**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS**

Matheus de Oliveira Schossler

Dinâmica de operadores de dois spins no modelo XX

São Carlos

2017

Matheus de Oliveira Schossler

Dinâmica de operadores de dois spins no modelo XX

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo, para obtenção do título de Mestre em Ciências.

Área de concentração: Física Básica

Orientador: Prof. Dr. Rodrigo Gonçalves Pereira

Versão corrigida
(Versão original disponível na Unidade que aloja o Programa)

São Carlos
2017

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Ficha catalográfica revisada pelo Serviço de Biblioteca e Informação do IFSC,
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

Schossler, Matheus de Oliveira

Dinâmica de operadores de dois spins no modelo XX
/ Matheus de Oliveira Schossler; orientador Rodrigo
Gonçalves Pereira - versão corrigida -- São Carlos,
2017.

95 p.

Dissertação (Mestrado - Programa de Pós-Graduação em
Física Básica) -- Instituto de Física de São Carlos,
Universidade de São Paulo, 2017.

1. Sistemas unidimensionais. 2. Dinâmica quântica.
3. Cadeias de spin. 4. Magnetismo quântico. I.
Pereira, Rodrigo Gonçalves, orient. II. Título.

AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer a minha família, por sempre ter me apoiado. Agradeço ao meu orientador, o professor Rodrigo Pereira, pelos ensinamentos em física. Agradeço aos meus amigos, pelas discussões em física e os momentos de divertimento. Em particular gostaria de agradecer o meu colega de sala João Carlos, pelas conversas durante os anos do mestrado.

Também gostaria de agradecer o IFSC por providenciar tudo o que foi necessário para desenvolver o meu trabalho, e ao CNPq (projeto 830717/1999-4) e à FAPESP (processo n. 2015/05644-9) pelo suporte financeiro.

RESUMO

SCHOSSLER, M. O. **Dinâmica de operadores de dois spins no modelo XX.** 2017. 95p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2017.

Propriedades dinâmicas de sistemas quânticos de muitos corpos é um tópico de grande interesse em física da matéria condensada. Estas propriedades nos dão informação sobre a propagação de excitações elementares e de mecanismos de relaxação em sistemas interagentes. Neste contexto, as funções de correlação tem se tornado ainda mais relevantes devido a experimentos em sistemas de átomos frios e íons armadilhados que medem diretamente no domínio temporal os comportamentos assintóticos no tempo. No entanto, até o momento a maioria dos estudos em cadeias de spin quânticas focaram-se em correlações de um único spin. Utilizando a cadeia de spin XX unidimensional, nós estudamos métodos exatos para calcular as funções de correlação das componentes do tensor de dois spins, $T_{i,j}^{ab} = S_i^a S_j^b$. Estes operadores aparecem, por exemplo, como a resposta da seção de choque de espalhamento inelástico de raios X. Baseados no teorema de Wick, nós mostramos que algumas funções de correlação das componentes locais do tensor de dois operadores de spins de sítios vizinhos, na representação de férmions, podem ser escritas como uma combinação de funções de Green de uma única partícula. Utilizamos diagramas de Feynman para organizar esta combinação e calcular as funções de correlação. Em seguida, considerando esses propagadores para tempos longos e grandes distâncias ao longo do cone de luz, encontramos o comportamento dessas funções de correlação como leis de potência oscilatórias que decaem com o tempo e distância. Uma aplicação direta das funções de correlação é para o estudo de quantidades conservadas e não conservadas, uma análise sobre algumas dessas quantidades foi feita. Discutimos também as funções de correlação das componentes do tensor que não são locais na representação fermiônica. Nesse caso os cálculos foram mais desafiadores, mas usamos o fato que funções de correlação dependente do tempo podem ser expressadas em termos dos determinantes de Fredholm.

Palavras-chave: Sistemas unidimensionais. Dinâmica quântica. Cadeias de spin. Magnetismo quântico.

ABSTRACT

SCHOSSLER, M. O. **Dynamics of two-spin operators in the XX model.** 2017. 95p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2017.

Dynamical properties of quantum many body systems is a major topic of interest in condensed matter physics. These properties tell us about the propagation of elementary excitation and mechanisms of relaxation in interacting systems. In this context correlation functions have become even more relevant due the experiments in systems of cold atoms and trapped ions that measure real time dependence directly out to relatively long times. However, most studies in quantum spins chains so far have focused on correlations of single spins. Using the one dimensional XX spin chain, we study exact methods to calculate the correlation functions of the components of the tensor operator involving two spins, $T_{i,j}^{ab} = S_i^a S_j^b$. This operator appear, for example, as a response of inelastic x-ray scattering cross section. Based on Wick's theorem, we show that some correlation functions of local components of the tensor operator of two pairs of neighbor sites, in the fermion space, can be written as a combination of Green's functions of a single particle. We have used Feynman diagrams to organize this combination and calculate the correlation functions. Then, considering these propagators for long times and large distances along the light cone, we found the behavior of these correlation functions as a oscillatory and power law decay on time. A direct application of correlation functions is to study conserved and non-conserved quantities, and such analysis has been made. We also considered other two-spin operators which are not local in the fermionic representation. In this case the calculation is more challenging, but the time-dependent correlation functions can be expressed in terms of Fredholm determinants.

Keywords: One-dimensional systems. Spin chains. Quantum dynamics. Quantum magnetism.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

- Figura 1 – Configuração de ocupação na representação dos *momenta* dos férmions no estado fundamental. A área em azul claro é chamada de mar de Fermi. 19
- Figura 2 – Diagramas associados com as 6 formas de contração das equações (3.13). 32
- Figura 3 – Função de correlação $C^{zz,+-}(x, t)$ como função do tempo e da distância. 37
- Figura 4 – Função de correlação $C^{zz,+-}(x, t)$ para $Jt \gg x = 6$. Em vermelho curva com aproximação analítica na equação (3.40). Em círculos azuis, cálculo numérico da equação (3.31). 40
- Figura 5 – Excitação de partícula-buraco do fundo da banda para o ponto de Fermi. A partícula e o buraco são criados na superfície de Fermi e no fundo da banda, respectivamente. A criação de partícula em $-\pi/2$ também é importante. Essa excitação dá origem ao termo $\cos(\frac{x\pi}{2})\frac{e^{-iJt}}{(Jt)^{3/2}}$ 41
- Figura 6 – Excitação partícula-buraco de baixa energia (relação de dispersão linearizada), próximo a superfície de Fermi. A criação de uma partícula próximo a $-\pi/2$ e de um buraco próximo a $\pi/2$ também gera contribuições, assim como a criação de uma partícula e buraco próximos ao mesmo ponto de Fermi. São responsáveis pelos termos $\frac{1}{(Jt)^2}$, $\frac{e^{\pm i\pi x}}{(x)^2}$, ou $\frac{1}{(x)^2}$ nas funções de correlação. 42
- Figura 7 – Excitação partícula-buraco com a criação de um buraco no fundo da banda e uma partícula no topo. É responsável pelo termo $e^{i\pi x}\frac{e^{-i2Jt}}{(Jt)^2}$ nas funções de correlação da forma de $C^{zz,+-}$, pois envolve a combinação de duas dessas excitações. Para as funções de correlação $C^{+-,+-}(x, t)$ e $C^{+-,+-}(x, t)$ o termo $e^{i\pi x}\frac{e^{-i2Jt}}{Jt}$ (que envolve somente uma partícula e um buraco) é dominante para tempos longos. 43
- Figura 8 – Função de correlação $C^{zz,+-}(x, t)$ para $x \gg Jt = 6$. Em vermelho curva com aproximação analítica (3.42). Em círculos azuis, cálculo numérico (3.31). A parte imaginária nesse limite é zero. 43
- Figura 9 – Excitação por criação de um buraco e uma partícula próximo aos pontos de Fermi. Em $-\pi/2$ é devido ao limite no cone de luz $x = Jt \gg 1$ com relação de dispersão aproximada até o termo cúbico, em $\pi/2$ é devido a baixas energias (aproximação linear). É responsável pelo termo $\frac{e^{-i\pi Jt}}{(Jt)^{4/3}}$ 44
- Figura 10 – Função de correlação $C^{+-,+-}(x, t)$ para $x = Jt \gg 1$. Em vermelho curva com aproximação analítica e em círculos azuis, cálculo numérico (3.50). 46
- Figura 11 – Excitação por criação de um buraco e uma partícula próximo ao ponto de Fermi $k = -\pi/2$, surge no limite $x = Jt \gg 1$ nas funções de correlação $C^{+-,+-}(x, t)$ e $C^{+-,+-}(x, t)$. É responsável pelo termo $\frac{1}{(Jt)^{2/3}}$. 47

Figura 12 – Parte real e imaginária de $C_A(t)$, onde fizemos $J = 1$ para constante de acoplamento do modelo XX	51
Figura 13 – Parte real de $C_B(t)$	52
Figura 14 – Excitação de buraco no fundo da banda com aproximação quadrática. .	81
Figura 15 – Excitação de buraco próxima a superfície de fermi com aproximação linear. A criação de buraco próximo a também é importante.	82
Figura 16 – Excitação de buraco próxima a superfície de Fermi para o cone de luz. A relação de dispersão é aproximada até o termo cúbico.	84
Figura 17 – Diagramas associados com as 6 formas de contração das equações (D.20). .	94

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	13
2	O MODELO XX E OS OPERADORES TENSORIAIS	17
2.1	O modelo XX e o mapeamento para férmions livres	17
2.2	O tensor de dois spins	19
2.3	Simetria e carga do tensor de dois spins	21
2.4	Componentes locais e não locais do tensor de spins	23
2.5	Funções de correlação do tensor de spins	25
3	FUNÇÕES DE CORRELAÇÃO DAS COMPONENTES LOCAIS DO TENSOR DE SPINS	29
3.1	Determinação das funções de correlação	29
3.2	Análise das funções de correlação	36
3.3	Quantidades conservadas e não conservadas	48
4	FUNÇÕES DE CORRELAÇÃO DAS COMPONENTES NÃO LO- CAIS DO TENSOR DE SPINS	55
4.1	Forma das funções de correlação	55
4.2	Determinante de Fredholm	56
5	CONCLUSÃO	67
	REFERÊNCIAS	69
	APÊNDICES	75
	APÊNDICE A – FUNÇÃO DE GREEN DE UM FÉRMION LIVRE SEM SPIN EM 1D	77
	APÊNDICE B – CONTRAÇÕES DE WICK	85
	APÊNDICE C – FUNÇÃO DE CORRELAÇÃO $C^{zz,zz}(x,t)$	87
	APÊNDICE D – TEORIA DE PERTURBAÇÃO	89

1 INTRODUÇÃO

Física da matéria condensada é um vasto campo que se propõe em explicar sistemas como sólidos e líquidos em baixas temperaturas, muitas vezes utilizando-se de teorias físicas, como, por exemplo, mecânica quântica, mecânica estatística e teoria quântica de campos. Nos últimos sessenta anos, foi um dos ramos da física que mais impactaram a sociedade, destacadamente com a criação do transistor,¹ o que possibilitou o desenvolvimento dos computadores modernos. Na década de noventa, a física da matéria condensada passou por uma etapa de desenvolvimento intenso devido à descoberta das tecnologias em ótica quântica.

As propriedades de sistemas de elétrons interagentes em três dimensões são bem descritas pela teoria de líquidos de Fermi de Landau.^{2,3} Essa teoria é uma escapatória para entender de forma relativamente simples sistemas em que as interações podem ser tratadas como uma perturbação fraca. As excitações de baixas energias correspondem a quase-partículas fermiônicas obtidas perturbativamente com alguns parâmetros, como a massa, renormalizados em comparação com o sistema de elétrons livres. Contudo, essa situação é radicalmente diferente em sistemas unidimensionais. Quando ligamos uma interação nesses sistemas, por menor que ela seja, um efeito dominó acontece, onde cada partícula empurra a partícula vizinha já que elas não podem evitar de se chocarem na única direção disponível para o movimento. Assim, todas as excitações são coletivas.⁴

Os efeitos da dimensionalidade reduzida em sistemas quânticos são dramáticos. Esse cenário é particularmente fascinante devido à riqueza de fenômenos exóticos que apresentam.⁵⁻⁷ Alguns exemplos desses fenômenos incluem, além de excitações coletivas, separação spin-carga,⁸ que é um exemplo de fracionalização das excitações; ausência de ordem de longo alcance, que é uma consequência do teorema de Mermin-Wagner;⁹⁻¹¹ a teoria de líquido de Tomonaga-Luttinger (veja a seguir). O interesse em sistemas quânticos de muitos corpos unidimensionais foi também promovido pelos avanços experimentais nos últimos 25 anos. Em destaque, a tecnologia com átomos frios tem possibilitado a simulação de sistemas físicos de forma bastante controlada.¹²⁻¹⁵ Nesses experimentos, uma nuvem de átomos é confinada em duas direções transversais, deixando os átomos livres para se mover apenas na direção longitudinal. Fios quânticos são outro exemplo de sistemas unidimensionais de interesse. Um exemplo bem conhecido são os nanotubos de carbono,¹⁶ que são tubos finos em que o diâmetro é comparável com o comprimento de onda do elétron e, como consequência, o movimento é confinado ao longo de uma dimensão.¹⁷ Os estados quirais de bordas de sistemas em duas dimensões onde o efeito Hall quântico é observado também são um exemplo interessante.¹⁸

O entendimento teórico dos sistemas quânticos unidimensionais evoluiu de forma

considerável na segunda metade do século passado. Uma importante classe de sistemas interagentes unidimensionais estudada foi o líquido de Tomonaga-Luttinger (LTL). Os dois físicos que deram nome a este modelo deram contribuições de forma independente. Em 1950 Tomonaga¹⁹ mostrou que linearizando o espectro de energia, um sistema fermiônico interagente poderia ser mapeado num sistema de fônons não interagentes. Logo depois, em 1963, Luttinger²⁰ redescobriu esse mapa e tentou calcular a distribuição de momenta, clareado mais tarde por Mattis e Lieb que chegaram a calcular a função de partição e outras propriedades físicas desse modelo sem diagonalizá-lo.²¹ A abordagem moderna, conhecida como bosonização,^{4,22} que conecta o líquido de Tomonaga-Luttinger com excitações de baixa energia de sistemas interagentes de férmions e bósons em uma dimensão em baixas temperaturas, foi desenvolvida por Haldane^{23,24} em 1985.

Em sistemas unidimensionais críticos, o comportamento típico das funções de correlação estáticas (funções da distância) são leis de potência. As flutuações quânticas, uma consequência do princípio da incerteza, usualmente previnem a quebra espontânea de simetrias contínuas.⁹⁻¹¹ Por isso, estes sistemas só possuem a chamada ordem de quase longo alcance, até em temperatura zero.⁵ Bosonização é a ferramenta favorita para explicar propriedades de baixas energias ou de equilíbrio em sistemas quânticos unidimensionais na classe de universalidade dos líquidos de Luttinger. Contudo, essa ferramenta sozinha falha completamente na descrição de propriedades dinâmicas ou de não equilíbrio. Excitações de baixa energia são frequentemente necessárias, mas somente combinadas com graus de liberdade adicionais podem descrever excitações de altas energias. Para descrição de propriedades dinâmicas, quase-partículas fermiônicas introduzidas por Mattis e Lieb²¹ são mais convenientes do que teoria de bosonização. Além disso, curiosamente, surgem conexões entre um LTL não linear e a teoria de líquidos de Fermi de Landau.⁶

O estudo de propriedades dinâmicas em sistemas quânticos de muitos corpos é de grande interesse.²⁵ Essas propriedades nos dão informações sobre a propagação de excitações elementares,^{26,27} mecanismos de relaxação em sistemas interagentes,^{28,29} sistemas com possíveis aplicações em computação quântica,^{30,31} fenômenos de transporte.³² Questões importantes surgem no estudo de dinâmica de excitações em sistemas unidimensionais, como por exemplo quão rápido as correlações se espalham. A resposta para esta pergunta foi respondida por Lieb e Robinson,³³ que descobriram a existência de um limite superior para a velocidade de excitações em sistemas com interações de curto alcance, levando a existência de um cone de luz. Atualmente, o estudo dessas propriedades de dinâmica, por vezes, é realizado utilizando-se de técnicas computacionais. Um exemplo é o algoritmo de grupo de renormalização para a matriz densidade (*Density Matrix Renormalization Group* - *DMRG*), que foi criado por White em 1993.³⁴ Esse algoritmo foi desenvolvido e tem sido bastante usado até mesmo para o cálculo de funções de correlação no domínio do tempo.^{27,35,36}

Uma das principais motivações para o estudo de dinâmica em sistemas quânticos unidimensionais nos últimos anos é devido aos avanços experimentais. Sistemas de átomos frios e íons armadilhados que medem direta ou indiretamente as funções de correlação no domínio do tempo só foram permitidos graças ao alto grau de isolamento em relação ao ambiente externo, diminuindo os efeitos de dissipação e decoerência quântica mesmo para tempos longos. Com isso, simulações de sistemas quânticos unidimensionais tem sido implementadas em larga escala.^{12,14,15,26,31,37,38} Muitos desses experimentos utilizam o *quench* quântico como ponto de partida, que consiste em observar a evolução temporal após uma mudança repentina dos acoplamentos do Hamiltoniano do sistema²⁵. Outros experimentos para o estudo de dinâmica em sistemas de spins unidimensionais são os de espalhamentos de nêutron,^{39–41} que dependem do fator de estrutura de um único operador de spin, e novos experimentos com espalhamento de raio X,^{42–45} que dependem de operadores de dois de spin.

Sistemas magnéticos são exemplos importantes em física de uma dimensão. A classe de sistemas integráveis conhecidos como XXZ em sua fase crítica pode ser mapeado em um LTL, e a solução exata desse modelo pode ser obtida via ansatz de Bethe.^{5,46} Um caso particular desse modelo, quando a constante de anisotropia vale zero, é o modelo XX . Esse modelo pode ser diagonalizado exatamente através da transformação de Jordan-Wigner, que é um mapeamento da cadeia de spins em um sistema de férmions livres sem spin.⁴ Embora o modelo XX , quando escrito na representação dos férmions, é um sistema não interagente, o estudo desse sistema serve como ponto de referência para um LTL.

A maioria dos estudos em cadeias quânticas de spin até agora tem focado em correlações de um único spin.⁴⁷ Esse tipo de função de correlação era mais interessante porque os experimentos com espalhamento de nêutrons dependem do fator de estrutura (transformada de Fourier da função de correlação) de um operador de spin. Mas como vimos, os experimentos com espalhamento de raio X tem proporcionado novos desafios. O estudo das funções de correlação do dímero de spins, que é o produto de dois operadores de spins adjacentes, tem evoluído desde então.^{43,48,49} Neste trabalho fazemos um estudo exato das funções de correlação de todos os operadores de dois spins no modelo XX .

Esta dissertação está organizada da seguinte forma. No capítulo 2 apresentamos uma análise do operador tensorial de spins, que é um tensor onde cada uma das componentes é um operador dímero de spins. Para calcular as funções de correlação, algumas simplificações podem ser feitas utilizando simetrias do modelo XX . A transformação de Jordan-Wigner incorpora um operador não local (depende de infinitos sítios no limite termodinâmico), chamado de *string*, aos operadores de férmions, e isso traz complicações no cálculo das funções de correlação. No capítulo 3 utilizamos técnicas de teoria de campos, como o teorema de Wick e diagramas de Feynman, para determinar os comportamentos assintóticos das funções de correlação das componentes do tensor que não dependem da *string*. No

capítulo 4 discutimos e apresentamos resultados preliminares das funções de correlação das componentes que dependem da *string*, além do teorema de Wick utilizamos uma técnica de equações integrais, o determinante de Fredholm.⁵⁰ Por fim apresentamos as conclusões do trabalho no capítulo 5.

2 O MODELO XX E OS OPERADORES TENSORIAIS

Neste capítulo vamos apresentar o Hamiltoniano do modelo XX e algumas de suas características. Feito isso partiremos para a discussão do operador tensorial, que é um operador que envolve dois spins adjacentes, e as funções de correlação de suas componentes. Veremos que as componentes desse operador podem ser divididas entre locais e não locais, o que diferencia na forma de determinação de suas funções de correlação. Algumas simetrias do modelo XX serão utilizadas a fim de reduzir o número de funções de correlação a serem calculadas e simplificar o nosso problema.

2.1 O modelo XX e o mapeamento para férmions livres

O modelo XX é uma cadeia unidimensional com N_s spins-1/2 com interações de troca⁵¹ entre primeiros vizinhos que envolve apenas as componentes x e y dos operadores de spin. O Hamiltoniano desse modelo é

$$H_{XX} = J \sum_{i=1}^{N_s} (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y). \quad (2.1)$$

Em termos dos operadores $S_i^\pm = S_i^x \pm iS_i^y$ esse Hamiltoniano fica

$$H_{XX} = \frac{J}{2} \sum_{i=1}^{N_s} (S_i^+ S_{i+1}^- + h.c.), \quad (2.2)$$

onde $h.c.$ denota o conjugado hermitiano do primeiro termo dentro da soma. Diagonalizar H_{XX} da forma como está acima é uma tarefa um tanto complicada pois o espaço de Hilbert desses sistema tem dimensão 2^{N_s} . Esse problema foi resolvido por Lieb, Schultz e Mattis em 1961⁵² utilizando a transformação de Jordan-Wigner proposta por Jordan e Wigner em 1928⁵³:

$$\begin{aligned} S_i^z &\longrightarrow \psi_i^\dagger \psi_i - 1/2 \\ S_i^- &\longrightarrow (-1)^i \psi_i e^{-i\pi\phi_i} \\ S_i^+ &\longrightarrow (-1)^i \psi_i^\dagger e^{i\pi\phi_i}, \end{aligned} \quad (2.3)$$

onde chamamos $e^{\pm i\pi\phi_i}$ de operador string, ϕ_i conta a quantidade de férmions à esquerda do sítio i , $\phi_i = \sum_{j<i} \rho_j$, $\rho_j = \psi_j^\dagger \psi_j$ é o operador número no sítio j , cujos autovalores são 1 se existe um férmion nesse sítio e 0 caso contrário.^{4,54} Esse operador é necessário para o mapeamento do problema de operadores de spin para um de férmions para preservar as relações de comutação

$$[S_i^\alpha, S_i^\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} S_i^\gamma, \quad (2.4)$$

onde $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$ é o tensor Levi-Civita, e $\{\alpha, \beta, \gamma\} = \{x, y, z\}$. O operador *string* é dito não local porque depende da soma sobre a ocupação de um número infinito de sítios no limite

termodinâmico. Na representação fermiônica, é possível escrever o Hamiltoniano como a soma dos termos de *hopping*, que são responsáveis pelo tunelamento de uma partícula de um sítio para o sítio vizinho

$$H_{XX} = -\frac{J}{2} \sum_{i=1}^{N_s} (\psi_i^\dagger \psi_{i+1} + h.c.). \quad (2.5)$$

Então, assumindo condições de contorno periódica e fazendo a transformada de Fourier discreta

$$\psi_x = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k c_k e^{ikx}, \quad (2.6)$$

pode-se mostrar que na representação dos *momenta* dos férmions o Hamiltoniano desse modelo é diagonal:

$$H_{XX} = \sum_k \varepsilon_k c_k^\dagger c_k, \quad (2.7)$$

onde a relação de dispersão é $\varepsilon_k = -J \cos(k)$, e $\rho(k) = c_k^\dagger c_k$ é o operador número com momento k . Como mostrado na figura (1), no intervalo entre $-k_F$ e k_F existe o mar de Fermi (todos os estados preenchidos), onde k_F é chamado de momento de Fermi (ou vetor de onda de Fermi). Quando $k_F = \pi/2$ vemos que essa é a configuração de ocupação do sistema no estado fundamental porque é a que minimiza a energia total, ocupando todos os estados em que a energia dos estados de uma partícula é negativa. Denotaremos o estado fundamental desse modelo por $|gs\rangle$. A energia do estado fundamental é dada por

$$\begin{aligned} \frac{\langle H_{XX} \rangle}{N_s} &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} dk \varepsilon_k \\ &= -\frac{J}{\pi}. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Figura 1 – Configuração de ocupação na representação dos *momenta* dos férmions no estado fundamental. A área em azul claro é chamada de mar de Fermi.

Fonte: Elaborada pelo autor

O estado fundamental na representação de spins pode ser obtido fazendo a transformada inversa de Fourier, para sair do espaço de momentos dos férmions e ir para o da posição, e então fazer a transformada inversa de Jordan-Wigner, para sair da representação fermiônica e para a dos spins-1/2. Este estado é um tanto complicado de trabalhar diretamente na representação dos spins, por isso iremos sempre na direção de trabalhar na representação dos momentos dos férmions, onde ele tem sua forma mais simples.

2.2 O tensor de dois spins

O problema em que estamos interessados é calcular as funções de correlação de todas as componentes do operador tensorial

$$T_{i,i+1}^{ab} = S_i^a S_{i+1}^b, \quad (2.9)$$

onde $a, b \in \{x, y, z\}$, no estado fundamental. Uma representação desse operador tensorial é a representação irredutível dos operadores esféricos:

$$T_{j,j+1} = T_{j,j+1}^{(0)} + T_{j,j+1}^{(1)} + T_{j,j+1}^{(2)}, \quad (2.10)$$

onde $T_{j,j+1}^{(0)}$ é um tensor de rank 0, que é um escalar

$$T_{j,j+1}^{(0)} = \frac{\vec{S}_j \cdot \vec{S}_{j+1}}{2}. \quad (2.11)$$

Uma aplicação imediata do traço desse tensor é para o cálculo do fator de estrutura dinâmico do operador de troca de spins, que aparece no fator de estrutura dinâmico que é

proporcional a seção de choque de espalhamento de raio X^{43} :

$$S(k, \omega) = \frac{8\pi}{N} \sum_{\alpha} |\langle gs | \sum_j e^{ikj} (T_{j-1,j}^{(0)} + T_{j,j+1}^{(0)}) | \alpha \rangle|^2 \delta(\omega + E_{gs} - E_{\alpha}), \quad (2.12)$$

onde k e ω são o momento e energia, respectivamente, da excitação inserida no sistema. $T_{j,j+1}^{(1)}$ é um tensor de rank 1,

$$T_{j,j+1}^{(1)} = \frac{\vec{S}_j \times \vec{S}_{j+1}}{i\sqrt{2}}. \quad (2.13)$$

E $T_{j,j+1}^{(2)}$ é um tensor de rank 2 cujas componentes são dadas por:

$$\begin{aligned} T^{(2),\pm\pm} &= S_j^{\pm} S_{j+1}^{\pm} \\ T_{j,j+1}^{(2),\pm z} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (S_j^{\pm} S_{j+1}^z + S_j^z S_{j+1}^{\pm}) \\ T_{j,j+1}^{(2),zz} &= \frac{1}{\sqrt{6}} (S_j^+ S_{j+1}^- + 2S_j^z S_{j+1}^z + S_j^- S_{j+1}^+), \end{aligned} \quad (2.14)$$

A componente $T^{(2),++}$ está relacionada com o parâmetro de ordem em fases nemáticas de sistemas de spin $1/2$.⁵⁵ Com base nessa discussão vamos indicar o tensor de dois spins por $T_{i,i+1}^{ab}$, onde $\{a, b\} = \{z, \pm\}$.

As funções de correlação das componentes do tensor de spins são definidas como:

$$C^{ab,cd}(x, t) = \langle gs | T_{j+x,j+x+1}^{ab}(t + t') T_{j,j+1}^{cd}(t') | gs \rangle, \quad (2.15)$$

onde a evolução temporal das componentes se dá de acordo com a representação de Heisenberg,

$$T_{x,x+1}^{ab}(t) = e^{iHt} T_{x,x+1}^{ab}(0) e^{-iHt}. \quad (2.16)$$

Como H é independente do tempo e invariante por translações espaciais já que todas as interações de primeiro vizinho entre os spins são idênticas (homogeneidade espacial), a correlação só depende de x e t . Veja que a vírgula no índice de $C^{ab,cd}(x, t)$ indica que a componente do tensor associada com ab atua em um ponto do espaço-tempo separado por uma distância x e diferença temporal t , do ponto em que a componente associada com cd atua.

Uma grande quantidade dessas funções de correlação são nulas por simetria. Nesse sentido é conveniente introduzirmos e analisarmos uma propriedade intrínseca de cada uma das componentes do tensor $T_{j,j+1}^{ab}(t)$ a fim de saber quais as funções de correlação são não nulas: a carga.

2.3 Simetria e carga do tensor de dois spins

O operador número total é definido como

$$N = \sum_{i=-\infty}^{\infty} \rho_i \quad (2.17)$$

$$= \frac{N_s}{2\pi} \int_{k=-\pi}^{k=\pi} \rho(k). \quad (2.18)$$

Este operador compartilha a mesma base de H_{XX} porque o Hamiltoniano depende somente de $\rho(k)$ na representação do momento. Os autovalores de N são bons números quânticos, e para determinar qualquer estado do sistema basta dizermos a energia e o número de partículas. O número total de férmions na representação fermiônica do estado fundamental é obtida pela conservação do spin total na direção z através da transformação de Jordan-Wigner (2.3):

$$\begin{aligned} \langle gs | S^z | gs \rangle &= \langle gs | \sum_{i=1}^{N_s} S_i^z | gs \rangle \\ &= N_{gs} - \frac{N_s}{2}, \end{aligned} \quad (2.19)$$

onde N_{gs} é número de férmions associados ao estado fundamental.

O Hamiltoniano do modelo XX comuta com o operador S^z pois eles dependem dos mesmos operadores na base dos *momenta*. Isso faz com que exista a conservação de S^z , que cria uma simetria contínua por rotação no plano xy , chamada $O(2)$. Como assumimos que o campo magnético externo é zero nesse modelo, então $\langle gs | S^z | gs \rangle = 0$ e obtemos

$$N_{gs} = \frac{N}{2}. \quad (2.20)$$

A carga de uma componente do tensor é definida como a soma das cargas dos dois operadores de spins presentes nessa componente, e associamos a carga da componente do vetor spin com o número de operadores de criação menos o número de operadores de destruição presentes na transformação de Jordan-Wigner dessa componente. A componente z envolve somente o operador número na representação de férmions, por esse motivo dizemos que a carga associada a essa componente é 0; operadores que dependem somente do operador número também tem carga nula. A componente $+$, devido a S_i^+ , envolve um operador de criação e o operador *string*, que possui carga nula, então associamos carga $+1$. A componente $-$, devido a S_i^- , envolve um operador de aniquilação e o operador *string*, então associamos carga -1 . A carga do operador nos dá o balanço do número de partículas (carga positiva) ou buracos (carga negativa) associados com tal operador na representação fermiônica.

Quando as componentes do tensor são aplicadas no estado fundamental, o número de partículas total do estado resultante é alterado ou não de acordo com sua carga. Se

aplicarmos um operador de carga nula sobre o estado fundamental $|gs\rangle$, o autovalor de N não vai ser alterado,

$$NT_{j,j+1}^{zz} |gs\rangle = N_{gs} T_{j,j+1}^{zz} |gs\rangle. \quad (2.21)$$

O mesmo é válido para as componentes $T_{j,j+1}^{+-}$ e $T_{j,j+1}^{-+}$, pois o operador N comuta com essas componentes. Por outro lado, se aplicarmos uma componente de carga positiva, então a carga desse operador faz com que o autovalor de N seja modificado, *e.g.*,

$$NT_{j,j+1}^{z+} |gs\rangle = (N_{gs} + 1) T_{j,j+1}^{z+} |gs\rangle, \quad (2.22)$$

assim como,

$$NT_{j,j+1}^{++} |gs\rangle = (N_{gs} + 2) T_{j,j+1}^{++} |gs\rangle. \quad (2.23)$$

De forma similar, um operador de carga negativa diminui o autovalor do operador número total,

$$NT_{j,j+1}^{z-} |\psi_0\rangle = (N_F - 1) T_{j,j+1}^{z-} |\psi_0\rangle, \quad (2.24)$$

assim como,

$$NT_{j,j+1}^{--} |gs\rangle = (N_{gs} - 2) T_{j,j+1}^{--} |gs\rangle. \quad (2.25)$$

A carga de cada componente nos diz quantos férmions foram adicionados ou removidos do estado fundamental quando tal componente é aplicada sobre ele. Podemos então escrever a carga de cada uma das componentes do tensor $T_{j,j+1}^{ab}$:

$$T_{j,j+1}^{zz} \longrightarrow 0, \quad (2.26a)$$

$$T_{j,j+1}^{z+} \longrightarrow +1, \quad (2.26b)$$

$$T_{j,j+1}^{+z} \longrightarrow +1, \quad (2.26c)$$

$$T_{j,j+1}^{z-} \longrightarrow -1, \quad (2.26d)$$

$$T_{j,j+1}^{-z} \longrightarrow -1, \quad (2.26e)$$

$$T_{j,j+1}^{+-} \longrightarrow 0, \quad (2.26f)$$

$$T_{j,j+1}^{-+} \longrightarrow 0, \quad (2.26g)$$

$$T_{j,j+1}^{++} \longrightarrow +2, \quad (2.26h)$$

$$T_{j,j+1}^{--} \longrightarrow -2. \quad (2.26i)$$

As correlações que envolvem os operadores tensoriais $T_{j,j+1}^{ab}(0)$ e $T_{j+x,j+x+1}^{cd}(t)$ só podem ser diferente de zero se a soma das cargas das componentes do tensor for nula. Caso contrário quando esses dois operadores agirem no estado fundamental então o autovalor de N atuado no estado $T_{j+x,j+x+1}^{ab}(t)T_{j,j+1}^{cd}(0)|gs\rangle = |\text{estado}\rangle$ será diferente do número total N_{gs} do estado fundamental, e portanto $|gs\rangle$ e $|\text{estado}\rangle$ são estados ortogonais. Assim, as seguintes funções de correlação se anulam: $C^{zz,z+}(x,t)$, $C^{zz,z-}(x,t)$, $C^{zz,++}(x,t)$, $C^{zz,--}(x,t)$, $C^{z+,++}(x,t)$, $C^{z-,--}(x,t)$, $C^{z+,+-}(x,t)$, $C^{z-,-+}(x,t)$. E as suas permutações de índices, por exemplo $C^{zz,+z}(x,t)$, também zero pelo mesmo argumento.

A soma de todas as permutações de índices das funções de correlação das componentes acima, que são nulas, totalizam 62. O tensor $T_{j,j+1}^{ab}$ possui 9 componente, dando origem a 81 possíveis funções de correlação. Desconsiderando as nulas, então existem 19 outras funções de correlação a serem calculadas. Estas funções de correlação não nulas serão discutidas na próxima seção, por enquanto vamos discutir uma outra propriedade do tensor de dois spins.

2.4 Componentes locais e não locais do tensor de spins

Localidade é um conceito bastante importante em física. Em teoria quântica de campos, ela é imposta quando é assumindo que as interações ou que o acoplamento entre os operadores de campo nas densidades de lagrangiana sempre sejam locais. Isto quer dizer que não aparecem produtos de operadores de campo no mesmo tempo separados por uma distância espacial. ^{56,57}

No nosso problema, para manter as relações de comutação apropriadas dos operadores de spin na representação fermiônica, a transformação de Jordan-Wigner (2.3) define o operador *string*, $e^{\pm i\pi\phi_j}$, onde ϕ_j conta a quantidade de férmions à esquerda do sítio j . Esse operador é dito não local porque depende do produto dos operadores número de todos os sítios à esquerda de j . As componentes do tensor de dois spins no modelo XX que dependem do operador *string*, quando escritos na representação dos férmions, são chamadas de não locais. As componentes que não dependem deste operador são ditas locais. A presença deste operador não local nas componentes do tensor de spins trás alguns desafios na forma de calcular as suas funções de correlação.

Antes de continuarmos com a discussão das componentes locais e não locais e suas funções de correlação, temos que discutir algumas propriedades algébricas do operador *string*. Este operador possui as seguintes regras de comutação:

$$[e^{\pm i\pi\phi_j}, \psi_i^\dagger] = 0, \text{ se } i \geq j; \quad (2.27)$$

$$[e^{\pm i\pi\phi_j}, \psi_i] = 0, \text{ se } i \geq j; \quad (2.28)$$

$$[\phi_i, \phi_j] = 0, \text{ para qualquer } i, j. \quad (2.29)$$

Para provar essas relações basta observar que o operador *string*, ϕ_j , é uma soma dos operadores número, portanto eles não modificam o autovalor do operador número total (2.17), apenas contam o número de partículas de todos os sítios a esquerda do sítio i . Assim, a ordem em que um operador de criação (ou destruição) de um sítio e a *string* são atuados em um estado, não produz um autovalor do operador número total diferente, para qualquer que seja este estado. A mesma discussão é válida para a mudança da energia do estado devido a ação da *string* e o operador de criação (ou destruição). E como o estado é determinado pelo autovalor do operador número total e sua auto-energia, já que H e N compartilham a mesma base, o operador *string* comuta com o operador de criação (ou

destruição), provando as equações (2.27) e (2.28). Da mesma forma os operadores *string* sempre comutam com eles mesmos porque operadores número sempre comutam consigo mesmos, não importa o seu índice.

Outra forma de provar essas equações é usando a álgebra desses operadores fermiônicos. A *string* pode ser escrita como

$$e^{\pm i\pi\varphi_j} = \prod_{i < j} (1 - 2\rho_i), \quad (2.30)$$

pois os autovalores de ρ_i são 0 ou 1. E se provarmos que $[\psi_i^\dagger, e^{\pm i\pi\rho_j}] = 0$, então provamos (2.27). De fato, usando as relações de anticomutação dos operadores fermiônicos para $i \neq j$, temos

$$\begin{aligned} [\psi_i^\dagger, 1 - 2\rho_j] &= -2 (\psi_i^\dagger \psi_j^\dagger \psi_j - \psi_j^\dagger \psi_j \psi_i^\dagger) \\ &= 0. \end{aligned} \quad (2.31)$$

De forma análoga provamos (2.28).

Teremos que considerar também as identidades

$$\psi_i^\dagger e^{i\pi\rho_i} = \psi_i^\dagger \quad (2.32)$$

$$\psi_i e^{i\pi\rho_i} = -\psi_i. \quad (2.33)$$

O operador $\psi_i^\dagger$ cria um férmion no sítio i , então antes desse operador ser atuado em qualquer que seja o estado o autovalor de ρ_i tem que ser zero (princípio da exclusão de Pauli), caso contrário a ação desse operador fornece zero. A mesma ideia se aplica à segunda equação, mas ρ_i tem que ter autovalor 1 deste vez, produzindo o sinal negativo.

Feitas essas considerações, podemos escrever todas as componentes do operador tensorial de spins na representação fermiônica separando-as em dois grupos: as locais e as não locais. As componentes locais são:

$$\begin{aligned} T_{i,i+1}^{zz} &= \left(\psi_i^\dagger \psi_i - \frac{1}{2} \right) \left(\psi_{i+1}^\dagger \psi_{i+1} - \frac{1}{2} \right), \\ T_{i,i+1}^{+-} &= \psi_i^\dagger \psi_{i+1} \\ T_{i,i+1}^{-+} &= \psi_i \psi_{i+1}^\dagger \\ T_{i,i+1}^{--} &= \psi_i \psi_{i+1} \\ T_{i,i+1}^{++} &= \psi_i^\dagger \psi_{i+1}^\dagger. \end{aligned} \quad (2.34)$$

As não locais são:

$$\begin{aligned} T_{i,i+1}^{z+} &= \left(\psi_i^\dagger \psi_i - \frac{1}{2} \right) (-1)^{i+1} \psi_{i+1}^\dagger e^{i\pi\phi_{i+1}} \\ T_{i,i+1}^{+z} &= (-1)^i \psi_i^\dagger e^{i\pi\phi_i} \left(\psi_{i+1}^\dagger \psi_{i+1} - \frac{1}{2} \right) \\ T_{i,i+1}^{z-} &= \left(\psi_i^\dagger \psi_i - \frac{1}{2} \right) (-1)^{i+1} \psi_{i+1} e^{-i\pi\phi_{i+1}} \\ T_{i,i+1}^{-z} &= (-1)^i \psi_i e^{-i\pi\phi_i} \left(\psi_{i+1}^\dagger \psi_{i+1} - \frac{1}{2} \right). \end{aligned} \quad (2.35)$$

As componentes locais tem cargas com módulo 0 ou 2, enquanto que as as componentes não locais tem carga com módulo 1. Portanto as correlações das componentes não locais com as componentes locais são todas nulas porque a soma das cargas das duas componentes em nenhum caso se anula. Veja que as componentes não locais são todas aquelas que envolvem a componente z e o operador que flipa um spin para cima ou para baixo no sítio vizinho.

A partir de agora nos dedicaremos à determinação das formas das correlações das componentes do tensor e na redução do número de funções de correlação a serem calculadas usando simetrias do modelo XX .

2.5 Funções de correlação do tensor de spins

Na primeira seção deste capítulo vimos que a soma das cargas das duas componentes do tensor devem ser nulas para que sua correlação não se anule. Assim as componentes locais do tensor de spins dão origem a 11 funções de correlação:

$$C^{zz,zz}(x, t) = \langle T_{j+x, j+x+1}^{zz}(t) T_{j, j+1}^{zz}(0) \rangle \quad (2.36)$$

$$C^{zz,+-}(x, t) = \langle T_{j+x, j+x+1}^{zz}(t) T_{j, j+1}^{+-}(0) \rangle \quad (2.37)$$

$$C^{zz,-+}(x, t) = \langle T_{j+x, j+x+1}^{zz}(t) T_{j, j+1}^{-+}(0) \rangle \quad (2.38)$$

$$C^{+-,zz}(x, t) = \langle T_{j+x, j+x+1}^{+-}(t) T_{j, j+1}^{zz}(0) \rangle \quad (2.39)$$

$$C^{-+,zz}(x, t) = \langle T_{j+x, j+x+1}^{-+}(t) T_{j, j+1}^{zz}(0) \rangle \quad (2.40)$$

$$C^{+-,+-}(x, t) = \langle T_{j+x, j+x+1}^{+-}(t) T_{j, j+1}^{+-}(0) \rangle \quad (2.41)$$

$$C^{-+, -+}(x, t) = \langle T_{j+x, j+x+1}^{-+}(t) T_{j, j+1}^{-+}(0) \rangle \quad (2.42)$$

$$C^{+-, -+}(x, t) = \langle T_{j+x, j+x+1}^{+-}(t) T_{j, j+1}^{-+}(0) \rangle \quad (2.43)$$

$$C^{-+,+-}(x, t) = \langle T_{j+x, j+x+1}^{-+}(t) T_{j, j+1}^{+-}(0) \rangle \quad (2.44)$$

$$C^{++,--}(x, t) = \langle T_{j+x, j+x+1}^{++}(t) T_{j, j+1}^{--}(0) \rangle \quad (2.45)$$

$$C^{--,++}(x, t) = \langle T_{j+x, j+x+1}^{--}(t) T_{j, j+1}^{++}(0) \rangle, \quad (2.46)$$

Enquanto que as 8 funções de correlação das componentes não locais são:

$$C^{z-,z+}(x, t) = \langle T_{j+x, j+x+1}^{z-}(t) T_{j, j+1}^{z+}(0) \rangle \quad (2.47)$$

$$C^{+z,-z}(x, t) = \langle T_{j+x, j+x+1}^{+z}(t) T_{j, j+1}^{-z}(0) \rangle \quad (2.48)$$

$$C^{-z,z+}(x, t) = \langle T_{j+x, j+x+1}^{-z}(t) T_{j, j+1}^{z+}(0) \rangle \quad (2.49)$$

$$C^{z-,+z}(x, t) = \langle T_{j+x, j+x+1}^{z-}(t) T_{j, j+1}^{+z}(0) \rangle \quad (2.50)$$

$$C^{z+,z-}(x, t) = \langle T_{j+x, j+x+1}^{z+}(t) T_{j, j+1}^{z-}(0) \rangle \quad (2.51)$$

$$C^{z+,-z}(x, t) = \langle T_{j+x, j+x+1}^{z+}(t) T_{j, j+1}^{-z}(0) \rangle \quad (2.52)$$

$$C^{-z,+z}(x, t) = \langle T_{j+x, j+x+1}^{-z}(t) T_{j, j+1}^{+z}(0) \rangle \quad (2.53)$$

$$C^{+z,z-}(x, t) = \langle T_{j+x, j+x+1}^{+z}(t) T_{j, j+1}^{z-}(0) \rangle, \quad (2.54)$$

onde $\langle \cdot \rangle$ denota a média sobre o estado fundamental. Uma vez que o Hamiltoniano é independente do tempo, pudemos fixar $t' = 0$ em (2.15).

Em matéria condensada muitos sistemas possuem a simetria partícula buraco, o que trás consequências importantes.^{58,59} No modelo XX , a simetria partícula-buraco pode ser usada para diminuir o número de estados a serem determinados na diagonalização do Hamiltoniano ou também para simplificar o trabalho de calcular as funções de correlação.

A campo magnético nulo, que corresponde ao potencial químico nulo na representação fermiônica, o Hamiltoniano tem uma simetria por inversão de spin que se traduz como uma transformação unitária

$$\mathcal{C} = e^{i\pi \sum_j S_j^x}. \quad (2.55)$$

Essa transformação é uma rotação de π em torno do eixo x , ou seja, é uma simetria discreta do grupo Z_2 . Ela leva $S_i^y \rightarrow -S_i^y$, $S_i^z \rightarrow -S_i^z$ e $S_i^x \rightarrow S_i^x$, que corresponde a simetria partícula-buraco na representação fermiônica. Ela também pode ser escrita como:

$$\mathcal{C}^\dagger S_i^\pm \mathcal{C} = S_i^\mp \quad (2.56)$$

$$\mathcal{C}^\dagger S_i^z \mathcal{C} = -S_i^z. \quad (2.57)$$

É imediato a partir da equação (2.2) que essa transformação comuta com o Hamiltoniano desse modelo. Portanto podemos usar essa simetria para reduzir algumas funções de correlação em termos de outras. Essa simetria nos permite escrever, por exemplo,

$$\begin{aligned} C^{zz,-+}(x,t) &= \langle \mathcal{C} \mathcal{C}^\dagger S_{j+x}^z(t) \mathcal{C} \mathcal{C}^\dagger S_{j+x+1}^z(t) \mathcal{C} \mathcal{C}^\dagger S_j^-(0) \mathcal{C} \mathcal{C}^\dagger S_{j+1}^+(0) \mathcal{C} \mathcal{C}^\dagger \rangle, \\ &= \langle S_{j+x}^z(t) S_{j+x+1}^z(t) S_j^+(0) S_{j+1}^-(0) \rangle \\ &= C^{zz,+-}(x,t). \end{aligned} \quad (2.58)$$

Da mesma forma podemos fazer isso com as funções de correlação $C^{+-,zz}(x,t)$, $C^{-+,-+}(x,t)$, $C^{+-,-+}(x,t)$ e $C^{--,++}(x,t)$. Assim, não precisamos nos preocupar com elas pois podem ser escritas em termos das outras funções de correlação.

Podemos aproveitar outras propriedades do modelo XX para eliminar outra função de correlação. O Hamiltoniano do modelo XX é invariante por translações espaciais pois todas as interações de primeiro vizinho entre os spins são idênticas (homogeneidade espacial). Outra propriedade interessante é que se fizermos uma translação temporal igual nas duas componentes do tensor de spins envolvidas na função de correlação $C^{-+zz}(x,t)$ então devemos obter a mesma função de correlação porque H_{XX} é independente do

tempo. Assim,

$$\begin{aligned}
C^{-+,zz}(x,t) &= \langle S_{j+x}^-(t) S_{j+x+1}^+(t) S_j^z(0) S_{j+1}^z(0) \rangle \\
&= \langle S_{j+1}^z(0) S_j^z(0) S_{j+x+1}^-(t) S_{j+x}^+(t) \rangle^* \\
&= \langle S_j^z(0) S_{j+1}^z(0) S_{j+x}^+(t) S_{j+x+1}^-(t) \rangle^* \\
&= \langle S_{j-x}^z(-t) S_{j-x+1}^z(-t) S_j^+(0) S_{j+1}^-(0) \rangle^* \\
&= (C^{zz,+-}(-x, -t))^*.
\end{aligned} \tag{2.59}$$

Portanto se encontramos $C^{zz,+-}(x,t)$ também conseguimos determinar de forma imediata $C^{-+,zz}(x,t)$. Assim teremos que calcular apenas cinco funções de correlação das componentes locais:

$$C^{zz,zz}(x,t) = \langle T_{j+x,j+x+1}^{zz}(t) T_{j,j+1}^{zz}(0) \rangle \tag{2.60}$$

$$C^{zz,+-}(x,t) = \langle T_{j+x,j+x+1}^{zz}(t) T_{j,j+1}^{+-}(0) \rangle \tag{2.61}$$

$$C^{+-,+-}(x,t) = \langle T_{j+x,j+x+1}^{+-}(t) T_{j,j+1}^{+-}(0) \rangle \tag{2.62}$$

$$C^{+-,-+}(x,t) = \langle T_{j+x,j+x+1}^{+-}(t) T_{j,j+1}^{-+}(0) \rangle \tag{2.63}$$

$$C^{++,- -}(x,t) = \langle T_{j+x,j+x+1}^{++}(t) T_{j,j+1}^{--}(0) \rangle. \tag{2.64}$$

O cálculo de todas essas funções de correlação será apresentado no capítulo 3 desta dissertação.

Da mesma forma, usando homogeneidade espacial e temporal do modelo XX , encontramos

$$\begin{aligned}
C^{z-,+z}(x,t) &= \langle gs | S_{j+x}^z(t) S_{j+x+1}^-(t) S_j^+(0) S_{j+1}^z(0) | gs \rangle \\
&= \left(\langle gs | S_{j+1}^z(0) S_j^-(0) S_{j+x+1}^+(t) S_{j+x}^z(t) | gs \rangle \right)^* \\
&= \left(\langle gs | S_{j-x}^-(-t) S_{j-x+1}^z(-t) S_j^z(0) S_{j+1}^+(0) | gs \rangle \right)^* \\
&= (C^{-z,z+}(-x, -t))^*.
\end{aligned} \tag{2.65}$$

E juntamente com a simetria partícula-buraco podemos escrever todas as funções de correlação das componentes não locais em termos das seguintes funções de correlação:

$$C^{z-,z+}(x,t) = \langle T_{j+x,j+x+1}^{z-}(t) T_{j,j+1}^{z+}(0) \rangle \tag{2.66}$$

$$C^{+z,-z}(x,t) = \langle T_{j+x,j+x+1}^{+z}(t) T_{j,j+1}^{-z}(0) \rangle \tag{2.67}$$

$$C^{-z,z+}(x,t) = \langle T_{j+x,j+x+1}^{-z}(t) T_{j,j+1}^{z+}(0) \rangle. \tag{2.68}$$

O cálculo dessas três funções de correlação será discutidos no capítulo 4 desta dissertação.

3 FUNÇÕES DE CORRELAÇÃO DAS COMPONENTES LOCAIS DO TENSOR DE SPINS

Neste capítulo, vamos nos focar nas funções de correlação das componentes do tensor de spins locais na representação Fermiônica. Após uma breve contextualização, vamos mostrar como obter essas funções usando o teorema de Wick e também pela representação diagramática de Feynman. Por fim, vamos calcular algumas quantidades conservadas que podem ser tratadas a partir destas funções de correlação.

3.1 Determinação das funções de correlação

Como vimos no capítulo anterior, a função de correlação $C^{zz,+}(x, t)$ é local pois os operadores *string* não aparecem nessa função. Em termos dos operadores de criação e aniquilação na representação Fermiônica ela fica:

$$C^{zz,+}(x, t) = \left\langle \left(\psi_{j+x}^\dagger(t) \psi_{j+x}(t) - \frac{1}{2} \right) \left(\psi_{j+x+1}^\dagger(t) \psi_{j+x+1}(t) - \frac{1}{2} \right) \left(\psi_j^\dagger(0) \psi_{j+1}(0) \right) \right\rangle, \quad (3.1)$$

lembrando que a média $\langle \cdot \rangle$ é feita no estado fundamental do modelo XX . A função de correlação $C^{zz,+}(x, t)$ é só um exemplo dentre as 11 funções de correlação de componentes locais dos operadores tensoriais de spin nesse modelo. A função de correlação acima será o nosso ponto de partida para explicar as técnicas usadas para calcular todas as outras funções de correlação.

Na equação (3.1) aparecem seis operadores de campo em pontos diferentes do espaço-tempo. Esse tipo de média é a mesma que aparece em teoria de perturbação em sistemas de muitos corpos. Portanto, fizemos o apêndice D com uma discussão sobre teoria de perturbação para o cálculo de quantidades físicas, nos baseando na literatura.^{2,60–62} Esse apêndice nos fornece uma motivação para o uso de técnicas de teoria quântica de campos, como teorema de Wick e diagramas de Feynman, no cálculo das funções de correlação, já que lá também existem médias parecidas com a equação (3.1).

Uma forma de lidar com a média do produto de vários operadores com ordenamento temporal é usando o teorema de Wick. Desde que o sistema seja não interagente, o que permite escrever o estado fundamental como um estado de vácuo de partículas para $k \leq k_F$ e buracos para $k \geq k_F$, uma consequência deste teorema é que a média, nesse estado, do produto de um número par de operadores de criação e destruição ordenados temporalmente é igual a soma dos produtos das médias nesse estado de todos os possíveis pares de operadores ordenados temporalmente, cada termo na soma sendo multiplicado por um fator $+1$ ou -1 dependendo se o número de permutações de operadores de férmions necessários para trazer os pares juntos é par ou ímpar.^{2,63}

Para enunciar o teorema de Wick precisaremos de três definições. A contração de dois operadores é tal que tem a característica de ser um número complexo, é definida como

$$\overline{A_1(x_1) A_2(x_2)} = T[A_1(x_1) A_2(x_2)] - N[A_1(x_1) A_2(x_2)], \quad (3.2)$$

onde $N[\cdot]$ denota o ordenamento normal, que é definido de forma que os operadores de aniquilação são movidos para a direita dos operadores de criação.

Outra definição importante é o ordenamento temporal. De forma geral, o operador de ordenamento temporal, T , é tal que:

$$T[O_1(t_1) \dots O_n(t_n)] = \xi^{\frac{1-\text{sign}(P)}{2}} O_{p_1}(t_{p_1}) \dots O_{p_n}(t_{p_n}) \quad (3.3)$$

onde $(t_{p_1}, \dots, t_{p_n})$ é a permutação de $(t_1, \dots, t_n)$ com $t_{p_1} > t_{p_2} > \dots > t_{p_n}$, $\text{sign}(P)$ é o sinal da permutação e ξ vale -1 para férmions e 1 para bósons.

O teorema de Wick afirma que o ordenamento temporal de um conjunto de operadores é igual a soma do ordenamento normal de todas as possibilidades do conjunto ter zero operadores contraídos (uma possibilidade), dois operadores contraídos, três operadores contraídos, assim por diante, até a soma de todas as possibilidades onde todos os operadores estão contraídos entre si. O ordenamento normal produz zero quando tomada a média em $|gs\rangle$, então quando realizamos a média na soma de todas as possibilidades de ordenamento normal, sobra apenas a possibilidade em que todos os operadores estão contraídos entre si. Além disso, o valor esperado da contração de dois operadores de campo será o valor esperado do ordenamento temporal desses operadores:

$$\begin{aligned} \overline{A_1(x_1) A_2(x_2)} &= \langle gs | \overline{A_1(x_1) A_2(x_2)} | gs \rangle \\ &= \langle gs | T[A_1(x_1) A_2(x_2)] | gs \rangle. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Essa contração é em geral nula, exceto para o caso de dois operadores de campo que são conjugados hermitianos. Mas nesse caso a média no estado fundamental do ordenamento temporal dos dois operadores é definido como a função de Green do sistema não interagente

$$iG(x - x', t - t') \equiv \langle gs | T\psi(x, t)\psi^\dagger(x', t') | gs \rangle \quad (3.5)$$

$$= \overline{\psi_x(t) \psi_{x'}^\dagger(t')}. \quad (3.6)$$

Portanto as médias da forma (3.1) e (D.19) podem ser escritas em termos de produtos de funções de Green do sistema não interagente. Este teorema é devido a Giancarlo Wick (1950).

Voltando na equação (3.1), podemos reescrevê-la como a soma de quatro termos:

$$C^{zz,+-}(x, t) = C_1^{zz,+-}(x, t) + C_2^{zz,+-}(x, t) + C_3^{zz,+-}(x, t) + C_4^{zz,+-}(x, t), \quad (3.7)$$

onde

$$C_1^{zz,+ -}(x, t) = \left\langle \psi_{j+x}^\dagger(t) \psi_{j+x}(t) \psi_{j+x+1}^\dagger(t) \psi_{j+x+1}(t) \psi_j^\dagger(0) \psi_{j+1}(0) \right\rangle \quad (3.8)$$

$$C_2^{zz,+ -}(x, t) = -\frac{1}{2} \left\langle \psi_{j+x}^\dagger(t) \psi_{j+x}(t) \psi_j^\dagger(0) \psi_{j+1}(0) \right\rangle \quad (3.9)$$

$$C_3^{zz,+ -}(x, t) = -\frac{1}{2} \left\langle \psi_{j+x+1}^\dagger(t) \psi_{j+x+1}(t) \psi_j^\dagger(0) \psi_{j+1}(0) \right\rangle \quad (3.10)$$

$$C_4^{zz,+ -}(x, t) = \frac{1}{4} \left\langle \psi_j^\dagger(0) \psi_{j+1}(0) \right\rangle, \quad (3.11)$$

perceba que os fatores $-\frac{1}{2}$ e $\frac{1}{4}$ são oriundos da transformação de Jordan-Wigner. Algumas simplificações aconteceram graças a esses fatores. Existem 3! possibilidades de contrações para o primeiro termo $C_1^{zz,+ -}(x, t)$:

$$\begin{aligned} C_1^{zz,+ -}(x, t) = & \overbrace{\psi_{j+x}^\dagger(t) \psi_{j+x}(t) \psi_{j+x+1}^\dagger(t) \psi_{j+x+1}(t)} \overbrace{\psi_j^\dagger(0) \psi_{j+1}(0)} \\ & + \overbrace{\psi_{j+x}^\dagger(t) \psi_{j+x}(t) \psi_{j+x+1}^\dagger(t) \psi_{j+x+1}(t)} \overbrace{\psi_j^\dagger(0) \psi_{j+1}(0)} \\ & + \overbrace{\psi_{j+x}^\dagger(t) \psi_{j+x}(t) \psi_{j+x+1}^\dagger(t) \psi_{j+x+1}(t)} \overbrace{\psi_j^\dagger(0) \psi_{j+1}(0)} \\ & + \overbrace{\psi_{j+x}^\dagger(t) \psi_{j+x}(t) \psi_{j+x+1}^\dagger(t) \psi_{j+x+1}(t)} \overbrace{\psi_j^\dagger(0) \psi_{j+1}(0)} \\ & + \overbrace{\psi_{j+x}^\dagger(t) \psi_{j+x}(t) \psi_{j+x+1}^\dagger(t) \psi_{j+x+1}(t)} \overbrace{\psi_j^\dagger(0) \psi_{j+1}(0)} \\ & + \overbrace{\psi_{j+x}^\dagger(t) \psi_{j+x}(t) \psi_{j+x+1}^\dagger(t) \psi_{j+x+1}(t)} \overbrace{\psi_j^\dagger(0) \psi_{j+1}(0)}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Cada contração pode ser escrita em termos dos produtos das funções de Green de uma partícula sem spin num sistema unidimensional e discreto. Usando os resultados do apêndice B para esse propagador em tempos iguais, equações (B.6) e (B.12), podemos escrever as contrações em termos da densidade média de ocupação em cada sítio no estado fundamental e a média dos termos de *hopping* do Hamiltoniano H_{XX} nesse estado, lembrando que $k_F = \pi/2$. Deste modo, obtemos

$$\overbrace{\psi_{j+x}^\dagger(t) \psi_{j+x}(t) \psi_{j+x+1}^\dagger(t) \psi_{j+x+1}(t)} \overbrace{\psi_j^\dagger(0) \psi_{j+1}(0)} = \left[\frac{1}{\pi} \right] \left[\frac{1}{2} \right] \left[\frac{1}{2} \right] \quad (3.13a)$$

$$\overbrace{\psi_{j+x}^\dagger(t) \psi_{j+x}(t) \psi_{j+x+1}^\dagger(t) \psi_{j+x+1}(t)} \overbrace{\psi_j^\dagger(0) \psi_{j+1}(0)} = \left[\frac{1}{\pi} \right] \left[\frac{1}{\pi} \right] \left[-\frac{1}{\pi} \right] \quad (3.13b)$$

$$\overbrace{\psi_{j+x}^\dagger(t) \psi_{j+x}(t) \psi_{j+x+1}^\dagger(t) \psi_{j+x+1}(t)} \overbrace{\psi_j^\dagger(0) \psi_{j+1}(0)} = -[iG(x, t)] \left[\frac{1}{\pi} \right] [-iG(-x, -t)] \quad (3.13c)$$

$$\overbrace{\psi_{j+x}^\dagger(t)\psi_{j+x}(t)\psi_{j+x+1}^\dagger(t)\psi_{j+x+1}(t)\psi_j^\dagger(0)\psi_{j+1}(0)} = [iG(x+1, t)] \left[-\frac{1}{\pi}\right] [-iG(1-x, -t)] \quad (3.13d)$$

$$\overbrace{\psi_{j+x}^\dagger(t)\psi_{j+x}(t)\psi_{j+x+1}^\dagger(t)\psi_{j+x+1}(t)\psi_j^\dagger(0)\psi_{j+1}(0)} = \left[\frac{1}{2}\right] [iG(x, t)] [-iG(1-x, -t)] \quad (3.13e)$$

$$\overbrace{\psi_{j+x}^\dagger(t)\psi_{j+x}(t)\psi_{j+x+1}^\dagger(t)\psi_{j+x+1}(t)\psi_j^\dagger(0)\psi_{j+1}(0)} = \left[\frac{1}{2}\right] [iG(x+1, t)] [-iG(-x, -t)], \quad (3.13f)$$

O termo $\frac{1}{2}$ é a média da densidade de ocupação dos sítios e $\frac{1}{\pi}$ é a média dos termos de *hopping* do Hamiltoniano. Todos os conjuntos de contrações podem ser representados por diagramas. Para as contrações acima temos os seguintes diagramas:

Figura 2 – Diagramas associados com as 6 formas de contração das equações (3.13).

Fonte: Elaborada pelo autor

Nos diagramas da figura (2) os dois primeiros pontos no espaço-tempo representam dois sítios vizinhos j e $j+1$, nessa ordem, em $t=0$. Os outros dois pontos representam sítios vizinhos $j+x$ e $j+x+1$, também nessa ordem, mas no tempo t . Os laços que saem de um ponto e chegam nele mesmo representa a densidade média no estado fundamental ($G(0,0)$), as curvas que saem de um sítio para o sítio vizinho representam as médias dos termos de *hopping* no estado fundamental ($G(1,0)$ ou $G(-1,0)$), e as outras curvas são funções de Green de uma partícula que conectam pontos do espaço-tempo separadas por um tempo t . Para ler esses diagramas existem 5 regras:

1. Para cada laço fechado multiplicamos por um fator $\frac{1}{2}$ da densidade média de ocupação no estado fundamental;
2. Para cada linha conectando dois sítios vizinhos multiplicamos por um fator $\frac{1}{\pi}$ da média dos termos de *hopping* entre sítios vizinhos no estado fundamental;
3. Para pontos separados por um tempo t multiplicamos por $iG(x_2 - x_1)$, em que x_1 é o ponto do espaço-tempo de partida da linha e x_2 o ponto de chegada;
4. Para linhas que apontam para trás no tempo e/ou posição multiplicamos por um fator -1 ;
5. Para o cruzamento de linhas multiplicamos por um fator -1 .

Essas são as regras necessárias para interpretar os diagramas das várias possibilidades de contrações de operadores de campo e escrevê-los em termos das funções de Green de um férmion livre sem spin numa rede unidimensional. Essas contrações estão presentes na representação Fermiônica das funções de correlação das componentes locais dos operadores tensoriais de spin $1/2$, como vimos através da equação (3.12). Se aplicarmos essas regras aos diagramas da figura (2) chegamos exatamente às equações (3.13).

Para desenhar esses diagramas precisamos observar o valor esperado no estado fundamental do produto dos operadores de campo e verificar em quais pontos do espaço-tempo as partículas são criadas, fazer uma linha saindo desses pontos e indo para os pontos do espaço-tempo onde as partículas são destruídas. Outra regra para desenhar os diagramas é colocar todas as linhas de propagação acima da reta que contem os quatro pontos do espaço-tempo envolvidos nessas contrações, pois só assim permitiríamos o cruzamento de linhas que é indicado na regra 5. A região abaixo deles é permitida para desenhar linhas que representam propagações em tempos iguais para sítios vizinhos somente por uma questão de estética (não superpor duas linhas), mas não tem nenhum significado.

Usando essas regras para desenhar os diagramas, conseguimos representar os termos $C_2^{zz,+}(x, t)$ e $C_3^{zz,+}(x, t)$ como

$$C_2^{zz,+}(x, t) = -\frac{1}{2} \begin{array}{c} \text{Diagram 1: A horizontal line with two dots. A curved arrow points from the left dot to the right dot above the line.} \\ \text{Diagram 2: A horizontal line with four dots. Two curved arrows connect the first and third dots, and the second and fourth dots, both above the line. The first arrow points right, the second points left.} \end{array} \quad (3.14)$$

$$C_3^{zz,+}(x,t) = -\frac{1}{2} \begin{array}{c} \bullet \xrightarrow{\quad} \bullet \\ \bullet \quad \bullet \end{array} \quad (3.15)$$

Perceba que o fator $-\frac{1}{2}$ na frente dos diagramas dos termos $C_2^{zz,+}(x,t)$ e $C_3^{zz,+}(x,t)$ é devido à transformação de Jordan-Wigner da componente S_i^z na equação (2.3). Por outro lado, a densidade de ocupação média no estado fundamental produz um fator $\frac{1}{2}$ como vimos nos diagramas de $C_1^{zz,+}(x,t)$. Assim vários diagramas de $C_1^{zz,+}(x,t)$ se cancelam com os de $C_2^{zz,+}(x,t)$ e $C_3^{zz,+}(x,t)$: o segundo diagrama de $C_2^{zz,+}(x,t)$ cancela com o diagrama (e) de $C_1^{zz,+}(x,t)$, o segundo diagrama de $C_3^{zz,+}(x,t)$ cancela com o diagrama (f) de $C_1^{zz,+}(x,t)$, e o primeiro diagrama de $C_2^{zz,+}(x,t)$ ou $C_3^{zz,+}(x,t)$ cancela com o diagrama (a) de $C_1^{zz,+}(x,t)$.

O último termo de $C^{zz,+}(x,t)$, o termo $C_4^{zz,+}(x,t)$, tem o diagrama a seguir:

$$C_4^{zz,+}(x,t) = \left(-\frac{1}{2}\right)^2 \begin{array}{c} \bullet \xrightarrow{\quad} \bullet \\ \bullet \quad \bullet \end{array} \quad (3.16)$$

Esse diagrama cancela com o último diagrama que sobra de $C_2^{zz,+}(x,t)$ ou $C_3^{zz,+}(x,t)$. Portanto podemos escrever a função de correlação $C^{zz,+}(x,t)$ como a soma dos três diagramas (b), (c), e (d) em (2):

$$C^{zz,+}(x,t) = \begin{array}{c} \bullet \xrightarrow{\quad} \bullet \\ \bullet \quad \bullet \end{array} + \begin{array}{c} \bullet \xrightarrow{\quad} \bullet \\ \bullet \xleftarrow{\quad} \bullet \end{array} + \begin{array}{c} \bullet \xrightarrow{\quad} \bullet \\ \bullet \xleftarrow{\quad} \bullet \end{array} + \begin{array}{c} \bullet \xrightarrow{\quad} \bullet \\ \bullet \xleftarrow{\quad} \bullet \end{array} \quad (3.17)$$

Esses diagramas são lidos usando as regras diagramáticas como:

$$C^{zz,+}(x,t) = \left(\frac{1}{\pi}\right)^3 - \frac{1}{\pi} [G(x,t)G(-x,-t) + G(x+1,t)G(1-x,-t)]. \quad (3.18)$$

Esse resultado também pode ser obtido somando os resultados das contrações (b), (c), e (d) das equações (3.13).

Utilizando os mesmos métodos usados no cálculo de $C^{zz,+}(x,t)$ podemos também encontrar as outras funções de correlação das componentes locais do operador tensorial de

spins. As funções que ainda precisamos determinar (de acordo com o capítulo 2) são:

$$C^{+-,+-}(x, t) = \langle \psi_{j+x}^\dagger(t) \psi_{j+x+1}(t) \psi_j^\dagger(0) \psi_{j+1}(0) \rangle \quad (3.19)$$

$$C^{+-,-+}(x, t) = \langle \psi_{j+x}^\dagger(t) \psi_{j+x+1}(t) \psi_j(0) \psi_{j+1}^\dagger(0) \rangle \quad (3.20)$$

$$C^{++,- -}(x, t) = - \langle \psi_{j+x}^\dagger(t) \psi_{j+x+1}^\dagger(t) \psi_j(0) \psi_{j+1}(0) \rangle \quad (3.21)$$

$$C^{zz,zz}(x, t) = \left\langle \left(\psi_{j+x}^\dagger(t) \psi_{j+x}(t) - \frac{1}{2} \right) \left(\psi_{j+x+1}^\dagger(t) \psi_{j+x+1}(t) - \frac{1}{2} \right) \times \right. \\ \left. \times \left(\psi_j^\dagger(0) \psi_j(0) - \frac{1}{2} \right) \left(\psi_{j+1}^\dagger(0) \psi_{j+1}(0) - \frac{1}{2} \right) \right\rangle \quad (3.22)$$

Os diagramas das três primeiras funções de correlação são:

$$C^{+-,+-}(x, t) = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} \quad (3.23)$$

$$C^{+-,-+}(x, t) = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} \quad (3.24)$$

$$C^{++,- -}(x, t) = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} \quad (3.25)$$

Esses diagramas podem ser interpretados utilizando as 5 regras de leitura como:

$$C^{+-,+-}(x, t) = \left(\frac{1}{\pi} \right)^2 + G(x+1, t) G(1-x, -t) \quad (3.26)$$

$$C^{+-,-+}(x, t) = - \left(\frac{1}{\pi} \right)^2 - G(x, t) G(-x, -t) \quad (3.27)$$

$$C^{++,- -}(x, t) = G(-x-1, -t) G(1-x, -t) - [G(-x, -t)]^2. \quad (3.28)$$

Colocamos os diagramas de $C^{zz,zz}(x,t)$ no apêndice C. Essa função de correlação em termos das funções de Green fica:

$$\begin{aligned}
C^{zz,zz}(x,t) = & \left(\frac{1}{\pi}\right)^4 + 2\left(\frac{1}{\pi}\right)^2 G(x,t)G(-x,-t) \\
& + \left(\frac{1}{\pi}\right)^2 \left[G(x-1,t)G(-x-1,-t) + G(x+1,t)G(1-x,-t) \right] \\
& + G(x,t)^2 G(-x,-t)^2 + G(x+1,t)G(-x-1,-t)G(x-1,t)G(1-x,-t) \\
& - G(x,t)^2 G(1-x,-t)G(-x-1,-t) - G(x+1,t)G(x-1,t)G(-x,-t)^2.
\end{aligned} \tag{3.29}$$

Com isso encerramos a parte de determinar as funções de correlação em função do propagador de uma partícula no sistema de férmions livres em que o modelo XX é mapeado. Vamos então partir para a análise dessas 5 funções de correlação.

3.2 Análise das funções de correlação

Vimos que as funções de correlação das componentes locais do tensor de spins no modelo XX podem ser reduzidas ao cálculo da função de Green de uma partícula usando o teorema de Wick. Nesta seção vamos analisar as funções de correlação encontradas na seção anterior nos limites assintóticos de tempos longos, grandes distâncias e grandes distâncias ao longo do cone de luz ($x = Jt$).

Começaremos pela função de correlação $C^{zz,+-}(x,t)$. A equação (3.18) nos fornece essa função de correlação em termos das funções de Green. Os resultados do apêndice A dizem que a função de Green de uma partícula ($t > 0$ para o argumento da parte temporal) e um buraco ($t < 0$ para o argumento da parte temporal) no sistema que estamos trabalhando é expressada em termos da integral

$$I(x, |t|) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} dk e^{i\{kx + \varepsilon_k |t|\}}. \tag{3.30}$$

Assim, podemos escrever $C^{zz,+-}(x,t)$ da seguinte forma:

$$C^{zz,+-}(x,t) = -\frac{1}{\pi^3} + \frac{(-1)^x}{\pi} \left[I(x,t)I(x,t) - I(x+1,t)I(x-1,t) \right]. \tag{3.31}$$

Veja que assumimos que $t > 0$ no argumento da função de correlação. Se fizermos $t < 0$ produz o mesmo resultado porque $G(x,t)$ é uma função par em x (apêndice A). Se fizermos $t \rightarrow -t$ em (3.18) vemos que essa função de correlação é par em t também, portanto trataremos apenas o caso $t > 0$. O gráfico de $C^{zz,+-}(x,t)$ em função (x,t) utilizando (3.31) está plotado na figura (3).

Figura 3 – Função de correlação $C^{zz,+}(x, t)$ como função do tempo e da distância.

Fonte: Elaborada pelo autor

Com este gráfico, observamos que a função de correlação decai tanto com a distância quanto com o tempo e também tem um comportamento oscilatório a medida que nos afastamos da origem. Esperamos um decaimento do tipo lei de potência porque o sistema é sem gap no limite termodinâmico (crítico). Queremos obter as potências de decaimento e as frequências de oscilação nos limites assintóticos das três direções de interesse. Para isso vamos usar os resultados de $I(x, t)$ do apêndice A para esses limites.

Como o Hamiltoniano do sistema de férmions livres na rede não é diagonal na representação da posição, não conseguimos analisar os efeitos das excitações nessa base. Por outro lado na representação de momento podemos tirar todas as informações das excitações importantes para as funções de correlação. Isso acontece porque na verdade existem regiões muito específicas no domínio $-\pi \leq k \leq \pi$ que dão contribuições dominante para a função de Green quando tomamos os limites de tempos longos, distâncias grandes e em cima do cone de luz (apêndice A). Como essas regiões tem momento e energia bem definidas podemos dizer que elas representam na verdade excitações com energia e momento característicos, e analisar a correlação de dois estados na representação x nesses limites é equivalente a analisar a evolução de estados oriundos dessas excitações no estado fundamental. Com a mesma ideia, quando queremos observar as funções de correlação das componentes locais do tensor de spins, que são em geral a soma do produto de duas funções de Green, podemos interpretar como a combinação de excitações sobre o estado fundamental. Assim, analisar a correlação de duas componentes do operador de

dois spins no modelo XX , separados no espaço-tempo por (x, t) , é equivalente às análises das excitações na representação k de férmions do sistema livre.

Agora vamos analisar o comportamento para longos tempos, grandes distâncias, e grandes distâncias ao longo do cone de luz. Para isso precisamos achar os pontos estacionários da integral, que são os pontos que extremizam a fase na exponencial. Para $Jt \gg x$, igualando a derivada do expoente da integral (3.30) a zero nos fornece os pontos em que as fases se somam (extremo) e portanto nos informa quais pontos tem maior contribuição para a função de Green. Esses pontos também são chamados de pontos de sela. Para esse limite,

$$\frac{d}{dk}(kx - J \cos(k)t) = 0 \quad (3.32)$$

assim,

$$k = \arcsin(0) = 0 \text{ ou } \pi. \quad (3.33)$$

O ponto de sela em $k = 0$ é o único que tem contribuições para a função de Green de um buraco. As contribuições para $k = \pi$ são importantes para a função de Green de uma partícula. Vamos analisar somente as contribuições devido ao buraco pois o propagador de uma partícula pode ser obtido a partir do propagador de um buraco (apêndice A). Resumindo, no limite de tempos longos o ponto de sela no fundo da banda é o responsável pela propagação de um buraco enquanto que o ponto de sela no topo da banda é responsável pela propagação de uma partícula.

Fazendo uma aproximação quadrática na relação de dispersão no fundo da banda, que é o primeiro termo não nulo, obtemos (apêndice A)

$$I(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{-iJt}}{\sqrt{Jt}} e^{-i(\frac{x^2}{2Jt} - \frac{3\pi}{4})}. \quad (3.34)$$

Dizemos que esse termo é devido a buracos próximos ao fundo da banda, o termo devido a partículas no topo da banda é semelhante.

Agora vamos focar no caso em que $x \gg Jt$. Usando a equação (3.32) vemos que neste regime não existe um ponto de sela da integral (3.30). Portanto devemos esperar que as excitações presentes na evolução da função de Green devem estar próximas aos pontos de Fermi ($k = \pi/2$ ou $k = -\pi/2$), pois possuem pequenas energias. Para esses pontos o primeiro termo não nulo na relação de dispersão é de primeira ordem,

$$\varepsilon_k \approx v(k - \frac{\pi}{2}), \text{ para } k = \frac{\pi}{2}; \quad (3.35)$$

$$\varepsilon_k \approx -v(k + \frac{\pi}{2}), \text{ para } k = -\frac{\pi}{2}. \quad (3.36)$$

onde $v = J$ é a velocidade associada as excitações de baixa energia. Com essas aproximações

a integral (3.30) fica (apêndice A):

$$I(x, t) = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{e^{i\frac{x\pi}{2}}}{x + Jt} - \frac{e^{-i\frac{x\pi}{2}}}{x - Jt} \right). \quad (3.37)$$

$$(3.38)$$

Dizemos que esse termo é devido a buracos próximos aos pontos de Fermi, o termo devido a partículas nos pontos de Fermi é semelhante.

Como vimos, considerando o limite para tempos longos ($Jt \gg x$), as contribuições para a função de Green que vem do fundo da banda ($k \sim 0$) são as dominantes, mas o termo devido aos pontos de Fermi também serão considerados pois devido ao cancelamento dos termos dominantes oriundos do fundo da banda é necessário considerar termos devido às excitações de baixa energia e que tem expoente de decaimento menor. Assim usaremos:

$$I(x, t) = \frac{1}{2\pi} \left[\sqrt{\frac{2\pi}{Jt}} e^{-i\left(Jt - \frac{3\pi}{4} + \frac{x^2}{2Jt}\right)} + \frac{2 \cos\left(\frac{x\pi}{2}\right)}{Jt} - i \frac{2x}{(Jt)^2} \sin(x\pi/2) \right]. \quad (3.39)$$

Cada termo nessa equação pode ser explicado a partir de excitações do tipo partícula ou buraco que são propagadas pela função de Green, essas excitações também vão poder ser reconhecidas nas funções de correlação. Após algumas manipulações algébricas e desconsiderando termos de ordem mais baixa encontramos:

$$C^{zz,+-}(x, t) = -\frac{1}{\pi^3} + \frac{(-1)^x}{2\pi^3} \left[\frac{2 \cos\left(\frac{x\pi}{2}\right)}{Jt} \sqrt{\frac{2\pi}{Jt}} e^{-i\left(Jt - \frac{3\pi}{4}\right)} + \frac{2 + \pi e^{-i2Jt}}{(Jt)^2} \right]. \quad (3.40)$$

As partes real e imaginária dessa função de correlação estão plotadas na figura (4).

(a)

(b)

Figura 4 – Função de correlação $C^{zz,+}(x, t)$ para $Jt \gg x = 6$. Em vermelho curva com aproximação analítica na equação (3.40). Em círculos azuis, cálculo numérico da equação (3.31).

Fonte: Elaborada pelo autor

Veja que a curva e os pontos ficam bastante próximos para o regime de tempo analisado, indicando que nossa aproximação para o limite $Jt \gg x$ é válida. Outro ponto a se notar é que na equação (3.40) para sítios ímpares o decaimento $1/(Jt)^{3/2}$ é cancelado, restando o decaimento com $1/(Jt)^2$.

Os termos $e^{\pm i \frac{\pi}{2} x} \frac{e^{-i J t}}{(J t)^{3/2}}$ na equação (3.40) são devidos a excitações de partícula-buraco de energia J . Correspondem a retirar uma partícula do fundo da banda ($k = 0$) e colocar na superfície de Fermi, e então evoluir o sistema. Como a superfície de Fermi possui dois pontos, $k = \pi/2$ e $k = -\pi/2$, então existe interferência entre as duas

excitações relacionadas a cada ponto de Fermi, gerando funções oscilatórias de x , como o $(-1)^x \cos(\pi x/2)$ em (3.40). A energia da excitação é igual à energia do buraco, J , como está indicado na figura (5). Também existe a contribuições de buraco com momentos próximo ao ponto de Fermi e partícula próximo ao topo da banda.

Figura 5 – Excitação de partícula-buraco do fundo da banda para o ponto de Fermi. A partícula e o buraco são criados na superfície de Fermi e no fundo da banda, respectivamente. A criação de partícula em $-\pi/2$ também é importante. Essa excitação dá origem ao termo $\cos(\frac{x\pi}{2}) \frac{e^{-iJt}}{(Jt)^{3/2}}$.

Fonte: Elaborada pelo autor

O termo $e^{i\pi x} \frac{d+ce^{-i2Jt}}{(Jt)^2}$ tem duas contribuições. O termo não oscilante em t é devido a excitações próximas à superfície de Fermi. Uma partícula é criada logo acima e outra é aniquilada logo abaixo da superfície de Fermi, mas separadas por um $\Delta k = \pi$. Essas excitações possuem baixas energias e surgem devido as flutuações de estado fundamental, figura (6). Para essas excitações é observado a interferência devido aos dois pontos de Fermi, dando origem a termos com oscilações da forma $\frac{(-1)^x}{x^2}$, que são importantes quando $x \gg Jt$, como veremos a seguir. Como a função $C^{zz,+}$ depende da soma de dois termos, cada um sendo o produto de duas funções de Green, os termos de ordem $1/t$ se cancelam. Essas contribuições são devido a criação de um buraco próximo ao fundo da banda e uma partícula próximo ao topo (também separadas por $\Delta k = \pi$), como expressado na figura (7). Com o seu cancelamento, o próximo termo depende de um fator extra de $1/t$ no decaimento, dando origem a potência $1/t^2$. Isso pode ser interpretado como um efeito do princípio de exclusão de Pauli, já que é o efeito de duas contribuições próximas, no fundo da banda e no topo.

Como vimos, considerando o limite para distâncias grandes ($Jt \ll x$) as principais contribuições para o propagador $G(x, t)$ vem dos pontos de Fermi com a relação de dispersão linearizada. Para este limite podemos usar apenas a parte imaginário de $I(x, t)$,

Figura 6 – Excitação partícula-buraco de baixa energia (relação de dispersão linearizada), próximo a superfície de Fermi. A criação de uma partícula próximo a $-\pi/2$ e de um buraco próximo a $\pi/2$ também gera contribuições, assim como a criação de uma partícula e buraco próximos ao mesmo ponto de Fermi. São responsáveis pelos termos $\frac{1}{(Jt)^2}$, $\frac{e^{\pm i\pi x}}{(x)^2}$, ou $\frac{1}{(x)^2}$ nas funções de correlação.

Fonte: Elaborada pelo autor

porque decai mais lentamente que a parte real:

$$I(x, t) = \frac{i}{\pi} \frac{1}{x} \sin\left(x \frac{\pi}{2}\right). \quad (3.41)$$

Poderíamos pensar que também seria necessário pegar a parte real de $I(x, t)$ já que para x par a aproximação acima fornece zero, mas quando isso acontece o termo $I(x+1, t)I(x-1, t)$ na equação (3.31) é o dominante. Considerando esse limite, obtemos:

$$C^{zz,+-}(x, t) = -\frac{1}{\pi^3} - \frac{(-1)^x}{\pi^3} \frac{1}{x^2}. \quad (3.42)$$

A parte real e imaginária oscilam com frequência π e decaem com $1/x^2$, esse gráfico está feito na figura (8).

A excitação associada à função $C^{zz,+-}(x, t)$ no limite de distâncias grandes é devido às excitações de baixas energias, que acontecem próximo aos pontos de Fermi, figura (6). Ela surge devido à criação de uma partícula próxima a um dos pontos de Fermi e um buraco no outro ponto de Fermi, de modo que $\Delta k = \pi$, produzindo a oscilação $(-1)^x$. Vamos agora analisar o limite $x = Jt \gg 1$, que é em cima do cone de luz e distante da origem. Para este limite, as excitações dominantes envolvidas na função de Green são devido a buracos com momentos próximos a $k = -\pi/2$, mas com aproximação cúbica na relação de dispersão

$$\cos(k + p) \simeq p - \frac{p^3}{6}. \quad (3.43)$$

Figura 7 – Excitação partícula-buraco com a criação de um buraco no fundo da banda e uma partícula no topo. É responsável pelo termo $e^{i\pi x} \frac{e^{-i2Jt}}{(Jt)^2}$ nas funções de correlação da forma de $C^{zz,+-}$, pois envolve a combinação de duas dessas excitações. Para as funções de correlação $C^{+-,-+}(x,t)$ e $C^{+-,+-}(x,t)$ o termo $e^{i\pi x} \frac{e^{-i2Jt}}{Jt}$ (que envolve somente uma partícula e um buraco) é dominante para tempos longos.

Fonte: Elaborada pelo autor

Figura 8 – Função de correlação $C^{zz,+-}(x,t)$ para $x \gg Jt = 6$. Em vermelho curva com aproximação analítica (3.42). Em círculos azuis, cálculo numérico (3.31). A parte imaginária nesse limite é zero.

Fonte: Elaborada pelo autor

Mas excitações de baixa energia, com relação de dispersão linearizada, em $k = \pi/2$ também geram contribuições para $I(x,t)$. Assim, colecionando os termos devido a essas duas contribuições (apêndice A), obtemos

$$I(Jt, J) = A \frac{e^{-i\frac{\pi}{2}Jt}}{(Jt)^{1/3}} + \frac{1}{4\pi} \frac{e^{i\frac{\pi}{2}Jt}}{Jt}. \quad (3.44)$$

Neste limite, precisamos olhar os termos $I(Jt \pm 1, t)$ de forma mais cuidadosa.

Esses termos geram contribuições que decaem com $1/(Jt)^{2/3}$ e $1/Jt$ devido ao ± 1 que vem quando fazemos a aproximação $e^{\mp ip} \approx 1 \mp ip - \frac{p^2}{2}$ na integral $I(x \pm 1, t)$. Vamos colocar esse resultado aqui:

$$I(Jt \pm 1, t) = e^{-i(\frac{\pi}{2}Jt \pm \frac{\pi}{2})} \left[A \frac{1}{t^{1/3}} \pm \frac{AB}{t^{2/3}} + \frac{1}{2\pi t} \right] + \frac{1}{4\pi} \frac{e^{i\frac{\pi}{2}Jt}}{Jt} e^{\pm i\frac{\pi}{2}}, \quad (3.45)$$

onde

$$A = \frac{e^{i\frac{2\pi}{3}}}{6^{2/3}\pi} \Gamma\left(\frac{1}{3}\right) \quad (3.46)$$

$$B = e^{i\frac{2\pi}{3}} 6^{1/3} \frac{\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{3}\right)}. \quad (3.47)$$

Depois de várias manipulações algébricas conseguimos chegar em

$$C^{zz,+-}(Jt, t) = -\frac{(-1)^{Jt}}{\pi} \left[\frac{A}{\pi} \frac{(e^{-i\pi Jt} - 1)}{(Jt)^{4/3}} - B^2 A^2 \frac{e^{-i\pi Jt}}{(Jt)^{4/3}} \right]. \quad (3.48)$$

O termo $\frac{1}{Jt} \frac{1}{(Jt)^{1/3}}$ é devido a correções de ordem mais alta em p no termo $e^{\pm ip}$ em $I(Jt \pm 1, t)$. Já o termo com oscilação $\frac{e^{-i\pi Jt}}{(Jt)^{4/3}}$ é devido à criação de um buraco em $-\pi/2$ e uma partícula em $\pi/2$, como ilustra a figura (9).

Figura 9 – Excitação por criação de um buraco e uma partícula próximo aos pontos de Fermi. Em $-\pi/2$ é devido ao limite no cone de luz $x = Jt \gg 1$ com relação de dispersão aproximada até o termo cúbico, em $\pi/2$ é devido a baixas energias (aproximação linear). É responsável pelo termo $\frac{e^{-i\pi Jt}}{(Jt)^{4/3}}$.

Fonte: Elaborada pelo autor

Feita essa análise para a função de correlação $C^{zz,+-}(x, t)$ podemos partir para as outras correlações das componentes locais do tensor de spins. As funções $C^{zz,zz}(x, t)$ e

$C^{++,--}(x, t)$ podem ser escritas em termos de $I(x, t)$ como:

$$C^{zz,zz}(x, t) = \frac{1}{\pi^4} - \frac{2}{\pi^2}(-1)^x [I(x, t)^2 - I(x-1, t)I(x+1, t)] \\ + I(x, t)^4 + I(x-1, t)^2 I(x+1, t)^2 - 2I(x, t)^2 I(x-1, t)I(x+1, t) \quad (3.49)$$

$$C^{++,--}(x, t) = -I^2(x, t) + I(x+1, t)I(x-1, t). \quad (3.50)$$

Os termos que envolvem I^2 em $C^{zz,zz}(x, t)$ tem a mesma forma que em $C^{zz,+-}(x, t)$, e os termos dependentes de I^4 podem ser desprezados. Assim todas as análises das excitações envolvidas em $C^{zz,zz}(x, t)$ quando fazemos os limites nos três eixos de interesse são idênticas às feitas no caso de $C^{zz,+-}(x, t)$.

Por outro lado $C^{++,--}(x, t)$ não possui o fator $(-1)^x$ porque essa correlação envolve a propagação de dois buracos na representação Fermiônica (equivalente a flipar para baixo dois spins vizinhos no modelo XX), enquanto que $C^{zz,+-}(x, t)$ envolve a propagação de uma partícula e um buraco (ou flipar um spin para baixo e seu vizinho para cima na representação de spins). Embora exista essa diferença podemos entender as análises das excitações para a função de correlação $C^{++,--}(x, t)$ com base nas feitas para $C^{zz,+-}(x, t)$. Para isso basta substituir as partículas por buracos; se as partículas são criadas próximo a algum ponto de Fermi no caso de $C^{zz,+-}(x, t)$ então a excitação envolvida em $C^{++,--}(x, t)$ é um buraco próximo ao mesmo ponto de Fermi. Se uma partícula é criada no topo da banda no caso de $C^{zz,+-}(x, t)$ então a excitação envolvida em $C^{++,--}(x, t)$ é um buraco próximo ao fundo da banda, pois produz a mesma variação de energia. Assim a variação de momento é nula ($\Delta k = 0$) por que ao invés de criarmos uma partícula com momento $k = \pm\pi/2$ ou 0 o que fazemos na verdade é destruir uma com $k = \pm\pi/2$ ou 0. Os comportamentos que obtemos são os mesmos de $C^{zz,+-}(x, t)$ sem o fator $e^{i\pi x}$. Na figura (10) estão os gráficos de $C^{++,--}(x, t)$ para o limite $x = Jt \gg 1$ em cima do cone de luz. As curvas com as aproximações nesse limite concordam com o cálculo numérico de (3.50).

Agora vamos partir para a análise de $C^{+-,+-}(x, t)$ e $C^{+-,-+}(x, t)$. Essas duas funções estão escritas nas equações (3.26) e (3.27). Elas possuem somente um produto de duas funções de Green, por isso são mais simples de serem analisadas. Em termos da integral $I(x, t)$ essas funções de correlação ficam:

$$C^{+-,+-}(x, t) = \frac{1}{\pi^2} + (-1)^x I(x+1, t)I(x-1, t) \quad (3.51)$$

$$C^{+-,-+}(x, t) = -\frac{1}{\pi^2} + (-1)^x I^2(x, t). \quad (3.52)$$

Usando a aproximação (3.39) no limite de tempos longos, encontramos os seguintes

Figura 10 – Função de correlação $C^{++,--}(x, t)$ para $x = Jt \gg 1$. Em vermelho curva com aproximação analítica e em círculos azuis, cálculo numérico (3.50).

Fonte: Elaborada pelo autor

resultados para os termos dominantes:

$$C^{+-,+-}(x, t) = \frac{1}{\pi^2} + \frac{(-1)^x}{2\pi} \frac{e^{-i\left(2Jt - \frac{3\pi}{2}\right)}}{Jt} \quad (3.53)$$

$$C^{+-,-+}(x, t) = -\frac{1}{\pi^2} + \frac{(-1)^x}{2\pi} \frac{e^{-i\left(2Jt - \frac{3\pi}{2}\right)}}{Jt}. \quad (3.54)$$

A excitação partícula-buraco envolvida nesses termos é a mostrada na figura (7), um buraco é criado em $k = 0$ e uma partícula em $k = \pi$.

Para distâncias grandes usamos a aproximação (3.41), o que produz

$$C^{+-,+-}(x, t) = \frac{1}{\pi^2} + \frac{(-1)^x}{\pi^2} \frac{\cos^2\left(x\frac{\pi}{2}\right)}{x^2} \quad (3.55)$$

$$C^{+-,-+}(x, t) = -\frac{1}{\pi^2} - \frac{(-1)^x}{\pi^2} \frac{\sin^2\left(x\frac{\pi}{2}\right)}{x^2}, \quad (3.56)$$

que é devido as excitações de baixas energias, figura (6). No limite $x = Jt \gg 1$ podemos usar a aproximação (3.44), o que nos fornece

$$C^{+-,+-}(x, t) = \frac{1}{\pi^2} + \frac{A^2}{(Jt)^{2/3}} \quad (3.57)$$

$$C^{+-,-+}(x, t) = -\frac{1}{\pi^2} + \frac{A^2}{(Jt)^{2/3}}. \quad (3.58)$$

As excitação partícula-buraco que dão origem a esses termos dominantes são devido à criação de um buraco dentro do mar de Fermi próximo a $-\pi/2$ e uma partícula logo acima do mar Fermi próximo a esse momento. Fizemos gráficos com todas as funções de correlação acima para comparar a validade das aproximações nos limites de interesse e os cálculos numéricos. Todos eles indicam ser válidas as aproximações.

Figura 11 – Excitação por criação de um buraco e uma partícula próximo ao ponto de Fermi $k = -\pi/2$, surge no limite $x = Jt \gg 1$ nas funções de correlação $C^{+-,+-}(x, t)$ e $C^{+-,-+}(x, t)$. É responsável pelo termo $\frac{1}{(Jt)^{2/3}}$.

Fonte: Elaborada pelo autor

As funções de correlação $C^{+-,+-}(x, t)$ e $C^{+-,-+}(x, t)$ possuem os limites assintóticos nos três eixos de interesse parecidos. Enquanto que as funções $C^{zz,+-}(x, t)$, $C^{zz,zz}(x, t)$ e $C^{++,--}(x, t)$ tem os comportamentos parecidos entre si nesses regimes. Para facilitar a leitura dos resultados montamos uma tabela (1) com os termos dependentes de (x, t) com os expoentes dominantes e frequências de oscilação para cada função de correlação.

Como vemos pela tabela, fica claro que as funções de correlação das componentes locais do tensor de spins no modelo XX que decaem mais devagar são as que envolvem somente flipar dois spins vizinhos em sentidos opostos, isto é, as funções $C^{+-,-+}(x, t)$ e $C^{+-,+-}(x, t)$. Feitas as análises das funções de correlação, vamos partir para as aplicações

Tabela 1 – Termos dominantes para as funções de correlação das componentes locais do tensor de spins para aproximações em (x, t) longe da origem.

	$Jt \gg x$	$Jt = x \gg 1$	$x \gg Jt$
$C^{zz,zz}(x, t)$	$e^{i(\pi \pm \pi/2)x} \frac{e^{-iJt}}{(Jt)^{3/2}}, e^{i\pi x} \frac{2+\pi e^{-i2Jt}}{(Jt)^2}$	$\frac{e^{-i\pi Jt}}{(Jt)^{4/3}}, \frac{1}{(Jt)^{4/3}}$	$\frac{e^{i\pi x}}{x^2}$
$C^{zz,+-}(x, t)$	$e^{i(\pi \pm \pi/2)x} \frac{e^{-iJt}}{(Jt)^{3/2}}, e^{i\pi x} \frac{2+\pi e^{-i2Jt}}{(Jt)^2}$	$\frac{e^{-i\pi Jt}}{(Jt)^{4/3}}, \frac{1}{(Jt)^{4/3}}$	$\frac{e^{i\pi x}}{x^2}$
$C^{++,--}(x, t)$	$e^{\pm i\frac{\pi}{2}x} \frac{e^{-iJt}}{(Jt)^{3/2}}, \frac{2+\pi e^{-i2Jt}}{(Jt)^2}$	$\frac{e^{-i\pi Jt}}{(Jt)^{4/3}}, \frac{1}{(Jt)^{4/3}}$	$\frac{1}{x^2}$
$C^{+-,-+}(x, t)$	$e^{i\pi x} \frac{e^{-i2Jt}}{Jt}$	$\frac{1}{(Jt)^{2/3}}$	$\frac{e^{\pm i\pi x}}{x^2}$
$C^{+-,+-}(x, t)$	$e^{i\pi x} \frac{e^{-i2Jt}}{Jt}$	$\frac{1}{(Jt)^{2/3}}$	$\frac{e^{\pm i\pi x}}{x^2}$

Fonte: Elaborada pelo autor

dessas funções. Veremos que elas são importantes para o estudo de operadores que dependem das componentes locais do tensor de spins.

3.3 Quantidades conservadas e não conservadas

O estudo de quantidades conservadas é de grande interesse em sistemas integráveis.⁶⁴ Alguns estudos recentes investigam quantidades conservadas em férmions livres para saber propriedades de relaxamento,²⁸ e também em sistemas interagentes para saber propriedades de transporte.⁶⁵ Nesta seção vamos identificar quantidades conservadas e não conservadas a partir das funções de correlação de operadores locais discutidas na seção anterior.

Nesta parte vamos fazer uma análise de um operador que corresponde a uma quantidade não conservada, isto é, que não comuta com o Hamiltoniano. Seja

$$A(t) = \sum_j S_j^-(t) S_{j+1}^-(t), \quad (3.59)$$

que na representação Fermiônica fica

$$A(t) = - \sum_j c_j(t) c_{j+1}(t). \quad (3.60)$$

Este operador não comuta com H , pois

$$[A, H] = \frac{J}{2} \sum_{i,j} [c_i c_{i+1}, c_j^\dagger c_{j+1}]. \quad (3.61)$$

Podemos também explicar de forma mais intuitiva notando o fato que A é a superposição de operadores que aniquilam dois férmions vizinhos (ou que *flipam* dois spins vizinhos) em qualquer auto-estado de H , e portanto retira este auto-estado do seu próprio subespaço de estados de mesma energia e mesmo número de férmions (ou spin total na direção z). Embora esse operador não seja hermitiano, ele pode representar o acoplamento do sistema

com uma perturbação externa que interage com a cadeia de spins flipando dois spins de sítios vizinhos. Vamos observar o comportamento da auto-correlação desse operador em tempos diferentes e conectar isso com as funções de correlações locais já calculadas.

A correlação dependente do tempo, ou simplesmente auto-correlação de A , é definida como

$$C_A(t) \doteq \frac{1}{N} \langle gs | A^\dagger(t) A(0) | gs \rangle, \quad (3.62)$$

onde atuamos o operador no tempo inicial (definido como zero), $A(0)$, no estado fundamental e então comparamos com um estado obtido da ação do operador A evoluído até o tempo t , $A(t)$, no estado fundamental. Essa quantidade pode ser escrita em termos da função de correlação de uma das componente do operador tensorial de spins $T_{i,i+1}^{ab}$, como vemos a seguir. Usando a invariância de translação da cadeia de spins no modelo XX , podemos escrever

$$C_A(t) = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{j'} S_{j'}^+(t) S_{j'+1}^+(t) \sum_j S_j^-(0) S_{j+1}^-(0) \right\rangle \quad (3.63)$$

$$= \frac{1}{N} \sum_x \sum_j \langle S_{j+x}^+(t) S_{j+x+1}^+(t) S_j^-(0) S_{j+1}^-(0) \rangle \quad (3.64)$$

$$= \sum_x \langle S_{j+x}^+(t) S_{j+x+1}^+(t) S_j^-(0) S_{j+1}^-(0) \rangle \quad (3.65)$$

$$= \sum_x C^{+,+,-,-}(x, t). \quad (3.66)$$

Assim conseguimos expressar a correlação $C_A(t)$ em função da soma em todas as distâncias x da função de correlação de dois spins $C^{+,+,-,-}(x, t)$ que havíamos determinado na seção anterior (3.29). Do apêndice A, considerando $t > 0$, o propagador do sistema fica:

$$G(x, -t) = G_h(x, t) \quad (3.67)$$

$$= i \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{dk}{2\pi} e^{i\{kx - \varepsilon_k t\}} \quad (3.68)$$

$$= I(x, t), \quad (3.69)$$

onde $\varepsilon_k = -J \cos(k)$ é a relação de dispersão do modelo XX , e de agora para frente vamos considerar $J = 1$. Assim a função de correlação $C^{+,+,-,-}(x, t)$ na equação (3.28) fica:

$$\begin{aligned} C^{+,+,-,-}(x, t) &= \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{dk}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{dp}{2\pi} e^{i(k+p)x} e^{-i(\varepsilon_k + \varepsilon_p)t} \\ &\quad - \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{dk}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{dp}{2\pi} e^{i(k-p)x} e^{i(k+p)x} e^{-i(\varepsilon_k + \varepsilon_p)t}. \end{aligned} \quad (3.70)$$

Considerando a transformada de Fourier da função de Dirac

$$\delta(k) = \frac{1}{2\pi} \sum_{x=-\infty}^{\infty} e^{ikx}, \quad (3.71)$$

podemos escrever a correlação dependente do tempo de A na forma

$$C_A(t) = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{dk}{2\pi} (1 - e^{2ik}) e^{-2i\varepsilon_k t} \quad (3.72)$$

$$= \frac{J_1(2t)}{2t} - i \frac{H_1(2t)}{2t}, \quad (3.73)$$

onde $J_1(t)$ é a função de Bessel de primeiro tipo e $H_1(t)$ a função de Struve de ordem 1. O gráfico de $C_A(t)$ está representado na figura (12).

A partir do limite assintótico das funções $J_1(t)$ e $H_1(t)$ podemos determinar o decaimento da correlação $C_A(t)$. A função $J_1(t)$ decai com $1/\sqrt{t}$ para tempos longos, enquanto que o limite assintótico de $H_1(t)$ é $2/\pi + \sqrt{2/\pi t}$.⁶⁶ Assim a parte real de $C_A(t)$ decai com $1/t^{3/2}$ e a parte imaginária com $1/t$. Isto está de acordo com o fato que $A(t)$ não comuta com o Hamiltoniano H , isto é, não é uma quantidade conservada e portanto é natural que sua auto-correlação decaia a medida que a diferença temporal t aumenta.

Outro operador interessante de ser analisado é

$$B(t) = \sum_j S_j^z(t) S_{j+1}^z(t), \quad (3.74)$$

este operador também não comuta com H pois depende de termos da forma $\rho_j \rho_{j+1}$ na representação Fermiônica, e esses termos não comutam com os termos de *hopping* $c_{j'}^\dagger c_{j'+1}$ para quaisquer j' .

Vamos definir então a correlação dependente do tempo t de $B(t)$ de forma similar como a definição de $C_A(t)$,

$$C_B(t) \doteq \frac{1}{N} \left[\langle gs | B^\dagger(t) B(0) | gs \rangle - \langle gs | B^\dagger(t) | gs \rangle \langle gs | B(0) | gs \rangle \right]. \quad (3.75)$$

Veja que nessa definição subtraímos a quantidade $\langle gs | B(t) | gs \rangle \langle gs | B(0) | gs \rangle$. Esta é a definição usual de função de correlação na qual se subtrai o produto dos valores esperados dos operadores. Na equação (3.62) omitimos essa contribuição porque o valor esperado de A é nulo. A função $C_B(t)$ pode ser escrita em termos de uma função de correlação de operadores locais de dois spins usando os mesmos argumentos ditos anteriormente:

$$C_B(t) = \frac{1}{N} \left[\left\langle \sum_{j'} S_{j'}^z(t) S_{j'+1}^z(t) \sum_j S_j^z(0) S_{j+1}^z(0) \right\rangle - \left\langle \sum_j S_j^z(t) S_{j+1}^z(t) \right\rangle \left\langle \sum_j S_j^z(0) S_{j+1}^z(0) \right\rangle \right] \quad (3.76)$$

$$= \sum_x \left[C^{zz,zz}(x, t) - \frac{1}{\pi^4} \right], \quad (3.77)$$

Figura 12 – Parte real e imaginária de $C_A(t)$, onde fizemos $J = 1$ para constante de acoplamento do modelo XX .

Fonte: Elaborada pelo autor

já que

$$\begin{aligned} \sum_j \langle S_j^z(t) S_{j+1}^z(t) \rangle &= \left\langle \sum_j S_j^z S_{j+1}^z \right\rangle \\ &= N/\pi^2, \end{aligned} \quad (3.78)$$

pois envolvem somente funções de Green de sítios vizinhos e sem dependência temporal. A função de correlação de operadores locais $C^{zz,zz}(x,t)$ é dada por (3.49), a soma em x do primeiro termo é simplesmente o tamanho do sistema, N , fornecendo N/π^4 . A soma no segundo termo é nula como podemos mostrar diretamente considerando que $\sum_x (-1)^x [I(x,t)^2 - I(x-1,t)I(x+1,t)]$ terá dois termos com integrais duplas, devido ao produto de dois I da equação (3.30), em que os integrados tem dependência em x da

forma $\sum_x (-1)^x e^{i(k+p)x}$, onde k e p são as variáveis de integração. Esse termo é zero pois

$$\sum_x (-1)^x e^{i(k+p)x} = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \sum_{x=-\infty}^{\infty} e^{i[\pi+(k+p)-i\eta]x} \quad (3.79)$$

$$= \frac{1}{e^{i(\pi+k+p)} - 1} + \frac{e^{i(\pi+k+p)}}{1 - e^{i(\pi+k+p)}} + 1 \quad (3.80)$$

$$= 0. \quad (3.81)$$

Portanto, nos resta saber apenas como é a soma dos outros termos de (3.49). Utilizando o mesmo raciocínio utilizado para chegar em (3.72), encontramos

$$C_B(t) = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{dk}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{dq}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{dp}{2\pi} \left[1 + e^{2i(k+p)} - 2e^{i(k+q+2p)} \right] e^{it(\varepsilon_k + \varepsilon_q + \varepsilon_p + \varepsilon_{k+q+p})}.$$

O gráfico desta integral está na figura (13). Apesar de não sermos capazes de dar um lei de decaimento para o termo dependente de t vemos que esse termo é suprimido rapidamente. Vemos que o operador B tem um valor esperado diferente de zero no estado fundamental. Contudo para tempos longos o suficiente vemos que a auto-correlação de B no tempo tende a zero,

$$C_B(t \rightarrow \infty) = 0. \quad (3.82)$$

Figura 13 – Parte real de $C_B(t)$.

Fonte: Elaborada pelo autor

Agora vamos partir para a análise de um operador interessante que comuta com H , o operador corrente. Este operador pode ser obtido a partir da equação que rege a dinâmica do operador número, $\rho_i(t)$, na representação de Heisenberg³²:

$$\frac{d}{dt} \rho_i(t) = i [H, \rho_i(t)], \quad (3.83)$$

onde fizemos $\hbar = 1$. Considerando a equação da continuidade em sua versão discreta

$$\frac{d}{dt}\rho_i(t) = -\left(J_{i+1}^s - J_i^s\right), \quad (3.84)$$

em que J_i^s é o operador corrente no sítio i . Calculando o comutador do lado direito da equação (3.83), podemos escrever então

$$-\left(J_{i+1}^s - J_i^s\right) = \frac{i}{2} \left[\left(c_{i+1}^\dagger c_i + c_{i-1}^\dagger c_i \right) - \left(c_i^\dagger c_{i-1} + c_i^\dagger c_{i+1} \right) \right], \quad (3.85)$$

e obtemos a identificação

$$J_i^s = \frac{1}{2} \left(i c_{i-1}^\dagger c_i + h.c. \right). \quad (3.86)$$

Este operador é interpretado como a corrente de spin polarizado na direção z no sítio i ou, na representação Fermiônica, a corrente de férmions no sítio i . O operador corrente global é definido como a soma de J_i^s em todos os sítios,

$$J^s = \sum_i J_i^s. \quad (3.87)$$

O operador J^s pode ser escrito na base dos *momenta* dos férmions por meio da transformada de Fourier discreta na seguinte forma

$$J^s = \frac{1}{N} \sum_p \psi_p^\dagger \psi_p \sin(p). \quad (3.88)$$

Nessa base o Hamiltoniano também é diagonal, assim é imediato que $[H, J^s] = 0$ como havíamos comentado anteriormente. Outro fato interessante é que no estado fundamental de H o auto-valor de J^s é nulo pois $|gs\rangle$ é preenchido na base dos *momenta* de forma simétrica entre $-\pi/2$ e $\pi/2$ e então $J^s |gs\rangle = 0$. Assim vemos que

$$C_{J^s}(t) = 0, \quad (3.89)$$

isto é, a auto-correlação de J^s é constante e igual a zero. O cálculo numérico dessa auto-correlação a partir de (3.93) também nos fornece a informação que $C_{J^s}(t) = 0$. Obteria uma constante diferente de zero em outros autoestados do Hamiltoniano em que a ocupação não é simétrica, preenchendo $k_1 < k < k_2$ com $k_1 \neq -k_2$, pois o J_s teria autovalor não nulo.

De posse deste operador podemos então escrever sua auto-correlação dependente do tempo em função das correlações locais de algumas componentes do operador tensorial $T_{i,i+1}^{a,b}$ determinadas na última seção. A auto-correlação dependente do tempo de J^s é definida como

$$C_{J^s}(t) \doteq \frac{1}{N} \langle gs | J^{s\dagger}(t) J^s(0) | gs \rangle,$$

utilizando a propriedade de homogeneidade do sistema, como feito anteriormente, podemos escrever

$$C_{J^s}(t) = -\frac{1}{N} \sum_{j,i} \left\langle \left(c_{j-1}^\dagger(t) c_j(t) - c_j^\dagger(t) c_{j-1}(t) \right) \left(c_{i-1}^\dagger(0) c_i(0) - c_i^\dagger(0) c_{i-1}(0) \right) \right\rangle \quad (3.90)$$

$$= - \sum_x \left[C^{+-,+ -}(x,t) + C^{-+,-+}(x,t) + C^{+-,-+}(x,t) + C^{-+,+ -}(x,t) \right]. \quad (3.91)$$

E pela simetria partícula-buraco podemos ainda simplificar

$$\begin{aligned} C_{J^s}(t) &= -2 \sum_x \left[C^{+-,+ -}(x,t) + C^{+-,-+}(x,t) \right] \\ &= 0. \end{aligned} \quad (3.92)$$

Podemos também definir a auto-correlação do próprio Hamiltoniano, mas subtraindo o produto das médias nos tempos diferentes (no caso do J^s essas médias são nulas). Neste caso temos

$$\begin{aligned} C_H(t) &= 2 \sum_x \left[C^{+-,+ -}(x,t) - C^{+-,-+}(x,t) \right] \\ &= 0. \end{aligned} \quad (3.93)$$

Isso nos diz que

$$\sum_x C^{+-,+ -}(x,t) = \sum_x C^{+-,-+}(x,t) = 0. \quad (3.94)$$

Fizemos cálculos numéricos e verificamos isso.

O tratamento feito com os vários operadores acima nos ajuda a identificar uma imediata aplicação das funções de correlação de operadores locais, e também nos fornece um forma de verificar nossos resultados.

4 FUNÇÕES DE CORRELAÇÃO DAS COMPONENTES NÃO LOCAIS DO TENSOR DE SPINS

Neste capítulo, vamos discutir as funções de correlação das componentes não locais do tensor de spins. Como vimos no capítulo 2, precisamos determinar apenas três funções de correlação desse tipo de componente. Com elas completariamos a tabela com os limites assintóticos de todas as funções de correlação das componentes do tensor. As funções de correlação dessas componentes são mais complicadas para serem calculadas porque envolvem o operador *string*, que é não local. baseado no trabalho de Zvonarev et al.⁵⁰ vamos deduzir uma forma para o cálculo dessas funções de correlação em termos de um determinante de uma matriz. Depois mostraremos que a função de correlação do operador *string* pode ser escrita em termos de um determinante de um operador integral, o determinante de Fredholm.

4.1 Forma das funções de correlação

Usando a transformação de Jordan-Wigner para os operadores de spins que aparecem nas componentes do tensor de dois spins nas equações (2.66-2.68) e as identidades (2.32) e (2.33), escrevemos as três funções de correlação das correlações não locais na representação fermiônica que queremos determinar:

$$\begin{aligned}
 C^{z-,z+}(x,t) = (-1)^x & \left\{ \left\langle \rho_{j+x}(t) \psi_{j+x+1}(t) O_{j+x+1}^\dagger(t) \rho_j(0) O_{j+1}(0) \psi_{j+1}^\dagger(0) \right\rangle \right. \\
 & - \frac{1}{2} \left\langle \psi_{j+x+1}(t) O_{j+x+1}^\dagger(t) \rho_j(0) O_{j+1}(0) \psi_{j+1}^\dagger(0) \right\rangle \\
 & - \frac{1}{2} \left\langle \rho_{j+x}(t) \psi_{j+x+1}(t) O_{j+x+1}^\dagger(t) O_{j+1}(0) \psi_{j+1}^\dagger(0) \right\rangle \\
 & \left. + \frac{1}{4} \left\langle \psi_{j+x+1}(t) O_{j+x+1}^\dagger(t) O_{j+1}(0) \psi_{j+1}^\dagger(0) \right\rangle \right\}, \tag{4.1}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 C^{-z,+z}(x,t) = (-1)^x & \left\{ \left\langle \psi_{j+x}(t) O_{j+x}^\dagger(t) \rho_{j+x+1}(t) O_j(0) \psi_j^\dagger(0) \rho_{j+1}(0) \right\rangle \right. \\
 & - \frac{1}{2} \left\langle \psi_{j+x}(t) O_{j+x}^\dagger(t) O_j(0) \psi_j^\dagger(0) \rho_{j+1}(0) \right\rangle \\
 & - \frac{1}{2} \left\langle \psi_{j+x}(t) O_{j+x}^\dagger(t) \rho_{j+x+1}(t) O_j(0) \psi_j^\dagger(0) \right\rangle \\
 & \left. + \frac{1}{4} \left\langle \psi_{j+x}(t) O_{j+x}^\dagger(t) O_j(0) \psi_j^\dagger(0) \right\rangle \right\}, \tag{4.2}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
C^{-z,z+}(x,t) = (-1)^{x-1} & \left\{ \left\langle \psi_{j+x}(t) O_{j+x}^\dagger(t) \rho_{j+x+1}(t) \rho_j(0) O_{j+1}(0) \psi_{j+1}^\dagger(0) \right\rangle \right. \\
& - \frac{1}{2} \left\langle \psi_{j+x}(t) O_{j+x}^\dagger(t) \rho_j(0) O_{j+1}(0) \psi_{j+1}^\dagger(0) \right\rangle \\
& - \frac{1}{2} \left\langle \psi_{j+x}(t) O_{j+x}^\dagger(t) \rho_{j+x+1}(t) O_{j+1}(0) \psi_{j+1}^\dagger(0) \right\rangle \\
& \left. + \frac{1}{4} \left\langle \psi_{j+x}(t) O_{j+x}^\dagger(t) O_{j+1}(0) \psi_{j+1}^\dagger(0) \right\rangle \right\}, \tag{4.3}
\end{aligned}$$

onde definimos o operador $O_j(t) = e^{i\pi\phi_{j+1}(t)}$.

Vamos discutir os termos que são da forma

$$\left\langle \psi_{j+x}(t) e^{i\pi\phi_{j+x+1}(t)} e^{i\pi\phi_{j+1}(0)} \psi_j^\dagger(0) \right\rangle, \tag{4.4}$$

eles correspondem a função de correlação de um spin

$$\left\langle S_{j+x}^-(t) S_j^+(0) \right\rangle. \tag{4.5}$$

Com este resultado podemos encontrar o último termo de todas as funções de correlação (4.2-4.3). Mas antes de tratarmos essa função, teremos que aprender a lidar com as funções de correlação apenas dos operadores *string* $\langle O_{j+x}(t) O_j(0) \rangle$.

4.2 Determinante de Fredholm

O estudo de equações integrais é de extremo interesse para os matemáticos.⁶⁷ Equações integrais com limites de integração não fixos foram primeiramente estudadas por V. Volterra em 1896. Já as equações integrais com limites de integração fixos são divididas em duas categorias, de primeiro tipo,

$$\int_a^b K(x,y) f(y) dy = g(x), \tag{4.6}$$

e de segundo tipo,

$$f(x) - \int_a^b K(x,y) f(y) dy = g(x). \tag{4.7}$$

Essas equações foram estudadas primeiramente pelo geômetra sueco Erik Ivar Fredholm em 1900, e por isso são conhecidas como equações integrais de Fredholm.^{67,68}

Este tipo de equação também aparece em física, por exemplo, no apêndice D colocamos o resultado para o operador de evolução temporal na representação de Interação, equação (D.11), que vem da equação diferencial

$$i \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = V U(t, t_0), \tag{4.8}$$

onde V é a perturbação do sistema. Integrando essa equação usando a condição $U(t_0, t_0) = \mathbf{1}$ obtemos

$$U(t, t_0) = \mathbf{1} - i \int_{t_0}^t dt' V(t') U(t', t_0), \quad (4.9)$$

que é uma equação integral. Se U fosse uma função então essa equação seria uma equação de Volterra e a solução teria garantia de convergência.² Mas como é um operador neste caso ela é resolvida por iteração.

A ideia para resolver as equações de Fredholm numericamente de segundo tipo é discretizar a integral e mapear em um problema mais simples, o cálculo de um determinante. Nesse ponto é que fica interessante, pois muitos problemas em física podem ser mapeados no mesmo tipo de determinante, chamado de determinante de Fredholm. Na referência⁶⁹ é derivada a função de correlação de operadores de spins do modelo XX em dois pontos diferentes do espaço-tempo em temperatura finita e com campo magnético em termos do determinante de Fredholm de um operador integral. O determinante de Fredholm também foi usado para o estudo de correlações em um gás de bósons impenetráveis,⁷⁰ e no estudo de correlações de spins 1/2 repulsivos no modelo de Bose-Hubbard.⁷¹ Estes são modelos integráveis e determinantes de Fredholm são comuns no cálculo de funções de correlação pelo método do ansatz de Bethe algébrico.

Nesta seção vamos reproduzir os resultados recentes da referência Zvonarev et al.,⁵⁰ que encontra uma representação da função de correlação do operador *string* como um determinante de Fredholm de um operador integral. E também vamos mostrar uma generalização que descobrimos para obter outras funções de correlação de operadores não locais.

O operador $O_j(t)$ pode ser escrito, usando $e^{i\pi\rho_i} = 1 - 2\rho_i$ para férmions, como

$$O_j(t) = \prod_{y \in M_{(j,t)}} [1 - 2\rho(y)], \quad (4.10)$$

onde é o conjunto $M_{(j,t)} = \{(i, t), i \leq j\}$. Como estamos trabalhando no limite termodinâmico, o conjunto $M_{(j,t)}$ possui infinitos elementos. Vamos primeiramente discutir o valor esperado do produto

$$\left\langle T \prod_{y \in M} [1 - 2\rho(y)] \right\rangle, \quad (4.11)$$

onde M é um conjunto ordenado com m elementos, $M = \{y_1, \dots, y_m\}$, que será utilizado para calcularmos correlação da *string*. Fazendo a distributiva na equação acima, podemos organizar o produto como:

$$\left\langle T \prod_{y \in M} [1 - 2\rho(y)] \right\rangle = 1 + \sum_{Q=1}^m \sum_{M_Q \subset M} \left\langle T \prod_{y \in M_Q} (-2)\rho(y) \right\rangle, \quad (4.12)$$

onde M_Q é um conjunto contido em M com Q elementos. A soma em Q garante que estamos varrendo todos os termos com produtos de Q operadores densidade $\rho(y_i)$, enquanto

que a soma em M_Q nos garante que todos os conjuntos com Q operadores densidade ou, de outra forma, que todas as possibilidades de produtos com Q operadores densidade diferentes estão incluídos no lado direito da equação. Pelo teorema de Wick enunciado no capítulo 3, podemos identificar^{52,63}

$$\left\langle T \prod_{y \in M_Q} (-2) \rho(y) \right\rangle = \left(\prod_{y \in M_Q} (-2) \right) \sum_{\text{contrações possíveis}} \text{sign}(P) \prod_{\text{todos os pares}} (\text{contração do par}) \quad (4.13)$$

onde $\text{sign}(P)$ é o sinal da permutação que coloca cada um dos dois operadores contraídos lado a lado em cada contração de par.

Como discutido no capítulo 3, equações (3.6), cada contração do par de dois operadores de campo que são conjugados hermitianos podem ser escritos em termos da função de Green. Cada função de Green, que é uma função de dois pontos do espaço tempo, pode ser identificada como o elemento de uma matriz $Q \times Q$ da forma

$$[A_Q]_{a,b} = 2iG(y_a - y_b). \quad (4.14)$$

Pela fórmula de Leibniz para determinantes, identificamos a equação (4.13) como

$$\left\langle T \prod_{y \in M_Q} (-2) \rho(y) \right\rangle = \det(A_Q). \quad (4.15)$$

Pela fórmula de decomposição em colunas para o determinante de uma matriz qualquer $n \times n$, temos

$$\det(A) = \sum_{j=1}^n (-1)^{j+k} A_{jk} \text{Men}(A)_{jk}, \quad (4.16)$$

onde $\text{Men}(A)$ é o elemento matriz dos menores de A e suas entradas $\text{Men}(A)_{jk}$ são definidas como o determinante da matriz $(n-1) \times (n-1)$ obtida eliminando-se a j -ésima linha e a k -ésima coluna de A .⁶⁸ Podemos aumentar o tamanho da matriz A_Q adicionando vetores linha que são base do $\mathbb{R}^m$, $\mathbf{e}_i$, e coluna, $\mathbf{e}_i^T$, nas linhas e colunas i onde faltam pontos do espaço-tempo $y_i \in M$ que não fazem parte do conjunto M_Q . Fazendo isso sucessivamente chegaremos numa matriz $m \times m$

$$A_Q^m = \begin{pmatrix} \vdots & & & & & & \\ & \mathbf{K}_j^Q & & & & & \\ & \vdots & & & & & \\ & & \mathbf{e}_i & & & & \\ & \vdots & & & & & \\ & & \mathbf{e}_{i'} & & & & \\ & \vdots & & & & & \\ & & \mathbf{K}_{j'}^Q & & & & \\ & \vdots & & & & & \end{pmatrix}, \quad (4.17)$$

em que $\mathbf{K}_j^Q = \{2iG(y_j - y_1), \dots, 0, \dots, 0, \dots, 2iG(y_j - y_m)\}$ e os 0 ocupam as posições $i, i', \dots$, índice de $\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_{i'}, \dots$, desse vetor. Essa matriz aumentada tem o mesmo determinante que a matriz original:

$$\det(A_Q) = \det(A_Q^m) \quad (4.18)$$

Voltando à equação (4.12), podemos reescrever como:

$$\left\langle T \prod_{y \in M} [1 - 2\rho(y)] \right\rangle = \det \mathbb{I}^m + \sum_{Q=1}^m \sum_{M_Q \subset M} \det(A_Q^m). \quad (4.19)$$

Uma outra propriedade interessante que pode ser derivada diretamente da equação (4.16) é

$$\det \begin{bmatrix} C_1 \\ \vdots \\ A \\ \vdots \\ C_n \end{bmatrix} + \det \begin{bmatrix} C_1 \\ \vdots \\ B \\ \vdots \\ C_n \end{bmatrix} = \det \begin{bmatrix} C_1 \\ \vdots \\ A+B \\ \vdots \\ C_n \end{bmatrix}, \quad (4.20)$$

assim podemos reescrever (4.19) como

$$\begin{aligned} \left\langle T \prod_{y \in M} [1 - 2\rho(y)] \right\rangle &= \det \begin{bmatrix} \mathbf{e}_1 + \mathbf{K}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{e}_m + \mathbf{K}_m \end{bmatrix} \\ &= \det(\mathbf{I} + \mathbf{K}), \end{aligned} \quad (4.21)$$

com

$$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} 2iG(y_1 - y_1), & \dots, & 2iG(y_1 - y_m) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 2iG(y_m - y_1), & \dots, & 2iG(y_m - y_1) \end{pmatrix}. \quad (4.22)$$

Com esse resultado, podemos deduzir a correlação do operador *string*, $\langle O_x^\dagger(t) O_0(0) \rangle$, em termos de um determinante

$$D(x, t) = \left\langle T \prod_{y \in M} [1 - 2\rho(y)] \prod_{y' \in M'} [1 - 2\rho(y')] \right\rangle \quad (4.23)$$

onde $M = \{y : y = (x + 1 - a, t), a \in \mathbb{N}^*\}$, $M' = \{y' : y' = (1 - a, 0), a \in \mathbb{N}^*\}$, assumindo o limite termodinâmico. Quando escrevermos $D(x, t)$ na forma como está em (4.12), podemos permutar os operadores $\rho(y')$ em cada termo da soma até ficarem lado a lado com um operador $\rho(y)$, onde y e y' definem a linha e coluna das contrações que envolve esses quatro operadores. Isso não altera o sinal da permutação pois $\rho(y')$ é formado por dois operadores fermiônicos. Uma vez que os operadores $\rho(y')$ e $\rho(y)$ estão lado a lado,

podemos pensar que no lugar das contrações de apenas dois operadores de campo em (4.22) teremos a contração de quatro operadores de campo. Assim $\mathbf{K}$ é promovida para uma matriz tal que em cada uma de suas entradas existe uma submatriz 2×2 dada por:

$$[\mathbf{K}]_{a,b} = \begin{pmatrix} 2iG(b-a, 0) & 2iG(b-a-x, -t) \\ 2iG(b-a+x, t) & 2iG(b-a, 0) \end{pmatrix}, \quad a, b \in \mathbb{N}. \quad (4.24)$$

Assim podemos escrever

$$\langle O_x^\dagger(t) O_0(0) \rangle = \det(\mathbf{I} + \mathbf{K}). \quad (4.25)$$

E também construir uma matriz cujo determinante é igual a correlação

$$\begin{aligned} D^+(x, t) &= \langle S_x^-(t) S_0^+(0) \rangle = (-1)^x \langle \psi_x(t) O_x^\dagger(t) O_0(0) \psi_0^\dagger(0) \rangle \\ &= (-1)^x \det(\mathbf{K}^+). \end{aligned} \quad (4.26)$$

Neste caso dois operadores de campo, $\psi_x(t)$ e $\psi_0^\dagger(0)$, são adicionados em cada um dos termos da soma em (4.12). Isso corresponde a criar uma linha e uma coluna a mais na matriz $\mathbf{K}^+$. No ordenamento que assumimos para o conjuntos M' adicionamos o ponto do espaço-tempo $y'_1 = (0, 0)$, do operador $\psi_0^\dagger(0)$, como o primeiro elemento. Como este é um operador de criação, ele será responsável pela criação da primeira coluna de $\mathbf{K}^+$ contraindo com todos os demais operadores de destruição, que corresponde ao índice de linha em (4.14). Por outro lado o índice y_b é devido ao operador de criação do par de operadores de campo envolvidos na contração. Já o ponto do espaço-tempo $y_1 = (x, t)$ devido a $\psi_x(t)$ é o primeiro termo do conjunto M , então devemos fazer a primeira linha de $\mathbf{K}^+$ ser a contração desse operador com todos os demais operadores de criação. A matriz $\mathbf{K}^+$ fica então

$$\begin{pmatrix} 2iG(x, t) & -iG(x, t) & -iG(0, 0) & -iG(x+1, t) & -iG(1, 0) & \dots \\ 2iG(0, 0) & 1 - 2iG(0, 0) & 2iG(-x, -t) & 2iG(1, 0) & 2iG(-x+1, -t) & \dots \\ 2iG(x, t) & 2iG(x, t) & 1 - 2iG(0, 0) & 2iG(x+1, t) & 2iG(+1, 0) & \dots \\ 2iG(-1, 0) & 2iG(-1, 0) & 2iG(-x-1, -t) & 1 - 2iG(0, 0) & 2iG(-x, -t) & \dots \\ 2iG(x-1, t) & 2iG(x-1, t) & 2iG(-1, 0) & 2iG(x, t) & 1 - 2iG(0, 0) & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (4.27)$$

Implementamos numericamente o cálculo do determinante da matriz na equação (4.26). Entretanto, até o momento não obtivemos resultados consistentes com o comportamento da correlação conhecido na literatura.⁴ Podemos usar essa mesma técnica para obter os outros termos das funções de correlação (4.2-4.3). Para isso, basta acrescentarmos linhas e colunas a matriz $\mathbf{K}$ relacionadas as contrações dos operadores de campo que são adicionados além do operador *string* em cada termo. Mas vamos propor também uma outra forma de calcular essas funções de correlação.

Baseado na referência⁵⁰ deduzimos a correlação do operador *string*, equação (4.25), em termos do determinante de Fredholm. A ideia para fazer isso é irmos para o domínio dos momentos, onde a matriz $\mathbf{K}$ infinita com elementos discretos se transforma num operador integral de núcleo contínuo entre $-\pi/2$ e $\pi/2$.

Começamos essa transformação definindo um operador auxiliar $\mathbf{U}$:

$$[\mathbf{U}]_{a,b} = \begin{cases} [\mathbf{K}]_{a+1,b+1}, & (a,b) \in \mathbb{N} \times \mathbb{N} \\ 0, & a \text{ ou } b \in (\mathbb{Z} \times \mathbb{Z}) \setminus (\mathbb{N} \times \mathbb{N}). \end{cases} \quad (4.28)$$

Na forma matricial esse operador é:

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \mathbf{K}_{1,1} & \mathbf{K}_{1,2} & \cdots \\ 0 & \cdots & 0 & \mathbf{K}_{2,1} & \mathbf{K}_{2,2} & \cdots \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\ 0 & \cdots & 0 & & & \end{pmatrix}. \quad (4.29)$$

Pela fórmula (4.16) é imediato que

$$\det(\mathbf{I} + \mathbf{K}) = \det(\mathbf{I} + \mathbf{U}). \quad (4.30)$$

Usando essa relação podemos expressar

$$D(x, t) = \det(\mathbf{I} + \mathbf{U}). \quad (4.31)$$

Nosso objetivo de agora em diante é examinar o operador $\mathbf{U}$ para calcular a função $D(x, t)$. Vamos começar determinando a transformada de Fourier de $(\mathbf{U}f)$, onde f é uma função arbitrária que pode ser expandida em Fourier. Atuando o operador $\mathbf{U}$ numa função f e utilizando a transformada de Fourier para essa função, encontramos

$$\begin{aligned} (\mathbf{U}f)(a) &= \sum_{b=-\infty}^{\infty} [\mathbf{U}]_{a,b} f(b) \\ &= \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dp}{2\pi} \tilde{f}(p) \sum_{b=-\infty}^{\infty} [\mathbf{U}]_{a,b} e^{ipb}. \end{aligned} \quad (4.32)$$

Em seguida usando a transformada discreta para $(\mathbf{U}f)(a)$, obtemos

$$\begin{aligned} \widetilde{(\mathbf{U}f)}(k) &= \sum_{a=-\infty}^{\infty} (\mathbf{U}f)(a) e^{-ika} \\ &= \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dp}{2\pi} \tilde{f}(p) \sum_{a,b=-\infty}^{\infty} [\mathbf{U}]_{a,b} e^{-ika} e^{ipb} \\ &= \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dp}{2\pi} \tilde{f}(p) \tilde{U}(k, p). \end{aligned} \quad (4.33)$$

Considerando a definição (4.28) podemos escrever:

$$\tilde{U}(k, p) = \sum_{a, b=0}^{\infty} [\mathbf{U}]_{a, b} e^{-ika} e^{ipb}. \quad (4.34)$$

Definindo a submatriz $g(b-a) = [\mathbf{U}]_{a, b}$, $a, b \in \mathbb{N}$

$$g(b-a) = \begin{pmatrix} 2iG(b-a, 0) & 2iG(b-a-x, -t) \\ 2iG(b-a+x, t) & 2iG(b-a, 0) \end{pmatrix}, \quad (4.35)$$

sua transformada fica

$$g(b-a) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dq}{2\pi} e^{iq(b-a)} u(q), \quad (4.36)$$

onde

$$u(q) = \begin{pmatrix} 2i\tilde{G}(q, 0) & 2i\tilde{G}(q, -t) e^{-inq} \\ 2i\tilde{G}(q, t) e^{inq} & 2i\tilde{G}(q, 0) \end{pmatrix}, \quad (4.37)$$

Usando a equação (4.9), a transformada de Fourier da função de Green sistema discreto fica

$$\tilde{G}(q, t) = -\theta(t) [1 - n_F(q)] e^{-i\xi_q t} + \theta(-t) n_F(q) e^{-i\xi_q t}, \quad (4.38)$$

$n_F(q)$ é a distribuição de Fermi-Dirac em temperatura zero e $k_F = \pi/2$, que é função degrau $\theta(k_F - |k|)$. Voltando na equação (4.34), com (4.36),

$$\tilde{U}(k, p) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dq}{2\pi} u(q) \sum_{a, b=0}^{\infty} e^{-iq(a-b)} e^{-ika} e^{ipb}. \quad (4.39)$$

As somas em a e b são separáveis,

$$\sum_{a, b=0}^{\infty} e^{-iq(a-b)} e^{-ika} e^{ipb} = \left[\sum_{a=0}^{\infty} e^{-ia(k+q)} \right] \left[\sum_{b=0}^{\infty} e^{ib(p+q)} \right]. \quad (4.40)$$

Cada soma é determinada por

$$\eta(k) = \sum_{m=0}^{\infty} e^{ikm} \quad (4.41)$$

$$= \frac{1}{1 - e^{ik-\epsilon}}, \quad (4.42)$$

com $\epsilon \rightarrow 0^+$. Portanto, a equação (4.39) se torna

$$\tilde{U}(k, p) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dq}{2\pi} u(q) \eta(-k-q) \eta(q+p). \quad (4.43)$$

Mas ainda temos que escrever a matriz $u(q)$. Com o resultado (4.38), podemos escrever essa matriz como:

$$\begin{aligned} u(q) &= \begin{pmatrix} 2in_F(q) & 2in_F(k) e^{i\xi_q t} e^{-inq} \\ -2i[1 - n_F(k)] e^{-i\xi_q t} e^{inq} & 2in_F(k) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -2iz^2(q) & 0 \end{pmatrix} + \theta(k_F - |q|) \begin{pmatrix} 2i & 2iz^{-2}(q) \\ 2iz^2(q) & 2i \end{pmatrix} \\ &= v(q) + w(q), \end{aligned} \quad (4.44)$$

onde definimos

$$z(q) = e^{i \frac{(xq - \xi q t)}{2}}, \quad (4.45)$$

$$v(q) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -2iz^2(q) & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.46)$$

$$w(q) = n_F(k) \begin{pmatrix} 2i & 2iz^{-2}(q) \\ 2iz^2(q) & 2i \end{pmatrix}. \quad (4.47)$$

Usando essas definições, nós podemos escrever

$$\mathbf{U} = \mathbf{V} + \mathbf{W}, \quad (4.48)$$

com

$$\tilde{V}(k, p) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dq}{2\pi} v(q) \eta(-k - q) \eta(q + p), \quad (4.49)$$

$$\tilde{W}(k, p) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dq}{2\pi} w(q) \eta(-k - q) \eta(q + p). \quad (4.50)$$

Com as equações (4.46) e (4.49) nós vemos que

$$\mathbf{V}^2 = 0, \quad (4.51)$$

assim

$$(\mathbf{I} + \mathbf{V})(\mathbf{I} - \mathbf{V}) = \mathbf{I}. \quad (4.52)$$

A matriz matriz $(\mathbf{I} + \mathbf{V})$ é triangular e sua diagonal é a mesma de $\mathbf{I}$. Como resultado, obtemos

$$\det(\mathbf{I} + \mathbf{V}) = 1. \quad (4.53)$$

Usando as relações (4.52) e (4.53) para escrever

$$\det(\mathbf{I} + \mathbf{U}) = \det(\mathbf{I} + \mathbf{V} + \mathbf{W}) \quad (4.54)$$

$$= \det\{\mathbf{I} + \mathbf{V} + (\mathbf{I} + \mathbf{V})(\mathbf{I} - \mathbf{V})\mathbf{W}\} \quad (4.55)$$

$$= \det(\mathbf{I} + \mathbf{V}) \det[\mathbf{I} + (\mathbf{I} - \mathbf{V})\mathbf{W}] \quad (4.56)$$

$$= \det[\mathbf{I} + (\mathbf{I} - \mathbf{V})\mathbf{W}]. \quad (4.57)$$

Assim nós reescrevemos a equação (4.31) como

$$D(x, t) = \det[\mathbf{I} + (\mathbf{I} - \mathbf{V})\mathbf{W}]. \quad (4.58)$$

Vamos voltar para a equação (4.50). A matriz $w(q)$ pode ser decomposta em termos das matrizes

$$\begin{aligned} w(q) &= n_F(k) \begin{pmatrix} 0 & 2iz^{-1}(q) \\ 0 & 2iz(q) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ z(q) & z^{-1}(q) \end{pmatrix} \\ &= a(q) b(q), \end{aligned} \quad (4.59)$$

com

$$a(q) = n_F(k) \begin{pmatrix} 0 & 2iz^{-1}(q) \\ 0 & 2iz(q) \end{pmatrix}, \quad (4.60)$$

$$b(q) = n_F(k) \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ z(q) & z^{-1}(q) \end{pmatrix}. \quad (4.61)$$

Considerando as seguintes definições:

$$\tilde{A}(k, q) = \eta(-k - q) a(q), \quad (4.62)$$

$$\tilde{B}(q, p) = \eta(q + p) b(q), \quad (4.63)$$

temos

$$\tilde{W}(k, p) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dq}{2\pi} \tilde{A}(k, q) \tilde{B}(q, p). \quad (4.64)$$

Isso implica

$$\tilde{W}(k, p) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dq}{2\pi} a(q) b(q) \sum_{a,b} e^{iq(a-b)} e^{-ika} e^{ipb} \quad (4.65)$$

$$= \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dq}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dq'}{2\pi} a(q) b(q') \sum_{a,b} e^{-ika} e^{ipb} e^{iqa} e^{-iq'b} \sum_j e^{-ij(q-q')} \quad (4.66)$$

$$= \sum_{a,b} \sum_j [A]_{a,j} [B]_{j,b} e^{-ika} e^{ipb} \quad (4.67)$$

$$= \sum_{a,b} [AB]_{a,b} e^{-ika} e^{ipb}, \quad (4.68)$$

onde

$$[A]_{a,j} = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dq}{2\pi} e^{iq(a-j)} a(q) \quad (4.69)$$

$$[B]_{j,b} = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dq}{2\pi} e^{iq(j-b)} b(q) \quad (4.70)$$

e obtemos

$$\mathbf{W} = \mathbf{AB}. \quad (4.71)$$

Agora podemos manipular as equações (4.58) para escrevê-la em termos de $\mathbf{A}$ e $\mathbf{B}$:

$$D(\lambda; n, t) = \det[\mathbf{I} + (\mathbf{I} - \mathbf{V}) \mathbf{AB}] \quad (4.72)$$

$$= \det[\mathbf{I} + \mathbf{B}(\mathbf{I} - \mathbf{V}) \mathbf{A}], \quad (4.73)$$

onde usamos a propriedade $\det(\mathbf{I} + \mathbf{M}_1 \mathbf{M}_2) = \det(\mathbf{I} + \mathbf{M}_2 \mathbf{M}_1)$. Isto pode ser verificado fazendo a expansão em cofatores da matriz $(\mathbf{I} + \mathbf{M}_1 \mathbf{M}_2)$, usando a propriedade $\det(\mathbf{M}_1 \mathbf{M}_2) = \det(\mathbf{M}_2 \mathbf{M}_1)$. Sabemos que a única diferença entre $(\mathbf{I} + \mathbf{M}_2 \mathbf{M}_1)$ e $(\mathbf{M}_2 \mathbf{M}_1)$ é nos elementos da diagonal, contudo $[\mathbf{I} + \mathbf{M}_1 \mathbf{M}_2]_{i,i} = [\mathbf{I} + \mathbf{M}_2 \mathbf{M}_1]_{i,i}$ porque $[\mathbf{M}_1 \mathbf{M}_2]_{i,i} = [\mathbf{M}_2 \mathbf{M}_1]_{i,i}$. Assim provamos que $\det(\mathbf{I} + \mathbf{M}_1 \mathbf{M}_2) = \det(\mathbf{I} + \mathbf{M}_2 \mathbf{M}_1)$.

De acordo com as equações (4.46), (4.60), e (4.61) os operadores $(\mathbf{I} - \mathbf{V})$, $\mathbf{A}$, e $\mathbf{B}$ podem ser expressos como:

$$(\mathbf{I} - \mathbf{V}) = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & 0 \\ -\mathbf{V}_{21} & \mathbf{I} \end{pmatrix}, \quad (4.74)$$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{A}_{12} \\ 0 & \mathbf{A}_{22} \end{pmatrix}, \quad (4.75)$$

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \mathbf{B}_{21} & \mathbf{B}_{22} \end{pmatrix}. \quad (4.76)$$

Assim,

$$\mathbf{B}(\mathbf{I} - \mathbf{V})\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{R} \end{pmatrix}, \quad (4.77)$$

onde

$$\mathbf{R} = \mathbf{B}_{21}\mathbf{A}_{12} - \mathbf{B}_{22}\mathbf{V}_{21}\mathbf{A}_{12} + \mathbf{B}_{22}\mathbf{A}_{22}, \quad (4.78)$$

é um operador integral. A expressão final para $D(x, t)$ se torna:

$$D(x, t) = \det[\mathbf{I} + \mathbf{R}], \quad (4.79)$$

com

$$\begin{aligned} \tilde{R}(k, p) = & \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dq}{2\pi} \left\{ \tilde{B}_{21}(k, q) \tilde{A}_{12}(q, p) + \tilde{B}_{22}(k, q) \tilde{A}_{22}(q, p) \right\} \\ & - \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dq}{2\pi} \tilde{B}_{21}(k, q) \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dq'}{2\pi} \tilde{V}_{21}(q, q') \tilde{A}_{12}(q', p). \end{aligned} \quad (4.80)$$

Usando as equações (4.49) e (4.60-4.63) e algumas simplificações deixamos na forma

$$\begin{aligned} \tilde{R}(k, p) = n_F(k) n_F(p) \left\{ \left[2iz(k) z^{-1}(p) + 2iz^{-1}(k) z(p) \right] \eta(k-p) \right. \\ \left. - 4z^{-1}(k) z^{-1}(p) \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dq}{2\pi} z^2(q) \eta(k-q) \eta(q-p) \right\}. \end{aligned} \quad (4.81)$$

considerando a relação $\eta(k-q) \eta(q-p) = \eta(k-p) [\eta(k-q) - \eta(q-p)]$, encontramos

$$\tilde{R}(k, p) = \frac{2\eta(k-p)}{z(k) z(p)} \left\{ - \left[z^2(p) + z^2(p) \right] + 2 \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dq}{2\pi} z^2(q) [\eta(k-q) - \eta(q-p)] \right\},$$

onde usamos as funções $n_F(p)$ e $n_F(k)$ para limitar o intervalo de k e p para $[-\pi/2, \pi/2]$.

Usando as identidades

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dq}{2\pi} z^2(q) \eta(k-q) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dq}{2\pi} \left[\frac{z^2(q)}{1 - e^{i(k-q)}} + \frac{z^2(k)}{1 - e^{-i(k-q)}} \right], \quad (4.82)$$

$$\begin{aligned}\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \eta(k-q) &= \frac{1}{1 - e^{i(k-q)}} \\ &= \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{i \tan\left(\frac{k-q}{2}\right)} \right],\end{aligned}\quad (4.83)$$

podemos escrever então:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dq}{2\pi} z^2(q) [\eta(k-q) - \eta(q-p)] = \frac{1}{2} \left\{ [z^2(p) + z^2(k)] - i[E(k) - E(p)] \right\} \quad (4.84)$$

e encontramos

$$\tilde{R}(k, p) = \frac{-2i\eta(k-p)}{z(k)z(p)} [E(k) - E(p)] \text{ com } \{k, p\} \in [-\pi/2, \pi/2], \quad (4.85)$$

onde

$$E(k) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dq}{2\pi} \frac{z^2(q) - z^2(k)}{\tan\left(\frac{q-k}{2}\right)} \quad (4.86)$$

$$\eta(k-q) = \frac{1}{1 - e^{i(k-q)}}. \quad (4.87)$$

Assim temos um relação para obter $\langle O_x^\dagger(t) O_0(0) \rangle$,

$$\langle O_x^\dagger(t) O_0(0) \rangle = \det[\mathbf{I} + \mathbf{R}], \quad (4.88)$$

onde $z^2(q) = e^{i(xq - \varepsilon_q t)}$.

Este resultado nos diz que a função de correlação o operador *string* pode ser obtida a partir do determinante do operador integral com núcleo dado pela equação (4.85). Fizemos os cálculos numéricos para determinar $\det[\mathbf{I} + \mathbf{R}]$ com o método sugerido em^{72,73} dividindo o intervalo $[-\pi/2, \pi/2]$ pela regra da quadratura Gaussiana e também diagonalizando numericamente $(\mathbf{I} + \mathbf{R})$ para calcular o determinante do operador. Contudo, até o momento os cálculos numéricos estão divergindo e assim não podem representar a correlação do operador O , pois $\langle O_x^\dagger(t) O_0(0) \rangle \leq 1$. Acreditamos que isto esteja acontecendo no cálculo numérico porque o núcleo (4.85) é altamente oscilatório e o método da quadratura Gaussiana não pode ser aplicado diretamente.^{73,74}

5 CONCLUSÃO

Neste trabalho nós estudamos algumas propriedades do operador tensorial de dois spins no modelo XX e fizemos um estudo das funções de correlação de suas componentes. No capítulo 2, utilizamos as simetrias do modelo XX para reduzir o número de funções de correlação a serem calculadas escrevendo algumas delas em função das outras.

No capítulo 3, desenvolvemos as regras diagramáticas que nos permitiram determinar as funções de correlação das componentes locais do tensor, que são aquelas componentes que não dependem do operador *string* da transformação de Jordan-Wigner. De posse dos resultados das funções de correlação, escritas em termos da função de Green de uma partícula numa rede de férmions livres sem spin, o próximo passo foi analisar o comportamento dessas funções nos limites de grandes distâncias, tempos longos e grandes distâncias em cima do cone de luz. Os resultados desses estudos foram colocados na tabela (1).

Como vemos pela tabela, as funções de correlação das componentes locais do tensor de spins no modelo XX que decaem mais devagar são as que invertem dois spins vizinhos em sentidos opostos, isto é, as funções $C^{+-,-+}(x, t)$ e $C^{+-,+-}(x, t)$. Para tempos longos o termo dominante é devido a excitação partícula-buraco do fundo da banda para o topo. Esse termo possui comportamento assintótico da forma $e^{i\pi x \frac{e^{-i2Jt}}{Jt}}$ e é o decaimento mais lento no tempo. Essas excitações tem energia $2J$ (J é a constante de interação de troca) e momento π (separação em k do topo e funda da banda). No regime de grandes distâncias, as flutuações do estado fundamental tem como termo dominante $\frac{1}{x^2}$, podendo ainda haver mais fatores oscilantes. Esse termo vem de excitações partícula-buraco próximas à superfície de Fermi e possuem baixas energias. Para grandes distâncias ao longo do cone de luz, o termo dominante é da forma $\frac{1}{(Jt)^{2/3}}$. Este termo é devido a excitação partícula-buraco próxima a superfície de Fermi, mas com relação de dispersão aproximada até o termo cúbico diferentemente das flutuações de baixas energias para as quais a aproximação linear é suficiente. Essas são as três excitações mais importantes para as funções de correlação locais. Nesta discussão vemos claramente que as excitação de baixa energia não são as únicas importantes no estudo de dinâmica, uma vez que excitações de alta energia devem ser consideradas, como proposto em trabalhos recentes.^{6,74}

Na seção 3.3 vimos uma aplicação direta das funções de correlação de operadores locais para o cálculo da correlação de quantidades conservadas e não conservadas. Nós mostramos operadores que não comutam e comutam com o Hamiltoniano do sistema e então derivamos uma forma para sua função de correlação em termos de funções de correlação das componentes do tensor de spins.

No capítulo 4 focamos no estudo das funções de correlação de operadores não locais. Primeiramente, derivamos uma representação matricial das funções de correlação onde cada componente é uma função de Green. Implementamos numericamente o cálculo do determinante da matriz na equação (4.26). Entretanto, até o momento não obtivemos resultados consistentes com o comportamento da correlação conhecido na literatura. Em seguida vimos que a correlação do operador *string* (não local), que aparece nas funções de correlação das componentes não locais é representada através do determinante de um operador integral, o determinante de Fredholm. O cálculo numérico desse determinante é o nosso próximo passo, apesar de já termos feito algumas tentativas insatisfatórias, que mostram um divergimento acentuado da correlação desse operador, o que não é plausível. Uma alternativa a esse método é o cálculo de equações diferenciais obtidos a partir do determinante de Fredholm.⁷⁴

Como perspectiva, seria muito interessante obter o comportamento assintótico para as correlações de operadores não locais. Com isso preencheríamos a tabela escrita no capítulo 3, que já tem os expoentes das funções de correlação de operadores de spin locais para grandes distâncias, tempos longos, e sobre o cone de luz.

REFERÊNCIAS

- 1 BARDEEN, J.; BRATTAIN, W. H. The transistor, a semi-conductor triode. **Physical Review**, v. 74, n. 2, p. 230–231, 1948.
- 2 FETTER, A. L.; WALECKA, J. D.; KADANOFF, L. P. **Quantum theory of many particle systems**. New York: McGraw-Hill, 1972.
- 3 MAHAN, G. D. **Many-particle physics**. Boston, MA: Springer, 2000.
- 4 GIAMARCHI, T. **Quantum physics in one dimension**. Oxford: Oxford University Press, 2003.
- 5 _____. One-dimensional physics in the 21st century. **Comptes Rendus Physique**, v. 17, n. 3-4, p. 322–331, 2016.
- 6 IMAMBEKOV, A.; SCHMIDT, T. L.; GLAZMAN, L. I. One-dimensional quantum liquids: beyond the Luttinger liquid paradigm. **Reviews of Modern Physics**, v. 84, n. 3, p. 1253–1306, 2012.
- 7 DESHPANDE, V. V. et al. Electron liquids and solids in one dimension. **Nature**, v. 464, n. 7286, p. 209–216, 2010.
- 8 VOIT, J. Charge-spin separation and the spectral properties of Luttinger liquids. **Physical Review B**, v. 47, n. 11, p. 6740–6743, 1993.
- 9 HOHENBERG, P. C. Existence of long-range order in one and two dimensions. **Physical Review**, v. 158, n. 2, p. 383–386, 1967.
- 10 MERMIN, N. D.; WAGNER, H. Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic Heisenberg models. **Physical Review Letters**, v. 17, n. 22, p. 1133–1136, 1966.
- 11 COLEMAN, S. There are no Goldstone bosons in two dimensions. **Communications in Mathematical Physics**, v. 31, n. 4, p. 259–264, 1973.
- 12 BLOCH, I.; DALIBARD, J.; ZWERGER, W. Many-body physics with ultracold gases. **Reviews of Modern Physics**, v. 80, n. 3, p. 885–964, 2008.
- 13 BLOCH, I.; DALIBARD, J.; NASCIMBÈNE, S. Quantum simulations with ultracold quantum gases. **Nature Physics**, v. 8, n. 4, p. 267–276, apr 2012.
- 14 KINOSHITA, T.; WENGER, T.; WEISS, D. S. A quantum Newton’s cradle. **Nature**, v. 440, n. 7086, p. 900–903, 2006.
- 15 DUAN, L.-M.; DEMLER, E.; LUKIN, M. D. Controlling spin exchange interactions of ultracold atoms in optical lattices. **Physical Review Letters**, v. 91, n. 9, p. 90402, 2003.
- 16 MONTHIOUX, M.; KUZNETSOV, V. L. Who should be given the credit for the discovery of carbon nanotubes? **Carbon**, v. 44, n. 9, p. 1621–1623, 2006.

- 17 HU, J.; ODOM, T. W.; LIEBER, C. M. Chemistry and physics in one dimensions: synthesis and properties of nanowires and nanotubes. **Accounts of Chemical Research**, v. 32, n. 5, p. 435–445, 1999.
- 18 CHANG, A. M. Chiral Luttinger liquids at the fractional quantum hall. **Review of Modern Physics**, v. 75, n. 1449, p. 1–119, 2003.
- 19 TOMONAGA, S. Remarks on Bloch's method of sound waves applied to many-fermion problems. **Progress of Theoretical Physics**, v. 5, n. 4, p. 544–569, 1950.
- 20 LUTTINGER, J. M. An exactly soluble model of a many-fermion system. **Journal of Mathematical Physics**, v. 4, n. 9, p. 1154–1162, sep 1963.
- 21 MATTIS, D. C.; LIEB, E. H. Exact solution of a many-fermion system and its associated boson field. **Journal of Mathematical Physics**, v. 6, n. 2, p. 304–312, feb 1965.
- 22 SACHDEV, S. **Compressible phases in one dimension**: Tomonaga-Luttinger liquids. 2016. Disponível em: <http://qpt.physics.harvard.edu/phys268/Lec3_Luttinger_liquids.pdf>. Acesso em: 23 jan. 2017.
- 23 HALDANE, F. D. M. 'Luttinger liquid theory' of one-dimensional quantum fluids. I. properties of the Luttinger model and their extension to the general 1D interacting spinless Fermi gas. **Journal of Physics C**, v. 14, n. 19, p. 2585–2609, 1981.
- 24 _____. Effective harmonic-fluid approach to low-energy properties of one-dimensional quantum fluids. **Physical Review Letters**, v. 47, n. 25, p. 1840–1843, 1981.
- 25 POLKOVNIKOV, A. et al. Nonequilibrium dynamics of closed interacting quantum systems. **Reviews of Modern Physics**, v. 83, n. 3, p. 863–883, aug 2011.
- 26 CHENEAU, M. et al. Light-cone-like spreading of correlations in a quantum many-body system. **Nature**, v. 481, n. 7382, p. 484–487, 2105.
- 27 DE PAULA, A. L. et al. Spinon and bound-state excitation light cones in Heisenberg XXZ chains. **Physical Review B**, v. 95, n. 4, p. 1–9, 2017.
- 28 RIGOL, M. et al. Relaxation in a completely integrable many-body quantum system: an Ab initio study of the dynamics of the highly excited states of 1D lattice hard-core Bosons. **Physical Review Letters**, v. 98, n. 5, p. 050405, 2007.
- 29 TROTZKY, S. et al. Probing the relaxation towards equilibrium in an isolated strongly correlated 1D Bose gas. **Nature Physics**, v. 8, n. 4, p. 325–330, 2011.
- 30 MEIER, F.; LEVY, J.; LOSS, D. 208 Quantum computing with spin cluster qubits. **Physical Review Letters**, v. 90, n. n. 4, p. 047901, 2003.
- 31 JAKSCH, D.; ZOLLER, P. The cold atom Hubbard toolbox. **Annals of Physics**, v. 315, n. 1, p. 52–79, 2005.
- 32 ZOTOS, X.; NAEF, F.; PRELOVSEK, P. Transport and conservation laws. **Physical Review B**, v. 55, n. 17, p. 11029, 1997.

-
- 33 LIEB, E. H.; ROBINSON, D. W. The finite group velocity of quantum spin systems. **Communications in Mathematical Physics**, v. 28, p. 251–257, 1972.
- 34 WHITE, S. R. Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups. **Physical Review B**, v. 48, n. 14, p. 10345–10356, 1993.
- 35 DALEY, A. J. et al. Time-dependent density-matrix renormalization-group using adaptive effective Hilbert spaces. **Journal of Statistical Mechanics**, v. 2004, n. 04, p. P04005, 2004.
- 36 LUO, H. G.; XIANG, T.; WANG, X. Q. Comment on time-dependent density-matrix renormalization group: a systematic method for the study of quantum many-body out-of-equilibrium systems. **Physical Review Letters**, v. 91, n. 4, p. 049701, 2003.
- 37 KNAP, M. et al. Probing real-space and time-resolved correlation functions with many-body ramsey interferometry. **Physical Review Letters**, v. 111, n. n. 14, p. 1–6, 2013.
- 38 BLOCH, I. Ultracold quantum gases in optical lattices. **Nature Physics**, v. 1, n. 1, p. 23–30, 2005.
- 39 MOURIGAL, M. et al. Fractional spinon excitations in the quantum Heisenberg antiferromagnetic chain. **Nature Physics**, v. 9, n. 7, p. 435–441, 2013.
- 40 THIELEMANN, B. et al. Direct observation of magnon fractionalization in the quantum spin ladder. **Physical Review Letters**, v. 102, n. 10, p. 107204, 2009.
- 41 KOHNO, M.; STARYKH, O. A.; BALENTS, L. Spinons and triplons in spatially anisotropic frustrated antiferromagnets. **Nature Physics**, v. 3, n. 11, p. 790–795, 2007.
- 42 BISOGNI, V. et al. Femtosecond dynamics of momentum-dependent magnetic excitations from resonant inelastic X-ray scattering in CaCu₂O₃. **Physical Review Letters**, v. 112, n. 14, p. 147401, 2014.
- 43 KLAUSER, A. et al. Spin-exchange dynamical structure factor of the S=1/2 Heisenberg chain. **Physical Review Letters**, v. 106, n. 15, p. 157205, apr 2011.
- 44 AMENT, L. J. P. et al. Resonant inelastic X-ray scattering studies of elementary excitations. **Reviews of Modern Physics**, v. 83, n. 2, p. 705–767, jun 2011.
- 45 BRINK, J. van den. The theory of indirect resonant inelastic X-ray scattering on magnons. **Europhysics Letters**, v. 80, n. 4, p. 47003, nov 2007.
- 46 PEREIRA, R. G. et al. Dynamical structure factor at small q for the XXZ spin-1/2 chain. **Journal of Statistical Mechanics**, v. 2007, n. 08, p. 08022–08022, 2007.
- 47 PEREIRA, R. G.; WHITE, S. R.; AFFLECK, I. Exact edge singularities and dynamical correlations in spin-1/2 chains. **Physical Review Letters**, v. 100, n. 2, p. 1–4, 2008.
- 48 HIKIHARA, T.; FURUSAKI, A.; LUKYANOV, S. **Dimer correlation amplitudes and dimer excitation gap in spin-1/2 XXZ and Heisenberg chains**. 2017. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/1706.02538>>. Acesso em: 23 jan. 2017.

- 49 KLAUSER, A.; MOSSEL, J.; CAUX, J.-S. Adjacent spin operator dynamical structure factor of the $S = 1/2$ Heisenberg chain. **Journal of Statistical Mechanics**, v. 2012, n. 03, p. 03012, 2012.
- 50 ZVONAREV, M. B.; CHEIANOV, V. V.; GIAMARCHI, T. The time-dependent correlation function of the Jordan-Wigner operator as a Fredholm determinant. **Journal of Statistical Mechanics**, v. 2009, n. 07, p. 07035, 2009.
- 51 FAZEKAS, P. **Lecture notes on electron correlation and magnetism**. New York: World Scientific, 1999. (Series in modern condensed matter physics).
- 52 LIEB, E.; SCHULTZ, T.; MATTIS, D. Two soluble models of an antiferromagnetic chain. **Annals of Physics**, v. 466, p. 407–466, 1961.
- 53 JORDAN, P.; WIGNER, E. ber das Paulische quivalenzverbot. **Zeitschrift fur Physik**, v. 47, n. 9-10, p. 631–651, sep 1928.
- 54 AFFLECK, I. **Field theory methods and quantum critical phenomena**. fields, strings and critical phenomena. Disponível em: <<http://www-thphys.physics.ox.ac.uk/people/ThomasVeness/journalclub/sources/affleckFields.pdf>>. Acesso em: 23 jan. 2017.
- 55 MILA, F. **Closing in on a magnetic analog of liquid crystals nuclear magnetic resonance measurements strengthen the case that spins in a copper oxide exhibit nematic order similar to that found in liquid crystals**. Disponível em: <<https://physics.aps.org/articles/v10/64>>. Acesso em: 23 jan. 2017.
- 56 TONG, D. **Quantum field theory**. Disponível em: <<http://www.damtp.cam.ac.uk/user/tong/qft.html>>. Acesso em: 23 jan. 2017.
- 57 BIALYNICKI-BIRULA, I. Local and nonlocal observables in quantum optics. **New Journal of Physics**, v. 16,n. 11, p. 113056, 2014.
- 58 ZHENG, D.; ZHANG, G. M.; WU, C. Particle-hole symmetry and interaction effects in the Kane-Mele-Hubbard model. **Physical Review B**, v. 84, n. 20, p. 1–9, 2011.
- 59 ESSLER, F. H. L. et al. **The one-dimensional Hubbard model**. Cambridge: Cambridge University Press, 2005.
- 60 MAHAN, G. D. **Many-particle physics**. Boston, MA: Springer, 1990. (Physics of solids and liquids).
- 61 ALTLAND, A.; SIMONS, B. D. **Condensed matter field theory**. Cambridge: Cambridge University Press, 2012.
- 62 ABRIKOSOV, A. A. et al. **Methods of quantum field theory in statistical physics**. New York: Dover Publications, 2012. (Dover books on physics).
- 63 GIULIANI, G.; VIGNALE, G. **Quantum theory of the electron liquid**. Cambridge: Cambridge University Press, 2005. (Masters series in physics and astronomy).
- 64 MIERZEJEWSKI, M.; PRELOVEK, P.; PROSEN, T. Identifying local and quasilocal conserved quantities in integrable systems. **Physical Review Letters**, v. 114, n. 14, p. 1–5, 2015.

- 65 KARRASCH, C.; MOORE, J. E.; HEIDRICH-MEISNER, F. Real-time and real-space spin and energy dynamics in one-dimensional spin- $1/2$ systems induced by local quantum quenches at finite temperatures. **Physical Review B**, v. 89, n. 7, p. 075139, 2014.
- 66 ABRAMOWITZ, M.; STEGUN, I.; MILLER, D. **Handbook of mathematical functions with formulas, graphs and mathematical tables**. New York: Dover Publications, 1965. 239 p.
- 67 RIESZ, F.; SZOKEFALVI-NAGY, B. **Functional analysis**. New York: Dover Publications, 1956.
- 68 BARATA, J. C. A. **Notas de aula**. Disponível em: <<http://denebola.if.usp.br>>. Acesso em: 25 jan. 2016.
- 69 COLOMO, F. et al. Correlators in the Heisenberg XXO chain as Fredholm determinants. **Physics Letters A**, v. 169, n. 4, p. 243–247, 1992.
- 70 ITS, A. R.; IZERGIN, A. G.; KOREPIN, V. E. Long-distance asymptotics of temperature correlators of the impenetrable Bose gas. **Communications in Mathematical Physics**, v. 130, n. 3, p. 471–488, 1990.
- 71 ZVONAREV, M. B.; CHEIANOV, V. V.; GIAMARCHI, T. Dynamical properties of the one-dimensional spin- $1/2$ bose-hubbard model near a mott-insulator to ferromagnetic-liquid transition. **Physical Review Letters**, v. 103, n. 11, p. 1–4, 2009.
- 72 BORNEMANN, F. **On the numerical evaluation of fredholm determinants**. 2008. p. 449–465, Disponível em: <<https://arxiv.org/pdf/0804.2543.pdf>>. Acesso em 23 jan. 2016.
- 73 HUYBRECHS, D.; OLVER, S. Highly oscillatory quadrature. **Highly Oscillatory Problems**, p. 25, 2009. Disponível em: <<http://www.sam.math.ethz.ch/~hiptmair/Seminars/OSCINT/HUO08.pdf>>. Acesso em 23 jan. 2016.
- 74 PRICE, T.; KOVRIZHIN, D. L.; LAMACRAFT, A. **Nonlinear Luttinger liquid**: exact result for the Green function in terms of the fourth Painlevé transcendent. p. 1–13, 2017. Disponível em: <<https://arxiv.org/pdf/1606.08702.pdf>>. Acesso em: 10 mar. 2017.
- 75 FEYNMAN, R. P. The theory of positrons. **Physical Review**, v. 76, n. 6, p. 749–759, 1949.
- 76 SAKURAI, J. J.; NAPOLITANO, J. **Modern quantum mechanics**. New York: Addison-Wesley, 2011.
- 77 MARTIN, P. C.; SCHWINGER, J. Theory of many-particle systems. I. **Physical Review**, v. 115, n. 6, p. 1342–1373, 1959.
- 78 KLEIN, A.; PRANGE, R. Perturbation theory for an infinite medium of fermions. **Physical Review**, v. 112, n. 3, p. 994–1007, nov 1958.

Apêndices

APÊNDICE A – FUNÇÃO DE GREEN DE UM FÉRMION LIVRE SEM SPIN EM 1D

Neste apêndice vamos discutir a função de Green de uma partícula sem spin numa rede discreta de sítios unidimensional em temperatura zero. Este propagador aparece toda vez que usamos o teorema de Wick para escrever a média de operadores de campo no estado fundamental desse sistema, portanto é importante para o cálculo das funções de correlação das componentes dos operadores tensoriais de spin no modelo XX .

A função de Green de uma partícula livre sem spin em temperatura zero é definida da seguinte forma:

$$G(x - x', t - t') = -i \langle gs | T \psi(x, t) \psi^\dagger(x', t') | gs \rangle, \quad (\text{A.1})$$

usando a definição do operador de ordenamento temporal em (D.4) temos:

$$\begin{aligned} G(x - x', t - t') &= -i\theta(t - t') \langle gs | \psi(x, t) \psi^\dagger(x', t') | gs \rangle \\ &+ i\theta(t' - t) \langle gs | \psi^\dagger(x', t') \psi(x, t) | gs \rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

onde o termo com $\theta(t - t')$ representa a propagação de uma partícula, enquanto o termo com $\theta(t' - t)$ representa a propagação de um buraco, ou pode ser interpretado como a propagação de uma partícula para o passado.⁷⁵

Supondo que o sistema de férmions livres seja formado por N sítios discretos, o Hamiltoniano do modelo XX no domínio dos momentos dos férmions é (2.7)

$$H = \sum_k \xi_k c_k^\dagger c_k, \quad (\text{A.3})$$

onde a relação de dispersão medida a partir da superfície de Fermi é $\xi_k = \varepsilon_k - \varepsilon_{k_F}$ com $\varepsilon_k = -J \cos(k)$. A transformada do operador de destruição é

$$\psi_x = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k c_k e^{ikx}. \quad (\text{A.4})$$

Esses operadores evoluem na representação de Heisenberg da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \psi_x(t) &= e^{iHt} \psi_x e^{-iHt} \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{iHt} c_k e^{-iHt} e^{ikx} \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k c_k(t) e^{ikx}. \end{aligned}$$

Uma vez que $\left(\frac{\partial c_k}{\partial t}\right)_H = 0$, $c_k(t)$ obedece a equação de movimento de Heisenberg

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} c_k(t) &= -i[c_k(t), H] \\ &= -i\xi_k c_k(t), \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

onde o último resultado é obtido observando que $c_k(t)H$ atuado em um auto-estado de H é igual a sua energia vezes c_k agindo no auto-estado, então subtraindo Hc_k restaria apenas ξ_k com um sinal positivo vezes c_k agindo no auto-estado. Este resultado pode ser generalizado para qualquer estado (basta escrevê-lo em função dos auto-estados de H) ou poderíamos obter da álgebra dos operadores. Com isso ficamos com:

$$c_k(t) = c_k e^{-i\xi_k t}. \quad (\text{A.6})$$

Portanto,

$$\psi_x(t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k c_k e^{i(kx - \xi_k t)}. \quad (\text{A.7})$$

e podemos escrever

$$G(x - x', t - t') = -i\theta(t - t') \frac{1}{N} \sum_{k, k'} \langle c_k c_{k'}^\dagger \rangle e^{i(kx - \xi_k t)} e^{-i(k'x' - \xi_{k'} t')} \quad (\text{A.8})$$

$$+ i\theta(t' - t) \frac{1}{N} \sum_{k, k'} \langle c_{k'}^\dagger c_k \rangle e^{-i(k'x' - \xi_{k'} t')} e^{i(kx - \xi_k t)}. \quad (\text{A.9})$$

Relembrando a definição do estado fundamental para o sistema de férmions livres

$$|gs\rangle = \prod_{|k| \leq k_F} c_k^\dagger |0\rangle, \quad (\text{A.10})$$

o valor médio $\langle c_k c_{k'}^\dagger \rangle$ e $\langle c_{k'}^\dagger c_k \rangle$ pode ser calculada diretamente usando a álgebra dos operadores. Para $\langle c_k c_{k'}^\dagger \rangle$ ser não nula é necessário que $|k| < |k_F|$ para $c_k |gs\rangle \neq 0$ e k e k' devem ser iguais, caso contrário $c_k |gs\rangle$ e $c_{k'} |gs\rangle$ seriam ortogonais. Também é conhecido da álgebra dos operadores fermiônicos que $c_k c_{k'}^\dagger = \delta_{kk'} - c_{k'}^\dagger c_k$, assim obtemos:

$$\langle c_k c_{k'}^\dagger \rangle = \delta_{kk'} \theta(|k| - |k_F|) \quad (\text{A.11})$$

$$\langle c_{k'}^\dagger c_k \rangle = \delta_{kk'} \theta(|k_F| - |k|). \quad (\text{A.12})$$

Redefinindo $x - x' \rightarrow x$ e $t - t' \rightarrow t$, e fazendo o limite termodinâmico encontramos

$$G(j, t) = -i\theta(t) \frac{1}{2\pi} \int dk \theta(|k| - |k_F|) e^{i(kj - \xi_k t)} \quad (\text{A.13})$$

$$+ i\theta(-t) \frac{1}{2\pi} \int dk \theta(|k_F| - |k|) e^{i(kj - \xi_k t)}. \quad (\text{A.14})$$

podendo ser reescrita da seguinte forma:

$$G(x, t) = G_p(x, t) + G_h(x, t), \quad (\text{A.15})$$

onde

$$G_h(x, t) = i\theta(-t) \frac{1}{2\pi} \int_{-k_F}^{k_F} dk e^{i(kx - \xi_k t)}, \quad (\text{A.16})$$

é o propagador de um buraco, e

$$\begin{aligned} G_p(x, t; k_F) &= -i\theta(t) \frac{1}{2\pi} \left\{ \int_{-\pi}^{-k_F} dk e^{i(kj - \xi_k t)} + \int_{k_F}^{\pi} dk e^{i(kj - \xi_k t)} \right\} \\ &= -(-1)^x G_h(x, -t; \pi - k_F) \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

é o propagador de uma partícula. Perceba que podemos escrever o propagador de uma partícula em função do propagador de um buraco, e todas as análises feitas podem ser aplicadas para as dois propagadores.

Considerando tempos negativos e positivos ainda podemos escrever $G(x, t)$ da seguinte forma:

$$G(x, t) = \begin{cases} G_p(x, t) & \text{se } t > 0, \\ G_h(x, t) & \text{se } t < 0. \end{cases} \quad (\text{A.18})$$

E no caso em que $k_F = \pi/2$ temos:

$$G_h(x, t) = \frac{i\theta(-t)}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} dk e^{i\{kx - \varepsilon_k t\}}, \quad (\text{A.19})$$

de forma parecida,

$$G_p(x, t) = -(-1)^x \frac{i\theta(t)}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} dk e^{i\{kx + \varepsilon_k t\}}. \quad (\text{A.20})$$

Este último resultado pode ser obtido de forma geral para qualquer k_F da seguinte forma:

$$G_p(j, t) = -i\theta(t) \frac{1}{2\pi} \left\{ \int_{-\pi}^{-k_F} dk e^{i(kj - \xi_k t)} + \int_{k_F}^{\pi} dk e^{i(kj - \xi_k t)} \right\}, \quad (\text{A.21})$$

então fazendo uma mudança de variável $k \rightarrow \pi + k$ no primeiro termo e $k \rightarrow -\pi + k$ no segundo termo, obtemos:

$$G_p(j, t) = -i\theta(t) \frac{e^{i\varepsilon_{k_F} t}}{2\pi} \left\{ e^{-i\pi j} \int_0^{\pi - k_F} dk e^{i(kj + \varepsilon_k t)} + e^{i\pi j} \int_{-(\pi - k_F)}^0 dk e^{i(kj + \varepsilon_k t)} \right\} \quad (\text{A.22})$$

$$= -i\theta(t) (-1)^j \frac{e^{-i\varepsilon_{(\pi - k_F)} t}}{2\pi} \int_{-(\pi - k_F)}^{(\pi - k_F)} dk e^{i(kj + \varepsilon_k t)}. \quad (\text{A.23})$$

Portanto, encontramos que $G_p(j, t, k_F) = -(-1)^j G_h(j, -t, \pi - k_F)$ como escrito em (A.17). Por esta razão será analisado apenas $G_h(x, t)$, e $G_p(x, t)$ é obtido diretamente.

Com essas equações (A.19 e A.20) vemos ainda que é possível nos fixarmos na análise da seguinte integral:

$$I(x, |t|) \doteq \frac{i}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} dk e^{i\{kx + \varepsilon_k |t|\}}, \quad (\text{A.24})$$

pois

$$G_h(x, t) = \theta(-t)I(x, |t|); \quad (\text{A.25})$$

$$G_p(x, t) = (-1)^{x+1}\theta(t)I(x, |t|). \quad (\text{A.26})$$

Agora vamos analisar o comportamento para longos tempos, grandes distâncias, e grandes distâncias ao longo do cone de luz. Para obter uma aproximação para a função de Green nesses limites vamos usar a mesma ideia de minimizar ação em integrais de caminho para recuperar o limite clássico na mecânica quântica quando $\hbar \rightarrow 0$.⁷⁶ Consiste em acharmos os pontos estacionários da integral, que são os pontos que extremizam a fase na exponencial. Para $Jt \gg x$ igualando a derivada do expoente da integral (A.24) a zero nos fornece os pontos em que as fases se somam (extremo) e portanto nos informa quais pontos tem maior contribuição para a função de Green. Esses pontos também são chamados de pontos de sela. Para esse limite,

$$\frac{d}{dk}(kx - J \cos(k)t) = 0 \quad (\text{A.27})$$

assim,

$$k = \arcsin(0) = 0 \text{ ou } \pi. \quad (\text{A.28})$$

O ponto de sela em $k = 0$ é o único que tem contribuições para a função de Green de um buraco. As contribuições para $k = \pi$ são importantes para a função de Green de uma partícula, mas poupamos o trabalho de analisar em $k = \pi$ escrevendo $G_p(x, t)$ em função de $G_h(x, t)$. Em poucas palavras, no limite de tempos longos o ponto de sela no fundo da banda é o responsável para a propagação de um buraco enquanto que o ponto de sela no topo da banda é responsável pela propagação de uma partícula.

Somente as excitações (partículas ou buracos) com momento bem próximos de $k = \pi$ (para partícula) ou $k = 0$ (para o buraco) serão responsáveis para a determinação da função de Green.

Uma vez encontrado o ponto de sela que dá a maior contribuição para a integral que representa a função de Green, uma forma de calcular essa integral é expandindo a relação de dispersão no fundo da banda até o primeiro termo não nulo. Lembrando que analisaremos somente o ponto $k = 0$. Para a propagação de uma partícula basta considerar (A.17). Na figura (14) esquematizamos a aproximação que faremos.

A expansão da relação de dispersão nos diz que o primeiro termo dependente de k é quadrático:

$$\varepsilon_k \approx -J + J \frac{k^2}{2}. \quad (\text{A.29})$$

uma vez que o termo linear não aparece pois a velocidade de grupo $\left. \frac{d\varepsilon_k}{dk} \right|_{k=0} = 0$. Com essa

Figura 14 – Excitação de buraco no fundo da banda com aproximação quadrática.

Fonte: Elaborada pelo autor

aproximação para o fundo da banda podemos escrever $I(x, t)$ da seguinte forma:

$$I(x, t) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} dk e^{i\{kx - Jt + Jt \frac{k^2}{2}\}} \quad (\text{A.30})$$

Veja que consideramos $t > 0$, para $t < 0$ temos $|t| = -t$ e podemos relacionar $I(x, -t) = -I^*(x, t)$,

$$\begin{aligned} I^*(x, t) &= \frac{-i}{2\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} dk e^{-i\{kx - J \cos(k)t\}} \\ &= \frac{-i}{2\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} dk e^{i\{k(-x) + J \cos(k)t\}} \\ &= -I(x, -t). \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

Onde usamos a propriedade de invariância espacial dessa integral, que também se estende a função de Green. Esses últimos resultados são válidos para qualquer x e t .

Voltando para o regime de tempos longos, adicionando um fator $e^{-\eta k^2}$ com $\eta \rightarrow 0^+$ na integral $I(x, t)$ (A.30) ficamos com

$$I(x, t) = \frac{i}{2\pi} e^{-iJt} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{i\{kx + \frac{1}{2}(Jt + i\eta)k^2\}}. \quad (\text{A.32})$$

Esta é uma integral Gaussiana,

$$I(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{-iJt}}{\sqrt{Jt}} e^{-i(\frac{x^2}{2Jt} - \frac{3\pi}{4})}. \quad (\text{A.33})$$

Este resultado nos mostra que $G_h(x, t)$ ou $G_p(x, t)$ decai com $t^{-\frac{1}{2}}$, que é o mesmo comportamento para evolução temporal de uma partícula livre localizada na origem em $t = 0$,

exceto por um termo que oscila com frequência J , que é a energia da excitação envolvida. Esse comportamento também é encontrado em sistemas que apresentam difusão.

Agora vamos focar no caso em que $x \gg Jt$. Usando a equação (A.27) vemos que neste regime não existe um ponto de sela da integral (A.24). Portanto devemos esperar que as excitações presentes na evolução da função de Green devem estar próximas aos pontos de Fermi ($k = \pi/2$ ou $k = -\pi/2$), pois possuem pequenas energias. Para esses pontos o primeiro termo não nulo na relação de dispersão é de primeira ordem,

$$\varepsilon_k \approx v(k - \frac{\pi}{2}), \text{ para } k = \frac{\pi}{2}; \quad (\text{A.34})$$

$$\varepsilon_k \approx -v(k + \frac{\pi}{2}), \text{ para } k = -\frac{\pi}{2}. \quad (\text{A.35})$$

onde $v = J$ é a velocidade associada as excitações de baixa energia. Por ter uma velocidade bem definida a propagação dessas excitações é balística. Na figura (15) esquematizamos os tipos de excitações envolvidas no regime de grandes distâncias.

Figura 15 – Excitação de buraco próxima a superfície de fermi com aproximação linear. A criação de buraco próximo a também é importante.

Fonte: Elaborada pelo autor

Da mesma forma como no caso de tempos longos, vamos analisar somente as excitações devido a buracos. As excitações devido a partículas podem ser analisadas via (A.17). Neste caso, como as excitações são de baixa energia, quando forem devido a partículas são criadas acima da superfície de Fermi, enquanto que excitações tipo buraco são criadas abaixo da superfície de Fermi.

A função de Green pode ser reescrita da seguinte forma

$$I(x, t) = \frac{i}{2\pi} \left\{ \int_{-\frac{\pi}{2}}^0 dk e^{i(kx + \varepsilon_k t)} + \int_0^{\frac{\pi}{2}} dk e^{i(kx + \varepsilon_k t)} \right\}, \quad (\text{A.36})$$

fazendo uma mudança de variável $p = k + \pi/2$ no primeiro termo e $p = k - \pi/2$ no segundo

e então usando a expansão da relação de dispersão, encontramos

$$I(x, t) = \frac{i}{2\pi} \left\{ e^{-ix\frac{\pi}{2}} \int_0^{\frac{\pi}{2}} dp e^{ip(x-Jt)} + e^{ix\frac{\pi}{2}} \int_{-\frac{\pi}{2}}^0 dp e^{ip(x+Jt)} \right\}. \quad (\text{A.37})$$

incluindo um fator $e^{-p\eta}$ no integrando do primeiro termo e $e^{p\eta}$ no segundo, com $\eta \rightarrow 0^+$; então fazendo o limite de integração indo a infinito, encontramos:

$$I(x, t) = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{e^{i\frac{x\pi}{2}}}{x+Jt} - \frac{e^{-i\frac{x\pi}{2}}}{x-Jt} \right) \quad (\text{A.38})$$

$$= \frac{1}{\pi} \frac{1}{x^2 - (Jt)^2} \left\{ -Jt \cos\left(x\frac{\pi}{2}\right) + ix \sin\left(x\frac{\pi}{2}\right) \right\} \quad (\text{A.39})$$

O resultado acima nos diz que no limite $x \gg Jt$ a parte real da função de Green decai com x^{-2} e a parte imaginária decai com x^{-1} , e oscila com frequência $\pi/2$.

Agora vamos analisar o caso em que $x = Jt \gg 1$. Usando a equação (A.28) vemos que o ponto de sela para esse regime é:

$$k = \arcsin(-1) = -\frac{\pi}{2}. \quad (\text{A.40})$$

Fazendo uma mudança de variável $k = -(\frac{\pi}{2} + p)$ em (A.24), ficamos com:

$$I(Jt, t) = \frac{i}{2\pi} e^{-i\frac{\pi}{2}Jt} \int_{-\pi}^0 dp e^{i\{-p+\sin(p)\}Jt}, \quad (\text{A.41})$$

pela equação (A.40) vemos que a contribuição para a integral acima deve vir das proximidades de $p = 0$, de forma que podemos expandir a função $\sin(p)$ em torno de $p = 0$,

$$\sin(p) \simeq p - \frac{p^3}{6}. \quad (\text{A.42})$$

Neste caso as excitações envolvidas são as próximas a $k = -\pi/2$, mas com uma relação de dispersão cúbica nada convencional, como mostrado na figura abaixo.

A integral envolvida na função de Green fica:

$$I(Jt, t) = \frac{i}{2\pi} e^{-i\frac{\pi}{2}Jt} \int_{-\infty}^0 dp e^{-iJt\frac{p^3}{6}}. \quad (\text{A.43})$$

Essa integral pode ser feita com sucessivas mudanças de variáveis e indo para o plano complexo. Primeiro, fazemos $a = -\frac{iJt}{6}$, então consideremos uma variável $z = -\sqrt[3]{ap}$, de forma que

$$I(Jt, t) = \frac{i}{2\pi} e^{-i\frac{\pi}{2}Jt} a^{-1/3} \int_0^{\infty e^{i\frac{\pi}{6}}} dz e^{-z^3}, \quad (\text{A.44})$$

Figura 16 – Excitação de buraco próxima a superfície de Fermi para o cone de luz. A relação de dispersão é aproximada até o termo cúbico.

Fonte: Elaborada pelo autor

que é uma integral numa reta no plano complexo com ângulo $\frac{\pi}{6}$ da origem ao infinito. Essa integral pode ser mapeada numa integral na reta real considerando o teorema de Cauchy (a função integrando é analítica em todo o plano). Então podemos escrever:

$$\int_0^{\infty e^{i\frac{\pi}{6}}} dz e^{-z^3} = \int_0^{\infty} du e^{-u^3}. \quad (\text{A.45})$$

E identificar:

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} du e^{-u^3} &= \frac{1}{3} \int_0^{\infty} dx x^{-2/3} e^{-x} \\ &= \frac{\Gamma\left(\frac{1}{3}\right)}{3} \end{aligned} \quad (\text{A.46})$$

onde $\Gamma\left(\frac{1}{3}\right)$ é a função Gamma de $\frac{1}{3}$.

Assim a integral para o limite assintótico em cima do cone de luz com $x = Jt \gg 0$ fica:

$$I(Jt, t) = A \frac{e^{-i\frac{\pi}{2}Jt}}{(Jt)^{1/3}}, \quad (\text{A.47})$$

onde definimos $A = \frac{e^{i\frac{2\pi}{3}}}{6^{2/3}\pi} \Gamma\left(\frac{1}{3}\right)$. Este resultado nos diz que nesse limite no cone de luz a função de Green deve oscilar com frequência $\pi/2$ e decair com $(Jt)^{-1/3}$.

APÊNDICE B – CONTRAÇÕES DE WICK

Neste apêndice vamos discutir contrações de dois operadores de campo. Este tipo de contração surge quando usamos o teorema de Wick para o cálculo das funções de correlação. Essas funções quando escritas em termos dos férmions livres sempre envolvem médias no estado fundamental de quatro ou mais operadores de campo, então usando o teorema de Wick podemos escrevê-las em termos das contrações de apenas dois operadores de campo, um de criação e outro de destruição. Como vimos no capítulo 3 essas contrações podem ser escritas em termos das funções de Green, mas ainda temos que discutir os casos dessas funções de Green a tempo nulo. Aqui vamos nos concentrar apenas no propagador de uma partícula de um férmion livre sem spin numa rede unidimensional discreta.

Os termos que envolvem a contração de $\psi_i^\dagger(t)$ e $\psi_i(t)$:

$$\begin{aligned} \overline{\psi_j^\dagger(t)\psi_j(t)} &= \langle \psi_0 | \overline{\psi_j^\dagger(t)\psi_j(t)} | \psi_0 \rangle = \lim_{t' \rightarrow t^+} \langle \psi_0 | T[\psi_j^\dagger(t')\psi_j(t)] | \psi_0 \rangle \\ &= \langle \psi_0 | \psi_j^\dagger(t)\psi_j(t) | \psi_0 \rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

Mas,

$$\begin{aligned} \langle \psi_0 | \psi_j^\dagger(t)\psi_j(t) | \psi_0 \rangle &= \langle \psi_0 | n_j(t) | \psi_0 \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{k,k'} e^{-i\{j(k-k') - (\xi_k - \xi_{k'})t\}} \langle \psi_0 | c_k^\dagger c_{k'} | \psi_0 \rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Como sabemos,

$$\langle \psi_0 | c_k^\dagger(t)c_{k'}(t) | \psi_0 \rangle = \delta_{kk'}\theta(k_F - k)\theta(k_F + k). \quad (\text{B.3})$$

Assim, no limite termodinâmico, temos

$$\langle \psi_0 | \psi_j^\dagger(t)\psi_j(t) | \psi_0 \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-k_F}^{k_F} dk. \quad (\text{B.4})$$

Portanto:

$$\overline{\psi_j^\dagger(t)\psi_j(t)} = \frac{k_F}{\pi}. \quad (\text{B.5})$$

E podemos então definir

$$\begin{aligned} G(0) &= i\overline{\psi_j^\dagger(t)\psi_j(t)} \\ &= i\frac{k_F}{\pi}, \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

apesar de não ser necessário porque podemos simplesmente dizer o valor da contração dos operadores de campo nos mesmos pontos do espaço-tempo sem ter que escrever a função de Green.

Os termos de densidade média da energia do estado fundamental são da forma

$$\begin{aligned}\overline{\psi_j^\dagger(t)\psi_{j+1}(t)} &= \langle \psi_0 | \overline{\psi_j^\dagger(t)\psi_{j+1}(t)} | \psi_0 \rangle \\ &= \lim_{t' \rightarrow t^+} \langle \psi_0 | T[\psi_j^\dagger(t')\psi_{j+1}(t)] | \psi_0 \rangle\end{aligned}\quad (\text{B.7})$$

$$= \lim_{t' \rightarrow t^+} \langle \psi_0 | \psi_j^\dagger(t')\psi_{j+1}(t) | \psi_0 \rangle. \quad (\text{B.8})$$

Mas

$$\begin{aligned}\lim_{t' \rightarrow t^+} \langle \psi_0 | \psi_j^\dagger(t')\psi_{j+1}(t) | \psi_0 \rangle &= \lim_{t' \rightarrow t^+} \frac{1}{N} \sum_{k,k'} e^{-i\{jk-(j+1)k'-\xi_k t' + \xi_{k'} t\}} \langle \psi_0 | c_k^\dagger c_{k'} | \psi_0 \rangle \\ &= \lim_{t' \rightarrow t^+} \frac{1}{N} \sum_{|k| < k_F} e^{-i\{-k-\xi_k(t'-t)\}}\end{aligned}\quad (\text{B.9})$$

E no limite termodinâmico ficamos com:

$$\overline{\psi_j^\dagger(t)\psi_{j+1}(t)} = \frac{1}{2\pi} \int_{-k_F}^{k_F} e^{ik} dk = \frac{\sin(k_F)}{\pi} \quad (\text{B.10})$$

Esses termos são proporcionais a densidade média de energia por serem a média dos termos de *hopping* do Hamiltoniano do modelo XX no estado fundamental. Como vimos no capítulo 2, a média da energia no estado fundamental é dada por:

$$\langle H_{xx} \rangle = \frac{-J}{2\pi} \int_{-k_F}^{k_F} dk \cos(k) = -J \frac{\sin(k_F)}{\pi}. \quad (\text{B.11})$$

Cada termo de *hopping* tem mesmo resultado em média, somando os dois encontramos a energia média. Podemos também definir a função de Green

$$\begin{aligned}G(1, 0) &= i \overline{\psi_{j+1}^\dagger(t)\psi_j(t)} \\ &= i \frac{\sin(k_F)}{\pi}.\end{aligned}\quad (\text{B.12})$$

Em geral definimos a função de Green de uma partícula no modelo XX em tempos iguais como:

$$G(x, 0) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} G(x, -\eta) \quad (\text{B.13})$$

$$= i \frac{\sin(xk_F)}{x\pi}. \quad (\text{B.14})$$

De acordo com os pontos do espaço-tempo de cada operador envolvido nas contrações para tempos diferentes a função de Green é interpretada como o propagador de partícula ou buraco:

$$\overline{\psi_{j+x}(t)\psi_j^\dagger(0)} = iG(x, t). \quad (\text{B.15})$$

Essas contrações que aparecem são escritas em termos das funções de Green de uma partícula, que foi discutida no apêndice A.

APÊNDICE C – FUNÇÃO DE CORRELAÇÃO $C^{zz,zz}(x, t)$

Neste apêndice vamos tratar da função de correlação $C^{zz,zz}(x, t)$. Mostraremos os diagramas que aparecem nessa função e depois usaremos as regras colocadas no capítulo 3 para ler esses diagramas.

Em termos da representação diagramática essa função de correlação fica:

$$\begin{aligned}
 C^{zz,zz}(x, t) = & \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} \\
 & + \text{Diagram 3} + \text{Diagram 4} \\
 & + \text{Diagram 5} + \text{Diagram 6} \\
 & + \text{Diagram 7} + \text{Diagram 8}
 \end{aligned}
 \tag{C.1}$$

Essa função de correlação é lida através dos diagramas e escrita em termos das funções de Green como:

$$\begin{aligned}
 S^{zzzz}(x, t) = & \left(\frac{1}{\pi}\right)^4 + 2\left(\frac{1}{\pi}\right)^2 G(x, t)G(-x, -t) \\
 & + \left(\frac{1}{\pi}\right)^2 \left[G(x-1, t)G(-x-1, -t) + G(x+1, t)G(1-x, -t) \right] \\
 & + G(x, t)^2 G(-x, -t)^2 + G(x+1, t)G(-x-1, -t)G(x-1, t)G(1-x, -t) \\
 & - G(x, t)^2 G(1-x, -t)G(-x-1, -t) - G(x+1, t)G(x-1, t)G(-x, -t)^2,
 \end{aligned}
 \tag{C.2}$$

onde as contribuições que envolvem o produto de duas funções de Green foram lidas a partir dos diagramas contendo duas linhas que separam pontos em tempos diferentes.

Enquanto que as contribuições que envolvem o produto de quatro funções de Green foram lidas a partir dos diagramas que envolve quatro linhas que separam pontos em tempo diferentes. Os termos com produto de duas funções de Green são os dominantes para a dinâmica, os outros podem desconsiderados.

APÊNDICE D – TEORIA DE PERTURBAÇÃO

Neste apêndice faremos uma breve discussão sobre teoria de perturbação em sistemas de muitos corpos. Algumas das técnicas utilizadas para obter grandezas físicas nesses sistemas por meio de teoria de perturbação são também utilizadas no cálculo da função de correlação. Por isso, justifica-se dedicarmos algumas páginas até encontrar o elemento comum que aparece na teoria de perturbação e no nosso problema de calcular funções de correlação: o valor esperado do produto de operadores de campo em pontos diferentes do espaço tempo.

Um problema importante em sistemas de muitos corpos é calcular o valor esperado de observáveis no estado fundamental. Consideraremos um sistema cujo Hamiltoniano é dado por

$$H = H_0 + V, \quad (\text{D.1})$$

onde H_0 é a parte não perturbada e V é uma perturbação pequena. O estado fundamental de H , em geral, é difícil de ser determinado exatamente e métodos perturbativos são um bom caminho para obter informações sobre este estado, que vamos chamar de $|\Psi_0\rangle$. Por enquanto, vamos nos concentrar em achar o valor esperado de observáveis no estado fundamental em termos do propagador de uma partícula em temperatura zero.

Por simplicidade, vamos calcular a média de observáveis de um corpo e vamos assumir que cada partícula do sistema não possui spin. Seja A um operador de um corpo, então podemos escrevê-lo em termos dos operador de campo $\psi(\vec{r})$ e $\psi^\dagger(\vec{r})$ da seguinte forma:

$$\begin{aligned} A &= \sum_{i=1}^N A_i \\ &= \int d\vec{r}' \int d\vec{r} \langle \vec{r}' | A | \vec{r} \rangle \psi^\dagger(\vec{r}') \psi(\vec{r}). \end{aligned} \quad (\text{D.2})$$

Perceba que assumimos que a base do sistema é contínua, o que não é o caso do sistema XX , mas as técnicas utilizadas para se obter as quantidades físicas de interesse são as mesmas. O valor esperado de A no estado fundamental de H fica

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \frac{\langle \Psi_0 | A | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} \\ &= \int d\vec{r}' \int d\vec{r} \langle \vec{r}' | A | \vec{r} \rangle \frac{\langle \Psi_0 | \psi^\dagger(\vec{r}') \psi(\vec{r}) | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle}. \end{aligned} \quad (\text{D.3})$$

Agora já podemos conectar o valor esperado acima com a definição do propagador de uma partícula em temperatura zero.

Por definição esse propagador é

$$G(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = -i \frac{\langle \Psi_0 | T \psi(\vec{r}, t) \psi^\dagger(\vec{r}', t') | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle}, \quad (\text{D.4})$$

onde os operadores de campo $\psi(\vec{r}, t)$ ($\psi^\dagger(\vec{r}, t)$) são evoluídos de acordo com a representação de *Heisenberg*:

$$\psi_H(\vec{r}, t) = e^{iHt} \psi(\vec{r}) e^{-iHt}. \quad (\text{D.5})$$

De forma geral, o operador de ordenamento temporal, T , é tal que:

$$T[O_1(t_1) \dots O_n(t_n)] = \xi^{\frac{1-\text{sign}(P)}{2}} O_{p_1}(t_{p_1}) \dots O_{p_n}(t_{p_n}) \quad (\text{D.6})$$

onde $(t_{p_1}, \dots, t_{p_n})$ é a permutação de $(t_1, \dots, t_n)$ com $t_{p_1} > t_{p_2} > \dots > t_{p_n}$, $\text{sign}(P)$ é o sinal da permutação e ξ vale -1 para férmions e 1 para bósons. No caso em que $t > t'$, o propagador $G(\vec{r}, t; \vec{r}', t')$ nos diz quanto de amplitude do estado oriundo da criação de uma excitação (partícula) em $(\vec{r}', t')$ sobre o estado fundamental resta no outro estado oriundo do aniquilamento de uma partícula em $(\vec{r}, t)$ sobre o estado fundamental. Em geral, o Hamiltoniano do sistema não comuta com os operadores de criação e destruição de partículas. Por isso, uma partícula criada sobre o estado fundamental vai ser espalhada e causar deslocamentos nos níveis energéticos durante o tempo $t - t'$ e a função $G(\vec{r}, t; \vec{r}', t')$ fornece esse tipo de informação sobre partículas criadas quando o sistema está em seu menor nível energético. De forma análoga, quando $t' > t$ a função $G(\vec{r}, t; \vec{r}', t')$ nos fornece informação sobre o processo de espalhamento de excitações tipo buraco (destruição de uma partícula) criadas no estado fundamental, os buracos podem ser interpretados como partículas sendo propagadas para o passado.^{2,75} Este tipo de propagador é largamente usado em matéria condensada e teoria quântica de campos.^{77,78}

Como na equação (D.3) os operadores de criação e destruição estão no mesmo tempo, temos que usar o truque

$$\psi^\dagger(\vec{r}') \psi(\vec{r}) = \xi \lim_{t' \rightarrow t^+} T \psi(\vec{r}, t) \psi^\dagger(\vec{r}', t'), \quad (\text{D.7})$$

para escrever o valor esperado de A no estado fundamental

$$\langle A \rangle = i \xi \lim_{t' \rightarrow t^+} \int d\vec{r}' \int d\vec{r} \langle \vec{r}' | A | \vec{r} \rangle G(\vec{r}, t; \vec{r}', t'). \quad (\text{D.8})$$

A função $G(\vec{r}, t; \vec{r}', t')$ carrega a informação do estado fundamental do sistema que é necessária para obter essas quantidades. Essa é só mais um tipo de várias outras quantidades que podem ser obtidas através do propagador de uma partícula ou mais partículas em temperatura zero. A resposta linear de um sistema de muitos corpos, que nos diz como esses sistemas reagem a uma perturbação externa, também está relacionada com esses propagadores.^{2,60-62}

No caso em que $V = 0$ e H_0 é quadrático é possível mostrar que $G(\vec{r}, t; \vec{r}', t')$ é a função de Green que vem da teoria de equações diferenciais inhomogêneas:

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\nabla^2}{2m} - U(\vec{r}) \right] G(\vec{r} - \vec{r}', t - t') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t'), \quad (\text{D.9})$$

onde $U(\vec{r})$ é um potencial independente do tempo, m a massa da partícula, e também supusemos que o sistema possui invariância translacional para escrever $G(\vec{r}, t; \vec{r}', t') = G(\vec{r} - \vec{r}', t - t')$. Com base nesta observação, por vezes também denotaremos $G(\vec{r} - \vec{r}', t - t')$ por função de Green, como é comum na literatura.^{2, 60-62}

Como vimos no exemplo com um operador de um corpo, as quantidades físicas em sistemas de muitos corpos estão relacionadas com funções de Green, mas ainda precisamos discutir uma forma de obter esse propagador. Na literatura, o cálculo dessas funções é bastante explorado, o que nos leva ao nosso objetivo de aprender as técnicas necessárias para calcularmos as funções de correlação das componentes locais dos operadores tensoriais de spin no modelo XX . Essas técnicas, o teorema de Wick e os diagramas de Feynman, são importantes para expandirmos perturbativamente o propagador (D.4) do sistema interagente com Hamiltoniano H em termos de funções de Green do sistema não perturbado H_0 .

Uma peça importante para essa discussão é o teorema de Gell-Mann e Low. Primeiramente vamos supor que o Hamiltoniano interagente do sistema seja

$$H = H_0 + e^{-\eta|t|}V, \quad (\text{D.10})$$

onde $e^{-\eta|t|}$ com $\eta \rightarrow 0^+$, *i.e.*, η tende a zero pela direita nos diz que a perturbação é ligada em $t = -\infty$, em $t = 0$ vale V e decai a zero em $t = \infty$. Com isso o operador de evolução temporal obtido a partir da série de Dyson na representação de Interação fica

$$U_{I,\eta}(t, t_0) = T \exp \left[-i \int_{t_0}^t dt' V_{I,\eta}(t') \right], \quad (\text{D.11})$$

onde $V_{I,\eta}(t)$ é a perturbação $e^{-\eta|t|}V$ evoluída nessa representação

$$V_{I,\eta}(t) = e^{-\eta|t|} e^{iH_0 t} V e^{-iH_0 t}. \quad (\text{D.12})$$

O que o teorema de Gell-Mann e Low nos diz é que se partirmos do estado fundamental de um Hamiltoniano não interagente em $t_0 = -\infty$ e ligar lentamente o a interação V , nós chegamos em um auto-estado de H em $t = 0$. Além disso vamos assumir que esse auto-estado seja o estado fundamental de H , estamos supondo que durante este processo não existem mudanças abruptas nos níveis de energia quando ligamos um V pequeno. Se supormos que haja um *gap* entre a energia do estado fundamental e os outros níveis energéticos isso corresponderia as hipóteses do teorema adiabático, mas não estamos

assumindo ela aqui. Assim, chamando de $|gs\rangle$ o estado fundamental do hamiltoniano não interagente, temos

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{U_{I,\eta}(0, -\infty) |gs\rangle}{\langle gs | U_{I,\eta}(0, -\infty) |gs\rangle} = \frac{|\Psi_0\rangle}{\langle gs | \Psi_0\rangle}, \quad (\text{D.13})$$

A partir desse resultado podemos escrever o propagador de um sistema interagente (D.4) em termos do estado fundamental do sistema não interagente com os operadores de campo (evoluídos de acordo com a representação de Interação) da seguinte forma:

$$\begin{aligned} G(\vec{r} - \vec{r}'; t - t') &= -i \frac{\langle gs | T \psi_I(\vec{r}, t) \psi_I^\dagger(\vec{r}', t') e^{-i \int_{-\infty}^{+\infty} dt' V_{I,\eta}(t')} |gs\rangle}{\langle gs | e^{-i \int_{-\infty}^{+\infty} dt' V_{I,\eta}(t')} |gs\rangle} \\ &= -i \frac{\langle gs | T \psi_I(\vec{r}, t) \psi_I^\dagger(\vec{r}', t') S |gs\rangle}{\langle gs | S |gs\rangle}, \end{aligned} \quad (\text{D.14})$$

onde definimos

$$\begin{aligned} S &= U_{I,\eta}(\infty, -\infty) \\ &= T \exp \left[-i \int_{-\infty}^{\infty} dt' V_{I,\eta}(t') \right], \end{aligned} \quad (\text{D.15})$$

conhecido como matriz S . Supondo que a interação $V_{I,\eta}(t_1)$ envolva somente dois corpos e que seja instantânea, $V_{I,\eta}(t_1) \delta(t_1 - t_2) \rightarrow \frac{1}{2} V_{I,\eta}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2, t_1 - t_2)$, podemos escrever S na notação de quadrvetores de forma simétrica no tempo e espaço em termos dos operadores de campo da seguinte forma

$$S = T \exp \left[-\frac{i}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} d^4 x_1 d^4 x_2 V_{I,\eta}(x_1 - x_2) \psi_I^\dagger(x_1) \psi_I^\dagger(x_2) \psi_I(x_1) \psi_I(x_2) \right]. \quad (\text{D.16})$$

A matriz S pode ser expandida em potências de V e como vemos na equação acima a perturbação V é acompanhada de quatro operadores de campo, então para cada potência de V que adicionamos em G mais quatro operadores de campo devem ser adicionados também. No termo de ordem zero existem apenas os dois operadores de campo em $y = (\vec{r}, t)$ e $y' = (\vec{r}', t')$, *i.e.*, esse termo é a função de Green do sistema não interagente. Para o numerador de (D.14) temos

$$G^n(\vec{r} - \vec{r}'; t - t') = G^{(0)}(\vec{r} - \vec{r}'; t - t') + G^{(1)}(\vec{r} - \vec{r}'; t - t') + \mathcal{O}(V^2), \quad (\text{D.17})$$

onde

$$\begin{aligned} G^{(1)}(\vec{r} - \vec{r}'; t - t') &= -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} d^4 x_1 d^4 x_2 V_{I,\eta}(x_1 - x_2) \times \\ &\quad \times \langle gs | T \psi_I(\vec{r}, t) \psi_I^\dagger(\vec{r}', t') \psi_I^\dagger(x_1) \psi_I^\dagger(x_2) \psi_I(x_1) \psi_I(x_2) |gs\rangle \end{aligned} \quad (\text{D.18})$$

e $G^{(0)}(\vec{r} - \vec{r}'; t - t')$ é a função de Green do sistema não interagente. Para determinar a função de Green de um sistema com interações devemos então aprender a calcular médias como

$$\langle gs | T \psi_I(y) \psi_I^\dagger(y') \psi_I^\dagger(x_1) \psi_I^\dagger(x_2) \psi_I(x_1) \psi_I(x_2) |gs\rangle. \quad (\text{D.19})$$

Estamos em um ponto que gostaríamos de criar uma analogia com o nosso problema de calcular as funções de correlação das componentes locais do operador tensorial de spins $T_{i,i+1}^{a,b}(x, t)$. Perceba que a média no estado fundamental em (3.1) é muito similar a equação (D.19). Como o modelo XX é mapeado em um sistema de férmions livres unidimensional, a evolução dos operadores de campo na representação de Interação é igual a evolução na representação de Heisenberg, assim podemos retirar o índice I desses operadores na equação acima para deixar de forma mais parecida com a equação (3.1). Outro fato importante é que o operador de ordenamento temporal pode ser colocado a esquerda dos operadores de criação e destruição em (3.1) porque já estão ordenados temporalmente, embora ainda tenhamos que dizer as consequências do ordenamento temporal para tempos iguais (pois não está bem definido em (D.6) - apêndice B). Com base nessa discussão, concluímos que o cálculo de (D.19) e (3.1) possuem o mesmo procedimento. Essa é a motivação de usar as técnicas de teoria de campos utilizadas em teoria de perturbação em sistemas de muitos corpos para obtenção das funções de correlação de operadores locais que estamos interessados nessa dissertação. Voltando na equação (D.18), vemos que existem 3 operadores de criação e 3 de destruição. Então existem $3!$ possibilidades de contrações. Vamos usar diretamente o teorema de Wick (capítulo 3) e obter as 6 possibilidades e então veremos que é possível representar as contração com diagramas, conhecidos como diagramas de Feynman. As contrações possíveis são:

$$\begin{aligned}
 a) \quad & \langle T \psi(y) \psi^\dagger(y') \psi^\dagger(x_1) \psi^\dagger(x_2) \psi(x_2) \psi(x_1) \rangle = -iG^{(0)}(y - y')G^{(0)}(0)G^{(0)}(0) \\
 b) \quad & \langle T \psi(y) \psi^\dagger(y') \psi^\dagger(x_1) \psi^\dagger(x_2) \psi(x_2) \psi(x_1) \rangle = iG^{(0)}(y - y')G^{(0)}(x_2 - x_1)G^{(0)}(x_1 - x_2) \\
 c) \quad & \langle T \psi(y) \psi^\dagger(y') \psi^\dagger(x_1) \psi^\dagger(x_2) \psi(x_2) \psi(x_1) \rangle = -iG^{(0)}(y - x_1)G^{(0)}(x_2 - y')G^{(0)}(x_1 - x_2) \\
 d) \quad & \langle T \psi(y) \psi^\dagger(y') \psi^\dagger(x_1) \psi^\dagger(x_2) \psi(x_2) \psi(x_1) \rangle = -iG^{(0)}(y - x_2)G^{(0)}(x_1 - y')G^{(0)}(x_2 - x_1) \\
 e) \quad & \langle T \psi(y) \psi^\dagger(y') \psi^\dagger(x_1) \psi^\dagger(x_2) \psi(x_2) \psi(x_1) \rangle = iG^{(0)}(y - x_1)G^{(0)}(x_1 - y')G^{(0)}(0) \\
 f) \quad & \langle T \psi(y) \psi^\dagger(y') \psi^\dagger(x_1) \psi^\dagger(x_2) \psi(x_2) \psi(x_1) \rangle = iG^{(0)}(y - x_2)G^{(0)}(x_2 - y')G^{(0)}(0).
 \end{aligned}
 \tag{D.20}$$

Lembrando que as funções de Green $G^{(0)}(x_1 - x_2)$ representam a propagação de uma excitação no sistema não interagente, podemos representar as diferentes contrações que dão origem a esses propagadores como conexões entre esses pontos do espaço-tempo. Enquanto que a interação $U(x_1 - x_2)$ é uma conexão a mais nesses diagramas que nos diz que existe uma interação entre os corpos nos pontos x_1 e x_2 . Graficamente as linha

contínuas representam funções de Green e linhas onduladas representam interações:

$$G^{(0)}(x_1 - x_2) = \overrightarrow{x_1 \quad x_2} \quad , \quad U(x_1 - x_2) = \begin{array}{c} \diagup \quad \diagdown \\ x_1 \\ \diagdown \quad \diagup \\ x_2 \end{array} \quad . \quad (D.21)$$

Os diagramas associados com cada possível conjunto de contrações acima são os da figura 17.

Figura 17 – Diagramas associados com as 6 formas de contração das equações (D.20).

Fonte: Elaborada pelo autor

Na equação (D.18) vemos que os pontos do espaço tempo y e y' estão fixos enquanto os outros dois, x_1 e x_2 , são variáveis não estáticas, isto é, são variáveis de integração, então para ler um diagrama devemos lembrar de somar todas as possibilidades de x_1 e x_2 . Por isso os diagramas (c) e (d), e (e) e (f) da figura 17 são ditos topologicamente equivalentes.

Existem 5 regras fechadas para ler os diagramas em qualquer ordem de perturbação na expansão diagramática da equação (D.14). Porém, como o sistema XX é não interagente, espacialmente discreto, e a ordem e quantidade de operadores de criação e destruição em (D.19) é diferente das médias típicas que estamos interessados como em (3.1), vamos voltar para o nosso problema e explicar as nossas próprias regras de leituras desses diagramas. Com o sistema interagente acima conseguimos captar a ideia de que tratar problemas que envolvam médias de operadores de campo usando o teorema de Wick é mais simples de observar as propagações das excitações com a representação diagramática.