Universidade de São Paulo
Instituto de Física

**Modelos de dímeros em redes planas.
Matriz de transferência e soluções por
meio da representação de férmions.**

Helder Luciani Casa Grande

Orientador: Prof. Dr. Silvio R. Salinas

Dissertação de mestrado apresentada ao
Instituto de Física para a obtenção do
título de Mestre em Ciências.

Banca examinadora:

Prof. Dr. Silvio R. Salinas (IFUSP)
Prof. Dr. Domingos Humberto U. Marchetti (IFUSP)
Prof. Dr. Francisco A. da Costa (UFRN)

São Paulo - 2009

FICHA CATALOGRÁFICA

**Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação
do Instituto de Física da Universidade de São Paulo**

Grande, Helder Luciani Casa

Modelos de dímeros em redes planas. Matriz de transferência e soluções por meio da representação de férmions. São Paulo, 2009.

Dissertação (Mestrado) – Universidade de São Paulo.
Instituto de Física - Depto. de Física Geral

Orientador: Prof. Dr. Silvio Roberto Salinas

Área de Concentração: Física

Unitermos: 1. Mecânica Estatística; 2. Mudança de Fase; 3. Modelo de Dímeros.

USP/IF/SBI-031/2009

Agradecimentos

- Agradeço primeiramente a Deus.
- Aos meus pais, pela forma dedicada como me educaram, e a todos os meus familiares pelo apoio e encorajamento. Sem essas pessoas eu nada seria.
- A todos os meus amigos, em especial aos amigos do IFUSP, companheiros dos últimos anos, e aos amigos da Universidade Estadual de Maringá, companheiros durante minha graduação. Agradeço também aos professores e amigos da Escola Estadual José Firpo e do Grupo de Ciências C.C. Luckesi da cidade de Lucélia, local onde recebi os primeiros ensinamentos e que guardarei por toda vida.
- Ao meu orientador pela sugestão do trabalho e pelo acompanhamento ao longo dos últimos dois anos.
- Ao CNPq pelo auxílio financeiro.

Resumo

Resolvemos o modelo de dímeros em duas redes planas diferentes, a rede 4-8 e a rede hexagonal (favo de mel). Na rede 4-8 ocorre uma transição do tipo Ising (bidimensional); na rede hexagonal há uma transição conhecida como $3/2$. Após a definição do modelo mostramos que o cálculo da função de partição pode ser formulado em termos do traço de uma matriz de transferência escrita numa representação de matrizes de Pauli. Usando a transformação de Jordan-Wigner, os operadores de Pauli são transformados em operadores de criação e aniquilação de férmions, e a matriz de transferência pode ser diagonalizada pela redução a um problema de férmions livres. Comparamos as soluções do modelo de dímeros na rede 4-8 e do modelo de Ising bidimensional; em particular, comparamos o comportamento do calor específico e analisamos o espectro da matriz de transferência. Verificamos que as nossas soluções concordam com resultados obtidos pelas técnicas combinatórias. Utilizamos a formulação da matriz de transferência para construir uma versão de tempo contínuo dos modelos de dímeros nas redes quadrada, 4-8 e hexagonal. Ao contrário do modelo de Ising, no caso dos dímeros essa aproximação de tempo contínuo altera a natureza do comportamento crítico.

Abstract

We solve the dimer model on two different planar lattices, the 4-8 lattice and the honeycomb lattice. In the dimer model on the 4-8 lattice there is a phase transition of the (two-dimensional) Ising type; on the honeycomb lattice there is a phase transition known as $3/2$. After defining the model we show that the calculation of the partition function can be formulated as the trace of a transfer matrix that is written in terms of Pauli matrices. Using the Jordan-Wigner transformation, the Pauli matrices give rise to fermion creation and annihilation operators, and the problem is reduced to the diagonalization of a system of free fermions. We compare the solutions of the dimer model on the 4-8 lattice and of the two-dimensional Ising model; in particular, we compare the behavior of the specific heat and we analyze the spectrum of the transfer matrix. These solutions agree with well-known results from combinatorial techniques. We then use the transfer matrix approach to obtain a continuum time formulation for the dimer models on the square, 4-8 and honeycomb lattices. In contrast to the Ising case, for the dimer models this approximation changes the nature of critical behavior.

Sumário

Agradecimentos	i
Resumo	iii
Abstract	v
1 Introdução.	1
2 Modelo de dímeros numa rede plana.	5
2.1 Definição do modelo de dímeros numa rede plana.	5
2.2 Formulação da matriz de transferência.	6
3 Modelo de dímeros na rede 4-8.	11
3.1 Matriz de transferência para o MD na rede 4-8.	11
3.2 Solução de férmions livres.	13
3.3 Espectro da matriz $\mathbf{V}$ e o calor específico.	24
4 Modelo de dímeros na rede hexagonal.	27
4.1 Matriz de transferência para o MD na rede hexagonal.	27
4.2 Solução de férmions livres.	29
5 Aproximação de tempo contínuo.	35
5.1 Modelo de Ising.	35
5.1.1 Modelo de Ising unidimensional.	36
5.1.2 Modelo de Ising bidimensional.	38

5.1.3	Criticalidade do modelo de Ising.	41
5.1.4	Solução de férmions livres.	42
5.2	Modelo de dímeros.	45
5.2.1	Modelo de dímeros unidimensional.	45
5.2.2	Modelo de dímeros na rede quadrada.	47
5.2.3	Modelo de dímeros na rede 4-8.	49
5.2.4	Modelo de dímeros na rede hexagonal.	51
6	Apêndice.	53
6.1	Espectro do modelo de Ising bidimensional.	53
7	Considerações Finais.	57
	Referências Bibliográficas	59

Capítulo 1

Introdução.

O problema de dímeros em redes planas constitui um dos poucos modelos estatísticos bidimensionais não triviais, que exhibe uma transição de fase e que tem soluções exatas conhecidas. Podemos defini-lo como uma distribuição de moléculas diatômicas em uma rede plana, onde cada molécula ocupa dois sítios primeiros vizinhos da rede e nenhum sítio pode ser ocupado por mais de uma molécula. Este modelo foi proposto por Fowler e Rushbrooke em 1937 [1] no estudo das propriedades termodinâmicas da adsorção de gases formados por moléculas diatômicas em uma superfície, tornando-se mais tarde um dos problemas clássicos da mecânica estatística nas redes.

Uma solução exata surgiu somente em 1961 quando, de forma independente, Kasteleyn [2] e Fisher e Temperley [3] resolveram o modelo na rede quadrada considerando o limite de empacotamento, ou seja, nenhum sítio vazio, por meio de métodos combinatórios e da teoria de grafos. Esse método combinatório baseia-se na formulação da função de partição em termos dos determinantes de determinadas matrizes antissimétricas e ficou conhecido como o método das pfaffianas. As primeiras soluções na rede quadrada não apresentaram uma transição de fase. No entanto, o próprio Kasteleyn em 1963 [4] mostrou que o modelo de dímeros na rede hexagonal (favo de mel) apresenta uma transição de fase muito peculiar, conhecida mais tarde como transição $3/2$, em que abaixo da temperatura crítica o calor específico é nulo e acima diverge com expoente $\alpha = 1/2$. No mesmo trabalho Kasteleyn também mostra que qualquer modelo de dímeros em uma rede plana (onde não há cruzamentos de ligações) pode ser resolvido pela técnica das pfaffianas. A rede hexagonal foi utilizada por Wu para estudar qualitativamente transições de fase em materiais ferroelétricos [5], propondo o modelo KDP modificado. Esse modelo surge como uma simplificação do modelo de vértices usado para explicar tanto a entropia residual do gelo, quanto para o estudo de transições em materiais ferroelétricos.

Em trabalho muito conhecido, Fisher [6] mostrou que qualquer modelo de Ising planar pode sempre ser mapeado em um modelo de dímeros equivalente em outra rede planar; por exemplo, o modelo de Ising na rede quadrada é mapeado no modelo de dímeros em uma rede conhecida como 3-12, que obviamente tem uma transição de fase do tipo Ising.

Posteriormente, Salinas e Nagle [7], também estudando transições de fase em materiais ferroelétricos, resolveram o modelo de dímeros em uma rede conhecida como 4-8 e observaram uma transição muito parecida com a que ocorre no modelo de Ising bidimensional, com uma divergência logarítmica do calor específico na temperatura crítica ($\alpha \approx 0$); porém, o calor específico encontrado é simétrico em relação à temperatura crítica. Diferentemente do que ocorre em modelos de Ising que têm o mesmo comportamento crítico em qualquer rede bidimensional, o comportamento crítico do modelo de dímeros é profundamente dependente da geometria da rede em que o modelo está definido. Em geral as soluções para modelos de dímeros em redes diversas têm transições do tipo Ising ou do tipo 3/2, ou podem ainda não apresentar uma transição, como no caso da rede quadrada com apenas dois tipos de atividades.

É importante enfatizar que o comportamento crítico dos modelos de dímeros não é afetado unicamente pela geometria da rede. Quando consideramos uma rede quadrada em que há dois tipos de ligações verticais (ambas na mesma linha horizontal distribuídas alternadamente) observamos uma transição de fase do tipo 3/2, como foi estudado por Bhattacharjee [8]. Generalizações deste tipo para a rede hexagonal continuam apresentando uma transição do tipo 3/2, porém, abaixo da temperatura crítica o calor específico é não nulo, ou seja, o estado fundamental não é mais congelado [9]. Nagle e Yokoi puderam encontrar ainda modelos de dímeros baseados em generalizações da rede 4-8 (também diferenciando algumas ligações com a mesma orientação) que mostram múltiplas transições de fase [10, 11]. Em um desses modelos, denominado 4-8/2/1, observa-se uma transição do tipo 3/2 e uma do tipo Ising dependendo das escolhas dos parâmetros de energia das ligações [10]. Em outro modelo denominado 4-8/4/1, além de duas transições, há também um ponto multicrítico Onsager-Kasteleyn, ou OK, onde se encontram as linhas de transição dos dois tipos [12]. Uma revisão a respeito das soluções de modelos de dímeros em várias redes diferentes pode ser encontrada nas referências [13, 14].

A solução exata de Onsager para a energia livre do modelo de Ising na rede quadrada, na ausência de campo externo, foi considerada desde o início um feito matemático [15]. Logo foram publicadas soluções em outras redes planas, com a mesma divergência logarítmica do calor específico, além de diversas soluções alternativas, inclusive através de métodos combinatórios

[16]. O trabalho de Fisher, utilizando a representação das pfaffianas para mostrar que qualquer problema de Ising pode ser reduzido a determinado problema de dímeros, é uma das técnicas combinatórias mais diretas de resolver o problema. Nessa linha de soluções alternativas, há uma proposta de caráter algébrico, publicada por Schultz, Mattis e Lieb [17], em que a matriz de transferência do modelo de Ising na rede quadrada é escrita em termos de operadores de momento angular, que são depois transformados em operadores de Fermi, através da transformação de Jordan-Wigner, e finalmente diagonalizados (na ausência de campo). Levando em conta a simplicidade dessa solução algébrica, Lieb considerou o mesmo tipo de solução alternativa para o modelo de dímeros na rede quadrada [18]. Lieb conseguiu representar a matriz de transferência desse modelo de dímeros em termos de matrizes de Pauli (operadores de spin $1/2$), no mesmo estilo feito para o modelo de Ising [17]. Utilizou então a técnica de redução a um problema de férmions livres para diagonalizar a matriz de transferência, como já havia sido feito para o modelo XY antiferromagnético [20]. Aparentemente não há na literatura tentativas de utilizar essa técnica de férmions livres para considerar modelos de dímeros em outras redes planas.

A solução de férmions livres, baseada na transformação de Jordan-Wigner [21], leva os operadores de Pauli de spin $1/2$ para operadores de criação e aniquilação de férmions. Desta forma o problema da diagonalização da matriz de transferência se reduz ao cálculo de autoestados de um problema exatamente solúvel de férmions livres, pelo menos quando lidamos com formas quadráticas nos operadores de Pauli. A formulação da matriz de transferência permite a investigação de diversas propriedades dos modelos de dímeros, como uma possível versão de tempo contínuo, semelhante ao que se faz para o modelo de Ising [22, 23], que vamos estudar no capítulo 5. Esta formulação deve permitir também o estudo das propriedades de invariância conforme ou comportamento de escala finita. Além disso, tem surgido o interesse no estudo de modelo de dímeros submetidos a diferentes condições de contorno [24], que talvez possam ser tratados nessa abordagem. Há indicações de que no limite termodinâmico a entropia pode depender das condições de contorno.

Recentemente surgiu um novo interesse nestes modelos, no contexto de transições de fase de natureza quântica [25, 26, 27, 28]. Novos materiais magnéticos foram descobertos e denominados “gelos de spin”, por ter um estado fundamental altamente frustrado obedecendo as “regras do gelo” de Pauling [29]. Foram introduzidos modelos de dímeros quânticos para descrever a física do modelo de Heisenberg quântico antiferromagnético [30], com interesse no estudo da dinâmica dos estados ressonantes de ligações de valência (RVB), propostos por Anderson [31]. Estes modelos foram inicialmente introduzidos no contexto da supercondutividade em altas temperatu-

ras, onde o modelo de dímeros quânticos na rede quadrada foi utilizado por Rokhsar e Kivelson [30] para descrever a dinâmica de estados RVB. Na literatura ainda há um interesse em modelos de dímeros relacionados a outros variados problemas, como estabilidade e dinâmica em sistemas granulares, transições de fases em fluidos complexos e biofísica de membranas (ver [32] e referências citadas).

Podemos dizer que esta dissertação tem por objetivo revisitar o trabalho de Lieb [18] e sua formulação do problema de dímeros na rede quadrada para então aplicar a mesma abordagem a dois modelos de dímeros com comportamentos críticos distintos, os modelos na rede 4-8 e na rede hexagonal. Esse trabalho já havia sido iniciado em parte da dissertação de mestrado de Francisco A. da Costa [33], trabalho também sugerido pelo Prof. Silvio R. A. Salinas. Pretendemos então rever e dar continuidade a esse trabalho. Estes dois modelos juntamente com a rede quadrada são os exemplos mais significativos no que diz respeito aos tipos de transição de fases existentes no problema de dímeros em redes planas. A solução de férmions livres será feita em grande detalhe a fim de podermos comparar o espectro da matriz de transferência do modelo de dímeros na rede 4-8 com o espectro do modelo de Ising bidimensional.

Por fim aproveitamos a formulação da matriz de transferência para propormos uma versão de tempo contínuo. Abordamos o modelo de dímeros na rede quadrada, 4-8 e hexagonal, além de um modelo unidimensional. Este estudo será baseado nos trabalhos que desenvolveram esta técnica para o estudo do modelo de Ising [22, 23], e que tiveram sucesso na determinação dos expoentes críticos deste modelo.

Capítulo 2

Modelo de dímeros numa rede plana.

Neste capítulo vamos definir o modelo de dímeros bidimensional (MD) na rede quadrada e mostrar como o cálculo da função de partição pode ser formulado em termos de uma matriz de transferência.

2.1 Definição do modelo de dímeros numa rede plana.

Dada uma rede bidimensional plana, a rede quadrada por exemplo, com M linhas e N colunas, um dímero nesta rede é uma haste rígida (semelhante a uma molécula diatômica) que ocupa dois vértices primeiros vizinhos e a ligação entre eles, sendo que nenhum vértice pode ser ocupado por mais de um dímero. O problema de dímeros consiste então na contagem do número de configurações possíveis dos dímeros que cobrem a rede. No problema de dímeros exigimos que todos os vértices da rede estejam ocupados, isto é chamado de limite de empacotamento. Os dímeros nas posições verticais e horizontais têm em geral “atividades” ou pesos estatísticos diferentes. Uma possível configuração de dímeros na rede quadrada é ilustrada na figura 2.1. Um modelo mais geral poderia incluir ainda a presença de monômeros (semelhantes a moléculas monoatômicas) que ocupam apenas um vértice independentemente (figura 2.2). Poderíamos entender ainda o monômero como um vértice não ocupado na rede, porém, para modelos deste tipo não há uma solução exata conhecida. O modelo de dímeros foi proposto por Fowler e Rushbrooke [1] em 1937, na tentativa de explicar as propriedades termodinâmicas da adsorção de gases formados por moléculas diatômicas em uma superfície. Uma solução exata na rede quadrada foi encontrada somente na

década de sessenta [2, 3] e não mostrou uma transição de fase; porém, em contraste com o modelo de Ising, o comportamento crítico é diferente em redes diferentes. Posteriormente o modelo encontrou aplicações para explicar transições de fases no equilíbrio em materiais ferroelétricos com ligações de hidrogênio [5, 7].

Figura 2.1: Dímeros na rede quadrada.

Figura 2.2: Dímeros e monômeros na rede quadrada.

2.2 Formulação da matriz de transferência.

Nesta seção vamos escrever a função de partição do modelo de dímeros na rede quadrada em termos de uma matriz de transferência reduzindo assim nosso problema a encontrar os autovalores desta matriz, esta formulação é devida a Lieb [18]. Embora esta rede tenha pouco interesse por não apresentar uma transição de fase, ela tem os elementos básicos importantes que necessitaremos no estudo deste modelo em outras redes. Sejam h e v o número de dímeros nas direções horizontal e vertical respectivamente e m o número de monômeros na rede. Pela definição do modelo devemos ter $2h + 2v + m = MN$. A função de partição pode ser escrita como

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\{\mathbf{C}\}} x^h y^v z^m \\ &= y^{\frac{1}{2}MN} \sum_{\{\mathbf{C}\}} \alpha^h \beta^m, \end{aligned} \quad (2.1)$$

onde $\mathbf{C}$ designa uma configuração de h dímeros na horizontal, v dímeros na vertical e m monômeros na rede com atividades x , y e z respectivamente, com $\alpha = x/y$ e $\beta = z/y^{\frac{1}{2}}$. A soma percorre todas as configurações possíveis de dímeros e monômeros na rede no limite de empacotamento.

Descreveremos nosso modelo em termos de operadores de Pauli. Para isso distinguiremos entre as ligações horizontais, que chamaremos de ligações H , e as verticais, que chamaremos de ligações V . Definimos também as variáveis de spin $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$ como sendo os autoestados do operador de Pauli σ^z , tal que

$$\sigma^z|\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle, \quad \text{e} \quad \sigma^z|\downarrow\rangle = -|\downarrow\rangle. \quad (2.2)$$

Na primeira linha da rede colocamos N ligações do tipo V seguidas de N ligações do tipo H ; subsequenteemente construímos a rede alternando cada tipo de ligação. Na primeira linha nas ligações V atribuímos uma variável de spin para cima $|\uparrow\rangle$ quando houver um dímero na ligação e uma variável de spin para baixo $|\downarrow\rangle$ se não houver um dímero. Nas ligações horizontais não será necessário atribuímos nenhuma variável. Na linha seguinte, em determinada ligação, havendo uma variável $|\uparrow\rangle$ na linha anterior (dímero), o vértice está saturado e o único valor possível para esta ligação é $|\downarrow\rangle$, ou seja, não pode haver outro dímero. Porém, havendo na linha anterior uma variável $|\downarrow\rangle$ (nenhum dímero), temos três possibilidades para esta ligação:

1. $|\uparrow\rangle$, indicando a presença de um dímero nesta ligação;
2. $|\downarrow\rangle$, indicando a presença de um monômero no vértice, ou seja, não é possível haver dímeros nas ligações vizinhas a este vértice;
3. dois vértices vizinhos, de forma cooperada, podem formar um dímero na ligação horizontal entre eles, ou seja, ambos terão $|\downarrow\rangle$.

Para visualizarmos melhor o papel da matriz de transferência, vamos definir os “vetores de estado” de cada linha, ou seja, o vetor que dá a configuração de cada linha tal como na figura 2.3, onde $|\Phi_i\rangle$ é a configuração da i -ésima linha horizontal da rede.

Figura 2.3: Rede quadrada

Vamos definir então o operador $\mathbf{V}$, que é a própria matriz de transferência no caso da rede quadrada, tal que

$$\langle\Phi_i|\mathbf{V}|\Phi_{i+1}\rangle = \alpha^h\beta^m, \quad (2.3)$$

se e somente se

1. $|\Phi_i\rangle$ e $|\Phi_{i+1}\rangle$ são compatíveis entre si;
2. na $(i + 1)$ ésima linha horizontal existem h dímeros horizontais e m monômeros.

Então podemos escrever a função de partição como

$$\begin{aligned} y^{-\frac{1}{2}MN} Z &= \sum_{\{\Phi_1, \Phi_2, \dots, \Phi_M\}} \langle \Phi_1 | \mathbf{V} | \Phi_2 \rangle \langle \Phi_2 | \mathbf{V} | \Phi_3 \rangle \dots \langle \Phi_{M-1} | \mathbf{V} | \Phi_M \rangle \langle \Phi_M | \mathbf{V} | \Phi_1 \rangle \\ &= \sum_{\{\Phi_1\}} \langle \Phi_1 | \mathbf{V}^M | \Phi_1 \rangle = \text{Tr}(\mathbf{V}^M). \end{aligned} \quad (2.4)$$

A matriz que satisfaz as regras anteriores é formada por três operadores que devem ser aplicados em sequência. O primeiro deles é

$$\mathbf{V}_1 = \prod_{n=1}^N \sigma_n^x, \quad (2.5)$$

onde a matriz de Pauli σ_n^x tem as seguintes propriedades:

$$\sigma_n^x |\dots \uparrow \dots\rangle = |\dots \downarrow \dots\rangle \quad \text{e} \quad \sigma_n^x |\dots \downarrow \dots\rangle = |\dots \uparrow \dots\rangle. \quad (2.6)$$

Estamos usando por simplicidade a notação

$$|\dots \uparrow \dots\rangle \equiv |\cdot\rangle_1 \otimes |\cdot\rangle_2 \otimes \dots \otimes |\uparrow\rangle_n \otimes \dots \otimes |\cdot\rangle_N. \quad (2.7)$$

Este operador quando aplicado em uma linha reverte todas as variáveis de spin para formar uma próxima linha com uma configuração compatível, ou seja, nenhum vértice ocupado por mais de um dímero. Na sequência aplicamos um operador que gera monômeros na linha, ou seja, converte alguns spins para cima em spins para baixo. Isso é feito pelo operador σ_n^- que tem as propriedades:

$$\sigma_n^- |\dots \uparrow \dots\rangle = |\dots \downarrow \dots\rangle \quad \text{e} \quad \sigma_n^- |\dots \downarrow \dots\rangle = 0. \quad (2.8)$$

Para gerar p monômeros na linha, em todas as configurações possíveis, usamos o operador $\frac{1}{p!} \left(\sum_{n=1}^N \sigma_n^- \right)^p$, lembrando que $(\sigma_n^-)^2 = 0$. Então, para gerar um número arbitrário de monômeros com atividade β aplicamos o operador

$$\mathbf{V}_2 = \exp \left(\beta \sum_{n=1}^N \sigma_n^- \right). \quad (2.9)$$

Para gerar dímeros na linha horizontal necessitamos converter duas variáveis de spins em ligações V primeiras vizinhas, ou seja, devemos usar operadores do tipo $\sigma_n^- \sigma_{n+1}^-$. Então para gerar um número arbitrário de dímeros horizontais, em todas as configurações possíveis, com uma atividade α , aplicamos o operador

$$\mathbf{V}_3 = \exp \left(\alpha \sum_{n=1}^N \sigma_n^- \sigma_{n+1}^- \right), \quad (2.10)$$

usando condições periódicas de contorno, $\sigma_{N+1}^- = \sigma_1^-$, na direção horizontal.

Assim podemos escrever a função de partição para o problema de monômeros e dímeros na rede quadrada como

$$Z = y^{\frac{1}{2}MN} \text{Tr} (\mathbf{V}^M), \quad (2.11)$$

com a matriz de transferência dada por

$$\mathbf{V} = \mathbf{V}_3 \mathbf{V}_2 \mathbf{V}_1. \quad (2.12)$$

É conveniente ainda escrever a matriz de transferência de uma forma mais adequada eliminando o operador $\mathbf{V}_1$. Consideremos primeiro $\beta = 0$ (apenas dímeros na rede); em seguida escrevemos $\mathbf{V}^2 = \mathbf{V}_3 \mathbf{V}_1 \mathbf{V}_3 \mathbf{V}_1$. Então usamos as propriedades $\sigma_n^x \sigma_n^- \sigma_n^x = \sigma_n^+$ e $(\sigma_n^x)^2 = 1$, com as quais obtemos o operador¹

$$\mathbf{V}_1 \mathbf{V}_3 \mathbf{V}_1 \equiv \bar{\mathbf{V}}_3 = \exp \left(\alpha \sum_{n=1}^N \sigma_n^+ \sigma_{n+1}^+ \right), \quad (2.13)$$

onde o operador σ_n^+ tem as propriedades:

$$\sigma_n^+ |\cdots \uparrow \cdots\rangle = 0 \quad \text{e} \quad \sigma_n^+ |\cdots \downarrow \cdots\rangle = |\cdots \uparrow \cdots\rangle. \quad (2.14)$$

Podemos assim escrever a matriz de transferência e a função de partição para o modelo de dímeros na rede quadrada, no limite de empacotamento, como

$$\begin{aligned} \mathbf{V}^2 &= \mathbf{V}_3 \bar{\mathbf{V}}_3, \\ \mathbf{V}_3 &= \exp \left(\alpha \sum_{n=1}^N \sigma_n^- \sigma_{n+1}^- \right), \\ \bar{\mathbf{V}}_3 &= \exp \left(\alpha \sum_{n=1}^N \sigma_n^+ \sigma_{n+1}^+ \right), \\ Z &= y^{\frac{1}{2}MN} \sum_{j=1}^{2^N} [\Lambda_j(N)]^{\frac{1}{2}M}, \end{aligned} \quad (2.15)$$

¹Para verificar a expressão (2.13) basta desenvolver o operador $\mathbf{V}_3$ em uma série de Taylor.

onde $\Lambda_j(N)$ para $(j = 1, 2, \dots, 2^N)$ são os autovalores de $\mathbf{V}^2$.

Lieb em seu trabalho de 1967 [18] calcula a função de partição nessa formulação, por meio da solução de férmions livres, e obtêm a mesma solução que havia sido obtida pelos métodos combinatórios [2, 3]. Como já dito o modelo de dímeros na rede quadrada não apresenta uma transição de fase. Neste trabalho não faremos esse cálculo, porém, a solução de férmions livres será exposta com certo detalhe no capítulo 3 para a solução do modelo de dímeros na rede 4-8.

Capítulo 3

Modelo de dímeros na rede 4-8.

Vamos obter agora a matriz de transferência para o modelo de dímeros na rede 4-8 e diagonalizar esta matriz por meio da solução de férmions livres. Faremos uma comparação do espectro da matriz de transferência deste modelo com o espectro do modelo de Ising bidimensional.

3.1 Matriz de transferência para o MD na rede 4-8.

A rede 4-8 que está ilustrada na figura 3.1. Atribuímos para cada ligação i uma energia ϵ_i quando um dímero ocupa esta ligação. Esta rede é isomorfa à rede ilustrada na figura 3.2, que é uma rede quadrada de onde foram retiradas algumas ligações. Nesta figura mostramos também as atividades dos dímeros quando ocupam cada ligação, (lembrando que a atividade é definida por $z_i = e^{-\beta\epsilon_i}$). Observe que na figura 3.2 fizemos uma escolha para os parâmetros de energia, $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon$ ($z \equiv e^{-\beta\epsilon}$), com $\epsilon > 0$ e $\epsilon_3 = 0$. Esta escolha foi feita respeitando-se uma condição conhecida $\epsilon_3 < \min(\epsilon_1, \epsilon_2)$ para que exista uma transição de fase nesta rede [7].

A matriz de transferência pode ser obtida usando-se operadores similares aos operadores usados para a obtenção da matriz de transferência na rede quadrada. Na figura 3.2 as linhas tracejadas delimitam o menor número de linhas horizontais necessárias para formar uma célula unitária de repetição da rede. Começando da linha inferior de ligações verticais, devemos aplicar o operador que conta quantos dímeros já existem na linha de partida, dado por

$$\mathbf{V}_4 = z^{\mathbf{N}_+} = \exp[(\ln z)\mathbf{N}_+]; \quad \mathbf{N}_+ = \sum_{n=1}^N \sigma_n^+ \sigma_n^-, \quad (3.1)$$

Figura 3.1: Rede 4-8

Figura 3.2: Rede 4-8

onde o operador $\mathbf{N}_+$ conta o número de spins para cima ao longo da linha horizontal.

Este operador deve ser usado sempre que na linha de ligações verticais a atividade for diferente de 1. O próximo operador a ser aplicado é o operador que inverte todos os spins das ligações verticais, para formar uma próxima linha compatível, que é igual ao que foi usado na rede quadrada,

$$\mathbf{V}_1 = \prod_{n=1}^N \sigma_n^x. \quad (3.2)$$

Logo após aplicamos o operador que cria dímeros nas ligações horizontais. Agora, porém, devemos criar dímeros em determinadas posições já que não temos algumas ligações da rede quadrada. Assim serão necessários dois tipos de operadores de criação de dímeros, que são dados por

$$\begin{aligned} \mathbf{V}_2 &= \exp \left[z \sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} \sigma_{2n-1}^- \sigma_{2n}^- \right], \\ \mathbf{V}_2' &= \exp \left[z \sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} \sigma_{2n}^- \sigma_{2n+1}^- \right], \end{aligned} \quad (3.3)$$

adotando condições periódicas de contorno, $\sigma_{N+1}^- = \sigma_1^-$, na direção horizontal.

O primeiro operador gera dímeros nas ligações entre os sítios da linha designados por (1,2), (3,4), (5,6), $\dots$, enquanto o segundo gera dímeros em

ligações alternadas às do primeiro operador, ou seja, entre os sítios (2,3), (4,5), (6,7), $\dots$. Seguindo então a construção da matriz de transferência de acordo com a figura 3.2, após a primeira aplicação dos operadores $\mathbf{V}_4$ e $\mathbf{V}_1$ devemos aplicar $\mathbf{V}_2$, $\mathbf{V}_1$ e $\mathbf{V}'_2$ e então $\mathbf{V}_4$, pois há uma outra linha de ligações verticais com atividade z . Logo após aplicamos $\mathbf{V}_1$, $\mathbf{V}'_2$ e $\mathbf{V}_1$; por fim aplicamos $\mathbf{V}_2$. Então basta repetir a aplicação desta seqüência $M/4$ vezes para gerar todas as configurações possíveis de dímeros em uma rede com M linhas horizontais. A matriz de transferência fica desta forma dada por

$$\mathbf{V} = \mathbf{V}_2 \mathbf{V}_1 \mathbf{V}'_2 \mathbf{V}_1 \mathbf{V}_4 \mathbf{V}'_2 \mathbf{V}_1 \mathbf{V}_2 \mathbf{V}_1 \mathbf{V}_4. \quad (3.4)$$

A função de partição é escrita como

$$Z = \text{Tr} \left(\mathbf{V}^{\frac{M}{4}} \right). \quad (3.5)$$

Após a diagonalização teremos

$$Z = \sum_{j=1}^{2^N} [\Lambda_j(N)]^{\frac{1}{4}M}, \quad (3.6)$$

onde $\Lambda_j(N)$ para $(j = 1, 2, \dots, 2^N)$ são os autovalores de $\mathbf{V}$. No limite termodinâmico necessitaremos apenas do maior autovalor da matriz de transferência.

3.2 Solução de férmions livres.

A primeira solução do modelo de dímeros foi feita por Kasteleyn [2] em 1961 na rede quadrada e no mesmo ano de forma independente por Temperley e Fisher [3], usando o método das “pfaffianas”. A solução na rede quadrada não apresentou uma transição de fase, porém, como previsto pelo próprio Kasteleyn [4], verificou-se que o comportamento crítico é diferente em redes com outras geometrias. Nesta seção vamos diagonalizar a matriz de transferência obtida na seção anterior pelo método conhecido por solução de férmions livres. Este método foi desenvolvido por Schultz, Mattis e Lieb para a solução exata de um modelo que consistia em uma cadeia de spins do modelo XY antiferromagnético [20]. Os mesmos autores posteriormente empregaram este método com sucesso em uma solução alternativa do modelo de Ising bidimensional [17], solução esta que é conhecida como uma das mais simples disponíveis. Este método baseia-se na transformação de Jordan-Wigner que transforma operadores de Pauli em operadores de férmions, já que os operadores de férmions são mais simples de tratar. Este método foi

utilizado para obter uma solução alternativa do modelo de dímeros na rede quadrada por Lieb [18] em 1967.

Vamos reescrever a matriz de transferência de um modo mais conveniente. Lembrando que $\sigma_n^x \sigma_n^- \sigma_n^x = \sigma_n^+$ e $(\sigma_n^x)^2 = 1$, podemos eliminar o operador V_1 do mesmo modo como feito no caso da rede quadrada,

$$\begin{aligned} V_1 V_2 V_1 &\equiv \bar{V}_2 = \exp \left[z \sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} \sigma_{2n-1}^+ \sigma_{2n}^+ \right], \\ V_1 V_2' V_1 &\equiv \bar{V}_2' = \exp \left[z \sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} \sigma_{2n}^+ \sigma_{2n+1}^+ \right]. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Então podemos escrever a matriz de transferência para o modelo de dímeros na rede 4-8 como

$$V = V_2 \bar{V}_2' V_4 V_2' \bar{V}_2 V_4. \quad (3.8)$$

Os operadores de Pauli (ou matrizes de Pauli) por meio dos quais escrevemos a matriz de transferência, são operadores de levantamento e abaixamento de spin $\frac{1}{2}$. Estes operadores satisfazem a um conjunto misto de regras de comutação e anticomutação, ou seja, eles têm uma parte bóson e uma parte férmion,

$$\begin{aligned} [\sigma_m^\pm, \sigma_n^\pm] &= 0, & (m \neq n), \\ \{\sigma_n^+, \sigma_n^-\} &= 1, & (\sigma_n^+)^2 = (\sigma_n^-)^2 = 0. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Esta é a principal fonte de dificuldades quando se lida com esses operadores, pois não é possível diagonalizar uma forma quadrática, como a que temos, diretamente por uma transformação canônica, ou seja, uma transformação que preserve o conjunto de regras dadas na (3.9). Porém é possível fazer uma transformação para um novo conjunto de operadores que são operadores puramente de férmions satisfazendo a um conjunto completo de regras de anticomutação. A transformação que faz isso é chamada transformação de Jordan-Wigner [21], que é dada por:

$$\begin{aligned} C_n &= \left[\exp \left(\pi i \sum_{j=1}^{n-1} \sigma_j^+ \sigma_j^- \right) \right] \sigma_n^-, \\ C_n^\dagger &= \left[\exp \left(\pi i \sum_{j=1}^{n-1} \sigma_j^+ \sigma_j^- \right) \right] \sigma_n^+, \end{aligned} \quad (3.10)$$

em que $\mathbf{C}_n^\dagger$ e $\mathbf{C}_n$ são operadores de criação e aniquilação de férmions que satisfazem as regras de anticomutação

$$\begin{aligned}\{\mathbf{C}_m, \mathbf{C}_n^\dagger\} &= \delta_{mn}, \\ \{\mathbf{C}_m^\dagger, \mathbf{C}_n^\dagger\} &= \{\mathbf{C}_m, \mathbf{C}_n\} = 0.\end{aligned}\quad (3.11)$$

O operador $[\exp(\pi i \sigma_j^+ \sigma_j^-)]$ nesta transformação tem valor $+1$ se aplicado a um spin $|\downarrow\rangle$ e o valor -1 se aplicado a um spin $|\uparrow\rangle$. Portanto, quando fazemos transformações de termos quadráticos o novo termo é também quadrático, ou seja,

$$\sigma_n^+ \sigma_n^- = \mathbf{C}_n^\dagger \mathbf{C}_n, \quad \text{pois,} \quad [\exp(\pi i \sigma_j^+ \sigma_j^-)]^2 = 1. \quad (3.12)$$

Para termos quadráticos que envolvem interações entre primeiros vizinhos, utilizando condições periódicas de contorno na borda, obtemos

$$\begin{aligned}\sigma_n^+ \sigma_{n+1}^+ &= \mathbf{C}_n^\dagger \mathbf{C}_{n+1}^\dagger, & (n \neq N), \\ \sigma_n^- \sigma_{n+1}^- &= -\mathbf{C}_n \mathbf{C}_{n+1}, & (n \neq N), \\ \sigma_N^+ \sigma_1^+ &= -(-1)^{N+} \mathbf{C}_N^\dagger \mathbf{C}_1^\dagger, \\ \sigma_N^- \sigma_1^- &= (-1)^{N+} \mathbf{C}_N \mathbf{C}_1.\end{aligned}\quad (3.13)$$

É conveniente neste momento mudar nossa notação com o uso de uma base unidimensional, ou célula unitária, com dois sítios diferentes para eliminarmos as somas que cobrem somente valores pares ou ímpares na matriz $\mathbf{V}$. Para isso redefinimos os operadores de Pauli da seguinte forma

$$\begin{aligned}\sigma_{2n-1}^\star &= \sigma_{n,1}^\star, \\ \sigma_{2n}^\star &= \sigma_{n,2}^\star,\end{aligned}\quad (3.14)$$

onde $\star = (+), (-), x, y, z$. A condição de contorno agora é dada por $\sigma_{\frac{N}{2}+1,1}^\star = \sigma_{1,1}^\star$.

Para fazer isso devemos considerar N par. Esta escolha, embora pareça menos geral, não tem nenhuma consequência no limite termodinâmico. Além do mais, esta escolha pode ser entendida como estando de acordo com a definição do modelo que impõe que todos os sítios da rede estejam ocupados por um vértice de um dímero; para isso devemos ter um número total de sítios par, o que é garantido se assumimos como par o número de sítios em uma direção (voltaremos a discutir essa restrição posteriormente). Então na direção horizontal consideramos $N/2$ células com dois sítios cada uma, designados por 1 e 2, e o índice n agora designa cada uma dessas células. Em

termos desta nova definição podemos reescrever os operadores da matriz de transferência como

$$\begin{aligned}
\mathbf{V}_2 &= \exp \left[z \sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} \sigma_{n,1}^- \sigma_{n,2}^- \right], & \bar{\mathbf{V}}_2 &= \exp \left[z \sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} \sigma_{n,1}^+ \sigma_{n,2}^+ \right], \\
\mathbf{V}'_2 &= \exp \left[z \sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} \sigma_{n,2}^- \sigma_{n+1,1}^- \right], & \bar{\mathbf{V}}'_2 &= \exp \left[z \sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} \sigma_{n,2}^+ \sigma_{n+1,1}^+ \right], \\
\mathbf{V}_4 &= \exp \left[(\ln z) \sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} (\sigma_{n,1}^+ \sigma_{n,1}^- + \sigma_{n,2}^+ \sigma_{n,2}^-) \right].
\end{aligned} \tag{3.15}$$

A transformada de Jordan-Wigner, que pode ser facilmente redefinida apenas com um rearranjo dos termos da soma, fica dada por

$$\begin{aligned}
\mathbf{C}_{n,\alpha} &= \left[\exp \left(\pi i \sum_{j=1}^{\bar{n}} (\sigma_{j,1}^+ \sigma_{j,1}^- + \sigma_{j,2}^+ \sigma_{j,2}^-) \right) \right] \sigma_n^-, \\
\mathbf{C}_{n,\alpha}^\dagger &= \left[\exp \left(\pi i \sum_{j=1}^{\bar{n}} (\sigma_{j,1}^+ \sigma_{j,1}^- + \sigma_{j,2}^+ \sigma_{j,2}^-) \right) \right] \sigma_n^+,
\end{aligned} \tag{3.16}$$

onde $\bar{n}$ significa $n - 1$ para $\alpha = 1$ e n para $\alpha = 2$.

As regras de anticomutação agora são escritas como

$$\begin{aligned}
\{ \mathbf{C}_{m,\alpha}, \mathbf{C}_{n,\beta}^\dagger \} &= \delta_{mn} \delta_{\alpha\beta}, \\
\{ \mathbf{C}_{m,\alpha}^\dagger, \mathbf{C}_{n,\beta}^\dagger \} &= \{ \mathbf{C}_{m,\alpha}, \mathbf{C}_{n,\beta} \} = 0.
\end{aligned} \tag{3.17}$$

Para os termos quadráticos obtemos relações análogas àsquelas encontradas na equação (3.13). Podemos então escrever a matriz de transferência em

termos de operadores de férmions no espaço real,

$$\begin{aligned}
\mathbf{V}_2 &= \exp \left[-z \sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} \mathbf{C}_{n,1} \mathbf{C}_{n,2} \right], \\
\overline{\mathbf{V}}_2 &= \exp \left[z \sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} \mathbf{C}_{n,1}^\dagger \mathbf{C}_{n,2}^\dagger \right], \\
\mathbf{V}'_2 &= \exp \left[-z \left(\sum_{n=1}^{\left(\frac{N}{2}-1\right)} \mathbf{C}_{n,2} \mathbf{C}_{n+1,1} - (-1)^{N_+} \mathbf{C}_{\frac{N}{2},2} \mathbf{C}_{1,1} \right) \right], \\
\overline{\mathbf{V}}'_2 &= \exp \left[z \left(\sum_{n=1}^{\left(\frac{N}{2}-1\right)} \mathbf{C}_{n,2}^\dagger \mathbf{C}_{n+1,1}^\dagger - (-1)^{N_+} \mathbf{C}_{\frac{N}{2},2}^\dagger \mathbf{C}_{1,1}^\dagger \right) \right], \\
\mathbf{V}_4 &= \exp \left[(\ln z) \sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} \left(\mathbf{C}_{n,1}^\dagger \mathbf{C}_{n,1} + \mathbf{C}_{n,2}^\dagger \mathbf{C}_{n,2} \right) \right]. \tag{3.18}
\end{aligned}$$

Devemos observar que os termos nos operadores $\mathbf{V}'_2$ e $\overline{\mathbf{V}}'_2$, com o operador paridade $(-1)^{N_+}$, foram gerados pela nossa escolha das condições periódicas de contorno. Isto não teria ocorrido caso tivéssemos escolhido condições de contorno livres, porém esta escolha se mostrará melhor logo a seguir. Como já dito escolhemos $N = \text{par}$ para que pudéssemos redefinir os operadores de Pauli; isto implica $(-1)^{N_+} = 1$, pois neste caso sempre teremos um número par de dímeros na vertical. Apesar disso faremos a seguir uma pequena discussão sobre as possíveis implicações do operador paridade nas condições de contorno e como essas dificuldades podem ser superadas. Isto é muito útil em modelos como o modelo de Ising em que a restrição $N = \text{par}$ não existe.

As dificuldades geradas por esses termos adicionais na matriz de transferência podem ser superados se observarmos que $[\mathbf{V}, (-1)^{N_+}] = 0$, pois a matriz $\mathbf{V}$ é formada por operadores quadráticos de férmions que sempre comutam com o operador paridade. Portanto, a paridade em relação ao número de partículas é conservada. Assim consideramos separadamente os autoestados de $\mathbf{V}$ que tenham um número par de férmions e os autoestados que

tenham um número ímpar de férmions. Escrevemos então

$$\begin{aligned} \mathbf{V}_{\pm} = & \exp \left[-z \sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} \mathbf{C}_{n,1} \mathbf{C}_{n,2} \right] \exp \left[z \sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} \mathbf{C}_{n,2}^{\dagger} \mathbf{C}_{n+1,1}^{\dagger} \right] \exp [(\ln z) \mathbf{N}_{+}] \times \\ & \times \exp \left[-z \sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} \mathbf{C}_{n,2} \mathbf{C}_{n+1,1} \right] \exp \left[z \sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} \mathbf{C}_{n,1}^{\dagger} \mathbf{C}_{n,2}^{\dagger} \right] \exp [(\ln z) \mathbf{N}_{+}], \end{aligned} \quad (3.19)$$

onde $\mathbf{N}_{+} = \sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} (\mathbf{C}_{n,1}^{\dagger} \mathbf{C}_{n,1} + \mathbf{C}_{n,2}^{\dagger} \mathbf{C}_{n,2})$. O sinal (+) indica $\mathbf{N}_{+}$ = par e temos condições de contorno periódicas anticíclicas,

$$\mathbf{C}_{\frac{N}{2}+1,1}^{\dagger} = -\mathbf{C}_{1,1}^{\dagger} \quad \text{e} \quad \mathbf{C}_{\frac{N}{2}+1,1} = -\mathbf{C}_{1,1}, \quad (\mathbf{N}_{+} \text{ par}), \quad (3.20)$$

O sinal (−) indica $\mathbf{N}_{+}$ = ímpar e temos condições de contorno periódicas cíclicas,

$$\mathbf{C}_{\frac{N}{2}+1,1}^{\dagger} = \mathbf{C}_{1,1}^{\dagger} \quad \text{e} \quad \mathbf{C}_{\frac{N}{2}+1,1} = \mathbf{C}_{1,1}, \quad (\mathbf{N}_{+} \text{ ímpar}). \quad (3.21)$$

É importante entender que os autovalores e autovetores de $\mathbf{V}$ constituem os autovalores e autovetores de $\mathbf{V}_{+}$, tendo número par de férmions, e os autovalores e autovetores de $\mathbf{V}_{-}$, tendo número ímpar de férmions. Demais autovalores e autovetores devem ser descartados.

A escolha de N par feita anteriormente implica condições de contorno anticíclicas (3.20). Lembramos que isto não deve ter efeito algum quando tomamos o limite termodinâmico.

Agora o operador a ser diagonalizado tem uma forma quadrática nos operadores de férmions. Fazemos então uma transformada de Fourier discreta definida por

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_{n,\alpha} &= \left(\frac{2}{N} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-i\frac{\pi}{4}} \sum_q e^{iqn} \boldsymbol{\eta}_{q,\alpha}, \\ \mathbf{C}_{n,\alpha}^{\dagger} &= \left(\frac{2}{N} \right)^{\frac{1}{2}} e^{i\frac{\pi}{4}} \sum_q e^{-iqn} \boldsymbol{\eta}_{q,\alpha}^{\dagger}. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Nesse momento estamos tirando proveito da simetria translacional vinda da escolha de condições periódicas de contorno. Precisamos escolher os índices q de acordo com a escolha das condições de contorno. Para condições de contorno anticíclicas, de acordo com (3.20), devemos ter

$$q \equiv l = \pm \frac{2\pi}{N}, \pm \frac{6\pi}{N}, \pm \frac{10\pi}{N}, \dots, \pm \frac{(N-2)\pi}{N}. \quad (3.23)$$

Para condições de contorno cíclicas, de acordo com (3.21), devemos ter

$$q \equiv k = 0, \pm \frac{4\pi}{N}, \pm \frac{8\pi}{N}, \pm \frac{12\pi}{N}, \dots, \pm \frac{(N-4)\pi}{N}, \pi. \quad (3.24)$$

A escolha dos índices q simétricos em relação à troca de sinal é útil para evitarmos a aparição de autovalores complexos como poderá ser visto adiante. Repare também que sempre temos $N/2$ valores de q , e que N deveria ser múltiplo de 4 se consideramos uma rede finita. A transformação de Fourier dada em (3.22) preserva o caráter fermiônico dos operadores onde atua, ou seja,

$$\begin{aligned} \{\boldsymbol{\eta}_{q,\alpha}, \boldsymbol{\eta}_{k,\beta}^\dagger\} &= \delta_{qk} \delta_{\alpha\beta}, \\ \{\boldsymbol{\eta}_{q,\alpha}^\dagger, \boldsymbol{\eta}_{k,\beta}^\dagger\} &= \{\boldsymbol{\eta}_{q,\alpha}, \boldsymbol{\eta}_{k,\beta}\} = 0. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Pela substituição direta da equação (3.22) nos operadores que compõem a matriz $\mathbf{V}_2$ obtemos

$$\sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} \mathbf{C}_{n,1} \mathbf{C}_{n,2} = -\frac{2i}{N} \sum_{q,q'} \sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} e^{in(q+q')} \boldsymbol{\eta}_{q,1} \boldsymbol{\eta}_{q',2}, \quad (3.26)$$

onde podemos identificar a relação de ortogonalidade

$$\sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} e^{in(q+q')} = \frac{N}{2} \delta_{q,-q'}. \quad (3.27)$$

Encontramos então

$$\sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} \mathbf{C}_{n,1} \mathbf{C}_{n,2} = -i \sum_q \boldsymbol{\eta}_{q,1} \boldsymbol{\eta}_{-q,2}. \quad (3.28)$$

Do mesmo modo, para os demais operadores obtemos

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} \mathbf{C}_{n,1}^\dagger \mathbf{C}_{n,2}^\dagger &= i \sum_q \boldsymbol{\eta}_{q,1}^\dagger \boldsymbol{\eta}_{-q,2}^\dagger, \\ \sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} \mathbf{C}_{n,2} \mathbf{C}_{n+1,1} &= -i \sum_q e^{-iq} \boldsymbol{\eta}_{q,2} \boldsymbol{\eta}_{-q,1}, \\ \sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} \mathbf{C}_{n,2}^\dagger \mathbf{C}_{n+1,1}^\dagger &= i \sum_q e^{iq} \boldsymbol{\eta}_{q,2}^\dagger \boldsymbol{\eta}_{-q,1}^\dagger, \\ \sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} \left(\mathbf{C}_{n,1}^\dagger \mathbf{C}_{n,1} + \mathbf{C}_{n,2}^\dagger \mathbf{C}_{n,2} \right) &= \sum_q \left(\boldsymbol{\eta}_{n,1}^\dagger \boldsymbol{\eta}_{n,1} + \boldsymbol{\eta}_{n,2}^\dagger \boldsymbol{\eta}_{n,2} \right). \end{aligned} \quad (3.29)$$

Podemos agora escrever a matriz de transferência em termos de operadores de férmions no espaço de Fourier,

$$\mathbf{V}_{\pm} = \prod_q \mathbf{V}_q; \quad \mathbf{V}_q = \mathbf{V}_{2,q} \bar{\mathbf{V}}'_{2,q} \mathbf{V}_{4,q} \mathbf{V}'_{2,q} \bar{\mathbf{V}}_{2,q} \mathbf{V}_{4,q},$$

com

$$\begin{aligned} \mathbf{V}_{2,q} &= \exp \left(iz \boldsymbol{\eta}_{q,1} \boldsymbol{\eta}_{-q,2} \right), \\ \bar{\mathbf{V}}_{2,q} &= \exp \left(iz \boldsymbol{\eta}_{q,1}^{\dagger} \boldsymbol{\eta}_{-q,2}^{\dagger} \right), \\ \mathbf{V}'_{2,q} &= \exp \left(-iz e^{-iq} \boldsymbol{\eta}_{-q,1} \boldsymbol{\eta}_{q,2} \right), \\ \bar{\mathbf{V}}'_{2,q} &= \exp \left(-iz e^{iq} \boldsymbol{\eta}_{-q,1}^{\dagger} \boldsymbol{\eta}_{q,2}^{\dagger} \right), \\ \mathbf{V}_{4,q} &= \exp \left[(\ln z) \left(\boldsymbol{\eta}_{q,1}^{\dagger} \boldsymbol{\eta}_{q,1} + \boldsymbol{\eta}_{q,2}^{\dagger} \boldsymbol{\eta}_{q,2} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Onde usamos o fato de que os operadores com índice q e q' comutam, então, obviamente $\mathbf{V}_q$ e $\mathbf{V}_{q'}$ comutam. Podemos diagonalizá-los simultaneamente e o maior autovalor da matriz de transferência será o produto do maior autovalor do operador $\mathbf{V}_q$. Observemos ainda que $\mathbf{V}_q$ tem acoplamentos entre os operadores com índices $(q, 1)$ e $(-q, 2)$ ou entre $(-q, 1)$ e $(q, 2)$. É interessante então reescrever a equação anterior decompondo em outros dois operadores que levem em conta somente um dos acoplamentos. Para tanto escrevemos primeiro $\mathbf{V}_{\pm} = \prod_{q>0} (\mathbf{V}_q \mathbf{V}_{-q})$. Então

$$\mathbf{V}_{\pm} = \prod_{q>0} (\mathbf{A}_q \mathbf{B}_q), \quad (3.31)$$

onde o operador $\mathbf{A}_q$ é definido por

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_q &= \mathbf{A}_{2,q} \bar{\mathbf{A}}'_{2,q} \mathbf{A}_{4,q} \mathbf{A}'_{2,q} \bar{\mathbf{A}}_{2,q} \mathbf{A}_{4,q}, \\ \mathbf{A}_{2,q} &= \exp \left(iz \boldsymbol{\eta}_{q,1} \boldsymbol{\eta}_{-q,2} \right), \\ \bar{\mathbf{A}}_{2,q} &= \exp \left(iz \boldsymbol{\eta}_{q,1}^{\dagger} \boldsymbol{\eta}_{-q,2}^{\dagger} \right), \\ \mathbf{A}'_{2,q} &= \exp \left(-iz e^{iq} \boldsymbol{\eta}_{q,1} \boldsymbol{\eta}_{-q,2} \right), \\ \bar{\mathbf{A}}'_{2,q} &= \exp \left(-iz e^{-iq} \boldsymbol{\eta}_{q,1}^{\dagger} \boldsymbol{\eta}_{-q,2}^{\dagger} \right), \\ \mathbf{A}_{4,q} &= \exp \left[(\ln z) \left(\boldsymbol{\eta}_{q,1}^{\dagger} \boldsymbol{\eta}_{q,1} + \boldsymbol{\eta}_{-q,2}^{\dagger} \boldsymbol{\eta}_{-q,2} \right) \right], \end{aligned} \quad (3.32)$$

com acoplamentos apenas entre $(q, 1)$ e $(-q, 2)$, e $\mathbf{B}_q$ é definido por

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_q &= \mathbf{B}_{2,q} \bar{\mathbf{B}}'_{2,q} \mathbf{B}_{4,q} \mathbf{B}'_{2,q} \bar{\mathbf{B}}_{2,q} \mathbf{B}_{4,q}, \\ \mathbf{B}_{2,q} &= \exp \left(iz \boldsymbol{\eta}_{-q,1} \boldsymbol{\eta}_{q,2} \right), \\ \bar{\mathbf{B}}_{2,q} &= \exp \left(iz \boldsymbol{\eta}_{-q,1}^\dagger \boldsymbol{\eta}_{q,2}^\dagger \right), \\ \mathbf{B}'_{2,q} &= \exp \left(-iz e^{-iq} \boldsymbol{\eta}_{-q,1} \boldsymbol{\eta}_{q,2} \right), \\ \bar{\mathbf{B}}'_{2,q} &= \exp \left(-iz e^{iq} \boldsymbol{\eta}_{-q,1}^\dagger \boldsymbol{\eta}_{q,2}^\dagger \right), \\ \mathbf{B}_{4,q} &= \exp \left[(\ln z) \left(\boldsymbol{\eta}_{-q,1}^\dagger \boldsymbol{\eta}_{-q,1} + \boldsymbol{\eta}_{q,2}^\dagger \boldsymbol{\eta}_{q,2} \right) \right], \end{aligned} \quad (3.33)$$

com acoplamentos apenas entre $(-q, 1)$ e $(q, 2)$.

Necessitamos diagonalizar $\mathbf{A}_q$ apenas entre os estados

$$\begin{aligned} \Phi_0 &= |0\rangle, & \Phi_q &= \boldsymbol{\eta}_{q,1}^\dagger |0\rangle, \\ \Phi_{-q} &= \boldsymbol{\eta}_{-q,2}^\dagger |0\rangle, & \Phi_{-qq} &= \boldsymbol{\eta}_{-q,2}^\dagger \boldsymbol{\eta}_{q,1}^\dagger |0\rangle. \end{aligned} \quad (3.34)$$

Nos estados Φ_q e Φ_{-q} a matriz $\mathbf{A}_q$ é diagonal com autovalor unitário. Nos outros estados a aplicação de $\mathbf{A}_q$ tem como resultados

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_q \Phi_0 &= (1 - 2z^2 \cos q + 2z^4) \Phi_0 + iz(2z^2 - e^{-iq}) \Phi_{-qq}, \\ \mathbf{A}_q \Phi_{-qq} &= -iz^3(2z^2 - e^{iq}) \Phi_0 + 2z^4 \Phi_{-qq}. \end{aligned} \quad (3.35)$$

Portanto, necessitamos diagonalizar $\mathbf{A}_q$ apenas no subespaço gerado por esses dois estados. Temos então

$$\mathbf{A}_q = \begin{pmatrix} 1 - 2z^2 \cos q + 2z^4 & -iz^3(2z^2 - e^{iq}) \\ iz(2z^2 - e^{-iq}) & 2z^4 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} a_q & c_q \\ d_q & b_q \end{pmatrix}, \quad (3.36)$$

que nos dá a seguinte equação para os autovalores

$$\lambda^2 - (1 - 2z^2 \cos q + 4z^4) \lambda + z^4 = 0, \quad (3.37)$$

com a solução

$$\lambda_{1,2}^a = \frac{1}{2} \left[(1 - 2z^2 \cos q + 4z^4) \pm \sqrt{(1 - 2z^2 \cos q + 4z^4)^2 - 4z^4} \right], \quad (3.38)$$

em que o maior autovalor tem o sinal (+). Os dois autovetores correspondentes são:

$$\begin{aligned} \Psi_0 &= \cos \phi_q \Phi_0 + \sin \phi_q \Phi_{-qq}, \\ \Psi_{-qq} &= -\sin \phi_q \Phi_0 + \cos \phi_q \Phi_{-qq}, \end{aligned} \quad (3.39)$$

onde o ângulo ϕ_q é definido por

$$\tan \phi_q = \frac{c_q}{\lambda_1^a - a_q}. \quad (3.40)$$

Da equação (3.37) sabemos que

$$\lambda_1^a \lambda_2^a = z^4 > 0. \quad (3.41)$$

Isto implica que λ_1^a e λ_2^a têm sempre o mesmo sinal. Também sabemos que

$$\begin{aligned} \lambda_1^a + \lambda_2^a = 1 - 2z^2 \cos q + 4z^4 &\geq 1 - 2z^2 + 4z^4 \\ &= (1 - z^2)^2 + 3z^4 > 0, \end{aligned} \quad (3.42)$$

ou seja, λ_1^a e λ_2^a são positivos.

Para diagonalizar $\mathbf{B}_q$ necessitamos dos estados

$$\begin{aligned} \Phi'_0 &= |0\rangle, & \Phi'_{-q} &= \boldsymbol{\eta}_{-q,1}^\dagger |0\rangle, \\ \Phi'_q &= \boldsymbol{\eta}_{q,2}^\dagger |0\rangle, & \Phi'_{-qq} &= \boldsymbol{\eta}_{q,2}^\dagger \boldsymbol{\eta}_{-q,1}^\dagger |0\rangle. \end{aligned} \quad (3.43)$$

$\mathbf{B}_q$ é também diagonal em Φ'_q e Φ'_{-q} . Os resultados aqui são os mesmos daqueles encontrados para o operador $\mathbf{A}_q$, apenas trocando-se ($q \rightarrow -q$). Porém, como os autovalores encontrados não dependem deste sinal, os autovalores de $\mathbf{B}_q$ são também

$$\lambda_{1,2}^b = \frac{1}{2} \left[(1 - 2z^2 \cos q + 4z^4) \pm \sqrt{(1 - 2z^2 \cos q + 4z^4)^2 - 4z^4} \right]. \quad (3.44)$$

Portanto, o maior autovalor da matriz de transferência é dado por

$$\Lambda_{\pm}^{(\text{máx})} = \prod_{q>0} \lambda_q^2, \quad (3.45)$$

com

$$\lambda_q = \frac{1}{2} \left[(1 - 2z^2 \cos q + 4z^4) + \sqrt{(1 - 2z^2 \cos q + 4z^4)^2 - 4z^4} \right]. \quad (3.46)$$

Agora podemos escrever a energia livre para o modelo de dímeros na rede 4-8. No limite termodinâmico apenas o termo que depende do maior autovalor contribui para a função de partição, os demais termos anulam-se. Então, no limite termodinâmico, o logaritmo da função de partição é dado aproximadamente por

$$\ln Z \approx \ln \left(\prod_{q>0} \lambda_q^2 \right)^{\frac{M}{4}} = \frac{M}{4} \sum_{q>0} \ln (\lambda_q^2). \quad (3.47)$$

No limite termodinâmico podemos transformar somas em integrais,

$$\frac{2}{N} \sum_q (\dots) \approx \frac{1}{\pi} \int_0^\pi dq (\dots). \quad (3.48)$$

Obtemos então a energia livre

$$\begin{aligned} -\beta f(z) &= \frac{2}{MN} \ln Z = \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^\pi dq \ln \left[\frac{(1 - 2z^2 \cos q + 4z^4) + \sqrt{(1 - 2z^2 \cos q + 4z^4)^2 - 4z^4}}{2} \right], \end{aligned} \quad (3.49)$$

em que $\frac{MN}{2}$ é o número de dímeros na rede.

Usando a identidade obtida da referência [34],

$$\int_0^\pi d\phi \ln(a - b \cos \phi - c \sin \phi) = \pi \ln \left[\frac{a + \sqrt{a^2 - b^2 - c^2}}{2} \right], \quad (3.50)$$

válida para $b^2 + c^2 < a^2$, com $a = 1 - 2z^2 \cos q + 4z^4$, $b = 2z^2$ e $c = 0$, obtemos

$$-\beta f(z) = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} dq dq' \ln [1 - 2z^2(\cos q + \cos q') + 4z^4], \quad (3.51)$$

que é justamente o resultado conhecido na literatura para o modelo de dímeros nesta rede e que foi obtido primeiramente por Salinas e Nagle [7] por meio de métodos combinatórios.

A energia livre é analítica como função da temperatura, ou da atividade z , a não ser quando o argumento do logaritmo torna-se nulo. Para verificarmos quando isso ocorre escrevemos

$$\begin{aligned} 1 - 2z^2(\cos q + \cos q') + 4z^4 &\geq 1 - 4z^2 + 4z^4 \\ &= (1 - 2z^2)^2, \end{aligned} \quad (3.52)$$

ou seja, a energia livre é não analítica quando $q = q' = 0$ e $z^2 = \frac{1}{2}$. Então a temperatura crítica do modelo de dímeros na rede 4-8 é dada por

$$\exp \left(-\frac{2\epsilon}{k_B T_c} \right) = \frac{1}{2}. \quad (3.53)$$

3.3 Espectro da matriz V e o calor específico.

Faremos agora uma comparação do espectro da matriz de transferência de nosso problema com o espectro da matriz de transferência do modelo de Ising bidimensional. Para isso diagonalizaremos novamente as matrizes (3.32) e (3.33) usando a transformação de Bogoliubov-Valatin, que foi usada primeiramente para simplificar a teoria BCS da supercondutividade e também na solução de férmions livres do modelo de Ising bidimensional [17], e pode sempre ser usada para operadores que envolvam dois tipos de operadores de criação e aniquilação de férmions. Para o operador (3.32) essa transformação pode ser escrita como

$$\begin{aligned}\xi_{q,1} &= \cos \phi_q \eta_{q,1} + \sin \phi_q \eta_{-q,2}^\dagger, & \xi_{-q,2} &= \cos \phi_q \eta_{-q,2} - \sin \phi_q \eta_{q,1}^\dagger, \\ \xi_{q,1}^\dagger &= \cos \phi_q \eta_{q,1}^\dagger + \sin \phi_q \eta_{-q,2}, & \xi_{-q,2}^\dagger &= \cos \phi_q \eta_{-q,2}^\dagger - \sin \phi_q \eta_{q,1}.\end{aligned}\quad (3.54)$$

O ângulo ϕ_q é o mesmo definido por (3.40), porém, poderíamos efetuar a transformação de Bogoliubov-Valatin para uma ângulo qualquer e então encontrar ϕ_q exigindo-se que $\mathbf{A}_q$ fique em uma forma diagonal. Essa transformação mantém novamente o caráter fermiônico dos operadores de criação e aniquilação,

$$\begin{aligned}\{\xi_{l,\alpha}^\dagger, \xi_{k,\beta}\} &= \delta_{lk} \delta_{\alpha\beta}, \\ \{\xi_{l,\alpha}, \xi_{k,\beta}\} &= \{\xi_{l,\alpha}^\dagger, \xi_{k,\beta}^\dagger\} = 0.\end{aligned}\quad (3.55)$$

Em função desses operadores podemos escrever os termos quadráticos que aparecem na matriz $\mathbf{A}_q$ como

$$\begin{aligned}\eta_{q,1} \eta_{-q,2} &= \sin^2 \phi_q \xi_{q,1}^\dagger \xi_{-q,2}^\dagger - \cos^2 \phi_q \xi_{-q,2} \xi_{q,1} + \\ &\quad + 2 \sin 2\phi_q \left(\xi_{q,1}^\dagger \xi_{q,1} + \xi_{-q,2}^\dagger \xi_{-q,2} - 1 \right), \\ \eta_{q,1}^\dagger \eta_{-q,2}^\dagger &= \cos^2 \phi_q \xi_{q,1}^\dagger \xi_{-q,2}^\dagger - \sin^2 \phi_q \xi_{-q,2} \xi_{q,1} + \\ &\quad - 2 \sin 2\phi_q \left(\xi_{q,1}^\dagger \xi_{q,1} + \xi_{-q,2}^\dagger \xi_{-q,2} - 1 \right), \\ \eta_{q,1}^\dagger \eta_{q,1} + \eta_{-q,2}^\dagger \eta_{-q,2} &= \cos 2\phi_q \left(\xi_{q,1}^\dagger \xi_{q,1} + \xi_{-q,2}^\dagger \xi_{-q,2} - 1 \right) + \\ &\quad + \sin 2\phi_q \left(\xi_{q,1}^\dagger \xi_{-q,2}^\dagger + \xi_{-q,2} \xi_{q,1} \right) + 1.\end{aligned}\quad (3.56)$$

Com a matriz de transferência escrita em função desses operadores podemos calcular a forma matricial dos operadores em (3.32) no sub-espaço gerado pelos vetores Ψ_0 e $\Psi_{-qq} = \xi_{q,1}^\dagger \xi_{-q,2}^\dagger \Psi_0$. Efetuando a multiplicação de

cada uma dessas matrizes podemos verificar que os termos fora da diagonal se anulam. Verificamos também que o termo diagonal fica em função apenas do operador número da equação anterior e podemos assim escrever a matriz $\mathbf{A}_q$ na forma

$$\mathbf{A}_q = \exp \left[-\epsilon_q \left(\xi_{q,1}^\dagger \xi_{q,1} + \xi_{-q,2}^\dagger \xi_{-q,2} - 1 \right) \right], \quad (3.57)$$

onde $e^{\epsilon_q} \equiv \lambda_q$ equação (3.46).

Esse tratamento pode ser feito de maneira idêntica para o operador $\mathbf{B}_q$, levando aos mesmos resultados. Podemos então escrever a matriz de transferência em uma forma extremamente simples,

$$\mathbf{V}_\pm = \exp \left[- \sum_q \sum_{\alpha=1,2} \epsilon_q \left(\xi_{q,\alpha}^\dagger \xi_{q,\alpha} - \frac{1}{2} \right) \right]. \quad (3.58)$$

Claramente o maior autovalor é obtido para o estado de zero partículas Ψ_0 , que é par. Como exigido pelas considerações de paridade, necessitamos ter um número par de sítios e somente o autovalor devido ao operador $\mathbf{V}_+$ deve ser considerado o outro autovalor devido ao operador $\mathbf{V}_-$ é descartado. Assim, tanto abaixo quanto acima da temperatura crítica do modelo o maior autovalor é não degenerado. Esta é uma diferença marcante entre o modelo de dímeros na rede 4-8 e o modelo de Ising bidimensional [17], pois o último tem um espectro que abaixo da temperatura crítica é duplamente degenerado (existem duas fases ordenadas), pois o operador $\mathbf{V}_-$ tem um estado de uma partícula que contribui com um valor igual ao estado de zero partículas do operador $\mathbf{V}_+$, enquanto acima da temperatura crítica o maior autovalor é não degenerado (existe uma única fase desordenada).

Esse comportamento do espectro da matriz de transferência do modelo de Ising bidimensional está fortemente ligado ao fato de que a restrição $\mathbf{N}_+ = \text{par}$, tal como ocorre na equação (3.18), não existe para esse modelo¹.

Agora vamos calcular o calor específico para o modelo de dímeros na rede 4-8 a fim de também compará-lo ao modelo de Ising bidimensional. A energia interna pode ser calculada como $u(T) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{2}{MN} \ln Z \right)$. Com a ajuda da identidade obtida de [34]

$$\int_0^\pi \frac{dx \cos nx}{1 + a \cos x} = \frac{\pi}{\sqrt{1-a^2}} \left(\frac{\sqrt{1-a^2}-1}{a} \right)^n; \quad [a^2 < 1, n \geq 0], \quad (3.59)$$

¹A discussão do espectro da matriz de transferência do modelo de Ising bidimensional pode ser encontrada no apêndice 6.1, ou de forma mais detalhada na seção III da referência [17].

e da equação (3.51) obtemos

$$u(T) = \frac{\epsilon}{2} - \frac{\epsilon}{\pi} \left(\frac{1 - 4z^4}{1 + 4z^4} \right) K(k^2); \quad K(k^2) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{d\theta}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \theta}}, \quad (3.60)$$

onde $k = 4z^2/1 + 4z^4$ e a função $K(k^2)$ é uma integral elíptica completa de primeiro tipo. Para $k \approx 1$, que ocorre próximo da temperatura crítica, quando $z^2 \approx \frac{1}{2}$, esta integral tem uma expansão em série no parâmetro k , obtida de [34], que converge rapidamente nesse limite,

$$\begin{aligned} K(k^2) &= \ln \left(\frac{4}{k'} \right) + \left(\frac{1}{2} \right)^2 \left[\ln \left(\frac{4}{k'} \right) - \frac{2}{1 \cdot 2} \right] k'^2 + \\ &+ \left(\frac{1 \cdot 3}{2 \cdot 4} \right)^2 \left[\ln \left(\frac{4}{k'} \right) - \frac{2}{1 \cdot 2} - \frac{2}{3 \cdot 4} \right] k'^4 + \dots, \end{aligned} \quad (3.61)$$

com $k' = \sqrt{1 - k^2}$.

Retendo apenas o primeiro termo dessa série podemos escrever

$$u(T) = \frac{\epsilon}{2} - \frac{\epsilon}{\pi} \left(\frac{1 - 4z^4}{1 + 4z^4} \right) \ln \left(\frac{4}{\sqrt{1 - k^2}} \right). \quad (3.62)$$

A partir da última equação podemos derivar o calor específico nas vizinhanças da temperatura crítica do modelo,

$$c(T) \sim \frac{-4\epsilon^2}{k_B T_c^2} \ln |T - T_c|, \quad (3.63)$$

em que $\sim$ significa o limite assintótico $T \rightarrow T_c$.

Esta divergência logarítmica no calor específico é semelhante a que ocorre no modelo de Ising bidimensional. Porém, no caso do modelo de dímeros o pico da divergência é simétrico em relação à temperatura crítica, diferentemente do que ocorre no modelo de Ising que é caracterizado por uma forte assimetria, isto reflete também a estrutura do espectro da matriz de transferência de cada modelo.

Capítulo 4

Modelo de dímeros na rede hexagonal.

Neste capítulo vamos apresentar a solução do modelo de dímeros na rede hexagonal com as mesmas técnicas utilizadas no capítulo anterior.

4.1 Matriz de transferência para o MD na rede hexagonal.

A rede hexagonal que estamos considerando, também conhecida como “honeycomb” ou “favo de mel”, está ilustrada na figura 4.1. Atribuímos a cada ligação i uma energia ϵ_i quando um dímero ocupa esta ligação. Assim como no caso da rede 4-8, esta rede é isomorfa à rede ilustrada na figura 4.2, que é uma rede quadrada sem algumas ligações. Escolhemos os seguintes parâmetros de energia $\epsilon_1 = 0$ e $\epsilon_2 = \epsilon_3 = \epsilon$ com $z \equiv e^{-\beta\epsilon}$; de acordo com a escolha feita por Wu [5] que apresenta uma transição de fase.

A matriz de transferência é obtida usando-se os mesmos operadores que foram usados para a rede quadrada e a rede 4-8. Na figura 4.2 as linhas tracejadas delimitam o menor número de linhas necessárias que devemos repetir para formar a rede. Porém, antes vamos reescrever a função de partição de uma forma mais conveniente. Usando o vínculo $h + v = \frac{MN}{2}$ podemos escrever

$$Z = \sum_{\{\mathbf{C}\}} z^v = z^{\frac{1}{2}MN} \sum_{\{\mathbf{C}\}} x^h, \quad (4.1)$$

onde $\mathbf{C}$ designa uma configuração de v dímeros na vertical e h dímeros na horizontal com atividades z e 1 respectivamente, com $x = 1/z$. A soma percorre todas as configurações possíveis de dímeros na rede hexagonal no

Figura 4.1: Rede hexagonal

Figura 4.2: Rede hexagonal

limite de empacotamento. Ou seja, podemos calcular a função de partição que queremos calculando a função de partição de um problema de dímeros equivalente, na mesma rede, com atividades horizontais iguais a x e atividades verticais iguais a 1. A descrição das configurações dos dímeros em termos de variáveis de spin é a mesma utilizada no caso da rede quadrada.

Assim construímos a matriz de transferência aplicando na primeira linha o operador que inverte todas variáveis de spin,

$$\mathbf{V}_1 = \prod_{n=1}^N \sigma_n^x. \quad (4.2)$$

Na seqüência, aplicamos o operador que gera dímeros nas ligações horizontais que começam em um vértice ímpar assim como feito na primeira das equações em (3.3),

$$\mathbf{V}_2 = \exp \left[x \sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} \sigma_{2n-1}^- \sigma_{2n}^- \right], \quad (4.3)$$

adotando condições periódicas de contorno na horizontal, $\sigma_{N+1}^- = \sigma_1^-$.

Após isto aplicamos novamente o operador que inverte todas as variáveis de spin para então aplicar o operador que gera monômeros nas ligações alternadas às do operador dito anteriormente, dado por

$$\mathbf{V}'_2 = \exp \left[x \sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} \sigma_{2n}^- \sigma_{2n+1}^- \right]. \quad (4.4)$$

Para uma rede com M linhas e N colunas devemos repetir essa aplicação $M/2$ vezes para gerar todas as configurações possíveis de dímeros em uma rede hexagonal. A função de partição pode então ser escrita como

$$Z = z^{\frac{MN}{2}} \text{Tr} \left(\mathbf{V}^{\frac{M}{2}} \right), \quad (4.5)$$

com a matriz de transferência

$$\mathbf{V} = \mathbf{V}'_2 \mathbf{V}_1 \mathbf{V}_2 \mathbf{V}_1 = \mathbf{V}'_2 \bar{\mathbf{V}}_2, \quad (4.6)$$

e o operador $\bar{\mathbf{V}}_2$ dado por

$$\bar{\mathbf{V}}_2 = \exp \left[x \sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} \sigma_{2n-1}^+ \sigma_{2n}^+ \right], \quad (4.7)$$

onde usamos novamente as propriedades, $\sigma_n^x \sigma_n^- \sigma_n^x = \sigma_n^+$ e $(\sigma_n^x)^2 = 1$, do mesmo modo como feito anteriormente. Após a diagonalização da matriz de transferência a função de partição será dada por

$$Z = z^{\frac{MN}{2}} \sum_{j=1}^{2^N} [\Lambda_j(N)]^{\frac{1}{2}M}, \quad (4.8)$$

onde $\Lambda_j(N)$ para $(j = 1, 2, \dots, 2^N)$ são os autovalores de $\mathbf{V}$.

4.2 Solução de férmions livres.

As equações (4.4) e (4.7) são idênticas às equações (3.3) e (3.7) e são diagonalizadas da mesma forma. Todos os resultados obtidos e discussões feitas para a rede 4-8 são da mesma forma válidas para os operadores da rede hexagonal. Para obtermos os autovalores da matriz de transferência da rede hexagonal escrevemos diretamente o resultado obtido após a transformada de Fourier,

$$\begin{aligned} \mathbf{V} &= \prod_q \mathbf{V}_q; & \mathbf{V}_q &= \mathbf{V}'_{2q} \bar{\mathbf{V}}_{2q}, \\ \bar{\mathbf{V}}_{2q} &= \exp \left(xi \boldsymbol{\eta}_{q,1}^\dagger \boldsymbol{\eta}_{-q,2}^\dagger \right), \\ \mathbf{V}'_{2q} &= \exp \left(xie^{-iq} \boldsymbol{\eta}_{q,2} \boldsymbol{\eta}_{-q,1} \right), \end{aligned} \quad (4.9)$$

onde os índices q , de acordo com as considerações feitas para a rede 4-8, são dados por

$$q = \pm \frac{2\pi}{N}, \pm \frac{6\pi}{N}, \pm \frac{10\pi}{N}, \dots, \pm \frac{(N-2)\pi}{N}. \quad (4.10)$$

Como no caso da rede 4-8 a escolha dos índices q simétricos em relação à troca de sinal nos permite escrever a matriz de transferência em termos de dois operadores que tenham apenas acoplamentos entre operadores de criação e aniquilação de férmions com índices $(q, 1)$ e $(-q, 2)$ ou entre $(-q, 1)$ e $(q, 2)$. Então

$$\mathbf{V} = \prod_{q>0} \mathbf{A}_q \mathbf{B}_q, \quad (4.11)$$

onde $\mathbf{A}_q$ tem acoplamentos entre os operadores com índices $(q, 1)$ e $(-q, 2)$,

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_q &= \mathbf{A}'_{2q} \overline{\mathbf{A}}_{2q}, \\ \overline{\mathbf{A}}_{2q} &= \exp \left(xi \boldsymbol{\eta}_{q,1}^\dagger \boldsymbol{\eta}_{-q,2}^\dagger \right), \\ \mathbf{A}'_{2q} &= \exp \left(xie^{iq} \boldsymbol{\eta}_{-q,2} \boldsymbol{\eta}_{q,1} \right), \end{aligned} \quad (4.12)$$

e $\mathbf{B}_q$ tem acoplamentos entre os operadores com índices $(-q, 1)$ e $(q, 2)$,

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_q &= \mathbf{B}'_{2q} \overline{\mathbf{B}}_{2q}, \\ \overline{\mathbf{B}}_{2q} &= \exp \left(xi \boldsymbol{\eta}_{-q,1}^\dagger \boldsymbol{\eta}_{q,2}^\dagger \right), \\ \mathbf{B}'_{2q} &= \exp \left(xie^{-iq} \boldsymbol{\eta}_{q,2} \boldsymbol{\eta}_{-q,1} \right). \end{aligned} \quad (4.13)$$

Necessitamos diagonalizar esses operadores apenas entre os estados de zero partículas ou de duas partículas,

$$\Phi_0 = |0\rangle, \quad \text{e} \quad \Phi_{-qq} = \boldsymbol{\eta}_{-q,2}^\dagger \boldsymbol{\eta}_{q,1}^\dagger |0\rangle. \quad (4.14)$$

Aplicando o operador $\mathbf{A}_q$ nesses estados temos

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_q \Phi_0 &= (1 - x^2 e^{iq}) \Phi_0 + xi \Phi_{-qq}, \\ \mathbf{A}_q \Phi_{-qq} &= \Phi_{-qq} + xie^{iq} \Phi_0, \end{aligned} \quad (4.15)$$

de onde obtemos

$$\mathbf{A}_q = \begin{pmatrix} 1 - x^2 e^{iq} & xie^{iq} \\ xi & 1 \end{pmatrix}, \quad (4.16)$$

com os autovalores

$$\lambda_q = \frac{1}{2} \left[2 - x^2 e^{iq} \pm x \left(x^2 e^{2iq} - 4e^{iq} \right)^{\frac{1}{2}} \right]. \quad (4.17)$$

Notamos que $\lambda_{-q} = \lambda_q^*$; notamos também que os autovalores do operador $\mathbf{B}_q$ são os mesmos que obtidos agora apenas trocando $q \rightarrow -q$. Assim, os

autovalores de $\mathbf{V}_q$ são números reais dados por produtos do tipo $\Lambda_q = \lambda_q \lambda_q^*$. O maior autovalor é obtido com o sinal negativo na equação (4.17),

$$\Lambda^{\text{máx}} = \prod_{q>0} \lambda_q \lambda_q^*. \quad (4.18)$$

No limite termodinâmico o logaritmo da função de partição por dímero pode ser escrito como

$$\begin{aligned} \frac{2}{MN} \ln Z(z) &= \ln z + \frac{1}{4\pi} \int_0^\pi \ln (\lambda_q \lambda_q^*) \\ &= \frac{1}{4\pi} \int_0^\pi \ln (z^4 \lambda_q \lambda_q^*) . \end{aligned} \quad (4.19)$$

O argumento do logaritmo no integrando é dado por

$$\begin{aligned} z^4 \lambda_q \lambda_q^* &= \\ &= \frac{1}{4} \left[1 + \sqrt{\Delta} + 4z^4 - 4z^2 \cos q + \frac{1}{2} (1 + \sqrt{\Delta}) \sqrt{(1 + \sqrt{\Delta})^2 - 16z^4} \right] \\ &= \left[\frac{1}{4} \left(1 + \sqrt{\Delta} + \sqrt{(1 + \sqrt{\Delta})^2 - 16z^4} \right) \right]^2, \end{aligned} \quad (4.20)$$

onde $\Delta = 1 - 8z^2 \cos q + 16z^4$.

Podemos finalmente escrever a energia livre para o modelo de dímeros na rede hexagonal como

$$\begin{aligned} -\beta f(z) &= \frac{1}{8\pi} \int_{-\pi}^\pi dq \ln (z^4 \lambda_q \lambda_q^*) \\ &= \frac{1}{4\pi} \int_{-\pi}^\pi dq \ln \left[\frac{1}{4} \left(1 + \sqrt{\Delta} + \sqrt{(1 + \sqrt{\Delta})^2 - 16z^4} \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.21)$$

A partir da função de partição podemos calcular a energia interna como,

$$u(T) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{2}{MN} \ln Z \right), \quad (4.22)$$

de onde obtemos

$$\begin{aligned}
u(T) &= \frac{2\epsilon}{\pi} J(z); \\
J(z) &= 4z^4 \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dq}{(\sqrt{\Delta}) \sqrt{(1 + \sqrt{\Delta})^2 - 16z^4}} + \\
&- 4z^4 \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dq}{\sqrt{(1 + \sqrt{\Delta})^2 - 16z^4} \left(1 + \sqrt{\Delta} + \sqrt{(1 + \sqrt{\Delta})^2 - 16z^4}\right)} + \\
&- z^2 \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dq \cos(q)}{(\sqrt{\Delta}) \sqrt{(1 + \sqrt{\Delta})^2 - 16z^4}}. \tag{4.23}
\end{aligned}$$

Os resultados para o modelo de dímeros na rede hexagonal, obtidos pelos métodos combinatórios, podem ser encontrados no trabalho de Wu [5]. Para nossas comparações vamos escrevê-los aqui. A energia livre é dada por

$$\begin{aligned}
-\beta f(z) &= \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta d\phi \ln [1 + 2z^2 + 2z^2 \cos(\theta - \phi) + 2z (\cos \theta + \cos \phi)] \\
&= \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\theta \ln \left[\frac{1}{2} (1 + 2z^2 - 2z \cos \theta + |1 - 2z \cos \theta|) \right]. \tag{4.24}
\end{aligned}$$

Para obtermos a segunda expressão da energia livre usamos a identidade (3.59). A partir dessa expressão Wu obtém os seguintes resultados para a energia interna e o calor específico

$$u(T) = \begin{cases} 0 & \text{se } T < T_c \\ \frac{2\epsilon}{\pi} \cos^{-1} \left[\frac{1}{2} \exp \left(\frac{\epsilon}{k_B T} \right) \right] & \text{se } T > T_c, \end{cases} \tag{4.25}$$

$$c(T) = \begin{cases} 0 & \text{se } T < T_c \\ \frac{\epsilon^2}{\pi k_B T^2} \left[\exp \left(-\frac{2\epsilon}{k_B T} \right) - \frac{1}{4} \right]^{-\frac{1}{2}} & \text{se } T > T_c, \end{cases} \tag{4.26}$$

onde a temperatura crítica é dada por $T_c = \frac{\epsilon}{k_B \ln 2}$.

Por meio de cálculos numéricos obtivemos evidências de que as expressões para a energia livre dadas por (4.21) e (4.24) são numericamente iguais para qualquer faixa de temperatura considerada. O mesmo se verifica para as expressões da energia interna (4.23) e (4.25). Nas figuras 4.3 e 4.4 mostramos os gráficos dessas equações, onde o primeiro deles foi obtido por meio de uma integração numérica.

Figura 4.3: Energia interna (4.23).

Figura 4.4: Energia interna (4.25).

Figura 4.5: Calor específico derivado de (4.23).

Figura 4.6: Calor específico equação (4.26).

A expressão (4.26) para o calor específico é o típico comportamento de uma transição de fase do tipo 3/2 com um calor específico nulo abaixo da temperatura crítica e com o comportamento $c(T) \sim (T - T_c)^{-\frac{1}{2}}$ próximo e acima da temperatura crítica. Na figura 4.5 mostramos o gráfico para o calor específico obtido pela integração numérica de

$$c(T) = \frac{\partial}{\partial T} u(T),$$

onde $u(T)$ é dado pela equação (4.23). Na figura 4.6 mostramos o gráfico para o calor específico obtido da equação (4.26). As curvas para o calor específico também são numericamente iguais para qualquer faixa de temperatura considerada.

Capítulo 5

Aproximação de tempo contínuo.

Neste capítulo vamos apresentar a aproximação de tempo contínuo para o modelo de Ising, com o objetivo de aplicar esta técnica para o modelo de dímeros em redes bidimensionais planas.

5.1 Modelo de Ising.

A formulação de tempo contínuo para o modelo de Ising bidimensional foi feita primeiramente dentro do contexto da teoria de gauge [22], onde a direção tomada como contínua era identificada como a direção temporal. Neste limite o modelo de Ising é relacionado a modelos da teoria de gauge em quatro dimensões (três espaciais e uma temporal) [22, 23]. Esta formulação pode ser obtida de um modo grosseiro considerando a matriz de transferência do modelo de Ising escrita na forma

$$\mathbf{V} = \mathbf{V}_2 \mathbf{V}_1, \quad (5.1)$$

onde $\mathbf{V}_1$ e $\mathbf{V}_2$ são operadores que têm genericamente a forma

$$\begin{aligned} \mathbf{V}_1 &= \exp[\alpha \mathbf{A}], \\ \mathbf{V}_2 &= \exp[\beta \mathbf{B}]. \end{aligned} \quad (5.2)$$

Os parâmetros α e β estão relacionados com as constantes de interação de troca entre os spins nas duas direções da rede. Para operadores do tipo (5.2) o teorema de Baker-Campbell-Hausdorff (BCH) diz que

$$e^{\mathbf{A}} e^{\mathbf{B}} = \exp \left(\mathbf{A} + \mathbf{B} + \frac{1}{2} [\mathbf{A}, \mathbf{B}] + \frac{1}{12} ([\mathbf{A}, [\mathbf{A}, \mathbf{B}]] - [\mathbf{B}, [\mathbf{A}, \mathbf{B}]]) + \dots \right). \quad (5.3)$$

No modelo de Ising os comutadores no argumento da segunda exponencial não se anulam. Porém, pode ser explorado um limite onde os parâmetros α e β sejam pequenos de tal forma que podemos desconsiderar os termos dos comutadores do teorema BCH. Este limite é justamente o limite em que uma das direções da rede é tomada como contínua, como veremos de forma mais clara a seguir. Dentro da teoria de gauge em geral esse limite é obtido exigindo-se que a matriz de transferência, que conecta uma das direções da rede, tenha a forma de uma transformação infinitesimal quântica

$$\mathbf{V} = e^{-\tau \mathbf{H}} \approx 1 - \tau \mathbf{H}, \quad (5.4)$$

com τ sendo infinitesimal.

Com a forma anterior podemos obter a solução do nosso problema diagonalizando a hamiltoniana $\mathbf{H}$. A solução obtida é apenas uma solução em um limite considerado, porém podemos esperar que o comportamento crítico do modelo não se altere, já que a dimensionalidade e o alcance da interação não foram alterados. Essa discussão será abordada novamente na seção 5.1.3. A seguir encontraremos a aproximação de tempo contínuo para o modelo de Ising em uma e duas dimensões.

5.1.1 Modelo de Ising unidimensional.

Construiremos primeiramente a matriz de transferência para o modelo de Ising unidimensional (Ising 1D), definido pela hamiltoniana

$$\mathcal{H} = - \sum_{n=1}^N J \sigma_n \sigma_{n+1} - \sum_{n=1}^N h \sigma_n, \quad (5.5)$$

em que $\sigma_n = \pm 1$, a soma percorre todos os sítios de uma cadeia com N spins e h é um campo magnético externo. Vamos considerar condições periódicas de contorno, ou seja, $\sigma_{N+1} = \sigma_1$.

É conveniente simetrizarmos o termo de campo e adicionarmos uma constante irrelevante a esta hamiltoniana, lembrando que $(\sigma_n)^2 = 1$, para podermos escrever

$$\mathcal{H} = \sum_{n=1}^N \left\{ \frac{J}{2} [\sigma_n - \sigma_{n+1}]^2 - \frac{h}{2} [\sigma_n + \sigma_{n+1}] \right\}. \quad (5.6)$$

Definindo

$$\mathcal{L}(n, n+1) = \left\{ \frac{J}{2} [\sigma_n - \sigma_{n+1}]^2 - \frac{h}{2} [\sigma_n + \sigma_{n+1}] \right\}, \quad (5.7)$$

podemos escrever

$$\mathcal{H} = \sum_{n=1}^N \mathcal{L}(n, n+1). \quad (5.8)$$

A função de partição pode então ser escrita como

$$Z = \sum_{\{\sigma_n\}} \exp(-\beta \mathcal{H}) = \sum_{\{\sigma_n\}} \prod_{n=1}^N \exp[-\beta \mathcal{L}(n, n+1)]. \quad (5.9)$$

A partir desta equação pode-se escrever a função de partição como um traço de uma matriz T elevada à potência N , definida por

$$\mathbf{T} = \exp[\mathcal{L}(n, n+1)] = \begin{pmatrix} e^{\beta h} & e^{-2\beta J} \\ e^{-2\beta J} & e^{-\beta h} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^L & e^{-2K} \\ e^{-2K} & e^{-L} \end{pmatrix}, \quad (5.10)$$

em que $L = \beta h$ e $K = \beta J$.

Então

$$Z = \text{Tr}(\mathbf{T}^N). \quad (5.11)$$

Agora podemos imaginar o eixo desta cadeia de spins como sendo o *eixo temporal da mecânica quântica*; assim $\mathbf{T}$ conduz informação de um tempo para o tempo vizinho. Queremos assim tomar o limite no qual os sítios vizinhos da rede são conectados por uma transformação infinitesimal da forma

$$\mathbf{T} = \exp(-\tau \mathbf{H}) \approx 1 - \tau \mathbf{H}, \quad (5.12)$$

onde τ é infinitesimal e $\mathbf{H}$ é a hamiltoniana da transformação infinitesimal. O limite no qual isso é verdade para a equação (5.10) é dado por

$$\begin{aligned} K &\rightarrow \infty, & (\text{baixas temperaturas}), \\ L &\rightarrow \lambda e^{-2K}, & (\lambda \text{ é uma constante qualquer}), \end{aligned} \quad (5.13)$$

escolhendo

$$\tau = e^{-2K}. \quad (5.14)$$

Encontramos então a forma desejada

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} 1 + \lambda\tau & \tau \\ \tau & 1 - \lambda\tau \end{pmatrix}. \quad (5.15)$$

Podemos agora escrever $\mathbf{T}$ em termos das matrizes de Pauli,

$$\mathbf{T} = 1 + (\lambda \boldsymbol{\sigma}^z + \boldsymbol{\sigma}^x) \tau, \quad (5.16)$$

de onde identificamos a hamiltoniana para o modelo aproximado como

$$\mathbf{H} = -(\boldsymbol{\sigma}^x + \lambda \boldsymbol{\sigma}^z). \quad (5.17)$$

5.1.2 Modelo de Ising bidimensional.

Trataremos agora o modelo de Ising bidimensional (Ising 2D) [15, 17]. Sua hamiltoniana, já colocada em uma forma conveniente, é dada por:

$$\mathcal{H} = \sum_{\vec{r}} \left\{ \frac{J_t}{2} [\sigma_{\vec{r}} - \sigma_{\vec{r}+\hat{n}_t}]^2 - J_z [\sigma_{\vec{r}} \sigma_{\vec{r}+\hat{n}_z}] \right\}, \quad (5.18)$$

onde $\vec{r}$ percorre todos os sítios de uma rede retangular, $\hat{n}_t$ [$\hat{n}_z$] é o vetor unitário na direção t [z]; J_t e J_z são as constantes de acoplamentos nas duas direções da rede. A forma como obteremos o limite de tempo contínuo não será a mesma apresentada no início da seção 5.1, pois isso demandaria um trabalho algébrico longo apenas para obter a matriz de transferência. Usaremos então a abordagem utilizada por Fradkin [22] em que se analisam os termos de interação entre duas linhas de spins.

Porém, antes de obtermos a aproximação de tempo contínuo para esse modelo vamos discutir qualitativamente o limite no qual a direção t torna-se contínua mantendo a direção z discreta. O diagrama de fases para o modelo de Ising 2D no espaço dos parâmetros (J_t, J_z) é mostrado na figura 5.1.

Figura 5.1: Diagrama de fases para o modelo de Ising 2D.

Há uma curva crítica que separa a fase ferromagnética (ordenada) da fase paramagnética (desordenada), dada pela equação

$$\left(\sinh \frac{2J_z}{k_B T_c} \right) \left(\sinh \frac{2J_t}{k_B T_c} \right) = 1. \quad (5.19)$$

Vamos ilustrar o significado dessas idéias em termos da função de correlação de dois pontos, $\langle \sigma_0 \sigma_r \rangle = C(r)$. Para $J_z = J_t$, esta função tem uma

simetria cúbica (figura 5.2); $C(r) = \text{cte}$ são círculos. No caso $J_t > J_z$, os contornos são deformados em elipses com o eixo maior ao longo de t (figura 5.3).

Figura 5.2: Simetria da função correlação de dois pontos $C(r)$.

Figura 5.3: Simetria da $C(r)$ quando $J_t > J_z$.

Agora imaginemos um reescalonamento do eixo t de tal modo que as elipses sejam novamente transformadas em círculos, como é mostrado na figura 5.4. Deste modo podemos compensar os efeitos de anisotropia pelo reescalonamento do eixo t em relação a z . Podemos repetir esse processo até alcançarmos um limite no qual a direção t da rede torna-se contínua. Este limite é chamado limite de tempo contínuo.

Figura 5.4: Reescalonamento de t em relação a z .

Figura 5.5: Duas cadeias de spins vizinhas.

Para obtermos a matriz de transferência para o modelo de Ising 2D já na aproximação de tempo contínuo consideramos duas linhas de spins, conforme ilustrado na figura 5.5. Os spins da linha superior [inferior] são denotados por σ_n [s_n], onde n designa o n -ésimo spin da linha. A hamiltoniana para este par de linhas é dada por

$$\mathcal{H} = \frac{J_t}{2} \sum_{n=1}^N [s_n^z - \sigma_n^z]^2 - \frac{J_z}{2} \sum_{n=1}^N [s_n^z s_{n+1}^z + \sigma_n^z \sigma_{n+1}^z]. \quad (5.20)$$

A matriz de transferência tem linhas e colunas designadas pela configuração de spins de ambas as linhas. Portanto, para N spins em cada linha a matriz T é $2^N \times 2^N$. O elemento da diagonal é obtido fazendo-se $s_n^z = \sigma_n^z$,

$$T_{\text{diagonal}} = \exp \left[K_z \sum_{n=1}^N \sigma_n^z \sigma_{n+1}^z \right]. \quad (5.21)$$

Os termos fora da diagonal podem ser classificados pelo número de spins invertidos ($s_n^z = -\sigma_n^z$). Para um único spin invertido temos

$$T_1 = \exp(-2K_t) \exp[-E(\sigma, s) J_z], \quad (5.22)$$

onde $E(\sigma, s)$ é a soma da energia das duas linhas independentemente. Similarmente para n -spins invertidos temos

$$T_n = \exp(-2nK_t) \exp[-E(\sigma, s) J_z], \quad (5.23)$$

onde estamos usando $\beta J_t \equiv K_t$ e $\beta J_z \equiv K_z$.

Agora consideramos um limite similar ao usado no caso unidimensional,

$$\begin{aligned} K_t &\rightarrow \infty, \\ K_z &\rightarrow \lambda e^{-2K_t}, \end{aligned} \quad (5.24)$$

de onde obtemos os elementos

$$\begin{aligned} T_{\text{diagonal}} &\rightarrow 1 + \lambda e^{-2K_t} \sum_{n=1}^N \sigma_n^z \sigma_{n+1}^z, \\ T_1 &\rightarrow e^{-2K_t} + O(e^{-4K_t}), \\ T_2 &\rightarrow e^{-4K_t} + O(e^{-6K_t}). \\ &\dots \end{aligned} \quad (5.25)$$

Assim podemos adotar uma forma infinitesimal, $\mathbf{T} = 1 + \tau \mathbf{H}$, identificando novamente $\tau = e^{-2K_t}$,

$$\mathbf{T} = 1 + \tau \left[\lambda \sum_{n=1}^N \sigma_n^z \sigma_{n+1}^z + \sum_{n=1}^N \sigma_n^x \right] + \tau^2 \sum_{n \neq m} \sigma_n^x \sigma_m^x + \dots, \quad (5.26)$$

onde estamos usando novamente as matrizes de Pauli; a matriz σ^x é usada para os termos fora da diagonal. Se ignorarmos termos superiores a segunda ordem, por comparação com a equação (5.12) obtemos

$$\mathbf{H} = - \sum_{n=1}^N \sigma_n^x - \lambda \sum_{n=1}^N \sigma_n^z \sigma_{n+1}^z. \quad (5.27)$$

Encontramos assim uma hamiltoniana que pode ser interpretada como o modelo de Ising unidimensional em um campo magnético transversal dado por $1/\lambda$. Espera-se que este modelo tenha o mesmo comportamento crítico que o modelo de Ising bidimensional.

5.1.3 Criticalidade do modelo de Ising.

Consideremos a forma da curva crítica (5.19), no limite $K_t \rightarrow \infty$ e $K_z \rightarrow 0$ ($\lambda e^{-2K_t} \rightarrow 0$). Encontramos que

$$\sinh 2K_t \rightarrow \frac{1}{2} \exp(2K_t), \quad (5.28)$$

e

$$\sinh 2K_z \rightarrow 2K_z. \quad (5.29)$$

Então, neste limite a curva crítica tem a forma

$$K_z = \exp(-2K_t), \quad (5.30)$$

que é a mesma relação de reescalonamento encontrada na equação (5.24), indicando assim que neste limite ainda estamos na região crítica do modelo de Ising 2D. De fato, observando o limite de tempo contínuo,

$$\frac{J_t}{k_B T} = K_t \rightarrow \infty, \quad (5.31)$$

$$\frac{J_z}{k_B T} = K_z \rightarrow \lambda e^{-2K_t}, \quad (5.32)$$

em uma dada temperatura finita isto equivale a fazermos o parâmetro de interação $J_z \rightarrow 0$ mantendo-se o alcance da interação (primeiros vizinhos) inalterado. Tendo em mente que a classe de universalidade é caracterizada essencialmente pela dimensionalidade do sistema, pelo parâmetro de ordem e pelo alcance da interação, torna-se então razoável acreditarmos que neste limite o modelo mantenha seu comportamento crítico inalterado.

5.1.4 Solução de férmions livres.

Faremos agora a diagonalização da hamiltoniana encontrada na formulação de tempo contínuo do modelo de Ising 2D, ou seja, resolveremos o modelo de Ising unidimensional com campo transverso. Isto foi feito primeiramente por Pfeuty em 1970 [35, 36] fora do contexto da aproximação de tempo contínuo, porém, o próprio autor já havia percebido as semelhanças entre o comportamento crítico deste modelo e o Ising bidimensional. A técnica empregada por Pfeuty foi a solução de férmions livres [17, 23]. Primeiramente reescrevemos a equação (5.27) de uma maneira equivalente,

$$\mathbf{H} = - \sum_{n=1}^N \sigma_n^z - \lambda \sum_{n=1}^N \sigma_n^x \sigma_{n+1}^x. \quad (5.33)$$

A primeira transformação aplicada é a transformação de Jordan-Wigner, que transforma operadores de Pauli em operadores de férmions, que foi definida na equação (3.10),

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_n &= \left[\exp \left(\pi i \sum_{j=1}^{n-1} \sigma_j^+ \sigma_j^- \right) \right] \sigma_n^-, \\ \mathbf{C}_n^\dagger &= \left[\exp \left(\pi i \sum_{j=1}^{n-1} \sigma_j^+ \sigma_j^- \right) \right] \sigma_n^+. \end{aligned} \quad (5.34)$$

As mesmas considerações feitas sobre a paridade em relação ao número de partículas e as condições de contorno também poderiam ser feitas aqui, porém, por simplicidade aqui assumiremos o número de sítios como sendo par.

Em termos destes operadores encontramos

$$\begin{aligned} \sigma_n^z &= 2\mathbf{C}_n^\dagger \mathbf{C}_n - 1, \\ \sigma_n^x \sigma_{n+1}^x &= [\mathbf{C}_n^\dagger - \mathbf{C}_n] [\mathbf{C}_{n+1}^\dagger + \mathbf{C}_{n+1}]. \end{aligned} \quad (5.35)$$

Portanto,

$$\mathbf{H} = -2 \sum_n \mathbf{C}_n^\dagger \mathbf{C}_n - \lambda \sum_n [\mathbf{C}_n^\dagger - \mathbf{C}_n] [\mathbf{C}_{n+1}^\dagger + \mathbf{C}_{n+1}]. \quad (5.36)$$

Devido à forma quadrática encontrada fazemos agora uma transformada de Fourier discreta,

$$\eta_k = \left(\frac{1}{N} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_{n=1}^N e^{ikn} \mathbf{C}_n, \quad (5.37)$$

com

$$k = 0, \pm \frac{2\pi}{N}, \pm \frac{4\pi}{N}, \dots, \pm \pi, \quad (5.38)$$

em que a escolha de índices refere-se à escolha de condições periódicas de contorno anticíclicas.

Desta transformação podemos obter os resultados

$$\begin{aligned} \sum_n C_n^\dagger C_{n+1}^\dagger &= \sum_k e^{-ik} \boldsymbol{\eta}_k^\dagger \boldsymbol{\eta}_{-k}^\dagger, \\ \sum_n C_n^\dagger C_n &= \sum_k \boldsymbol{\eta}_k^\dagger \boldsymbol{\eta}_k. \end{aligned} \quad (5.39)$$

Portanto,

$$\begin{aligned} \mathbf{H} = & - 2 \sum_{k>0} (1 + \lambda \cos k) \left(\boldsymbol{\eta}_k^\dagger \boldsymbol{\eta}_k + \boldsymbol{\eta}_{-k}^\dagger \boldsymbol{\eta}_{-k} \right) \\ & + 2i\lambda \sum_{k>0} \sin k \left(\boldsymbol{\eta}_k^\dagger \boldsymbol{\eta}_{-k}^\dagger + \boldsymbol{\eta}_k \boldsymbol{\eta}_{-k} \right). \end{aligned} \quad (5.40)$$

Queremos agora colocar essa hamiltoniana na forma

$$\mathbf{H} = \sum_k \Lambda_k \boldsymbol{\xi}_k^\dagger \boldsymbol{\xi}_k + \text{cte.} \quad (5.41)$$

Para tanto usamos uma transformação de Bogoliubov-Valatin, que já foi usada no final da seção 3.2. Devido a maior simplicidade deste problema usaremos uma forma mais geral, dada por

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\xi}_k &= u_k \boldsymbol{\eta}_k + iv_k \boldsymbol{\eta}_{-k}^\dagger, & \boldsymbol{\xi}_{-k} &= u_k \boldsymbol{\eta}_{-k} - iv_k \boldsymbol{\eta}_k^\dagger, \\ \boldsymbol{\xi}_k^\dagger &= u_k \boldsymbol{\eta}_k^\dagger - iv_k \boldsymbol{\eta}_{-k}, & \boldsymbol{\xi}_{-k}^\dagger &= u_k \boldsymbol{\eta}_{-k}^\dagger + iv_k \boldsymbol{\eta}_k. \end{aligned} \quad (5.42)$$

Exigimos dois critérios para as funções u_k e v_k : (1) os operadores $\boldsymbol{\xi}_k^\dagger$ e $\boldsymbol{\xi}_k$ devem ser operadores de férmions; (2) a hamiltoniana deve ficar em uma forma diagonal nos operadores $\boldsymbol{\xi}_k^\dagger$ e $\boldsymbol{\xi}_k$. O primeiro requisito,

$$\begin{aligned} \left\{ \boldsymbol{\xi}_l^\dagger, \boldsymbol{\xi}_k \right\} &= \delta_{lk}, \\ \left\{ \boldsymbol{\xi}_l, \boldsymbol{\xi}_k \right\} &= \left\{ \boldsymbol{\xi}_l^\dagger, \boldsymbol{\xi}_k^\dagger \right\} = 0, \end{aligned} \quad (5.43)$$

nos leva a

$$u_k^2 + v_k^2 = 1. \quad (5.44)$$

A hamiltoniana em termos destes operadores é dada por

$$\begin{aligned}
\mathbf{H} &= \sum_{k>0} \left[-2(1 + \lambda \cos k) (u_k^2 + v_k^2) + 4\lambda \sin k u_k v_k \right] \times \\
&\times \left(\xi_k^\dagger \xi_k + \xi_{-k}^\dagger \xi_{-k} \right) + \\
&+ \sum_{k>0} \left[4i(1 + \lambda \cos k) u_k v_k + 2i\lambda \sin k (u_k^2 + v_k^2) \right] \times \\
&\times \left(\xi_k^\dagger \xi_{-k}^\dagger + \xi_k \xi_{-k} \right). \tag{5.45}
\end{aligned}$$

Exigindo que esta hamiltoniana seja diagonal, na forma de (5.41), encontramos

$$4(1 + \lambda \cos k) u_k v_k + 2\lambda \sin k (u_k^2 + v_k^2) = 0. \tag{5.46}$$

Considerando a equação (5.44) podemos propor

$$u_k = \cos \theta_k, \quad v_k = \sin \theta_k. \tag{5.47}$$

A equação (5.46) fica

$$4(1 + \lambda \cos k) \sin 2\theta_k + 2\lambda \sin k \cos 2\theta_k = 0. \tag{5.48}$$

Então

$$\tan 2\theta_k = -\frac{\lambda \sin k}{(1 + \lambda \cos k)}. \tag{5.49}$$

Finalmente podemos escrever

$$\mathbf{H} = 2 \sum_k \sqrt{1 + 2\lambda \cos k + \lambda^2} \xi_k^\dagger \xi_k + \text{cte}. \tag{5.50}$$

Salientamos que este modelo tem o mesmo comportamento crítico que o modelo de Ising bidimensional quando, a temperatura nula, consideramos a transição quântica induzida pela variação do campo transversal, que funciona como uma temperatura efetiva [35, 36]. Esse é um dos exemplos mais significativos de uma “transição quântica” sob o efeito de flutuações de natureza quântica.

5.2 Modelo de dímeros.

Tentaremos agora fazer a aproximação de tempo contínuo para o modelo de dímeros. Na primeira seção mostramos a matriz de transferência para um modelo unidimensional, logo após trataremos a matriz de transferência para o modelo de dímeros nas redes quadrada, 4-8 e hexagonal.

5.2.1 Modelo de dímeros unidimensional.

Podemos definir um modelo de dímeros e monômeros unidimensional considerando uma faixa formada por duas cadeias de sítios como ilustra a figura 5.6 adotando condições periódicas de contorno da direção horizontal, essa faixa é semelhante a que foi usada para o estudo do modelo de vértices unidimensional em [37]. Na figura 5.7 mostramos as quatro possíveis configurações de uma célula unitária na representação de spins (a mesma utilizada na rede quadrada) em que uma variável de spin para cima significa a presença de um dímero.

Figura 5.6: Rede unidimensional. Figura 5.7: Configurações possíveis.

Representamos cada estado pelo vetor $|\uparrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2 \equiv |\uparrow\uparrow\rangle$, onde 1 e 2 designam o primeiro e o segundo sítios na horizontal. Como cada vetor tem quatro possíveis configurações teremos uma matriz de transferência 4×4 com

seus elementos definidos por ${}_i\langle \cdot \cdot | \mathbf{T} | \cdot \cdot \rangle_{i+1}$, assim

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} \langle \uparrow\uparrow | \mathbf{T} | \uparrow\uparrow \rangle & \langle \downarrow\uparrow | \mathbf{T} | \uparrow\uparrow \rangle & \langle \uparrow\downarrow | \mathbf{T} | \uparrow\uparrow \rangle & \langle \downarrow\downarrow | \mathbf{T} | \uparrow\uparrow \rangle \\ \langle \uparrow\uparrow | \mathbf{T} | \downarrow\uparrow \rangle & \langle \downarrow\uparrow | \mathbf{T} | \downarrow\uparrow \rangle & \langle \uparrow\downarrow | \mathbf{T} | \downarrow\uparrow \rangle & \langle \downarrow\downarrow | \mathbf{T} | \downarrow\uparrow \rangle \\ \langle \uparrow\uparrow | \mathbf{T} | \uparrow\downarrow \rangle & \langle \downarrow\uparrow | \mathbf{T} | \uparrow\downarrow \rangle & \langle \uparrow\downarrow | \mathbf{T} | \uparrow\downarrow \rangle & \langle \downarrow\downarrow | \mathbf{T} | \uparrow\downarrow \rangle \\ \langle \uparrow\uparrow | \mathbf{T} | \downarrow\downarrow \rangle & \langle \downarrow\uparrow | \mathbf{T} | \downarrow\downarrow \rangle & \langle \uparrow\downarrow | \mathbf{T} | \downarrow\downarrow \rangle & \langle \downarrow\downarrow | \mathbf{T} | \downarrow\downarrow \rangle \end{bmatrix}. \quad (5.51)$$

O elemento da matriz de transferência entre duas células vizinhas com configurações $|\cdot \cdot\rangle_i$ e $|\cdot \cdot\rangle_{i+1}$ das ligações verticais tem a forma

$$T(i, i+1) = \sum_{\{\mathbf{C}\}} \alpha^h \beta^m, \quad (5.52)$$

onde somamos sobre todas as configurações possíveis de monômeros e dímeros na horizontal entre as células vizinhas.

Todos os elementos que representam uma superposição de dímeros em um mesmo sítio como o elemento (1,1) da matriz $\mathbf{T}$ tem valor nulo pois não representam uma configuração possível. Isto também ocorre com os elementos (1,2), (1,3), (2,1), (2,2), (3,1) e (3,3). Os elementos da diagonal oposta representam os quatro estados que tem dois dímeros verticais não sobrepostos, a atividade destes estados tem valor 1.

Há quatro estados com um monômero e um dímero (2,4), (3,4), (4,2) e (4,3), estes tem uma atividade associada igual a β . E o último elemento (4,4) é um estado de zero dímeros verticais e portanto temos três possibilidades para preencher os vértices, uma com dois monômeros e outras duas possibilidades com um dímero na horizontal. Este estado tem então uma atividade associada igual a $\beta^2 + 2\alpha$.

Encontramos assim a matriz de transferência para o modelo de dímeros e monômeros em uma dimensão

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & \beta \\ 0 & 1 & 0 & \beta \\ 1 & \beta & \beta & (\beta^2 + 2\alpha) \end{bmatrix}. \quad (5.53)$$

Podemos ainda escrever a matriz de transferência em termos de operadores de Pauli como um caso especial da equação (2.11) da rede quadrada. O operador $\mathbf{V}_1$ necessita inverter apenas duas variáveis de spin,

$$\mathbf{V}_1 = \sigma_1^x \sigma_2^x. \quad (5.54)$$

O operador que cria monômeros $\frac{1}{p!} \left(\sum_{n=1}^N \sigma_n^- \right)^p$ neste caso deve criar zero, um e dois monômeros e fica dado por

$$\mathbf{V}_2 = 1 + \beta(\sigma_1^- + \sigma_2^-) + \beta^2 \sigma_1^- \sigma_2^-. \quad (5.55)$$

De forma análoga para o operador que cria dímeros, cria zero ou um dímero, temos

$$\mathbf{V}_3 = 1 + 2\alpha\sigma_1^-\sigma_2^-. \quad (5.56)$$

A matriz de transferência é escrita assim como antes $\mathbf{T} = \mathbf{V}_3\mathbf{V}_2\mathbf{V}_1$. A aplicação desse operador nos estados $|\cdot\cdot\rangle_i$ nos dá a mesma matriz que acabamos obter por meio de considerações gerais.

Vemos facilmente que a matriz (5.53) não pode ser colocada na forma $\mathbf{T} \approx 1 - \tau\mathbf{H}$. Assim não é possível formular uma versão de tempo contínuo para esse modelo dímeros e monômeros unidimensional diferente do que ocorreu com o modelo de Ising unidimensional. Isto ocorre claramente devido a forma do operador associado ao campo magnético externo no modelo de Ising ser diferente da forma do operador que cria monômeros, embora esses operadores sejam considerados análogos, pois, ambos têm uma forma linear nos operadores de Pauli. Isto impede que haja uma solução exata tanto para o modelo de Ising bidimensional com um campo magnético externo como para o modelo de dímeros e monômeros bidimensional, sob o ponto de vista da solução de férmions livres [17, 18]. Nas próximas seções faremos uma versão de tempo contínuo para os modelos de dímeros nas redes quadradas, 4-8 e hexagonal.

5.2.2 Modelo de dímeros na rede quadrada.

A matriz de transferência para a rede quadrada é dada pela equação (2.15),

$$\mathbf{V}^2 = \mathbf{V}_3\bar{\mathbf{V}}_3 = \exp\left[\alpha\sum_{j=1}^N\sigma_j^-\sigma_{j+1}^-\right]\exp\left[\alpha\sum_{j=1}^N\sigma_j^+\sigma_{j+1}^+\right], \quad (5.57)$$

onde $\alpha = x/y$, sendo x a atividade do dímero na horizontal e y a atividade do dímero na vertical. A função de partição é escrita como

$$Z = y^{\frac{1}{2}MN} \text{Tr} [\mathbf{V}^2]^{\frac{1}{2}} = y^{\frac{1}{2}MN} \sum_j [\lambda_j(N)]^{\frac{1}{2}}, \quad (5.58)$$

onde $\lambda_j(N)$ são os autovalores de $\mathbf{V}^2$. A matriz de transferência contempla todas as configurações possíveis para duas linhas horizontais do sistema, ligadas verticalmente; esta matriz conecta então as linhas horizontais do sistema. Queremos tomar o limite no qual os sítios vizinhos da rede na direção vertical sejam tratados por uma transformação infinitesimal da forma

$$\mathbf{V} = e^{-\tau\mathbf{H}} \approx 1 - \tau\mathbf{H} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{V}^2 \approx 1 - 2\tau\mathbf{H}. \quad (5.59)$$

No modelo de Ising isto foi obtido quando fizemos $K_t \rightarrow \infty$ enquanto $K_z \rightarrow \lambda e^{-2K_t}$, ou seja, a razão entre os pesos de Boltzmann nas direções z e t vai a zero, $[(e^{K_z}/e^{K_t}) \rightarrow 0]$. Da definição daquele modelo, $K_t \rightarrow \infty$ equivale a dizer que a energia devido ao parâmetro de acoplamento da rede na direção t vai a $-\infty$, resultando num peso de Boltzmann infinito. Portanto, no modelo de dímeros na rede quadrada basta fazer $\alpha \rightarrow 0$, o que equivale como esperado a fazer a energia do dímero na vertical $\rightarrow -\infty$, mantendo de alguma forma a atividade na outra direção finita. Assim, estamos tomando a direção vertical no limite contínuo. Fazendo isto na equação (5.57) obtemos,

$$\mathbf{V}^2 = 1 + \alpha \sum_{j=1}^N (\sigma_j^- \sigma_{j+1}^- + \sigma_j^+ \sigma_{j+1}^+). \quad (5.60)$$

Comparando com a equação (5.59) identificamos

$$\mathbf{H} = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N (\sigma_j^- \sigma_{j+1}^- + \sigma_j^+ \sigma_{j+1}^+). \quad (5.61)$$

Esta forma simples obtida já reflete o fato de este modelo não apresentar uma transição de fase. A diagonalização pode ser feita pelo mesmo método que foi usado para diagonalizar a hamiltoniana obtida para o modelo de Ising 2D (seção 5.1.4). Aqui apenas mostraremos alguns resultados resumidamente. Após a transformação de Jordan-Wigner (3.10) obtemos

$$\mathbf{H} = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N (\mathbf{C}_j^\dagger \mathbf{C}_{j+1}^\dagger - \mathbf{C}_j \mathbf{C}_{j+1}). \quad (5.62)$$

Depois da transformada de Fourier, temos

$$\mathbf{H} = - \sum_{(q>0)} \sin q \left(\boldsymbol{\eta}_{-q}^\dagger \boldsymbol{\eta}_q^\dagger - \boldsymbol{\eta}_q \boldsymbol{\eta}_{-q} \right). \quad (5.63)$$

Fazendo finalmente a transformação de Bogoliubov-Valatin obtemos

$$\mathbf{H} = \sum_{(q>0)} \sin q \left(\boldsymbol{\xi}_q^\dagger \boldsymbol{\xi}_q + \boldsymbol{\xi}_{-q}^\dagger \boldsymbol{\xi}_{-q} - 1 \right). \quad (5.64)$$

5.2.3 Modelo de dímeros na rede 4-8.

O modelo de dímeros na rede 4-8 tem uma energia livre, quando consideramos ϵ_1 , ϵ_2 e ϵ_3 diferentes [7], dada por

$$f(x_1, x_2, x_3) = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta d\phi \ln \left(x_1^4 + x_2^4 + x_3^4 + 2x_1^2 x_2^2 + \right. \\ \left. - 2x_2^2 x_3^2 \cos \phi - 2x_1^2 x_3^2 \cos \theta \right), \quad (5.65)$$

onde x_1, x_2, x_3 são as atividades das ligações verticais, horizontais e diagonais respectivamente, todas do tipo $e^{-\beta\epsilon_i}$, onde ϵ_i é a energia do dímero na i -ésima ligação (figura 5.8).

Figura 5.8: Rede 4-8

No espaço dos parâmetros (x_1, x_2, x_3) a curva de criticalidade é dada por:

$$x_1^2 + x_2^2 = x_3^2, \quad (5.66)$$

ou seja,

$$\exp \left[-\frac{2\epsilon_1}{k_B T_c} \right] + \exp \left[-\frac{2\epsilon_2}{k_B T_c} \right] = \exp \left[-\frac{2\epsilon_3}{k_B T_c} \right]. \quad (5.67)$$

Dessa última equação podemos perceber que há uma condição para o modelo ter uma transição de fase, ou seja, uma condição tal que a equação acima possa ser satisfeita para um T_c positivo. Isso poderá ocorrer somente se

$$\epsilon_3 < \min(\epsilon_1, \epsilon_2). \quad (5.68)$$

A matriz de transferência para esse modelo pode ser obtida da mesma forma como na seção 3.1 e é dada por

$$\begin{aligned} \mathbf{V} = & \exp \left[z_1 \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} \sigma_{2j-1}^- \sigma_{2j}^- \right] \exp \left[z_1 \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} \sigma_{2j}^+ \sigma_{2j+1}^+ \right] z_2^{\mathbf{N}_+} \times \\ & \times \exp \left[z_1 \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} \sigma_{2j}^- \sigma_{2j+1}^- \right] \exp \left[z_1 \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} \sigma_{2j-1}^+ \sigma_{2j}^+ \right] z_2^{\mathbf{N}_+}, \end{aligned} \quad (5.69)$$

onde

$$\begin{aligned} \mathbf{N}_+ &= \sum_{j=1}^N \sigma_j^+ \sigma_j^-, \\ z_1 &= x_1/x_3, \\ z_2 &= x_2/x_3. \end{aligned} \quad (5.70)$$

Esta matriz conecta as linhas horizontais da rede. Como já feito anteriormente queremos colocar esta matriz na forma $\mathbf{V} = 1 - \tau \mathbf{H}$. Para tanto o primeiro limite considerado para os parâmetros (x_1, x_2, x_3) é claramente

$$z_1 \rightarrow 0. \quad (5.71)$$

Este limite equivale a $\epsilon_3 \rightarrow -\infty$, justamente como feito no caso do modelo de Ising 2D, implicando diretamente $(x_1/x_3) \rightarrow 0$ para qualquer x_1 finito. Porém, não temos ainda (5.69) da forma desejada. Necessitamos fazer ainda $z_2 = 1$ para que $z_2^{\mathbf{N}_+} = 1$, que é verdade se considerarmos o mesmo limite para os parâmetros ϵ_2 e ϵ_3 , pois ambos estão na direção em que se quer tomar o limite do contínuo,

$$\epsilon_3, \epsilon_2 \rightarrow -\infty \quad \Rightarrow \quad z_2 = \left(\frac{x_2}{x_3} \right) \rightarrow 1. \quad (5.72)$$

Feito isso, se desprezarmos os termos de ordem superior a z_1^2 , encontramos finalmente que

$$\begin{aligned} \mathbf{V} = & 1 + z_1 \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} \sigma_{2j-1}^- \sigma_{2j}^- + z_1 \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} \sigma_{2j}^+ \sigma_{2j+1}^+ + \\ & + z_1 \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} \sigma_{2j}^- \sigma_{2j+1}^- + z_1 \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}} \sigma_{2j-1}^+ \sigma_{2j}^+. \end{aligned} \quad (5.73)$$

Se rearranjarmos os termos desta soma encontramos uma forma muito simples, dada por

$$\mathbf{V} = 1 + z_1 \sum_{j=1}^N \sigma_j^- \sigma_{j+1}^- + z_1 \sum_{j=1}^N \sigma_j^+ \sigma_{j+1}^+. \quad (5.74)$$

Então temos

$$\mathbf{H} = - \sum_{j=1}^N (\sigma_j^- \sigma_{j+1}^- + \sigma_j^+ \sigma_{j+1}^+), \quad (5.75)$$

que tem uma forma semelhante (a menos de um fator 1/2) ao resultado obtido para o modelo de dímeros na rede quadrada na aproximação de tempo contínuo, conforme pode ser visto na equação (5.61). Esperamos assim que o comportamento crítico tenha sido alterado, ou seja, o modelo agora não deve apresentar uma transição de fase. Isto gera um problema já que nossa hipótese era de que o comportamento crítico não seria alterado.

Observemos com atenção o limite tomado para deixar a matriz de transferência na forma infinitesimal, equação (5.72),

$$\epsilon_3, \epsilon_2 \rightarrow -\infty.$$

Se estamos considerando ϵ_1 como sendo finito, então fazendo $\epsilon_2 = \epsilon_3$ na equação (5.67), obtemos

$$\exp \left[-\frac{2\epsilon_1}{k_B T_c} \right] = 0. \quad (5.76)$$

Esta equação não tem uma solução para T_c positivo. Portanto, o reescalonamento dos parâmetros conduziu-nos de fato para fora da região crítica do modelo.

5.2.4 Modelo de dímeros na rede hexagonal.

Vamos mostrar agora sucintamente os resultados que podem ser encontrados para a aproximação de tempo contínuo no modelo de dímeros na rede hexagonal. Não precisamos de resultados mais gerais do que os obtidos neste texto. Partimos da matriz de transferência obtida na seção 4,

$$\mathbf{V} = \mathbf{V}'_2 \bar{\mathbf{V}}_2 = \exp \left[x \sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} \sigma_{2n}^- \sigma_{2n+1}^- \right] \exp \left[x \sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} \sigma_{2n-1}^+ \sigma_{2n}^+ \right]. \quad (5.77)$$

Considerando a curva crítica para esse modelo [5] que é dada por

$$\exp \left[-\frac{\epsilon}{k_B T_c} \right] = \frac{1}{2}. \quad (5.78)$$

O limite que devemos considerar para obter a forma infinitesimal desejada é $x \rightarrow 0$. Neste limite a matriz de transferência é aproximadamente

$$\mathbf{V} \approx 1 + x \sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} \sigma_{2n}^- \sigma_{2n+1}^- + x \sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} \sigma_{2n-1}^+ \sigma_{2n}^+. \quad (5.79)$$

Que tem uma forma muito semelhante ao resultado encontrado para a rede 4-8 e quadrada. Identificamos assim

$$\begin{aligned} \mathbf{H} &= - \sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} (\sigma_{2n}^- \sigma_{2n+1}^- + \sigma_{2n-1}^+ \sigma_{2n}^+) \\ &= - \sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} (\sigma_{n,2}^- \sigma_{n+1,1}^- + \sigma_{n,1}^+ \sigma_{n,2}^+), \end{aligned} \quad (5.80)$$

onde novamente usamos uma base unidimensional considerando dois sítios diferentes.

Essa hamiltoniana é diagonalizada do mesmo modo como feito para a versão de tempo contínuo da rede quadrada, a única diferença é a base unidimensional adotada. Após aplicarmos a transformação de Jordan-Wigner (3.10) obtemos,

$$\mathbf{H} = \sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} (\mathbf{C}_{n,2} \mathbf{C}_{n+1,1} - \mathbf{C}_{n,1}^\dagger \mathbf{C}_{n,2}^\dagger). \quad (5.81)$$

Utilizando a transformada de Fourier definida em (3.22) e assumindo condições de contorno periódicas anticíclicas encontramos,

$$\mathbf{H} = -i \sum_q \left(e^{-iq} \boldsymbol{\eta}_{q,2} \boldsymbol{\eta}_{-q,1} + \boldsymbol{\eta}_{q,1}^\dagger \boldsymbol{\eta}_{-q,2}^\dagger \right). \quad (5.82)$$

Por fim utilizando a transformação de Bogoliubov-Valatin na forma definida em (3.54), onde devemos tratar a equação anterior como feito na seção 3.3 em relação aos acoplamentos de partículas obtemos finalmente

$$\mathbf{H} = 2 \sum_{(q>0)} \cos q \left(\boldsymbol{\xi}_{q,1}^\dagger \boldsymbol{\xi}_{q,1} + \boldsymbol{\xi}_{-q,2}^\dagger \boldsymbol{\xi}_{-q,2} - 1 \right). \quad (5.83)$$

Este resultado simples reflete o fato de que na aproximação de tempo contínuo para o modelo de dímeros não haver uma transição de fase. Isto pode ser visto mais claramente quando analisamos a curva crítica no limite de tempo contínuo que é

$$x \rightarrow 0 \quad \Rightarrow \quad z \rightarrow \infty. \quad (5.84)$$

O que claramente não está de acordo com a equação (5.78).

Capítulo 6

Apêndice.

6.1 Espectro do modelo de Ising bidimensional.

Neste apêndice mostraremos resumidamente o espectro da matriz de transferência do modelo de Ising bidimensional. Esses resultados foram retirados do trabalho de Schultz, Mattis e Lieb [17], onde os autores resolvem o modelo de Ising numa rede retangular na formulação da matriz de transferência por meio da técnica de férmions livres. Para um estudo mais detalhado do espectro desse modelo recomendamos a leitura da seção III desse artigo.

A matriz de transferência para o modelo de Ising bidimensional numa rede retangular, com constantes de interação entre os spins primeiros vizinhos, J_1 e J_2 , nas direções verticais e horizontais respectivamente, escrita em sua forma diagonal, é dada por

$$\mathbf{V}^\pm = (2 \sinh 2K_1)^{\frac{N}{2}} \exp \left[- \sum_q \epsilon_q \left(\xi_q^\dagger \xi_q - \frac{1}{2} \right) \right], \quad (6.1)$$

onde os operadores de criação e aniquilação de férmions $\xi_q^\dagger$ e ξ_q obedecem as regras de anticomutação da equação (3.55). Os índices q , de acordo com as mesmas considerações sobre as condições de contorno feitas no capítulo 3, são dados por

$$q \equiv l = \pm \frac{\pi}{N}, \pm \frac{3\pi}{N}, \pm \frac{5\pi}{N}, \dots, \pm \frac{(N-1)\pi}{N}, \quad (6.2)$$

para condições de contorno periódicas anticíclicas, (N par), e dados por

$$q \equiv k = 0, \pm \frac{2\pi}{N}, \pm \frac{4\pi}{N}, \pm \frac{6\pi}{N}, \dots, \pm \frac{(N-2)\pi}{N}, \pi, \quad (6.3)$$

para condições de contorno periódicas cíclicas, (N ímpar).

O autovalor ϵ_q é dado por pela raiz positiva da equação

$$\cosh \epsilon_q = \cosh 2K_2 \cosh 2K_1^* - \sinh 2K_2 \sinh 2K_1^* \cos q, \quad (6.4)$$

para $q \neq 0, \pi$. Para os outros casos temos

$$\begin{aligned} \epsilon_0 &= 2(K_1^* - K_2), \\ \epsilon_\pi &= 2(K_1^* + K_2), \end{aligned} \quad (6.5)$$

onde estamos usando por simplicidade a definição

$$\tanh K_1^* \equiv e^{-2K_1}. \quad (6.6)$$

Devemos lembrar que os autoestados permitidos de $\mathbf{V}^+$ (denotados por Ψ^+) devem ter um número par de partículas e os autoestados permitidos de $\mathbf{V}^-$ (denotados por Ψ^-) devem ter um número ímpar de partículas. Neste modelo não há uma restrição quanto a paridade do número de partículas, ao contrário do que ocorre no modelo de dímeros na rede 4-8.

Podemos observar, para $T \neq T_c$, que

$$\begin{aligned} \epsilon_q &\geq \epsilon_{\min} > 0, & q \neq 0, \\ \epsilon_0 &= \pm \lim_{q \rightarrow 0} \epsilon_q \geq 0, & T \gtrless T_c. \end{aligned} \quad (6.7)$$

A temperatura crítica T_c é definida por $K_1^* = K_2$ ou, de forma equivalente, por

$$\sinh(2J_1/k_B T_c) \sinh(2J_2/k_B T_c) = 1. \quad (6.8)$$

O maior autovalor de $\mathbf{V}^+$ é o obtido para o estado de zero partículas, que é o autoestado Ψ_0^+ ,

$$\Lambda_0^+ = (2 \sinh 2K_1)^{\frac{N}{2}} \exp \left[\frac{1}{2} \sum_l \epsilon_l \right]. \quad (6.9)$$

O maior autovalor de $\mathbf{V}^-$ é obtido tanto para o estado de zero partículas (Ψ_0^-), quanto para o estado de uma partícula com $k = 0$ ($\Psi_{k=0}^- = \xi_{k=0}^\dagger \Psi_0^-$), dependendo se $\epsilon_{k=0}$ é positivo ou negativo, o que ocorre se $T > T_c$ ou $T < T_c$, respectivamente. Nesses dois casos o maior autovalor pode ser escrito como

$$\Lambda_0^- (\text{ou } \Lambda_{k=0}^-) = (2 \sinh 2K_1)^{\frac{N}{2}} \exp \left[\frac{1}{2} \sum_k |\epsilon_k| \right]. \quad (6.10)$$

Acima da temperatura crítica o maior autovalor da matriz de transferência é dado por Λ_0^+ , pois o autovalor Λ_0^- é um estado com número par de partículas e deve ser descartado. Porém, abaixo da temperatura crítica, o autovalor $\Lambda_{k=0}^-$ é um estado permitido e contribui com um valor igual ao do autovalor Λ_0^+ . Assim, abaixo da temperatura crítica, a matriz de transferência tem um maior autovalor duplamente degenerado. Isto está ligado ao fato de que abaixo da temperatura crítica o modelo de Ising tem duas fases ordenadas coexistentes. Essa é uma diferença interessante em relação ao modelo de dímeros na rede 4-8.

Capítulo 7

Considerações Finais.

Por meio da formulação da matriz de transferência e da solução de férmions livres fomos capazes de resolver exatamente dois importantes modelos de dímeros, na rede 4-8 e na rede hexagonal. A formulação escolhida proporcionou uma discussão a respeito do espectro da matriz de transferência do modelo na rede 4-8, possibilitando comparações com o espectro do modelo de Ising bidimensional. Observamos que o modelo de dímeros na rede 4-8, tanto abaixo como acima da temperatura crítica, é análogo ao modelo de Ising bidimensional acima da temperatura crítica, pois, os dois modelos têm uma única fase existente nas faixas de temperatura consideradas, que está associada a um autovalor dominante não degenerado da matriz de transferência.

Com a matriz de transferência para os modelos de dímeros nas redes quadrada, 4-8 e hexagonal pudemos também estudar uma possível aproximação de tempo contínuo. Observamos que o comportamento crítico dos modelos é alterado, pois o limite tomado para escrever a matriz de transferência como uma transformação infinitesimal quântica não estava de acordo com as condições para uma transição de fases descritas pelas curvas críticas. Isto ocorreu nos dois modelos de dímeros com transição de fases que foram considerados.

Referências Bibliográficas

- [1] R.H. Fowler, G.C. Rushbrooke, *Trans. Faraday Soc.* **21**, 1272 (1937)
- [2] P.W. Kasteleyn, *Physica* **27**, 1209 (1961)
- [3] H.N.V. Temperley, M.E. Fisher *Phil. Mag.* **6**, 1061 (1961)
- [4] P.W. Kasteleyn, *J. Math. Phys.* **4**, 287 (1963)
- [5] F.Y. Wu, *Phys. Rev. Lett.* **18**, 605 (1967) e *Phys. Rev. Lett.* **168**, 539 (1968)
- [6] M.E. Fisher, *J. Math. Phys.* **7**, 1776 (1966)
- [7] S.R. Salinas, J.F. Nagle, *Phys. Rev. B* **9**, 11 4920 (1974)
- [8] S.M. Bhattacharjee, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1161 (1984)
- [9] J.F. Nagle, G.R. Allen, *J. Chem. Phys.* **55**, 2708 (1971)
- [10] J.F. Nagle, C.S.O. Yokoi, *Phys. Rev. B* **35**, 5307 (1987)
- [11] J.F. Nagle, C.S.O. Yokoi, *Physica A* **163**, 140 (1990)
- [12] C.S.O. Yokoi, J.F. Nagle, *J. Phys. A* **25**, 543 (1992)
- [13] C.S.O. Yokoi, J.F. Nagle, S.M. Bhattacharjee cap. 2 de *Phase Transition and Critical Phenomena*, editado por C. Domb, J.L. Lebowitz, Academic Press, vol. 13, (1990)
- [14] F.Y. Wu, *Int. J. Mod. Phys. B* **20**, 5357 (2006)
- [15] L. Onsager, *Phys. Rev.* **65**, 117 (1944)
- [16] H.N.V. Temperley cap. 6 de *Phase Transition and Critical Phenomena*, editado por C. Domb, M.S. Green, Academic Press, vol. 1, (1972)
- [17] T.D. Schultz, D.C. Mattis, E.H. Lieb, *Rev. Mod. Phys.* **36**, 856 (1964)

- [18] E.H. Lieb, *J. Math. Phys.* **8**, 12, 2339 (1967)
- [19] H.A. Kramers, G.H. Wannier, *Phys. Rev.* **60**, 252 (1941)
- [20] E.H. Lieb, T.D. Schultz, D.C. Mattis, *Annals of Physics* **16**, 407 (1961)
- [21] P. Jordan, E. Wigner, *Z. Physik* **47**, 631 (1928)
- [22] E. Fradkin, L. Susskind, *Physical Review D* **17**, 2637 (1978)
- [23] J. Kogut, *Rev. Mod. Phys.* **51**, 659 (1979)
- [24] N. Elkies, J Propp, *Duke Math. J.* **85**, 117 (1996)
- [25] R. Moessner, S.L. Sondhi, *Phys. Rev. Lett.*, **86**, 1881 (2001)
- [26] R. Moessner, S.L. Sondhi, *Phys. Rev. B*, **68**, 054405 (2003)
- [27] J.O. Fjaerestad, arXiv:0811.3789v1, (24 Nov 2008)
- [28] P. Fendley, R. Moessner, S.L. Sondhi, *Phys. Rev. B*, **66**, 214513 (2002)
- [29] A.P. Ramirez, et al, *Nature*, **399**, 333 (1999)
- [30] D.S. Rokhsar, S.A. Kivelson, *Phys. Rev. Lett.*, **61**, 2376 (1988)
- [31] P.W. Anderson, *Science*, **235**, 1196 (1987)
- [32] A.B. Harris, M. Cohen, *J. Chem. Phys.*, **125**, 184107 (2006)
- [33] F.A. da Costa, *Dissertação de Mestrado*, Instituto de Física - USP, (1986)
- [34] I.S. Gradshteyn, I.M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series and Products*, p.531 e p.861, 7 ed, Elsevier (2007)
- [35] P. Pfeuty, *Ann. Phys.* **57**, 79 (1970)
- [36] R.J. Elliott, P. Pfeuty, C. Wood, *Phys. Rev. Lett.* **25**, 443 (1970)
- [37] J.A. Plascak, S.R. Salinas, *Revista Brasileira de Física*, **10**, 173 (1980)