UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

DEPARTAMENTO DE FISICA E CIÊNCIA DOS MATERIAIS

INSTITUTO DE FISICA E QUIMICA DE SÃO CARLOS

ok

USP / IFQSC / SBI
8-2-000847

Estudo do Crossover no Modelo XY com Campo Transverso

Miled Hassan Youssef Moussa

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

Orientador: Prof. Dr. José Roberto Drugowich de Felicio

SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO - IFQSC
FÍSICA

São Carlos - São Paulo

1990

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE

Miled Hassan Youssef Moussa APRESENTADA

AO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 22 DE fevereiro DE 1990.

COMISSÃO JULGADORA:

Dr. José R.D.de Felício Orientador

Dr. Nestor Felipe Caticha Alfonso

Dr. Raimundo Rocha dos Santos

Dedico

À Mag, Marcela

e à minha família

Pelo constante incentivo na procura

da forma mais clara de ser

Agradeço

A todos aqueles que contribuiram na realização deste trabalho ensinando-me a "não viver de cor os conceitos"

- *Dinis, Rosângela, Reginaldo, João, Regina, Sérgio, José de Alencar, Clisthenis, Nagib, Flávio, Liliane, Wilson, Egues, Aparecida, Marcel, Henrique, Chahine, Langoni, Carlos, Neto, Du, Ilde & Cia., etc., etc., etc...*

Àqueles de outros carnavais

- *Marcus, Geraldo, Celso, Zé Potoca, Chico, Nicolela, bodão, etc..*

(Travessias ...)

- À *Irene, Ítalo e ao Milton*, pela simpatia e dedicação
- Ao *CNPq* pelo apoio financeiro

Finalmente

- Ao *Drugo*, primeiramente pela amizade que fez agradável este tempo de vivências em comum. Pelo incentivo, dedicação e competência dispensados diariamente. "Narrar é resistir."

RESUMO

Em decorrência do grande avanço alcançado pela mecânica estatística devido a introdução das idéias de invariância conforme às teorias de escala para sistemas finitos, retomamos, neste trabalho, o estudo do modelo XY em campo transverso.

A princípio, apresentamos uma análise detalhada do comportamento "crossover" característico do modelo, onde incluimos cálculos melhorados dos expoentes da susceptibilidade e do gap de energia anteriormente apresentados por dos Santos e Stinchcombe.

Em seguida, uma análise numérica do espectro foi desenvolvida, considerando-se condições livres de contorno, e comparada com as previsões da invariância conforme.

Finalmente, as correções à energia do estado fundamental de cadeias finitas foram utilizadas para obter o parâmetro que caracteriza as classes de universalidade (a carga central c).

SERVIÇO DE

ABSTRACT

In view of the great advance attached from statistical mechanics due to the conformal invariance ideas introduced to the scale theories, we take over at this work, the study of the XY model in a transverse field.

At first, we present a detailed analysis on the sample's typical crossover behavior. An improved calculation of the susceptibility and gap exponents early presented by dos Santos and Stinchcombe is included.

Nest, a numerical analysis of the spectrum, regarding free boundary conditions was developed and compared with conformal invariance predictions.

Finally, the fundamental state energy corrections of finite chains were used to obtain the parameter which distinguishes the universality classes (the central charge c).

INDICE

CAPÍTULO I - INTRODUÇÃO

CAPÍTULO II - TEORIA DE ESCALA PARA SISTEMAS FINITOS E INVARIÂNCIA CONFORME

II-A - Introdução. 6

II-B - Distorções do Ponto Crítico 8

II-C - FSS 10

II-D - Grupo de Renormalização Fenomenológico 11

II-E - Matriz de Transferência e Hamiltoniana Associada 13

II-F - Crossover 15

II-G - A Hipótese Estendida do FSS 19

II-H - Invariância Conforme 23

II-I - Invariância Conforme e FSS 25

II-J - Espectro 27

II-L - Correções ao Tamanho Finito e Operadores Primários 30

II-M - Invariância Conforme e Álgebra de Virassoro 32

II-N - Espaço de Hilbert e Representação da Álgebra de Virassoro 35

CAPÍTULO III - O MODELO XY EM CAMPO TRANSVERSO

III-A - Sinópse 40

III-B - Introdução e Formulação do Problema 41

III-C - Energia do Estado Fundamental 45

III-D - Acoplamento Crítico 47

III-E - Diagrama de Fases 49

CAPÍTULO IV - O CROSSOVER ANISOTRÓPICO NO MODELO XY UNIDIMENSIONAL À TEMEPRATURA ZERO

IV-A - Introdução. 53

IV-B - Gaps dos Níveis mais Baixos de Energia 53

IV-C - Susceptibilidades Longitudinais - χ^{zz} e χ^{yy} 64

CAPÍTULO V - INVARIÂNCIA CONFORME

V-A - Anomalia Conforme 81

V-B - Dimensão de Escala 88

V-C - Dimensão de Escala e Espectro 97

CAPÍTULO VI - CONCLUSÃO 102

REFERÊNCIAS 103

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO
FÍSICA

INTRODUÇÃO

No decorrer das últimas duas décadas a investigação dos fenômenos críticos vivenciou um período especialmente importante, imprimindo avanços significativos na compreensão dos sistemas estatísticos.

Pode-se dizer que a primeira abordagem a despertar grande entusiasmo consistiu na hipótese de escala para sistemas finitos, à qual costumamos chamar de "finite-size scaling" (Fisher e Barber [1] - 1971). Desde que as singularidades manifestam-se apenas no limite termodinâmico (sistemas infinitos), o finite-size scaling analisa a dependência dessas singularidades com o tamanho do sistema, tratando sistematicamente os efeitos de tamanho finito.

As idéias concernentes à invariância de escala possibilitaram a introdução do chamado "Grupo de Renormalização" (Wilson e Kogut [2] - 1974, Wallace e Zia [3] - 1978), que revelou-se bastante eficiente na explicação dos valores dos expoentes críticos obtidos teórica e experimentalmente. O Grupo de Renormalização consegue dar também uma explicação muito convincente para as chamadas "Classes de Universalidade"[4], que são formadas por sistemas bastante diferenciados entre si apresentando porém, o mesmo comportamento crítico. Segundo as idéias de Wilson [2] os sistemas pertencentes a uma certa classe de universalidade, têm o seu comportamento crítico governado por um único ponto fixo, que não depende dos detalhes da Hamiltoniana e sim de características mais gerais tais como a dimensionalidade da rede e do parâmetro de ordem.

Em conseqüência da hipótese de universalidade se, por alguma razão, a dimensionalidade do parâmetro de rede for alterada (devido por exemplo à mudança de acoplamentos na Hamiltoniana), então o sistema poderá exibir um comportamento crítico totalmente diferente, governado por um novo ponto fixo. Há, no entanto, uma série de casos intermediários para os quais "a priori" o comportamento crítico deveria ser uma mistura dos dois extremos. É como se o sistema fosse liberado para desenvolver a nova característica, cruzando de um comportamento ao outro. A investigação desse fenômeno, denominado "crossover", tem se apoiado nas funções de escala (Riedel e Wegner [5] - 1969, Pfeuty e outros [6] - 1974) bem como no Grupo de Renormalização (ver Aharony [7] - 1976).

A extensão natural das idéias de Wilson, ou seja, uma transformação de escala local, só foi realmente explorada a partir de 1984 quando ficou clara [8] a importância das transformações conforme (que localmente preservam ângulos) no estudo da criticalidade de sistemas bidimensionais. Quase simultaneamente ao trabalho de BPZ [8] houve um grande avanço no entendimento das "coincidências" verificadas [9] em cálculos de finite-size scaling. Foi Cardy [10] quem mostrou que ao imaginar a cinta infinita (geometria usual do FSS) como sendo o mapeamento do plano através da função logarítmo, ficava muito fácil explicar porque os índices críticos poderiam ser obtidos diretamente do espectro da matriz de transferência, conforme vinha sendo feito por Derrida e De Seze [11], Nightingale e Blöte [12] e outros. O trabalho de Friedan, Qiu e Shenker [13], mostrando que a unitariedade conduzia a uma quantização da carga central c (ou número de anomalia conforme) permitiu que vários casos fossem estudados (numericamente) e classificados dentro desse novo espírito [14]. Algum tempo depois se descobriu porém que a informação acerca do c está contida no próprio autovalor maior da matriz de transferência, o que permite [15,16] então classificar o modelo de forma muito mais simples.

Tendo em vista o enorme avanço conseguido nessa década, no que diz respeito à combinação finite-size scaling - invariância conforme, parece natural revisitar modelos que no passado já tenham despertado o interesse dos pesquisadores. Foi dentro dessa perspectiva que nos propusemos a estudar o modelo XY com campo transverso, anteriormente visitado por dos Santos e Stinchcombe [17], cujo Hamiltoniano se escreve

$$H = -\sum_i \left\{ \Gamma \sigma_i^z + \frac{J}{2}(1+\eta)\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \frac{J}{2}(1-\eta)\sigma_i^y \sigma_{i+1}^y \right\}, \qquad (I-1)$$

e que, nos casos extremos $\gamma = 1$ e $\gamma = 0$, reproduz respectivamente os modelos de Ising e XY isotrópico em campo transverso. Esse modelo, que é crítico em $(\Gamma/J) = 1$ qualquer que seja o valor de $0 \leq \gamma \leq 1$ serviu de laboratório para que dos Santos e Stinchcombe[17] testassem o seu "extended finite-size scaling". A necessidade de uma extensão do FSS usual aparece em virtude da existência de dois comprimentos de correlação importantes no problema que, mérito do modelo, dominam o comportamento singular nos casos extremos ($\gamma = 1$, $\gamma = 0$) e competem entre si ("crossover") para $0 < \gamma < 1$.

Neste trabalho nós testamos as hipóteses de dos Santos e Stinchcombe,

usando cadeias bem maiores ($L \leq 18$) do que aquelas por eles utilizadas ($L \leq 9$). A dificuldade é que a maioria dos cálculos precisa ser feita sob condições livres de contorno, o que significa quebra de invariância translacional e conseqüentemente impossibilidade de bloco-diagonalizar o Hamiltoniano com o rótulo do momento. Apresentamos também um estudo detalhado do Hamiltoniano ($I-1$), com condições livres de contorno, sob o ponto de vista de invariância conforme. Em particular levantamos o espectro para verificar que, na região $0 < \gamma \leq 1$, não só a carga central vale $1/2$ mas também somente as representações 0 e $1/2$ aparecem no espectro. O mesmo ocorre quando se estuda o modelo de Ising puro com campo transverso sob condições livres de contorno. Quando tratamos o caso limite $\gamma = 0$ porém, os avanços são poucos. Ocorre que nesse caso a constante de normalização do Hamiltoniano (que deixa o Hamiltoniano invariante conforme) se anula o que torna praticamente impossível determinar qualquer coisa de relevante.

Esta dissertação está esquematizada da seguinte forma : no capítulo II a teoria de escala para sistrmas finitos é introduzida, abordando de forma particular o fenômeno crossover e, conseqüentemente, a hipótese estendida do F.S.S.. A teoria da invariância conforme e suas relações com o FSS também se encontra nesse capítulo. No capítulo III o modelo XY em campo transverso é apresentado seguindo-se algumas considerações acerca do seu comportamento crítico. Os resultados provenientes da análise desse modelo, através do finite-size scaling (susceptibilidade, gaps e expoente de crossover) são apresentados no capítulo IV, enquanto que a abordagem via invariância conforme, encontra-se no capítulo V. As conclusões são apresentadas no capítulo VI.

CAPÍTULO II

TEORIA DE ESCALA PARA SISTEMAS FINITOS

SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO - IFQSC
FÍSICA

II - A - INTRODUÇÃO

Em mecânica estatística as quantidades termodinâmicas são funções singulares da temperatura ou campos externos apenas no limite termodinâmico, isto é, situação onde a densidade $\rho = N/V$ do sistema mantem-se fixa quando tanto o volume V quanto o número N de partículas tornam-se infinitamente grandes.

Desde que operamos com sistemas reais (N e V suficientemente grandes, mas não infinitos) para obter informações relativas às propriedades críticas, suas finitudes certamente manifestar-se-ão substituindo as singularidades por picos suaves, que só são vestígios da transição verdadeira (veja Figura 1). Tais respostas termodinâmicas, portanto, apresentam uma concordância fortuita com as predições teóricas através de efeitos de tamanho finito além das resoluções experimentais.

Com o intuito de contornar a dissonância presente quando se decide investigar a mecânica estatística dos sistemas finitos, Fisher e colaboradores desenvolveram a teoria de escala para sistemas finitos (finite-size scaling) com a justa preocupação de elaborar sobre a aproximação ou caminho para a criticalidade de tais sistemas.

É preciso, contudo, ao estudar sistemas finitos, distinguir entre as três principais geometrias: aqueles finitos em d dimensões (geometria A) ou finitos em $d' = d - 1$ dimensões e infinitos na dimensão remanescente (geometria B), que não sofrem uma verdadeira transição de fase e, aqueles infinitos em d' dimensões e finitos numa outra (geometria C), que apresentam transições de fase quando $d' \geq 2$.

A anomalia presente na figura 1 relativa ao calor específico de um sistema de Ising bidimensional e finito dis respeito à geometria A, enquanto que na figura 2 esboça-se a mudança no comportamento crítico da susceptibilidade de um sistema de geometria C.

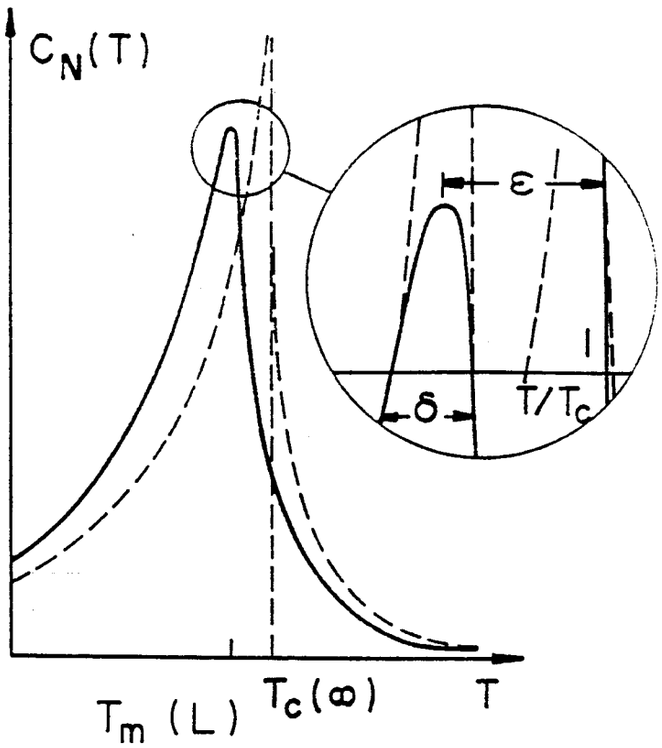


Figura 1: Anomalia da curva de calor específico de um sistema finito. A curva tracejada refere-se a um sistema infinito (modelo de Ising em duas dimensões) e no detalhe estão mostrados as grandezas ϵ (que mede a distância entre a temperatura pseudocrítica $T_m(L)$ e T_c) e δ (que define a região onde as curvas se diferenciam).

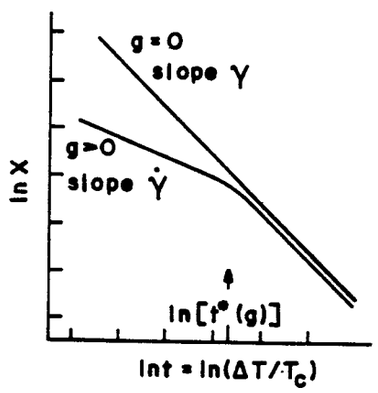


Figura 2: Mudança de comportamento da susceptibilidade do sistema.

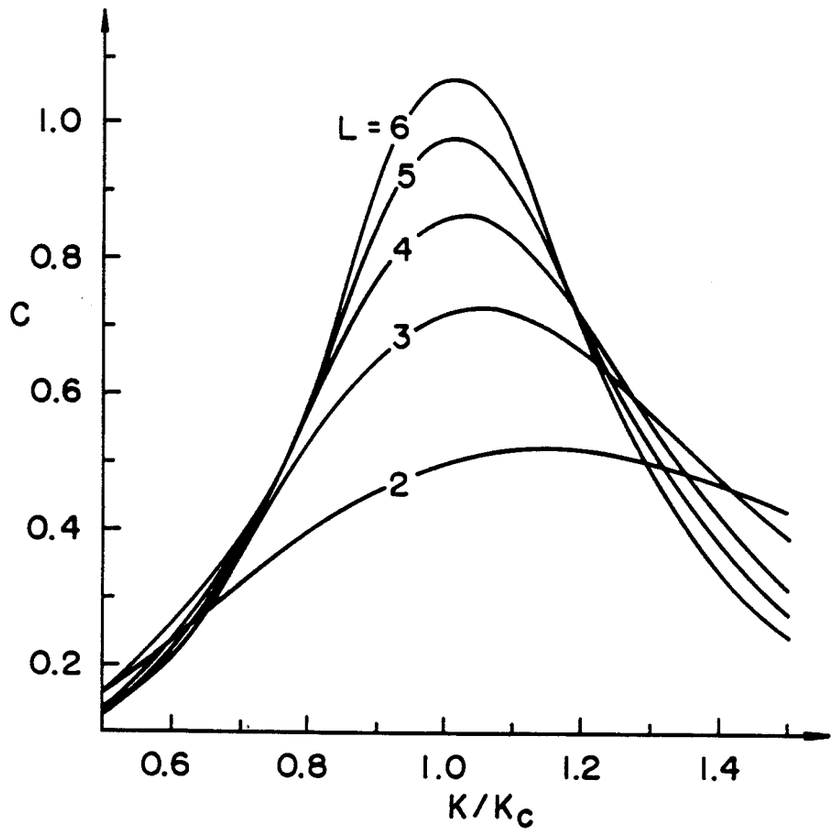


Figura 3: Calor específico em função da temperatura de um sistema bidimensional finito de Ising.
(ver Ferdinand and Fisher[42], 1969)

A seguir nos ocuparemos com uma breve descrição quantitativa envolvendo o efeito da limitação do tamanho sobre as propriedades de um sistema.

II-B - DISTORÇÕES DO PONTO CRÍTICO

Atendo-nos à figura 1, observamos que a divergência logarítmica característica da rede infinita (curva tracejada) desaparece no caso de rede finita (curva cheia) tornando-se um pico arredondado cuja altura cresce com o tamanho do sistema (figura 3). A posição desse pico constata a anomalia existente naquele ponto onde considera-se a temperatura pseudocrítica $Tm(L)$ que se aproxima de T_c (temperatura crítica do sistema infinito) quando o tamanho do sistema $\ell = L/a$ aproxima-se do infinito, segundo

$$\frac{Tm(\ell) - T_c}{T_c} \sim \frac{b}{\ell^{\lambda}} \qquad (II-1)$$

Esta caracterização da diferença entre ambos os comportamentos é ainda possibilitada através da superposição da curva do sistema finito àquela do sistema infinito com o que obtem-se a temperatura $T^{*}(\ell)$ na qual as curvas começam a separar-se. Para $\ell \to \infty$, $T^{*}(\ell)$ aproxima-se de T_c, segundo

$$\frac{T^{*}(\ell) - T_c}{T_c} \sim \frac{C}{\ell^{\Theta}} \qquad (II-2)$$

Concluimos, a seguir, a relação direta entre o expoente Θ acima apresentado e o expoente crítico ν do comprimento de correlação (ξ). Lembramos que $T^{*}(\ell)$ é a temepratura na qual a finitude do sistema começa a refletir-se na resposta, o que deve ocorrer quando o comprimento de correlação tornar-se da ordem do tamanho do sistema (L), ou seja

$$\xi\,(T^{*}(\ell)) \sim L. \qquad (II-3)$$

Desde que nas visinhanças da temperatura crítica o comprimento de correlação do sistema infinito comporta-se da forma

$$\xi(T)\alpha\left(\frac{T - T_c}{T_c}\right)^{-\nu} \qquad (II-4)$$

segue

$$L^{-1/\nu} \sim \frac{T^{*}(L) - T_c}{T_c}. \qquad (II-5)$$

Comparando (II-2) e (II-5) conclui-se que

$$\Theta = 1/\nu \qquad (II-6)$$

SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO - IFQSC
FÍSICA

O expoente λ, apresentado em (II-1), contudo, não aceita uma interpretação tão simples. Deve-se salientar, no entanto, que em muitos modelos $\lambda = \Theta = 1/\nu$ (ver Barber 1983).

II-C - FSS

Consideramos, por simplicidade, uma rede hipercúbica d-dimensional de tamanho L (geometria A). Quando mantemos L finito, há uma competição entre dois comprimentos característicos do sistema, nominalmente o tamanho L e o comprimento de correlação descrito em (II-4) para $T \simeq T_c$. Em outras palavras, se L é finito e $T \simeq T_c$ o comprimento de correlação restringe-se à extensão da ordem L : o comportamento crítico é inibido. Quando, porém, $L \rightarrow \infty$, o comprimento de correlação tem alcance infinito.

Com base nas considerações acima, o comportamento assintótico de qualquer quantidade termodinâmica Q (tal como susceptibilidade, calor específico ou comprimento de correlação), calculado para um sistema de tamanho finito L (mas de extensão considerável), é dado pela hipótese fundamental do F.S.S. da forma

$$Q_L(T) = L^w F(y) \qquad (II-7)$$

onde $y \equiv L/\xi(T)$.

Para a determinação do expoente w tomamos o limite $L \rightarrow \infty$ de $X_L(T)$ e comparamos com a quantidade $X_\infty(T)$ de um ferromagneto infinito

$$X_\infty(T) \sim A\left(\frac{T - T_c}{T_c}\right)^{-\gamma} \qquad (II-8)$$

Dessa forma, devemos ter $w = \gamma/\nu$ ea função do F.S.S. F(y) com as propriedades (Fisher 1971)

$$F(y) = \begin{cases} constante & \text{para } y \to 0 \\ y^{-\gamma/\nu} & \text{para } y \to \infty \end{cases} \qquad (II-9)$$

A consideração de um único comprimento de correlação relevante, na hipótese do FSS, exclui qualquer possibilidade da expressão (II-7) descrever um comportamento tipo "crossover", desde que este é caracterizado pela presença de mais de um comprimento de correlação.

II-D - GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO FENOMENOLÓGICO

O Grupo de Renormalização fenomenológico proposto por Nightingale [18,19], tem se mostrado um método bastante útil na investigação do comportamento crítico em sistemas estatísticos bidimensionais, isto é, na obtenção de temperaturas e expoentes críticos a partir do estudo de cintas infinitas. Este método emprestou a hipótese findamental do FSS (II-7) que aplicada ao próprio comprimento de correlação ξ_L, expressa-se como

$$\xi_L(T) \sim L\tilde{F}\left(L/\xi(T)\right) \qquad (II-10)$$

onde $\xi(T)$ é o comprimento de correlação do análogo infinito.

A proposta de Nightingale decorre da observação de que na temperatura crítica do sistema infinito

$$\xi(T_c) \to \infty, \qquad (II-11)$$

e, portanto, a razão $\xi_L/\xi_{L'}$ para duas diferentes redes elimina a então constante $\tilde{F}(0)$ resultando em

$$\xi_L(T_c) = b\xi_{L'}(T_c) \qquad (II-12)$$

onde $b = L/L'$.

Podemos inferir uma renormalização do inverso da temperatura $\beta \rightarrow \beta'$, da forma

$$\xi_L(\beta) = b\xi_{L'}(\beta') \qquad (II-13)$$

onde $\beta = 1/k_B T$ (k_B = constante de Boltzmann).

Uma estimativa da temperatura crítica no limite $L \rightarrow \infty$ decorre do ponto fixo $\beta_L^* = \beta = \beta'$ na equação (II-13), com β_L^* convergindo aparentemente de maneira rápida para β_c com o incremento de L (detalhes em Privman e Fisher [20]). Na tabela I encontram-se as estimativas de T_c obtidas via (II-13) para o modelo de Ising bidimensional.

REDES	K_c	$Y_t = 1/\nu$
2,3	0.422361	1.0792
3,4	0.430884	1.0591
4,5	0.435953	1.0369
5,6	0.438258	1.0233
6,7	0.439310	1.0157
7,8	0.439831	1.0113
8,9	0.440116	1.0085
9,10	0.440286	1.0067
10,11	0.440394	1.0054
11,12	0.440466	1.0045
EXATO	0.440687	1.0000

Tabela I - Estimativas da temperatura crítica e expoente ν obtidos através do estudo de sistemas finitos. (ver Nightingale[18], 1976)

O expoente térmico y_T pode ser avaliado a partir da derivada no ponto

crítico

$$\left(\frac{\partial\beta'}{\partial\beta}\right)^{*} = b^{y_T}. \qquad (II-14)$$

Portanto, $\beta^{*} = \beta_c = 1/k_B T_c$ é um ponto fixo da transformação (II-13) e o expoente $y_T = 1/\nu$ pode ser obtido através de uma linearização em torno desse ponto. Da equação (II-13), chamando $\dot{\xi}$ a derivada de ξ em relação a β, decorre que

$$y_T = \frac{1}{\nu} = \frac{\ell n(\dot{\xi}_L(\beta_c)/\dot{\xi}_{L/b}(\beta_c)}{\ell n(L/L')}) - 1. \qquad (II-15)$$

Novamente, uma seqüência de estimativas desta natureza leva a excelentes resultados para o expoente ν, os quais também encontram-se na Tabela I.

II-E - MATRIZ DE TRANSFERÊNCIA E HAMILTONIANA ASSOCIADA

Devemos ressaltar que, embora já encontrados formalmente, os resultados práticos acerca de T_c e ν exigem o cálculo do comprimento de correlação para sistemas finitos, em função da temperatura. Considerando-se um sistema com geometria B, podemos escrever o comprimento de correlação ao longo da direção infinita como (veja Baxter [21])

$$\xi_L^{-1}(T) = \ell n(\lambda_0/\lambda_1) \qquad (II-16)$$

onde λ_0 e λ_1 são os dois maiores autovalores da matriz de transferência. Entretanto, será necessário diagonalizar matrizes de dimensões demasiado grandes (por exemplo, 6×10^4 para redes tipo Ising com 16 spins), o que dificulta a implementação em computador. Ocorre que as grandezas universais não dependem do parâmetro de rede e, por essa razão, é possível ajustar as constantes de acoplamento de forma que, na direção infinita da cinta, tenhamos o parâmetro de rede $\tau \to 0$ (limite do tempo contínuo). Tal procedimento permite interpretar

a matriz de transferência como um operador de evolução temporal

$$\hat{T} \simeq e^{-\tau \hat{H}}, \qquad (II-17)$$

podendo-se associar os maiores autovalores de $\hat{T}$ com os menores de $\hat{H}$ e à razão $\left(\frac{\lambda_0}{\lambda_1}\right)$ o primeiro gap de energia $(E_1 - E_0)$, a menos de constante.

Mesmo que impossibilitados, em geral, de diagonalizar essas hamiltonianas exatamente, elas despertam um especial interesse pelo fato de serem mais simples (esparsas) do que a matriz de transferência.

A divergência do comprimento de correlação, que caracteriza uma transição de fase de 2a ou maior ordem, equivale (pelas equações (II-16) e (II-17)), na formulação hamiltoniana, ao desaparecimento do primeiro gap de massa

$$G = E_1 - E_0, \qquad (II-18)$$

onde $E_0(E_1)$ é o estado fundamental (1o estado excitado).

Para sistemas finitos, o gap tem sua variação caracterizada da forma

$$G_L \alpha L^{s/\nu}, \qquad (II-19)$$

o que leva à estimativa do expoente s/ν segundo

$$\frac{s}{\nu} = \frac{\ell n(G_L/G_{L'})}{\ell n(L/L')} \qquad (II-20)$$

Nas seções que se seguem trataremos explicitamente da mudança de comportamento presente em nosso hamiltoniano. Primeiramente dedicamo-nos à análise do crossover e à existência de mais de um comprimento de correlação divergente. Feito isso, passamos ao desenvolvimento da hipótese estendida do FSS.

II-F - CROSSOVER

Sistemas descritos por hamiltonianos que apresentam uma determinada simetria, possuem um ponto fixo H^* que caracteriza o seu comportamento crítico.

Há porém sistemas mais complexos que não podem ser classificados de forma tão simples. Vamos, por exemplo, considerar um hamiltoniano do tipo

$$H = H_I(g) + \eta H_A(g) \qquad (II-21)$$

onde I e A representam os termos de isotropia e anisotropia, respectivamente; g é um acoplamento constante, η mede a anisotropia e varia entre 0 e 1.

Com o intuito de ilustrar o crossover, consideremos que H descreva, por exemplo, um ferromagneto de Heisemberg em um cristal com um eixo preferencial de simetria (escolhemos o eixo Z), o qual provoca campos cristalinos que atuam sobre os spins. Tal hamiltoniano pode ter a forma

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2}\sum_{r,r'} J(r,r')\vec{S}(r).\vec{S}(r') - \eta\sum_{r} S_z(r)^2. \qquad (II-22)$$

O parâmetro η, entendido como um campo responsável por uma quebra de simetria é relevante sobre o ponto fixo de Heisenberg. Se $\eta \neq 0$ jamais alcançaremos o ponto fixo de Heisenberg, mas o "cross-over" para qualquer dos pontos fixos de Ising ou XY:

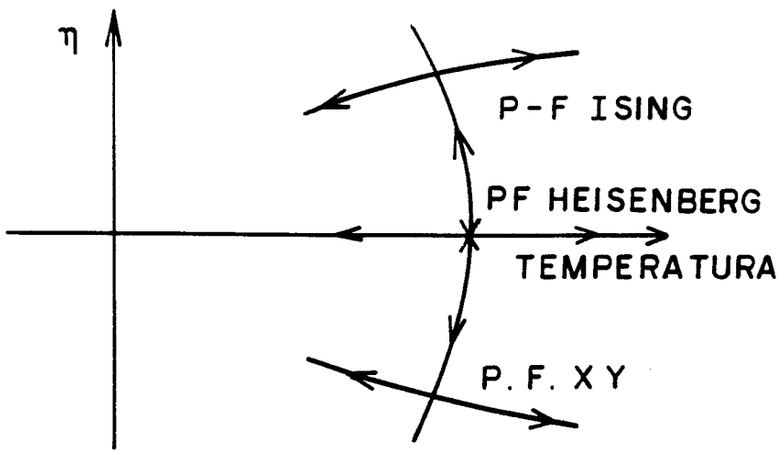


Figura 4: Projeção no plano (T, η) do comportamento crítico de $\mathcal{H}$.

Tendo-se em vista o hamiltoniano (II-21) passamos agora ao tratamento quantitativo do fenômeno ilustrado.

Considerando-se que H_A tenha uma simetria reduzida em relação a H_I, segue-se da hipótese de universalidade que o comportamento crítico isotrópico cruza-se sobre o comportamento crítico anisotrópico. Portanto, para η fixo, uma quantidade termodinâmica $X(g, \eta)$ comporta-se como

$$X(g,\eta) \sim \begin{cases} |g - g_c(0)|^{-x_0} & \eta = 0, \\ |g - g_c(\eta)|^{-x} & \eta > 0, \end{cases} \qquad (II-23)$$

para $g \simeq g_c(\eta)$, onde χ e χ_0 são, em geral, diferentes.

Segundo a teoria de escala envolvendo crossover proposta por Pfeuty et al[6] (1974) a quantidade $X(g, \eta)$ comporta-se da forma

$$X(g,\eta) = t^{-x_0} F(\eta/t^{\Phi}) \qquad (II-24)$$

onde

$$t = (g - g_c(0))/g_c(0) \qquad (II-25)$$

é o acoplamento reduzido, Φ é o expoente de crossover e a função $F(Z)$ tem as propriedades

$$F(z) \sim \begin{cases} \text{constante}, & z << 1, \\ (z - z_c)^{-\chi}, & z \to z_c, \end{cases} \qquad (II-26)$$

onde z_c é relativo a $g_c(\eta)$.

Pode-se considerar em (II-24), segundo Riedel and Wegner [5] (1969), o acoplamento reduzido deslocado

$$\dot{t} = (g - g_c(\eta))/g_c(0) \qquad (II-27)$$

segundo o que

$$F(z) \sim \begin{cases} \text{constante} & z << 1 \\ z^{(\chi-\chi_s)/\Phi} & z >> 1. \end{cases}$$

Em $z \sim 1$ encontra-se a região de crossover no sentido de que para $g \leq g^{\chi}$, onde

$$g^{\chi} = g_c(\eta) + A\eta^{1/\Phi} \qquad (II-28)$$

e A é uma constante, o efeito da anisotropia torna-se dominante sobre o comportamento isotrópico. É conveniente, para esquematizar esta imagem, voltar ao ferromagneto de Heisenberg. Quando $\eta \neq 0$, o calor específico C comporta-se da forma

$$C \sim |t|^{-\alpha}\psi_{\gtrless}(\eta|t|^{-\Phi}). \qquad (II-29)$$

Contudo, para η pequeno, o calor específico praticamente coincidirá com o ponto onde $\eta = 0$

SERVIÇO DE FÍSICA

$(C \sim |t|^{-a}\psi \gtrless (0))$, exceto para temperaturas reduzidas tal que $\eta|t|^{-\Phi} >_{\sim} 1$, isto é, $|t| \lesssim \eta^{1/\Phi}$. Dentro desta região nós encontramos o comportamento de Ising, ou o XY:

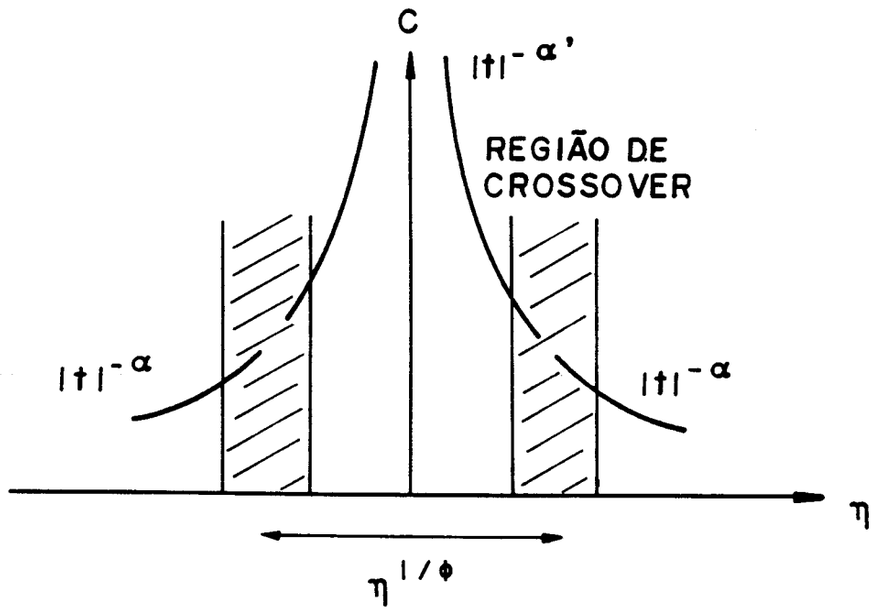


Figura 5: Esquematização do crossover quanto ao calor específico.

O expoente de crossover Φ pode ser calculado derivando-se X em relação a η, em $\eta = 0$

$$\frac{\partial X}{\partial \eta}|_{\eta=0} \sim t^{-(X_\phi+\Phi)}, \qquad (II-30)$$

tal que a derivada do logarítmo de X comporta-se da forma

$$\frac{\partial \ell n X}{\partial \eta}|_{\eta=0} \sim t^{-\Phi}, \qquad (II-31)$$

Passamos, agora, ao tratamento da hipótese estendida do FSS (EFSS) onde, como já salientado, deve-se abarcar a possibilidade de mais de um comprimento de correlação que diverge. Para o crossover anisotrópico podemos definir dois comprimentos de correlação ξ_1 e ξ_2 de modo que para $\eta = 0$ ambos divergem em $g_c(0)$, ao passo que para $\eta > 0$, somente um comprimento de correlação diverge em $g_c(\eta)$ enquanto o outro permanece constante.

Usando a forma estendida de escala podemos escrever:

$$\xi_1 = t^{-\nu_0} F_1\left(\eta/t^{\Phi}\right) \qquad (II-32)$$

e

$$\xi_2 = t^{-\nu_0} F_2\left(\eta/t^{\Phi}\right) \qquad (II-33)$$

onde $F_1(z)$ e $F_2(z)$ tem as formas assintóticas

$$F_1(z) = \begin{cases} A & z \to 0 \\ B & z \to z_c \end{cases} \qquad (II-34)$$

onde A e B são constantes, e

$$F_2(z) = \begin{cases} A & z \to 0 \\ (z - z_c)^{-\nu} & z \to z_c \end{cases} \qquad (II-35)$$

II-G - A HIPÓTESE ESTENDIDA DO FSS

Voltamos a considerar a geometria A que encerra um hipercubo d-dimensional de extensão finita L em todas as dimensões.

Desde que pretendemos considerar a possiblidade de ocorrência do fenômeno crossover no limite termodinâmico, devemos introduzir uma segunda variável na hipótese usual do FSS. As discussões prévias sugerem que para um sistema finito a competição entre L/ξ_1 e L/ξ_2, para g e η fixos, determinará qual comportamento crítico deverá ocorrer no limite termodinâmico.

A quantidade termodinâmica $X(g, \eta)$, cujo comportamento crítico em $L \to \infty$ foi discutido na seção anterior, deve comportar-se então, para um sistema grande mas de

tamanho finito L, da forma

$$X_L(g,\eta) \approx L^w Q(L/\xi_1, L/\xi_2), \qquad (II-36)$$

onde a constante w será determinada com base em condições a serem impostas sobre o comportamento assintótico da função do EFSS $Q(u,v)$.

Primeiramente, para g e η fixos tal que $g \simeq g_c(\eta)$, devemos reproduzir a forma de escala do crossover (II-24) quando $L \to \infty$. Para tal, com o intuito de cancelar qualquer dependência em L, podemos assumir

$$Q(u,v) \xrightarrow[u,v\to\infty]{} u^{-w} G(u/v), \qquad (II-37)$$

G sendo uma função de $y = u/v = \xi_2/\xi_1$.

Devido às equações (II-32) e (II-33), podemos escrever (II-37) como

$$Q(u,v) \to L^{-w} t^{-w\nu_0} F(\eta/t^{\Phi}) \qquad (II-38)$$

onde

$$F(z) = F_1^w(z) G[F_2(z)/F_1(z)] \qquad (II-39)$$

tal que

$$X(g,\eta) = Lim_{L\to\infty} X_L(g,\eta) = t^{-w\nu_0} F(z) \qquad (II-40)$$

Da comparação de (II-40) com (II-24), decorre

$$w = \chi_0/\nu_0 \qquad (II-41)$$

Requeremos, em seguida, que a função Q recupere o "ansatz" usual do FSS para η fixo. Logo, para L finito e $\eta = 0$ fixo, $\xi_1 = \xi_2$, tal que

$$X_L(g) = L^{\chi_0/\nu_0} R(L/\xi_2) \qquad (II-42)$$

onde $R(L/\xi_2) = R(L/\xi_2, L/\xi_2)$. Contudo, para preservar a dependência em L e recuperar o "ansatz" usual do FSS, devemos assumir para L finito, $\eta > 0$ fixo e $g \simeq g_c(\eta)$, que a função Q seja separável segundo

$$Q(u,v) \sim S(u)\,T(v)\,, \qquad (II-43)$$

com S e T sendo funções de escala das suas variáveis. Por essa razão, como para $\eta > 0$ ξ_1 é uma função bem comportada de η (ver equações (II-32) e (II-34)), podemos escrever $u \sim Lf(\eta)$ e esperar que

$$S(u) \sim u^e \sim [Lf(\eta)]^e \qquad (II-44)$$

para primeira ordem em L, com e a ser determinado.

Finalmente, podemos escrever para $\eta > 0$

$$X_L(g,\eta) \approx L^{e/\nu}\,[f(\eta)]^e\,T(L/\xi_2) \qquad (II-45)$$

onde

$$e = \chi/\nu - \chi_0/\nu_0,$$

é consistente com a hipótese usual do FSS.

É importante notar que a equação (II-44) é somente válida para $L \gtrsim \xi_1(g,\eta)$, ou seja, a descontinuidade esperada em $\eta = 0$ no expoente em L apenas toma lugar em

$L \to \infty$. Para $L < \xi_1(g,\eta)$ próximo ao ponto crítico instável ($g_c(0)$) o sistema comporta-se ligeiramente diferente.

Estimativas sucessivas de $\psi_L(\eta)$, para o expoente em L na hipótese EFSS, decorrem da equação (II-20) relativamente a $X_L(g,\eta)$, ou seja

$$\psi_L(\eta) \equiv \frac{\ell n X_{L+1}(g_c(\eta),\eta) - \ell n X_L(g_c(\eta),\eta)}{\ell n(L+1/L)}, \qquad (II-46)$$

d'onde deve-se produzir

$$\psi_L(0) \to \chi_0/\nu_0 \qquad \text{com} \quad L \to \infty \qquad (II-47)$$

$$\psi_L(\eta) \to \chi/\nu \qquad \text{com} \quad L \to \infty \qquad (II-48)$$

A razão Φ/ν_0 pode ser estimada através de procedimento similar : efetuando-se a derivada de X_L relativa a η sobre $\eta = 0$ e considerando (II-30) para $\frac{\partial f_2}{\partial \eta}|_{\eta=0}$, obtemos

$$\frac{\partial X_L}{\partial \eta}|_{\eta=0} \approx L^{1+X_0/\nu_0} t^{\nu_0-\Phi} Z(L/t^{-\nu_0}), \qquad (II-49)$$

onde Z é alguma função da variável de escala Lt^{ν_0}, o que implica

$$\frac{\partial(\ell n X_L)}{\partial \eta}|_{\eta=0} \sim L t^{\nu_0-\Phi} Y(L/t^{-\nu_0}), \qquad (II-50)$$

usando-se o fato de que para $\eta = 0$

$$\xi_1 = \xi_2 \approx t^{-\nu_0}. \qquad (II-51)$$

Quanto à função $Y(u_0)$, com $u_0 = L/\xi_2$ para $\eta = 0$ (conforme equações (II-35) e (II-40)), decorrem as propriedades:

$$lim_{u_0 \to -\infty} Y(u_0) \sim u_0^{-1}. \qquad (II-52)$$

com o intuito de cancelar a dependência residual em L, e

$$lim_{u_0 \to -\infty} Y(u_0) \sim u_0^{\Phi/\nu_0 - 1}, \qquad (II-53)$$

para evitar a possibilidade de um comportamento singular para L finito quando $t \to 0$. Considerando-se (II-53) obtemos via (II-50)

$$ln\left(\frac{\partial}{\partial \eta} ln X_c[g_c(\eta)]\,|_{\eta=0}\right) \approx \frac{\Phi}{\nu_0} ln L \qquad (II-54)$$

tal que a razão Φ/ν_0 explicita-se plotando em escala log-log a derivada logarítmica de X com relação a η (em $\eta = 0$) versus L.

II-H - INVARIÂNCIA CONFORME

Evidencia-se nitidamente nas seções anteriores o caráter fundamental do princípio da invariância de escala na determinação de informações relativas ao comportamento crítico de sistemas estatísticos. Como vimos, podemos conhecer o caminho para a criticalidade de um sistema estudando o comportamento de certas correlações, quando uma transformação de escala (uniforme) é feita no sistema.

Contudo, no seu trabalho pioneiro de 1970 Polyakov [35] sugere que na criticalidade o sistema apresenta uma simetria ainda maior, ou seja ele é invariante frente a transformações que o deformam preservando ângulos. Portanto na criticalidade, além da invariância de escala o sistema apresenta a invariância conforme. Decorre, então, que sob uma transformação de escala, na qual o fator λ depende continuamente da posição,

$$\vec{r}' = \lambda(\vec{r})\vec{r}. \qquad (II-55)$$

SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO - IFQSC
FÍSICA

As funções de correlação no ponto crítico, continuam obedecendo uma equação semelhante à

$$< \Phi_1(r_1)\Phi_2(r_2)\ldots >= \Pi_{i=1}^{L}\lambda^{-x_i} < \Phi_1(r_1')\Phi_2(r_2')\ldots >, \qquad (II-56)$$

onde $\vec{r}$ é a posição relativa à rede original e $\vec{r'}$ à rede reescalonada. Os números x_i são expoentes críticos característicos das densidades Φ_i.

Tratando-se do caso mais geral de um reescalonamento não uniforme onde $\lambda = \lambda(r)$ (figura 6), a densidade Φ_i transforma-se localmente de forma que (II-56) permanecerá válida contanto que o mapeamento $r \rightarrow r'$ corresponda localmente a uma dilatação e uma rotação. Tal mapeamento preserva os ângulos locais,mas pode deformar a tal ponto o sistema que as duas funções de correlação em (II-56) acabam sendo avaliadas em diferentes geometrias.

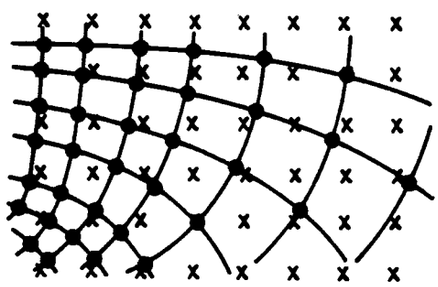


Figura 6: Mapeamento conforme onde a rede original, denotada por cruzes, é deformada por uma transformação que preserva os ângulos.

Desses aspectos gerais da teoria conforme pode-se elaborar no sentido de se efetuar uma análise mais poderosa do comportamento crítico de sistemas bidimensionais. É o que desenvolvemos nas próximas seções.

II-I - INVARIÂNCIA CONFORME E FSS

Partimos da transformação logarítmica $w = \ell nz$ proposta por Cardy [10], que consiste no mapeamento de todo o plano z sobre uma cinta da superfície cilíndrica. Segundo Polyakov, a função de correlação em uma e outra geometria não são independentes e relacionam-se de acordo com a equação

$$< \Phi(z_1, \overline{z}_1)\Phi(z_2, \overline{z}_2) >_{T_c} = |w'(z_1)|^x |w'(z_2)|^x < \Phi(w_1, \overline{w_1})\Phi(w_2, \overline{w_2}) > \qquad (II-57)$$

onde x é dimensão anômala da quantidade Φ e $w'(z)$ é a derivada de w com relação a z.

A função de correlação à esquerda diz respeito ao plano infinito que, na criticalidade, é dada por

$$< \Phi(z_1, \overline{z_1})\Phi(z_1, \overline{z_2}) >_{T_c} \sim \frac{1}{|z_1 - z_2|^{2x}}. \qquad (II-58)$$

Escolhendo

$$w = \frac{L}{2\pi}\ell nz \qquad (z = \exp(y + i\Theta)) \qquad (II-59)$$

o plano todo é mapeado na cinta $-L/2 \leq Imw \leq L/2$, conforme mostra a figura 7.

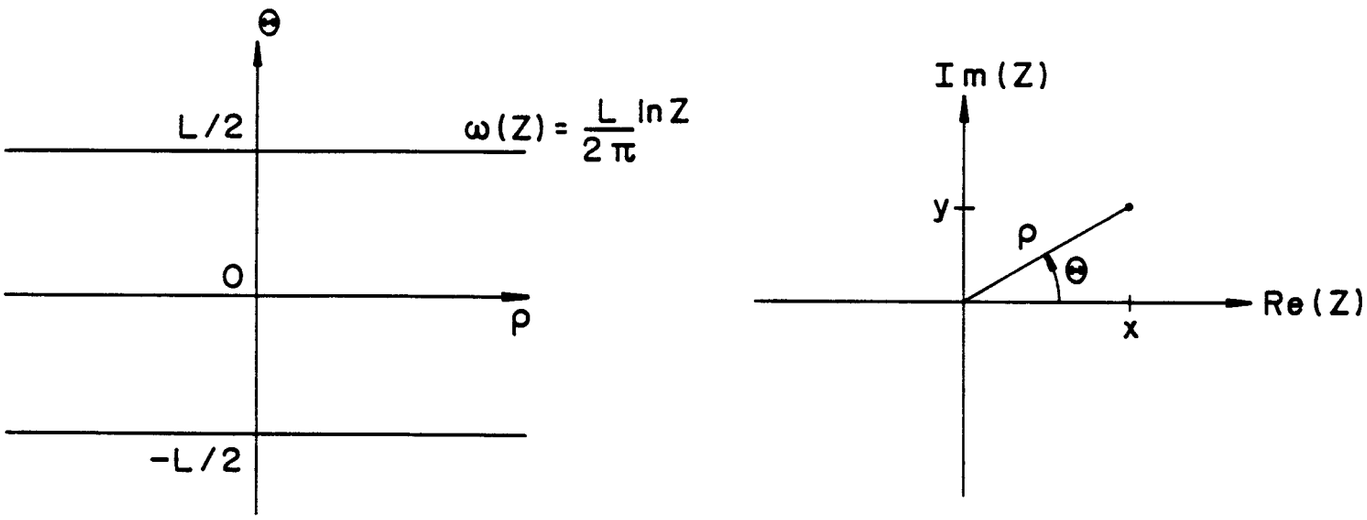


Figura 7: A transformação $w(z) = \frac{L}{2\pi} \ln z$ mapeia o plano z em uma cinta finita na direção θ $(-\frac{L}{2} < \theta < \frac{L}{2})$ e infinita em ρ.

Realizando-se as devidas substituições, obtemos para a função de correlação na cinta

$$< \Phi(w_1, \overline{w_1})\Phi(w_2, \overline{w_2}) >_{T_c} = \frac{(\pi/L)^{2s}}{|2senh\frac{\pi}{L}(w_1 - w_2)|^{2s}} \qquad (II-60)$$

que, considerando-se $|w_1 - w_2| >> L/\pi$, resulta em

$$< \Phi(w_1, \overline{w_1})\Phi(w_2, \overline{w_2}) >_{T_c} \sim \exp\left(\frac{-2\pi}{L} x |w_1 - w_2|\right) \qquad (II-61)$$

O decaimento exponencial explicitado em (II-61), revela uma forma funcional radicalmente diferente daquela da função de correlação no plano Z. Entretanto, esse fato está de acordo com a nova geometria correspondente a um sistema essencialmente unidimensional, que por sua vez não sofre transição de fase à temperatura finita.

Comparando a equação (II-61) com o decaimento

SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO - IFQSC
FÍSICA

$$e^{-|w_1-w_2|/\xi}, \qquad (II-62)$$

compatível com a dimensionalidade da cinta, chegamos à expressão fundamental que relaciona o comprimento de correlação ξ ao índice x.

$$L\xi_L^{-1} = 2\pi x, \qquad (II-63)$$

ou seja, a razão (L/ξ_L) é universal e está diretamente ligada ao índice crítico.

Dessa forma, quando lidamos com a função de correlação spin-spin, obtemos o expoente crítico η da magnetização desde que nesse caso $2x = \eta$. Se a função de correlação envolver outros operadores, então outros índices críticos serão obtidos.

Desde que a cada operador (cujo índice crítico vale x) associa-se um comprimento de correlação diferente, a relação (II-63) permite determinar os índices críticos de um modelo a partir dos vários comprimentos de correlação. Estes, por sua fez, podem ser obtidos da diagonalização da matriz de transferência via equação (II-16), o que já foi tratado na seção (II-E).

II-J - ESPECTRO

Retornamos, agora, à função de correlação numa cinta de largura L, com condições periódicas de contorno, calculada na formulação da matriz de transferência. Através deste enfoque muitas propriedades da matriz de transferência de um sistema crítico numa cinta finita têm sido relacionadas a quantidades do sistema infinito usando-se o princípio da invariância conforme.

Consideramos a matriz de transferência, expressa em (II-17), escrita na forma

$$\hat{T} = e^{-a\hat{H}} \qquad (II-64)$$

onde "a" é o espaçamento da rede. No limite do tempo contínuo $a \to 0$ (direção temporal), $\hat{H}$ pode ser pensado como um operador de evolução temporal no espaço euclideano e identificado com o hamiltoniano da teoria quântica de campos em $(1+1)$ dimensões. Nesta formulação os campos de escala $\Phi(u,v)$ tornam-se operadores $\hat{\Phi}(v)$ atuando no mesmo espaço de Hilbert que a matriz de transferência. Usamos w para denotar um ponto da cinta, com $w = u + iv$, onde u é a coordenada na direção temporal e v, na direção finita da cinta (veja figura 7).

Devido à invariância translacional em v, os autoestados de $\hat{H}$ podem ser escolhidos como sendo os autoestados do operador momentum $(-i\partial/\partial v)$ com autovalores K quantizados em unidades de $2\pi/L$. Assim, introduzimos um conjunto completo de autoestados de $\hat{H}, |n,K>$ com energia En e momentum K.

$$\hat{H}|n,K> = En|n,K> \qquad (II-65)$$

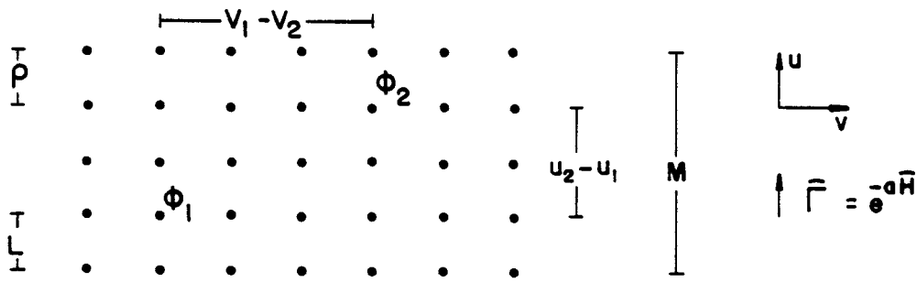


Figura 8: Reticulado utilizado no cálculo da função de correlação.

A função de correlação entre os operadores $\hat{\Phi}(u_1,v_1)$ e $\hat{\Phi}(u_2,v_2)$ segue-se do traço

$$< \hat{\Phi}(u_1,v_1)\hat{\Phi}(u_2,v_2) > = T_R \left\{ \hat{T}^P \hat{\Phi}(v_1) \hat{T}^{(u_1-u_2)} \hat{\Phi}(v_2) \hat{T}^L \right\} Z^{-1}, \qquad (II-66)$$

onde Z é a função de partição $Z = T_r\{\hat{T}^M\}$.

Inserindo um conjunto completo de autoestados $\{|m>\}$ teremos

$$
\begin{aligned}
< \Phi(u_1,v_1)\Phi(u_2,v_2) >= & \sum_m < m|\hat{T}^P\hat{\Phi}(v_1)\hat{T}^{(u_1-u_2)}\hat{\Phi}(v_2)\hat{T}^L|m > Z^{-1} \\
& = \sum_{n,m} e^{-E_m(p+L)}e^{-|u_1-u_2|E_n} < m|\hat{\Phi}(v_1)|n,k > \qquad (II-67) \\
& < n,k|\hat{\Phi}(v_2)|m > Z^{-1}
\end{aligned}
$$

Sendo $P+(u_1-u_2)+L=M$ podemos tomar $M\to\infty$, concomitantemente com $P\to\infty$, mantendo $|u_1-u_2|$ fixo. Feito isso e mantendo a unicidade do estado fundamental, a função de correlação escreve-se da forma

$$
< \Phi(u_1,v_1)\Phi(u_2,v_2) >= \sum_n < 0|\hat{\Phi}(v_1)|n,k > e^{-(E_n-E_0)(u_1-u_2)} < n,k|\hat{\Phi}(v_2)|0 > \quad (II-68)
$$

onde os elementos de matriz dependem de v_1 e v_2 com o $e^{ik(v_1-v_2)}$.

Usando a notação $w=u+iv$, podemos reescrever a função de correlação na cinta (II-60), da forma

$$
< \Phi(u_1,v_1)\Phi(u_2,v_2) >= \frac{(2\pi/L)^x}{|2cosh\left(\frac{2\pi}{L}(u_1-u_2)\right)-2cos\left(\frac{2\pi}{L}(v_1-v_2)\right)|^x} \qquad (II-69)
$$

Expandindo-se o denominador, obtemos, para $u_1>u_2$

$$
\begin{aligned}
& < \Phi(u_1,v_1)\Phi(u_2,v_2) >= \\
& = \left(\tfrac{2\pi}{L}\right)^{2x}\sum_{m,\overline{m}=0} a_m a_{\overline{m}} e^{\frac{-2\pi}{L}(x+m+\overline{m})(u_1-u_2)} e^{\frac{2\pi}{L}i(m-\overline{m})(v_1-v_2)}
\end{aligned} \qquad (II-70)
$$

onde os coeficientes a_m são dados por

$$
a_M = \frac{T(x+m)}{m!\ T(x)} \qquad (II-71)
$$

Comparando (II-70) com a função de correlação obtida na formulação da matriz de transferência (II-68) concluímos que a cada operador Φ_i corresponde um número

infinito de autoestados de $\hat{H}$, caracterizados pelos inteiros $(m, \overline{m})$, com energia e momentum, respectivamente

$$E_{m,\overline{m}} = E_0 + \frac{2\pi}{L}(x_i + m + \overline{m}), \quad P_{m,\overline{m}} = \frac{2\pi}{L}(m - \overline{m}). \qquad (II-72)$$

Se Φ_i possuir spin s_i diferente de zero, o momentum será modificado para $2\pi/L(s_i + m - \overline{m})$.

Desde que, na cinta de largura L, temos um número finito de espaçamentos da rede, a matriz de transferência terá somente um número finito de autoestados. Os estados excitados de $\hat{H}$, expressos em (II-72) com $m \neq 0$ e/ou $\overline{m} = 0$, são associados a operadores com dimensão de escala $x+m+\overline{m}$. Assim, o espectro de $\hat{H}$ é construído a partir de seqüências de níveis de energia, ou seja, "cascatas" da forma

$$E_0, E_0 + \frac{2\pi}{L}x_i, E_0 + \frac{2\pi}{L}(x_i + 1), \ldots, E_0 + \frac{2\pi}{L}(x_i + n), \ldots \qquad (II-73)$$

Chamamos de operadores primários aos primeiros de cada "cascata", ou seja, aqueles que correspondem aos níveis de mais baixa energia $(E_0 + \frac{2\pi}{L}x_i)$ de cada seqüência i. Dessa forma, a partir do conhecimento das dimensões de escala χ_i dos operadores primários, podemos, através da seqüência (II-72), construir todo o espectro de $\hat{H}$.

Vemos ainda, de (II-73), que todos os "gaps" $E_n - E_0$ escalam com L^{-1} e que, portanto, desaparecerão no limite $L \to \infty$. A inexistência de gaps no ponto crítico é a causa da invariância conforme (e, consequentemente, da invariância de escala) do sistema em estudo.

II-L - CORREÇÕES AO TAMANHO FINITO E OPERADORES PRIMÁRIOS

Em decorrência do mapeamento do plano Z sobre a tira cilíndrica de espessura finita, outro resultado de particular interesse, relativo ao menor autovalor E_0 de

$\hat{H}$ é apresentado. Segundo Blöte et al [15] e Affleck [16], devido à invariância conforme do sistema infinito no ponto crítico, o comportamento assintótico do estado fundamental pode ser predito tratando-se de uma tira cuja espessura $L \to \infty$. Para condições de contorno periódicas, o resultado é

$$\frac{E_0(L)}{L} = e_\infty - \frac{\pi c}{6L^2} + 0(L^{-4}) \qquad (II-74)$$

onde e_∞ é o limite da energia do estado fundamental por sítio, e c a chamada carga central (número de anomalia conforme).

Quanto à condição livre de contorno, naturalmente, em vista de se ter que considerar a energia de superfície, decorre que

$$\frac{E_0}{L}(L) = e_\infty - \frac{a}{L} - \frac{\pi c}{24L^2} + 0(L^{-4}) \qquad (II-75)$$

A importância desses resultados é que, como veremos a seguir, o número de anomalia conforme contém praticamente todas as informações acerca do comportamento crítico do modelo.

Segundo Belavin, Polyakov e Zamolodchikov [8] parametrizando C da forma seguinte

$$C = 1 - \frac{6}{m(m+1)}, \qquad (II-76)$$

com m racional, todos os expoentes críticos serão obtidos como combinação das dimensões $h_{p,q}$ obedecendo a fórmula de Kac,

$$h_{p,q} = \frac{(p(m+1) - qm)^2 - 1}{4m(m+1)}. \qquad (II-77)$$

Friedan, Qiu e Shenker [13] mostraram que, numa teoria unitária com $C < 1$, m deve ser um inteiro > 2, e que as únicas dimensões de escala possíveis para os operaodres primários provêm da fórmula de Kac com $1 \leq q \leq p \leq m-1$.

Tais dimensões de escala χ e os spins S dos operadores primários obedecem às relações

$$\chi = h + \overline{h} \qquad \text{e} \qquad S = h - \overline{h} \tag{II-78}$$

no caso de condições periódicas de contorno.

Deve-se ressaltar, no entanto, que o acesso ao conjunto $\{hp, q\}$ é insuficiente para a determinação do modelo em questão e, tanto pior, para se estabelecer a correta conexão entre os expoentes encontrados e os correspondentes operadores. Estudando o modelo de potts com 3 estados por sítio, sujeito a uma variedade de condições de contorno, Gehlen e Rittenberg [22], procurando solucionar a questão, explicaram um subconjunto das representações $(h, \overline{h})$ associadas à anomalia conforme $c = 8/10$ do modelo. Desde que este valor de c deve também explicar o modelo de Ising tetracrítico parecia razoável não esgotar, com o Potts-3, todo o conjunto dos $h's$. Entretanto, segundo Cardy [23], é possível chegar às dimensões ausentes da análise de Gehlen e Rittenberg considerando um novo tipo de condição de contorno.

II-M - INVARIÂNCIA CONFORME E ÁLGEBRA DE VIRASSORO

A invariância conforme decorre do fato de podermos descrever o comportamento de sistemas estatíticos bidimensionais por operadores da teoria quântica de campos, desde que, como salientado na seção (II-E), tais sistemas podem ser interpretados como sistemas quânticos unidimensionais.

Em teoria quântica de campos, constitui-se numa característica importante lidar com estados com norma positiva, isto é, o espaço de estado é um espaço de Hilbert e, portanto, a teoria é unitária. As transformações locais nas coordenadas, enfraquecendo acoplamentos numa direção e fortalecendo na outra, são geradas pelo operador caracterizado pelo tensor momento-energia $T_{\mu\nu}$.

Assim, no estudo do grupo das transformações conforme, com o objetivo de identificar os operadores que geram simetrias por translações, rotações e dilatações, deparamo-nos com o tensor momuntum-energia. Para assegurar que haja a invariância de escala global, o tensor $T_{\mu\nu}$ deve ser construído de forma a ser simétrico ($T_{\mu\nu} = T_{\nu\mu}$) e com traço nulo ($T_{\mu\mu=0}$).

Da decomposição do tensor momento-energia em duas componentes independentes $T(z)$ e $\overline{T}(\overline{z})$, expandidas em uma série de Laurent, segue-se

$$T(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} L_n z^{-n-2}, \quad \overline{T}(\overline{z}) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \overline{L}_n \overline{z}^{-n-2}. \qquad (II-79)$$

Sob o efeito de uma transformação conforme inifinitesimal

$$z \to z + \epsilon(z), \quad \overline{z} \to \overline{z} + \epsilon(\overline{z}) \qquad (II-80)$$

onde

$$\epsilon(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \epsilon_n z^n, \quad \overline{\epsilon}(\overline{z}) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \overline{\epsilon}_n \overline{z}^n, n\epsilon z \qquad (II-81)$$

um campo local $\Phi(z, \overline{z})$ tem sua variação $\delta\Phi$ descrita na forma

$$\delta\Phi(w, \overline{w}) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \epsilon_{n+1} \left[L_n, \Phi(w, \overline{w})\right] + \sum_{n=-\infty}^{\infty} \overline{\epsilon}_{n+1} \left[\overline{L}_n, \Phi(w, \overline{w})\right]. \qquad (II-82)$$

Podemos, então, segundo a equação (II-82), identificar os operadores L_n e $\overline{L}_n$ como aqueles que geram as transformações conforme infinitesimais

$$z \to z + \epsilon z^{n+1}, \quad \overline{z} \to \overline{z} + \overline{\epsilon} + \overline{z}^{n+1} \qquad (II-83)$$

Combinando devidamente os operadores L_n e $\overline{L}_n$, geramos transformações conforme de particular interesse porque definidas globalmente. Assim, definimos o grupo

SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO
FÍSICA

das transformações confrome globais

$$L_n, \overline{L}_n \quad n = -1, 0, 1, \tag{II - 84}$$

Cujos operadores satisfazem as seguintes relações

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

$$[L_m, L_n] = (m-n)\overline{L}_{m+n} + c\frac{m(m^2-1)}{12}\delta_{m,-n} \tag{II - 85}$$

$$\left[L_m, \overline{L}_n\right] = 0$$

onde a constante c, apresentada na seção anterior, é a constante denominada anomalia conforme ou carga central da àlgebra de Virassoro. Desde que pretendemos teorias unitárias, devemos impor a condição de hermiticidade para $T(z)$, o que deverá prover-nos das relações

$$L_n^+ = -L_{-n}, \quad \overline{L}_n^+ = \overline{L}_{-n} \tag{II - 86}$$

A álgebra das transformações conforme locais é, então, um produto de duas àlgebras de Virassoro, L_n e $\overline{L}_n$, que comutam entre si.

Finalizando esta seção, é importante ressaltar que a álgebra de Virassoro é a extensão central da álgebra dos operadores diferenciais

$$L_n = z^{n+1}\frac{d}{dz}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \tag{II - 87}$$

de cujas regras de comutação, decorre

$$[L_n, L_m] = (m-n)L_{n+m}. \tag{II - 88}$$

II-N - ESPAÇO DE HILBERT E REPRESENTAÇÃO DA ÁLGEBRA DE VIRASSORO

Desejamos, nesta seção, caracterizar a álgebra de Virassoro através dos estados $|h>$, representados justamente mediante os campos primários $\Phi(0)$ da teoria conforme, ou seja

$$|h>=\Phi(0)|0> \qquad (II-89)$$

Considerando-se a expansão do operador produto entre o tensor energia e o campo primário $\Phi(z)$, encontramos

$$\begin{aligned}[L_n,\Phi(w)] = & \oint \frac{dz}{2\pi i} z^{n+1}T(z)\Phi(w) \\ & = h(n+1)w^n\Phi(w)+w^{n+1}\partial\Phi(w),\end{aligned} \qquad (II-91)$$

tal que $[L_n,\Phi(w)]=0, n>0$. Segue-se, então, que o estado $|h>$ deve satisfazer as relações

$$L_0|h>=h|h> \qquad L_n|h>0, \qquad n>0. \qquad (II-92)$$

Contudo, para que (II-92) se estabeleça, outras importantes condições acerca dos operadores $L_n's$ derivam do requerimento de regularidade do que se segue da expressão (II-79)

$$T(z)|0>=\sum_{n\in z} L_n z^{-n-2}|0>, \quad \overline{T}(\overline{z})=\sum_{n\in z}\overline{L}_n\overline{z}^{-n-2} \qquad (II-93)$$

em $z=0$. Evidentemente, somente termos com $m\leq -2$ são permitidos, tal que

$$L_n|0>=\overline{L}_n|0>=0 \qquad n\geq -1 \qquad (II-94)$$

Outra condição a ser satisfeita pelo vácuo, de modo a torná-lo invariante sob as transformações conforme, exige

$$L_{0,\pm 1}|0>=0. \qquad (II-95)$$

Obtêm-se ainda as expressões em (II-92) das relações de comutação (II-84) com $m=0$, do que resulta

$$L_0(L_n|h>)=(h-n)(L_n|h>), \qquad (II-96)$$

É possível a identificação, em (II-96), de L_n com um operador de levantamento se $n<0$, e de abaixamento se $n>0$, daí as relações em (II-92). O espaço de Hilbert é gerado aplicando-se o operador de levantamento ao estado fundamental $|0>$.

Todo estado que satisfaça (II-92) é conhecido como estado primário, a partir do qual, e assegurando-nos de (II-96), geramos todos os estados excitados segundo o bloco conforme

	nível
$\|h>$	0
$L_{-1}\|h>$	1
$L_{-2}\|h>, L_{-1}^2\|h>$	2
$L_{-3}\|h>, L_{-1}L_{-2}\|h>, L_{-1}^3\|h>$	3
$\vdots$	$\vdots$

$(II-97)$

Em síntese, verifica-se a expressão

$$|h+r>=L_{-r_1}\ldots L_{-r_k}|h> \qquad r_i>0, \qquad (II-98)$$

onde $r=r_1+\ldots+r_K$.

O número de operadores relativos ao nível N equivale ao número de partições do inteiro $N(P(N))$, todos com dimensão de escala $x+N$.

É de fundamental importância notar que nem todos os estados obtidos pela aplicação de operadores no mesmo nível são independentes, e como conseqüência ocorre que a degenerescência do nível N não é, em geral, igual a $P(N)$. Usando o caráter da fórmula calculada por Rocha-Caridi [24] (1984). Altschüler and Lacki [25] (1985), podemos precisar corretamente a degenerescência $d(h,r)$ correspondente ao nível $(h+r)$.

Abaixo apresentamos a tabela de caracteres associada ao modelo de Ising, de cuja carga central $c = 1/2$ decorre $h = 0, 1/16, 1/2$.

	r										
Δ	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
0	1	0	1	1	2	2	3	3	5	5	7
1/2	1	1	1	1	2	2	3	4	5	6	8
1/16	1	1	1	2	2	3	4	5	6	8	10

Tabela II - Função $d(h,r)$ representando a degenerescência do nível $(h+r)$ da representação irredutível com o menor peso h.

Posto que a variação de um operador "secundário", sob uma transformação conforme infinitesimal, pode ser expressa linearmente em termos das representações do mesmo bloco ao qual pertence, podemos identificar cada bloco conforme com uma representação irredutível da álgebra do grupo conforme. O espaço de hilbert da teoria conforme pode ser, então, decomposto em representações irredutíveis das duas álgebras de Virassoro formadas pelos operadores L_n e $\overline{L}_n$.

À por fim neste capítulo, cumpre frisar o significado físico de h e $\overline{h}$ junto ao espectro que, através dos quais, ergue-se via pares da representação irredutível. Estudando-se a função de correlação dos campos que são invariantes frente a transformações conforme globais (geradas pelos $L_n, \overline{L}_n$, $n = -1, 0, 1$), em particular, pode-se determinar a forma da função de dois pontos.

$$< \Phi(z,\overline{z})\Phi(0,0) > \sim \frac{1}{|z|^{2h}|\overline{z}|^{2\overline{h}}} = \frac{e^{-2i\Theta(h-\overline{h})}}{|r|^{2(h+\overline{h})}} \qquad (II-99)$$

onde $z = re^{i\Theta}, \overline{z} = re^{-i\Theta}$, $x = h+\overline{h}$ é a dimensão de escala e $s = h-\overline{h}$ o spin do campo

primário $(h, \overline{h})$.

Desde que podemos associar o hamiltoniano ao gerador das dilatações no plano z (translações na cinta), ou seja $H = L_0 + \overline{L}_0$, segue-se para os níveis de energia F(P) associados ao momento P

$$F(P) = (h + r) + (\overline{h} + \overline{r})$$

$$P = (h + r) - (\overline{h} + \overline{r}) - a \qquad (II - 100)$$

$(r, \overline{r} = 0, 1, 2, \ldots)$ onde o fator "a" depende do modelo em questão e da sua condição de contorno. A degenescência é $d(h, r).d(\overline{h}, \overline{r})$.

Consideradas as expressões (II-100) à vista da Tabela 2, constrói-se o espectro que, de diferente forma, tratou-se na seção (II-J).

SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO - IFQSC
FÍSICA

CAPÍTULO III

O MODELO XY EM CAMPO TRANSVERSO

III-A - SINOPSE

Toda a motivação acerca do modelo XY faz parte de uma história um tanto remota, quando da proposição do arranjo linear de spins no ferromagneto de Heisenberg. Para este último, atendo-se ao caso unidimensional, Bethe [26] desenvolveu uma teoria detalhada de ondas de spins, e Hultthén [27] obteve a energia exata do estado fundamental. Todavia, o método de Bethe não se mostrou capaz de uma generalização para os casos de maior interesse em duas e três dimensões. Métodos aproximados foram desenvolvidos, com resultados acurados em uma dimensão, através dos quais se procurou, inultilmente, implementar tal generalização. O teste crucial para qualquer método aproximado demarca o quão bem ele descreve a ordem de longo alcance; mas é precisamente este teste que foi impossibilitado, posto que a ordem de longo alcance não havia sido calculada exatamente via método de Bethe.

Kasteleyn [28] introduziu um parâmetro de anisotropia no modelo, em função do qual obteve a descontinuidade da ordem de longo alcance, o que despertou inúmeras objeções e reacendeu o interesse pelo modelo unidimensional de Heisenberg.

Consideráveis dúvidas pairavam quanto à natureza da ordem de longo alcance em uma ou mais dimensões, com resultados contraditórios devidos a vários autores. Contudo, todos prognosticavam o começo da ordem de longo alcance para um determinado valor crítico da anisotropia; no mais, o mesmo valor no qual uma classe é predita para a ordem de curto-alcance.

Desenvolveu-se umas generalizações do método de Bethe (Orbach-1958) e insistiu-se no método variacional para o caso unidimensional (Ruijgrok and Rodriguez - 1959); somente resultados melhorados da energia do estado fundamental foram obtidos. Davis [29], em 1960, realizou um cálculo em teoria das perturbações que indicou, para a ordem na qual se empreendeu, uma ordem de longo alcance para qualquer número de dimensões sempre para o caso isotrópico.

Insurgiram-se, no entanto, questões como a possiblidade da ordem de longo alcance em qualquer número de dimensões para interação de Heisenberg puramente isotrópicas, ou então, a relação entre tais possibilidades com o número da dimensão.

Com o intuito de obter novos "insights" sobre os efeitos da anisotropia em uma dimensão Lieb, Schultz, and Mattis [30], em 1961, introduziram o modelo XY. A investigação deste modelo sugeriu fortemente que o modelo de Heisenberg isotrópico não apresenta uma ordem de longo alcance, mas que tal ordem existe para qualquer valor finito da anisotropia. Enfatiza, no mais, a natureza sutil da ordem de longo alcance e a insuficiência dos métodos variacionais como proposição segura quanto a tal questão.

Embora não propriamente com os mesmos objetivos que o suscitaram, passamos, a seguir, ao tratamento do modelo XY com campo transverso, sobre o qual, Th. Niemeider [31], desenvolve alguns cálculos exatos considerando-se uma cadeia de spin 1/2.

INTRODUÇÃO E FORMULAÇÃO DO PROBLEMA

O modelo XY compreende uma cadeia linear antiferromagnética de spin 1/2, com interação entre vizinhos próximos. A denominação "XY" deu-se porque o hamiltoniano original [30] envolve somente componentes x e y dos operadores de spins. Introduz-se, então, duas componentes de "exchange", o que corresponde a uma generalização da anisotropia de Kasteleyn.

Considerando-se uma cadeia XY com N spins, imersa em um campo magnético Γ ao longo do eixo z, decorre o hamiltoniano

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}J(1+\eta)\sum_i \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \frac{1}{2}J(1-\eta)\sum_i \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y - \Gamma \sum_i \sigma_i^z \qquad (III-1)$$

onde J é a interação de exchange e η o parâmetro que caracteriza o grau de anisotropia da interação no plano xy. $\sigma_i^\alpha (\alpha = x, y, z)$ representam as matrizes de Pauli ($\hbar = 1$):

$$\sigma_i^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \sigma_i^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \sigma_i^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

O modelo XY é exatamente solúvel para todos os valores de η, embora nós

devamos considerar, na abordagem que se segue, somente o intervalo $0 \leq \eta \leq 1$. Quanto à interação de "exchange", por motivos que faremos transparecer futuramente, fixamos $J = 1$.

No mais, devemos prender-nos às condições de contorno periódica e antiperiódica, casos nos quais $1 \leq i \leq N$ e $\sigma^x_{N+1} = \pm\sigma^x_1, \sigma^y_{N+1} = \pm\sigma^y_1$ (respectivamente quanto aos sinais).

A primeira atitude a tomar, no resolução do modelo XY, consiste na introdução dos operadores de levantamento e abaixamento, segundo a tranformação

$$\sigma^x_i = (a^\dagger_i + a_i); \quad \sigma^y_i = (a^\dagger_i - a_i)/i; \quad \sigma^z_i = 2a^\dagger_i a_i - 1. \qquad (III-2)$$

Apresenta-se, então, o hamiltoniano

$$\mathcal{H} = \sum_i \left[(a^\dagger_i a_{i+1} + \eta a^\dagger_i a^\dagger_{i+1}) + h.c.\right] - \sum_i \Gamma(2a^\dagger_i a_i - 1). \qquad (III-3)$$

cujos operadores, parcialmente, obedecem à álgebra de Fermi

$$\left\{a_i, a^\dagger_i\right\} = 1; \quad a^2_i = (a^\dagger_i)^2 = 0; \qquad (III-4)$$

e, parcialmente, assemelham-se a operadores de Bose

$$\left\{a^\dagger_i, a_j\right\} = \left[a^\dagger_i, a^\dagger_j\right] = [a_i, a_j] = 0; \quad i \neq j. \qquad (III-5)$$

Portanto, fas-se impossível diagonalizar a forma quadrática presente em (III-3) diretamente por meio de uma transformação canônica, posto que os eixos principais da transformação dos $a's$ e $a^{\dagger}{}'s$ não preservam seu grupo misto das regras canônicas. Todavia, é possível reescrever o hamiltoniano (III-3) em um novo grupo de varáveis, estritamente operadores de Fermi, segundo a transformação de Jordan-Wigner [32]

$$c_i \equiv \exp\left[\pi i \sum_1^{i-1} a_j^\dagger a_j\right] a_i,$$

$$c_i^\dagger \equiv a_i^\dagger \exp\left[-\pi i \sum_1^{i-1} a_j^\dagger a_j\right]. \qquad (III-6)$$

Obtem-se, então

$$c_i^\dagger c_i = a_i^\dagger a_i, \qquad (III-7)$$

tal que a transformação inversa é simplesmente

$$a_i = \exp\left[-\pi i \sum_1^{i-1} c_j^\dagger c_j\right] c_i,$$

$$a_i^\dagger = c_i^\dagger \exp\left[\pi i \sum_1^{i-1} c_j^\dagger c_j\right]. \qquad (III-8)$$

Os $c's$ e $c^{\dagger}{}'s$ são operadores de Fermi:

$$\left\{c_i, c_j^\dagger\right\} = \delta_{ij}$$

$$\{c_i, c_j\} = \left\{c_i^\dagger, c_j^\dagger\right\} = 0 \qquad (III-9)$$

Desde que $c_j^\dagger c_j$ é um número de ocupação, cujos valores possíveis são 0 ou 1,

$$\exp(\pi i c_j^\dagger c_j) = \exp(-\pi i c_j^\dagger c_j). \qquad (III-10)$$

Para $i = 1, 2, \ldots, N-1$, decorre também

$$a_i^\dagger a_{i+1} = c_i^\dagger c_{i+1},$$

$$a_i^\dagger a_{i+1}^\dagger = c_i^\dagger c_{i+1}^\dagger, \qquad (III-11)$$

de forma que, para condições livres de contorno, caso onde $1 \leq i \leq N-1$, o hamiltoniano esboça-se como

$$\mathcal{H} = \sum_1^{N-1} \left[(c_i^\dagger c_{i+1} + \eta c_i^\dagger c_{i+1}^\dagger) + h.c. \right] - \sum_1^N \Gamma(2c_i^\dagger c_i - 1). \qquad (III-12)$$

Para uma cadeia cíclica, em decorrência de contorno expresso pelo hamiltniano

$$\mathcal{H}' = \pm\frac{1}{2}[(1+\eta)\sigma_N^x\sigma_1^x + (1-\eta)\sigma_N^y\sigma_1^y], \qquad (III-13)$$

obviamente, devemos acrescentar

$$a_N^\dagger a_1 = -c_N^\dagger c_1 \exp(i\pi\mathcal{N}) \neq c_N^\dagger c_1,$$

$$a_N^\dagger a_1^\dagger = -c_N^\dagger c_1^\dagger \exp(i\pi\mathcal{N}) \neq c_N^\dagger c_1^\dagger, \qquad (III-14)$$

onde

$$\mathcal{N} = \sum_1^N c_j^\dagger c_j = \sum_1^N (S_j^z + \frac{1}{2}). \qquad (III-15)$$

De forma geral, resulta o hamiltoniano

$$\begin{aligned} H = \ & \textstyle\sum_{i=1}^N \left[(c_i^\dagger c_{i+1} + \eta c_i^\dagger c_{i+1}^\dagger + h.c. \right] + \\ & \pm 1 \left[(c_N^\dagger c_1 + \eta c_N^\dagger c_1^\dagger) + h.c \right] (\exp(i\pi\mathcal{N}) + 1) - \textstyle\sum_{i=1}^N \Gamma(2c_i^\dagger c_i - 1) \end{aligned} \qquad (III-16)$$

Podemos, considerando-se sistemas grandes, negligenciar o termo de correção proporcional a $\{\exp(i\pi\mathcal{N})+1\}$, obtendo portanto

$$H=\sum_{i=1}^{N}\left[c_i^{\dagger}c_{i+1}+\eta c_i^{\dagger}c_{i+1}^{\dagger})+h.c.\right]-\Gamma\sum_{i=1}^{N}2c_i^{\dagger}c_i+N\Gamma \qquad (III-17)$$

Observa-se, então, a descrição do hamiltoniano como uma forma quadrática simples em operadores de Fermi, possibilitando para que seja diagonalizado exatamente através de uma transformação canônica; do que decorre o espectro de energia.

III-C - ENERGIA DO ESTADO FUNDAMENTAL

Num primeiro passo, o hamiltoniano presente em (III-17) é escrito na forma

$$H=\sum_{i,j=1}^{N}\left[c_i^{*}A_{ij}c_j+\frac{1}{2}\left(c_i^{*}B_{ij}c_j^{*}+h.c.\right)\right], \qquad (III-18)$$

onde $A(B)$ é uma matriz simétrica (antissimétrica), e os $c's$ são operadores de Fermi.

Conforme exposto no Apêndice A da referência 30, tal hamiltoniano pode ser diagonalizado segundo a transformação canônica (os operadores s mantêm-se fermiônicos).

$$s_k^{*}=\sum_{i=1}^{N}g_{ki}c_i^{*}+h_{ki}c_i,$$

$$s_k^{*}=\sum_{i=1}^{N}g_{ki}c_i+h_{ki}c_i^{*}, \qquad (III-19)$$

onde os coeficientes g_{ki} e K_{ki} são números reais. Esta transformação remete H à forma

$$H=\sum_{k=1}^{N}\Lambda_k s_k^{*}s_k \quad + \quad \text{constante} \qquad (III-20)$$

Os coeficientes g_{ki} e h_{ki} são detemrinados pelas matrizes A e B por intermédio das equações

$$(A+B)\Phi_k = \Lambda_k \psi_k,$$

$$(A-B)\psi_k = \Lambda_k \Phi_k, \qquad (III-21)$$

onde os vetores Φ_k e ψ_k são dados por

$$(\Phi_k)_j = g_{kj} + h_{kj},$$

$$(\psi_k)_j = g_{kj} - h_{kj}. \qquad (III-22)$$

No caso de trabalhar-se com condições periódicas de contorno, as matrizes relevantes são

$$A = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -2\Gamma & 1 & & & 1 \\ 1 & -2\Gamma & & & \\ & 1 & \bigcirc & & \\ & & & 1 & \\ 1 & & & 1 & -2\Gamma \end{pmatrix}, B = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & \eta & & & -\eta \\ -\eta & 0 & & \bigcirc & \\ & -\eta & & & \\ & & & & \eta \\ \eta & & & -\eta & 0 \end{pmatrix}$$

$(A-B)(A+B) = \frac{1}{4}$

$$\begin{pmatrix} 4\Gamma^2+2(1+\eta^2) & -4\Gamma & (1-\eta^2) & & & (1-\eta^2) & -4\Gamma \\ -4\Gamma & 4\Gamma^2+2(1+\eta^2) & -4\Gamma & & & & (1-\eta^2) \\ (1-\eta^2) & -4\Gamma & 4\Gamma^2+2(1+\eta^2) & & & & \\ \bigcirc & & & & & & \bigcirc \\ & & & 4\Gamma^2+2(1+\eta^2) & -4\Gamma & & (1-\eta^2) \\ (1-\eta^2) & & & -4\Gamma & 4\Gamma^2+2(1+\eta)^2 & & -4\Gamma \\ -4\Gamma & (1-\eta^2) & & (1-\eta^2) & -4\Gamma & & 4\Gamma^2+2(1+\eta^2) \end{pmatrix}. \qquad (IV-23)$$

Os vetores são soluções reais das equações seculares.

$$\Phi_k(A-B)(A+B) = \Lambda_k^2 \Phi_k,$$

$$\psi_k(A+B)(A-B) = \Lambda_k^2 \psi_k, \qquad (III-24)$$

- Segundo C.Hoeger e outros [33], nesse caso as energias do estado fundamental (E_0) e do primeiro estado excitado (E_1), escrevem-se como

$$E_0(\Gamma\eta N) = -\sum_{n=0}^{N-1} \Lambda\left(\frac{2\pi}{N}\left(n+\frac{1}{2}\right)\right) \qquad (III-25)$$

$$E_1(\Gamma\eta N) = \begin{cases} -\sum_{n=0}^{N-1} \Lambda\left(\frac{2\pi}{N}n\right) & \Gamma \geq 1 \\ -\sum_{n=0}^{N-1} \Lambda\left(\frac{2\pi}{N}\right) & \Gamma < 1 \end{cases} \qquad (III.26)$$

onde

$$\Lambda(\varphi) = \left[(cos\varphi - \Gamma)^2 + \eta^2 sen^2\varphi\right]^{\frac{1}{2}}. \qquad (III-27)$$

III-D - ACOPLAMENTO CRÍTICO

Quando da diagonalização do hamiltoniano (III-1), identificou-se o espectro de excitação $\Lambda\alpha$ à solução da equação secular

$$det\left[(A+B)(A-B) - \Lambda_\alpha^2 1\right] = 0, \qquad (III-28)$$

onde as matrizes $(A-B)$ e $(A+B)$, ordem $N \times N$, satisfazem

$$A - B = (A + B)^t = \begin{pmatrix} -\Gamma & J_2 & & & -J_1 \\ J_1 & -\Gamma & J_2 & 0 & \\ & & & & \\ & 0 & & & \\ & & & & J_2 \\ J_2 & & & J_1 & -\Gamma \end{pmatrix}_{N \times N} \qquad (III - 29)$$

com $J_1 = J/2(1+\eta)$ e $J_2 = J/N(1-\eta)$.

A equação secular (III-28) apresenta a solução $\Lambda\alpha = 0$ se $det[(A-B)(A+B)] = 0$, mas

$$det(A - B) = det(A + B) = (-\Gamma)^N + J_1^N + J_2^N. \qquad (III - 30)$$

Há, portanto, uma excitação da energia $\Lambda\alpha = 0$ se a seguinte condição crítica for satisfeita

$$(-\Gamma)^N = -(J_1^N + J_2^N). \qquad (III - 31)$$

Desde que a relação (III-31) se verifique o gap no espectro de excitação deverá tender a zero o que induz um comportamento singular da energia do estado fundamental. Este desaparecimento do gap somente ocorre no limite $N \to \infty$, devido ao efeito do termo de correção desprezado anteriormente.

Decorre automaticamente da relação (III-31) que

$$g_c \equiv \left(\frac{\Gamma}{J_1 + J_2}\right)_C = 1, \qquad (III - 32)$$

expressão esta que está de acordo com a propriedade de autodualidade do problema.

A constante g_c é o acoplamento crítico entre visinhos próximos e, desde que $J_1 = J/2(1+\eta)$ e $J_2 = J/2(1-\eta)$, a relação (III-30) equivale a fixar $J = 1$, consideração salientada em (III-B).

III-E - DIAGRAMA DE FASES

O diagrama de fases do sistema (III-1), obtido por Barouch e McCoy [34] (1971), encontra-se esboçado na figura 9.

Nosso interesse centra-se particularmente na linha $g = 1$, a qual representa uma transição de Ising ao longo de toda extensão $0.0 < \eta \leq 1.0$. No tocante ao ponto $\eta = 0.0$, ocorre a transição XY onde se verifica a passagem direta da fase paramagnética à fase incomensurável. O círculo $\Gamma^2 + \eta^2 = 1$ comporta-se como uma linha de desordem, sobre a qual a natureza da função de correlação é modificada.

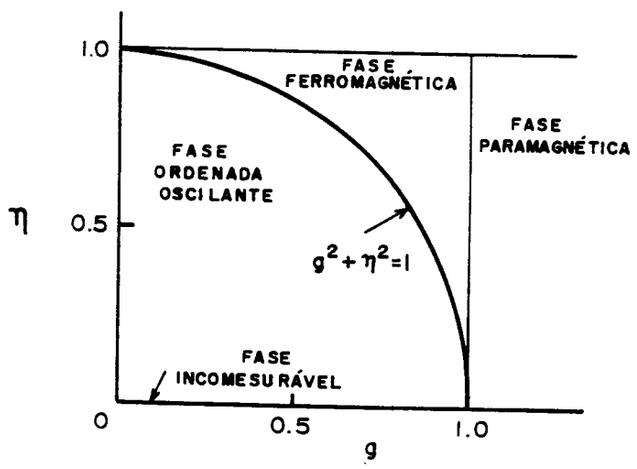


Figura 9: Diagrama de fases do modelo XY transverso

Finalmente, como uma aplicação trivial do F.S.S. , apresentamos os resultados obtidos com esta técnica para o campo transverso Γ onde ocorre a transição de fase. Para tal, consideramos o gráfico $LG \times \Gamma$ para as redes L e L', conforme esboçado na figura abaixo.

O método consiste em delimitar suficientemente a região onde as curvas se cruzam, de modo a aproximá-las de retas cuja interpolação nos informa o valor do campo crítico.

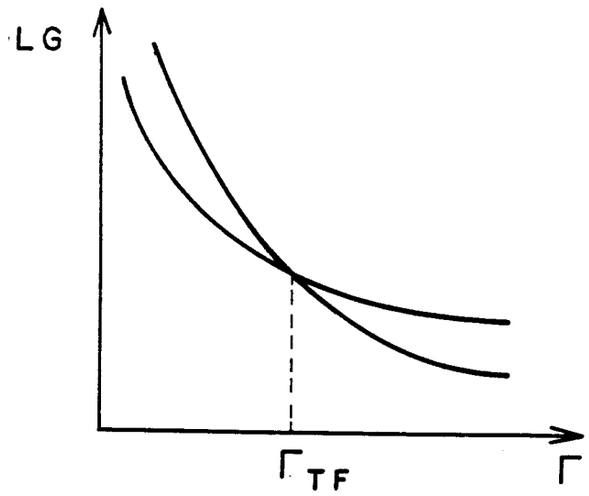


Figura 10: Esquematização gráfica da obtenção do campo crítico Γ_{TF} via finite-size scaling.

Os resultados, para vários valores da anisotropia γ, estão reunidos nas tabelas III, IV e V.

L,L'	Γ_{TF}
4,5	1.21032
5,6	1.14677
6,7	1.10753
7,8	1.08191
8,9	1.06437
∞	1.00647

Tabela III

L,L'	Γ_{TF}
4,5	1.19009
5,6	1.13306
6,7	1.09765
7,8	1.07446
8,9	1.05855
∞	1.00500

Tabela IV

L,L'	Γ_{TF}
4,5	1.15080
5,6	1.10651
6,7	1.07853
7,8	1.06006
8,9	1.04731
∞	0.99864

Tabela V

TabelasIII, IV e V - Redes L, L' contra o campo Γ_{TF} seguido de sua estimativa para redes infinitas. Consideramos respectivamente $\eta = 0.2, 0.4$ e 0.6.

CAPÍTULO IV

O CROSSOVER ANISOTROPICO NO MODELO XY UNIDIMENSIONAL EM UM CAMPO TRANSVERSO À TEMPERATURA ZERO

IV-A - INTRODUÇÃO

Para estudar os efeitos de "crossover" nós usamos o modelo XY unidimensional em campo transverso e de spin-1/2 (TXYM[7]) à temperatura zero. Apresentado no capítulo anterior este modelo (TXYM), descrito pelo hamiltoniano (III-1), apresenta-se como um laboratório ideal para investigar aquele fenômeno usando a hipótese estendida do FSS.

Sabe-se que para qualquer $|\eta| > 0$ o sistema torna-se crítico em $g_c(\eta) = 1$, com o mesmo expoente crítico do modelo de Ising transverso ($|\eta| = 1$) (Katsura - 1962, Barouch e McCoy - 1971, Suzuki - 1971). Para $\eta = 0$, embora não haja ordem de longo alcance, as susceptibilidades longitudinais χ^{xx} e χ^{yy} bem como os comprimentos de correlação relativos às funções de correlação $< 0|\sigma_0^x\sigma_r^x|0 >$ e $< 0|\sigma_0^y\sigma_r^y|0 >$ divergem também em $g_c = 1$, mas com expoentes diferentes daqueles do caso anisotrópico (Barouch e McCoy , 1971, Gerber e Beck 1977, Jullien e Preuty 1979).

Contudo, antes de passarmos a tais testes nós devemos primeiramente discutir as características gerais das quantidades termodinâmicas usadas em nossos cálculos.

IV-B - GAPS DOS NÍVEIS MAIS BAIXOS DE ENERGIA

Conforme dos Santos e Stinchombe [17], a natureza dos níveis de excitação mais baixos no espectro do hamiltoniano (III-1) pode ser discutida segundo as linhas do "aproach" perturbativo utilizado por Pfeuty e Elliot (1971) para o modelo de Ising transverso.

Considerando inicialmente $\eta = 1$, analisaremos dois casos limites : modelo de Ising ($\Gamma = 0$) e spins independentes ($J = 0$). Quando $\Gamma = 0$ o estado fundamental é duplamente degenerado devido a simetria discreta ($\sigma^z \rightarrow -\sigma^z$), enquanto que o primeiro estado excitado expõe uma degenerescência igual ao número L de spins da rede. Ao mergulhar a rede em um pequeno campo transverso, a degenerescência é levantada, originando daí uma banda contínua de estados excitados quando $L \rightarrow \infty$.

Focalizando agora o caso $J = 0$, verificamos que o estado fundamental não

apresenta degenerescência, ao passo que o primeiro estado excitado é também marcado por degenerescência L. Novamente, quando uma pequena interação de Ising é considerada, a degenerescência é levantada, de onde, para um sistema infinito, decorre uma banda contínua de estados excitados.

No ponto crítico $(\Gamma/J)_c$ ocorre então uma troca na degenerescência do estado fundamental. Além do mais, segundo resultados de Pfeuty [36] (1970) e Pfeuty e Elliot [37](1971), o gap de energia entre ambos os estados mais baixos desaparece quando o ponto crítico os faz aproximar, por cima e por baixo. Desde que os estados excitados formam um contínuo nós podemos esperar que os gaps de energia entre o estado fundamental e os dois primeiros estados excitados desaparecem em $(\Gamma/J)_c$. Denotando ambos os gaps mencionados por Δ e $\tilde{\Delta}$ respectivamente, podemos assumir que para $g(\equiv \Gamma/J)$ próximo a g_c, temos

$$\Delta \sim |g - g_c|^s \qquad (IV-1)$$

e

$$\tilde{\Delta} \sim |g - g_c|^{\tilde{s}} \qquad (IV-2)$$

onde, em princípio, os expoentes dos gaps são diferentes.

Os argumentos acima expostos podem ser igualmente aplicados aos mais baixos níveis do espectro para $0 < \eta < 1$. Espera-se comportamento idêntico àquele exposto em (IV-1) e (IV-2) com g_c substituído por $g_c(\eta)$. Para $\eta = 0$ um raciocínio similar é também válido, onde g_c, s e $\tilde{s}$ são substituídos por $g_c(0)$, s_0 e $\tilde{s_0}$.

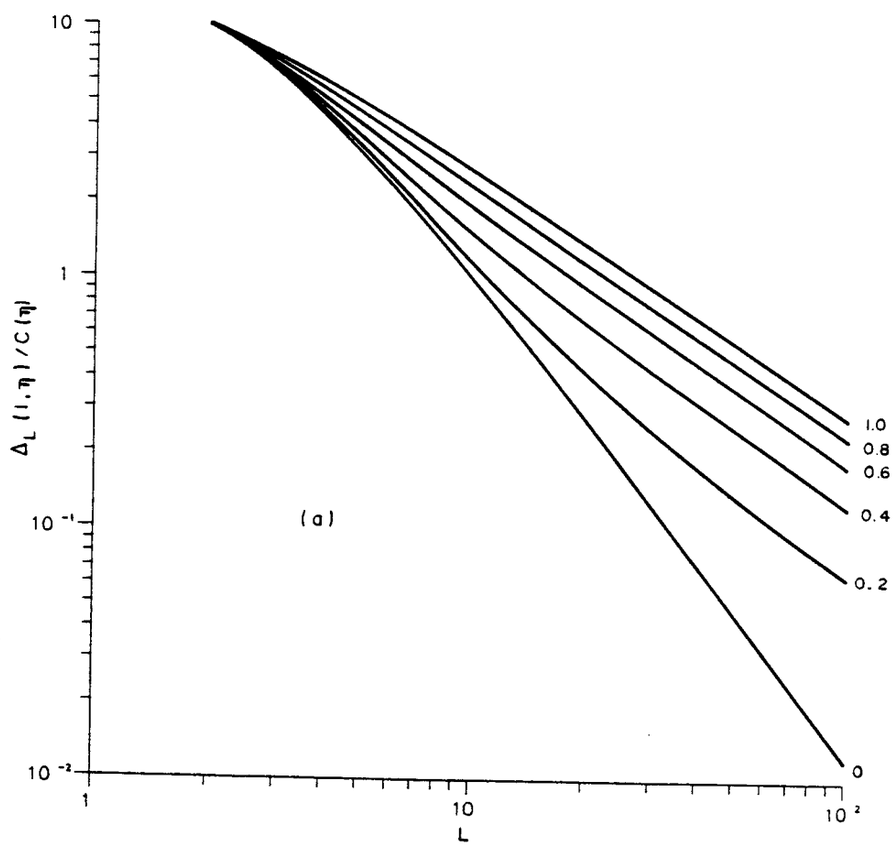
Utilizando-nos da hipótese estendida do FSS, somos capazes de investigar o crossover no comportamento crítico dinâmico. Segundo Hohenberg e Halperin [38] (1977), o expoente crítico dinâmico à temperatura zero é descrito pela razão entre o expoente do gap s (ou s_0) e o expoente do comprimento de correlação ν (ou ν_0), o que é exatamente o expoente do termo L na hipótese do FSS, ou seja

$$z = s/\nu \quad , \quad z_0 = s_0/\nu_0; \qquad (IV-3)$$

SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO - IFQSC
FÍSICA

$$\tilde{z} = \tilde{s}/\nu \quad , \quad \tilde{z}_0 = \tilde{s}_0/\nu_0. \qquad (IV-4)$$

Plotamos na figura 11, em escala log-log, os gaps Δ e $\tilde{\Delta}$ considerando-se $g = 1$ e vários valores da anisotropia η, em função do tamanho L de uma cadeia com condições livres de contorno. Tais gaps foram obtidos numericamente mediante a diagonalização da matriz $(A-B)(A+B)$ (III-23), devidamente ajustada à condição de contorno em questão.



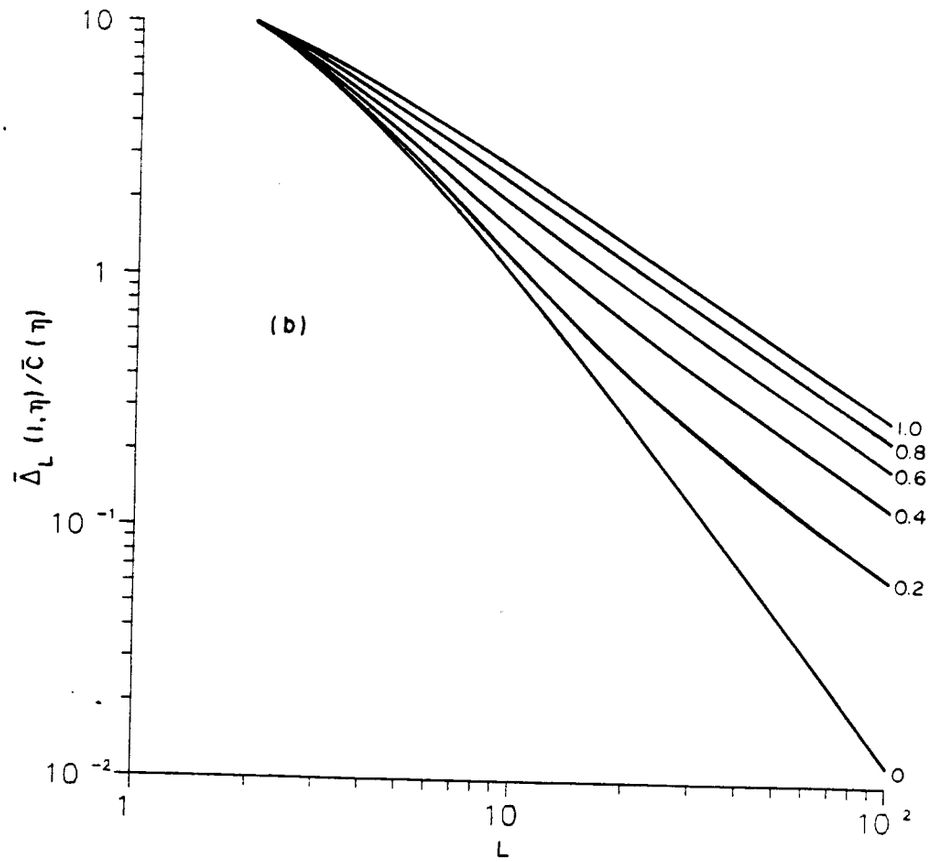
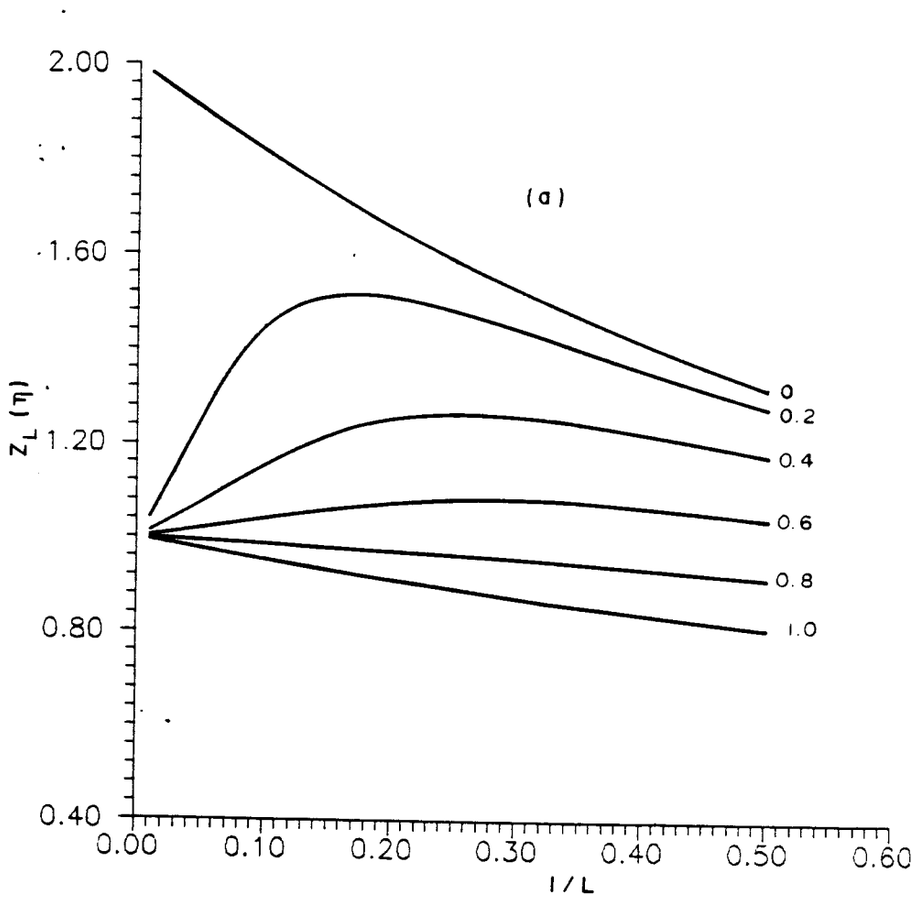


Figura 11: Gaps normalizados da energia entre o estado fundamental e os primeiro (a) e segundo (b) estados excitados versus o tamanho L de rede. A anisotropia η que rotula as curvas é mantida constantes. (condições livres de contorno)

Em vista da figura 11, podemos salientar os aspectos do crossover considerando-se estimativas sucessivas dos expoentes $z_L(\eta)$ e $\tilde{z}_L(\eta)$ definidos pela equação (II-46) com X reposto por Δ e $\tilde{\Delta}$, respectivamente, e $g_c(\eta) = 1$. Dessa forma, na figura 10, plotamos em escala log-log, os expoentes $z_L(\eta)$ e $\tilde{z}_L(\eta)$ versus 1/L.



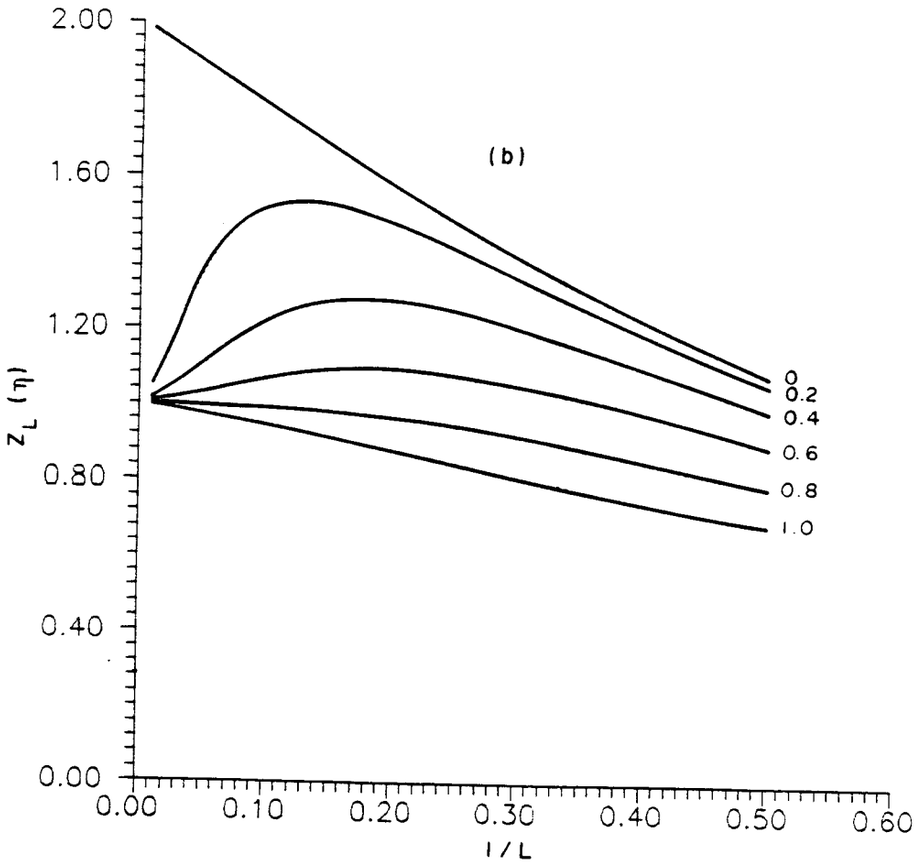


Figura 12: Comportamento assintótico das estimativas para os expoentes dinâmicos associados aos gaps da figura 11. As curvas são rotuladas pela anisotropia η.

SERVIÇO DE ... FÍSICA

Então, para L suficientemente grande nós podemos esperar $z_L(0) \to z_0$ e $z_L(\eta) \to z$ para $\eta > 0$, com definições análogas $\tilde{z}_L$. Aspectos sobressalentes do crossover são observaods sobretudo junto às curvas em $\eta = 0.2$ e $\eta = 0.4$ com o incremento de L.

Desenvolveu-se análise idêntica para cadeias com condições periódicas de contorno onde, segundo cálculos prévios, relativos ao modelo de Ising transverso (dos Santos [39] - 1980), as estimativas do FSS convergem mais rapidamente para os resultados exatos.

Tratando-se, então, de condições periódicas de contorno, observa-se na figura 13(a) a omissão da curva referente à anisotropia nula, o que ocorre em função da degenerescência do estado fundamental (em $g = 1$) ao longo do círculo unitário $g^2 + \eta^2 = 1$ para qualquer tamanho finito da rede. Desde que neste caso os estados podem ser classificados em conseqüência de um vetor de onda $\vec{k}$, o estado fundamental (modo $\vec{k} = 0$) deve transformar-se segundo o modo $\vec{k} = 0$ de um operador que é simétrico somente em $g^2 + \eta^2 = 1$. Por esta razão referimo-nos a esta degenerscência como acidental.

Desde que $\Delta_L(1, 0) \equiv 0$, o comportamento assintótico $z_L(0) \to 2$ quando $L \to \infty$ não pode ser detectado. Ilustra-se este fato na figura 13(a) quando a curva correspondente a $\eta = 0.1$ esboça uma pequena declividade, enquanto que a figura 13(b), concernente ao gap $\tilde{\Delta}$, apresenta comportamento análogo àquele para cadeias com fins livres. Novamente, os efeitos do crossover pronunciam-se mais nas inclinações das curvas da figura 14.

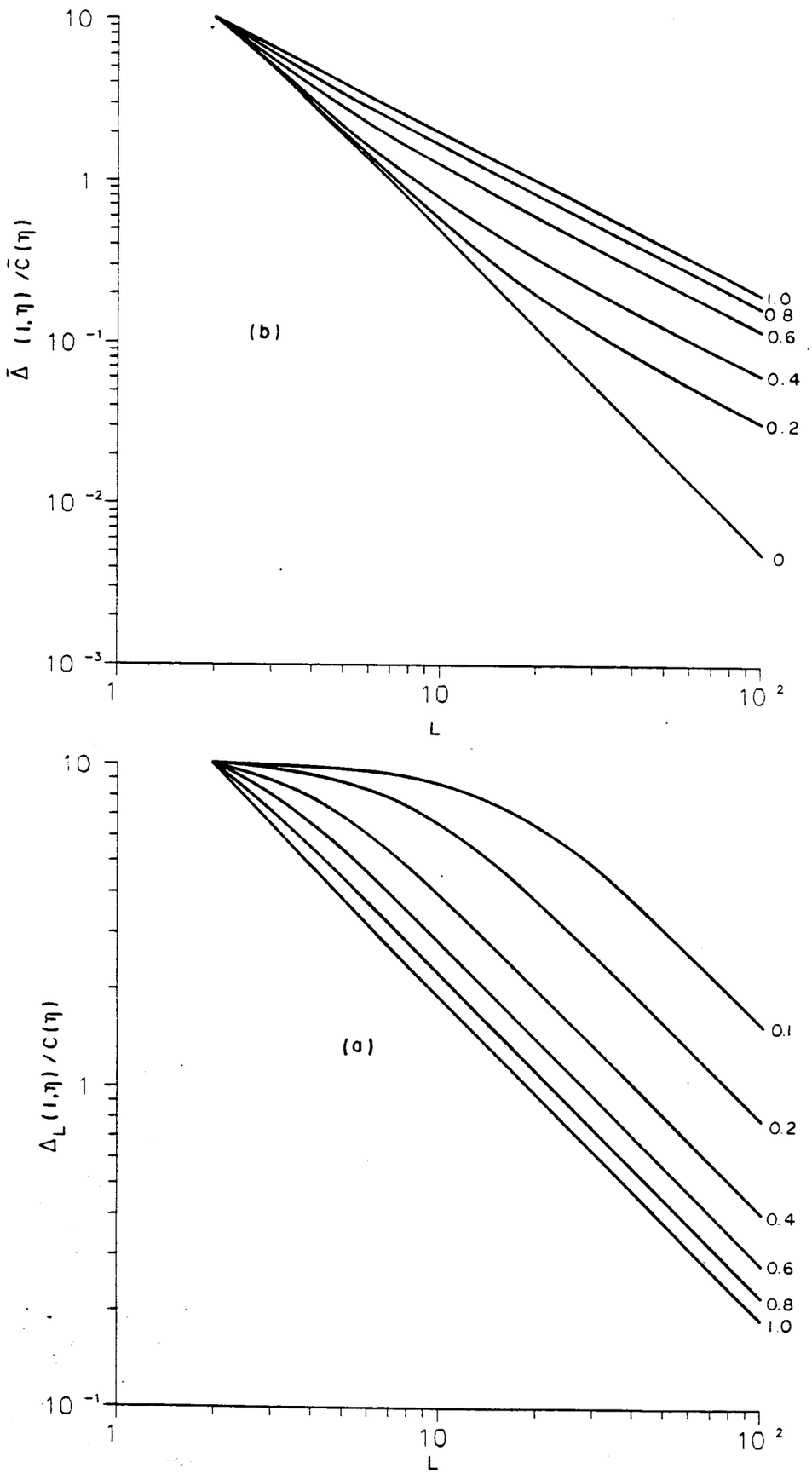


Figura 13: Gaps normalizados da energia entre o estado fundamental e os primeiro (a) e segundo (b) estados excitados versus o tamanho L de rede. A anisotropia η que rotula as curvas é mantida constantes. (condições periódicas de contorno)

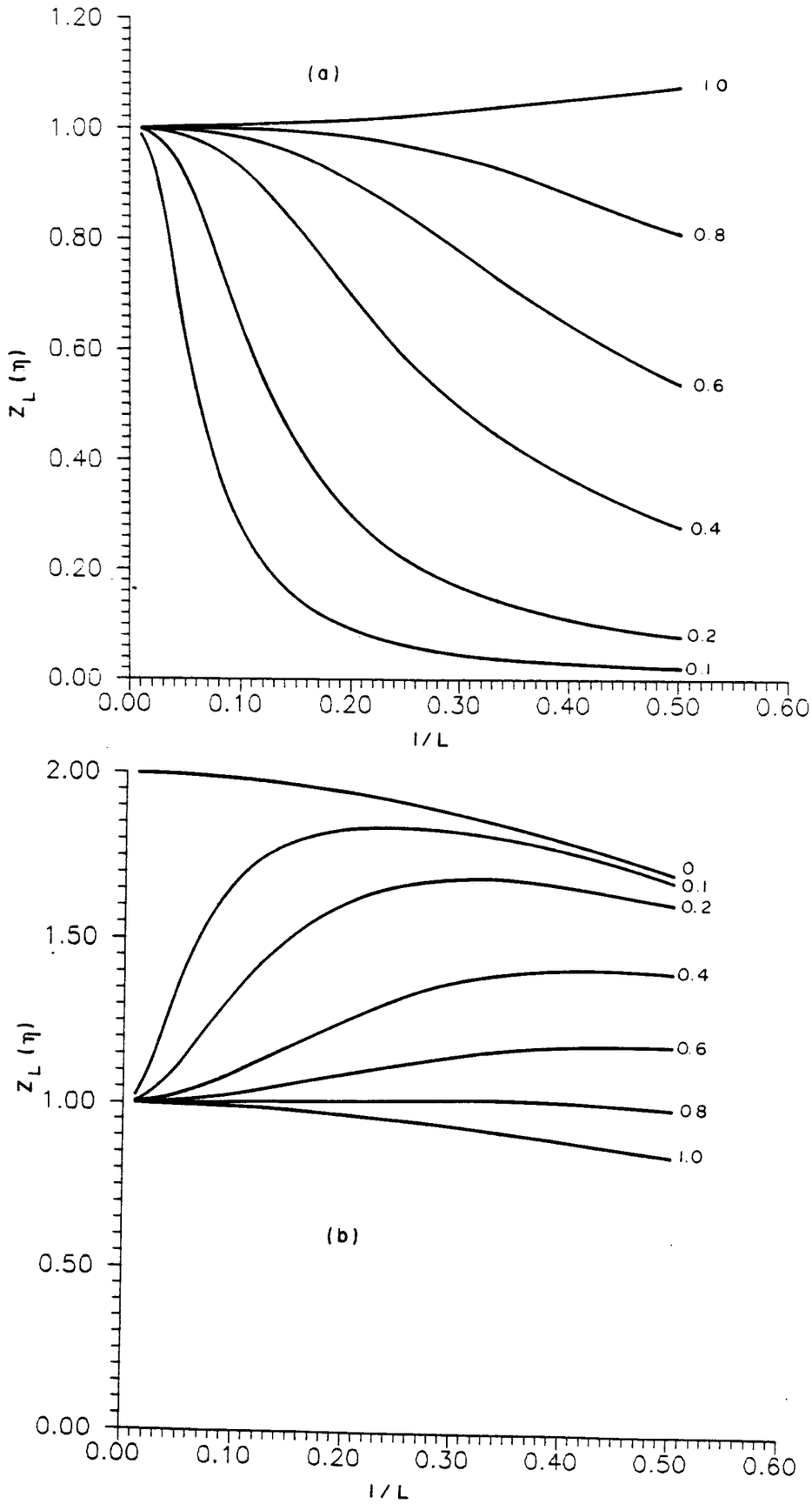


Figura 14: Comportamento assintótico das estimativas para os expoentes dinâmicos associados aos gaps da figura 13. As curvas são rotuladas pela anisotropia η.

Compreendendo como acidental o comportamento do gap Δ_L para cadeias com condições periódicas de contorno quando $\eta \rightarrow 0$, os resultados para os cálculos com os gaps de energia podem, então, ser apresentados conforme segue:

$$(i) \quad Lim_{L\rightarrow\infty} z_L(\eta) = Lim_{L\rightarrow\infty} \tilde{z}_L(\eta) \qquad (IV-5)$$

$$(ii) \quad Lim_{L\rightarrow\infty} z_L(\eta) = \begin{cases} 1 & \eta > 0 \\ 2 & \eta = 0 \end{cases} \qquad (IV-6)$$

A igualdade entre os expoentes relativos aos gaps Δ e $\tilde{\Delta}$ refletida por (IV-5), nunca foi estabelecida, mas os resultados para z concordam com cálculos exatos para $0 < \eta \leq 1$ (Pfeuty - 1970, Suzuki - 1971, Barouch e McCoy - 1971, Young - 1975) e com cálculos em grupo de renormalização (Gerber e Bech - 1977, Jullien e Pfeuty - 1979) para $\eta = 0$.

Fazendo uso de técnicas de extrapolações numéricas (Hamer e Barber - 1981), estimamos o valor dos expoentes dinâmicos $z_L(\eta)$ e $\tilde{z}_L(\eta)$ no tocante a redes infinitas, para condições livres e periódicas de contorno. Tais valores, expostos na tabela IV, perfasem estreitamente as expectativas.

COND. CONT.	GAP	η	$Z = s/\nu$
LIVRE	Δ	0.0	2.00006
		0.2	1.00021
		0.4	0.99974
		0.6	0.99996
		0.8	0.99999
		1.0	1.00000
	$\tilde{\Delta}$	0.0	2.00003
		0.2	1.01882
		0.4	1.00019
		0.6	0.99993
		0.8	0.99993
		1.0	1.00000
PERIODICA	Δ	0.1	0.99713
		0.2	1.00000
		0.4	0.99999
		0.6	0.99999
		0.8	1.00000
		1.0	0.99999
	$\tilde{\Delta}$	0.0	2.00000
		0.1	1.00708
		0.2	0.99999
		0.4	1.00000
		0.6	0.99999
		0.8	0.99999
		1.0	1.00000

Tabela VI - Extrapolações numéricas dos expoentes dinâmicos relativos às figuras 12 e 14.

IV-C - SUSCEPTIBILIDADES LONGITUDINAIS - χ^{xx} e χ^{yy}

O comportamento das susceptibilidades ao longo das direções X e Y no espaço dos spins assemelha-se àquele envolvendo dois comprimentos de correlação discutido quando se tratou do crossover, seção (II-F). De fato, para $\eta = 0$ os papéis de σ^x e σ^y podem ser trocados, do que advém $\chi^{xx} = \chi^{yy}$. Para qualquer quantidade finita da anisotropia positiva, o acoplamento YY torna-se irrelevante (no sentido do grupo de renormalização) tal que χ^{xx} não deverá divergir em $g_c(\eta)$, enquanto que χ^{xx} deverá divergir com expoente idêntico àquele do modelo de Ising transverso. Analogamente, para $\eta < 0$ χ^{yy} deverá divergir, o que não acontece com χ^{xx}.

A inclusão de um campo no plano XY impõe a necessidade de acrescentarmos ao hamiltoniano (III-1) o termo

$$H_{campo} = -h^x \sum_i \sigma_i^x - h^y \sum_i \sigma_i^y, \qquad (IV-7)$$

tal que à temperatura zero a susceptibilidade à campo zero para um sistema de L spins é definida por

$$\chi^{\mu\mu}(g,\eta) = -\frac{1}{L}\left(\frac{\partial^2 E_0(g,\eta,h^x,h^y)}{\partial^2 h^{\mu^2}}\right)_{h^x=h^y=0} \qquad (IV-8)$$

onde $\mu = x, y$, e $E_0(g,\eta,h^x,h^y)$ é a energia do estado fundamental. No limite termodinâmico nós, então, esperamos para $g_c(\eta)$, $\eta \geq 0$,

$$\chi^{xx}(g,0) = \chi^{yy}(g,0) \sim |g - g_c(0)|^{-\gamma}, \qquad (IV-9)$$

$$\chi^{xx}(g,0) \sim |g - g_c(\eta)|^{-\gamma}, \qquad (IV-10)$$

$$\chi^{yy}(g,0) \sim \Phi(g,\eta), \qquad (IV-11)$$

onde Φ é uma função suave e bem comportada de $\eta > 0$. Isto significa que para um sistema de tamanho finito (suficientemente grande) a hipótese EFSS assegura

$$\chi_L^{zz}(1,0) = \chi_L^{yy}(1,0) \approx L^{\gamma_0/\nu_0} \qquad (IV-12)$$

para $\eta = 0$, e

$$\chi_L^{zz}(1,\eta) \approx L^{\gamma/\nu} f_1(\eta) \qquad (IV-13)$$

e

$$\chi_L^{yy}(1,\eta) \approx L^{\tilde{\gamma}/\nu} \tilde{f}_2(\eta) \qquad (IV-14)$$

para $\eta > 0$. Nota-se que a ausência de singularidade na lei de potência no limite termodinâmico é refletida pela independência de L na hipótese do FSS, tal que esperamos $\tilde{\gamma} = 0$.

Na figura 15(a), contrariamente ao procedimento adotado quanto aos gaps de energia, optamos por plotar as estimativas sucessivas $\psi_L(\eta)$ ($X \equiv \chi^{zz}$), definidas em (II-46), para cadeias com extremidades livres. Tal escolha dá-se porque a diferença entre os dois limites da inclinação, quando plotamos em escala log-log χ^{zz} versus L, não é facilmente notada: $\gamma/\nu = 1.75$ (Pfeuty - 1970) e $\gamma_0/\nu_0 = 2$ (Gerber e Beck - 1977). Segundo as equações (II-47) e (II-48), devemos esperar

$$\psi_L(\eta) \rightarrow_{L\to\infty} \begin{cases} \gamma/\nu & \eta \neq 0 \\ \gamma_0/\nu_0 & \eta = 0 \end{cases} \qquad (IV-15)$$

De fato, verifica-se na figura 15(a) que a altura e posição do máximo de $\psi_L(\eta)$ convergem ambos para os valores 2 e 0, resepctivamente. A figura 15(b) expõe o comportamento destas estimativas como funções de 1/L. Infelizmente, quanto às sucsceptibilidades e estimativas decorrentes, os sistemas acessíveis numericamente não possuem tamanho suficiente para verificarmos dobramentos análogos àqueles apresentados para os gaps.

Na resolução dessas grandezas empregamos o método de Lanczos elaborado via técnicas que nos possibilitam abordar redes grandes ($L \simeq 18$). Estes últimos permitem-nos, quando lidamos com hamiltonianos com invariância translacional, a utilização de estados que exploram essa simetria. Quanto a técnica "HASH", viabiliza uma diminuição drástica da dimensão dos vetores nos quais armazenamos os estados de spins envolvidos no processo.

Quanto aos resultados χ^{zz}, estão expostos na figura 16 segundo os moldes dos gaps de energia. Nota-se da figura 16(a) que a proporção em que η afasta-se de zero, as curvas tendem a nivelar-se para os valores de L suficientemente grandes, o que demonstra a ausência de singularidade nas leis de potência.

Como guia ao comportamento para valores limite de L, estimativas sucessivas de $\tilde{\gamma}/\nu$ em função de $1/L$ encontram-se na figura 16(b), onde o dobramento das curvas rumo ao valor $\tilde{\Gamma}(\eta) = 0$ torna-se aparente a partir daquela correspondente a $\eta = 0.1$.

Extrapolações numéricas foram desenvolvidas quanto as estimativas $\Gamma_L(\eta)$ e $\tilde{\Gamma}_L(\eta)$, para condições livres de contorno, cujos resultados apresentamos na tabela VII.

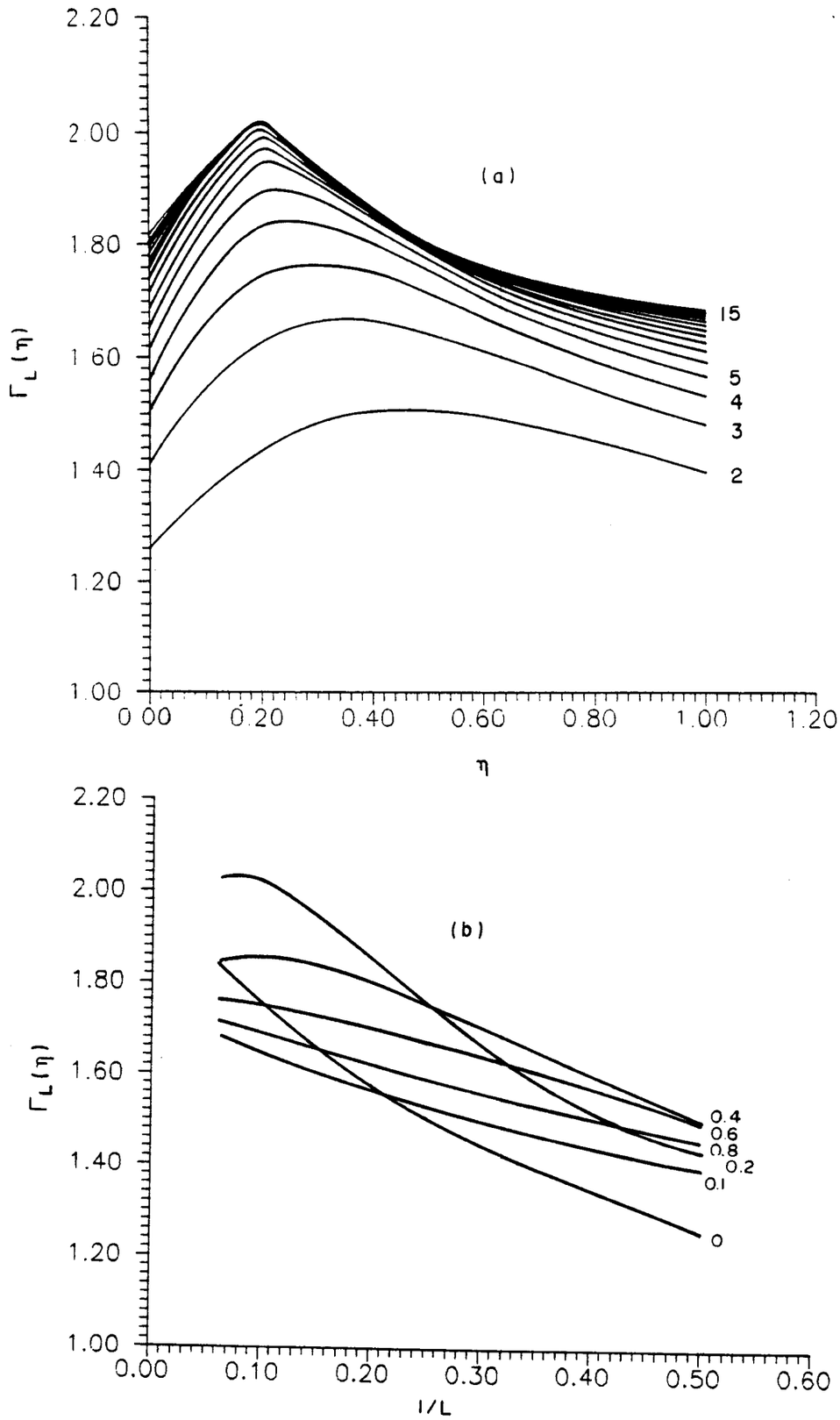


Figura 15: (a) Estimativas sucessivas da razão entre a susceptibilidade XX e os expoentes do comprimento de correlação como função de η, para cadeias com condições livres de contornos, obtidas da equação II-46 com $X \equiv \chi^{ss}$ e $\psi_N \equiv \Gamma_L$. As curvas são rotuladas por L. (b) Comportamento assintótico destas estimativas para diferente valores da anisotropia η a qual rotula as curvas.

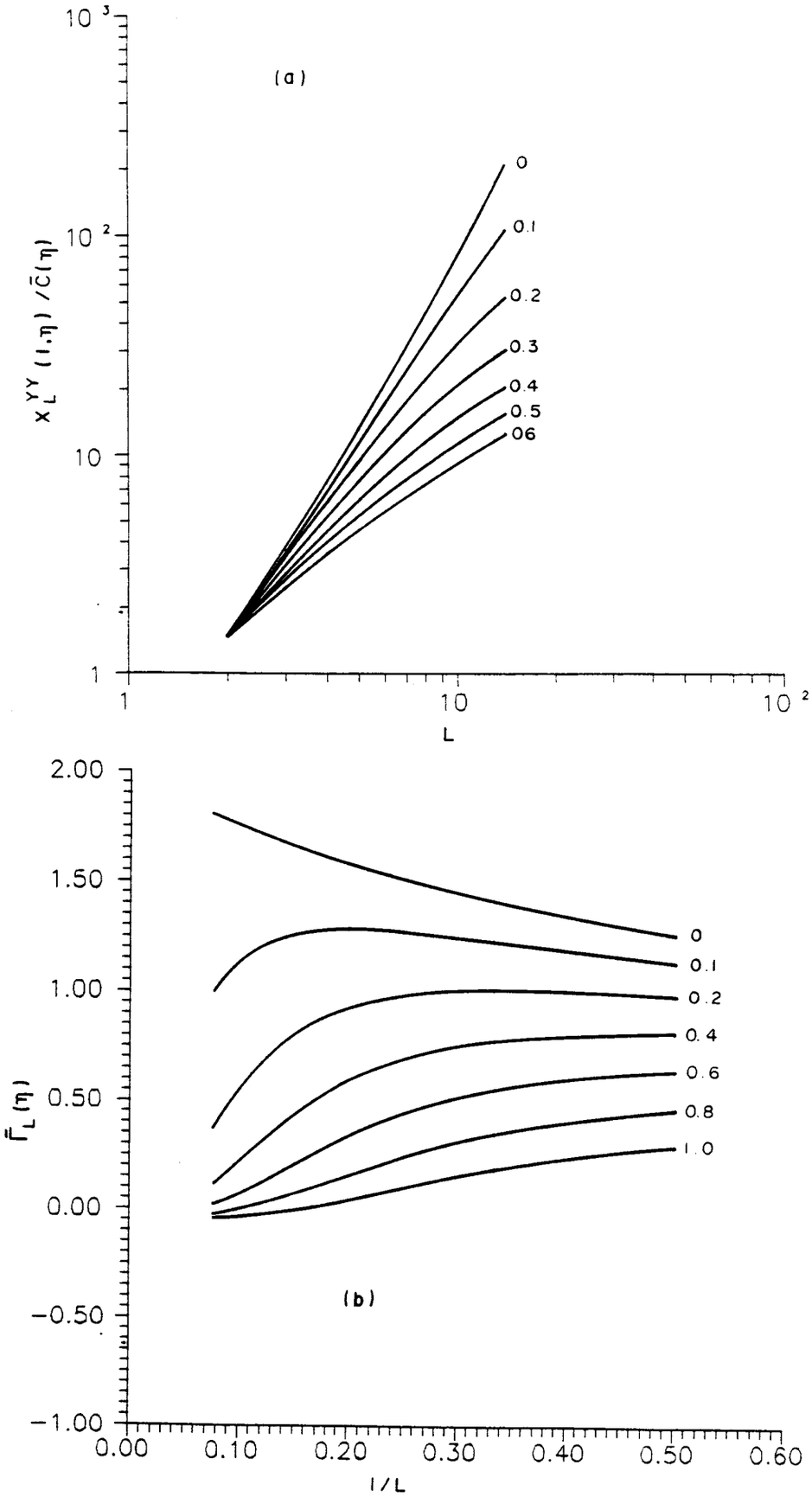


Figura 16: (a) Susceptiblidade - YY normalizada como função de L à anisotropia constante η, para condições livres de contorno. As curvas são rotuladas pelos valores de η. (b) Comportamento assintótico das curvas correspondentes, de acordo com a equação II-46 com $X \equiv \chi^{yy}\psi_L(\eta) \equiv \bar{\Gamma}(\eta)$.

Tabela VII - Extrapolações numéricas das estimativas $\Gamma_L(\eta)$ e $\tilde{\Gamma}_L(\eta)$, referentes às figuras 15(b) e 16(b) respectivamente. Condições livres de contorno.

η		
0.0		1.92914
0.2		2.03282
0.4		1.85415
0.6	$\Gamma_N(\eta)$	1.76221
0.8		1.74194
1.0		1.74042
0.0		1.92671
0.1		1.21306
0.2		-8.51237E-02
0.3	$\tilde{\Gamma}_N(\eta)$	5.96649E-02
0.4		-1.06729E-02
0.5		-2.50369E-02
0.6		-4.59506E-02

Tratando-se de condições periódicas de contorno, os efeitos da degenerescência são igualmente sentidos quanto à susceptibilidade. Neste caso, os cálculos realizados indicam que χ^{xx} e χ^{yy} divergem mesmo para um sistema finito quando $\eta \to 0$, embora $Lim_{L\to 0}[\chi^{\mu\mu}_{L+1}(1,\eta)/\chi^{\mu\mu}_{L}(1,\eta)] = 1$. Novamente, toda informação acerca do limite isotrópico é perdida devido a tal comportamento. Ainda assim, podemos detectar uma troca no comportamento quando η afasta-se de zero, como mostram as figuras 17(a) e 17(b). Em particular, destaca-se da figura 17(a) que as curvas correspondentes a $\eta = 0.6, 0.8$ e 1, respectivamente, são aproximadamente paralelas considerando-se valores grandes de L.

Números efetivos para as sucessivas inclinações podem ser extraídos da figura 17(b), onde a tendência assinala nitidamente que as curvas tendem a um limite comum próximo a 1.75, o resultado exato.

SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO - IFQSC
FÍSICA

Os resultados concernentes a χ^{yy} para cadeias com condições periódicas de contorno estão dispostos na figura 18(a), dos quais notamos um achatamento das curvas correspondentes a $\eta \geq 0.4$, em concordância com o caso onde fins livres são considerados. É nítido o comportamento delineado na figura 18(b) onde, após um valor inicial diferente de zero para $\tilde{\gamma}$, as curvas tendem a zero com o incremento de η.

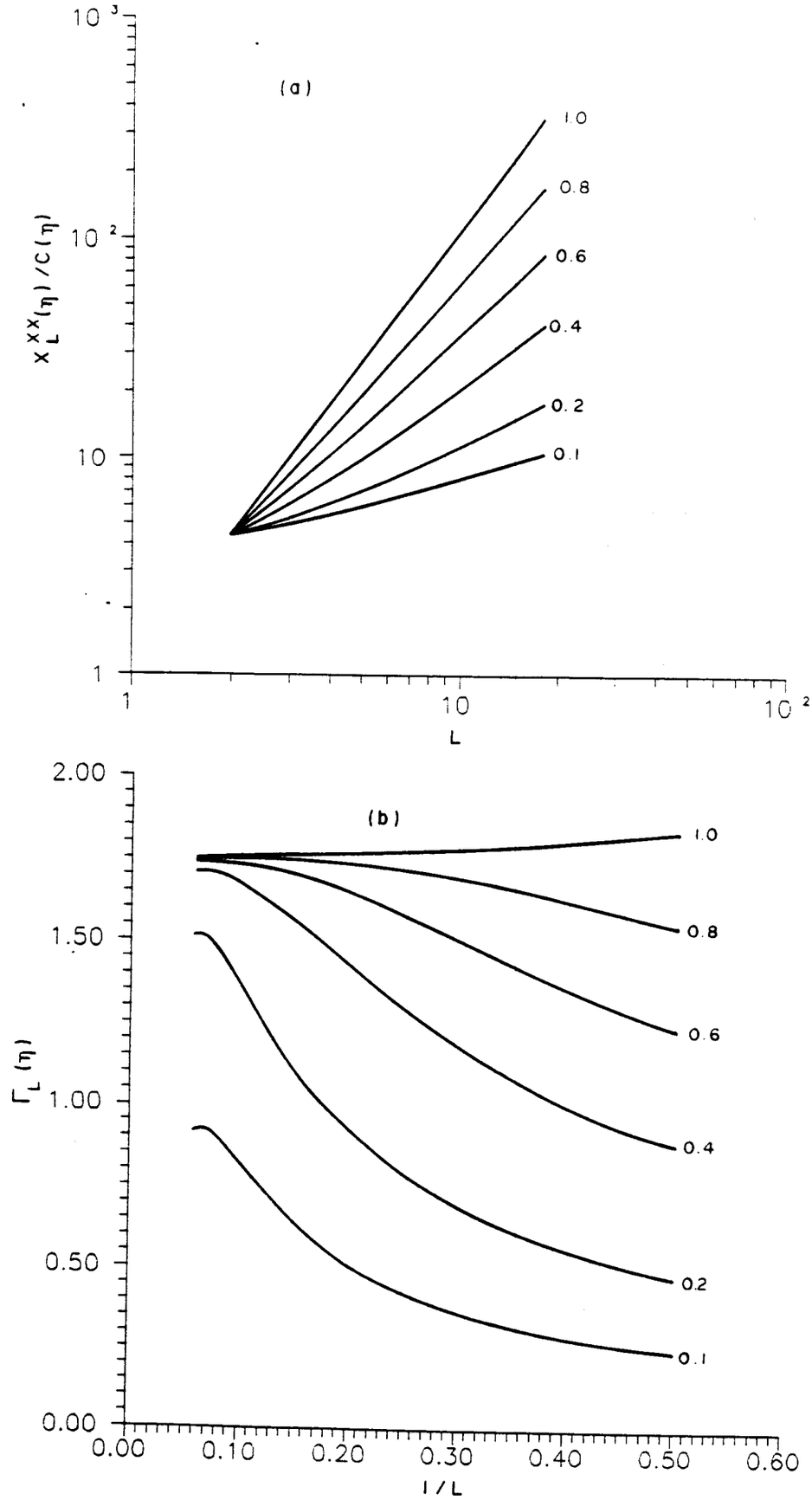


Figura 17: (a) Susceptibilidade - XX normalizada como função de L à anisotropia constante η, para condições periódicas de contorno. As curvas são rotuladas pelos valores de η. (b) Comportamento assintótico das curvas correspondentes, de acordo com a equação II-46 com $X \equiv \chi^{xx}\psi_L(\eta) \equiv \Gamma(\eta)$.

Negligenciando novamente o comportamento expresso em $\eta = 0$, para cadeias com condições periódicas de contorno, os resultados para a susceptibilidade podem ser sumarizados segundo

$$(i) \quad Lim_{L\to\infty}(\gamma_0/\nu_0)_L = Lim_{L\to\infty}(\tilde{\gamma}_0/\nu_0)_L = 2, \qquad (IV-16)$$

$$(ii) \quad Lim_{L\to\infty}(\gamma/\nu)_L = 1.75, \qquad (IV-17)$$

$$(iii) \quad Lim_{L\to\infty}(\tilde{\gamma}/\nu)_L = 0, \qquad (IV-18)$$

onde estendemos a notação da equção (VI-15). Este quadro está em concordância com os resultados exatos para γ, ν e ν_0 (Pfeuty - 1970, Barouch e McCoy - 1971), e com resultados aproximados para γ_0 (Gerber e Beck - 1977).

Quanto as extrapolações numéricas referentes às estimativas $\Gamma_L(\eta)$ e $\tilde{\Gamma}_L(\eta)$, para condições periódicas de contorno, apresentamo-as na tabela VIII.

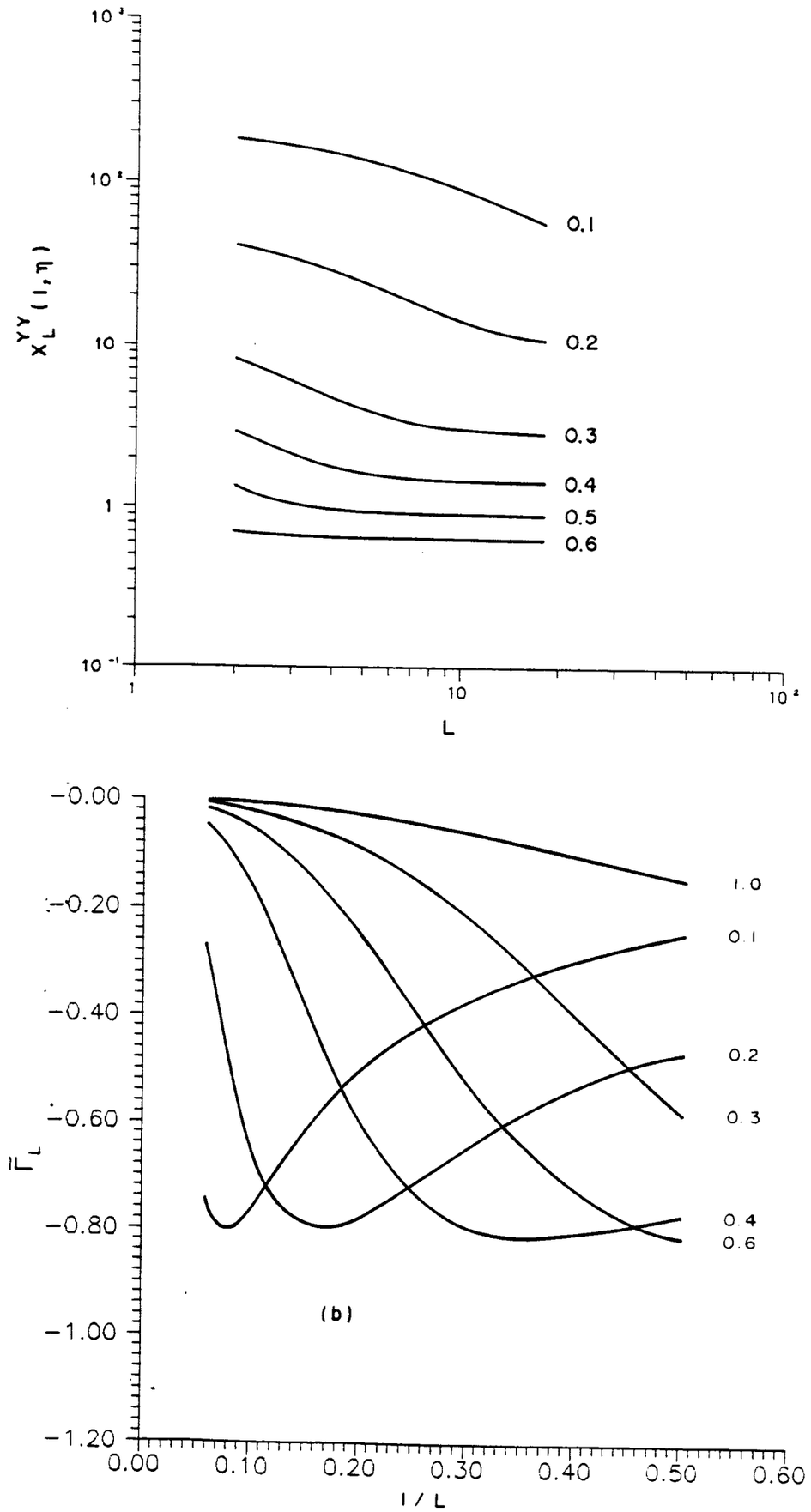


Figura 18: (a) Susceptiblidade - YY normalizada como função de L à anisotropia constante η, para condições periódicas de contorno. As curvas são rotuladas pelos valores de η. (b) Comportamento assintótico das curvas correspondentes, de acordo com a equação II-46 com $X \equiv \chi^{yy}\psi_L(\eta) \equiv \tilde{\Gamma}(\eta)$.

SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO - IFQSC
FÍSICA

η		
0.1		0.86929
0.2		1.52506
0.4		1.72112
0.6	$\Gamma_N(\eta)$	1.74127
0.8		1.74834
1.0		1.75279
0.1		0.78167
0.2		0.22481
0.4		4.35925E-02
0.6	$\tilde{\Gamma}_N(\eta)$	4.72766E-02
0.8		-4.80819E-04
1.0		9.71055E-02

Tabela VIII -Extrapolações numéricas das estimativas $\Gamma_L(\eta)$ e $\tilde{\Gamma}_L(\eta)$, referentes as figuras 17(b) e 18(b) respectivamente. Condicoes periódicas de contorno.

No que diz respeito às tabelas VII e VIII, apesar de realizado um significativo aumento no tamanho das redes, com relação ao trabalho de dos Santos e Stinchombe [17], não foi suficiente fazer ressaltar claramente os valores esperados das extrapolações.

Conforme mencionado no capítulo II, seção II-G, a razão Φ/ν_0 pode ser estimada de forma análoga ao cálculo de χ/ν_0, cuidando para que consideremos a derivada logarítmica de X_N. Desde que os níveis de energia são funções pares de η (devido a simetria do hamiltoniano), temos que usar a susceptibilidade para o cálculo da razão Φ $/\nu_0$, cujos resultados, e respectivas extrapolações, apresentam-se na tabela IX.

Tabela IX - Estimativas sucessivas de $(\Phi/\nu_0)_n = \ell n[\psi_L(1)/\psi_{L-1}(1)]/\ell n(L/L-1)$ onde $\psi_L(1) = \{\partial/\partial_\eta \ell n \chi_L[g_c(\eta)]_{\eta=0}$ para cadeias com extremidades livres. A estimativa para uma cadeia infinita encontra-se anexa.

L	$(\Phi/\nu_0)_L$
3	1.63802
4	1.35949
5	1.25343
6	1.19760
7	1.16304
8	1.13942
9	1.12217
10	1.10897
11	1.09849
∞	1.00531

Em vista do que indica a tabela IX, $Lim_{N\to\infty}(\Phi/\nu_0) = 1$, e sabendo-se que $\nu_0 = 1/2$, obtemos $\Phi = 1/2$. Este resultado é consistente com a conclusão de uma análise cuidadosa dos resultados de Barouch e McCoy (1971).

Como um teste final destas idéias, plotamos na figura 19, escala log-log, $L\Delta_L(g = 1, \eta)$ e $L^{-1.75}\chi_L^{zz}(g = 1, \eta)$ como função de η. A satisfazer as expectativas, para η pequeno as curvas não se superpõem, ao passo que com $\eta > 0.4$ o caráter universal ressalta-se nitidamente. Além do mais, para o comportamento próximo a $\eta = 1$, dos Santos e Stinchombe (1981) inferem que a dependência em η obedece à lei de potência

$$L^{-\chi/\nu}X_L(1, \eta) \sim L^{\gamma}. \qquad (IV - 19)$$

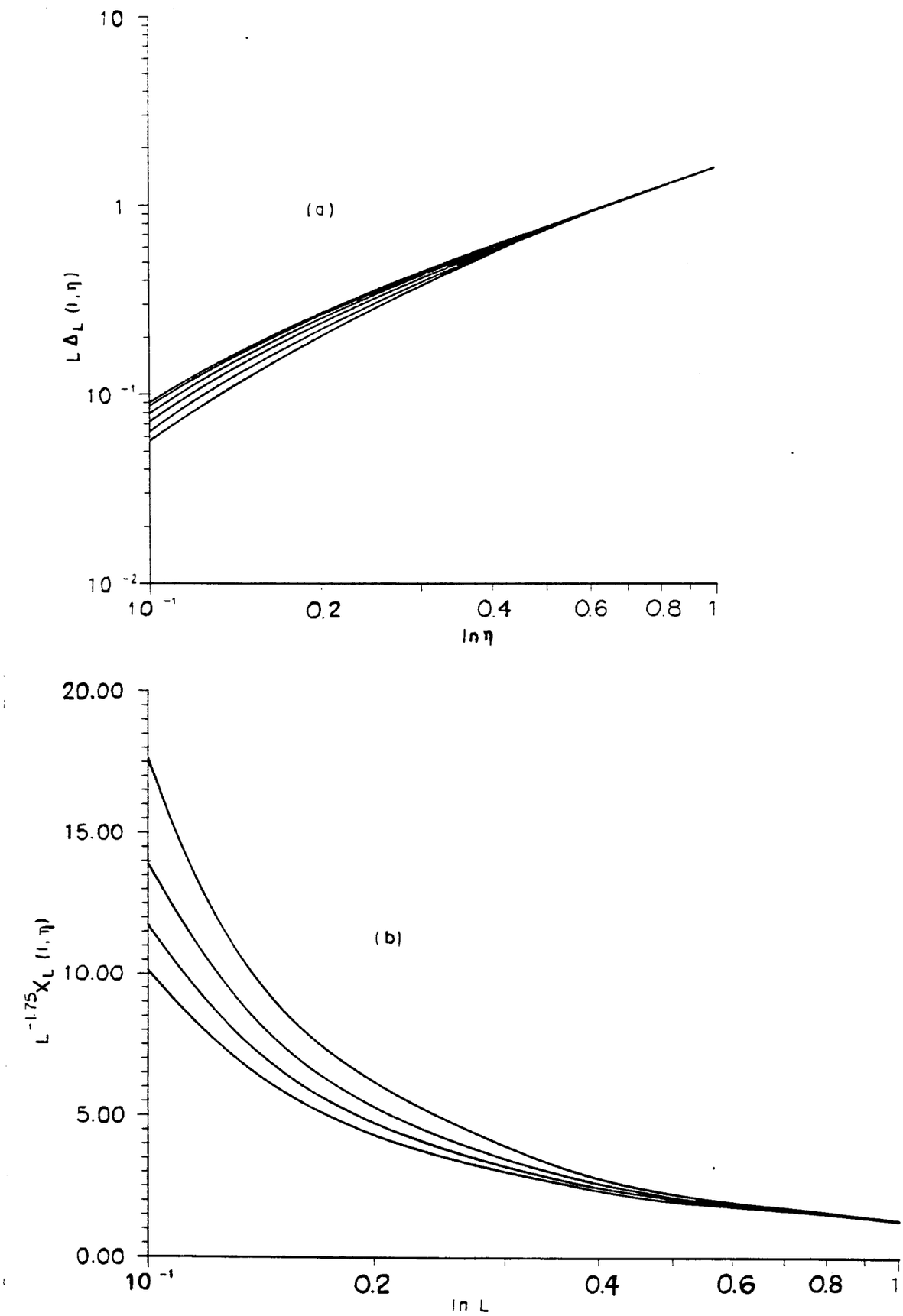


Figura 19: Curvas universais dos gaps de energia Δ_L (a) e susceptibilidade $XX\chi_L^{zz}$ como indica a equação IV-10, em função de η (condição periódica de contorno). As são rotuladas pelo tamanho das redes.

CAPÍTULO V

INVARIÂCIA CONFORME

V-A - ANOMALIA CONFORME

Para efetuarmos o cálculo da carga central (c) da álgebra de Virassoro, expressa pela relação de comutação em (II-85), lembramos que as correções devido ao tamanho finito do sistema ao autovalor mais baixo E_0 do hamiltoniano, estão relacionadas à c através da relação

$$\frac{E_0}{L}(L) = e_\infty - \frac{a}{L} - \frac{\pi\xi c}{24L^2} + 0(L^{-4}) \qquad (V-1)$$

Conforme salientado em (II-75), e_∞ corresponde ao limite termodinâmico da energia do estado fundamental por sítio, "a" é uma energia de superfície, enquanto que o termo ξ decorre da normalização do hamiltoniano, em princípio arbitrária, fixada pelos requisitos da teoria conforme (von Gehlen e outros [40] - 1986). Segundo M. Henkel [41] - (1986), o hamiltoniano XY invariante conforme, decorre da razão entre aquele definido em (III-1) e 2η, ou seja

$$H_{\ inv.conf.} = \frac{H}{2\eta}, \qquad (V-2)$$

onde η é o fator de anisotropia. Portanto, $\xi = 2\eta$ diz respeito a uma constante que restaura a invariância conforme perdida no limite anisotrópico.

O fator e_∞ é obtido através do cálculo, para redes finitas, da energia do estado fundamental por sítio e respectiva extrapolação para o limite termodinâmico. Igualmente no limite termodinâmico, determinamos o fator de superfície a extrapolando os resultados decorrentes da expressão

$$a = L\left[\frac{E_0(L)}{L} - e_\infty\right], \qquad (V-3)$$

o que torna desprezível o termo onde se apresenta a carga central c, em virtude da potência em L.

SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO - IFQSC
FÍSICA

Deve-se cuidar para não exceder o valor L cujo termo E_0/L aproxima-se suficientemente de e_∞, possibilitando que a diferença presente em (V-3) perfaça a ordem do erro intrinseco à estimativa de e_∞. Nas tabelas que se seguem apresentamos os valores da carga central (multiplicadas por 2 η) respectivos a tais tamanhos de rede L; que dá confiabilidade às estimativas de $c \times 2\eta$ em $L \rightarrow \infty$.

Tabela X - Anomalia conforme ($\times 2\eta$) correspondente aos tamanhos L de rede e respectiva extrapolação ($\eta = 0.2$).

L	C x 2η
2	0.27812
3	0.31643
4	0.33112
5	0.33334
6	0.32904
7	0.32156
8	0.31280
9	0.30381
10	0.29515
11	0.28710
12	0.27979
13	0.27322
14	0.26736
15	0.26216
16	0.25754
17	0.25344
18	0.24980
19	0.24654
20	0.24362
21	0.24100
22	0.23864
23	0.23649
24	0.23454
25	0.23275
26	0.23112
27	0.22961
28	0.22821
29	0.22692
30	0.22572
∞	0.22115

$$\frac{c}{2\eta} = \frac{0.22115}{0.4} = 0.55288$$

Tabela XI - Anomalia conforme ($\times 2\eta$) correspondente aos tamanhos L de rede e respectiva extrapolação ($\eta = 0.4$).

L	C x 2η
2	0.52023
3	0.53725
4	0.52704
5	0.51062
6	0.49487
7	0.48161
8	0.47092
9	0.46238
10	0.45553
11	0.44995
12	0.44536
13	0.44152
14	0.43826
15	0.43546
16	0.43302
17	0.43088
18	0.42899
19	0.42730
20	0.42579
21	0.42442
22	0.42317
23	0.42204
24	0.42099
25	0.42003
26	0.41914
27	0.41832
28	0.41755
29	0.41684
30	0.41617
31	0.41554
32	0.41495
33	0.41439
34	0.41386
35	0.41336
36	0.41289
37	0.41244
38	0.41201
39	0.41160
40	0.41121
41	0.41084
42	0.41049
43	0.41014
44	0.40981
45	0.40950
46	0.40920
47	0.40890
48	0.40862
49	0.40835
50	0.40809
51	0.40784
52	0.40759
53	0.40735
54	0.40712
∞	0.40661

$$\frac{c}{2\eta} = \frac{0.40661}{0.8} = 0.50826$$

Tabela XII - Anomalia conforme ($\times 2\eta$) correspondente aos tamanhos L de rede e respectiva extrapolação ($\eta = 0.6$).

L	C x 2 η
2	0.65875
3	0.66185
4	0.65186
5	0.64249
6	0.63545
7	0.63027
8	0.62639
9	0.62337
10	0.62097
11	0.61900
12	0.61736
13	0.61597
14	0.61477
15	0.61372
16	0.61280
17	0.61198
18	0.61125
19	0.61059
20	0.60999
21	0.60945
22	0.60895
23	0.60849
24	0.60806
25	0.60767
26	0.60730
27	0.60696
28	0.60664
29	0.60633
30	0.60605
31	0.60578
32	0.60553
33	0.60529
34	0.60506
35	0.60484
36	0.60463
37	0.60443
38	0.60424
39	0.60406
40	0.60389
41	0.60372
42	0.60355
43	0.60340
44	0.60325
45	0.60310
46	0.60296
47	0.60282
48	0.60269
49	0.60256
50	0.60244
51	0.60232
52	0.60220
53	0.60208
54	0.60197
55	0.60187
56	0.60176
57	0.60165
58	0.60155
59	0.60145
60	0.60135
61	0.60126
62	0.60117
63	0.60108
64	0.60099
65	0.60090
66	0.60081
67	0.60073
68	0.60065
69	0.60057
70	0.60049
71	0.60041
72	0.60034
73	0.60026
74	0.60018
75	0.60011
76	0.60004
77	0.59997
78	0.59990
∞	0.60037

$$\frac{c}{2\eta} = \frac{0.60037}{1.2} = 0.50031$$

Tabela XIII - Anomalia conforme ($\times 2\eta$) correspondente aos tamanhos L de rede e respectiva extrapolação ($\eta = 0.8$).

L	C x 2η
2	0.74152
3	0.76152
4	0.77051
5	0.77599
6	0.77973
7	0.78245
8	0.78450
9	0.78609
10	0.78736
11	0.78839
12	0.78925
13	0.78996
14	0.79057
15	0.79109
16	0.79153
17	0.79192
18	0.79226
19	0.79256
20	0.79282
21	0.79305
22	0.79326
23	0.79344
24	0.79360
25	0.79375
26	0.79388
27	0.79399
28	0.79410
29	0.79419
30	0.79427
31	0.79435
32	0.79441
33	0.79447
34	0.79452
35	0.79458
36	0.79461
37	0.79465
38	0.79468
39	0.79471
40	0.79473
41	0.79475
42	0.79476
43	0.79478
44	0.79478
45	0.79479
46	0.79479
47	0.79479
48	0.79480
49	0.79479
50	0.79479
51	0.79478
52	0.79477
53	0.79476
54	0.79475
55	0.79474
56	0.79472
57	0.79471
58	0.79469
59	0.79467
60	0.79465
61	0.79463
62	0.79462
63	0.79458
64	0.79457
65	0.79454
66	0.79452
67	0.79449
68	0.79446
69	0.79444
70	0.79442
71	0.79438
72	0.79436
73	0.79433
74	0.79430
75	0.79426
76	0.79424
77	0.79420
78	0.79418
79	0.79414
80	0.79411
81	0.79408
82	0.79404
83	0.79402
84	0.79397
85	0.79394
86	0.79391
87	0.79388
88	0.79383
89	0.79380
90	0.79376
91	0.79373
92	0.79369
93	0.79366
94	0.79362
95	0.79358
96	0.79355
97	0.79352
98	0.79347
99	0.79343
100	0.79340
∞	0.79485

$$\frac{c}{2\eta} = \frac{0.79485}{1.6} = 0.49678$$

Tabela XIV - Anomalia conforme ($\times 2\eta$) correspondente aos tamanhos L de rede e respectiva extrapolação ($\eta = 1.0$).

L	C x 2η
2	0.80926
3	0.86214
4	0.89197
5	0.91115
6	0.92452
7	0.93437
8	0.94194
9	0.94792
10	0.95278
11	0.95680
12	0.96018
13	0.96305
14	0.96554
15	0.96770
16	0.96960
17	0.97128
18	0.97278
19	0.97412
20	0.97533
21	0.97643
22	0.97743
23	0.97835
24	0.97918
25	0.97995
26	0.98066
27	0.98132
28	0.98193
29	0.98250
30	0.98303
31	0.98352
32	0.98399
33	0.98442
34	0.98483
35	0.98521
36	0.98557
37	0.98591
38	0.98624
39	0.98655
40	0.98683
41	0.98711
42	0.98737
43	0.98761
44	0.98786
45	0.98807
46	0.98830
47	0.98850
48	0.98870
49	0.98888
50	0.98906
51	0.98924
52	0.98939
53	0.98956
54	0.98971
55	0.98985
56	0.98998
57	0.99012
58	0.99025
59	0.99037
60	0.99049
61	0.99061
62	0.99072
63	0.99082
64	0.99092
65	0.99103
66	0.99112
67	0.99120
68	0.99131
69	0.99138
70	0.99147
71	0.99154
72	0.99162
73	0.99171
74	0.99176
75	0.99183
76	0.99190
77	0.99196
78	0.99204
79	0.99210
80	0.99215
81	0.99222
82	0.99227
83	0.99232
84	0.99237
85	0.99242
86	0.99246
87	0.99252
88	0.99258
89	0.99261
90	0.99264
91	0.99270
92	0.99274
93	0.99277
94	0.99281
95	0.99286
96	0.99289
97	0.99293
98	0.99296
99	0.99300
100	0.99303
∞	0.99354

$$\frac{c}{2\eta} = \frac{0.99354}{2.0} = 0.49677$$

DIMENSÃO DE ESCALA

Recordando a relação (II-63), verificamos que os gaps de energia relacionam-se às dimensões de escala, segundo

$$LG = 2\pi x^{(volume)}, \qquad (V-4)$$

em se tratando de condições periódicas e antiperiódicas de contorno. Quanto a condições livres de contorno, decorre

$$LG = \pi x^{(superficie)}. \qquad (V-5)$$

Quando se analisa o modelo de Ising, obtem-se para as estimativas $L \to \infty$ dos gaps de energia os resultados

$$E^{(-)} = Lim_{L\to\infty} LG_L^{(-)} = \begin{cases} \pi/4 & \text{cond. periodicas de contorno} \\ \pi/2 & \text{cond. livres de contorno} \\ 3\pi/4 & \text{cond. antiperiodicas de contorno} \end{cases} \qquad (V-6)$$

$$E^{(+)} = Lim_{L\to\infty} LG_L^{(+)} = 2\pi \quad \text{para os tres tipos de cond. de contorno,} \qquad (V-7)$$

onde $(+)$ e $(-)$ representam os setores de paridade relativos ao número termiônico $\mathcal{N}$ indicado em (III-14).

Em decorrência destas estimativas seguem-se, para condições periódicas e livres de contorno, as dimensões de escala de magnetização x_σ

$$x_\sigma^{(volume)} = 1/8 \ , \ x_\sigma^{(superficie)} = 1/2, \qquad (V-8)$$

e as dimensões de operador energia x_E

$$x_E^{(volume)} = 1 \quad , \quad x_E^{(superficie)} = 2. \qquad (V-9)$$

Quanto às condições antiperiódicas de contorno, é necessário mais cuidado. O motivo decorre da inserção de dois operadores desordem nas posições $\pm\infty$ na direção temporal da cinta. Dessa forma é possível descrever a função de correlação de um dado operador Φ, sob esta condição de contorno, em termos de uma outra calculada em um sistema com condições periódicas de contorno.

Em decorrência do fator $\xi = 2\eta$, que necessariamente introduz-se à direita da igualdade em (V-5), somos impossibilitados de avaliar a dimensão de escala quando a anisotropia se anula. De qualquer maneira vale a pena registrar o estudo que faremos da razão de gaps G_2/G_1 para $\eta = 0$.

Tratando-se de anisotropia não nula, o modelo insere-se na classe de universalidade de Ising, o que se confirma nitidamente dos resultados expostos nas tabelas que se seguem.

Tabela XV - Razão G_2/G_1 correspondente ao tamanho L das redes e respectiva extrapolação ($\eta = 0.2$).

L	G_1/G_2
2	3.98025
3	4.36509
4	4.53342
5	4.60750
6	4.63437
7	4.63536
8	4.62145
9	4.59888
10	4.57142
11	4.54151
12	4.51070
13	4.48003
14	4.45017
15	4.42155
16	4.39440
17	4.36885
18	4.34496
19	4.32271
20	4.30204
21	4.28290
22	4.26519
23	4.24882
24	4.23370
25	4.21974
26	4.20683
27	4.19491
28	4.18388
29	4.17368
30	4.16422
31	4.15546
32	4.14733
33	4.13978
34	4.13275
35	4.12621
36	4.12012
37	4.11443
38	4.10912
39	4.10415
40	4.09950
41	4.09514
42	4.09105
43	4.08721
44	4.08360
45	4.08020
46	4.07700
47	4.07398
48	4.07113
49	4.06844
50	4.06589
51	4.06348
52	4.06120
53	4.05903
54	4.05698
55	4.05503
56	4.05317
57	4.05141
58	4.04973
59	4.04813
60	4.04660
61	4.04515
62	4.04376
63	4.04243
64	4.04117
65	4.03995
66	4.03879
67	4.03768
68	4.03662
69	4.03560
70	4.03462
71	4.03368
72	4.03277
73	4.03191
74	4.03107
75	4.03027
76	4.02950
77	4.02876
78	4.02804
79	4.02736
80	4.02669
81	4.02605
82	4.02543
83	4.02484
84	4.02426
85	4.02371
86	4.02317
87	4.02265
88	4.02215
89	4.02166
90	4.02119
91	4.02074
92	4.02030
93	4.01987
94	4.01946
95	4.01906
96	4.01867
97	4.01829
98	4.01792
99	4.01757
100	4.01722
∞	4.00551

Tabela XVI - Razão G_2/G_1 correspondente ao tamanho L das redes e respectiva extrapolação ($\eta = 0.4$).

L	G_1/G_2
2	3.92380
3	4.23867
4	4.34062
5	4.35883
6	4.34290
7	4.31411
8	4.28204
9	4.25093
10	4.22252
11	4.19732
12	4.17531
13	4.15622
14	4.13971
15	4.12542
16	4.11304
17	4.10228
18	4.09289
19	4.08467
20	4.07745
21	4.07107
22	4.06543
23	4.06041
24	4.05593
25	4.05192
26	4.04831
27	4.04506
28	4.04212
29	4.03946
30	4.03703
31	4.03482
32	4.03280
33	4.03095
34	4.02925
35	4.02768
36	4.02623
37	4.02490
38	4.02366
39	4.02251
40	4.02144
41	4.02045
42	4.01952
43	4.01866
44	4.01785
45	4.01709
46	4.01638
47	4.01571
48	4.01508
49	4.01449
50	4.01393
51	4.01340
52	4.01291
53	4.01244
54	4.01199
55	4.01157
56	4.01117
57	4.01079
58	4.01043
59	4.01009
60	4.00976
61	4.00945
62	4.00916
63	4.00887
64	4.00860
65	4.00835
66	4.00810
67	4.00786
68	4.00764
69	4.00742
70	4.00722
71	4.00702
72	4.00683
73	4.00664
74	4.00647
75	4.00630
76	4.00614
77	4.00598
78	4.00583
79	4.00569
80	4.00555
81	4.00541
82	4.00528
83	4.00516
84	4.00504
85	4.00492
86	4.00481
87	4.00470
88	4.00460
89	4.00450
90	4.00440
91	4.00430
92	4.00421
93	4.00412
94	4.00404
95	4.00395
96	4.00387
97	4.00379
98	4.00372
99	4.00364
100	4.00357
∞	3.99999

Tabela XVII - Razão G_2/G_1 correspondente ao tamanho L das redes e respectiva extrapolação ($\eta = 0.6$).

L	G_1/G_2
2	3.83813
3	4.07976
4	4.14080
5	4.14465
6	4.13139
7	4.11456
8	4.09860
9	4.08474
10	4.07308
11	4.06338
12	4.05533
13	4.04861
14	4.04299
15	4.03824
16	4.03421
17	4.03077
18	4.02781
19	4.02525
20	4.02301
21	4.02106
22	4.01934
23	4.01782
24	4.01647
25	4.01527
26	4.01419
27	4.01322
28	4.01235
29	4.01156
30	4.01084
31	4.01019
32	4.00959
33	4.00905
34	4.00855
35	4.00809
36	4.00766
37	4.00727
38	4.00691
39	4.00657
40	4.00626
41	4.00597
42	4.00570
43	4.00544
44	4.00521
45	4.00499
46	4.00478
47	4.00458
48	4.00440
49	4.00423
50	4.00406
51	4.00391
52	4.00377
53	4.00363
54	4.00350
55	4.00338
56	4.00326
57	4.00315
58	4.00304
59	4.00294
60	4.00285
61	4.00276
62	4.00267
63	4.00259
64	4.00251
65	4.00244
66	4.00236
67	4.00230
68	4.00223
69	4.00217
70	4.00211
71	4.00205
72	4.00199
73	4.00194
74	4.00189
75	4.00184
76	4.00179
77	4.00175
78	4.00170
79	4.00166
80	4.00162
81	4.00158
82	4.00154
83	4.00151
84	4.00147
85	4.00144
86	4.00141
87	4.00137
88	4.00134
89	4.00131
90	4.00128
91	4.00126
92	4.00123
93	4.00120
94	4.00118
95	4.00116
96	4.00113
97	4.00111
98	4.00109
99	4.00106
100	4.00104
∞	4.00000

Tabela XVIII - Razão G_2/G_1 correspondente ao tamanho L das redes e respectiva extrapolação ($\eta = 0.8$).

L	G_1/G_2
2	3.73300
3	3.92722
4	3.98520
5	4.00378
6	4.00959
7	4.01094
8	4.01068
9	4.00988
10	4.00894
11	4.00802
12	4.00718
13	4.00644
14	4.00579
15	4.00522
16	4.00472
17	4.00429
18	4.00391
19	4.00357
20	4.00328
21	4.00302
22	4.00279
23	4.00258
24	4.00239
25	4.00223
26	4.00208
27	4.00194
28	4.00182
29	4.00171
30	4.00161
31	4.00151
32	4.00143
33	4.00135
34	4.00128
35	4.00121
36	4.00115
37	4.00109
38	4.00104
39	4.00099
40	4.00094
41	4.00090
42	4.00086
43	4.00082
44	4.00079
45	4.00076
46	4.00073
47	4.00070
48	4.00067
49	4.00064
50	4.00062
51	4.00060
52	4.00057
53	4.00055
54	4.00053
55	4.00052
56	4.00050
57	4.00048
58	4.00047
59	4.00045
60	4.00044
61	4.00042
62	4.00041
63	4.00040
64	4.00039
65	4.00037
66	4.00036
67	4.00035
68	4.00034
69	4.00033
70	4.00032
71	4.00032
72	4.00031
73	4.00030
74	4.00029
75	4.00028
76	4.00028
77	4.00027
78	4.00026
79	4.00026
80	4.00025
81	4.00024
82	4.00024
83	4.00023
84	4.00023
85	4.00022
86	4.00022
87	4.00021
88	4.00021
89	4.00020
90	4.00020
91	4.00020
92	4.00019
93	4.00019
94	4.00018
95	4.00018
96	4.00018
97	4.00017
98	4.00017
99	4.00017
100	4.00016
∞	4.00000

Tabela XIX - Razão G_2/G_1 correspondente ao tamanho L das redes e respectiva extrapolação ($\eta = 1.0$).

L	G_1/G_2
2	3.61803
3	3.80194
4	3.87939
5	3.91899
6	3.94188
7	3.95630
8	3.96595
9	3.97272
10	3.97766
11	3.98137
12	3.98423
13	3.98648
14	3.98828
15	3.98974
16	3.99094
17	3.99195
18	3.99279
19	3.99351
20	3.99413
21	3.99466
22	3.99513
23	3.99553
24	3.99589
25	3.99621
26	3.99649
27	3.99674
28	3.99696
29	3.99717
30	3.99735
31	3.99751
32	3.99766
33	3.99780
34	3.99793
35	3.99804
36	3.99815
37	3.99825
38	3.99834
39	3.99842
40	3.99850
41	3.99857
42	3.99863
43	3.99870
44	3.99875
45	3.99881
46	3.99886
47	3.99891
48	3.99895
49	3.99899
50	3.99903
51	3.99907
52	3.99910
53	3.99914
54	3.99917
55	3.99920
56	3.99923
57	3.99925
58	3.99928
59	3.99930
60	3.99933
61	3.99935
62	3.99937
63	3.99939
64	3.99941
65	3.99942
66	3.99944
67	3.99946
68	3.99947
69	3.99949
70	3.99950
71	3.99952
72	3.99953
73	3.99954
74	3.99956
75	3.99957
76	3.99958
77	3.99959
78	3.99960
79	3.99961
80	3.99962
81	3.99963
82	3.99964
83	3.99965
84	3.99965
85	3.99966
86	3.99967
87	3.99968
88	3.99968
89	3.99969
90	3.99970
91	3.99971
92	3.99971
93	3.99972
94	3.99972
95	3.99973
96	3.99974
97	3.99974
98	3.99975
99	3.99975
100	3.99976
∞	4.00000

Tabela XX - Razão G_2/G_1 correspondente ao tamanho L das redes e respectiva extrapolação ($\eta = 0.0$).

L	G_1/G_2
2	4.00000
3	4.41421
4	4.61803
5	4.73205
6	4.80194
7	4.84776
8	4.87939
9	4.90211
10	4.91899
11	4.93185
12	4.94188
13	4.94986
14	4.95630
15	4.96157
16	4.96595
17	4.96962
18	4.97272
19	4.97538
20	4.97766
21	4.97964
22	4.98137
23	4.98289
24	4.98423
25	4.98542
26	4.98648
27	4.98742
28	4.98828
29	4.98904
30	4.98974
31	4.99037
32	4.99094
33	4.99147
34	4.99195
35	4.99239
36	4.99279
37	4.99317
38	4.99351
39	4.99383
40	4.99413
41	4.99441
42	4.99466
43	4.99490
44	4.99513
45	4.99534
46	4.99553
47	4.99572
48	4.99589
49	4.99605
50	4.99621
51	4.99635
52	4.99649
53	4.99662
54	4.99674
55	4.99685
56	4.99696
57	4.99707
58	4.99717
59	4.99726
60	4.99735
61	4.99743
62	4.99751
63	4.99759
64	4.99766
65	4.99773
66	4.99780
67	4.99787
68	4.99793
69	4.99799
70	4.99804
71	4.99810
72	4.99815
73	4.99820
74	4.99825
75	4.99829
76	4.99834
77	4.99838
78	4.99842
79	4.99846
80	4.99850
81	4.99853
82	4.99857
83	4.99860
84	4.99863
85	4.99867
86	4.99870
87	4.99873
88	4.99875
89	4.99878
90	4.99881
91	4.99883
92	4.99886
93	4.99888
94	4.99891
95	4.99893
96	4.99895
97	4.99897
98	4.99899
99	4.99901
100	4.99903
∞	5.00000

Obtém-se nesse caso completa concordância com o predito pelas equções (V-8) e (V-9), onde $x_1 = 1/2$ e $x_2 = 2$, cuja razão x_E/x_σ deve ser igual a 4 quando $\eta \neq 0$.

No caso isotrópico ($\eta = 0$), essa razão é certamente alterada para um novo valor embora não se possa nesse caso fornecer nenhuma interpretação para o referido resultado.

V-C - DIMENSÕES DE ESCALA E ESPECTRO

Na abordagem do modelo de Ising, desde que $c = 1/2$, obtem-se via (III-24) as dimensões de escala $h = 0, 1/10, 1/2$. Em fase destas dimensões, usando-se o caráter da fórmula devida a Rocha-Caridi [24], ressaltam-se as degenerescências $d(h, r)$ correspondentes aos níveis $(h + r)$. Presente na seção (II-N), a tabela II informa-nos destas degenerescências, permitindo a construção de todo o espectro emergente do hamiltoniano invariante conforme especificado em (V-2).

As dimensões de escala associam-se aos gaps de energia segundo

$$\chi = h + r \qquad (V - 11)$$

do que decorre

$$\frac{LG}{\pi\xi} = h + r. \qquad (V - 12)$$

Fixando $\eta = 0.4$, efetuamos o cálculo das dimensões de escala relativas aos seis primeiros autovalores (mais baixos) correspondentes a cada rede L. Obviamente, consideramos estes autovalores em suas combinações, o que compreende diversos gaps de energia. A tabela exposta abaixo, abarca as seguintes combinações: $C_{6,1}$, e os 11 primeiros termos relativos a $C_{6,2}$.

Tabela XXI - Dimensões de escala referentes aos gaps, considerando-se $\eta = 0.4$.

REFERÊNCIA DO GAP	X
1	0.49999
2	1.49999
3	1.99994
4	2.50007
5	3.00005
6	3.50014
7	3.99997
8	4.00014
9	4.49998
10	4.49992
11	5.00020
12	5.00054
13	5.50024
14	5.50067
15	6.00016
16	6.00029
17	6.00064

Verifica-se que o espectro aqui esquematizado, até onde o explicitamos, confere com aquele estipulado pela tabela II (reproduzida abaixo), ressaltando que somente as representações 0 e 1/2 participam na construção do mesmo. Situação análoga ocorre com o modelo de Ising puro sob condições livres de contorno.

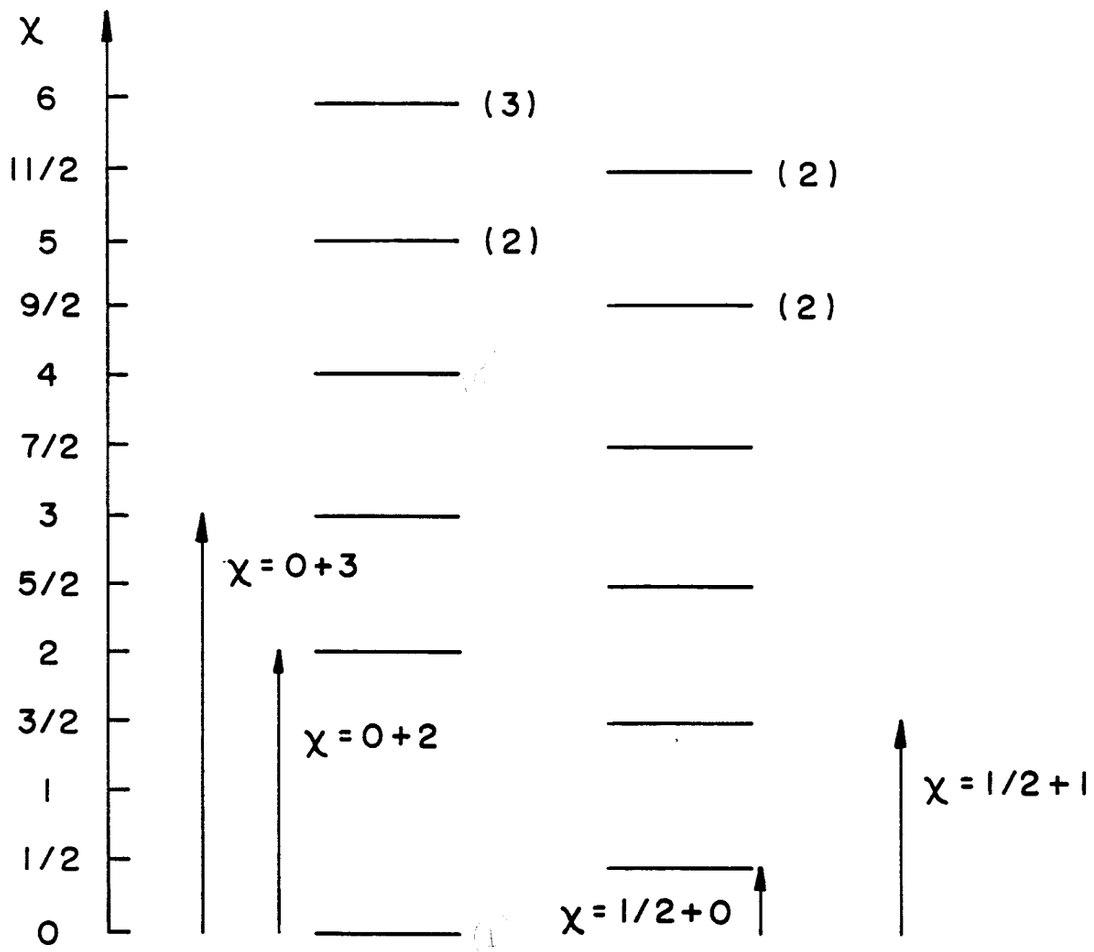


Figura 20: Esquematização do espectro relativo à tabela XXI.

	r										
Δ	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
0	1	0	1	1	2	2	3	3	5	5	7
1/2	1	1	1	1	2	2	3	4	5	6	8
1/16	1	1	1	2	2	3	4	5	6	8	10

Tabela II - Função $d(h,r)$ representando a degenerescência do nível $(h+r)$ da representação irredutível com o menor peso h.

CAPÍTULO VI

CONCLUSÃO

CONCLUSÃO

O estudo desenvolvido do modelo XY em campo transverso utilizou-se do FSS e métodos de invariância conforme. No primeiro caso (FSS) reobtivemos os resultados de dos Santos e Stinchcombe trabalhando com redes maiores, o que nos permitiu um avanço quantitativo responsável por resultados bastante confiáveis. O expoente de crossover foi determinado com razoável precisão.

Através da fermionização do hamiltoniano do modelo em questão, do que decorrem as matrizes A e B, fomos capazes de abordar redes de até 100 sítios, possibilitando uma nítida vizualização do crossover. Esse método também foi empregado para obter a carga central do modelo e para levantar o espectro no limite de escala.

Finalmente, comparando tal espectro com as predições da invariância conforme, nota-se que o modelo por inteiro reproduz o comportamento do modelo de Ising para qualquer valor não nulo da anisotropia. Considerando-se a anisotropia nula, infelizmente foi impossível aplicar os métodos de invariância conforme uma vez que a energia do estado fundamental sequer apresenta correções em potências de L, inviabilizando o cálculo da carga central c.

REFERÊNCIAS

1. M. E. Fisher e M. N. Barber, Phys. Rev. Lett. **28**, (1972) 1516
2. K. Wilson e J. B.Kogut, Phys. Rep. **12C**, (1974) 71
3. D. J. Wallace e R. K. P. Zia, Rep. Prog. Phys. **41**, (1978) 1
4. L. P. Kadanoff 1975 em "Phase Transitions and Critical Phenomena " Ed. C. Domb and M. S. Green, vol. 5a (London: Academic)
5. E. K. Riedel e F. J. Wegner, Z. Phys. **225**, (1969) 195
6. P. Pfeuty, D. Jasnow e M. E. Fisher, Phys. Rew. **B10**, (1974) 2088
7. A. Aharony 1976 em "Phase Transitions and Critical Phenomena" Ed. C. Domb and M. S. Green vol. 6 (London: Academic)
8. A. A. Belavin, A. M. Polyakov e A. B. Zamolodchikov, J. Statist. Phys. **34**, (1984) 763
9. V. Privman e M. E. Fisher, PHys. Rev. **B30**, (1984) 322
10. J. L. Cardy, J. Phys. A: Math. Gen. **17**, (1984) L385
11. B. Derrida e J. de Seze, J. de Physique **43**, (1982) 475
12. M. P. Nightingale e H. Blöte, J. Phys. **A16**, (1985) L657
13. D. Friedan, Z.Quiu e S. Shenker, Phys. Rev. Lett. **52**, (1984) 1575
14. D. B. Balbão, Tese de Mestrado apresentada ao IFQSC - DFCM, (1987)
15. H. W. Blöte, J. L. Cardy e M. P. Nightingale, Phys. Rew. Lett. **56**, (1986) 742
16. I. Affleck, Phys. Rev. Lett.**56**, (1986) 746
17. R. R. dos Santos e R. B. Stinchombe, J. Phys. A: Math. Gen. **14** (1981) 2741
18. M. P. Nightingale, Physica **83A**, (1976) 561
19. M. P. Nightingale, Proc. Koninklijke Nederlandse Acad. van Wetenschappen **B82**, (1979) 235
20. V. Privman e M. E. Fisher, J. Phys. A: Math. Gen. **16**, (1983) L295
21. R. J. Baxter, "Exactly solved models". Academic Press (1982)
22. G. von Gehlen e V. Rittenberg, J. Phys. **A19**, (1986) L625

23. J. Cardy, Nucl. Phys. **B275**, (1986) 200

24. A. Rocha - Caridi 1984 "Vertex Operator in Mathematics and Physics" Ed. J. Lepowski et al (Berlin: Springer)

25. D. Altschüler e J. Lacki 1985 Private Communication

26. H. A. Bethe, Z. Physik **71**, (1931) 205

27. L. Hulthén, Arkiv Mat. Astron. Fhsik **26A**, (1938) 1

28. P. W. Kasteleijn, Physica **18**, (1952) 104

29. H. L. Davis, Phys. Rev. **120**, (1960) 789

30. E. Lieb, T. Shultz, D. Mattis, Ann. Physik **16**, (1961) 407

31. Th. Niemeijer, Physica **36**, (1967) 377

32. P. Jordan e E. Wigner, Z. Physik **47**, (1928) 631

33. C. Hoeger, G. von Gehlen e Rittenberg, J. Phys. A: Math. Gen. **18**, (1985) 1813

34. E. Barouch, B. M. McCoy, Phys. Rev. A**3**, (1971) 786

35. A. M. Polyakov, sov. Phys. JETP Letters, **12**, (1970) 381

36. P. Pfeuty, Ann. Phys. , NY 57, (1970) 79

37. P. Pfeuty e R. J. Elliott, J. Phys. C: Solid State Phys. **4**, (1971) 2370

38. P. C. Hohenberg e B. I. Halperin, Rev. Mod. Phys. **49**, (1977) 435

39. R. R. dos Santos, D. Phil. Thesis University Oxford, (1980)

40. G. von Gehlen, V. Rittenberg e H. Rueg, J. Phys. A: Math. Gen. **19**, (1986) 107

41. M. Henkel, J. Phys. A: Math. Gen. **20**, (1987) 995

42. A.E.Ferdinand and M.E.Fisher, Phys.Rev. *185*, (1969) 832

SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO - IFQSC
FÍSICA