UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA E CIÊNCIA DOS MATERIAIS

Algumas Aplicações de Invariância
conforme no estudo de fenômenos
críticos.

Nagib Miguel Hazbun

Dissertação apresentada ao Instituto
de Física e Química de São Carlos,
USP para obtenção do título de Mes -
tre em Física Básica.

Orientador: Prof. Dr. Francisco Castilho Alcaraz

São Carlos - São Paulo
1990

SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO - IFQSC
FÍSICA

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE
Nagib Miguel Hazbun APRESENTADA
AO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSI
DADE DE SÃO PAULO, EM 20 DE março DE 19 90.

COMISSÃO JULGADORA:

Dr. Francisco C. Alcaraz Orientador

Dr. Nelson Studart Filho

Dr. Roland Koberle

Agradeço a:

Meu orientador Prof. Dr. Francisco C. Alcaraz, pelo que me ensinou.

Ao Prof. Dr. César R. de Oliveira, pela motivação e pelo que aprendi durante a graduação.

Ao Prof. Dr. Nelson Studart pelas sugestões e correções.

Ao Carlos A. Morés, pela amizade e atenção durante a elaboração deste trabalho.

Ao Paulo e a Cristina pela convívio e apoio desde a graduação.

Aos meus tios Michel e Neide, pelo apoio e amizade.

Aos professores, Rogério, Lidério, Caticha, Zílio e Vanderlei que deram os cursos que fiz no mestrado.

Aos amigos e colegas, Braz, Miled, Gilberto, Zézinho, César, Wilson, Ilde, Fragalli, Chahine, Marcio, Marcia, Neto, Fernando, Reginaldo, Henrique, Liliâne, Flávio, Newtinho, Clisthenis, Santoro, Dotta, Rosalino, Irene, Cecília, Silvio, Zé, Paulinho, Duda, Anselmo, Ítalo e demais que de alguma forma contribuíram para a realização deste trabalho.

Dedico este trabalho a:

Minha mãe Naqibe, um exemplo de luta.

Meu pai Issa Hanna(in memorian), que sempre viverá.

Meus irmãos, João e Regina.

"A ciência pela ciência" é a última cilada
que nos arma a moral - e é precisamente
essa que nos envolve a todos inextrincavel_
mente em sua rede

NIETZSCHE

ÍNDICE

Capítulo 1. INTRODUÇÃO	1
Capítulo 2. INVARIANCIA CONFORME	5
– Grupo Conforme	7
– Função de Correlação	10
– Álgebra de Operadores	16
– Aplicação da Álgebra de Virasoro	20
Capítulo 3. TEORIA DE ESCALA PARA SISTEMAS FINITOS	24
– Distorções do Ponto Crítico	27
– Obtenção dos Pontos Críticos	32
– Matriz de Transferência e a Hamiltoniana Clássica ...	36
Capítulo 4. MODELO 1	40
Capítulo 5. MODELO 2	62
– A Hamiltoniana Quântica	73
Capítulo 6. CONCLUSÃO	89
Referências Bibliográficas	91
Apêndice A	95

RESUMO

Neste trabalho apresentamos alguns resultados da invariância conforme e da teoria de escala para sistemas finitos. Estudamos, usando tais técnicas, dois modelos estatísticos (modelos 1 e 2). Para cada modelo obtivemos a anomalia conforme e as dimensões dos operadores energia e magnetização bem como seus respectivos descendentes.

ABSTRACT

In this work we show some results of conformal invariance theory and finite-size scaling. We study by using these theories two statistical mechanics models (models 1 and 2). To each model we obtained the conformal anomaly, the dimensions of energy and magnetization operators as well their respective descendants.

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

Historicamente, a conexão entre invariância de escala e invariância conforme é conhecida desde o início do século pelos físicos teóricos. Por exemplo, as equações de Maxwell no vácuo são invariantes tanto por transformações conformes como por transformações de escala¹. No entanto, somente em 1970 com Polyakov² surgiu o primeiro trabalho referente à aplicação de invariância conforme a fenômenos críticos. Nesta época as atenções estavam voltadas aos princípios de invariância de escala e K. Wilson³ criou uma técnica (grupo de renormalização) bastante eficaz no cálculo dos expoentes críticos dos modelos de mecânica estatística.

Mais recentemente em um trabalho realizado por Belavin, Polyakov e Zamolodchikov⁴ (BPZ) as idéias de invariância conforme revelaram-se de grande valia no estudo de fenômenos críticos. Particularmente em duas dimensões o grupo conforme é isomórfico ao grupo de funções analíticas tendo portanto dimensão infinita. A álgebra correspondente a este grupo, chamada álgebra de Virasoro, já havia sido estudada no contexto de teoria de cordas. Subsequentemente o matemático V. Kac e colaboradores⁵ estudaram a representação desta álgebra. Em seu trabalho BPZ mostraram que cada operador de escala dos sistemas bi-dimensionais no ponto crítico corresponde a uma representação desta álgebra, indexada pelo valor da sua carga central ou anomalia conforme c . Se esta

representação for de uma espécie particularmente simples, correspondendo ao anulamento de uma certa quantidade chamada determinante de Kac, então não somente os expoentes críticos, mas todas as funções de correlação de muitos pontos no ponto crítico podem ser obtidas; nesta linha seguiram os trabalhos de Dotsenko⁶ e Dotsenko e Fateev⁷. Nisso tudo, a suposição feita por BPZ que somente representações degeneradas apareceriam, ainda não estava clara, quando Friedan, Qiu e Shenker⁸ mostraram que se a teoria é unitária e que o valor da anomalia conforme c satisfaz $c < 1$, de fato tais representações são as únicas possíveis.

Independentemente, nesta mesma época, já com maiores facilidades na computação numérica, a teoria de escala para sistemas finitos tornou-se uma ferramenta importante no estudo de transições de fase (Barber⁹). Cardy¹⁰ utilizando-se das idéias de invariância conforme acima descritas mostrou ser possível mapear uma geometria em outra mais simples, podendo desta maneira pode-se extrair propriedades de sistemas infinitos a partir de sistemas finitos. O sucesso dos resultados numéricos obtidos desta forma firmaram de maneira convincente o princípio de invariância conforme nos fenômenos críticos.

Este trabalho contém os desenvolvimentos da teoria conforme no capítulo (2) e da teoria de escala para sistemas finitos no capítulo (3). Mais adiante nos capítulos (4) e (5) são apresentados as aplicações e resultados das técnicas desenvolvidas em dois modelos, e finalmente no capítulo (6) as discussões e

conclusões do trabalho são apresentadas.

CAPÍTULO II

INVARIÂNCIA CONFORME

Consideremos um sistema homogêneo e isotrópico (rede quadrada com espaçamento $\underline{a}$). Uma transformação de escala por dilatação no espaço é definida por:

$$(II-1) \quad a' = ba$$

onde $\underline{b}$ é uma constante adimensional (fator de escala) e $\underline{a'}$ é a nova unidade de comprimento da rede (figura(II-1)). Podemos definir uma transformação conforme¹¹ como uma generalização de uma transformação de dilatação uniforme (transformação de escala). Na transformação conforme o fator de escala $\underline{b}$ em (II-1) depende continuamente da posição no espaço. Tal transformação deve preservar os ângulos (figura (II-2)).

FIGURA (II-1)

FIGURA (II-2)

Uma transformação de escala por dilatação no espaço é ilustrado na figura (II-1). Na figura (II-2) temos uma transformação conforme.

GRUPO CONFORME

Consideraremos o espaço R^d com o elemento de área $ds^2 = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu$. Em uma transformação de coordenadas $x \rightarrow x'$ o tensor métrico $g_{\mu\nu}$ se transforma como:

$$(II-2) \quad g_{\mu\nu} \rightarrow g'_{\mu\nu} = \frac{\partial x^\alpha}{\partial x'^\mu} \frac{\partial x^\beta}{\partial x'^\nu} g_{\alpha\beta}(x).$$

O grupo conforme é definido como o subgrupo das transformações de coordenadas que deixa a métrica localmente invariante,¹² isto é:

$$(II-3) \quad g_{\mu\nu}(x) \rightarrow g'_{\mu\nu}(x') = \Omega(x) \cdot g_{\mu\nu}(x).$$

Esta transformação preserva localmente os ângulos, como podemos verificar:

$$(II-4) \quad ds'^2 = \Omega(x) ds^2$$

$$ds'^2 = g'_{\mu\nu} dx'^\mu dx'^\nu = \Omega(x) \cdot g_{\mu\nu} \cdot dx^\mu dx^\nu,$$

o que nos diz que os ângulos φ e φ' entre dois vetores antes e depois da transformação são iguais, pois:

$$\begin{aligned} \cos(\varphi') &= \frac{v' \cdot w'}{(v'^2 \cdot w'^2)^{1/2}} = \frac{\Omega(x) \cdot \epsilon_{\mu\nu} \cdot v^\mu \cdot w^\nu}{[\Omega(x) \epsilon_{\mu\nu} v^\mu v^\nu \Omega(x) \epsilon_{\mu\nu} w^\mu w^\nu]^{1/2}} \\ &= \frac{\epsilon_{\mu\nu} \cdot v^\mu \cdot w^\nu}{[\epsilon_{\mu\nu} v^\mu v^\nu \epsilon_{\mu\nu} w^\mu w^\nu]^{1/2}} = \frac{v \cdot w}{(v^2 \cdot w^2)^{1/2}} = \cos(\varphi). \end{aligned}$$

Os geradores infinitesimais do grupo conforme podem ser determinados pela transformação infinitesimal:

$$(II-5) \quad x^\mu \rightarrow x^\mu + \epsilon^\mu,$$

onde ϵ^μ é infinitesimal. Em tal transformação teremos:

$$\begin{aligned} ds'^2 &= dx'_\mu dx'^\nu = (dx_\mu + \partial_\nu \epsilon_\mu dx^\nu)(dx^\nu + \partial_\mu \epsilon_\nu dx^\mu) \\ &= dx_\mu dx^\nu + (\partial_\nu \epsilon_\mu + \partial_\mu \epsilon_\nu) dx^\mu dx^\nu + o(\epsilon^2) \\ &= ds^2 + (\partial_\nu \epsilon_\mu + \partial_\mu \epsilon_\nu) dx^\mu dx^\nu + o(\epsilon^2), \end{aligned}$$

onde $\partial_\alpha = \frac{\partial}{\partial x^\alpha}$. Comparando a relação acima com a (II-4) vemos que

$\partial_\nu \epsilon_\mu + \partial_\mu \epsilon_\nu$ deve ser proporcional a $\epsilon_{\mu\nu}$, ou mais precisamente:

$$(II-6) \quad \partial_\nu \epsilon_\mu + \partial_\mu \epsilon_\nu = 2/d \cdot (\partial \cdot \epsilon) \epsilon_{\mu\nu},$$

conhecida como equação de Killing, sendo d a dimensão do tensor $g_{\mu\nu}$. Da equação (II-6) podemos derivar a seguinte fórmula:

$$(II-7) \quad [g_{\mu\nu} \cdot \partial^2 + (d-2) \partial_\mu \partial_\nu] \partial \cdot \epsilon = 0.$$

Para o caso particular em que:

$$(II-8) \quad \epsilon^\mu = b^\mu x^2 - 2 x^\mu b \cdot x.$$

sendo os b^μ constantes, temos uma transformação conforme especial. Tal transformação pode ser expressa como uma inversão adicionada a uma translação, isto é:

$$(II-9) \quad \frac{x'^\mu}{x^2} = \frac{x^\mu}{x^2} + b^\mu,$$

Para $d > 2$ a simetria conforme é gerada por um número finito de geradores. Contudo para $d = 2$, segue-se da equação (II-6) que:

$$(II-10) \quad \partial_\mu \epsilon_\nu + \partial_\nu \epsilon_\mu = (\partial \cdot \epsilon) g_{\mu\nu}.$$

Fazendo-se na expressão acima a soma nos índices μ e ν , onde em duas dimensões podem assumir os valores 1 e 2, teremos:

$$2 (\partial_{11} \epsilon_1 + \partial_{22} \epsilon_2 + \partial_{12} \epsilon_1 + \partial_{21} \epsilon_2) = (g_{11} + g_{22} + g_{12} + g_{21}) \times$$

$$(\partial_1 \epsilon_1 + \partial_2 \epsilon_2).$$

No espaço Euclidiano sabemos que:

$$g_{ij} = \delta_{ij},$$

o que nos leva ao resultado:

$$(II-11) \quad \partial_1 \epsilon_1 = \partial_2 \epsilon_2,$$

$$\partial_1 \epsilon_2 = -\partial_2 \epsilon_1.$$

As equações (II-11) são as condições de Cauchy - Riemann para funções analíticas, isto é a duas dimensões qualquer função analítica define uma transformação conforme e contém um número infinito de geradores.

FUNÇÃO DE CORRELAÇÃO

Devido à invariância conforme do sistema crítico infinito podemos relacionar muitas propriedades acessíveis da matriz de transferência de um sistema crítico em uma tira de largura finita L com quantidades termodinâmicas (plano infinito) universais.¹³

Com a transformação de escala definida na equação (II-1) (dilatação), os operadores da teoria se transformam como:

$$(II-12) \quad \phi(r) \rightarrow b^x \phi(br),$$

onde r é a coordenada espacial, e x é a dimensão anômala do operador ϕ . Tal dimensão está relacionada com os expoentes críticos associados ao modelo estatístico em questão.

Sob uma transformação conforme $w = f(z)$, $z = re^{i\theta}$, Belavin, Polyakov and Zamolodchikov⁴ mostraram que existem campos (campos primários) que se transformam não da maneira mostrada na relação (II-12), mas sim da forma:

$$(II-13) \quad \phi(z, \bar{z}) = |f'(z)|^h |\bar{f}'(\bar{z})|^{\bar{h}} \phi(w, \bar{w}), \quad f'(z) = df/dz \\ \bar{f}'(\bar{z}) = d\bar{f}/d\bar{z},$$

onde a dimensão anômala x e o spin associado ao campo primário são dados por $h + \bar{h}$ e $h - \bar{h}$, respectivamente.

A função de dois pontos (função de correlação) para um campo primário é obtida a partir da relação (II-13), impondo-se nesta relação invariância por translação, rotação, transformações de escala e transformações conformes especiais. Assim a função de correlação (massa zero) se comporta como:

$$(II-14) \quad \langle \phi(z, \bar{z}) \phi(0, 0) \rangle \propto |z|^{-2h} |\bar{z}|^{-2\bar{h}}.$$

Para obtermos a função de correlação numa tira de largura L , com condição de contorno periódica ao longo da dimensão finita, escolhemos a transformação:

$$(II-15) \quad w = f(z) = (L/2\pi)\ln(z),$$

esta função mapeia todo o plano z na superfície de um cilindro como mostra a figura (II-3)¹⁰:

FIGURA (II-3)

O mapeamento que leva um plano a uma tira pela transformação (II-15) é ilustrado na figura (II-3).

A fim de obter a função de correlação na tira, antes derivamos uma relação desta com a função de correlação no plano infinito. De acordo com a relação (II-13), utilizamo-nos de

(II-15) teremos:

$$(II-16) \quad \langle \phi(z, \bar{z}) \phi(z', \bar{z}') \rangle_{\infty} = |f'(z)|^h |\overline{f'(z)}|^{\bar{h}} \times$$

$$|f'(z')|^h |\overline{f'(z')}|^{\bar{h}} \langle \phi(w, \bar{w}) \phi(w', \bar{w}') \rangle_L.$$

Sabendo-se que o comportamento da função de correlação na geometria infinita é dado por (II-14) e definindo-se em (II-16) $w=u+iv$, onde u mede a distância ao longo da tira e v é a coordenada periódica transversa a tira, obtemos após algum cálculo:

$$(II-17) \quad \langle \phi(u, v) \phi(u', v') \rangle_L = \frac{(2\pi/L)^{2x}}{|2\cosh(2\pi(u-u')/L) - 2\cos(2\pi(v-v')/L^x)|}.$$

No limite em que $u-u' \gg L$, temos um decaimento exponencial:

$$(II-18) \quad \langle \phi(u, v) \phi(u', v') \rangle_L \propto (2\pi/L)^{2x} \exp[-2\pi x(u-u')/L],$$

onde concluímos que o comprimento de correlação do sistema finito associado ao operador ϕ é dado por:

$$(II-19) \quad \zeta_L = L/2\pi x,$$

o que nos permite relacionar o particular comprimento de correlação na geometria finita, com a dimensão do operador

associado. Para $u > u'$ podemos expandir a equação (II-17) e obter:

$$(II-20) \quad \langle \phi(u,v) \phi(u',v') \rangle_L = (2\pi/L)^{2x} \sum_{N, \bar{N}}^{\infty} a_N a_{\bar{N}} \exp\{-2\pi(x + N + \bar{N})x$$

$$(u - u')/L \exp(2\pi i(s + N - \bar{N})(v - v')/L)\},$$

onde os coeficientes a_N são expressos em termos de funções gama:

$$a_N = \frac{\Gamma(x + N)}{\Gamma(x)N!},$$

e o spin $s = h - \bar{h}$.

Uma outra forma independente de se calcular a função de correlação acima é por meio da matriz de transferência $T = e^{-a\hat{H}}$, onde a é o espaçamento da rede na direção do tempo e $\hat{H}$ é o Hamiltoniano do sistema. Nesta formulação as funções $\phi(u,v)$ passam a ser verdadeiros operadores $\hat{\phi}(v)$ agindo no espaço de Hilbert associado a $\hat{H}$. A função de correlação obtida deste modo é dada por:

$$(II-21) \quad \langle \phi(u,v) \phi(u',v') \rangle_L = \sum_n \langle 0 | \hat{\phi}(v) | n, k \rangle \exp[-(E_n - E_0)(u - u')] \times \\ \langle n, k | \hat{\phi}(v') | 0 \rangle,$$

onde $|n,k\rangle$ é um conjunto completo de auto-estados de $\hat{H}$ com energia E_n e momento k . O momento é um bom número quântico, devido ao fato da tira ser periódica ao longo da dimensão finita. Deste modo a dependência de v e v' deve ser da forma $e^{-ik(v-v')}$.

Comparando as equações (II-20) e (II-21) Cardy¹⁰ obteve um importante resultado. Para cada operador primário ϕ de dimensão x e spin s corresponde um número infinito de autoestados de $\hat{H}$. Tais estados (bloco conforme) são descritos por pares de inteiros não negativos $(N, \bar{N})$ com energia:

$$(II-22) \quad E_{N, \bar{N}} = E_0 + 2\pi(x + \bar{N} + N)/L,$$

e momento:

$$(II-23) \quad k = 2\pi(s + N - \bar{N})/L,$$

Este resultado é extremamente importante, pois nos permite o cálculo das dimensões anômalas dos operadores primários da teoria ($N=\bar{N}=0$) bem como das dimensões relativas aos operadores (descendentes) que compõem o bloco conforme associados a cada operador primário ($N+\bar{N}>0$). O resultado (II-22) tem sido usado de forma intensa na obtenção do conteúdo de operadores dos modelos estatístico (veja referência (35) para uma recente revisão sobre estas aplicações).

ÁLGEBRA DE OPERADORES

Primeiramente iremos obter a álgebra das teorias conforme clássicas.

As transformações infinitesimais $z \rightarrow z + \epsilon z^{n+1}$, $\bar{z} \rightarrow \bar{z} + \epsilon \bar{z}^{n+1}$, sendo ϵ infinitesimal, são geradas por operadores de Virasoro $L_n, \bar{L}_n$ ($L_n = -z^{n+1} \partial_z$, $\bar{L}_n = -\bar{z}^{n+1} \partial_{\bar{z}}$) conforme podemos verificar:

$$e^{-\epsilon L_n} z \propto [1 - \epsilon L_n] z = [1 - \epsilon(-z^{n+1} \partial_z)] z = z + \epsilon z^{n+1},$$

e apresentam as seguintes correspondências:

$L_{-1}, \bar{L}_{-1}$, translação,

$L_0, \bar{L}_0$, dilatação,

$L_1, \bar{L}_{-1}$, transformação conforme especial.

Aplicando sucessivamente L_m e L_n em uma função $g(z)$ obtemos:

$$(II-24) \quad L_n L_m g(z) = L_n (z^{n+1} g') = z^{n+1} ((m+1) z^m g' + z^{m+1} g'').$$

Invertendo a ordem, primeiro L_n e depois L_m .

$$(I-25) \quad L_m L_n g(z) = z^{m+1} ((n+1) z^n g' + z^{n+1} g'').$$

Subtraindo (II-24) de (I-25) verificamos que L_m e L_n

satisfazem a seguinte álgebra (da mesma forma para $\bar{L}_m$ e $\bar{L}_n$).

$$(II-26) \quad \begin{aligned} [L_m, L_n] &= (m - n)L_{m+n}, \\ [\bar{L}_m, \bar{L}_n] &= (m - n)\bar{L}_{m+n}. \end{aligned}$$

Esta é a álgebra conforme na teoria clássica. No caso da teoria quântica os operadores $L_n, \bar{L}_n$ são definidos pela expansão a curta distância do campo ϕ com a componente $T_{zz}(z)$ do tensor energia-momento T , desta forma temos:

$$T_{zz}(z) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} z^{-n-2} L_n,$$

de forma análoga $\bar{L}_n$ é definido na expansão de $\bar{T}_{zz}(\bar{z})$

Os operadores $L_n, \bar{L}_n$, neste caso satisfazem a uma álgebra estendida como se segue:

$$(II-27) \quad [L_m, L_n] = (m-n)L_{m+n} + c[(m^3 - m)/12]\delta_{m,-n},$$

$$L_n^+ = L_{-n},$$

$$[L_m, \bar{L}_n] = 0,$$

analogamente para os $\bar{L}_m$, onde o número c é o mesmo.

Esta álgebra é conhecida como álgebra de Virasoro e o número

c, chamado de anomalia conforme ou carga central da álgebra, pode ser usado para classificar as diversas teorias de campos invariantes conforme. Consequentemente, como tais teorias de campos estão descrevendo as flutuações críticas de modelos estatísticos, tal número também servirá para classificar os modelos estatísticos nas suas diferentes classes de universalidade. Friedan, Qiu e Shenker⁸ provaram que se impormos que a teoria de campos além de invariante conforme seja também unitária, o que corresponde a termos no modelo estatístico uma matriz de transferência com autovalores reais, os possíveis valores de c são restritos, no caso em que $c < 1$, ao conjunto contável:

$$(II-28) \quad c = 1 - 6/m(m + 1), \quad m = 3, 4, \dots$$

Para um modelo onde c toma um desses valores, as dimensões de escala $x = h + \bar{h}$ dos possíveis operadores que descrevem a criticalidade do modelo são números racionais, com h e $\bar{h}$ restritos aos valores dados pela fórmula de Kac⁵:

$$(II-29) \quad h_{p,q}(c) = \frac{[(m+1)p - mq]^2 - 1}{4m(m+1)},$$

$$p = 1, 2, \dots, m-1, \quad q = 1, 2, \dots, p.$$

Nas tabelas (II-1), (II-2) e (II-3) mostramos uma comparação

com as dimensões de escalas conhecidas.

modelo	x	h	$\bar{h}$	$h_{p,q}(c)$	modelo	x	h	$\bar{h}$	$h_{p,q}(c)$
Ising c=1/2	$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{16}$	$\frac{1}{16}$	m=3 $\frac{1}{16}$ $\frac{1}{2}$	Ising tri- crítico c=7/10	$\frac{3}{40}$	$\frac{3}{80}$	$\frac{3}{80}$	m=4 $\frac{1}{10}$ $\frac{3}{5}$ $\frac{3}{2}$
	1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$			$\frac{1}{5}$	$\frac{1}{10}$	$\frac{1}{10}$	
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0			$\frac{7}{8}$	$\frac{7}{16}$	$\frac{7}{16}$	
						$\frac{6}{5}$	$\frac{3}{5}$	$\frac{3}{5}$	
						3	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	

TABELA (II-1)

modelo	x	h	$\bar{h}$	$h_{p,q}(c)$
Potts	$\frac{2}{21}$	$\frac{1}{21}$	$\frac{1}{21}$	m=6 $\frac{1}{7}$ $\frac{5}{7}$ $\frac{12}{7}$
3-estados	$\frac{2}{7}$	$\frac{1}{7}$	$\frac{1}{7}$	
tri- crítico	$\frac{20}{21}$	$\frac{10}{21}$	$\frac{10}{21}$	
c=6/7	$\frac{17}{7}$	$\frac{5}{7}$	$\frac{5}{7}$	
	$\frac{8}{3}$	$\frac{4}{3}$	$\frac{4}{3}$	0 $\frac{1}{8}$ $\frac{23}{8}$ 5
	$\frac{23}{7}$	$\frac{22}{7}$	$\frac{1}{7}$	
	5	5	0	

TABELA (II-2)

modelo	x	h	$\bar{h}$	$h_{p,q}(c)$
Potts 3-estados $c=4/5$	$\frac{2}{15}$	$\frac{1}{15}$	$\frac{1}{15}$	m=5
	$\frac{4}{5}$	$\frac{2}{5}$	$\frac{2}{5}$	
	$\frac{4}{5}$	$\frac{2}{5}$	$\frac{2}{5}$	
	$\frac{4}{3}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{2}{3}$	
	$\frac{9}{5}$	$\frac{7}{5}$	$\frac{2}{5}$	
	$\frac{14}{5}$	$\frac{7}{5}$	$\frac{7}{5}$	0
	$\frac{14}{5}$	$\frac{7}{5}$	$\frac{7}{5}$	
	$\frac{14}{5}$	$\frac{7}{5}$	$\frac{7}{5}$	
	$\frac{14}{5}$	$\frac{7}{5}$	$\frac{7}{5}$	
	$\frac{14}{5}$	$\frac{7}{5}$	$\frac{7}{5}$	

TABELA (II-3)

Nas tabelas (II-1), (II-2) e (II-3) exibimos algumas dimensões de escalas conhecidas.

APLICAÇÃO DA ÁLGEBRA DE VIRASORO

Define-se o vácuo da teoria como sendo o estado invariante por translação, dilatação e transformação conforme especial, portanto o vácuo $|0\rangle$ é aniquilado por L_{-1}, L_0, L_1

$$L_{-1}|0\rangle = 0,$$

$$L_0|0\rangle = 0,$$

$$L_1|0\rangle = 0.$$

Usando a relação (II-26) temos:

(II-30)

$$L_0 L_n - L_n L_0 = -n L_n,$$

que aplicada ao vácuo nos dará:

$$L_0 L_n |0\rangle = L_n L_0 |0\rangle - n L_n |0\rangle$$

$$(II-31) \quad L_0 (L_n |0\rangle) = -n (L_n |0\rangle),$$

portanto L_n agindo no vácuo, diminui de n o autovalor de L_0 . Como o vácuo é o estado de menor autovalor temos:

$$(II-32) \quad L_n |0\rangle = 0 \quad n \geq 1.$$

Da relação (II-31) identificamos L_n como o operador de levantamento para $n < 0$ e abaixamento se $n > 0$. Isto implica que a cada operador ϕ com dimensão de escala x corresponde um número infinito de outros operadores $L_n \phi$ ($n \in \mathbb{Z}^+$) com dimensões $x-n$. Como para teorias unitárias as dimensões de escala não podem ser negativas devem existir operadores $\phi(0)$ tais que $L_n \phi(0) = 0$, $n > 0$, operadores estes chamados de primários. Associado a cada operador primário $\phi(0)$, há um número infinito de outros operadores que formam um bloco conforme, esses operadores podem ser gerados aplicando-se $L_{-k_i} \bar{L}_{-k'_i}$ ($k_i, k'_i \in \mathbb{Z}$) em $\phi(0)$. De forma geral um operador no nível $(N, \bar{N})$ associado ao bloco conforme de $\phi(0)$, tem a forma:

$$(II-33) \quad L_{-k_1} \dots L_{-k_m} \bar{L}_{-k'_1} \dots \bar{L}_{-k'_m} \phi_{h, \bar{h}}(0), \quad \sum_j k_j = N, \quad \sum_j k'_j = \bar{N}.$$

Este operador tem dimensão $(h+\bar{h}, h+\bar{h})$ e corresponde a um auto-estado de $\hat{H}$ com energia $x+\bar{x}$ e momento $s+\bar{s}$ medido em unidades de $2\pi/L$. O número de tais estados é o número de alternativas que podemos escrever a soma $N+\bar{N}$.

Para os primeiros níveis temos:

<u>NÍVEL</u>	<u>DIMENSÃO</u>	<u>CAMPO</u>
0	$h + \bar{h}$	$\phi(0)$
1	$h + \bar{h} + 1$	$L_{-1}\phi(0), \bar{L}_{-1}\phi(0)$
2	$h + \bar{h} + 2$	$L_{-2}\phi(0), L_{-1}^2\phi(0), \bar{L}_{-2}\phi(0), \bar{L}_{-1}^2\phi(0)$
3	$h + \bar{h} + 3$	$L_{-3}\phi(0), L_{-1}L_{-2}\phi(0), L_{-2}L_{-1}\phi(0), L_{-1}^3\phi(0),$ $\bar{L}_{-3}\phi(0), \bar{L}_{-1}\bar{L}_{-2}\phi(0), \bar{L}_{-2}\bar{L}_{-1}\phi(0), \bar{L}_{-1}^3\phi(0)$
⋮	⋮	⋮
N	$h + \bar{h} + N + \bar{N}$	$P(N)P(\bar{N})$ campos,

onde $P(N)P(\bar{N})$ é o número de partições de $N+\bar{N}$ em inteiros positivos. $P(N)$ assim como $P(\bar{N})$ são dados em termos da função geradora:

$$(II-34) \quad \frac{1}{\prod_{N=1}^{\infty} (1 - q^N)} = \sum_{N=0}^{\infty} P(N)q^N, \quad P(0) \equiv 1.$$

Em geral nem todos operadores em um dado nível são independentes. Na verdade o bloco conforme relativo aos operadores primários cujas dimensões são dadas pela fórmula de

Kac apresentam esta propriedade (álgebra degenerada).

Um outro resultado interessante da invariância conforme de um sistema em duas dimensões é que a amplitude das correções de finite size scaling (F.S.S.) da energia livre de uma tira infinita de largura L na criticalidade, é linearmente dependente do valor de c (Blöte, Cardy, Nightingale¹⁴ e Affleck¹⁵) para várias condições de contorno. Particularmente para condições periódicas de contorno temos:

$$(II-35) \quad E_0 \simeq e_\infty L - \pi c/6L,$$

sendo e_∞ a energia livre do sistema infinito por unidade de área.

A expressão acima tem sido usada com bastante sucesso na determinação das classes de universalidade de diversos modelos estatísticos. Mais adiante utilizar-nos-emos deste resultado para o estudo de alguns modelos (veja capítulos (IV) e (V)).

CAPÍTULO III

TEORIA DE ESCALA PARA SISTEMAS FINITOS

A fim de tratar sistemas finitos na criticalidade M.E.Fisher^{16,17} formulou a teoria de escala para sistemas finitos (finite-size scaling (FSS)). Primeiramente convém lembrar que as transições de fase ocorrem apenas quando o sistema tiver pelo menos algumas de suas dimensões infinitas, e um número infinito de graus de liberdade. Somente neste limite podemos observar singularidades nas quantidades termodinâmicas. Porém sistemas reais têm dimensões finitas e possuem transições de fase que são vistas experimentalmente como singularidades aparentes das quantidades termodinâmicas.

Ao tratarmos os sistemas finitos, estes podem ter formas variadas, dependendo da particular geometria, bem como das suas condições de contorno. Sistemas reais exibem todas dimensões finitas caracterizada por um único comprimento de escala $L \propto V^{1/d}$ onde d é a dimensão do sistema (geometria G1). Esta é a geometria normalmente usada nas simulações por técnicas de Monte Carlo. Uma outra geometria muito estudada se refere a sistemas infinitos em $d' = d-1$ dimensões e finito em uma dimensão caracterizada pelo seu comprimento L (geometria G2). De uma maneira geral estes sistemas exibem transições de fase para $d > 2$, mas comportam-se de maneira diversa do sistema infinito em todas direções, apresentando por exemplo diferentes expoentes críticos.

A última geometria de interesse é a de sistemas que são infinitos em uma dimensão e finitos em $d' = d-1$ dimensões, todas de

largura L (geometria G3). É esta geometria que normalmente usamos para cálculos de matriz de transferência, renormalização fenomenológica (Nightingale¹⁸) e cálculos envolvendo Hamiltoniana quânticas onde a dimensão infinita é definida como sendo o tempo.

Ao estudarmos sistemas físicos, seja com dimensões finitas ou infinitas, devemos especificar quais serão as condições de contorno que o sistema estará sujeito. No caso de sistemas com dimensões infinitas estaremos restringindo o seu domínio, e em sistemas com todas dimensões finitas estaremos fixando qual é o tipo de superfície. Devemos ter um certo cuidado teórico para uma escolha apropriada dessas condições, pois a física que observamos é afetada significativamente por estas condições. Denotando por L o comprimento das dimensões finitas de um sistema, destacaremos entre os casos mais gerais as seguintes condições de contorno:

Periódica: onde supomos que qualquer quantidade local, como um parâmetro de ordem $\phi(\vec{\rho}, x)$ satisfaça:

$$\phi(\vec{\rho}, x) = \phi(\vec{\rho}, x+L),$$

onde $\vec{\rho}$ é um vetor transversal à dimensão finita. Neste tipo de condição de contorno as propriedades físicas não são afetadas por efeitos da superfície do sistema.

Antiperiódica:

$$\phi(\vec{p}, x) = -\phi(\vec{p}, x+L).$$

Esta condição é comumente usada em sistemas fermiônicos ou no caso da geometria G3 para verificarmos o comportamento de setores parafermiônicos do espaço de Hilbert associado à matriz de transferência.

Superfície livre:

$$\phi(\vec{p}, x) = 0, \quad \text{para } x < 0 \text{ e } x > L.$$

Nesta condição os efeitos da superfície são mais evidentes.

DISTORÇÕES DO PONTO CRÍTICO

Dissemos anteriormente que sistemas finitos apresentam singularidades aparentes no ponto crítico. Veremos agora como são modificadas e distorcidas uma singularidade crítica.

Para se ter uma idéia mais clara destas distorções, ilustramos na figura (III-1)¹⁹ o comportamento do calor específico do modelo de Ising bidimensional com condições periódicas de contorno e com dimensões $L \times L$ para $L=8$ e $L=32$, em comparação com o do sistema infinito (linha tracejada).

FIGURA (III-1)

Na figura (III-1) temos ilustrado o comportamento do calor específico de uma rede quadrada tipo Ising com condições de contorno para $L=8$ e $L=32$. A linha tracejada é para o sistema infinito.

Observamos na figura (III-1) que próximos à região onde o sistema infinito exibe divergência (T_c), os sistemas finitos apresentam um pico, onde a altura do mesmo cresce com o tamanho do sistema. A temperatura onde ocorre esse pico é chamada de temperatura pseudo-crítica T_m , que aproxima-se de T_c quando $L \rightarrow \infty$. A aproximação $T_m \rightarrow T_c$ é caracterizada por um expoente de

deslocamento λ definido^{20,21} por:

$$(III-1) \quad [T_m(L) - T_c]/T_c \propto b/L^\lambda, \quad L \rightarrow \infty.$$

Um outro ponto interessante é aquele no qual a curva referente ao comportamento do calor específico para a rede $L \times L$ começa a diferir a curva correspondente ao sistema infinito. Este ponto ocorre na temperatura $T^*(L)$ que se aproxima de T_c como:

$$(III-2) \quad [T^*(L) - T_c]/T_c \sim b/L^\theta, \quad L \rightarrow \infty,$$

onde definimos²⁰ o expoente θ .

Dissemos na seção anterior que sistemas com geometria G2 apresentam transição de fase com $d > 2$ e comportamento crítico em geral diferente da situação em que $L \rightarrow \infty$. Como exemplo vemos que a susceptibilidade do Ising em três dimensões com uma delas finita de tamanho L (comportamento bidimensional), diverge como⁹:

$$(III-3) \quad \chi_L(T) \propto [T - T_c(L)]^{-7/4}, \quad T \rightarrow T_c(L),$$

onde,

$$(III-4) \quad [T_c(L) - T_c]/T_c = a/L^\lambda.$$

Quando tomamos o limite de L infinito temos:

$$(III-5) \quad \chi(T) \propto (T - T_c)^{-5/4}, \quad T \rightarrow T_c,$$

que é o comportamento do sistema tridimensional.

Este resultado pode ser aplicado no caso de L ser muito grande onde já se nota o efeito de cross-over como está ilustrado na figura (III-2).

FIGURA (III-2)

Na figura (III-2) esquematizamos a situação de cross-over entre os comportamentos bi-dimensional (linha contínua) e tri-dimensional (linha tracejada) da função logarítmica da susceptibilidade versus a temperatura reduzida.

Notamos que $T^*(L)$ é o mesmo da figura (III-1) onde o sistema em $T < T^*(L)$ se comporta como em duas dimensões passando a ter

comportamento tri-dimensional acima desta temperatura.

Os expoentes λ e θ apresentados anteriormente, podem ser relacionados com o expoente do comprimento de correlação ν . Para o expoente θ Fisher e Ferdinand²⁰ argumentaram que em $T^*(L)$ começamos a observar o efeito do sistema ser finito, isto ocorre quando o comprimento de correlação alcança as dimensões do sistema, ou seja:

$$(III-6) \quad \xi(T^*(L)) \propto L \propto (T^*(L) - T_c)^{-1/\theta},$$

como próximo à temperatura crítica T_c temos:

$$(III-7) \quad \xi(T) \propto (T - T_c)^{-\nu},$$

concluimos que:

$$(III-8) \quad \theta = 1/\nu.$$

Este resultado pode também ser obtido através da teoria do grupo de renormalização⁹.

A situação para o expoente de deslocamento λ é um tanto mais delicada. Apesar da asserção de Fischer e Ferdinand²⁰ que o único critério de se determinar os efeitos do tamanho finito na criticalidade é igualar o comprimento de correlação ao tamanho do sistema, onde temos:

(III-9)

$$\lambda = \theta = 1/\nu,$$

essa igualdade não é assegurada em algumas situações como para o modelo esférico²² e o gás ideal de Bose²³.

OBTENÇÃO DOS EXPOENTES CRÍTICOS

A hipótese da teoria de escala para sistemas finitos (Fisher¹⁶, Fisher e Barber¹⁷) se baseia no fato de que na vizinhança da temperatura crítica T_c , o comportamento de sistemas com dimensões finitas é determinado pela variável de escala:

(III-10)

$$y = L/\xi(T),$$

sendo $\xi(T)$ o comprimento de correlação do sistema infinito. Portanto $T^*(L)$ é determinado quando $y \cong 1$, para $y \gg 1$ temos o comportamento de um sistema infinito e quando $y \ll 1$ observamos os efeitos do tamanho finito do sistema. Tal hipótese afirma que uma quantidade termodinâmica que se comporta num sistema infinito como:

(III-11)

$$P_{\infty}(T) \propto At^{-\rho},$$

$$t = \frac{T - T_c}{T_c},$$

no sistema finito escalará da seguinte forma:

$$(III-12) \quad P_L^T(T) \propto L^w \tilde{Q}(y) \quad w=\rho/\nu,$$

onde o expoente w é determinado impondo-se que a equação (III-12) reproduza a equação (III-11) no limite $L \rightarrow \infty$ e $\tilde{Q}(y)$ é uma função da variável de escala y . Como esta hipótese é supostamente válida para qualquer quantidade que exibe uma singularidade no sistema infinito, podemos aplicá-la diretamente ao comprimento de correlação. Consequentemente para o sistema finito escrevemos:

$$(III-13) \quad \xi_L(T) \propto L \tilde{\xi}(y).$$

Sendo esta mesma relação válida para um outro sistema de dimensão L' , em uma determinada temperatura, teremos:

$$(III-14) \quad \xi_L(T)/L \propto \xi_{L'}(T')/L'.$$

Esta relação tornou-se bastante útil após os trabalhos de M.P.Nightingale^{18,24}, onde esta relação foi explorada na construção de diagramas de fases e em cálculos de expoentes críticos de vários modelos estatísticos. Esta relação é satisfeita para uma temperatura $T_{L,L'}^*$ tida como a temperatura pseudo-crítica do sistema. Assim esperamos que $T_{L,L'}^* \rightarrow T_c$ quando $L, L' \rightarrow \infty$. No gráfico da figura (III-3) temos duas curvas, para dois tamanhos de rede diferentes L e L' . O ponto de cruzamento

dessas duas curvas (quando a igualdade de (III-14)) é válida) ocorre em $T_{L,L'}^*$, aproximando de T_c no limite de $L, L' \rightarrow \infty$.

FIGURA (III-3)

A figura (III-3) mostra em que temperatura a eq(III-14) é satisfeita. Esta temperatura se aproxima de T_c a medida que aumentamos as dimensões L e L' dos sistemas.

Para o cálculo do expoente ν partimos do argumento que para uma transformação de escala $r' \rightarrow br$ no sistema, o comprimento de correlação escala com o fator de escala b na forma:

$$(III-15) \quad \xi_L(t) = b \xi_{L'}(t'), \quad b > 1.$$

Tendo em vista que a temperatura escala como:

$$(III-16) \quad t' = b^{y_t} t, \quad y_t = 1/\nu,$$

e substituindo a equação (III-16) na equação (III-15) obtemos:

$$(III-17) \quad \xi_L(t) = b \xi_{L'}(b^{y_t} t).$$

Diferenciando-se o comprimento de correlação em relação a temperatura obtemos:

$$(III-18) \quad \frac{d}{dt} \xi_L(t) = b \frac{d}{dt'} \xi_{L'}(b^{y_t} t) \frac{dt'}{dt} = b^{1+y_t} \frac{d}{dt'} \xi_{L'}(b^{y_t} t).$$

Assim levando os termos com derivadas para o lado direito e tomando o logaritmo obtemos:

$$(III-19) \quad y_t = \nu^{-1} = \ln \left[\frac{d}{dt} \xi_L(t) / \frac{d}{dt'} \xi_{L'}(b^{y_t} t) \right]^{-1}.$$

Para cálculos de outros expoentes, observamos que para a equação (III-12) reproduzir a (III-11) no limite de $L \rightarrow \infty$ devemos impor que:

$$(III-20) \quad \tilde{Q}(y) \rightarrow \frac{Q_\infty(T)}{y^{\rho/\nu}},$$

para cancelarmos a dependência de L em (III-12) devemos ter:

$$(III-21) \quad w = \rho/\nu.$$

Portanto, considerando um conjunto de redes finitas, nos é possível estimarmos ρ/ν extrapolando-se a sequência²⁵:

$$(III-22) \quad \langle L [P_L(T_c) - P_{L-1}(T_c)]/P_{L-1}(T_c) \rangle \rightarrow \rho/\nu.$$

MATRIZ DE TRANSFERÊNCIA E A HALMILTONIANA QUANTICA

Uma maneira prática de se definir o comprimento de correlação é através do uso da matriz de transferência. Como já ressaltamos este método nos permite tratar sistemas com a geometria G3. O comprimento de correlação correspondente ao sistema de tamanho L :

$$(III-23) \quad \xi_L^{-1}(T) = \ln [\lambda_1(T,L)/\lambda_0(T,L)],$$

onde λ_0 e λ_1 são os dois maiores autovalores na matriz de transferência.

Em geral a matriz de transferência é escrita em termos de produtos de L^{d-1} operadores quânticos o que torna difícil a sua diagonalização mesmo para L razoavelmente pequeno. No entanto, podemos facilitar os cálculos explorando as analogias e

correspondências existentes entre a mecânica estatística no equilíbrio e a teoria quântica de campos²⁶. Procuramos, desta forma uma Hamiltoniana associada ao modelo estatístico que seja expressa em termos de somas de L^{d-1} operadores quânticos.

Tendo uma matriz de transferência $\hat{T}$ para algum modelo estatístico em uma rede de d dimensões, definimos uma Hamiltoniana $\hat{H}$ associada, por meio da seguinte expansão:

$$(III-24) \quad \hat{T} = 1 - \tau \hat{H} + O(\tau^2),$$

onde o espaçamento na direção infinita (tempo) τ é um parâmetro infinitesimal. A Hamiltoniana $\hat{H}$ refere-se a uma rede de $d-1$ dimensões espaciais e a d -ésima dimensão do sistema estatístico original desempenha o papel de tempo (direção temporal).

Acreditando no fato de que o espaçamento da rede seja um parâmetro irrelevante quando ocorre uma transição de fase, se fizermos o limite do contínuo na definição de $\hat{H}$ não teremos afetado aspectos universais do comportamento crítico. O comprimento de correlação é obtido das auto-energias de $\hat{H}$ associando seus valores mais baixos com os maiores auto-valores de $\hat{T}$, pois da equação (III-24) temos que:

$$(III-25) \quad \hat{T} \propto e^{-\tau \hat{H}}.$$

A Hamiltoniana quântica pode ser definida para uma série de

modelos de mecânica estatística. Como em sua maioria estas Hamiltonianas não podem ser diagonalizadas exatamente, então devemos recorrer a algumas técnicas numéricas para estudá-las. Uma técnica muito usada consiste em limitar o tamanho da rede, para o qual a Hamiltoniana pode ser construída e explicitamente diagonalizada. Estes auto-valores, e outras quantidades derivadas, podem então ser extrapoladas no limite da rede infinita usando FSS (Hamer e Barber²⁷).

Em transições contínuas o comprimento de correlação da equação (III-23) diverge no ponto crítico. Na formulação Hamiltoniana o que temos é o anulamento da lacuna de massa.²⁶

$$(III-26) \quad \Gamma = E_1 - E_0,$$

onde E_0 e E_1 são as energias do estado fundamental e do primeiro estado excitado de $\hat{H}$ respectivamente. Assim a lacuna de massa desempenha o papel de ξ^{-1} , o que é imediato a partir da equação (III-24). O análogo à equação (III-14) será então:

$$(III-27) \quad \Gamma_L(J) = \frac{L'}{L} \Gamma_L(J'),$$

onde o acoplamento J faz o papel de temperatura no Hamiltoniano quântico. Para estimar o acoplamento crítico temos:

$$(III-28) \quad L \Gamma_L(J^*) = L' \Gamma_L(J^*),$$

e para o expoente ν :

$$(III-29) \quad \nu^{-1} = \ln \left[\frac{d \Gamma_L(J^*)}{dJ} \right] \times \left[\ln \frac{L}{L'} \right]^{-1} - 1.$$

Vemos assim que a geometria apropriada para cálculos envolvendo Hamiltonianas quânticas de rede finita é a geometria G3, onde a dimensão infinita é identificado como sendo o tempo.

CAPÍTULO IV

MODELO 1

Neste capítulo e no próximo estudaremos dois modelos estatísticos, os quais chamaremos de modelo 1 e modelo 2, onde iremos aplicar algumas das técnicas desenvolvidas nos capítulos (II) e (III).

O modelo 1, numa cadeia de L sítios, é descrito pela seguinte Hamiltoniana quântica:

$$(IV-1) \quad H(\lambda) = - \sum_{i=1}^L (J_1 \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z + J_2 \sigma_i^z \sigma_{i+2}^z) + \lambda (J_1 \sigma_i^x + J_2 \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x),$$

onde J_1 e J_2 (na realidade a razão J_2/J_1), desempenham o papel de constantes de acoplamento e o parâmetro λ o papel de temperatura. Esta Hamiltoniana descreve interações entre primeiros e segundos vizinhos. A motivação de estudarmos esta Hamiltoniana está no fato de que ela apresenta simetrias muito interessantes, ou seja, apresenta a propriedade de dualidade, da qual podemos derivar o gráfico de transição de fases. Veremos mais adiante que o ponto crítico ocorre em $\lambda = \lambda_c = 1$. Os operadores σ^x e σ^z são operadores que agem no espaço produto, isto é:

$$(IV-2) \quad \sigma_i^z = I \otimes I \otimes \dots \otimes I \otimes \sigma^z \otimes I \otimes \dots \otimes I,$$

$$\sigma_i^x = I \otimes I \otimes \dots \otimes I \otimes \sigma^x \otimes I \otimes \dots \otimes I,$$

sendo I a matriz identidade (2×2) e σ_i^x, σ_i^z as matrizes de Pauli de spin $1/2$ que satisfazem a seguinte álgebra:

$$[\sigma_i^x, \sigma_j^z] = 0, \quad i \neq j, \quad [\sigma_i^z, \sigma_j^z] = [\sigma_i^x, \sigma_j^x] = 0, \quad \forall i, j$$

$$\{\sigma_i^x, \sigma_j^z\} = 1, \quad i = j.$$

Escolhendo-se a base em que σ^x é diagonal, σ_i^x, σ_i^z são representados por:

$$(IV-3) \quad \sigma_i^x = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \dots \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \dots \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\sigma_i^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \dots \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \dots \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Assim o espaço de Hilbert associado à Hamiltoniana quântica tem dimensão 2^L e pode ser expresso pela base vetorial formada pelas possíveis combinações dos produtos diretos de L vetores $|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ e $|-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, que representam spins para cima e para baixo, respectivamente. Os operadores σ^x, σ^z agem nesses estados da seguinte maneira:

$$(IV-4) \quad \sigma^x |+\rangle = |+\rangle \quad \text{e} \quad \sigma^z |+\rangle = |-\rangle,$$

$$\sigma^x |-\rangle = -|-\rangle \quad \sigma^z |-\rangle = |+\rangle.$$

Observamos que a Hamiltoniana (1), da mesma forma que o modelo de Ising com campo transverso²⁸, tem uma simetria global $Z(2)$. Esta simetria é expressa pela seguinte relação de comutação:

$$(IV-5) \quad [H, \hat{P}] = 0,$$

onde $\hat{P}$ é o operador paridade (não local) escrito como:

$$(IV-6) \quad \hat{P} = \prod_{i=1}^L \sigma_i^x.$$

Desta maneira, como estamos na base em que σ^x é diagonal podemos separar o espaço de Hilbert em setores de paridade par e ímpar de acordo com os autovalores +1 e -1 do operador $\hat{P}$.

O primeiro passo, afim de obter algum entendimento acerca deste modelo, foi obtido derivando-se um mapeamento entre os comportamentos a alta e a baixa temperatura. Este mapeamento é obtido através da transformação de dualidade (Kramers e Wannier²⁹), que de uma forma geral mapeiam um modelo de mecânica estatística em outro. Contudo existem modelos cuja transformação dual conduz ao mesmo modelo mas com temperatura diferente (modelos autoduais^{29,30}). Entre estes modelos autoduais um caso típico é o modelo de Ising que como decorrência desta propriedade exhibe uma simetria entre os comportamentos a alta e a baixa temperatura.²⁶ Nesta transformação associamos à rede original, uma nova rede

dual, onde os sítios da rede original são associados com as ligações da rede dual e vice-versa conforme a figura (III-1).

FIGURA (III-1)

Na figura (III-1) ilustramos a transformação de dualidade, os pontos de cima são os sítios da rede original, sendo que os de baixo são os sítios da rede dual. Vemos que na transformação os sítios da rede original associam-se as ligações da rede dual.

Para o nosso modelo 1 definimos os operadores na rede dual como:

$$(IV-7) \quad \mu_i^x = \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z ; i=1,2,3,\dots ,$$

$$\mu_i^z = \prod_{m \leq i} \sigma_m^x ; i=1,2,3,\dots .$$

Assim enquanto μ_i^x vira spins adjacentes, μ_i^z identifica se os spin no sítio m e os spins a sua esquerda estão alinhados.

Podemos verificar que μ_i^x e μ_i^z satisfazem à mesma álgebra das matrizes de Pauli σ_i^x e σ_i^z :

(IV-8)

$$\mu_i^x \mu_j^z = (\sigma_i^z \sigma_{i+1}^z) \prod_{m \leq j} \sigma_m^x,$$

para $j < i$ obtemos diretamente:

(IV-9)

$$\mu_i^x \mu_j^z = \mu_j^z \mu_i^x,$$

se $j \geq i+1$ existe um sítio n tal que:

$$\mu_n^x \mu_j^z = \sigma_n^z \sigma_n^x \sigma_{n+1}^z \sigma_{n+1}^x \prod_{m \leq j} \sigma_m^x,$$

onde usando as relações de comutação entre σ^x e σ^z , realizamos as seguintes passagens:

$$\sigma_n^z \sigma_n^x \sigma_{n+1}^z \sigma_{n+1}^x = (-\sigma_n^z \sigma_n^x) (-\sigma_{n+1}^z \sigma_{n+1}^x) = \sigma_n^z \sigma_n^x \sigma_{n+1}^z \sigma_{n+1}^x,$$

e obtemos:

(IV-10)

$$\mu_i^x \mu_j^z = \mu_j^z \mu_i^x,$$

enquanto que para $j = i$, temos:

$$\begin{aligned} \mu_i^x \mu_i^z &= \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \prod_{m \leq i} \sigma_m^x = \prod_{m \leq i-1} \sigma_m^x (\sigma_i^z \sigma_i^x) \sigma_{i+1}^z \\ &= \prod_{m \leq i-1} \sigma_m^x (-\sigma_i^x \sigma_i^z) \sigma_{i+1}^z = - \prod_{m \leq i} \sigma_m^x \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z, \end{aligned}$$

e conseqüentemente:

$$(IV-11) \quad \mu_i^x \mu_i^z = -\mu_i^z \mu_i^x .$$

Das relações (IV-9), (IV-10) e (IV-11), temos:

$$(IV-12) \quad \begin{cases} [\mu_i^x, \mu_j^z] = 0 , & i \neq j, \\ \mu_i^x \mu_j^z = -\mu_j^z \mu_i^x , & i = j, \end{cases}$$

e claramente observamos que:

$$(IV-13) \quad [\mu_i^z, \mu_j^z] = [\mu_i^x, \mu_j^x] = 0, \quad \forall i, j ,$$

onde vemos que μ^x e μ^z obedece à mesma álgebra que σ^x e σ^z .

Para escrevermos a Hamiltoniana dual derivamos ainda as seguintes relações:

$$(IV-14) \quad \mu_i^z \mu_{i+1}^z = \prod_{m \leq i} \sigma_m^x \cdot \prod_{n \leq i+1} \sigma_n^x = \prod_{m \leq i} (\sigma_m^x)^2 \sigma_{i+1}^x = \sigma_{i+1}^x ,$$

$$(IV-15) \quad \mu_i^x \mu_{i+1}^x = \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \sigma_{i+1}^z \sigma_{i+2}^z = \sigma_i^z \sigma_{i+2}^z ,$$

$$(IV-16) \quad \mu_i^z \mu_{i+2}^z = \mu_i^z \mu_{i+1}^z \mu_{i+1}^z \mu_{i+2}^z = \sigma_{i+1}^x \sigma_{i+2}^x .$$

Substituindo cada termo da interação pelo seu dual e usando as relações (IV-14), (IV-15) e (IV-16), ficamos com a Hamiltoniana

escrita na forma:

$$(IV-17) \quad H(\lambda) = -\lambda \sum_{i=1}^L \langle (J_1 \mu_i^z \mu_{i+1}^z + J_2 \mu_i^z \mu_{i+2}^z) + 1/\lambda (J_1 \mu_i^x + J_2 \mu_i^x \mu_{i+1}^x) \rangle ,$$

onde os termos na somatória têm a mesma forma que os da Hamiltoniana original, com a diferença que o termo que multiplicava λ , agora multiplica $1/\lambda$. Podemos então escrever a seguinte relação:

$$(IV-18) \quad H(\lambda) = \lambda H(1/\lambda) ,$$

o que mostra que o comportamento do sistema para altos e baixos valores de λ estão relacionados (autodualidade).

Esta relação é válida na realidade quando $L \rightarrow \infty$, pois quando N for finito, como é o nosso caso, temos que considerar os efeitos das condições de contorno. A fim de tratarmos o problema da cadeia finita adequadamente consideremos a nossa cadeia quântica com condição de contorno periódica ($q=+1$), antiperiódica ($q=-1$) e livre ($q=0$). Com estas condições de contorno as variáveis $\langle \sigma \rangle$ nos contornos são definidos por:

$$(IV-19) \quad \sigma_{L+1}^z = q \sigma_1^z , \quad \sigma_{L+2}^z = q \sigma_2^z , \quad \sigma_{L+1}^x = q \sigma_1^x .$$

Para prosseguirmos em nossa análise definimos novas variáveis $\{\zeta_i; i=1,2,\dots,2L\}$ por:

$$(IV-20) \quad \zeta_{2i-1} = \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z; \quad i=1,2,\dots,L-1, \quad \zeta_{2L-1} = q \sigma_L^z \sigma_1^z,$$

$$\zeta_{2i} = \sigma_i^x; \quad i=1,2,\dots,L.$$

É fácil verificar que os ζ 's satisfazem à seguinte álgebra:

$$(IV-21) \quad [\zeta_{2i-1}, \zeta_{2j}] = 0, \quad i \neq j, |j-i| \neq 1; \text{ se } j=1 \text{ então } i \neq 1, L, \\ \text{se } j=L \text{ então } i \neq L-1, L,$$

$$\{\zeta_{2i-1}, \zeta_{2j}\} = 0, \quad \text{outros } i, j,$$

$$[\zeta_{2i}, \zeta_{2j}] = 0, \quad \forall i, j,$$

$$[\zeta_{2i-1}, \zeta_{2j-1}] = 0, \quad \forall i, j.$$

Contudo as variáveis $\{\zeta\}$ não são independentes pois devem satisfazer à seguinte equação de vínculo:

$$(IV-22a) \quad \prod_{i=1}^L \zeta_{2i-1} = \sigma_1^z \sigma_2^z \sigma_2^z \sigma_3^z \dots \sigma_{L-1}^z \sigma_L^z q \sigma_L^z \sigma_1^z = q.$$

É interessante observar que em termos das novas variáveis $\{\zeta\}$ o operador paridade $\hat{P}$ é definido por:

(IV-22b)

$$\hat{P} = \prod_{i=1}^L \zeta_{2i}.$$

A fim de explicitarmos as condições de contorno reescrevemos a Hamiltoniana (IV-1) da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \text{(IV-23)} \quad H = & - \sum_{i=1}^{L-1} J_1 \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - q J_1 \sigma_L^z \sigma_1^z - \sum_{i=1}^{L-2} J_2 \sigma_i^z \sigma_{i+2}^z - q J_2 \sigma_L^z \sigma_2^z \\ & - q J_2 \sigma_{L-1}^z \sigma_1^z - \sum_{i=1}^L \lambda J_1 \sigma_i^x - \sum_{i=1}^{L-1} \lambda J_2 \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x - \lambda J_2 q \sigma_L^x \sigma_1^x. \end{aligned}$$

Substituindo na Hamiltoniana (IV-23) as novas variáveis ζ 's teremos:

$$\begin{aligned} \text{(IV-24)} \quad H(\zeta) = & - \sum_{i=1}^{L-1} J_1 \zeta_{2i-1} - J_1 \zeta_{2L-1} - \sum_{i=1}^{L-2} J_2 \zeta_{2i-1} \zeta_{2i+1} \\ & - J_2 \zeta_{2L-3} \zeta_{2L-1} - J_2 \zeta_{2L-1} \zeta_1 - \sum_{i=1}^L \lambda J_1 \zeta_{2i} \\ & - \sum_{i=1}^{L-1} \lambda J_2 \zeta_{2i} \zeta_{2i+2} - \lambda J_2 \zeta_{2L} \zeta_2. \end{aligned}$$

Se agora fizermos a troca de índices $2i \rightarrow 2i+1$, ficaremos com:

$$\begin{aligned}
\text{(IV-25)} \quad H_1(\zeta) = & - \sum_{i=1}^{L-1} J_1 \zeta_{2i} + \zeta_{2L} - \sum_{i=1}^{L-2} J_2 \zeta_{2i} \zeta_{2i+2} - J_2 \zeta_{2L-2} \zeta_{2L} \\
& - J_2 \zeta_{2L} \zeta_2 - \sum_{i=1}^{L-1} \lambda J_1 \zeta_{2i+1} + \lambda J_1 \zeta_1 - \sum_{i=1}^{L-2} \lambda J_2 \zeta_{2i+1} \zeta_{2i+3} \\
& - \lambda J_2 \zeta_{2L-1} \zeta_1 - \lambda J_2 \zeta_1 \zeta_3 .
\end{aligned}$$

Com a troca de índices $2i \rightarrow 2i+1$ o vínculo será expresso por:

$$\text{(IV-26a)} \quad \prod_{i=1}^L \zeta_{2i} = p ,$$

enquanto que o operador paridade por:

$$\text{(IV-26b)} \quad \hat{P} = \prod_{i=1}^L \zeta_{2i-1} .$$

Assim comparando-se as equações (IV-24) e (IV-25) juntamente com as relações (IV-22) e (IV-26) vemos que o setor p (± 1) do Hamiltoniano $H(\lambda)$ com condição de contorno q (± 1); possui o mesmo espectro que o setor q (± 1) do Hamiltoniano $H(1/\lambda)$ com condição de contorno p (± 1). Em particular para o setor par ($p=+1$) com condição de contorno periódica teremos a relação:

$$\text{(IV-27)} \quad \lambda E(\lambda) = E(1/\lambda) .$$

Recordando do capítulo (III), em que temos o anulamento da lacuna de massa no ponto crítico, a equação (IV-27) nos afirma que se a lacuna de massa se anular em $\lambda = \lambda^*$, ela também anular-se-á em $\lambda = 1/\lambda^*$. Supondo que este ponto seja único (esta suposição não é verdadeira em geral, para teorias com mais de uma transição de fase (Elitzur et al.³¹)), a autodualidade do modelo implicará que:

$$(IV-28) \quad \lambda^* = 1.$$

A fim de verificar no modelo 1 em que ponto ocorre a transição e se este é único ($\lambda=1$), utilizar-nos-emos da relação (III-27) e acharemos para qual λ a relação será satisfeita. Para ilustrar nossos resultados, mostramos para alguns valores de J_2 os acoplamentos pseudo-críticos obtidos para $L=4,6,8,10,12$ e 14 (tabela (IV-1)).

Numa rede infinita as interações entre segundos vizinhos acoplam somente sítios de uma mesma paridade (par ou ímpar). Assim para termos uma boa convergência, ao limite $L \rightarrow \infty$, consideramos apenas redes com um número L par de sítios, pois caso L for ímpar os sítios pares e ímpares se acoplam, via condição de contorno.

Na região $J_2/J_1 > 1.0$ os valores de λ decaem, isto sugere que poderia haver uma abertura na linha de transição nesta região, mas nossas análises para outros valores (ainda maiores) de J_2 não

foram conclusivas a este respeito. Tal efeito pode ser em princípio ocasionado pelo fato de que redes consideradas serem pequenas, e é possível que o comportamento exibido nesta região ainda não seja devido ao comportamento assintótico $L \rightarrow \infty$. Na região de J_2 negativo os resultados que obtivemos foram altamente inconsistentes, e a isto podemos atribuir um efeito de competição

$$J_1 = 0.0$$

L	L'	J_2	λ
4	6	0,0	1,00567976
6	8	0,0	1,00197368
8	10	0,0	1,00091124
10	12	0,0	1,00049444
12	14	0,0	1,00029795
EXTRAPOLADO		0,0	1,0000
4	6	0,0	1,01604534
6	8	0,0	1,00250457
8	10	0,0	1,00071957
10	12	0,0	1,00027848
12	14	0,0	1,00012807
EXTRAPOLADO		0,0	1,0000
4	6	0,0	1,02444245
6	8	0,0	0,99990607
8	10	0,0	0,99823796
10	12	0,0	0,99856788
12	14	0,0	0,99895767
EXTRAPOLADO		0,0	1,0000

TABELA (IV-1)

Na tabela (IV-1) mostramos os resultados obtidos para a

"temperatura" λ , para os acoplamentos ($J_1 = 1,0$; $J_2 = 0,0, 0,5$ e $1,0$).

de várias fases do sistema.

É interessante observar que no caso limite em que $J_2 \rightarrow 0$ a Hamiltoniana torna-se:

$$(IV-29) \quad H(\lambda) = -J_1 \sum_{i=1} \{ \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z + \lambda \sigma_i^x \},$$

que identificamos como sendo a Hamiltoniana associada ao modelo de Ising. Esta Hamiltoniana tem uma única transição em $\lambda=1$. Este resultado é confirmado numericamente (para testes de nossos programas) como demonstrado na tabela (IV-1).

Devido à inconsistência dos nossos resultados nas regiões $J_2 < 0$ ou $J_2 > 1$ tanto através das técnicas de invariância conforme como com as de FSS, os estudos nessas regiões ficaram em aberto. Nos restringimos tão somente na região $0 \leq J_2 \leq 1$, que chamamos de região Ising do modelo. Antes porém de proseguirmos iremos definir as notações. Estudamos a Hamiltoniana (IV-1) com condições periódicas de contorno, o que nos garante que o espaço de Hilbert associado pode ser separado em setores com paridade (± 1) e momento ($p=2\pi k/L$; $k=0,1,\dots,L-1$) bem definidos. Nos referimos a alguns destes setores por:

-setor 1 $\rightarrow$ par de momento zero

- setor 2 $\rightarrow$ par de momento um
- setor 3 $\rightarrow$ ímpar de momento zero
- setor 4 $\rightarrow$ ímpar de momento um

A a-ésima energia do setor s será denotada por E_a^s , e E_0 é a energia do estado fundamental. Para calcularmos o valor da anomalia conforme usamos a relação (II-35), que reescrevemos abaixo dentro do formalismo Hamiltoniano:

$$(IV-30) \quad E_0/L = e_\infty - \pi c \zeta / 6L^2 ,$$

onde $\zeta=1$ no formalismo de matriz de transferência, mas no caso Hamiltoniano ζ depende do modelo, refletindo o fato de que o comportamento singular da Hamiltoniana é indiferente se multiplicarmos $\hat{H}$ por uma constante arbitrária.^{32,33,34} As relações (II-22) e (II-23) que dão as energias e momentos dos vários níveis de um bloco conforme, no formalismo Hamiltoniano são escritas como:

$$(IV-31) \quad E_{N,\bar{N}} = E_0 + 2\pi\zeta(x + N + \bar{N})/L + o(L^{-1}) ,$$

$$(IV-32) \quad K_{N,\bar{N}} = 2\pi\zeta(s + N - \bar{N})/L .$$

A constante é calculada usando-se a relação (IV-31). A diferença entre dois estados subsequentes pertencentes ao mesmo bloco conforme será $2\pi\zeta/L$. Assim, acreditando que E_1^3 e E_1^4

estejam relacionados ao mesmo operador primário teremos:

$$(IV-33) \quad \zeta = L(E_1^4 - E_1^3)/2\pi .$$

Escrevendo a relação (II-34) para dois tamanhos de redes diferentes L e L' e substituindo a relação (IV-32) para as constantes ζ_L e $\zeta_{L'}$ obtivemos como estimativa para c a relação (IV-34) a seguir:

$$(IV-34) \quad E_0/L - E_0/L' = -\pi c(\zeta_L/L^2 - \zeta_{L'}/L'^2)/6 ,$$

$$c_{L,L'} = \frac{12(E_0/L - E_0/L')}{\frac{(E_1^3 - E_1^4)_L}{L} - \frac{(E_1^3 - E_1^4)_{L'}}{L'}} , \quad c_{L,L'} \xrightarrow{L,L' \rightarrow \infty} c .$$

Sabemos que para o modelo de Ising temos $c=1/2$ (ver tabela (II-1)), e os nossos resultados, para a Hamiltoniana (1) na região $0 \leq J_2 \leq 1$, calculados através da relação (IV-34) indicam que o modelo pertence à classe de universalidade do modelo de Ising em toda a região, como vemos na tabela (IV-2).

Ainda, usando as relações (IV-30) e (IV-32), obtemos as dimensões dos operadores energia e magnético. Tais dimensões são estimadas pela extrapolação das sequências (IV-35) e (IV-36):

$$(E_2^1 - E_0) = 2\pi \zeta_{x_\varepsilon}/L + o(L^{-1}) ,$$

$$(IV-35) \quad x_{\varepsilon}^{L,L'} = L(E_2^1 - E_0)/2\pi\zeta = (E_2^1 - E_0)/(E_1^4 - E_1^3),$$

$$x_{\varepsilon}^{L,L'} \xrightarrow{L, L' \rightarrow \infty} x_{\varepsilon}.$$

$$J_1 = 1.0$$

L	L'	J ₂	c
4	6	0,0	0,599139
6	8	0,0	0,544542
8	10	0,0	0,525651
10	12	0,0	0,516759
12	14	0,0	0,511834
EXTRAPOLADO		0,0	0,5000
4	6	0,5	1,110553
6	8	0,5	0,752820
8	10	0,5	0,643606
10	12	0,5	0,593489
12	14	0,5	0,565937
EXTRAPOLADO		0,5	0,5000
4	6	1,0	1,375011
6	8	1,0	0,868599
8	10	1,0	0,716611
10	12	1,0	0,645103
12	14	1,0	0,604468
EXTRAPOLADO		1,0	0,5000

TABELA (IV-2)

Na tabela (IV-2) mostramos os resultados obtidos para a anomalia conforme c, o valor extrapolado próximo de 0,5 indica que o modelo nesta região $0 \leq J_2/J_1 \leq 1,0$ pertence a classe de universalidade do modelo Ising.

$$\langle E_1^3 - E_0 \rangle = 2\pi\zeta x_M / L + o(L^{-1}) ,$$

$$(IV-35) \quad x_M^{L,L'} = L(E_1^3 - E_0) / 2\pi\zeta = \langle E_1^3 - E_0 \rangle / \langle E_1^4 - E_1^3 \rangle ,$$

$$x_M^{L,L'} \xrightarrow{L, L' \rightarrow \infty} x_M .$$

Nas tabelas (IV-3)–(IV-8) mostramos os nossos cálculos para as dimensões dos operadores energia e magnético na região $0 \leq J_2 \leq 1$. Estes resultados reforçam o fato da região ter comportamento tipo Ising, pois obtemos as dimensões dos operadores energia ($x_\epsilon = 1$) e magnético ($x_m = 1/8 = 0,125$) do modelo de Ising. Ainda nas tabelas (IV-3)–(IV-8) calculamos também os valores correspondentes aos três primeiros níveis dos blocos conforme, referentes ao operador energia e magnético, para as interações $J_1 = 1,0$; $J_2 = 0,0, 0,5$ e $1,0$. Em nossos cálculos para se obter os autovalores E_α^s da Hamiltoniana, utilizamos o método de Lanczos discutido no apêndice (A).

Ainda na região ($0,0 \leq J_2/J_1 \leq 1$), calculamos os expoentes críticos ν e γ (equações (III-19) e (III-22)) usando as técnicas de FSS. Como já observamos ser esta uma região de comportamento tipo Ising esperamos encontrar os expoentes do modelo de Ising, $\nu=1$ e $\gamma=7/4$. Mais adiante apresentamos os resultados nas tabelas (IV-9) e (IV-10), que corroboram os resultados obtidos explorando a invariância conforme do modelo.

$$J_2 = 0,0$$

L	x_ε	$x_\varepsilon + 1, N=1, \bar{N}=0$	$x_\varepsilon + 2, N=\bar{N}=1$	$x_\varepsilon + 3, N=2, \bar{N}=1$
4	1,082392	1,847775	1,847759	1,847759
6	1,035276	1,931851	2,828427	3,346065
8	1,019591	1,961570	2,903549	3,624509
10	1,012465	1,975376	2,938288	3,757389
12	1,008628	1,982889	2,957150	3,830648
14	1,006327	1,987424	2,968521	3,875191
∞	1,0000	1,0000	3,0000	4,0013

TABELA (IV-3)

L	x_M	$x_M + 1, N=1, \bar{N}=0$	$x_M + 2, N=\bar{N}=1$	$x_M + 3, N=2, \bar{N}=1$
4	0,140652	1,140652	1,847759	1,847759
6	0,131652	1,131652	2,131652	2,863703
8	0,128685	1,128685	2,128685	2,976444
10	0,127342	1,127342	2,127342	3,029455
12	0,126620	1,126620	2,126620	3,058471
14	0,126187	1,126187	2,126618	3,076043
∞	0,1250	1,1250	2,1250	3,1251

TABELA (IV-4)

Nas tabelas (IV-3) e (V-4) apresentamos os resultados obtidos para as dimensões dos operadores energia e magnetização e de seus primeiros descendentes para o acoplamento $J_2/J_1=0,0$.

$$J_2 = 0,5$$

L	x_ε	$x_\varepsilon + 1, N=1, \bar{N}=0$	$x_\varepsilon + 2, N=\bar{N}=1$	$x_\varepsilon + 3, N=2, \bar{N}=1$
4	0,899234	1,425994	1,425994	1,425994
6	0,893342	1,459044	2,096289	2,468431
8	0,915637	1,558037	2,155049	2,641891
10	0,935975	1,649241	2,247478	2,787328
12	0,951061	1,722490	2,346632	2,921405
14	0,961871	1,778716	2,439886	3,046289
∞	1,0005	2,0008	*	*

TABELA (IV-5)

L	x_M	$x_M + 1, N=1, \bar{N}=0$	$x_M + 2, N=\bar{N}=1$	$x_M + 3, N=2, \bar{N}=1$
4	0,195792	1,195792	1,425994	1,425994
6	0,155188	1,155188	1,533280	1,973600
8	0,142071	1,142071	1,624848	2,116474
10	0,135999	1,135999	1,716818	2,263608
12	0,132677	1,132677	1,794495	2,396764
14	0,130660	1,130660	1,856536	2,511697
∞	0,1250	1,1251	2,1242	3,1282

TABELA (IV-6)

Nas tabelas (IV-5) e (V-6) apresentamos os resultados obtidos para as dimensões dos operadores energia e magnetização e de seus primeiros descendentes para o acoplamento $J_2/J_1=0,5$.

$$J_2 = 1,0$$

L	x_ε	$x_\varepsilon + 2, N=\bar{N}=1$	$x_\varepsilon + 2, N=\bar{N}=1$	$x_\varepsilon + 3, N=2, \bar{N}=1$
4	0,744006	1,323955	1,323955	1,323955
6	0,758343	1,299839	1,721339	2,056393
8	0,796233	1,365879	1,986822	2,278649
10	0,833194	1,445237	2,066906	2,531677
12	0,864387	1,521576	2,115462	2,760696
14	0,889332	1,590030	2,175441	2,830993
∞	1,0030	2,0728	*	4,0236

TABELA (IV-7)

L	x_M	$x_M + 1, N=1, \bar{N}=0$	$x_M + 2, N=1, \bar{N}=1$	$x_M + 3, N=2, \bar{N}=1$
4	0,215575	1,215575	1,323955	1,323955
6	0,164404	1,164404	1,306657	1,787306
8	0,148231	1,148231	1,371680	1,877606
10	0,140478	1,140478	1,455120	1,982652
12	0,136062	1,136062	1,536858	2,086572
14	0,133296	1,133296	1,611768	2,186142
∞	0,1250	1,1249	*	*

TABELA (IV-8)

Nas tabelas (IV-7) e (V-8) apresentamos os resultados obtidos para as dimensões dos operadores energia e magnetização e de seus primeiros descendentes para o acoplamento $J_2/J_1=1,0$. Nos pontos em que aparecem * nas tabelas indicam que nestes pontos não tivemos uma boa extrapolação, a isso atribuímos ao fato de que nestes pontos o tamanho da rede não revela o comportamento assintótico de $L \rightarrow \infty$.

$$J_1 = 1,0$$

L	L'	J ₂	ν
4	6	0,0	1,166036
6	8	0,0	1,115302
8	10	0,0	1,088696
10	12	0,0	1,072175
12	14	0,0	1,060881
EXTRAPOLADO		0,0	1,0000
4	6	0,5	1,104196
6	8	0,5	1,077095
8	10	0,5	1,065178
10	12	0,5	1,056944
12	14	0,5	1,050619
EXTRAPOLADO		0,5	1,0022
4	6	1,0	1,038935
6	8	1,0	1,017695
8	10	1,0	1,020333
10	12	1,0	1,022696
12	14	1,0	1,023834
EXTRAPOLADO		1,0	1,0000

TABELA (IV-9)

Na tabela (IV-9) exibimos os valores obtidos para o índice crítico ν para os acoplamentos $J_2/J_1=0,0; 0,5$ e $1,0$.

$$J_1 = 1,0$$

L	L'	J ₂	γ/ν
4	6	0,0	1,294692
6	8	0,0	1,477373
8	10	0,0	1,585147
10	12	0,0	1,656174
12	14	0,0	1,706481
14	16	0,0	1,743970
EXTRAPOLADO		0,0	*

TABELA (IV-10)

Na tabela (IV-10) exibimos os valores obtidos para a razão dos expoentes críticos γ/ν com o acoplamento $J_2/J_1=0,0$.

CAPÍTULO V

MODELO 2

Neste capítulo introduzimos outro modelo. Diferentemente ao caso do modelo anterior onde só estudamos a Hamiltoniana quântica, partimos neste caso de uma Hamiltoniana clássica. Na versão clássica do modelo, consideraremos uma rede quadrada e em cada ponto da rede colocamos uma variável de "spin" S (variável $Z(2)$) que pode ter apenas os valores $+1$ ("spin" para cima) ou -1 ("spin" para baixo).

A Hamiltoniana clássica é então definida por:

$$\begin{aligned} (V-1) \quad H = - \sum_{i \text{ par}} \{ & J_2 S(i,j) S(i+1,j) S(i,j+1) S(i+1,j+1) \\ & + J_1 [S(i,j) S(i,j+1) + S(i+1,j) S(i+1,j+1)] \\ & + J_1 [S(i,j) S(i+1,j) + S(i,j+1) S(i+1,j+1)] \\ & + J_2 [S(i,j) S(i+2,j)] \}, \end{aligned}$$

onde na somatória i deve ser par.

Esta Hamiltoniana apresenta interações entre quatro vizinhos com constante de interação J_2 , entre primeiros vizinhos em ambas direções com interação J_1 e entre segundos vizinhos em uma direção com interação J_2 . Assim, tanto as interações entre quatro vizinhos como as de segundos vizinhos têm a mesma constante de acoplamento J_2 . A figura (V-1) a seguir ilustra isso:

FIGURA (V-1)

A figura (V-1) ilustra as interações presentes na Hamiltoniana (V-1).

Para analisarmos o modelo usamos o método da matriz de transferência (capítulo(III)). Para escrevermos a matriz de transferência, primeiramente separamo-la nas partes diagonal e não diagonal, $T_1(c, c')$ e $T_2(c, c')$, respectivamente, sendo c e c' configurações de linhas adjacentes. Escolhendo-se a direção de propagação (direção temporal da matriz de transferência) como a direção vertical (veja figura (V-1)) podemos escrever:

$$(V-2) \quad T(c, c') = T_1(c, c') T_2(c, c').$$

É imediato verificar que como T_1 descreve as interações dentro da própria linha, então teremos:

$$(V-3) \quad T_1 = \prod_{i \text{ par}} \exp(\beta J_1 (S_i S_{i+1} + S_{i+1} S_{i+2}) + \beta J_2 S_i S_{i+2}),$$

onde $\beta=1/kT$. Consequentemente podemos escrever.

$$(V-4) \quad T_1 = \prod_{i \text{ par}} \exp(\beta J_1 (S_i S_{i+1} + S_{i+1} S_{i+2}) + \beta J_2 S_i S_{i+2}) \prod_i \delta_{S_i, S'_i}.$$

Como T_1 é diagonal, podemos considerar $S_i = \pm 1$ como autovalores do operador diagonal σ_i^x (ver capítulo IV). Substituindo os autovalores da expressão (V-4) por operadores ficamos com:

$$(V-5) \quad T_1 = \prod_{i \text{ par}} \exp(\beta J_1 (\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_{i+1}^x \sigma_{i+2}^x) + \beta J_2 \sigma_i^x \sigma_{i+2}^x).$$

A matriz T_2 liga duas linhas adjacentes como pode ser visto na expressão abaixo:

$$(V-6) \quad T_2 = \prod_{i \text{ par}} \exp(\beta J_2 S_i S_{i+1} S'_i S'_{i+1} + \beta J_1 (S_i S'_i + S_{i+1} S'_{i+1})).$$

Para expressarmos T_2 em termos de operadores, primeiro observamos que:

$$\begin{aligned}
(V-7) \quad T_2 = \prod_{i \text{ par}} & (e^{\beta(J_2 + 2J_1)} \delta_{s_i, s'_i} \delta_{s_{i+1}, s'_{i+1}} \\
& + e^{\beta(J_2 - 2J_1)} \delta_{s_i, -s'_i} \delta_{s_{i+1}, -s'_{i+1}} \\
& + e^{-\beta J_2} \delta_{s_i, -s'_i} \delta_{s_{i+1}, s'_{i+1}} + e^{-\beta J_2} \delta_{s_i, s'_i} \delta_{s_{i+1}, -s'_{i+1}}) \dots
\end{aligned}$$

Por outro lado os elementos de matriz dos operadores I e σ^z , na base σ^x diagonal (ver capítulo(IV)) são dados por:

$$(V-8) \quad \langle S_i | I | S'_i \rangle = \langle S_i | S'_i \rangle = \delta_{s_i, s'_i},$$

$$(V-9) \quad \langle S_i | \sigma_i^z | S'_i \rangle = \langle S_i | -S'_i \rangle = \delta_{s_i, -s'_i},$$

onde I é o operador identidade e σ_i^z são operadores que rodam σ^x . Usando as relações (V-8) e (V-9), podemos escrever:

$$\begin{aligned}
T_2 = \prod_{i \text{ par}} & (e^{\beta(J_2 + 2J_1)} I I + e^{\beta(J_2 - 2J_1)} \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z + e^{-\beta J_2} \sigma_i^z I \\
& + e^{-\beta J_2} I \sigma_{i+1}^z), \\
T_2 = \prod_{i \text{ par}} & e^{\beta(J_2 + 2J_1)} (1 + e^{-2\beta(J_2 + J_1)} (\sigma_i^z + \sigma_{i+1}^z) + e^{-4\beta J_1} \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z)
\end{aligned}$$

$$(V-10) \quad T_2 = C \prod_{i \text{ par}} e^{\beta \tilde{J}_1 (\sigma_i^z + \sigma_{i+1}^z) + \beta \tilde{J}_2 (\sigma_i^z \sigma_{i+1}^z)},$$

onde C é uma constante.

As novas interações $\tilde{J}_1$ e $\tilde{J}_2$ se relacionam com J_1 e J_2 nas equações abaixo:

1º) para $\sigma_i^z = \sigma_{i+1}^z = 1$

$$(V-11) \quad C e^{\beta(2\tilde{J}_1 + \tilde{J}_2)} = e^{\beta(J_2 + 2J_1)} (1 + 2e^{-2\beta(J_2 + J_1)} + e^{-4\beta J_1}).$$

2º) para $\sigma_i^z = -\sigma_{i+1}^z = 1$

$$(V-12) \quad C e^{-\beta J_2} = e^{\beta(J_2 + 2J_1)} (1 - e^{-4\beta J_1}).$$

3º) para $\sigma_i^z = \sigma_{i+1}^z = -1$

$$(V-13) \quad C e^{-2\beta \tilde{J}_1 + \beta \tilde{J}_2} = e^{\beta J_2 + 2\beta J_1} (1 - 2e^{-2\beta(J_2 + J_1)} + e^{-4\beta J_1}).$$

Dividindo-se as equações (V-13) e (V-12) por (V-11) obtemos,

$$(V-14) \quad \tilde{x}_2 = \frac{1 - 2x_1 + x_2}{1 + 2x_1 + x_2},$$

$$(V-15) \quad \tilde{x}_1 = \frac{1 - x_2}{1 + 2x_1 + x_2},$$

respectivamente, onde x_1 , x_2 , $\tilde{x}_1$ e $\tilde{x}_2$ são dados por:

$$(V-16) \quad x_1 = e^{-2\beta(J_2 + J_1)}, \quad \tilde{x}_1 = e^{-2\beta(\tilde{J}_2 + \tilde{J}_1)},$$

$$(V-17) \quad x_2 = e^{-4\beta J_1}, \quad \tilde{x}_2 = e^{-4\beta \tilde{J}_1}.$$

Podemos verificar que este modelo também apresenta a propriedade de auto-dualidade (capítulo (IV)). As variáveis duais são dadas por:

$$(V-18) \quad \tilde{\sigma}_i^z = \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x,$$

$$(V-19) \quad \tilde{\sigma}_i^x = \prod_{k=0}^{i-1} \sigma_{i-k}^z.$$

É imediato ver que estas novas variáveis satisfazem a mesma álgebra que as variáveis originais.

Para escrevermos T_1 e T_2 em função das variáveis duais $\tilde{\sigma}^x$ e $\tilde{\sigma}^z$ derivamos os seguintes resultados:

$$\tilde{\sigma}_i^x \tilde{\sigma}_{i-1}^x = (\sigma_i^z \sigma_{i-1}^z \dots \sigma_1^z) (\sigma_{i-1}^z \sigma_{i-2}^z \dots \sigma_1^z) = \sigma_i^z,$$

$$\tilde{\sigma}_i^x \tilde{\sigma}_{i-2}^x = (\sigma_i^z \sigma_{i-1}^z \dots \sigma_1^z) (\sigma_{i-2}^z \sigma_{i-3}^z \dots \sigma_1^z) = \sigma_i^z \sigma_{i-1}^z,$$

$$\tilde{\sigma}_i^z \tilde{\sigma}_{i+1}^z = \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x \sigma_{i+1}^z \sigma_{i+2}^x = \sigma_i^x \sigma_{i+2}^x ,$$

o que nos possibilita a escrever T_1 e T_2 como:

$$(V-20) \quad T_1 = \prod_{i \text{ par}} \exp(\beta J_1 (\tilde{\sigma}_i^z + \tilde{\sigma}_{i+1}^z) + \beta J_2 \tilde{\sigma}_i^z \tilde{\sigma}_{i+1}^z) ,$$

$$(V-21) \quad T_2 = \prod_{i \text{ par}} \exp(\beta \tilde{J}_1 (\tilde{\sigma}_i^x \tilde{\sigma}_{i-1}^x + \tilde{\sigma}_i^x \tilde{\sigma}_{i+1}^x) + \beta \tilde{J}_2 \tilde{\sigma}_{i-1}^x \tilde{\sigma}_{i+1}^x) .$$

Comparando-se a matriz de transferência dual com a original vemos que pela transformação de dualidade $(J_1, J_2) \rightarrow (\tilde{J}_1, \tilde{J}_2)$ Em particular a linha autodual ocorre quando:

$$(V-22) \quad \tilde{J}_1 = J_1, \quad \tilde{J}_2 = J_2 ,$$

o que implica (veja (V-16) e (V-17)):

$$(V-23) \quad \tilde{x}_1 = x_1, \quad \tilde{x}_2 = x_2 .$$

Por outro lado, das equações (V-14) e (V-15) obtemos:

$$(V-24) \quad (1 + 2x_1 + x_2)(1 + 2\tilde{x}_1 + \tilde{x}_2) = 4 ,$$

que juntamente com (V-23) nos dá a equação da linha dual:

(V-25)

$$x_2 = 1 - 2x_1 .$$

Na figura (V-2) desenhamos esta linha autodual (curva (b)).

É óbvio verificar que a Hamiltoniana (V-1) com $J_2=0$ reproduz o modelo de Ising. Consequentemente de (V-16) e (V-17) o caminho termodinâmico (curva (a)).

(V-26)

$$x_2 = x_1^2 ,$$

no diagrama (x_2, x_1) é o caminho do modelo de Ising (veja figura (V-2)).

FIGURA (V-2)

Na figura (V-2) temos os gráficos onde o modelo é dual (curva (b)) e onde o modelo reproduz o modelo de Ising (curva (a)).

Concluimos portanto que no ponto de cruzamento das curvas dadas pelas equações (V-24) e (V-26) (curvas (a) e (b) na figura (V-2)) temos o ponto de autodualidade (crítico) do modelo Ising. Analizaremos agora a equação (V-24) nos limites de $x_1 \rightarrow 0$ e $x_2 \rightarrow 0$. No caso em que $x_1 \rightarrow 0$ e $x_2 \rightarrow 1$, vemos das equações (V-16) e (V-17) que $J_1 \rightarrow 0$ e $J_2 \rightarrow \infty$. Para vermos o que corresponde fisicamente tal limite reescrevemos o Hamiltoniano clássico H' como:

$$(V-27) \quad -H' = J_2 \sum_{i \text{ par}} \langle S(i,j) S(i+1,j) S(i,j+1) S(i+1,j+1) \\ + S(i,j) S(i+2,j) \rangle .$$

Consideremos agora a seguinte transformação de variável $\{S\} \rightarrow \{\gamma\}$:

$$\begin{aligned} S(1,j) &= \gamma(1,j) , \\ S(2,j) S(1,j) &= \gamma(2,j) , \\ S(3,j) S(2,j) &= \gamma(3,j) , \\ &\vdots \\ S(1+i,j) S(i,j) &= \gamma(i+1,j) , \\ &\vdots \end{aligned}$$

cujo inverso nos dá:

$$\begin{aligned} S(1,j) &= \gamma(1,j) , \\ S(2,j) &= \gamma(2,j) \gamma(1,j) , \\ S(3,j) &= \gamma(3,j) \gamma(2,j) \gamma(1,j) , \end{aligned}$$

$$S(i,j) = \gamma(i,j)\gamma(i-1,j)\dots\gamma(1,j) ,$$

É fácil ver que as interações que aparecem em (V-27) podem ser reescritas em termos das novas variáveis por:

$$S(i,j)S(i+1,j)S(i,j+1)S(i+1,j+1) = \gamma(i+1,j)\gamma(i+1,j+1) ,$$

$$S(i,j)S(i+2,j) = S(i,j)S(i+1,j)S(i+1,j)S(i+2,j) =$$

$$\gamma(i+1,j)\gamma(i+2,j) ,$$

Assim podemos escrever a Hamiltoniana (V-27) nas novas variáveis como:

$$(V-28) \quad -H'(\gamma) = -J_2 \sum_{i \text{ ímpar}} \{ \gamma(i,j)\gamma(i,j+1) + \gamma(i,j)\gamma(i+1,j) \} .$$

A Hamiltoniana (V-28) é a de Ising isotropico, porém como i só assume valores ímpares vemos que a rede está desacoplada como está ilustrado na figura (V-2):

Isto nos diz que neste limite ($x_1 \rightarrow 0$) a transição de fase é única e é como no modelo de Ising unidimensional ocorrendo em $T=0$ ou $x_2=1$.

No outro caso limite em que $x_2 \rightarrow 0$, da relação (V-15) vemos

FIGURA (V-3)

A figura (V-3) ilustra as interações presentes na Hamiltoniana (V-28).

que $J_1 \rightarrow \infty$ e $J_2 \rightarrow -\infty$ o que nos impossibilita analisarmos este limite. Contudo pelo fato da única simetria que o modelo exibe é $Z(2)$; grupo este que não possui nenhum subgrupo, esperamos que a reta autodual coincida com a reta de transição de fase para todo espaço (x_1, x_2) .

A HAMILTONIANA QUANTICA

A Hamiltoniana quântica $\hat{H}$ associada ao modelo é definida por (ver capítulo (III)):

$$(V-29) \quad \hat{T} = \exp(-\tau \hat{H}) ,$$

sendo τ o espaçamento da rede na direção temporal. No limite em que $\tau \rightarrow 0$ a Hamiltoniana associada é mais simples. Existem várias maneiras possíveis de se obter uma Hamiltoniana quântica associada a um dado modelo. Aqui obteremos uma Hamiltoniana que seja uma boa descrição em torno da reta autodual do modelo, (em que $J_1 = \tilde{J}_1$, $J_2 = \tilde{J}_2$). Para isto fazemos:

$$(V-30) \quad J_1, J_2, \tilde{J}_1 \text{ e } \tilde{J}_2 \propto \tau.$$

E a variável λ que desempenhará o papel da temperatura é definida por:

$$(V-31) \quad \tilde{J}_1 = \lambda J_1,$$

$$\tilde{J}_2 = \lambda J_2.$$

Desta forma a Hamiltoniana quântica é escrita como:

$$(V-32) \quad H(\lambda, J_1, J_2) = - \sum_i \{ J_1 (\sigma_{2i}^x \sigma_{2i+1}^x + \sigma_{2i+1}^x \sigma_{2i+2}^x) \\ + J_2 \sigma_{2i}^x \sigma_{2i+2}^x \} - \lambda \sum_i \{ J_1 (\sigma_{2i}^z + \sigma_{2i+1}^z) + J_2 \sigma_{2i}^z \sigma_{2i+1}^z \},$$

onde vemos que a propriedade de autodualidade do modelo em sua versão Euclidiana foi preservada, pois em termos das variáveis duais (relações (V-18) e (V-19) teremos:

$$\begin{aligned}
(V-33) \quad H(1/\lambda, J_1, J_2) = & - \sum_i \{ J_1 (\tilde{\sigma}_{2i}^z + \tilde{\sigma}_{2i+1}^z) + J_2 \tilde{\sigma}_{2i}^z \tilde{\sigma}_{2i+1}^z \} \\
& - \lambda \sum \{ J_1 (\tilde{\sigma}_{2i}^x \tilde{\sigma}_{2i+1}^x + \tilde{\sigma}_{2i+1}^x \tilde{\sigma}_{2i+2}^x) + J_2 \tilde{\sigma}_{2i}^x \tilde{\sigma}_{2i+2}^x \} ,
\end{aligned}$$

o que implica em:

$$H(\lambda, J_1, J_2) = \lambda H(1/\lambda, J_1, J_2) .$$

É interessante enfatizar que enquanto no caso Euclidiano a transformação de dualidade é dada pelas relações (V-14) e (V-15) na versão Hamiltoniana temos simplesmente.

$$(\lambda, J_1, J_2) \rightarrow (1/\lambda, J_1, J_2) .$$

É imediato vermos que quando $J_2 = 0$ obtemos diretamente a Hamiltoniana de Ising. No caso em que $J_1 = 0$ teremos que fazer algum cálculo para entendermos este limite. Primeiro vamos fazer uma mudança de variável na Hamiltoniana Ising escrita a seguir:

$$(V-34) \quad H_I = - \sum_{i=1}^L (\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \lambda \sigma_i^z) .$$

Na soma da expressão (V-34) o tamanho da rede é L . Definimos agora as novas variáveis $\{\mu\}$:

$$\sigma_1^x \sigma_2^x = \mu_1^x ,$$

$$\sigma_1^z = \mu_1^z ,$$

$$\sigma_2^x \sigma_3^x = \mu_2^x ,$$

$$\sigma_2^z = \mu_2^z ,$$

⋮

⋮

$$\sigma_{N-1}^x \sigma_N^x = \mu_{N-1}^x ,$$

$$\sigma_N^z = \mu_N^z ,$$

$$p \sigma_N^x \sigma_1^x = \mu_N^x ,$$

onde p depende da condição de contorno, sendo $+1$ para condições periódicas, -1 para antiperiódicas e 0 para livre. Substituindo estas novas variáveis na Hamiltoniana obtemos:

$$(V-35) \quad H_I(\mu) = - \sum_{i=1}^N (\mu_i^z + \lambda \mu_i^x) ,$$

onde μ_i^z e μ_i^x obedecem a seguinte álgebra:

Para $j = i$ temos:

$$(V-36) \quad \mu_i^x \mu_i^z = \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x \sigma_i^z = (\sigma_i^x \sigma_i^z) \sigma_{i+1}^x = (-\sigma_i^z \sigma_i^x) \sigma_{i+1}^x = -\mu_i^z \mu_i^x .$$

Para $j = i+1$ temos:

$$(V-37) \quad \mu_i^x \mu_{i+1}^z = \sigma_i^x (\sigma_{i+1}^x \sigma_{i+1}^z) = \sigma_i^x (-\sigma_{i+1}^z \sigma_{i+1}^x) = -\mu_{i+1}^z \mu_i^x .$$

Já para outros j é fácil ver que:

$$(V-38) \quad \mu_i^x \mu_j^z = \mu_j^z \mu_i^x .$$

Usando as relações (V-36), (V-37) e (V-38) podemos escrever a álgebra dos μ 's como:

$$(V-39) \quad [\mu_i^x, \mu_j^z] = 0 , \quad j \neq i, j \neq i+1 ,$$

$$\langle \mu_i^x, \mu_j^z \rangle = 0 , \quad j = i, j = i+1 ,$$

$$[\mu_i^x, \mu_j^x] = [\mu_i^z, \mu_j^z] = 0 , \quad i, j=1,2,\dots,L .$$

Contudo as variáveis $\langle \mu \rangle$ não são independentes, pois devem satisfazer ao vínculo $\langle p=\pm 1 \rangle$

$$(V-40) \quad \prod_{i=1}^L \mu_i^x = \sigma_1^x \sigma_2^x \sigma_2^x \sigma_3^x \sigma_3^x \sigma_4^x \dots \sigma_{N-1}^x \sigma_N^x p \sigma_N^x \sigma_1^x = p ,$$

no caso de condições livres este vínculo não existe e as variáveis $\langle \mu \rangle$ são independentes.

O Hamiltoniano de Ising (relação (V-34)) comuta com o operador paridade:

$$(V-41) \quad \hat{P} = \prod_{i=1}^L \mu_i^z = \sigma_1^z \sigma_2^z \dots \sigma_L^z .$$

Por outro lado, voltando ao nosso modelo no caso em que $J_1=0$ teremos:

$$(V-42) \quad H' = - \sum_i (\sigma_{2i}^x \sigma_{2i+2}^x + \lambda \sigma_{2i}^z \sigma_{2i+1}^z) ,$$

e então definimos a seguinte troca de variáveis:

$$(V-43) \quad \begin{aligned} \zeta_3^x &= \sigma_2^x \sigma_4^x , & \zeta_3^z &= \sigma_2^z \sigma_3^z , \\ \zeta_5^x &= \sigma_4^x \sigma_6^x , & \zeta_5^z &= \sigma_4^z \sigma_5^z , \\ \zeta_7^x &= \sigma_6^x \sigma_8^x , & \zeta_7^z &= \sigma_6^z \sigma_7^z , \\ & \vdots & & \vdots \\ \zeta_{L-1}^x &= \sigma_{L-2}^x \sigma_L^x , & \zeta_{L-1}^z &= \sigma_{L-2}^z \sigma_{L-1}^z , \\ \zeta_1^x &= p \sigma_L^x \sigma_2^x , & \zeta_1^z &= p \sigma_L^z \sigma_1^z . \end{aligned}$$

É simples verificar que estas novas variáveis $\{\zeta\}$ obedecem à mesma álgebra que as variáveis $\{\mu\}$, dada nas relações (V-39).

$$(V-44) \quad \zeta_{2i+1}^x \zeta_{2i+1}^z = \sigma_{2i}^x \sigma_{2i+2}^x \sigma_{2i}^z \sigma_{2i+1}^z = (-\sigma_{2i}^z \sigma_{2i}^x) \sigma_{2i+2}^x \sigma_{2i+1}^z$$

$$= -\zeta_{2i+1}^z \zeta_{2i+1}^x ,$$

$$(V-45) \quad \zeta_{2i+1}^x \zeta_{2i+3}^z = \sigma_{2i}^x \sigma_{2i+2}^x \sigma_{2i-2}^z \sigma_{2i+3}^z = -\zeta_{2i+3}^z \zeta_{2i+1}^x ,$$

$$(V-46) \quad \zeta_{2i+1}^x \zeta_{2i-1}^z = \sigma_{2i}^x \sigma_{2i+2}^x \sigma_{2i-1}^z \sigma_{2i-1}^z = \zeta_{2i-1}^z \zeta_{2i+1}^x .$$

Das relações (V-44), (V-45) e (V-46) podemos escrever:

$$(V-47) \quad \{\zeta_{2i+1}^x, \zeta_{2j+1}^z\} = 0 , \quad j = i \text{ ou } j = i + 1 ,$$

$$[\zeta_{2i+1}^x, \zeta_{2i+1}^z] = 0 , \quad \text{outros } i, j .$$

Da mesma forma que as variáveis $\{\mu_i\}$ introduzidas anteriormente as novas variáveis $\{\zeta_i\}$ ($i=1,2,\dots,L/2$) não são independentes, mas satisfazem ao vínculo:

$$(V-48) \quad \prod_{i=1}^{L/2} \sigma_{2i+1}^x = \sigma_2^x \sigma_4^x \sigma_4^x \sigma_6^x \dots \sigma_{L-2}^x \sigma_L^x p \sigma_L^x \sigma_2^x = p = \prod_{i=1}^{L/2} \zeta_{2i-1}^x .$$

A Hamiltoniana com as variáveis ζ é escrita como:

$$(V-49) \quad H'(\zeta) = - \sum_{i=1}^{N/2} (\zeta_{2i+1}^x + \lambda \zeta_{2i+1}^z) .$$

Assim verificamos que a Hamiltoniana H_ζ (relação (V-49)) é

expressa por variáveis que obedecem à mesma álgebra e apresenta os mesmo vínculos que as variáveis da Hamiltoniana de Ising (relação(V-35)), expressa pelas variáveis $\{\mu\}$. Portanto a Hamiltoniana do modelo 2 para $J_1 = 0$ é idêntica à de Ising como se tivéssemos uma rede de tamanho $N/2$. Isto se torna claro quando ilustramos as interações presentes na Hamiltoniana da equação (V-42):

FIGURA (V-4)

A figura (V-4) ilustra as interações presentes na Hamiltoniana (V-42), os sítios na rede de tamanho $N/2$ são representados pela linha tracejada.

onde a linha tracejada representa a variável do sistema de tamanho $L/2$. É interessante notar que a Hamiltoniana (V-38) possui uma invariância local de gauge $Z(2)$, manifesta pela comutação com qualquer operador σ_i^z com i ímpar, isto é:

$$(V-50) \quad [H', \sigma_{2i+1}^z] = 0 \quad i = 0, \dots, \frac{L-1}{2}.$$

Isto significa que na base em que σ^z é diagonal podemos

separar o espaço de Hilbert associado ao Hamiltoniano (V-38) em $2^{L/2}$ setores disjuntos indexados pelos autovalores (± 1) dos operadores σ_{2i+1}^z ($i=0,1,\dots,(L-1)/2$). Cada um destes $2^{L/2}$ setores podem ainda ser subdivididos em dois setores, correspondentes à paridade par $(+1)$ ou (-1) do operador:

$$(V-51) \quad \hat{P} = \prod_{i=1}^{L/2} \sigma_{2i}^z ,$$

pois temos a relação de comutação:

$$(V-52) \quad [H, \hat{P}] = 0 .$$

Para qualquer escolha de calibre, o que corresponde a fixar os valores:

$$(V-53) \quad \sigma_{2i}^z = s_i \quad i=0,1,\dots,(L-1)/2, \quad s_i = \pm 1 ,$$

podemos fazer a transformação canônica:

$$(V-54) \quad \sigma_{2i}^z = s_i \sigma_{2i}^z , \quad \sigma_{2i}^x = \sigma_{2i}^x ,$$

de forma a termos,

$$(V-55) \quad H' = - \sum_i \{ \sigma_{2i}^x \sigma_{2i+2}^x + \lambda \sigma_{2i}^z \} .$$

Isto nos diz que os $2^{L/2}$ setores do espaço de Hilbert de (V-38) são degenerados e do tipo Ising.

Verificaremos agora se os resultados numéricos estão de acordo com nossas previsões oriundas de cálculos algébricos. Em primeiro lugar verificaremos que o ponto crítico é único na região $J_2/J_1 \geq 0$. Na tabela (V-1) abaixo mostramos para alguns valores de J_2 e J_1 a sequência de estimativa de λ_c para $L=2, \dots, 14$ com o respectivo valor extrapolado (ver capítulo (III)).

$J_1 = 1,0$				$J_2 = 1,0$			
L_1	L_2	J_2	λ_c	J_2	λ_c	J_1	λ_c
4	6	0,0	1,005679	10	1,042867	0,0	1,047854
6	8	0,0	1,001197	10	1,014458	0,0	1,016129
8	10	0,0	1,000911	10	1,006611	0,0	1,007374
0	12	0,0	1,000494	10	1,003570	0,0	1,003983
2	14	0,0	1,000297	10	1,002144	0,0	1,002395
	∞	0,0	1,000	10	1,000	0,0	1,000

TABELA (V-1)

Os resultados obtidos para a "temperatura" crítica λ_c são mostrados na tabela (V-1), onde notamos que o valor estimado para λ_c ao longo de toda a região $J_2/J_1 \geq 0$ e 1.

Da tabela (V-1) acima vemos claramente que $\lambda_c = 1$.

O cálculo da anomalia conforme c , das dimensões dos operadores energia e magnetização e de alguns de seus descendentes (ver capítulo (IV)) são exibidos nas tabelas (V-2)-(V-13) para as interações $(J_1=1,0; J_2=0,0)$, $(J_1=1,0; J_2=0,5)$, $(J_1=1,0; J_2=1,0)$ e $(J_1=0,0; J_2=1,0)$

$$J_1=1,0 \quad J_2=0,0$$

L	L	c
4	6	0,599139
6	8	0,544542
8	10	0,525651
10	12	0,516759
12	14	0,511834
14	16	0,508813
EXTRAPOLADO		0,5007

TABELA (V-2)

$$J_1=1,0 \quad J_2=0,5$$

L	L	c
4	6	-
6	8	1,380441
8	10	0,775023
10	12	0,639854
12	14	0,586490
14	16	0,559315
EXTRAPOLADO		0,5005

TABELA (V-3)

$$J_1=J_2=1,0$$

L	L	c
4	6	2,298805
6	8	1,195718
8	10	0,821608
10	12	0,674939
12	14	0,610115
14	16	0,576436
EXTRAPOLADO		*

TABELA (V-4)

$$J_1=0,0 \quad J_2=1,0$$

L	L	c
6	8	0,717714
8	10	0,614784
10	12	0,572067
12	14	0,549803
14	16	0,536604
EXTRAPOLADO		0,5001

TABELA (V-5)

Os valores da anomalia conforme c são mostrados nas tabelas (V-2) a (V-5), onde os valores extrapolados para próximo de 0,5 indica que o modelo é do tipo Ising na região $J_2/J_1 \geq 0$.

$$J_1=1,0 \quad J_2=0,0$$

L	x_ε	$x_\varepsilon + 1, N=1, \bar{N}=0$	$x_\varepsilon + 2, N=\bar{N}=1$
4	1,082392	1,847751	
6	1,035276	1,931851	2,449489
8	1,019591	1,961570	2,903552
10	1,012465	1,975376	2,938288
12	1,008628	1,982889	2,957150
14	1,006327	1,987424	2,968521
16	1,004838	1,990369	2,975900
∞	1,000	2,000	2,999

TABELA (V-6)

$$J_1=1,0 \quad J_2=0,5$$

L	x_ε	$x_\varepsilon + 1, N=1, \bar{N}=0$	$x_\varepsilon + 2, N=\bar{N}=1$
4	1,151222	1,459097	1,864679
6	1,012715	1,445671	1,943744
8	0,997646	1,662888	2,057963
10	0,996557	1,705661	2,235962
12	0,997116	1,791501	2,405064
14	0,997731	1,847637	2,541921
∞	1,005	*	*

TABELA (V-7)

$$J_1=1,0 \quad J_2=1,0$$

L	x_ε	$x_\varepsilon+1, N=1, \bar{N}=0$	$x_\varepsilon+2, N=\bar{N}=1$
4	1,140121	1,308473	2,045798
6	1,002785	1,224266	1,981453
8	0,967583	1,268737	1,778847
10	0,966755	1,373967	1,782088
12	0,973796	1,496722	1,875458
14	0,980218	1,610730	2,004222
16	0,984903	1,704220	2,143042
∞	1,004	*	*

TABELA (V-8)

$$J_1=0,0 \quad J_2=1,0$$

L	x_ε	$x_\varepsilon+1, N=1, \bar{N}=0$	$x_\varepsilon+2, N=\bar{N}=1$
6	1,154700		
8	1,082392	1,847759	
10	1,051462	1,902113	2,227032
12	1,035276	1,931851	2,449489
14	1,025716	1,949855	2,589410
16	1,019591	1,961570	2,682547
∞	1,000	2,000	3,001

TABELA (V-9)

$$J_1=1,0 \quad J_2=0,0$$

L	x_M	$x_M+1, N=1, \bar{N}=0$	$x_M+2, N=\bar{N}=1$
4	0,140652	1,140652	1,554865
6	0,131652	1,131652	2,131652
8	0,128685	1,128685	2,128685
10	0,127342	1,127342	2,127342
12	0,126620	1,126620	2,126620
14	0,126187	1,126187	2,126187
16	0,125907	1,125907	2,125907
∞	0,125	1,125	2,125

TABELA (V-10)

$$J_1=1,0 \quad J_2=0,5$$

L	x_M	$x_M+1, N=1, \bar{N}=0$	$x_M+2, N=\bar{N}=1$
4	0,223397	1,223397	1,481844
6	0,159405	1,159405	1,530238
8	0,142708	1,142708	1,710941
10	0,135893	1,135893	1,843420
12	0,132407	1,132407	1,925490
14	0,130374	1,130374	1,977900
∞	0,125	*	*

TABELA (V-11)

$$J_1=1,0 \quad J_2=1,0$$

L	x_M	$x_M+1, N=1, \bar{N}=0$	$x_M+2, N=\bar{N}=1$
4	0,308473	1,308473	1,145012
6	0,199311	1,199311	1,362158
8	0,160967	1,160967	1,398665
10	0,145216	1,145216	1,502141
12	0,137914	1,137914	1,623685
14	0,134008	1,134008	1,735336
16	0,131670	1,131670	1,826001
∞	*	*	*

TABELA (V-12)

$$J_1=0,0 \quad J_2=1,0$$

L	x_M	$x_M+1, N=1, \bar{N}=0$	$x_M+2, N=\bar{N}=1$
6	0,154700	1,154700	
8	0,140652	1,140652	1,554865
10	0,134729	1,134729	1,752763
12	0,131652	1,131652	1,863703
14	0,129842	1,129842	1,931780
16	0,128685	1,128685	1,976444
∞	0,125	1,125	2,122

TABELA (V-13)

Nas tabelas (V-6) a (V-13) mostramos os resultados obtidos para as dimensões dos operadores energia e magnetização e de seus primeiros descendentes, os resultados são os do modelo de Ising.

Podemos observar claramente que os nossos resultados reproduzem os valores conhecidos da anomalia conforme c e dos operadores energia x_ε e magnetização x_M e seus descendentes pertencentes a classe de universalidade do modelo Ising em toda região $J_2/J_1 \geq 0$.

Na região $J_2/J_1 < 0$, temos uma competição entre várias fases, como acontece no modelo 1. O que impossibilitou devido a dificuldades de se atingir o limite assintótico achar as linhas de transição.

CAPITULO VI

.

CONCLUSÃO

Em nosso trabalho estudamos dois modelos, na criticalidade, os quais chamamos de modelo 1 e modelo 2. Neste ponto (crítico) pudemos explorar os resultados advindos da invariância conforme bem como as técnicas de teorias de escala para sistemas finitos (FSS). No modelo 1 estudamos apenas a região entre $0 \leq J_2/J_1 \leq 1$, a qual chamamos de região Ising do modelo.

O modelo 2 foi definido inicialmente através de uma Hamiltoniana clássica e a estudamos usando-se método da matriz de transferência. Neste contexto obtivemos as curvas de dualidade e do modelo Ising para o modelo clássico. Tomando o limite de tempo contínuo obtivemos a Hamiltoniana quântica associado ao modelo.

Neste último formalismo, via diagonalização numérica da Hamiltoniana, obtivemos o diagrama de fases do modelo e calculamos a anomalia conforme, as dimensões de diversos operadores (energia, magnetização e seus respectivos descendentes). Nossos resultados mostram que em toda a sua extensão o comportamento do modelo é como aquele do modelo Ising.

Ficaram em aberto para estudos a região $J_2/J_1 > 1$ no modelo 1 e $J_2/J_1 \leq 0$ em ambos os modelos. Como nesta última região há uma competição de várias fases, será um tanto difícil estudá-la pelos métodos que envolvem o estudo de redes finitas, pois precisaríamos utilizar de redes de tamanhos bem maiores que aqueles que normalmente usamos. A aplicação de técnicas de FSS em sistemas com competição é ainda um problema em aberto.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. Cunningham e.(1909), Proc. London Math. Soc. 8,77.
Bateman H. (1910), Proc. London Math. Soc. 8,223.
2. Polyakov (1970), Zh. Eksper. Teor. Fiz. Pis. Red. 12,538 [JETP Lett.12,381].
3. K. Wilson, Phys. Rev. B4.3184 (1971).
4. A. A. Belavin, A. M. Polyakov and A. B. Zamolodchikov, J. Statist. Phys. 34,763 (1984)
5. Kac. V. G. (1979) In "Group Theoretical Methods in Physics", W. Beiglbock, A. Bohm, eds., Lecture Notes in Physics vol. 94 (Springer-Verlag., New York), p.441
6. Dotsenko V1. S(1981), Nucl. Phys. B235,54
7. Dotsenko V1. S. and Fateev V. A. (1984), Nucl. Phys. B240, 312 (1985a), Nucl. Phys. B251, 691
8. Friedan D. Qiu Z. and Shenkers (1984a), Phys. Rev. Lett. 52,1575
9. Barber M. N. (1983), In "Phase Transitions and Critical Phenomena", Vol. 8 (C. Domb and J. L. Lebowitz, eds.), Academic Press, London, Ch. 2.
10. Cardy J.L. (1984a), J. Phys. A17, L385, (1984b), J. Phys. A17, L971.
11. Cardy J. L. "Conformal Invariance" Vol. 11 (C. Domb. and J. L. Lebowitz, eds.), Academic Press, London, Ch. 2.

12. Ginsparg P. "Applied Conformal Field Theory". Cambridge, MA 02138.
13. Cardy J. L., Nuclear Physys B270[FS16] (1986) 186-204.
14. H. W. J. Blöte, J. C. Cardy, and M. P. Nightingale, Phys. Rev. Lett. 56:742-745 (1986).
15. I. Affleck, Phys. Rev. Lett. 56:746-748 (1986).
16. Fisher, M. E. (1971). In "Critical Phenomena", Proceedings of the 51st Enrico Fermi Summer School, Varenna, Italy (M. S. Green, ed.), Academic Press, New York.
17. Fisher, M. E. and Barber, M. N. (1972) Phys. Rev. Lett. 28,1516 .
18. Nightingale, M. Pl (1076) Physica 83A,561.
19. Ferdinand, A. E. and Fisher, M. E. (1969) Phys. Rev. 185,832.
20. Fisher, M. E. and Ferdinand, A. E. (1967) Phys. Rev. Lett. 19,169.
21. R. R. Whitehead, A. Watt, B. J. Cole and I. Morrison, Advances in Nuclear Physics (Plenum, New York, 1977), Vol. 9, p. 123.
22. Barber, M. N. and Fisher, M. E. (1973a) Ann. Phys. 77,1.
23. Barber, M. N. (1977a) J. Phys. A 10,1335.
24. Nightingale, M. P. (1979) Proc. Kon. Ned. Akad Wet. 82,235.
25. F. C. Alcaraz, Felício J. R. D., Köberle R. and Stilck J. F. (1985) Phys. Rev. B 32,7469.
26. Kogut, J. (1979) Rev. Mod. Phys. 51,659.
27. Hamer, G. J. and Barber, M. N. (1980) J. Phys. A 13,L169.

28. Pfeuty, P., 1970, Ann. Phys. (NY) 57,79.
29. Kramers, H. A. and G. H. Wannier, 1941, Phys. Rev. 60, 252.
30. Mittag, L. and Stephen, M. J. 1971 J. Math. Phys. 12,441.
31. Elitzur, S., R. B. Pearson and J. Shigemitsu, 1979, Phys. Rev. D19,3698.
32. F. C. Alcaraz and J. R. Drugowich de Felício, J. Phys. A: Math. Gen. 17:L651-655 (1984).
33. G. V. Gehlen, V. Rittenberg and H. J. Ruegg, J. Phys. A:Math. Gen. 19:107-119 (1985).
34. F. C. Alcaraz and J. R. Drugowich de Felício, Rev. Bras. Fís. 15:128-141 (1985)
35. M. Henkel, Saclay preprint - World Scientific Pu 1990.
36. H. H. Roomany, H. W. Wyld and L. E. Holloway (1980), Phys. Rev. D Vol 21,6 1557.

APENDICE A

MÉTODO DE LANCZOS³⁰

O problema se apresenta da seguinte forma. Dado uma Hamiltoniana definida em uma rede finita de tamanho L , sendo que cada sítio tem n estados possíveis, queremos achar os autovalores de menor energia da matriz H . O método padrão de se implementar este problema no computador seria calcular todos elementos da matriz H de dimensão $n^L \times n^L$ e com o uso de rotinas padrões, transformar a matriz em tridiagonal e então diagonalizá-la. Este método no entanto nos é impraticável, pois ainda que estejamos com o modelo mais simples (simetria $Z(2)$ em uma dimensão) com $n=2$, ou seja, uma matriz H de dimensão $2^L \times 2^L$, tal matriz seria muito grande, já com $L > 8$, para ser armazenada na memória do computador.

Para se resolver este problema apelamos para o método de Lanczos.²¹ Tal método usa uma base especial que deixa a matriz H de imediato tridiagonal. Isto é, ao invés de armazenarmos $n^L \times n^L$ números, armazenamos apenas $2n^L$. Os vetores da base são obtidos da seguinte maneira. Escolhemos um estado normalizado ψ_1 arbitrário que será o primeiro elemento da base. Os outros vetores são gerados da seguinte maneira:

Aplicamos o operador H no estado ψ_1 .

$$(A-1) \quad H\psi_1 = a_1\psi_1 + b_1\psi_2,$$

onde a_1 e b_1 são constantes escolhidas de forma que ψ_2 seja normalizado e ortogonal a ψ_1 . Aplicamos H novamente, agora no

novo estado.

$$(A-2) \quad H\psi_2 = c_1\psi_1 + a_2\psi_2 + b_2\psi_3.$$

Novamente as constantes são escolhidas tal que deixe o novo vetor ψ_3 normalizado e ortogonal aos vetores restantes ψ_1 e ψ_2 . Continuando a cada aplicação um novo ψ_n é gerado, e então computamos $H\psi_n$, subtraímos as componentes com $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$ e normalizamos o termo restante ψ_{n+1} .

$$(A-3) \quad H\psi_n = \sum_{i=1}^{n-2} \alpha_i \psi_i + c_{n-1} \psi_{n-1} + a_n \psi_n + b_n \psi_{n+1}.$$

Se tomarmos a projeção da equação (A-3) nos estados ψ_j ($j \leq n-2$), teremos:

$$(A-4) \quad \langle \psi_j, H\psi_n \rangle = \alpha_j.$$

Usamos o fato de a matriz ser Hermitiana e escrevemos:

$$(A-5) \quad \langle H\psi_j, \psi_n \rangle = \alpha_j.$$

Vemos da equação (A-3) que se $n=j$, $H\psi_j$ é uma combinação linear de estados ortogonais a ψ_n . Desta forma temos:

$$(A-6) \quad \alpha_j = 0, \quad j=1,2,\dots,n-2.$$

Assim ficamos com a seguinte estrutura:

$$(A-7) \quad H\psi_1 = a_1\psi_1 + b_1\psi_2,$$

$$H\psi_2 = c_1\psi_1 + a_2\psi_2 + b_2\psi_3,$$

$$H\psi_n = c_{n-1}\psi_{n-1} + a_n\psi_n + b_n\psi_{n+1}.$$

A Hermiticidade de H também implica em $b_i = c_i$, $i=1,2,\dots$. Na base $\psi_1, \psi_2, \dots$, H tem a seguinte forma tridiagonal:

$$(8) \quad \begin{bmatrix} a_1 & b_1 & & & \\ b_1 & a_2 & b_2 & & \\ & b_2 & a_3 & b_3 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \end{bmatrix}.$$

Este processo (Lanczos) termina automaticamente quando todos os estados $\psi_1, \psi_2, \dots$ que compõem todo o espaço de H forem obtidos, ou de um subespaço conectados por elementos não nulos de H.

A principal vantagem deste método é que os menores autovalores de H podem ser obtidos após 30 a 40 passos (ainda para sistemas com 2^{18} graus de liberdade). Podemos monitorar a convergência comparando os autovalores obtidos depois de n passos com aqueles calculados após n-1 passos de Lanczos.

Para implementar este esquema no computador³⁷ é conveniente representar um estado quântico por um número inteiro (ou

combinação de inteiros), por exemplo: Para um sistema de spin com variáveis $Z(2)$ de tamanho 5. Um estado pode ser representado da forma seguinte:

$$(A-9) \quad |+-++\rangle = \langle 10110 \rangle = 22 ,$$

onde + e -, representam spins para cima e para baixo respectivamente. O número 22 obtemos da seguinte maneira:

$$(A-10) \quad \langle 10110 \rangle = 1 \times 2^4 + 0 \times 2^3 + 1 \times 2^2 + 1 \times 2^1 + 0 \times 2^0 = 22 .$$

Para aplicar uma Hamiltoniana procedemos da seguinte forma: Como exemplo aplicaremos o termo $\sigma_3^x \sigma_2^x$ no estado $\langle 10110 \rangle$. Em um computador temos uma função que realiza esta tarefa, é a função EXCLUSIVE OR (IEOR). Ilustramos abaixo como esta função realiza a tarefa:

$$(A-11) \quad \begin{array}{rclclcl} \langle 10110 \rangle & + & \langle 00110 \rangle & = & \langle 10000 \rangle, & \text{ou} \\ 22 & + & 6 & = & 16 . \end{array}$$

A parte diagonal da Hamiltoniana pode ser implementada pela função BITEST a qual retorna "verdadeira" se o bit for 1 e "falso" se o bit for 0.

Ainda podemos tornar o processo mais acelerado explorando as simetrias de momento das Hamiltonianas dos modelos.