwa energetyczna* Δ_+ , która będzie grała istotną rolę przy nierównowagowych ewolucjach [30]. Jest ona zdefiniowana jako różnica energii pomiędzy dwoma najniższymi stanami w podprzestrzeni o dodatniej parzystości. Aby wyjaśnić jej związek z dynamiką, przypomnijmy, że zachodzi następująca tożsamość:

$$[H, P] = 0, \quad (2.26)$$

gdzie P jest operatorem parzystości. Oznacza to, że parzystość stanu jest zachowana podczas dynamiki - dlatego, jeżeli ewolucja zaczyna się w stanie podstawowym, ważne własności dynamiczne będą związane z wartością Δ_+ . Poniżej przytaczamy ważniejsze własności obu przerw energetycznych.

W granicy termodynamicznej ($N \rightarrow \infty$) przerwa energetyczna związana z łamaniem symetrii jest równa zero w fazie ferromagnetycznej, zaś w fazie paramagnetycznej dla $g > 1$ wynosi $2(g - 1)$. Dla układu o skończonym rozmiarze obie przerwy energetyczne wykazują nietrywialne zachowanie wraz z rozmiarem N . Dokładne zachowanie przerwy energetycznej będzie istotne w dalszych rozważaniach, dlatego poniżej podajemy wyrażenia na przerwę energetyczną związaną z łamaniem symetrii [27]:

$$\begin{aligned}\delta &= g^N \int_0^1 dt \frac{4N}{\pi} \frac{t^{N-3/2} \sqrt{(1-t)(1-g^2t)}}{1-(gt)^{2N}}, \quad 0 \leq g < 1, \\ \delta &= 2g - 2 + g^{-N} \int_0^1 dt \frac{4N}{\pi} \frac{t^{N-3/2} \sqrt{(1-t)(g^2-t)}}{1-t^{2N}/g^{2N}}, \quad 0 \leq g < 1, \\ \delta &= 2 \tan \frac{\pi}{4N}, \quad g = 1.\end{aligned}\tag{2.27}$$

W fazie ferromagnetycznej δ maleje wykładniczo wraz z N :

$$\delta = O\left(\exp(-N/\xi)/\sqrt{N}\right),\tag{2.28}$$

gdzie ξ jest długością korelacji (patrz rozdział 1, równanie (1.7)). W punkcie krytycznym:

$$\delta(g = 1) \approx \frac{\pi}{2N},\tag{2.29}$$

skąd widać, że w punkcie krytycznym δ , choć również maleje do zera, to znacznie wolniej. Dla porównania, zachowanie dynamicznej przerwy energetycznej jest następujące:

$$\Delta_+ = 4\varepsilon_{\frac{\pi}{N}} = 4\sqrt{g^2 - 2g \cos \frac{\pi}{N} + 1},\tag{2.30}$$

gdzie czynnik 4 pojawia się, ponieważ wzbudzone są *dwa* pędy $\pm \frac{\pi}{N}$. Dla $0 \leq g < 1$ asymptotyka przerwy dynamicznej jest następująca:

$$\Delta_+ = g - 1 + O\left(\frac{1}{N^2}\right),\tag{2.31}$$

zaś dla $g = 1$:

$$\Delta_+ \approx \frac{4\pi}{N}.\tag{2.32}$$

Dla ścisłości przypominamy, że punkt krytyczny jest dokładnie w $g = 1$ jedynie w granicy termodynamicznej. W skończonym układzie punkt krytyczny nie istnieje, ale dla dużych rozmiarów układu wartość $g = 1$ jest traktowana jako bardzo dobre przybliżenie efektywnego punktu krytycznego (patrz uwaga 2 pod koniec podrozdziału 1.1). Ponadto zaznaczamy, że przerwa energetyczna związana z łamaniem symetrii dla $0 \leq g \leq 1$ jest niezerowa tylko dla skończonego rozmiaru.

2.1.2 Dynamika nierównowagowa

Zakładamy, że układ jest przygotowany w stanie podstawowym (2.1) dla pola magnetycznego g_0 , a następnie poddawany jest dynamice określonej przez zależne od czasu pole $g(t)$. Przyjmując, że stan początkowy znajduje się w podprzestrzeni o dodatniej parzystości mamy:

$$|\psi(t = 0)\rangle = \prod_{k \in \mathbf{k}^+} \left(u_k^{\text{eq}} - v_k^{\text{eq}} c_k^\dagger c_{-k}^\dagger \right) |\text{vac}\rangle,\tag{2.33}$$

gdzie

$$u_k^{\text{eq}} = \cos\left(\frac{\vartheta_k}{2}\right), \quad v_k^{\text{eq}} = \sin\left(\frac{\vartheta_k}{2}\right)\tag{2.34}$$

oraz ϑ_k jest zdefiniowane poprzez wyrażenia (2.15) w g_0 . Stan w dowolnej chwili czasu można zapisać w postaci:

$$|\psi(t)\rangle = \prod_{k \in \mathbf{k}^+} \left(u_k(t) - v_k(t) c_k^\dagger c_{-k}^\dagger \right) |\text{vac}\rangle, \quad (2.35)$$

gdzie $u_k(t)$, $v_k(t)$ spełniają równanie różniczkowe:

$$i \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} v_k \\ u_k \end{pmatrix} = \tilde{h}_k \begin{pmatrix} v_k \\ u_k \end{pmatrix}, \quad \tilde{h}_k = 2 \begin{pmatrix} g(t) - \cos(k) & -\gamma \sin(k) \\ -\gamma \sin(k) & \cos(k) - g(t) \end{pmatrix} \quad (2.36)$$

oraz warunki początkowe:

$$u_k(t=0) = u_k^{\text{eq}}, \quad v_k(t=0) = v_k^{\text{eq}}. \quad (2.37)$$

Powyższe równania są ogólne, ich rozwiązanie pozwala na kompletną charakteryzację dynamiki układu.

Poniżej przedstawiamy rozwiązanie powyższych równań w szczególnym przypadku dla modelu Isinga ($\gamma = 1$) i liniowej zależności $g(t)$. Tego typu zależność jest typowa w analizie mechanizmu Kibbla-Zurka (patrz rozdział 1). Zakładamy następującą postać $g(t)$:

$$g(t) = 1 - \frac{t}{\tau_Q}. \quad (2.38)$$

Ewolucja rozpoczyna się dla $t \rightarrow -\infty$, gdzie wszystkie spiny są ustawione zgodnie z kierunkiem pola magnetycznego (faza paramagnetyczna). Pierwszym krokiem do rozwiązania dynamiki jest podstawienie:

$$t' = 4\tau_Q \sin(k)[g(t) - \cos(k)], \quad \tau'_Q = 4\tau_Q \sin^2(k). \quad (2.39)$$

Wtedy równanie (2.36) przyjmuje postać znaną z problemu Landaua-Zenera [21]:

$$i \frac{d}{dt'} \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} t'/\tau'_Q & 1 \\ 1 & -t'/\tau'_Q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix}, \quad (2.40)$$

z warunkami początkowymi:

$$|u_k(t = -\infty)| = 1, \quad v_k(t = -\infty) = 0. \quad (2.41)$$

Stosując metody z Appendixu B pracy [19] otrzymuje się rozwiązanie w następującej postaci:

$$\begin{aligned} v_k(t) &= \sqrt{\tau_Q} \sin(k) e^{-\pi\tau_Q \sin^2(k)/4} D_{-n-1}[iz(t)], \\ u_k(t) &= e^{-\pi\tau_Q \sin^2(k)/4} e^{-i\pi/4} ((1+n)D_{-n-2}[iz(t)] + iz(t)D_{-n-1}[iz(t)]), \\ iz(t) &= 2\sqrt{\tau_Q} e^{i\pi/4} [g(t) - \cos(k)], \quad n = i\tau_Q \sin^2(k), \end{aligned} \quad (2.42)$$

gdzie $D_n(z)$ jest funkcją Webera [31] zdefiniowaną poprzez równanie różniczkowe:

$$\frac{d^2 D_n(z)}{dz^2} + \left(n + \frac{1}{2} - \frac{1}{4} z^2 \right) = 0. \quad (2.43)$$

Używając reprezentacji (2.35) można łatwo, w dowolnej chwili czasowej, obliczyć wartości obserwabli, które można wyrazić jako formę kwadratową względem operatorów $c_k, c_{-k}^\dagger$. Ściśle mówiąc, tego typu obserwabli dają się zapisać w postaci:

$$O = \sum_{k \in \mathbf{k}^+} \Psi^\dagger \mathbb{O}_k \Psi, \quad \Psi = \begin{pmatrix} c_k \\ c_{-k}^\dagger \end{pmatrix}, \quad (2.44)$$

gdzie $\mathbb{O}_k$ jest macierzą hermitowską 2×2 . Wartość obserwabli O w stanie danym poprzez (2.35) jest wtedy równa:

$$\langle \psi(t) | O | \psi(t) \rangle = \sum_{k \in \mathbf{k}^+} V_k^\dagger \mathbb{O}_k V_k, \quad V_k = \begin{pmatrix} -v_k \\ u_k \end{pmatrix}. \quad (2.45)$$

Przykładowo, wartość średnia *magnetyzacji poprzecznej*:

$$S^z = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i^z \quad (2.46)$$

może być w stanie $|\psi(t)\rangle$ (2.35) wyrażona następująco:

$$S^z(t) = \langle \psi(t) | \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (1 - 2c_i^\dagger c_i) | \psi(t) \rangle = 1 - \frac{2}{N} \sum_{k \in \mathbf{K}^+} \langle \psi(t) | c_k^\dagger c_k | \psi(t) \rangle = 1 - \frac{4}{N} \sum_{k \in \mathbf{K}^+} |v_k(t)|^2. \quad (2.47)$$

Zwracamy uwagę na różne zbiory pędów w powyższych sumach - przypominamy, że $\mathbf{K}^+$ oznacza wszystkie pędy właściwe dla podprzestrzeni o dodatniej parzystości, zaś $\mathbf{k}^+$ oznacza pędy dodatnie właściwe dla dodatniej parzystości - stąd czynnik 4 przed drugą sumą.

W tym miejscu zasadne jest wyszczególnienie kilku uwag. Po pierwsze podkreślamy, że w powyższych wzorach ograniczamy się do podprzestrzeni o dodatniej parzystości. W większości zastosowań do badań dynamiki nierównowagowej w temperaturze zerowej obliczenia w podprzestrzeni o dodatniej parzystości są wystarczające, choć w modelach innych niż model Isinga (model XY z $\gamma \neq 1$ lub rozszerzony model XY, patrz podrozdział 2.3) należy być ostrożnym, gdyż stan podstawowy nie zawsze się w niej znajduje.

Druga uwaga dotyczy klasy obserwabli, które można reprezentować w postaci (2.44). Klasa ta obejmuje dużo ważnych z fizycznego punktu widzenia obserwabli, takich jak magnetyzacja poprzeczna czy energia, natomiast nie zawiera magnetyzacji podłużnej σ_i^x . Jak zobaczymy w kolejnym podrozdziale, magnetyzacja podłużna w stanie podstawowym modelu Isinga jest równa zero na mocy twierdzenia Wicka, gdyż operator ją reprezentujący wyraża się iloczynem nieparzystej liczby operatorów fermionowych. Aby dostać nietrywialną wartość σ_i^x , trzeba obliczać ją w stanach postaci $|\gamma, g\rangle^+ + |\gamma, g\rangle^-$. Innymi słowy, magnetyzacja podłużna posiada niezerowe elementy macierzowe pomiędzy stanami o różnej parzystości. To rodzi konieczność pracy z operatorami fermionowymi dla różnych parzystości i wyrażanie jednych poprzez drugie. Jest to wykonalne [32], aczkolwiek bardzo skomplikowane. Dlatego w niniejszej pracy prezentujemy inne podejście - obliczamy magnetyzację w modelu z otwartymi warunkami brzegowymi. W następnym podrozdziale prezentujemy szczegóły.

2.2 Sieci spinowe z otwartymi warunkami brzegowymi

2.2.1 Przypadek stacjonarny

W tym podrozdziale zajmujemy się modelem Isinga, tzn. przypadkiem $\gamma = 1$. Rozważamy zatem Hamiltonian:

$$H_{\text{OBC}}(g) = - \sum_{i=1}^{N-1} \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x - g \sum_{i=1}^N \sigma_i^z. \quad (2.48)$$

Powyższe wyrażenie różni się od (2.1) tym, że brak w nim członów postaci $\sigma_N^x \sigma_1^x$. Jest to zatem model Isinga z otwartymi warunkami brzegowymi. Poniżej przedstawiamy systematyczną metodę rozwiązywania tego typu układów (patrz np. [33, 34]) Pierwszym krokiem jest transformata Jordana-Wignera, po wykonaniu której Hamiltonian przyjmuje postać:

$$H_{\text{OBC}}(g) = - \sum_{i=1}^{N-1} \left[c_i^\dagger c_{i+1} + c_{i+1}^\dagger c_i + c_i^\dagger c_{i+1}^\dagger + c_{i+1} c_i \right] - g \sum_{i=1}^N \left(1 - 2c_i^\dagger c_i \right). \quad (2.49)$$

Powyższy Hamiltonian jest już w formie nieoddziałującej (w przypadku okresowych warunków brzegowych obecny był dodatkowo operator parzystości P). W tym przypadku nie można jednak sprowadzić problemu do $N/2$ problemów 2×2 za pomocą transformaty Fouriera. Aby wygodnie zdiagonalizować Hamiltonian (2.49), zapisujemy go w postaci:

$$\begin{aligned} H_{\text{OBC}} &= \Psi^\dagger \mathbb{H} \Psi, \\ \Psi^\dagger &= (c_1^\dagger \dots c_N^\dagger c_1 \dots c_N), \\ \mathbb{H} &= \begin{pmatrix} A & B \\ -B & -A \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (2.50)$$

gdzie A i B są macierzami trójdziagonalnymi o wymiarze $N \times N$ i elementach:

$$\begin{aligned} A_{ij} &= g \delta_{i,j} - 1/2 \delta_{i,j+1} - 1/2 \delta_{i+1,j}, \\ B_{ij} &= 1/2 \delta_{i,j+1} - 1/2 \delta_{i+1,j}. \end{aligned} \quad (2.51)$$

Za pomocą transformacji Bogoliubova

$$\begin{aligned} \Psi &= M \Gamma, \\ \Gamma^\dagger &= (\gamma_1^\dagger \dots \gamma_N^\dagger \gamma_1 \dots \gamma_N), \end{aligned} \quad (2.52)$$

gdzie M jest macierzą diagonalizującą $\mathbb{H}$, Hamiltonian (2.50) można sprowadzić do postaci diagonalnej:

$$H_{\text{OBC}} = \sum_{i=1}^N E_i \left(\gamma_i^\dagger \gamma_i - \frac{1}{2} \right), \quad (2.53)$$

gdzie energie wzbudzeń są uszeregowane rosnąco: $E_1 < E_2 < \dots < E_N$ i wyrażają się wzorem [34]:

$$E_i = 2\sqrt{g^2 - 2g \cos \theta_i + 1}, \quad (2.54)$$

gdzie θ_i są rozwiązaniami równania:

$$g \sin[(N+1)\theta] = \sin(N\theta), \quad 0 < \theta < \pi. \quad (2.55)$$

Dla $g > N/(N+1)$ powyższe równanie ma N rzeczywistych rozwiązań $\theta_1 < \theta_2 < \dots < \theta_N$, zaś dla $0 \leq g \leq N/(N+1)$ istnieje jeden pierwiastek urojony θ_1 , zaś pozostałe są rzeczywiste [34]. Stan podstawowy $|\text{GS}(g)\rangle$ jest anihilowany przez wszystkie operatory γ_i , najniższy stan wzbudzony jest równy $\gamma_1^\dagger |\text{GS}(g)\rangle$. Podkreślamy, że Hamiltonian H_{OBC} również komutuje z operatorem parzystości:

$$[H_{\text{OBC}}, P] = 0, \quad (2.56)$$

dlatego w tym przypadku również stany własne dzielą się na te z dodatnią parzystością i te z ujemną. Adaptując argument z twierdzenia Perrona-Frobeniusa [28] można pokazać, że $|\text{GS}\rangle$ znajduje się w podprzestrzeni o dodatniej parzystości. Najniższy energetycznie stan o ujemnej parzystości jest równy $\gamma_1^\dagger |\text{GS}\rangle$, zatem przerwa energetyczna związana z łamaniem symetrii jest równa:

$$\delta_{\text{OBC}}(g) = E_1. \quad (2.57)$$

Dla $g = 1$ równanie (2.55) można ściśle rozwiązać:

$$\theta_i = \frac{2i-1}{2N+1}\pi, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (2.58)$$

Można wtedy podać ścisły wzór na δ :

$$\delta_{\text{OBC}}(g=1) = 4 \sin \frac{\pi}{4N+2} \approx \frac{\pi}{N}. \quad (2.59)$$

Zauważmy, że w tym przypadku przerwa energetyczna związana z łamaniem symetrii jest około 2 razy większa niż w przypadku periodycznych warunków brzegowych (2.29).

Przechodzimy teraz do obliczania wartości średnich obserwabli. Jest to proste, gdy obserwabla wyraża się jako forma kwadratowa względem operatorów $c_i, c_i^\dagger$. Przejdziemy zatem do metody obliczania magnetyzacji podłużnej - stanowi to główną motywację do rozważania układów z otwartymi warunkami brzegowymi. Jak już wspominaliśmy, sens ma obliczanie magnetyzacji podłużnej w stanie:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\text{GS}(g)\rangle + \gamma_1^\dagger |\text{GS}(g)\rangle \right). \quad (2.60)$$

Aby zrozumieć sens fizyczny stanów w powyższej postaci, rozważmy przypadek $g = 0$. Wtedy stan (2.60) można zapisać w postaci:

$$|\psi\rangle = |\rightarrow\rightarrow\rightarrow\ldots\rightarrow\rangle, \quad (2.61)$$

co ma jasną interpretację oraz odniesienie eksperymentalne. Z uwagi na brak translacyjnej niezmienniczości, wartość magnetyzacji podłużnej zależy od miejsca w sieci. Aby zminimalizować wpływ warunków brzegowych, skupimy się na obliczeniu $\sigma_{N/2}^x$ (przypominamy, że rozważamy układy o parzystej liczbie spinów):

$$\langle\psi|\sigma_{N/2}^x|\psi\rangle = \text{Re} \langle\text{GS}(g)|\gamma_1\sigma_{N/2}^x|\text{GS}(g)\rangle \quad (2.62)$$

Człony $\langle\text{GS}(g)|\sigma_{N/2}^x|\text{GS}(g)\rangle$ oraz $\langle\text{GS}(g)|\gamma_1\sigma_{N/2}^x\gamma_1^\dagger|\text{GS}(g)\rangle$ znikają na mocy twierdzenia Wicka [7, 35, 36], gdyż zawierają nieparzystą liczbę operatorów fermionowych - po wykonaniu wszystkich kontrakcji zawsze zostaje niesparowany operator. W celu obliczenia wartości (2.62) wprowadzamy notację wykorzystującą tzw. fermiony Majorany:

$$a_i = c_i + c_i^\dagger, \quad b_i = c_i - c_i^\dagger \quad (2.63)$$

Wtedy, korzystając z tego, że $b_i a_i = 1 - 2c_i^\dagger c_i$ możemy zapisać wyrażenie na $\sigma_{N/2}^x$ z transformacji Jordana-Wignera w postaci:

$$\gamma_1\sigma_{N/2}^x = \gamma_1 a_{N/2} b_{N/2-1} a_{N/2-1} \ldots b_1 a_1. \quad (2.64)$$

Zwróćmy uwagę, że powyższe wyrażenie jest iloczynem *parzystej* liczby operatorów, z których każdy wyraża się liniowo przez operatory c_i . Ponownie stosując twierdzenie Wicka otrzymuje się [7]:

$$\langle\text{GS}(g)|\gamma_1\sigma_{N/2}^x|\text{GS}(g)\rangle = \text{Pf}(G),$$

$$G = \begin{pmatrix} 0 & \langle\gamma_1 a_{N/2}\rangle & \langle\gamma_1 b_{N/2-1}\rangle & \langle\gamma_1 a_{N/2-1}\rangle & \cdots & \langle\gamma_1 a_1\rangle \\ & 0 & \langle a_{N/2} b_{N/2-1}\rangle & \langle a_{N/2} a_{N/2-1}\rangle & \cdots & \langle a_{N/2} a_1\rangle \\ & & 0 & \langle b_{N/2-1} a_{N/2-1}\rangle & \cdots & \langle b_{N/2-1} a_1\rangle \\ & & & & & \vdots \\ & & & & & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.65)$$

gdzie Pf oznacza Pfaffian, część macierzy G leżąca pod diagonalą może być otrzymana z relacji $G = -G^T$, zaś wartości oczekiwane obliczone są w stanie podstawowym $|\text{GS}\rangle$, przykładowo:

$$\langle a_i b_j \rangle = \langle\text{GS}(g)|a_i b_j|\text{GS}(g)\rangle. \quad (2.66)$$

Dla pełności wyводу przypominamy definicję Pfaffianu. Dla antysymetrycznej macierzy A o wymiarze $2n \times 2n$ Pfaffian jest zdefiniowany w następujący sposób:

$$\text{Pf}(A) = \frac{1}{2^n n!} \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_n} \text{sgn}(\sigma) \prod_{i=1}^n A_{\sigma(2i-1)} A_{\sigma(2i)}, \quad (2.67)$$

gdzie $\mathcal{S}_n$ jest grupą symetryczną zbioru n -elementowego oraz $\text{sgn}(\sigma)$ oznacza znak permutacji. Suma w powyższym wzorze zastosowana do macierzy G z równania (2.65) odpowiada sumie po wszystkich możliwych kontrakcjach występujących w twierdzeniu Wicka. Pfaffian można efektywnie obliczać numerycznie używając transformacji Hausholdera [37].

Na koniec tego podrozdziału zauważmy, że dla modelu Isinga z periodycznymi warunkami brzegowymi i parzystą liczbą spinów, odpowiednikiem stanu (2.60) będzie stan (patrz (2.16), (2.23)):

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\gamma = 1, g\rangle^+ + |\gamma = 1, g\rangle^-). \quad (2.68)$$

Zauważmy, że w ogólności (poza $g = 0$) nie ma w tym przypadku prostej relacji pomiędzy $|\gamma = 1, g\rangle^+$ oraz $|\gamma = 1, g\rangle^-$, z uwagi na różne zbiory pędów w obu podprzestrzeniach. Konieczność przechodzenia pomiędzy różnymi zbiorami pędów jest główną przyczyną tego, że obliczenia związane z magnetyzacją podłużną w układzie z periodycznymi warunkami brzegowymi są dużo bardziej złożone niż z otwartymi.

2.2.2 Dynamika nierównowagowa

Dynamikę układów z otwartymi warunkami brzegowymi najwygodniej rozpatrywać w obrazie Heisenberga. Wtedy operatory stają się zależne od czasu. W szczególności, operatory fermionowe $c_i(t)$ spełniają teraz równania Heisenberga:

$$\frac{d}{dt}c_i(t) = i[H_{OBC}, c_i], \quad \frac{d}{dt}c_i^\dagger = i[H_{OBC}, c_i^\dagger], \quad (2.69)$$

które można w zwartej postaci zapisać jako unitarną ewolucję wektora Ψ (patrz równanie (2.50)):

$$\Psi(t) = U(t)\Psi(t_0), \quad (2.70)$$

gdzie t_0 jest początkową chwilą ewolucji, zaś $U(t)$ jest macierzą unitarną. Z równań Heisenberga (2.69) otrzymuje się następujące równanie różniczkowe na macierz $U(t)$:

$$\frac{d}{dt}U(t) = -2\mathbb{H}U(t), \quad (2.71)$$

gdzie $\mathbb{H}$ jest macierzą zdefiniowaną w (2.50).

Znając $U(t)$ i macierz Bogoliubova M w chwili t_0 , możemy powiązać operatory $c_i(t)$ oraz $c_i^\dagger(t)$ z γ_i oraz $\gamma_i^\dagger$ z postaci (2.53). Mianowicie,

$$\Psi(t) = W(t)\Gamma, \quad W(t) = U(t)M, \quad (2.72)$$

gdzie macierz W posiada następującą strukturę:

$$W = \begin{pmatrix} C & D \\ \bar{D} & \bar{C} \end{pmatrix}, \quad (2.73)$$

gdzie C i D są macierzami zespolonymi o wymiarze $N \times N$ oraz macierz $\bar{C}$ jest zdefiniowana poprzez sprzężenie zespolone wszystkich elementów:

$$(\bar{C})_{ij} = \overline{C_{ij}} \quad (2.74)$$

Transformacja Bogoliubova (2.72) może być użyta do obliczenia funkcji korelacji potrzebnych do znajdowania wartości średnich obserwabli. W szczególności można znaleźć wyrażenia na funkcje korelacji potrzebne do obliczenia ewolucji magnetyzacji poprzecznej:

$$M^x(t) = \langle \psi(t) | \sigma_{N/2}^x(t) | \psi(t) \rangle \quad (2.75)$$

za pomocą wyrażenia (2.65). Przykładowo, używając podstawowych przekształceń algebraicznych można pokazać, że:

$$\langle a_i a_j \rangle = \sum_{k=1}^N (C_{ik}D_{jk} + C_{ik}\bar{C}_{jk} + \bar{D}_{ik}D_{jk} + \bar{D}_{ik}\bar{C}_{jk}). \quad (2.76)$$

2.3 Rozszerzony model XY

W tym podrozdziale omówimy możliwe uogólnienia modelu (2.1). Ograniczymy się do periodycznych warunków brzegowych, choć metody opisane w podrozdziale 2.2 mogą być wprost zastosowane również w tym przypadku. Rozważamy model zadany Hamiltonianem:

$$H(g) = - \sum_{i=1}^N (\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \frac{1}{3} \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y - \frac{1}{3} \sigma_i^x \sigma_{i+1}^z \sigma_{i+2}^x + g \sigma_i^z), \quad (2.77)$$

gdzie $g \geq 0$ jest zewnętrznym polem magnetycznym. Podstawowe jego własności tego modelu zostały opisane w [38, 39], jest on szczególnym przypadkiem rodziny rozszerzonych modeli XY, które są ściśle rozwiązywalne, tzn. posiadają reprezentację w postaci nieoddziałujących fermionów. Z uwagi na to, że w pracy rozpatrujemy tylko Hamiltonian (2.77), w dalszej części będziemy odnosić się do niego jako *rozszerzonego modelu XY*. Szczególny wybór współczynników przy członach oddziaływania powoduje, że model ten, podobnie jak model Isinga, posiada dwie fazy: ferromagnetyczną dla $0 \leq g < 1$ i paramagnetyczną dla $g > 1$. Fazy oddzielone są punktem krytycznym $g_c = 1$. Główną cechą odróżniającą ten model od modelu Isinga są wartości wykładników krytycznych: $z = 3$, $\nu = 1/3$.

Postępując w standardowy sposób i stosując transformatę Jordana-Wignera, Hamiltonian (2.77) można zapisać w postaci:

$$\begin{aligned} H(g) = & - \sum_{i=1}^{N-2} \left[\frac{4}{3} (c_i^\dagger c_{i+1} + c_{i+1}^\dagger c_i) - \frac{1}{3} (c_i^\dagger c_{i+2} + c_{i+2}^\dagger c_i) + \frac{2}{3} (c_i^\dagger c_{i+1}^\dagger + c_{i+1} c_i) - \frac{1}{3} (c_i^\dagger c_{i+2}^\dagger + c_{i+2} c_i) \right] \\ & + P \left[\frac{4}{3} (c_N^\dagger c_1 + c_1^\dagger c_N) - \frac{1}{3} (c_N^\dagger c_2 + c_2^\dagger c_N) + \frac{2}{3} (c_N^\dagger c_1^\dagger + c_1 c_N) - \frac{1}{3} (c_N^\dagger c_2^\dagger + c_2 c_N) \right] \\ & - g \sum_{i=1}^N (1 - 2c_i^\dagger c_i), \end{aligned} \quad (2.78)$$

gdzie P jest operatorem parzystości (patrz (2.6)). Widać zatem, że podobnie jak w przypadku modelu XY i modelu Isinga, problem należy rozwiązywać oddzielnie w podprzestrzeniach o dodatniej i ujemnej parzystości. Przy założeniu, że N jest parzyste, odpowiednie zbiory pędów są zdefiniowane za pomocą równań (2.11) i (2.18). Po transformacji Fouriera część „parzysta” i „nieparzysta” Hamiltonianu (patrz (2.10)) mają postać odpowiednio:

$$H^+(g) = 2 \sum_{k \in \mathbf{k}^+} \left[(c_k^\dagger c_k - c_{-k} c_{-k}^\dagger) A_k(g) + (c_k^\dagger c_{-k}^\dagger + c_k c_{-k}) B_k \right], \quad (2.79)$$

$$\begin{aligned} H^-(g) = & 2 \sum_{k \in \mathbf{k}^-} \left[(c_k^\dagger c_k - c_{-k} c_{-k}^\dagger) A_k(g) + (c_k^\dagger c_{-k}^\dagger + c_k c_{-k}) B_k \right] + \\ & (g-1)(c_0^\dagger c_0 - c_0 c_0^\dagger) + \left(g + \frac{5}{3}\right) (c_\pi^\dagger c_\pi - c_\pi c_\pi^\dagger), \end{aligned} \quad (2.80)$$

gdzie

$$\begin{aligned} A_k(g) &= g - \frac{4}{3} \cos k + \frac{1}{3} \cos 2k, \\ B_k(g) &= \frac{2}{3} \sin k - \frac{1}{3} \sin 2k. \end{aligned} \quad (2.81)$$

Transformacja prowadzi do następujących energii wzbudzeń:

$$\begin{aligned}\varepsilon_k &= \sqrt{A_k^2(g) + B_k^2}, \\ \gamma_k &= \cos\left(\frac{\vartheta_k}{2}\right) c_k + \sin\left(\frac{\vartheta_k}{2}\right) c_{-k}^\dagger, \\ (\sin \vartheta_k, \cos \vartheta_k) &= \left(\frac{B_k}{\varepsilon_k}, \frac{A_k(g)}{\varepsilon_k}\right).\end{aligned}\tag{2.82}$$

Powyższe równości są prawdziwe dla wszystkich pędów, w przestrzeni o ujemnej parzystości mamy dodatkowo:

$$\begin{aligned}\varepsilon_0 &= g - 1, \quad \varepsilon_\pi = g + \frac{5}{3} \\ \vartheta_0 &= 0, \quad \vartheta_\pi = 0.\end{aligned}\tag{2.83}$$

Zwracamy uwagę, że podobnie jak w równaniach (2.15) i (2.22) energii wzbudzenia dla modów 0 i π *nie* otrzymuje się poprzez proste podstawienie $k = 0$ lub $k = \pi$ do wzoru (2.82), wskutek czego dla pewnych wartości pola g może być ona ujemna.

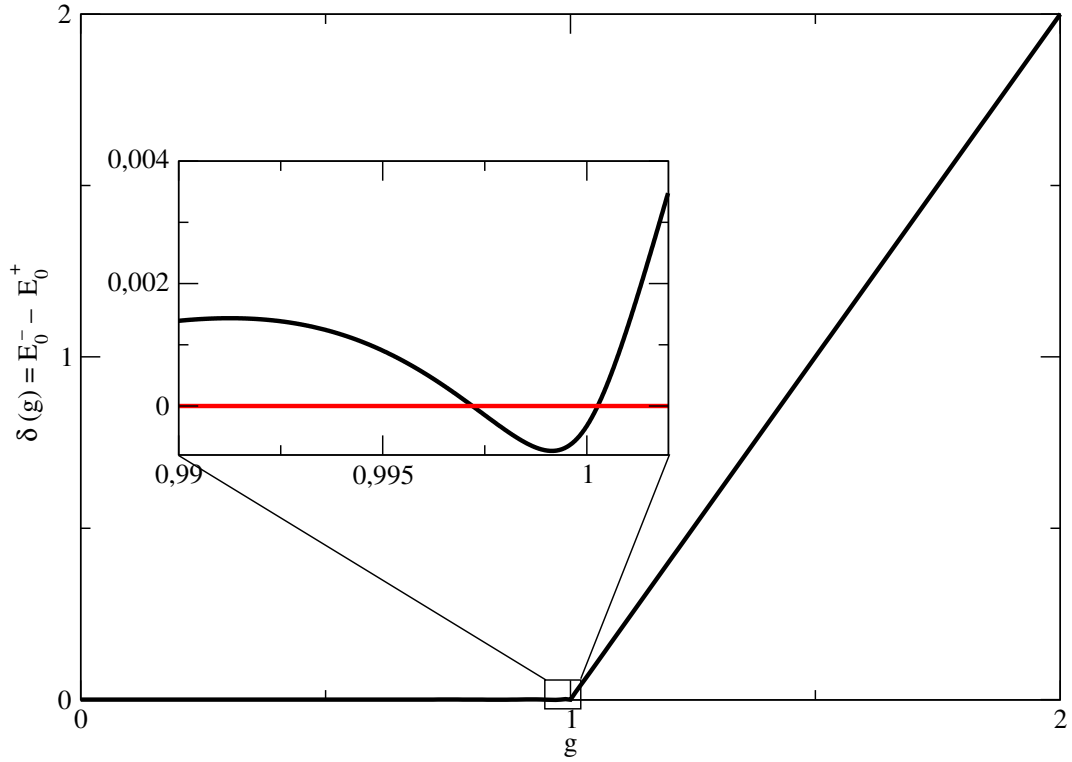
Podobnie jak w przypadku modelu Isinga, najniższy stan w podprzestrzeni o ujemnej parzystości ma wzbudzony mod zerowy zaś mod π jest pusty; odpowiednie stany podstawowe są dane wzorami (2.16) i (2.23) ich energie wynoszą odpowiednio:

$$E_0^+ = -2 \sum_{k \in \mathbf{k}^+} \varepsilon_k, \tag{2.84}$$

$$E_0^- = -2 \sum_{k \in \mathbf{k}^-} \varepsilon_k - \frac{8}{3}. \tag{2.85}$$

W przeciwieństwie do modelu Isinga, w przypadku rozszerzonego modelu XY stan podstawowy niekoniecznie leży w podprzestrzeni o dodatniej parzystości (patrz rysunek 2.2). W niniejszej pracy będziemy modelować ewolucję, która zaczyna się głęboko w fazie paramagnetycznej (duże wartości pola g) bądź dla $g = 0$. Dla rozważanych rozmiarów układu, jak widać z rysunku 2.2, stan podstawowy dla $g \gg 1$ znajduje się w podprzestrzeni o dodatniej parzystości, zaś dla $g = 0$ można wybrać stan o dodatniej parzystości z dwóch możliwych stanów zdegenerowanych. Dlatego nierównowagowy stan układu, podobnie jak dla modelu Isinga, ma postać (2.35), przy czym u_k, v_k spełniają równanie różniczkowe:

$$i \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} v_k \\ u_k \end{pmatrix} = \tilde{h}_k \begin{pmatrix} v_k \\ u_k \end{pmatrix}, \quad \tilde{h}_k = 2 \begin{pmatrix} g(t) - \frac{4}{3} \cos(k) + \frac{1}{3} \cos 2k & -\frac{2}{3} \sin(k) + \frac{1}{3} \sin 2k \\ -\frac{2}{3} \sin(k) + \frac{1}{3} \sin 2k & \frac{4}{3} \cos(k) - \frac{1}{3} \cos 2k - g(t) \end{pmatrix}. \tag{2.86}$$



Rysunek 2.2: Wykres przerwy energetycznej związanej z łamaniem symetrii rozszerzonego modelu XY (2.77) w zależności od zewnętrznego pola magnetycznego g (otrzymany za pomocą rachunków numerycznych). Odpowiednio głęboko w fazie paramagnetycznej przerwa energetyczna jest zawsze dodatnia i z bardzo dobrą dokładnością opisana zależnością liniową $\delta(g) = 2g - 2$ (można to porównać z drugim ze wzorów (2.27) dla modelu Isinga). Z wewnętrznego wykresu, który pokazuje zależność w bliskim sąsiedztwie punktu $g = 1$ widać, że przerwa energetyczna może być tam ujemna (obszar znajdujący się pod czerwoną linią wyznaczającą 0). Oznacza to, że stan podstawowy dla pewnych wartości pola g ma ujemną parzystość. Dla lepszej ilustracji zmian wartości $\delta(g)$ wykres wykonano dla stosunkowo małego rozmiaru układu, $N = 20$. Dla większych rozmiarów przerwa energetyczna w fazie ferromagnetycznej jest bardzo bliska zeru i szczegóły jej zachowania są mało widoczne.

Rozdział 3

Przejścia zatrzymane w punkcie krytycznym - „połowa” mechanizmu Kibbla-Zurka

W tym rozdziale opiszemy dynamikę układu, który nie został w pełni przeprowadzony z jednej fazy do drugiej, lecz ewolucja została zatrzymana w punkcie krytycznym. Skupiamy się na modelu Isinga zadanym Hamiltonianem, który dla wygody czytelnika zapisujemy ponownie:

$$H(g) = - \sum_{i=1}^N (\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + g \sigma_i^z), \quad (3.1)$$

Model Isinga jest standardową platformą do badania dynamiki nierównowagowej. Ciągłe przejścia (tzn. spełniające warunek $0 < \tau_Q < \infty$) w tym modelu były bardzo intensywnie badane, patrz np. [16, 21, 40, 41, 42, 43, 44, 45]. Bardzo szeroka literatura jest również dostępna na temat przejść natychmiastowych, gdzie g jest skokowo zmieniane i następnie obserwowane jest zachowanie swobodnie ewoluującego układu [46, 47, 48, 49, 50]. Scenariusz przejścia opisany w niniejszym rozdziale (na podstawie pracy [51]) łączy podejścia typowe dla przejść ciągłych i natychmiastowych. W początkowej fazie układ jest doprowadzony z fazy paramagnetycznej do punktu krytycznego za pomocą ciągłego przejścia z czasem przejścia τ_Q . Następnie układ ewoluuje swobodnie w punkcie krytycznym - ten fragment dynamiki ma charakter przejścia natychmiastowego ze stanem początkowym parametryzowanym przez τ_Q , a nie, jak zazwyczaj, wartością pola g dla którego zaczyna się przejście.

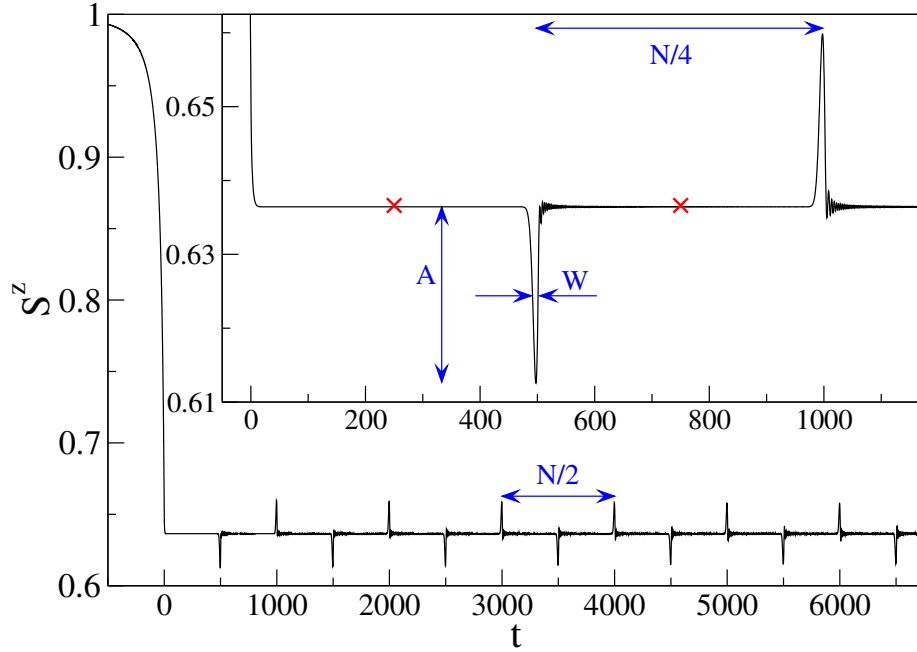
Dokładna postać zmiany parametru wywołującego przejście jest następująca:

$$g(t) = \begin{cases} 1 - t/\tau_Q & , \quad t \leq 0 \\ 1 & , \quad t > 0 \end{cases}. \quad (3.2)$$

Ewolucja rozpoczyna się w stanie podstawowym Hamiltonianu (3.1), głęboko w fazie paramagnetycznej. Układ ewoluuje w kierunku punktu krytycznego i znajduje się w nim w stanie wzbudzone w chwili $t = 0$. Poziom wzbudzenia jest kontrolowany przez czas przejścia τ_Q (większe τ_Q prowadzi do bardziej adiabatycznej ewolucji). Kiedy układ znajdzie się w punkcie krytycznym, pole magnetyczne już nie podlega zmianom, tak, że układ kontynuuje tam ewolucję swobodną. Będziemy badać ewolucję dwóch obserwabli: magnetyzacji poprzecznej $S^z(t)$ oraz tzw. echo Loschmidta, zdefiniowanego dla $t \geq 0$ jako:

$$L(t) = |\langle \psi(t=0) | \psi(t) \rangle|^2 = \langle \psi(0) | e^{-iH(g=1)t} \psi(0) \rangle|^2, \quad (3.3)$$

gdzie $|\psi(t)\rangle$ jest nierównowagową funkcją falową układu. Celem analizy tych obserwabli dla założonego protokołu przejścia (3.2) jest ilościowe zbadanie, w jaki sposób relacje przewidywane przez mechanizm Kibbla-Zurka (1.23) - (1.25) manifestują się w ewolucji swobodnej tych obserwabli w punkcie



Rysunek 3.1: Dynamika magnetyzacji poprzecznej (2.47) dla przejścia (3.2). Wykres wewnętrzny pokazuje w powiększeniu dwa piki pojawiające się podczas ewolucji swobodnej. Amplituda oraz szerokość połówkowa są oznaczone literami odpowiednio A i W . Czerwone krzyżyki pokazują wartość równowagową magnetyzacji w punkcie krytycznym w granicy termodynamicznej ($N \rightarrow \infty$), która jest równa $S_{eq}^z = 2/\pi \approx 0.637$. Symulację wykonano dla układu $N = 2000$ spinów i czasu przejścia $\tau_Q = 100$.

krytycznym. Oprócz dokładnych wyników numerycznych, podajemy analityczne przybliżenia, które z bardzo dobrą dokładnością ujmują kluczowe zachowanie badanych obserwabli. Wszystkie rysunki w tym rozdziale zaczerpnięto z pracy [51].

3.1 Ewolucja magnetyzacji poprzecznej

Typowa ewolucja magnetyzacji poprzecznej jest przedstawiona na rysunku 3.1. Wykres został otrzymany za pomocą wzoru (2.47), współczynniki v_k dla każdego pędu $k \in \mathbf{k}^+$ zostały obliczone poprzez numeryczne rozwiązanie układu równań (2.36) z $\gamma = 1$ oraz warunkami początkowymi (zastosowano algorytm Bulirscha-Stoera [52]):

$$u_k(t = t_0) = u_k^{\text{eq}}, \quad v_k(t = t_0) = v_k^{\text{eq}}, \quad (3.4)$$

gdzie u_k^{eq} i v_k^{eq} są obliczone ze wzorów (2.34) w $g_0 = 5$. Bezpośrednie sprawdzenie pokazuje, że taki wybór wartości g_0 z bardzo dobrą dokładnością przybliża idealną sytuację, gdy stan początkowy ma wszystkie spiny skierowane w kierunku osi z . Uzasadnia to zastosowanie w dalszej części pracy rozwiązań analitycznych danych poprzez funkcje Webera (wzory (2.42), (2.43)). Powodem, dla którego nie stosujemy wyłącznie wzorów wykorzystujących funkcje Webera do symulacji $S^z(t)$ są kwestie wydajnościowe.

Wykres 3.1 pokazuje charakterystyczną, periodyczną strukturę ewolucji po zatrzymaniu zmiany pola magnetycznego w punkcie krytycznym ($t = 0$). Oscylacje mają miejsce wokół wartości bazowej, którą oznaczamy S_b^z . Należy zaznaczyć, że ta wartość bazowa jest w ogólności różna od $S^z(0)$ oraz od wartości równowagowej magnetyzacji poprzecznej w punkcie krytycznym. Będziemy analizować następujące, charakterystyczne dla tej ewolucji wielkości (zależne od rozmiaru układu oraz czasu przejścia τ_Q):

1. Okres oscylacji.
2. Wartość $S^z(0)$ i jej relację do wartości równowagowej.
3. Amplitudę pików A .
4. Szerokość połówkową pików W .

Aby dokładnie zbadać i wyjaśnić zachowanie powyższych wielkości, znajdziemy analityczne przybliżenie ewolucji za pomocą metod z rozdziału 2. Po pierwsze, dla $t > 0$ (czyli dla ewolucji swobodnej) współczynniki $u_k(t)$ i $v_k(t)$ z ogólnej postaci zależnego od czasu stanu (2.35) można znaleźć z równania:

$$\begin{pmatrix} v_k(t) \\ u_k(t) \end{pmatrix} = \exp(-i\tilde{h}_k t) \begin{pmatrix} v_k(0) \\ u_k(0) \end{pmatrix}, \quad \tilde{h}_k = 2 \begin{pmatrix} 1 - \cos(k) & -\sin(k) \\ -\sin(k) & \cos(k) - 1 \end{pmatrix}. \quad (3.5)$$

Obliczając $\exp(-i\tilde{h}_k t)$ otrzymujemy:

$$\begin{pmatrix} v_k(t) \\ u_k(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\varepsilon_k t) - i \sin(k/2) \sin(\varepsilon_k t) & i \cos(k/2) \sin(\varepsilon_k t) \\ i \cos(k/2) \sin(\varepsilon_k t) & \cos(\varepsilon_k t) + i \sin(k/2) \sin(\varepsilon_k t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_k(0) \\ u_k(0) \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

gdzie, ze wzoru (2.15),

$$\varepsilon_k = 4 \sin(k/2). \quad (3.7)$$

Korzystając z wartości $v_k(t)$, można obliczyć magnetyzację poprzeczną (2.47)

$$S^z(t) = 1 - \frac{4}{N} \sum_{k \in \mathbf{k}^+} |[\cos(\varepsilon_k t) - i \sin(k/2) \sin(\varepsilon_k t)]v_k(0) + i \cos(k/2) \sin(\varepsilon_k t)u_k(0)|^2. \quad (3.8)$$

Wartości własne Hamiltonianu $\tilde{h}_k$ są równe $\pm \varepsilon_k$. Wzór (3.8) jest punktem wyjścia do pełnego opisu ewolucji swobodnej po zatrzymanym przejściu. Jedynymi nieznanymi wielkościami są $v_k(0)$ i $u_k(0)$, które są wyznaczone poprzez rozwiązania równania (2.36) z warunkami początkowymi (3.4). Jak zobaczymy dalej, można jednak dobrze je przybliżać stosując asymptotykę funkcji Webera.

Okres oscylacji. Analizując okres oscylacji dla różnych rozmiarów układu oraz czasów przejścia τ_Q można zauważyć, że jest on niezależny od czasu przejścia, i z bardzo dobrą dokładnością wynosi $N/2$, gdzie N jest rozmiarem układu. Fakt ten można wyjaśnić korzystając ze wzoru (3.8). Mechanizm Kibbla-Zurka przewiduje, że wzbudzona będą mody odpowiadające „małym” pędom. Charakterystyczna, nierównowagowa skala pędów jest dana poprzez $\frac{1}{\xi}$ (patrz rozdział 1), czyli:

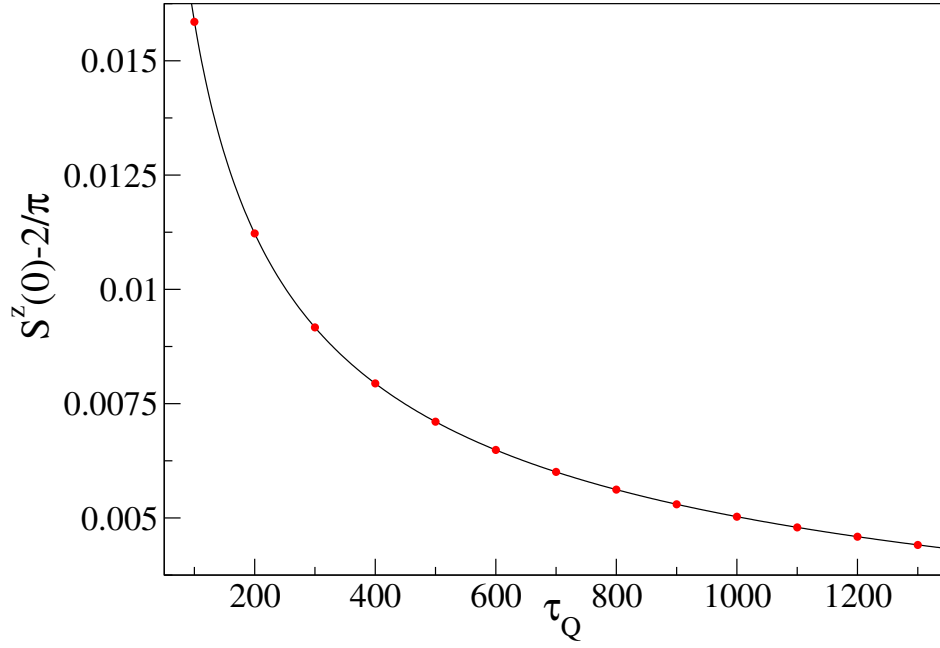
$$k \lesssim \frac{1}{\sqrt{\tau_Q}}. \quad (3.9)$$

Gdy przejście jest idealnie adiabatyczne ($\tau_Q \rightarrow \infty$), dla każdego k zachodzi $u_k(0) = u_{ck}^{\text{eq}}$, $v_k(0) = v_{ck}^{\text{eq}}$, gdzie u_{ck}^{eq} oraz v_{ck}^{eq} są wartościami współczynników u_k^{eq} , v_k^{eq} obliczonymi w $g = 1$ (patrz (2.34)). Wtedy magnetyzacja poprzeczna po dojściu do punktu krytycznego ustala się na wartości równowagowej S_{eq}^z i żadne oscylacje nie są obserwowane. Gdy τ_Q jest skończone, pędy spełniające (3.9) są wzbudzone, co prowadzi do powstania pików widocznych na rysunku 3.1. Dla dużych τ_Q tylko małe pędy są wzbudzone, i energie wzbudzeń można przybliżać następująco:

$$\varepsilon_k \approx 2k. \quad (3.10)$$

Uwzględniając powyższe przybliżenie we wzorze (3.8) widać, że okres oscylacji T otrzymuje się z zależności

$$2kT = \pi. \quad (3.11)$$



Rysunek 3.2: Nierównowagowa wartość magnetyzacji poprzecznej w punkcie krytycznym pomniejszona o wartość równowagową. Stosujemy przybliżenie $\frac{2}{\pi}$ dla wartości równowagowej, które jest ścisłym wynikiem w granicy termodynamicznej i z dobrą dokładnością sprawdza się w układzie $N = 1000$ spinów. Czarna linia pochodzi od fitu $\ln(S^z(0) - 2/\pi) = -1.8465(5) - 0.4989(1) \ln(\tau_Q)$.

Ponieważ najmniejszy pęd należący do $\mathbf{k}^+$ jest równy $\frac{\pi}{N}$, otrzymujemy od razu wartość okresu $T = \frac{N}{2}$.

Wartość $S^z(0)$. Przeanalizujemy, w jaki sposób wartość magnetyzacji poprzecznej w punkcie krytycznym po przejściu nierównowagowym dąży do wartości równowagowej. Dla modelu Isinga wartość równowagowa magnetyzacji poprzecznej w punkcie krytycznym w granicy termodynamicznej jest równa $\frac{2}{\pi}$ (patrz np. [53]). Symulacje numeryczne sugerują, że dla $N \gg \hat{\xi}$ (czyli tam, gdzie mechanizm Kibbla-Zurka powinien działać), zachodzi:

$$S^z(0) - \frac{2}{\pi} \sim \frac{1}{\sqrt{\tau_Q}}, \quad (3.12)$$

co zilustrowano na rysunku 3.2.

Amplituda i częstość połówkowa oscylacji. Wykorzystując wyrażenia (2.42) oraz (3.8) można podać analityczne wyrażenie dające bardzo dobre przybliżenie ewolucji swobodnej w $g = 1$. Pierwszym krokiem jest wykorzystanie wyników teorii Kibbla-Zurka i założenie, że ograniczamy się do małych pędów, spełniających (3.9). Wykorzystując przybliżenie $\sin k \approx k$ mamy (patrz równanie (2.42)):

$$iz(0) \approx \sqrt{\tau_Q} k^2 = (k\sqrt{\tau_Q})^2 / \sqrt{\tau_Q}. \quad (3.13)$$

Funkcję $z(t)$ obliczamy w zerze, gdyż interesują nas rozwiązania w punkcie krytycznym. Korzystając z rozwinięcia funkcji Weбера w szereg [31] (można je również otrzymać za pomocą programu [54]) otrzymujemy:

$$\begin{aligned} v_k(0) &\approx \sqrt{\tau_Q} k \sqrt{\frac{\pi}{2}} e^{-\pi\tau_Q k^2/4}, \\ u_k(0) &\approx e^{-\pi\tau_Q k^2/4} e^{-i\pi/4} \left[1 + \frac{i}{2} \tau_Q k^2 (\gamma + \ln 2) \right], \\ v_{ck}^{\text{eq}} &\approx u_{ck}^{\text{eq}} \approx \frac{1}{\sqrt{2}}, \end{aligned} \quad (3.14)$$

gdzie γ jest stałą Eulera-Mascheroniego równą w przybliżeniu $0.5772 \dots$. Warto zaznaczyć, że wykonaliśmy rozwinięcie $\sin^2 k = k^2 + \dots$ bezpośrednio w argumentie funkcji $e^{-\pi\tau_Q \sin^2(k)/4}$, a nie całej funkcji

eksponencjalnej. Pozostawia to czynnik gaussowski $e^{-\pi\tau_Q k^2/4}$, który posłuży do wyeliminowania wysokich pędów $k \gg 1/\xi \sim 1/\sqrt{\tau_Q}$ dających jedynie przyczynki do ewolucji adiabatycznej. Podstawiając wyrażenia (3.14) do (3.8) otrzymujemy:

$$S^z(t) \approx \text{const} - \frac{4}{N} \sum_{k \in \mathbf{k}^+} \left[\sin^2(\varepsilon_k t) + \frac{\sqrt{\pi}}{2} k \sqrt{\tau_Q} \sin(2\varepsilon_k t) + \frac{\pi}{2} k^2 \tau_Q \cos^2(\varepsilon_k t) \right] e^{-\pi\tau_Q k^2/2}, \quad (3.15)$$

gdzie const oznacza niezależność od czasu. Warto zwrócić uwagę na formę wyrażenia w nawiasach kwadratowych, które można traktować jako rozwinięcie w $k\sqrt{\tau_Q}$ - parametr ten jest związany z tym, z jaką dokładnością uwzględniamy efekty nieadiabatyczne w ewolucji. Rozwijając funkcje Webera do wyższych rzędów względem k otrzymalibyśmy wyższe człony tego rozwinięcia. Najprostsze przybliżenie otrzymuje się biorąc „zerowy” człon powyższego rozwinięcia. Wykorzystując tożsamość $\sin^2(2kt) = 1/2 - \cos(4kt)/2$ otrzymuje się:

$$S_0^z(t) = \text{const} + \frac{2}{N} \sum_{k \in \mathbf{k}^+} \cos(4kt) e^{-\pi\tau_Q k^2/2}, \quad (3.16)$$

gdzie człon $-2/N \sum_{k \in \mathbf{k}^+} e^{-\pi\tau_Q k^2/2}$ został dołączony do wyrazu stałego. Biorąc pod uwagę konkretne wartości pędów $k \in \mathbf{k}^+$ (2.11), z powyższego równania jest jasne, że kolejne piki pojawiają się co $N/4$ i są skierowane naprzemiennie: powyżej bazowej S_b^z („zerowy” pik to $S^z(0)$, nie skupiamy się na nim w dalszej analizie) oraz poniżej. W związku z tym specyficznym układem pików będziemy mówić o ich *antyperiodyczności*. Aby dostać amplitudę i szerokość połówkową pików wykonamy kolejne przybliżenie, mianowicie przejście do granicy termodynamicznej $N \rightarrow \infty$, co wiąże się z zamianą sumy na całkę w następujący sposób:

$$\sum_{k \in \mathbf{k}^+} \rightarrow \frac{N}{2\pi} \int_0^\pi dk, \quad (3.17)$$

co prowadzi do:

$$\text{const} + \frac{1}{\pi\sqrt{2\tau_Q}} e^{-8t^2/(\pi\tau_Q)}. \quad (3.18)$$

Przejście do granicy termodynamicznej niesie ze sobą ten problem, że całkowicie traci się informację o strukturze periodycznej ewolucji, zachowując jedynie kształt pojedynczego pik (okres równy $N/4$ staje się nieskończony). Aby formalnie zapisać nasze przybliżenie, zakładamy dokładną reprodukowalność kształtu (3.18) i uwzględniamy antyperiodyczność metodą „brute-force”:

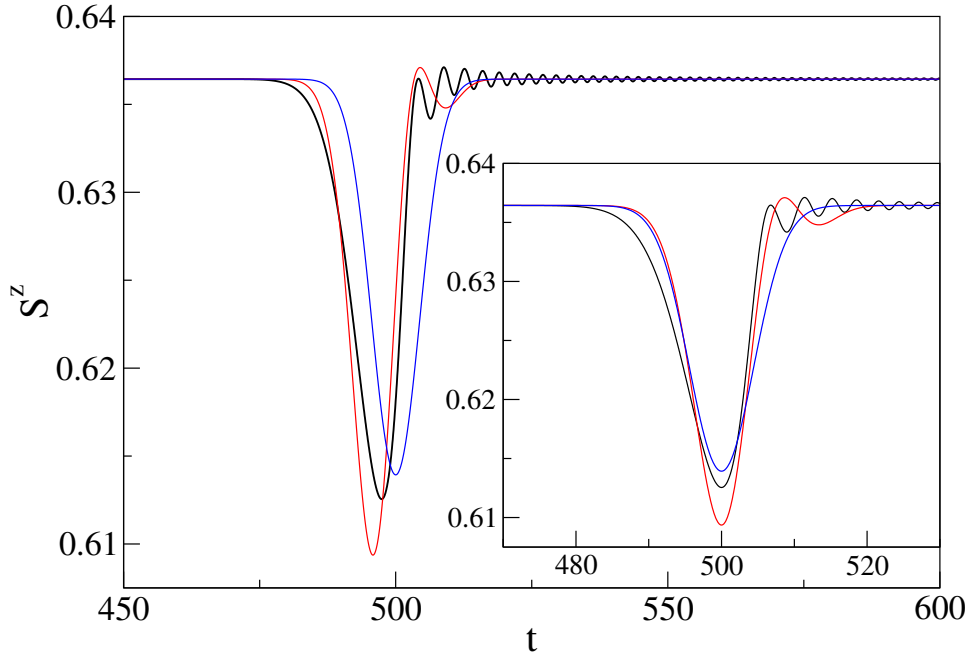
$$S_0^z(t) = \text{const} + \frac{1}{\pi\sqrt{2\tau_Q}} \sum_{s=0}^{\infty} (-)^s e^{-8(t-sN/4)^2/(\pi\tau_Q)}. \quad (3.19)$$

Powyższy wzór dobrze odtwarza strukturę ewolucji dla względnie małych czasów oraz kształt pików (patrz rysunek 3.3). Dla długich horyzontów czasowych piki zanikają: maleje ich amplituda oraz rośnie szerokość połówkowa (rysunek 3.4).

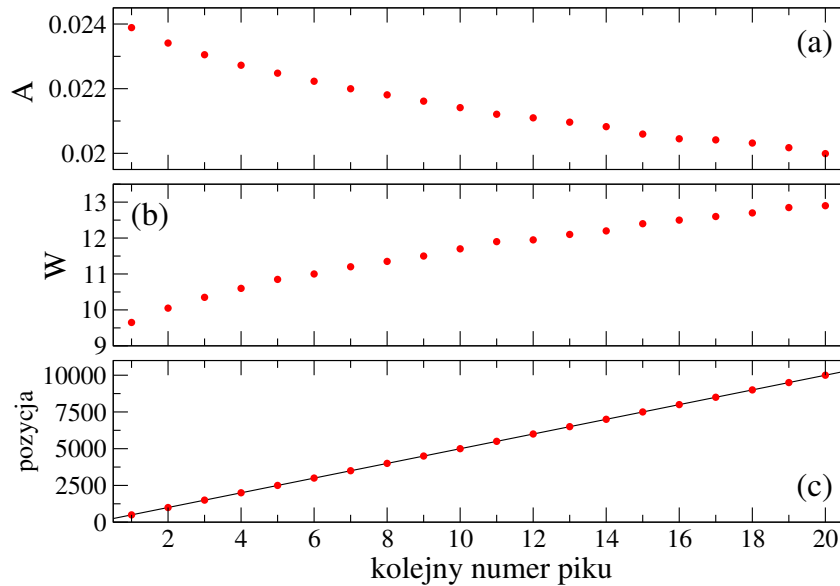
Ze wzoru (3.19) można odczytać spodziewaną zależność amplitudy oraz szerokości połówkowej pików od τ_Q :

$$A \approx \frac{1}{2\sqrt{2\tau_Q}} \approx \frac{0.225}{\sqrt{\tau_Q}}, \quad W \approx \sqrt{\frac{\pi \ln 2}{2}} \sqrt{\tau_Q} \approx 1.04 \sqrt{\tau_Q}. \quad (3.20)$$

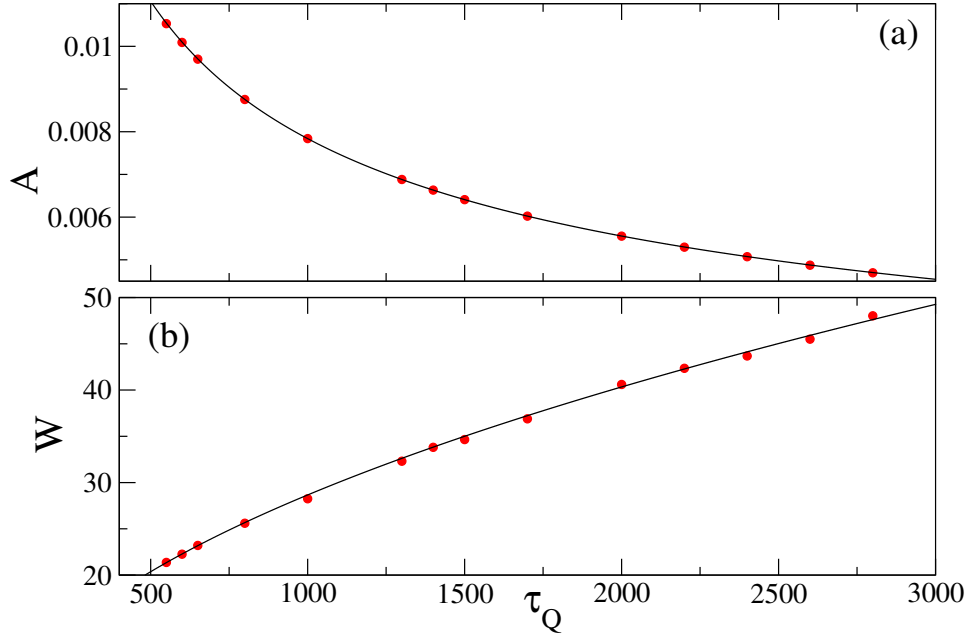
Jak już wspomnieliśmy, przybliżenie (3.19) traci na dokładności dla dużych czasów ewolucji. Dlatego w analizie zgodności parametrów (3.20) z danymi numerycznymi skupimy się na pierwszym pik (na rysunku 3.1 skierowanym w dół). Porównanie przybliżenia (3.19) z danymi numerycznymi zawiera rysunek 3.5. Można z niego wywnioskować, że wykładniki skalujące z (3.20) (równe 1/2) zgadzają się z wynikami numerycznymi z dokładnością 1%, co jest bardzo dobrym rezultatem.



Rysunek 3.3: Pierwszy pik magnetyzacji poprzecznej podczas ewolucji swobodnej. Linia czarna oznacza magnetyzację obliczoną numerycznie (jako fragment rysunku 3.1). Linia czerwona pokazuje przybliżenie za pomocą szeregu (3.15), zaś niebieska wyrażenie (3.19). Wyraz stały w (3.15) i (3.19) został wybrany w ten sposób, aby odtworzyć wyniki numeryczne daleko od centrum piku. Wykres wewnętrzny bazuje na tych samych wyrażeniach co główny, ale z danymi przesuniętymi poziomo tak, że piki mają środek w tym samym czasie. Wykresy zostały wykonane dla $N = 2000$ i $\tau_Q = 100$. Warto zwrócić uwagę, że przybliżenie (3.19) gubi informację o oscylacjach pojawiających się przy prawym końcu piku.



Rysunek 3.4: Wykres przedstawia kwaziperiodyczność oscylacji w punkcie krytycznym. Wykresy (a) i (b) przedstawiają amplitudę i szerokość połówkową pików, patrz rysunek 3.1. Pokazują, że piki stopniowo są coraz niższe i szersze. Na wykresie (c) zaznaczono, w domenie czasowej, pozycję kolejnych maksimum. Linia ciągła jest fitem liniowym $-2.66(4) + 500.079(4)n$, gdzie n jest numerem piku. Odległość między pikami jest w przybliżeniu równa $N/4 = 500$. Pozycja kolejnych pików nie wykazuje stopniowych zmian, jak wielkości z wykresów (a) and (b). Wykresy wykonano dla $N = 2000$ oraz $\tau_Q = 100$, dokładnie tak jak na rysunku 3.1. Czerwone kropki pokazują wyniki numeryczne.



Rysunek 3.5: Własności pierwszego pikę magnetyzacji poprzecznej w zależności od czasu przejścia τ_Q . Wykres (a): amplituda pierwszego pikę. Czerwone kropki pokazują numerykę, zaś linia czarna pochodzi z fitu $\ln(A) = -1.421(2) - 0.4962(3) \ln(\tau_Q)$. Można to zapisać jako $A \approx 0.241/\tau_Q^{0.496}$ i porównać z (3.20). Wykres (b): Szerokość połówkowa pierwszego pikę. Ponownie czerwone kropki pokazują wyniki numeryczne, zaś czarna linia pochodzi z fitu $\ln(W) = -0.05(3) + 0.493(4) \ln(\tau_Q)$, co może być przekształcone do $W \approx 0.951\tau_Q^{0.493}$ (3.20). Rozmiar układu wynosi $N = 2000$ dla obu wykresów.

Dyskusję ewolucji swobodnej magnetyzacji poprzecznej kończymy obserwacją, że

$$A \cdot W \approx 0.23, \quad (3.21)$$

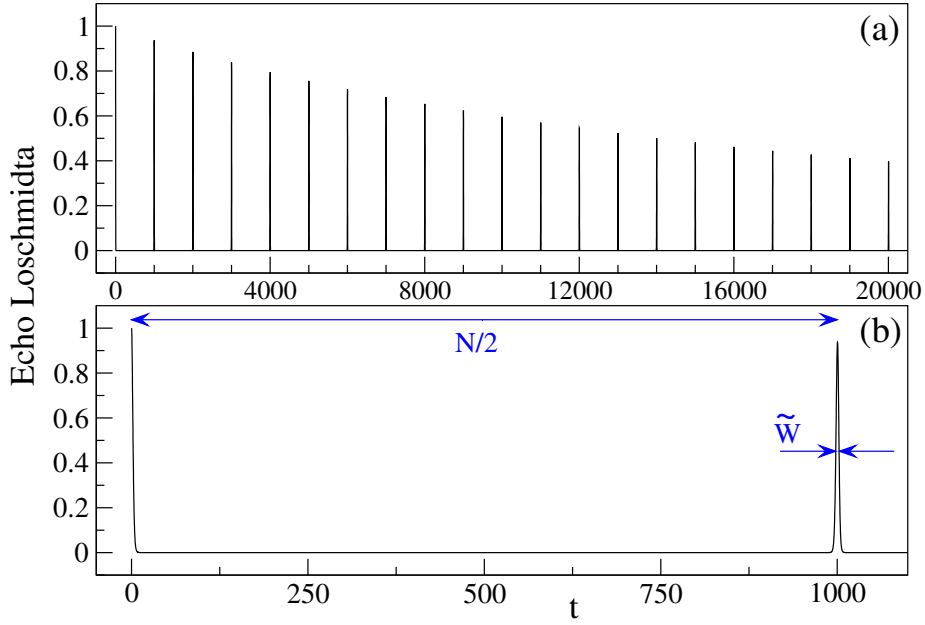
a zatem iloczyn $A \cdot W$ jest niezależny od τ_Q w kwantowym modelu Isinga. Praktycznie taki sam rezultat otrzymuje się bezpośrednio z danych numerycznych z rysunku 3.5. Na zakończenie zaznaczamy, że jeżeli przejście nie kończy się w punkcie krytycznym, obserwuje się inną dynamikę magnetyzacji poprzecznej [45].

3.2 Dynamika echa Loschmidta

Używając podobnych technik jak dla magnetyzacji poprzecznej z poprzedniego podrozdziału, przeanalizujemy tzw. echo Loschmidta, które jest zdefiniowane jako moduł iloczynu skalarnego (lub, w żargonie, przekrycie) pomiędzy stanem początkowym, przykładowo $|\phi\rangle$, oraz stanem poddanym ewolucji czasowej, $e^{-i\hat{H}t}|\phi\rangle$. Wielkość ta, nazywana również amplitudą powrotu lub wiernością (ang. *fidelity*), w sposób nietrywialny zależy od czasu o ile tylko $|\phi\rangle$ nie jest stanem własnym Hamiltonianu H . Echo Loschmidta było w ostatnim czasie intensywnie analizowane dla przejść natychmiastowych, gdzie $|\phi\rangle$ jest stanem własnym Hamiltonianu przed przejściem, zaś $\hat{H}$ jest Hamiltonianem po przejściu (patrz np. [55, 56, 57] dla prac poświęconych kwantowemu modelowi Isinga i [58, 59] w ogólnym kontekście).

W dalszej części tego rozdziału skupiamy się na echu Loschmidta w punkcie krytycznym $\hat{H} = H(g = 1)$, obliczonym dla stanu $|\phi\rangle$, który jest nierównowagowym stanem kwantowego modelu Isinga doprowadzonego do punktu krytycznego:

$$L(t) = |\langle\psi(0)|e^{-iH(g=1)t}|\psi(0)\rangle|^2 = |\langle\psi(0)|\psi(t)\rangle|^2, \quad (3.22)$$



Rysunek 3.6: Echo Loschmidta dla układu $N = 2000$ spinów i czasu przejścia $\tau_Q = 100$. Wykres (a) pokazuje okresowość i zanik „powrotów”. Wykres (b) przedstawia echo Loschmidta dla małych czasów ewolucji do pierwszego pik. Szerokość połówkowa pierwszego pik jest oznaczona literą $\tilde{W}$.

gdzie $t \geq 0$, a stan $|\psi(t)\rangle$ można otrzymać wykorzystując ogólną postać (2.35) oraz równanie ewolucji (3.6). Podobne podejście do analizy echa Loschmidta zostało zastosowane w pracy [45], gdzie ciągłe przejście rozpoczynające się i kończące daleko od punktu krytycznego zostało wykorzystane do otrzymania stanu $|\phi\rangle$. Prowadzi to do dynamiki echa Loschmidta różnej od tej, którą zajmujemy się w niniejszej pracy. Rysunek 3.6 przedstawia typową zależność echa Loschmidta od czasu dla przejścia (3.2).

Podobnie jak w przypadku magnetyzacji poprzecznej, w ewolucji echa Loschmidta obserwuje się piki pojawiające się w praktycznie identycznych odstępach czasowych, które stają się coraz mniejsze (w sensie amplitudy) i szersze (w sensie szerokości połówkowej), patrz rysunek 3.7. Piki te często są nazywane w literaturze „powrotami” (ang. *revivals*) - intuicyjnie, wzrost przekrycia między stanami $|\psi(t)\rangle$ i $|\psi(0)\rangle$ oznacza, że stan ewoluowany jest „bliżej” stanowi początkowemu (przyjmując zwyczajową interpretację podobieństwa stanów $|\langle \cdot, \cdot \rangle|$). Echo Loschmidta jest bliskie zeru pomiędzy pikami. Aby dokładniej opisać jego zachowanie, użyjemy podobnych technik jak w przypadku magnetyzacji poprzecznej.

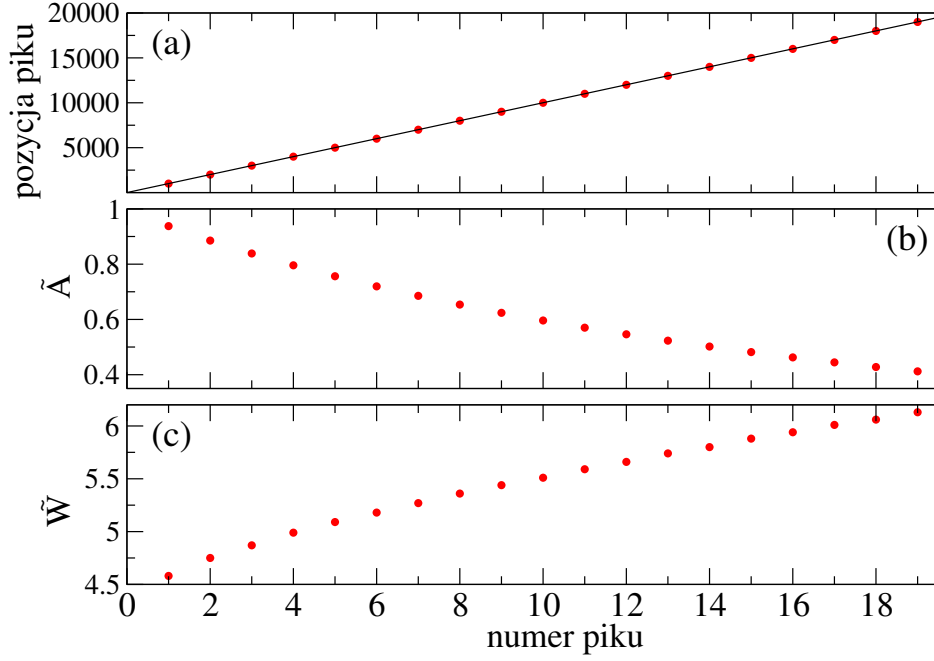
Po pierwsze, zapisujemy stany $|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}(g=1)t} |\psi(0)\rangle$ przy użyciu operatorów fermionowych:

$$|\psi(t)\rangle = \prod_{k \in \mathbf{k}^+} \left[u_k(t) - v_k(t) c_k^\dagger c_{-k}^\dagger \right] |\text{vac}\rangle. \quad (3.23)$$

Unormowanie stanu $|\psi(0)\rangle$ pociąga za sobą warunek $|u_k(t)|^2 + |v_k(t)|^2 = 1$. Wykorzystując to można zapisać:

$$L(t) = \prod_{k \in \mathbf{k}^+} (1 - |u_k(0)v_k(t) - v_k(0)u_k(t)|^2). \quad (3.24)$$

Echo Loschmidta zapisane w takiej postaci pozwala użyć przybliżeń (3.14) dla każdego k . W granicy małych pędów (w sensie nierówności (3.9)), przybliżenia te z bardzo dobrą dokładnością opisują wynik dokładny. Z drugiej strony, dla dużych pędów czynniki gaussowskie w (3.14) powodują, że wyrazy wchodzące w skład iloczynu (3.24) są bliskie 1, dając do dynamiki wkład adiabatyczny.



Rysunek 3.7: Zilustrowana kwaziperiodyczność echa Loschmidta. Wykres (a) pokazuje pozycje kolejnych pików w domenie czasowej. Ciągła, czarna linia przedstawia fit $0.96(23) + 1000.11(2)n$, gdzie n jest numerem pików. Odległość między pikami jest z bardzo dobrą dokładnością równa $N/2 = 1000$ i nie wykazuje stopniowej zmiany w czasie, tak jak to ma miejsce dla amplitudy $\tilde{A}$ i szerokości połowkowej $\tilde{W}$. Symulacje zostały wykonane dla $N = 2000$ i $\tau_Q = 100$, czerwone kropki pokazują wyniki numeryczne.

Podstawiając (3.14) do (3.24) otrzymujemy:

$$L(t) \approx \prod_{k \in \mathbf{k}^+} \left[1 - \sin^2(\varepsilon_k t) e^{-\pi \tau_Q k^2} \right]. \quad (3.25)$$

Wyrażenie to można zestawić z (3.15). Zauważmy, że tutaj, w przeciwieństwie do magnetyzacji poprzecznej, człony „szeregu” proporcjonalne do $k\sqrt{\tau_Q}$ i $(k\sqrt{\tau_Q})^2$ znikają. Podstawiając przybliżenie na energię wzbudzenia w punkcie krytycznym, możemy zapisać:

$$L_0(t) = \prod_{k \in \mathbf{k}^+} \left[1 - \sin^2(2kt) e^{-\pi \tau_Q k^2} \right], \quad (3.26)$$

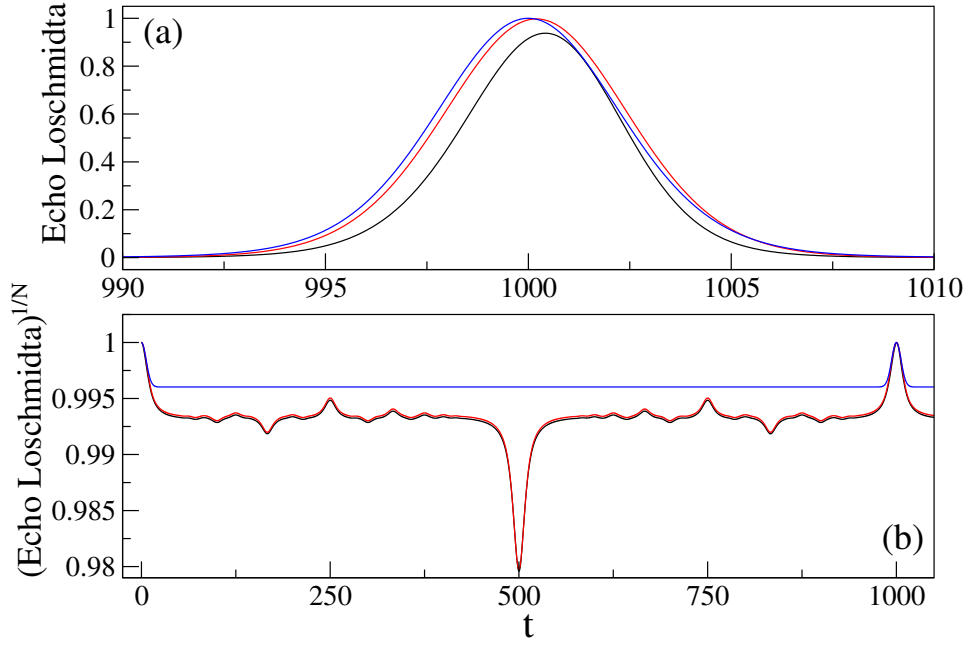
które jest periodyczne z okresem $\frac{N}{2}$. Następnie, wykorzystując $\prod \exp = \exp(\sum)$, przechodząc do granicy termodynamicznej i zamieniając sumę na całkę sprowadzamy powyższe wyrażenie do:

$$\exp\left(\frac{N}{2\pi} \int_0^\pi dk \ln \left[1 - \sin^2(2kt) e^{-\pi \tau_Q k^2} \right]\right). \quad (3.27)$$

Dalsze uproszczenie można otrzymać zauważając, że powyższe wyrażenie ma bardzo ostre maksimum w $t = 0$, skąd wykorzystując rozwinięcie logarytmu $\ln(1+x) \approx x - \dots$ przekształcamy wykładnik w następujący sposób:

$$-\frac{N}{2\pi} \int_0^\pi dk \sin^2(2kt) e^{-\pi \tau_Q k^2} \approx -\frac{N}{8\pi\sqrt{\tau_Q}} \left(1 - e^{-4t^2/(\pi\tau_Q)} \right). \quad (3.28)$$

Przypominamy, że powyższe przybliżenia są poprawne przy założeniu, że $\tau_Q \gg 1$. Podobnie jak w przypadku magnetyzacji poprzecznej, przejście do granicy termodynamicznej spowodowało utratę informacji o periodyczności $L(t)$, co naprawiamy wprowadzając odpowiednie przesunięcia o $N/2$ w wykładniku



Rysunek 3.8: Wykres (a) pokazuje zestawienie dokładnych wyników numerycznych dla echa Loschmidta w pobliżu pierwszego pik (linia czarna) oraz przybliżeń (3.25) i (3.29) (linie czerwona i niebieska, odpowiednio). Wykres (b) pokazuje dane z wykresu (a) podniesione do potęgi $1/N$ i pokazane w szerszym zakresie czasowym. W ten sposób szczegóły echa Loschmidta pomiędzy pikami (gdzie echo Loschmidta jest bardzo bliskie zero) mogą być klarownie uwidocznione tak, że można ocenić jakość poszczególnych przybliżeń. Wykresy wykonano dla rozmiaru układu $N = 2000$ i czasu przejścia $\tau_Q = 100$.

eksponenty. Ostatecznie dostajemy przybliżenie:

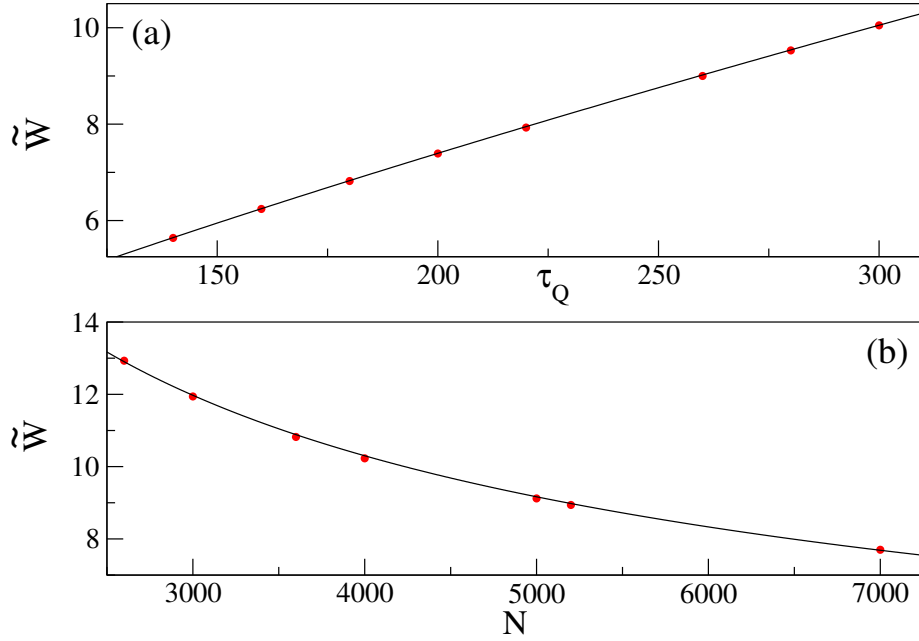
$$L_0(t) \approx \exp \left[-\frac{N}{8\pi\sqrt{\tau_Q}} \left(1 - \sum_{s=0}^{\infty} e^{-4(t-sN/2)^2/(\pi\tau_Q)} \right) \right]. \quad (3.29)$$

Porównanie kolejnych przybliżeń (3.25) i (3.29) z dokładną symulacją numeryczną pokazano na rysunku 3.8. Omówimy teraz po kolei charakterystyczne cechy otrzymanych wyników.

Jakość przybliżeń. Z rysunku 3.8 można wywnioskować, że oba przybliżenia (3.25) i (3.29) zachowują się bardzo podobnie wokół pierwszego pik i z dobrą dokładnością odtwarzają dane numeryczne. Jednakże pomiędzy pikami przybliżenie (3.25) zachowuje się znacznie lepiej niż (3.29), patrz rysunek 3.8(b). Świadczy to o istotnej roli pełnej relacji dyspersji w punkcie krytycznym (3.7) (podobne zachowanie można zaobserwować na rysunku 2 z pracy [55], gdzie badano przejścia natychmiastowe).

Częstość pojawiania się pików. Należy zaznaczyć, że pomimo że piki („powroty”) pojawiają się co $N/2$ z bardzo dobrą dokładnością (co jest widoczne z rysunków 3.6 i 3.7), to ich amplituda i szerokość połówkowa zmieniają się w trakcie ewolucji, czego nie odtwarza wzór (3.29). Interesujące jest to, że pomimo tego, że pełna relacja dyspersji (3.7) jest konieczna do odtworzenia kształtu $L(t)$ pomiędzy pikami, to za ich periodyczność odpowiada jej forma dla najniższych pędów, gdzie działa przybliżenie $\varepsilon_k \approx 2k$.

Amplituda i szerokość połówkowa pików. Ważną cechą przybliżenia (3.29) jest to, że przewiduje stałą, niezależną od τ_Q i N wartość amplitudy $\tilde{A}$ pierwszego pik równą 1 (co nie jest zgodne z wynikiem symulacji, patrz rysunek 3.6). Odróżnia to przybliżenie echa Loschmidta od analogicznego wyrażenia dla magnetyzacji poprzecznej (3.19), które pozwalało uzyskać nietrywialną zależność od czasu przejścia. Wzór (3.29) pozwala jednak opisać zachowanie szerokości połówkowej, którą oznaczamy $\tilde{W}$. Korzystając z tego, że przybliżenie to przewiduje wartość echa Loschmidta równą $\frac{1}{2}$ w



Rysunek 3.9: Wykres (a): szerokość połowkowa echa Loschmidta dla układu $N = 2000$ spinów. Czarna linia przedstawia fit $\ln(\tilde{W}) = -2.01(1) + 0.757(1) \ln(\tau_Q)$, co można zapisać jako $\tilde{W} \approx 0.13\tau_Q^{0.757}$. Ten fit może być porównany do (3.30) obliczonego w $N = 2000$, to jest do wyrażenia $0.165\tau_Q^{3/4}$. Wykres (b): Szerokość połowkowa echa Loschmidta dla czasu przejścia $\tau_Q = 500$. Czarna linia przedstawia fit $\ln(\tilde{W}) = 6.67(4) - 0.523(5) \ln(N)$, co sprowadza się do $\tilde{W} \approx 788.4/N^{0.523}$. Fit ten może być porównany do (3.30) po położeniu $\tau_Q = 500$, co daje $\tilde{W} \approx 782.2/N^{1/2}$. Czerwone kropki na obu wykresach zostały obliczone na podstawie symulacji numerycznych.

połowie pik, możemy zapisać:

$$\tilde{W} \approx \sqrt{-\pi\tau_Q \ln \left| 1 - \frac{8\pi\sqrt{\tau_Q} \ln 2}{N} \right|} \approx 2\pi\sqrt{2\ln 2} \frac{\tau_Q^{3/4}}{\sqrt{N}} \approx 7.4 \frac{\tau_Q^{3/4}}{\sqrt{N}}, \quad (3.30)$$

gdzie do rozwinięcia logarytmu skorzystano z warunku $N \gg \sqrt{\tau_Q}$ (patrz warunek (1.29), po uwzględnieniu $z = \nu = 1$). Weryfikację powyższego przewidywania z danymi numerycznymi dla pierwszego pik przedstawiono na rysunku 3.9.

Jest widoczne, że wykładniki skalujące (3.30) zgadzają się z dokładnością kilku procent z wynikami numerycznymi (zarówno skalowanie względem τ_Q , jak i również N). Sama zależność (3.30) jest nietypowa na pierwszy rzut oka. Przeprowadzając analizę wymiarową, można ją zapisać w postaci:

$$\tilde{W} \sim \hat{t} \sqrt{\frac{\hat{\xi}}{\ell}}, \quad (3.31)$$

gdzie ℓ oznacza długość łańcucha spinowego, to znaczy stałą sieci pomnożoną przez N . Długość łańcucha pojawia się w (3.31) poprzez zamianę sumy na całkę po pędach w (3.27). Nierównowagowa długość korelacji $\hat{\xi}$ pochodzi od założenia mechanizmu Kibbla-Zurka, które mówi że uniwersalna dynamika układu zależy od pędów poprzez wyrażenie $k/\hat{k} \sim k\hat{\xi}$. Przeskalowanie pędów pod całką (3.28)

$$k \rightarrow k/\hat{\xi} \quad (3.32)$$

powoduje pojawienie się czynnika $\hat{\xi}$ w (3.31). Z kolei $\hat{t}$ pojawia się w wyrażeniu (3.31) poprzez relację dyspersji. Aby to pokazać, zauważmy że czas wchodzi równań poprzez wyrażenie $\varepsilon_k t \sim k^z t$ dla nisko energetycznych modów w punkcie krytycznym, których wzbudzenie powoduje pojawienie się powrotów

widocznych w echu Loschmidta. Następnie wykorzystujemy przeskalowanie (3.32) otrzymując $\varepsilon_k t \rightarrow k^z t / \hat{\xi}^z$ i jednocześnie zauważając, że w teorii Kibbla-Zurka mamy $\hat{\xi}^z \sim \hat{t}$. Ta procedura pozwala uzyskać $t/\hat{t}$, co zadaje skalę czasową w (3.31).

Na koniec zauważmy, że stosując powyższe rozumowanie można również odtworzyć skalowanie amplitudy $A \sim 1/\hat{\xi}$ i szerokości połówkowej piku magnetyzacji poprzecznej $W \sim \hat{t}$ (zgodnie ze wzorem (3.20)).

3.3 Podsumowanie

W poprzednich podrozdziałach rozważaliśmy ciągle przejście w modelu Isinga, który początkowo był przygotowany w stanie podstawowym głęboko w fazie paramagnetycznej. Przejście zostało doprowadzone do punktu krytycznego $g_c = 1$, a następnie układ ewoluował swobodnie. Skupiliśmy się na analizie magnetyzacji poprzecznej oraz echa Loschmidta. Obie te wielkości wykazują charakterystyczną periodyczną strukturę, gdzie kolejne piki pojawiają się w odległości proporcjonalnej do rozmiaru układu, zaś ich szerokość połówkowa skaluje się zgodnie z przewidywaniami teorii Kibbla-Zurka. Zaproponowaliśmy prosty sposób ścisłego, analitycznego sposobu opisu tych ewolucji.

Podkreślamy, że w naszych symulacjach nie stosujemy granicy termodynamicznej $N \rightarrow \infty$, która była zazwyczaj zakładana we wcześniejszych pracach (zobacz np. [45, 60]). Jest to istotne z dwóch powodów. Po pierwsze, pozwala zaobserwować kwaziperiodyczne piki, których okres jest rozbieżny w granicy termodynamicznej. Po drugie, wyniki dla skończonego rozmiaru powinny mieć znaczenie z punktu widzenia układów eksperymentalnych, których rozmiar zazwyczaj znacząco odbiega od granicy termodynamicznej (najnowsze symulatory kwantowe pozwalają badać eksperymentalnie ok $N = 50$ spinów), patrz [61, 62].

Jeżeli chodzi o analizę echa Loschmidta, to istotną wartością dodaną niniejszej pracy w stosunku do poprzednich wyników [55, 57] jest rozważenie nietrywialnego stanu początkowego. Stan ten bowiem generujemy za pomocą nierównowagowej ewolucji, która zawiera informację o wykładnikach krytycznych z oraz ν . Dzięki temu echo Loschmidta jest dodatkowo parametryzowane przez τ_Q , co czyni je bardziej złożoną wielkością, która może być wykorzystana do próbkowania dynamiki nierównowagowej.

Przedstawione w tym rozdziale wyniki mogą być rozbudowane w różny sposób. Po pierwsze, można rozważać modele całkowalne wykazujące inne wartości wykładników krytycznych z oraz ν . Po drugie, można rozważyć układy w skończonej temperaturze i sprawdzić, jaki wpływ na własności skalowania pików ma wprowadzenie dodatkowego parametru, jakim jest temperatura. Elementy rozszerzenia teorii Kibbla-Zurka na układy w skończonej temperaturze można znaleźć np. w [63]. Trzecią, i najbardziej ambitną drogą dalszych badań jest rozważenie układów niecałkowalnych, które nie mają analitycznego rozwiązania, takich jak model Bosego-Hubbarda [64] czy dalekozasięgowy model Isinga [65]. Te eksperymentalnie realizowalne układy wykazują kwantowe przejścia fazowe i można badać ich dynamikę nierównowagową w kontekście mechanizmu Kibbla-Zurka.

Jeszcze inną, komplementarną drogę postępowania implementujemy w następnym rozdziale, w którym rozważamy przejścia z fazy ferromagnetycznej m.in. do punktu krytycznego, zaś główną obserwabłą poddaną analizie jest magnetyzacja podłużna.

Rozdział 4

Dynamika magnetyzacji podłużnej i łamanie symetrii

Celem tego rozdziału jest przeanalizowanie zjawiska łamania symetrii w fazie ferromagnetycznej z wykorzystaniem przejść nierównowagowych i mechanizmu Kibbla-Zurka. Podobnie jak w poprzednim rozdziale, prototypowym modelem wykorzystanym do symulacji będzie model Isinga, lecz zaprezentowane rozważania mogą być też zastosowane do innych układów wykazujących przejście fazowe i podobną strukturę poziomów energetycznych (patrz rys. 2.1). Kluczową wielkością jest przerwa energetyczna związana z łamaniem symetrii δ ((2.25), (2.27)). Przypominamy, że zanika ona wykładniczo wraz z rozmiarem układu w fazie ferromagnetycznej i w granicy termodynamicznej stan układu jest dwukrotnie zdegenerowany dla $0 \leq g < 1$, podczas gdy Hamiltonian jest symetryczny względem zamiany $\sigma_i^x \rightarrow -\sigma_i^x$ - stąd użycie terminu „łamanie symetrii” w tym kontekście. Pomimo tego, że rozważamy szczególny model, metoda ma ogólny charakter i może być zastosowana zarówno do numerycznego jak i eksperymentalnego wyznaczania przerwy energetycznej.

Idea jest następująca: układ jest początkowo przygotowany w stanie, w którym wszystkie spiny są spolaryzowane w kierunku x (schematycznie można to przedstawić jako $|\rightarrow\rightarrow\ldots\rightarrow\rangle$) i zewnętrzne pole g jest równe 0. Następnie g jest zmieniane z czasem przejścia τ_Q do różnych wartości w fazie ferromagnetycznej, w fazie paramagnetycznej oraz do punktu krytycznego, po czym układ ewoluuje swobodnie. Analizując potem ewolucję swobodną magnetyzacji podłużnej, można uzyskać informacje o zachowaniu przerwy energetycznej związanej z łamaniem symetrii (2.25), a także wykorzystać mechanizm Kibbla-Zurka w celu ilościowej oceny, jak adiabatyczne jest rozważane przejście.

Organizacja rozdziału jest następująca. W pierwszym podrozdziale przedstawiamy idee oraz przypominamy znane wyniki dotyczące zachowania magnetyzacji podłużnej w modelu Isinga z periodycznymi warunkami brzegowymi. W drugim podrozdziale prezentujemy wyniki dla symulacji wykonanych w układzie z periodycznymi warunkami brzegowymi (za pomocą metody bezpośredniej diagonalizacji Hamiltonianu). Podrozdziały trzeci i czwarty zawierają wyniki dla modelu Isinga z otwartymi warunkami brzegowymi, dla większych rozmiarów układu. Wykorzystując kształt obserwowanych ewolucji podajemy systematyczną metodę określenia „adiabatyczności” przejścia oraz porównujemy ją z przewidywaniami teorii Kibbla-Zurka i skalowania skończonego rozmiaru. Podrozdział piąty stanowi podsumowanie oraz przedstawia eksperymentalny kontekst prezentowanych wyników. Niniejszy rozdział bazuje na pracy [30], z pracy tej zaczerpnięto również wszystkie rysunki.

4.1 Wprowadzenie

Ideę tego rozdziału przedstawiamy dla modelu Isinga z periodycznymi warunkami brzegowymi:

$$H(g) = - \sum_{i=1}^N (\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + g \sigma_i^z), \quad \sigma_{N+1}^x = \sigma_1^x. \quad (4.1)$$

Układ ten poddany jest ciągłemu przejściu, które jest zadane wzorem:

$$g(t) = \begin{cases} g_f + t/\tau_Q & \text{dla } -g_f\tau_Q \leq t \leq 0 \\ g_f & \text{dla } t > 0. \end{cases} \quad (4.2)$$

Wartość τ_Q kontroluje szybkość zmian pola magnetycznego do wartości g_f , gdzie rozpoczyna się ewolucja swobodna. Stan początkowy w $g = 0$ jest wybrany w następujący sposób:

$$|\psi\rangle = |\rightarrow\rightarrow\ldots\rightarrow\rangle. \quad (4.3)$$

Naturalną obserwabłą do badania zjawiska łamania symetrii jest magnetyzacja podłużna:

$$M_x = \langle \sigma_i^x \rangle, \quad (4.4)$$

gdzie wybór oczka sieci i nie ma znaczenia w modelu z periodycznymi warunkami brzegowymi, z uwagi na translacyjną niezmienniczość. Magnetyzacja podłużna jest czuła na sposób, w jaki symetria $\sigma_x^i \rightarrow -\sigma_x^i$ jest łamana. Zachodzi bowiem:

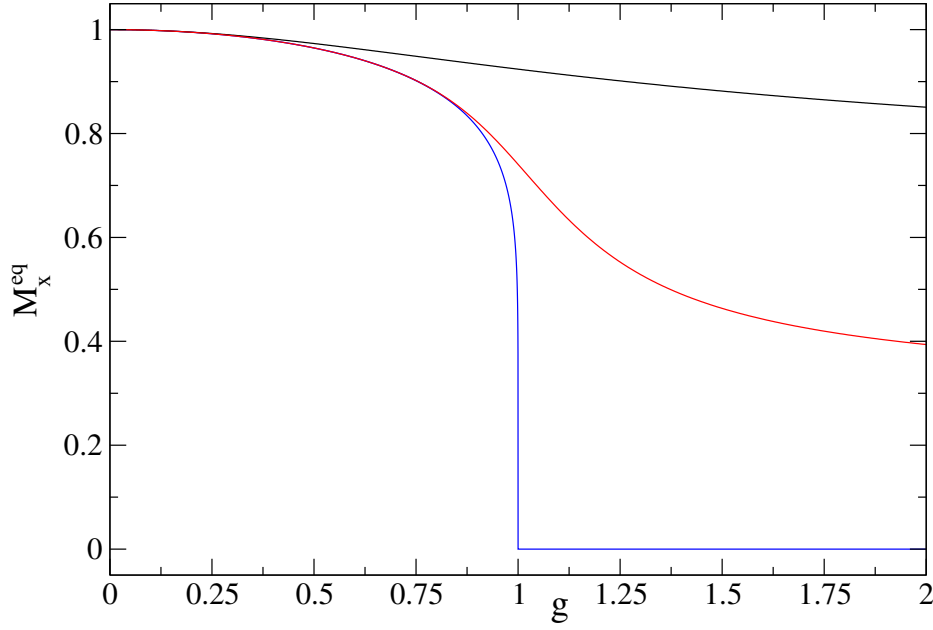
$$-M_x^{eq} \leq M_x \leq M_x^{eq}, \quad (4.5)$$

gdzie wartość M_x^{eq} spełnia:

$$M_x^{eq} = \begin{cases} (1 - g^2)^{1/8} & \text{dla } 0 \leq g \leq 1 \\ 0 & \text{dla } g > 1 \end{cases}. \quad (4.6)$$

dla rozmiaru układu dążącego do nieskończoności [6]. Wielkość M_x^{eq} będziemy nazywać magnetyzacją równowagową, jej zachowanie w granicy $N \rightarrow \infty$ zostało otrzymane z dwupunktowej funkcji korelacji. Będziemy analizować M_x^{eq} w układach o skończonym rozmiarze, gdzie, jak zobaczymy dalej, należy zastosować nieco inne podejście.

Typowe zachowanie magnetyzacji równowagowej przedstawiono na rysunku 4.1, skąd jest jasne, że magnetyzacja dla skończonych układów jest analityczna. Kluczowe jest teraz zrozumienie, w jaki sposób analiza M_x może być użyta do znajdowania przerwy energetycznej związanej z łamaniem symetrii. Aby to wyjaśnić, odwołamy się do rozdziałów 1 i 2. Przypomnijmy, że kluczowy jest fakt, że Hamiltonian (4.1) komutuje z operatorem parzystości zdefiniowanym w (2.6). Dzięki temu, przestrzeń Hilberta można przedstawić jako sumę prostą dwóch podprzestrzeni: o dodatniej parzystości i o ujemnej. Przerwa energetyczna związana z łamaniem symetrii δ jest różnicą pomiędzy pomiędzy najniższymi poziomami energetycznymi Hamiltonianu w obu podprzestrzeniach. Wyrażenia na δ w różnych fazach oraz jej zachowanie asymptotyczne zostało przytoczone we wzorach (2.27)-(2.29). Struktura poziomów energetycznych jest przedstawiona na rysunku 2.1. Warto również przypomnieć rolę dynamicznych przerw energetycznych Δ_+ i Δ_- , które są zdefiniowane jako odległości pomiędzy najniższymi poziomami energetycznymi w każdej podprzestrzeni osobno. Ich główna rola w rozważanych ewolucjach polega na tym, że relacja komutacji (2.26) zabrania dynamicznych przejść pomiędzy podprzestrzeniami o różnych parzystościach. Dlatego wzbudzenia układu generowane podczas przejścia (4.2) zależą od τ_Q , $\Delta_{\pm}$ i stanu początkowego. Przerwa energetyczna δ odgrywa istotną rolę jedynie w



Rysunek 4.1: Magnetyzacja równowagowa M_x^{eq} w modelu Isinga z periodycznymi warunkami brzegowymi. Krzywe, od góry do dołu, odpowiadają rozmiarom układu 2 (czarny), 12 (czerwony) oraz ∞ (niebieski). Pierwsza z nich została otrzymana za pomocą wzoru (4.19), druga za pomocą diagonalizacji numerycznej Hamiltonianu, zaś trzecia ze wzoru (4.6).

sytuacji, gdy pojawia się łamanie symetrii - a to ma miejsce w przypadku wybranego przez nas stanu początkowego $|\psi\rangle$. Zauważmy bowiem, że:

$$|\psi\rangle = |\psi_+\rangle + |\psi_-\rangle, \quad (4.7)$$

gdzie

$$|\psi_+\rangle = \frac{|\rightarrow\rightarrow\rightarrow\dots\rangle + |\leftarrow\leftarrow\leftarrow\dots\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |\psi_-\rangle = \frac{|\rightarrow\rightarrow\rightarrow\dots\rangle - |\leftarrow\leftarrow\leftarrow\dots\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (4.8)$$

Stany $|\psi_+\rangle$ i $|\psi_-\rangle$ mają dobrze określoną parzystość, tzn. $P|\psi_{\pm}\rangle = \pm|\psi_{\pm}\rangle$. Gdy stan ewoluuje w czasie, można zapisać:

$$|\psi(t)\rangle = |\psi_+(t)\rangle + |\psi_-(t)\rangle, \quad P|\psi_{\pm}(t)\rangle = \pm|\psi_{\pm}(t)\rangle \quad (4.9)$$

Zauważmy teraz, że

$$\langle\psi_+(t)|\sigma_i^x|\psi_+(t)\rangle = \langle\psi_-(t)|\sigma_i^x|\psi_-(t)\rangle = 0. \quad (4.10)$$

Wynika to z twierdzenia Wicka - ponieważ liczba operatorów fermionowych w σ_i^x jest nieparzysta, łączna liczba operatorów w powyższych wyrażeniach również jest nieparzysta, skąd są one równe 0. Zatem:

$$M_x(t) = \langle\psi_+(t)|\sigma_i^x|\psi_-(t)\rangle + \text{c.c.} \quad (4.11)$$

W ogólności, obliczenie $M_x(t)$ dla dowolnego τ_Q jest skomplikowane. Jeżeli jednak założymy, że τ_Q jest na tyle duże, że ewolucja jest adiabatyczna, to wykorzystując przykładowo (1.17) można zapisać:

$$M_x(t) = \cos\left(\int_{-g_f\tau_Q}^t dt \delta[g(t)]\right) + \langle\gamma = 1, g(t)|\sigma_i^x|\gamma = 1, g(t)\rangle^-. \quad (4.12)$$

Stany $|\gamma = 1, g(t)\rangle^{\pm}$ są zdefiniowane w rozdziale 2 (patrz (2.16), (2.23)). Dla części ewolucji swobodnej ($t > 0$) powyższe wyrażenie sprowadza się do:

$$M_x(t) = M_x^{eq}(g_f) \cos[\delta(g_f)t + \text{const}], \quad (4.13)$$

gdzie stałą fazę można wyznaczyć na podstawie przebiegu ewolucji dla $t < 0$. Powyższe wyrażenie może być użyte do wyznaczania magnetyzacji równowagowej oraz przerwy energetycznej związanej z łamaniem symetrii na podstawie danych numerycznych lub doświadczalnych.

W tym miejscu pojawia się naturalne pytanie, kiedy (tzn. dla jakich wartości τ_Q) należy uznać, że jesteśmy już w reżimie adiabatycznym. Problem ten będziemy nazywać zagadnieniem *zmiany reżimów* i poświęcimy mu drugą część podrozdziału 4.4, gdzie przedstawimy ilościową metodę podejścia do tego problemu. Teraz przedstawimy jakościowe rozumowanie, które bazuje na teorii Kibbla-Zurka. Mianowicie przypomnijmy, że zgodnie z teorią Kibbla-Zurka nierównowagowa skala długości zachowuje się w następujący sposób:

$$\hat{\xi} \sim \tau_Q^{\nu/(1+z\nu)}. \quad (4.14)$$

Ewolucja jest adiabatyczna dla dużych $\tau_Q \rightarrow \infty$, przestaje być adiabatyczna, gdy wyżej zdefiniowana nierównowagowa długość korelacji staje się mniejsza niż rozmiar układu. Dla modelu Isinga ($z = \nu = 1$) warunek ten można zapisać w postaci:

$$\tau_Q \sim N^{(1+z\nu)/\nu} \sim N^2. \quad (4.15)$$

Oznacza to, że dla czasów przejścia rzędu N^2 lub większych można oczekiwać, że dynamika jest z dobrym przybliżeniem adiabatyczna.

4.1.1 Przypadek dwóch spinów

Zademonstrujemy teraz, w jaki sposób przerwa energetyczna związana z łamaniem symetrii oraz równowagowa magnetyzacja podłużna mogą być obliczone w najprostszej wersji modelu Isinga, mianowicie składającego się jedynie z dwóch spinów.

W tym przypadku można obliczyć wszystkie energie własne i odpowiadające im stany własne:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{0,+} &= -2\sqrt{1+g^2}, \quad |0\rangle^+ = A_-|\uparrow\uparrow\rangle + B_-|\downarrow\downarrow\rangle, \\ \mathcal{E}_{0,-} &= -2, \quad |0\rangle^- = \frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}, \\ \mathcal{E}_{1,-} &= 2, \quad |1\rangle^- = \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}, \\ \mathcal{E}_{1,+} &= 2\sqrt{1+g^2}, \quad |1\rangle^+ = A_+|\uparrow\uparrow\rangle + B_+|\downarrow\downarrow\rangle, \end{aligned} \quad (4.16)$$

gdzie $\sigma^z|\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle$, $\sigma^z|\downarrow\rangle = -|\downarrow\rangle$,

$$A_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}\sqrt{1+g^2 \pm g\sqrt{1+g^2}}}, \quad B_{\pm} = -\frac{g \pm \sqrt{1+g^2}}{\sqrt{2}\sqrt{1+g^2 \pm g\sqrt{1+g^2}}}, \quad (4.17)$$

oraz $|0\rangle^{\pm}$ oraz $|1\rangle^{\pm}$ oznaczają odpowiednio stan podstawowy oraz wzbudzony w każdej z podprzestrzeni.

Korzystając z tych wyników, natychmiast otrzymuje się:

$$\delta = \mathcal{E}_{0,-} - \mathcal{E}_{0,+} = 2\left(\sqrt{1+g^2} - 1\right), \quad (4.18)$$

co jest zgodne z (2.27) dla $N = 2$.

Łatwo teraz pokazać, że ekstremalne wartości magnetyzacji podłużnej w unormowanym stanie, który jest liniową kombinacją stanów $|0\rangle^+$ oraz $|0\rangle^-$ są równe:

$$\begin{aligned} M_x &= \pm^+ \langle 0 | \sigma_i^x | 0 \rangle^- \\ &= \pm \frac{1}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{g}{\sqrt{1+g^2}}} + \sqrt{1 - \frac{g}{\sqrt{1+g^2}}} \right). \end{aligned} \quad (4.19)$$

Powyższa funkcja zależna od g jest pokazana na rysunku 4.1, gdzie można łatwo zauważyć, że wraz ze wzrostem g , różni się ona coraz bardziej od wyrażenia z granicy termodynamicznej (4.6). Ta różnica jest niezerowa w całej fazie paramagnetycznej. Co więcej, można pokazać, że w układzie N spinów z periodycznymi warunkami brzegowymi, magnetyzacja podłużna w granicy dużych wartości pola spełnia:

$$M_x^{eq}(g \rightarrow \infty) = \frac{1}{\sqrt{N}}. \quad (4.20)$$

Tak prosty wynik wynika z obserwacji, że dla $g \rightarrow \infty$ stan podstawowy o dodatniej parzystości dąży do $|\uparrow\uparrow\uparrow\cdots\rangle$, zaś stan podstawowy o ujemnej parzystości zmierza do:

$$\frac{|\downarrow\uparrow\uparrow\cdots\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\cdots\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\cdots\rangle + \cdots}{\sqrt{N}}. \quad (4.21)$$

4.2 Periodyczne warunki brzegowe

Przeanalizujemy teraz dynamikę magnetyzacji podłużnej w modelu Isinga z periodycznymi warunkami brzegowymi. Istnieją różne sposoby postępowania. Najbardziej oczywistym jest operowanie w przestrzeni Focka, która jest rozpięta przez wszystkie stany postaci $|\uparrow\uparrow\downarrow\cdots\rangle$.

W tak zdefiniowanej przestrzeni można łatwo wyróżnić podprzestrzeń o dodatniej i ujemnej parzystości, gdzie można przeprowadzać ewolucję czasową niezależnie. Dodatkową zaletą tej metody jest również łatwość obliczania magnetyzacji podłużnej. Wada jest oczywista: zasoby pamięciowe oraz czas wykonania symulacji rosną wykładniczo wraz z N , co znacznie ogranicza możliwe do analizy rozmiary układów. Inne podejście (stosowane w pozostałych podrozdziałach) polega na mapowaniu układu spinów na swobodne fermiony - redukuje to problem do znalezienia ewolucji czasowej N dwupoziomowych układów. Jest to najefektywniejsza metoda znajdowania funkcji falowej (4.9). Problem w tym podejściu polega na obliczeniu magnetyzacji podłużnej (patrz uwaga pod wzorem (2.68)). Dlatego użyjemy tu pierwszego podejścia, to jest numerycznej ewolucji w pełnej przestrzeni Focka, aby scharakteryzować ewolucję magnetyzacji podłużnej dla układu $N = 12$ spinów. W następnym podrozdziale zrezygnujemy z translacyjnej niezmienniczości i przeprowadzimy symulację dla znacznie większych rozmiarów układów z otwartymi warunkami brzegowymi.

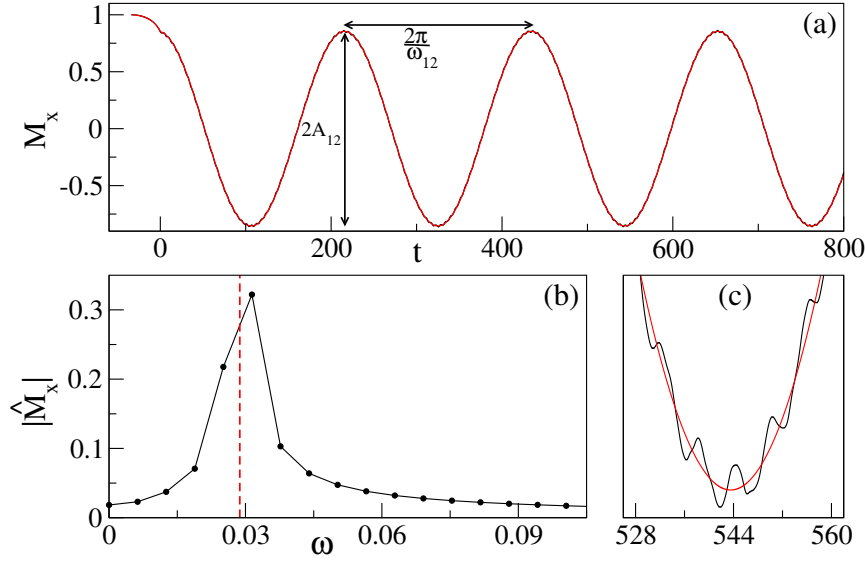
Wyniki symulacji numerycznych przejścia (4.2) dla periodycznych warunków brzegowych przedstawiono na rysunkach 4.2, 4.3, 4.4. Wartość τ_Q jest wybrana na tyle duża, aby przejście było prawie adiabatyczne. Zakładamy, że ewolucja swobodna odbywa się w przedziale czasowym:

$$0 \leq t \leq L. \quad (4.22)$$

W przedziale tym obserwuje się oscylacje, które będziemy badać różnymi sposobami:

1. **Ekstrakcja z danych numerycznych.** Obliczenie różnicy położenia dwóch pierwszych maksimum $M_x(t)$ i wykorzystanie jej do obliczenia częstości oscylacji ω_{12} . Wykorzystując dane numeryczne można też obliczyć różnicę pomiędzy $M_x(t)$ w pierwszym maksimum i w drugim minimum aby dostać amplitudę oscylacji A_{12} . Wielkości te zilustrowano na rysunku 4.2. Częstość ω_{12} oraz amplituda A_{12} stanowią oszacowanie $\delta(g_f)$ oraz $M_x^{eq}(g_f)$ (patrz dyskusja wokół wzoru (4.13)). Jest to najprostszy sposób charakteryzacji oscylacji pojawiających się po przejściu, wymagana jest jedynie znajomość położenia i wysokości dwóch maksimum.
2. **Fit nieliniowy.** Wykonanie nieliniowego fitu funkcji postaci:

$$M_x(t) = A_{\text{fit}} \cos(\omega_{\text{fit}} t + \text{const}) \quad (4.23)$$



Rysunek 4.2: Dynamika magnetyzacji podłużnej dla przejścia zatrzymanego w fazie ferromagnetycznej, $g_f = 0.85$. Przejście nierównowagowe kończy się w $t = 0$, gdzie zaczyna się ewolucja swobodna. Wykres (a): krzywa czarna pokazuje wyniki numeryczne, zaś czerwona przybliżenie (4.12). Wykres (b): moduł dyskretnej transformaty Fouriera (4.24) z ewolucji swobodnej magnetyzacji podłużnej obliczony w pobliżu przerwy energetycznej związanej z łamaniem symetrii δ (oznaczonej na rysunku czerwoną przerywaną linią). Wykres (c): powiększenie części wykresu (a) w pobliżu trzeciego minimum. Rozmiar układu wynosi $N = 12$, czas przejścia $\tau_Q = 40$ oraz zakres czasowy oscylacji swobodnych jest równy $L = 1000$.

do danych numerycznych. Fit wykonujemy za pomocą funkcji `NonlinearModelFit` programu [54]. Funkcja ta pozwala również oszacować niepewność statystyczną wyznaczanych parametrów, która jest zanedbywalna w naszym przypadku. Zbadanie kilku okresów oscylacji zapewnia wykorzystanie pełnego potencjału tej metody.

3. Dyskretna transformata Fouriera. Obliczenie dyskretnej transformaty Fouriera zdefiniowanej jako:

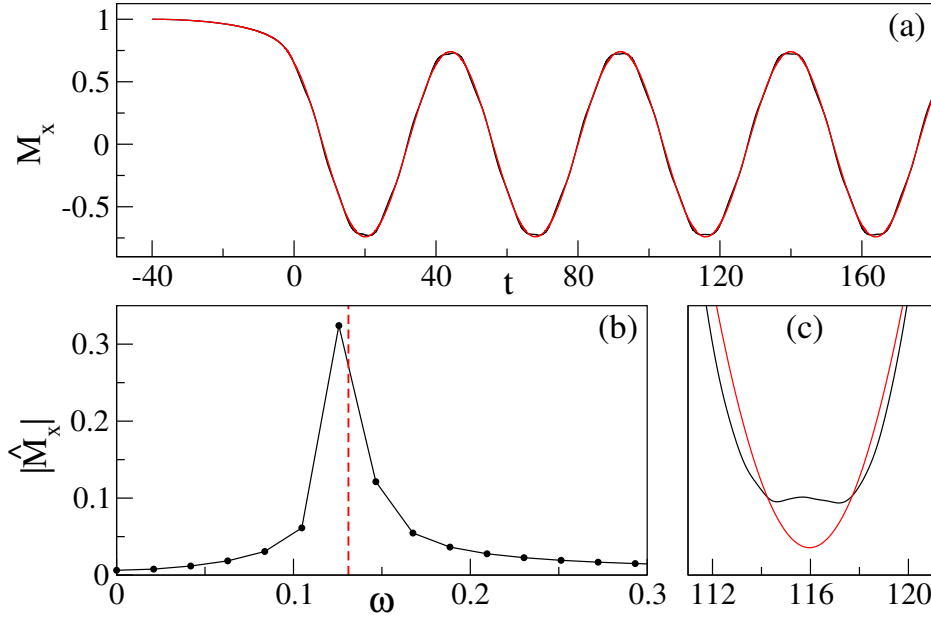
$$\hat{M}_x(\omega_j) = \frac{1}{S} \sum_{s=0}^{S-1} M_x(s\Delta t) e^{i\omega_j s\Delta t}, \quad (4.24)$$

$$\Delta t = \frac{L}{S}, \quad \omega_j = \frac{2\pi j}{L}, \quad j = 0, 1, \dots, S-1,$$

gdzie S jest liczbą punktów danych numerycznych wygenerowanych podczas ewolucji. Będziemy wyznaczać maksimum globalne $|\hat{M}_x|$ odczytując jego położenie $\omega_{\max}$ oraz wysokość $|\hat{M}_x(\omega_{\max})|$. Pierwsza z tych wielkości będzie stanowić oszacowanie $\delta(g_f)$, zaś druga oszacowanie na połowę wartości M_x^{eq} . Dlatego wprowadzamy notację:

$$A_{\max} = 2|\hat{M}_x(\omega_{\max})|. \quad (4.25)$$

Zastosowaliśmy wszystkie te techniki do danych z rysunków 4.2 - 4.4, wyniki prezentujemy w tabelicy 4.1. Możliwość przetestowania różnych sposobów analizy danych jest korzyścią, która płynie z rozważenia na początku prostych ewolucji w układzie z periodycznymi warunkami brzegowymi. Można zaobserwować bardzo dobrą zgodność wartości ω_{12} , ω_{fit} oraz A_{12} , A_{fit} z teoretycznymi wartościami δ oraz M_x^{eq} (patrz tablice 4.1, 4.2).



Rysunek 4.3: Dynamika magnetyzacji podłużnej w układzie z okresowymi warunkami brzegowymi dla przejścia zatrzymanego w punkcie krytycznym. Organizacja wykresów jest taka, jak na rysunku 4.2. Wartości parametrów: $N = 12$, $g_f = 1$, $\tau_Q = 40$, $L = 300$.

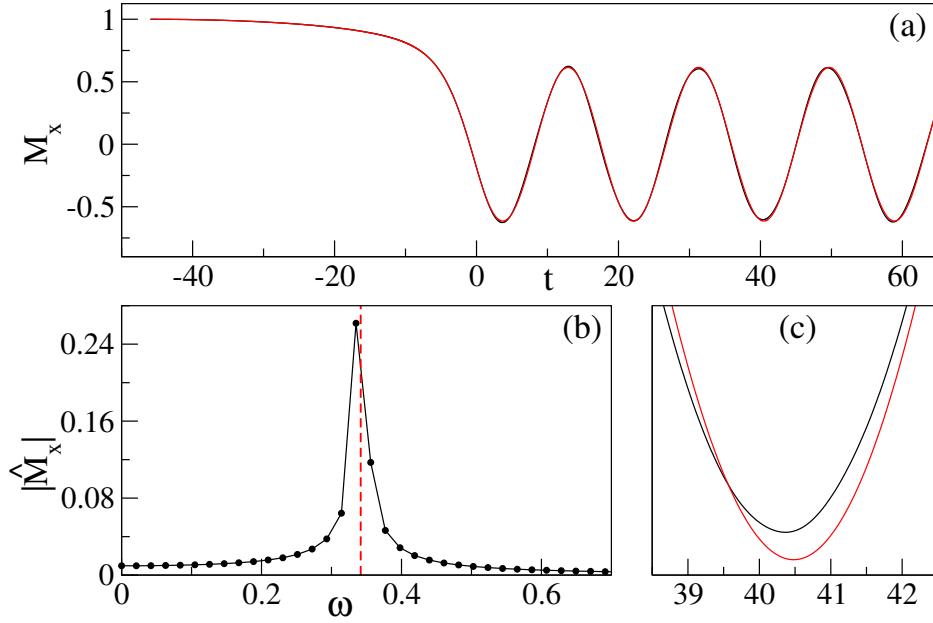
	ω_{12}	ω_{fit}	ω_{max}	A_{12}	A_{fit}	A_{max}
$g_f = 0.85$	0.028422	0.028747	0.031416	0.8620	0.8538	0.64
$g_f = 1$	0.13114	0.13108	0.12566	0.7286	0.7397	0.65
$g_f = 1.15$	0.34177	0.34174	0.33510	0.6178	0.6146	0.52

Tablica 4.1: Wartości parametrów charakteryzujących ewolucję swobodną z rysunków 4.2 - 4.4. Wielkości ω_{12} , ω_{fit} , ..., A_{max} są zdefiniowane w dyskusji wokół wzorów (4.23) i (4.24). Fitowanie zostało wykonane w przedziale czasowym $0 \leq t \leq 4 \times \frac{2\pi}{\delta(g_f)}$, co odpowiada czterem okresom oscylacji.

Jeżeli jednak porównamy wartości obliczone na podstawie transformaty Fouriera, tj. ω_{max} oraz A_{max} z δ oraz M_x^{eq} , to można zauważyć, że pojawiają się istotne rozbieżności. Szacowanie przerwy energetycznej związanej z łamaniem symetrii poprzez ω_{max} jest obarczone błędem wynikającym z rozdzielczości spektralnej transformaty Fouriera - dla przebiegu czasowego o długości L jest ona równa

$$\frac{2\pi}{L}. \quad (4.26)$$

Jest to widoczne na rysunkach 4.2b - 4.4b, gdzie odległość w poziomie pomiędzy punktami waha się od 0.006 do 0.02, a więc nie jest zanedbywalna względem δ . Na oszacowanie magnetyzacji równowagowej za pomocą A_{max} dodatkowy wpływ ma obsadzenie innych modów Fourierowskich, co obniża wartość $|\hat{M}(\omega_{\text{max}})|$. Zjawisko to można łatwo wyjaśnić za pomocą twierdzenia Plancherela [66]. Dobra jakość oszacowań δ oraz M_x^{eq} otrzymanych za pomocą dwóch pierwszych metod wynika z wyboru odpowiednio dużego τ_Q , dzięki czemu ewolucja jest bliska adiabatycznej. Patrząc na rysunki 4.2c - 4.4c można zauważyć małe odchylenie od idealnie adiabatycznej ewolucji. Podobne właściwości wykazują ewolucje w układzie z otwartymi warunkami brzegowymi - przechodzimy do ich analizy w następnym podrozdziale.



Rysunek 4.4: Dynamika magnetyzacji podłużnej w układzie z periodycznymi warunkami brzegowymi dla przejścia zatrzymanego w fazie paramagnetycznej. Organizacja wykresów jest taka, jak na rysunku 4.2. Wartości parametrów: $N = 12$, $g_f = 1.15$, $\tau_Q = 40$, $L = 300$.

	δ	Δ_+	Δ_-	M_x^{eq}
$g = 0.85$	0.028747	1.13	2.00	0.8545
$g = 1$	0.13109	1.04	2.07	0.7407
$g = 1.15$	0.34167	1.27	2.30	0.6146

Tablica 4.2: Przerwa energetyczna związana z łamaniem symetrii δ , dynamiczne przerwy energetyczne $\Delta_{\pm}$ oraz magnetyzacja równowagowa M_x^{eq} obliczone dla modelu Isinga z periodycznymi warunkami brzegowymi dla rozmiaru układu $N = 12$. Wartości δ oraz $\Delta_{\pm}$ są obliczone za pomocą analitycznych wyrażeń (patrz (2.27), (2.30)), zaś M_x^{eq} za pomocą numerycznej diagonalizacji Hamiltonianu. Część z tych wyników została pokazana na rysunku 2.1 z rozdziału 2.

4.3 Otwarte warunki brzegowe

W tym podrozdziale będziemy zajmować się Hamiltonianem modelu Isinga z otwartymi warunkami brzegowymi:

$$H_{OBC}(g) = - \sum_{i=1}^{N-1} (\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + g \sigma_i^z). \quad (4.27)$$

Układy z otwartymi warunkami brzegowymi są warte głębszej analizy z kilku powodów. Po pierwsze, możliwości eksperymentalne ich realizacji są o wiele bogatsze - zaprojektowanie układu z cyklicznym oddziaływaniem spinów jest bardzo skomplikowane (patrz [67] dla wyczerpującego opisu jak mogłoby to być zrealizowane w symulatorze układu spinowego działającego z wykorzystaniem zimnych jonów).

Po drugie, jak już wspominaliśmy w rozdziale 2, obliczenia magnetyzacji podłużnej są znacznie prostsze w układzie z otwartymi warunkami brzegowymi. Główną tego przyczyną jest fakt, że operator parzystości nie pojawia się wtedy w reprezentacji Hamiltonianu za pomocą operatorów fermionowych (patrz wzory (2.5), (2.49)). Dzięki temu możliwe będzie przeprowadzenie symulacji dla rozmiarów układu rzędu kilkuset spinów, co pozwoli na systematyczne zbadanie problemu zmiany reżimów (z nierównowagowego do adiabatycznego) z wykorzystaniem teorii Kibbla-Zurka. W dalszej części tego podrozdziału będziemy korzystać z wyników przedstawionych w rozdziale 2. W szczególności, przydatne

będą wzory na energie wzbudzeń jednocząstkowych (2.54). Ich wartości liczbowe zamieszczamy w tablicy 4.4.

Stosujemy przejścia takiej samej postaci, jak dla okresowych warunków brzegowych, tzn. dane wzorem (4.2). W celu opisanego, jakie częstości mogą pojawiać się w ewolucji swobodnej, zapiszmy najbardziej ogólną postać stanu układu w $t = 0$, gdzie pole magnetyczne przestaje się zmieniać:

$$\begin{aligned} |\psi(t=0)\rangle &= \sum_{i_1 i_2 \dots i_N} a_{i_1 i_2 \dots i_N} |i_1 i_2 \dots i_N\rangle, \\ \sum_{i_1 i_2 \dots i_N} |a_{i_1 i_2 \dots i_N}|^2 &= 1, \\ |i_1 i_2 \dots i_N\rangle &= \left(\gamma_1^\dagger\right)^{i_1} \left(\gamma_2^\dagger\right)^{i_2} \dots \left(\gamma_N^\dagger\right)^{i_N} |\text{GS}(g_f)\rangle, \\ i_n &= 0, 1 \text{ oraz } \gamma_n |\text{GS}(g_f)\rangle = 0 \text{ dla } 1 \leq n \leq N, \end{aligned} \quad (4.28)$$

gdzie $|\text{GS}(g)\rangle$ oznacza stan podstawowy modelu Isinga z otwartymi warunkami brzegowymi (tak, jak w rozdziale 2). Zwróćmy uwagę, że stany $|i_1 i_2 \dots i_N\rangle$ tworzą zupełną bazę stanów własnych modelu dla $g = g_f$. Wykorzystując powyższy zapis, magnetyzacja podłużna w dowolnej chwili $t > 0$ ma postać:

$$M_x(t) = \sum_{\substack{j_1 j_2 \dots j_N \\ i_1 i_2 \dots i_N}} \overline{a_{j_1 j_2 \dots j_N}} a_{i_1 i_2 \dots i_N} e^{it \sum_{n=1}^N (j_n - i_n) E_n} \langle j_1 j_2 \dots j_N | \sigma_{N/2}^x | i_1 i_2 \dots i_N \rangle, \quad (4.29)$$

gdzie E_n , są energiami wzbudzeń danymi wzorami (2.54) oraz $n = 1, 2, \dots, N$. Teraz zauważmy, że wyrażenie $\langle j_1 j_2 \dots j_N | \sigma_{N/2}^x | i_1 i_2 \dots i_N \rangle$ zawiera parzystą liczbę operatorów fermionowych tylko wtedy, gdy suma

$$\sum_{n=1}^N (i_n + j_n) \quad (4.30)$$

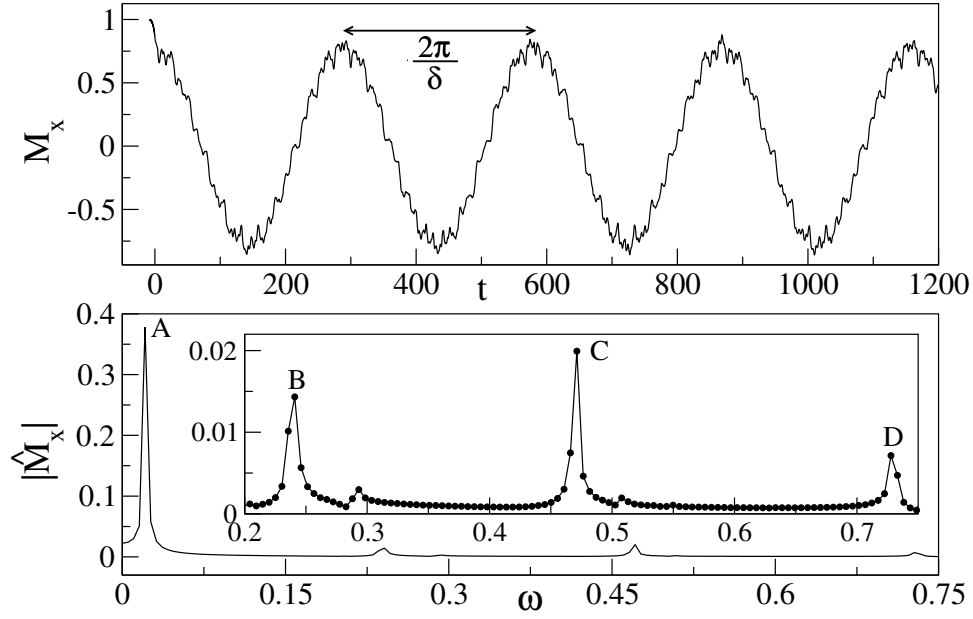
jest nieparzysta (gdyż $\sigma_{N/2}^x$ zawiera ich nieparzystą liczbę). Z twierdzenia Wicka tylko te człony są niezerowe, zatem możliwe częstości mają postać:

$$\omega = \sum_{n=1}^N (j_n - i_n) E_n, \quad \sum_{n=1}^N (i_n + j_n) \text{ nieparzyste.} \quad (4.31)$$

Magnetyzacja podłużna $M_x(t)$ jest generowana numerycznie za pomocą równań (2.65), (2.73) oraz (2.76). Macierz $U(t)$ potrzebną do wyliczenia W znajdujemy rozwiązując równanie (2.71). Wykorzystujemy w tym celu rozkład Suzuki-Trottera rzędu drugiego [68]. Zaletą metody Suzuki-Trottera w stosunku do innych metod numerycznych rozwiązywania zwyczajnych równań różniczkowych, takich jak np. metoda Rungego-Kutty czy algorytm Bulirsha-Stoera [52], jest własność dokładnego zachowywania unitarności w każdej iteracji algorytmu. Testy różnych algorytmów pokazały, że ma to duże znaczenie w przypadku symulowania ewolucji magnetyzacji podłużnej.

Przechodzimy teraz do prezentacji konkretnych wyników dla ewolucji magnetyzacji podłużnej dla przejść postaci (4.2). Do systematycznej analizy przebiegów ewolucji swobodnej $M_x(t)$ wykorzystamy narzędzia opisane w podrozdziale 4.2.

Symulacje dla przejść do *fazy ferromagnetycznej* wykonano dla $g_f = 0.85$ i $N = 20$. Wybór stosunkowo małego rozmiaru układu wiąże się z bardzo szybkim zanikiem przerwy energetycznej δ wraz z rozmiarem układu w fazie ferromagnetycznej - symulacje większych rozmiarów wymagałyby przeprowadzania dużo dłuższych symulacji. Ewolucję dla $\tau_Q = 10$ przedstawiono na rysunku 4.5. Uderzający jest „kanciasty” kontur ewolucji. Aby to zrozumieć, zbadamy moduł dyskretnej transformaty Fouriera (dolna część rysunku 4.5). Po pierwsze, zwróćmy uwagę na szereg pików oznaczonych A , B , etc. których maksima występują dla częstości ω_A , ω_B , etc. Ich wartości są wypisane w pierwszym rzędzie tablicy



Rysunek 4.5: Na górze: dynamika magnetyzacji podłużnej w modelu Isinga z otwartymi warunkami brzegowymi dla przejścia zatrzymanego w fazie ferromagnetycznej. Wartości parametrów są następujące: $g_f = 0.85$, $N = 20$, $\tau_Q = 10$. Wartość δ jest dana poprzez E_1 z tablicy 4.4 (pierwszy rząd). Na dole: moduł dyskretnej transformaty Fouriera z ewolucji $M_x(t > 0)$ z górnej części wykresu. Wewnętrzny wykres pokazuje w powiększeniu piki B–D. Na tym wykresie przyjęto $L = 1200$.

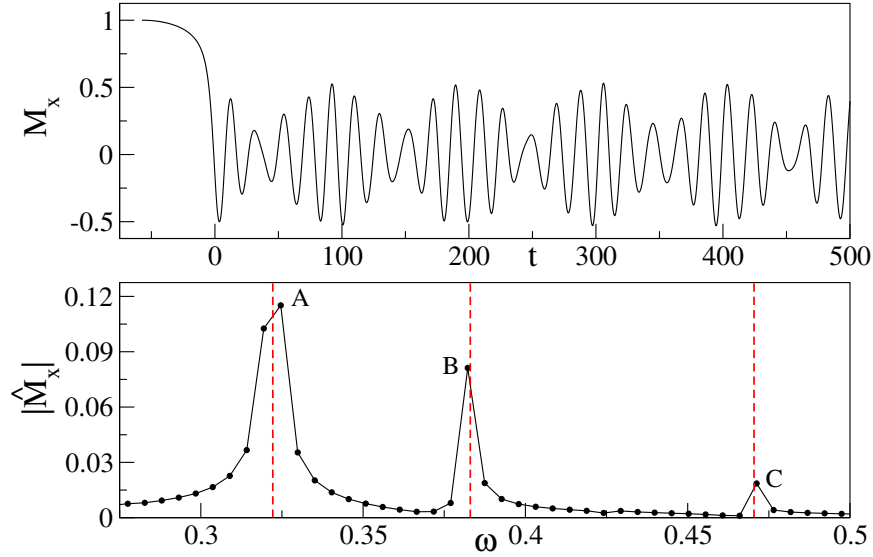
	ω_A	ω_B	ω_C	ω_D	ω_E	ω_F	ω_G
$g_f = 0.85$, $N = 20$	0.0209	0.241	0.471	0.728			
$g_f = 1$, $N = 50$	0.0628	0.188	0.308	0.434	0.559	0.685	0.804
$g_f = 1.15$, $N = 50$	0.325	0.382	0.471				

Tablica 4.3: Położenia maksimów dyskretnej transformaty Fouriera $|\hat{M}_x|$ oznaczonych na rysunkach 4.5, 4.6 oraz 4.7.

4.3. Jeżeli porównamy te częstotliwości z danymi z tablicy 4.4 to zauważymy, że wartości ω_A , ω_B , ω_C i ω_D są równe E_1 , $E_3 - E_2 - E_1$, E_2 , E_3 w granicach rozdzielczości spektralnej transformaty Fouriera - jest to zgodne z przewidywaniami wynikającymi ze wzorów (4.29) i (4.31). Częstotliwości wokół ω_A odpowiadają za główny okres oscylacji $\frac{2\pi}{\delta(g_f)}$, zaznaczony w górnej części rysunku 4.5. Odnotujmy teraz dwie ważne własności dyskretnej transformaty Fouriera widoczne w dolnej części rysunku 4.5: (i) częstotliwości ω_B , ω_C etc. są przynajmniej 10 razy większe od częstotliwości ω_A , (ii) wartość $|M_x(\omega_A)|$ jest przynajmniej 15 razy większa od $|M_x(\omega_B)|$, $|M_x(\omega_C)|$. Własność (i) oznacza, że należy spodziewać się oscylacji o wysokiej częstotliwości nałożonej na częstotliwość bazową ω_A . Z własności (ii) wynika, że mają one małą amplitudę w porównaniu do oscylacji bazowych. Obie te cechy są bardzo wyraźnie widoczne w górnej części wykresu 4.5.

	E_1	E_2	E_3	E_4	E_5	E_6	E_7
$g_f = 0.85$, $N = 20$	0.0217	0.470	0.730				
$g_f = 1$, $N = 50$	0.0622	0.187	0.311	0.435	0.558	0.681	0.803
$g_f = 1.15$, $N = 50$	0.322	0.383	0.470				

Tablica 4.4: Energie jednocząstkowych wzbudzeń w modelu Isinga obliczone na podstawie wzorów (2.54), (2.55).



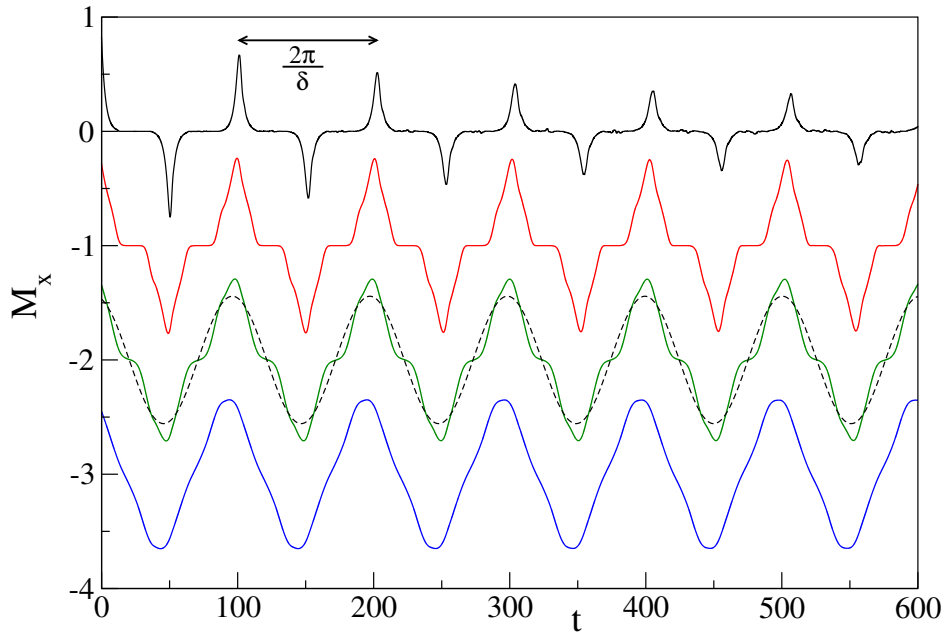
Rysunek 4.6: Na górze: dynamika magnetyzacji podłużnej w modelu Isinga z otwartymi warunkami brzegowymi dla przejścia zatrzymanego w fazie paramagnetycznej. Wartości parametrów są następujące: $g_f = 1.15$, $N = 50$, $\tau_Q = 50$. Na dole: moduł dyskretnej transformaty Fouriera z ewolucji $M_x(t > 0)$ z górnej części wykresu. Przyjmujemy $L = 500$.

Z inną sytuacją mamy do czynienia dla ewolucji doprowadzonych do fazy paramagnetycznej. Rysunek 4.6 przedstawia ewolucję zatrzymaną w $g_f = 1.15$ dla układu $N = 50$ spinów. Wyraźnie widoczne są dudnienia - aby je wyjaśnić, również odwołamy się do modułu dyskretnej transformaty Fouriera i struktury jej pików (dolna część rysunku 4.6). Widoczne są dwa duże piki scentrowane wokół ω_A i ω_B . Fakt, że ich amplitudy $|\hat{M}_x(\omega_A)|$ oraz $|\hat{M}_x(\omega_B)|$ są porównywalne odpowiada za powstanie dudnień. Częstości ω_A i ω_B są tego samego rzędu wielkości, co eliminuje mody wysokiej częstości, które były widoczne w przypadku przejścia do fazy paramagnetycznej. Analizując wykres 4.6, zauważmy, że ω_A , ω_B i ω_C z dobrą dokładnością są równe E_1, E_2, E_3 (patrz tablice 4.3 oraz 4.4).

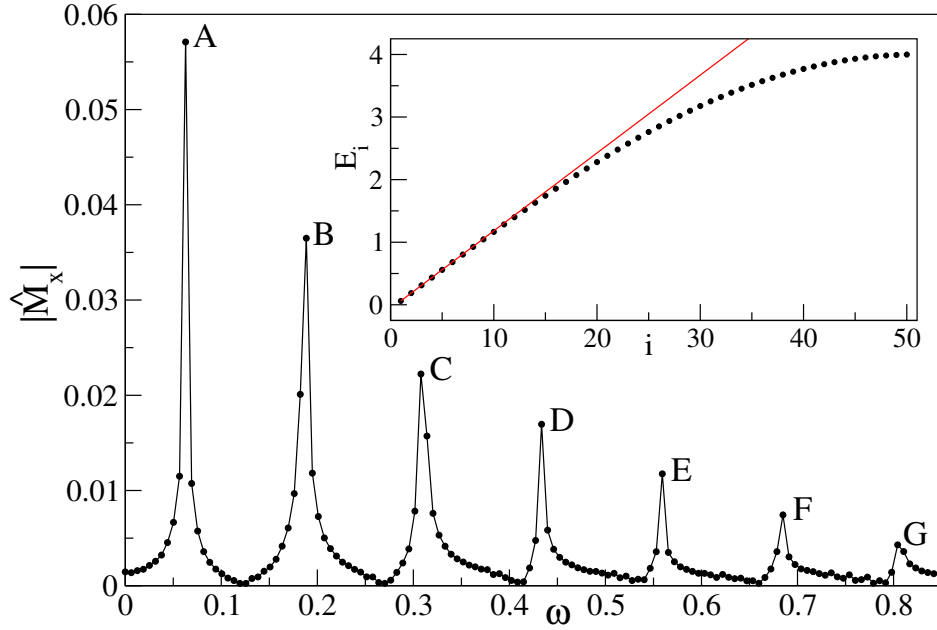
4.4 Przejścia doprowadzone do punktu krytycznego

Ewolucja swobodna magnetyzacji podłużnej dla przejść doprowadzonych do punktu krytycznego ma specyficzny przebieg, co pokazano na rysunku 4.7. Dla małych τ_Q widać szereg wąskich pików, których amplituda maleje wraz z czasem. Magnetyzacja pomiędzy pikami jest równa prawie zero. W miarę zwalniania ewolucji (wzrostu τ_Q), szerokość pików rośnie, jednocześnie zmniejszają się odcinki czasowe gdzie magnetyzacja jest bliska zeru. Dalsze zwiększanie czasu przejścia τ_Q doprowadza do spodziewanej dynamiki adiabatycznej, danej wzorem (4.13).

Aby wyjaśnić osobliwy kształt ewolucji dla szybkich przejść z rysunku 4.7 wykorzystamy dyskretną transformatę Fouriera (rysunek 4.8). Położenia kolejnych maksimów $|\hat{M}_x(\omega)|$ są równe wzbudzeniom jednocząstkowym $E_1, E_2, \dots$ (patrz tablice 4.3 i 4.4). Charakterystyczne jest to, że wiele częstości posiada swoją istotną reprezentację w widmie, co objawia się poprzez stosunkowo duże amplitudy kolejnych pików modułu transformaty Fouriera (w przeciwieństwie do przypadku przejścia do fazy ferromagnetycznej lub paramagnetycznej, gdzie tylko kilka pików odgrywało istotną rolę). Kolejną interesującą cechą ewolucji przedstawionych na rysunku 4.7 jest bardzo dobrze widoczna periodyczność. Nie jest to zaskakujące dla wolnych przejść, gdyż dokładnie tego oczekujemy w granicy adiabatycznej (4.12) - natomiast dla szybkich przejść ($\tau_Q = 2$) tak wyraźna struktura pików oddalonych o $2\pi/\delta(g_f = 1)$ jest specyficzną własnością przejść zatrzymanych w $g_f = 1$. Aby wyjaśnić to zjawisko, odwołamy



Rysunek 4.7: Ewolucja swobodna magnetyzacji podłużnej po przejściach do punktu krytycznego w modelu Isinga z otwartymi warunkami brzegowymi. Linie ciągłe, zaczynając od góry, odpowiadają symulacjom dla następujących wartości czasu przejścia: $\tau_Q = 2$ (linia czarna), $\tau_Q = 20$ (linia czerwona), $\tau_Q = 73$ (linia zielona) oraz $\tau_Q = 200$ (linia niebieska). Kolejne krzywe są przesunięte o liczbę całkowitą w dół, aby umożliwić ich porównanie. Czarna przerywana linia pokazuje funkcję $0.557 \cos(0.0622t + 0.307)$ przesuniętą o 2 w dół. Pochodzi ona z fitu dla $\tau_Q = 73$, blisko czasu odpowiadającemu zmianie reżimów, omawianego na rysunku 4.9. Wartości parametrów są następujące: $g_f = 1$, $N = 50$, δ jest dana przez E_1 z tablicy 4.4 (drugi rząd).



Rysunek 4.8: Moduł dyskretnej transformaty Fouriera ze swobodnej ewolucji magnetyzacji podłużnej dla przejścia doprowadzonego do punktu krytycznego. Parametry przejścia są następujące: $g_f = 1$, $N = 50$, $\tau_Q = 2$ (górna ewolucja z rysunku 4.7). Wewnętrzny rysunek pokazuje wzbudzenia obliczone ze wzoru (2.54), czerwona linia pokazuje przybliżenie (4.33).

się do struktury wzbudzeń jednocząstkowych w modelu Isinga z otwartymi warunkami brzegowymi. Podstawiając $g = 1$ oraz kąty (2.58) do wzoru (2.54), dostajemy ściśle wyrażenie na wartości wzbudzeń jednocząstkowych:

$$E_i = 4 \sin \frac{\theta_i}{2} = 4 \sin \frac{2i-1}{4N+2}. \quad (4.32)$$

Dla małych wartości i prawdziwe jest przybliżenie:

$$E_i \approx (2i-1) \frac{\pi}{N} = (2i-1) \delta(g_f = 1). \quad (4.33)$$

Dokładność powyższego przybliżenia jest dobrze widoczna na wewnętrznym wykresie rysunku 4.8. Gdyby powyższe wyrażenie było prawdziwe dla każdego i , ewolucja byłaby idealnie adiabaticzna niezależnie od czasu przejścia. Jest ono jednak prawdziwe dla dominujących (jeżeli chodzi o amplitudę pików w $|\hat{M}_x(\omega)|$) częstości, co prowadzi do bardzo stabilnej periodyczności ewolucji z okresem $2\pi/\delta(g_f = 1)$. Na koniec tej analizy podkreślamy, że przybliżenie (4.33) jest prawdziwe tylko dla $g_f = 1$ - tłumaczy to całkowicie odmienny charakter ewolucji w przypadku przejść do fazy ferromagnetycznej i paramagnetycznej.

Przechodzimy teraz do kolejnego, ważnego elementu analizy ewolucji z rysunku 4.7. Celem jest ilościowe zbadanie, wspomnianego w podrozdziale 4.3, zagadnienia zmiany reżimów ewolucji. Głównym narzędziem będzie analiza amplitudy pików dla przejść doprowadzonych do punktu krytycznego (rys. 4.7) - będziemy badać, jak szybko dąży ona do wartości równowagowej M_x^{eq} . Zasadniczo, możliwych jest kilka dróg postępowania. Po pierwsze, można wziąć pod uwagę wartość maksimum globalnego modułu dyskretnej transformaty Fouriera i obliczyć A_{max} ze wzoru (4.25). Takie podejście ma jednak wady - głównym problemem jest ograniczona rozdzielczość spektralna transformaty Fouriera, co powoduje konieczność analizowania długich ewolucji i dokładną interpolację położenia maksimum z danych numerycznych.

Po drugie, można „odczytać” wartość amplitudy oraz odległości pomiędzy pierwszymi dwoma pikami magnetyzacji $M_x(t)$ wprost z wykresu ewolucji. Ta metoda jest jednak podatna na fluktuacje

danych. Można by ją ulepszyć wprowadzając uśrednianie wartości odczytanych z wielu pików, jednak to również wymagałoby rozpatrywania długich ewolucji.

Dlatego do dalszej analizy wykorzystamy jeszcze inną, diskutowaną wcześniej metodę, mianowicie fit nieliniowy funkcji:

$$A_{\text{fit}} \cos(\omega_{\text{fit}} t + \text{const}) \quad (4.34)$$

do danych numerycznych. Główną zaletą tej metody jest to, że wykorzystuje całą informację zawartą w wygenerowanym przebiegu $M_x(t)$, a nie jedynie w okolicach maksimów $M_x(t)$ lub $|\hat{M}_x(\omega)|$. Ponadto fluktuacje danych zostają uśrednione, przez co powyższa metoda ma potencjalne zastosowanie również w przypadku danych eksperymentalnych. Zatem w dalszej części tego podrozdziału jako amplitudę oscylacji będziemy brali wartość A_{fit} otrzymaną z fitu nieliniowego, który będziemy wykonywać do danych $M_x(t)$ dla $0 \leq t \leq 12N$, co odpowiada około 6 okresom oscylacji.

Jak już wspomnieliśmy wcześniej, gdy τ_Q rośnie, wartość $A_{\text{fit}}(\tau_Q)$ będzie dążyła do $M_x^{\text{eq}}(g_f = 1)$. Sugeruje to, że dobrą miarą nieadiabatywności danej ewolucji $M_x(t)$ będzie względne odchylenie amplitudy $A_{\text{fit}}(\tau_Q)$ od wartości równowagowej:

$$\text{dev}(\tau_Q) = \left| \frac{A_{\text{fit}}(\tau_Q) - M_x^{\text{eq}}(g_f = 1)}{M_x^{\text{eq}}(g_f = 1)} \right|. \quad (4.35)$$

Zmiana reżimów następuje, gdy zdefiniowane powyżej odchylenie spada poniżej pewnej, ustalonej z góry wartości $\eta \in (0, 1)$. Czas przejścia odpowiadający zmianie reżimów będziemy oznaczać τ_Q^{cross} - jest on zdefiniowany w następujący sposób:

$$\tau_Q^{\text{cross}} = \min\{\tau_Q : \text{dev}(\tau_Q) \leq \eta\}. \quad (4.36)$$

W naszej analizie będziemy używać wartości $\eta = 10\%$. Powyższe koncepcje zilustrowano na rysunku 4.9, gdzie przedstawiono zależność $A_{\text{fit}}(\tau_Q)$. Widoczne jest, że amplituda obliczona z wykorzystaniem fitu nieliniowego w bardzo gładki sposób zależy od τ_Q - potwierdza to zasadność wyboru metody.

Wykonując systematyczne fity dla różnych rozmiarów układu $20 \leq N \leq 300$ otrzymujemy zależność $\tau_Q^{\text{cross}}(N)$, którą przedstawia rysunek 4.10(a). Odwołując się do rozważań wokół wzoru (4.15), spodziewamy się, że zależność ta jest postaci:

$$\tau_Q^{\text{cross}} \sim N^a, \quad a > 0. \quad (4.37)$$

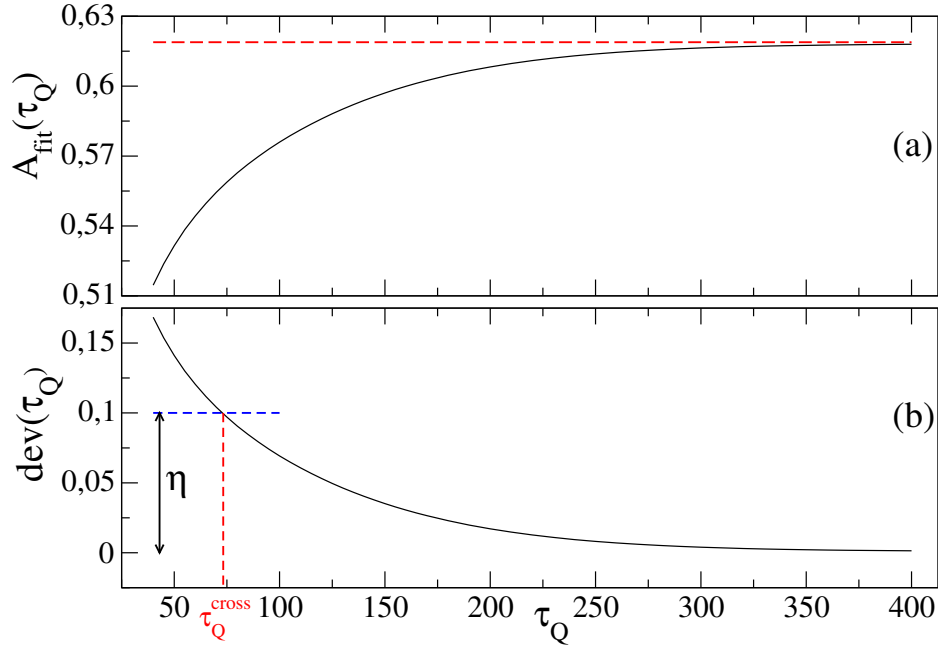
W celu zweryfikowania tej hipotezy, wykonujemy fit liniowy postaci:

$$\ln \tau_Q^{\text{cross}} = a \ln N + b. \quad (4.38)$$

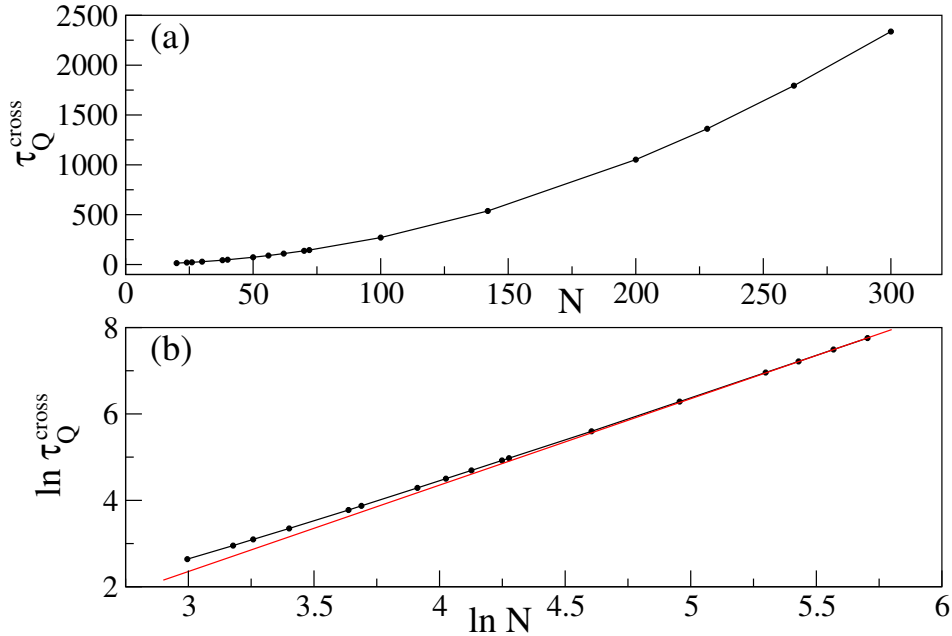
Jak można zobaczyć z tablicy 4.5, współczynniki a, b różnią się nieco dla różnych zakresów danych, ale wartość a dąży do 2 dla dużych rozmiarów układu N (fit liniowy pokazano na rysunku 4.10(b)). Bardzo dobrze zgadza się to z przewidywaniami teorii Kibbla-Zurka (4.15), która sprawdza się najlepiej dla dużych rozmiarów układu. Zauważmy, że wartość współczynnika a rośnie monotonicznie wraz ze wzrostem rozmiaru układu - potwierdza to wysoką stabilność metody wyznaczania czasu przejścia dla zmiany reżimów na bazie magnetyzacji podłużnej. Podkreślamy, że zaprezentowana metoda nie jest jedynym sposobem badania adiabatywności ewolucji; naszym celem było przedstawienie solidnych argumentów, że taka droga postępowania prowadzi do spójnych wniosków oraz pokazanie jej zalet w kontekście analizy zarówno danych numerycznych, jak i eksperymentalnych.

4.5 Podsumowanie

Celem tego rozdziału było zademonstrowanie, w jaki sposób można badać przerwę energetyczną związaną z łamaniem symetrii za pomocą ciągłych przejść nierównowagowych. Wykorzystaliśmy w



Rysunek 4.9: Wykres (a): amplituda oscylacji magnetyzacji podłużnej po przejściu doprowadzonym do punktu krytycznego w modelu Isinga z otwartymi warunkami brzegowymi. Amplituda została obliczona za pomocą fitu nieliniowego (4.34). Czerwoną, przerywaną linią oznaczono wartość $M_x^{\text{eq}}(g_f = 1)$. Wykres (b): względne odchylenie amplitudy oscylacji od wartości równowagowej, dane wzorem (4.35). Zaznaczono również wartość τ_Q^{cross} odpowiadającą $\eta = 10\%$, która dla rozpatrywanego układu ($N = 50$) wynosi około 72.83.



Rysunek 4.10: Wykres (a): czas zmiany reżimów τ_Q^{cross} jako funkcja rozmiaru układu dla przejść zatrzymanych w punkcie krytycznym modelu Isinga z otwartymi warunkami brzegowymi ($g_f = 1$). Kropki na wykresie pochodzą z danych numerycznych, połączono je odcinkami aby pokazać charakter zależności. Wykres (b): dane z wykresu (a) pokazane w skali logarytmicznej zastosowanej do obu osi. Aby zobrazować zbieżność metody, czerwona prosta ma współczynnik kierunkowy równy 2 i wyraz wolny dopasowany do dwóch punktów o największym N .

	a	b
$20 \leq N \leq 30$	1.75(1)	-2.60(4)
$38 \leq N \leq 62$	1.871(3)	-3.03(1)
$70 \leq N \leq 142$	1.92(1)	-3.26(6)
$200 \leq N \leq 300$	1.970(4)	-3.48(2)

Tablica 4.5: Wyniki fitu (4.38) do danych numerycznych z różnych zakresów rozmiaru układu (do regresji liniowej wykorzystano cztery lub pięć punktów). Błąd statystyczny obliczony za pomocą funkcji LinearModelFit z [54] podano w nawiasach okrągłych.

tym celu ściśle rozwiązywalny model Isinga z periodycznymi i otwartymi warunkami brzegowymi. Przejścia rozpoczynały się w łatwym do przygotowania stanie początkowym, który był stanem własnym modelu dla zerowego pola. Wartość przerwy energetycznej związanej z łamaniem symetrii można było odczytać ze swobodnej ewolucji magnetyzacji podłużnej po doprowadzeniu wartości pola do zadanej wartości końcowej. Układy z otwartymi warunkami brzegowymi wykorzystano, aby w wydajny sposób przeprowadzić symulacje dla większych rozmiarów układu, i odnieść otrzymane wyniki do przewidywań teorii Kibbla-Zurka. Do systematycznej analizy ewolucji swobodnej wykorzystaliśmy trzy różne techniki numeryczne.

Pomimo, że nasze analizy zostały przeprowadzone dla modelu Isinga, zaprezentowane metody mogą z powodzeniem być zastosowane do innych modeli wykazujących łamanie symetrii. Przykładowo, modele Isinga z dalekozasięgowym oddziaływaniem są realizowane eksperymentalnie za pomocą symulatorów zbudowanych na bazie zimnych atomów (patrz przykładowo [64, 69, 67, 70]). Układy te są bardzo obiecujące pod kątem eksperymentalnej realizacji koncepcji przedstawionych w tym rozdziale - ich rozmiar jest względnie niewielki (około 50 spinów), dzięki czemu przerwa energetyczna związana z łamaniem symetrii może być zaobserwowana i zmierzona. Ponadto, dynamika takich układów jest ostatnio intensywnie badana [61, 62, 71].

Inną, interesującą platformą do weryfikacji naszych koncepcji są komputery typu D-Wave, które mogą być używane do symulowania modeli spinowych [72]. Warto zaznaczyć, że badania mechanizmu Kibble-Zurka za pomocą komputerów typu D-Wave były niedawno opublikowane [73].

Warto również podkreślić, że zjawisko łamania symetrii w kwantowym układzie wielociałowym zostało ostatnio zbadane doświadczalnie w [74]. Eksperyment ten został wykonany w zimnym gazie atomowym, gdzie każdy atom symulował 16-spinowy model Lipkina-Meshkova Glicka. Jego Hamiltonian jest podobny do kwantowego modelu Isinga z tym, że oddziaływania występują między wszystkimi parami spinów, nie tylko pomiędzy najbliższymi sąsiadami. Oprócz innego Hamiltonianu, zastosowany w eksperymencie schemat przejścia różnił się od proponowanego w niniejszym rozdziale: przejścia zaczynały się w fazie paramagnetycznej, ponadto były realizowane tylko dla jednego rozmiaru układu, a zatem nie było możliwe zbadanie powiązania adiabatywności ewolucji z teorią Kibbla-Zurka (co stanowi istotną wartość dodaną naszych wyników).

Podsumowując, mamy nadzieję, że przedstawione w tym rozdziale wyniki mogą stanowić impuls do dalszych badań nad zjawiskiem łamania symetrii w kwantowych przejściach fazowych.

Rozdział 5

Wyznaczanie punktu krytycznego za pomocą dwustronnych przejść nierównowagowych

Jednym z głównych celów badań nad kwantowymi (a także klasycznymi) przejściami fazowymi jest identyfikacja uniwersalnych własności układów poprzez analizę skalowania obserwabli. Jest to również jeden z tematów przewodnich niniejszej pracy, gdzie silny nacisk jest kładziony na identyfikację mechanizmu Kibbla-Zurka w przejściach nierównowagowych. Warto jednak podkreślić, że większość relacji skalowania, których uniwersalność się postuluje, zakłada znajomość położenia punktu krytycznego, co jest już ściśle związane ze specyfiką konkretnego układu. Ponadto, w okolicy punktu krytycznego mają miejsce bardzo ciekawe zjawiska z zakresu fizyki wielu ciał, związane z nagłą zmianą własności układu. Zrozumienie tych zjawisk bazuje na technikach grupy renormalizacji, które zakładają sąsiedztwo punktu krytycznego [13]. Dlatego istotne jest wypracowanie efektywnych metod znajdowania punktów krytycznych i oceny ich dokładności. Niniejszy rozdział bazuje na pracy [75], w której do wyznaczania punktu krytycznego wykorzystano fundamentalne cechy przejść fazowych oraz mechanizm Kibbla-Zurka do oceny dokładności otrzymanych wyników. Ponieważ wykorzystywane są przejścia w obie strony, prezentowane w tym rozdziale idee stanowią pewnego rodzaju połączenie koncepcji przedstawionych w dwóch poprzednich rozdziałach. Poprzednio, przejścia o skończonym czasie do badania położenia punktów krytycznych wykorzystano m.in. w pracach [76, 77, 78], zaś przejścia natychmiastowe w [79, 80]. W pracach tych wykorzystano jednak inne techniki niż w niniejszym rozdziale.

Organizacja tego rozdziału jest następująca: Na początku opisujemy ogólną ideę, która co do zasady powinna być stosowalna do wielu modeli wykazujących kwantowe przejście fazowe. Następnie krok po kroku prezentujemy zastosowanie jej do dwóch szczególnych modeli: rozszerzonego modelu XY (patrz sekcja 2.3) oraz modelu Isinga w polu poprzecznym. Metoda bazuje na połączeniu dwóch przejść: z fazy ferromagnetycznej do fazy paramagnetycznej oraz w przeciwną stronę - w tym sensie wykorzystujemy tu idee omawiane w poprzednich rozdziałach. Na zakończenie podajemy możliwe uogólnienia zaprezentowanej techniki oraz perspektywy eksperymentalne. Wszystkie rysunki w tym rozdziale są zaczerpnięte z pracy [75].

5.1 Metoda

Podstawowym założeniem wykorzystywanym w naszej metodzie jest istnienie podatności χ względem pewnej obserwabli O , która w granicy termodynamicznej posiada osobliwość w punkcie krytycznym. Przez podatność obserwabli O rozumiemy tutaj pochodną wartości oczekiwanej obserwabli

względem parametru wywołującego przejście fazowe. W naszym przypadku będzie to zewnętrzne pole g , zatem

$$\chi(g) = \frac{d\langle O \rangle}{dg}. \quad (5.1)$$

Wybór takiej podatności jest zależny od modelu i od typu osobliwości w nim występujących. Przejścia rozważane w niniejszej pracy cechują się rozbieżnością drugiej pochodnej energii stanu podstawowego - jak zobaczymy, zasugeruje to wybór odpowiedniej podatności.

Pierwszym krokiem jest podzielenie analizowanej podatności na część regularną i osobliwą:

$$\chi^{eq}(g) = \chi_{reg}^{eq}(g) + \chi_{sing}^{eq}(g), \quad (5.2)$$

gdzie zakładamy, że część osobliwa jest rozbieżna nie szybciej niż algebraicznie wraz z odległością od punktu krytycznego g_c :

$$\chi_{sing}^{eq}(g) \sim |g - g_c|^{-\gamma}, \quad \gamma > 0. \quad (5.3)$$

Na początku, układ jest przygotowany w stanie podstawowym daleko od punktu krytycznego, a następnie poddany przejściu *w górę* zgodnie ze wzorem:

$$g(t) = g_c + \frac{t}{\tau_Q} \quad (5.4)$$

z czasem przejścia τ_Q . Punkt krytyczny jest osiągany dla $t = 0$. Dopóki układ jest daleko od punktu krytycznego, ewolucja jest z bardzo dobrą dokładnością adiabatyczna i podatność jest równa swojej równowagowej części χ^{eq} . W pobliżu punktu krytycznego czas reakcji układu, dany poprzez odwrotność przerwy energetycznej [18], dąży do nieskończoności. Zatem podatność $\chi(g(t))$ będzie opóźniona względem $\chi^{eq}(g(t))$. Różnica między podatnościami będzie największa w punkcie krytycznym, gdzie $\chi^{eq}(g_c)$ jest nieskończona, w przeciwieństwie do $\chi(g_c) = \chi[g(t=0)]$ (podczas ewolucji nierównowagowej układ nie ma czasu osiągnąć nieskończonej wartości podatności). Efekt opóźnionej reakcji układu manifestuje się w położeniu maksimum, które powinno pojawić się *po* osiągnięciu przez pole zewnętrzne punktu krytycznego - założmy że dzieje się to dla pewnego $g_*^\uparrow > g_c$.

Przypuśćmy teraz, że układ na początku jest przygotowany w stanie podstawowym po przeciwnej stronie punktu krytycznego i przejście z parametrem g następuje *w dół*, tzn. na skutek zmniejszania pola g . Dynamiczna podatność jest wtedy opóźniona względem jej wartości równowagowej, i osiąga maksimum po przekroczeniu punktu krytycznego (a zatem dla pewnej wartości $g_*^\downarrow < g_c$). Podsumowując, spodziewamy się, że punkt krytyczny jest zlokalizowany w przedziale $(g_*^\downarrow, g_*^\uparrow)$. Powyższe koncepcje jakościowo zilustrowano na rysunku 5.1.

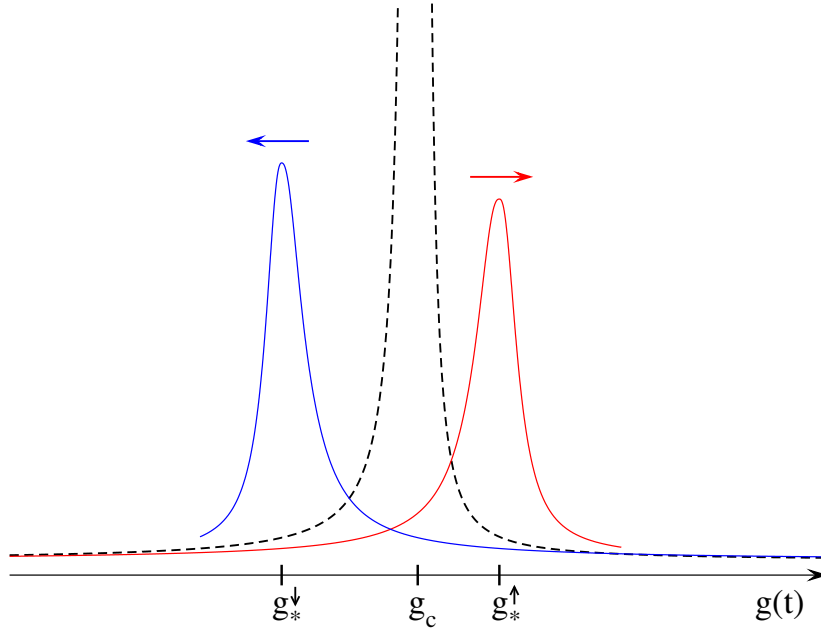
Opisaną powyżej sytuację można ilościowo przeanalizować wykorzystując mechanizm Kibbla-Zurka, przywołując przewidywane przez niego charakterystyczne, nierównowagowe skale czasu oraz zewnętrznego pola (patrz podrozdział 1.2):

$$\hat{t} \sim \tau_Q^{z\nu/(1+z\nu)}, \quad \hat{g} \sim \tau_Q^{-1/(1+z\nu)}. \quad (5.5)$$

W pracy [75] zaproponowano, że

$$\begin{aligned} \chi(g(t)) &\approx \hat{\chi} f\left(\frac{g(t) - g_c}{\hat{g}}\right), \\ \hat{\chi} &= \chi^{eq}[g(t_c \pm \hat{t})] \sim \tau_Q^{\gamma/(1+z\nu)}, \end{aligned} \quad (5.6)$$

gdzie $f(x)$ jest nieosobliwą funkcją, która jest proporcjonalna do $|x|^{-\gamma}$ przed rozpoczęciem ewolucji nieadiabatycznej, tzn. dla $x \gg 1$ przy przejściach w górę i $x \ll -1$ przy przejściach w dół. W ten sposób można uzyskać „daleko” od punktu krytycznego własność $\chi[g(t)] \approx \chi_{sing}^{eq}(g(t))$. Ansatz (5.6) jest uzasadniony na mocy dwóch założeń, które pojawiają się w całej niniejszej pracy (patrz rozdział 1):



Rysunek 5.1: Schematyczna ilustracja procedury wyznaczania punktu krytycznego g_c opisanej w podrozdziale 5.1. Liniami przerywanymi oznaczono podatność równowagową, która jest rozbieżna w g_c . Linia czerwona (niebieska) pokazuje nierównowagowe przejście, podczas którego wartość parametru g jest zwiększana (obniżana). Strzałki oznaczają kierunek zmian pola g . Kwantowy punkt krytyczny znajduje się pomiędzy maksimami obu krzywych, $g_*^\downarrow < g_c < g_*^\uparrow$.

1. Przybliżenia adiabaticzno-impulsowego, które modeluje dynamikę nierównowagową poprzez założenie, że układ jest „zamrożony” w przedziale impulsowym (dla $|t - t_c| < \hat{t}$), zaś przed wejściem w obszar impulsowy podąża zgodnie z ewolucją adiabaticzną [18, 19, 81]. To wprowadza czynnik $\hat{\chi}$ do wzoru (5.6).
2. Założenia, że dynamika nierównowagowa zależy od przeskalowanej (zgodnie z nierównowagową skalą $\hat{t}$) odległości od punktu krytycznego w domenie czasowej $(t - t_c)/\hat{t}$. Za to odpowiedzialna jest funkcja f , której argument, po podstawieniu za $g(t)$ przejścia liniowego przyjmuje pożądaną postać.

Ansatz (5.6) w różnych postaciach i kontekstach pojawia się również np. w [38, 82, 83, 84, 85]. W szczególności, był dyskutowany w kontekście dynamiki klasycznych przejść fazowych w [86].

Ze wzoru (5.6) wynika kluczowy rezultat tego rozdziału, który daje przewidywanie skalowania odległości pomiędzy maksimami:

$$\delta = g_*^\uparrow - g_*^\downarrow \sim \tau_Q^{-1/(1+z\nu)}. \quad (5.7)$$

Zwracamy uwagę, aby nie mylić δ w powyższym wzorze z przerwą energetyczną związaną z łamaniem symetrii (2.25). W związku z opisaną metodą konieczne jest wyszczególnienie następujących uwag. Każda z nich dotyczy innego aspektu przedstawionych zagadnień:

1. **Stosowalność metody.** Powyższy schemat można zastosować zarówno w symulacjach numerycznych, jak i w eksperymencie (patrz sekcja 5.4).
2. **Stopień ogólności rozważań.** Warto zaznaczyć, że w toku rozumowania, do momentu pojawienia się równania (5.5), nie został wykorzystany mechanizm Kibbla-Zurka, a jedynie ogólne własności podatności wynikające wprost z definicji kwantowego przejścia fazowego i typowego zachowania układów kwantowych w jego sąsiedztwie. To sugeruje, że opisana metoda jest bardziej

stabilna od samego mechanizmu Kibbla-Zurka, zatem może być użyteczna nawet w układach, w których ilościowa weryfikacja teorii Kibbla-Zurka jest trudna, bądź niemożliwa.

3. **Przejścia jednostronne.** Warto zdawać sobie sprawę, że do oszacowania położenia punktu krytycznego nie wystarczy wykonać przejścia w jedną stronę. Jednostronne przejście nie pozwala podać jednocześnie dolnego i górnego ograniczenia, jak to ma miejsce przy zastosowaniu pełnego, dwustronnego schematu przejść.
4. **Techniczne aspekty wyznaczania maksimów podatności.** Zauważmy, że opisana metoda nie podaje dokładnego położenia punktu krytycznego w relacji do końców przedziału $(g_*^\downarrow, g_*^\uparrow)$. W szczególności, niekoniecznie musi on się znajdować w środku tego przedziału. Jako maksima, wartości $g_*^\downarrow$ i $g_*^\uparrow$ mogą być stosunkowo łatwo wyznaczone zarówno z obarczonych niepewnością danych doświadczalnych, jak i trudnych do opracowania danych numerycznych. W razie konieczności „wygładzenia” danych można zastosować różne techniki, np. przybliżenia Padé [5].
5. **Kwestia rozmiaru układu.** W tym rozdziale, w przeciwieństwie do poprzednich, nie występuje parametr N - rozmiar układu. Wszystkie rozumowania (oraz symulacje) są przeprowadzane *de facto* w granicy termodynamicznej. Symulacje przeprowadzano dla rozmiarów układu rzędu $N = 2000$, co jest bardzo dużą liczbą spinów dla tego typu układów i dalsze zwiększanie rozmiaru praktycznie nie zmienia przebiegu ewolucji (co potwierdziliśmy symulacjami numerycznymi). Podkreślamy, że podatność nierównowagowa jest skończona, co można wywnioskować z symulacji numerycznych przeprowadzanych dla coraz większych N .
6. **Zastosowanie w metrologii.** Zauważmy, że zależność (5.7) może znaleźć potencjalne zastosowanie w metrologii kwantowej (możliwość zastosowania teorii Kibbla-Zurka w metrologicznym kontekście została zauważona w [87]). W szczególności, (5.7) może być użyte do znajdowania iloczynu wykładników krytycznych $z\nu$.

Przechodzimy teraz do zastosowania opisanej w tym podrozdziale metody na dwóch przykładach: rozszerzonego modelu XY oraz modelu Isinga. Znamy położenie punktu krytycznego w obu modelach; daje to możliwość krytycznego sprawdzenia skuteczności opisanej metody i oceny jej efektywności. Jak zobaczymy, oba modele wykazują inny charakter skalowania badanej podatności wraz z odległością od punktu krytycznego, dlatego ich szczegółowe omówienie daje pełniejszy obraz, jak stosować opisane techniki w różnych, specyficznych sytuacjach.

5.2 Rozszerzony model XY

Dla przejrzystości wywodu przypomnijmy Hamiltonian, którym będziemy się zajmować w tym podrozdziale:

$$H = - \sum_{i=1}^N (\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \frac{1}{3} \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y - \frac{1}{3} \sigma_i^x \sigma_{i+1}^z \sigma_{i+2}^x) - g \sum_{i=1}^N \sigma_i^z, \quad (5.8)$$

gdzie $g \geq 0$ jest zewnętrznym polem magnetycznym, $\sigma_i^{x,y,z}$ są macierzami Pauliego, N oznacza rozmiar układu. Zakładamy okresowe warunki brzegowe. Podstawowe własności oraz metoda rozwiązywania powyższego modelu znajdują się w podrozdziale 2.3. Kluczowe będą wartości wykładników krytycznych: $z = 3$, $\nu = 1/3$ [38]. Podatnością, którą będziemy badać, będzie *podatność magnetyczna*:

$$\chi(g) = \frac{d\langle S^z \rangle}{dg}. \quad (5.9)$$

Podobnie jak w rozdziale 3, S^z oznacza magnetyzację poprzeczną, którą z uwagi na niezmienniczość translacyjną (periodyczne warunki brzegowe) można utożsamić z σ_i^z w dowolnym oczku. W stanie podstawowym, wielkość (5.9) jest rozbieżna. Mianowicie, z twierdzenia Feynmana-Hellmana można zapisać:

$$\chi^{eq}(g) = -\frac{1}{N} \frac{d^2 E_0^+}{dg^2}, \quad (5.10)$$

gdzie E_0^+ jest zdefiniowane w (2.84). Zazwyczaj część singularną E_0^+ zapisuje się z użyciem wykładnika α (patrz (1.13)):

$$E_0^+ \sim |g - g_c|^{2-\alpha}, \quad (5.11)$$

gdzie wykładnik α jest dany wzorem (1.14). Wykorzystując znane wartości z oraz ν otrzymujemy $\alpha = 2/3$, skąd:

$$\chi_{sing}^{eq}(g) \sim |g - 1|^{-2/3}. \quad (5.12)$$

Zatem,

$$\hat{\chi} \sim \tau_Q^{1/3}. \quad (5.13)$$

Biorąc pod uwagę, że $\hat{g} \sim \tau_Q^{-1/2}$ mamy pełną wiedzę do skonstruowania ansatzu (5.6):

$$\chi(g(t)) \approx \tau_Q^{1/3} f[(g(t) - 1)\tau_Q^{1/2}]. \quad (5.14)$$

Wynika z niego m.in., że $\chi[g(t)]/\tau_Q^{1/3}$ powinno zależeć jedynie od $(g(t) - 1)\tau_Q^{1/2}$.

Przejście w górę realizujemy poprzez następującą zależność czasową:

$$g(t) = \left(\frac{t}{2\tau_Q} \right)^2, \quad (5.15)$$

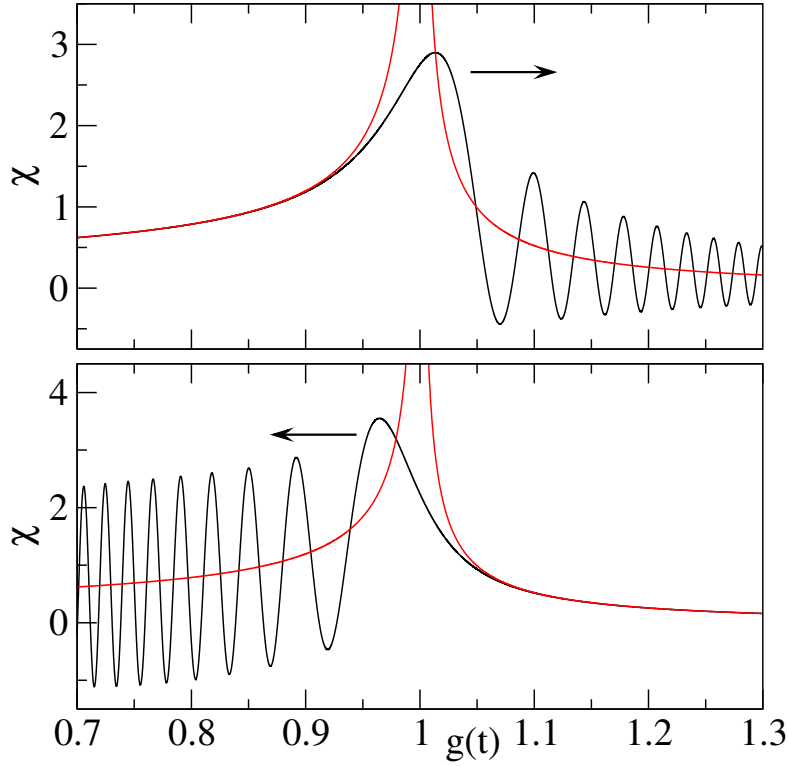
zaś przejście w dół:

$$g(t) = g_0 - \frac{t}{\tau_Q}, \quad g_0 = 5. \quad (5.16)$$

Obie ewolucje zaczynają się w $t = 0$ i punkt krytyczny jest osiągany w $t_c = 2\tau_Q$ dla przejścia w górę oraz w $t_c = (g_0 - 1)\tau_Q$ dla przejścia w dół.

Przejścia opisane wzorami (5.15) i (5.16) mają ważną własność: szybkość przejścia $|dg/dt|$ w punkcie krytycznym jest równa τ_Q^{-1} , czyli tak, jak w modelowym dla teorii Kibbla-Zurka przejściu (1.19). Aby wyjaśnić użycie kwadratowej zależności od czasu w (5.15) zauważmy, że przejścia typowo prowadzą do powstania oscylacji podatności na początku ewolucji (patrz na przykład [88]). Oscylacje pojawiają się, gdyż zewnętrzny parametr nie jest włączony wystarczająco gładko (im więcej kolejnych pochodnych znika na początku ewolucji, tym bardziej jest ona adiabatyczna). Symulacje numeryczne wykazały, że zastosowanie przejścia kwadratowego w czasie (5.15) w istotny sposób redukuje oscylacje w porównaniu z przejściem liniowym. Sytuacja jest podobna przy przejściach w dół, jednak w tym przypadku przerwa energetyczna na początku ewolucji ($g_0 \gg g_c$) jest dużo większa niż w przypadku przejść w górę (startujących z $g = 0$), co powoduje, że nawet przy przejściu liniowym (5.16) prawdopodobieństwo wzbudzeń jest dużo niższe i ewolucja początkowa dużo bliższa idealnie adiabatycznej. Zaznaczamy, że nieliniowe przejścia były już wcześniej stosowane, patrz przykładowo [42, 89].

Zanim przejdziemy do analizy ilościowej dynamiki, należy poruszyć ważną kwestię parzystości stanu początkowego. Dla przejść w dół, symulacje numeryczne pokazują, że stan podstawowy ma dodatnią parzystość dla startowych wartości pola (patrz np. rysunek 2.2). Z faktu, że Hamiltonian komutuje z operatorem parzystości wynika, że parzystość stanu jest zachowywana podczas ewolucji. Z kolei dla przejść w górę, zaczynając od $g = 0$ podprzestrzeń własna jest dwukrotnie zdegenerowana, można zatem wybrać stan początkowy tak, aby był w przestrzeni o dodatniej parzystości.



Rysunek 5.2: Dynamika podatności magnetycznej χ podczas przejścia w górę (w dół) w rozszerzonym modelu XY jest przedstawiona na wykresie górnym (dolnym). Czerwone linie pokazują wartość podatności w stanie podstawowym $\chi^{eq}[g(t)]$. Czas przejścia wynosi $\tau_Q = 300$.

Typowa dynamika zarówno dla przejść w górę jak i w dół jest przedstawiona na rysunku 5.2, gdzie widoczne są charakterystyczne etapy ewolucji. Na początku, ewolucja jest adiabatyczna (powolny wzrost podatności). Następnie wchodzi w fazę nieadiabatyczną i „opóźnia” się względem wartości równowagowej. Na końcu pojawiają się stabilne oscylacje, które mogą być zinterpretowane jako etap kwaziadiabatyczny. Oznacza to, że nie pojawiają się nowe wzbudzenia, ale układ nie jest w stanie podstawowym $H[g(t)]$.

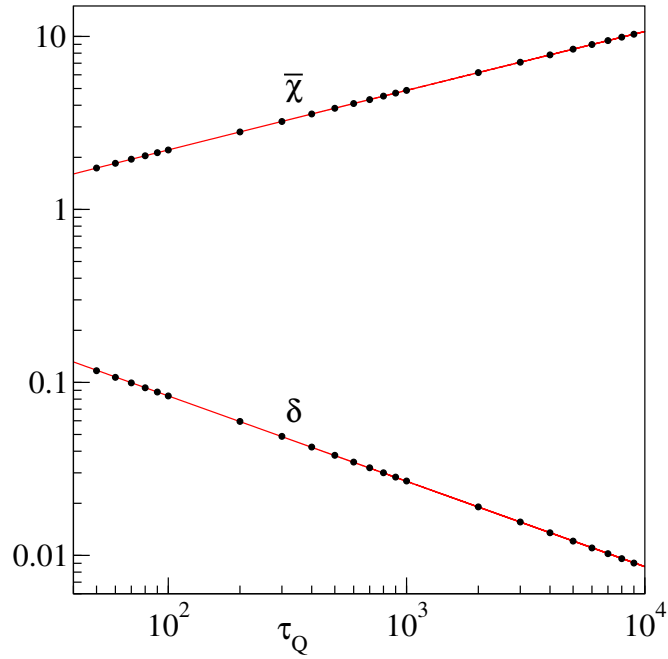
Wykonując regresję liniową [54], otrzymuje się następujące wyrażenie na odległość pomiędzy maksimami (5.7):

$$\ln \delta = -0.209(3) - 0.4936(5) \ln \tau_Q. \quad (5.17)$$

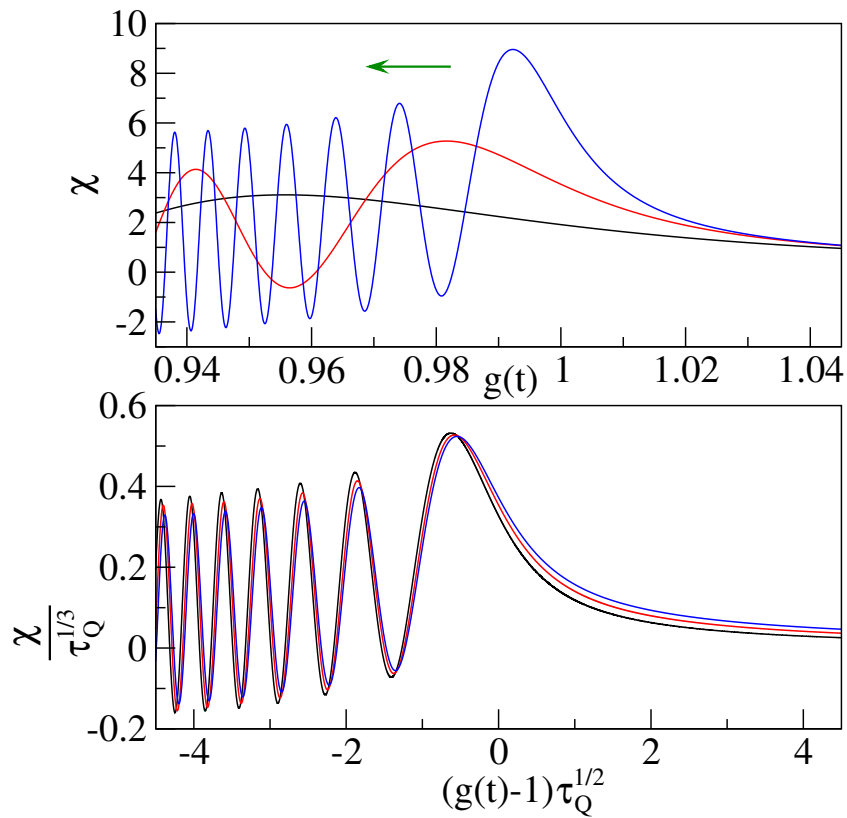
Przewidywany w (5.7) wykładnik wynosi $-1/(1 + z\nu) = -1/2$, zatem zgadza się to bardzo dobrze z otrzymaną numerycznie liczbą $-0.4936(5)$. Jako dopełnienie analizy, warto również zbadać zależność wartości średniej maksimów podatności. Fit nieliniowy do danych z rysunku 5.3 pokazuje, że

$$\bar{\chi} = (\chi_*^\uparrow + \chi_*^\downarrow)/2 = -0.063(2) + 0.4795(7)\tau_Q^{0.3376(2)}, \quad (5.18)$$

gdzie wykładnik doskonale zgadza się z teoretycznie przewidywaną wartością $1/3$ (patrz (5.14)). Podobny rezultat dostaje się wykonując fit do każdego z maksimów $\chi_*^\uparrow$ i $\chi_*^\downarrow$. Jednakże obliczenie średniej $\bar{\chi}$ pozwala usunąć drobne odchylenia $\chi_*^\uparrow$ i $\chi_*^\downarrow$ od dokładnego skalowania zgodnego z teorią Kibbla-Zurka. Na rysunku 5.4 zobrazowano dokładność ansatzu (5.14).



Rysunek 5.3: Globalne maksima nierównowagowe podatności χ w rozszerzonym modelu XY. Na górze: średnia wartość podatności χ w globalnych maksimach podczas przejść w górę i w dół. Na dole: odległość pomiędzy maksimami. Czerwone linie pokazują fity do czarnych punktów pochodzących z obliczeń numerycznych, patrz wzory (5.17) oraz (5.18).



Rysunek 5.4: Dynamika podatności magnetycznej χ w rozszerzonym modelu XY przed (górny wykres) i po (dolny wykres) przeskalowaniu zgodnie z ansatzem (5.14). Linie czarna, czerwona i niebieska pokazują ewolucję dla τ_Q odpowiednio 200, 1000 i 5000.

5.3 Model Isinga

Hamiltonian ma postać:

$$H = - \sum_{i=1}^N (\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + g \sigma_i^z). \quad (5.19)$$

Podobnie jak rozszerzony model XY, model ten ma dwie fazy i punkt krytyczny w $g_c = 1$. To, co go odróżnia, i czyni analizę naszej metody nieco trudniejszą, są wartości wykładników krytycznych $z = \nu = 1$, co prowadzi do $\alpha = 0$. Wobec zależności :

$$\chi^{eq}(g) = \frac{d\langle S^z \rangle}{dg} \sim |g - g_c|^{-\alpha} \quad (5.20)$$

oznacza to, że podatność magnetyczna jest w punkcie krytycznym rozbieżna wolniej niż algebraicznie (porównaj (5.10), (5.11)). Właściwa relacja ma w tym przypadku postać [53]:

$$\chi_{sing}^{eq}(g) \approx -\frac{1}{\pi} \ln |g - 1|. \quad (5.21)$$

Rezultat ten jest stosunkowo dobrze znany, aczkolwiek dość osobliwy, z uwagi na to że zazwyczaj oczekuje się algebraicznej rozbieżności. Powoduje to pewne anomalie w modelu Isinga, z tego powodu analiza jest bardziej skomplikowana niż ta opisana dla rozszerzonego modelu XY, gdzie podatność skaluje się algebraicznie. Z uwagi na niealgebraiczne skalowanie podatności magnetycznej, nie możemy zastosować wprost ansatzu (5.6). Istnieją dwie możliwe drogi dalszego postępowania. Można rozważyć inną podatność, która będzie wykazywać algebraiczną rozbieżność (np. $\tilde{\chi}(g) = \frac{d^2 S^z}{dg^2}$) i rozważać jej ewolucję. Można też „obejść” problem logarytmicznej rozbieżności $\chi(g)$ poprzez wykorzystanie $\tilde{\chi}(g)$ i znalezienie odpowiedniego ansatzu dla teorii z logarytmicznymi rozbieżnościami. My wybieramy drugą drogę postępowania - analiza podatności magnetycznej $\frac{d\langle S^z \rangle}{dg}$ jest bardziej dogodna zarówno ze względów numerycznych jak i eksperymentalnych. W tym celu zapiszmy relację skalowania dla pochodnej podatności magnetycznej $\tilde{\chi} = \frac{d\chi}{dg}$:

$$\tilde{\chi}_{sing}^{eq} \approx \frac{1}{\pi(1-g)}, \quad (5.22)$$

Wielkość $\tilde{\chi}$ jest już rozbieżna algebraicznie, więc można zastosować ansatz (5.6):

$$\tilde{\chi} \approx \sqrt{\tau_Q} \tilde{f}((g-1)\sqrt{\tau_Q}), \quad (5.23)$$

który po wzięciu pod uwagę, że $\tilde{\chi} = \frac{d\chi}{dg}$ prowadzi do

$$\frac{d\chi}{dx} \approx \tilde{f}(x), \quad x = (g-1)\sqrt{\tau_Q}. \quad (5.24)$$

Całkując względem x otrzymujemy

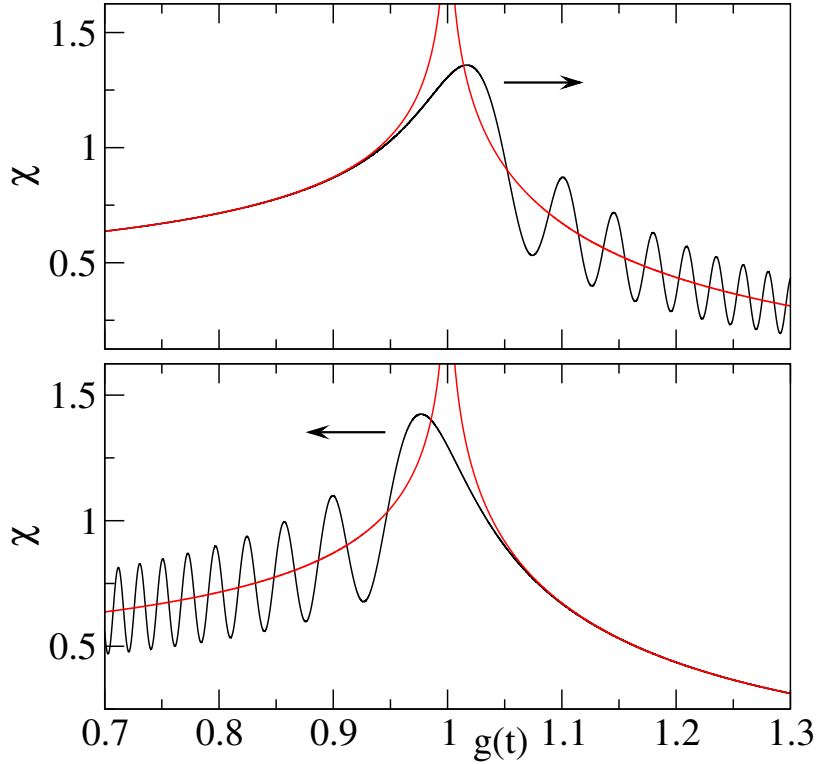
$$\chi \approx h(x) + C, \quad (5.25)$$

gdzie $h(x)$ jest nową tzw. funkcją skalującą (ang. *scaling function*). Aby dostać wartość stałej C (tzn. niezależnej od g) wykorzystujemy warunek brzegowy, że $\chi(x \ll -1)$ dla przejść w górę i $\chi(x \gg 1)$ dla przejść w dół jest dobrze opisywane przez zależność:

$$\chi_{sing}^{eq} \approx -\frac{1}{\pi} \ln |g - 1|. \quad (5.26)$$

Funkcja skalująca z definicji zależy od τ_Q jedynie poprzez swój argument. To prowadzi do wniosku, że

$$\chi \approx h((g-1)\sqrt{\tau_Q}) + \frac{\ln \tau_Q}{2\pi}, \quad (5.27)$$



Rysunek 5.5: Linie czarne: Podatność magnetyczna podczas przejścia w górę (wykres górny) oraz w dół (wykres dolny) w modelu Isinga dla $\tau_Q = 300$. Linie czerwone: wartość równowagowa podatności magnetycznej w modelu Isinga $\chi^{eq}[g(t)]$.

gdzie $h(x \ll -1)$ dla przejść w górę oraz $h(x \gg 1)$ dla przejść w dół są z dobrą dokładnością opisywane wzorem $-\frac{1}{\pi} \ln |x|$. Identyfikując $\sqrt{\tau_Q}$ z $1/\hat{g}$ otrzymujemy odpowiednik ansatzu (5.6) dla modelu Isinga z logarytmiczną rozbieżnością podatności:

$$\chi(g(t)) \approx \tilde{h} \left(\frac{g(t) - g_c}{\hat{g}} \right) + \frac{\ln \tau_Q}{2\pi}. \quad (5.28)$$

Powyższy wzór oznacza, że $\chi(g(t)) - \frac{\ln \tau_Q}{2\pi}$ powinno zależeć jedynie od $(g - 1)\sqrt{\tau_Q}$. Według naszej wiedzy, ansatz (5.28) nie był wcześniej stosowany w literaturze na temat nierównowagowych przejść w modelu Isinga. Można go również otrzymać z tzw. przestrzennych przejść fazowych, patrz np. [53].

Jesteśmy teraz przygotowani aby powtórzyć kroki z podrozdziału 5.2. Typowa ewolucja podatności magnetycznej jest przedstawiona na rysunku 5.5 (zarówno dla przejść w górę jak i w dół danych wzorami (5.15) oraz (5.16)). Fity z rysunku 5.6 wyrażają się następująco:

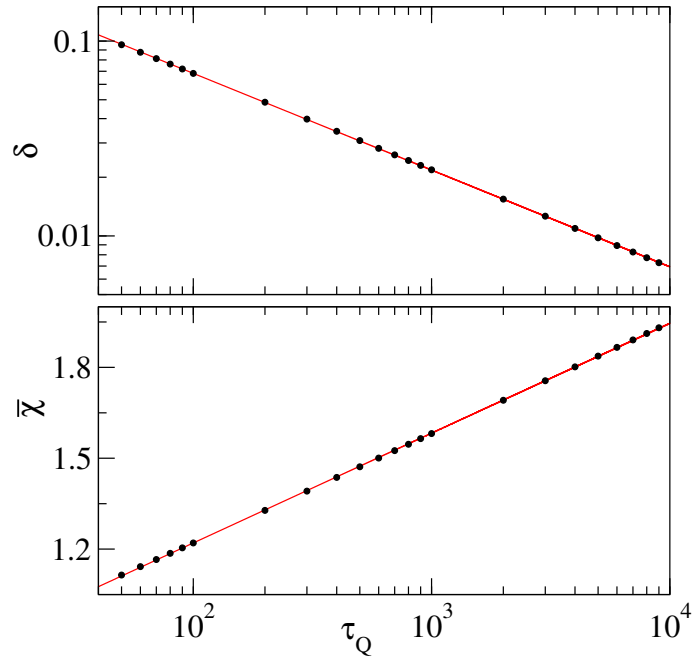
$$\ln \delta = -0.397(3) - 0.4965(4) \ln \tau_Q, \quad (5.29)$$

$$\bar{\chi} = 0.495(2) + 0.1575(2) \ln \tau_Q. \quad (5.30)$$

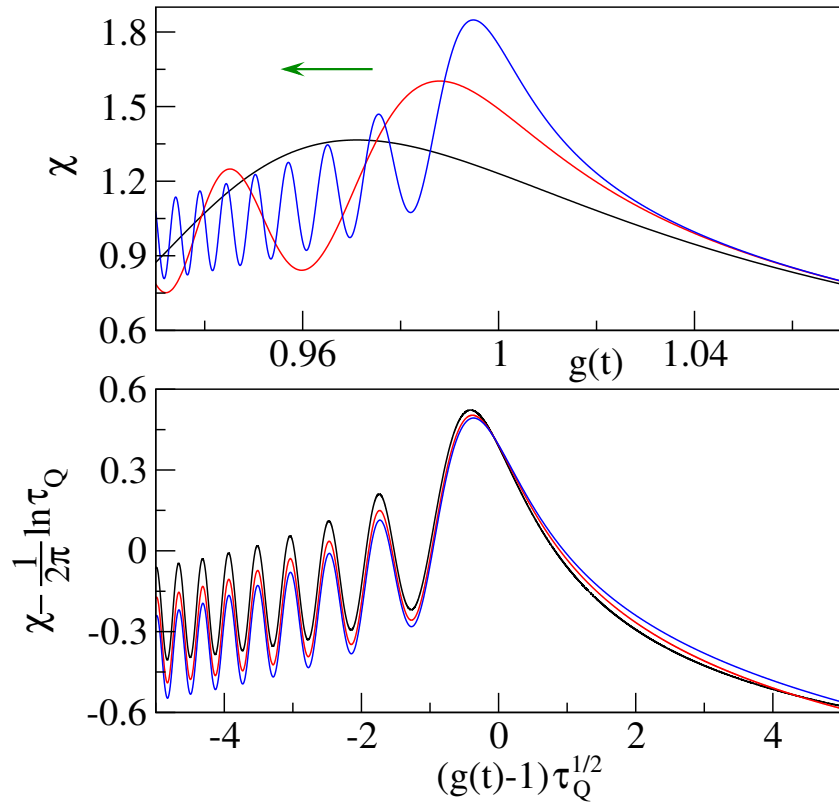
Aby porównać te wyniki z przewidywaniami teoretycznymi zauważmy, że czynnik przed logarytmem w wyrażeniu na δ jest bardzo bliski $-1/2$, jak należało się spodziewać. Podobnie $0.1575(2)$ z (5.30) powinno być porównane z $1/(2\pi) \approx 0.159$ na podstawie ansatzu (5.28) - zgodność również jest bardzo dobra. Pełna weryfikacja ansatzu (5.28) jest zilustrowana na rysunku 5.7.

5.4 Podsumowanie

W tym rozdziale przedstawiliśmy metodę wyznaczania punktu krytycznego opartą na nierównowagowych przejściach w dwóch kierunkach. Metodę przetestowaliśmy na przykładzie dwóch modeli,



Rysunek 5.6: Na górze: Odległość pomiędzy globalnymi maksimami podatności pojawiającymi się podczas przejść w górę i w dół w modelu Isinga. Na dole: Średnia arytmetyczna wartości χ w tych maksimach. Czerwone linie pokazują fity do czarnych punktów pochodzących z danych numerycznych, patrz (5.29), (5.30).



Rysunek 5.7: Dynamika podatności magnetycznej χ w modelu Isinga przed (górny wykres) i po (dolny wykres) przeskalowaniu zgodnie z ansatzem (5.28). Linie czarna, czerwona i niebieska pokazują ewolucję dla τ_Q odpowiednio 200, 1000 i 5000.

wykazujących różne właściwości skalowania podatności w punkcie krytycznym: rozszerzonego modelu XY i modelu Isinga. Istnieje kilka możliwych rozszerzeń i uogólnień naszej metody.

Po pierwsze, podobne obliczenia mogą być wykonane w innych modelach. Wpłynęłoby to na głębsze zrozumienie zachowania podatności w kontekście mechanizmu Kibbla-Zurka. Do dnia dzisiejszego brakuje satysfakcjonujących badań na ten temat, o czym świadczy mała liczba odniesień w literaturze - mimo gruntownych poszukiwań udało się znaleźć trzy pozycje [53, 88, 90]. Wśród tych pozycji w [53] w ogóle nie rozważa się dynamiki, a jedynie przestrzenny mechanizm Kibbla-Zurka. Należy również podkreślić, że jeżeli $\tau_Q < \infty$ to dynamika nierównowagowa zawsze zawiera nieuniwersalne przyczynki, które wymagają oddzielnych badań, zależnych od konkretnego układu. Na ich obecność wskazuje np. brak idealnego przekrycia przeskalowanych podatności na rysunkach 5.4 oraz 5.7.

Po drugie, nasza metoda może być wykorzystana w celu numerycznej lokalizacji punktów krytycznych w modelach nie posiadających analitycznego rozwiązania. W szczególności, perspektywiczne wydają się układy badane za pomocą metod sieci tensorowych [91, 92], takie jak np. dalekozasięgowy model Isinga [65, 93]. Techniki te oprócz znajdowania stanu podstawowego dają możliwość symulacji dynamiki nierównowagowej z użyciem metody TEBD [94] lub t-DMRG [95].

Po trzecie, proponowany schemat może mieć spory potencjał do wykorzystania w eksperymentalnym wyznaczaniu diagramu fazowego układów kwantowych, a także w projektowaniu doświadczeń mających na celu badanie podatności w kontekście mechanizmu Kibbla-Zurka. W szczególności, można wykorzystać symulatory kwantowe układów spinowych bazujące na podejściu zimno-atomowym lub pułapkowanych jonach [64, 67, 69, 70]. Dynamika układów wykazujących przejście fazowe i mechanizm Kibbla-Zurka była eksperymentalnie badana w [61, 62, 71].

Na zakończenie zauważmy, że zjawiska wykorzystywane w opisanej w tym rozdziale metodzie powinny również występować w nierównowagowych klasycznych przejściach fazowych. Stwierdzenie to jest uprawnione z uwagi na to, że teoria Kibbla-Zurka oryginalnie została sformułowana w kontekście klasycznym [15, 20].

Podsumowując, ogólność zaprezentowanej metody i stosunkowo mała liczba założeń na których ona się opiera sugeruje duże spektrum zastosowań i otwiera wiele dróg dalszych badań.

Podsumowanie

W niniejszej pracy przedstawiono teoretyczną analizę trzech koncepcji związanych z dynamiką kwantowych przejść fazowych: periodyczności ewolucji magnetyzacji poprzecznej i echa Loschmidta dla przejść zatrzymanych w punkcie krytycznym, łamania symetrii oraz lokalizacji punktu krytycznego. Przedstawiono również niezbędne narzędzia techniczne i pojęcia konieczne do zrozumienia prezentowanych zjawisk, wraz z przeglądem literatury prezentującym rozwój tej dziedziny fizyki. Pomimo, że obliczenia wykonano dla szczególnych modeli, które posiadają analityczne rozwiązanie, koncepcja uniwersalności skal wprowadzanych przez mechanizm Kibbbla-Zurka pozwala oczekiwać, że rezultaty powinno dać się rozszerzyć na inne modele oraz układy eksperymentalne.

Istnieją dwie zasadnicze drogi dalszych badań. Można próbować rozszerzyć przedstawione wyniki na układy, które nie mają analitycznego rozwiązania, takie jak np. model Isinga z dalekozasięgowymi oddziaływaniami czy model Bosego-Hubbarda. Można także rozważyć układy w skończonej temperaturze - wtedy do analizy dochodzi jeszcze jeden parametr T . Tą drogą podążają późniejsze prace Autora:

- M. Białończyk, F. Gómez-Ruiz, A. del Campo. *Exact properties of free-fermionic spin chains*. SciPost Phys. 11:013, 2021.
- M. Białończyk, F. Gómez-Ruiz, A. del Campo. *Uhlmann Fidelity and Fidelity Susceptibility for Integrable Spin Chains at Finite Temperature: Exact Results*. New J. Phys. 23:09033, 2021.

Analizowane są w nich pełne statystyki obserwabli w całkowalnych sieciach spinowych w skończonej temperaturze. Obliczenia są jednak wykonywane w stanie równowagi termodynamicznej, dla ustalonych wartości pola zewnętrznego - dlatego tematycznie odbiegają one od głównego nurtu zaprezentowanego w niniejszej rozprawie, która skupia się na dynamice nierównowagowej. Powyższe prace zawierają jednak niezbędne narzędzia do analizy dynamiki nierównowagowej, dlatego perspektywa dalszych wyników w tym zakresie jest bardzo realna.

Podsumowując, mamy nadzieję, że pomimo tego, że niniejsze studium dotyczy w istocie wąskiego zakresu dziedziny kwantowych przejść fazowych, to zaprezentowane w nim różnorodne idee posłużą jako punkt wyjścia do dalszych badań.

Bibliografia

- [1] J. A. Lipa, J. A. Nissen, D. A. Stricker, D. R. Swanson, and T. C. P. Chui. *Specific heat of liquid helium in zero gravity very near the lambda point*. Phys. Rev. B, 68:174518, 2003.
- [2] S. Sachdev. *Quantum Phase Transitions*. Cambridge University Press, second edition, 2011.
- [3] M. P. A. Fisher, P. B. Weichman, G. Grinstein, and D. S. Fisher. *Boson localization and the superfluid-insulator transition*. Phys. Rev. B, 40:546, 1989.
- [4] D. Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner, and P. Zoller. *Cold bosonic atoms in optical lattices*. Phys. Rev. Lett., 81:3108, 1998.
- [5] O. A. Prośniak, M. Łacki, and B. Damski. *Critical points of the three-dimensional Bose-Hubbard model from on-site atom number fluctuations*. Sci. Rep., 9:8687, 2019.
- [6] P. Pfeuty. *The one-dimensional Ising model with a transverse field*. Ann. Phys., 57:79, 1970.
- [7] E. Barouch and B. M. McCoy. *Statistical mechanics of the XY model. II. Spin-correlation functions*. Phys. Rev. A, 3:786, 1971.
- [8] M. Continentino. *Quantum scaling in many-body systems*. World Scientific, Singapore River Edge, NJ, 2001.
- [9] K. G. Wilson. *The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem*. Rev. Mod. Phys., 47:773, 1975.
- [10] H. Stanley. *Scaling, universality and renormalization: Three pillars of modern critical phenomena*. Rev. Mod. Phys., 71:S358, 1999.
- [11] H. Nishimori. *Elements of phase transitions and critical phenomena*. Oxford University Press, New York, 2011.
- [12] M. A. Continentino, G. M. Japiassu, and A. Troper. *Critical approach to the coherence transition in Kondo lattices*. Phys. Rev. B, 39:9734, 1989.
- [13] J. Cardy. *Scaling and Renormalization in Statistical Physics*. Cambridge Lecture Notes in Physics. Cambridge University Press, 1996.
- [14] J. Cardy. *Finite-size scaling*. North-Holland, Netherlands, 1988.
- [15] W. Zurek. *Cosmological experiments in condensed matter systems*. Phys. Rep., 276:177, 1996.
- [16] W. H. Zurek, U. Dorner, and P. Zoller. *Dynamics of a quantum phase transition*. Phys. Rev. Lett., 95:105701, 2005.
- [17] T. Kato. *On the adiabatic theorem of quantum mechanics*. J. Phys. Soc. Japan, 5:435, 1950.

- [18] B. Damski. *The simplest quantum model supporting the Kibble-Zurek mechanism of topological defect production: Landau-Zener transitions from a new perspective*. Phys. Rev. Lett., 95:035701, 2005.
- [19] B. Damski and W. H. Zurek. *Adiabatic-impulse approximation for avoided level crossings: From phase-transition dynamics to Landau-Zener evolutions and back again*. Phys. Rev. A, 73:063405, 2006.
- [20] T. Kibble. *Some implications of a cosmological phase transition*. Phys. Rep., 67:183, 1980.
- [21] J. Dziarmaga. *Dynamics of a quantum phase transition: Exact solution of the quantum Ising model*. Phys. Rev. Lett., 95:245701, 2005.
- [22] M. Tomka, L. Campos Venuti, and P. Zanardi. *Accuracy of the adiabatic-impulse approximation for closed and open quantum systems*. Phys. Rev. A, 97:032121, 2018.
- [23] C. De Grandi and A. Polkovnikov. *Adiabatic Perturbation Theory: From Landau–Zener Problem to Quenching Through a Quantum Critical Point*, pages 75. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2010.
- [24] P. Weinberg, M. Bukov, L. D’Alessio, A. Polkovnikov, S. Vajna, and M. Kolodrubetz. *Adiabatic perturbation theory and geometry of periodically-driven systems*. Phys. Rep., 688:1, 2017.
- [25] E. Lieb, T. Schultz, and D. Mattis. *Two soluble models of an antiferromagnetic chain*. Ann. Phys., 16:407, 1961.
- [26] S. Katsura. *Statistical Mechanics of the Anisotropic Linear Heisenberg Model*. Phys. Rev., 127:1508, 1962.
- [27] B. Damski and M. M. Rams. *Exact results for fidelity susceptibility of the quantum Ising model: the interplay between parity, system size, and magnetic field*. J. Phys. A, 47:025303, 2013.
- [28] A. F. Albuquerque, F. Alet, C. Sire, and S. Capponi. *Quantum critical scaling of fidelity susceptibility*. Phys. Rev. B, 81:064418, 2010.
- [29] M. Okuyama, Y. Yamanaka, H. Nishimori, and M. M. Rams. *Anomalous behavior of the energy gap in the one-dimensional quantum XY model*. Phys. Rev. E, 92:052116, 2015.
- [30] M. Białończyk and B. Damski. *Dynamics of longitudinal magnetization in transverse-field quantum Ising model: from symmetry-breaking gap to Kibble–Zurek mechanism*. J. Stat. Mech., 2020:013108, 2020.
- [31] G. N. Watson and E. T. Whittaker. *A Course of Modern Analysis*. Cambridge University Press, Cambridge, 1950.
- [32] N. Wu. *Longitudinal magnetization dynamics in the quantum Ising ring: A Pfaffian method based on correspondence between momentum space and real space*. Phys. Rev. E, 101:042108, 2020.
- [33] A. P. Young. *Finite-temperature and dynamical properties of the random transverse-field Ising spin chain*. Phys. Rev. B, 56:11691, 1997.
- [34] G. G. Cabrera and R. Jullien. *Role of boundary conditions in the finite-size Ising model*. Phys. Rev. B, 35:7062, 1987.

- [35] E. R. Caianiello and S. Fubini. *On the algorithm of Dirac spurs*. Il Nuovo Cimento (1943-1954), 9:1218, 1952.
- [36] G. Giuliani and G. Vignale. *Normal ordering and Wick's theorem*, page 674–681. Cambridge University Press, 2005.
- [37] M. Wimmer. *Algorithm 923: Efficient numerical computation of the Pfaffian for dense and banded skew-symmetric matrices*. ACM Trans. Math. Softw., 38, 2012.
- [38] D. Sadhukhan, A. Sinha, A. Francuz, J. Stefaniak, M. M. Rams, J. Dziarmaga, and W. H. Zurek. *Sonic horizons and causality in phase transition dynamics*. Phys. Rev. B, 101:144429, 2020.
- [39] M. Suzuki. *Relationship among Exactly Soluble Models of Critical Phenomena. I: 2D Ising Model, Dimer Problem and the Generalized XY-Model*. Prog. Theor. Phys., 46:1337, 1971.
- [40] A. Polkovnikov. *Universal adiabatic dynamics in the vicinity of a quantum critical point*. Phys. Rev. B, 72:161201, 2005.
- [41] S. Mostame, G. Schaller, and R. Schützhold. *Decoherence in a dynamical quantum phase transition of the transverse Ising chain*. Phys. Rev. A, 76:030304, 2007.
- [42] R. Barankov and A. Polkovnikov. *Optimal nonlinear passage through a quantum critical point*. Phys. Rev. Lett., 101:076801, 2008.
- [43] S. Mondal, K. Sengupta, and D. Sen. *Theory of defect production in nonlinear quench across a quantum critical point*. Phys. Rev. B, 79:045128, 2009.
- [44] D. Patanè, L. Amico, A. Silva, R. Fazio, and G. E. Santoro. *Adiabatic dynamics of a quantum critical system coupled to an environment: Scaling and kinetic equation approaches*. Phys. Rev. B, 80:024302, 2009.
- [45] T. Puskarov and D. Schuricht. *Time evolution during and after finite-time quantum quenches in the transverse-field Ising chain*. SciPost Phys., 1:003, 2016.
- [46] K. Sengupta, S. Powell, and S. Sachdev. *Quench dynamics across quantum critical points*. Phys. Rev. A, 69:053616, 2004.
- [47] P. Calabrese, F. H. L. Essler, and M. Fagotti. *Quantum quench in the transverse field Ising chain: I. Time evolution of order parameter correlators*. J. Stat. Mech., 2012:07016, 2012.
- [48] P. Calabrese, F. H. L. Essler, and M. Fagotti. *Quantum quenches in the transverse field Ising chain: II. Stationary state properties*. J. Stat. Mech., 2012:07022, 2012.
- [49] F. H. L. Essler, S. Evangelisti, and M. Fagotti. *Dynamical correlations after a quantum quench*. Phys. Rev. Lett., 109:247206, 2012.
- [50] M. Heyl, A. Polkovnikov, and S. Kehrein. *Dynamical quantum phase transitions in the transverse-field Ising model*. Phys. Rev. Lett., 110:135704, 2013.
- [51] M. Białończyk and B. Damski. *One-half of the Kibble-Zurek quench followed by free evolution*. J. Stat. Mech., 2018:073105, 2018.
- [52] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery. *Numerical Recipes 3rd Edition: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, USA, third edition, 2007.

- [53] M. Łącki and B. Damski. *Spatial Kibble–Zurek mechanism through susceptibilities: the inhomogeneous quantum Ising model case*. J. Stat. Mech., 2017:103105, 2017.
- [54] Wolfram Research Inc. *Mathematica, Version 12.2*. Champaign, IL, 2020.
- [55] J. Cardy. *Thermalization and revivals after a quantum quench in conformal field theory*. Phys. Rev. Lett., 112:220401, 2014.
- [56] M. Heyl, A. Polkovnikov, and S. Kehrein. *Dynamical quantum phase transitions in the transverse-field Ising model*. Phys. Rev. Lett., 110:135704, 2013.
- [57] K. Najafi and M. A. Rajabpour. *On the possibility of complete revivals after quantum quenches to a critical point*. Phys. Rev. B, 96:014305, 2017.
- [58] A. A. Zvyagin. *Dynamical quantum phase transitions (review article)*. Low Temp. Phys., 42:971, 2016.
- [59] M. Heyl. *Dynamical quantum phase transitions: a review*. Rep. Prog. in Phys., 81:054001, 2018.
- [60] E. Barouch, B. M. McCoy, and M. Dresden. *Statistical mechanics of the XY model. I*. Phys. Rev. A, 2:1075, 1970.
- [61] H. Bernien, S. Schwartz, A. Keesling, H. Levine, A. Omran, H. Pichler, S. Choi, A. S. Zibrov, M. Endres, M. Greiner, V. Vuletić, and M. D. Lukin. *Probing many-body dynamics on a 51-atom quantum simulator*. Nature, 551:579, 2017.
- [62] J. Zhang, G. Pagano, P. W. Hess, A. Kyprianidis, P. Becker, H. Kaplan, A. V. Gorshkov, Z.-X. Gong, and C. Monroe. *Observation of a many-body dynamical phase transition with a 53-qubit quantum simulator*. Nature, 551:601, 2017.
- [63] S. Deng, G. Ortiz, and L. Viola. *Dynamical critical scaling and effective thermalization in quantum quenches: Role of the initial state*. Phys. Rev. B, 83:094304, 2011.
- [64] M. Lewenstein, A. Sanpera, V. Ahufinger, B. Damski, A. Sen(De), and U. Sen. *Ultracold atomic gases in optical lattices: mimicking condensed matter physics and beyond*. Adv. Phys., 56:243, 2007.
- [65] D. Jaschke, K. Maeda, J. D. Whalen, M. L. Wall, and L. D. Carr. *Critical phenomena and Kibble–Zurek scaling in the long-range quantum Ising chain*. New J. Phys., 19:033032, 2017.
- [66] W. Rudin. *Real and Complex Analysis, 3rd Ed.* McGraw-Hill, Inc., USA, 1987.
- [67] S. Korenblit, D. Kafri, W. C. Campbell, R. Islam, E. E. Edwards, Z.-X. Gong, G.-D. Lin, L.-M. Duan, J. Kim, K. Kim, and C. Monroe. *Quantum simulation of spin models on an arbitrary lattice with trapped ions*. New J. Phys., 14:095024, 2012.
- [68] N. Hatano and M. Suzuki. *Finding Exponential Product Formulas of Higher Orders*, pages 37. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2005.
- [69] C. Gross and I. Bloch. *Quantum simulations with ultracold atoms in optical lattices*. Science, 357:995, 2017.
- [70] D. Porras and J. I. Cirac. *Effective quantum spin systems with trapped ions*. Phys. Rev. Lett., 92:207901, 2004.

- [71] A. Keesling, A. Omran, H. Levine, H. Bernien, H. Pichler, S. Choi, R. Samajdar, S. Schwartz, P. Silvi, S. Sachdev, P. Zoller, M. Endres, M. Greiner, V. Vuletić, and M. D. Lukin. *Quantum Kibble–Zurek mechanism and critical dynamics on a programmable Rydberg simulator*. Nature, 568:207, 2019.
- [72] R. Harris, Y. Sato, A. J. Berkley, M. Reis, F. Altomare, M. H. Amin, K. Boothby, P. Bunyk, C. Deng, C. Enderud, S. Huang, E. Hoskinson, M. W. Johnson, E. Ladizinsky, N. Ladizinsky, T. Lanting, R. Li, T. Medina, R. Molavi, R. Neufeld, T. Oh, I. Pavlov, I. Perminov, G. Poulin-Lamarre, C. Rich, A. Smirnov, L. Swenson, N. Tsai, M. Volkmann, J. Whittaker, and J. Yao. *Phase transitions in a programmable quantum spin glass simulator*. Science, 361(6398):162, 2018.
- [73] B. Gardas, J. Dziarmaga, W. H. Zurek, and M. Zwolak. *Defects in quantum computers*. Sci. Rep., 8:4539, 2018.
- [74] V. Makhalov, T. Satoor, A. Evrard, T. Chalopin, R. Lopes, and S. Nascimbene. *Probing quantum criticality and symmetry breaking at the microscopic level*. Phys. Rev. Lett., 123:120601, 2019.
- [75] M. Białończyk and B. Damski. *Locating quantum critical points with Kibble-Zurek quenches*. Phys. Rev. B, 102:134302, 2020.
- [76] S. Yin, X. Qin, C. Lee, and F. Zhong. *Finite-time scaling of dynamic quantum criticality*, 2013.
- [77] Q. Hu, S. Yin, and F. Zhong. *Scaling of the entanglement spectrum in driven critical dynamics*. Phys. Rev. B, 91:184109, 2015.
- [78] R.-Z. Huang and S. Yin. *Nonequilibrium critical dynamics in the quantum chiral clock model*. Phys. Rev. B, 99:184104, 2019.
- [79] S. Bhattacharyya, S. Dasgupta, and A. Das. *Signature of a continuous quantum phase transition in non-equilibrium energy absorption: Footprints of criticality on higher excited states*. Sci. Rep., 5:16490, 2015.
- [80] S. Roy, R. Moessner, and A. Das. *Locating topological phase transitions using nonequilibrium signatures in local bulk observables*. Phys. Rev. B, 95:041105, 2017.
- [81] M. Tomka, L. Campos Venuti, and P. Zanardi. *Accuracy of the adiabatic-impulse approximation for closed and open quantum systems*. Phys. Rev. A, 97:032121, 2018.
- [82] M. Kolodrubetz, B. K. Clark, and D. A. Huse. *Nonequilibrium dynamic critical scaling of the quantum Ising chain*. Phys. Rev. Lett., 109:015701, 2012.
- [83] A. Chandran, A. Erez, S. S. Gubser, and S. L. Sondhi. *Kibble-Zurek problem: Universality and the scaling limit*. Phys. Rev. B, 86:064304, 2012.
- [84] A. Francuz, J. Dziarmaga, B. Gardas, and W. H. Zurek. *Space and time renormalization in phase transition dynamics*. Phys. Rev. B, 93:075134, 2016.
- [85] D. Rossini and E. Vicari. *Dynamic Kibble-Zurek scaling framework for open dissipative many-body systems crossing quantum transitions*. Phys. Rev. Research, 2:023211, 2020.
- [86] B. Damski and W. H. Zurek. *Soliton creation during a Bose-Einstein condensation*. Phys. Rev. Lett., 104:160404, 2010.

- [87] M. M. Rams, P. Sierant, O. Dutta, P. Horodecki, and J. Zakrzewski. *At the limits of criticality-based quantum metrology: Apparent super-Heisenberg scaling revisited*. Phys. Rev. X, 8:021022, 2018.
- [88] M. M. Rams, J. Dziarmaga, and W. H. Zurek. *Symmetry breaking bias and the dynamics of a quantum phase transition*. Phys. Rev. Lett., 123:130603, 2019.
- [89] B. Damski and W. H. Zurek. *How to fix a broken symmetry: quantum dynamics of symmetry restoration in a ferromagnetic Bose–Einstein condensate*. New J. Phys., 10:045023, 2008.
- [90] S. Yin, X. Qin, C. Lee, and F. Zhong. *Finite-time scaling of dynamic quantum criticality*, 2013.
- [91] F. Verstraete, V. Murg, and J. Cirac. *Matrix product states, projected entangled pair states, and variational renormalization group methods for quantum spin systems*. Adv. Phys., 57:143, 2008.
- [92] U. Schollwöck. *The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states*. Ann. Phys., 326:96, 2011.
- [93] F. J. Gómez-Ruiz and A. del Campo. *Universal dynamics of inhomogeneous quantum phase transitions: Suppressing defect formation*. Phys. Rev. Lett., 122:080604, 2019.
- [94] G. Vidal. *Efficient classical simulation of slightly entangled quantum computations*. Phys. Rev. Lett., 91:147902, 2003.
- [95] F. Verstraete, J. J. García-Ripoll, and J. I. Cirac. *Matrix product density operators: Simulation of finite-temperature and dissipative systems*. Phys. Rev. Lett., 93:207204, 2004.