

Universidade de São Paulo  
Instituto de Física de São Carlos

Cadeias Quânticas de Spin:  
Alguns Estudos Numéricos e Analíticos

Gilberto Medeiros Nakamura

*Dissertação apresentada ao Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, para obtenção do título de Mestre em Ciências: Física Básica.*

Orientador: Francisco Castilho Alcaraz

São Carlos 2006

**USP/IFSC/SBI**



**8-2-001737**

**IFSC-USP** SERVIÇO DE BIBLIOTECA  
INFORMAÇÃO

IFSC - SBI
CLASS.....
CUTTER.....
TOMBO.....

Nakamura, Gilberto Medeiros

“Cadeias Quânticas de Spin: Alguns Estudos Numéricos e Analíticos”  
Gilberto Medeiros Nakamura – São Carlos, 2006

Dissertação (Mestrado) – Área de Física Básica do Instituto de Física de São  
Carlos da Universidade de São Paulo  
2006 - Páginas: 84

Orientador: Prof. Dr. Francisco Castilho Alcaraz

1. Cadeias de Spin 2. Transição de Fase

I. Título



MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE  
MESTRADO DE **GILBERTO MEDEIROS NAKAMURA** APRESENTADA AO  
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS, UNIVERSIDADE DE SÃO  
PAULO, EM 09/03/2006.

COMISSÃO JULGADORA:

Prof. Dr. Francisco Castillo Alcaraz (Orientador e Presidente) – IFSC/USP

Prof. Dr. Raimundo Rocha dos Santos – UFRJ

Prof. Dr. Evaldo Mendonça Fleury Curado – CBPF

*A minha mãe, que ensinou-  
me a beleza das ciências.*

## Agradecimentos

Gostaria de agradecer

Ao professor Francisco Castilho Alcaraz, pela dedicação para com minha orientação científica e pelas palavras de amizade nos momentos de dificuldade,

Ao professores do Instituto de Física de São Carlos,

Aos meus amigos do grupo de teoria cujo apoio, principalmente nas horas de café, foi fundamental,

Ao meus amigos Rafael Bertolini Frigori, Guilherme C. P. Innocentini e Márcio Seiji Nomoto, três grandes físicos,

A Camila Miranda Carvalho pelo apoio e paciência em todos os momentos,

E a Fapesp pelo apoio financeiro.

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Cadeias Quânticas de Spin <math>1/2</math></b>	<b>9</b>
2.1	Cadeia XY com campo magnético alternado . . . . .	10
2.1.1	Solução exata do modelo . . . . .	11
2.2	Modelo XY com exclusão . . . . .	17
2.2.1	Transformação do subespaço projetado . . . . .	19
2.2.2	Análise via invariância conforme . . . . .	25
<b>3</b>	<b>Cadeias Quânticas de Spin 1</b>	<b>33</b>
3.1	Ansatz do Produto Matricial . . . . .	34
3.2	Modelos exatamente integráveis . . . . .	39
<b>4</b>	<b>O modelo NDF</b>	<b>43</b>
4.1	Parametrização do modelo NDF . . . . .	45
4.2	Análise numérica das equações espectrais . . . . .	46
4.2.1	Região 1 . . . . .	56
4.2.2	Região 2 e 3 . . . . .	64
4.2.3	Região 4 . . . . .	72
4.3	Considerações finais . . . . .	75
<b>5</b>	<b>Conclusão</b>	<b>79</b>

# Lista de Figuras

2.1	Diagrama de bandas . . . . .	16
2.2	Diagrama do vínculo de exclusão . . . . .	18
4.1	Energia como função de $\rho$ I . . . . .	52
4.2	Energia como função de $\rho$ II . . . . .	53
4.3	Máxima densidade de raízes reais . . . . .	55
4.4	$E_0/L \times L^{-2}$ . . . . .	57
4.5	Ilustração de raízes . . . . .	61
4.6	Velocidade do som I . . . . .	62
4.7	Strings . . . . .	65
4.8	Campo magnético . . . . .	67
4.9	Velocidade do som II . . . . .	68
4.10	Cruzamento de níveis . . . . .	72
4.11	Quebra de simetria . . . . .	73
4.12	$t_p$ crítico . . . . .	74

# Lista de Tabelas

4.1	Energia I . . . . .	48
4.2	Energias II . . . . .	49
4.3	Energias III . . . . .	50
4.4	Energia livre . . . . .	53
4.5	Dimensões $x_{\pm 1,0}$ região 1 . . . . .	63
4.6	Dimensões $x_{0,1}$ região 1 . . . . .	63
4.7	Valores extrapolados para o campo magnético externo. . . . .	66
4.8	Velocidade do som . . . . .	68
4.9	Anomalia Conforme . . . . .	69
4.10	Dimensão anômala $x_{\pm 1,0}$ . . . . .	70
4.11	Dimensão anômala $x_{0,1}$ . . . . .	71
4.12	Espectro NDF e XXZ . . . . .	76



## Abstract

In this dissertation, we have studied exactly integrable unidimensional quantum spin chains of spin  $1/2$  and spin  $1$ . Special attention was given to the properties of the energy eigenspectra of these chains and particularly to their finite size effects. To achieve this goal, we have explored the invariance by conformal transformations of the models in their critical points. As an appreciation of these studies, we have studied the exactly integrable model NDF of spin  $1$ , proposed by Alcaraz e Bariev. We verified that such model possess a quantum phase transition.

# Capítulo 1

## Introdução

É notável o desenvolvimento das ciências físicas durante o século XX. Neste período tivemos o advento da Mecânica Quântica e da Relatividade Geral. Mais que isto, através da fusão da Mecânica Quântica e da Relatividade Restrita, orquestrada magistralmente por Dirac e toda uma geração de físicos, teorias quânticas para campos foram desenvolvidas. O formidável sucesso de algumas destas teorias, como a Eletrodinâmica Quântica, justifica a confiança que depositamos nas mesmas e em suas bases para a descrição de interações microscópicas da matéria.

Apesar do desenvolvimento, também é impressionante que ainda existam fenômenos sob a alçada dessas mesmas teorias sem uma explicação adequada. Um dos casos mais intrigantes e que tem fornecido constante material para pesquisa é o ferromagnetismo. Isto se deve ao fato de que embora possamos afirmar que a teoria para o campo eletromagnético proposta por Maxwell é a teoria clássica melhor estabelecida no cenário das Ciências, sua formulação utilizando apenas mecânica clássica falha em explicar a origem do ferromagnetismo. Acredita-se que a introdução de efeitos quânticos seja capaz de realizar uma descrição precisa para esse fenômeno coletivo. A maneira correta para realizar tal procedimento ainda é incerta. Há muito busca-se compreender a origem deste fenômeno, já inserido em diversas tecnologias atuais, o que abriria caminho para o desenvolvimento de novos materiais e tecnologias.

Em 1907, essas questões acerca do ferromagnetismo levaram Pierre Weiss [1]

a formular um modelo para sistemas ferromagnéticos. Neste, assumiu-se que a interação relevante para o surgimento de fases ferromagnéticas seria aquela entre os momentos magnéticos dos constituintes da matéria. Em primeira ordem, e portanto a situação mais provável, Weiss considerou interações de natureza dipolo-dipolo, onde a fase ferromagnética é expressa pelo alinhamento dos mesmos. Optou, entretanto, em simplificar sua teoria através da introdução de um campo molecular efetivo (campo médio). Este campo, cuja intensidade é diretamente proporcional ao valor médio dos dipolos magnéticos, acoplar-se-ia com os mesmos reproduzindo, possivelmente, a interação dipolo-dipolo. Porém, a simplificação exclui o cenário de interações puramente locais, pois torna o modelo equivalente a um com interações dipolo-dipolo entre *todos* os dipolos magnéticos do sistema, cuja intensidade é independente da distância relativa entre os mesmos. Apesar desta limitação, a teoria de campo médio de Weiss foi capaz de capturar a transição entre as fases magnética e não-magnética, cuja verificação experimental já existia. A temperatura característica da transição, porém, não correspondia ao valor experimental.

Em 1925, Ising e Lenz [2] propuseram um modelo estatístico para materiais ferromagnéticos esperando que este possuísse as duas fases obtidas por Weiss, mas restrito somente a interações locais. O modelo, que hoje leva o nome de modelo de Ising, consiste em uma rede (em uma, duas ou três dimensões) com uma densidade de sítios uniforme. Cada sítio representa um átomo ou molécula que compõe o material em estudo. Estes interagem com maior intensidade com os vizinhos mais próximos, ou seja, as interações relevantes são locais, diferentemente da teoria de campo médio de Weiss. Para cada sítio localizado na posição  $\vec{r}_j$  é associada uma variável  $s(\vec{r}_j)$  que, em princípio, descreveria uma configuração do dipolo magnético clássico deste sítio, assumindo os valores  $s(\vec{r}_j) = \pm 1$ . A Hamiltoniana que descreve a interação é dada por

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s(\vec{r}_j) s(\vec{r}_i), \quad (1.1)$$

onde  $J$  representa a intensidade média<sup>1</sup> da interação entre os dipolos clássicos. Infelizmente, Ising resolveu exatamente este modelo apenas em uma dimensão, onde verificou uma fase magnética(ordenada) a temperatura nula,  $T = 0$ , e outra não-magnética(desordenada) para  $T > 0$ . Apenas em 1944 a solução em duas dimensões foi obtida por Onsager [5]. Através desta solução, Onsager foi capaz de mostrar que o modelo de Ising, em duas dimensões, possui uma transição de fase de segunda ordem a temperatura  $T_c > 0$ , possuindo um ponto crítico<sup>2</sup>.

O trabalho pioneiro de Ising motivou Heisenberg [3] a formular um modelo análogo em 1928, onde foram utilizados aspectos fundamentalmente quânticos para realizar a descrição da interação microscópica. Para isto supôs que as interações microscópicas entre as partículas localizadas nos sítios, responsáveis pelo magnetismo macroscópico da matéria, possuíam um caráter puramente elétrico e não magnético. Junto a isto, considerou também o princípio de exclusão de Pauli, que nenhuma teoria clássica poderia contemplar. Essas interações seriam muito bem representadas pela interação  $\vec{S}(\vec{r}_i) \cdot \vec{S}(\vec{r}_j)$ , onde  $\vec{S}(\vec{r}_j)$  é o operador

---

<sup>1</sup>Convém ressaltar que para  $J > 0$  a configuração mais provável para baixas temperaturas é aquela onde todos os sítios estão alinhados, representando uma fase ferromagnética. Para  $J < 0$ , a situação mais provável é obtida quando os sítios estão anti-paralelos, descrevendo uma fase antiferromagnética. Iremos sempre utilizar aqui  $J > 0$ .

<sup>2</sup>O ponto crítico de um dado modelo separa duas fases termodinâmicas de maneira contínua. As propriedades termodinâmicas (magnetização, calor específico, funções de correlação), ao redor do ponto crítico, são geralmente bem descritos por leis de potência, cujos expoentes são denominados de expoentes críticos. Uma característica marcante destes fenômenos é que diferentes sistemas físicos podem apresentar o mesmo conjunto de expoentes. Isto evidencia características universais da transição, uma vez que transcende propriedades específicas de cada material. Esta é a hipótese de universalidade, sendo muito bem aceita atualmente e possui, inclusive, verificações experimentais. Outra propriedade importante de um ponto crítico é que o comprimento de correlação do sistema, que fornece a máxima escala onde as funções de correlação são relevantes, diverge. O sistema então perde sua escala intrínseca, o que reflete no aparecimento da invariância por transformações de escala. A independência de escala microscópica faz com que muitos sistemas se assemelhem, corroborando com a hipótese de universalidade. Devido à divergência do comprimento de correlação, sistemas críticos apresentam, mesmo sendo suas interações de curto alcance, comportamentos coletivos de longo alcance.

de spin do  $j$ -ésimo sítio (spin meio). O operador Hamiltoniano do sistema é dado por

$$\hat{\mathcal{H}} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}(\vec{r}_i) \cdot \vec{S}(\vec{r}_j), \quad (1.2)$$

a soma sendo novamente realizada somente sobre os vizinhos próximos. A versão unidimensional deste modelo foi resolvida por Hans Bethe [4] em 1931. Bethe utilizou um ansatz: propôs que a solução para a equação de autovalor,  $\hat{\mathcal{H}}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$ , seria uma combinação de ondas planas, sendo seus números de onda definidos como raízes de equações algébricas não-lineares e acopladas.

Vários outros modelos de cadeias de spin foram introduzidos ao longo dos anos, apresentando diferentes simetria e acoplamentos, tornando possível a presença de diversas fases termodinâmicas bem como transições entre estas. Maior atenção foi-lhes dada quando estabeleceu-se uma relação entre cadeias quânticas e teorias de campo clássicas com uma dimensão extra<sup>3</sup>, quando estas descrevem fenômenos críticos. Atualmente, cadeias de spin são utilizadas em vários campos de estudo. Isto se deve à possibilidade de definir um modelo efetivo em cadeias de spin cuja dinâmica assemelha-se à dinâmica de um sistema distinto, com maior complexidade. Quando existe tal possibilidade, as propriedades relevantes são comuns a ambos, ou seja, o estudo de cadeias de spin ou dos sistemas os quais a cadeia imita são equivalentes. Essa abrangência e generalidade motivaram-nos a estudar fenômenos críticos e transições de fase em cadeias de spin, visando aprender técnicas desenvolvidas ao longo das décadas pela área bem como contribuir com outras. Iremos, convenientemente, abordar modelos passíveis de soluções exatas, uma vez que podemos utilizá-los para estudar aspectos não-perturbativo de sistemas físicos com dinâmicas mais complexas permitindo-nos compreender, com clareza, a origem de seus efeitos físicos.

Como dito no parágrafo anterior, iremos utilizar muitas técnicas desenvolvidas em Mecânica Estatística. Uma destas foi desenvolvida por Wilson [7]. Sua teoria reside no fato de que, ao redor do ponto crítico, é possível realizar transformações

---

<sup>3</sup>Para uma revisão, veja [6].

sobre o sistema, de maneira que muitos graus de liberdade podem ser eliminados, sem que as propriedades físicas (funções de correlação) de grandes distâncias sejam alteradas. Esta é a idéia do Grupo de Renormalização. As transformações deste grupo são as dilatações. Não iremos discorrer sobre o tema aqui, que é extremamente rico e abrangente, mas apenas sobre sua “generalização”, proposta por Fateev, Zamolodchikov e Belavin [8]. Estes autores propuseram que se um sistema com interações locais fosse localmente invariante por transformações de escala, isto é, invariante por transformações conformes, novas propriedades poderiam ser contempladas, particularmente para duas dimensões. Neste caso, o sistema seria governado por uma teoria de campos relativística invariante por transformações conforme que poderia ser classificada, quanto à classe de universalidade, pela anomalia conforme  $c$ . Um dos resultados importantes desta teoria é que as funções de correlação entre os operadores primários  $\varphi(\vec{r})$  e seus descendentes<sup>4</sup>  $\varphi_{m,m'}(\vec{r})$  ( $m, m' = 1, 2, \dots$ ) até três pontos possuem expressões que podem ser obtidas analiticamente. Em particular, a função de dois pontos para o operador primário  $\varphi(\vec{r})$  é dada por

$$\langle \varphi(\vec{r}) \varphi(\vec{r}') \rangle \propto \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|^{2(\Delta_\varphi + \bar{\Delta}_\varphi)}} = \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|^{2x_\varphi}}, \quad (1.3)$$

onde  $\Delta_\varphi$  e  $\bar{\Delta}_\varphi$  são as dimensões conformes do operador  $\varphi(\vec{r})$ , enquanto  $x_\varphi = \Delta_\varphi + \bar{\Delta}_\varphi$  é a dimensão anômala do operador primário  $\varphi(\vec{r})$ . Em coordenadas complexas  $z = r_1 + ir_2$ ,  $\bar{z} = r_1 - ir_2$ , através de uma mudança de coordenada,  $z' = f(z)$ , a função de correlação acima transforma-se como

$$\langle \varphi(z', \bar{z}') \varphi(0) \rangle = \left( \frac{\partial z'}{\partial z} \right)^{2\Delta_\varphi} \left( \frac{\partial \bar{z}'}{\partial \bar{z}} \right)^{2\bar{\Delta}_\varphi} \langle \varphi(z, \bar{z}) \varphi(0) \rangle. \quad (1.4)$$

Para o caso particular  $f(z) = z/b$ ,  $b \in \mathbb{R}$ , reobtemos a transformação usual para

---

<sup>4</sup> Para cada operador primário  $\varphi(\vec{r})$  existe um conjunto de operadores secundários  $\varphi_{m,m'}(\vec{r})$  que formam a torre conforme do operador  $\varphi(\vec{r})$ . Os operadores secundários são obtidos pela aplicação dos elementos da álgebra de Virasoro  $L_m, \bar{L}_{m'}$  ( $m, m' = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ) sobre os operadores primários  $\varphi(\vec{r})$ , isto é,  $\varphi_{m,m'}(\vec{r}) = L_m \bar{L}_{m'} \varphi(\vec{r})$ . Os elementos da álgebra de Virasoro,  $L_m$ , satisfazem  $[L_m, L_n] = (m - n) L_{m+n} + \frac{c}{12} m^2 (m - 1) \delta_{m,-n}$ , ( $m, n = 0, \pm 1, \dots$ ). Relação análoga é satisfeita pelos  $\bar{L}_m$ .

a função de correlação através do Grupo de Renormalização, donde relacionamos as dimensões anômalas  $x_\varphi$  com expoentes críticos dos respectivos operadores.<sup>5</sup>

Esses resultados para teoria de campos bidimensionais podem ser associados aos efeitos sobre o espectro de energia relacionados à finitude de cadeias quânticas de spin<sup>6</sup>, devido à conexão entre modelos clássicos e quânticos acima mencionados. Dentre esse conjunto de resultados, as relações mais importantes para o desenvolvimento desta dissertação podem ser resumidos da seguinte maneira. Cada auto-estado do operador Hamiltoniano  $\hat{\mathcal{H}}$  de uma cadeia quântica crítica de spin relaciona-se com um operador  $\varphi(r)$  da teoria de campos bidimensional conforme associada, com dimensão  $x_\varphi = \Delta_\varphi + \bar{\Delta}_\varphi$  e spin  $s_\varphi = \Delta_\varphi - \bar{\Delta}_\varphi$ . A energia e momento destes auto-estados são dados por

$$E^\varphi = E_0 + \frac{2\pi v_s}{L} (x_\varphi + m + m') + o(L^{-1}), \quad (1.5)$$

$$P = \frac{2\pi}{L} (s_\varphi + m - m'), \quad (1.6)$$

com  $m, m' = 0, 1, 2, \dots$ , e  $v_s$  é a velocidade do som, que é o coeficiente linear da relação energia-momento relativística.  $E_0$  é a energia do estado fundamental e assintoticamente possui a expansão

$$E_0 = e_\infty - \frac{\pi v_s c}{6L} + o(L^{-1}), \quad (1.7)$$

onde  $e_\infty$  é a energia livre no limite termodinâmico. Assim, é possível obter o espectro correspondente às energias relacionadas aos maiores comprimentos de onda.

A dissertação encontra-se disposta da seguinte maneira. No capítulo dois, iremos abordar cadeias quânticas de spin meio, cujas soluções exatas serão obtidas através da fermionização da rede. Dois modelos serão estudados: a cadeia XY com campo magnético alternado e a cadeia XY com exclusão [11]. Este último, como veremos, é um modelo crítico e será nosso laboratório para extrair as quantidades que caracterizam a teoria de campos adjacentes. No capítulo três,

<sup>5</sup>Para uma revisão mais elaborada sobre invariância conforme, veja [9].

<sup>6</sup>Veja por exemplo [10].

iremos utilizar o ansatz do produto matricial [12] para expressar as soluções de cadeias quânticas de spin 1 em termos de equações não-lineares. No capítulo quatro, resolveremos numericamente tais equações para o modelo NDF de spin 1 introduzido em [13]. Tal estudo é bastante interessante, pois quase nada se sabe sobre a física deste modelo cuja matriz  $S$  não possui uma dependência com os parâmetros espectrais na forma de diferenças, daí a notação escolhida para o modelo NDF (“non difference form”). Confeccionaremos um diagrama de fases para tal modelo e iremos obter as dimensões anômalas e a anomalia conforme da teoria de campos associada, em seu regime crítico. Por fim, discutiremos sobre um regime de acoplamento onde verificou-se uma transição de fase quântica.



## Capítulo 2

# Cadeias Quânticas de Spin 1/2

Iniciamos esta dissertação com o estudo de cadeias quânticas de modelos de spin 1/2, por serem sistemas passíveis de um tratamento teórico mais simples. Discorreremos sobre dois modelos nesta primeira etapa: o modelo  $XY$  com campo magnético alternado e o modelo  $XY$  com exclusão [11].

O primeiro, como veremos adiante, é o modelo  $XY$  com campo magnético alternado caracterizado por duas fases distintas. O modelo exibe um espectro com lacuna de massa para campo não nulo e um com espectro contínuo (sem gap) para campo nulo. Tais espectros são análogos aos das fases condutoras e isolantes. O segundo modelo é o  $XY$  com exclusão. Neste, existe um vínculo que proíbe que quaisquer dois spins com  $\sigma^z = +1$  encontrem-se separados por um número de sítios menor que  $s$ , onde  $s$  ( $s = 1, 2, \dots$ ) é o parâmetro de exclusão do modelo. Este modelo, como veremos, apresenta um espectro de energia contínuo e conforme. Tal fato nos permite o uso das técnicas de Invariância Conforme, desenvolvidas por Zamolodchikov, Belavin e Polyakov [8] e por Cardy [10], para estudar o comportamento crítico do modelo mediante a análise do comportamento assintótico das auto-energias da cadeia definida em geometria finita. Para caracterizarmos o comportamento crítico, calcularemos a anomalia conforme, que indexa a classe de universalidade de comportamento crítico, e a dimensão anômala dos operadores, quantidades estas que se relacionam com os expoentes críticos do modelo.

## 2.1 Cadeia XY com campo magnético alternado

Consideramos uma cadeia quântica de spin 1/2 composta de  $L$  ( $L$  par) sítios e com condição periódica de contorno, cujo operador Hamiltoniano é dado por

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{1}{2} \sum_{k=1}^L [\hat{\sigma}_k^x \hat{\sigma}_{k+1}^x + \hat{\sigma}_k^y \hat{\sigma}_{k+1}^y + 2(-1)^k h \hat{\sigma}_k^z], \quad (2.1)$$

onde  $\hat{\sigma}_k^\alpha$ ,  $\alpha = x, y, z$  são as matrizes de Pauli no  $k$ -ésimo sítio e  $h$  é a intensidade do campo magnético. A fase  $(-1)^k$  que acompanha a intensidade do campo alterna de sinal de sítio para sítio. É conveniente escrever o Hamiltoniano (2.1) em termos dos operadores de levantamento e abaixamento  $\hat{\sigma}_k^\pm = (\hat{\sigma}_k^x \pm i\hat{\sigma}_k^y)/2$  e de  $\hat{\sigma}_k^z = 2\hat{\sigma}_k^+ \hat{\sigma}_k^- - 1$ ,

$$\hat{\mathcal{H}} = - \sum_{k=1}^L [\hat{\sigma}_k^+ \hat{\sigma}_{k+1}^- + \hat{\sigma}_{k+1}^+ \hat{\sigma}_k^- + (-1)^k h (2\hat{\sigma}_k^+ \hat{\sigma}_k^- - 1)]. \quad (2.2)$$

É importante mencionar que na ausência do campo ( $h = 0$ ) reobtemos o modelo XY tradicional, cuja solução exata fora obtida por Lieb, Mattis e Schultz em [14]. Neste caso, o estado fundamental é caracterizado pela desordem dos seus sítios. Entretanto, a introdução de um campo magnético alternado tenta estabelecer um ordenamento em cada sítio. Há, portanto, uma competição entre ordem e desordem neste modelo. Queremos compreender quais os efeitos do campo magnético alternado sobre o espectro de energia e sobre o comportamento físico da cadeia. Para isto é conveniente introduzir um conjunto de operadores que explorem as simetrias do Hamiltoniano (2.1), que são a invariância por translações<sup>1</sup> e a conservação da magnetização<sup>2</sup>. Veremos a seguir que escrevendo-se o Hamiltoniano (2.1) na base destes novos operadores poderemos descrever o Hamiltoniano (2.1) como uma composição de blocos disjuntos indexados pela magnetização e

<sup>1</sup>O operador de translação  $\hat{T}$  translada a configuração de cada sítio  $k$  para o sítio vizinho  $k + 1$ . Por exemplo, na configuração particular da cadeia com  $L = 3$ ,  $\hat{T} |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle = |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle$ . No presente modelo, existe a invariância pela translação de dois sítios devido à alternância de sinal do campo magnético. A invariância é expressa através de  $[\hat{T}^2, \hat{\mathcal{H}}] = 0$ .

<sup>2</sup>O operador que descreve a magnetização é  $\hat{\mathcal{M}} = \sum_{i=1}^L \hat{\sigma}_i^z$ . É fácil verificar que  $[\hat{\mathcal{M}}, \hat{\mathcal{H}}] = 0$ , que implica na conservação da magnetização.

número quântico de translação (momento). Desta forma a diagonalização do Hamiltoniano reduz-se a diagonalização dos blocos disjuntos, que são mais simples.

### 2.1.1 Solução exata do modelo

A invariância translacional da cadeia sugere o uso de operadores advindos de transformada de Fourier como é costume. Entretanto, salientamos que a álgebra dos operadores  $\hat{\sigma}_k^+$ ,  $\hat{\sigma}_k^-$ ,  $\hat{\sigma}_k^z$  não é fermiônica nem bosônica. Isto ocorre como consequência da localização espacial dos operadores nos sítios, cujas relações de comutação e anticomutação são

$$\{\hat{\sigma}_k^+, \hat{\sigma}_k^-\} = 1 \quad (2.3)$$

$$[\hat{\sigma}_k^+, \hat{\sigma}_{k'}^-] = \hat{\sigma}_k^z \delta_{k,k'}, \quad (2.4)$$

$$[\hat{\sigma}_k^z, \hat{\sigma}_{k'}^\pm] = \pm 2\hat{\sigma}_k^\pm \delta_{k,k'}. \quad (2.5)$$

Para a existência de uma transformada bem definida, é necessário fixar a natureza fermiônica ou bosônica dos operadores.

Escolhemos fermionizar os operadores  $\hat{\sigma}_k^+$ ,  $\hat{\sigma}_k^-$ ,  $\hat{\sigma}_k^z$ , através de uma transformação unitária  $\hat{U}$ . Esta transformação é conhecida na literatura como transformação de Jordan-Wigner. A idéia é obter novos operadores de criação e destruição fermiônicos  $\hat{C}_k^\dagger$  e  $\hat{C}_k$  para  $k = 1, 2, \dots, L$  a partir dos operadores  $\hat{\sigma}_k^+$ ,  $\hat{\sigma}_k^-$  através da transformação  $\hat{U}$

$$\hat{C}_k^\dagger = \hat{U}_k \hat{\sigma}_k^+, \quad (2.6)$$

$$\hat{C}_k = \hat{U}_k \hat{\sigma}_k^-. \quad (2.7)$$

Utilizando-se

$$\hat{U}_k = \prod_{l=1}^{k-1} [-\hat{\sigma}_l^z], \quad (2.8)$$

verifica-se facilmente que os operadores  $\hat{C}_k^\dagger$  e  $\hat{C}_k$  satisfazem as relações fermiônicas

$$\{\hat{C}_k^\dagger, \hat{C}_m\} = \delta_{km} \quad (2.9)$$

$$\{\hat{C}_k^\dagger, \hat{C}_m^\dagger\} = \{\hat{C}_k, \hat{C}_m\} = 0 \quad \forall k, m. \quad (2.10)$$

Podemos definir ainda o operador número  $\hat{\mathcal{N}}_F$ , que conta o número de férmions presentes na cadeia, através de

$$\hat{\mathcal{N}}_F = \sum_{l=1}^L \hat{c}_l^\dagger \hat{c}_l. \quad (2.11)$$

Por fim, o operador  $\hat{\sigma}_k^z$ ,  $k = 1, 2, \dots, L$  e o operador de magnetização  $\hat{\mathcal{M}}$  são descritos pelos operadores  $\hat{c}_k^\dagger, \hat{c}_k$  da seguinte maneira

$$\hat{\sigma}_k^z = 2\hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k - 1, \quad (2.12)$$

$$\hat{\mathcal{M}} = 2 \sum_{l=1}^L \hat{c}_l^\dagger \hat{c}_l - L = 2\hat{\mathcal{N}}_F - L. \quad (2.13)$$

Note que  $[\hat{\mathcal{N}}_F, \hat{\mathcal{M}}] = 0$ , sendo, portanto, o número de férmions um número quântico tão bom quanto a magnetização.

Vamos, então, aplicar as transformações (2.9), (2.10) em (2.2), que resulta em

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} = & - \sum_{k=1}^{L-1} \left[ \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_{k+1} + \hat{c}_{k+1}^\dagger \hat{c}_k + h e^{i\pi k} (2\hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k - 1) \right] - h e^{i\pi L} (2\hat{c}_L^\dagger \hat{c}_L - 1) \\ & - (-1)^{N_F+1} [\hat{c}_L^\dagger \hat{c}_1 + \hat{c}_1^\dagger \hat{c}_L]. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Vemos pela expressão acima que a condição de contorno, na formulação em termos de operadores puramente fermiônicos, não é, em geral, periódica. Há o acréscimo de uma fase que depende da paridade do número de férmions na rede, isto é,

$$\hat{c}_{L+1}^\dagger = (-1)^{(N_F+1)} \hat{c}_1^\dagger, \quad (2.15)$$

$$\hat{c}_{L+1} = (-1)^{(N_F+1)} \hat{c}_1. \quad (2.16)$$

Assim, para  $N_F$  ímpar, a condição de contorno é periódica enquanto para  $N_F$  par, a condição de contorno é anti-periódica.

Para explorar a simetria translacional de (2.14), podemos definir um novo conjunto de operadores fermiônicos  $\hat{\mathcal{A}}_{q_j}^\dagger, \hat{\mathcal{A}}_{q_j}$  descritos em termos dos operadores  $\hat{c}_k^\dagger, \hat{c}_k$  através da transformada de Fourier

$$\hat{\mathcal{A}}_{q_j}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{k=1}^L e^{iq_j k} \hat{c}_k^\dagger, \quad (2.17)$$

$$\hat{\mathcal{A}}_{q_j} = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{k=1}^L e^{-iq_j k} \hat{c}_k. \quad (2.18)$$

Os  $q_j$ , que serão chamados daqui em diante de momenta, possuem seus valores determinados pela condição de contorno da cadeia. Utilizamos as transformações (2.17) e (2.18) para os operadores em (2.15) (2.16), determinando assim os valores dos momenta  $q_j$

$$\hat{c}_{L+1}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{j=0}^{L-1} e^{-iq_j(L+1)} \hat{\mathcal{A}}_{q_j}^\dagger = e^{i\pi(N_F+1)} \hat{c}_1^\dagger. \quad (2.19)$$

A expressão acima é verdadeira se e somente se  $\exp(iq_j L) = \exp(i\pi(N_F + 1))$ , ou seja,

$$q_j = -\pi + \frac{\pi}{L} + \frac{2\pi j}{L}, \quad j = 0, 1, \dots, L-1 \text{ se } N_F \text{ par}, \quad (2.20)$$

$$q_j = -\pi + \frac{2\pi j}{L}, \quad j = 0, 1, \dots, L-1 \text{ se } N_F \text{ ímpar}. \quad (2.21)$$

Esse conjunto de  $q_j$  define a primeira zona de Brillouin do modelo. Em termos da magnetização ( $M=2Q$ ), os  $q_j$  que se encontram dentro da primeira zona de Brillouin são

$$q_j = -\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{L}(Q+1) + \frac{2\pi j}{L}, \quad j = 0, 1, \dots, L-1. \quad (2.22)$$

Por fim, o Hamiltoniano (2.14) descrito em termos dos operadores de criação e destruição de férmions, com momento  $q_j$ ,  $\hat{\mathcal{A}}_{q_j}^\dagger$  e  $\hat{\mathcal{A}}_{q_j}$ , é dado por

$$\hat{\mathcal{H}} = -2 \sum_j \left[ \cos q_j \hat{\mathcal{A}}_{q_j}^\dagger \hat{\mathcal{A}}_{q_j} + h \hat{\mathcal{A}}_{q_j}^\dagger \hat{\mathcal{A}}_{q_j+\pi} \right] = \oplus'_{q_j} \hat{\mathcal{H}}_{q_j}, \quad (2.23)$$

onde a soma direta é realizada sobre os  $-\pi \leq q_j < 0$ , isto é, metade dos valores disponíveis. O operador  $\hat{\mathcal{H}}_{q_j}$  é dado por

$$\hat{\mathcal{H}}_{q_j} = -2 \cos q_j \hat{\mathcal{A}}_{q_j}^\dagger \hat{\mathcal{A}}_{q_j} + 2 \cos q_j \hat{\mathcal{A}}_{q_j+\pi}^\dagger \hat{\mathcal{A}}_{q_j+\pi} - 2h \hat{\mathcal{A}}_{q_j}^\dagger \hat{\mathcal{A}}_{q_j+\pi} - 2h \hat{\mathcal{A}}_{q_j+\pi}^\dagger \hat{\mathcal{A}}_{q_j}, \quad (2.24)$$

sendo  $q_j$ , ( $j = 0, 1, \dots, L/2 - 1$ ) dados por (2.22) e dependentes do particular setor caracterizado pelo valor de  $Q$ .

Nesta forma, o operador Hamiltoniano (2.23) é a soma direta de operadores  $\hat{\mathcal{H}}_{q_j}$  (2.24) cuja representação matricial possui dimensão 4. Para diagonalizar o Hamiltoniano basta diagonalizar cada operador  $\hat{\mathcal{H}}_{q_j}$ .

O operador  $\hat{\mathcal{H}}_{q_j}$  em (2.24), por sua vez, é facilmente diagonalizado através de uma transformação de Bogoliubov<sup>3</sup>. Esta transformação consiste em considerar os operadores  $\hat{\mathcal{A}}_{q_j}$  e  $\hat{\mathcal{A}}_{q_j+\pi}$  como uma particular combinação linear de novos operadores fermiônicos  $\hat{\mathcal{Z}}_{q_j,\uparrow}$  e  $\hat{\mathcal{Z}}_{q_j,\downarrow}$ <sup>4</sup>. Esta transformação é feita para que o Hamiltoniano seja descrito em termos de operadores número  $\hat{\mathcal{Z}}_{q_j,\downarrow}^\dagger \hat{\mathcal{Z}}_{q_j,\downarrow}$  e  $\hat{\mathcal{Z}}_{q_j,\uparrow}^\dagger \hat{\mathcal{Z}}_{q_j,\uparrow}$ , que são diagonais. A transformação é

$$\hat{\mathcal{A}}_{q_j} = \alpha_1 \hat{\mathcal{Z}}_{q_j,\uparrow} + \beta_1 \hat{\mathcal{Z}}_{q_j,\downarrow}^\dagger \quad \hat{\mathcal{A}}_{q_j}^\dagger = \alpha_1^* \hat{\mathcal{Z}}_{q_j,\uparrow}^\dagger + \beta_1^* \hat{\mathcal{Z}}_{q_j,\downarrow}, \quad (2.25)$$

$$\hat{\mathcal{A}}_{q_j+\pi} = \alpha_2 \hat{\mathcal{Z}}_{q_j,\uparrow} + \beta_2 \hat{\mathcal{Z}}_{q_j,\downarrow}^\dagger \quad \hat{\mathcal{A}}_{q_j+\pi}^\dagger = \alpha_2^* \hat{\mathcal{Z}}_{q_j,\uparrow}^\dagger + \beta_2^* \hat{\mathcal{Z}}_{q_j,\downarrow}, \quad (2.26)$$

onde os operadores  $\hat{\mathcal{Z}}_{q_j,\uparrow}$ ,  $\hat{\mathcal{Z}}_{q_j,\downarrow}$  e  $\hat{\mathcal{Z}}_{q_j,\uparrow}^\dagger$ ,  $\hat{\mathcal{Z}}_{q_j,\downarrow}^\dagger$  satisfazem

$$\{\hat{\mathcal{Z}}_{q_j,\sigma}^\dagger, \hat{\mathcal{Z}}_{q_l,\sigma'}^\dagger\} = \{\hat{\mathcal{Z}}_{q_j,\sigma}, \hat{\mathcal{Z}}_{q_l,\sigma'}\} = 0, \quad (2.27)$$

$$\{\hat{\mathcal{Z}}_{q_j,\sigma}^\dagger, \hat{\mathcal{Z}}_{q_l,\sigma'}\} = \delta_{l,j} \delta_{\sigma,\sigma'}, \quad (2.28)$$

com  $j, l = 1, 2, \dots, L$  e  $\sigma, \sigma' = \uparrow, \downarrow$ . As relações de anticomutação de  $\hat{\mathcal{A}}_{q_j}^\dagger$  e  $\hat{\mathcal{A}}_{q_j}$  impõem relações adicionais sobre os operadores  $\hat{\mathcal{Z}}_{q_j,\uparrow}$ ,  $\hat{\mathcal{Z}}_{q_j,\downarrow}$  e aos coeficientes  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$ ,  $\beta_1$ ,  $\beta_2$ . São elas

$$\{\hat{\mathcal{A}}_{q_j}, \hat{\mathcal{A}}_{q_j}\} = 0 \text{ se e somente se } \{\hat{\mathcal{Z}}_{q_j,\uparrow}, \hat{\mathcal{Z}}_{q_j,\downarrow}^\dagger\} = 0, \quad (2.29)$$

$$\{\hat{\mathcal{A}}_{q_j}, \hat{\mathcal{A}}_{q_j}^\dagger\} = 1 \text{ se e somente se } |\alpha_1|^2 + |\beta_1|^2 = 1 \text{ e } \{\hat{\mathcal{Z}}_{q_j,\uparrow}, \hat{\mathcal{Z}}_{q_j,\downarrow}\} = 0 \quad (2.30)$$

$$\{\hat{\mathcal{A}}_{q_j+\pi}, \hat{\mathcal{A}}_{q_j+\pi}^\dagger\} = 1 \text{ se e somente se } |\alpha_2|^2 + |\beta_2|^2 = 1, \quad (2.31)$$

$$\{\hat{\mathcal{A}}_{q_j}, \hat{\mathcal{A}}_{q_j+\pi}^\dagger\} = 0 \text{ se e somente se } \alpha_1 \alpha_2^* + \beta_1 \beta_2^* = 0. \quad (2.32)$$

Uma escolha adequada para os coeficientes  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$ ,  $\beta_1$  e  $\beta_2$  e que satisfaz às relações acima é

$$\alpha_1 = \beta_2 = \cos \theta,$$

$$\alpha_2 = \beta_1 = i \sin \theta,$$

<sup>3</sup>Veja, por exemplo, a transformação de Bogoliubov para o modelo de Ising quântico com campo transversal em [6].

<sup>4</sup>As setas dos operadores  $\hat{\mathcal{Z}}_{q_j,\uparrow}$  e  $\hat{\mathcal{Z}}_{q_j,\downarrow}$  são tão somente uma notação para distinguir dois tipos de férmions. A interpretação de valores de spin, porém, é possível.

sendo  $\theta$  um ângulo real qualquer. Substituindo (2.25) e (2.26) em (2.1), obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\hat{\mathcal{H}}_{q_j}}{-2} &= \cos q_j (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta) \left[ \hat{\mathcal{Z}}_{q_j, \uparrow}^\dagger \hat{\mathcal{Z}}_{q_j, \uparrow} - \hat{\mathcal{Z}}_{q_j, \downarrow} \hat{\mathcal{Z}}_{q_j, \downarrow}^\dagger \right] + \mathcal{F}(q_j) \hat{\mathcal{Z}}_{q_j, \uparrow}^\dagger \hat{\mathcal{Z}}_{q_j, \downarrow}^\dagger + \\ &+ \mathcal{F}^\dagger(q_j) \hat{\mathcal{Z}}_{q_j, \downarrow} \hat{\mathcal{Z}}_{q_j, \uparrow}, \end{aligned} \quad (2.33)$$

onde  $\mathcal{F}(q_j) = i \sin 2\theta \cos q_j + h$ . Os termos da Hamiltoniano (2.33) acompanhados por  $\mathcal{F}(q_j)$  não são operadores número. É possível, sem perda de generalidade, escolher  $\sin 2\theta = ih/\cos q_j$ . Esta, por sua vez, implica que  $\cos 2\theta = -\sqrt{\cos^2 q_j + h^2}/\cos q_j$  e  $\mathcal{F}(q_j)$  torna-se identicamente nulo. Logo, o operador em (2.33) é descrito em termos de operadores que descrevem a ocupação  $\hat{\mathcal{Z}}_{q_j, \uparrow}^\dagger \hat{\mathcal{Z}}_{q_j, \uparrow}$  e  $\hat{\mathcal{Z}}_{q_j, \uparrow}^\dagger \hat{\mathcal{Z}}_{q_j, \uparrow}$ , isto é,

$$\hat{\mathcal{H}}_{q_j} = 2\sqrt{\cos^2 q_j + h^2} \left[ \hat{\mathcal{Z}}_{q_j, \uparrow}^\dagger \hat{\mathcal{Z}}_{q_j, \uparrow} + \hat{\mathcal{Z}}_{q_j, \downarrow}^\dagger \hat{\mathcal{Z}}_{q_j, \downarrow} \right] - 2\sqrt{\cos^2 q_j + h^2}. \quad (2.34)$$

A interpretação física da transformação de Bogoliubov é a introdução de dois tipos de férmions sem spin que podem ocupar independentemente cada momento  $q_j$ <sup>5</sup>. Esses são as quasi-partículas do sistema que nada mais são que as excitações tratadas como partículas. Assim, o estado de menor energia para um particular  $q_j$  é o estado sem quasi-partículas.

Para um dado  $q_j$ , podemos ter quatro configurações distintas relacionadas a quatro autoenergias  $E_{q_j}$  do Hamiltoniano (2.34). Nenhum férmion, que corresponde a menor energia  $E_{q_j} = -\sqrt{\cos^2 q_j + h^2}$ . Um férmion que corresponde a energia nula  $E_{q_j} = 0$ . Esta configuração é duplamente degenerada, pois temos dois tipos de férmions. E por fim, existe a possibilidade dos dois férmions ocuparem o mesmo  $q_j$ . Neste caso a energia é a máxima possível  $E_{q_j} = \sqrt{\cos^2 q_j + h^2}$ . Para ilustrar melhor este cenário, as quatro configurações para dados  $q_j$  e  $h$  foram desenhadas na figura 2.1.

Para uma dada magnetização, qualquer energia da cadeia é uma combinação das energias  $E_{q_j}$  para cada momento  $q_j$ . Em particular, o estado fundamental

<sup>5</sup>Uma interpretação com maior apelo físico e induzida pela notação adotada pode ser feita. Nesta interpretação os dois férmions são os estados  $m_z = +1/2$  e  $m_z = -1/2$  de um único férmion com spin  $s = 1/2$ . Nesta interpretação (2.34) estaria descrevendo a dinâmica de elétrons itinerantes de momento  $q_j$  e massa  $m$

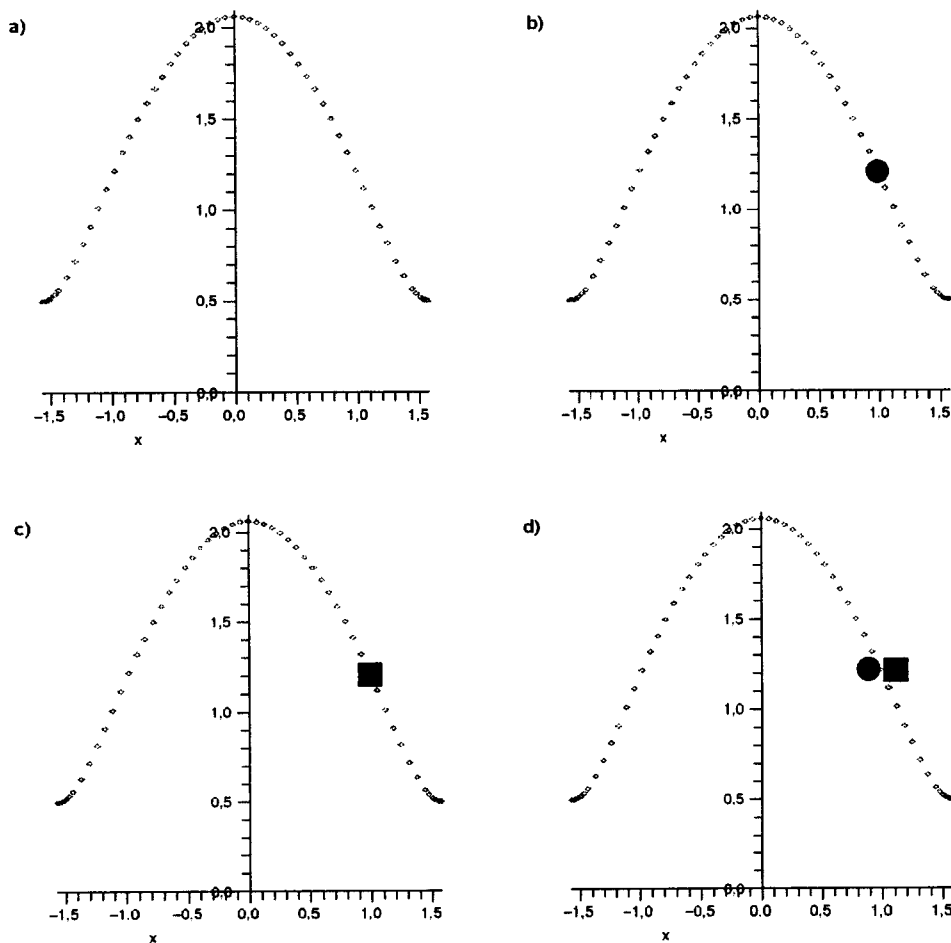


Figura 2.1: Diagrama ilustrando as quatro possíveis configurações de ocupação para um estado de momento  $q_j$ . Aqui a ordenada representa a energia e a abscissa, o momento. A linha pontilhada é a energia  $E_{q_j} = 2\sqrt{\cos^2 q_j + \hbar^2}$ . Em a) não há ocupação. Em b) existe um férmion de um tipo enquanto em c) o outro é quem ocupa. Em d) ambos os férmions possuem o mesmo  $q_j$ .

é o estado que não contém quasi-partícula para todos os estados de momento disponíveis  $q_j$ , ( $j = 0, 1, \dots, L/2-1$ ) dados por (2.22). A menor energia, portanto a energia do estado fundamental  $E_0$ , é obtida quando  $Q = 0$  que caracteriza o setor de magnetização nula. A energia  $E_0$  é dada por

$$E_0 = -2 \sum_{j=0}^{L/2-1} \sqrt{\cos^2 q_j + \hbar^2}. \quad (2.35)$$



Podemos obter o primeiro estado excitado, que é degenerado, adicionando uma quasi-partícula ao estado fundamental. Isto corresponde a alterar o setor de magnetização para  $Q = 1$ , e que de acordo com (2.22) altera os valores de  $q_j = -\pi/2 + 2\pi/L, -\pi/2 + 4\pi/L, \dots, \pi/2$ . Verifica-se que a diferença de energia entre a energia do estado fundamental  $E_0$  e a do primeiro estado excitado  $E_1$  pode ser aproximada, para grandes comprimentos de rede ( $L \gg 1$ ),

$$E_1 - E_0 = 2\sqrt{h^2 + \sin^2\left(\frac{2\pi}{L}\right)} \approx 2\sqrt{h^2 + \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2}, \quad (2.36)$$

Neste limite ( $L \gg 1$ ) temos que  $E_1 - E_0 = 2\sqrt{m^2 + p^2}$ , sendo  $m = h$  e  $p = 2\pi/L$ , que indica uma relação de dispersão energia-momento do tipo relativística, o campo  $h$  fazendo papel de massa de excitação, isto é,

$$E_1 - E_0 = 2|h| + O(L^{-1}). \quad (2.37)$$

Existe, portanto, um gap de energia que é função unicamente da intensidade do campo. Na interpretação em que (2.34) descreve a dinâmica de elétrons estaríamos numa fase isolante.

Para  $h = 0$ , o modelo não possui gaps. Neste caso, o comprimento de correlação  $\xi_c$ , que é inversamente proporcional ao gap, diverge no limite termodinâmico. Como  $\xi_c$  fornece a escala típica de distância para a função de correlação entre os spins nos sítios, quando este diverge o espaçamento da rede pode ser tratado como um infinitésimo e a rede como um contínuo. Nesse caso a física a longas distâncias do modelo é descrita por uma teoria de campo relativística onde as excitações não possuem massa, como esperado, pois o mesmo recai no modelo XY tradicional.

## 2.2 Modelo XY com exclusão

Seja uma cadeia de spins  $1/2$ , contendo  $L$  sítios igualmente espaçados, com condições periódicas de contorno. Para este sistema existe um operador de exclusão  $\hat{\mathcal{P}}_s$  que proíbe qualquer configuração desta cadeia que possua dois sítios com

spin  $+1/2$  que estejam separados por menos de  $s$  sítios. Para  $s = 0$  não há exclusão. Para  $s > 0$ , este operador impõe um vínculo sobre a cadeia, sendo possível interpretar o sítio com spin  $+1/2$  e seus  $s$  vizinhos à direita como um único sítio efetivo com tamanho  $s + 1$ . Isto pode ser feito pois estes sempre possuem spins para baixo. Apresentamos uma ilustração na figura 2.2 onde esta interpretação é representada.

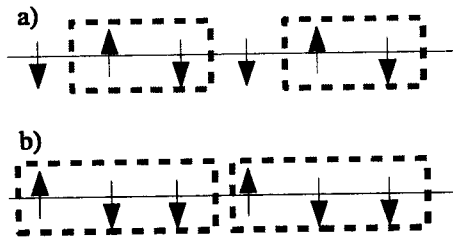


Figura 2.2: Diagrama ilustrando uma configuração de cadeia, de comprimento  $L = 6$ , que satisfaz aos vínculos de exclusão do operador  $\hat{\mathcal{P}}_s$ . Em a), o parâmetro de exclusão é  $s = 1$  e em b)  $s=2$ . As caixas retangulares representam o volume efetivo que um sítio com spin  $+1/2$  ocupa.

Em [11], Alcaraz e Bariev obtiveram a solução exata do modelo XXZ sujeito ao vínculo da exclusão acima mencionado via ansatz de Bethe. Diferentemente de [11], estudamos, nesta dissertação, o modelo XY anisotrópico sujeito ao vínculo de exclusão utilizando-nos da transformação de Jordan-Wigner, definida na seção anterior. O modelo é descrito pelo operador Hamiltoniano

$$\hat{\mathcal{H}} = -\hat{\mathcal{P}}_s \left[ \sum_{k=1}^L \frac{(1+\lambda)}{2} (\hat{\sigma}_k^x \hat{\sigma}_{k+1}^x) + \frac{(1-\lambda)}{2} (\hat{\sigma}_k^y \hat{\sigma}_{k+1}^y) \right] \hat{\mathcal{P}}_s, \quad (2.38)$$

onde  $\lambda \in \mathbb{R}$  e  $\hat{\sigma}_k^x, \hat{\sigma}_k^y$  são as matrizes de Pauli localizadas no sítio  $k$ . Em função das matrizes de levantamento e abaixamento  $\hat{\sigma}_k^\pm = (\hat{\sigma}_k^x \pm i\hat{\sigma}_k^y)/2$  o operador Hamiltoniano (2.38) é dado por

$$\hat{\mathcal{H}} = -\hat{\mathcal{P}}_s \left[ \sum_{k=1}^L (\hat{\sigma}_k^+ \hat{\sigma}_{k+1}^- + \hat{\sigma}_k^- \hat{\sigma}_{k+1}^+) + \lambda (\hat{\sigma}_k^+ \hat{\sigma}_{k+1}^+ + \hat{\sigma}_k^- \hat{\sigma}_{k+1}^-) \right] \hat{\mathcal{P}}_s. \quad (2.39)$$

Note que os operadores que adicionam ou retiram pares de partículas em sítios vizinhos ( $\hat{\sigma}_k^+ \hat{\sigma}_{k+1}^+$  e  $\hat{\sigma}_k^- \hat{\sigma}_{k+1}^-$ ) sob ação dos operadores de projeção  $\hat{\mathcal{P}}_s$  para  $s > 0$  tornam-se irrelevantes. Este fato trivializa o modelo, que passa também a conservar a magnetização, sendo assim um caso particular do modelo estudado em [11]. A novidade será, então, a solução do problema via fermionização.

O primeiro passo em direção à solução do modelo é encontrar um subespaço  $\mathcal{G}$  na qual a ação do operador de exclusão  $\hat{\mathcal{P}}_s$  seja idêntica à ação do operador identidade. Este subespaço é livre de vínculos. Assim, buscaremos uma transformação que leva  $\mathcal{G}$  em um outro subespaço  $\mathcal{G}_P$ , cuja dinâmica é descrita por férmions não-interagentes.

Detalharemos agora os estudos realizados que consistem de duas partes. Na primeira mostraremos como os vetores do subespaço projetado  $\mathcal{G}$  transformam-se em vetores do subespaço  $\mathcal{G}_P$ . Na segunda parte veremos como os operadores de  $\mathcal{G}$  transformam-se em operadores no subespaço  $\mathcal{G}_P$ . Desta maneira poderemos encontrar um novo conjunto de operadores fermiônicos que explorem as simetrias do modelo, que são a invariância translacional e a conservação da magnetização. Para isto utilizaremos a transformação de Jordan-Wigner e a transformada de Fourier. Por fim, iremos obter as correções no espectro de energia devido a finitude da cadeia, utilizando as técnicas de invariância conforme.

### 2.2.1 Transformação do subespaço projetado

O espaço de Hilbert para uma cadeia de  $L$  sítios é composto de vetores  $|a_1, a_2, \dots, a_L\rangle$ , onde  $a_l = \uparrow, \downarrow$ ,  $l = 1, 2, \dots, L$  representa a configuração do  $l$ -ésimo sítio. A dimensão do espaço de Hilbert é então  $2^L$ . Entretanto, a ação do operador  $\hat{\mathcal{P}}_s$  sobre este espaço vetorial, exclui do mesmo todos os vetores que possuem dois spins para cima separados por um número de sítios menor que  $s$ . Portanto, a física que nos interessa, física esta proveniente dos operadores que descrevem a dinâmica em (2.39), atuará tão somente no espaço projetado.

Identificamos dois tipos de configurações de sítios que possibilitam a criação

de um estado que satisfaça ao vínculo de exclusão:

- Sítios ocupados por spin com magnetização na direção  $z$  igual a  $-1/2$  ( $m_z = +1/2$ ) cujos  $s$  vizinhos à esquerda e  $s$  vizinhos à direita possuam o mesmo valor de  $m_z$ .
- Sítios com  $m_z = +1/2$  cujos  $s$  vizinhos à direita possuam  $m_z = -1/2$ .

Desta forma um dado vetor  $|\Phi'\rangle$ , sob ação do operador  $\hat{\mathcal{H}}$  (2.39), transforma-se no vetor  $|\Phi''\rangle$ , que pode ser não nulo se e somente se  $|\Phi''\rangle$  for um produto tensorial das configurações acima. Isto restringe a dinâmica dos operadores cinéticos  $\hat{\sigma}_k^+ \hat{\sigma}_{k+1}^- + \hat{\sigma}_{k+1}^+ \hat{\sigma}_k^-$ .

Ao invés de trabalharmos neste espaço projetado, introduziremos um espaço reduzido onde teremos um Hamiltoniano equivalente sem qualquer projetor adicional, diferentemente de (2.39). Para tal fim, notamos que  $\hat{\mathcal{P}}_s$  atua diferentemente da identidade somente em sítios com  $m_z = +1/2$  e como a identidade para sítios com  $m_z = -1/2$ . Podemos interpretar um sítio com spin  $m_z = +1/2$  e seus  $s$  vizinhos à direita como um novo sítio<sup>6</sup> de  $m_z = +1/2$  de uma rede efetiva de comprimento  $L' < L$

$$|\uparrow\rangle \otimes \prod_{\otimes}^s |\downarrow\rangle \equiv |\Psi_-\rangle. \quad (2.40)$$

Sítios com  $m_z = -1/2$  e seus  $s$  vizinhos com  $m_z = -1/2$ , tanto a direita quanto a esquerda, são equivalentes a um sítio com  $m_z = -1/2$

$$|\downarrow\rangle \equiv |\Psi_+\rangle \quad 2s \text{ vizinhos com } m_z = -1/2.$$

Por exemplo, para  $L = 5, n = 2$  e  $s = 1$ , temos:

$$\begin{aligned} |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle &\rightarrow |\Psi_+\Psi_+\Psi_-\rangle \\ |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle &\rightarrow |\Psi_-\Psi_+\Psi_+\rangle \\ |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle &\rightarrow |\Psi_-\Psi_+\Psi_+\rangle \\ |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle &\rightarrow |\Psi_+\Psi_-\Psi_+\rangle \\ |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle &\rightarrow |\Psi_+\Psi_-\Psi_+\rangle. \end{aligned}$$

<sup>6</sup>Para o caso do sítio com spin  $m_z = +1/2$  encontrar-se localizado numa posição  $k > L - s$ , utilizamos a periodicidade da rede (isto é,  $\hat{\sigma}_{L+j}^- = \hat{\sigma}_j^-$ ), definindo a nova partícula como os sítios  $k$  (spin  $+1/2$ ) e os  $j = k + 1, \dots, L$  além dos sítios  $j = 1, 2, \dots, k + s - L$

Uma vez que cada uma das  $n$  partículas (sítios com  $m_z = +1/2$ ) e seus  $s$  sítios vizinhos são interpretados como uma partícula efetiva, com tamanho  $s + 1$ , o número de sítios  $L'$  da rede efetiva é dado por:

$$L' = L - ns. \quad (2.41)$$

No entanto, a transformação gera uma rede efetiva onde as condições de contorno deixam de ser periódicas, tornando-se torcida ("twisted"). Isto quer dizer que uma partícula efetiva, ao transladar a rede do  $L'$ -ésimo sítio para o primeiro através da ação do operador de translação  $\hat{T}'$  da rede efetiva, ganha uma fase  $\phi$ , isto é,

$$\hat{T}' |\dots \Psi_+\rangle = e^{i\phi} |\Psi_+ \dots\rangle. \quad (2.42)$$

A invariância translacional é então perdida,

$$\left(\hat{T}'\right)^{L'} |\dots \Psi_+\rangle \neq |\dots \Psi_+\rangle. \quad (2.43)$$

É possível, porém, insistir em escolher como base os autovetores do operador de translação  $\hat{T}'$  da rede efetiva, pois como veremos adiante, é possível fazer uma transformação sobre os operadores de levantamento e abaixamento efetivos de tal modo a recuperar a invariância translacional. A base fica descrita por:

$$|\Psi\rangle = \sum_{\xi=0}^{L'-1} \left(\omega' \hat{T}'\right)^{\xi} |\psi\rangle, \quad (2.44)$$

onde  $\omega' = \exp(2i\pi p'/L')$ , com  $p' = 0, 1, \dots, L' - 1$  e  $|\psi\rangle$  é uma configuração de spin qualquer, na rede efetiva. Dado o operador  $\hat{T}$  de translação da rede original, seus autovetores são descritos por:

$$|\Phi\rangle = \sum_{k=0}^{L-1} \left(\omega \hat{T}\right)^k |\varphi\rangle, \quad (2.45)$$

onde  $\omega = \exp(2i\pi p/L)$  com  $p = 0, 1, \dots, L-1$  e  $|\varphi\rangle$  uma configuração qualquer de spin na rede normal. Podemos então obter uma equivalência entre tais estados e a base  $|\Psi\rangle$  da rede efetiva, descrita em (2.44), pois sabemos como cada configuração da cadeia de spin se transforma. Podemos ainda impor que as configurações  $|\varphi\rangle$ ,

da rede normal, sejam tais que todos os sítios localizados nas posições  $k > (L-s)$  estejam desocupados (isto é, não possuam  $m_z = +1/2$ ), uma vez que estas geram a mesma configuração que aquela com o sítio  $k = L-s$  ocupado por uma partícula. Note que estas configurações não ficam proibidas, apenas podemos expressá-las através de translações. Por exemplo,

$$|\Phi\rangle = \sum_{k=0}^4 (\omega \hat{T})^k |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle = \omega \sum_{k=0}^4 (\omega \hat{T})^k |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle \equiv \omega \sum_{\xi=0}^2 (\omega' \hat{T}')^{\xi} |\Psi_+ \Psi_- \Psi_+\rangle. \quad (2.46)$$

O segundo passo foi compreender como a transformação descrita na seção 2.2.1 levaria os operadores do Hamiltoniano definido em (2.39) para um espaço equivalente definindo um Hamiltoniano<sup>7</sup>  $\hat{\mathcal{H}}_R$  mais simples, fornecendo a mesma dinâmica.

Definimos os operadores de levantamento e abaixamento da rede efetiva,  $\hat{\eta}_{\xi}^+$  e  $\hat{\eta}_{\xi}^-$  bem como o operador  $\hat{\eta}_{\xi}^z$  tal que  $[\hat{\eta}_{\xi}^+, \hat{\eta}_{\xi'}^-] = \delta_{\xi, \xi'} \hat{\eta}_{\xi}^z$ . Considerando condições de contorno torcida, o Hamiltoniano que gera a mesma dinâmica que (2.39), mas na rede efetiva, é dado por:

$$\hat{\mathcal{H}}_{\phi} = - \sum_{\xi=1}^{L'-1} (\hat{\eta}_{\xi}^+ \hat{\eta}_{\xi+1}^- + \hat{\eta}_{\xi}^- \hat{\eta}_{\xi+1}^+) - e^{-i\phi} \hat{\eta}_{L'}^+ \hat{\eta}_1^- - e^{i\phi} \hat{\eta}_{L'}^- \hat{\eta}_1^+. \quad (2.47)$$

É importante salientar que  $[\hat{\mathcal{H}}_{\phi}, \sum_{\xi=1}^{L'} \hat{\eta}_{\xi}^z] = 0$ , sendo a magnetização efetiva uma quantidade conservada.

Para obter a fase da condição de contorno torcida, consideraremos alguns exemplos. Sejam os estados, respectivamente, da rede original, com  $s = 1$  e  $L = 5$ , e reduzida, com  $L' = 3$ :

$$|\Phi\rangle = \sum_{k=0}^4 (\omega \hat{T})^k |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle$$

$$|\Psi\rangle = \sum_{\xi=0}^2 (\omega' \hat{T}')^{\xi} |\Psi_+ \Psi_+ \Psi_-\rangle.$$

<sup>7</sup>O índice R indica que determinada quantidade é definida para a cadeia efetiva com tamanho reduzido  $L' = L - ns$

A aplicação de (2.39) no estado  $|\Phi\rangle$  fornece:

$$\hat{\mathcal{H}} \sum_{k=0}^4 (\omega \hat{T})^k |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle = - \sum_{k=0}^4 (\omega \hat{T})^k |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle - \omega \sum_{k=0}^4 (\omega \hat{T})^k |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle. \quad (2.48)$$

Por outro lado, a equação da energia para o estado da rede efetiva fica:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_\phi \sum_{\xi=0}^2 (\omega' \hat{T}')^\xi |\Psi_+ \Psi_+ \Psi_-\rangle = \\ - \sum_{\xi=0}^2 (\omega' \hat{T}')^\xi |\Psi_+ \Psi_- \Psi_+\rangle - e^{-i\phi} \sum_{\xi=0}^2 (\omega' \hat{T}')^\xi |\Psi_- \Psi_+ \Psi_+\rangle. \end{aligned} \quad (2.49)$$

Comparando-se as expressões, temos para  $s = 1$ :

$$\phi = -\frac{2\pi p}{L}. \quad (2.50)$$

Realizando o mesmo procedimento, mas para  $s = 2$ ,  $L = 7$ , e considerando os seguintes estados (da rede normal, e da reduzida):

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} \sum_{k=0}^6 (\omega \hat{T})^k |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle = - \sum_{k=0}^6 (\omega \hat{T})^k |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle - \omega^2 \sum_{k=0}^6 (\omega \hat{T})^k |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle \\ \hat{\mathcal{H}}_\phi \sum_{\xi=0}^2 (\omega' \hat{T}')^\xi |\Psi_+ \Psi_+ \Psi_-\rangle = \\ - \sum_{\xi=0}^2 (\omega' \hat{T}')^\xi |\Psi_+ \Psi_- \Psi_+\rangle - e^{-i\phi} \sum_{\xi=0}^2 (\omega' \hat{T}')^\xi |\Psi_- \Psi_+ \Psi_+\rangle, \end{aligned}$$

temos por comparação que

$$\phi = -\frac{2\pi p}{L} 2. \quad (2.51)$$

Não é difícil convencer-se que o resultado pode ser generalizado para

$$\phi = -\frac{2\pi}{L} ps, \quad (2.52)$$

onde  $s$  é o parâmetro de exclusão e  $p = 0, 1, \dots, L - 1$ .

Finalmente, podemos tornar as condições de contorno periódicas, para a rede efetiva, utilizando a seguinte transformação nos operadores de levantamento  $\hat{\eta}_\xi^+$  e de abaixamento  $\hat{\eta}_\xi^-$ :

$$\hat{\eta}_\xi^\pm \rightarrow e^{\pm i\phi\xi/L'} \hat{\eta}_\xi^\pm. \quad (2.53)$$

Assim, o Hamiltoniano da rede efetiva com condição periódica é descrito por

$$\hat{\mathcal{H}}_R = - \sum_{\xi=1}^{L'} \left[ \left( e^{-i\phi/L'} \right) \hat{\eta}_{\xi}^+ \hat{\eta}_{\xi+1}^- + \left( e^{+i\phi/L'} \right) \hat{\eta}_{\xi}^- \hat{\eta}_{\xi+1}^+ \right]. \quad (2.54)$$

O operador (2.54) fica descrito na forma da cadeia quântica  $XX$ , trivialmente solúvel utilizando a transformação de Jordan-Wigner descrita na seção anterior, onde os operadores  $\hat{\eta}_k^+$ ,  $\hat{\eta}_k^-$  são substituídos pelos operadores fermiônicos  $\hat{\mathcal{C}}_k^{R,\dagger}$ ,  $\hat{\mathcal{C}}_k^R$ . Em termos destes últimos, o Hamiltoniano (2.54) é dado por

$$\hat{\mathcal{H}}_R = - \sum_{\xi=1}^{L'-1} \left[ \left( e^{-i\phi/L'} \right) \hat{\mathcal{C}}_{\xi}^{R,\dagger} \hat{\mathcal{C}}_{\xi+1}^R + \left( e^{+i\phi/L'} \right) \hat{\mathcal{C}}_{\xi+1}^{R,\dagger} \hat{\mathcal{C}}_{\xi}^R \right] - \hat{\mathcal{H}}_R^{\text{sup}}, \quad (2.55)$$

onde  $\hat{\mathcal{H}}_R^{\text{sup}} = (-1)^{N_F+1} \left[ e^{-i\phi/L'} \hat{\mathcal{C}}_L^{R,\dagger} \hat{\mathcal{C}}_1^R - e^{+i\phi/L'} \hat{\mathcal{C}}_L^R \hat{\mathcal{C}}_1^{R,\dagger} \right]$  é o termo de borda, sendo  $N_F$  o autovalor do operador número de férmions efetivos  $\hat{\mathcal{N}}_F = \sum_{\xi=1}^{L'} \hat{\mathcal{C}}_{\xi}^{R,\dagger} \hat{\mathcal{C}}_{\xi}^R$ .

Dependendo da paridade de  $N_F$ , o Hamiltoniano, na formulação fermiônica, possui condição de contorno periódica ( $N_F$  ímpar) ou antiperiódica ( $N_F$  par), ou seja,

$$\hat{\mathcal{C}}_{L'+1}^R = e^{i\pi(N_F+1)} \hat{\mathcal{C}}_1^R.$$

Podemos, como na seção anterior (2.1), buscar um novo conjunto de operadores que explorem a simetria por translações. Ou seja, buscar operadores  $\hat{\mathcal{A}}_{q_j}^{R,\dagger}$  que sejam definidos como a transformada de Fourier dos  $\hat{\mathcal{C}}_k^{R,\dagger}$ . Dessa forma, o Hamiltoniano será facilmente decomposto em blocos disjuntos, cada um indexado pela sua magnetização e número quântico de momento.

Definimos os operadores de criação ( $\hat{\mathcal{A}}_{q_j}^{R,\dagger}$ ) e destruição ( $\hat{\mathcal{A}}_{q_j}^R$ ) de férmions com tamanho  $s+1$  de momento  $q_j$  obtidos pela transformada de Fourier dos operadores de criação e destruição de férmions efetivos  $\hat{\mathcal{C}}_k^{R,\dagger}$ ,  $\hat{\mathcal{C}}_k^R$

$$\hat{\mathcal{A}}_{q_j}^R = \frac{1}{\sqrt{L'}} \sum_{k=1}^{L'} e^{iq_j k} \hat{\mathcal{C}}_k^R, \quad (2.56)$$

$$\hat{\mathcal{A}}_{q_j}^{R,\dagger} = \frac{1}{\sqrt{L'}} \sum_{k=1}^{L'} e^{-iq_j k} \hat{\mathcal{C}}_k^{R,\dagger}. \quad (2.57)$$

Os momenta  $q_j$  são obtidos através da condição de contorno na formulação fermiônica, isto é,

$$\hat{\mathcal{C}}_{L'+1}^{R,\dagger} = \frac{1}{\sqrt{L'}} \sum_{q_j} e^{iq_j L'} e^{iq_j \cdot 1} \hat{\mathcal{A}}_{q_j}^{R,\dagger} = e^{i\pi(N_F+1)} \hat{\mathcal{C}}_1^{R,\dagger}. \quad (2.58)$$



Assim, para  $N_F$  par, os valores de  $q_j$  são

$$q_j = -\pi + \frac{\pi}{L'} + \frac{2\pi j}{L'}, j = 0, 1, \dots, L' - 1. \quad (2.59)$$

Por outro lado, para  $N_F$  ímpar temos

$$q_j = -\pi + \frac{2\pi j}{L'}, j = 0, 1, \dots, L' - 1. \quad (2.60)$$

Entretanto, é conveniente expressar os valores  $q_j$  em termos da magnetização pois dessa maneira, alterando-se o número de férmions a distribuição dos  $q_j$  é corrigida, ficando de acordo com as expressões acima. Para isto, reescrevemos  $\hat{\mathcal{N}}_F$  em termos do operador  $\hat{\mathcal{Q}}' = \hat{\mathcal{M}}'/2$ , que é metade da magnetização na rede efetiva,

$$\hat{\mathcal{N}}_F = \sum_{\xi=1}^{L'} \frac{\hat{\eta}_{\xi}^z}{2} + \frac{L'}{2} = \hat{\mathcal{Q}}' + \frac{L'}{2}. \quad (2.61)$$

Assim, os  $q_j$  assumem os valores

$$q_j = -\frac{\pi}{2} + \frac{\pi Q'}{L'} + \frac{(2j+1)\pi}{L'}, j = 0, 1, \dots, L'-1; Q = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \frac{L'}{2}. \quad (2.62)$$

Utilizando os operadores da transformada de Fourier definidos em (2.56), o operador Hamiltoniano (2.55) é descrito através do operador que conta o número de férmions com momento  $q_j$ , isto é,

$$\hat{\mathcal{H}}_R = -2 \sum_{q_j} \left[ \cos \left( q_j - \frac{\phi}{L'} \right) \hat{\mathcal{A}}_{q_j}^{R\dagger} \hat{\mathcal{A}}_{q_j}^R \right], \quad (2.63)$$

sendo a soma realizada sobre todos os valores de  $q_j$  permitidos em (2.62).

Do modelo XY sem exclusão sabemos que o mesmo possui *gaps* de energia para  $\lambda \neq 0$ , sendo crítico somente para  $\lambda = 0$ . No entanto, com a exclusão, o modelo XY passa trivialmente a ser crítico para qualquer valor de  $\lambda$ . Utilizaremos a seguir as técnicas advindas da invariância conforme para obter a energia do limite termodinâmico, dimensões anômalas de operadores bem como a classe de universalidade, através da anomalia conforme.

### 2.2.2 Análise via invariância conforme

Para obter as dimensões anômalas  $x_{\varphi}$  dos operadores primários  $\hat{\varphi}$  que descrevem o modelo, é necessário obter primeiramente os estados de menor energia

para cada setor de magnetização  $M = 2Q'$  e de momento. É simples verificar que o setor de momento nulo da rede original (portanto  $\phi = 0$  para a rede efetiva) possui o maior número de quasi-momenta  $q_j$  que minimizam a energia.

Assim, para cada setor de magnetização  $M$ , a distribuição de momentos que gera o estado de menor energia é dada por:

$$q_j = -\frac{\pi}{2} + \frac{\pi(Q' + 1)}{L'} + \frac{2\pi j}{L'}, \quad j = 0, 1, \dots, \frac{L'}{2} - (Q' + 1). \quad (2.64)$$

Para tais estados, a soma em (2.63) realiza-se de  $j = 0$  até  $j_{max} = L'/2 - (Q' + 1)$ , isto é,

$$E_{0,0}^{Q',0} = -2 \sum_{j=0}^{j_{max}} \sin\left(\frac{\pi(2j + 1 + Q')}{L'}\right). \quad (2.65)$$

Realizando-se a soma em (2.65) obtem-se

$$E_{0,0}^{Q',0} = -2 \frac{\cos(\pi Q'/L')}{\sin(\pi/L')}. \quad (2.66)$$

Em termos do comprimento real da rede  $L$  e da densidade  $\rho = n/L$ , onde  $n$  é o número de sítios ocupados por spins  $m_z = +1/2$ , temos

$$E_{0,0}^{Q',0} = -2 \frac{\sin(\pi\rho/(1-s\rho))}{\sin(\pi/L(1-s\rho))}, \quad (2.67)$$

onde usamos o fato que  $Q' = (2n - L')/2$ . Temos então as menores energias para qualquer setor de magnetização. Certamente a energia do estado fundamental está entre elas. Note que como o parâmetro de exclusão  $s$  é livre, o estado fundamental pode também mudar de setor de magnetização conforme  $s$  varia. Para evitar o comportamento de campo magnético advindo da exclusão, podemos adicionar um campo magnético externo  $h$  ao sistema, impondo que determinado setor de magnetização contenha o estado fundamental. Para isso, a intensidade de  $h$  deve possuir um valor particular para cada  $s$ . O Hamiltoniano em (2.63) é então modificado com a adição do termo de campo magnético  $h$ ,

$$\hat{\mathcal{H}}_R = - \sum_{q_j} \left[ 2 \cos\left(q_j - \frac{\phi}{L'}\right) + h \right] \hat{\mathcal{A}}_{q_j}^{R,\dagger} \hat{\mathcal{A}}_{q_j}^R. \quad (2.68)$$

Assim, em termos do comprimento real da rede  $L$  e da densidade  $\rho = n/L$ , a menor energia para o estado de momento nulo, no setor de magnetização efetiva

$2Q'$ , é

$$E_{0,0}^{Q',0} = -2 \frac{\sin(\pi\rho/(1-s\rho))}{\sin(\pi/(1-s\rho)L)} - hL(2\rho-1). \quad (2.69)$$

Assintoticamente ( $L \gg 1$ ), a energia do fundamental  $E_{0,0}^{0,0}$  deve ser a do limite termodinâmico além de correções de tamanho finito. A expansão de (2.69) fornece

$$\frac{E_{0,0}^{0,0}}{L} \approx -2 \frac{(1-s\rho)}{\pi} \sin\left(\frac{\pi\rho}{1-s\rho}\right) - h(2\rho-1) + \left(\frac{2\pi}{6L^2(1-s\rho)}\right) \sin\left(\frac{\pi\rho}{1-s\rho}\right). \quad (2.70)$$

Para um modelo invariante por transformações conformes temos a seguinte expansão para a energia do estado fundamental

$$\frac{E_{0,0}^{0,0}}{L} = e_\infty - \frac{v_s c \pi}{6L^2} + o(L^{-2}), \quad (2.71)$$

onde  $v_s$  é a velocidade do som e  $c$  é anomalia conforme. Comparando-se as equações (2.70) e (2.71) temos

$$e_\infty = -2 \frac{(1-s\rho)}{\pi} \sin\left(\frac{\pi\rho}{1-s\rho}\right) - h(2\rho-1) \quad (2.72)$$

$$cv_s = \left(\frac{2}{1-s\rho}\right) \sin\left(\frac{\pi\rho}{1-s\rho}\right). \quad (2.73)$$

Para garantir que a energia  $E_{0,0}^{0,0}$ , de um setor com densidade de partículas  $\bar{\rho}$ , seja a energia do estado fundamental é necessário que  $e_\infty$  seja o menor valor possível, isto é,  $\frac{de_\infty}{d\rho}|_{\bar{\rho}} = 0$ . Essa condição é obtida quando o campo magnético  $h$  satisfaz à equação abaixo

$$-h + \frac{s}{\pi} \sin\left(\frac{\pi\bar{\rho}}{1-s\bar{\rho}}\right) - \cos\left(\frac{\pi\bar{\rho}}{1-s\bar{\rho}}\right) = 0. \quad (2.74)$$

Esta expressão é resolvida numericamente. Da mesma expressão também podemos fixar uma dependência para  $h$  como função da densidade de partículas:

$$h(\rho) = \frac{s}{\pi} \sin\left(\frac{\pi\rho}{1-s\rho}\right) - \cos\left(\frac{\pi\rho}{1-s\rho}\right), \quad (2.75)$$

sendo que para a densidade de partículas  $\bar{\rho}L$ , escolhida como o densidade que caracteriza o estado fundamental, temos  $h(\bar{\rho}) = 0$ .

Para obter a velocidade do som excitamos um férmion do estado fundamental  $E_{0,0}^{0,0}$  para o primeiro estado excitado  $E_P$  e utilizamos a relação de dispersão relativística:

$$E_P - E_{0,0}^{0,0} = P v_s, \quad (2.76)$$

onde  $P$  é o momento e  $v_s$  é a velocidade do som. O primeiro estado excitado da rede normal possui momento  $P = 2\pi/L$ , portanto  $p = 1$ . Logo, a contribuição de  $\phi$  para o operador (2.68) é não nula. A distribuição dos  $q_j$  é dada por

$$q_j = -\frac{\pi}{2} + \frac{\pi\bar{\rho}}{1-s\bar{\rho}} + \frac{\pi(2j+1)}{L'}, \quad j = 0, 1, \dots, L'/2 - (Q' + 2), L'/2 - Q'. \quad (2.77)$$

Assintoticamente ( $L \gg 1$ ), é válido desprezar  $\phi/L' \sim O(L^{-2})$ , e assim temos:

$$E_P = E_{0,0}^{0,0} + \left[ 2 \cos \left( -\pi - \frac{\pi\bar{\rho}}{1-s\bar{\rho}} - \frac{\pi}{L'} \right) - 2 \cos \left( -\pi - \frac{\pi\bar{\rho}}{1-s\bar{\rho}} + \frac{\pi}{L'} \right) \right], \quad (2.78)$$

que resulta em

$$E_P - E_{0,0}^{0,0} = \left[ 4 \sin \left( \frac{\pi\bar{\rho}}{1-s\bar{\rho}} \right) \sin \left( \frac{\pi}{L'} \right) \right] = \frac{2\pi}{L} \left[ \frac{2}{1-s\bar{\rho}} \sin \left( \frac{\pi\bar{\rho}}{1-s\bar{\rho}} \right) \right] + o(L^{-1}). \quad (2.79)$$

Portanto, da relação de dispersão (2.76), a velocidade do som é dada por

$$v_s = \frac{2}{1-s\bar{\rho}} \sin \left( \frac{\pi\bar{\rho}}{1-s\bar{\rho}} \right). \quad (2.80)$$

Este resultado, usando (2.73) implica que a anomalia conforme tem o valor  $c = 1$  para qualquer densidade  $\rho$ .

Outros setores de momento podem ser contemplados ao substituir os  $\beta$  ( $-\beta$ ) férmions de menores (maiores) momenta pelos maiores (menores) momenta disponíveis. Esta configuração é obtida fornecendo-se  $\pm\beta$  unidades de momento a cada partícula. O momento total é não nulo e expresso por

$$P = \pm \frac{2\pi\beta\bar{n}}{L} \quad (2.81)$$

o que implica em

$$p = \beta\bar{n}. \quad (2.82)$$

Como o número quântico de momento  $p$  é alterado de  $\pm\beta\bar{n}$  unidades, é necessário considerar a fase advinda da condição de contorno  $\phi = 2\pi\bar{\rho}s\beta$ . A distribuição dos  $q_j$  é dada por

$$q_k = -\frac{\pi}{2} + (Q' + 1) \frac{\pi}{L'} + \frac{2\pi}{L'} (k + \beta), \quad k = 0, 1, \dots, \frac{L'}{2} - (Q' + 1). \quad (2.83)$$

A energia relacionada a esta nova configuração é então:

$$E_{0,0}^{0,\beta} = -2 \sum_{j=0}^{L'/2-Q'-1} \cos \left( q_j - \frac{2\pi\beta s\bar{\rho}}{L'} \right), \quad (2.84)$$

o que nos dá o comportamento assintótico ( $L \gg 1$ )

$$E_{0,0}^{0,\beta} = E_{0,0}^{0,0} + \frac{2\pi v_s}{L} \beta^2 (1 - s\bar{\rho})^2 + o(L^{-1}), \quad (2.85)$$

onde  $E_{0,0}^{0,0}$  é a energia associada ao estado fundamental. Para uma teoria invariante por transformações conforme, as correções da energia, dos estados excitados, devido à finitude da rede estão relacionadas às dimensões anômalas dos operadores da teoria de campos conforme adjacente. A energia destes estados é dada assintoticamente por

$$E_{0,0}^{0,\beta} = E_{0,0}^{0,0} + \frac{2\pi v_s}{L} x_{0,\beta} + o(L^{-1}), \quad (2.86)$$

onde  $x_{0,\beta}$  é a dimensão anômala do operador primário que denominamos  $\hat{\mathcal{X}}_{0,\beta}$ . Comparando-se (2.85) e (2.86), a dimensão anômala associada é dada por

$$x_{0,\beta} = \beta^2 (1 - s\bar{\rho})^2. \quad (2.87)$$

Em particular, o operador energia é o operador primário  $\hat{\mathcal{X}}_{0,1}$  cuja dimensão anômala é  $x_{0,1} = (1 - s\bar{\rho})^2$ .

Para outros setores de magnetização, a densidade de partículas  $\rho'$  difere do valor da densidade do estado fundamental  $\bar{\rho} = n_0/L$  por uma certa quantidade  $\xi/L$  tal que  $\rho' = \bar{\rho} + \xi/L$ . Como o campo magnético se  $h$  anula somente para o estado fundamental, a energia devido ao campo deve ser considerada. Para o setor de momento nulo, a distribuição de momenta é a mesma de (2.64) com  $n = n_0 + \xi$  e  $Q' \neq 0$ , o que fornece:

$$E_{0,0}^{\xi,0} \approx E_{0,0}^{0,0} + \frac{2\pi v_s}{L} \frac{\xi^2}{4(1 - s\bar{\rho})^2}. \quad (2.88)$$

Analogamente a (2.86), esperamos o comportamento assintótico

$$E_{0,0}^{\xi,0} = E_{0,0}^{0,0} = \frac{2\pi v_s}{L} x_{\xi,0} + o(L^{-1}), \quad (2.89)$$

sendo a dimensão anômala  $x_{\xi,0}$  dada por

$$x_{\xi,0} = \frac{\xi^2}{4(1-s\bar{\rho})^2}. \quad (2.90)$$

Finalmente, considerando estados excitados obtidos por combinação entre os dois tipos de excitação, acima descritos, dar-nos-ão energias  $E_{0,0}^{\alpha,\beta}$  cujo comportamento assintótico é dado por

$$E_{m,\bar{m}}^{\xi,\beta} - E_{0,0}^{0,0} = \frac{2\pi v_s}{L} \left( \frac{\xi^2}{4(1-s\bar{\rho})^2} + \beta^2(1-s\bar{\rho})^2 \right) + o(L^{-1}), \quad (2.91)$$

com  $v_s$  dado por (2.80), o que fornece as dimensões anômalas

$$x_{\xi,\beta} = \frac{\xi^2}{4(1-s\bar{\rho})^2} + \beta^2(1-s\bar{\rho})^2. \quad (2.92)$$

Estados excitados gerais fornecerão as dimensões dos operadores associados à torre conforme dos operadores  $\hat{\mathcal{X}}_{\xi,\beta}$ , isto é, serão estados com comportamento assintótico

$$E_{m,\bar{m}}^{\xi,\beta} - E_{0,0}^{0,0} = \frac{2\pi v_s}{L} \left( \frac{\xi^2}{4(1-s\bar{\rho})^2} + \beta^2(1-s\bar{\rho})^2 + m + \bar{m} \right) + o(L^{-1}), \quad (2.93)$$

sendo  $m, m' = 0, 1, 2, \dots$ . Tais energias estarão associadas aos “filhotes” da torre conforme dos operadores  $\hat{\mathcal{X}}_{\xi,\beta}$ , isto é,

$$x_{\xi,\beta} + m + m'. \quad (2.94)$$

Assim, nossos resultados mostram que com a adição de campo magnético apropriado,  $h = h(\rho)$ , a cadeia XY com exclusão é sempre crítica para  $s > 0$ , governada por uma teoria de campos conforme de carga central  $c = 1$  e com dimensão anômala

$$x_{\alpha,\beta} = \alpha^2 \bar{X} + \frac{\beta^2}{4\bar{X}}, \quad \alpha, \beta = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (2.95)$$

sendo

$$\bar{X} = \frac{1}{4(1-s\rho)^2}. \quad (2.96)$$

No caso  $s = 0$ , reobtem-se o modelo XY e a criticalidade é obtida quando  $\lambda = 0$ . A adição de campos magnéticos neste caso produzem uma teoria conforme com carga central  $c = 1$  e dimensão anômala dada por (2.95) mas agora diferentemente  $\bar{X} = 1/4$  para qualquer densidade.

## Capítulo 3

### Cadeias Quânticas de Spin 1

No capítulo anterior, o espectro de energia de modelos exatamente integráveis de spin  $1/2$  foi obtido através de operadores fermiônicos que tornaram o Hamiltoniano diagonal. Neste capítulo iremos obter o espectro de energia de cadeias de spin 1 utilizando outra técnica: o recente ansatz matricial [12]. Este é equivalente ao ansatz formulado por Hans Bethe para obter o espectro de energia do modelo de Heisenberg de spin  $1/2$ .

Seguiremos [12] enquanto conveniente manter a generalidade. Posteriormente fixar-nos-emos nossa análise no modelo exatamente integrável introduzido na referência [13] e que denominaremos daqui por diante de modelo NDF<sup>1</sup>. Obteremos para tal cadeia a energia do limite termodinâmico bem como as correções das auto-energias devido à finitude da cadeia. No regime crítico, obteremos as quantidades que caracterizam a teoria de campos bidimensional associadas à cadeia: a anomalia conforme e as dimensões anômalas dos operadores. Estas últimas quantidades nos dão o comportamento a longa distância das funções de correlação e relacionam-se com os expoentes críticos da cadeia.

Mostraremos que, no regime de criticalidade, a cadeia é governada por uma teoria de campos com anomalia conforme  $c = 1$  analogamente ao que ocorre com a cadeia XXZ de spin  $1/2$  em seu respectivo regime crítico. Por fim, estudando o

---

<sup>1</sup>Tal denominação será usada pelo fato do Hamiltoniano ter uma matriz associada cuja dependência espectral não é na forma de diferença.



espectro de energia, nossos resultados indicam que o modelo possui também uma transição de fase quântica de primeira ordem.

### 3.1 Ansatz do Produto Matricial

Cadeias de spin 1 podem ser convenientemente interpretadas como operadores que descreve a dinâmica de partículas numa rede. Em tal interpretação os estados magnéticos  $\hat{\sigma}_k^z = -1, 0, 1$  corresponderiam à ocupação do sítio  $k$  por 0, 1 e 2 partículas, respectivamente.

Seguindo [12], as interações entre dois sítios podem ser descritas através de uma notação compacta. Nesta notação, a interação em que dois spins próximos com ocupação  $(\mu, \nu)$  ( $\mu, \nu = 0, 1, 2$ ) são levados à ocupação  $(\alpha, \beta)$  é dada por  $\Gamma_{\mu\nu}^{\alpha\beta}$ . A classe de Hamiltonianos que estaremos considerando é aquela com simetria  $U(1)$ , manifestada, na notação que estamos considerando, na conservação global do número de partículas. Neste caso, as interações possíveis  $\Gamma_{\mu\nu}^{\alpha\beta}$  são tais que  $\mu + \nu = \alpha + \beta$ .

A densidade de Hamiltoniano geral que estaremos considerando é convenientemente expressa em termos das matrizes  $3 \times 3$  de Weyl  $E^{i,j}$ , cujos elementos de matriz são dados por  $(E^{i,j})_{n,m} = \delta_{n,i}\delta_{m,j}$ , ( $n, m, i, j = 0, 1, 2$ ):

$$\hat{\mathcal{H}}_{k,k+1} = - \sum_{\alpha,\beta,\mu,\nu=0}^2 \Gamma_{\mu\nu}^{\alpha\beta} E_k^{\mu,\alpha} E_{k+1}^{\nu\beta} + \Gamma_{0,0}^{0,0}. \quad (3.1)$$

Para exemplificar a ação do operador acima podemos considerar sua ação sobre o vetor  $|\varphi\rangle = |-1, 0\rangle \equiv |0, 1\rangle$  que descreve dois sítios vizinhos considerando-se as projeções de spin no eixo z ou em termos de ocupação de partículas, respectivamente. As matrizes de Weyl  $E_k^{i,j}$  localizadas no sítio  $k$  simplesmente mudam a ocupação deste sítio de  $j$  partículas para  $i$ . Dessa maneira,  $OpH_{k,k+1}|\varphi\rangle = -\Gamma_{01}^{10}|1, 0\rangle$  em termos de ocupação de partícula.

O operador Hamiltoniano que descreve as interações presentes na cadeia periódica de  $L$  sítios é então dada pela composição de operadores de dois sítios para

cada sítio

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{k=1}^L \hat{\mathcal{H}}_{k,k+1}. \quad (3.2)$$

O ansatz descrito em [12] para a solução exata do modelo, pressupõe que para cada autovetor associado a  $\hat{\mathcal{H}}$  exista um conjunto de matrizes que formam produtos associativos com uma relação unívoca com as possíveis configurações das “partículas” da cadeia. A existência de álgebras bem definidas implicam em condições que fixam os possíveis valores do espectro. O espectro é obtido em termos de equações não lineares idênticas às obtidas pelo tradicional ansatz de Bethe coordenada [13]. Faremos uma brevíssima descrição de tal ansatz aplicado à cadeias de spin 1, uma vez que os cálculos completos bem como as idéias encontram-se em [12].

Podemos expressar as auto-funções de (3.2), caracterizadas pelo momentum linear  $P = \frac{2\pi}{L}l$  ( $l = 0, 1, \dots, L-1$ ), para um estado de  $n$  partículas como combinações lineares dos vetores que descrevem as posições  $x_l, l = 1, \dots, n$  das partículas:

$$|\Psi_{n,P}\rangle = \sum_{(x_1, \dots, x_n)} f(x_1, \dots, x_n) |x_1, \dots, x_n\rangle, \quad (3.3)$$

onde a soma é realizada sobre as todas posições possíveis mantendo-se o ordenamento  $1 \leq x_1 \leq x_2 \leq \dots \leq x_n \leq L$ . As amplitudes  $f(x_1, \dots, x_n)$  são, no ansatz matricial, dadas pelo traço do produto de matrizes que caracterizam a ocupação do  $k$ -ésimo sítio da rede. Aos sítios vazios associamos a matriz  $E$ , aos sítios ocupação simples associamos  $A$  e por fim aos sítios com dupla ocupação associamos a matriz  $BE^{-1}B$ . Assim, o ansatz consiste em fazer-se a associação:

$$f(x_1, \dots, x_n) = \text{Tr} [E^{x_1-1} A E^{x_2-x_1-1} A \dots A E^{x_n-x_{n-1}-1} \Omega_P]. \quad (3.4)$$

Além das matrizes  $E$  e  $A$  introduzimos em (3.4) a matriz  $\Omega_P$  que possibilitará a fixação do momento.

O fato de (3.3) ter um estado de momento  $P$  bem definido implica na restrição  $f(x_1 + m, x_2 + m, \dots, x_n + m) = e^{-imP} f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ . Esta última restrição é imediatamente satisfeita caso  $A, B, E$  satisfaçam às relações de comutação com

$\Omega_P$ :

$$E\Omega_P = e^{-iP}\Omega_P E, \quad A\Omega_P = e^{-iP}\Omega_P A, \quad B\Omega_P = e^{-iP}\Omega_P B. \quad (3.5)$$

Como em [12] as restrições impostas pelo fato de  $|\Psi_{n,P}\rangle$  ser um autovetor de (3.2) implicam que as matrizes  $A, B$  são decompostas num conjunto de matrizes  $\{A_{k_j}, B_{k_j}\}, j = 1, \dots, n$ , dependentes de um parâmetro espectral  $\{k_j\}$ , isto é,

$$A = \sum_j^n A_{k_j} E, \quad B = \sum_j^n B_{k_j} E, \quad (3.6)$$

sendo as relações de comutação de  $A_{k_j}, B_{k_j}$  e  $E$  dadas por

$$A_{k_j} E = e^{-ik_j} E A_{k_j}, \quad A_{k_j}^2 = 0, \quad (3.7)$$

e

$$B_{k_j} E = e^{-ik_j} E B_{k_j}, \quad B_{k_j}^2 = 0. \quad (3.8)$$

Resolvemos inicialmente o caso de uma rede contendo uma partícula, e com as informações advindas, resolvemos o caso de duas partículas, três, etc. Durante este processo, surgem equações de consistência, as quais *devem* ser satisfeitas para que um modelo seja exatamente integrável.

Para o caso de uma partícula  $n = 1$ , temos o vetor

$$|\Psi_1\rangle = \sum_{x_1=1}^L \text{Tr} [E^{x_1-1} A E^{L-x_1} \Omega_P] |x_1\rangle. \quad (3.9)$$

Aplicando-se o Hamiltoniano (3.2) neste vetor, temos

$$\hat{\mathcal{H}} |\Psi_1\rangle = \epsilon_1 |\Psi_1\rangle, \quad (3.10)$$

que resulta em

$$\begin{aligned} \epsilon_1 \text{Tr} [E^{x_1-1} A E^{L-x_1} \Omega_P] &= -\Gamma_{01}^{10} \text{Tr} [E^{x_1-2} A E^{L-x_1+1} \Omega_P] - \Gamma_{10}^{01} \text{Tr} [E^{x_1} A E^{L-x_1-1} \Omega_P] \\ &+ (2\Gamma_{00}^{00} - \Gamma_{10}^{10} - \Gamma_{01}^{01}) \text{Tr} [E^{x_1-1} A E^{L-x_1} \Omega_P]. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Usando-se (3.7) e impondo<sup>2</sup> que  $\text{Tr} [E^{x_1-1} A E^{L-x_1} \Omega_P] \neq 0$ , temos a energia para o estado de uma partícula

$$\epsilon_1(k_1) = -(\Gamma_{01}^{10} e^{ik_1} + \Gamma_{10}^{01} e^{-ik_1}) + 2(\Gamma_{00}^{00} - \Gamma_{10}^{10} - \Gamma_{01}^{01}). \quad (3.12)$$

<sup>2</sup>Caso contrário o vetor teria norma nula.

Por fim, a relação entre o parâmetro  $k_1$  e o momento é estabelecida através da propriedade cíclica do traço:

$$\text{Tr} [E^{x_1-1} A_{k_1} E^{L-1} \Omega_P] = e^{-iP} \text{Tr} [E^{x_1} A_{k_1} E^{L-2} \Omega_P] = e^{-ik_1} \text{Tr} [E^{x_1} A_{k_1} E^{L-2} \Omega_P], \quad (3.13)$$

que implica

$$P = k_1 = \frac{2\pi}{L} l, l = 0, 1, \dots, L-1. \quad (3.14)$$

Para  $n = 2$ , a equação de autovalores aplicada às configurações em que as partículas estejam a distâncias maiores que o espaçamento da rede implicam que a energia e o momento são dados por

$$\epsilon_2 = \sum_{j=1}^2 \epsilon_1(k_j), P = \sum_{j=1}^2 k_j, \quad (3.15)$$

sendo  $\epsilon_1(k)$  dada por (3.12). Por outro lado, as equações de autovalores aplicadas às configurações com partículas próximas ( $x_2 = x_1 + 1$  ou  $x_2 = x_1$ ) fornecem duas novas equações que devem ser consistentes com a energia obtida anteriormente (3.12). São elas

$$N(k_i, k_j) A_{k_i} A_{k_j} + N(k_j, k_i) A_{k_j} A_{k_i} = C_1(k_i, k_j) B_{k_i} B_{k_j} + C_1(k_j, k_i) B_{k_j} B_{k_i}, \quad (3.16)$$

e

$$C_2(k_i, k_j) (e^{ik_j} A_{k_i} A_{k_j} + e^{ik_i} A_{k_j} A_{k_i}) = C_0(k_i, k_j) (B_{k_i} B_{k_j} + B_{k_j} B_{k_i}), \quad (3.17)$$

onde

$$C_0(k_i, k_j) = \Gamma_{01}^{10} (e^{ik_i} + e^{ik_j}) + \Gamma_{10}^{01} (e^{ik_i} + e^{ik_j}) e^{i(k_i+k_j)} - \Gamma_{02}^{20} - \Gamma_{20}^{02} e^{i(k_i+k_j)} + (2\Gamma_{10}^{10} + 2\Gamma_{01}^{01} - 2\Gamma_{00}^{00} - \Gamma_{20}^{20} - \Gamma_{02}^{02}), \quad (3.18)$$

$$C_1(k_i, k_j) = \Gamma_{11}^{20} + \Gamma_{11}^{02} e^{i(k_i+k_j)}, \quad (3.19)$$

$$C_2(k_i, k_j) = \Gamma_{02}^{11} + \Gamma_{20}^{11} e^{i(k_i+k_j)}. \quad (3.20)$$

Substituindo (3.17) em (3.16) obtemos a relação de comutação entre as matrizes  $A_{k_j}$

$$A_{k_i} A_{k_j} = S_{ij}^{ji} A_{k_j} A_{k_i}, \quad (3.21)$$

onde  $S_{ij}^{ji}$  é dada por

$$S_{ij}^{ji} = -\frac{C^0(k_j, k_i) N(k_j, k_i) - e^{ik_j} C^1(k_j, k_i) C^2(k_j, k_i)}{C^0(k_i, k_j) N(k_i, k_j) - e^{ik_i} C^1(k_i, k_j) C^2(k_i, k_j)}. \quad (3.22)$$

Desta relação de comutação obtemos uma nova equação que fixa os possíveis valores dos parâmetros  $k_j$ . Esta equação é obtida separando-se duas matrizes  $A_{k_i} A_{k_j}$ , inicialmente em sítios contíguos, por  $L$  sítios através da propriedade cíclica do traço e então retornando à configuração original, desta vez utilizando as relações de comutação (3.7) e (3.21):

$$\text{Tr} [A_{k_1} A_{k_2} E^L \Omega_P] = \text{Tr} [A_{k_2} E^L \Omega_P A_{k_1}] = e^{ik_1 L} \text{Tr} [A_{k_2} A_{k_1} E^L \Omega_P], \quad (3.23)$$

que implica no sistema de equações

$$e^{ik_1 L} = -S_{12}^{21}, \quad e^{ik_2 L} = -S_{21}^{12}. \quad (3.24)$$

Tais equações restringem os possíveis valores de  $k_1$  e  $k_2$ , que passam a ser funções dos acoplamentos  $\Gamma_{\alpha\beta}^{\mu\nu}$ . Obtidas as soluções  $k_1, k_2$ , os autovalores da energia e momento são obtido através da equação (3.15).

Para  $n = 3$  temos duas novas equações de compatibilidade (quando  $x_3 = x_2 + 1, x_2 = x_1 + 1$  e  $x_3 = x_2 + 1, x_2 = x_1$ ), enquanto que  $n = 4$  temos a última equação de compatibilidade ( $x_2 = x_1, x_3 = x_4 = x_2 + 1$ ). Estas três equações são dadas por:

$$\sum' [D_1(k_1, k_2, k_3) N(k_1, k_2) C_0(k_2, k_3) + e^{i(k_2+k_3)} [\Gamma_{20}^{11} C_1(k_2, k_3) - \Gamma_{21}^{12} N(k_2, k_3)] \times C_1(k_1, k_2)] C_1(k_1, k_3) A_{k_1} A_{k_2} A_{k_3} = 0, \quad (3.25)$$

$$\sum' [D_2(k_1, k_2, k_3) N(k_2, k_3) C_0(k_1, k_2) + e^{ik_3} [\Gamma_{02}^{11} C_1(k_1, k_2) - \Gamma_{12}^{21} N(k_1, k_2)] \times C_1(k_2, k_3)] C_1(k_1, k_3) A_{k_1} A_{k_2} A_{k_3} = 0, \quad (3.26)$$

$$\sum' [D_4(k_1, k_2, k_3, k_4) N(k_1, k_2) N(k_4, k_4) + \Gamma_{20}^{11} e^{i(k_2+k_3+k_4)} C_1(k_1, k_2) N(k_3, k_4) + \Gamma_{02}^{11} N(k_1, k_2) C_1(k_2, k_3)] C_1(k_1, k_3) C_1(k_1, k_4) A_{k_1} A_{k_2} A_{k_3} A_{k_4} = 0, \quad (3.27)$$

onde as somas são efetuadas sobre todas as permutações possíveis dos  $k_j, j =$

$1, \dots, 4$ , e os coeficientes  $D_k, k = 1, 2, 4$  são dados por

$$D_1(k_1, k_2, k_3) = \Gamma_{01}^{10} + e^{i(k_1+k_2+k_3)}\Gamma_{20}^{02} - e^{ik_3}(\Gamma_{00}^{00} + \Gamma_{21}^{21} - \Gamma_{01}^{01} - \Gamma_{20}^{20}), \quad (3.28)$$

$$D_2(k_1, k_2, k_3) = \Gamma_{02}^{20} + e^{i(k_1+k_2+k_3)}\Gamma_{10}^{01} - e^{i(k_2+k_3)}(\Gamma_{00}^{00} + \Gamma_{12}^{12} - \Gamma_{10}^{10} + \\ - \Gamma_{02}^{02}), \quad (3.29)$$

$$D_4(k_1, k_2, k_3, k_4) = \Gamma_{02}^{20} + \Gamma_{20}^{02}e^{i(k_1+k_2+k_3+k_4)} - e^{i(k_3+k_4)}(\Gamma_{22}^{22} + \Gamma_{00}^{00} - \Gamma_{02}^{02} + \\ - \Gamma_{20}^{20}). \quad (3.30)$$

Estas novas equações restringem os possíveis valores que os acoplamentos  $\Gamma_{\alpha,\beta}^{\mu,\nu}$  podem assumir para não perder a consistência da álgebra.

Da condição cíclica do traço obtemos, conforme realizado para  $n = 2$ , as equações que definem os valores dos parâmetros espectrais  $k_j$

$$e^{ik_j L} = (-1)^{n-1} \prod_{q=1, q \neq j}^n S_{jq}^{qj}, \quad j = 1, \dots, n. \quad (3.31)$$

De posse de um conjunto  $k_j, j = 1, \dots, n$  para um estado de  $n$  partículas e de momento  $P = \sum_{j=1}^n k_j$ , a energia é então dada por

$$\epsilon_n(k_1, \dots, k_n) = - \sum_{j=1}^n [\Gamma_{01}^{10}e^{ik_j} + \Gamma_{10}^{01}e^{-ik_j} - 2(\Gamma_{00}^{00} - \Gamma_{10}^{10} - \Gamma_{01}^{01})]. \quad (3.32)$$

Uma vez escolhidos os acoplamentos que satisfaçam (3.25)-(3.27) o modelo é exatamente integrável pois não aparecem condições adicionais para  $n > 4$ .

## 3.2 Modelos exatamente integráveis

Os modelos exatamente integráveis de spin 1 que satisfazem ao ansatz matricial devem possuir acoplamentos que satisfaçam às restrições impostas pelas equações (3.25)-(3.27). Para resolver tais equações consideramos as mesmas como equações polinomiais nas variáveis  $x_j = e^{ik_j}$  ( $j = 1, 2, 3, 4$ ). Como tais equações devem ser satisfeitas para quaisquer valores de  $\{x_j\}$ , impomos a nulidade de todos os coeficientes das mesmas. Tal condição nos dará restrições aos acoplamentos  $\Gamma_{\mu\nu}^{\alpha\beta}$  que tentamos resolver utilizando o manipulador algébrico *Maple*. O algoritmo foi bastante simples. Primeiramente escrevemos as equações (3.25) e (3.26)

e destas obtivemos um conjunto  $\mathcal{Q}_1$  formado pelos seus coeficientes<sup>3</sup>. Como cada coeficiente é uma função dos acoplamentos  $\Gamma_{ij}^{kl}$ , selecionamos um subconjunto  $\mathcal{P}_1$  formado apenas por coeficientes que são polinômios de ordem  $p \leq 4$  em  $\Gamma_{ij}^{kl}$ . Resolvendo-se este subconjunto obtem-se  $m_1$  raízes. Substitui-se uma raiz no conjunto  $\mathcal{Q}_1$  e seleciona-se um novo subconjunto  $\mathcal{Q}_2$  de equações que devem ser resolvidas. O procedimento é repetido até que todos os coeficientes sejam nulos.

Com tal procedimento fomos capazes de reobter soluções bem conhecidas na literatura: o modelo Fateev-Zamolodchikov[15] que corresponde a:

$$\begin{aligned} \Gamma_{00}^{00} = \Gamma_{22}^{22} = 0, & \quad \Gamma_{01}^{01} = \Gamma_{21}^{21} = \Gamma_{20}^{02} = \Gamma_{02}^{20} = -1, \\ \Gamma_{01}^{10} = \Gamma_{10}^{01} = \Gamma_{12}^{21} = \Gamma_{21}^{12} = 1, & \quad \Gamma_{02}^{11} = \Gamma_{20}^{11} = \Gamma_{11}^{02} = \Gamma_{11}^{20} = 2 \cos \gamma, \\ \Gamma_{02}^{02} = \Gamma_{20}^{20} = -3 + 4 \sin^2 \gamma, & \quad \Gamma_{10}^{10} = \Gamma_{12}^{12} = -1 + 4 \sin^2 \gamma = \Gamma_{11}^{11} + 1, \end{aligned}$$

com  $\gamma$  sendo um parâmetro livre; o modelo Izergin-Korepin[16], cujos acoplamentos são dados por

$$\begin{aligned} \Gamma_{01}^{10} = \Gamma_{10}^{01} = \Gamma_{21}^{12} = \Gamma_{12}^{21} = 1, & \quad \Gamma_{00}^{00} = \Gamma_{01}^{01} = \Gamma_{10}^{10} = 0, & \quad \Gamma_{02}^{20} = \Gamma_{20}^{02} = \frac{\cosh \gamma}{\cosh 3\gamma}, \\ \Gamma_{11}^{20} = \Gamma_{20}^{11} = \frac{\cosh 2\gamma}{\cosh 3\gamma} e^{2\gamma}, & \quad \Gamma_{02}^{11} = \Gamma_{11}^{02} = -\frac{\cosh 2\gamma}{\cosh 3\gamma} e^{-2\gamma}, & \quad \Gamma_{11}^{11} = 2 \cosh \gamma \frac{\cosh 2\gamma}{\cosh 3\gamma}, \\ \Gamma_{02}^{02} = \Gamma_{20}^{20} = \Gamma_{02}^{20} + 2\Gamma_{11}^{11} \sinh^2 \gamma, & \quad \Gamma_{12}^{12} = \Gamma_{02}^{02} + \Gamma_{02}^{20} e^{-4\gamma}, & \quad \Gamma_{21}^{21} = \Gamma_{02}^{02} + \Gamma_{02}^{20} e^{4\gamma}, \\ \Gamma_{22}^{22} = 2(\Gamma_{02}^{02} + \Gamma_{02}^{20} \cosh 4\gamma), & & \end{aligned}$$

onde  $\gamma$  é um parâmetro livre; e o modelo NDF obtido em [13], e cujos acoplamentos são dados por

$$\begin{aligned} \Gamma_{10}^{01} = \Gamma_{01}^{10} = 1, & \quad \Gamma_{12}^{21} = \Gamma_{21}^{12} = \epsilon, & \quad \Gamma_{20}^{02} = \Gamma_{02}^{20} = t_p, \\ \Gamma_{11}^{20} = \Gamma_{20}^{11} = e^{i\pi/3} \sqrt{t_p^2 - 1}, & \quad \Gamma_{02}^{11} = \Gamma_{11}^{02} = -\epsilon e^{-i\pi/3} \sqrt{t_p^2 - 1}, & \quad \Gamma_{10}^{10} = \Gamma_{01}^{01} = 0, \\ \Gamma_{20}^{20} = \Gamma_{02}^{02} = \frac{1}{2} \left( \frac{2-\epsilon}{t_p} + t_p \right), & \quad \Gamma_{12}^{12} = \frac{1}{2} \left( \frac{2-\epsilon}{t_p} - i\sqrt{3}t_p \right), & \quad \Gamma_{21}^{21} = \frac{1}{2} \left( \frac{2-\epsilon}{t_p} + i\sqrt{3}t_p \right), \\ \Gamma_{11}^{11} = -\epsilon t_p, & \quad \Gamma_{22}^{22} = \frac{2-\epsilon}{t_p}, & \quad \Gamma_{00}^{00} = 0, \end{aligned}$$

onde  $t_p$  é um parâmetro livre e  $\epsilon = \pm 1$ .

Mais ainda, nossa análise mostrou a existência de um possível novo Hamiltoniano exatamente integrável. Utilizamos o termo possível pois estamos, no

<sup>3</sup> Neste ponto podemos escolher alguma simetria desejada para a hamiltoniana de dois sítios como, por exemplo,  $\Gamma_{ij}^{kl} = \Gamma_{ji}^{lk}$ .

momento, avaliando cautelosamente se tal modelo não é apenas uma representação diferente de um modelo já reportado na literatura. Tal solução corresponde a um Hamiltoniano hermitiano cujos acoplamentos, parametrizados por  $\sigma, \zeta \in \mathbb{R}$ , são dados por

$$\begin{aligned} \Gamma_{10}^{01} = \Gamma_{01}^{10} &= 1, & \Gamma_{12}^{21} = \Gamma_{21}^{12} &= \zeta^2, & \Gamma_{10}^{10} = \Gamma_{01}^{01} &= \sigma, \\ \Gamma_{11}^{20} = \Gamma_{20}^{11} = \Gamma_{11}^{02} = \Gamma_{02}^{11} &= \zeta, & \Gamma_{20}^{02} = \Gamma_{02}^{20} &= \sqrt{\zeta^4 - \zeta^2 + 1}, & \Gamma_{11}^{11} &= 2\sigma, \\ \Gamma_{20}^{20} = \Gamma_{02}^{02} &= 2\sigma + \sqrt{\zeta^4 - \zeta^2 + 1}, & \Gamma_{12}^{12} = \Gamma_{21}^{21} &= 3\sigma + \sqrt{\zeta^4 - \zeta^2 + 1}, & \Gamma_{00}^{00} &= 0. \end{aligned}$$

O acoplamento  $\Gamma_{22}^{22}$  embora ainda não tenha sido obtido será obtido a partir da equação de 4 corpos (3.27), podendo ser isolado e expresso em termos de uma combinação dos demais. Este modelo não possui a simetria por inversão dos spins  $+1$  por  $-1$  e vice-versa para qualquer  $\sigma$  e  $\zeta$  (por exemplo  $\Gamma_{01}^{10} \neq \Gamma_{12}^{21}$ ). Portanto, também não se enquadra nos modelos de spin 1 obtidos em [18]. No ponto particular  $\zeta = \pm 1, 0$ , o modelo recobra a simetria por inversão. Esperamos em futuro próximo dar continuidade ao estudo da cadeia acima obtida. É importante mencionar que enquanto os modelo Fateev-Zamolodchikov e Izergin-Korepin foram extensivamente estudados ao longo dos anos, a física do modelo NDF é totalmente desconhecida. Assim, para destacarmos nossos estudos no modelo acima apresentaremos os mesmos em um novo capítulo desta dissertação.



# Capítulo 4

## O modelo NDF

Neste capítulo descreveremos o modelo NDF de spin 1, identificado por Alcazar e Bariev em 2001 e descrito em [13].

É interessante enfatizar que este modelo não possui simetria pela transformação que leva os sítios com spin +1 (2 partículas) em sítios com spin -1 (0 partículas) e vice-versa. Também *não* possui invariância com respeito à reflexão para qualquer valor de  $t_p$ , isto é,

$$\Gamma_{cd}^{ab} \neq \Gamma_{dc}^{ba}, \Gamma_{cd}^{ab} \neq \Gamma_{ba}^{dc}.$$

Esta ausência de simetria coloca o modelo em uma categoria distinta daquelas obtidas em [18]. Ao invés de apresentarmos o modelo como em [13], enunciaremos o modelo numa versão “simetrizada”<sup>1</sup> com respeito a troca  $0 \leftrightarrow 2$  e  $1 \leftrightarrow 1$ , para  $\epsilon = 1$ . Tal simetrização é possível ao levarmos em conta que o modelo possui uma invariância  $U(1)$  expressa pela comutação  $[\hat{S}^z, \hat{\mathcal{H}}] = 0$ , o que nos permite a introdução de um campo magnético sem destruir a integrabilidade do modelo. A versão simetrizada do modelo é dada por

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{k=1}^L \hat{\mathcal{H}}_{k,k+1}, \quad (4.1)$$

---

<sup>1</sup>Usamos aqui o termo entre aspas porque a simetrização não é perfeita. Apenas a parte real dos acoplamentos é simetrizada.

sendo

$$\hat{\mathcal{H}}_{k,k+1} = \left( \begin{array}{c|c|c|c} 0 & & & \\ \hline & -\frac{1}{4t_p} & 1 & \\ & 1 & -\frac{1}{4t_p} & \\ \hline & & -t_p - \frac{1}{2t_p} & \Gamma_{20}^{11} \quad \Gamma_{02}^{11} \\ & & \Gamma_{20}^{11} & \frac{t_p}{2} \quad t_p \\ & & \Gamma_{02}^{11} & t_p \quad \frac{t_p}{2} \\ \hline & & & -\frac{1}{4t_p} - \zeta \quad 1 \\ & & & 1 \quad -\frac{1}{4t_p} + \zeta \\ \hline & & & 0 \end{array} \right), \quad (4.2)$$

onde  $\zeta = i\sqrt{3}t_p$ ,  $\Gamma_{20}^{11} = e^{i\pi/3}\sqrt{t_p^2-1}$ ,  $\Gamma_{02}^{11} = -e^{-i\pi/3}\sqrt{t_p^2-1}$ . O ordenamento da base utilizada foi  $|00\rangle, |10\rangle, |01\rangle, |11\rangle, |20\rangle, |02\rangle, |12\rangle, |21\rangle$  e  $|22\rangle$ , e apresentamos apenas os elementos de matriz não-nulos. Em tal base a matriz (4.2) é separada em blocos disjuntos, onde cada setor possui um número  $n = 0, 1, 2, 3$  ou 4 de partículas.

O caráter não-hermitiano da matriz acima não representa um problema para a mecânica estatística pois a função de partição é definida como o traço do operador, que é real para  $t_p \in \mathbb{R}$ .

Uma interessante quantidade associada à integrabilidade dos modelos é a matriz de espalhamento  $S_{qp}^{pq}$  obtidas usando-se os acoplamentos que definem  $\hat{\mathcal{H}}$  em (3.22). Para  $\epsilon = 1^2$ , temos

$$S_{qp}^{pq} = -\frac{t^2 x_p^2 x_q^2 - t^2 x_q^2 - t x_p^2 x_q + t^2 - t x_p + x_p x_q}{t^2 x_p^2 x_q^2 - t^2 x_p^2 - t x_p x_q^2 + t^2 - t x_q + x_p x_q}, \quad (4.4)$$

sendo que denotamos  $x_p = e^{ik_p}$  e  $x_q = e^{ik_q}$ .

---

<sup>2</sup>Para  $\epsilon = -1$  temos

$$S_{qp}^{pq} = -\frac{t^2 x_p^2 x_q^2 + t^2 x_q^2 - t x_p^2 x_q - 2 t x_p x_q^2 + t^2 - t x_p - 2 t x_q + 3 x_p x_q}{t^2 x_p^2 x_q^2 + t^2 x_p^2 - 2 t x_p^2 x_q - t x_p x_q^2 + t^2 - 2 t x_p - t x_q + 3 x_p x_q}. \quad (4.3)$$

Nesta dissertação estudaremos apenas sobre o ramo  $\epsilon = 1$  do modelo e consideramos  $t_p$  real e positivo ( $t_p > 0$ ). Uma das características de nosso Hamiltoniano é o seu caráter não hermitiano. Contudo, como o traço do mesmo é real para qualquer valor de  $t_p$ , isto não representa nenhuma dificuldade física visto que a função de partição do modelo  $Z = \text{Tre}^{-\beta\hat{H}}$  será real.

No ponto  $t_p = 1$ , o modelo exhibe uma nova simetria, pois agora o número de sítios com simples e dupla ocupação são quantidades independentemente conservadas. Neste ponto, se nos restringirmos aos setores onde não existem ocupação dupla, o modelo pode ser interpretado como uma cadeia quântica XXZ. Este ponto será melhor abordado na seção 4.3.

Diagonalizando<sup>3</sup> numericamente a Hamiltoniana NDF em cadeias de  $L = 2, 3, \dots, 20$  sítios, verificamos que para  $t_p$  arbitrário o estado fundamental ocorre no setor de magnetização nula ou, equivalentemente, no setor onde o número de partículas  $n = L$ . Mais ainda, verificamos que todas as energias dos setores com densidade  $\rho$  são idênticas às do setor  $\rho' = 2 - \rho$ .

## 4.1 Parametrização do modelo NDF

O primeiro passo em direção à resolução do problema é encontrar uma parametrização  $k = k(\lambda)$  que simplifique (3.31) onde os coeficientes  $\Gamma_{\gamma\delta}^{\alpha\beta}$  ( $\alpha, \beta, \gamma, \delta = 0, 1, 2$ ) são dados por (3.2). A parametrização escolhida foi a mesma apresentada em [13], dada por

$$\lambda_{j,l} = \frac{1}{2} \ln \left[ \frac{e^r + e^{-r} S_{ij}^{jl}}{e^{-r} + e^r S_{ij}^{jl}} \right], \quad (4.5)$$

onde  $r$  é um parâmetro livre. Este parâmetro  $r$  pode ser escolhido como

$$r = \frac{2i\pi}{3}, \quad (4.6)$$

para que a parametrização (4.5) possua a seguinte propriedade

$$\lambda_{j,l} = \lambda_j - \lambda_l. \quad (4.7)$$

---

<sup>3</sup>Acreditamos que tal fato deve ser passível de prova analítica simples, embora não o tenhamos provado.

Invertendo a parametrização (4.5), obtemos  $k_j = k_j(\lambda_j)$ ,  $j = 1, \dots, n$ ,

$$x_j = e^{ik_j} = \frac{\sinh \lambda_j - i\sqrt{3t_p^2 + (4t_p^2 - 1)\sinh^2 \lambda_j}}{t_p (\sinh \lambda_j + i\sqrt{3} \cosh \lambda_j)}. \quad (4.8)$$

Em termos dos  $\lambda_j$ ,  $j = 1, \dots, n$ , as equações espectrais (3.31) tornam-se produtos de funções cujos argumentos são diferenças  $\lambda_j - \lambda_m$ ,

$$\left[ \frac{\sinh \lambda_j - i\sqrt{3t_p^2 + (4t_p^2 - 1)\sinh^2 \lambda_j}}{t_p (\sinh \lambda_j + i\sqrt{3} \cosh \lambda_j)} \right]^L = \prod_{m=1}^n \left( \frac{\sinh(\lambda_j - \lambda_m - r)}{\sinh(\lambda_j - \lambda_m + r)} \right), \quad (4.9)$$

enquanto a energia e momento são dados por

$$E = - \sum_{j=1}^n \frac{1}{t_p} \frac{\sinh \lambda_j - i\sqrt{3t_p^2 + (4t_p^2 - 1)\sinh^2 \lambda_j}}{\sinh \lambda_j + i\sqrt{3} \cosh \lambda_j} - t_p \sum_{j=1}^n \frac{\sinh \lambda_j + i\sqrt{3} \cosh \lambda_j}{\sinh \lambda_j - i\sqrt{3t_p^2 + (4t_p^2 - 1)\sinh^2 \lambda_j}} \quad (4.10)$$

$$P = -i \sum_{j=1}^n \ln \left( \frac{\sinh \lambda_j - i\sqrt{3t_p^2 + (4t_p^2 - 1)\sinh^2 \lambda_j}}{\sinh \lambda_j + i\sqrt{3} \cosh \lambda_j} \right). \quad (4.11)$$

## 4.2 Análise numérica das equações espectrais

As equações espectrais formam um sistema de  $n$  equações não lineares e acopladas. Devido à não-linearidade do sistema, não existe método numérico que garanta a solução do mesmo. Assim, a obtenção das soluções do sistema exige uma certa dose de inspiração e sacrifício. As soluções numéricas serão obtidas usando o tradicional método de Newton. Em tal método, o problema é transformado no de busca de mínimos de uma função  $f(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$  de  $n$  variáveis complexas. Dá-se um valor inicial  $\lambda_j = \lambda_j^0$ , ( $j = 1, 2, \dots, n$ ) e sucessivas aproximações são calculadas usando-se o gradiente da  $f(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ . Assim, o sucesso da solução dependerá de dois ingredientes fundamentais: a parametrização utilizada (que determinará o perfil da função  $f(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$  onde os mínimos serão procurados) e do valor inicial (“chute” inicial).

Soluções onde  $\{\lambda_j\}$  são complexos são, em geral, difíceis de serem obtidos. Como primeiro passo tentaremos obter soluções das equações espectrais cujas raízes sejam números reais.

Para que tenhamos  $\{\lambda_j\}$  reais, as variáveis  $\{x_j\}$  definidas em (4.8) devem ser unimodulares, isto é,  $|x_j| = 1$  ( $j = 1, 2, \dots, n$ ). Tal condição implica que os  $\{\lambda_j\}$  não se distribuem arbitrariamente na reta real mas obedecem às restrições:

- para  $t_p \geq 1/2$ ,  $\lambda_j = a + im\pi$ ,  $a \in \mathbb{R}$ ,  $m \in \mathbb{Z}$ .
- para  $0 < t_p < 1/2$ ,  $\lambda_j = a + im\pi$ ,  $-\sigma(t_p) \leq a \leq \sigma(t_p)$ ,  $m \in \mathbb{Z}$ .

com

$$\sigma(t_p) = \frac{1}{2} \cosh^{-1} \left( \frac{6t_p^2}{1 - 4t_p^2} + 1 \right). \quad (4.12)$$

Assim, nos casos em que as raízes  $\{k\}$  são reais a distribuição dos  $\lambda_j$ , ( $j = 1, 2, \dots, n$ ) não é restrita, podendo assumir quaisquer valores reais, para  $t_p \geq 1/2$  enquanto para  $0 < t_p < 1/2$  as raízes  $\lambda_j$  podem assumir apenas os valores do intervalo  $[-\sigma(t_p), \sigma(t_p)]$  com  $\sigma(t_p)$  dados por (4.12).

Podemos simplificar ainda mais as equações (4.9), deixando-a na forma

$$e^{i(\theta_j^2 - \theta_j^1)L} = (-1)^{n-1} \prod_{m=1}^n e^{i\varphi(\lambda_j - \lambda_m)}, \quad (4.13)$$

onde

$$\beta_j = 3t_p^2 + (4t_p^2 - 1) \sinh^2 \lambda_j, \quad (4.14)$$

$$\theta_j^2 = \tan^{-1} \left( \frac{\sqrt{\beta_j}}{\sinh \lambda_j} \right), \quad (4.15)$$

$$\theta_j^1 = \tan^{-1} \left( \sqrt{3} \coth \lambda_j \right), \quad (4.16)$$

$$\varphi(\lambda_j - \lambda_m) = 2 \tan^{-1} (\cot(\text{Im}(r)) \tanh(\lambda_j - \lambda_m)). \quad (4.17)$$

No caso em que os  $\lambda_j$ ,  $j = 1, 2, \dots, n$  são números reais, as variáveis  $\theta_j^1, \theta_j^2$  também o são e a equação (4.13) pode ser expressa de forma mais simples

$$(\theta_j^2 - \theta_j^1) L = 2\pi Q_j^{(n)} + \sum_{q=1}^n \varphi(\lambda_j - \lambda_q), \quad (4.18)$$

onde  $Q_j^{(n)}$ ,  $j = 1, 2, \dots, n$  são números semi-inteiros (inteiros) se  $n$  é par (ímpar). Esta nova equação é mais simples de resolver-se numericamente pois o conjunto de números  $Q_j^{(n)}$  é fixo restando apenas  $n$  variáveis reais ( $\lambda_j; j = 1, 2, \dots, n$ ) para serem obtidas, frente as  $n$  variáveis complexas de (4.9).

Uma vez definidas as equações que fornecem a energia (4.10) e as equações espectrais (4.18), passemos então ao cálculo das soluções  $\lambda_j$ ,  $j = 1, 2, \dots, n$  para o caso de raízes reais.

Começaremos obtendo raízes para o caso em que  $t_p < 1/2$ . Neste intervalo de acoplamento, as raízes  $\lambda_j$ ,  $j = 0, 1, \dots, n$  da equação (4.18) encontram-se restritas ao intervalo  $\left[-\frac{1}{2} \cosh^{-1} \left( \frac{6t_p^2}{1-4t_p^2} + 1 \right), \frac{1}{2} \cosh^{-1} \left( \frac{6t_p^2}{1-4t_p^2} + 1 \right) \right]$ , sendo mais simples de serem obtidas<sup>4</sup>. Para cada cadeia de comprimento  $L$  e várias densidades de partículas  $\rho = n/L$ , conseguimos obter a menor energia. Tal energia é real e corresponde a uma distribuição de raízes  $\{\lambda_j\}$  reais. Variando-se o comprimento  $L$ , mantendo-se a densidade de partículas fixa, um conjunto de energias é obtido em função de  $L$ . Este conjunto é utilizado posteriormente para obter-se, mediante extrapolação, o valor da energia livre no limite termodinâmico ( $L \rightarrow \infty$ ). Nas tabelas 4.1, 4.2 e 4.3, reportamos alguns valores da menor energia por sítio para  $t_p = 0.2, 0.3, 0.4$  e densidades  $\rho = 0.6, 0.65, 0.69$  respectivamente.

$L \setminus t_p$	0.2	0.3	0.4
10	-0.74745562	-0.78716387	-0.83079604
100	-0.73726600	-0.78221690	-0.82160939
200	-0.73719021	-0.78215147	-0.82153821
1000	-0.73716569	-0.78213716	-0.82151539

Tabela 4.1: Valores da energia do estado fundamental por sítio para  $t_p = 0.2, 0.3, 0.4$  e  $\rho = 0.6, 0.65, 0.69$ . Resultados obtidos via resolução numérica das equações espectrais (4.9).

---

<sup>4</sup>Para  $t_p > 1/2$ , como veremos adiante, somente para densidades baixas teremos raízes reais

$L$	$E_0/L$	$L$	$E_0/L$	$L$	$E_0/L$
100	-0.78221691	150	-0.78217977	200	-0.78215147
101	-0.78220625	151	-0.78217170	201	-0.78216048
102	-0.78223132	152	-0.78216707	202	-0.78215606
103	-0.78220462	153	-0.78217845	203	-0.78215342
104	-0.78220995	154	-0.78216696	204	-0.78215999
105	-0.78222537	155	-0.78216935	205	-0.78215357
106	-0.78292252	156	-0.78217658	206	-0.78215489
107	-0.78221181	157	-0.78216188	207	-0.78215917
108	-0.78221865	158	-0.78217085	208	-0.78215086
109	-0.78216781	159	-0.78217424	209	-0.78215594
110	-0.78221214	160	-0.78215661	210	-0.78215805

Tabela 4.2: Valores de energia por sítio do estado fundamental para  $t_p = 0.3$  e  $\rho = 0.65$ . Resultados obtidos via resolução numérica das equações espectrais (4.18).

Para garantir que as energias obtidas para cadeias de comprimentos finito são corretas, criamos um código computacional que diagonaliza de forma direta a matriz que representa o Hamiltoniano para a cadeia quântica. Compara-se, então, as energias obtidas através do mesmo com as energias obtidas via resolução das equações espectrais advindas do ansatz matricial. Este programa, utiliza-se da conservação da magnetização e da invariância translacional do sistema, ou seja, a matriz é separada em blocos disjuntos indexados por dois números quânticos  $n, p$ . Para cadeias de comprimento até  $L = 20$  os valores correspondentes às menores energias em diversos setores foram compatíveis.

$L$	$E_0/L$	$L$	$E_0/L$	$L$	$E_0/L$
30	-0.738299465	150	-0.737210054	270	-0.737178698
31	-0.737862100	151	-0.737199561	271	-0.737177241
40	-0.737802734	160	-0.737204552	280	-0.737177716
41	-0.737569173	161	-0.737195777	281	-0.737176497
50	-0.737572961	170	-0.737200007	290	-0.737176834
51	-0.737429996	171	-0.737192601	291	-0.737175823
60	-0.737448185	180	-0.737196192	300	-0.737176039
61	-0.737352911	181	-0.737189926	301	-0.737175212
70	-0.737372962	190	-0.737192966	400	-0.737171079
71	-0.737305690	191	-0.737187642	401	-0.737171272
80	-0.737324144	200	-0.737190210	500	-0.737168746
81	-0.737274620	201	-0.737185677	501	-0.737169322
90	-0.737290677	210	-0.737187838	600	-0.737165239
91	-0.737253055	211	-0.737183972	601	-0.737168197
100	-0.737266740	220	-0.737185783	800	-0.737165822
101	-0.737237456	221	-0.737182482	801	-0.737166986
110	-0.737249030	230	-0.737183989	900	-0.737165909
111	-0.737225791	231	-0.737181173	901	-0.737166631

Tabela 4.3: Valores de energia por sítio do estado fundamental para  $t_p = 0.2$ , no setor de densidade de partículas  $\rho_n = n/L = 0.6$ , valores obtidos resolvendo-se numericamente as equações espectrais (4.18).

Embora os resultados que mostramos até aqui exibam raízes reais para a menor energia em um dado setor, este não é sempre o caso, como veremos adiante. Antes de considerarmos a solução (4.9) em que  $\{\lambda_j\}$  são números complexos, podemos ter uma idéia onde as mesmas deixam de ocorrer analisando o limite assintótico de (4.18). Tal limite nos dará, como função de  $\rho$  e  $t_p$ , a energia livre no limite termodinâmico no caso em que as raízes sejam reais. A densidade máxima



de raízes  $\rho_c$  permitida, para dado valor de  $t_p$ , implica que para setores com  $\rho > \rho_c$  necessariamente a distribuição de raízes referente ao estado fundamental deverá ter raízes complexas. Passemos assim ao cálculo do limite termodinâmico nos casos em que as raízes são reais.

Seguimos para isto as idéias de Baxter [19] para obter o valor exato da energia livre. Para isto tratamos as raízes  $\lambda_j$  como variáveis reais contínuas  $\lambda$  de maneira que o número de soluções entre  $\lambda$  e  $\lambda + \delta\lambda$  que satisfaz (4.18) é dada pela distribuição de raízes  $R(\lambda)$ . Assim, para uma cadeia com  $L, n \gg 1$  mantendo-se  $n/L$  constante, a distribuição de raízes deve satisfazer

$$\int_{C_1}^{C_2} R(\lambda) d\lambda = \frac{n}{L}, \quad (4.19)$$

onde os limites de integração  $C_1, C_2$  dependem da particular densidade de partículas  $n/L$ . Neste limite, a equação (3.32) fornece a energia do limite termodinâmico dada em termos da densidade de raízes  $R(\lambda)$ , isto é,

$$\frac{E}{L} = \int_{C_1}^{C_2} d\lambda R(\lambda) \epsilon'(\lambda), \quad (4.20)$$

onde  $\epsilon'(\lambda)$  é dada por (4.10). A fim de se obter a energia livre no limite termodinâmico é necessário conhecer qual a distribuição de raízes  $R(\lambda)$  que caracteriza a menor energia do modelo. Podemos encontrá-la a partir de (4.18), quando trocamos as equações algébricas (4.18) por uma equação integral. Para isto, vejamos que a equação (4.18) se transforma, nesse limite, em

$$\theta_2(\lambda) - \theta_1(\lambda) = \frac{2\pi}{L} Q^{(n)}(\lambda) + \int_{C_1}^{C_2} d\lambda' R(\lambda') \varphi(\lambda - \lambda'), \quad (4.21)$$

com  $\theta_2(\lambda)$ ,  $\theta_1(\lambda)$  e  $\varphi(\lambda - \lambda')$  dados por (4.15), (4.16) e (4.17). A distribuição mais simples para os valores, e que corresponde ao estado fundamental, de  $Q^{(n)}(\lambda)$  é aquela em que  $Q^{(n)}(\lambda + \delta\lambda) - Q^{(n)}(\lambda) = 1$ , isto é, os  $Q^{(n)}(\lambda)$  são números inteiros ou semi-inteiros (dependendo da paridade de  $n$ ) consecutivos. Neste caso, temos  $Q^{(n)}(\lambda) = \int_{C_1}^{\lambda} R(\lambda') d\lambda' + \mathcal{C}^{(n)}$ , onde  $\mathcal{C}^{(n)} = -(n-1)/2$ . Derivando-se (4.21) em relação a  $\lambda$  obtemos uma equação integral para  $R(\lambda)$ :

$$2\pi R(\lambda) = \frac{d}{d\lambda} (\theta_2(\lambda) - \theta_1(\lambda)) - \int_{C_1}^{C_2} d\lambda' R(\lambda') \frac{\partial}{\partial \lambda} \varphi(\lambda - \lambda'). \quad (4.22)$$

As equações (4.22) e (4.19) podem ser então resolvidas numericamente fornecendo  $R(\lambda)$  para cada densidade. Utilizando-se os valores de  $R(\lambda)$  obtemos a energia livre através de (4.20). Na figura 4.1 mostramos, como função de  $\rho$ , as energias obtidas para o estado fundamental considerando-se as raízes  $\{\lambda_j\}$  reais. As energias livres correspondentes são exibidas na figura 4.2. A fim de melhor apreciarmos tais resultados comparamos na tabela 4.4 tais resultados com aqueles obtidos da extrapolação das soluções da equação espectral (4.18) para cadeias de comprimento  $L = 100, 120, \dots, 2000$ . Há um excelente acordo dos resultados, como esperado.

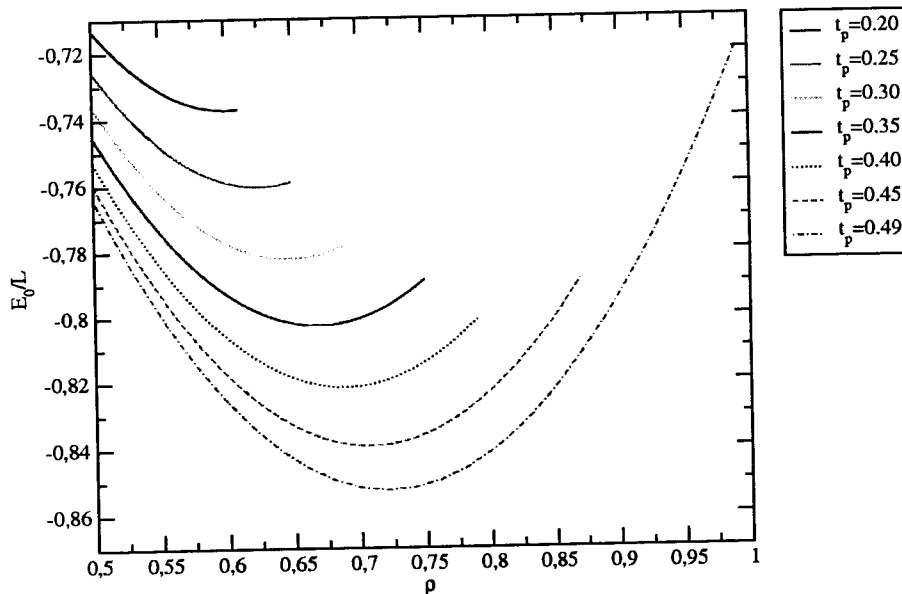


Figura 4.1: Menores energias para setores de densidade  $0,5 \leq \rho \leq 1$  para diferentes valores de  $t_p$ , para rede de tamanho  $L = 200$ , obtidas através da (4.18). Note que existe uma densidade máxima para cada valor de  $t_p$ .

Como a densidade máxima<sup>5</sup> de partículas deve ser  $\rho = 1$ , a figura 4.1 mostra claramente que para dado valor de  $t_p$  existe uma densidade máxima de raízes, caso as mesmas sejam reais. Assim, existe uma densidade  $\rho_c$  acima da qual a equação (4.19) não é satisfeita, isto é, nem todas as raízes são reais. Os valores

<sup>5</sup>conforme vimos no início do capítulo, as energias dos setores de densidade de partículas  $\rho > 1$  relacionam-se com aquelas do setor  $\rho' = 2 - \rho$ .

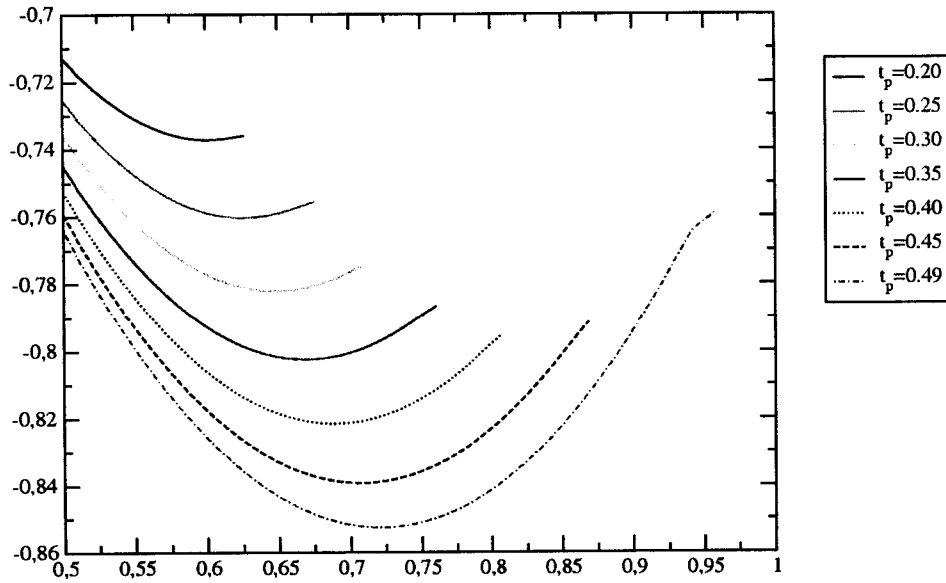


Figura 4.2: Menores energias para setores de densidade  $0.5 \leq \rho \leq 1$  para diferentes valores de  $t_p$  obtidas resolvendo-se (4.22).

$t_p$	$\rho$	$E_0/L$	$E_e/L$	$E_0/E_e$
0.20	0.60	-0.737165222	-0.737164399	0.999998884
0.25	0.63	-0.760269916	-0.760266557	0.999995581
0.30	0.65	-0.782134722	-0.782132286	0.999996886
0.35	0.68	-0.802274441	-0.802239112	0.999955963
0.40	0.70	-0.821240469	-0.821240379	0.999999890

Tabela 4.4: Comparação entre valores extrapolados da energia do estado fundamental por sítios obtidos pela extrapolação das soluções numéricas das equações espectrais (4.9) e (3.32) ( $E_0/L$ ) e a correspondente quantidade ( $E_e/L$ ) obtida resolvendo-se as equações integrais (4.20) e (4.22).

de  $\rho_c$  são obtidos de forma distinta dependendo se  $t_p < 1/2$  ou  $t_p > 1/2$ . No caso em que  $t_p < 1/2$ , os máximos valores de  $C_1$  e  $C_2$  em (4.19) são finitos, enquanto que para  $t_p > 1/2$  tais valores são  $C_1 \rightarrow -\infty$  e  $C_2 \rightarrow \infty$ . Logo, para  $t_p < 1/2$ , podemos resolver a equação (4.22) iterativamente enquanto para  $t_p > 1/2$ , este resultado pode ser obtido realizando-se a transformada de Fourier da equação

(4.22), isto é,

$$2\pi\mathcal{F}_q[R] = \mathcal{F}_q\left[\frac{d}{d\lambda}(\theta_2 - \theta_1)\right] - \mathcal{F}_q[R]\mathcal{F}_q\left[\frac{\partial\varphi(\lambda)}{\partial\lambda}\right], \quad (4.23)$$

onde  $\mathcal{F}_q[\ ]$  representa a função transformada na variável  $q$ . Logo

$$\mathcal{F}_q[R] = \frac{\mathcal{F}_q\left[\frac{d}{d\lambda}(\theta_2 - \theta_1)\right]}{2\pi + \mathcal{F}_q\left[\frac{\partial\varphi(\lambda)}{\partial\lambda}\right]}, \quad (4.24)$$

e assim

$$R(\lambda) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-iq\lambda} \mathcal{F}_q\left[\frac{d}{d\lambda}(\theta_2 - \theta_1)\right]}{2\pi + \mathcal{F}_q\left[\frac{\partial\varphi(\lambda)}{\partial\lambda}\right]} dq. \quad (4.25)$$

A máxima densidade de partículas  $\rho_{\max}$  que apresentam apenas raízes reais, em função de  $t_p$ , é obtida quando consideramos apenas o termo  $\mathcal{F}_0[R]$ , pois

$$\rho_{\max} = \int_{-\infty}^{\infty} R(\lambda) d\lambda = \int_{-\infty}^{\infty} e^{iq\lambda} R(\lambda) d\lambda|_{q=0} = \mathcal{F}_0[R]. \quad (4.26)$$

Os resultados encontram-se na figura 4.3.

Separamos, na apresentação da figura 4.3, o espaço  $(t_p, \rho)$  em cinco regiões distintas. A região 1, cujas soluções numéricas da equação espectral (4.13) foram apresentados anteriormente, apresenta raízes reais restritas a um intervalo. Na região 2, as raízes embora reais não são limitadas. Nas regiões 3 e 4 necessariamente existem raízes complexas no limite  $L \rightarrow \infty$ . Mais adiante mostraremos que soluções das equações espectrais (4.9), mesmo para pequenas cadeias, exibem, para a configuração do estado fundamental, raízes complexas denominadas na literatura como strings.<sup>6</sup> Na linha que separa a região 3 da 4, conforme veremos adiante, ocorre um cruzamento de níveis entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado. Tal cruzamento é surpreendente pois ocorre entre níveis no mesmo setor.

Antes de fecharmos esta seção é importante lembrar que a introdução de um termo de campo magnético azimutal

$$-h \sum_{k=1}^L \hat{\sigma}_k^z = -h \sum_{k=1}^L (\hat{n}_k - 1), \quad (4.27)$$

<sup>6</sup>Strings de tamanho  $m$  são formadas por um conjunto de  $m$  raízes  $\{k_1, \dots, k_m\}$  tal que  $k_l = a + ilb$ ,  $a, b \in \mathbb{R}$  e  $l = 1, 2, \dots, m$ .

no Hamiltoniano do modelo NDF, não destrói a integrabilidade do modelo original e nem nossa análise feita até aqui. Tal fato é importante pois mediante a introdução de um campo apropriado  $h = h(t_p)$  podemos fixar a densidade do setor de ocorrência do estado fundamental  $\rho = \rho(h, t_p)$ .

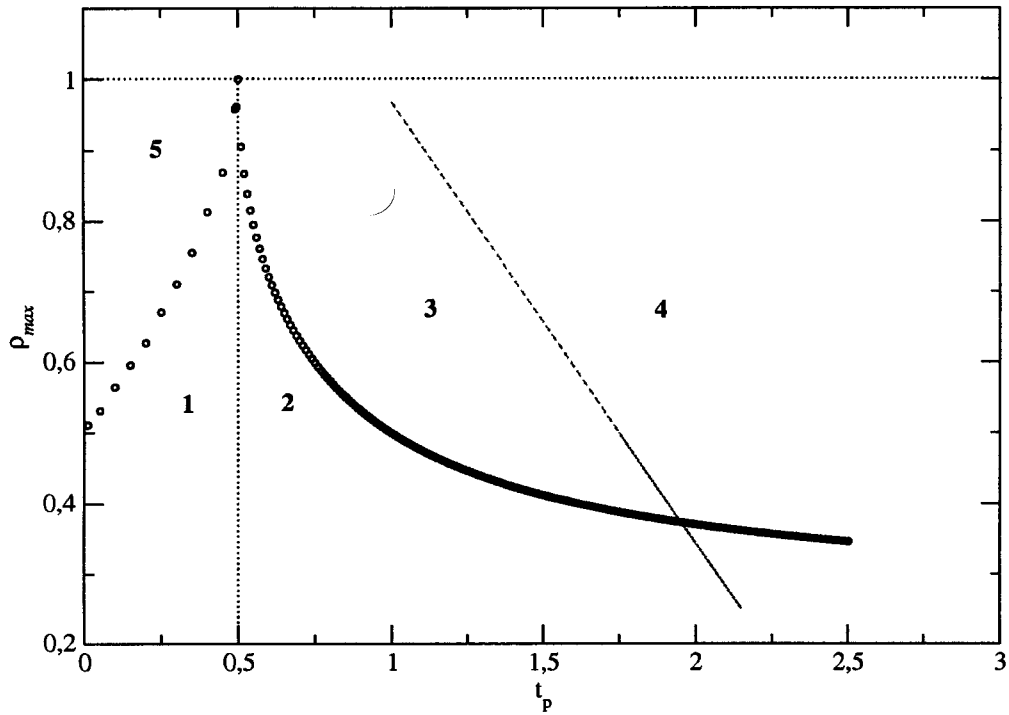


Figura 4.3: Os pontos circulares representam a máxima densidade de raízes que tem a possibilidade de serem reais em função de  $t_p$ . Acima da linha definida pelos pontos devem existir raízes complexas. O tracejado apenas divide as partes 1,2,3,4 e 5 do gráfico.

### 4.2.1 Região 1

Iniciaremos estudando o espectro de energia para a região 1 em cadeias de comprimento finito  $L$ . Neste região, as raízes  $\lambda_j$ ,  $j = 1, 2, \dots, n$  encontram-se confinadas em um intervalo, isto é,

$$-\frac{1}{2} \cosh^{-1} \left( \frac{6t_p^2}{1-4t_p^2} + 1 \right) < \lambda_j < \frac{1}{2} \cosh^{-1} \left( \frac{6t_p^2}{1-4t_p^2} + 1 \right). \quad (4.28)$$

A obtenção destas raízes é simples via (4.18), como realizado na seção anterior.

Conforme a discussão feita no final da seção anterior, mediante a introdução de um campo magnético apropriado podemos ter o estado fundamental em qualquer densidade. Assim, com vistas a entender o diagrama de fases termodinâmicas do modelo é importante verificar se o mesmo, nesta região, possui simetria conforme. Formalmente seria necessário obter o modelo bidimensional associado que forneceria, no limite do contínuo, a teoria de campos sem massa em  $(1+1)$  dimensões. Em seguida, obter o tensor energia-momentum e verificar se o mesmo é simétrico de traço nulo e invariante por rotações e translações. Porém, contentamo-nos em obter indícios indiretos da invariância conforme.

Para isto iremos utilizar algumas relações gerais de modelos que apresentam invariância por transformações conforme. A primeira afirma que as correções devido à finitude da rede da energia do estado fundamental  $E_0$  é dada em termos da anomalia conforme  $c$  (que indexa a classe de universalidade) e pela velocidade do som  $v_s$ , isto é,

$$E_0/L = e_\infty - v_s c \pi / 6L^{-2} + o(L^{-2}). \quad (4.29)$$

A segunda afirma que para cada operador primário  $\Phi_{\alpha,\beta}$ , de dimensão anômala  $x_{\alpha,\beta}$  e spin  $s_{\alpha,\beta}$ , existe um conjunto de autoestados do Hamiltoniano (3.2) cujas energias e momenta são dados, no limite assintótico ( $L \rightarrow \infty$ ), por

$$E_{m,m'}^{\alpha,\beta} = E_0 + \frac{2\pi v_s}{L} (x_{\alpha,\beta} + m + m') + o(L^{-1}), \quad (4.30)$$

$$P = \frac{2\pi}{L} (s_{\alpha,\beta} + m + m'), \quad (4.31)$$

com  $m, m' = 0, 1, 2, \dots$ . Dessa forma, no limite assintótico ( $L \rightarrow \infty$ ), a diferença de energia entre o estado fundamental e algum estado excitado decai inversamente

com o comprimento da rede, formando, no limite  $L \rightarrow \infty$  uma banda contínua de energia.

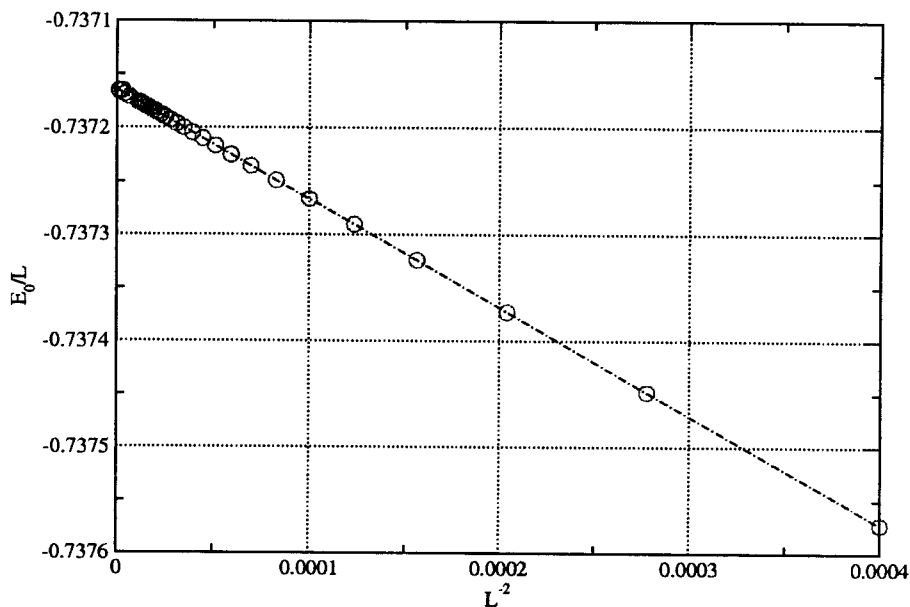


Figura 4.4: Gráfico da dependência da energia por sítio com  $L^{-2}$ , para  $t_p = 0.2$  e densidade  $\rho = 0.6$ . Fitando uma reta pelos dados obtemos  $e_\infty = -0.73716(5)$ .

Portanto, se o modelo possui simetria conforme, a energia do estado fundamental por sítio deve ser linear com  $L^{-2}$ . Da figura 4.4, vemos que a menor energia por sítio  $E_0/L$  de uma cadeia de comprimento  $L$  possui para  $t_p = 0.2$ ,  $\rho = 0.6$ , essencialmente, um comportamento linear com  $L^{-2}$ , indicando a presença da simetria conforme. A energia livre  $e_\infty$  fornecida pela figura 4.4, sendo compatível com o valor obtido anteriormente resolvendo-se a equação (4.22). Os dados da figura 4.4 foram obtidos considerando-se o campo magnético  $h = 0$ . Os resultados para  $h \neq 0$  não mudariam o declive, apenas o ponto de intercepção com a ordenada da figura.

O segundo indício de invariância conforme se dá pelo desaparecimento do gap como  $o(L^{-1})$  no limite  $L \rightarrow \infty$ . Caso contrário resultaria em uma teoria de campos massiva. Para verificarmos se tais gaps permanecem no limite termodinâmico, calculamos a diferença de energia entre as duas menores energias para diversos comprimentos de rede. Em seguida, utilizamos este conjunto para extrapolar o

valor do gap no limite termodinâmico.

Como exemplo, tomemos o Hamiltoniano NDF com  $t_p = 0.2$ , campo magnético  $h = 0$  e no setor de densidade  $\rho = 0.6$ . A diferença de energia entre a menor energia do setor com número de partícula  $n = \rho L$  e as menores energias dos setores com números de partículas  $n_{\pm} = \rho L \pm 1$  é dada por  $g_{\pm}(t_p) = \pm 0.00267092$ . Contudo, com respeito ao setor com  $n = \rho L$  partículas, a inclusão do campo magnético faz com que as menores energias dos setores com  $n_{\pm} = \rho L \pm 1$  tenham suas energias aumentadas ou diminuídas por  $h$ . Assim, escolhemos o particular valor de  $h = h(\rho, t_p)$  que garanta que o estado fundamental do sistema ocorra no setor de densidade  $\rho$ . É importante enfatizar que a inclusão do campo magnético não destrói o indício já mostrado da invariância conforme dado pelo comportamento assintótico de  $L^{-1}$  do estado fundamental.

A energia do estado fundamental no setor de  $n = \rho L$  partículas, terá agora o comportamento assintótico (veja 4.29)

$$E_0 \approx e_{\infty}L + h(\rho)(n - L) - \frac{\pi v_s c}{6L} + o(L^{-2}). \quad (4.32)$$

Mais ainda (veja 4.30), se o modelo for invariante conforme, a menor energia nos setores adjacentes em que adicionamos ou removemos uma partícula nos fornecerá

$$E_{\pm 1} - E_0 \approx \pm g(\rho, t_p) \mp h(\rho, t_p) + \frac{2\pi}{L}(x_{\pm 10}) + o(L^{-1}), \quad (4.33)$$

onde  $x_{10}$  e  $x_{-10}$  são as dimensões anômalas dos operadores da teoria de campos conforme adjacente e para que a cadeia seja crítica no limite  $L \rightarrow \infty$  devemos ter  $h(\rho, t_p) = g(\rho, t_p)$ .

Para obter-se  $h(\rho, t_p)$  precisamos então calcular o gap  $g(\rho, t_p)$  e para isto procedemos da seguinte maneira. Fixamos o acoplamento  $t_p$  e a densidade  $\rho$ , por exemplo  $t_p = 0.2$  e  $\rho = 0.6$ , e para uma certa densidade  $\rho$  de partículas, selecionamos um conjunto de redes de comprimento  $L$  tal que o número de partículas<sup>7</sup> seja  $n = \rho L \in \mathbb{Z}$ . Calculamos a menor energia advinda destes setores, bem como

<sup>7</sup>Tal procedimento de ter-se densidades exatas é importante para termos um conjunto de dados com convergência uniforme no limite  $L \rightarrow \infty$ .



a menor energia nos setores cujo número de ocupação diferem daquele do estado fundamental pela adição (subtração) de uma partícula. Assim, de acordo com (4.33), obtivemos o valor do campo magnético  $h(\rho, t_p) = g(\rho, t_p) = -0.0026712$  que anula o gap do Hamiltoniano, no caso  $t_p = 0.2$  e  $\rho = 0.6$ .

Nossos estudos numéricos indicam que apesar de ainda não conhecermos a forma explícita geral da dependência do campo magnético  $h(\rho, t_p)$  com  $t_p$ , convencemo-nos que o modelo possui simetria conforme mediante a adição de um campo externo. Uma vez admitida a invariância conforme mediante a introdução de  $h(\rho, t_p)$ , prosseguimos obtendo a anomalia conforme  $c$  e a velocidade do som  $v_s$  associada ao modelo. Como antes, escolhemos o setor  $\rho = 0.6$  e o acoplamento  $t_p = 0.2$  a fim de ilustrar o procedimento para  $t_p < 1/2$ .

Da expansão da energia por sítio do estado fundamental para cadeias finitas (4.29), o produto da velocidade do som pela anomalia conforme é obtido pelo comportamento assintótico de

$$v_s c = \lim_{L \rightarrow \infty} \Omega_L, \quad \Omega_L = \frac{6L^2}{\pi} \left( e_\infty - \frac{E_0}{L} \right). \quad (4.34)$$

Para obter-se separadamente a velocidade do som  $v_s$ , em geral, utiliza-se a menor energia  $E_P$  do setor de mesma densidade  $\rho$  que a do estado fundamental mas com o momento diferindo por uma quantidade  $2\pi/L$ , pois da dispersão relativística teríamos

$$E_P - E_0 = P v_s = \frac{2\pi}{L} v_s + o(L^{-1}). \quad (4.35)$$

Entretanto a solução numérica das equações espectrais para o menor estado de momento  $\frac{2\pi}{L}$  a mais (menos) que o estado fundamental (que possui momento 0 ou  $\pi$ ) são altamente instáveis e de difícil obtenção. As distribuições de raízes  $\{\lambda_j\}$  referentes a tais estados são assimétricas com respeito à reflexões pela origem. Ao contrário, as distribuições referentes a estados de momento 0 ou  $\pi$  são simétricas com respeito a tal reflexão, isto é,  $\lambda_j = -\lambda_{n-j}$ , ( $j = 1, 2, \dots, n$ ), o que torna a sua obtenção mais simples para cadeias de grandes tamanhos. Uma maneira de circundar tal dificuldade é buscar estados excitados com momento 0 ou  $\pi$ .

Esperamos que tais estados (veja equação (4.30)) estejam associados aos estados da torre conforme referente ao operador identidade (dimensão anômala  $x = 0$ ) e com  $m = m'$ . Neste caso, os gaps correspondentes seriam assintoticamente dados por

$$E_{0,0}^{m,m} - E_0 = \frac{2\pi v_s}{L} \cdot 2m + o(L^{-1}), \quad (4.36)$$

e conseqüentemente a velocidade do som é obtida pelo comportamento assintótico

$$v_s = \lim_{L \rightarrow \infty} \mu_L, \quad \mu_L = \frac{L}{4\pi m} (E_{0,0}^{m,m} - E_0). \quad (4.37)$$

Para obter os estados excitados realizamos pequenas modificações na distribuição das raízes  $\lambda_j$ , ( $j = 1, 2, \dots, n$ ) do estado fundamental (que está contida completamente no eixo real) adicionando uma parte imaginária às duas raízes mais externas<sup>8</sup>. Para permanecer no mesmo setor de momento que o estado fundamental somos obrigados a adicionar essa constante de maneira simétrica em relação ao eixo real, isto é, a uma das raízes adicionamos  $i\pi$  e a outra subtraímos  $i\pi$ , como esquematizado na figura 4.5

As energias obtidas através desta nova configuração possuem  $m = m' \in \mathbb{Z}$  mas não necessariamente correspondem ao primeiro estado excitado de momento nulo e que seria obtido para  $m = m' = 1$ . Dessa maneira a diferença de energia  $E_{mm}^{00} - E_0$  passa a ser uma função linear de  $m$ , com  $v_s$  representando o coeficiente angular, isto é,

$$v_s m = (E_{mm}^{00} - E_{00}^{00}) \frac{L}{4\pi}. \quad (4.38)$$

Este problema pode ser contornado. Para isto obtivemos a energias do estado fundamental e a menor energia do estado com momento  $2\pi/L$  a mais que o fundamental utilizando a diagonalização exata do Hamiltoniano para  $L = 10$  sítios. Através de (4.35) obtivemos então uma estimativa  $v_s^{(\text{est})}$  para a velocidade do som. Os valores de  $m$  da equação (4.38), por serem inteiros, podem ser estimados a partir de  $v_s^{(\text{est})}$ , isto é,  $m^{\text{est}} = (E_{mm}^{00} - E_{00}^{00})L/4\pi v_s^{(\text{est})}$ . Realizamos o procedimento acima para cadeias de comprimentos  $L = 10, 20, 30, \dots, 250$ . Obtivemos então

---

<sup>8</sup>O módulo da parte real destas raízes encontram-se mais próximas de  $\frac{1}{2} \cosh^{-1} \left( \frac{6t_p^2}{1-4t_p} + 1 \right)$

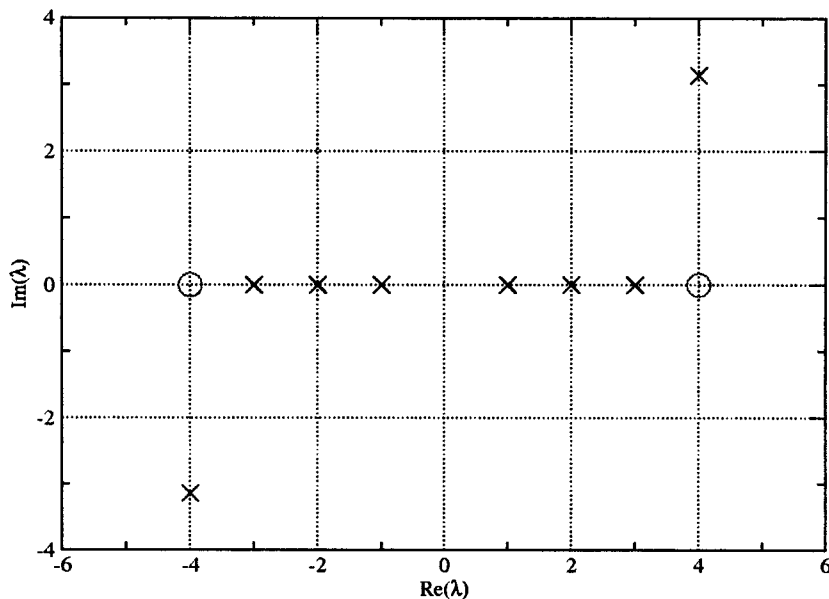


Figura 4.5: Esquema ilustrando a distribuição de raízes  $\{\lambda_j\}$  referentes ao estado excitado. O círculo vazio representa o valor que a raiz com parte imaginária ocupava para configurar o estado fundamental.

um gráfico  $(E_{mm}^{00} - E_{00}^{00}) \times m^{(\text{est})}$ , que é apresentado na figura 4.6, cujo coeficiente angular é uma estimativa de  $v_s$  para grandes comprimentos de rede.

Ajustando o conjunto de pontos a uma reta obtemos uma boa estimativa para a velocidade do som  $v_s = 1.95(0)$ . Utilizando o valor anteriormente obtido para o produto da velocidade do som pelo anomalia conforme na equação (4.34), obtemos  $c = 1.00(1)$ . Este resultado mostra que a teoria de campos associada ao modelo NDF possui a mesma anomalia conforme que a teoria de campos associada ao modelo XXZ de spin  $1/2$ , para a região 1.

Uma vez obtidos  $v_s$  e o campo magnético  $h(\rho, t_p)$ , para dado  $t_p$  e densidade  $\rho$ , podemos calcular as dimensões anômalas  $x_{\pm 1,0}$  dos operadores primários  $\mathcal{X}_{\pm 1,0}$  da teoria de campos associada através da equação (4.33). Estes operadores estão relacionados com auto-estados do Hamiltoniano que se encontram em setores de densidade de partículas  $\rho' = \rho \pm 1/L$ , isto é, possuem uma partícula a mais

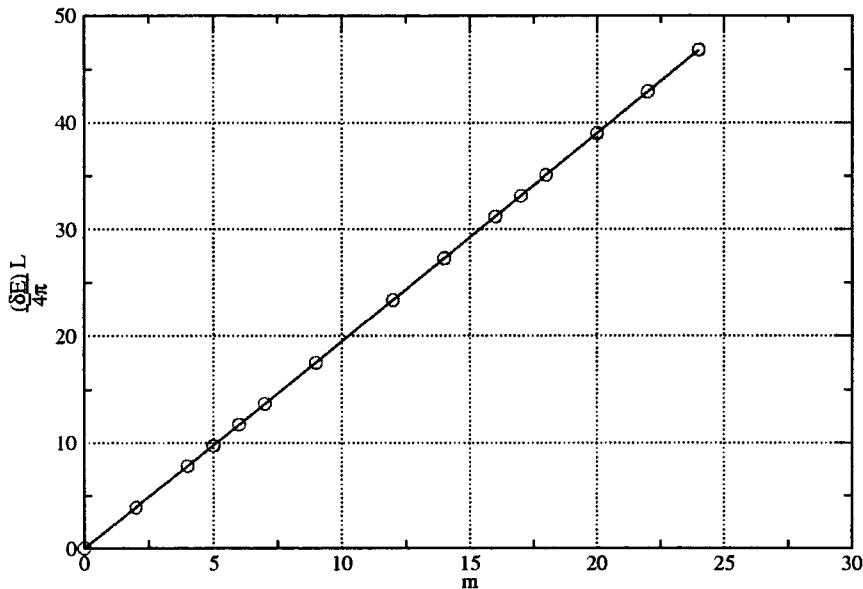


Figura 4.6: Dependência linear da diferença de energias  $E_{mm}^{00} - E_{00}^{00}$  com  $m$ , onde  $m$  é o valor obtido dividindo-se a diferença de energia pela velocidade do som obtida para  $L = 10$ . A ordenada representa o lado direito da (4.38). Calculado para  $t_p = 0.2$  e  $\rho = 0.6$ .

(menos) que setor do estado fundamental. No limite assintótico, temos

$$x_{\pm 1,0} = \lim_{L \rightarrow \infty} a_L, \quad a_L = \frac{L}{2\pi v_s} (E_{\pm 1} - E_0 \mp g(\rho, t_p) \pm h(\rho, t_p)). \quad (4.39)$$

Na tabela 4.5 mostramos os valores obtidos de  $x_{\pm 1,0}$  para determinados valores de  $t_p$  e  $\rho$ . Com boa aproximação, identificamos as dimensões anômalas  $x_{\pm \xi,0}$ , relacionadas aos setores com  $\pm \xi$  partículas a mais (menos) que o estado fundamental, com

$$x_{\pm \xi,0} = \frac{\xi^2}{(2 + t_p)^2}, \quad \xi = 1, 2, \dots \quad (4.40)$$

Finalmente, obtivemos as dimensões anômalas  $x_{0,1}$  dos operadores primários  $\hat{\mathcal{X}}_{0,1}$ . Este operadores relacionam-se com os auto-estados de momento  $P'$  e de energia  $E_{P'}$ . O momento  $P'$  depende da particular densidade de partículas  $\rho$  escolhida. No limite assintótico temos, através da equação (4.30),

$$x_{0,1} = \lim_{L \rightarrow \infty} w_L, \quad w_L = (E_{P'} - E_0) \frac{L}{2\pi v_s}. \quad (4.41)$$

$t_p$	$\rho$	$h(\rho, t_p)$	$v_s$	$x_{+1,0}$	$x_{-1,0}$
0.20	0.60	$-2.67(1)10^{-3}$	1.95(0)	0.19(9)	0.19(8)
0.25	0.63	$2.52(0)10^{-2}$	1.90(5)	0.19(1)	0.19(5)
0.30	0.65	$1.25(6)10^{-2}$	1.87(2)	0.18(4)	0.18(5)
0.35	0.68	$4.80(3)10^{-2}$	1.83(9)	0.17(8)	0.17(8)
0.40	0.70	$4.63(9)10^{-2}$	1.79(9)	0.17(4)	0.17(3)
0.45	0.70	$-2.57(8)10^{-2}$	1.74(9)	0.17(1)	0.17(1)

Tabela 4.5: Valores obtidos para as dimensões anômalas  $x_{\pm 1,0}$  através de (4.39). Para determinar a velocidade do som utilizamos  $c = 1$ .

Esses auto-estados são difíceis de obter através das equações espectrais (4.18). Por outro lado, a diagonalização numérica da Hamiltoniana não requer maiores esforços para a identificação de tais estados. Por este motivo, diagonalizamos a Hamiltoniana NDF através do método da potência e utilizamos as energias obtidas na equação (4.41) para obter  $x_{0,1}$ . Os resultados encontram-se na tabela 4.6 para determinados valores de  $t_p$  e  $\rho$ . Através destes valores concluímos que, para a região 1,

$$x_{0,1} = \frac{(2 + t_p)^2}{4}. \quad (4.42)$$

$t_p$	$\rho$	$x_{0,1}$	$1/4x_{1,0}$
0.20	0.6	1.22(7)	1.25(6)
0.40	0.7	1.43(7)	1.43(7)
0.45	0.7	1.46(9)	1.46(2)

Tabela 4.6: Valores obtidos para as dimensões anômalas  $x_{0,1}$  através de (4.41), utilizando a diagonalização da hamiltoniana. Os valores utilizados para a velocidade do som encontram-se na tabela 4.5. Na última coluna mostramos os valores para a quantidade  $1/4x_{1,0}$  que, para modelos relacionados com o modelo gaussiano, expressa  $x_{0,1}$ .

### 4.2.2 Região 2 e 3

Na região 2, conforme esperado, as raízes espectrais  $\{\lambda_j\}$  que produzem os estados fundamentais são reais e simétricas. As soluções numéricas para cadeias finitas não são de difícil obtenção, assim como na região 1 discutida anteriormente. Nossas análises mostram que os níveis de energia possuem um comportamento assintótico governado por uma teoria conforme com  $c = 1$ .

A limitação entre a região 2 e 3 foi obtida resolvendo-se a máxima densidade possível, no limite termodinâmico, compatível com raízes reais. Assim, é interessante analisarmos, para cadeias finitas, o aparecimento de raízes complexas quando fixarmos um valor de densidade e aumentarmos  $t_p$  de modo a cruzarmos a linha que separa as regiões 2 e 3. Isto é observado. À medida que avançamos<sup>9</sup> na região 3, observamos que parte das raízes correspondentes ao estado fundamental ficam complexas.

Em particular, as soluções complexas que obtivemos são aquelas denominadas na literatura como *strings*. Na figura 4.7 apresentamos uma solução explícita à configuração de raízes correspondente ao estado fundamental neste regime, onde vemos o aparecimento de uma string de tamanho 2.

Soluções do tipo exibida na figura 4.7 foram obtidas para cadeias de comprimento de até  $L = 16$  sítios, restritos a determinados valores de  $t_p$  e densidade de partículas. Tais soluções não são simples de serem obtidas devido à instabilidades<sup>10</sup> numéricas não fomos capazes até o momento de ter um cenário completo para a topologia das raízes referentes ao estado fundamental como função do parâmetro  $t_p$ . Por este motivo iremos abrir mão das equações espectrais (4.18), cujas soluções poderiam ser obtidas para cadeias da ordem de  $L = 1000$  sítios, em favor da diagonalização direta do Hamiltoniano. Como estaremos interessados tão somente nos estados de menor energia para qualquer setor de momento e den-

---

<sup>9</sup>No limite termodinâmico tais raízes surgiriam exatamente na linha divisória das regiões 2 e 3.

<sup>10</sup>A mistura de raízes reais (“partículas”) com as do tipo “strings” torna o problema de solução das equações espectrais extremamente instável.

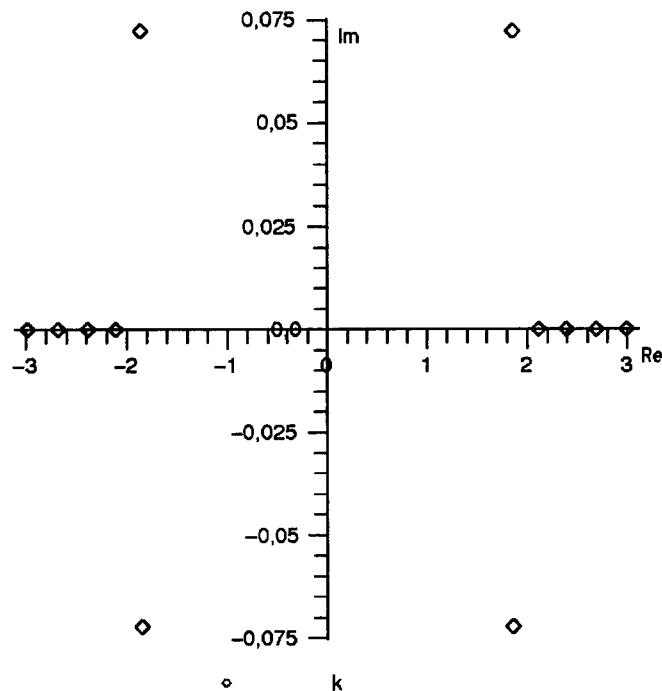


Figura 4.7: Distribuição de raízes referentes ao estado de mais baixa energia para cadeia com  $L = 16$ ,  $n = 12$  ( $\rho = 3/4$ ) e  $t_p = 3/4$ . Verificamos a presença de duas cordas de tamanho 2 para as raízes cujas partes reais possuem menor valor.

tidade de partículas, iremos utilizar o método da potência para diagonalização, o que nos permitirá tratar de cadeia com até  $L = 20$  sítios.

Para fixar o campo magnético  $h(\rho, t_p)$ , procedemos de maneira semelhante àquela na seção anterior. Escolhemos um setor de magnetização  $L(\rho - 1)$  a ser estudado. Para este setor de densidade de partículas  $\rho$ , a diagonalização da hamiltoniana (3.2) com campo nulo fornece a menor energia  $E_0(h = 0)$ . Diagonalizamos então a hamiltoniana (ainda com campo nulo) nos setores de densidades de partículas próximos a  $\rho L$ , que são caracterizados por possuir uma partícula a mais ou a menos que o setor de densidade  $\rho$ . A menor energia proveniente destes setores são respectivamente  $E_{+1}(h = 0)$  e  $E_{-1}(h = 0)$ . No limite de grandes comprimentos de redes, onde as correções da energia são da ordem  $L^{-1}$  da cadeia são irrelevantes, ocorre, em geral, um gap de energia  $g(\rho, t_p)$  entre os estados  $E_0(h = 0)$  e  $E_{+1}(h = 0)$  assim como entre  $E_0(h = 0)$  e  $E_{-1}$ . O campo magnético

$t_p$	$h_{est}$
0.50	0.80129949
0.75	0.93652633
1.00	1.00480117
1.25	1.06821875

Tabela 4.7: Valores extrapolados para o campo magnético externo.

é então adicionado garantindo-se que  $E_0(h) \leq E_{-1}(h)$  e  $E_0(h) \leq E_{+1}(h)$ , isto é, fixando-se a menor energia no setor de densidade  $\rho$  como a energia do estado fundamental. Disto decorre

$$E_{+1}(h) \approx E_0 - h(\rho, t_p) + g(\rho, t_p) \quad (4.43)$$

$$E_{-1}(h) \approx E_0 + h(\rho, t_p) - g(\rho, t_p). \quad (4.44)$$

O campo, como feito anteriormente, deverá ser escolhido de maneira a eliminar o gap de energia existente, isto é,  $h(\rho, t_p) = g(\rho, t_p)$ .

Para obter o valor assintótico das diferenças de energia (4.43) e (4.44), extrapolamos as diferenças obtidas para diversos valores de comprimento de cadeias.

Para simplificar, fixar-nos-emos nossa apresentação no restante desta seção para o setor com densidade  $\rho = 1/2$ . Tal escolha se deve ao fato de que conseguimos, neste caso, o maior número de redes satisfazendo à condição<sup>11</sup>  $n = \rho L \in \mathbb{Z}$ , isto é, conseguimos dados para redes pares  $L = 2, 4, \dots, 20$ .

Na tabela 4.7 indicamos alguns destes resultados para densidade  $\rho = 1/2$  e na figura 4.8 apresentamos os valores utilizados na extrapolação.

Com o campo magnético fixo, no regime crítico, isto é, sem gaps de energia, calculamos as quantidades que caracterizam a teoria de campos em  $(1+1)d$  associada ao modelo como a dimensão anômala dos operadores e a anomalia

<sup>11</sup>A densidade  $\rho = 1$  nos daria, em princípio, um maior número de redes, mas, neste caso, o maior sub-bloco a ser diagonalizado restringe o tamanho da rede para  $L < 20$ . Esta é sem dúvida uma densidade interessante pr ser a densidade esperada para o estado fundamental na ausência de campo ( $h(1, t_p) = 0$ ).



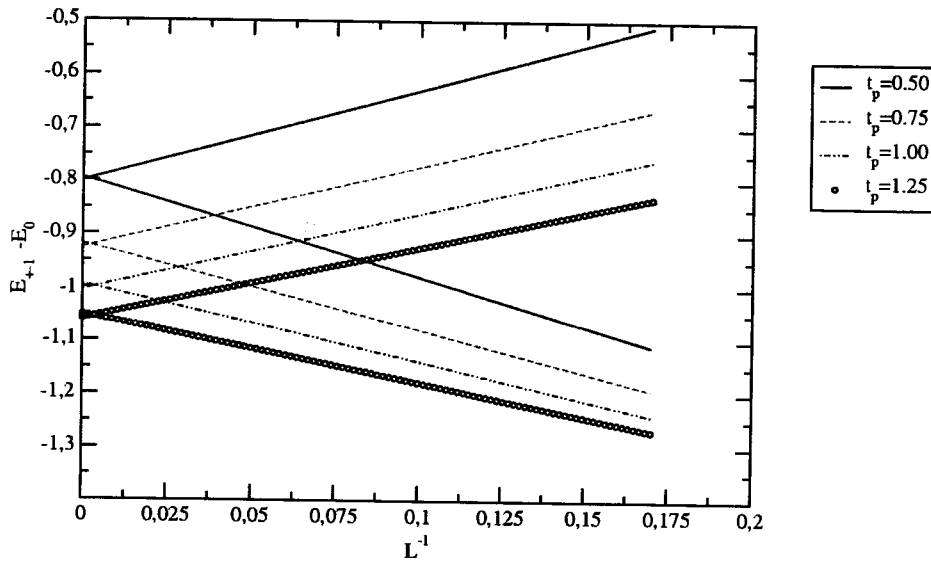


Figura 4.8: Campo magnético  $h$  necessário a fazer com que o estado fundamental pertença ao setor com densidade  $\rho = 1/2$ . Tais resultados foram obtidos através da diferença de energia  $E_{\pm 1} - E_0$  para diversos comprimentos de rede. Estes valores foram utilizados para extrapolar o valor de  $h$  para cadeias de grandes comprimentos. A dependência linear em  $L^{-1}$  é descrita por (4.33).

conforme bem como a velocidade do som.

Para obter a velocidade do som  $v_s$ , calculamos, para redes de tamanho  $L$  e densidade  $\rho$ , a diferença entre a energia do estado fundamental  $E_0$  e a energia do primeiro estado excitado  $E_1$ , com momento  $P = 2\pi/L$ . A velocidade do som é obtida da expressão

$$v_s = \lim_{L \rightarrow \infty} \Omega_L, \quad \Omega_L = (E_1 - E_0) \frac{L}{2\pi}. \quad (4.45)$$

Também calculamos a velocidade do som considerando o primeiro estado excitado no mesmo setor de partículas e momento. Neste caso, a energia deste estado é descrita por  $E_{1,1}^{0,0}$ . A velocidade do som obtida por este método foi a mesma que a obtida através da equação acima.<sup>12</sup>

<sup>12</sup> Preferimos extrair a velocidade do som através de (4.45) pois o método da potência funciona melhor para obter o autovalor de maior módulo. É possível, entretanto, obter outros autovalores, mas o custo computacional é muito maior.

A velocidade do som  $v_s$  foi obtida em função do comprimento  $L$  para cada  $t_p$ . A seqüência formada por estes diversos  $v_s$  indexados pelo comprimento  $L$  foi extrapolada para o limite assintótico ( $L \rightarrow \infty$ ). Assim adquirimos uma estimativa para o valor da velocidade do som. Os valores obtidos encontram-se tabelados na tabela 4.8 e no gráfico 4.9.

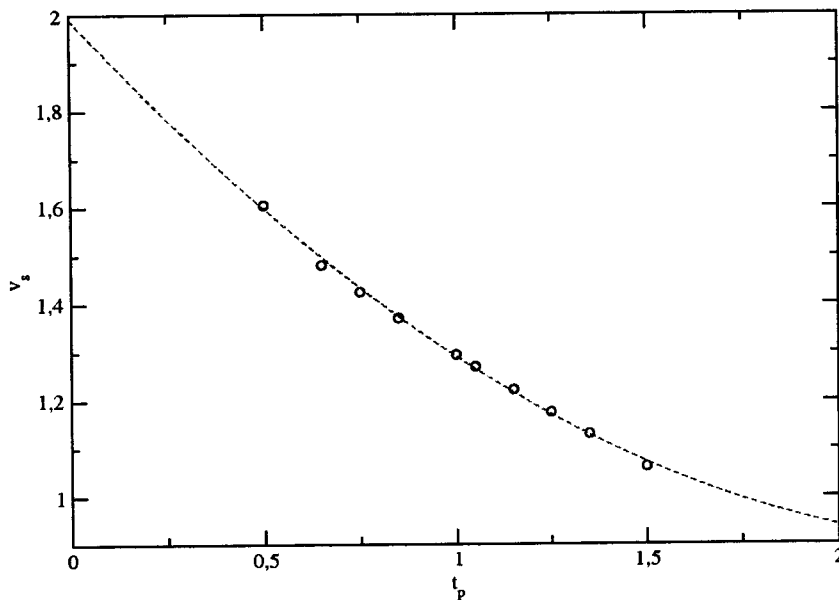


Figura 4.9: Os pontos são as estimativa da velocidade de dispersão  $v_s$ , para  $\rho = 1/2$ , como função de  $t_p$ . A linha tracejada é apenas um guia para os olhos.

$t_p$	$v_s^{est}$	$t_p$	$v_s^{est}$
0.50	1.604(9)	1.05	1.270(1)
0.65	1.480(8)	1.15	1.222(3)
0.75	1.425(1)	1.25	1.175(7)
0.85	1.371(2)	1.35	1.130(2)
1.00	1.294(7)	1.50	1.061(7)

Tabela 4.8: Valores da velocidade do som  $v_s$ , para  $\rho = 1/2$  e vários valores de  $t_p$ .

Observamos então uma propriedade interessante. A velocidade  $v_s$  diminui com o aumento da possibilidade de difusão dos sítios com dupla ocupação.

$t_p$	$c_{\text{est}}$
0.50	1.0(0)
0.75	1.0(2)
1.00	1.0(2)
1.25	1.0(3)
1.50	1.0(3)

Tabela 4.9: Estimativas dos Valores da anomalia conforme  $c$ , para  $\rho = 1/2$  e vários valores de  $t_p$ .

Uma vez obtidos as estimativas das velocidades  $v_s$ , utilizamos a expansão (4.29) para obter as respectivas estimativas para a anomalia conforme  $c$ . Apresentamos estes valores na tabela 4.9. Embora estejamos limitados a cadeia de até  $L = 20$  sítios, nossos dados indicam fortemente que o modelo é invariante conforme com  $c = 1$ . A anomalia conforme não mudou em relação ao valor obtido para  $t_p < 1/2$ .

Vamos agora ver como as dimensões anômalas  $x_{\alpha,\beta}$  dos operadores primários  $\hat{\mathcal{X}}_{\alpha,\beta}$  da teoria de campos associada se comportam quando passamos da região 2 para a região 3. Como mencionado na introdução, as dimensões  $x_{\alpha,\beta}$  relacionam-se com os expoentes críticos.

Iniciamos calculando a dimensão anômala  $x_{\pm 1,0}$  para o operador relacionado ao aumento (diminuição) da magnetização. Os estados relacionados a estes operadores encontram-se nos setores com uma partícula a mais e a menos, respectivamente, que o setor de partículas onde se encontra o estado fundamental. Estes estados possuem as menores energias em seus respectivos setores. Da diferença de energia  $E_{00}^{\pm 10}$  destes estados e da energia do estado fundamental  $E_0$ , extraímos as dimensões anômalas  $x_{\pm 1,0}$  através de (4.30), com  $m = m' = 0$ . Para isto utilizamos o campo magnético estimado  $h_{\text{est}}$  e velocidade do som  $v_s$  já estimadas. Extrapolamos as estimativas de  $x_{\pm 1,0}$  para grandes comprimentos de rede para alguns valores de  $t_p = 0.50, 0.75, 1.00, 1.25, 1.50$  e  $\rho = 1/2$ . Estes valores

encontram-se na tabela 4.10.

$t_p$	$x_{+1,0}$	$x_{-1,0}$
0.50	0.17(2)	0.17(2)
0.75	0.18(5)	0.18(5)
1.00	0.17(6)	0.17(5)
1.25	0.20(5)	0.13(2)
1.50	0.23(1)	0.11(0)

Tabela 4.10: Valores obtidos para dimensão anômala  $x_{\pm 1,0}$  para  $\rho = 1/2$ .

Nota-se para estes valores que a partir<sup>13</sup> de  $t_p > 1$ , as dimensões anômalas para o operador que adiciona uma partícula e o que retira uma partícula da configuração do estado fundamental já não coincidem. Estes valores de  $t_p$  para densidade  $\rho = 1/2$  encontram-se na região 3, região esta que não possui raízes  $\{k\}$  reais. Este é um ponto surpreendente e inesperado que esperamos clarificar no prosseguimento deste trabalho. Tal fenômeno usualmente ocorre em modelos com dois ramos de dispersão energia-momento (duas velocidades do som), como é o caso do modelo de Hubbard repulsivo fora da densidade de camada semi-cheia.

A próxima dimensão anômala a ser calculada é  $x_{0,\pm 1}$ . Esta relaciona-se com o operador responsável pelo aumento (diminuição) de  $2\pi/L$  unidades de momento para cada partícula. Dessa forma, para densidade de partículas  $\rho = 1/2$ , o momento macroscópico total é alterado pela adição de  $\pi$  unidades de momento.

A estimativa de  $x_{0,1}$  é dada em termos do comprimento de rede  $L$ , velocidade do som  $v_s$  e da energia do estado fundamental  $E_0(P_0)$  e da menor energia do estado de momento  $P_0 + \pi$ ,  $E(P_0 + \pi)$ .

$$x_{0,1} = [E(P_0 + \pi) - E_0(P_0)] \frac{L}{2\pi v_s}. \quad (4.46)$$

Realizamos este cálculo para diversos comprimentos de rede. O conjunto de medidas de  $x_{0,1}$  indexados pelo comprimento  $L$  é então extrapolado para

<sup>13</sup>Repare que  $t_p = 1$  é o ponto que divide as regiões 2 e 3 para  $\rho = 1/2$ . Não sabemos ainda se tal fato ocorre para um ponto qualquer na linha que separa as regiões 2 e 3.

grandes comprimentos de rede. Os valores obtidos encontram-se na tabela 4.11. Comparando-se esta tabela com a tabela 4.10, vemos que com boa aproximação

$$x_{0,1} = \frac{1}{4\mathbb{X}}, \quad (4.47)$$

sendo

$$\mathbb{X} = \frac{1}{2}(x_{+1,0} + x_{-1,0}). \quad (4.48)$$

Este é um fato que esperamos clarificar no futuro, com análises numéricas adicionais.

$t_p$	$x_{0,1}$	$1/2(x_{+1,0} + x_{-1,0})$
0.50	1.42(9)	0.17(2)
0.75	1.49(7)	0.18(5)
1.00	1.50(4)	0.17(6)
1.25	1.49(7)	0.16(9)
1.50	1.47(8)	0.17(1)

Tabela 4.11: Estimativas para as dimensões anômalas  $x_{0,1}$  para  $\rho = 1/2$ .

### 4.2.3 Região 4

Separamos para esta seção um resultado muito interessante. Na interface entre a região 3 e a região 4, para um valor de  $t_p = t_p^c > 1/2$  que depende da particular densidade  $\rho$ , ocorre um *cruzamento* entre um estado excitado e o estado fundamental. Após isso, aquele que era o estado fundamental passa a ser o estado excitado. No gráfico 4.10 ilustramos este fenômeno para duas cadeias de comprimento  $L = 10$  e  $L = 12$  para o setor de densidade  $\rho = 1/2$ . Sendo as distribuições de raízes para cada estado distintas entre si, vemos que há uma mudança na distribuição de raízes do estado de menor energia.

As energias de cada estado, por sua vez, são funções distintas em  $t_p$ . Assim, ocorre uma variação descontínua na variação da energia do estado fundamental em  $t_p = t_p^c$  para uma dada densidade  $\rho$ . Temos então uma transição de fase quântica de primeira ordem.

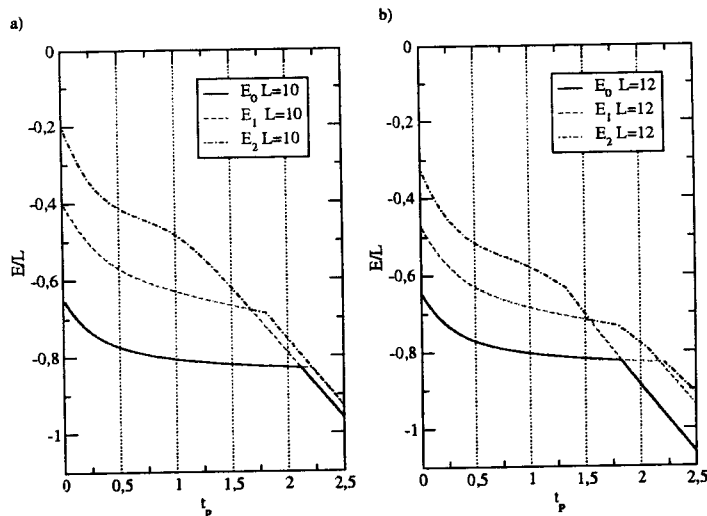


Figura 4.10: Em a) é apresentado a variação da energia para os três primeiros estados contendo  $n = 5$  partículas, para o setor de momento nulo para uma cadeia de  $L = 10$ . Em  $t_p = 2.12 = t_p^c$ , o estado fundamental torna-se degenerado. O segundo estado excitado em  $t_p = 0$  torna-se o estado fundamental para  $t_p > t_p^c$ . Em b)  $L = 12$ ,  $n = 6$  o mesmo fenômeno é verificado para  $t_p^c = 1.83$ .

Podemos verificar também que na região 4 a simetria conforme é quebrada.

A evidência para tal afirmativa é que a energia do estado fundamental por comprimento de rede não varia com  $L^{-2}$  conforme vemos na figura 4.11.

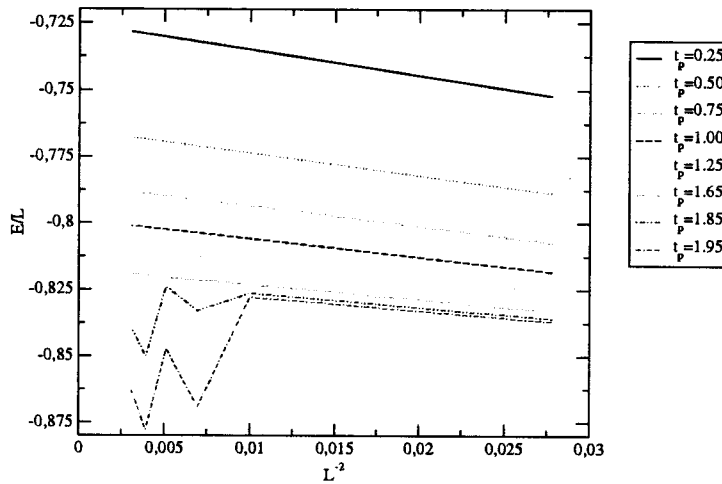


Figura 4.11: Para valores de  $t_p = 1.85, 1.95$  e  $\rho = 1/2$ , a dependência da energia do estado fundamental com  $L$  não obedece a forma dada em (4.29), indicando a quebra da simetria conforme.

A quebra acontece para algum valor de  $t_p = t_p^c > 1/2$ . Na figura 4.12 mostramos o valor de  $t_p^c$  obtido para  $\rho = 1/2$  utilizando-se cadeias de tamanho  $L = 6, 7, \dots, 16$ . Dos gráficos 4.10 e 4.12 é evidente que  $t_p^c$  varia exponencialmente com o comprimento da rede. Nossos resultados indicam uma possível lei de escala, de forma aproximada, a seguinte dependência da estimativa  $t_p^c$  como função do comprimento  $L$  para a densidade  $\rho = 1/2$ ,

$$t_p^c = \frac{7}{2} \left( \frac{1}{2} + e^{-(L-6)} \right) \text{ onde.} \quad (4.49)$$

Na figura 4.12 mostramos a equação (4.49) (curva pontilhada).

Cálculos análogos foram feitos para as densidades  $\rho = 1/3$  e  $\rho = 1/4$ . Embora tenhamos feito tal análise para poucas densidades, acreditamos que tal comportamento seja geral e esperamos que no limite termodinâmico o mesmo ocorra em toda região 4 da figura 4.3.

Será bastante interessante como continuação deste trabalho um melhor entendimento da física do modelo na região 4. Embora não seja tarefa fácil, será

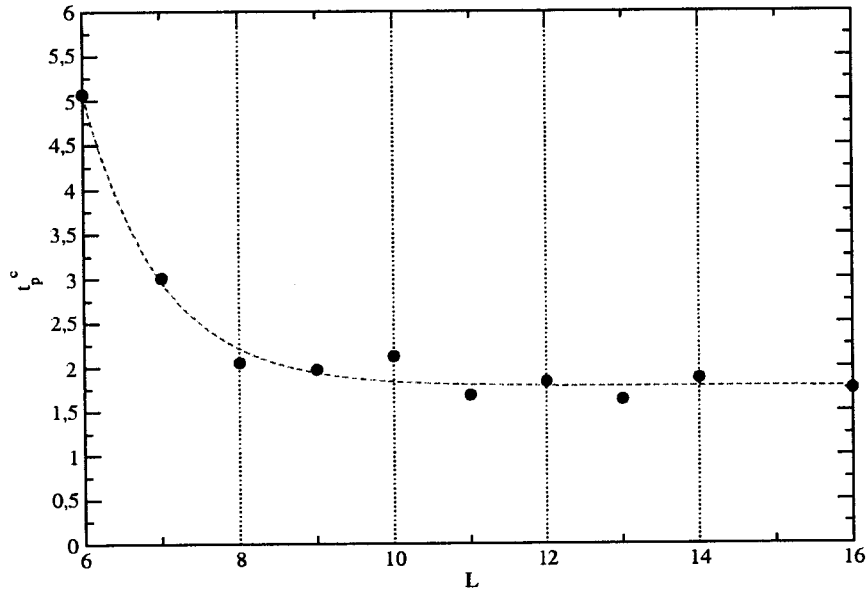


Figura 4.12: Valor do ponto  $t_p^c$  (bolinhas cheias) para diversos valores de cadeia (veja texto). A linha tracejada é o ajuste  $\tau = \frac{7}{2} \left[ \frac{1}{2} + e^{-(L-6)} \right]$ .

bastante interessante obter a topologia das raízes espectrais dos estados de menor energia nesta região.



### 4.3 Considerações finais

Nas seções anteriores, vimos que o modelo NDF, em  $0 < t_p < t_p^c$ , é crítico e o mesmo é governado por uma teoria conforme com carga central  $c = 1$ , análogo ao modelo XXZ, isto é, neste regime as propriedades físicas relevantes (correlações de longo alcance, etc.) destes modelos são semelhantes. Baseados nestas informações e nas expressões (4.4) e (4.9) para a matriz de espalhamento, podemos ainda obter informações interessantes.

Primeiro, no caso limite  $t_p = 0$  a (4.4) é reduzida à matriz  $S$  do modelo XY ( $S = -1$ ). Neste limite, os termos do Hamiltoniano (4.2) relacionados com a dupla ocupação possuem um custo infinito em relação aos de simples e nenhuma ocupação. Como o potencial  $\Gamma_{11}^{11} = 0$ , temos, no caso  $\rho < 1$ , uma cadeia equivalente de spin 1/2 cuja dinâmica é a mesma que a da cadeia crítica XY, para os ocupação de simples. Assim, para  $\rho < 1$ , a energia média das configurações envolvendo ocupação dupla é infinita. Conseqüentemente, o espectro se separa em duas partes por um gap de energia infinito. Como ilustração colocamos na tabela 4.12 as auto-energias da cadeia NDF e XY (spin 1/2), com tamanho  $L = 8$ , número de partículas  $n = L/2 = 4$  e pertencentes ao setor de momento  $P = 0$ . Nela distingue-se claramente o espectro da cadeia XY dentro do espectro do modelo NDF. Corroborando com essas asserções, a velocidade do som da cadeia NDF pode ser obtida a partir da velocidade do som da cadeia XY que é  $v_s = 2.0$ . Tal fato evidencia a boa qualidade do ajuste feito na figura 4.9, onde a velocidade do som foi estimada para densidade  $\rho = 1/2$ .

Outra informação interessante é obtida quando  $t_p = 1$ . Neste ponto ocorre a conservação do número de sítios com ocupação simples e dupla independentemente, pois os termos  $\Gamma_{20}^{11} = \Gamma_{02}^{11}$  são nulos. Neste caso as equações espectrais (4.9), para uma rede de comprimento  $L$  e  $n$  partículas, são dadas por

$$\left[ \frac{\sinh(\lambda_i + i\gamma/2)}{\sinh(\lambda_i - i\gamma/2)} \right]^L = \prod_{j=1}^n \frac{\sinh(\lambda_i - \lambda_j + i\gamma)}{\sinh(\lambda_i - \lambda_j - i\gamma)}, \quad (4.50)$$

onde  $\gamma = -2\pi/3$ . Esta é a mesma equação espectral que aquela do modelo XXZ com  $\Delta = -\cos(\gamma) = \frac{1}{2}$ . A velocidade do som da cadeia XXZ em  $\Delta = 1/2$  e

	$E_{AB}$	$E_{XXZ}$
1	-5.22625185831363	-5.22625185950551
2	-2.16478444286652	-2.16478440058479
3	$-7.8 \cdot 10^{-8}$	0.0
4	$-2.1 \cdot 10^{-8}$	0.0
5	$-9.2 \cdot 10^{-9}$	0.0
6	$-7.9 \cdot 10^{-9}$	0.0
7	$-1.3 \cdot 10^{-9}$	0.0
8	$7.7 \cdot 10^{-9}$	0.0
9	2.16478435399971	2.16478440058479
10	5.22625182627476	5.22625185950550
11	$10^8$	-
12	$10^8$	-

Tabela 4.12: Espectro de energia para as cadeias NDF spin 1(esquerda) e XXZ spin 1/2(direita). Ambas as redes possuem comprimento  $L = 8$ ,  $n = 4$  partículas e momento  $P = 0$  com condição periódica de contorno. Para o modelo NDF,  $t_p = 10^{-8}$  e mostramos apenas os primeiros 12 níveis. Para o modelo XXZ,  $\Delta = 0$ .

$\rho = 1/2$  é  $v_s^{xxz} = 1.299038106$ . Para o modelo NDF, com esta densidade, nossas estimativas fornecem  $v_s = 1.294(7)$ , como mostra a tabela 4.8. Os espectros de energia, diferentemente do ocorrido anteriormente, não mais coincidem. Para que este propósito seja satisfeito, é necessário adicionar um campo magnético  $h_{xxz}$  e uma constante ao modelo XXZ, isto é,

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^L \left[ \hat{\sigma}_k^x \hat{\sigma}_{k+1}^x + \hat{\sigma}_k^y \hat{\sigma}_{k+1}^y - \Delta \hat{\sigma}_k^z \hat{\sigma}_{k+1}^z - \frac{\Delta}{2} (\hat{\sigma}_k^z + 1) \right], \quad (4.51)$$

com  $\Delta = 1/2$ . Desta forma, o espectro de energia do modelo XXZ, com  $\rho < 1$  fica contido no espectro do modelo NDF em  $t_p = 1$  para mesma densidade  $\rho$ . Assim, uma interessante interpretação do modelo NDF é que o mesmo seria uma deformação da cadeia XXZ na anisotropia  $\Delta = 1/2$ , pois com a introdução de  $t_p \neq$

1 apenas o lado esquerdo da equação espectral se modifica. Tal efeito é análogo às extensões integráveis das cadeias XXZ com spins maiores ( $s = 1, 3/2, \dots$ ).

Esperamos futuramente estabelecer melhor a relação entre a cadeia de spin 1 NDF e a cadeia de spin 1/2 XXZ, cujo comportamento físico (fases, expoentes críticos) é conhecido de forma analítica.

# Capítulo 5

## Conclusão

Nesta dissertação, descrevemos a maioria das técnicas adquiridas nesses dois anos, como fermionização, ansatz de Bethe e do produto matricial, utilização de propriedades advindas da invariância conforme e métodos numéricos (construção e diagonalização de hamiltonianos quânticos). Obtivemos soluções exatas de cadeias de spin meio e spin um, realizando, quando possível, uma análise do espectro de energia sob a óptica da invariância conforme. Alguns destes resultados embora já reportados na literatura (spin meio) foram apresentados numa nova abordagem, enquanto outros são originais (spin um).

Dos modelos de spin meio dissertamos sobre as cadeias quânticas XY com campo magnético alternado e XY com exclusão. No primeiro caso, obtivemos a solução exata através da fermionização da cadeia quântica. Verificamos, em primeira ordem, a existência de um gap de energia que é proporcional à intensidade do campo magnético alternado. No segundo caso, obtivemos uma solução exata via transformação de Jordan-Wigner, diferentemente de [11], onde a solução foi obtida através de uma generalização do ansatz de Bethe. Este modelo possui um espectro contínuo de energia o que possibilitou uma análise via invariância conforme. Obtivemos a carga conforme da teoria de campos bidimensional associada ( $c = 1$ ), além das dimensões anômalas. Os valores obtidos encontram-se de acordo com aqueles em [11]. Esses dois modelos serviram como base para o aprendizado de fermionização de cadeias quânticas, identificação de gaps e sobre

as técnicas de invariância conforme.

Quanto aos modelos de spin um, estudamos o modelo NDF, que fora pouco estudado na literatura. Devido a pouca informação disponível referente ao modelo, depara-mo-nos com comportamentos distintos daqueles de modelos bem conhecidos. Ainda não fomos capazes de explicá-los. Entre estes, citamos o aparecimento de raízes do tipo strings, com o aumento do acoplamento cinético  $t_p$ , na distribuição de raízes que caracteriza o estado fundamental. Verificamos também que ocorre um cruzamento entre níveis de energia do estado fundamental e do primeiro estado excitado, dentro do mesmo setor de partículas. Este fato caracteriza uma transição de fase quântica de primeira ordem. Por fim, ainda verificamos que as dimensões anômalas  $x_{\pm 1,0}$ , relacionadas aos setores com uma partícula a mais (menos) que o estado fundamental, são diferentes para  $t_p > 1$ , com densidade de partículas  $\rho = 1/2$ , isto é,  $x_{+1,0} \neq x_{-1,0}$ . É importante lembrar que, para essa particular densidade,  $t_p = 1$  é exatamente o ponto que delimita as regiões com soluções reais das soluções com raízes complexas.

Como visto, existem muitos fatos não compreendidos, mas, por outro lado, realizamos contribuições rumo a melhor compreensão do modelo. Entre as contribuições citamos a adição do termo de campo magnético ( $-\sum_{k=1}^L \hat{n}_k/2t_p$ ) ao Hamiltoniano do modelo NDF, proposto em [13]. Este campo fixa a ocorrência do estado fundamental ao setor de  $L$  partículas para qualquer valor de  $t_p$ . Realizamos também uma análise do espectro sob a óptica da invariância conforme. Desta obtivemos numericamente a velocidade do som, dimensões anômalas e anomalia conforme ( $c = 1$ ) nas regiões que apresentaram tal simetria. Através deste conjunto de informações conseguimos esboçar um diagrama de fases para o modelo, que, embora rudimentar, expressa as informações relevantes coletadas.

Por fim, relacionamos o modelo NDF de spin 1 com o modelo XXZ de spin  $1/2$ , para  $\rho = 1/2$ . Esta relação talvez seja a mais animadora das contribuições pois vincula o modelo NDF ao modelo XXZ, que provavelmente é a cadeia quântica melhor compreendida. Nesta relação é depositada muita esperança em encontrar expressões analíticas que permitam encontrar informações sobre o comportamento

crítico do modelo.

É claro para nós que muito ainda resta a ser feito sobre o modelo NDF e esperamos compreender as propriedades físicas distintas, acima mencionadas, futuramente.

## Referências Bibliográficas

- [1] E. H. Stanley, *Introduction to phase transition and critical phenomena*, (New York, Oxford University Press, 1979).
- [2] E. Ising, *Beitrag Zur Theorie des Ferromagnetismus*, *Z. Physik*, **31**(1925), 253.
- [3] W. Heisenberg, *Zur Theorie des Ferromagnetismus*, *Z. Physik*, **49**(1928), 619.
- [4] H. A. Bethe, *Zur Theorie der Metalle*, *Z. Physik*, **71**(1931), 205.
- [5] L. Onsager, *Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition*, *Phys. Rev.* **65**(1944), 117.
- [6] J.B. Kogut, *Introduction to Lattice Gauge Theories and Spin Systems*, *Rev. Mod. Phys.*, **51**(1967), 659.
- [7] K.G. Wilson, *Renormalization Group and Critical Phenomena. I. Renormalization Group and the Kadanoff's Scaling Picture.*, *Phys. Rev. B*, **4**(1971), 3174.
- [8] A.B. Zamolodchikov, A.M. Polyakov, A.A Belavin, *Infinite conformal symmetry in two-dimensional quantum field theory*, *Nuclear Phys. B*, **241**(1984), 333.
- [9] M. Henkel, *Conformal Invariance and Critical Phenomena*, (Heidelberg, Springer, 1999).

- [10] J.L. Cardy, *Phase Transition and Critical Phenomena* (C. Domb e J.L. Lebowitz), (New York, Academic Press, 1987), Vol. **11**.
- [11] F.C. Alcaraz, R.C. Bariev, *Statistical Physics on the Eve of the Twenty-First Century (Series on Advances in Statistical Mechanics)* (M. T. Batchelor and L. T. Wille), (Singapore, World Scientific, 1999), Vol. **14**.
- [12] F. C. Alcaraz, M. J. Lazo, *J. Phys. A: Math. and Gen.*, **37**(2004), 4149.
- [13] F. C. Alcaraz, R. Z. Bariev, *J. Phys. A: Math. and Gen.*, **34**(2001), L467.
- [14] E. Lieb, D. Mattis, T. Schultz, *Two soluble models of an antiferromagnetic chain*, *Ann. Phys.*, **16**(1961).
- [15] A.B. Zamolodchikov, V. Fateev, *Sov. J. Nucl. Phys.* **32**(1980), 298.
- [16] A.G. Izergin, V. E. Korepin, *Commun. Math. Phys.*, **79**(1981), 303.
- [17] F.C. Alcaraz, M.N. Barber, M.T. Batchelor, *Conformal Invariance, the XXZ Chain and the Operator Content of Two-Dimensional Critical Systems*, *Ann. Phys.*, **182**(1988).
- [18] M. Idzumi, T. Tokihiro, M. Arai, *J. Phys. France I*, **4**(1994), p1151
- [19] R. Baxter, *Exactly soluble models in statistical mechanics*, (New York, Academic Press, 1990).