UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS

INVARIÂNCIA CONFORME E O MODELO XY TRIPLETE

Clisthenis Ponce Constantinidis

*Dissertação apresentada ao Instituto
de Física e Química de São Carlos
para obtenção do Título de Mestre em
Física Básica*

ORIENTADOR: *Prof. Dr. Francisco Castilho Alcaraz*

DEPARTAMENTO DE FÍSICA E CIÊNCIA DOS MATERIAIS

SÃO CARLOS

1989

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE
Clisthenis Ponce Constantinidis APRESENTADA
AO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSI
DADE DE SÃO PAULO, EM 18 DE agosto DE 1989.

COMISSÃO JULGADORA:

Dr. Francisco C. Alcaraz Orientador

Dr. Nestor Felipe Caticha Alfonso

Dr. Jörgen Stilck

Agradeço,

- ao meu orientador, *Professor Francisco Castilho Alcaraz*, pela forma como conduziu este trabalho, preocupando-se sempre com o aprimoramento de minha postura diante dos problemas e deixando para mim o exemplo de um grande profissional;
- ao *Professor Roland Köberle* pela sua dedicação constante ao grupo de Mecânica Estatística do IFQSC através de discussões e preparação dos seminários;
- aos *companheiros Vitor, Nestor, Chahine, Chico, Gavião, Zé, Márcio, Nagib, Gilberto, Newtinho, Braz, Miled, ...* pelo apoio e pela amizade;
- aos *companheiros de república : Fragalli, Robson, Renato, Henrique, Carlão e Fernando*, pelos momentos de nossa convivência;
- ao *Ismar, Jô, Sheila e Patinha* : aprendemos muito juntos !;
- à *minha família* pelo incentivo constante;
- à *Irene* pela sua competência e também pela sua enorme paciência durante a datilografia deste trabalho;
- à *Teresa*, pela sua companhia durante este tempo que estamos juntos dividindo nossas dúvidas e nosso amor;
- ao *CNPq e Capes* pelo apoio financeiro.

Dedico este trabalho a :

Anna

Christiane Aristi

Fláfi

e à memória de Clisthenis Zissis

RESUMO

Estudamos nesta dissertação o conteúdo de operadores da cadeia quântica do modelo XY anisotrópico com interações de três spins (XY triplete anisotrópico). Verificamos que, como no caso de interações de dois spins, este modelo pode ser visto como uma superposição de duas cadeias quânticas Ising, que neste caso apresentam interações de três spins (Ising triplete). Como consequência, todo o conteúdo de operadores do modelo XY triplete é obtido através de um estudo sistemático do conteúdo de operadores do Ising triplete o que é feito numericamente explorando-se as relações entre as lacunas de massa e as dimensões anômalas dos operadores do modelo, previstas pela invariância conforme.

ABSTRACT

We study in this work the operator content of the staggered XY model quantum chain with three-spin interactions (staggered XY triplet). We verified that, as in the case of two-spin interactions, this model can be viewed as a superposition of two quantum Ising chains, but in this case with three-spin interactions (Ising triplet). It is possible therefore to obtain all the operator content of the XY triplet model by a systematic numerical analysis of the Ising triplet's operator content, which follows by exploiting the relations between the mass gap amplitudes and the anomalous dimension of the operators of the model, predicted by conformal invariance.

INDICE

Capítulo I - Introdução	1
Capítulo II - A Invariância Conforme	5
2.1 Introdução	6
2.2 Relação entre Invariância Conforme e Finite Size Scaling . .	7
2.3 O Espectro de Autovalores	9
2.4 Generalização das Condições de Contorno	11
2.5 A Álgebra de Virasoro	15
2.6 Construção do Espaço de Hilbert e Representações da Álgebra	17
Capítulo III - Modelo XY Triplete e Modelo de Ising Triplete	20
3.1 O Modelo XY Triplete anisotrópico	21
3.1.1 A Hamiltoniana Quântica	21
3.1.2 Transformação de Dualidade	22
3.1.3 Desacoplamento e Relações de Vínculo	22
3.1.4 Invariância de Gauge Local	24
3.2 O Modelo de Ising Triplete	26
3.3 Redução do XY Triplete Alternado ao Ising Triplete	34
Capítulo IV - Resultados Numéricos	38
4.1 O diagrama de fases	39
4.2 Invariância Translacional e Composição de Cargas	40
4.3 Dimensões Anômalas dos Operadores para Condições de Contorno Periódicas	43
4.4 Condições Toroidais de Contorno	47
4.5 Condições Livres de Contorno	50
Capítulo V - Análise Conforme do Modelo XY Triplete	53
5.1 Acoplamento das Hamiltonianas Alternadas	54
5.2 O Conteúdo de Operadores do Modelo XY Triplete	55
5.3 Conclusão	60
Apêndice I - O Método de Lanczos	62
Referências	64

C A P Í T U L O I

Introdução

O interesse em se estudar modelos com interações mais gerais do que interações de dois corpos surgiu com as evidências de efeitos importantes de atrações de muitos corpos em teorias de ligas ⁽¹⁾, problemas de superfície ^(2,3), estrutura do ^3He sólido ⁽⁴⁾, etc.

Os primeiros modelos que surgiram focalizando o problema de interações de multispin foram os modelos de Ashkin-Teller ⁽⁵⁾ e o modelo de oito vértices ⁽⁶⁾, ambos em duas dimensões. Em seguida Baxter e Wu ⁽⁷⁾ resolveram exatamente o modelo de Ising com interações de três corpos numa rede triangular, observando que na transição de fase os expoentes diferiam daqueles do modelo de Ising com interação de vizinhos próximos (Onsager).

Na década de 70 o estudo dos fenômenos críticos vivia uma época eferescente com a introdução das idéias de invariância de escala que levaram K. Wilson ⁽⁸⁾ a introduzir a técnica do grupo de renormalização. Tal técnica revelou-se um método eficiente na explicação dos valores dos expoentes críticos obtidos experimentalmente.

Por outro lado, também se iniciou neste período a investigação sobre o comportamento de sistemas finitos ao redor do ponto crítico do sistema infinito. Como as singularidades aparecem apenas nos sistemas infinitos estudou-se de que forma essas singularidades apareceriam à medida que o tamanho do sistema fosse aumentando. O primeiro trabalho que abordou a teoria de escala para sistemas finitos (finite size scaling) foi de Fisher e Barber ⁽⁹⁾, discutindo sistematicamente os efeitos de tamanho finito. A união de conceitos advindos da teoria do Grupo de Renormalização e da teoria de finite size scaling possibilitou um avanço considerável no estudo dos fenômenos críticos. Na linguagem de Grupo de Renormalização o inverso do comprimento do sistema (L^{-1}) é um parâmetro relevante da mesma forma que o campo magnético e a temperatura. O próximo passo foi dado por Nightingale que formulou o chamado "grupo de renormalização fenomenológico" possibilitando um desenvolvimento computacional enorme, ideal para o tratamento de Hamiltonianas quânticas.

Utilizando tais técnicas de finite size scaling Penson et al ⁽¹¹⁾ e Debierre e Turban ⁽¹²⁾ voltaram a estudar modelos com interações de multispin. No entanto as investigações não foram conclusivas e o comportamento crítico permaneceu sujeito a várias

Introdução

O interesse em se estudar modelos com interações mais gerais do que interações de dois corpos surgiu com as evidências de efeitos importantes de atrações de muitos corpos em teorias de ligas ⁽¹⁾, problemas de superfície ^(2,3), estrutura do ^3He sólido ⁽⁴⁾, etc.

Os primeiros modelos que surgiram focalizando o problema de interações de multispin foram os modelos de Ashkin-Teller ⁽⁵⁾ e o modelo de oito vértices ⁽⁶⁾, ambos em duas dimensões. Em seguida Baxter e Wu ⁽⁷⁾ resolveram exatamente o modelo de Ising com interações de três corpos numa rede triangular, observando que na transição de fase os expoentes diferiam daqueles do modelo de Ising com interação de vizinhos próximos (Onsager).

Na década de 70 o estudo dos fenômenos críticos vivia uma época eferescente com a introdução das idéias de invariância de escala que levaram K. Wilson ⁽⁸⁾ a introduzir a técnica do grupo de renormalização. Tal técnica revelou-se um método eficiente na explicação dos valores dos expoentes críticos obtidos experimentalmente.

Por outro lado, também se iniciou neste período a investigação sobre o comportamento de sistemas finitos ao redor do ponto crítico do sistema infinito. Como as singularidades aparecem apenas nos sistemas infinitos estudou-se de que forma essas singularidades apareceriam à medida que o tamanho do sistema fosse aumentando. O primeiro trabalho que abordou a teoria de escala para sistemas finitos (finite size scaling) foi de Fisher e Barber ⁽⁹⁾, discutindo sistematicamente os efeitos de tamanho finito. A união de conceitos advindos da teoria do Grupo de Renormalização e da teoria de finite size scaling possibilitou um avanço considerável no estudo dos fenômenos críticos. Na linguagem de Grupo de Renormalização o inverso do comprimento do sistema (L^{-1}) é um parâmetro relevante da mesma forma que o campo magnético e a temperatura. O próximo passo foi dado por Nightingale que formulou o chamado "grupo de renormalização fenomenológico" possibilitando um desenvolvimento computacional enorme, ideal para o tratamento de Hamiltonianas quânticas.

Utilizando tais técnicas de finite size scaling Penson et al ⁽¹¹⁾ e Debierre e Turban ⁽¹²⁾ voltaram a estudar modelos com interações de multispin. No entanto as investigações não foram conclusivas e o comportamento crítico permaneceu sujeito a várias

esclareceu os pontos que ainda se mantinham contraditórios.

Com o objetivo de continuar a explorar sistemas com interações de três corpos é que surgiu o interesse pelo modelo XY triplete. Como veremos nesta dissertação este modelo possui propriedades particulares que permitem uma equivalência exata com o modelo de Ising triplete. Tal equivalência mostrará que o modelo XY triplete com condições periódicas de contorno é uma composição do modelo de Ising triplete com diversas condições de contorno.

Esta dissertação está composta da seguinte maneira : no capítulo II apresentamos a teoria de invariância conforme e sua relação com o finite-size scaling. Apresentamos um modelo XY triplete e o Ising triplete no capítulo III, no capítulo IV mostramos nossos resultados numéricos referentes ao Ising triplete e finalmente no capítulo V, fazemos a análise conforme do modelo XY triplete.

CAPÍTULO II

A Invariância Conforme em duas dimensões

2.1 - Introdução

O estudo das transições de fase de segunda ordem obteve um grande avanço com a exploração das idéias de invariância de escala culminando no surgimento do Grupo de Renormalização.

Sob uma transformação de escala do espaço :

$$r \rightarrow \lambda r \quad (2.1.1)$$

onde λ é uma constante adimensional, os operadores da teoria se transformam da seguinte maneira :

$$\Phi(r) \rightarrow \lambda^{x_\Phi} \Phi(\lambda r) \quad (2.1.2)$$

sendo x_Φ a dimensão anômala do operador ϕ , dimensão esta que se relaciona com os expoentes críticos do modelo estatístico associado.

A idéia de que os sistemas físicos na criticalidade apresentassem uma simetria maior do que a simetria de escala é antiga (Polyakov ⁽²⁵⁾), porém não haviam sido obtidos resultados satisfatórios até a análise feita por BPZ ⁽¹³⁾ para sistemas bidimensionais.

Em duas dimensões as transformações conformes são geradas por todas as funções analíticas, isto é, o grupo tem dimensão infinita. BPZ mostraram que por uma transformação conforme $z' = f(z)$ existem campos que ao invés de se transformarem como (2.1.2), transformam-se como :

$$\Phi(z, \bar{z}) = \left| \frac{df(z)}{dz} \right|^\Delta \left| \frac{d\bar{f}(\bar{z})}{d\bar{z}} \right|^{\bar{\Delta}} \Phi(f(z), \bar{f}(\bar{z})) \quad (2.1.3)$$

onde $z = x_1 + ix_2$; $\bar{z} = x_1 - ix_2$; $z \rightarrow z' = f(z)$; $\bar{z} \rightarrow \bar{z}' = \bar{f}(\bar{z})$.

Os campos que se transformam segundo (2.1.3) são denominados campos primários, aos quais são associados a dimensão anômala x , dada por $x = \Delta + \bar{\Delta}$ e o spin $s = \Delta - \bar{\Delta}$.

Conhecendo a lei de transformação (2.1.3) e impondo invariância por translação, rotação, dilatação (transformação de escala) e também invariância por transformações conformes especiais é possível fixar a forma da função de dois pontos para um

campo primário. Estas propriedades implicam :

$$< \Phi(z, \bar{z}) \Phi(0, 0) > \sim \frac{1}{|z|^{2\Delta} |\bar{z}|^{2\bar{\Delta}}} = \frac{e^{-2i\theta(\Delta - \bar{\Delta})}}{|r|^{2(\Delta + \bar{\Delta})}} \tag{2.1.4}$$

onde $z = re^{i\theta}$, $\bar{z} = re^{-i\theta}$ e o spin ($s = \Delta - \bar{\Delta}$) descreve o comportamento angular da função de dois pontos (ou função de correlação na linguagem de mecânica estatística).

2.2 - Relação entre Invariância Conforme e finite size scaling

Foi Cardy ⁽²⁰⁾ quem observou que a relação das amplitudes do comprimento de correlação em sistemas finitos com as dimensões anômalas dos operadores de um modelo no seu ponto crítico, era decorrência da invariância conforme do sistema infinito. Esta relação já havia sido observada em vários trabalhos anteriores conforme mencionado na introdução. O procedimento utilizado na obtenção de tais relações foi mapear o plano infinito numa cinta de largura L com condições periódicas de contorno. Tal mapeamento é feito através da função

$$w = \frac{L}{2\pi} \ln z \tag{2.2.1}$$

Figura 1: A transformação (2.2.1) mapeia o plano z em uma cinta finita na direção $\theta(-L/2 < \theta < L/2)$ e infinita em ρ .

A seguir obteremos tais resultados no caso de operadores escalares ($\Delta = \bar{\Delta}$),

i.e. sem spin. Neste caso as funções de correlação de dois pontos do operador $\Phi(z, \bar{z})$ no plano infinito e na cinta estão relacionados da seguinte maneira (veja 2.1.3) :

$$\langle \Phi(z_1, \bar{z}_1) \Phi(z_2, \bar{z}_2) \rangle_{\text{plano}} = |w'(z_1)|^s |w'(z_2)|^s \langle \Phi(w_1, \bar{w}_1) \Phi(w_2, \bar{w}_2) \rangle_{\text{cinta}} \quad (2.2.2)$$

O comportamento crítico da função de correlação no plano infinito é dado por (2.1.4). Substituindo esta expressão juntamente com (2.2.1) em (2.2.2) temos :

$$\langle \Phi(w_1, \bar{w}_1) \Phi(w_2, \bar{w}_2) \rangle_{\text{cinta}} = (2\pi/L)^{2s} \frac{|z_1|^s |z_2|^s}{|z_1 - z_2|^{2s}} \quad (2.2.3)$$

$$\langle \Phi(w_1, \bar{w}_1) \Phi(w_2, \bar{w}_2) \rangle_{\text{cinta}} = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^{2s} \frac{|e^{\frac{2\pi}{L}w_1} - e^{\frac{2\pi}{L}w_2}|^s}{|e^{\frac{2\pi}{L}w_1} - e^{\frac{2\pi}{L}w_2}|^{2s}} \quad (2.2.4)$$

Definindo-se $w = u + iv$ ($u, v \in R$) temos finalmente

$$\langle \Phi(u_1, v_1) \Phi(u_2, v_2) \rangle_{\text{cinta}} = \frac{(2\pi/L)^{2s}}{\left(2\cosh\frac{2\pi}{L}(u_1 - u_2) - 2\cosh\frac{2\pi}{L}(v_1 - v_2)\right)^s} \quad (2.2.5)$$

Analisemos agora alguns casos limites da equação (2.2.5). Na situação em que as separações são muito menores do que L teremos :

$$\langle \Phi(u_1, v_1) \Phi(u_2, v_2) \rangle_{\text{cinta}} \sim \frac{1}{((u_1 - u_2)^2 + (v_1 - v_2)^2)^s} \quad (2.2.6)$$

que reproduz o comportamento da função de correlação no plano infinito, dado por (2.1.4)

O outro limite interessante é quando $u_1 - u_2 \gg L$. Nestas condições a função de correlação se comportará da forma :

$$\langle \Phi(u_1, v_1) \Phi(u_2, v_2) \rangle = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^{2s} e^{\frac{2\pi}{L}(u_1 - u_2)} (1 + o(e^{-\frac{u_1 - u_2}{L}}))^s \quad (2.2.7)$$

onde o decaimento exponencial surge devido à existência de uma escala no sistema (a largura L da tira). Através de (2.2.7) podemos identificar o comprimento de correlação ξ_L do sistema finito associado ao operador Φ :

$$\xi_L = \frac{L}{2\pi x} \quad (2.2.8)$$

Por outro lado sabemos que os diversos comprimentos de correlação se relacionam com as razões dos autovalores da matriz de transferência $(\lambda_0, \lambda_1 \dots)$ através da expressão

$$\xi_L^i = \left[\ln \frac{\lambda_0}{\lambda_i} \right]^{-1} \quad (2.2.9)$$

onde λ_0 é o maior autovalor da matriz de transferência e $\lambda_i (i > 0)$ são os autovalores seguintes. Portanto a cada lacuna de massa da matriz de transferência do modelo corresponderá uma dimensão anômala de algum operador.

2.3 - O Espectro de Autovalores

Devido à invariância conforme do sistema infinito no seu ponto crítico conseguimos obter as propriedades críticas dos modelos estudando-os na sua geometria finita. Como foi visto na seção anterior, a determinação das dimensões anômalas dos operadores do sistema fica praticamente reduzida à determinação dos autovalores da matriz de transferência. No entanto, a determinação do maior autovalor da matriz de transferência é idêntica à determinação do estado fundamental da Hamiltoniana quântica a ela associada, pois

$$\hat{T} = e^{-\tau \hat{H}} \quad (2.3.1)$$

onde $\hat{H}$, é em geral bastante complicada e τ é o espaçamento da rede na direção temporal. No entanto, tomando-se o limite de tempo contínuo $\tau \rightarrow 0$ (Fradkin e Susskind ⁽²⁶⁾) e mantendo-se o espaçamento na direção espacial fixo, (2.3.1) se reduz a

$$T = e^{-\tau \hat{H}} \simeq 1 - \tau \hat{H} + o(\tau^2) + \dots \quad (2.3.2)$$

onde $\hat{H}$ é a Hamiltoniana com tempo contínuo. Nesta formulação Hamiltoniana os campos $\Phi(u, v)$ tornam-se operadores $\Phi(v)$. Devido à invariância translacional em v (no caso de condições toroidais de contorno), os autoestados de $\hat{H}$ serão também estados de momento e a Hamiltoniana será diagonalizada na base $|n, k\rangle$:

$$\hat{H}|n, k\rangle = E_n|n, k\rangle \quad (2.3.3)$$

onde os autovalores do momento k serão quantizados em unidades de $2\pi/L$.

Usando-se o fato de $\hat{T}$ em (2.3.1) ser o operador de evolução temporal a função de correlação de dois pontos do operador $\Phi(u, v)$ poderá ser escrita, para $u_1 > u_2$ como :

$$\langle \Phi(u_1, v_1) \Phi(u_2, v_2) \rangle = \sum_{n, \bar{n}} | \langle 0 | \Phi(0) | n, \bar{n} \rangle |^2 e^{-(E_n - E_0)(u_1 - u_2)} e^{ik(v_1 - v_2)} \quad (2.3.4)$$

Por outro lado, a expansão da expressão (2.2.5) nos conduz ao resultado

$$\langle \Phi(u_1, v_1) \Phi(u_2, v_2) \rangle = \left(\frac{2\pi}{L} \right)^{2s} \sum_{m, \bar{m}=0} a_m a_{\bar{m}} e^{-\frac{2\pi}{L}(s+m+\bar{m})(u_1 - u_2)} e^{\frac{2\pi i}{L}(m - \bar{m})(v_1 - v_2)} \quad (2.3.5)$$

onde

$$a_m = \frac{\Gamma(x + m)}{\Gamma(x) m!} \quad (2.3.6)$$

Comparando (2.3.4) e (2.3.5) observamos que a cada operador Φ corresponde um número infinito de autoestados de H (torre conforme), com energia dada por

$$E_{m, \bar{m}}^i = E_0 + \frac{2\pi}{L}(x_i + m + \bar{m}) \quad (2.3.7)$$

e momento

$$P_{m, \bar{m}}^i = \frac{2\pi}{L}(m - \bar{m}) \quad (2.3.8)$$

onde $m, \bar{m} = 0, 1, 2, 3, \dots$

Se generalizarmos a expressão (2.3.5) para incluirmos os operadores com spin não nulo ($\Delta_i - \bar{\Delta}_i = s_i \neq 0$) obteremos :

$$P_{m, \bar{m}}^i = \frac{2\pi}{L}(s_i + m - \bar{m}) \quad (2.3.9)$$

Observamos que $m = \bar{m} = 0$ corresponderá às dimensões anômalas dos operadores primários da teoria. As amplitudes correspondentes aos estados mais altos do espectro ($m, \bar{m} > 0$) fornecerão as dimensões dos operadores denominados filhotes, que comporão a torre conforme associada ao operador primário.

Blöte et al ⁽²⁷⁾ e Affleck ⁽²⁸⁾ mostraram ainda, que, devido à invariância conforme do sistema infinito no seu ponto crítico, o comportamento assintótico do estado

fundamental para $L \rightarrow \infty$ pode ser predito. Especificamente o estado fundamental da Hamiltoniana $E_0(L)$, com condições de contorno periódicas, em $L \rightarrow \infty$ deve comportar-se como :

$$\frac{E_0(L)}{L} = e_\infty - \frac{\pi c}{6} L^{-2} + o(L^{-2}) \quad (2.3.10)$$

onde e_∞ é a energia do estado fundamental, por sítio, no limite termodinâmico. A constante c é a carga central ou anomalia conforme, que caracteriza a álgebra conforme e a classe da universalidade do modelo. As dimensões anômalas dos operadores serão representações dessa álgebra, denominada álgebra de Virasoro.

Para trabalharmos com a diagonalização de Hamiltonianas quânticas devemos levar em consideração que a Hamiltoniana é sempre definida a menos de uma constante arbitrária multiplicativa (ζ) que depende do particular modelo. Este fato implica que para o estudo de Hamiltonianas quânticas as equações (2.3.7) e (2.3.10) tomam a forma :

$$E_{m,\bar{m}}^i = E_0 + \frac{2\pi\zeta}{L}(x_i + m + \bar{m}) \quad (2.3.11)$$

e

$$\frac{E_0(L)}{L} = e_\infty - \frac{\pi\zeta c}{6} L^{-2} + o(L^{-2}) \quad (2.3.12)$$

respectivamente.

2.4 - Generalização das Condições de Contorno

O mapeamento (2.2.1) permitiu relacionar as dimensões de operadores às lacunas de massa de um sistema com condições de contorno periódicas. Cardy⁽²³⁾ generalizou este procedimento para o caso de condições de contorno livres, relacionando desta forma as dimensões de operadores de superfície às lacunas de massa do modelo finito através do mapeamento de um plano semi-infinito numa cinta, dado pela função

$$w = \frac{L}{\pi} \ln z \quad (2.4.1)$$

Tal mapeamento, de forma análoga à manipulação algébrica da última seção nos permite relacionar os expoentes de superfície x^* de um dado modelo com o comprimento

de correlação correspondente:

$$\xi_L = \frac{L}{\pi x^s} \quad (2.4.2)$$

As relações entre amplitudes de comprimento de correlação e as dimensões anômalas de operadores foram também estendidas para condições de contorno antiperiódicas. No caso do modelo de Ising, por exemplo, tal problema recai no caso de condições contorno periódicas pelo fato da antiperiodicidade ser equivalente à introdução de uma linha antiferromagnética no modelo com condições periódicas, ou seja, as constantes de acoplamento nessa linha teriam seu sinal mudado. De acordo com Kadanoff e Ceva ⁽²²⁾ esse procedimento é equivalente a se introduzir operadores desordem " μ " no sistema, duais aos operadores ordem σ (caso particular de Φ) em $\pm\infty$. Tomando $0 \leq x \leq L$ e $-\infty \leq y \leq \infty$ estas considerações são traduzidas na expressão :

$$\langle \sigma(x_1, y_1) \sigma(x_2, y_2) \rangle_{Antip.} = \lim_{y'_1, y'_2 \rightarrow \pm\infty} \frac{\langle \mu(x'_1, y'_1) \sigma(x_1, y_1) \sigma(x_2, y_2) \mu(x_2, y'_2) \rangle_{period.}}{\langle \mu(x'_1, y'_1) \mu(x'_2, y'_2) \rangle_{period.}} \quad (2.4.3)$$

em que no lado esquerdo usou-se condições de contorno antiperiódicas enquanto no lado direito tanto o numerador quanto o denominador são calculados com condições periódicas de contorno. No limite em que $y_2 - y_1 \gg L$, com $y'_1 - y_1$ e $y'_2 - y_2$ fixos, é válida a expansão à curtas distâncias de operadores, e de acordo com Kadanoff e Ceva ⁽²²⁾ a expansão $\sigma\mu$ resulta no operador fermiônico ψ . Assim será possível a identificação

$$\xi^{-1} = \frac{2\pi}{L}(x_\psi - x_\mu) \quad (2.4.4)$$

ou seja, a lacuna de massa do modelo de Ising com condições antiperiódicas de contorno está relacionada com a dimensão anômala do operador fermiônico e do operador desordem, que por dualidade é idêntica à dimensão do operador ordem x_σ .

No caso mais geral em que o modelo estatístico possui simetria global Z_N ao invés de Z_2 , como no modelo de Ising, a análise feita neste último para condições de contorno gerais pode ser facilmente estendida (Gehlen et al ⁽²⁹⁾). As Hamiltonianas de tais modelos com L sítios (Alcaraz e Köberle) ⁽³³⁾, são escritas como :

$$H^{(\tilde{Q})} = - \sum_{k=1}^{N-1} \left[a_k \sum_{i=1}^L (\sigma_i)^k + \lambda b_k \left(\sum_{i=1}^{L-1} (\Gamma_i)^k (\Gamma_{i+1})^{N-k} + w^{(N-k)\tilde{Q}} (\Gamma_L)^k (\Gamma_1)^{N-k} \right) \right] \quad (2.4.5)$$

onde os operadores σ_i e Γ_i são definidos pelos produtos tensoriais

$$\sigma_i = 1 \otimes 1 \otimes \dots \otimes \sigma \otimes 1 \dots \otimes 1 \quad (2.4.6.a)$$

$$\Gamma_i = 1 \otimes 1 \otimes \dots \otimes \Gamma \otimes 1 \dots 1 \quad (2.4.6.b)$$

sendo

$$\sigma = \begin{pmatrix} 1 & & 0 \\ & \omega & \\ & & \ddots \\ 0 & & & \omega^{N-1} \end{pmatrix} ; \Gamma = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ 1 & 0 & \ddots & 0 & 0 \\ \vdots & 1 & & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.4.7)$$

Em (2.4.5), a_k e b_k ($k = 1, \dots, N-1$) são constantes de acoplamento e λ é o análogo à temperatura. As condições de contorno toroidais, mais gerais possíveis, compatíveis com a simetria $Z(N)$ são $\Gamma_{L+1} = p\omega^{\tilde{Q}}\Gamma_1$, onde $\omega = e^{2\pi i/N}$; $\tilde{Q} = 0, 1, \dots, N-1$ e $p = 0, 1$. O caso livre corresponde a $p = 0$ e o periódico a $p = 1$ e $\tilde{Q} = 0$.

Definindo-se ainda o operador

$$\hat{Q} = \sum_{i=1}^L q_i (\text{mod } N) \quad (2.4.8)$$

onde

$$q = \begin{pmatrix} 0 & & & \\ & 1 & 0 & \\ & & \ddots & \\ & 0 & & N-1 \end{pmatrix} \quad (2.4.9)$$

verifica-se facilmente que $\hat{Q}$ comuta com (2.4.5) e possui autovalores $Q = 0, 1, \dots, N-1$ que caracterizarão os setores de carga de $H^{(\tilde{Q})}$, ou em outras palavras, o espaço de Hilbert

associado a (2.4.5) será separado em N setores, indexados pelos autovalores $Q = 0, 1, \dots, N-1$.

A partir dessas considerações é possível determinar todo o conteúdo de operadores de modelos com simetria Z_N . Através da diagonalização de $H^{(\vec{Q})}$ são feitas as análises espectroscópicas das lacunas de massa que fornecerão as dimensões anômalas dos operadores da teoria.

Para condições de contorno periódicas ($\vec{Q} = 0$) consegue-se obter as dimensões do operador energia (x_e), que está relacionada à primeira lacuna de massa do setor de carga 0. As lacunas entre os estados com energia mais baixa dos setores de carga ($Q \neq 0$) e o estado fundamental ($Q = 0$) determinam as dimensões dos operadores de ordem do modelo. Um exemplo deste fato é a análise feita por Alcaraz e Drugowich de Felício ⁽¹⁹⁾ que determinaram as dimensões dos operadores magnetização ($x_1 = \frac{1}{8}$) e polarização elétrica ⁽³⁴⁾ ($x_2 = \frac{3}{4}$) para o modelo Z_4 , que é também conhecido como modelo de Ashkin-Teller ⁽³⁰⁾ cuja Hamiltoniana é escrita como :

$$H = - \left(\sum_{i=1}^L [\sigma_i + (\sigma_i)^3 + \epsilon(\sigma_i)^2] + \right. \\ \left. \lambda \sum_{i=1}^L [\Gamma_i \Gamma_{i+1}^\dagger + \Gamma_i^\dagger \Gamma_{i+1} + \epsilon(\Gamma_i)^2 (\Gamma_{i+1})^2] \right) \quad (2.4.10) \\ + \text{ termo de superfície}$$

onde $-\frac{\sqrt{2}}{2} \leq \epsilon \leq 1$ e o termo de superfície é escrito tomando-se $\Gamma_{L+1} = \exp(i\pi\vec{Q}/2)\Gamma_1$ ($\vec{Q} = 0, 1, 2, 3$).

Assim, x_1 e x_2 são obtidos através da análise das lacunas de massa entre os níveis de menor energia nos setores $Q = 1$ e $Q = 2$ e o estado fundamental (que ocorre no setor $Q = 0$) respectivamente. Olhando para (2.4.10) podemos questionar a existência de outro operador com dimensão x_3 , que seria relacionado com estado de menor energia nos setores $Q = 3$ (veja 2.4.8). No entanto, devido a relações de simetria particulares do modelo, os setores $Q = 1$ e $Q = 3$ são degenerados no caso de condições de contorno periódicas.

Para condições livres de contorno a análise é semelhante. Neste caso, a primeira lacuna do setor de carga zero produz $x_{e,s} = 2$, que descreve o decaimento ao longo da superfície do operador energia. Os outros setores fornecem as dimensões $x_{1,s} = 1/2x_e$ e $x_{2,s} = 1$. Ainda sob estas condições de contorno continuam válidas as relações de simetria da Hamiltoniana que prevê a degenerescência entre os setores $Q = 1$ e $Q = 3$.

Analisaremos, finalmente, os casos em que $\tilde{Q} \neq 0$. A equação (2.4.4) é agora generalizada, de tal forma que as lacunas entre os níveis mais baixos dos setores Q com condições de contorno $\tilde{Q}$ e o nível mais baixo do setor 0 com condições periódicas se relacionam com as dimensões dos operadores parafermiônicos $x_{\frac{Q\tilde{Q}}{N}}$, cujo spin é dado por :

$$s = \frac{Q\tilde{Q}}{N} \quad (2.4.11)$$

Podemos ilustrar este fato tomando como referência o modelo de Potts 4-estados ($\varepsilon = 1$ em (2.4.10)). Neste modelo são previstos parafermions de spin $\frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}$. Contudo, devido ao fato do operador responsável pelas correções para scaling ser marginal ⁽³⁵⁾ aparecem neste modelo correções logarítmicas que tornam a convergência nas análises de finite size scaling bastante lentas, dificultando as estimativas das dimensões dos operadores. Recentemente Alcaraz, Barber e Batchelor ⁽³¹⁾ conseguiram superar essa dificuldade e determinaram as dimensões anômalas de todos os parafermions previstos pela teoria e os valores encontrados foram : $x_{\frac{1}{4}} = \frac{17}{32}$, $x_{\frac{1}{2}} = \frac{5}{8}$ e $x_{\frac{3}{4}} = \frac{25}{32}$.

2.5 - A Álgebra de Virasoro

Como foi visto, a invariância conforme impõe uma lei de transformações para os campos primários da teoria, dada pela equação (2.1.3).

Em duas dimensões a invariância conforme é gerada por todas as funções analíticas. Considerando transformações infinitesimais do tipo

$$z \rightarrow z + \varepsilon_n(z) \quad (2.5.1)$$

$$\bar{z} \rightarrow \bar{z} + \bar{\varepsilon}_n(\bar{z}) \quad , n \in \mathbb{Z} \quad ,$$

$\varepsilon_n(z)$ e $\bar{\varepsilon}_n(\bar{z})$ são escritas como

$$\varepsilon_n(z) = z^{n+1} \quad (2.5.2)$$

$$\bar{\varepsilon}_n(\bar{z}) = \bar{z}^{n+1}$$

cujos geradores são dados por

$$L_n = z^{n+1} \frac{d}{dz} \quad (2.5.3)$$

$$\bar{L}_n = \bar{z}^{n+1} \frac{d}{d\bar{z}}$$

que satisfazem à álgebra

$$[L_m, L_n] = (m - n)L_{m+n} \quad (2.5.4)$$

$$[\bar{L}_m, \bar{L}_n] = (m - n)\bar{L}_{m+n}$$

denominada álgebra de Virasoro.

No entanto, estudando a teoria quântica de campo, que governa o sistema na sua criticalidade, sabemos que existem simetrias que devem ser levadas em conta, implicando invariância por translações, rotações e invariância de escala do sistema. Estas simetrias são geradas pelo tensor energia-momento que é construído de tal forma que seja simétrico ($T_{\mu\nu} = T_{\nu\mu}$), $\partial_\mu T_{\mu\nu} = 0$ para que haja invariância por translações e com traço nulo ($T_{\mu\mu} = 0$), que é a condição que assegura a invariância de escala.

Devido a estas propriedades o tensor energia-momento é decomposto em duas componentes independentes $T(z)$ e $\bar{T}(\bar{z})$ que podem ser escritas como uma série de Laurent, cujos coeficientes são os geradores de álgebra de Virasoro

$$T(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} z^{-n-2} L_n \quad (2.5.5.a)$$

$$\bar{T}(\bar{z}) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \bar{z}^{-n-2} \bar{L}_n \quad (2.5.5.b)$$

que satisfazem às seguintes relações de comutação :

$$[L_m, L_n] = (m - n)L_{m+n} + c \frac{m(m^2 - 1)}{12} \delta_{m,-n} \quad (2.5.6.a)$$

$$[\bar{L}_m, \bar{L}_n] = (m - n)\bar{L}_{m+n} + c \frac{m(m^2 - 1)}{12} \delta_{m,-n} \quad (2.5.6.b)$$

onde c é uma constante denominada anomalia conforme ou carga central da álgebra de Virasoro. Para construirmos teorias unitárias, devemos impor a condição de hermiticidade para $T(z)$, o que resulta na igualdade :

$$L_m^\dagger = L_{-m} \quad (2.5.7)$$

2.6 - Construção do Espaço de Hilbert e Representações da álgebra de Virasoro

A fim de construirmos o espaço de Hilbert associado à teoria, definimos inicialmente o seu vácuo (estado de energia mais baixa). Partindo de (2.5.5) escrevemos :

$$T(z)|0\rangle = \sum_{n \in \mathbb{Z}} L_n z^{-n-2} |0\rangle \quad (2.6.1)$$

exigindo regularidade na origem ($z = 0$). Portanto, somente termos com $n \leq -2$ serão permitidos e diretamente concluímos :

$$L_n |0\rangle = 0 \quad , n \geq -1 \quad (2.6.2)$$

A invariância por translações, dilatações e transformações conformes especiais exige que o vácuo também satisfaça :

$$L_{0,\pm 1} |0\rangle = 0 \quad (2.6.3)$$

Após termos definido o vácuo construímos a partir dele o estado primário, que é criado pelo campo $\Phi(z)$ (primário) com peso Δ :

$$|\Delta\rangle = \Phi(0)|0\rangle \quad (2.6.4)$$

A expansão a curtas distâncias do tensor energia-momento e o campo primário $\Phi(z)$ é dada por :

$$[L_n, \Phi(\omega)] = \oint \frac{dz}{2\pi i} z^{n+1} T(z) \Phi(\omega) = \Delta(n+1) \omega^n \Phi(\omega) + \omega^{n+1} \partial \Phi(\omega) \quad (2.6.5)$$

de onde notamos que $[L_n, \Phi(0)] = 0, n > 0$. Desta forma $|\Delta\rangle$ satisfaz :

$$L_0|\Delta\rangle = \Delta|\Delta\rangle$$

$$L_n|\Delta\rangle = 0 \quad , \quad n > 0 \quad (2.6.6)$$

Todos os estados que satisfazem (2.6.6) são conhecidos como estados primários. No entanto existem os estados filhotes, que são construídos a partir dos estados primários na forma $L_{-n_1} \dots L_{-n_k}|\Delta\rangle$ ($n_i > 0$). Vale ainda observar que os kets relativos aos bras (2.6.6) são escritos considerando a hermiticidade dos operadores de Virasoro (2.5.7),

$$\langle\Delta|L_0 = \Delta\langle\Delta|$$

$$\langle\Delta|L_n = 0 \quad , \quad n < 0 \quad (2.6.7)$$

cujos filhotes são dados por $\langle\Delta|L_{n_1} \dots L_{n_k}$ ($n_i > 0$). Constatamos, portanto, que existe um número infinito de operadores que aniquilam o estado primário ($L_n, n > 0$) e um número infinito que geram os estados filhotes ($L_{-n}, n > 0$), aumentando o autovalor de L_0 por um fator n . Este fato pode ser observado a partir da relação (2.5.6), pois,

$$L_0 L_n |\Delta\rangle = (\Delta - n) L_n |\Delta\rangle \quad (2.6.8)$$

Desta forma podemos construir um conjunto de estados a partir do estado primário :

$$|\Delta\rangle$$

$$L_{-1}|\Delta\rangle \quad \text{nível 1}$$

$$(L_{-1})^2|\Delta\rangle \quad L_{-2}|\Delta\rangle \quad \text{nível 2}$$

$$\vdots \quad \quad \quad \vdots$$

$$L_{-k_1} L_{-k_2} \dots L_{-k_m} |\Delta\rangle; \sum_i k_i = n \quad , \quad k_1 \geq k_2 \geq \dots \geq k_m > 0 \quad \text{nível } n \quad (2.6.9)$$

A investigação da unitariedade para as representações da álgebra de Virasoro foi feita por Friedan, Quiu e Shenker ⁽¹⁴⁾. No N -ésimo nível existem $P(N)$ autoestados, onde $P(N)$ é número de maneiras possíveis de se partir em inteiros o número N . O produto interno desses estados formam uma matriz M_N de dimensão $P(N) \times P(N)$, cujos elementos dependerão de c e Δ , (os estados são construídos a partir da definição da álgebra de Virasoro). A condição de unitariedade implica que todos os autovalores de M_N sejam não negativos. Os autovalores de M_N e sua degenerescência são determinados pela fórmula do determinante de Kac:

$$\det M_N(c, \Delta) = \prod_{pq \leq N} (\Delta - \Delta_{pq}(c))^{P(N-pq)} \quad (2.6.10)$$

onde p, q são números inteiros e

$$\Delta_{pq}(c) = \frac{[(m+1)p - mq]^2 - 1}{4m(m+1)} \quad (2.6.11)$$

e m é dado por

$$c = 1 - \frac{6}{m(m+1)} \quad (2.6.12)$$

A análise feita por Friedan, Quiu e Shenker ⁽¹⁴⁾ mostrou que na região $c \geq 1, \Delta > 0$, o determinante de Kac não se anula, ou seja, a unitariedade não impõe vínculos aos valores de c e Δ . Por outro lado, para $c < 1$, os valores de Δ são quantizados com $m = 3, 4, 5, \dots$ em (2.6.12) e $1 \leq p \leq m-1; 1 \leq q \leq p$ em (2.6.11).

CAPÍTULO III

Modelo XY triplete e Modelo de Ising triplete

3.1 - O Modelo XY triplete anisotrópico

3.1.1 - A Hamiltoniana Quântica

Pretendemos tratar neste trabalho uma Hamiltoniana quântica que apresenta interações de três corpos nas componentes σ^x e σ^y , onde σ^x e σ^y são matrizes de Pauli de spin $\frac{1}{2}$. Sabemos de estudos anteriores, como por exemplo Peschel e Schotte ⁽³⁶⁾, que no caso de interações de dois corpos o modelo XY é equivalente a uma cadeia quântica de Ising dobrada. Sob a ótica da invariância conforme, o modelo de Ising possui anomalia conforme $c = \frac{1}{2}$ ($m = 3$ em (2.6.12)), enquanto o modelo XY apresenta $c = 1$ em decorrência do fato de ser um modelo de Ising dobrado. Mais recentemente, Alcaraz e Barber ⁽²⁴⁾ introduziram o modelo de Ising triplete anisotrópico, que é a versão anisotrópica do modelo de Ising com campo transversal envolvendo interações de três spins e verificaram que também neste caso a anomalia conforme assume o valor $c = 1$, independentemente do valor da anisotropia.

Para simplificação futura trataremos nesta dissertação de cadeias quânticas com números de sítios múltiplo de 6. Tal restrição deve-se ao fato de termos interações de três corpos e também, como veremos a seguir, isso nos permitirá uma decomposição do modelo original em duas cadeias quânticas independentes.

A Hamiltoniana do modelo XY triplete com condições periódicas de contorno que estudaremos, descreve a dinâmica de matrizes de Pauli ($\sigma_i^x, \sigma_i^y, \sigma_i^z$) de spin $\frac{1}{2}$ que satisfazem a álgebra $su(2)$:

$$[\sigma_i^x, \sigma_i^y] = i\sigma_i^z, \quad [\sigma_i^y, \sigma_i^z] = i\sigma_i^x, \quad [\sigma_i^z, \sigma_i^x] = i\sigma_i^y \quad (3.1.1.a)$$

$$[\sigma_i^x, \sigma_j^y] = [\sigma_i^y, \sigma_j^z] = [\sigma_i^z, \sigma_j^x] = 0 \quad p/i \neq j. \quad (3.1.1.b)$$

e é definido por

$$\begin{aligned}
H(\alpha, \lambda) = & - \left\{ \sum_{i=0}^{L-6} \left(\alpha \sigma_{3i}^x \sigma_{3i+1}^x \sigma_{3i+2}^x + \alpha \sigma_{3i+1}^x \sigma_{3i+2}^x \sigma_{3i+3}^x + \sigma_{3i+2}^x \sigma_{3i+3}^x \sigma_{3i+4}^x \right) \right. \\
& + \alpha \sigma_{L-3}^x \sigma_{L-2}^x \sigma_{L-1}^x + \alpha \sigma_{L-2}^x \sigma_{L-1}^x \sigma_0^x + \sigma_{L-1}^x \sigma_0^x \sigma_1^x + \\
& \lambda \left[\sum_{i=0}^{L-6} \left(\alpha \sigma_{3i}^y \sigma_{3i+1}^y \sigma_{3i+2}^y + \alpha \sigma_{3i+1}^y \sigma_{3i+2}^y \sigma_{3i+3}^y + \sigma_{3i+2}^y \sigma_{3i+3}^y \sigma_{3i+4}^y \right) + \right. \\
& \left. \left. \alpha \sigma_{L-3}^y \sigma_{L-2}^y \sigma_{L-1}^y + \alpha \sigma_{L-2}^y \sigma_{L-1}^y \sigma_0^y + \sigma_{L-1}^y \sigma_0^y \sigma_1^y \right] \right\}
\end{aligned} \tag{3.1.2}$$

onde α é o parâmetro que indica a anisotropia do modelo, λ desempenha o papel da temperatura e L é o tamanho da cadeia. A importância de se definir o parâmetro de anisotropia α reside no fato de se esperar que no ponto crítico as dimensões dos operadores sejam dependentes dele, já que, de uma forma análoga, esta dependência ficou bem estabelecida para o modelo de Ising triplete (Alcaraz e Barber ⁽²⁴⁾). Nesse caso o efeito de anisotropia é fazer com que surja no modelo uma linha crítica com expoentes que variam continuamente com a mesma. Esperamos que a anisotropia α em (3.1.1) possa eventualmente também produzir tal efeito.

3.1.2. Transformação de Dualidade

Efetuada a seguinte transformação : $\sigma^x \rightarrow \sigma^y, \sigma^y \rightarrow \sigma^x, \sigma^z \rightarrow -\sigma^z$ notamos que os novos operadores continuam satisfazendo às mesmas relações algébricas (3.1.1) que os antigos (transformação canônica). Isto nos permite substituir as antigas variáveis pelas novas na Hamiltoniana (3.1.2). Chegamos desta forma à seguinte expressão :

$$H(\lambda, \alpha) = \lambda H\left(\frac{1}{\lambda}, \alpha\right) \tag{3.1.3}$$

o que nos diz que o ponto crítico deve ocorrer para todo α em $\lambda = 1$, caso o modelo exiba uma única transição de fase.

3.1.3. Desacoplamento e Relações de Vínculo

Definiremos a seguir novas variáveis na tentativa de desacoplar o sistema e trabalharmos com um menor número de graus de liberdade. Lembrando que, por considerações de simetria, devemos ter L múltiplo de 6, definiremos as variáveis :

$$\eta_i^a = \sigma_{2i}^a \sigma_{2i+1}^a \sigma_{2i+2}^a \quad i = 0, \dots, \frac{L}{2} - 2;$$

$$\eta_{\frac{L}{2}-1}^a = \sigma_{L-2}^a \sigma_{L-1}^a \sigma_0^a \quad (3.1.4)$$

e

$$\xi_i^a = \sigma_{2i+3}^a \sigma_{2i+4}^a \sigma_{2i+5}^a \quad , i = 0, \dots, \frac{L}{2} - 3;$$

$$\xi_{\frac{L}{2}-2}^a = \sigma_{L-1}^a \sigma_0^a \sigma_1^a$$

$$\xi_{\frac{L}{2}-1}^a = \sigma_1^a \sigma_2^a \sigma_3^a \quad (3.1.5)$$

onde $a = x, y$.

Em termos destas novas variáveis a Hamiltoniana (3.1.2) será escrita como:

$$H(\lambda, \alpha) = - \left\{ \sum_{i=0}^{L/6-1} \left[(\alpha \eta_{3i}^x + \eta_{3i+1}^x + \alpha \eta_{3i+2}^x) + \lambda (\alpha \eta_{3i}^y + \eta_{3i+1}^y + \alpha \eta_{3i+2}^y) \right] + \right. \\ \left. \sum_{i=0}^{L/6-1} \left[(\alpha \xi_{3i}^x + \xi_{3i+1}^x + \alpha \xi_{3i+2}^x) + \lambda (\alpha \xi_{3i}^y + \xi_{3i+1}^y + \alpha \xi_{3i+2}^y) \right] \right\} \quad (3.1.6)$$

Embora aparentemente (3.1.6) seja mais simples que (3.1.2) toda a complexidade está embutida na álgebra das variáveis η^a e ξ^a . Para especificar completamente a Hamiltoniana (3.1.6) precisamos fornecer esta álgebra. É fácil ver, a partir das definições (3.1.4) e (3.1.5) que

$$[\eta_i^x, \xi_j^x] = [\eta_i^x, \xi_j^y] = 0 \quad (3.1.7.a)$$

$$\{\xi_i^x, \xi_j^y\} = \{\eta_i^x, \eta_j^y\} = 0 \quad \begin{cases} j = i \\ |i - j| = 1 \\ (i, j) = (0, \frac{L}{2} - 1), (\frac{L}{2} - 1, 0) \end{cases} \quad (3.1.7.b)$$

$$[\xi_i^x, \xi_j^y] = [\eta_i^x, \eta_j^y] = 0 \quad \text{em outros pontos} \quad (3.1.7.c)$$

Estas relações implicam que a Hamiltoniana original pode ser desacoplada em duas Hamiltonianas, pois os operadores η^a e ξ^a comutam entre si, isto é $H = H^\xi + H^\eta$. No entanto devemos observar que devido às condições de contorno esses operadores podem não ser linearmente independentes, existindo vínculos a serem satisfeitos. No caso presente em que estamos tratando com condições de contorno periódicas os vínculos surgem pelo fato de ao fazermos o produto de variáveis ξ^a e η^a ao longo da cadeia estas se cancelam, isto é :

$$\prod_{i=0}^{L/6-1} \eta_{3i}^a \eta_{3i+2}^a \xi_{3i}^a \xi_{3i+2}^a = 1 \quad a = x, y \quad (3.1.8.a)$$

$$\prod_{i=0}^{L/6-1} \eta_{3i}^a \eta_{3i+1}^a \xi_{3i}^a \xi_{3i+1}^a = 1 \quad a = x, y \quad (3.1.8.b)$$

Estas equações mostram que embora as Hamiltonianas que descrevem a dinâmica dos operadores ξ^a e η^a sejam desacopladas, a composição de seus espectros para a formação do espectro de (3.1.2) não é arbitrária.

3.1.4. Invariância de gauge local

Consideremos uma das Hamiltonianas que surgem em (3.1.6)

$$-H_D = \sum_{i=0}^{L/6-1} [(\alpha \eta_{3i}^x + \eta_{3i+1}^x + \alpha \eta_{3i+2}^x) + \lambda(\alpha \eta_{3i}^y + \eta_{3i+1}^y + \alpha \eta_{3i+2}^y)] \quad (3.1.9)$$

que denominaremos por XY triplete alternado, pois cada interação η começa num sítio par da rede. É interessante observar que podemos construir operadores locais (calibre) que comutam com (3.1.9) e que em termos das variáveis $\sigma^a(a = x, y)$ são dados por :

$$G_i^a = \sigma_{2i-1}^a \sigma_{2i}^a \sigma_{2i+1}^a \quad ; \quad i = 1, \dots, \frac{L}{2} - 1 \quad (3.1.10.a)$$

$$G_0^a = \sigma_{L-1}^a \sigma_0^a \sigma_1^a \quad (3.1.10.b)$$

A figura (3.1) ilustra as interações e a localização dos operadores locais $G_i^a(a = x, y)$

Figura 2: Os pontos representam os operadores σ^a ($a = x, y$), as linhas onduladas as interações η^a ($a = x, y$) e as chaves ilustram a atuação dos operadores de gauge locais nos sítios. As barras verticais indicam as extremidades do sistema de L (múltiplo de seis) sítios.

Observamos da figura (2) que sempre há um número par (0 ou 2) de matrizes de Pauli comum entre os operadores G_i^a e η_j^a ($a = x, y$), o que implica na comutação entre esses operadores locais G_i^a ($i = 0, \dots, \frac{L}{2} - 1$) e a Hamiltoniana (3.1.9). Este fato nos permite, na base em que σ^z é diagonal, separar o espaço de Hilbert associado a H_D em setores disjuntos indexados pelos autovalores de G_i^a , que pelo fato de $(G_i^a)^2 = 1$, valem ± 1 para qualquer valor de i . Em outras palavras, dado um estado inicial com determinados autovalores dos operadores de gauge G_i^a ($i = 0, \dots, \frac{L}{2} - 1$), tais autovalores são mantidos inalterados com a aplicação da Hamiltoniana nesse estado, observando-se dessa forma uma invariância de gauge local.

Em resumo, observamos que o modelo XY triplete (3.1.2) pode ser escrito como a soma de duas Hamiltonianas idênticas H_D (3.1.6) sujeitas aos vínculos (3.1.8). Verificamos ainda que H_D possui invariância frente às transformações de gauge locais. Veremos a seguir que H_D , ou o modelo XY triplete alternado pode ser reduzido a um Ising triplete. As configurações dos gauges do primeiro estarão intimamente relacionados às condições de contorno do segundo. A fim de prosseguirmos em nossa análise, passaremos na próxima seção a um estudo detalhado do modelo de Ising triplete.

3.2 - O Modelo de Ising triplete

Este modelo, introduzido por Alcaraz e Barber ⁽²⁴⁾, é dado pela Hamiltoniana quântica :

$$-H(\lambda, \alpha) = \sum_{i=-\infty}^{\infty} \left[\left(\sigma_{3i}^x \sigma_{3i+1}^x \sigma_{3i+2}^x + \alpha \sigma_{3i+1}^x \sigma_{3i+2}^x \sigma_{3i+3}^x + \alpha \sigma_{3i+2}^x \sigma_{3i+3}^x \sigma_{3i+4}^x \right) + \lambda \left(\alpha \sigma_{3i}^z + \sigma_{3i+1}^z + \alpha \sigma_{3i+2}^z \right) \right] \quad (3.2.1)$$

onde, como antes $\sigma_i^x, \sigma_i^y, \sigma_i^z$ são matrizes de Pauli, α é o parâmetro de anisotropia e λ desempenha o papel da temperatura. Alcaraz e Barber ⁽²⁴⁾ mostraram também que a Hamiltoniana (3.2.1) é autodual, e conseqüentemente caso o modelo exiba uma única transição de fase esta ocorrerá no ponto $\lambda = 1$.

O modelo isotrópico ($\alpha = 1$) foi proposto por Debiere e Turban ⁽¹²⁾ sob a conjectura de que este modelo pertencia à classe de universalidade do modelo de Potts de quatro estados, contudo os métodos disponíveis na época (basicamente "finite-size scaling"), não forneciam conclusões definitivas sobre esta conjectura. A questão da classe de universalidade do modelo foi retomada por Penson et al ⁽¹¹⁾ que também não conseguiram chegar a nenhuma conclusão definitiva. Já Iglói et al ⁽³²⁾ por meio de uma análise precipitada de seus dados rejeitaram totalmente a hipótese deste modelo estar na mesma classe de universalidade do modelo de Potts de quatro estados. O objetivo de Alcaraz e Barber ⁽²⁴⁾ ao introduzir a Hamiltoniana (3.2.1) foi no sentido de ampliar o espaço de parâmetros de tal forma a visualizar um quadro mais geral, que pudesse solucionar tal questão.

Para que possamos ter alguma idéia dessas conjecturas, exploremos primeiramente as simetrias do modelo de Ising triplete anisotrópico clássico introduzido por Alcaraz e Barber ⁽²⁴⁾, onde foram consideradas interações de três spins na direção horizontal (espacial) e interações de dois spins na direção vertical (temporal) de uma rede quadrada.

$$-H = \sum_{(ij)} (H_{3i,j}^x + H_{3i,j}^t) \quad (3.2.2)$$

onde

$$H_{i,j}^x = K_0 \sigma(i,j) \sigma(i+1,j) \sigma(i+2,j) + K_1 \sigma(i+1,j) \sigma(i+2,j) \sigma(i+3,j) + K_1 \sigma(i+2,j) \sigma(i+3,j) \sigma(i+4,j) \quad (3.2.3.a)$$

$$H_{i,j}^t = K_1' \sigma(i,j) \sigma(i,j+1) + K_0' \sigma(i+1,j) \sigma(i+1,j+1) + K_1' \sigma(i+2,j) \sigma(i+2,j+1) \quad (3.2.3.b)$$

K_0 e K_1 são acoplamentos na direção horizontal e K_0' e K_1' na direção temporal.

Dividindo-se a cadeia em três subredes ($\bigcirc$, $\square$, $\triangle$) observamos que este modelo é invariante por uma simetria não local $Z(2) \otimes Z(2)$, isto é, a Hamiltoniana é invariante se mudarmos todos os spins em duas quaisquer subredes. Como consequência dessa simetria o estado fundamental apresenta degenerescência quatro, que corresponderiam às seguintes configurações nas subredes :

Figura 3: Estados fundamentais do modelo (3.2.2)

Esta degenerescência do estado fundamental é idêntica à do modelo de Ashkin-Teller clássico, dado pela Hamiltoniana

$$-H = \sum_{\langle ij \rangle} [K_2(\sigma_i \sigma_j + \tau_i \tau_j) + K_4 \sigma_i \sigma_j \tau_i \tau_j] \quad (3.2.4)$$

onde K_2 e K_4 são constantes de acoplamento e a soma é efetuada sobre as ligações entre vizinhos próximos de uma rede quadrada, cujos sítios são ocupados por um par de spins σ e τ que assumem valores ± 1 .

Uma outra similaridade entre o modelo de Ising triplete e o modelo de Ashkin-Teller pode ser observada pela análise das energias das paredes de Bloch ⁽³⁷⁾ entre

diferentes configurações do estado fundamental. Na coexistência dessas configurações, a parede de Bloch é localizada quando termina uma configuração do estado fundamental e começa outra. Na tabela abaixo mostramos a coexistência das fases a, b, c , e d , designando as energias das paredes, que é o “custo” de se passar de uma configuração para outra. Da equação (3.2.3) observamos que a subrede $\bigcirc$ será associada à constante K_0 , enquanto a constante K_1 estará associada às subredes $\square$ e $\triangle$. Dados dois estados fundamentais existem três possíveis paredes de Bloch dependendo se estas se localizam entre as subredes $\square$ e $\triangle$ ou $\triangle$ e $\bigcirc$ ou $\bigcirc$ e $\square$, e é claro que a excitação mais relevante será a que for de menor energia. Observemos ainda, que pelo fato de existirem duas subredes equivalentes, duas das paredes terão mesma energia e a terceira parede terá energia maior ou menor, dependendo dos valores de K_0 e K_1 . Montamos, assim, a tabela abaixo, onde as linhas $\parallel$ designam as localizações das paredes.

Fases coexistentes	K_1 $\square$	K_1 $\triangle$	K_0 $\bigcirc$	K_1 $\square$	K_1 $\triangle$	K_0 $\bigcirc$	K_1 $\square$	K_1 $\triangle$	K_0 $\bigcirc$	Energia da parede
	+	+	$\parallel$	+	-	-	+	-	-	$2K_0$
a, b	+	+	+	$\parallel$	-	-	+	-	-	$2K_0$
	+	+	+	+	$\parallel$	-	+	-	-	$4K_1$
	+	+	$\parallel$	-	-	+	-	-	+	$2K_1$
a, c	+	+	+	$\parallel$	-	+	-	-	+	$2K_0 + 2K_1$
	+	+	+	+	$\parallel$	+	-	-	+	$2K_1$
	+	+	$\parallel$	-	+	-	-	+	-	$2K_0 + 2K_1$
a, d	+	+	+	$\parallel$	+	-	-	+	-	$2K_1$
	+	+	+	+	$\parallel$	-	-	+	-	$2K_1$
	+	-	$\parallel$	-	-	+	-	-	+	$2K_0 + 2K_1$
b, c	+	-	-	$\parallel$	-	+	-	-	+	$2K_1$
	+	-	-	+	$\parallel$	+	-	-	+	$2K_1$
	+	-	$\parallel$	-	+	-	-	+	-	$2K_1$
b, d	+	-	-	$\parallel$	+	-	-	+	-	$2K_0 + 2K_1$
	+	-	-	+	$\parallel$	-	-	+	-	$2K_1$
	-	-	$\parallel$	-	+	-	-	+	-	$2K_0$
c, d	-	-	+	$\parallel$	+	-	-	+	-	$2K_0$
	-	-	+	-	$\parallel$	-	-	+	-	$4K_1$

O mesmo tipo de análise pode ser feito para o modelo de Ashkin-Teller, dado pela Hamiltoniana (3.2.4). Podemos comparar as energias relativas das paredes para os dois modelos, ilustradas na figura abaixo :

Figura 4: Energias relativas das paredes de Bloch para o modelo de Ising triplete (esquerda) e o modelo de Ashkin-Teller (direita)

Alcaraz e Barber⁽²⁴⁾ verificaram que a análise qualitativa acima descrita, entre a similaridade destes modelos tinha relação com seus respectivos diagramas de fases. Observamos que, para o Ising triplete, quando $K_0 = K_1$ as energias das paredes se igualam, reduzindo-se ao caso do modelo isotrópico proposto por Debierre e Turban⁽¹²⁾. Analogamente, fazendo-se $K_2 = K_4$ no Ashkin-Teller as energias das paredes também se igualam, reduzindo-se ao modelo de Potts de quatro estados. Feita esta análise com a Hamiltoniana clássica, podemos voltar ao formalismo quântico.

Estenderemos aqui o trabalho de Alcaraz e Barber⁽²⁴⁾ que analisaram apenas o caso de condições de contorno periódicas. As técnicas que utilizaremos para explorar o comportamento crítico do modelo exigem que trabalhem com sistemas finitos e a primeira questão a ser considerada é o tamanho das redes que devemos utilizar. Para que as simetrias do modelo sejam preservadas devemos sempre escolher o tamanho da rede (L) múltiplo de três. A Hamiltoniana quântica do modelo de Ising triplete, que corresponde ao limite de tempo contínuo de (3.2.1) é escrita como⁽²⁴⁾ :

$$\begin{aligned}
-H(\lambda, \alpha) = & \sum_{i=0}^{L/3-6} (\sigma_{3i}^z \sigma_{3i+1}^z \sigma_{3i+2}^z + \alpha \sigma_{3i+1}^z \sigma_{3i+2}^z \sigma_{3i+3}^z + \alpha \sigma_{3i+2}^z \sigma_{3i+3}^z \sigma_{3i+4}^z) + \\
& \sigma_{L-3}^z \sigma_{L-2}^z \sigma_{L-1}^z + \alpha C_1 \sigma_{L-2}^z \sigma_{L-1}^z \sigma_0^z + \alpha C_2 \sigma_{L-1}^z \sigma_0^z \sigma_1^z + \\
& \lambda \sum_{i=0}^{L/3-1} (\alpha \sigma_{3i}^z + \sigma_{3i+1}^z + \alpha \sigma_{3i+2}^z)
\end{aligned} \tag{3.2.5}$$

onde C_1 e C_2 assumem valores ± 1 para condições toroidais de contorno e são nulas para condições livres de contorno.

A Hamiltoniana (3.2.5) possui simetria $Z(2) \otimes Z(2)$ e é possível separar o espaço de seus autoestados em setores caracterizados pelos autovalores dos operadores paridade que implementam tal simetria. Esta divisão é fundamental para a análise das amplitudes que faremos mais adiante, a fim de determinar as dimensões anômalas dos operadores do modelo. Os operadores paridade são dados por :

$$\prod_{i=0}^{L/3-1} \sigma_{3i}^z \sigma_{3i+1}^z = \hat{P}_1 \tag{3.2.6.a}$$

$$\prod_{i=0}^{L/3-1} \sigma_{3i}^z \sigma_{3i+1}^z = \hat{P}_2 \tag{3.2.6.b}$$

$$\prod_{i=0}^{L/3-1} \sigma_{3i+1}^z \sigma_{3i+2}^z = \hat{P}_1 \cdot \hat{P}_2 = \hat{P}_3 \tag{3.2.6.c}$$

Na representação matricial de H em que escolhemos a base em que σ^z é diagonal estes operadores serão diagonais.

Escolhemos agora uma nova representação para (3.2.5) definindo novas variáveis :

$$\eta_{i+1}^y = \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \sigma_{i+2}^z \quad i = 0, \dots, L-3 \tag{3.2.7.a}$$

$$\eta_{L-1}^y = C_1 \sigma_{L-2}^z \sigma_{L-1}^z \sigma_0^z \tag{3.2.7.b}$$

$$\eta_0^y = C_2 \sigma_{L-1}^z \sigma_0^z \sigma_1^z \tag{3.2.7.c}$$

$$\eta_i^z = \sigma_i^z \quad i = 0, \dots, L-1 \tag{3.2.7.d}$$

que satisfazem à álgebra :

$$\{\eta_k^j, \eta_j^i\} = 0 \begin{cases} j = L - 1, 0, 1 & \text{para } i = 0 \\ j = i - 1, i, i + 1 & \text{para } 1 \leq i \leq L - 2 \\ j = L - 2, L - 1, 0 & \text{para } i = L - 1 \end{cases} \quad (3.2.8.a)$$

$$[\eta_k^j, \eta_j^i] = 0 \quad \text{nos outros pontos} \quad (3.2.8.b)$$

$$[\eta_k^j, \eta_j^i] = [\eta_k^i, \eta_j^j] = 0 \quad \text{em todos os pontos} \quad (3.2.8.c)$$

Nessa nova representação a Hamiltoniana Ising triplete será escrita como :

$$-H(\lambda, \alpha) = \sum_{i=0}^{L/3-1} [(\lambda \eta_{3i}^j + \eta_{3i+1}^j + \alpha \eta_{3i+2}^j) + \lambda(\alpha \eta_{3i}^j + \eta_{3i+1}^j + \alpha \eta_{3i+2}^j)] \quad (3.2.9)$$

e os operadores da paridade serão dados por :

$$\prod_{i=0}^{L/3-1} \eta_{3i}^j \eta_{3i+1}^j = \hat{P}_1 \quad (3.2.10.a)$$

$$\prod_{i=0}^{L/3-1} \eta_{3i}^j \eta_{3i+2}^j = \hat{P}_2 \quad (3.2.10.b)$$

Notamos ainda que no caso de condições toroidais os operadores $(\eta_j^i, j = 0, 1, \dots, L - 1)$ não são independentes, devendo obedecer às seguintes equações de vínculos :

$$\prod_{i=0}^{L/3-1} \eta_{3i+1}^j \eta_{3i+2}^j = C_1 \quad (3.2.11.a)$$

$$\prod_{i=0}^{L/3-1} \eta_{3i}^j \eta_{3i+1}^j = C_2 \quad (3.2.11.b)$$

Convém salientar que estas relações de vínculos não são válidas para condições livres de contorno, onde C_1 e C_2 são nulos.

O que procuraremos fazer a seguir será explorar outras simetrias de forma que possamos encontrar identidades que relacionem entre si os diversos setores do espaço de Hilbert com condições de contorno definidas. Essas relações indicariam quais setores apresentariam os mesmos espectros de energia.

Consideremos a Hamiltoniana (3.2.9) efetuemos a seguinte transformação canônica (não altera a álgebra (3.2.8)) : $\eta_i^x \rightarrow \eta_i^x, \eta_i^y \rightarrow \eta_i^y (i = 0, \dots, L-1)$. Com esta transformação a Hamiltoniana (3.2.9) obedecerá à relação :

$$H(\lambda, \alpha) = \lambda H(1/\lambda, \alpha) \quad (3.2.12)$$

mostrando a autodualidade para o sistema finito.

A transformação canônica fará, no entanto, com que tenhamos modificações nas relações de vínculos (3.2.11) bem como nas expressões dos setores de paridade, que agora serão escritos como :

$$\prod_{i=0}^{\frac{L}{2}-1} \eta_{3i}^x \eta_{3i+1}^x = C_2 \quad (3.2.13.a)$$

$$\prod_{i=0}^{\frac{L}{2}-1} \eta_{3i}^x \eta_{3i+2}^x = C_1 \cdot C_2 \quad (3.2.13.b)$$

$$\prod_{i=0}^{\frac{L}{2}-1} \eta_{3i+1}^y \eta_{3i+2}^y = \hat{P}_1 \cdot \hat{P}_2 \quad (3.2.14.a)$$

$$\prod_{i=0}^{\frac{L}{2}-1} \eta_{3i}^y \eta_{3i+1}^y = \hat{P}_1 \quad (3.2.14.b)$$

A transformação canônica efetuada nos permite identificar diferentes setores do espaço de Hilbert. As equações (3.2.10), (3.2.11), (3.2.13) e (3.2.14) indicam :

$$H_{P_1, P_2}^{C_1, C_2} = H_{C_2, C_1 C_2}^{P_1 P_2, P_1} \quad (3.2.15)$$

que nos informa que o espectro do setor (P_1, P_2) da Hamiltoniana Ising triplete com condições de contorno (C_1, C_2) é idêntico ao espectro do setor $(C_2, C_1 C_2)$ da mesma Hamiltoniana com condições de contorno $(P_1 P_2, P_1)$.

Há ainda uma outra simetria a ser explorada, que é a simetria por reflexão. Fazendo-se a transformação $i \rightarrow (L-1) - i (i = 0, 1, \dots, L-1)$ nos índices, notamos que as intensidades das interações, ou seja, as distribuições das constantes de acoplamento não são

alteradas. Exemplifiquemos este fato com uma rede de $L = 6$ conforme a figura abaixo :

na parte interna do diagrama numeramos a rede original e na parte externa os sítios da rede transformada. α e β são as constantes de acoplamento, sendo que β vale 1 na Hamiltoniana (3.2.9). Começando em 0 pelo lado interno do diagrama percebemos a distribuição $\alpha\beta\alpha\alpha\beta\alpha$. Fazendo o mesmo no ponto 0 externo, no sentido horário, a mesma distribuição $\alpha\beta\alpha\alpha\beta\alpha$ é constatada. Com isso, as equações (3.2.10) e (3.2.11) serão transformadas :

$$\prod_{i=0}^{L/3-1} \eta_{3i}^x \eta_{3i+1}^x \rightarrow \prod_{i=0}^{L/3-1} \eta_{3i+1}^x \eta_{3i+2}^x = \hat{P}_1 \cdot \hat{P}_2 \quad (3.2.16.a)$$

$$\prod_{i=0}^{L/3-1} \eta_{3i}^x \eta_{3i+2}^x \rightarrow \prod_{i=0}^{L/3-1} \eta_{3i}^x \eta_{3i+2}^x = \hat{P}_2 \quad (3.2.16.b)$$

$$\prod_{i=0}^{L/3-1} \eta_{3i+1}^y \eta_{3i+2}^y \rightarrow \prod_{i=0}^{L/3-1} \eta_{3i}^y \eta_{3i+1}^y = C_2 \quad (3.2.17.b)$$

$$\prod_{i=0}^{L/3-1} \eta_{3i}^y \eta_{3i+1}^y \rightarrow \prod_{i=0}^{L/3-1} \eta_{3i+1}^y \eta_{3i+2}^y = C_1 \quad (3.2.17.b)$$

Consequimos desta forma uma outra relação de simetria que é escrita como :

$$H_{P_1, P_2}^{C_1, C_2} = H_{P_1, P_2, P_2}^{C_2, C_1} \quad (3.2.18)$$

entendida como a identificação do espectro do setor (P_1, P_2) da Hamiltoniana Ising triplete

com condições de contorno (C_1, C_2) ao setor $(P_1 P_2, P_2)$ da mesma com condições de contorno (C_2, C_1) .

A simetria por reflexão pode ainda ser explorada quando tratamos com condições livres de contorno. Nesse caso C_1 e C_2 são 0 e não existem mais as relações de vínculo (3.2.11). Seguindo os passos dados para encontrar (3.2.18) chegamos à seguinte expressão :

$$H_{P_1, P_2}^{(F)} = H_{P_1 P_2, P_1}^{(F)} \quad (3.2.19)$$

onde (F) indica que a Hamiltoniana está sendo tratada com condições livres de contorno.

3.3 - Redução do XY triplete alternado ao Ising triplete

Após termos estudado a estrutura geral do modelo de Ising triplete devemos retornar ao modelo XY triplete alternado, que apresenta invariância de gauge local, conforme vimos na seção 3.1. Para que tenhamos maior clareza faremos uma redefinição das variáveis originais (σ_i^x, σ_i^y) . As variáveis dos sítios pares $\sigma_{2i}^a (i = 0, \dots, \frac{L-2}{2}; a = x, y)$ serão denominadas por ν_i^a e as variáveis dos sítios ímpares $\sigma_{2i+1}^a (i = 0, \dots, \frac{L-2}{2}; a = x, y)$ por μ_i^a . Introduzimos agora novas variáveis envolvendo o produto de três variáveis :

$$\eta_i^a = \nu_i^a \mu_i^a \nu_{i+1}^a \quad a = x, y; \quad i = 0, \dots, \frac{L}{2} - 1 \quad (3.3.1)$$

Na base σ^y , os operadores de gauge $G_i^y (i = 0, \dots, \frac{L}{2} - 1)$ introduzidos em (3.1.9) serão diagonais e poderemos conseqüentemente separar o espaço de Hilbert associado a H_D de acordo com seus autovalores. Estes operadores, em termos das variáveis ν_i^y e μ_i^y são dados por :

$$G_i^y = \mu_{i-1}^y \nu_i^y \mu_i^y; \quad i = 1, \dots, \frac{L}{2} - 1 \quad (3.3.2.a)$$

$$G_0^y = \mu_{\frac{L}{2}-1}^y \nu_0^y \mu_0^y \quad (3.3.2.b)$$

Desta forma as interações de H_D podem ser escritas como :

$$\eta_i^y = G_i^y G_{i+1}^y \mu_{i-1}^y \mu_i^y \mu_{i+1}^y \quad i = 1, \dots, \frac{L}{2} - 2 \quad (3.3.3.a)$$

$$\eta_0^y = G_0^y G_1^y \mu_{\frac{k}{2}-1}^y \mu_0^y \mu_1^y \quad (3.3.3.b)$$

$$\eta_{\frac{k}{2}-1}^y = G_{\frac{k}{2}-1}^y G_0^y \mu_{\frac{k}{2}-2}^y \mu_{\frac{k}{2}-1}^y \mu_0^y \quad (3.3.3.c)$$

onde G_i^y ($i = 0, \dots, \frac{k}{2} - 1$) são números que valem ± 1 na base σ^y diagonal.

Este resultado mostra que se tivermos uma configuração de autovalores de G_i^y e μ_i^y as variáveis ν_i^y ($i = 0, \dots, \frac{k}{2} - 1$) serão automaticamente determinadas. Além disso, a invariância de gauge local garante que os valores de G_i^y não são alterados com a aplicação de H_D num estado. Portanto, a parte não diagonal da Hamiltoniana que é responsável pela modificação da configuração de um estado fica restrita somente à atuação dos operadores μ_i^x . Assim, η_i^x poderá ser escrito somente como :

$$\eta_i^x = \mu_i^x. \quad (3.3.4)$$

Levando em conta essas considerações podemos reescrever H_D somente em termos das variáveis μ_i^x, μ_i^y ($i = 0, \dots, \frac{k}{2} - 1$), isto é :

$$\begin{aligned} -H_D = & \sum_{i=0}^{\frac{k}{2}-1} (\alpha \mu x_{3i} + \mu_{3i+1}^x + \alpha \mu_{3i+2}^x) + \\ & \lambda \left[\sum_{i=0}^{\frac{k}{2}-2} (G_{3i+1}^y G_{3i+2}^y \mu_{3i}^y \mu_{3i+1}^y \mu_{3i+2}^y + \alpha G_{3i+2}^y G_{3i+3}^y \mu_{3i+1}^y \mu_{3i+2}^y \mu_{3i+3}^y + \right. \\ & \alpha G_{3i+3}^y G_{3i+4}^y \mu_{3i+2}^y \mu_{3i+3}^y \mu_{3i+4}^y) \\ & + G_{\frac{k}{2}-2}^y G_{\frac{k}{2}-1}^y \mu_{\frac{k}{2}-3}^y \mu_{\frac{k}{2}-2}^y \mu_{\frac{k}{2}-1}^y + \alpha G_{\frac{k}{2}-1}^y G_0^y \mu_{\frac{k}{2}-2}^y \mu_{\frac{k}{2}-1}^y \mu_0^y + \\ & \left. \alpha G_0^y G_1^y \mu_{\frac{k}{2}-1}^y \mu_0^y \mu_1^y \right] \end{aligned} \quad (3.3.5)$$

A escolha que fazemos de base é arbitrária, não interferindo na física do sistema. Por isso, apesar da Hamiltoniana (3.3.5) ter sido construída na base em que μ^y é diagonal, temos a liberdade de escolher a base μ^x diagonal, caso seja mais conveniente.

Observando as equações (3.3.3) e (3.3.4) concluímos diretamente que (3.3.5) pode ser escrita na forma (3.2.9). Além disso notamos que as variáveis definidas em (3.3.3) e (3.3.4) também obedecem a álgebra (3.2.8). Com isso verificamos que os modelos XY triplete alternado e o Ising triplete são sistemas equivalentes.

As equações (3.2.10) e (3.2.11) definem os setores de paridade e as condições de contorno do Ising triplete através dos produtórios das variáveis η^x e η^y . Naquele caso

a base η^x é diagonal e isso nos leva, por conveniência, a escolher a base μ^x diagonal na Hamiltoniana (3.3.5). A partir das definições (3.3.3) e (3.3.4) os produtórios serão :

$$\prod_{i=0}^{L/3-1} \eta_{3i}^x \eta_{3i+1}^x = \prod_{i=0}^{L/3-1} \mu_{3i}^x \mu_{3i+1}^x = \hat{P}_1 \quad (3.3.6.a)$$

$$\prod_{i=0}^{L/3-1} \eta_{3i}^x \eta_{3i+2}^x = \prod_{i=0}^{L/3-1} \mu_{3i}^x \mu_{3i+2}^x = \hat{P}_2 \quad (3.3.6.b)$$

enquanto que a equação que impõe os vínculos será escrita como :

$$\prod_{i=0}^{L/3-1} \eta_{3i+1}^y \eta_{3i+2}^y = \prod_{i=0}^{L/3-1} G_{3i}^y G_{3i+1}^y \quad (3.3.7.a)$$

$$\prod_{i=0}^{L/3-1} \eta_{3i}^y \eta_{3i+1}^y = \prod_{i=0}^{L/3-1} G_{3i}^y G_{3i+2}^y \quad (3.3.7.b)$$

Com as equações (3.3.6) e (3.3.7) conseguimos relacionar os setores de paridade e as diversas condições de contorno do Ising triplete com os setores e produtos dos gauges do XY triplete alternado.

A conclusão a que chegamos é que o modelo XY triplete pode então ser estudado através do acoplamento de dois Ising triplete vinculados, pois assim como a Hamiltoniana em η na equação (3.1.5), a Hamiltoniana em ξ gozará das mesmas propriedades. Isso significa que devemos “traduzir” as equações de vínculos formuladas para o XY triplete dadas pela equação (3.1.8) para a “linguagem” do modelo de Ising triplete.

Designando C_1 e C_2 as condições de contorno do modelo alternado escrito nas variáveis η e $\tilde{C}_1, \tilde{C}_2$ as do modelo alternado escrito nas variáveis ξ , a expressão (3.1.8) implica que estes modelos devem ser acoplados seguindo a seguinte regra para as condições de contorno

$$C_1 = \tilde{C}_1 \quad (3.3.8.a)$$

$$C_2 = \tilde{C}_2 \quad (3.3.8.b)$$

Os setores a serem acoplados, seguindo a convenção da equação anterior devem obedecer à relação :

$$P_1 = \tilde{P}_1 \tag{3.3.9.a}$$

$$P_2 = \tilde{P}_2 \tag{3.3.9.b}$$

As relações (3.3.8) e (3.3.9) indicam, portanto, que para obtermos o espectro do modelo XY triplete anisotrópico com condições periódicas de contorno, devemos acoplar espectros de dois setores idênticos do Ising triplete com condições de contorno idênticas.

C A P Í T U L O I V

Resultados Numéricos

4.1 - O diagrama de fases

No estudo feito para o modelo de Ising triplete com condições periódicas de contorno, Alcaraz e Barber ⁽²⁴⁾ levantaram o diagrama de fases do modelo utilizando o método da renormalização fenomenológica.

Ao observar as relações de simetria do modelo de Ising triplete, notamos que os setores $(P_1 = +, P_2 = -)$ e $(P_1 = -, P_2 = +)$, são degenerados quando trabalhamos com condições de contorno periódicas. Com essa consideração, Alcaraz e Barber ⁽²⁴⁾ definiram duas lacunas de massa para o modelo :

$$G_L^1(\lambda, \alpha) = E_{0,-+}^{++}(L) - E_{0,++}^{++}(L) \quad (4.1.1.a)$$

$$G_L^2(\lambda, \alpha) = E_{0,--}^{++}(L) - E_{0,++}^{++}(L) \quad (4.1.1.b)$$

onde $E_{0,P_1,P_2}^{C_1,C_2}(L)$ é o estado de menor energia do setor (P_1, P_2) do modelo com condição de contorno (C_1, C_2) e $E_{0,++}^{++}$ é o estado fundamental do modelo. O diagrama de fases foi calculado utilizando-se as equações do grupo de renormalização fenomenológico :

$$\frac{LG_L^i(\lambda, \alpha)}{(L-3)G_{L-3}^i(\lambda, \alpha)} = 1 \quad i = 1, 2 \quad (4.1.2)$$

e é ilustrado na figura (5) abaixo :

Figura 5: Diagrama de fases do modelo de Ising triplete

onde F indica uma fase ferromagnética, P paramagnética e G uma fase parcialmente ordenada.

No intervalo $0 < \alpha \leq 1$ o modelo apresenta uma única transição de fase com $\lambda = 1$, e a carga central ou anomalia conforme vale $1^{(24)}$. No ponto $\alpha = 1$, $G_L^1(1, 1) = G_L^2(1, 1)$ e se espera que o modelo esteja na classe de universalidade do modelo de Potts - 4 estados (veja discussão da seção 3.2).

Nosso trabalho nesta dissertação consistiu na generalização dessa análise na região $0 < \alpha \leq 1$ para várias condições de contorno do modelo de Ising triplete, pois como vimos nas seções precedentes, este procedimento nos permitirá determinar as dimensões anômalas dos operadores que governam a criticalidade do modelo XY triplete.

4.2 - Invariância Translacional e Composição de Cargas

Quando trabalhamos com condições de contorno periódicas notamos que devido à invariância translacional da Hamiltoniana H , os momentos p são bons números quânticos. Isto nos diz que o espaço de Hilbert associado a H pode ser separado em setores disjuntos indexados pelos autovalores do operador momento $\hat{p}(\frac{2\pi}{L}k, k = 0, 1, \dots, L-1)$. Conseqüentemente um estado genérico ($|p, \{\alpha_i\} \rangle$) com momento p é escrito como :

$$|p, \{\alpha_i\} \rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} \{ |\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_L \rangle + e^{\frac{2\pi i p}{L}} |\alpha_2, \alpha_3, \dots, \alpha_L, \alpha_1 \rangle + \dots + e^{(L-1)\frac{2\pi i p}{L}} |\alpha_L, \alpha_1, \dots, \alpha_{L-1} \rangle \} \quad (4.2.1)$$

onde os α_i caracterizam os estados.

Esta propriedade faz com que tenhamos em mãos um artifício extremamente útil para trabalharmos numericamente economizando espaço de memória e tempo computacional. O termo da esquerda em (4.2.1) é denominado representativo, pois representará todos os demais estados transladados (existentes no termo à direita) que surgirem no modelo.

Para as simetrias do modelo de Ising triplete serem preservadas, trabalhamos com cadeias que são múltiplos de 3. Os estados de momento, neste caso, a fim de preservar os autovalores dos operadores de paridade $\hat{P}_1$ e $\hat{P}_2$ (veja seção (3.2)) são introduzidos de tal forma que as translações sejam efetuadas de 3 em 3 sítios. Assim, um estado para este modelo será escrito como

$$|p, \{\alpha\} \rangle = \frac{1}{\sqrt{L/3}} \left\{ |\alpha_{1,1}\alpha_{2,1}\alpha_{3,1}; \alpha_{1,2}\alpha_{2,2}\alpha_{3,2}; \dots; \alpha_{1,L}\alpha_{2,L}\alpha_{3,L} \rangle + \right. \\ e^{\frac{2\pi i p}{L/3}} |\alpha_{1,2}\alpha_{2,2}\alpha_{3,2}; \dots; \alpha_{1,L}\alpha_{2,L}\alpha_{3,L}; \alpha_{1,1}\alpha_{2,1}\alpha_{3,1} \rangle + \dots + \\ \left. e^{\frac{2\pi i p}{L/3}(L/3-1)} |\alpha_{1,L}\alpha_{2,L}\alpha_{3,L}; \alpha_{1,1}\alpha_{2,1}\alpha_{3,1}; \dots; \alpha_{1,2}\alpha_{2,2}\alpha_{3,2} \rangle \right\} \quad (4.2.2)$$

Desta forma conseguimos introduzir, sem dificuldades, estados de momento do modelo de Ising triplete para condições de contorno periódicas. O desenvolvimento natural desta idéia é a introdução de estados de momento para condições toroidais de contorno. Esta generalização deve ser feita de tal forma que quando a Hamiltoniana do Ising triplete com dada condição de contorno é aplicada em um certo estado com momento definido p e paridade P_1, P_2 , todos os estados gerados nesta aplicação passam a ser escritos como uma justaposição de estados com momento p e paridade P_1, P_2 . O que buscamos, portanto, é a generalização da equação (4.2.2) de tal forma que os estados representativos sejam escritos corretamente para todas as condições de contorno. Tal generalização pode ser escrita como:

$$|p, \alpha \rangle = \frac{1}{\sqrt{\frac{L}{3}}} \left\{ |\alpha_{1,1}\alpha_{2,1}\alpha_{3,1}; \alpha_{1,2}\alpha_{2,2}\alpha_{3,2}; \dots; \alpha_{1,L}\alpha_{2,L}\alpha_{3,L} \rangle + \right. \\ e^{\frac{2\pi i X_1}{L/3}} |\alpha_{1,2}\alpha_{2,2}\alpha_{3,2}; \dots; \alpha_{1,L}\alpha_{2,L}\alpha_{3,L}; \alpha_{1,1}\alpha_{2,1}\alpha_{3,1} \rangle + \dots \\ \left. e^{\frac{2\pi i X_{\frac{L}{3}-1}}{L/3}} |\alpha_{1,L}\alpha_{2,L}\alpha_{3,L}; \alpha_{1,1}\alpha_{2,1}\alpha_{3,1}; \dots; \alpha_{1,2}\alpha_{2,2}\alpha_{3,2} \rangle \right\} \quad (4.2.3)$$

onde os X_i ($i = 1, 2, \dots, \frac{L}{3} - 1$) devem ser caracterizados para cada condição de contorno ($C_1, C_2 = \pm 1$) e setor ($P_1, P_2 = \pm 1$) e mais ainda, (4.2.3) deve ser reduzida a (4.2.2) no caso de condições periódicas de contorno ($C_1 = C_2 = 1$). Esperamos, no caso de condições de contorno não periódicas, que as funções X_i ($i = 1, \dots, \frac{L}{3} - 1$) definidas em (4.2.4) devam depender dos autovalores dos spins envolvidos nas translações, ao passarem pelos defeitos na rede (originado pelo fato de $C_1, C_2 \neq 1$). Definimos, para a i -ésima trinca de spins as cargas $q_{1,i}, q_{2,i}$ e $q_{3,i}$ ($i = 0, \dots, \frac{L}{3} - 1$), (± 1) como os autovalores dos operadores $\sigma_{3i}^X, \sigma_{3i+1}^X, \sigma_{3i+2}^X$. Propomos a seguinte estrutura para X_i em (4.2.4)

$$X_i = \left(\frac{\tilde{Q}_1}{2} \sum_{k=0}^{i-1} q_{1,k} + \frac{\tilde{Q}_2}{2} \sum_{k=0}^{i-1} q_{2,k} + \frac{\tilde{Q}_3}{2} \sum_{k=0}^{i-1} q_{3,k} \right) - (\Lambda - p) \cdot i \quad (4.2.4)$$

onde $i = 1, 2, \dots, L/3 - 1$ e as constantes $\tilde{Q}_j$ ($j = 1, 2, 3$) e Λ devem ser determinadas a partir das condições de contorno e p é o momento (unidades de $\frac{2\pi}{L/3}$). Para condições periódicas de

contorno $\tilde{Q}_j (j = 1, 2, 3)$ e Λ devem valer 0, reduzindo (4.2.3) a (4.2.2).

Ao efetuarmos uma translação completa num estado ($i = L/3$) devemos ter a igualdade :

$$e^{\frac{i2\pi X_L}{L/3}} = 1 \quad (4.2.5)$$

Desta forma podemos determinar os expoentes $\tilde{Q}_i$ ($i = 1, 2, 3$) da seguinte maneira

$$\left(\frac{\tilde{Q}_1}{2} q_1^{total} + \frac{\tilde{Q}_2}{2} q_2^{total} + \frac{\tilde{Q}_3}{2} q_3^{total} \right) - \Lambda = \text{inteiro} \quad (4.2.6.a)$$

onde

$$q_i^{total} = \sum_{k=0}^{L/3-1} q_{i,k} ; i = 1, 2, 3 \quad (4.2.6.b)$$

Suponhamos que para determinado valor de C_1 e C_2 tenhamos $\tilde{Q}_1 = 1, \tilde{Q}_2 = 1$ e $\tilde{Q}_3 = 0$. Nestas condições a quantidade entre parênteses em (4.2.6) contará as cargas que surgem com a aplicação de $\hat{P}_1 = \prod_{i=0}^{L/3-1} \sigma_{3i}^x \sigma_{3i+1}^x$. Portanto Λ_1 , cuja forma ainda não é conhecida será uma função de P_1 e (4.2.6) será reduzida a :

$$\frac{q_1^{total} + q_2^{total}}{2} - \Lambda(P_1) = \text{inteiro} \quad (4.2.7)$$

Dois casos possíveis devem ser analisados :

$$(i) \quad q_1^{total} + q_2^{total} = \text{par}$$

neste caso $\Lambda(P_1)$ pode ser qualquer número inteiro deixando a estrutura de (4.2.7) inalterado (inteiro = inteiro) .

$$(ii) \quad q_1^{total} + q_2^{total} = \text{impar}$$

agora $\Lambda(P_1)$ deve ser um número semi-inteiro para que a estrutura de (4.2.7) seja respeitada (semi-inteiro - semi-inteiro = inteiro).

Uma forma apropriada, que enquadra (i) e (ii) é :

$$\Lambda(P_1) = \frac{1 - P_1}{4} \quad (4.2.8)$$

já que em (i) P_1 vale +1 e em (ii) P_1 vale -1.

Resta-nos agora associar a cada condição de contorno o setor cujas cargas serão consideradas. Isso foi feito testando caso a caso de maneira tal que utilizando cada condição de contorno, os estados representativos pudessem ser escritos corretamente. A conclusão à que chegamos está resumida na tabela abaixo :

C_1	C_2	Q_1	Q_2	Q_3	$\Lambda(P)$
+1	+1	0	0	0	0
-1	+1	1	1	0	$(1 - P_1)/4$
-1	-1	1	0	1	$(1 - P_2)/4$
+1	-1	0	1	1	$(1 - P_3)/4$

Devemos observar que esta análise exclui totalmente a hipótese de este modelo possuir paraférmions de spin 1/4 e spin 3/4, pois $\Lambda(P)$ será sempre inteiro ou semi inteiro.

4.3 - Dimensões anômalas dos operadores para condições de contorno periódicas

Apresentamos nesta seção os resultados numéricos obtidos pela extrapolação ($L \rightarrow \infty$) das lacunas de massa obtidas para sistemas finitos. Todas as extrapolações que efetuamos nesta dissertação são feitas utilizando-se os aproximantes de van den Broeck - Schwartz ⁽³⁸⁾, que é uma generalização dos aproximantes de Padè. A dimensão do operador energia (x_e) é obtida extrapolando-se a seqüência

$$G_L^o = E_{1,++}^{++}(L) - E_{o,++}^{++}(L) = \frac{2\pi}{L}\zeta x_e + o(L^{-1}) \tag{4.3.1}$$

onde $E_{1,++}$ é o primeiro estado excitado (com momento nulo) do setor que contém o estado fundamental. Esta relação é esperada, pois o operador energia é par quanto à paridade, isto é, a sua atuação em um estado ψ_p com paridade p bem definida, produz um estado ψ'_p com a mesma paridade p . O estado excitado $E_{1,++}^{++}(L)$ deve possuir momento nulo pelo fato do operador energia não possuir spin.

Na análise das simetrias do modelo de Ising triplete (seção (3.2)), vimos que o sistema pode ser dividido em três subredes : $\bigcirc$, $\square$ e $\triangle$. As correlações entre os spins dessas subredes serão governadas por dois operadores de ordem diferentes e as lacunas de

massa que darão suas dimensões serão G_L^1 e G_L^2 dados pela equação (4.1.1), ou seja :

$$G_L^1 = E_{\alpha,-+}^{++}(L) - E_{\alpha,++}^{++}(L) = \frac{2\pi\zeta}{L}x_{\bigcirc} + o(L^{-1}) \quad (4.3.2)$$

$$G_L^2 = E_{\alpha,--}^{++}(L) - E_{\alpha,++}^{++}(L) = \frac{2\pi\zeta}{L}x_{\square} + o(L^{-1}) \quad (4.3.3)$$

onde $E_{\alpha,-+}^{++}$ e $E_{\alpha,--}^{++}$ indicam os estados fundamentais dos setores $(P_1 = -, P_2 = +)$ e $(P_1 = -, P_2 = -)$ respectivamente.

Observamos a partir das equações (4.3.1), (4.3.2) e (4.3.3) que permanecemos com uma quantidade desconhecida que é a constante de normalização da Hamiltoniana, ζ . Podemos, contudo, determinar as dimensões anômalas dos operadores sem calculá-la diretamente. Pelos resultados (2.3.11) e (2.3.12), do capítulo II, ζ pode ser obtida através da extrapolação das lacunas de massa de quaisquer dois níveis de energia pertencentes à mesma torre conforme de um operador primário qualquer. Por exemplo, podemos utilizar :

$$Z_L = E_{1,-+}^{++}(L) - E_{\alpha,-+}^{++}(L) = \frac{2\pi\zeta}{L} + o(L^{-1}) \quad (4.3.4)$$

onde $E_{1,-+}^{++}(L)$ é o estado de energia mais baixa com momento $2\pi/L$. Podemos, portanto, dividir as equações (4.3.1), (4.3.2) e (4.3.3) por (4.3.4) e ao tomar o limite $L \rightarrow \infty$ teremos determinado as dimensões $x_{\bullet}$, $x_{\bigcirc}$ e $x_{\square}$ respectivamente. Relacionamos nas tabelas abaixo estes resultados, no intervalo $0 < \alpha \leq 1$:

Tabela (4.1) - Condições periódicas de contorno, Setor 0 ($P_1 = +, P_2 = +$) : Seqüência G_L^0/Z_L para vários valores de L e da anisotropia α , as extrapolações nos dão a dimensão x_+ . Os valores conjecturados são dados por (4.3.5.a)

$L \backslash \alpha$	0.1	0.2	0.4	0.5	0.6	0.8	1.0
6	1.36219021	1.30856174	1.20876565	1.16677495	1.13164844	1.08407688	1.06786530
9	1.09612633	1.03855335	0.93912222	0.90053085	0.86987113	0.83122269	0.82017928
12	1.02228573	0.96480327	0.86775118	0.83059206	0.80122991	0.76450098	0.75466535
15	0.99078270	0.93354642	0.83742119	0.80045589	0.77105621	0.73385826	0.72386756
18	0.97432104	0.91725196	0.82137517	0.78419493	0.75436742	0.71606107	0.70553089
Extr.	0.942	0.885	0.782	0.738	0.696	0.628	0.590
Conj.	0.940	0.886	0.792	0.750	0.709	0.629	0.500

Tabela (4.2) - Condições periódicas de contorno, Setor 1 ($P_1 = -, P_2 = -$) : Seqüência G_L^1/Z_L para valores de L e da anisotropia α , as extrapolações nos dão a dimensão x_0 . Os valores conjecturados são dados por (4.3.5.b)

$L \backslash \alpha$	0.1	0.2	0.4	0.5	0.6	0.8	1.0
6	0.20570659	0.20269184	0.19629520	0.19406901	0.19287910	0.19420348	0.20111979
9	0.15409743	0.15269495	0.14957172	0.14858685	0.14831207	0.15051680	0.15714227
12	0.14030573	0.13949279	0.13770683	0.13724002	0.13733213	0.13988614	0.14665496
15	0.13450487	0.13397591	0.13283146	0.13259202	0.13281678	0.13541535	0.14224199
18	0.13149485	0.13112370	0.13033123	0.13020570	0.13048020	0.13303054	0.13987687
Extr.	0.125	0.125	0.125	0.125	0.125	0.126	0.132
Conj.	0.125	0.125	0.125	0.125	0.125	0.125	0.125

Tabela (4.3) - Condições periódicas de contorno, Setor 2 ($P_1 = -, P_2 = +$) : Seqüência G_L^2/Z_L para valores de L e da anisotropia α , as extrapolações nos dão a dimensão $x_{\square}$. Os valores conjecturados são dados por (4.3.5.c)

$L \backslash \alpha$	0.1	0.2	0.4	0.5	0.6	0.8	1.0
6	0.38702451	0.35796135	0.30331740	0.27969420	0.25888461	0.22532050	0.20111979
9	0.28955238	0.26945145	0.23223851	0.21593429	0.20127335	0.17655635	0.15714227
12	0.26351313	0.24606454	0.21423752	0.20022062	0.18741122	0.16515332	0.14665496
15	0.25256286	0.23629167	0.20687447	0.19385104	0.18186499	0.16058280	0.14224199
18	0.24688145	0.23123987	0.20311798	0.19063535	0.17907791	0.15827102	0.13987687
Extr.	0.235	0.221	0.196	0.184	0.174	0.153	0.132
Conj.	0.235	0.221	0.198	0.187	0.177	0.157	0.125

Com os resultados apresentados nas tabelas acima consegue-se observar uma similaridade muito grande entre este modelo e o modelo de Ashkin-Teller se identificarmos x_0 com a dimensão do operador magnetização x_m^{AT} e $x_{\square}$ com a dimensão do operador polarização x_p^{AT} .

Os resultados acima induzem às seguintes conjecturas :

$$x_+ = \frac{\pi}{2\cos^{-1}(-\alpha)} \tag{4.3.5.a}$$

$$x_0 = \frac{1}{8} \tag{4.3.5.b}$$

$$x_{\square} = x_c/4 \quad (4.3.5.c)$$

Estas conjecturas (que são mostradas como função de α na última linha das tabelas anteriores) concordam com os valores obtidos numericamente dentro de uma margem de erro razoável, exceto ao redor de $\alpha = 1$, onde os valores conjecturados e os valores obtidos diferem bastante. Este resultado é explicado devido ao fato de que nessa região, tanto no modelo de Ising triplete como no modelo de Ashkin-Teller, surgem correções logarítmicas, o que piora a convergência, pois os métodos usuais de extrapolação não fornecem bons resultados quando tais correções estão presentes. Num trabalho recente, Alcaraz, Barber e Batchelor ⁽³¹⁾ discutiram as equivalências entre o modelo de Potts de 4-estados (que corresponde ao ponto isotrópico do modelo de Ashkin-Teller) e o modelo XXZ , conseguindo trabalhar com redes de até $L = 256$ obtendo extrapolações excelentes nesta região.

Analisando as amplitudes correspondentes a estados com energias mais altas que as consideradas anteriormente, conseguimos observar a existência de um operador marginal. Obtivemos sua dimensão anômala pela extrapolação da sequência

$$M_L^o = E_{2,++}^{++}(L) - E_{o,++}^{++}(L) = \frac{2\pi}{L} \zeta x_{\text{marg}} \quad (4.3.6)$$

onde $E_{2,++}^{++}(L)$ é o segundo estado excitado do setor 0 com momento nulo, pois o operador é sem spin. Os resultados estão mostrados na tabela (4.4) abaixo :

Tabela (4.4) - Condição periódica de contorno, Setor 0 ($P_1 = +, P_2 = +$) : Seqüência M_L^o/Z_L para valores de L e da anisotropia α , as extrapolações nos dão a dimensão do operador marginal x_{marg} . Os valores conjecturados são mostrados na última linha.

$L \backslash \alpha$	0.1	0.2	0.4	0.5	0.6	0.8	1.0
6	2.82209498	2.79857018	2.66808779	2.55073417	2.40843908	2.12674169	3.0.9215793
9	2.30623063	2.29505892	2.23734131	2.18414057	2.11163051	1.92716608	2.88615678
12	2.16205325	2.15314090	2.11195424	2.07649886	2.02773778	1.88812961	2.59496042
15	2.10093528	2.09453039	2.06532662	2.03959591	2.00261188	1.88437081	2.55142269
18	2.06908435	2.06438774	2.04266897	2.02288027	1.99318540	1.88871144	2.52345887
Extr.	2.000	1.988	1.961	2.008	1.998	1.959	2.500
Conj.	2.000	2.000	2.000	2.000	2.000	2.000	2.000

Constatamos que na análise desta amplitude a convergência já não é tão boa quanto nos casos anteriores. Isto indica que as correções para “scaling” relativas a esta dimensão são maiores que as das dimensões das tabelas (4.1), (4.2) e (4.3). A existência do operador marginal, cuja dimensão está calculada na tabela (4.4) acima, é fundamental para a ocorrência de uma linha crítica com expoentes críticos variáveis (Kadanoff e Brown ⁽³⁵⁾).

4.4 - Condições Toroidais de Contorno

Obtivemos as dimensões anômalas dos operadores parafermiônicos do modelo de Ising triplete através da análise das lacunas de massa do modelo com condições de contorno gerais.

As relações de simetria que implicam na degenerescência entre os vários setores são agora de extrema valia, pois reduzem drasticamente a quantidade de espectros a serem analisados.

Conseguimos obter a dimensão anômala do paraférmion de spin 1 através da extrapolação da seqüência :

$$P_L^{S=1} = E_{1,-+}^{--}(L) - E_{\alpha,++}^{++}(L) = \frac{2\pi}{L} \zeta x_{pf}^{s=1} + o(L^{-1}) \tag{4.4.1}$$

onde $E_{1,-+}^{--}$ é um estado de momento $p = 1$, no setor $P_1 = -1$ e $P_2 = +1$ da Hamiltoniana com condição de contorno $C_1 = C_2 = -1$. Nossos resultados para a dimensão correspondente ao operador de spin 1 são mostrados abaixo, na tabela (4.5)

Tabela (4.5) - Condições de contorno ($C_1 = -1, C_2 = -1$) Setor ($P_1 = -, P_2 = +$) : $p = 1$ Seqüência $P_L^{S=1}/Z_L$ para valores de L e da anisotropia α , as extrapolações nos dão a dimensão do operador parafermiônico de spin $s = 1$ $x_{pf}^{s=1}$. Os valores conjecturados são mostrados na última linha

$L-\alpha$	0.1	0.2	0.4	0.5	0.6	0.8	1.0
6	1.36219021	1.30856174	1.20878865	1.16677495	1.13164844	1.08407688	1.06786539
9	1.15009686	1.13804078	1.10254113	1.08390305	1.06713213	1.04411751	1.04030637
12	1.07990568	1.07342270	1.05403694	1.04361101	1.03416931	1.02215889	1.02497183
15	1.04986760	1.04571359	1.03308062	1.02609052	1.01966379	1.0193173	1.01723820
18	1.03416319	1.03125857	.02222952	1.01705337	1.01217968	1.00646490	1.01283105
Extr.	0.985	1.003	1.001	1.001	1.000	1.000	1.001
Conj.	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000

o que nos indica que $x_{pf}^{s=1} = 1$ para todo $0 < \alpha \leq 1$. Este resultado foi também obtido para o modelo de Ashkin-Teller por Alcaraz et al ⁽³¹⁾, resultado este que reforça a similaridade entre estes dois modelos.

Para obtermos a dimensão anômala do paraférmion de spin 1/2 extrapolamos, pelos mesmos procedimentos anteriores, a seqüência :

$$P_L^{S=1/2} = E_{\alpha,-+}^{-+}(L) - E_{\alpha,++}^{++}(L) = \frac{2\pi}{L} \zeta x_{pf}^{s=1/2} + o(L^{-1}) \tag{4.4.2}$$

As estimativas para estas dimensões no modelo de Ising triplete estão na tabela (4.6) abaixo:

Tabela (4.6) - Condições de Contorno ($C_1 = -1, C_2 = +1$) Setor ($P_1 = -, P_2 = +$) : $p = 1$ Seqüência $P_L^{s=1/2}/Z_L$ para valores de L e da anisotropia α , as extrapolações nos dão a dimensão do operador parafermiônico de spin $s = 1/2$, ($x_{pf}^{s=1/2}$). Os valores conjecturados estão mostrados na última linha.

$L \backslash \alpha$	0.1	0.2	0.4	0.5	0.6	0.8	1.0
6	0.91061687	0.90086367	0.86792226	0.84716318	0.82539962	0.78492058	0.75674923
9	0.73000024	0.72444734	0.70551446	0.69327657	0.68007099	0.65403196	0.63387689
12	0.68057588	0.67713052	0.66496626	0.65660487	0.64707561	0.62655181	0.60865268
15	0.65960720	0.65728344	0.64868761	0.64235328	0.63471842	0.61685147	0.59965390
18	0.64868171	0.64701192	0.64052193	0.63540930	0.62892885	0.61264167	0.59565810
Extr.	0.627	0.626	0.625	0.625	0.624	0.615	0.596
Conj.	0.625	0.625	0.625	0.625	0.625	0.625	0.625

Estes resultados nos induzem a conjectura $x_{pf}^{s=1/2} = 5/8 = 0.625$ para $0 < \alpha \leq 1$. No caso do modelo de Ashkin-Teller o operador correspondente foi determinado por von Gehlen e Rittenberg ⁽³⁰⁾ e seu valor é também 5/8 independentemente da anisotropia.

É importante observar que para todas as nossas análises numérica verifica-se uma distorção em torno do ponto $\alpha = 1$. Conforme já mencionado, estas distorções são provocadas por correções logarítmicas que surgem no ponto isotrópico ⁽²⁴⁾.

As similaridades com o modelo de Ashkin-Teller terminam neste ponto, ou seja, para uma similaridade total entre os dois modelos precisaríamos ainda detectar as dimensões anômalas dos paraférmions de spin 1/4 e 3/4. No entanto, percebemos a partir da própria estrutura do Ising triplete, que este não possui tais operadores, como pudemos notar na seção (4.2).

Conseguimos, ainda, detectar dimensões de operadores similares às dimensões presentes no modelo XXZ , com o mesmo valor da anisotropia α cuja Hamiltoniana é escrita como :

$$H = \frac{1}{2} \sum_{m=1}^M (\sigma_m^x \sigma_{m+1}^x + \sigma_m^y \sigma_{m+1}^y + \alpha \sigma_m^z \sigma_{m+1}^z) \tag{4.4.3}$$

onde $-1 \leq \alpha \leq 1$. Segundo Alcaraz et al ⁽³¹⁾ as dimensões dos operadores do modelo XXZ são dadas por :

$$x_{n,m}^{XXZ} = \frac{n^2}{16x_p^{AT}} + 4m^2 x_p^{AT} \tag{4.4.4}$$

onde n e m são números inteiros e x_p^{AT} é a dimensão anômala que corresponde ao operador polarização do modelo de Ashkin-Teller, com acoplamento α , que no Ising triplete é idêntica a $x_{\square}$ (veja (4.3.5)).

Através da extrapolação da sequência :

$$F_L^{S=1/2} = E_{o,--}^{-+}(L) - E_{o,++}^{++}(L) = \frac{2\pi}{L}\zeta x + o(L^{-1}) \tag{4.4.5}$$

mostradas na tabela (4.7) abaixo, concluímos que o modelo de Ising triplete apresenta outro operador de spin 1/2 com dimensão idêntica a $x_{1,1/2}$ dada em (4.4.4), isto é :

$$x_{1,1/2} = \frac{1}{16x_p^{AT}} + x_p^{AT} \tag{4.4.6}$$

Tabela (4.7) - Condições de Contorno ($C_1 = -1, C_2 = +1$) Setor ($P_1 = -, P_2 = -$) : Sequência $F_L^{S=1/2}/Z_L$ para valores de L e da anisotropia α , as extrapolações nos dão as dimensões do operador parafermiônico de spin $s = 1/2$, conjecturadas em (4.4.6). Os valores conjecturados estão mostrados na última linha.

L \ α	0.1	0.2	0.4	0.5	0.6	0.8	1.0
6	0.70645258	0.70525846	0.70464811	0.70646404	0.71038220	0.72650503	0.75674923
9	0.57709992	0.57692582	0.57925580	0.58259711	0.58783387	0.60523381	0.63387689
12	0.54137700	0.54228158	0.54763057	0.55250311	0.55911138	0.57859288	0.60865268
15	0.52617160	0.52771991	0.53481991	0.54054110	0.54788015	0.56846575	0.59965390
18	0.51823675	0.52017603	0.52833426	0.53456321	0.54233335	0.56357779	0.59565810
Extr.	0.502	0.505	0.515	0.523	0.532	0.555	0.596
Conj.	0.500	0.503	0.513	0.520	0.529	0.554	0.625

Para confirmarmos que esta é a dimensão de um operador de spin 1/2 do Ising triplete basta olharmos para a tabela da seção (4.2) e verificarmos que para esta condição de contorno, $\Lambda(P)$ é dado por $\Lambda(P) = (1 - P_1)/4$, surgindo, portanto, o fator 1/2 que caracteriza o spin do operador.

A última dimensão anômala que encontramos na análise das lacunas de massa para condições toroidais de contorno foi obtida através da extrapolação da sequência:

$$F_L^{S=0} = E_{o,+}^{-+}(L) - E_{o,+}^{++}(L) = \frac{2\pi}{L}\zeta x + o(L^{-1}) \tag{4.4.7}$$

Nossos resultados mostram que tal operador corresponde a um operador do XXZ sem spin, com dimensão anômala dada por $x_{1,0}$ em (4.4.4), isto é,

$$x_{1,0} = \frac{1}{16x_p^{AT}} \tag{4.4.8}$$

Mostramos em seguida, na tabela (4.8) os valores das extrapolações feitas em (4.4.7).

Tabela (4.8)- Condições de Contorno ($C_1 = -1, C_2 = +1$) Setor ($P_1 = +, P_2 = -$) : Seqüência $F_L^{S=0}/Z_L$ para valores de L e da anisotropia α , as extrapolações nos dão as dimensões do operador sem spin, conjecturadas em (4.4.8). Os valores conjecturados estão mostrados na última linha.

$L \backslash \alpha$	0.1	0.2	0.4	0.5	0.6	0.8	1.0
6	0.43667693	0.45544418	0.48750116	0.50265148	0.51816696	0.55279281	0.59601758
9	0.32782565	0.34490010	0.37691389	0.39273690	0.40897786	0.44429208	0.48597897
12	0.29870962	0.31566155	0.34899699	0.36583780	0.38314523	0.42046494	0.46398680
15	0.28645953	0.30344013	0.33760897	0.35503919	0.37295483	0.41153499	0.45664603
18	0.28010220	0.29712199	0.33181007	0.34960190	0.36790364	0.40730267	0.45374469
Extr.	0.267	0.284	0.320	0.339	0.359	0.403	0.461
Conj.	0.266	0.282	0.316	0.333	0.353	0.397	0.500

4.5 - Condições Livres de Contorno

Partimos agora para determinação das dimensões anômalas dos operadores de superfície. Uma das diferenças entre as análises espectrais feitas nesta seção e nas seções anteriores deve-se ao fato de não possuirmos invariância translacional, e portanto, não poderemos fazer uso de estados representativos, o que nos aumentará drasticamente a dimensão do espaço de Hilbert a ser analisado (veja seção (4.2)). Em termos práticos isto nos conduzirá a um aumento do tempo computacional. Devido a isto utilizamos redes de tamanho máximo $L = 15$.

O equivalente à dimensão do operador energia para condições livres, x_e^s , foi conjecturado por Cardy ⁽²¹⁾ como tendo sempre dimensão 2 (independentemente do modelo). Utilizando este fato como uma maneira de testar nossas extrapolações analisamos a amplitude :

$$S_L^o = E_{1,++}^{(F)} - E_{o,++}^{(F)} = \frac{\pi}{L} \zeta x_e^{(s)} + o(L^{-1}) \tag{4.5.1}$$

onde (F) indica que estamos trabalhando com condições livres de contorno. Nossos resultados são mostrados na tabela (4.9) que se segue:

Tabela (4.9) - Condições livres de contorno Setor ($P_1 = +, P_2 = +$) : Sequência S_L^0/Z_L para valores de L e da anisotropia α , as extrapolações nos dão a dimensão $x_\square^{(s)}$. Os valores conjecturados estão na última linha.

$L-\alpha$	0.1	0.2	0.4	0.5	0.6	0.8	1.0
6	2.24441818	2.24942994	2.25300626	2.25416541	2.25648646	2.26765185	2.28839743
9	1.95922433	1.96134309	1.95915907	1.95732798	1.95653031	1.96128816	1.97722008
12	1.91231444	1.91565871	1.91498430	1.91346317	1.91267847	1.91657983	1.93098418
15	1.90542393	1.90933196	1.90907619	1.90738788	1.90618257	1.90859869	1.92136292
Extr.	1.999	1.998	1.998	2.002	2.002	2.006	2.001
Conj.	2.000	2.000	2.000	2.000	2.000	2.000	2.000

Podemos observar que os resultados concordam de forma razoável com a conjectura de Cardy, $x_\square^{(s)} = 2$.

A fim de estimarmos as dimensões dos operadores nos demais setores é conveniente modificarmos nosso esquema inicial de extrapolação. Agora, ao invés de dividirmos as lacunas por Z_L (4.3.4), substituímos o valor conjecturado por Cardy em (4.5.1), obtendo a lacuna :

$$W_L = E_{1,++}^{(F)} - E_{o,++}^{(F)} = 2\frac{\pi}{L}\zeta + o(L^{-1}) \tag{4.5.2}$$

que será utilizada para a eliminação da constante de normalização ζ .

Desta forma, a dimensão do operador de magnetização de superfície é obtido através das análises das lacunas :

$$S_L^1 = E_{o,--}^{(F)} - E_{o,++}^{(F)} = \frac{\pi}{L}\zeta x_\square^{(s)} + o(L^{-1}) \tag{4.5.3}$$

e nossos resultados estão na tabela (4.10) :

Tabela (4.10) - Condições livres de contorno Setor ($P_1 = -, P_2 = -$) : Sequência S_L^1/W_L para valores de L e da anisotropia α , as extrapolações nos dão a dimensão $x_\square^{(s)}$. Os valores conjecturados estão na última linha.

$L-\alpha$	0.1	0.2	0.4	0.5	0.6	0.8	1.0
6	0.58635222	0.61630633	0.66656266	0.68775387	0.70707986	0.74299164	0.78070803
9	0.56069154	0.59305843	0.65050599	0.67570786	0.69889421	1.74098101	0.78107669
12	0.54969308	0.58272190	0.64392606	0.67157981	0.69722159	0.74351469	0.78639651
15	0.54405453	0.57740820	0.64097092	0.67026400	0.69759859	0.74694269	0.79216982
Extr.	0.525	0.564	0.625	0.665	0.699	0.772	0.850
Conj.	0.531	0.564	0.631	0.666	0.705	0.794	1.000

onde vemos que nossos resultados induzem a conjectura $x_\square^{(s)} = \cos^{-1}(-\alpha)/\pi$.

Estes valores foram também encontrados para o modelo de Ashkin-Teller por von Gehlen e Rittenberg ⁽³⁰⁾, que na região equivalente à que foi analisada no Ising triplete, conjecturaram :

$$x_m^{AT,(s)} = \frac{1}{2x_e^{AT}}.$$

Finalmente analisamos a lacuna :

$$S_L^2 = E_{\alpha,-+}^{(F)} - E_{\alpha,++}^{(F)} = \frac{\pi}{L} \zeta x_O^{(s)} + o(L^{-1}) \tag{4.5.4}$$

Nossos resultados são mostrados na tabela (4.11) abaixo :

Tabela (4.11) - Condições livres de contorno Setor ($P_1 = -, P_2 = +$) : Seqüência S_L^2/W_L para valores de L e da anisotropia α , as extrapolações nos dão a dimensão $x_O^{(s)}$. Os valores conjecturados estão na última linha.

$L \backslash \alpha$	0.1	0.2	0.4	0.5	0.6	0.8	1.0
6	1.11227236	1.10635236	1.05828753	1.01907270	0.973333396	0.87541896	0.78620473
9	1.05873681	1.05563826	1.02150519	0.99185097	0.95563572	0.87143367	0.78438984
12	1.03561580	1.03318617	1.00707957	0.98312567	0.95242516	0.87551086	0.78843335
15	1.02374334	1.02172746	1.00084346	0.98062751	0.95356011	0.88133272	0.79350812
Extr.	0.999	1.002	1.003	1.001	0.998	0.945	0.843
Conj.	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000

O resultado correspondente para o modelo de Ashkin-Teller obtido por von Gehlen e Rittenberg neste caso é :

$$x_p^{AT,(s)} = 1$$

para todos os valores de α na região analisada, conferindo exatamente com nossos resultados para o modelo de Ising triplete.

A tabela (4.11) mostra que também no caso do Ising triplete $x_p^{(s)} = 1$ para todo $0 < \alpha \leq 1$.

C A P Í T U L O V

Análise Conforme do Modelo XY triplete

5.1. Acoplamento das Hamiltonianas Alternadas

Como foi visto na seção (3.3), o espectro do modelo XY triplete é obtido a partir de dois Ising triplete, obedecendo a uma equação do tipo :

$$E^{xy}(2L) = "E^{Ising}(L) + \tilde{E}^{Ising}(L)" \quad (5.1.1)$$

onde " " indicam que os vínculos devem ser obedecidos. De acordo com as expressões (3.3.8) e (3.3.9), o estado fundamental do XY triplete será dado pela relação :

$$E_0^{xy}(2L) = E_0^{Ising}(L) + E_0^{Ising}(L) \quad (5.1.2)$$

e dividindo esta equação por $2L$ teremos :

$$\frac{E_0^{xy}(2L)}{2L} = \frac{E_0^{Ising}(L)}{2L} + \frac{E_0^{Ising}(L)}{2L} \quad (5.1.3)$$

Uma possível forma de se calcular a constante de normalização " ζ " (veja (2.3.11) e (2.3.12)) da Hamiltoniana do Ising triplete ⁽²⁴⁾, conforme vimos no capítulo IV (veja (4.3.4)), é através da equação :

$$E_{1,-+}^{++Ising}(L) - E_{0,-+}^{++Ising}(L) = \frac{2\pi\zeta}{L} + o(L^{-1}) \quad (5.1.4)$$

onde $E_{1,-+}^{++}(L)$ significa o primeiro estado excitado do setor $(-+)$ com momento não nulo e $E_{0,-+}^{++}(L)$ é o estado de energia mais baixa do mesmo setor com momento nulo. Por outro lado, com o auxílio de (3.3.8) e (3.3.9), podemos obter uma relação que nos forneça a constante ζ' , que normaliza a Hamiltoniana do XY triplete.

O primeiro estado excitado resultante do acoplamento do setor $(-, +)$ é obtido através da combinação :

$$E_{1,-+}^{++}(L) + E_{0,-+}^{++}(L) \quad (5.1.5)$$

A constante ζ' deve ser obtida através da equação :

$$\left(E_{1-+}^{++}(L) + E_{0-+}^{++}(L)\right) - 2E_{0-+}^{++}(L) = \frac{2\pi\zeta'}{2L} + o(L^{-1}) \quad (5.1.6)$$

o que nos dá

$$E_{1-+}^{++}(L) - E_{0-+}^{++}(L) = \frac{2\pi\zeta'}{2L} \quad (5.1.7)$$

Comparando-se (5.1.6) e (5.1.4) concluímos que :

$$\zeta' = 2\zeta \quad (5.1.8)$$

Conforme vimos em (2.3.10), o estado fundamental do XY triplete com condições periódicas de contorno deve ainda se comportar como :

$$\frac{E_0(2L)}{2L} = e_\infty - \frac{\pi\hat{c}\zeta'}{6(2L)^2} + o(L^{-2}) \quad (5.1.9)$$

onde $\hat{c}$ é anomalia conforme do modelo. Substituindo em (5.1.9) os resultados (5.1.3) e (5.1.8), chegamos à relação :

$$\frac{E_0(L)}{L} = e_\infty - \frac{\pi\hat{c}\zeta}{6(2L)^2} + o(L^{-2}) \quad (5.1.10)$$

Por outro lado sabemos, do trabalho de Alcaraz e Barber ⁽²⁴⁾, que o Ising triplete possui $c = 1$ e seu estado fundamental é dado pela relação :

$$\frac{E_0(L)}{L} = e_\infty - \frac{\pi c\zeta}{6L^2} + o(L^{-2}) \quad (5.1.11)$$

Portanto, a equivalência entre (5.1.9) e (5.1.10) nos indica que o modelo XY triplete é governado na sua criticalidade por teoria invariante conforme com carga central :

$$c = 2 \quad (5.1.12)$$

5.2 - O Conteúdo de Operadores do Modelo XY Triplete

Após termos obtido todas as dimensões dos operadores do modelo de Ising triplete temos condições de determinar as dimensões anômalas dos operadores existentes no modelo XY triplete.

As relações de vínculo exigem que apenas acoplemos setores idênticos das Hamiltonianas alternadas com as mesmas condições de contorno. Desta forma, ao considerarmos o setor do estado fundamental dos Ising triplete podemos escrever :

$$E_{1,++}^{++}(L) + \tilde{E}_{o,++}^{++}(L) = E_{o,++}^{++}(L) + \frac{2\pi}{L}\zeta x_{\epsilon} + \tilde{E}_{o,++}^{++}(L) + o(L^{-1}) = E_o(2L) + \frac{2\pi}{2L}\zeta' x_{\epsilon}^{XY} + o(L^{-1}) \quad (5.2.1)$$

Considerando (5.1.2) e (5.1.7) concluímos diretamente que :

$$x_{\epsilon}^{XY} = x_{\epsilon}^{Ising} \quad (5.2.2)$$

ou seja, o modelo XY triplete possui um operador com mesma dimensão do operador energia do Ising triplete.

Seguindo o mesmo procedimento feito para a dimensão do operador energia, conseguimos mostrar o aparecimento de um operador marginal também no modelo XY triplete, isto é :

$$x_{marg}^{XY} = x_{marg}^{Ising} \quad (5.2.3)$$

Devemos observar, contudo, que todas as demais dimensões dos operadores presentes no modelo de Ising triplete foram obtidas através de lacunas de massa relativas a estados excitados pertencentes a setores distintos daquele que contém o estado fundamental. Como consequência das relações de vínculo notamos que operadores com dimensão $x_{\square}$, $x_{\square}$, etc. não estarão presentes no modelo XY triplete. As dimensões dos demais operadores primários que surgirão no modelo XY triplete serão, devido às relações de vínculo, o dobro das dimensões dos operadores primários do modelo de Ising triplete ($x_{\square}$, $x_{\square}$, etc.). Exemplifiquemos este fato com o operador $x_{\square}$ (identificado a x_m^{AT}) lembrando que esta análise é idêntica para os demais operadores primários :

$$\begin{aligned} E_{o,-+}^{++}(L) + \tilde{E}_{o,-+}^{++}(L) &= E_{o,++}^{++}(L) + \frac{2\pi}{L}\zeta x_{\square}^{Ising} + \tilde{E}_{o,++}^{++}(L) + \frac{2\pi}{L}\zeta x_{\square}^{Ising} + o(L^{-1}) \\ &= 2E_{o,++}^{++}(L) + \frac{2\pi}{L}\zeta' x_{\square}^{XY} + o(L^{-1}) \end{aligned} \quad (5.2.4)$$

Novamente considerando (5.1.2) e (5.1.7) concluímos :

$$x_{\square}^{XY} = 2x_{\square}^{Ising} \quad (5.2.5)$$

Após termos determinado os valores permitidos para as dimensões anômalas do modelo XY triplete, é interessante encontrarmos os tipos de funções de correlação que são governadas por estas dimensões na criticalidade.

A função de correlação energia-energia para o modelo XY triplete é escrita como :

$$G_E(k-i) = \langle \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y \sigma_{i+2}^y \sigma_k^y \sigma_{k+1}^y \sigma_{k+2}^y \rangle - \langle \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y \sigma_{i+2}^y \rangle \langle \sigma_k^y \sigma_{k+1}^y \sigma_{k+2}^y \rangle \quad (5.2.6)$$

o que nos conduz a dois tipos de análise :

i) $i = 3j + \alpha, k = 3\ell + \alpha$ com $\ell > j = 0, 1, 2, \dots$ e $\alpha = 0, 1, 2$:

neste caso os operadores pertencem à mesma Hamiltoniana alternada e podemos escrever a correlação acima em termos das correlações nas variáveis do modelo de Ising triplete :

$$G_E(k-i) = \langle G_i^y G_{i+1}^y \mu_{i-1}^y \mu_i^y \mu_{i+1}^y G_k^y G_{k+1}^y \mu_{k-1}^y \mu_k^y \mu_{k+1}^y \rangle - \langle G_i^y G_{i+1}^y \mu_{i-1}^y \mu_i^y \mu_{i+1}^y \rangle \langle G_k^y G_{k+1}^y \mu_{k-1}^y \mu_k^y \mu_{k+1}^y \rangle \quad (5.2.7)$$

Sabemos que os operadores G_i^y só introduzem sinais, não influenciando no comportamento crítico. Com isso, percebemos que a função de correlação energia-energia para o modelo XY triplete possui o mesmo comportamento crítico desta função para o Ising triplete.

ii) $i = 3j + \alpha, k = 3\ell + \alpha + 1$ com $\ell > j = 0, 1, 2, \dots$ e $\alpha = 0, 1, 2$:

Agora os operadores não pertencem a mesma Hamiltoniana alternada atuando em espaços tensoriais diferentes fazendo com que a equação (5.2.7) se anule.

No modelo de Ising triplete as funções de correlação dos operadores de ordem são escritas como $\langle \sigma_{3i+\alpha}^z \sigma_{3j+\alpha}^z \rangle$ onde $\alpha = 0, 1, 2$ e correspondem às correlações nas sub-redes $\square, \triangle$ e $\bigcirc$ respectivamente. Tais correlações são governadas, na criticalidade, pelo comportamento ditado pelas dimensões dos operadores $x_\square, x_\triangle, x_\bigcirc$. As relações de vínculo exigem que acoplemos setores idênticos das Hamiltonianas Ising triplete com mesmas condições de contorno. Desta forma já começamos a ter idéia de como devem ser os

operadores de ordem do modelo XY triplete, pois ao acoplarmos os sistemas alternados a correlação terá uma estrutura do tipo :

$$\langle \nu_{3i+\alpha}^y \nu_{3j+\alpha}^y \rangle \langle \mu_{3k+\alpha}^y \mu_{3l+\alpha}^y \rangle, \alpha = 0, 1, 2 \quad (5.2.8)$$

onde os operadores ν atuam no espaço de Hilbert associado a H^η e os operadores μ no espaço associado a H^ϵ . Lembrando que as funções de correlação $\langle \nu\nu \rangle$ e $\langle \mu\mu \rangle$ só não se anulam se estes operadores pertencerem a sub-redes idênticas ⁽²⁴⁾, conseguimos reproduzir esta estrutura no modelo XY triplete através das correlações :

$$\langle \nu_{3i+\alpha}^y \prod_{m=i+\alpha+1}^{j-1} G_{3m+1}^y G_{3m+2}^y \nu_{3j+\alpha}^y \rangle \langle \mu_{3k+\alpha}^y \prod_{m=k+\alpha+1}^{l-1} G_{3m+1}^y G_{3m+2}^y \mu_{3l+\alpha}^y \rangle, \alpha = 0, 1, 2 \quad (5.2.9)$$

onde os produtos dos operadores G^y valem ± 1 . Observamos ainda que se $\nu_{3i+\alpha}^y$ e $\nu_{3k+\alpha}^y$ forem vizinhos próximos, o mesmo acontecendo a $\nu_{3j+\alpha}^y$ e $\mu_{3l+\alpha}^y$ as relações de vínculo não serão violadas na região intermediária. Desta forma, as correlações de ordem do modelo XY triplete podem ser escritas como :

$$\langle \sigma_{2i}^y \sigma_{2i+1}^y \sigma_{2j}^y \sigma_{2j+1}^y \rangle \sim \frac{1}{|j-i|^{4x_\sigma}} \quad (5.2.10)$$

onde $|j-i|$ deve ser múltiplo de 6, e $x_\sigma = x_\square, x_\circ, x_\Delta$ dependendo do caso, mostrando que as dimensões dos operadores de ordem no XY triplete são o dobro daquelas do Ising triplete.

Para condições de contorno gerais ($C_1, C_2 \neq 1$) o raciocínio é idêntico ao formulado acima, com condições de contorno periódicas. Notamos que a existência dos operadores de gauge locais no modelo faz com que todas as condições de contorno dos sistemas acoplados sejam tratadas de forma idêntica. Os operadores que aparecem no Ising triplete com condições de contorno gerais ($C_1, C_2 \neq 1$) aparecem naturalmente no XY triplete como dimensões de operadores de ordem, obedecendo as relações de vínculo que dizem que o produto das condições de contorno dos sistemas acoplados vale 1 (eqs. (3.1.7) e (3.2.11)). Equivalentemente, no modelo XY triplete esta mesma informação nos é fornecida em termos das configurações dos operadores de gauge (eq. (3.3.7)). Notamos, portanto, que tratando os Ising triplete acoplados com condições de contorno gerais, estamos tratando o modelo XY triplete com determinada configuração de operadores de gauge locais.

No caso de condições livres de contorno observamos que não existem mais as relações de vínculo, pois, $C_1 = C_2 = 0$. Portanto, poderemos acoplar quaisquer setores dos Ising triplete alternados sem restrição alguma. Em particular notamos que as dimensões de operadores primários surgirão através do acoplamento de qualquer setor de um Ising triplete com o estado fundamental da outra Hamiltoniana alternada. Assim, todas as dimensões dos operadores primários do Ising triplete serão detectadas também no XY triplete.

5.3. CONCLUSÃO

Estudamos nesta dissertação um modelo de mecânica estatística explorando as propriedades advindas da invariância conforme que o sistema apresenta em sua criticidade. O modelo estudado é o modelo XY com interação de três corpos - XY triplete. No decorrer de nossa análise observamos que o presente modelo apresenta uma invariância local de calibre (gauge), o que nos possibilitou uma enorme simplificação no tratamento de sua Hamiltoniana quântica. Nossa análise mostrou ainda, que o modelo XY triplete com condições de contorno periódicas relaciona-se com o modelo de Ising triplete introduzido por Alcaraz e Barber ⁽²⁴⁾. Mais especificamente, para uma dada escolha de calibre no XY triplete corresponde a uma cadeia de Ising triplete dobrada com determinada condição de contorno. Observamos, conseqüentemente, que da mesma forma que o modelo XY de interações de dois corpos se reduz ao Ising tradicional dobrado ⁽³⁶⁾, o mesmo ocorrerá para o XY com interações de três corpos.

Pelo fato do modelo XY triplete estar relacionado ao Ising triplete com diversas condições de contorno, tivemos que estudar sistematicamente este último modelo nas mais diversas condições de contorno, compatíveis com a simetria $Z(2) \otimes Z(2)$ do modelo. Os cálculos espectrais anteriores da Hamiltoniana Ising triplete basearam-se exclusivamente no modelo periódico.

Após o trabalho de Alcaraz e Barber ⁽²⁴⁾ acredita-se que o modelo de Ising triplete e o Ashkin-Teller pertençam à mesma classe de universalidade. Nossos resultados revelam que embora ambos sejam descritos por uma teoria conforme de carga central $c = 1$, estes dois modelos não possuem conteúdos de operadores totalmente equivalentes. Em particular, enquanto o modelo de Ashkin-Teller apresenta operadores parafermiônicos de spin $s = 1/4$ e $3/4$, estes estão ausentes no modelo de Ising triplete. Em contrapartida aparecem no Ising triplete operadores fermiônicos ($s = 1/2$) e bosônicos ($s = 1$), ausentes no Ashkin-Teller. No caso em que ambos os modelos possuam uma superfície livre (plano semi-infinito) nossos resultados mostraram uma equivalência total.

Portanto, após um estudo detalhado do conteúdo de operadores do modelo de Ising triplete, voltamos ao XY triplete. Recordamos que existem relações de vínculos

que devem ser satisfeitas e o conteúdo de operadores do modelo XY triplete foi determinado acoplando-se setores dos Ising triplete alternados que não violassem as relações de vínculos.

Como sugestão para continuidade do trabalho, seria interessante estudar o modelo XXZ triplete cuja Hamiltoniana é escrita como :

$$H^{XXZ} = - \sum_{m=1}^M \left(\sigma_m^x \sigma_{m+1}^x \sigma_{m+2}^x + \sigma_m^y \sigma_{m+1}^y \sigma_{m+2}^y + \Delta \sigma_m^z \sigma_{m+1}^z \sigma_{m+2}^z \right)$$

com Δ variando. Seria interessante calcular o diagrama de fases do modelo e verificar se, da mesma forma que para o modelo XXZ de dois corpos, aparecem também linhas críticas, conforme Δ varie. No caso do surgimento de uma linha crítica é interessante saber se a anomalia conforme é $c = 2$ em toda a linha, bem como determinar a dependência dos expoentes críticos com α e Δ .

APÊNDICE I

O Método de Lanczos

O método que utilizamos para obter os autovalores da Hamiltoniana é o chamado método de Lanczos, que consiste em colocar a Hamiltoniana numa base tridiagonal. A simplificação introduzida por este método reside em dois aspectos : 1). ao invés de armazenarmos uma matriz $q^L \times q^L$ elementos, armazenamos uma matriz de $2q^L$ elementos, onde q é o número de estados por sítio e L é o número de sítios. 2). a base em que expressamos a Hamiltoniana é tal que possui projeção decrescente com os autovalores da Hamiltoniana, possibilitando obter boas estimativas para os estados de menor energia, mesmo para um espaço de Lanczos truncado.

Construímos as bases tridiagonal escolhendo arbitrariamente um estado normalizado de H , $|\psi_0\rangle$. Aplicando H teremos :

$$H|\psi_0\rangle = a_1|\psi_0\rangle + b_1|\psi_1\rangle \quad (I.1)$$

onde a_1 e b_1 são coeficientes que normalizam $|\psi_0\rangle$ e $|\psi_1\rangle$, sendo estes ortogonais. Continuando, aplicamos H em $|\psi_1\rangle$, fornecendo :

$$H|\psi_1\rangle = b_1|\psi_0\rangle + a_2|\psi_1\rangle + b_2|\psi_2\rangle \quad (I.2)$$

onde os coeficientes b_1 , a_2 e b_2 normalizam $|\psi_2\rangle$, que é ortogonal a $|\psi_0\rangle$ e $|\psi_1\rangle$. Observamos que b_1 aparece em (I.1) e (I.2) pelo fato de H ser Hamiltoniana.

O método prossegue e (I.2) é generalizada por :

$$H|\psi_i\rangle = b_{i-1}|\psi_{i-1}\rangle + a_i|\psi_i\rangle + b_i|\psi_{i+1}\rangle \quad (I.3)$$

terminando quando $b_i = 0$. Assim montamos a matriz T :

$$T = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & & & \\ b_1 & a_2 & & & \\ & b_2 & & & \\ & & & & \\ & & & b_{L-1} & \\ & & b_{L-1} & a_L & \end{pmatrix} \quad (I.4)$$

Conforme salientamos, em geral não precisamos chegar ao fim da tridiagonalização, pois os autovalores mais baixos de T são obtidos em poucas interações. Portanto, a cada iteração, os autovalores mais baixos convergem mais para seu valor definitivo. Controlamos, portanto, esta convergência passo a passo, até termos uma precisão de 10^{-13} para os cinco autovalores mais baixos de T .

Um outro fato que utilizamos para acelerar o processo foi explorar as simetrias de H com a divisão dos setores de carga e a invariância de translação através dos estados representativos.

R E F E R Ê N C I A S

1. G.B.Taggart e R.A.Tahir-Kheli, Prog.Theor.Phys. **47**, 370 (1972)
2. R.C.Kittler e K.H.ennemann, Solide State Commun. **32**, 403 (1979)
3. K.Binder e D.P.Landau, phys.Rev. B **21**, 1941 (1980)
4. M. Roger, J.M.Derrieu, J.H.Hetherington, Phys. Rev. Lett. **45**, 137 (1980)
5. J. Ashkin e E. Teller, Phys. Rev., **64**, 178 (1943)
6. R.J.Baxter, Ann. Phys. (N.Y.), **70** , 193 (1972)
7. R.J.Baxter e F.Y.Wu, Phys.Rev.Lett. **31**, 1294 (1973)
8. K.Wilson, Phys. Rev. **B4**, 3184 (1971)
9. M.E. Fisher e M.N.arber, Phys. Rev.Lett. **28**, 1516 (1972)
10. M.P.Nightingale, Physica **83A**, 561 (1976)
11. K.A. Penson, R.Jullien e P.Pfeuty, Phys. Rev. **B26**, 6334 (1982)
12. J.M. Debierre e L.Tyrban, J. Phys. A : Math. Gen. **16**, 3571 (1983)
13. A.A.Belavin, A.M.Polyakov e A.B. Zamolodchicov, J. Statist. Phys **34** 763 (1984)
14. D.Friedan, Z.Qiu e S.Shenker, Phys. Rev.Lett. **52**, 1575 (1984)
15. J.M.Luck, J.Phys. A : Math. Gen. **15**, L169 (1982)
16. B.Derrida e J.de Seze, J. Physique **43**, 475 (1982)
17. M.P. Nightingale e H.W.Blöte, J.Phys. A : Math. Gen. **16**, L657 (1983)
18. V.Privman e M.E.Fisher , Phys. Rev. **B30**, 322 (1984)
19. F.C.Alcaraz, J.R.Drugowich de Felício, J.Phys. A **17**L651 (1984)
20. J.L.Card, J.Phys. A : Math. Gen. **17**, L385 (1984)
21. J.L.Card, J.Phys. A, Math. Gen. **17**,L961 (1984)
22. Kadanoff e H.Ceva, Phys. Rev. **D3**,398 (1971)

23. J.L.Cardy, Nucl. Phys. **B240**, 514 (1984)
24. F.C.Alcaraz e M.N.Barber, J. Statist. Phys. **46**, 435 (1987)
25. A.M.Polyakov, Sov. Phys. JETP Letters, **12**,381 (1970)
26. E.Fradkin, L. Susskind, Phys. Rev. **D17** 2637 (1978)
27. H.W.J.Blöte, J.L.Cardy, M.P.Nightingale, Phys. Rev.Lett. **56**, 742 (1986)
28. I. Affleck, Phys. Rev.Lett. **56**, 746 (1986)
29. G.V.Gehlen, V.Rittenberg, H.Huegg, J.Phys. A : Math. Gen. **19**, 107 (1985)
30. G.V. Gehlen, V.Rittenberg, J.Phys. A: Math. Gen. **20**, 227 (1987)
31. F.C.Alcaraz, M.N. Barber, M.T. Batchelor, Ann. Phys. **182**, 2 280 (1988)
32. .Iglói, D.V. Kapor, M. Skrinjar, J. Sólyon, J.Phys. A: Math. Gen. **16**, 4067 (1983)
33. F. C. Alcaraz, R. Köberle, J. Phys. A — Math. Gen. **14** 1169 (1981)
34. R. J. Baxter, Exactly Solved Models in Statistical Mechanics, Academic Press (1982)
35. L. P. Kadanoff, A. Brown, Ann. Phys. **121** 318 (1979)
36. I. Peschel, K. D. Schotte, Z. Phys. **B 54** 305 (1984)
37. N. W. Ashcroft, N.D. Mermin, Solid State Physics
38. C. J. Hamer e M.N. Barber, J.Phys. A : Math. Gen. **14** 2009 (1981)