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

EFEITOS DE CONDIÇÃO DE CONTORNO
SOBRE O ESPECTRO DA CADEIA QUÂN-
TICA DE BLUME-CAPEL

Deborah Brasil Balbão

Dissertação apresentada ao Ins-
tituto de Física e Química de
São Carlos, da Universidade de
São Paulo, para obtenção do tí-
tulo de Mestre em Física Básica

Orientador: Prof.Dr.José Roberto Drugowich de
Felício

São Carlos
1 9 8 7

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE
Deborah Brasil Balbão APRESENTADA
AO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSI
DADE DE SÃO PAULO, EM 20 DE março DE 1987.

COMISSÃO JULGADORA:

Dr. J.R.D. de Felício Orientador

Dr. Roberto Nicolau Onody

Dr. Jürgen F. Stilck

AGRADECIMENTOS

Agradeço a ti, Zezão, pelo amor, pela força, pela paciência e por ser parte de mim agora e sempre;

ao Chico, ao Lula, ao Jaime, ao Valter, ao Almir, ao Gavião, ao Giomal e à Dayse pela amizade e pela luz que me fizeram ver e viver;

à música, à chuva, ao sol, à vida e a vocês: Dani, Kica, Clarissa, Alexandre, Rafael, Tia Dulce, Tia Célia e Vó Sônia;

Finalmente, agradeço ao Drugo pelo incentivo, pelo apoio e pela amizade, sem os quais este trabalho não teria chegado até aqui.

A

minha família

Ao José Fernando e
ao meu amigo
Drugowich

ÍNDICE

RESUMO.....	I
ABSTRACT.....	II
CAPÍTULO I - INTRODUÇÃO.....	1
CAPÍTULO II- INVARIÂNCIA CONFORME EM 2 DIMENSÕES.....	5
1. Invariância Conforme.....	5
2. Espectro.....	8
3. Operadores Primários.....	11
4. Invariância Conforme e a Álgebra de Virasoro.....	14
5. Aplicação ao Modelo de Ising em Campo Transverso.....	22
CAPÍTULO III-O MODELO DE BLUME-CAPEL.....	33
1. O Modelo.....	33
2. O Diagrama de Fases.....	40
3. Cálculo do Número de Anomalia Conforme C.....	41
CAPÍTULO IV -EFEITO DAS CONDIÇÕES DE CONTORNO SOBRE O ESPECTRO DO MODELO DE BLUME-CAPEL.....	45
1. Condições Periódicas de Contorno.....	46
2. Condições Antiperiódicas de Contorno....	49
3. Condição Livre de Contorno.....	54
4. Condição Fixa de Contorno.....	55
5. Comentários Finais.....	58
APÊNDICE A - Regras de Soma de Inversão.....	59
APÊNDICE B - O Método de Lanczos.....	63
REFERÊNCIAS.....	69

I

RESUMO

Nesse trabalho nós apresentamos o estudo numérico do espectro da cadeia quântica de Blume-Capel no ponto tricrítico (aquele que separa as linhas de transição de 1a. e 2a. ordem).

Os resultados obtidos foram comparados com as previsões da invariância conforme que permitiram construir o espectro a partir da combinação das dimensões de escala associadas aos operadores da teoria. O parâmetro que caracteriza as classes de universalidade, chamado número de anomalia conforme , foi calculado através das correções à energia do estado fundamental de cadeias finitas. Finalmente várias condições de contorno foram utilizadas para investigar a associação entre os operadores e suas dimensões, bem como para calcular os expoentes críticos das funções de correlação na superfície.

II

ABSTRACT

We calculated the conformal anomaly number of the Blume-Capel quantum chain via finite-size corrections to the ground-state energy. In addition we compute, at the tricritical point, the lowest excitations of the spectrum to be compared with the theoretical description in terms of the irreducible representations of the corresponding Virasoro Algebra. Several boundary conditions are analyzed. In particular, surface exponents are obtained by using free boundary conditions.

Este trabalho teve o apoio financeiro da FAPESP e
do CNPq.

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

A utilidade da invariância conforme em cálculos de Mecânica Estatística, apesar de sugerida há muitos anos por Polyakov¹, só muito recentemente foi reconhecida de forma definitiva. Curiosamente essa redescoberta aconteceu por acaso, quando em seus cálculos numéricos Luck², Derrida e de Sèze³ encontraram uma relação direta entre as amplitudes do comprimento de correlação e a dimensão anômala do operador cuja correlação estava sendo considerada. As coincidências numéricas foram estendidas por Nigthingale e Blöte⁴ além de Privman e Fisher⁵, mas foi John Cardy^{6,7} quem conseguiu explicar o fato (usando o princípio da invariância conforme) e inaugurar uma nova etapa para o "Finite-Size Scaling" (F.S.S.).

Esse breve histórico da união F.S.S. + invariância conforme omite, no entanto, um avanço muito importante conseguido por Belavin, Polyakov e Zamolodchikov⁸ (BPZ) no início de 1984. Nesse trabalho eles mostraram que os campos locais, de uma teoria conformemente invariante em duas dimensões*, podem ser classificados de acordo com as representações irredutíveis da álgebra de Virasoro e que todas as funções de correlação podem ser construídas a partir dos "blocos conforme", que são por sua vez completamente determinados pela invariância conforme. Em particular são obtidas todas as dimensões anômalas (expoentes críticos) dos operadores presentes na teoria. Vale a pena mencionar, no entanto, que a completa deter

* Para dimensão $d > 2$ o grupo conforme tem dimensão finita e consiste de translações, rotações, dilatações e transformações conforme especiais.

minação das funções de muitos pontos só pode ser feita se as representações mencionadas forem tais que conduzam ao desaparecimento de uma certa quantidade chamada determinante de Kac⁹. Para fechar o trabalho de BPZ faltava apenas explicar, então, porque se deveria escolher apenas as particulares representações que anulam o determinante de Kac. Foi exatamente isso que Friedan, Qiu e Shenker¹⁰ conseguiram fazer, invocando o argumento da unitariedade (a condição que nenhum dos estados gerados tenha norma negativa). Dessa forma, ficou provado que se a carga central $\underline{c}$, que é o número que parametriza a álgebra de Virasoro, for menor que 1, as únicas representações possíveis são dadas pela fórmula de Kac.

Fica claro, do exposto acima, que o número adimensional $\underline{c}$, também chamado número de anomalia conforme, praticamente nos conduz aos expoentes críticos de uma certa classe de universalidade. Ressalve-se, entretanto, que se esse número for determinado por argumentos muito gerais (por exemplo: à Lagrangeana $\mathcal{L} = \frac{1}{2} \psi \frac{\partial \psi}{\partial \bar{z}} + \frac{1}{2} \bar{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial z}$ está associado o tensor momento-energia $T(z) = -\frac{1}{2} : \psi(z) \frac{\partial}{\partial z} \psi(z) :$ que satisfaz a álgebra de Virasoro com $c=1/2$) corre-se o risco de não se saber a que modelo de mecânica estatística os índices críticos obtidos corresponderão. A situação, nesse caso, conforme palavras de Cardy em seu artigo de revisão¹¹, "é análoga àquela de um físico atômico que classifica todos os possíveis elementos pelos seus apropriados números quânticos, mas precisa apelar a outras informações para saber qual deles é incolor, inodoro, adequado à respiração dos vertebrados". Em virtude dessa dificuldade foi muito importante a conexão, recentemente descoberta por Blöte et al¹² além de I. Affleck, entre a carga central $\underline{c}$ e o maior autovalor da matriz de transferência de um sistema, finito em uma direção e infinito na outra (simetria de cinta). De acordo com esses autores, a correção de "scaling" à energia livre por

sítio, de um sistema $L \times \infty$, na temperatura crítica do análogo infinito é universal e vale (no caso de condições periódicas de contorno) $\frac{\mathbb{T}c}{6}$, sendo c a carga central. No caso de se encontrar um valor menor do que 1 para essa quantidade todas as dimensões anômalas podem ser obtidas através da fórmula de Kac⁹

$$h_{p,q} = \frac{[p(m+1) - qm]^2 - 1}{4m(m+1)} \quad 1 \leq q \leq p \leq m-1$$

onde m satisfaz a equação

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

Os comentários anteriores podem dar a impressão de que o estudo do autovalor dominante da matriz de transferência (ou do estado fundamental do hamiltoniano associado $\hat{H} = -\frac{1}{T} \ln \hat{T}$) seria suficiente para o completo entendimento de um modelo, uma vez que isso permitiria calcular o número c , e conseqüentemente as dimensões dos operadores. Entretanto, nesse esquema fica faltando identificar as dimensões, com os seus respectivos operadores, tarefa que precisa ser feita de maneira independente (por exemplo através do cálculo de autovalores subdominantes pertencentes a setores com simetria bem definida). Além disso, usando condições de contorno alternativas é possível determinar outras grandezas de interesse, como por exemplo o expoente da função de correlação para pontos na superfície de um sistema semi-infinito, a dimensão dos para-férmions, etc... É nesse sentido que o estudo numérico do espectro de cadeias finitas encontra espaço dentro desse ambicioso programa de classificação dos modelos bidimensionais.

Nesse trabalho nós investigaremos, no contexto hamiltoniano¹³⁻¹⁵, o modelo de Blume-Capel^{16,17} com o objetivo de identi-

ficar os operadores com suas respectivas dimensões. Existem pelo menos duas razões para estudar esse modelo. A primeira é que ele não é um modelo exatamente solúvel (pelo menos até hoje) e a segunda é que ele é o modelo mais simples a exibir supersimetria (simetria entre bósons e férmions). A dissertação está esquematizada da seguinte forma: no Capítulo II são apresentadas as previsões da invariância conforme para o espectro de cadeias e uma introdução à álgebra de Virasoro. Ainda nesse capítulo verificamos essas previsões em um caso exatamente solúvel: o modelo de Ising em campo transversal¹⁹. No Capítulo III introduzimos o modelo de Blume-Emery - Griffiths cuja versão mais simples, a de Blume-Capel é o tema desse trabalho. Determina-se a carga central c no ponto tricrítico (que divide a linha de transição em duas partes, uma onde a transição é de 1a. e outra onde a transição é de 2a. ordem) e num outro ponto da curva crítica onde se espera um comportamento do tipo Ising. Finalmente no Capítulo IV fazemos um estudo do efeito das condições de contorno sobre o espectro do modelo no seu ponto tricrítico. Os resultados "experimentais" são comparados com as previsões da invariância conforme. Destacamos a determinação do expoente (η_s) de superfície e da dimensão do férmion (ψ) da teoria.

CAPÍTULO II

INVARIÂNCIA CONFORME EM 2 DIMENSÕES

1. INVARIÂNCIA CONFORME

O princípio da invariância de escala num ponto crítico tem sido bastante utilizado para extrair informações relacionadas com o comportamento crítico de sistemas estatísticos. Sabemos no entanto, desde o pioneiro trabalho de Polyakov¹, que na criticalidade um sistema com interações de curto alcance e invariância translacional exibe uma simetria ainda maior, denominada invariância conforme, que é uma generalização da transformação de escala na qual o fator depende continuamente da posição. Esse fato porém não se mostrou, naquela altura, de grande relevância para o estudo dos fenômenos críticos visto que os únicos resultados que dele se obtiveram foram as regras de seleção para funções de correlação entre operadores diferentes e a dependência formal da função de três pontos em termos das dimensões anômalas dos operadores. Só recentemente (1984) é que Belavin, Polyakov e Zamolodchikov⁸ mostraram o quanto a invariância conforme é poderosa na análise do comportamento crítico de sistemas bidimensionais*.

Um exemplo simples e interessante nesse caso é a função logarítmo, que mapeia o plano inteiro- $\mathbb{Z}$ na superfície de um cilindro. A função de correlação, em uma e outra geometria, segundo Polyakov, não são independentes e estão relacionadas pela equação

* Esta é uma consequência do grupo conforme ser infinito em duas dimensões, já que, nesse caso, toda função analítica $W(\mathbb{Z})$ corresponde a uma transformação conforme.

$$\langle \phi(z_1, \bar{z}_1) \phi(z_2, \bar{z}_2) \rangle = |w'(z_1)|^\chi |w'(z_2)|^\chi \langle \phi(w_1, \bar{w}_1) \phi(w_2, \bar{w}_2) \rangle, \quad (\text{II.1})$$

onde a função de correlação da esquerda é aquela do plano infinito que na temperatura crítica vale

$$\langle \phi(z_1, \bar{z}_1) \phi(z_2, \bar{z}_2) \rangle \sim \frac{1}{|z_1 - z_2|^{2\chi}} \quad (\text{II.2})$$

e a da direita é calculada no cilindro (χ é a dimensão anômala do operador ϕ).

Escolhendo

$$w = \frac{L}{2\pi} \ln z \quad z = \exp(y + i\theta) \quad (\text{II.3})$$

o plano- z será mapeado na cinta $-\frac{L}{2} \leq \text{Im } w \leq \frac{L}{2}$

Substituindo a forma da função de correlação no sistema infinito (II.2) na equação (II.1) obtemos a forma da função de correlação na cinta

$$\begin{aligned} \langle \phi(w_1, \bar{w}_1) \phi(w_2, \bar{w}_2) \rangle_{T_c} &= |w'(z_1)|^{-\chi} |w'(z_2)|^{-\chi} |z_1 - z_2|^{-2\chi} \\ &= |z_1|^\chi |z_2|^\chi |z_1 - z_2|^{-2\chi} \\ &= \frac{e^{\frac{\pi}{L} w_1 \chi} e^{\frac{\pi}{L} \bar{w}_1 \chi} e^{\frac{\pi}{L} w_2 \chi} e^{\frac{\pi}{L} \bar{w}_2 \chi}}{\left| \left(e^{\frac{2\pi}{L} w_1} - e^{\frac{2\pi}{L} w_2} \right) \left(e^{\frac{2\pi}{L} \bar{w}_1} - e^{\frac{2\pi}{L} \bar{w}_2} \right) \right|^\chi}, \end{aligned} \quad (\text{II.4})$$

ou

$$\langle \phi(w_1, \bar{w}_1) \phi(w_2, \bar{w}_2) \rangle_{T_c} = \frac{\left(\pi/L \right)^{2\chi}}{\left| 2 \sinh \frac{\pi}{L} (w_1 - w_2) \right|^{2\chi}} \quad (\text{II.5})$$

que para $|w_1 - w_2| \gg \frac{L}{\pi}$ resulta em

$$\langle \phi(w_1, \bar{w}_1) \phi(w_2, \bar{w}_2) \rangle \sim \exp \left(-\frac{2\pi}{L} \chi |w_1 - w_2| \right). \quad (\text{II.6})$$

Comparando esse resultado com o decaimento

$$e^{-|w_1 - w_2|/\xi} \quad , \quad (\text{II.7})$$

compatível com a unidimensionalidade da cinta, concluímos que

$$L \xi^{-1} = 2\pi \chi \quad (\text{II.8})$$

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

Se estivermos trabalhando com a função de correlação spin-spin obtemos o expoente crítico η da magnetização (já que nesse caso $2\chi = \eta$), mas se a função de correlação envolver outros operadores, então outros índices críticos serão obtidos.

Como a cada operador (cujo índice crítico vale χ) está associado um comprimento de correlação diferente, a relação (II.8) permite determinar os índices críticos de um modelo a partir do conhecimento dos vários comprimentos de correlação. Estes, por sua vez, podem ser obtidos da diagonalização da matriz de transferência, já que

$$\xi_L^i = \left[\ln \frac{\lambda_0}{\lambda_i} \right]^{-1}, \quad (\text{II.9})$$

*Essa relação entre os expoentes críticos e a amplitude do inverso do comprimento de correlação no ponto crítico de sistemas bidimensionais já havia sido conjecturada em um trabalho de Derrida e de Sêze³ de 1982.

onde λ_0 é o maior autovalor da matriz de transferência e λ_1 um dos autovalores seguintes, escolhido de acordo com a simetria do operador cuja correlação está sendo calculada.

2. ESPECTRO

Depois do sucesso da combinação invariância conforme+finite-size scaling, obtido através da relação (II.8), em determinar índices críticos, muitas outras 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.

Para ilustrar esse novo enfoque retornamos ao cálculo da função de correlação numa cinta de largura L , com condições de contorno periódicas, calculada na formulação da matriz de transferência.

Por conveniência, escrevemos a matriz de transferência T na forma

$$\hat{T} = e^{-a\hat{H}} \quad (II.10)$$

onde a é o espaçamento da rede. No limite do contínuo, $a \rightarrow 0$ numa direção (direção temporal), $\hat{H}$ pode ser pensado como um operador de evolução temporal no espaço euclidiano e, identificado com o hamiltoniano da teoria quântica de campos em $(1+1)$ dimensões. (usaremos 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)

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, e devido à invariância translacional em v , os auto

estados de $\hat{H}$ podem ser escolhidos como sendo os autoestados do operador momentum $(-i \partial/\partial v)$ com autovalores K quantizados em unidades de $\frac{2\pi}{L}$.

Introduzimos, assim, um conjunto completo de autoestados de $\hat{H}$, $|n, k\rangle$ com energia E_n e momentum K .

$$\hat{H} |n, k\rangle = E_n |n, k\rangle \quad (\text{II.12})$$

Figura II.1. Reticulado usado no cálculo da função de correlação.

Para calcular a função de correlação entre os operadores $\hat{\phi}(u_1, v_1)$ e $\hat{\phi}(u_2, v_2)$ precisamos calcular o seguinte traço

$$\langle \hat{\phi}(u_1, v_1) \hat{\phi}(u_2, v_2) \rangle = \text{Tr} \left\{ \hat{T}^P \hat{\phi}(v_1) \hat{T}^{(u_1 - u_2)} \hat{\phi}(v_2) \hat{T}^L \right\} Z^{-1} \quad (\text{II.13})$$

onde Z é a função de partição dada por $Z = \text{Tr} \left\{ \hat{T}^N \right\}$.

Inserindo um conjunto completo de estados $\{|m\rangle\}$ teremos

$$\begin{aligned} \langle \hat{\phi}(u_1, v_1) \hat{\phi}(u_2, v_2) \rangle &= \sum_m \langle m | \hat{T}^P \hat{\phi}(v_1) \hat{T}^{(u_1 - u_2)} \hat{\phi}(v_2) \hat{T}^L | m \rangle Z^{-1} \\ &= \sum_{n, m} e^{-E_m(P+L)} e^{-|u_1 - u_2| E_n} \langle m | \hat{\phi}(v_1) | n, k \rangle \langle n, k | \hat{\phi}(v_2) | m \rangle Z^{-1} \end{aligned} \quad (\text{II.14})$$

Como $P + (u_1 - u_2) + L = N$ podemos tomar $M \rightarrow \infty$, concomitantemente com $P \rightarrow \infty$ e $L \rightarrow \infty$ e $|u_1 - u_2|$ fixo. Feito isso, e admitindo a unicidade do estado fundamental a equação (II.13) pode ser escrita como

$$\langle \phi(u_1, v_1) \phi(u_2, v_2) \rangle = \sum_n \langle 0 | \hat{\phi}(v_1) | n, k \rangle e^{-(E_n - E_0)(u_1 - u_2)} \langle n, k | \hat{\phi}(v_2) | 0 \rangle \quad (\text{II.15})$$

onde os elementos de matriz dependem de v_1 e v_2 como $e^{iK(v_1 - v_2)}$.

Voltamos, agora, à forma da função de correlação na cinta, obtida do mapeamento conforme do plano- z com a função logarítmica:

$$\langle \phi(w_1, \bar{w}_1) \phi(w_2, \bar{w}_2) \rangle_{T_c} = \frac{\left(\frac{\pi}{L} \right)^{2\chi}}{\left| 2 \sinh \frac{\pi}{L} (w_1 - w_2) \right|^{2\chi}}$$

Usando a notação $w = u + iv$, onde u mede as distâncias ao longo da cinta, podemos reescrever essa expressão na forma

$$\langle \phi(u_1, v_1) \phi(u_2, v_2) \rangle = \frac{\left(\frac{2\pi}{L} \right)^{\chi}}{\left| 2 \cosh \left[\frac{2\pi}{L} (u_1 - u_2) \right] - 2 \cos \left[\frac{2\pi}{L} (v_1 - v_2) \right] \right|^{\chi}} \quad (\text{II.16})$$

e, expandindo o denominador, obtemos, para $u_1 > u_2$

$$\begin{aligned} \langle \phi(u_1, v_1) \phi(u_2, v_2) \rangle &= \\ &= \left(\frac{2\pi}{L} \right)^{2\chi} \sum_{m, \bar{m}=0} a_m a_{\bar{m}} e^{-\frac{2\pi}{L}(\chi + m + \bar{m})(u_1 - u_2)} e^{\frac{2\pi}{L}i(m - \bar{m})(v_1 - v_2)} \end{aligned} \quad (\text{II.17})$$

onde os coeficientes a_m são dados por

$$a_m = \frac{\Gamma(\chi + m)}{m! \Gamma(\chi)} \quad (\text{II.18})$$

Comparando a expressão (II.17) com a função de correlação obtida na formulação de matriz de transferência (II.15) vemos que a cada operador ϕ_i corresponde um número infinito de autoestados de $\hat{H}$, caracterizados pelos inteiros $(m, \bar{m})$, com energia $E_0 + \frac{2\pi}{L}(\chi_i + m + \bar{m})$ e momentum $\frac{2\pi}{L}(m - \bar{m})$. Se ϕ_i possuir spin s_i diferente de zero o momentum será modificado para $\frac{2\pi}{L}(s_i + m - \bar{m})$.

É claro, que numa cinta cuja largura seja um número finito de espaçamentos da rede, a matriz de transferência terá somente um número finito de autoestados. Os estados excitados ($E_{m,\bar{m}} = E_0 + \frac{2\pi}{L}(\chi_i + m + \bar{m})$, $m \neq 0$ e/ou $\bar{m} \neq 0$) de $\hat{H}$ são associados a operadores com dimensão de escala $\chi_i + m + \bar{m}$. (ver seção 4)

Assim, o espectro de $\hat{H}$ é constituído de sequências de níveis de energia, "cascatas", da forma

$$E_0, E_0 + \frac{2\pi}{L}\chi_i, E_0 + \frac{2\pi}{L}(\chi_i + 1), \dots, E_0 + \frac{2\pi}{L}(\chi_i + n), \dots \quad (\text{II.19})$$

Os operadores ϕ_i que correspondem aos níveis de mais baixa energia ($E_0 + \frac{2\pi}{L}\chi_i$) de cada sequência i , ou seja, os primeiros de cada "cascata", são chamados operadores primários. Então, conhecendo as dimensões de escala χ_i dos operadores primários, podemos, através de (II.19), construir todo o espectro de $\hat{H}$.

É importante observar que todos os "gaps", $E_n - E_0$ (ver (II.19) escalam com L^{-1} e que, portanto, desaparecerão no limite $L \rightarrow \infty$. A inexistência de "gaps" no ponto crítico é a causa da invariância conforme (e, conseqüentemente, da invariância de escala) do sistema em estudo.

3. OPERADORES PRIMÁRIOS

Recentemente, Blöte et al and Affleck¹² mostraram que as correções devido ao tamanho finito do sistema ao autovalor mais baixo (E_0) de $\hat{H}$ estão relacionadas a um número c , chamado anomalia conforme, que além de desempenhar um papel central na análise da invariância conforme, pode ser usado para caracterizar diferentes classes de universalidade. No caso de condições de contorno periódicas esta relação se escreve como

$$E_0 \sim fL - \frac{\pi c}{6L}, \quad (\text{II.20})$$

onde f é o limite termodinâmico da energia do estado fundamental por sítio.

Belavin, Polyakov and Zamolodchikov mostraram que, se nós parametrizamos c por

$$c = 1 - \frac{6}{m(m+1)}, \quad (\text{II.21})$$

com m racional, o grupo de operadores primários é finito e suas dimensões de escala $(h, \bar{h})$, onde $\chi = h + \bar{h}$, são dados pela fórmula de Kac⁹, $h = h_{p,q}$, $\bar{h} = h_{\bar{p},\bar{q}}$ onde

$$h_{p,q} = \frac{(p(m+1) - qm)^2 - 1}{4m(m+1)} \quad (\text{II.22})$$

TEORIA dos estados positivos a norma positiva $\rightarrow$ produto escalar $< | \geq 0$

Friedan, Qiu e Shenker¹⁰ mostraram que, numa teoria unitária com $c < 1$, m deve ser um inteiro maior que dois ($m > 2$) e, que as únicas dimensões de escala possíveis para os operadores primários são dados pela fórmula de Kac com $1 \leq q \leq p \leq m-1$.

Notamos que o número de anomalia conforme c , realmente caracteriza uma classe de universalidade pois, tendo o valor de c obtemos um conjunto de valores de expoentes críticos através da fórmula de Kac. Consideremos, por exemplo, os casos $c=1/2$, $c=7/10$ e $c=8/10$.

Colocando o valor $c=1/2$ na relação (II.21) tiramos o valor $m=3$ e, substituindo esse valor na fórmula de Kac (II.22), os seguintes valores de $h_{p,q}$ são obtidos:

$$\begin{aligned} h_{2,2} &= 1/16 \\ h_{1,1} &= 0 \quad h_{2,1} = 1/2 \end{aligned} \quad (\text{II.23})$$

e, como para condições de contorno periódicas* somente operadores com spin ($s = h - \bar{h}$) inteiro podem ocorrer, obtemos, nesse caso, dois operadores primários não triviais, cujas dimensões de escala são

$$\chi_1 = h_{2,2} + \bar{h}_{2,2} = 1/8$$

e

$$\chi_2 = h_{2,1} + \bar{h}_{2,1} = 1 \quad (II.24)$$

Comparando essas dimensões com aquelas do modelo de Ising, vemos que a dimensão χ_1 corresponde ao expoente crítico da magnetização e que a dimensão χ_2 está relacionada à função de correlação energia-energia deste modelo.

No caso $c=7/10$, o valor de m obtido é $m=4$ e os valores de $h_{p,q}$ possíveis são:

$$\begin{array}{lll} h_{3,3} = 1/10 & & \\ h_{2,2} = 3/80 & h_{3,2} = 3/5 & \\ h_{1,1} = 0 & h_{2,1} = 7/16 & h_{3,1} = 3/2 \end{array} \quad (II.25)$$

Combinando esses valores obtemos as seguintes dimensões ($\chi = h + \bar{h}$):

$$\begin{array}{ll} \chi_1 = h_{3,3} + \bar{h}_{3,3} = 1/5 & \chi_4 = h_{2,2} + \bar{h}_{2,2} = 3/40 \\ \chi_2 = h_{3,2} + \bar{h}_{3,2} = 6/5 & \chi_5 = h_{2,1} + \bar{h}_{2,1} = 7/8 \\ \chi_3 = h_{3,1} + \bar{h}_{3,1} = 3 & \end{array} \quad (II.26)$$

Estas dimensões obtidas são exatamente as dimensões de escala do modelo de Ising tricrítico, conjecturadas por Nienhuis²⁰.

* No caso de condições periódicas de contorno o grupo de simetria é $G = \Gamma \oplus \bar{\Gamma}$ onde Γ ($\bar{\Gamma}$) é o grupo das substituições analíticas da variável z ($\bar{z}$), e por essa razão as dimensões das representações são somas de dois h 's.

No caso $c=8/10$ ($m=5$) a fórmula de Kac fornece o seguinte conjunto de dimensões:

$$\begin{array}{llll}
 & & & h_{4,4} = 1/8 \\
 & & h_{3,3} = 1/15 & h_{4,3} = 2/3 \\
 & h_{2,2} = 1/40 & h_{3,2} = 21/40 & h_{4,2} = 13/8 \\
 h_{1,1} = 0 & h_{2,1} = 2/5 & h_{3,1} = 7/5 & h_{4,1} = 3
 \end{array}$$

(II.27)

Como sempre acontece nesses casos, o conhecimento do conjunto $\{h_{p,q}\}$ não é suficiente para determinar o modelo que se está descrevendo e muito menos para estabelecer a correta conexão entre os expoentes encontrados e os correspondentes operadores. Para resolver essa questão Gehlen e Rittenberg²¹ estudaram o modelo de Potts com 3 estados por sítio, sujeito a uma variedade de condições de contorno e encontraram explicações para um subconjunto das representações (II.27) associadas ao $c=8/10$. Como esse valor de c deve descrever também o modelo de Ising tetracrítico parecia razoável não esgotar, com o Potts-3, todo o conjunto dos h 's. Entretanto, conforme apontado recentemente por Cardy²², é possível encontrar as dimensões ausentes da análise de Gehlen e Rittenberg considerando um novo tipo de condição de contorno que chamaremos de "conjugada".

4. INVARIÂNCIA CONFORME E A ÁLGEBRA DE VIRASORO

Sistemas estatísticos em duas dimensões podem ser interpretados como sistemas quânticos unidimensionais, segundo a conhecida técnica da matriz de transferência. Assim, no ponto crítico o comportamento do sistema pode ser descrito, muito adequadamente, por operadores da teoria quântica de campos. Uma característica im-

"perdemos o contato" com a rede, pois, no pto crítico os operadores de Pauli "σ" tornam-se campos escalares.

portante da teoria de campos é que os estados têm a norma positiva, isto é, o espaço de estados é um espaço de Hilbert e, portanto, a teoria é unitária. Friedan, Qiu e Shenker¹⁰ têm estudado o papel desta propriedade nas teorias de campos conforme.

No estudo do grupo de transformações conforme nos deparamos com o tensor momento-energia $T_{\mu\nu}$. Em teorias quânticas de campos, o tensor momento-energia é o operador que gera transformações locais nas coordenadas. Ele é o operador que modifica localmente o sistema, enfraquecendo acoplamentos numa direção e fortalecendo na outra. Em duas dimensões, o tensor momento-energia tem quatro componentes e, se existe invariância de escala global, é simétrico e com traço nulo, resultando apenas duas componentes independentes. Da lei de conservação $\partial_\mu T_{\mu\nu} = 0$, as duas combinações $T = T_{11} + iT_{12}$ e $\bar{T} = T_{11} - iT_{12}$ são independentes e só dependem das combinações $z = x+iy$ e $\bar{z} = x-iy$.

Com o objetivo de identificar os operadores que geram translações, rotações e dilatações no plano, expandimos T e $\bar{T}$ nas suas componentes de Fourier:

$$T(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} L_n z^{-n-2} \quad \bar{T}(\bar{z}) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \bar{L}_n \bar{z}^{-n-2} \quad (\text{II.28})$$

e, em seguida examinamos o efeito de uma transformação conforme infinitesimal

$$z \rightarrow z + \epsilon(z) \quad , \quad \bar{z} \rightarrow \bar{z} + \epsilon(\bar{z}) \quad (\text{II.29})$$

onde

$$\epsilon(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \epsilon_n z^n \quad , \quad \bar{\epsilon}(\bar{z}) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \bar{\epsilon}_n \bar{z}^n \quad (\text{II.30})$$

por exemplo, geram as dilatações em z e $\bar{z}$, respectivamente:

$$z \rightarrow z + \xi z \quad , \quad \bar{z} \rightarrow \bar{z} + \bar{\xi} \bar{z} \quad (\text{II.36})$$

O operador $L_0 + \bar{L}_0$ gera a dilatação do plano bidimensional

$$z \rightarrow z + \lambda z \quad \bar{z} \rightarrow \bar{z} + \lambda \bar{z} \quad , \quad \lambda \text{ é um número real} \quad (\text{II.37})$$

Similarmente, podemos ver que o operador $L_0 - \bar{L}_0$ gera rotações e os operadores L_{-1} e $\bar{L}_{-1}$ geram translações. Os operadores L_0 , $\bar{L}_0$, L_{-1} , $\bar{L}_{-1}$ juntamente com L_1 e $\bar{L}_1$ formam, então, o grupo de transformações conforme globais. É possível mostrar ainda que de modo geral, os operadores L_n e $\bar{L}_n$ satisfazem as seguintes relações de comutação e hermiticidade:

$$\begin{aligned} L_n^\dagger &= L_{-n} \quad , \quad \bar{L}_n^\dagger = \bar{L}_{-n} \\ [L_m, L_n] &= (m-n) L_{m+n} + \frac{1}{12} c m(m^2-1) \delta_{m+n,0} \quad (\text{II.38}) \\ [\bar{L}_m, \bar{L}_n] &= (m-n) \bar{L}_{m+n} + \frac{1}{12} c m(m^2-1) \delta_{m+n,0} \\ [L_m, \bar{L}_n] &= 0 \end{aligned}$$

(ex - central charge)

onde o número adimensional c é a carga central ou número de anomalia conforme.

A álgebra formada pelos L_n ($\bar{L}_n$) é a chamada álgebra de Virasoro, portanto, a álgebra das transformações conforme locais é um produto de duas álgebras de Virasoro, que comutam entre si. A álgebra de Virasoro é a extensão central da álgebra dos operadores diferenciais

$$L_n = z^{n+1} \frac{d}{dz} \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (\text{II.39})$$

As regras de comutação para esses operadores são facilmente obtidas como mostramos abaixo:

$$\begin{aligned} L_n L_m \phi - L_m L_n \phi &= L_n z^{m+1} \frac{d}{dz} \phi - L_m z^{n+1} \frac{d}{dz} \phi = \\ &= (m+1) z^{n+1} z^m \frac{d\phi}{dz} + z^{n+1} z^{m+1} \frac{d^2 \phi}{dz^2} - (n+1) z^{m+1} z^n \frac{d\phi}{dz} - z^{m+1} z^{n+1} \frac{d^2 \phi}{dz^2} \\ L_n L_m \phi - L_m L_n \phi &= (m-n) z^{n+m+1} \frac{d\phi}{dz} = (m-n) L_{n+m} \phi \end{aligned}$$

e, então;

$$[L_n, L_m] = (m-n) L_{n+m} \quad (\text{II.40})$$

Voltando a álgebra de Virasoro e escolhendo novas coordenadas σ e τ , definidas por

$$z = \exp(\tau + i\sigma), \quad \bar{z} = \exp(\tau - i\sigma) \quad (\text{II.41})$$

obtemos que o Hamiltoniano pode ser escrito como

$$H = L_0 + \bar{L}_0, \quad \text{translação.} \quad (\text{II.42})$$

Unidade e geradores de translação.
Def. no pl. o $\bar{z}$, base (ve

isto é, os autoestados de H são autoestados de L_0 e $\bar{L}_0$. Das relações de comutação (II.38) com $n=0$ vemos que

$$[L_0, L_n] = +n L_n, \quad (\text{II.43})$$

e, trabalhando com autoestados $|h\rangle$ de L_0 cujos autovalores são denotados por h , teremos

$$\begin{aligned} L_0 L_n |h\rangle - L_n L_0 |h\rangle &= -n L_n |h\rangle, \\ L_0 L_n |h\rangle - h L_n |h\rangle &= -n L_n |h\rangle, \\ L_0 (L_n |h\rangle) &= (h-n) (L_n |h\rangle), \end{aligned} \quad (II.44)$$

$L_0 |h\rangle = h |h\rangle$
 $L_0 (L_n |h\rangle) = h (L_n |h\rangle)$
 $L_0 |h\rangle = h |h\rangle$

o que possibilita a identificação de L_n com um operador de levantamento se $n < 0$ e, como um operador de abaixamento se $n > 0$.

Assim, o estado $|h\rangle$ é um estado "fundamental" se ele for aniquilado por todos os operadores de abaixamento, isto é,

$$L_0 |h\rangle = h |h\rangle, \quad L_n |h\rangle = 0 \quad n > 0 \quad (II.45)$$

O espaço de Hilbert é gerado aplicando o operador de levantamento no estado fundamental $|0\rangle$. Além disso, o estado fundamental $|0\rangle$ deve ser aniquilado por $L_n, \bar{L}_n$ se $n \geq -1$, isto é

$$L_n |0\rangle = \bar{L}_n |0\rangle = 0 \quad n \geq -1 \quad (II.46)$$

para que o tensor momento-energia seja não-singular em $z=0$, já que

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

O significado físico de h e $\bar{h}$ pode ser entendido estudando as funções de correlação dos campos que são invariantes frente a transformações conforme globais (geradas pelos $L_n, \bar{L}_n$ para $n=-1, 0, 1$). Em particular, pode-se determinar a forma da função de dois pontos:

$$\frac{e^{2i(\Delta, \bar{\Delta})}}{|r|^{2(\Delta+\bar{\Delta})}} = \frac{1}{|z|^{\Delta}|z'|^{\bar{\Delta}}} = \frac{1}{|re^{i\theta}|^{\Delta}|re^{i\theta}|^{\bar{\Delta}}}$$

$$\begin{aligned} \langle 0 | \phi(z, \bar{z}) \phi(0, 0) | 0 \rangle &= \langle 0 | \phi(re^{i\theta}, r\bar{e}^{i\theta}) \phi(0, 0) | 0 \rangle \\ &= r^{-2(h+\bar{h})} e^{2i(h-\bar{h})\theta} \end{aligned} \quad (\text{II.47})$$

vemos, então, que $\phi(z, \bar{z})$ tem dimensão $x=h+\bar{h}$ e spin $s=h-\bar{h}$.

A definição dos operadores primários pode ser introduzida neste contexto da expansão de $T(z)$ com o operador $\phi(z', \bar{z}')$

$$T(z) \phi(z', \bar{z}') = \sum_{n=-\infty}^{\infty} (z-z')^{-2-n} L_n \phi(z', \bar{z}') \quad (\text{II.48})$$

que leva à seguinte relação de comutação

$$[L_n, \phi(z, \bar{z})] = z^{n+1} \partial_z \phi(z, \bar{z}) + h(n+1) z^n \phi(z, \bar{z}) \quad (\text{II.49})$$

Portanto, se ϕ tiver dimensão de escala h , os operadores L_n terão dimensão $x=h-h$. Como numa teoria unitária os operadores não podem ter dimensão negativa ($x < 0$), existirão operadores ϕ para os quais

$$L_n \phi = 0, \quad n > 0 \quad (\text{II.50})$$

que serão chamados operadores primários. Os operadores $L_n \phi$ ($n < 0$) não têm essa propriedade. Estes operadores juntamente com o operador primário ϕ constituem um bloco conforme, cujos primeiros membros são:

	nível	
ϕ	0	
$L_{-1} \phi$	1	(II.51)
$L_{-2} \phi, L_{-1}^2 \phi$	2	
$L_{-3} \phi, L_{-1} L_{-2} \phi, L_{-1}^3 \phi$	3	

O número de operadores no nível N é $P(N)$, o número de partições do inteiro N e todos eles têm dimensão de escala $x+N$.

É importante notar que nem todos os estados obtidos pela aplicação de operadores do mesmo nível são independentes e como consequência disso a degenerescência do nível N não é, em geral, igual a $P(N)$. Para calcular corretamente a degenerescência de um nível é preciso usar a tabela de caracteres correspondente que pode ser obtida através da fórmula calculada por Rocha-Caridi (veja Apêndice A e Capítulo IV).

Como a variação de um operador secundário (que não é primário) pertencente a um dado bloco conforme sob uma transformação conforme infinitesimal pode ser expressa linearmente em termos das representações deste mesmo bloco conforme, 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 Virasoro formadas pelos operadores L_n e $\bar{L}_n$.

5. APLICAÇÃO AO MODELO DE ISING EM CAMPO TRANSVERSO

Nessa seção nós verificaremos as previsões da invariância conforme em um modelo exatamente solúvel que é a cadeia de L spins de Ising em um campo transversal λ cujo hamiltoniano com condições livres de contorno é

$$H_F = - \lambda \sum_{n=1}^L \sigma_n^z - 2 \sum_{n=1}^{L-1} \sigma_n^x \sigma_{n+1}^x \quad (\text{II.52})$$

onde σ^x, σ^z são matrizes de Pauli. Para condições periódicas e antiperiódicas de contorno um termo extra $H_1 = \mp 2 \sigma_L^x \sigma_1^x$, respectivamente, é incluído no hamiltoniano. No limite $L \rightarrow \infty$, o estado fundamental é singular em $\lambda_c = 1$ (a cadeia de Ising num campo transversal foi estudada em detalhes por Katsura, Pfeuty e Boccara e Sarma). O modelo pode ser resolvido introduzindo-se os operadores de criação e aniquilação de férmions e, então, diagonalizando-se exatamente o hamiltoniano resultante por uma transformação canônica.

Substituímos os Paulions por Férmions através de uma transformação de Jordan-Wigner que se escreve

$$C_j^+ = \frac{1}{2} (\sigma_j^x + i \sigma_j^y) \prod_{k < j} [-\sigma_k^z], \quad (\text{II.53})$$

e

$$C_j = \frac{1}{2} \prod_{k < j} [-\sigma_k^z] (\sigma_j^x - i \sigma_j^y),$$

Em termos dos operadores fermiônicos C_n, C_n^+ o hamiltoniano H_F é modificado para

soluções da equação

$$\lambda^{-1} = \frac{\text{sen} \left[(L+1)k \right]}{\text{sen}(Lk)} \quad (\text{II.59})$$

Em $\lambda = \lambda_c = 1$, isso se reduz a $\tan Lk = \cotg(k/2)$, ou ainda

$$|k| = \frac{(2m+1)\pi}{(2L+1)} \quad m=0, 1, \dots, L-1 \quad (\text{II.60})$$

Para $L=4$, por exemplo

$$|k| = \frac{\pi}{9}, \frac{3\pi}{9}, \frac{5\pi}{9} \text{ e } \frac{7\pi}{9} \quad (\text{II.61})$$

A energia do estado fundamental corresponde ao estado sem nenhum fêrmion, de forma que

$$\begin{aligned} E_0(F) &= -\frac{1}{2} \sum_{m=0}^{L-1} \Lambda \left(\frac{(2m+1)\pi}{2L+1} \right) = \\ &= \frac{1}{2} \left(1 - \text{cosec} \frac{\pi}{2(2L+1)} \right) \end{aligned} \quad (\text{II.62})$$

O primeiro estado excitado é obtido colocando-se uma "partícula" de momento $k=\pi/(2L+1)$, de modo que o 1º "gap" dentro das condições livres de contorno é dado por

$$E^{(1)}(F) = \Lambda \left(\frac{\pi}{(2L+1)} \right) = 2 \text{sen} \left(\frac{\pi}{(2L+1)} \right) \quad E_1(F) \quad (\text{II.63})$$

$$G(F) = E_1(F) - E_0(F) = -\frac{1}{2} \sum_k \Lambda(k) + \Lambda \left(\frac{\pi}{2L+1} \right) + \frac{1}{2} \sum_k \Lambda(k)$$

Para calcular o segundo "gap" é preciso excitar duas "partículas", uma de momento $k=\pi/(2L+1)$ e outra de momento $k=3\pi/(2L+1)$ de forma que:

$$\begin{aligned}
 G^{(+)}(F) &= \Lambda\left(\frac{\pi}{2L+1}\right) + \Lambda\left(\frac{3\pi}{2L+1}\right) = \\
 &= 2 \left(\sin \frac{\pi}{2(2L+1)} + \sin \frac{3\pi}{2(2L+1)} \right). \quad (\text{II.64})
 \end{aligned}$$

Para condições periódicas de contorno com N par ou condições antiperiódicas com N ímpar, os valores permitidos de k são:

$$k = \left[\frac{(2m+1)}{L} \right] \pi \quad m=0, 1, \dots, L-1 \quad (\text{II.65})$$

enquanto que para condições periódicas com N ímpar ou antiperiódicas com N par, são:

$$\begin{aligned}
 k &= k_p \frac{2\pi}{L} \sin \frac{\pi}{2} (2m+2) = \left(k_p \frac{2\pi}{L} \sin \frac{\pi}{2} (2m+2) \right) \\
 k &= \left(\frac{2m}{L} \right) \pi \quad K = \frac{\pi}{L} (k_p \sin \frac{\pi}{2} (2m+2)) \quad m=0, 1, \dots, L-1 \quad (\text{II.66})
 \end{aligned}$$

Os dois grupos de k 's possuem dois estados fundamentais diferentes que, em $\lambda = \lambda_c = 1$ possuem N par. Assim, as energias dos estados fundamentais para condições periódicas e antiperiódicas de contorno, respectivamente, são dadas por

$$E_0(P) = -\frac{1}{2} \sum_{m=0}^{L-1} \Lambda\left(\frac{2m+1}{L} \pi\right) = -\text{cosec}\left(\frac{\pi}{2L}\right) \quad (\text{II.67})$$

$$E_0(A) = -\frac{1}{2} \sum_{m=0}^{L-1} \Lambda\left(\frac{2m}{L} \pi\right) = -\text{cotg}\left(\frac{\pi}{L}\right) \quad (\text{II.68})$$

Note que $E_0(A) - E_0(P) = \tan(\pi/4L)$. Além disso, o primeiro estado excitado no setor N par corresponde a

$$E_1^{(+)}(p) = -\frac{1}{2} \sum_k \Lambda(k) + \Lambda\left(\frac{\pi}{L}\right) + \Lambda\left(\frac{(2L-1)\pi}{L}\right) \quad (\text{II.69})$$

resultando no "gap" $G^{(+)}(p)$

excita-se um n.º par de partículas.

$$G_1^{(+)}(p) = \Lambda\left(\frac{\pi}{L}\right) + \Lambda\left(\frac{(2L-1)\pi}{L}\right) = 4 \sin\left(\frac{\pi}{2L}\right) \quad (\text{II.70})$$

É possível formar estados com $k_{\text{total}} \neq 0$, excitando, por exemplo

$$\frac{\pi}{L}, \frac{3\pi}{L} \Rightarrow k_T = \frac{\pi}{L} + \frac{3\pi}{L} = \frac{4\pi}{L} \quad (\text{II.71})$$

ou ainda

$$\frac{\pi}{L}, (2L-3)\frac{\pi}{L} \Rightarrow k_T = -\frac{2\pi}{L} \quad (\text{II.72})$$

Eles terão energia mais alta, obedecendo a relação de dispersão $E = pc$.

Para obter o primeiro estado excitado no setor N° ímpar, dentro das condições periódicas, excitamos uma partícula de $k=0$, mas com isso não custa nada em energia ($\Lambda(0)=0$) teremos $E_1^{(-)}(p) = E_0(A)$. Assim, o primeiro "gap" de condições periódicas de contorno dado por

$$E_1^{(-)}(p) = -\frac{1}{2} \sum_{k=0}^{L-1} \Lambda\left(\frac{2k\pi}{L}\right) + \Lambda(0) = E_0^{(+)}(p)$$

$$G_1^{(-)}(p) = \Lambda(0) + E_0^{(+)}(A) - E_0^{(+)}(p) = \quad (\text{II.73})$$

$$= E_0^{(+)}(A) - E_0^{(+)}(p) = \tan\left(\frac{\pi}{4L}\right)$$

$$-\frac{1}{2} \sum \Lambda\left(\frac{2k\pi}{L}\right) - \frac{1}{2} \sum \Lambda\left(\frac{2k\pi}{L}\right)$$

coincide com a diferença de energia entre o estado fundamental com condições periódicas de contorno e aquele com condições antiperiódicas de contorno. Esse fato é compatível com a igualdade entre a dimensão dos operadores ordem e desordem, como veremos mais adiante.

O primeiro estado excitado das condições antiperiódicas de contorno (N ímpar) será igual a $E_0(P)$ a menos de uma partícula que aumenta a energia para

$$E_1^{(-)}(A) = E_0(P) + \Lambda\left(\frac{\pi}{L}\right), \quad (\text{II.74})$$

resultando num "gap" $G^{(-)}(A)$ igual à

$$G^{(-)}(A) = 2 \operatorname{sen}\left(\frac{\pi}{2L}\right) - \tan\left(\frac{\pi}{4L}\right). \quad (\text{II.75})$$

Os primeiros "gaps" para condições periódicas e antiperiódicas de contorno, são, então, dados por:

$$G^{(-)}(P) = \Lambda(0) + E_0(A) - E_0(P) = \tan\left(\frac{\pi}{4L}\right)$$

$$G^{(+)}(P) = \Lambda\left(\frac{\pi}{L}\right) + \Lambda\left[\frac{(2L-1)\pi}{L}\right] = 4 \operatorname{sen}\left(\frac{\pi}{2L}\right)$$

$$\begin{aligned} G^{(+)}(A) &= \Lambda\left(\frac{\pi}{L}\right) + E_0(P) - E_0(A) = \\ &= 2 \operatorname{sen}\left(\frac{\pi}{2L}\right) - \tan\left(\frac{\pi}{4L}\right) \end{aligned}$$

$$G^{(+)}(A) = \Lambda(0) + \Lambda\left(\frac{2\pi}{L}\right) = 2 \operatorname{sen}\left(\frac{\pi}{L}\right)$$

que, no limite $L \rightarrow \infty$, resultarão em:

$$\mathcal{E}^{(-)} = \lim_{L \rightarrow \infty} L G_L^{(-)} = \begin{cases} \pi/4 & \text{para condições periódicas de contorno} \\ \pi/2 & \text{para condições livres de contorno} \\ 3\pi/4 & \text{para condições antiperiódicas de con-} \\ & \text{torno} \end{cases} \quad (\text{II.77})$$

e

$$\mathcal{E}^{(+)} = \lim_{L \rightarrow \infty} L G_L^{(+)} = 2\pi \quad \text{para os três tipos de condi-} \\ \text{ções de contorno.}$$

Lembrando que, os "gaps" estão relacionados às dimensões de escala por

$$LG = 2\pi \chi^{(\text{volume})} \quad \text{para condições periódicas e antiperiódicas} \quad (\text{II.78})$$

e

$$LG = \pi \chi^{(\text{superfície})} \quad \text{para condições livres}$$

obtemos os seguintes resultados:

$$\chi_0^{(\text{volume})} = 1/8 \quad \chi_0^{(\text{superf.})} = 1/2 \quad (\text{II.79})$$

onde χ_0 é a dimensão da magnetização, e

$$\chi_e^{(\text{volume})} = 1 \quad \chi_e^{(\text{superf.})} = 2 \quad (\text{II.80})$$

onde $\chi_c = (2 - 1/\chi)$ é a dimensão do operador energia.

As condições antiperiódicas de contorno exigem um pouco mais de cuidado pois elas contêm mais informações relevantes do que se pensa. Vejamos isso: para o modelo de Ising, a imposição de condições antiperiódicas é equivalente à inserção de dois operadores desordem μ em $u = \pm\infty$. A função de correlação de um operador ϕ , no sistema com condições antiperiódicas de contorno, pode então ser escrita em termos de uma outra calculada em um sistema com condições periódicas de contorno, conforme segue:

$$\langle \phi(u) \phi(u) \rangle_A = \lim_{\substack{u'_1 \rightarrow -\infty \\ u'_2 \rightarrow +\infty}} \frac{\langle \mu(u'_1) \phi(u_1) \phi(u_2) \mu(u'_2) \rangle_P}{\langle \mu(u'_1) \mu(u'_2) \rangle_P} \quad (\text{II.81})$$

O comprimento de correlação é obtido tomando-se o limite $u_2 - u_1$ grande, depois dos limites em u'_1 e u'_2 . O autoestado de $\hat{H}$ que domina neste limite corresponde ao operador com menor dimensão χ que é gerada na expansão de curta distância de μ e ϕ . Para o modelo de Ising, se $\phi = \hat{\sigma}$ (o operador da magnetização), o operador mais relevante gerado é o férmion ψ , que tem $\chi_F = 1/2$, correspondendo ao autovalor $E_0 + \pi/L$. Deste, deve ser subtraída a dimensão correspondendo a μ no denominador, que é igual à de $\hat{\sigma}$ por dualidade. Assim

$$L G^{(1)}(A) = 2\pi (\chi_F - \chi_\mu) = 2\pi \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{8} \right) = \frac{3}{4} \pi \quad (\text{II.82})$$

Se consideremos os "gaps" formados com autovalores mais altos obteremos as "cascatas" (veja seção II do Capítulo II) associadas a essas dimensões de escala, listadas em (II.77).

Vejamos, por exemplo, o que acontece no caso de condi -

ções periódicas de contorno. Os autovalores no setor par ($\mathcal{N}$ par) são obtidos excitando-se um número par de "partículas" com momentos dados por:

$$k = \frac{(2m+1)\pi}{L} \quad m=0,1,\dots,L-1. \quad (\text{II.83})$$

Assim, além do estado fundamental

$$E_0(P) = -\frac{1}{2} \sum_k \Lambda(k) = -\frac{1}{2} \sum_{m=0}^{L-1} \Lambda\left(\frac{2m+1}{L} \pi\right),$$

e do 1º estado excitado (no setor par)

$$E_1^{(+)}(P) = -\frac{1}{2} \sum_k \Lambda(k) + \Lambda\left(\frac{\pi}{L}\right) + \Lambda\left(\frac{(2L-1)\pi}{L}\right) \quad (\text{II.84})$$

outros autovalores podem ser obtidos excitando-se, por exemplo, uma partícula com $k=\pi/L$ e outra com $k=3\pi/L$, e assim por diante. No caso mencionado a energia é

$$E_2^{(+)}(P) = -\frac{1}{2} \sum_k \Lambda(k) + \Lambda\left(\frac{\pi}{L}\right) + \Lambda\left(\frac{3\pi}{L}\right), \quad (\text{II.85})$$

cujo momento total é $K_T = \frac{\pi}{L} + \frac{3\pi}{L} = \frac{4\pi}{L}$.

A diferença de energia $(E_2^{(+)} - E_0)$ é dada por

$$G_2^{(+)}(P) = 2 \sin\left(\frac{\pi}{2L}\right) + 2 \sin\left(\frac{3\pi}{2L}\right),$$

que no limite $L \rightarrow \infty$ se reduz a

$$\lim_{L \rightarrow \infty} L G_2^{(+)}(P) = \pi + 3\pi = 4\pi = 2\pi \chi_2^{(+)} = 2\pi(\chi_2 + 1) \quad (\text{II.86})$$

com $\chi_2^{(+)} = \chi_{E+1}$.

Podemos excitar uma partícula com $k = \frac{5\pi}{L}$ ao invés de $k = \frac{3\pi}{L}$, o que resultará em:

$$E_3^{(+)}(P) = -\frac{1}{2} \sum_k \Lambda(k) + \Lambda\left(\frac{\pi}{L}\right) + \Lambda\left(\frac{5\pi}{L}\right) \quad (\text{II.87})$$

de forma que

$$G_3^{(+)}(P) = 2 \sin\left(\frac{\pi}{2L}\right) + 2 \sin\left(\frac{5\pi}{L}\right)$$

e

(II.88)

$$\lim_{L \rightarrow \infty} L G_3^{(+)}(P) = 6\pi = 2\pi \chi_3^{(+)} = 2\pi(\chi_E + 2)$$

No setor ímpar ($\mathcal{N}$ ímpar) os autovalores são obtidos excitando-se um número ímpar de partículas com momentos dados por:

$$k = \frac{2m\pi}{L} \quad m = 0, 1, \dots, L-1 \quad (\text{II.89})$$

Dessa forma, analogamente ao setor par obtêm-se:

$$E_2^{(-)}(P) = -\frac{1}{2} \sum_k \Lambda(k) + \Lambda\left(\frac{2\pi}{L}\right) \quad (\text{II.90})$$

$$G_2^{(-)}(P) = \tan\left(\frac{\pi}{4L}\right) + 2 \sin \frac{\pi}{L}$$

$$\lim_{L \rightarrow \infty} L G_2^{(-)}(P) = \frac{\pi}{4} + 2\pi = 2\pi(\chi_E + 1), \quad \chi_E = 1/8 \quad (\text{II.91})$$

ou ainda:

$$E_3^{(-)}(p) = -\frac{1}{2} \sum_k \Lambda(k) + \Lambda(0) + \Lambda\left(\frac{2\pi}{L}\right) + \Lambda\left(\frac{2(L-1)\pi}{L}\right) \quad (\text{II.92})$$

$$G_3^{(-)}(p) = \tan\left(\frac{\pi}{4L}\right) + 2 \sin \frac{\pi}{L} + 2 \sin (L-1) \frac{\pi}{L}$$

que no limite $L \rightarrow \infty$ resulta em

$$\lim_{L \rightarrow \infty} L G_3^{(-)}(p) = \frac{\pi}{4} + 2\pi + 2\pi = 2\pi (\chi_f + 2) \quad (\text{II.93})$$

Dessa forma todo o espectro pode ser construído, simplesmente como "cascatas" dos operadores primários. Vale a pena mencionar que isso só ocorre quando o modelo é mínimo, isto é, tem um conjunto finito de operadores primários. Há casos, como exemplificado pelo modelo de Ising com defeitos lineares em que o conjunto de operadores primários é infinito tornando assim a construção do espectro altamente não trivial.

CAPÍTULO III

O MODELO DE BLUME-CAPEL

1. O MODELO

O modelo BEG²⁴, Blume-Emery-Griffiths, foi introduzido em 1971 numa tentativa de explicar qualitativamente o diagrama de fases da mistura He³-He⁴ (veja figura III.1) e, consiste de uma generalização do modelo de Ising para spin 1. O valor Sz=0 corresponde aos átomos de He³ e os valores +1 e -1 aos átomos de He⁴. Na sua forma mais geral, o Hamiltoniano com interações de vizinhos mais próximos pode ser escrito como

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & - H \sum_{j=1}^L S_j + \Delta \sum_{j=1}^L S_j^2 - J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \\ & - H_3 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j (S_i + S_j) - K \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^2 S_j^2 \end{aligned} \quad (\text{III.1})$$

onde cada spin S_k da rede pode assumir os valores -1, 0 e 1. O parâmetro H representa o campo magnético, Δ é o campo cristalino, J e K são interações de troca bilineares e biquadráticas, respectivamente, e H_3 introduz uma perturbação magnética de 3a. ordem.

Um caso particular deste modelo, com $H_3=K=0$, é o modelo de Blume-Capel, introduzido independentemente por Blume¹⁶ e Capel¹⁷ em 1966. Esse modelo, embora mais simples, já apresenta um comportamento bem mais rico que o modelo de Ising, com uma transição de fase que pode ser continua ou de 1a. ordem, dependendo do valor do campo cristalino Δ . O diagrama de fases do modelo a campo nulo está mostrado na figura III.2, enquanto que na figura III.3 está representa

do o diagrama para $H \neq 0$. Como se pode ver nesta última figura, o ponto tricrítico é o encontro de três linhas λ e, por essa razão, Griffiths sugeriu o nome tricrítico para esse ponto que anteriormente era chamado de ponto crítico de segunda espécie.

Figura III.1. Diagrama de fases da mistura $\text{He}^3\text{-He}^4$.

Figura III.2. Diagrama de fases do modelo de Blume-Capel de acordo com a teoria de campo médio.

Figura III.3. Diagrama de fases do modelo de Blume-Capel depois da inclusão de um campo magnético.

Neste trabalho nós não investigaremos o modelo de Blume - Emery Griffiths (BEG) em duas dimensões mas sim, o seu análogo quântico unidimensional. Para isso, vamos supor que o modelo seja anisotrópico de forma que possamos fazer o limite de tempo contínuo¹³. Assim, escrevendo o hamiltoniano na forma

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -J_x \sum_{i,j} S(i,j) S(i+1,j) - K_x \sum_{i,j} S^2(i,j) S^2(i+1,j) \\ & - J_t \sum_{i,j} S(i,j) S(i,j+1) - K_t \sum_{i,j} S^2(i,j) S^2(i,j+1) + \Delta \sum_{i,j} S^2(i,j) \end{aligned} \quad (\text{III.2})$$

podemos colocar a matriz de transferência T na forma

$$T = e^{\frac{-H_1}{2}} e^{-H_0} e^{\frac{-H_1}{2}} \quad (\text{III.3})$$

onde

$$H_0 = X \sum_i S_x(i) + Z \sum_i S_x^2(i) \quad (\text{III.4})$$

$$H_1 = Y \sum_i S_z^2(i) - \beta J_x \sum_i S_z(i) S_z(i+1) \quad (\text{III.5})$$

$$- \beta K_x \sum_i S_z^2(i) S_z^2(i+1)$$

As quantidades $S_x(i)$ e $S_z(i)$ são agora operadores de spin 1 que atuam no espaço produto, isto é

$$S_N = \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \dots \otimes \hat{S}_N \otimes \dots \otimes \mathbb{1}, \quad N=x,z \quad (\text{III.6})$$

com

$$\hat{S}_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{S}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{III.7})$$

Os novos acoplamentos X, Y e $Z^{25,26}$ que aparecem em H_0 e H_1 podem ser escritos em termos dos acoplamentos originais como segue:

$$\sinh^2 X = e^{-\beta K_t} [\cosh(\beta J_t) - e^{\beta K_t}]^{-1}, \quad (\text{III.8a})$$

$$e^{-2Z} = \frac{\cosh(\beta J_t)}{\sinh^2(\beta J_t)} [\cosh(\beta J_t) - e^{-\beta K_t}], \quad (\text{III.8b})$$

e

$$Y = \beta \Delta - \ln [2 e^{\beta K_t} \cosh(\beta J_t)] \quad (\text{III.8c})$$

Podemos verificar facilmente que a matriz de transferência T (III.3) comuta com o operador paridade definido por:

$$\mathcal{P} = \mathbb{I} \otimes [2\hat{S}_x^2 - 11] \quad (\text{III.9})$$

$$\mathcal{Q}^2 = 11 \otimes 11 \otimes 11 \otimes \dots \otimes 11 \quad (\text{III.10})$$

sendo exatamente essa invariância $Z(2)$ de T a simetria quebrada na transição.

Na base em que S_x é diagonal a matriz de transferência T terá uma forma bloco-diagonal. Os autovalores de T são obtidos dia-

gonalizando-se independentemente os dois blocos diagonais que são caracterizados pela paridade (par ou ímpar) dos estados. Podemos , então, classificar os operadores do modelo em ímpares (que ligam estados de paridade par com estados de paridade ímpar) e pares (que conectam estados de mesma paridade). No primeiro conjunto estarão os operadores magnéticos (que se acoplam aos campos) e no segundo estarão os térmicos.

$$\left(\begin{array}{c|c} \text{PARIDADE PAR} & 0 \\ \hline 0 & \text{PARIDADE ÍMPAR} \end{array} \right)$$

Figura III-4a. Forma bloco-diagonal da matriz de transferência T , com setores caracterizados pela paridade.

Além da paridade, existem outras quantidades que são conservadas, o que possibilita colocar os dois setores de T (de paridade par e ímpar, conforme figura III-4a) numa forma bloco diagonal também (figuras III-4b e III-4c), onde esses novos blocos, de dimensão menor, são caracterizados pelos autovalores dessa quantidade conservada.

No caso de condições de contorno periódicas, o momentum $K = \frac{2\pi}{L} \eta$ ($\eta = 0, 1, \dots, [L/2]$) é conservado, o que permite a divisão de cada um dos setores em $([L/2] + 1)$ subsetores ($[\alpha]$ significa o maior número inteiro menor que α) caracterizados pelos possíveis valores $(\frac{2\pi}{L} \eta)$ do momentum.

$$\begin{pmatrix} K_1 & 0 & 0 \\ 0 & K_2 & 0 \\ 0 & 0 & K_3 \end{pmatrix}$$

Figura III.4b. Forma bloco-diagonal de um setor de paridade definida de T, com blocos caracterizados pelos valores K_1 , K_2 e K_3 do momentum.

$$\begin{pmatrix} K_1 & 0 & 0 & & \\ 0 & K_2 & 0 & & \\ 0 & 0 & K_3 & & \\ & & & 0 & \\ & & & & \ddots \\ & & & & & 0 \end{pmatrix}$$

PARIDADE
ÍMPAR

Figura III-4c. Matriz de transferência T com estrutura bloco-diagonal, sendo os blocos caracterizados pela paridade e pelo momentum.

O mesmo acontece no caso de condições de contorno antiperiódicas, só que agora o momentum é $K = \frac{\pi}{L} (2n+1)$ ($n=0,1,\dots, [(L-1)/2]$) no setor ímpar.

Com condições livres de contorno pode-se explorar a simetria por reflexão, que permite uma divisão em dois subsectores caracterizados pela reflexão positiva ou negativa dos estados.

Essa divisão em setores, da matriz de transferência T, traz muitas vantagens do ponto de vista computacional, uma vez que cada um dos blocos pode ser diagonalizado separadamente. Dessa forma é possível ter acesso a um maior número de autovalores, com mais precisão e menor tempo de CPU.

Em princípio T já é um operador quântico unidimensional que, uma vez diagonalizado, fornecerá a função de partição e o comprimento de correlação. Entretanto, devemos lembrar que a matriz de transferência é uma exponencial de operadores e tem, portanto, várias potências do expoente. Isso significa que quase todos os elementos da matriz T serão diferentes de zero o que, somado ao rápido

crescimento da sua dimensão com o tamanho do sistema (3^L), torna praticamente inviável a sua diagonalização. Por essa razão, trabalharemos com a versão quântica do modelo. Isso corresponde a tomarmos o limite altamente anisotrópico do modelo no qual X, Y, Z, J_x e K_x são todos infinitesimais. Para se conseguir isso é preciso escolher

$$\beta J_x, \beta K_x \ll 1 \quad (\text{III.11})$$

e simultaneamente

$$\beta J_t, \beta K_t \gg 1 \quad (\text{III.12})$$

sob a restrição

$$\beta (\Delta - J_t - K_t) \ll 1 \quad (\text{III.13})$$

Satisfeitas essas condições a matriz de transferência pode ser escrita como

$$T \simeq \exp \left\{ -\beta J_x H \right\} \quad (\text{III.14})$$

com

$$H = - \sum_i \left\{ S_z(i) S_z(i+1) + \alpha S_z^2(i) S_z^2(i+1) \right. \\ \left. - \delta S_z^2(i) - \gamma S_x(i) - \lambda S_x^2(i) \right\} \quad (\text{III.15})$$

e

$$\alpha = \frac{K_x}{J_x} \quad , \quad \delta = \frac{Y}{\beta J_x} \quad , \quad \gamma = \frac{X}{\beta J_x} \quad , \quad \lambda = \frac{Z}{\beta J_x}$$

É claro que, como H tem a mesma dimensão que T , poderia -
mos pensar que a dificuldade com a diagonalização continua a mesma.
Entretanto, se analisarmos em detalhe o operador Π , veremos que es-
te só liga estados com no máximo 2 spins diferentes e isso faz com
que cada linha de 3^L elementos possua apenas L elementos não nulos.
Essa matriz "rarefeita" pode então ser diagonalizada pelo método de
Lanczos²⁷ (ver apêndice B) que é um método muito eficiente para se
calcular os autovalores extremos de uma matriz.

2. O DIAGRAMA DE FASES

Na formulação hamiltoniana a hipótese do FSS assegura que
a diferença de energia entre o estado fundamental e o primeiro esta-
do excitado (correspondente ao inverso do comprimento de correla-
ção) de um sistema infinito

$$G(\beta) = E_1 - E_0 \quad (\text{III.16})$$

que vai a zero no acoplamento crítico segundo

$$G(\beta) \sim (\beta - \beta_c)^{\nu} \quad (\text{III.17})$$

deve se comportar como

$$G_L(\beta_c) \sim L^{-1} \quad (\text{III.18})$$

no caso de um sistema de tamanho L .

A equação (III.18) sugere que o acoplamento crítico pode
ser encontrado extrapolando a sequência de valores β^* que satisfa-
zem a igualdade

$$L \tilde{G}_L(\beta^*) = L' \tilde{G}_L(\beta^*) \quad (\text{III.19})$$

Em 1985, Alcaraz et al²⁸ obtiveram o diagrama de fases do modelo BEG utilizando a equação (III.19). A localização do ponto tricrítico foi feita através de uma equação que generaliza (III.19), isto é:

$$L \tilde{\tilde{G}}_L(\beta_t) = L' \tilde{\tilde{G}}_L(\beta_t) \quad (\text{III.20})$$

onde $\tilde{\tilde{G}}_L$ é a diferença de energia entre o estado fundamental e o segundo estado excitado (segundo "gap").

Justificamos o uso dessa equação lembrando que um ponto tricrítico é o ponto onde três fases (que antes coexistiam) tornam-se idênticas e, portanto, devemos ter degenerescência dos três primeiros autovalores. A degenerescência, porém, só ocorre no limite de $L = \infty$ e, assim, a equação (III.20) fornece uma estimativa do acoplamento tricrítico.

Neste trabalho nós utilizaremos o diagrama de fases obtido por Alcaraz et al²⁸, para investigar o comportamento crítico do modelo de Blume-Capel através do seu espectro.

3. CÁLCULO DO NÚMERO DE ANOMALIA CONFORME C

Para determinar o número de anomalia conforme C para o modelo de Blume-Capel, lembramos que as correções devido ao tamanho finito do sistema ao autovalor mais baixo E_0 do hamiltoniano estão relacionadas à "C" (ver seção 3, Cap.II) através da relação¹²

No caso de condições de contorno periódicas, f é o limite termodinâmico da energia do estado fundamental por sítio e γ é uma constante ($\gamma = (\beta J_x)^{-1}$, conforme (III.14)) que serve para restaurar a invariância conforme perdida no limite anisotrópico. Para encontrar o valor de f é preciso obter a energia do estado fundamental por sítio de cadeias finitas e extrapolar para o limite termodinâmico ($L \rightarrow \infty$). O fator γ é obtido calculando-se o "gap" que separa as energias mais baixas do setor ímpar, com momentos respectivamente iguais a zero e $2\pi/L$ (este "gap" é igual à $2\pi\gamma/L$).

Nós calculamos o valor de C no ponto tricrítico T e num ponto S sobre a linha crítica de 2a. ordem (veja figura III.1). Na tabela I estão listadas as estimativas da energia do estado fundamental por sítio (E_0/L), e nas tabelas II e III, respectivamente, estão as estimativas do fator γ e do número de anomalia conforme C em ambos os casos. Os valores extrapolados da tabela III concordam com os valores esperados $C=7/10$ ($m=4$) no ponto tricrítico e $C=1/2$ ($m=3$) no ponto S onde a transição é do tipo Ising.

Figura III.1. Diagrama de fases para o hamiltoniano de Blume-Capel obtido por Alcaraz et al.²⁸ usando a técnica do finite-size scaling. O ponto tricrítico T ($\alpha = 0.9103$, $T = 0.4155$) separa as linhas de transição de 1a. ordem (linha tracejada) e 2a. ordem (linha contínua).

O caso $C=1/2$ já foi suficientemente estudado uma vez que o modelo de Ising é exatamente solúvel para qualquer valor de L . O espectro pode ser obtido sob várias condições de contorno e todos os gaps podem ser explicados em termos das dimensões $1/16$, $1/2$ e 0 associadas ao inteiro $m=3$. A situação no caso $C=7/10$ é porém bastante diferente, uma vez que não há soluções exatas disponíveis e tudo o que se conhece é o conjunto dos expoentes críticos conjecturados por Nienhuis²⁰. No próximo capítulo analisaremos o espectro da cadeia de Blume-Capel sujeita a uma variedade de condições de contorno para elucidar algumas questões ainda pendentes a respeito do seu comportamento crítico.

L	$(-\frac{E_0}{L})$ no ponto T	$(-\frac{E_0}{L})$ no ponto S
2	0.23377843	1.90861248
3	0.20175177	1.85737302
4	0.19114537	1.84078977
5	0.18633838	1.83335518
6	0.18375409	1.82938124
7	0.18220498	1.82700715
8	0.18120324	1.82547517
9	0.18051812	1.82442889
ext.	0.1779512(2)	1.820520(5)

TABELA I : Energia do estado fundamental por sítio do hamiltoniano de Blume-Capel no ponto T e no ponto S.

L	T	S
2	0.373025	0.689156
3	0.478083	0.932940
4	0.517130	1.038314
5	0.535363	1.092954
6	0.545205	1.124687
7	0.551066	1.144629
8	0.554811	1.157925
9	0.557290	1.167207

TABELA II: Sequência de estimativas para o fator γ nos pontos T e S.

L	C- ponto T	C- ponto S
2	1.143451	0.976517
3	0.855933	0.678981
4	0.780001	0.596528
5	0.748558	0.560692
6	0.732563	0.541680
7	0.723441	0.530339
8	0.717773	0.523017
9	0.712548	0.518008
ext.	0.70 (2)	0.49 (7)

TABELA III: Sequência de estimativas para o número de anomalia conforme (C) da cadeia quântica de Blume-Capel.

CAPÍTULO IV

EFEITO DAS CONDIÇÕES DE CONTORNO SOBRE O ESPECTRO
DO MODELO DE BLUME-CAPEL

Na Seção 5 do Capítulo II verificamos as previsões da invariância conforme no modelo de Ising, cujos autovalores são conhecidos exatamente. Neste Capítulo nós obtemos o espectro do modelo de Blume-Capel, no ponto tricrítico (T), usando diferentes tipos de condições de contorno.

Nesse ponto o espectro inteiro deve ser descrito pelas representações irredutíveis da álgebra de Virasoro associada com $C = 7/10$ cujas dimensões, fornecidas pela fórmula de Kac, são:

$$\begin{array}{ccc} 0 & & \\ 7/16 & 3/80 & \\ 1/10 & 3/5 & 3/2 \end{array} \quad (\text{IV.1})$$

A parte "experimental" do trabalho consiste no cálculo dos "gaps" escalados:

$$E_i = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{L}{2\pi\gamma} (E_i^L - E_0^L) \quad (\text{IV.2})$$

sendo E_0^L , a energia do estado fundamental, E_i^L o i -ésimo estado excitado e γ a constante multiplicativa a ser extraída do espectro.

O hamiltoniano H utilizado para se obter os autovalores foi escrito na forma

$$\hat{H} = - \sum_{i=1}^L \left\{ S_z(i) S_z(i+1) - \alpha S_z^2(i) - \beta S_x(i) \right\} \quad (\text{IV.3})$$

Lembramos do Capítulo III que este hamiltoniano comuta com o operador paridade

$$\mathcal{P} = \prod_i \left[2 \hat{S}_i^2 - 11 \right] \quad (\text{IV.4})$$

o que permite a divisão do espectro em dois setores (par e ímpar). Os "gaps" escalados serão denotados por $\tilde{E}_i^{(+)}$ ou $\tilde{E}_i^{(-)}$ conforme a paridade do estado excitado E_i .

Um estudo do efeito das condições de contorno sobre o espectro pode conduzir ao perfeito entendimento dos operadores que participam da teoria bem como da estrutura e relacionamento entre eles.

Gehlen e Rittenberg⁽²¹⁾ e Cardy⁽²²⁾ analisaram o espectro do modelo de Potts-3 estados usando diferentes tipos de condições de contorno. Para cada uma delas eles identificaram um subgrupo diferente das dimensões de escala fornecidas pela fórmula de Kac. Além disso, valores de p e q que com um tipo de condição de contorno correspondiam a operadores do tipo energia em outro caso estavam associados a operadores do tipo magnetização e vice-versa.

Nas seções seguintes, mostraremos os resultados obtidos pela análise do hamiltoniano H sujeito a quatro diferentes condições de contorno: periódicas, livres, fixas e antiperiódicas.

1. CONDIÇÕES PERIÓDICAS DE CONTORNO

No caso de condições periódicas de contorno o grupo de simetria é $G = T \otimes \bar{T}$ onde $T(\bar{T})$ é o grupo das substituições analíticas da variável $Z(\bar{Z})$ e por essa razão as dimensões de escala χ são somas de dois h 's ($\chi = h + \bar{h}$). Devido à invariância translacional apenas operadores com spin inteiro podem ocorrer, o que significa ,

nesse caso, que $h=\bar{h}$. Assim, o número de representações irredutíveis descrevendo o espectro é seis: $(0,0)$, $(3/80, 3/80)$, $(7/16, 7/16)$, $(1/10, 1/10)$, $(3/5, 3/5)$ e $(3/2, 3/2)$.

As condições periódicas de contorno exigem que

$$S_2(l+1) = S_2(1) \quad (\text{IV.5})$$

O espectro foi dividido em setores caracterizados pela paridade e pelo momento K . Para selecionar os estados com um determinado valor do momento é preciso construir um vetor de onda inicial com esse valor de K . Devido à simetria $Z(2)$ do modelo, os valores de K permitidos serão múltiplos de $(2\pi/L)$, analogamente ao modelo de Ising (seção 5, Cap.II), submetidos às mesmas condições de contorno. O vetor de onda inicial é da forma

$$\frac{1}{\text{NORM}} (a_1\phi_1 + a_2\phi_2 + \dots + a_L\phi_L) \quad (\text{IV.6})$$

onde ϕ_i é a translação cíclica ($j=L+1=1$) por $(i-1)$ espaçamentos de rede, a_i é o coeficiente que carrega o momento K ,

$$a_i = \cos \left(\frac{2\pi m(i-1)}{L} \right) \quad (\text{IV.7})$$

e NORM é o fator de normalização

$$\text{NORM} = \left[\sum_{i=1}^L a_i^2 \right]^{1/2} \quad (\text{IV.8})$$

Usando o método de Lanczos (apêndice B) para a diagonalização de H conseguimos analisar redes de até 9 sítios. Os "gaps" escalados ξ_i foram, então, obtidos usando-se o método de extrapolação de Van der Broeck-Schwardz. A constante pode ser obtida do "gap"

entre as energias mais baixas do setor ímpar, com momento $K=0$ e $K=2\pi/L$, já que, de acordo com as previsões da invariância conforme, o momento K e as energias E_i do espectro são dadas por

$$K = (m - \bar{m}) \frac{2\pi}{L}, \quad E_i = \frac{2\pi}{L} (\chi_i + m + \bar{m}) \quad (\text{IV.9})$$

Assim, os estados de energia mais baixa para uma dada dimensão χ_i com momentos $K=0$ e $K=2\pi/L$, correspondem, respectivamente, aos seguintes valores de m e $\bar{m}$: $m=\bar{m}=0$ e $m=1, \bar{m}=0$, de forma que:

$$E_i \left(K = \frac{2\pi}{L} \right) - E_i \left(K = 0 \right) = \frac{2\pi}{L} \quad (\text{IV.10})$$

Os resultados "experimentais" do espectro com condições periódicas de contorno estão na Tabela I, juntamente com as representações do grupo de simetria $G = \mathbb{T} \otimes \bar{\mathbb{T}}^*$.

* Como se pode ver na tabela todos os "gaps" podem ser explicados por

$$\mathcal{E}_i(K) = (h+m) + (\bar{h}+\bar{m})$$

com

$$K = (h+m) - (\bar{h}+\bar{m})$$

onde m e $\bar{m} \in \mathbb{N}$.

TABELA I - Espectro experimental $\ell_i(K)$ com sua interpretação teórica.

K	$h+m+\bar{h}+\bar{m}$	(0,0)	(3/80,3/80)	(7/16,7/16)	(1/10,1/10)	(3/5,3/5)	(3/2,3/2)	$\ell_i^{(+)}(K)$	$\ell_i^{(-)}(K)$
0	0.075	-	1	-	-	-	-		0.075(1)
	0.2	-	-	-	1	-	-	0.199(1)	
	0.875	-	-	1	-	-	-		0.87(6)
	1.2	-	-	-	-	1	-	1.18(7)	
	2.075	-	1	-	-	-	-		2.07(7)
	2.2	-	-	-	1	-	-	2.19(2)	
	2.875	-	-	1	-	-	-		2.8(5)
	3.0	-	-	-	-	-	1	3.0(6)	
1	1.075	-	1	-	-	-	-		1.075(6)
	1.2	-	-	-	1	-	-	1.1(9)	
	1.875	-	-	1	-	-	-		1.87(8)
2	2.0	1	-	-	-	-	-	2.0	
	2.075	-	1	-	-	-	-		2.0(7)

2. CONDIÇÕES ANTIPERIÓDICAS DE CONTORNO (CAC)

As condições de contorno utilizadas se refletem no hamiltoniano através do termo $S_L^Z S_{L+1}^Z$ ou mais precisamente em S_{L+1}^Z . No caso de condições antiperiódicas de contorno S_{L+1}^Z é associado a S_1^Z por

$$S_{L+1}^Z = Q^{-1} S_1^Z Q$$

(IV.11)

onde Q é o operador paridade

$$\mathcal{P} = \prod_{i=1}^L (2S_x^2 - 1) , \tag{IV.12}$$

que implementa a simetria $Z(2)$.

É fácil verificar que (IV.11) implica em

$$S_{L+1}^z = - S_1^z \tag{IV.13}$$

que no hamiltoniano significa trocar J por $-J$ no contorno.

Da mesma forma que no caso de condições periódicas de contorno, o espectro é dividido em setores caracterizados pela paridade e pelo momento K . A única diferença é que no setor ímpar os valores permitidos de K serão múltiplos ímpares de π/L , isto é, $K=(2m+1)\pi/L^*$.

Os "gaps" escalados $\mathcal{E}_i$ para esse caso estão na Tabela II. Vejamos como esses "gaps" estão relacionados com os operadores do modelo. Devido à simetria $Z(2)$ existente, os resultados obtidos podem ser explicados de forma análoga ao modelo de Ising.

χ	$+$	m	$\mathcal{E}_i^+$	$\mathcal{E}_i^-$
4/5		0	0.79 (2)	
5/8		0		0.62 (6)
0		1	0.99 (8)	
57/40		0		1.42 (8)
5/8		1		1.6 (3)
4/5		1	1. (7)	

TABELA II - Espectro experimental $\mathcal{E}_i$ para o caso de condições antiperiódicas de contorno.

* Isto acontece porque neste setor só é possível excitar um número ímpar de "partículas" (veja mais detalhes no que foi apresentado sobre o modelo de Ising, seção 5, Cap.II).

Com esse tipo de condição de contorno conseguimos identificar a dimensão de escala χ_ψ do operador fermiônico ψ (que possui $\text{spin} = h - \bar{h} = 1/2$) refletindo a supersimetria do modelo (simetria entre bósons e férmions). Lembramos que para o modelo de Ising as condições antiperiódicas de contorno podem ser obtidas pela introdução de operadores desordem de forma que o "gap" dentro das condições antiperiódicas de contorno é obtido subtraindo-se da dimensão do operador em questão a dimensão do operador desordem. Lembramos ainda que no caso do Ising o estado fundamental (com condições periódicas de contorno) do setor ímpar, é igual ao estado fundamental do setor par no caso de condições antiperiódicas (CAC) que, portanto, o operador desordem tem a mesma dimensão de escala do operador magnetização. Extrapolando esses resultados para o modelo de Blume-Capel, a dimensão do operador desordem, é $\chi_\mu = 3/40$. Se somarmos, então, essa dimensão χ_μ da dimensão de escala associada ao 1º "gap" nas condições antiperiódicas de contorno teremos a dimensão do operador fermiônico ψ . Da Tabela II vemos que isso será

$$\chi_\psi = \chi_1 + \chi_\mu \simeq 0.63 + 3/40 \simeq 0.705 \simeq 7/10 \quad (\text{IV.14})$$

Das dimensões de escala fornecidas pela fórmula de Kac (II.25) para esse modelo, vemos que essa dimensão χ_ψ corresponde às representações (3,2) e (3,3), isto é

$$\chi_\psi = h_{3,3} + h_{3,2} = 1/10 + 3/5 = 7/10 \quad (\text{IV.15})$$

Podemos certificar o resultado calculando o spin, que para o operador fermiônico deverá ser $S = +1/2$. E o resultado é

$$S = h_{3,2} - h_{3,3} = 3/5 - 1/10 = 1/2, \quad (\text{IV.16})$$

como esperávamos.

Recentemente, Cardy obteve soluções para as regras de soma de inversão, no caso de CAC, formalmente escritas como:

$$[M \otimes M] \mathcal{N}_A(p, q; \bar{p}, \bar{q}) = \mathcal{N}_A(p, q; \bar{p}, \bar{q}) \quad (\text{IV.17})$$

O resultado é que os operadores contidos nesse espectro devem obedecer à restrição:

$$\mathcal{N}_A(p, q; \bar{p}, \bar{q}) = \delta_{p, m-\bar{p}} \delta_{q, \bar{q}} \quad , \quad (\text{IV.18})$$

o que leva às seguintes dimensões de escala possíveis:

$$\begin{array}{ll} \mathcal{N}_A(2, 1; 2, 1) = 1 & \chi = 7/8 \\ \mathcal{N}_A(2, 2; 2, 2) = 1 & \chi = 3/40 \\ \mathcal{N}_A(3, 1; 1, 1) = 1 & \chi = 3/2 \\ \mathcal{N}_A(3, 2; 3, 3) = 1 & \chi = 7/10 \end{array} \quad (\text{IV.19})$$

Além disso, ele obteve que valores de p pares (ímpares) estão associados a operadores pares (ímpares) de simetria $Z(2)$. Assim, subtraindo a dimensão de escala do operador desordem $\chi_\mu = 3/40$ das dimensões dadas em (IV.19) obtém-se que as dimensões dentro das condições antiperiódicas são:

$$\chi = 7/8 - 3/40 = 8/10 \quad (\text{IV.20})$$

e

$$\chi = 3/40 - 3/40 = 0$$

no setor par, e

(IV.21)

$$\chi = 7/10 - 3/40 = 5/8 = 0.625$$

e

$$\chi = 3/2 - 3/40 = 57/40 = 1.425$$

no setor ímpar.

Estes resultados estão esquematizados na Figura 1.

Figura 1 - Ilustração das excitações mais baixas do espectro. χ_ν e χ_μ denotam as dimensões de escala dos operadores fermiônico e desordem, respectivamente.

3. CONDIÇÃO LIVRE DE CONTORNO

Neste caso, os autovalores de $\hat{H}_F$ determinam expoentes críticos da superfície²⁹ (Binder, 1983) já que a invariância conforme dá informações sobre as funções de correlação ao longo da fronteira do sistema³⁰. Impor condições livres de contorno, significa desvincular o parâmetro de ordem nas extremidades do sistema, de forma que a interação $S_L^Z S_{L+1}^Z$ deixa de existir no Hamiltoniano.

A transformação que relaciona essa geometria àquela de um sistema semi-infinito, relaciona também os autovalores de $\hat{H}_F$ com os expoentes críticos que descrevem o decaimento das correlações no contorno. A equação é

$$E_m(F) - E_0(F) = \frac{\pi}{L} (\chi_s + m), \quad m = 0, 1, \dots \quad (\text{IV.22})$$

onde o expoente de superfície χ_s , nesse caso, coincide com a dimensão h da representação da álgebra de Virasoro correspondente. É importante mencionar que no caso de condições livres de contorno existe apenas uma álgebra de Virasoro e, assim, o espectro pode ser obtido através de inteiros $\mathcal{N}_F(p, q)$ (caracterizados por só um par de números p, q).

As estimativas da dimensão anômala χ_s do operador ordem na superfície estão na Tabela III. O resultado para $\eta_{||} = 2\chi_s = 3$, é compatível com a equação $\eta_{||} = 2/(3\chi - 1)$ deduzida por Cardy³⁰ para o modelo de Potts-escalar. A coincidência não é surpreendente uma vez que os dois modelos estão relacionados por uma continuação analítica em torno de $q=4$ ³¹.

soma para a inversão não são suficientes para determinar completamente o espectro de $\hat{H}_F$. Em função disso ele encontrou $\mathcal{N}_F(1,1) = \mathcal{N}_F(3,1) = 1$ e $\mathcal{N}_F(1,2) = \mathcal{N}_F(3,2) = I$, com $I=0$ ou 1 . A possibilidade $I=1$ foi eliminada considerando que dela resultaria um operador expúreo (par) relevante, associado à $(3,2)$ com $\tilde{\chi} = 3/5$. Escolhendo então $I=0$, obtêm-se $\mathcal{N}_F=1$ apenas para as representações $(1,1)$ e $(3,1)$ que correspondem à $h=0$ e $3/2$.

4. CONDIÇÃO FIXA DE CONTORNO

Como a variável de spin S_i pode assumir três valores diferentes ($S_i = +1, 0, -1$), que nós representaremos por $+, -$ e o , podemos formar vários setores fixando uma extremidade da rede no estado X e a outra no estado Y ($X, Y = +, -$ ou o). Mas devido à simetria $Z(2)$ apenas três setores distintos aparecem: H_{++} , H_{+-} e H_{o+} .

Os setores H_{++} e H_{+-} foram identificados com os setores par e ímpar, respectivamente, das condições livres de contorno (ver Tabela V). Novamente, isso reflete a simetria $Z(2)$ do modelo, já que no modelo de Ising, os casos de condições fixas e livres de contorno são relacionadas exatamente por uma transformação de dualidade. Vejamos isso melhor: a matriz de transferência para condições livres do modelo de Ising é

$$\hat{T}_F = \exp \left(J \sum_{j=1}^{L-1} \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z \right) \exp \left(J \sum_{j=1}^L \sigma_j^x \right) \quad (\text{IV.23})$$

uma transformação de dualidade é implementada definindo variáveis de desordem dadas por

$$\mu_j^x = \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z \quad (1 \leq j \leq L-1) \quad (\text{IV.24})$$

$$\mu_j^z = \sigma_1^x \sigma_2^x \dots \sigma_j^x$$

TABELA III - Estimativas da dimensão de escala do operador magnetização na superfície.

L	χ_s
2	1.664915
3	1.622975
4	1.596981
5	1.579588
6	1.567248
7	1.558093
8	1.551061
9	1.545508
extr.	1.50(2)

Outras excitações do espectro foram obtidas considerando se os outros "gaps". Os resultados estão listados na Tabela IV.

TABELA IV - Espectro experimental no caso de condição livre de contorno. Os números marcando a contribuição de cada h indicam a degenerescência encontrada "experimentalmente".

h + m	0	3/2	$\ell_i^{(+)}$	$\ell_i^{(-)}$
1.5	-	1		1.50(2)
2.5	-	1		2.55(5)
3.0	1	-	3.00(1)	
3.5	-	2		3.52(7), 3.54(7)
4.0	2	-	3.9(8), 3.99(3)	

Vemos que o espectro é descrito, nesse caso, somente por duas representações (0 e 3/2), confirmando os resultados obtidos recentemente por Cardy que investigou as soluções de $M_{\mathcal{N}_F}(p,q) = \mathcal{N}_F(p,q)$ para essa teoria. Nesse caso as condições das regras de

em termos das quais a matriz $\hat{T}_F$ pode ser escrita* :

$$\hat{T}_F = \exp \left(\mu_1^z + \mu_1^z \mu_2^z + \dots + \mu_{L-1}^z \sum \right) \exp \left(\sum_{j=1}^{L-1} \mu_j^x \right) \tag{IV.25}$$

onde $\sum \equiv \prod_j \sigma_j^x$ é o operador magnetização que implementa a simetria $Z(2)$. Dessa relação pode-se concluir que o setor $\sum = +1$ de $\hat{H}_F$ é e - quivalente à $\hat{H}_{++}$ e o setor $\sum = -1$ à $\hat{H}_{+-}$, isto é, o espectro é o mes- mo nos dois casos.

TABELA V - Espectro "experimental" no caso de condição fi- xa de contorno. O número marcando a contribui - ção da dimensão h indica a degenerescência obti da "experimentalmente".

h+m	0	3/2	$\sum_i^{++}$	$\sum_i^{+-}$
1,5	-	1		1,50 (0)
2,0	1	-	2,0	
2,5	-	1		2,5 (2)
3,0	1	-	2,9 (8)	
3,5	-	2		3. (5), 3.4 (9)
4,0	2	-	3,9 (8), 3. (9)	
4,5	-	2		4. (4), 4. (5)

* Na verdade os fatores estão na ordem invertida, mas o resultado é equivalente por uma transformação de similaridade.

5. COMENTÁRIOS FINAIS

O estudo numérico do Hamiltoniano quântico associado ao modelo de Blume-Capel permitiu identificar todos os operadores da teoria com suas respectivas dimensões, além de confirmar alguns resultados obtidos por Cardy²² com base na invariância modular. A semelhança com o modelo de Ising (que também tem simetria $Z(2)$) possibilitou o entendimento completo dos efeitos das várias condições de contorno sobre o espectro, que estão reunidos na tabela a seguir.

Cumpramos ressaltar que um estudo preliminar das correções ao "scaling" não revelou informações relevantes. Esse porém, é um ponto que pretendemos retomar brevemente. A questão da supersimetria, que foi relegada a um segundo plano nessa dissertação, também é de nosso interesse.

condição de contorno	números quânticos (p,q; $\bar{p},\bar{q}$)	Dimensões (h, $\bar{h}$)	Gap	Simetria
periódica	(1,1;1,1)	(0,0)		+
	(2,2;2,2)	(3/80,3/80)	3/20	-
	(3,3;3,3)	(1/10,1/10)	2/5	+
	(2,1;2,1)	(7/16,7/16)	7/4	-
	(3,2;3,2)	(3/5,3/5)	12/5	+
	(3,1;3,1)	(3/2,3/2)	6	+
antiperiódica	(2,1;2,1)	(7/16,7/16)	8/5	+
	(3,3;3,2)	(1/10,3/5)	7/5	-
	(1,1;1,1)	(0,0)		+
	(3,1;1,1)	(3/2,0)	57/20	-
livre	(1,1)	0	2	+
	(3,1)	3/2	3/2	-
fixa				
++	(1,1)	0	2	
+-	(3,1)	3/2	3/2	

TABELA VI - A 2a.coluna mostra os números quânticos (pq; $\bar{p}\bar{q}$) dos operadores primários e a 3a.coluna, suas dimensões de escala. A 4a.coluna mostra os "gaps" em unidades de $\hbar/L$ e a última coluna indica as propriedades de simetria $Z(2)$.

APÊNDICE A

REGRAS DE SOMA DE INVERSÃO

Considere a função de partição para uma teoria definida num retângulo $\lambda \times \lambda'$ com condições toroidais de contorno, no limite em que $\lambda, \lambda' \rightarrow \infty$ com $\lambda'/\lambda = \delta$, fixo.

$$Z(\lambda, \lambda') = T_R e^{-\lambda' \hat{H}_P} \quad (A.1)$$

Os autovalores E_n de $\hat{H}_P$ são relacionados às dimensões de escala χ_n dos operadores de escala da teoria por

$$E_n - E_0 \sim \frac{2\pi \chi_n}{\lambda} \quad (A.2)$$

e a correção devido ao tamanho finito do sistema ao autovalor mais baixo E_0 é relacionado à anomalia conforme c , através de

$$E_0 \sim f\lambda - \frac{\pi c}{6\lambda} \quad (A.3)$$

onde f é o valor da energia do estado fundamental por sítio no limite termodinâmico ($\lambda \rightarrow \infty$).

Usando (A.2) e (A.3) a relação (A.1) para a função de partição $Z(\lambda, \lambda')$ pode ser escrita na forma

$$Z(\lambda, \lambda') = e^{\frac{\pi c \delta}{6}} \sum_n e^{-(E_n - E_0) \lambda'} \quad (A.4)$$

onde consideramos $f=0$. Essa soma sobre n pode ser quebrada em uma soma sobre os blocos conforme e uma outra sobre os operadores de cada bloco. No nível $(N, \bar{N})$ de um bloco, o operador geral tem a forma

$$L_{-K_1} \dots L_{-K_m} \bar{L}_{-K'_1} \dots \bar{L}_{-K'_m} \phi \quad (A.5)$$

onde $K_1 \leq \dots \leq K_m$, $K'_1 \leq \dots \leq K'_m$ e $\sum K_j = N$, $\sum K'_j = \bar{N}$, e sua dimensão de escala é

$$\chi = h_{p,q} + \bar{h}_{\bar{p},\bar{q}} + N + \bar{N} \quad (A.6)$$

Existem $P(N)P(\bar{N})$ operadores desse tipo, onde $P(N)$ é o número de partições de N em inteiros positivos, não necessariamente distintos. Entretanto, alguns desses operadores podem não ser independentes, o que faz com que a degenerescência do nível $(N, \bar{N})$ não seja $P(N)P(\bar{N})$. A soma na equação (4) pode ser escrita na forma

$$\sum_{N, \bar{N}} \sum_{p,q, \bar{p}, \bar{q}} d^p(p,q; \bar{p}, \bar{q}) d_{p,q}(N) d_{\bar{p}, \bar{q}}(\bar{N}) \times \exp \left(-2\pi\delta (h_{p,q} + \bar{h}_{\bar{p}, \bar{q}} + N + \bar{N}) \right) \quad (A.7)$$

onde d é a degenerescência do nível N no bloco conforme e $N(p,q; \bar{p}, \bar{q})$ é o número de operadores primários com $h=h_{p,q}$ e $\bar{h}=\bar{h}_{\bar{p}, \bar{q}}$. Essa equação tem a mesma forma da fórmula de caracteres para a apropriada representação da álgebra de Virasoro. Estas fórmulas foram obtidas por Rocha-Caridi e, são dadas por

$$Z(\delta) = e^{\frac{\pi c \delta}{6}} \sum_{p,q, \bar{p}, \bar{q}} d^p(p,q; \bar{p}, \bar{q}) \chi_{p,q}(\delta) \chi_{\bar{p}, \bar{q}}(\delta) \quad (A.8)$$

onde

$$\chi_{pq}(\delta) = \prod_{n=1}^{\infty} (1 - e^{-2\pi n \delta})^{-1} \times \sum_{k=-\infty}^{\infty} \left\{ \exp \left(- \frac{\pi \delta}{2m(m+1)} \times \right. \right. \\ \left. \left. \times \left[(2m(m+1)k + (m+1)p - mq)^2 - 1 \right] \right) - \{q \rightarrow -q\} \right\} \quad (\text{A.9})$$

Com o auxílio da fórmula de soma de Poisson, $\chi_{p,q}$ pode ser colocado na forma

$$\chi_{pq}(\delta) = \left(\frac{2}{m(m+1)} \right)^{1/2} \exp \left[\frac{\pi c}{12} (\delta^{-1} - \delta) \right] \prod_{n=1}^{\infty} (1 - e^{-2\pi n \delta^{-1}})^{-1} \times \\ \times \sum_{r=-\infty}^{\infty} \exp \left(- \frac{\pi(r^2 - 1)}{2\delta m(m+1)} \right) \frac{\sin \pi r p}{m} \frac{\sin \pi r q}{m+1}, \quad (\text{A.10})$$

que com um pouco de manipulação algébrica permite reescrever (A.6) na forma

$$Z(\delta) = e^{\frac{\pi c}{6\delta}} \sum_{p, \bar{p}} \sum_{q, \bar{q}} M_{pq}^{p'q'} M_{\bar{p}\bar{q}}^{\bar{p}'\bar{q}'} \mathcal{N}(p', q'; \bar{p}', \bar{q}') \times \\ \times \chi_{pq}(\delta^{-1}) \chi_{\bar{p}\bar{q}}(\delta^{-1}) \quad (\text{A.11})$$

onde os elementos da matriz M são dados por

$$M_{pq}^{p'q'} = \left(\frac{1}{\delta} m(m+1) \right)^{1/2} (-1)^{(p+q)(p'+q')} \frac{\sin \pi p p'}{m} \frac{\sin \pi q q'}{m+1} \quad (\text{A.12})$$

As regras de soma de inversão são obtidas impondo-se a condição que $Z(\delta) = Z(\delta^{-1})$ e igualando-se potências de $e^{-1/\delta}$, o que resulta em equações lineares para $\mathcal{N}$, escritas como

$$[M \otimes M] \mathcal{N} = \mathcal{N} \quad (\text{A.13})$$

Como se pode ver de (A.13), nós estamos interessados em autovetores de $[M \otimes M]$ com autovalor um. Em geral, este autoespaço é multidimensional e, como queremos apenas soluções nas quais $\mathcal{N}(p, q; \bar{p}, \bar{q})$ sejam inteiros não negativos, obter as soluções de (A.13) se torna um trabalho difícil. Uma solução que pode sempre ser encontrada é

$$\mathcal{N}(p, q; \bar{p}, \bar{q}) = \delta_{p, \bar{p}} \delta_{q, \bar{q}} \quad (\text{A.14})$$

que corresponde ao caso de todos os operadores escalares possíveis estarem presentes e mais nenhum outro.

Vejamos, por exemplo, o modelo de Ising ($m=3$) cujos valores permitidos de h e $\bar{h}$ são 0, $1/16$, $1/2$. Truncada ao espaço de operadores escalares, a matriz $[M \otimes M]$, com elementos dados por (A.12) é

$$M = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 2 \\ 2 & 2 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.15})$$

Pode-se mostrar daí que a única solução possível é da forma (A.14). Os três operadores escalares primários nesse caso são: o operador unidade, a densidade de energia e a magnetização.

APÊNDICE B

O MÉTODO DE LANCZOS

O algoritmo de Lanczos para diagonalização de matrizes consiste em achar, por construção, uma base na qual o Hamiltoniano tenha uma representação tridiagonal. Isso significa que ao invés de armazenar $q^N \times q^N$ elementos teremos que guardar apenas $2q^N$, onde q é o número de estados por sítio e N o número de sítios.

Para construir a nova base nós escolhemos um estado inicial ψ_0 normalizado e a seguir aplicamos H repetidas vezes. Após a primeira aplicação teremos

$$H\psi_0 = a_1\psi_0 + b_1\psi_1 \quad (\text{B.1})$$

onde a_1 e b_1 são escolhidos de modo que ψ_1 também seja normalizado e ortogonal a ψ_0 . A seguir atuamos com H em ψ_1 e obtemos

$$H\psi_1 = c_1\psi_0 + a_2\psi_1 + b_2\psi_2 \quad (\text{B.2})$$

onde c_1 , a_2 e b_2 são escolhidos de maneira que ψ_2 seja normalizado e ortogonal a ambos ψ_1 e ψ_0 . O método prossegue nessa linha, e cada vez que um novo estado é gerado (ψ_n) nós calculamos $H\psi_n$, subtraímos as suas componentes ao longo dos outros estados ($\psi_0, \psi_1, \dots, \psi_n$) e normalizamos o que sobra (ψ_{n+1}). De forma geral teríamos:

$$H\psi_n = \sum_{i=1}^{n-2} \alpha_i \psi_i + c_n \psi_{n-1} + a_{n+1} \psi_n + b_{n+1} \psi_{n+1} \quad (\text{B.3})$$

Os $n+1$ estados construídos até agora são, por construção, ortonormais, e se nós calcularmos a projeção de $H\psi_n$ sobre um estado ψ_j ($j < n-2$) encontraremos

$$(\psi_j, H\psi_n) = \alpha_j \quad . \quad (B.4)$$

Como H é hermitiano podemos reescrever (B.4) como

$$(H\psi_j, \psi_n) = \alpha_j \quad . \quad (B.5)$$

Entretanto, usando (B.3) para $n=j$ observamos que $H\psi_j$ não contém ψ_n e portanto

$$\alpha_j = 0 \quad , \quad \forall j < n-2 \quad (B.6)$$

Dessa forma concluímos que a partir de $n=1$ teremos

$$H\psi_n = c_n \psi_{n-1} + a_{n+1} \psi_n + b_{n+1} \psi_{n+1} \quad , \quad (B.7)$$

e o processo termina quando

$$H\psi_{\tilde{n}} = c_{\tilde{n}} \psi_{\tilde{n}-1} + a_{\tilde{n}+1} \psi_{\tilde{n}} \quad (B.8)$$

ou seja quando $b_{\tilde{n}+1} = 0$.

A hermiticidade de H também implica que

$$c_n = b_n \quad , \quad n=1, 2, \dots \quad (B.9)$$

e, assim, H é escrito na nova base como

$$H_T = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & & 0 \\ b_1 & a_2 & b_2 & \\ & b_2 & a_3 & \ddots \\ 0 & & & a_{\tilde{n}} \end{pmatrix} \quad (B.10)$$

A característica principal desse método é que não há necessidade de completar o processo para se obter os autovalores extremos de H com boa precisão. A experiência mostra que os autovalores mais baixos da submatriz de dimensão $K \ll N$, convergem rapidamente para aqueles de H . Essa convergência pode ser monitorada fazendo-se a diagonalização das submatrizes a cada passo e comparando os autovalores de uma iteração com aqueles da anterior. No caso de Hamiltonianos com invariância translacional é possível acelerar o processo utilizando estados que exploram essa simetria. Em geral consegue-se pré-diagonalizar o Hamiltoniano reconhecendo quantidades conservadas como a carga no modelo de Potts ou o spin total no modelo XXZ ($\sum_i \sigma_i^z$).

Os estados representativos do sistema podem ser guardados como números inteiros, o que facilita a aplicação de H no computador. Na linguagem binária um número inteiro é uma sequência de uns e zeros que serão associados a spin "up" e spin "down". A aplicação dos operadores é feita através de funções que trabalham diretamente com os bits.

O método de Lanczos pode ser generalizado para hamiltonianos não-hermitianos. Neste caso, procuramos a transformação de similaridade

$$X^{-1} H X = T \quad (B.11)$$

que leva o hamiltoniano H a uma representação T tridiagonal e simétrica

$$T = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & & 0 \\ b_1 & a_2 & b_2 & \\ & b_2 & a_3 & \dots \\ 0 & & & \dots \end{pmatrix} \quad (B.12)$$

A matriz X é escrita como uma série de vetores coluna

ψ_i :

$$X = (\psi_0, \psi_1, \dots, \psi_N) \quad (B.13)$$

As equações do método de Lanczos são as mesmas, só que agora os coeficientes c_n , a_{n+1} e b_{n+1} são números complexos

$$H\psi_0 = a_1\psi_0 + b_1\psi_1 \quad (B.14)$$

$$H\psi_n = c_n\psi_{n-1} + a_{n+1}\psi_n + b_{n+1}\psi_{n+1}$$

Devido à não-hermiticidade de H , X não é unitária e, assim precisamos gerar sua inversa X^{-1}

$$Y = X^{-1\dagger}, \quad H^\dagger Y = Y T^\dagger, \quad Y^\dagger X = I \quad (B.15)$$

As colunas ϕ_i de Y podem ser calculadas com as seguintes equações adicionais

$$H^\dagger \phi_0 = a_1^* \phi_0 + b_1^* \phi_1 \quad (B.16)$$

$$H^\dagger \phi_n = c_n^* \phi_{n-1} + a_{n+1}^* \phi_n + b_{n+1}^* \phi_{n+1}$$

de forma que

$$\phi_i^\dagger \psi_j = \delta_{ij} \quad (B.17)$$

Os coeficientes a_{n+1} são, então, obtidos de:

$$a_{n+1} = \phi_n^\dagger H \psi_n \quad (B.18)$$

e usando que

$$b_{n+1} \psi_{n+1} = H \psi_n - a_{n+1} \psi_n - c_n \psi_{n-1} \quad (\text{B.19})$$

$$b_{n+1}^* \phi_{n+1} = H^\dagger \phi_n - a_{n+1}^* \phi_n - c_n^* \phi_{n-1}$$

obtêm-se os coeficientes b_{n+1} e os vetores de Lanczos ψ_{n+1}, ϕ_{n+1}

$$(b_{n+1})^2 = (b_{n+1}^* \phi_{n-1})^\dagger (b_{n+1} \psi_{n+1}) \quad (\text{B.20})$$

Nós implementamos esse esquema no computador com a finalidade de estudar o modelo de Potts-3 quiral. Os resultados estão sendo analisados.

REFERÊNCIAS

- 1) A.M.Polyakov. Sov.Phys.JETP Letters, 12, 381 (1970).
- 2) J.M.Luck. J.Physc., A15, L169 (1982).
- 3) B.Derrida e J.de Sèze. J.de Physique 43, 475 (1982).
- 4) M.P.Nightingale e H.Blöte. J.Phys. A16, L657 (1985).
- 5) V.Privman e M.E.Fisher. Phys.Rev. B30, 322 (1984).
- 6) J.L.Cardy. J.Phys., A17, L385 (1984).
- 7) J.L.Cardy. J.Phys., A17, L961 (1984).
- 8) A.Belavin, A.Polyakov e A.Zamolodchikov. Nucl.Phys. B241, 333 (1984).
- 9) V.G.Kac, em "Lectures Notes in Physics", vol.94, p.441 (Springer-Verlag, New York),
- 10) D.Friedan, Z.Qiu e S.Shenker. Phys.Rev.Letters, 52, 1575 (1984).
- 11) J.Cardy, em "Phase Transitions and Critical Phenomena", vol. 11 da Coleção DOMB & LEBONITZ (Academic, New York, 1986).
- 12) H.Blöte, J.Cardy e M.Nightingale. Phys.Rev.Letters 56, 742 (1986).
- I.Affleck. Phys.Rev.Letters 56, 746 (1986).
- 13) J.B.Kogut. Rev.Mod.Phys., 51, 659 (1979).
- 14) C.J.Hammer e M.N.Barber. J.Phys., A13, L169 (1980).
- 15) Roomany, Wild e Holloway. Phys. Rev.; D21, 1557 (1980).
- 16) M.Blume. Phys.Rev., 141, 517 (1966).
- 17) H.Capel. Physica, 32, 966 (1966).
- 18) Z.Qiu. Nucl.Physics, B270, 205 (1986).
- 19) E.Lieb, T.Schultz e D.Mattis. Ann.Phys., NY 16, 407(1961).
- T.W.Burkhardt e I.Guim. J.Phys., A18, L33 (1985).

- 20) B.Nienhuis, E.Riedel e M.Schick. J.Phys., A13, L189 (1980).
- 21) G.Von Gehlen e V.Rittenberg. J.Phys., A19, L625 (1986).
J.Phys., A19, L631 (1986).
- 22) J.Cardý. Nucl.Phys., B275, 200 (1986).
- 23) J.Cardý. Nucl.Phys., B270, 186 (1986).
- 24) M.Blume, V.Emery e R.Griffiths. Phys.Rev. A4, 1071 (1971).
- 25) H.Hamber. Phys.Rev., B21, 3999 (1980).
- 26) P.Boyanovshy e L.Masperì. Phys.Rev., D21, 1550 (1980).
- 27) C.Lanczos. J.Res. NBS 45, 255 (1950).
- 28) F.Alcaraz, J.R.Drugowich de Felício, R.Köberle e J.F. Stilck. Phys.Rev., B32, 7469 (1985).
- 29) K.Binder, em "Phase Transitions and Critical Phenomena". ,
vol.8 (C.DOMB e J.L.LEBOWITZ, eds.), Academic, London.
- 30) J.L.Cardý. Nucl.Phys., B240, 514 (1984).
- 31) B.Nienhuis, E.Riedel e M.Schick. Phys.Rev.Letters, 43 ,
737 (1979).