

# Relatório Final de Iniciação Científica

## Mapeamento Clássico-Quântico: estudo do modelo de Ising em duas dimensões

Alex Enrique Crispim

1 de setembro de 2018

### Resumo

O presente relatório visa descrever o progresso e os resultados finais obtidos durante o projeto de iniciação científica intitulado *Mapeamento Clássico-Quântico: estudo do modelo de Ising em duas dimensões*.

Como objetivos gerais, o projeto busca a introdução do discente a temas da Física contemporânea, quais sejam, Mecânica Quântica, Mecânica Estatística, Transição Quântica de Fase e Sistemas Quânticos de Muitos Corpos. A parte final do projeto também conta com a introdução à Física Computacional de Transições de Fase e de Sistemas de Muitos Corpos, além de conhecimentos estudados em Teoria da Medida e Integração, para o entendimento teórico dos algoritmos de simulação computacional.

Buscar-se-á introduzir a ideia base do projeto visando desenvolver um entendimento da importância do mesmo, durante as primeiras seções do relatório. O modelo de estudo do projeto, *Modelo de Ising*, é apresentado primeiramente na formulação clássica e depois desenvolve-se o modelo quântico, por meio do mapeamento clássico-quântico. Os objetivos específicos do projeto serão explanados ao longo das seções demonstrando o estudo realizado durante o decorrer do projeto.

Este trabalho finaliza com o objetivo de pesquisa: estudar o emaranhamento quântico por meio de propriedades do sistema estatístico clássico correspondente. Para este estudo, utilizamos o mapeamento clássico-quântico de observáveis quânticos para clássicos, de forma que se pôde calcular os observáveis desejados para o sistema quântico por meio de simulações computacional para o sistema estatístico. Ao final, conclui-se que a transição de fase do sistema quântico se dá como uma transição de localidade—não localidade, onde há a presença de uma fase onde os spins do sistema se encontram em estados emaranhados e outra fase onde a correlação das medidas entre spins vai a zero. Concluiu-se também que a transição de fase é a região onde os spins estariam mais fortemente emaranhados, estudando uma das desigualdades de Bell durante a transição.

## Sumário

1	Objetivos do Projeto	3
2	Atividades Realizadas	3
3	Cronograma das Atividades Futuras	4
4	Introdução	4

<b>5</b>	<b>O Comportamento Crítico de Sistemas Termodinâmicos</b>	<b>6</b>
5.1	Definições e Fenômenos Observáveis . . . . .	6
5.2	Potenciais Termodinâmicos e a Função de Partição . . . . .	7
5.3	Sistemas Magnéticos . . . . .	10
5.4	Expoentes Críticos e a Hipótese de Escala . . . . .	11
<b>6</b>	<b>O Modelo de Ising</b>	<b>15</b>
6.1	Contextualização e Proposições . . . . .	15
6.2	O Modelo . . . . .	15
6.3	O Modelo 1D . . . . .	17
6.4	O Surgimento de Transições de Fase Para o Modelo 2D . . . . .	20
6.5	Modelo 2D . . . . .	22
6.5.1	Auto-dualidade do Modelo de Ising Clássico . . . . .	23
6.5.2	A Solução para Duas Dimensões . . . . .	26
6.5.3	Comentários a Respeito da Solução: Magnetização Espontânea . . . . .	37
<b>7</b>	<b>Mapeamento para o Modelo Quântico: Spins no Campo Transverso</b>	<b>38</b>
7.1	Mapeamento 1D Clássico $\rightarrow$ 0D Quântico . . . . .	39
7.1.1	Mapeamento Para $h \neq 0$ . . . . .	42
7.2	Mapeamento 2D Clássico $\rightarrow$ 1D Quântico . . . . .	44
7.2.1	Auto-dualidade para o Modelo de Ising Quântico . . . . .	47
<b>8</b>	<b>A linguagem da Segunda Quantização</b>	<b>49</b>
8.1	Introdução: Quantização Canônica, Primeira e Segunda Quantização . . . . .	49
8.2	O Oscilador Harmônico Quântico e Operadores de Criação e Destruição . . . . .	51
8.3	Bósons e Férmions . . . . .	55
8.4	A Transformada de Jordan-Wigner . . . . .	57
8.5	Diagonalizando a Hamiltoniana Quântica de Ising . . . . .	60
8.5.1	Férmions de Majorana e o Modelo de Ising na Transição de Fase . . . . .	64
<b>9</b>	<b>Observáveis Quânticos: Contraparte Clássica e o Emaranhamento Quântico</b>	<b>66</b>
9.1	O Emaranhamento Quântico . . . . .	66
9.2	Mapeando Observáveis Quânticos em Clássicos . . . . .	69
9.2.1	Mapeando-se $Z_q$ em $Z_{cl}$ . . . . .	70
9.2.2	Procedimento Geral . . . . .	72
9.2.3	Mapeando-se $\hat{\sigma}_k^z$ . . . . .	73
9.2.4	Mapeando-se $\hat{\sigma}_k^z \hat{\sigma}_l^z$ . . . . .	73
9.2.5	Mapeando-se $\hat{\sigma}_k^x$ . . . . .	74
9.2.6	Mapeando-se $\hat{\sigma}_k^x \hat{\sigma}_l^x$ . . . . .	76
9.2.7	Mapeando-se $\hat{\sigma}_k^z \hat{\sigma}_l^x$ . . . . .	76
9.3	Simulação Computacional do Modelo de Ising . . . . .	77
9.3.1	Conhecimentos Preliminares em Teoria da Medida e Integração . . . . .	77
9.3.2	O Método de Monte Carlo e o Algoritmo de Metropolis . . . . .	82
9.3.3	Dificuldades e Cuidados para a Simulação . . . . .	84
9.3.4	Limitações e Alternativas ao Método de Monte Carlo . . . . .	86
9.3.5	Resultados e Discussões para a Rede Isotrópica . . . . .	87
9.3.6	Resultados para a Rede Anisotrópica - Observáveis Quânticos . . . . .	87
9.4	Resultados da Simulação para a Rede Anisotrópica e o Emaranhamento do Sistema Quântico Equivalente . . . . .	89
9.5	Considerações Finais acerca das Simulações Realizadas . . . . .	89
<b>10</b>	<b>Conclusão</b>	<b>90</b>

<b>A Produto Direto, Matrizes de Pauli e Derivações</b>	<b>91</b>
<b>Referências</b>	<b>95</b>

## 1 Objetivos do Projeto

O presente projeto de pesquisa de iniciação científica tem como objetivo estudar vários temas contemporâneos da Física teórica. Os objetivos específicos de estudo são:

1. Estudar o modelo de Ising clássico em duas dimensões; [22, 37]
2. Entender a noção de comprimento de correlação; [22]
3. Entender a ideia de classe de universalidade e expoentes críticos; [22]
4. Estudar o mapeamento clássico-quântico para o modelo de Ising; [10, 41]
5. Estudar o modelo quântico de Ising no campo transversal,
  - (a) aprender a linguagem de segunda quantização, [1, 20]
  - (b) aprender a transformação de Jordan-Wigner, [2, 33, 29, 45]
  - (c) aprender a tomar o limite contínuo de uma teoria de rede, [2]
  - (d) aprender a linguagem de integrais de caminho com variáveis bosônicas e fermiônicas; [22, 38]
6. Relacionar as quantidades da representação quântica com a representação clássica, [22, 29]
  - (a) Energia do vácuo  $\Longleftrightarrow$  energia livre,
  - (b) Propagador  $\Longleftrightarrow$  função de correlação,
  - (c) Gap de massa  $\Longleftrightarrow$  inverso do comprimento de correlação.

Como objetivo de pesquisa, após aprender os itens anteriores iremos estudar a relação entre emaranhamento no sistema quântico e propriedades do sistema estatístico[26].

## 2 Atividades Realizadas

O cronograma teórico para a primeira parte do projeto foi

- de 08/2017 à 11/2017 aprender sobre o modelo de Ising clássico em duas dimensões;
- de 12/2017 à 03/2018 aprender sobre o mapeamento clássico-quântico e aprender sobre o modelo de Ising no campo transversal;

Nesse relatório está resumido os estudos realizados sobre o modelo de Ising em duas dimensões e o modelo de Ising no campo transversal em uma dimensão. Como será apresentado o cronograma proposto foi seguido e todos os objetivos de aprendizagem para essa fase do projeto foram cumpridos.

### 3 Cronograma das Atividades Futuras

Na primeira parte do projeto foram estudados o modelo de Ising, o formalismo de segunda quantização e o mapeamento clássico quântico. Agora que os elementos básicos foram entendidos, se inicia a parte de pesquisa original.

Durante os próximos meses será estudada a relação entre o emaranhamento entre o sistema quântico e propriedades do sistema estatístico clássico.

Inicialmente será estudado em profundidade o conceito de emaranhamento e suas quantificações [27]. Após escolher uma das quantificações ela será aplicada ao modelo de Ising Quântico e em seguida mapeada no sistema clássico. Serão usadas técnicas analíticas e computacionais para desenvolver e discutir os resultados.

### 4 Introdução

Frequentemente, acontece de as soluções para um problema específico estarem relacionadas com a solução de um outro problema por meio de alguma transformação dos parâmetros e variáveis envolvidas. Um clássico exemplo é o *sistema de dois pêndulos acoplado por uma mola*, como mostrado na figura 1 abaixo.

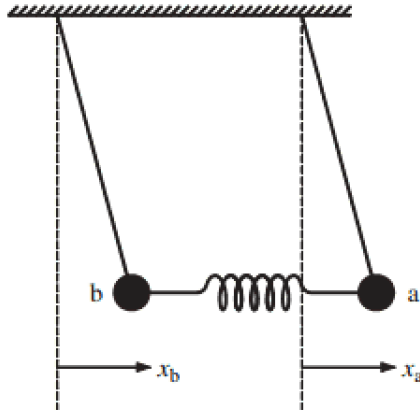


Figura 1: Pêndulos Acoplados por uma Mola

Sendo  $k$  a constante elástica da mola e  $\omega_0 = \sqrt{g/l}$ , onde  $l$  é o comprimento dos fios dos pêndulos e  $g$  a aceleração local da gravidade, a segunda lei de Newton leva ao seguinte sistemas de equações diferenciais acopladas

$$\begin{cases} \ddot{x}_a + \omega_0^2 x_a + k/m(x_a - x_b) = 0 \\ \ddot{x}_b + \omega_0^2 x_b + k/m(x_a - x_b) = 0 \end{cases} \quad (1)$$

onde utilizou-se a notação  $\dot{x} = dx/dt$ . Fazendo a seguinte transformação

$$(q_1, q_2) = T(x_a, x_b) = (x_a + x_b, x_a - x_b),$$

o sistema (1) se torna

$$\begin{cases} \ddot{q}_1 + \omega_0^2 q_1 = 0 \\ \ddot{q}_2 + (\omega_0^2 + 2k/m)q_2 = 0 \end{cases} \quad (2)$$

cujas soluções para cada uma das coordenadas generalizadas  $q_1, q_2$  são as soluções para o problema do *oscilador harmônico simples* [35]. Aqui, um problema mais complicado, vibrações acopladas, é mapeado para um problema conhecido e mais simples.

Da mesma forma como exemplificada anteriormente, outros problemas podem ser relacionados com problemas mais simples ou de solução conhecida entre diversas áreas da Física ou até mesmo entre campos diferentes da Ciência.

Aproximando-nos mais do tema deste projeto, podemos notar uma certa relação entre a Equação de Schrödinger e a Equação de Difusão do Calor. Para uma partícula livre, a equação de Schrödinger não estacionária toma a seguinte forma, quando projetada no espaço das posições,  $\{|\mathbf{r}\rangle\}$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) \quad (3)$$

Se imaginarmos um espaço de duas dimensões temporais com uma das direções sendo o tempo real  $t$  e a outra dimensão também sendo temporal, porém distintas (chamemos de  $\tau$  a outra dimensão), então a rotação de  $\pi/2$  nesse espaço, dada pela transformação

$$t \rightarrow it \Leftrightarrow \tau = it \quad (4)$$

leva a equação (3) à seguinte forma

$$\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, it) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, it) \quad (5)$$

definindo

$$D \stackrel{\text{def}}{=} -\hbar/2m,$$

chegamos à

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = D \nabla^2 \psi \quad (6)$$

As relações acima mostram que há uma correlação entre a solução da equação da difusão (interpretando  $D$  como o coeficiente de difusão) e a solução para a equação de Schrödinger para uma partícula livre, bastando tomar o tempo como sendo imaginário,  $t \rightarrow it$ , para mapear uma solução equação da difusão para a equação de Schrödinger da partícula livre. Acrescentando o potencial  $V(\mathbf{r}, t) = -\tilde{V}(\mathbf{r}, t)$  para um caso mais geral, podemos ver a equação resultante da mesma transformação como uma equação do calor, associando ao termo  $V$  uma ideia de produção de calor; um termo associado a fatores externos.

$$\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left( \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \tilde{V}(\mathbf{r}, t) \right) \psi \quad (7)$$

Analogias como as que foram feitas anteriormente e a interpretação probabilística da Teoria Quântica, foram motivações para trabalhos visando encontrar uma relação entre a Mecânica Quântica e processos estocásticos em sistemas clássicos, de uma forma geral. No entanto, tal busca não foi bem sucedida, como mostrado em [14]

Contudo, de forma especial, alguns problemas quânticos têm uma correlação com problemas clássicos. O objetivo deste projeto é estudar o chamado Mapeamento Clássico-Quântico onde acredita-se que um problema de dimensão  $D$  pertencente à Mecânica Quântica pode ser mapeado em um problema de dimensão  $D + 1$  da Mecânica Estatística, por meio da função de partição, em especial, para *Modelo de Ising*.

Neste projeto, desenvolveremos a ligação entre uma Hamiltoniana Clássica 2-dimensional e a Hamiltoniana Quântica 1-dimensional, possibilitando o mapeamento acima mencionado. Por meio da chamada *Transformada de Jordan-Wigner*, um problema de spins 1/2 em uma dimensão, pode ser mapeado em um problema de férmions. Com isso, usando a linguagem de operadores de criação de aniquilação de férmions da segunda quantização, poderemos resolver o modelo de Ising Quântico exatamente, e relacionar com a solução devida a Onsager para o modelo clássico de Ising em duas dimensões na transição de fase.

Buscar-se-á, em seguida, entender como propriedades do problema clássico se manifestam no modelo de Ising no campo transversal, a contraparte quântica.

A relação entre Mecânica Estatística e Teoria de Campos também será estudada, posteriormente, com base no modelo de Ising, mostrando as relações entre grandezas clássica e quânticas e relacionando certas quantidades de cada uma das teorias.

Por fim, após todo o processo citado acima, o projeto tem como objetivo final discutir a relação entre o emaranhamento quântico e as propriedades do sistema mecânico-estatístico clássico; como se manifestam certas características do sistema quântico no sistema clássico no qual o mesmo é mapeado.

## 5 O Comportamento Crítico de Sistemas Termodinâmicos

### 5.1 Definições e Fenômenos Observáveis

Para certos sistemas, há pelo menos uma temperatura a qual chamamos *temperatura crítica*, caracterizada por um comportamento anômalo do sistema, em comparação com outros valores de temperatura. Na temperatura crítica, nos deparamos com o fenômeno de *transição de fase* [30]. Nesta seção, desenvolveremos um estudo e entendimento básico sobre transições de fase, comportamento crítico, definiremos quantidades termodinâmicas relevantes para o entendimento de tais tópicos e para o entendimento do que será feito futuramente e, por fim, discutiremos a respeito da *função de partição do sistema*. Outros conceitos importantes aqui não citados serão explicados ao longo do texto.

Para começar discutindo a respeito de transições de fase e, ao final, a importância para este trabalho, comecemos falando a respeito do termo *fase*. Em Termodinâmica e Mecânica Estatística, uma fase é definida como sendo um sistema homogêneo [30]. Comumente, um sistema é considerado homogêneo se for homogêneo a nível microscópico. No entanto, pode-se tomar qualquer escala, a depender de cada caso.

Como exemplo inicial, à temperatura ambiente, quando adicionado alguns gramas de açúcar a um copo de água com 200 mL teremos uma fase simples, após misturar-se o suficiente. Se, no entanto, adiciona-se uma elevada quantidade de açúcar, a mistura pode se tornar *saturada*, apresentando uma fase composta; uma mistura heterogênea. [30]

No exemplo acima, a fase de um sistema foi alterada adicionando-se um novo componente até atingir um limite certo limite. Contudo, a fase de um sistema pode ser alterada por meio de mudança de condições externas como a temperatura, a pressão, a presença de um campo magnético, dentre outras possibilidades. Nesta última forma de transição, o interesse está no fato de se observar uma mudança brusca no sistema, não alterando sua composição, como no exemplo inicial.

Como segundo exemplo, tomemos novamente a água, à temperatura de  $25^{\circ}C$  e pressão de 1 atm. Dois fatos do cotidiano podem ser levantados para a água, nessas condições:

- (i) A redução da temperatura para abaixo de  $0^{\circ}C$  leva ao aparecimento de gelo.
- (ii) O aumento da temperatura para acima de  $100^{\circ}C$  leva ao aparecimento de vapor.

É de conhecimento fenomenológico, também, que alterações no valor da pressão, podem levar a alterações nos valores de temperatura para os quais a água passa da fase líquida para as outras três fases convencionais [7, 30]. A relação entre fases, pressão e temperatura pode ser sintetizada em um gráfico a qual recebe o nome de *diagrama de fases*.

A figura 2 representa o diagrama de fases da água onde as ideias anteriores são apresentadas. À primeira vista, nota-se pontos incomuns ao cotidiano como o *ponto triplo* e o *ponto crítico*. As curvas em vermelho são chamadas *curvas de coexistência* pois, sobre tais curvas, duas fases podem coexistir [30]. O ponto triplo é justamente o ponto onde as três curvas se interceptam. Neste ponto, a água pode coexistir em suas três fases comuns (sólida, líquida e gasosa). Diferentemente,

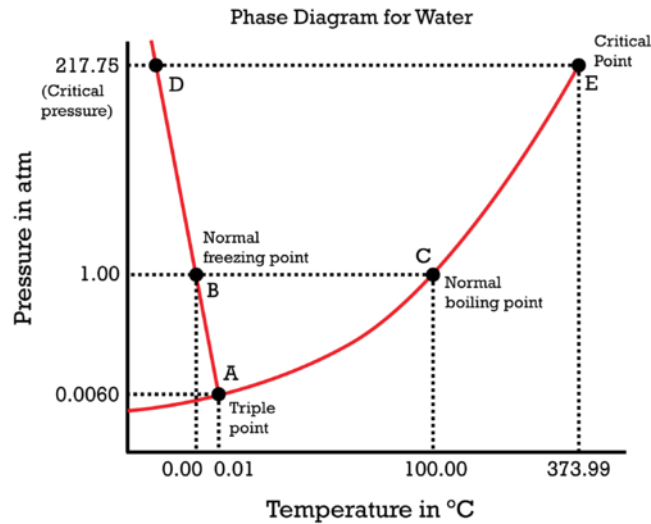


Figura 2: Diagrama de Fases da Água

o ponto crítico é o ponto para o qual valores de temperatura e ou pressão maiores levam a uma nova fase chamada *fluido supercrítico*. [30]

Supondo um ponto na região líquida do diagrama, se mantermos a pressão constante e aumentamos a temperatura, ao chegarmos na linha de coexistência, temos duas fases no sistema [30]. Após um tempo de fornecimento de energia por meio de calor ao sistema, toda a água estará na fase gasosa. Transições desse tipo é o que vamos chamar de transição de fase; transições mediante alterações nas condições externas ao sistema.

Um primeiro fato interessante é o aparecimento repentino do vapor, exatamente quando chegasse à linha coexistência, ou seja, caso a temperatura seja  $\epsilon$  menor do que o valor necessário para a ebulição, com  $\epsilon$  muito pequeno, o sistema apresenta apenas a fase líquida. Somente ao atingir o valor necessário, ocorre o aparecimento do vapor. Observa-se que *uma mudança brusca no sistema com uma mudança pequenas nas condições externas*. Nesse momento, a densidade da água sofre uma descontinuidade [30]. A densidade passa, no caso da pressão inicial de  $1 \text{ atm}$ , de um valor de aproximadamente  $1 \text{ g/cm}^3$  para um valor de  $0,0001 \text{ g/cm}^3$ . A mesma descontinuidade aparece no congelamento da água, por meio de valores diferentes.

As transições de fase descritas acima são chamadas *transições de primeira ordem*. O significado desse nome se tornará claro ao explicar a relação entre transições de fase e potenciais termodinâmico, a seguir.

Para finalizar, considere um caminho sobre o diagrama de fases da seguinte forma: Iniciando em algum ponto da curva de coexistência entre os pontos  $C$  e  $E$  da figura 2, com valor de pressão e temperaturas maiores do que em  $C$ . Deste novo ponto, o caminho é feito até o ponto  $E$  sobre a curva de coexistência. Ao atingir  $E$  temos um fase única de água supercrítica, onde a distinção entre fases líquida e gasosa não é mais possível. No caso deste exemplo, temos uma descontinuidade no *coeficiente de expansão térmica*. Também é possível notar que o sistema transforma-se como um todo, não havendo coexistência entre líquido, gás e fluido supercrítico.

As características acima são as de uma *transição de segunda ordem*, que será de maior interesse em nosso estudo sobre sistemas magnéticos, cujo motivo torna-se-á claro adiante.

## 5.2 Potenciais Termodinâmicos e a Função de Partição

Um sistema termodinâmico fica completamente definido quando dado uma função chamada *função de estado* [7]. Basicamente é uma função do tipo  $f(p, V, T, \dots)$  onde o uso das reticências se deve ao fato de que outros parâmetros podem ser necessários, a depender do sistema. O estado termodinâmico de um sistema é representado por algumas entidades chamadas *potenciais termodinâmicos* que, em essência, são funções de estado.

Para definirmos os parâmetros importantes para um potencial termodinâmico, devemos considerar o tipo de reservatório térmico ao qual o sistema em questão esteja acoplado. Características como a possibilidade de troca de partículas, troca de calor dentre outras coisas levarão a adição de termos como mostraremos a seguir.

Um potencial termodinâmico simples é a energia interna do sistema,  $U$ . Dá primeira lei da termodinâmica, temos

$$dU = TdS - pdV \quad (8)$$

como

$$\bar{d}Q = TdS \quad \text{e} \quad \bar{d}W = pdV,$$

a energia interna mede a capacidade de realização de trabalho e troca de calor [7]. Se no entanto o sistema for composto por paredes adiabáticas, não permitindo a troca de calor com o reservatório térmico, o termo  $TdS$  pode ser excluído da equação.

Para o caso de o sistema poder trocar partículas com o reservatório, deve-se acrescentar um termo da forma

$$\sum_i \mu_i dN_i;$$

um termo de difusão. Como outro exemplo de termos modificadores da equação de estado, na presença de um campo magnético, um termo  $-MdB$  também deve ser adicionado.

Para alguns tipo de reservatórios específicos temos os potenciais chamados de *Energias Livre de Gibbs, Helmholtz e Entalpia*, denotados  $G$ ,  $F$  e  $H$ , respectivamente [7, 30].

$$dF = dU - TdS \quad (9)$$

$$dH = dU + pdV \quad (10)$$

$$dG = dU + pdV - TdS \quad (11)$$

Duas observações importantes para reforçar: todas as quantidades acima são funções de estado, a depender do tipo de reservatório térmico em contato com o sistema, como já dito, e também que não são os únicos potenciais relevantes, são apenas os mais comuns [7].

A importância de tais potenciais reside no fato de que as quantidades relevantes a respeito do sistema podem ser obtidos por meio desses. O volume específico  $v$ , por exemplo, pode ser escrito como

$$v = \frac{1}{N} \frac{\partial G}{\partial P} \quad (12)$$

Na presença de um campo magnético externo, com a adição do termo  $-MdB$ , temos para a magnetização  $M$

$$M = -\frac{\partial G}{\partial B} \quad (13)$$

Como último exemplo, o coeficiente de expansão volumétrica  $\alpha_V$  pode ser obtido por meio da expressão

$$\alpha_V = \frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial T} \right)_p = \frac{1}{V} \left( \frac{\partial^2 G}{\partial T \partial P} \right) \quad (14)$$

Com o conhecimento das expressões (12) e (14), podemos finalmente explicar os nomes transição de fase de primeira e segunda ordem.

Uma transição de fase é dita ser de primeira ordem quando, na temperatura de transição, a descontinuidade, ou não analiticidade, aparece em uma quantidade obtida pela derivada de primeira ordem da energia livre, como em (12), o caso da densidade da água, citado anteriormente. [30]

Seguindo a mesma ideia, uma transição de fase de segunda ordem ocorre quando a segunda derivada da energia livre é não analítica para algum valor de temperatura, como no caso do ponto crítico da água; uma descontinuidade da função dada pela equação (14). [30]



Outros aspectos como a coexistência de fases numa transição de primeira ordem ou a transformação completa do sistema em uma transição de segunda ordem também são importantes para caracterização.

Nosso interesse se mostrará nas transições de segunda ordem para sistemas magnéticos; *transições de ordem-desordem* ou *ferromagnética-paramagnética*, nome devido ao comportamento dos *spins* das partículas do sistema.

O Modelo de Ising, como explicado na próxima seção, buscava entender o fenômeno do ferromagnetismo, a nível mais elementar [4]. Atualmente, o modelo é a base para o entendimento de transições de fase de segunda ordem e relações que podem ser derivadas por meio do mesmo, são o caminho para modelo mais complexos.

Para introduzir o Modelo de Ising, precisamos de uma entidade a qual será o meio de determinar a energia livre e outras quantidades estatísticas do sistema, a *Função de Partição*,  $Z$  [7]. Futuramente, mostraremos como a *amplitude de transição* entre pontos  $(t, \vec{x})$ ,  $(t', \vec{x}')$  no espaço de Minkowski está relacionada com uma entidade, a ser definida no capítulo sobre o Modelo de Ising, chamada *matriz de transferência*, por meio da formulação de Feynman da Mecânica Quântica e da Teoria de Campos.

**Função de Partição:** Seja  $E_i$  a energia de uma configuração do sistema, a probabilidade de se encontrar o sistema com essa energia é dada por [7]

$$P(E_i) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_i}, \quad (15)$$

onde o termo  $1/Z$  é um fator de normalização e  $\beta = 1/kT$  é o inverso da temperatura, com  $k$  sendo a constante de Boltzman. Comumente, o termo  $e^{-\beta E}$  é chamado *peso de Boltzman*. Para termos uma medida de probabilidade deve-se ter

$$\begin{aligned} \sum_i P(E_i) = 1 &\Leftrightarrow \frac{1}{Z} \sum_i e^{-\beta E_i} = 1 \\ \therefore Z &= \sum_i e^{-\beta E_i} \end{aligned} \quad (16)$$

$Z$  recebe o nome de Função de Partição [7]. A forma como  $Z$  foi definida pode ser facilmente generalizada para o caso contínuo.

Por meio desta função, podemos derivar todas as quantidades estatísticas como a energia média do sistema e também a Energia Livre.

Uma outra forma equivalente de normalização para a medida (15) é definindo  $F$  tal que [38]

$$P(E_i) = e^{-\beta(E_i - F)} \quad (17)$$

com isso

$$Z = e^{-\beta F} \quad (18)$$

Claramente,  $F$  definida acima tem dimensão de energia. Ocorre de ser justamente a energia livre. A energia livre pode então ser escrita como

$$F = -kT \ln Z, \quad (19)$$

Como segundo exemplo, para a energia média do sistema, temos

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \sum_i E_i P(E_i) = \frac{1}{Z} \sum_i E_i e^{-\beta E_i} = \frac{-1}{Z} \sum_i \frac{\partial}{\partial \beta} e^{-\beta E_i} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \\ \therefore \langle E \rangle &= -\frac{\partial(\ln Z)}{\partial \beta} \end{aligned} \quad (20)$$

Da formula (20) acima, nota-se a relação (19) surgir.

Espera-se que a energia livre para um sistema com muitos componente, ser proporcional ao tamanho do sistema, para qualquer que seja o tamanho do mesmo. De outro modo, espera-se que o seguinte limite exista [38]

$$f = \lim_{N \rightarrow \infty} (-kT \ln Z_N)/N \quad (21)$$

$f$  é a energia livre por sítio ou *densidade de energia livre*. Tal limite é denominado *limite termodinâmico* [7, 22].

Com isso, nosso objetivo ao estudar um sistema estatístico estará na função de partição. A busca por singularidades na energia livre ou suas derivadas se dará primeiramente buscando-se a função de partição. Ao se estudar o Modelo de Ising, voltaremos a atenção para a determinação de  $Z$  partindo da Hamiltoniana do modelo. Posteriormente, relacionaremos o modelo clássico em duas dimensões com o modelo quântico em uma dimensão e, conseqüentemente, a solução para a função de partição. [22]

### 5.3 Sistemas Magnéticos

Considere uma barra de ferro à temperatura ambiente. Quando colocados a barra na presença de um campo magnético  $\vec{B}$ , verifica-se uma magnetização sobre a barra [30]. Ao se desligar o campo magnético aos poucos até o valor zero, nota-se uma que a magnetização decresce, porém com um valor resultante não nulo; há uma magnetização espontânea para  $\vec{B} = 0$ . Espera-se que as forças intermoleculares sejam invariantes sob reversão temporal. Devido a isso e também à isotropia com relação à orientação do sistema e do campo magnético, invertendo-se o campo, espera-se que a magnetização se comporte, em módulo, de forma igual, no entanto, com valor oposto,  $M(-\vec{B}) = -M(\vec{B})$ , ou seja,  $M(\vec{B})$  deve ser uma função ímpar [37]. A partir dessas informações, espera-se que o gráfico de  $M(\vec{B})$  seja como o da figura 3 abaixo.

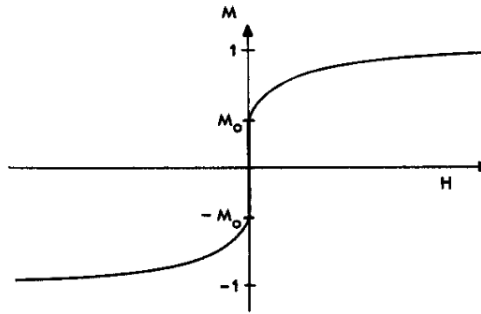


Figura 3: Magnetização em função do campo magnético externo ( $T < T_C$ )

Há, no entanto, uma temperatura  $T_c$  para o qual  $M(0) \stackrel{\text{def}}{=} M_0$  assume um valor nulo, quando  $T \geq T_c$ . Espera-se para a função  $M_0(T)$ , encontrarmos o seguinte gráfico [37]

Logo, a situação da figura 3 é o caso  $T < T_C$ . Como  $T_C$  é a temperatura de transição de fase, esperamos encontrar alguma singularidade na primeira ou segunda derivada da energia livre. De fato, ao se estudar  $M(\vec{B})$  para  $T = T_C$ , encontramos um gráfico como o descrito pela figura 5 [37]

Nota-se que  $\partial M / \partial B \rightarrow \infty$  quando  $B \rightarrow 0$ , ou seja, temos uma singularidade na segunda derivada da energia livre; uma transição de fase de segunda ordem [37]. A figura 4 indica que, para  $T > T_C$ ,  $M_0$  é sempre nula.

Partindo de sistemas magnéticos, podemos entender algumas noções importantes para o estudo de transições de fase de segunda ordem que desenvolveremos a seguir.

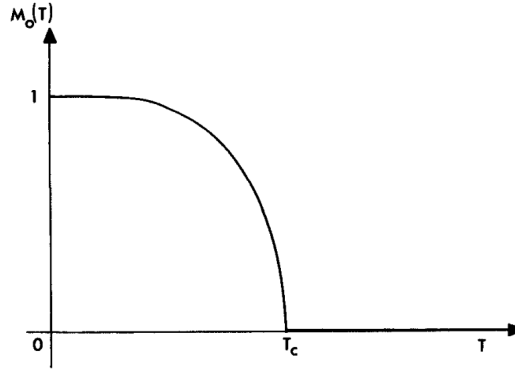


Figura 4: Magnetização para  $\vec{B} = 0$  em função da temperatura

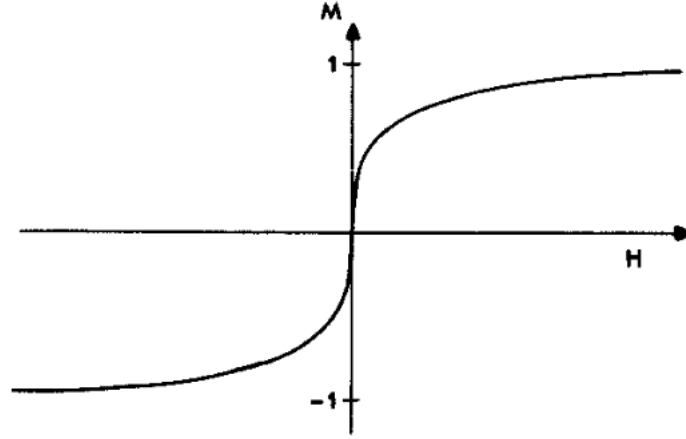


Figura 5:  $M(\vec{B})$  para  $T = T_C$

## 5.4 Expoentes Críticos e a Hipótese de Escala

A medida da resposta dos componentes do sistema magnético à presença de um campo externo é dado pela *susceptibilidade magnética* [22]

$$\chi = \partial M / \partial h \big|_{h=0}, \quad (22)$$

onde passamos a utilizar  $h$  para denotar o campo magnético. Se escrevermos

$$M = \left\langle \sum_j \sigma(j) \right\rangle = \sum_{\text{config.}} \left( \sum_j \sigma(j) \right) e^{-\beta H(\{\sigma\})} / Z, \quad (23)$$

com  $H(\{\sigma\})$  denotando a Hamiltoniana de uma configuração  $\{\sigma\}$  de spins, como será melhor definido próxima seção, a susceptibilidade pode ser escrita da seguinte forma [22]

$$\chi = \frac{1}{kT} [\langle \sigma_{\text{tot}}^2 \rangle - \langle \sigma_{\text{tot}} \rangle^2] = \frac{\text{Var}(\sigma_{\text{tot}})}{kT}, \quad \sigma_{\text{tot}} = \sum_j \sigma(j) \quad (24)$$

A equação (24) nos mostra que podemos identificar  $\chi$  como uma medida de flutuação dos spins [22]. Pode-se, ainda, reescrever  $\chi$  da seguinte forma

$$\chi = \frac{1}{kT} \left[ \sum_{j,k} \langle \sigma(j) \sigma(k) \rangle - \left\langle \sum_j \sigma(j) \right\rangle^2 \right] \quad (25)$$

A *Função de Correlação Spin-Spin*  $\Gamma$  é definida como

$$\Gamma(j, k) = \langle \sigma(j) \sigma(k) \rangle - \langle \sigma(j) \rangle \langle \sigma(k) \rangle \quad (26)$$

Se  $\langle \sigma_{\text{tot}} \rangle = M_0 = 0$ , e a energia  $E(\sigma)$  for invariante sob translação, podemos escrever  $\chi$  como

$$\chi = \frac{N}{kT} \sum_k \Gamma(k, 0) \quad (27)$$

A equação (27) é basicamente o *Teorema Flutuação-Dissipação* [22, 30]. Com a invariância de  $E(\sigma)$ ,  $\langle \sigma_i \rangle = M/N$ , para todo  $i$ , logo  $\Gamma(j, k)$  depende apenas da distância entre os sítios

$$\Gamma(j, k) = f(\vec{r}_{jk}) \quad (28)$$

onde  $f(\vec{r})$  é a *função de correlação*.

Caso o sistema tenha uma correlação spin-spin extremamente grande entre os spins,  $\chi$  pode divergir, como mostrado pela equação (27) [22]. Logo, na temperatura de transição de fase, como a derivada da magnetização, ou seja, a susceptibilidade, diverge, devemos ter uma divergência de  $\Gamma$ .

Considere  $\mathfrak{T}$  definido como

$$\mathfrak{T} = T - T_C \quad (29)$$

Para estudar as quantidades físicas de interesse perto da temperatura crítica,  $\mathfrak{T}$  é de maior utilidade, em comparação com  $T$ .

Como dito anteriormente, para  $\mathfrak{T} < 0$  e  $T$  fixo, a magnetização  $M(h, T)$  é não nula, quando  $h$  tende para zero. Por outro lado, quando  $\mathfrak{T} \geq 0$ ,  $M(h, T)$  tende para zero, com  $h \rightarrow 0$ . Isso se deve a uma disputa entre energia e entropia. Pela energia livre de Helmholtz

$$dF = dU - TdS$$

Para o sistema ir de um estado inicial para um novo estado, de forma espontânea, é necessário que a energia livre da nova configuração seja menor ou igual a energia do estado anterior [30]. Com isso, de forma geral, os spins de sítios adjacentes tendem a se alinhar, visto que é o estado de mais baixa energia (como será visto pela Hamiltoniana de Ising), aumentando sua probabilidade, como mostra a equação (15). No entanto, há uma tendência oposta devida à entropia, visto que  $dS > 0$  implica em uma redução da energia livre. Com isso, para temperaturas elevadas, numa escala dada pela temperatura crítica, o termo de entropia tende a ser mais relevante, favorecendo a desordem no sistema, enquanto que para temperaturas baixas, a ordenação entre os spins adjacentes é mais relevante para a redução da energia livre. [30]

Por meio da ideia acima, pode-se estimar a temperatura crítica como sendo [30]

$$T_C \approx \frac{\Delta U}{\Delta S} \quad (30)$$

Para uma rede quadrada e utilizando-se do modelo de Ising, pode-se aproximar

$$kT_C \approx 2J/\ln, 3$$

um valor próximo da solução exata devida a Onsager,

$$kT_C = 2J/\ln(1 + \sqrt{2})$$

Para diversos modelos, incluindo o modelo de Ising, quanto  $\mathfrak{T} \rightarrow 0^-$ ,  $M$  vai a zero como uma lei de potência da forma [22, 37]

$$M \sim (-\mathfrak{T})^\beta, \quad (31)$$

onde  $\beta$  é, neste caso, o *expoente crítico* para a magnetização, não o inverso da temperatura. Para o modelo de Ising 2-dimensional,  $\beta = 1/8$ . [22]

Considerando agora a função de correlação spin-spin. Como já dito, para  $\mathfrak{T} \gg 0$ , a correlação entre os spins decai exponencialmente com a distância entre os spins,  $|j - k|$

$$\Gamma(j, k) \sim \exp(-|j - k|/\xi(T)), \quad |j - k| \gg 1 \quad (32)$$

A entidade  $\xi(T)$  é chamada *comprimento de correlação do sistema* [22]. O significado físico do comprimento de correlação é dado por uma medida da distância para o qual os spins tendem a estar correlacionados; mensura quão longe de um específico spin os outros tendem a estar alinhados. [22]

Na região  $\mathfrak{T} < 0$ ,

$$\Gamma(j, k) \sim \langle \sigma(0) \rangle^2 \neq 0, \quad |j - k| \gg 1 \quad (33)$$

Para  $\mathfrak{T} = 0$ ,  $\Gamma$  toma a forma

$$\Gamma(j, k) = |j - k|^{-(d-2+\eta)}, \quad (34)$$

onde  $\eta$  é outro expoente crítico e  $d$  a dimensão do modelo [22]. De fato, como esperado, para  $\chi$  temos

$$\chi \sim \mathfrak{T}^{-\gamma}, \quad \mathfrak{T} \rightarrow 0^+ \quad (35)$$

$$\chi \sim (-\mathfrak{T})^{-\gamma}, \quad \mathfrak{T} \rightarrow 0^- \quad (36)$$

Com os argumentos anteriores a respeito de  $\chi$  na temperatura crítica, a respeito de sua divergência e pelas relações (27), (32) e (34),  $\xi$  deve divergir para  $\mathfrak{T} \rightarrow 0$ , uma vez que as equações (32) e (34) devem ser compatíveis[22]. Para  $\xi$  temos

$$\xi \sim |\mathfrak{T}|^{-\nu}, \quad \mathfrak{T} \rightarrow 0 \quad (37)$$

$\nu$  sendo outro expoente crítico.

Alguns experimentos mostraram que os expoentes críticos de uma grande variedade de sistemas físicos são iguais. Das relações anteriores e também do fato da divergência do comprimento de correlação para  $\mathfrak{T} \rightarrow 0$ , surge a chamada *hipótese de escala para o comprimento de correlação*. A mesma sugere uma explicação para a dependência singular em  $\mathfrak{T}$  de todas as quantidades física. Segundo esta hipótese, devida a divergência de  $\xi$  na região crítica,  $\xi$  é o único comprimento relevante para o sistema[22].

Munidos da hipótese acima, podemos imaginar o sistema de spins para  $\mathfrak{T} \approx 0$ . O sistema será composto de *ilhas* de spins correlacionados. Em vista do fato de que tanto o alinhamento dos spins para a redução da energia interna como o aumento da entropia tem aproximadamente a mesma contribuição para a redução da energia livre, as ilhas de spins devem variar de tamanho. A variação do tamanho das ilhas vai de zero até comprimentos da ordem de  $\xi(T)$ [22]. No entanto, uma ilha com tamanho da ordem de  $\xi$ , em comparação ao espaçamento entre os spins e devida a divergência do comprimento de correlação, seria um sistema físico de tamanho grande e, logo, por si só outro sistema de spins de tal forma que dentro de tal ilha, haveriam pequenas outras ilhas de spins[22]. Com isso, o sistema se tornaria invariante em escala, com a divergência de  $\xi$ . Portanto, o sistema pareceria o mesmo em todas as escalas de comprimento. Isso explicaria a não coexistência de fases para uma transição de segunda ordem; uma transformação completa do sistema.

A invariância em escala do sistema estaria relacionada com o aparecimento das leis de potência e dos expoentes críticos. Distribuições da forma de leis de potência são invariantes em escala; são funções homogêneas. Como fora sugerido na década de 60 por alguns pesquisadores, certas funções termodinâmicas devem ser homogêneas na região crítica. Essa é a *hipótese de escala*[22].

Partindo disso, a magnetização, em particular, deve ser uma função homogênea de  $h$  e  $\mathfrak{T}$ . Como sugerido por Griffiths, devemos ter uma relação da seguinte forma [37]

$$h/kT_C = M|M|^{\delta-1}g_s(\mathfrak{T}|M|^{-1/\beta}) \quad (38)$$

A proporcionalidade ao termo  $M|M|^{\delta-1}$  deve-se à necessidade de  $h$  ser uma função ímpar de  $M$ . Na equação cima,  $g_s$  é uma função de escala, adimensional. Da hipótese de homogeneidade das quantidades termodinâmicas,  $g_s$  deve ser monotonicamente crescente ou decrescente.

Para o Modelo de Ising em Duas Dimensões,  $g_s$  é uma função monotonicamente crescente com domínio definido como  $D(g_s) = [-z_0, \infty)$ , com  $g_s(-z_0) = 0$ ,  $z_0 \neq 0$  o que implica em  $g_s(0) \neq 0$ , ou seja

$$M \sim h^{1/\delta}, \quad \mathfrak{T} = 0 \quad (39)$$

Por meio da hipótese de escala, certas relações entre os expoentes críticos podem ser obtidas. Pela equação (39) e pela figura 4, para  $\mathfrak{T} < 0$ ,  $g_s = 0$ , ou seja

$$-z_0 = \mathfrak{T}|M|^{-1/\beta} \quad (40)$$

Pela relação acima,  $\beta$  é o mesmo da equação (31)

Tomando a derivada de (38) com relação a  $M$ , para  $\mathfrak{T}$  fixo, definindo  $z = \mathfrak{T}|M|^{-1/\beta}$ , obtemos

$$(\chi^k T_C)^{-1} = |M|^{\delta-1} [\delta g_s(z) - \beta^{-1} z (g_s(z))'_M] \quad (41)$$

Na região de corte do gráfico da figura 4, [37]

$$\chi^{-1} \sim |M|^{\delta-1} \sim (-\mathfrak{T})^{\beta(\delta-1)} \quad (42)$$

A compatibilidade da equação (34) com a equação (40) leva a relação [22, 37]

$$\gamma = \beta(\delta - 1) \quad (43)$$

Tais relações entre expoentes críticos são chamadas *relações de escala* [22].

Por fim, definindo o expoente crítico  $\alpha$  para o calor específico  $C$ , na região crítica, como

$$C \sim \mathfrak{T}^{-\alpha}, \quad (44)$$

Por meio da hipótese de escala, as seguintes relações podem ser derivadas [22, 37]

$$2\beta = \nu(d - 2 + \eta) \quad (45)$$

$$\gamma = \nu(2 - \eta) \quad (46)$$

$$\alpha = 2 - \nu d \quad (47)$$

$$\delta = (d + 2 - \eta)/(d - 2 + \eta) \quad (48)$$

Na tabela abaixo, os valores de alguns expoentes críticos são mostrados para modelos diferentes [22, 30]

Expoente	Campo Médio	2D Ising	3D Ising
$\alpha$	0	0	$\sim 0,11$
$\beta$	$1/2$	$1/8$	$\sim 0,32$
$\gamma$	1	1,75	$\sim 1,24$
$\delta$	3	15	$\sim 4,82$
$\nu$	$1/2$	1	$\sim 0,65$
$\eta$	0	$1/4$	$\sim 0,03$

Tabela 1: Expoentes críticos para três modelos diferentes

Nota-se que os valores obtidos para a Teoria do Campo Médio de Landau, não satisfazem a relação de escala e, de fato, levam a resultados diferentes dos providos pelo modelo de Ising. Contudo, aproximar por meio do Campo Médio, pode ser útil como primeiro ponto de partida. [30]

Um último fato a se notar é que as flutuações são de grande importância em baixas dimensões, como indicado pela diferença nos valores dos expoentes críticos e pela discrepância entre os resultados previstos por cada modelo.

**Classe de Universalidade:** Parâmetros como a magnetização ou a temperatura crítica podem até variar para cada sistema em específico, a depender da Hamiltoniana, porém, acredita-se que os expoentes críticos são universais[22]. Tais sistemas físicos aparentam poder ser categorizados em certas *classes de universalidades*. Dizemos então que, quando dois sistemas diferentes têm os mesmo expoentes críticos, os sistemas pertencem à mesma classe de universalidade.

Como exemplo, podemos citar a molécula de  $CO_2$ , gás de  $Xe$  (Xenônio) e o Modelo de Ising em três dimensões [30]. Por meio de experimentos e simulações, pode-se ver que os mesmos valores de expoentes críticos aparecem para os três casos.

O comportamento crítico em comum entre sistemas na mesma classe de universalidade é esperado.

Os fatos e definições importantes para o entendimento básico do comportamento crítico foram apontados nessa seção e serão mencionados quando necessários ao longo do relatório.

## 6 O Modelo de Ising

### 6.1 Contextualização e Proposições

O Modelo de Ising foi um modelo cunhado no início da década de 1920 por Wilhelm Lenz e dado ao seu orientando de doutorado Ernst Ising o qual trabalhou no desenvolvimento do mesmo, recebendo, como homenagem, seu nome ao modelo [4].

Inicialmente, o modelo visava estudar e entender os fenômenos do ferromagnetismo e transições de fase. Ainda que sem sucesso de início, o modelo é atualmente de grande importância para diversas áreas da Física e até mesmo aplicado a problemas em outras áreas, onde o comportamento cooperativo dos integrantes do sistema é relevante [4].

O Modelo de Ising  $d$ -dimensional corresponde a uma rede num espaço discreto de dimensão  $d$  onde cada ponto dessa rede, denominado *sítio*, é mapeado para uma variável que assume certos valores, dependendo da utilização do modelo. [4]

O modelo toma como base duas premissas, discutidas logo no início do trabalho de Ising. O artigo começa citando a explicação dada por Weiss para o ferromagnetismo, a hipótese do *campo molecular*. De acordo com esta hipótese, um campo magnético médio é criado por todos os dipolos magnéticos do material. para um determinado local, os dipolos magnéticos mais distantes tenderiam a se cancelar e seus efeitos para a dinâmica local seriam pequenos. Ising então toma como primeira proposição a de que as interações entre os elementos do sistema vai a zero muito rapidamente com o aumento da distância entre os mesmos, tomando como primeira aproximação, interações apenas entre os primeiros vizinhos. [9]

Como segunda proposição, é assumido que os elementos constituintes do sistema ocupam apenas alguns níveis distintos de energia devidos a orientação dos mesmo e que a energia interna é a mínima quando os elementos estão alinhados na mesma direção. Excitações térmicas seriam responsáveis pela ocupação de outros níveis de energia. [9]

As proposições feitas para o modelo, quando traduzidas matematicamente, levam à Hamiltoniana de Ising, desenvolvida adiante.

### 6.2 O Modelo

Considere os espaços  $\mathbb{R}^d$  e  $\mathbb{Z}^d$ . Tomando inicialmente um hipercubo  $\Omega \in \mathbb{Z}^d$ ,

$$\Omega = [-a, a] \times \dots \times [-a, a] \cap \mathbb{Z}^d, \quad a > 0$$

$\Omega$  é uma estrutura a qual é chamada *rede*. Cada elemento da rede é denominado *sítio*. O *sítio*  $i$  é descrito pelo vetor  $i = (i_1, \dots, i_d)$ . O número de *sítios* da rede é o cardinal  $card(\Omega) = |\Omega|$  para os quais são definidas variáveis  $\sigma_i$ , que tomam certos valores, a depender da aplicação do modelo [4, 11]. Em particular, para  $d = 2$ , temos uma rede quadrada.

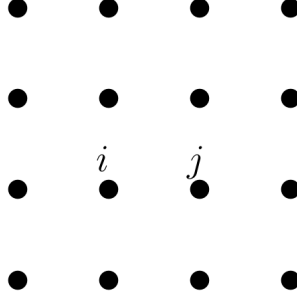


Figura 6: Rede Quadrada ( $d = 2$ )

Cada sítio  $i$  da rede pode ser associado a uma variável aleatória  $\sigma_i$ . Para sistemas magnéticos,  $\sigma_i$  representa o *spin*, tomando valores tais que  $\sigma_i \in \{-1, +1\}$ , representando os estados em que o spin aponta para cima ou para baixo. [4, 22]

Entre dois sítios  $i$  e  $j$ , a interação entre os mesmo é assumida como sendo da forma [22]

$$V_{ij} \propto \sigma_i \sigma_j \Leftrightarrow V_{ij} = J_{ij} \sigma_i \sigma_j$$

Das hipóteses de Ising,

$$J_{ij} \sim \|i - j\|^{-\alpha}, \quad \alpha > 0,$$

onde definimos a métrica  $d_m(x, y) = \|x - y\|$  da seguinte forma:

$$\|\cdot\|: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$$

$$x \mapsto \max\{|x_k|, \quad k = 1, \dots, d\}$$

Chamamos de *uma configuração de spins*  $\{\sigma\}$  a função  $\{\sigma\}: \Omega \rightarrow \{-1, +1\}^{|\Omega|}$ . Com isso, para uma dada configuração, a energia do sistema pode ser escrita como [22]

$$H(\{\sigma\}) = H(\sigma) = - \sum_{\langle i, j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j = - \sum_{\substack{\langle i, j \rangle: \\ \|i - j\| = 1}} J_{ij} \sigma_i \sigma_j, \quad (49)$$

onde  $\langle i, j \rangle$  significa os  $j$  primeiros vizinhos de  $i$ , definido na soma seguinte como sendo os pares  $(i, j)$  tal que  $d_m(i, j) = 1$ . Em outras palavras, estamos tomando a aproximação

$$J_{ij} = 0, \text{ se } \|i - j\| > 1,$$

como dito ao final da segunda proposição do modelo.

Claramente, a Hamiltoniana definida em (49) é uma Hamiltoniana clássica, visto que as variáveis são variáveis clássicas; as variáveis  $\sigma_i$  são números que comutam entre si. Futuramente, mostraremos que, identificando uma das  $d$  dimensões do sistema como sendo a dimensão temporal, sendo  $\delta\tau$  a distância entre os sítios no eixo temporal, no limite  $\delta t \rightarrow 0$ , a Hamiltoniana acima pode ser mapeada em uma Hamiltoniana Quântica de dimensão  $d - 1$ . [22, 40, 46]

Voltando à Hamiltoniana clássica, se sobre o sistema age um campo magnético externo  $\vec{B} = h\hat{u}$ , pela relação para a energia de um dipolo magnético em um campo,  $E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$ , a Hamiltonia se torna então

$$H = - \sum_{\langle i, j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \quad (50)$$

Comumente, para certos sistemas, toma-se a interação entre os vizinhos como sendo igual. A constante de acoplamento entre os sítios  $i, j$  passa a ser apenas uma constante para todos os pares de sítios. Com isso, a Hamiltoniana pode ser escrita da seguinte forma

$$H = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \quad (51)$$



Por fim, devemos considerar a fronteira do sistema e inserir condições de contorno. No entanto, pode-se mostrar que no limite termodinâmico, o Modelo de Ising é independente das condições de contorno [11]. Com isso, somos livres para escolher as condições de contorno que sejam convenientes, tomando o limite termodinâmico.

As condições de contorno tomadas são chamadas *condições periódicas de contorno*. Basicamente, para todo  $i \in \Omega$ ,  $i = (i_1, \dots, i_d)$ , com  $i_j = 1, \dots, N_j$ , impomos que [19]

$$\sigma(i_1, \dots, i_k = N_k + 1, \dots, i_d) = \sigma(i_1, \dots, i_k = 1, \dots, i_d), \quad (52)$$

para todo  $k = 1, \dots, d$ .

Como exemplo, para o caso unidimensional,  $\sigma_i$ ,  $i = 1, \dots, N$ , as condições de contorno ficam

$$\sigma_{N+1} = \sigma_1 \quad (53)$$

Para duas dimensões,  $\sigma_{i,j} = \sigma_i^j$ , com  $i = 1, \dots, N_1$  e  $j = 1, \dots, N_2$

$$\sigma_{N_1+1}^j = \sigma_1^j, \quad \forall j \quad (54)$$

$$\sigma_i^{N_2+1} = \sigma_i^1, \quad \forall i \quad (55)$$

Em outras palavras, em uma dimensão, estamos tomando uma linha e transformando em um círculo. Para duas dimensões, podemos imaginar uma folha enrolada em uma direção formando uma espécie de cilindro e depois, juntando as extremidades livre, conferindo a topologia de um toro [4]. As figuras abaixo traduzem por meio de uma imagem a explicação anterior.

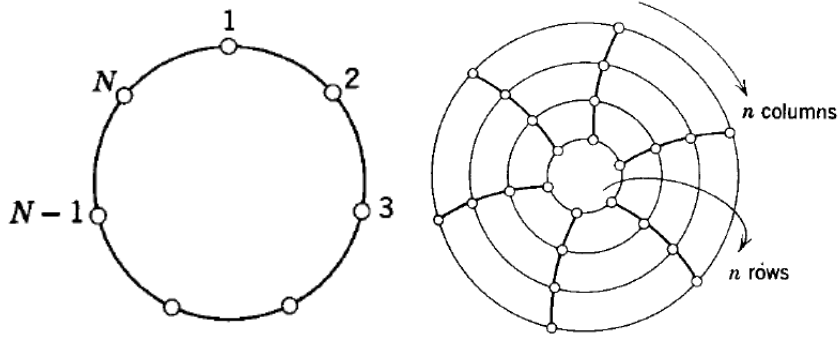


Figura 7: Condições de contorno periódicas para uma e duas dimensões

Adiante, utilizaremos as condições periódicas de contorno para buscar a função de partição, partindo da Hamiltoniana de Ising. Por meio dessa, poderemos derivar as funções termodinâmicas e assim procurar as singularidades propostas na seção anterior.

### 6.3 O Modelo 1D

Em sua tese de doutorado, Ernst Ising utilizou-se de um método interessante para encontrar a função de partição para o modelo unidimensional. Tal método é chamado *o método da matriz de transferência* [4, 19, 22, 37]. Consiste em relacionar os componentes do cálculo da função de partição com elementos de uma matriz. Partiremos desta ideia.

Em uma dimensão, a Hamiltoniana pode ser escrita na seguinte forma

$$H(\sigma) = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} - h \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (56)$$

A função de partição é escrita como

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta H(\{\sigma\})} \quad (57)$$

onde a soma é feita sobre todas as possíveis configurações do  $\{\sigma\}$  sistema.

É conveniente absorver o fator  $\beta$  dentro da Hamiltoniana [22], faremos isso definindo  $\beta = 1$  e, ao final, reescrevendo  $\beta$  multiplicando os termos  $J$  e  $h$ . Escrevendo  $e^{-H}$  na forma

$$e^{-H} = \prod_{i=1}^N e^{J\sigma_i\sigma_{i+1}} e^{h\sigma_i} \quad (58)$$

então

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \left[ \prod_{i=1}^N \left( e^{J\sigma_i\sigma_{i+1}} e^{h\sigma_i} \right) \right] \quad (59)$$

Definimos [19]

$$T(\sigma_i, \sigma_{i+1}) = \langle \sigma_i | \hat{T} | \sigma_{i+1} \rangle \stackrel{\text{def}}{=} e^{J\sigma_i\sigma_{i+1}} e^{\frac{h}{2}(\sigma_i + \sigma_{i+1})} \quad (60)$$

com isso,

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \left( \prod_{i=1}^N T(\sigma_i, \sigma_{i+1}) \right) \quad (61)$$

$$= \sum_{\sigma_1=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \left( \langle \sigma_1 | \hat{T} | \sigma_2 \rangle \langle \sigma_2 | \hat{T} | \sigma_3 \rangle \dots \langle \sigma_{N-1} | \hat{T} | \sigma_N \rangle \langle \sigma_N | \hat{T} | \sigma_{N+1} \rangle \right) \quad (62)$$

A relação acima vale, dada a forma como definimos  $T(\sigma_i, \sigma_{i+1})$ , por conta das condições periódicas de contorno. A definição da equação (60) foi feita por conveniência futura.

As somas  $\sum_{\sigma_k=\pm 1}$ , juntamente com os termos  $|\sigma_k\rangle \langle \sigma_k|$ , formam a relação de identidade da Álgebra Linear [39]. Com isso, podemos eliminar os termos entre  $\sigma_1$  e  $\sigma_{N+1}(=\sigma_1)$ .

$$Z = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \langle \sigma_1 | \hat{T}^N | \sigma_1 \rangle \quad (63)$$

$$\therefore Z_N = \text{Tr}(\hat{T}^N) \quad (64)$$

Da equação acima, podemos ver a matriz  $\hat{T}$  como uma matriz  $2 \times 2$  da forma

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} T(+1, +1) & T(+1, -1) \\ T(-1, +1) & T(-1, -1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{J+h} & e^{-J} \\ e^{-J} & e^{J-h} \end{pmatrix} \quad (65)$$

As somas sobre os  $\sigma_i$ , para  $i \neq 1$ , podem ser vistas como multiplicações entre diversas matrizes  $\hat{T}$ , levando ao resultando (64) [19]. Como a matriz  $\hat{T}$  acima é hermitiana, obviamente

$$[\hat{T}, \hat{T}^\dagger] = 0 \quad (66)$$

o que nos permite afirmar, pelo *Teorema Espectral*, que  $\hat{T}$  é diagonalizável [26]. Com isso, podemos definir uma base  $\mathcal{B} = \{|\lambda_i\rangle\}$ , cujo autovalor associado a  $|\lambda_i\rangle$  é  $\lambda_i$  e calcular a função de partição como

$$Z = \text{Tr}(\hat{T}^N) = \lambda_1^N + \lambda_2^N \quad (67)$$

Sem perda de generalidade, podemos supor  $\lambda_1 > \lambda_2$ , pois  $\hat{T}$  é uma matriz de entradas positivas. Com isso, o limite termodinâmico se torna

$$f = -kT \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln [\lambda_1^N (1 + (\lambda_2/\lambda_1)^N)] \quad (68)$$

$$= -kT \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \left[ N \ln \lambda_1 + \ln (\lambda_2/\lambda_1)^N \right] \quad (69)$$

$$= -kT \ln \lambda_1 \quad (70)$$

A partir das equações acima, podemos tomar dois caminhos diferentes para o cálculo de  $f$ : (1) determinar a forma exata de  $Z$ , ou (2) encontrar o maior autovalor de  $\hat{T}$ . Podemos determinar a forma de  $Z$  encontrando todos os autovalores da matriz de transferência ou encontrando a forma explícita de  $\hat{T}^N$ . Comumente o segundo meio acaba sendo mais simples.

Seguindo o segundo método, comecemos por determinar o polinômio característico  $p(\lambda)$ .

Como  $\hat{T}$  é uma matriz  $2 \times 2$ , vale o seguinte [4]

$$p(\lambda) = \lambda^2 - \text{Tr}(\hat{T})\lambda + \det(\hat{T}) \quad (71)$$

De (65), é fácil calcular

$$\text{Tr}(\hat{T}) = e^J (e^h + e^{-h}) = 2e^J \cosh(h) \quad (72)$$

$$\det(\hat{T}) = e^{2J} - e^{-2J} = 2 \sinh(2J) \quad (73)$$

com isso,  $p(\lambda) = 0$  se, e somente se,

$$\lambda_{\pm} = \frac{2e^J \cosh(h) \pm \sqrt{4e^{2J} \cosh^2(h) - 8 \sinh(2J)}}{2} \quad (74)$$

$$= e^J \cosh(h) \pm \sqrt{e^{2J} \cosh^2(h) - 2 \sinh(2J)} \quad (75)$$

$$= e^J \cosh(h) \pm \sqrt{e^{2J} \sinh^2(h) + e^{-2J}} \quad (76)$$

Pro fim, como  $\lambda_1 = \lambda_+$ , redefinindo  $\beta$ , a densidade de energia livre, no limite termodinâmico, tende para

$$f = -kT \ln \left[ e^{\beta J} \cosh(\beta h) + \sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta J}} \right] \quad (77)$$

Da fórmula (23), podemos escrever [22]

$$\mathbf{m} = \frac{\partial f}{\partial h} \quad (78)$$

onde  $\mathbf{m}$  representa a magnetização média por sítio. Então, (77) dá

$$\mathbf{m} = \frac{e^{\beta J} \sinh(\beta h)}{\sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta J}}} \quad (79)$$

O numerador da função acima é analítico em todo seu domínio para  $\beta$ . Como o argumento da raiz do denominador é sempre positivo, para todo  $\beta$ , para temperaturas finitas, não há uma singularidade.

A conclusão final é de que não há transição de fase para o Modelo Clássico de Ising em uma dimensão. [4, 19]

## 6.4 O Surgimento de Transições de Fase Para o Modelo 2D

Até a década de 30, acreditava-se que o modelo em duas ou três dimensões poderia ser reduzido ao problema unidimensional, culminando no mesmo resultado encontrado por Ising; não haveria transição de fase no Modelo de Ising. No entanto, no ano de 1936, Peierls provou que, à temperatura suficientemente baixa, o modelo de Ising em duas dimensões apresentava uma transição de fase [36]. Com isso, começou-se uma busca pela solução do modelo em duas dimensões. A seguir, apresentaremos uma prova seguindo a ideia de Peierls.

Dada uma configuração  $\{\sigma\}$  de spins, a probabilidade de tal configuração é

$$P(\{\sigma\}) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H(\{\sigma\})}, \quad Z = \sum_{\{\sigma\} \in \Lambda'} e^{-\beta H(\{\sigma\})}, \quad (80)$$

$\Lambda'$  é o conjunto de todas as configurações de spins.

Se queremos que nosso sistema tenha uma magnetização resultante não nula, um meio de se fazer tal imposição é escolher as condições de contorno tais que os spins da fronteira estejam todos em uma determinada direção, digamos, sem perda de generalidade,

$$\sigma_i = +1, \quad \forall i \in \partial\Omega^1$$

Por fim, tomaremos o limite  $N \rightarrow \infty$ , onde teremos a independência do modelo para com as condições de contorno [11]. Chamemos  $\Lambda$  o conjunto de todas as configurações  $\{\sigma\}$  com tal condição de contorno.

Seja  $\sigma_o$  um domínio magnético no sítio "o", longe do bordo do sistema,  $(d(o, j) \gg 1)$ , para todo  $j \in \partial\Omega$ , a probabilidade de que  $\sigma_o$  assuma o valor  $-1$  é

$$P(\sigma_o = -1) = \frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma'\} \in \Lambda_o} e^{-\beta H(\{\sigma'\})}, \quad (81)$$

com  $\Lambda_o \subsetneq \Lambda$  sendo o conjunto das configurações de spins tal que  $\sigma_o = -1$ .

Seja, agora,  $-E$  a energia dos spins todos alinhados ( $\sigma_i = +1$ , para todo  $i$ ), quando um ou mais spins passam a assumir o valor de  $-1$ , há um aumento na energia de  $\sum_{\mathfrak{s}} J L(\mathfrak{s})$ , onde  $\mathfrak{s}$  é o contorno cercado cada ilha de spins negativos em um "mar" de spins positivos e  $L(\mathfrak{s})$  é o perímetro dessa ilha<sup>2</sup>. A figura 8 representa as ideias de ilha e contorno.

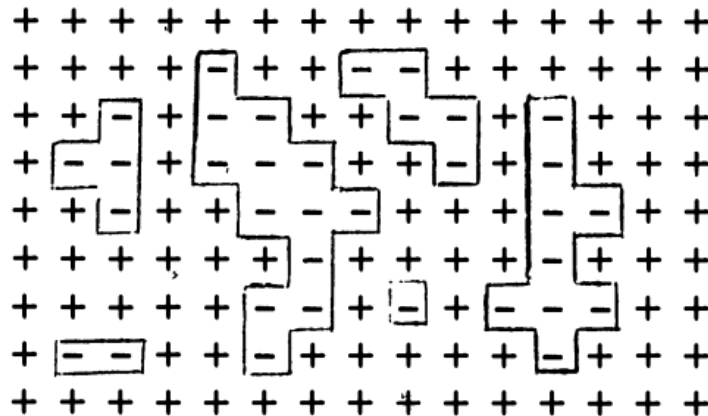


Figura 8: Ilhas de spins negativas rodeadas por spins positivos

<sup>1</sup> $\partial\Omega$  representa o bordo do sistema  $\Omega$

<sup>2</sup>Uma observação importante é que cada aresta é tomada como tendo uma unidade de comprimento e todas as arestas têm o mesmo tamanho.

Seja  $\Lambda_{\mathbf{p}}$  o conjunto de configurações de spins tal que  $\mathbf{p}$  é o contorno da ilha que cerca  $\sigma_o$ , é conveniente escrever a probabilidade  $P(\sigma_o = -1)$  como

$$P(\sigma_o = -1) = \sum_{\mathbf{p} \in \mathfrak{I}} P(\Lambda_{\mathbf{p}}) \quad (82)$$

$\mathfrak{I}$  é o conjunto de todos os contorno em torno de  $\sigma_o$ . No entanto, podemos escrever  $P(\Lambda_{\mathbf{p}})$  como

$$P(\Lambda_{\mathbf{p}}) = \frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma\} \in \Lambda_{\mathbf{p}}} e^{-\beta H(\{\sigma\})} = \frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma\} \in \Lambda_{\mathbf{p}}} e^{-\beta J L(\mathbf{p})} \left[ \exp \left( \beta J \sum_{\langle i,j \rangle \notin \mathbf{p}} \sigma_i \sigma_j \right) \right] \quad (83)$$

$$P(\Lambda_{\mathbf{p}}) = \frac{e^{-\beta J L(\mathbf{p})}}{Z} \sum_{\{\sigma\} \in \Lambda_{\mathbf{p}}} \exp \left( \beta J \sum_{\langle i,j \rangle \notin \mathbf{p}} \sigma_i \sigma_j \right) \quad (84)$$

Definindo a transformação [4]

$$\begin{aligned} T: \Lambda_{\mathbf{p}} &\longrightarrow \Lambda'_{\mathbf{p}} \\ \{\sigma\} &\longmapsto \{\sigma'\} \end{aligned}$$

como sendo a transformação que faz a troca de todos os spins internos à fronteira  $\mathbf{p}$  e mantém os spins externos inalterados é fácil ver que a transformação é bijetiva. Podemos escrever então

$$\sum_{\langle i,j \rangle \notin \mathbf{p}} \sigma_i \sigma_j = \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma'_i \sigma'_j - L(\mathbf{p}) \quad (85)$$

O que implica em

$$\sum_{\langle i,j \rangle \notin \mathbf{p}} \sigma_i \sigma_j < \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma'_i \sigma'_j \quad (86)$$

logo

$$P(\Lambda_{\mathbf{p}}) < \frac{e^{-\beta J L(\mathbf{p})}}{Z} \sum_{\{\sigma'\} \in \Lambda'_{\mathbf{p}}} \exp \left( \beta J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma'_i \sigma'_j \right) = \frac{e^{-\beta J L(\mathbf{p})}}{Z} \sum_{\{\sigma'\} \in \Lambda'_{\mathbf{p}}} e^{-\beta H(\{\sigma'\})} \quad (87)$$

A troca da soma sobre as configurações  $\{\sigma\}$  pertencentes a  $\Lambda_{\mathbf{p}}$  fora trocada pela soma sobre  $\{\sigma'\} \in \Lambda'_{\mathbf{p}}$  por conta da bijetividade de  $T$  definida na página anterior.

Como

$$\sum_{\{\sigma'\} \in \Lambda'_{\mathbf{p}}} e^{-\beta H(\{\sigma'\})} < \sum_{\{\sigma\} \in \Lambda} e^{-\beta H(\{\sigma\})} \quad (88)$$

podemos escrever

$$P(\Lambda_{\mathbf{p}}) < \frac{e^{-\beta J L(\mathbf{p})}}{Z} \sum_{\{\sigma\} \in \Lambda} e^{-\beta H(\{\sigma\})} = e^{-\beta J L(\mathbf{p})} \quad (89)$$

Com isso

$$P(\sigma_o = 1) < \sum_{\mathbf{p} \in \mathfrak{I}} e^{-\beta J L(\mathbf{p})} = \sum_{L=4}^{\infty} n(L) e^{-\beta J L} \quad (90)$$

com  $n(L)$  representando o número de contornos distintos possíveis de perímetro  $L$  rodeando o sítio  $o$ . Claramente  $n(L)$ , ou uma aproximação para, deve ser tal que garanta a convergência da série acima.

Para trabalharmos em cima da função  $n(L)$ , consideremos uma ilha de perímetro  $L$ . Dada uma aresta inicial de um contorno, para cada nova aresta a ser criada, há 3 possíveis direções a serem escolhidas. Para a aresta inicial há 4. Com isso, dado uma aresta de partida, há  $4 \cdot 3^{L-1}$  maneiras de se desenvolver um caminho aleatório para se criar um contorno de perímetro  $L$ . Há

$L$  possibilidades de arestas iniciais. Inicialmente, pode-se pensar que há então  $4 \cdot 3^{L-1} L$  formas de se criar um caminho de perímetro  $L$ , contudo, estamos contando cada caminho duas vezes. Dado um caminho específico, escolhendo uma aresta qualquer inicial, há duas possibilidades de escolha da segunda aresta para se formar o mesmo caminho. Com isso

$$n(l) = \frac{4 \cdot 3^{L-1} L}{2} = \frac{2}{3} L 3^L \quad (91)$$

Por meio de (91), podemos escrever

$$P(\sigma_o = -1) < \sum_{L=4}^{\infty} \frac{2}{3} L 3^L e^{-\beta J L} < \frac{2}{3} \sum_{L=1}^{\infty} L (3e^{-\beta J})^L \quad (92)$$

A série

$$\sum_{n=1}^{\infty} n x^n = x + 2x^2 + 3x^3 + \dots$$

pode ser interpretada como a derivada de uma série começando com  $n = 0$  multiplicada por uma função, para fins de uma possível correção. Podemos escrever

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{\infty} n x^n &= \sum_{n=1}^{\infty} x \left( \frac{d}{dx} x^n \right) = x \sum_{n=1}^{\infty} n x^{n-1} \\ &= x \left[ \frac{d}{dx} \left( \sum_{n=0}^{\infty} x^n \right) \right] \\ &= x(1 + x + x^2 + \dots) \end{aligned}$$

A série  $1 + x + x^2 + \dots$  converge se  $|x| < 1$ . A série  $\sum x^n$  é a chamada *série geométrica* e sabemos que  $\sum x^n = 1/(1-x)$ . Portanto

$$\sum_{n=0}^{\infty} x^n = \frac{1}{1-x} \Rightarrow x \left[ \frac{d}{dx} \left( \sum_{n=0}^{\infty} x^n \right) \right] = \sum_{n=1}^{\infty} n x^n = \frac{x}{(1-x)^2} \quad (93)$$

Identificando  $x = 3e^{-\beta J}$ , temos finalmente

$$P(\sigma_o = -1) < \frac{2}{3} \left[ \frac{3e^{-\beta J}}{(1 - 3e^{-\beta J})^2} \right], \quad \beta J > \ln 3 \quad (94)$$

Para  $\beta$  suficientemente grande, a convergência é garantida, a depender também da constante de acoplamento  $J$ . Como  $\beta$  cresce hiperbolicamente quando  $T \rightarrow 0$ , a convergência deve valer para algum valor de  $T$  suficientemente baixo. Nessas condições, podemos tomar a aproximação  $1 - 3e^{-\beta J} \approx 1 \Leftrightarrow 3e^{-\beta J} \approx 0$ . Com isso  $P(\sigma_o = -1) \approx 0$ .

No limite termodinâmico, o modelo se torna independente das condições de contorno impostas de início. Outro ponto importante é que, no limite, qualquer sítio poderia ser tomado como o sítio "o". Logo, a conclusão é de que, para duas dimensões, existe uma temperatura de transição de fase limitada por  $\beta_c J > \ln 3$ .

## 6.5 Modelo 2D

Da forma geral da Hamiltoniana, seguindo a ideia que fizemos para o caso unidimensional, podemos decompor a soma em termos de uma soma na direção vertical e outra na direção horizontal.

$$H_{2D} = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,i+1}^{j,j} \sigma_i^j \sigma_{i+1}^j + J_{i,i}^{j,j+1} \sigma_i^j \sigma_i^{j+1} \quad (95)$$

Podemos tomar um modelo isotrópico fazendo  $J_{i,i+1}^{j,j} = J_{i,i}^{j,j+1} = J$ . No entanto, um modelo anisotrópico definindo  $J_{i,i+1}^{j,j} = J_h$  e  $J_{i,i}^{j,j+1} = J_v$  é conveniente para certas situações. Em 6.5.1, mostramos uma relação entre  $\beta J_h$  e  $\beta J_v$  que permitiu o cálculo da temperatura crítica três anos antes da publicação da solução exata de L. Onsager [16]. Uma outra utilidade em se considerar tal anisotropia se mostrará quando fizermos o mapeamento do modelo clássico em duas dimensões para o modelo quântico unidimensional.

A solução de Onsager fora feita para o modelo de Ising numa rede quadrada. Há porém, outros tipos de modelo como a rede triangular-estrela, modelo triangular, vértices, modelo gás-rede, dentre outros que podem ser mapeados no modelo bidimensional e podemos aplicar a solução de Onsager. [42]

A seguir, desenvolveremos a simetria de auto-dualidade do modelo de Ising encontrada por Kramers e Wannier [16] e, após isso, a solução de Onsager, na formulação dada por B. Kaufman [21].

### 6.5.1 Auto-dualidade do Modelo de Ising Clássico

Kramers e Wannier, em 1941, derivaram uma simetria para o modelo de Ising [16]. Tal simetria veio a receber o nome de *dualidade de Kramers-Wannier*. Com isso, supondo que o modelo apresentava uma única temperatura de transição de fase, os autores conseguiram encontrar o ponto crítico dado pela solução de Onsager, três anos antes da publicação da mesma. Aplicaremos a auto-dualidade novamente quando fizermos o mapeamento do modelo clássico bidimensional para o modelo quântico.

Por meio da função de partição do modelo de Ising, podemos estabelecer um mapeamento entre a expansão de alta e baixa temperatura e assim determinar uma simetria entre o sistema. Utilizaremos a dualidade do modelo para derivar a temperatura crítica, com base na suposição de a mesma ser única e estabelecer um diagrama de fases para o modelo.

Começamos convertendo a função de partição em um polinômio de duas variáveis com coeficientes inteiros fazendo uso da identidade

$$e^{\pm x} = \cosh x \pm \sinh x \quad (96)$$

Uma vez que  $\sigma_i$  toma valores no conjunto  $\{-1, +1\}$ , temos [4]

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp \left[ \sum_{\langle i,j \rangle} K \sigma_i \sigma_j + \sum_i g \sigma_i \right] = \sum_{\{\sigma\}} \left[ \left( \prod_{\langle i,j \rangle} e^{K \sigma_i \sigma_j} \right) \left( \prod_i e^{g \sigma_i} \right) \right] \quad (97)$$

$$= \sum_{\{\sigma\}} \left[ \left( \prod_{\langle i,j \rangle} \cosh(K) (1 + \sigma_i \sigma_j U) \right) \left( \prod_i \cosh(g) (1 + \sigma_i V) \right) \right] \quad (98)$$

$$= \cosh^a(K) \cosh^N(g) \sum_{\{\sigma\}} \left( \prod_{\langle i,j \rangle} 1 + \sigma_i \sigma_j U \right) \left( \prod_i 1 + \sigma_i V \right) \quad (99)$$

com

$$U = \tanh K, \quad V = \tanh g, \quad K = \beta J, \quad g = \beta h$$

A primeira produtória é feita sobre os pares de primeiros vizinhos, ou seja, o número de produtos existentes é igual ao número de arestas ligando dois sítios da rede. A segunda produtória que aparece é feita sobre todos os sítios de tal forma que temos  $N$  produtos. Essa é a interpretação dos expoentes  $a$  e  $N$  multiplicando os cossenos hiperbólicos em (99).

Caso utilizemos as condições de contorno toroidais (periódicas), [4]

$$a = d.N,$$

com  $d$  sendo a dimensão do modelo. Por conveniências futuras, multiplicamos a dividimos a função de partição por  $2^N$  e definindo a função de partição modificada  $Z'$  como

$$Z' = \frac{Z}{(2 \cosh^d(K) \cosh(g))^N} = \frac{1}{2^N} \sum_{\{\sigma\}} \left( \prod_{\langle i,j \rangle} 1 + \sigma_i \sigma_j U \right) \left( \prod_i 1 + \sigma_i V \right) \quad (100)$$

Para as produtória internas à soma sobre as configurações de spins, podemos reescrevê-las fazendo uso do fato de que  $\sigma_i^2 = 1$  na seguinte forma [4]

$$\left( \prod_{\langle i,j \rangle} 1 + \sigma_i \sigma_j U \right) \left( \prod_i 1 + \sigma_i V \right) = P(U, V) + \sigma_1 P_2(U, V, \sigma_2, \dots, \sigma_N) \\ + \sigma_2 P_2(U, V, \sigma_3, \dots, \sigma_N) + \dots + \sigma_N P_N(U, V)$$

Os termos  $\sigma_i P_i$  se devem ao fator  $\sigma_i$  na segunda produtória. Os termos para os quais  $\sigma_i = \sigma_j$  foram os que fizemos uso de  $\sigma_i^2 = 1$  e englobamos os mesmos dentro do polinômio maior. No entanto, quando somarmos sobre todas as configurações, a forma acima se torna mais simples pois cada termos  $\sigma_i P_i$  desaparece.

$$\sum_{\{\sigma\}} \sigma_k P_k(U, V, \dots) = \left( \sum_{\sigma_k = \pm 1} \sigma_k \right) \left( \sum_{\{\sigma\}} P_k(U, V, \dots) \right) = 0 \quad (101)$$

portanto

$$Z' = \frac{1}{2^N} \sum_{\{\sigma\}} P(U, V) = P(U, V) \quad (102)$$

Tomando o caso  $h = 0$  ( $V = 0$ ), a expansão se dá apenas para o termo  $\prod_{\langle i,j \rangle} 1 + \sigma_i \sigma_j U$  onde, pelo mesmo argumento da equação (101), os termos de variáveis  $\sigma$  livre se cancelarão. O produto sobre os primeiros vizinhos  $\langle i, j \rangle$  pode ser pensado no produto entre as arestas da rede. Logo, apenas se as arestas formam um caminho fechado, elas irão contribuir para a soma [22]. Com isso, podemos escrever  $P(U, 0) = p(U)$  da seguinte forma

$$p(U) = 1 + c_d(4)U^4 + c_d(6)U^6 + c_d(8)U^8 + \dots + c_d(dN)U^{dN} \quad (103)$$

O polinômio inicia-se a partir da quarta potência, desconsiderando o termo de grau zero, pois é o mínimo de arestas de um caminho fechado na rede. Os índices  $d$  representam a dimensão. Podemos, seguindo a ideia anterior de caminhos fechados, interpretar o significado dos coeficientes  $c_d(k)$  como o número de subgrafos (caminhos fechados) da rede, não orientados, com  $k$  arestas [4]. Analisemos o caso  $d = 2$  para os coeficientes  $c(4)$  e  $c(6)$  como exemplo.

$c_2(4)$ : Um subgrafo fechado de quatro arestas é simplesmente um quadrado, como mostrado na figura abaixo. Podemos rotular cada quadrado pelo vértice inferior esquerdo. É fácil ver que para

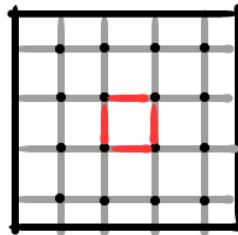


Figura 9: Subgrafo fechado de quadro arestas

cada vértice, um único quadrado pode ser associado ao mesmo. Ainda utilizando as condições toroidais de contorno, é fácil ver que  $c_2(4) = N$ .



$c_2(6)$ : um subgrafo fechado com seis vértices em duas dimensões é um retângulo  $2 \times 1$ , como mostra a figura abaixo. Da figura acima, escolhendo o vértice inferior esquerdo do retângulo,

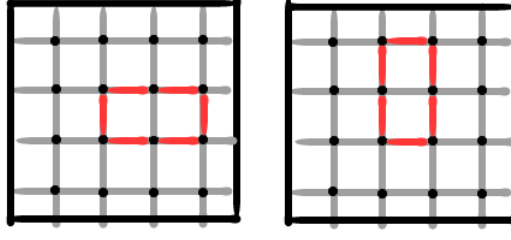


Figura 10: Subgrafos fechados de seis arestas

podemos rotulá-los. Para cada sítio há duas possíveis orientações dos retângulo de tal forma que  $c_2(6) = 2N$ .

Os casos seguintes seguem a mesma ideia. Podemos escrever  $p(U)$  como

$$p(U) = 1 + N.U^4 + 2N.U^6 + \frac{N(N+9)}{2}.U^8 + \dots \quad (104)$$

De outra forma, podemos escrever  $p(U) = p(\tanh(K)) \stackrel{\text{def}}{=} \wp(K)$  mais explicitamente

$$\wp(K) = 1 + N.\tanh(K) + 2N.\tanh(K)^2 + \frac{N(N+9)}{2}.\tanh(K)^4 + \dots \quad (105)$$

A série (105) acima é chamada *série de altas temperaturas para  $Z'$*  [16, 22]. Podemos fazer uma expansão para a série de baixas temperaturas. À baixas temperaturas os spins estão alinhados; uma redução na energia interna contribui mais do que um aumento na entropia para a redução da energia livre. Então, a expansão para baixas temperaturas se dá expandindo pelo número de spins desalinhados. Se um spin está desalinhado com relação ao todo, quatro arestas são quebradas. Se dois spins estão desalinhados, seis arestas são quebradas, ou oito, caso os dois sejam vizinhos e assim por diante [22]. Com isso, a expansão para baixas temperaturas toma a forma

$$\wp_{\text{baixas temperaturas}} = 1 + N.e^{-8K} + 2N.e^{-12K} + \frac{N(N+9)}{2}.e^{-16K} + \dots \quad (106)$$

Imaginando-se que o centro das arestas quebradas pelos spins desalinhados são conectadas formando subgrafos, é simples ver a correspondência entre a série de baixas e de altas temperaturas. A figura abaixo mostra a ideia acima. Uma rede de Ising é superposta por outra, o que seria a ideia de ligar o centro das arestas quebradas formando subgrafos. A ligação das arestas quebradas à baixas temperaturas é exatamente como se o modelo dual fosse um modelo de altas temperaturas. Essa é a dualidade do modelo de Ising.

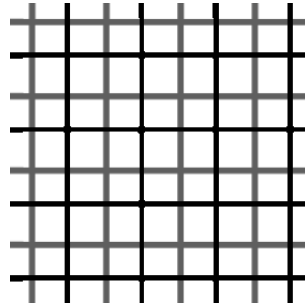


Figura 11: Representação da auto-dualidade do Modelo de Ising

Definindo-se o acoplamento  $K^*$  tal que

$$\tanh K = \exp(2K^*), \quad (107)$$

definimos o mapeamento da série de baixas temperaturas para a série de altas temperaturas.

Comparando as duas funções de partição, para altas e baixas temperaturas, chegamos a relação [16, 22]

$$\frac{Z(K^*)}{(e^{2K^*})^N} = \frac{Z(K)}{(2 \cosh^2(K))^N} \quad (108)$$

A equação (107) pode ser reescrita na forma

$$\sinh(2K) \sinh(2K^*) = 1, \quad (109)$$

permitindo reescrever (108) em uma forma mais simétrica

$$\frac{Z(K^*)}{\sinh^{N/2}(2K^*)} = \frac{Z(K)}{\sinh^{N/2}(2K)} \quad (110)$$

A interpretação da dualidade é que a redução da temperatura em uma rede equivale ao aumento na outra rede. Então, se o modelo tem uma única temperatura crítica, ela deve ocorrer quando  $K = K^*$ , pois é quando as duas redes se encontram [16]. Com isso

$$\sinh^2 K_c = 1 \Leftrightarrow 2K_c = \log(\sqrt{2} + 1) \quad (111)$$

A equação (109) pode ser utilizada como uma equação para determinar o diagrama de fase do modelo de Ising anisotrópico com acoplamentos  $K$  e  $K^*$ . A figura abaixo mostra a curva descrita por (109) no plano  $K \times K^*$ , com  $K$  sendo o eixo vertical e  $K^*$  o eixo horizontal. Acima da curva

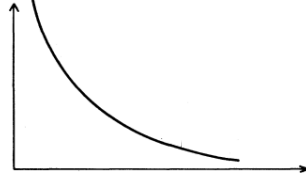


Figura 12: Diagrama de fases

crítica do gráfico, o sistema se encontraria ordenado (baixas temperaturas), enquanto que abaixo da curva o sistema se encontraria desordenado.

O resultado encontrado acima, em especial pela equação (109), será de utilidade quando fizermos o mapeamos clássico-quântico para o modelo de Ising bidimensional clássico.

Por agora, tendo provado a existência de transições de fase para o modelo bidimensional e determinado um valor para a temperatura crítica, supondo que a mesma seja única, passamos a solução exata para a função de partição do modelo clássico em duas dimensões.

### 6.5.2 A Solução para Duas Dimensões

Para o modelo 2-dimensional, a Hamiltoniana de Ising pode ser escrita como

$$H_{\{\sigma\}} = \sum_{i,j} \left( J_h \sigma_i^j \sigma_{i+1}^j + J_v \sigma_i^j \sigma_i^{j+1} \right) - h \sum_{i,j} \sigma_i^j,$$

onde introduzimos uma anisotropia diferindo a interação vertical da horizontal.

Seja

$$\mu_j = (\sigma_1^j, \dots, \sigma_n^j)$$

o vetor que representa os spins da linha  $j$ , é fácil ver que uma configuração de linhas é igual a uma configuração de spins [19]

$$\{\sigma\} = \{\mu\} = \{\mu_1, \dots, \mu_n\}$$

Seja, agora,  $E(\mu_j, \mu_k)$  a energia de interação entre as linhas  $j$  e  $k$  e seja  $E(\mu_j)$  a energia de interação dos spins dentro da linha  $j$  e dos mesmo com um campo magnético externo, então

$$E(\mu_j, \mu_k) = -J_v \sum_{i=1}^n \sigma_i^j \sigma_i^k$$

$$E(\mu_j) = -J_h \sum_{i=1}^n \sigma_i^j \sigma_{i+1}^j - h \sum_{i=1}^n \sigma_i^j,$$

de onde pode-se escrever a Hamiltoniana como

$$H_{\{\mu\}} = \sum_{j=1}^n [E(\mu_j, \mu_{j+1}) + E(\mu_j)]$$

A função de partição, se torna então

$$Z = \sum_{\{\mu\}} \left( \prod_{j=1}^n e^{-\beta [E(\mu_j, \mu_{j+1}) + E(\mu_j)]} \right)$$

Para determinar a função de partição, é convém utilizar a matriz  $T$  definida como [19]

$$T = (T_{jk}) = \langle \mu_j | T | \mu_k \rangle = e^{-\beta [E(\mu_j, \mu_k) + E(\mu_j)]}$$

Com isso, a função de partição pode ser escrita como

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\{\mu\}} \left( \prod_j \langle \mu_j | T | \mu_{j+1} \rangle \right) = \sum_{\mu_1} \cdots \sum_{\mu_n} \langle \mu_1 | T | \mu_2 \rangle \langle \mu_2 | T | \mu_3 \rangle \cdots \langle \mu_{n-1} | T | \mu_n \rangle \langle \mu_n | T | \mu_1 \rangle \\ &= \sum_{\mu_1} \langle \mu_1 | T^n | \mu_1 \rangle = \text{Tr}(T^n) \end{aligned}$$

Seja  $\lambda_i$  um autovalor de  $T$  com autovetor associado  $|\lambda_i\rangle$ , então, na base dos autovetores  $\{|\lambda_i\rangle\}$

$$T = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_{2^n}); \quad \lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_{2^n}$$

logo

$$Z = \lambda_1^n + \dots + \lambda_{2^n}^n = \lambda_1^n \left( 1 + \sum_{i=2}^{2^n} \left( \frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^n \right)$$

o limite  $f = \lim_{n \rightarrow \infty} (\ln Z)/n$  pode ser escrito como

$$f = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\ln Z}{n} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \left( \ln \lambda_1^n + \ln \left[ 1 + \sum_{i=2}^{2^n} \left( \frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^n \right] \right) = \ln \lambda_1$$

Logo, para se determinar a energia livre,  $-kTf$ , no limite termodinâmico, basta encontrarmos o maior autovalor de  $T$ ,  $\lambda_1$ . É convêniente procurar um meio mais interessante de se escrever a matriz  $T$ , para isso introduziremos três matrizes  $T_1$ ,  $T_2$  e  $T_3$  como segue [19]

$$\langle \sigma_1^j, \dots, \sigma_n^j | T | \sigma_1^k, \dots, \sigma_n^k \rangle = \prod_{p=1}^n e^{(\beta h \sigma_p^j)} e^{(\beta J_h \sigma_p^j \sigma_{p+1}^j)} e^{(\beta J_v \sigma_p^j \sigma_p^k)} \quad (112)$$

$$\langle \sigma_1^j, \dots, \sigma_n^j | T_1 | \sigma_1^k, \dots, \sigma_n^k \rangle = \prod_{p=1}^n e^{\beta J_v \sigma_p^j \sigma_p^k} \quad (113)$$

$$\langle \sigma_1^j, \dots, \sigma_n^j | T_2 | \sigma_1^k, \dots, \sigma_n^k \rangle = \prod_{p=1}^n \delta(\sigma_p^j, \sigma_p^k) e^{\beta J_h \sigma_p^j \sigma_{p+1}^j} \quad (114)$$

$$\langle \sigma_1^j, \dots, \sigma_n^j | T_3 | \sigma_1^k, \dots, \sigma_n^k \rangle = \prod_{p=1}^n \delta(\sigma_p^j, \sigma_p^k) e^{\beta h \sigma_p^j} \quad (115)$$

$\delta(\sigma, \sigma')$  represente o delta de Kronecker. Da forma como introduzido acima, pode-se escrever

$$T = T_3 T_2 T_1$$

As matrizes  $T_1$ ,  $T_2$  e  $T_3$  podem ser convenientemente descritas em termos das matrizes e ideias discutidas no apêndice A

Da equação (2), podemos escrever

$$\langle \sigma_1^j, \dots, \sigma_n^j | T_1 | \sigma_1^k, \dots, \sigma_n^k \rangle = \prod_{p=1}^n e^{\beta J_v \sigma_p^j \sigma_p^k} = \prod_{p=1}^n \langle \sigma_p^j | A | \sigma_p^k \rangle$$

o que nos permite escrever  $T_1$  como o produto direto

$$T_1 = \underbrace{A \otimes \dots \otimes A}_{n \text{ vezes}} = A^{\otimes n}$$

Como  $\langle \sigma_p^j | A | \sigma_p^k \rangle = \langle j | A | k \rangle = e^{\beta J_v \sigma_p^j \sigma_p^k}$ , temos

$$A = \begin{bmatrix} e^{\beta J_v} & e^{-\beta J_v} \\ e^{-\beta J_v} & e^{\beta J_v} \end{bmatrix} = e^{\beta J_v} I + e^{-\beta J_v} X$$

É conveniente procurar escrever  $A$  como algo da forma  $A = z e^{\theta X}$  para determinar  $T_1$  [19, 21]. Podemos escrever então

$$A = z(\cosh \theta I + \sinh \theta X) = z \cosh \theta (I + \tanh \theta X)$$

pela fórmula acima

$$A = e^{\beta J_v} (I + e^{-2\beta J_v} X) = z \cosh \theta (I + \tanh \theta X) \Leftrightarrow \tanh \theta = e^{-2\beta J_v} \text{ e } z \cosh \theta = e^{\beta J_v}$$

como  $\tanh \theta = e^{-2\beta J_v}$ , podemos determinar  $z$

$$\begin{aligned} z &= e^{\beta J_v} \operatorname{sech} \theta = e^{\beta J_v} \sqrt{1 - \tanh^2 \theta} \\ &= e^{\beta J_v} \sqrt{1 - e^{-4\beta J_v}} = \sqrt{e^{2\beta J_v} - e^{-2\beta J_v}} \\ &= \sqrt{2 \sinh(2\beta J_v)} \end{aligned}$$

$$\therefore A = \sqrt{2 \sinh(2\beta J_v)} e^{\theta X}, \quad \tanh \theta = e^{-2\beta J_v}$$

com isso

$$T_1 = [2 \sinh(2\beta J_v)]^{n/2} \left( e^{\theta X} \right)^{\otimes n}$$

Uma relação entre os  $n$  produtos tensoriais de  $e^{\theta X}$  e as matrizes  $X_\alpha$  pode ser obtida da seguinte forma

$$\begin{aligned} e^{\theta X} \otimes \dots \otimes e^{\theta X} &= (e^{\overset{1}{\uparrow} \theta X} I I \dots I) \otimes (I e^{\overset{2}{\uparrow} \theta X} I \dots I) \otimes \dots \otimes (I \dots I e^{\overset{n}{\uparrow} \theta X}) \\ &= (e^{\overset{1}{\uparrow} \theta X} \otimes I \otimes \dots \otimes I) (I \otimes e^{\overset{2}{\uparrow} \theta X} \otimes \dots \otimes I) \dots (I \otimes \dots \otimes I \otimes e^{\overset{n}{\uparrow} \theta X}) \end{aligned}$$

Seja

$$W_\alpha = I \otimes \dots \otimes \overset{\alpha\text{-ésima posição}}{\uparrow} e^{\theta X} \otimes \dots \otimes I,$$

então

$$\left(e^{\theta X}\right)^{\otimes n} = \prod_{\alpha=1}^n W_{\alpha}$$

Podemos ainda escrever

$$\begin{aligned} W_{\alpha} &= I \otimes \dots \otimes e^{\theta X} \otimes \dots \otimes I \\ &= I \otimes \dots \otimes \left( I \cosh \theta + X \sinh \theta \right) \otimes \dots \otimes I \\ &= \left( I^{\otimes \alpha} \cosh \theta + \underbrace{I \otimes \dots \otimes I}_{\alpha-1} \otimes X \sinh \theta \right) \otimes \dots \otimes I \\ &= I^{\otimes n} \cosh \theta + X_{\alpha} \sinh \theta \\ &= e^{\theta X_{\alpha}} \\ \therefore \left(e^{\theta X}\right)^{\otimes n} &= \prod_{\alpha=1}^n e^{\theta X_{\alpha}} \end{aligned}$$

$$T_1 = \left[ 2 \sinh(2\beta J_v) \right]^{n/2} \prod_{\alpha=1}^n e^{\theta X_{\alpha}}, \quad \tanh \theta = e^{-2\beta J_v}$$

O cálculo de  $T_2$  e  $T_3$  segue a mesma ideia. Começemos por  $T_3$ .

$$\langle \sigma_1^i, \dots, \sigma_n^i | T_3 | \sigma_1^j, \dots, \sigma_n^j \rangle = \prod_{k=1}^n \delta(\sigma_k^i, \sigma_k^j) e^{\beta h \sigma_k^i} = \prod_k \langle \sigma_k^i | B | \sigma_k^j \rangle$$

com isso

$$B = \begin{bmatrix} e^{\beta h} & 0 \\ 0 & e^{-\beta h} \end{bmatrix} = e^{\beta h Z},$$

facilmente vista lembrando-se da decomposição espectral de  $Z$ . Com isso

$$V_3 = \prod_{\alpha=1}^n e^{\beta h Z_{\alpha}}$$

Podemos utilizar uma ideia similar no cálculo de  $T_2$ .

$$\langle \sigma_1^i, \dots, \sigma_n^i | T_2 | \sigma_1^j, \dots, \sigma_n^j \rangle = \prod_{k=1}^n \delta(\sigma_k^i, \sigma_k^j) e^{\beta J_h \sigma_k^i \sigma_{k+1}^i}$$

definimos uma matriz  $C$  de elementos

$$\langle \sigma_k^i, \sigma_{k+1}^i | C | \sigma_k^j, \sigma_{k+1}^j \rangle = \delta(\sigma_k^i, \sigma_k^j) e^{\beta J_h \sigma_k^i \sigma_{k+1}^i}$$

Para se determinar os elementos de  $C$ , devemos lembrar que a matriz  $C$  é determinada por 4 índices, que correspondem aos spins; cada posição diz respeito aos elementos de  $C$  aplicados àquela configuração de spins. Montemos uma matriz de posições para evitar confusão colocando as configurações de spins em cada posição. Utilizamos o vetor de estado  $|\sigma_k^i, \sigma_{k+1}^i, \sigma_k^j, \sigma_{k+1}^j\rangle$  para representar as configurações dos spins da tabela abaixo

$$Config. = \begin{bmatrix} |1, 1, 1, 1\rangle & |1, 1, 1, -1\rangle & |1, 1, -1, 1\rangle & |1, 1, -1, -1\rangle \\ |1, -1, 1, 1\rangle & |1, -1, 1, -1\rangle & |1, -1, -1, 1\rangle & |1, -1, -1, -1\rangle \\ |-1, 1, 1, 1\rangle & |-1, 1, 1, -1\rangle & |-1, 1, -1, 1\rangle & |-1, 1, -1, -1\rangle \\ |-1, -1, 1, 1\rangle & |-1, -1, 1, -1\rangle & |-1, -1, -1, 1\rangle & |-1, -1, -1, -1\rangle \end{bmatrix}$$

Para a matriz  $C$ , temos

$$C = \begin{bmatrix} e^{\beta J_h} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-\beta J_h} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-\beta J_h} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{\beta J_h} \end{bmatrix} = e^{\beta J_h Z \otimes Z} = e^{\beta J_h Z_1 Z_2}$$

Por indução e seguindo a ideia de  $T_3$ , pode-se concluir

$$T_2 = \prod_{\alpha=1}^n e^{\beta J_h Z_\alpha Z_{\alpha+1}}$$

Por fim

$$T = [2 \sinh(2\beta J_v)]^{n/2} \left( \prod_{\alpha=1}^n e^{\beta h Z_\alpha} \right) \left( \prod_{\alpha=1}^n e^{\beta J_h Z_\alpha Z_{\alpha+1}} \right) \left( \prod_{\alpha=1}^n e^{\theta X_\alpha} \right), \quad \tanh \theta = e^{-2\beta J_v} \quad (116)$$

Como observação, é importante e fácil notar que, para  $h = 0$ , isto é, na ausência de um campo magnético externo

$$T_3 = I,$$

o caso da solução de Onsager.

A solução dada por Lars Onsager em 1944 [34] utiliza variáveis de Grassmann e integrais Grassmannianas e um pouco da álgebra dos quaterniões [6, 34]. Contudo, a solução de Onsager, apesar de clara, transmite uma sensação de obscuridade do plano por trás; do porquê ir de um passo a outro [42]. Em 1949, Bruria Kaufman reformulou a solução de Onsager em termos de grupos de rotações [19, 21, 42]. A solução apresentada se dará utilizando-se as ideias do trabalho de Kaufman, com breves referências ao artigo de Onsager que explica certas passagens.

Inicialmente, é importante definir um conjunto de matrizes  $\{\Gamma_\mu\}$ ,  $\mu = 1, \dots, 2n$  satisfazendo a seguinte álgebra anticomutativa [19]

$$\Gamma_\mu \Gamma_\nu + \Gamma_\nu \Gamma_\mu = 2\delta_{\mu\nu}, \quad (\nu, \mu = 1, \dots, 2n) \quad (117)$$

característica de uma *Álgebra de Clifford* [6]. Daqui poderíamos escolher tanto o caminho da solução por variáveis Grassmannianas como por grupos de rotações. Tais conjuntos de matrizes gozam de certas propriedades [19, 21], quais sejam,

- (i) A dimensão de cada  $\Gamma_\mu$  é maior ou igual a  $2^n \times 2^n$ .
- (ii) Dados dois conjuntos  $\{\Gamma_\mu\}$  e  $\{\Gamma'_\mu\}$ , existe uma matriz  $S$  não singular tal que  $\Gamma'_\mu = S\Gamma_\mu S^{-1}$ .
- (iii) Qualquer matriz  $2^n \times 2^n$  é uma combinação linear da matriz identidade, as matrizes  $\Gamma_\mu$  e produtos da forma  $\Gamma_\mu \Gamma_\nu$ ,  $\Gamma_\mu \Gamma_\nu \Gamma_\lambda, \dots$

Para os casos  $n = 1$  e  $n = 2$ , o conjunto de matrizes com as propriedades definidas na página anterior poderiam ser as matrizes de Pauli e de Dirac, respectivamente. Para um caso mais geral podemos escolher [19]

$$\Gamma_{2\alpha-1} = X_1 X_2 \dots X_{\alpha-1} Z_\alpha, \quad (\alpha = 1, \dots, n) \quad (118)$$

$$\Gamma_{2\alpha} = X_1 \dots X_{\alpha-1} Y_\alpha, \quad (\alpha = 1, \dots, n) \quad (119)$$

Imaginando as matrizes  $\Gamma_\mu$  como componentes de um vetor  $2n$ -dimensional, podemos definir uma *rotação* como

$$\begin{pmatrix} \Gamma'_1 \\ \vdots \\ \Gamma'_{2n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \omega_{1,1} & \dots & \omega_{1,2n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \omega_{2n,1} & \dots & \omega_{2n,2n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Gamma_1 \\ \vdots \\ \Gamma_{2n} \end{pmatrix} \quad (120)$$

ou, de outro modo,

$$\Gamma'_\mu = \sum_\nu \omega_{\mu\nu} \Gamma_\nu \quad (121)$$

Requer-se ainda que a matriz  $\omega$  satisfaça

$$\omega^T \omega = 1 \quad (122)$$

Com isso, vê-se uma correspondência entre  $\omega$  e a matriz  $S$  citada na segunda propriedade (denotaremos por  $S(\omega)$  e a correspondência por  $\omega \leftrightarrow S(\omega)$ ). Com isso

$$S(\omega) \Gamma_\mu S(\omega)^{-1} = \sum_\nu \omega_{\mu\nu} \Gamma_\nu \quad (123)$$

A matriz  $\omega$  é chamada de uma *rotação* e  $S(\omega)$  a *representação spin de uma rotação*  $\omega$ . Uma rotação no plano  $\mu\nu$  do espaço  $2n$ -dimensional considerado é dado pelas relações

$$\begin{cases} \Gamma'_\lambda = \Gamma_\lambda & (\lambda \neq \mu, \nu) \\ \Gamma'_\mu = \Gamma_\mu \cos \theta - \Gamma_\nu \sin \theta & (\mu \neq \nu) \\ \Gamma'_\nu = \Gamma_\mu \sin \theta + \Gamma_\nu \cos \theta & (\mu \neq \nu) \end{cases} \quad (124)$$

$\theta$  pode ser um número complexo não necessariamente real puro dada a abstração do problema, apesar de associarmos às rotações.

A matriz  $\omega_{\mu\nu}(\theta)$  que representa tal rotação é dada por

$$\omega_{\mu\nu}(\theta) = (\omega_{i,j}) = \begin{cases} 1 & \text{se } i = j \text{ e } i, j \notin \{\mu, \nu\} \\ \cos \theta & \text{se } i = j \text{ e } i, j = \nu \text{ ou } i, j = \mu \\ \sin \theta & \text{se } i = j \text{ e } i = \mu, j = \nu \\ -\sin \theta & \text{se } i = j \text{ e } i = \nu, j = \mu \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (125)$$

$\omega_{\mu\nu}(\theta)$  é chamada rotação no plano  $\mu\nu$  e tem as seguintes propriedades

$$\omega_{\mu\nu}(\theta) = \omega_{\nu\mu}(-\theta), \quad \omega_{\mu\nu}(\theta)^T \omega_{\mu\nu}(\theta) = 1 \quad (126)$$

Alguns lemas relevantes para a continuação da solução são enunciados abaixo [21] omitindo-se as demonstrações

**Lema 1.** Se  $\omega_{\mu\nu}(\theta) \leftrightarrow S_{\mu\nu}(\theta)$ , então

$$S_{\mu\nu}(\theta) = e^{-(\Gamma_\mu \Gamma_\nu \theta)/2} \quad (127)$$

Do lema acima,

$$\begin{cases} S_{\mu\nu}(\theta) \Gamma_\lambda S_{\mu\nu}(\theta)^{-1} = \Gamma_\lambda & (\lambda \neq \mu, \nu) \\ S_{\mu\nu}(\theta) \Gamma_\mu S_{\mu\nu}(\theta)^{-1} = \Gamma_\mu \cos \theta - \Gamma_\nu \sin \theta & (\mu \neq \nu) \\ S_{\mu\nu}(\theta) \Gamma_\nu S_{\mu\nu}(\theta)^{-1} = \Gamma_\mu \sin \theta + \Gamma_\nu \cos \theta & (\mu \neq \nu) \end{cases} \quad (128)$$

**Lema 2.** Os autovalores de  $\omega_{\mu\nu}(\theta)$  são 1, com multiplicidade geométrica  $2n - 2$ , e  $e^{\pm i\theta}$ . Os autovalores de  $S_{\mu\nu}(\theta)$  são  $e^{\pm i\theta/2}$ , com multiplicidade geométrica  $2^{n-1}$

**Lema 3.** seja  $\{\alpha, \beta, \dots, \mu, \nu\}$  uma permutação de  $\{1, \dots, 2n-1, 2n\}$  e sejam  $\theta_1, \dots, \theta_n$  números complexos. Dado o produto de rotações

$$\omega = \omega_{\alpha\beta}(\theta_1) \dots \omega_{\mu\nu}(\theta_n), \quad (129)$$

então

(i)  $\omega \leftrightarrow S(\omega)$ ,  $S(\omega)$  dado por

$$S(\omega) = e^{-\Gamma_\alpha \Gamma_\beta \theta_1/2} \dots e^{-\Gamma_\mu \Gamma_\nu \theta_n/2} \quad (130)$$

(ii) Os autovalores de  $\omega$  são

$$e^{\pm i\theta_1}, \dots, e^{\pm i\theta_n} \quad (131)$$

(iii) Os autovalores de  $S(\omega)$  são

$$e^{(i/2)(\pm\theta_1 \pm \dots \pm \theta_n)}, \quad (132)$$

para cada combinação dos sinais  $\pm$  dos  $\theta_i$  escolhidos de forma independente.

A seguir, escreveremos  $T_1$  e  $T_2$  em termos de  $S(\omega)$  onde utilizaremos os lemas enunciados. Pela equação (116), temos

$$f = \lim_{n \rightarrow \infty} n^{-1} \ln Z_n(h=0, T) = \frac{1}{2} \ln [2 \sinh(2\beta J_v)] + \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln \Lambda, \quad (133)$$

com  $\Lambda$  sendo o maior autovalor de  $\tilde{T}$  definido como

$$\tilde{T} = \left( \prod_{\alpha=1}^n e^{\beta J_h Z_\alpha Z_{\alpha+1}} \right) \left( \prod_{\alpha=1}^n e^{\theta X_\alpha} \right), \quad \tanh \theta = e^{-2\beta J_v} \quad (134)$$

Devemos portanto diagonalizar  $\tilde{T}$ .

### Diagonalização de $\tilde{T}$

Por meio das equações (118) e (119), podemos notar [19]

$$\Gamma_{2\alpha} \Gamma_{2\alpha-1} = i X_\alpha \quad (135)$$

$$\Gamma_{2\alpha+1} \Gamma_{2\alpha} = i Z_\alpha Z_{\alpha+1} \quad (136)$$

$$\Gamma_1 \Gamma_{2n} = -i Z_1 Z_n (X_1 \dots X_n) \quad (137)$$

Por conveniência futura, definimos a matriz  $U$  da seguinte maneira

$$U \stackrel{\text{def}}{=} X_1 \dots X_n \quad (138)$$

Escrevendo  $T_2$  como

$$T_2 = \left[ \prod_{\alpha=1}^{n-1} e^{\beta J_h Z_\alpha Z_{\alpha+1}} \right] e^{\beta J_h Z_n Z_1} = e^{\beta J_h Z_n Z_1} \left[ \prod_{\alpha=1}^{n-1} e^{\beta J_h Z_\alpha Z_{\alpha+1}} \right] \quad (139)$$

e utilizando (135)-(138), temos

$$\tilde{T} = e^{i\phi U \Gamma_1 \Gamma_{2n}} \left[ \prod_{\alpha=1}^{n-1} e^{-i\phi \Gamma_{2\alpha+1} \Gamma_{2\alpha}} \right] \left[ \prod_{\lambda=1}^n e^{-i\theta \Gamma_{2\lambda} \Gamma_{2\lambda-1}} \right], \quad (140)$$

com

$$\phi = \beta J_h, \quad \tanh \theta = e^{-2\beta J_v}$$



Da definição de  $U$  é fácil ver que [19]

$$U^2 = 1 \Rightarrow U(1 + U) = 1 + U, \quad U(1 - U) = -(1 - U) \quad (141)$$

$$U = i^n \Gamma_1 \dots \Gamma_{2n}, \quad (142)$$

o que nos permite deduzir

$$e^{i\phi \Gamma_1 \Gamma_{2n} U} = \frac{1}{2} [(1 + U)e^{i\phi \Gamma_1 \Gamma_{2n}} + (1 - U)e^{-i\phi \Gamma_1 \Gamma_{2n}}], \quad (143)$$

de tal forma que

$$\tilde{T} = \frac{1}{2}(1 + U)V^+ + \frac{1}{2}(1 - U)V^- \quad (144)$$

$$T^\pm = e^{\pm i\phi \Gamma_1 \Gamma_{2n}} \left[ \prod_{\alpha=1}^{n-1} e^{-i\phi \Gamma_{2\alpha+1} \Gamma_{2\alpha}} \right] \left[ \prod_{\lambda=1}^n e^{-i\theta \Gamma_{2\lambda} \Gamma_{2\lambda-1}} \right] \quad (145)$$

Pela equação (145) é fácil notar que  $T^\pm$  são representações de spin de rotação. Os próximos passos consistem em aplicar os lemas enunciados anteriormente para o estudo dos autovalores de  $T^\pm$  e diagonalizar  $U$ . Outro ponto importante é que [19]

$$[U, T^+] = [U, T^-] = [T^+, T^-] = 0, \quad (146)$$

de tal forma que podemos determinar uma base na qual as três matrizes são simultaneamente diagonalizáveis.

Começemos diagonalizando a matriz  $U$ . Como  $U^2 = 1$ , se  $\epsilon$  é um autovalor de  $U$  vale o seguinte:

$$U|\epsilon\rangle = \epsilon|\epsilon\rangle \quad (147)$$

$$U^2|\epsilon\rangle = U(\epsilon|\epsilon\rangle) = \epsilon^2|\epsilon\rangle = 1|\epsilon\rangle \quad (148)$$

$$\therefore \epsilon^2 = 1 \Leftrightarrow \epsilon = \pm 1 \quad (149)$$

De (138), podemos utilizar os resultados do apêndice A para escrever

$$U = X \otimes \dots \otimes X \quad (150)$$

de tal forma que a representação diagonal de  $U$  seria

$$U = Z \otimes \dots \otimes Z, \quad (151)$$

o que nos diz que os autovalores  $\pm 1$  ocorrem com frequências iguais. Podemos escrever a forma diagonal de  $U$  como  $\hat{U} = R U R^{-1}$ . Escolhemos  $R$  de tal forma que todos os autovalores  $+1$  estejam agrupados entre si e o mesmo para  $-1$ , ou seja, sendo  $\mathbb{1}$  a matriz identidade, queremos

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix} \quad (152)$$

Sob tal transformação,  $T^\pm$  transformam-se em  $\hat{T}^\pm = R T^\pm R^{-1}$ . A comutatividade de  $T^\pm$  com  $U$  implica na seguinte forma de  $\hat{T}^\pm$ .

$$\hat{T}^\pm = \begin{pmatrix} A^\pm & 0 \\ 0 & B^\pm \end{pmatrix} \quad (153)$$

As seguintes relações são facilmente notadas

$$\frac{1}{2}(1 + \hat{U})\hat{T}^+ = \begin{pmatrix} A^+ & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (154)$$

$$\frac{1}{2}(1 - \hat{U})\hat{T}^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & B^- \end{pmatrix} \quad (155)$$

de onde escrevemos

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} A^+ & 0 \\ 0 & B^- \end{pmatrix} \quad (156)$$

Logo, diagonalizaremos  $\tilde{T}$  diagonalizando  $T^\pm$  separadamente [19].

Como dito anteriormente,  $T^\pm$  são representações spin de um rotação. Denominamos tais rotações por  $\Omega^\pm$

$$T^\pm \leftrightarrow \Omega^\pm$$

Por meio dos lemas enunciados e da equação (145), podemos escrever, na linguagem dos lemas anteriores

$$\Omega^\pm = \omega_{1,2n}(\mp 2i\phi) \left[ \prod_{\alpha=1}^{n-1} \omega_{2\alpha+1,2\alpha}(-2i\phi) \right] \left[ \prod_{\lambda=1}^n \omega_{2\lambda,2\lambda-1}(-2i\theta) \right] \quad (157)$$

Como sugerido em [19, 21], os autovalores de  $\Omega^\pm$  são os mesmos dados pela rotação  $\omega^\pm = V\chi^\pm V^{-1}$  definidos como

$$V = \prod_{\lambda=1}^n \omega_{2\lambda,2\lambda-1}(-i\theta) = \prod_{\lambda=1}^n \omega_{2\lambda-1,2\lambda}(i\theta) \quad (158)$$

$$\chi = \omega_{1,2n}(\pm 2i\phi) \prod_{\alpha=1}^{n-1} \omega_{2\alpha,2\alpha+1}(2i\phi) \quad (159)$$

ou, de forma mais explícita

$$V = \begin{bmatrix} J & 0 & \dots & 0 \\ 0 & J & \dots & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & J \end{bmatrix}, \quad \chi^\pm = \begin{bmatrix} a & 0 & \dots & \pm b \\ 0 & K & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mp b & \dots & 0 & a \end{bmatrix} \quad (160)$$

com

$$J \stackrel{\text{def}}{=} \begin{bmatrix} \cosh \theta & i \sinh \theta \\ -i \sinh \theta & \cosh \theta \end{bmatrix}, \quad K = \begin{bmatrix} \cosh 2\phi & i \sinh 2\phi \\ -i \sinh 2\phi & \cosh 2\phi \end{bmatrix} \quad (161)$$

$$0 = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad a = \cosh 2\phi, \quad b = i \sinh 2\phi \quad (162)$$

Por meio de cálculos diretos, podemos determinar  $\omega^\pm$  [19]

$$\omega^\pm = \begin{bmatrix} C & D & 0 & \dots & 0 & 0 & \mp D^\dagger \\ B^\dagger & A & B & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & B^\dagger & A & B & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \dots & & \ddots & \dots & & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & & & & \\ \mp D & 0 & \dots & \dots & & B^\dagger & A \end{bmatrix} \quad (163)$$

onde  $C$  e  $D$  são matrizes

$$C = \begin{bmatrix} \cosh 2\phi \cosh 2\theta & -i \cosh 2\phi \sinh 2\theta \\ i \cosh 2\phi \sinh 2\theta & \cosh 2\phi \cosh 2\theta \end{bmatrix} \quad (164)$$

$$D = \begin{bmatrix} -(1/2) \sinh 2\phi \sinh 2\theta & i \sinh 2\phi \sinh^2 \theta \\ -i \sinh 2\phi \cosh^2 \theta & -(1/2) \sinh 2\phi \sinh 2\theta \end{bmatrix} \quad (165)$$

Os autovetores para diagonalizar  $\omega^\pm$  devem ser tomados da forma sugerida em [21]

$$\Psi = \begin{bmatrix} zu \\ z^2u \\ \vdots \\ z^nu \end{bmatrix}, \quad (166)$$

como as matrizes  $\omega^\pm$  estão definidas por blocos de matrizes  $2 \times 2$ , o elemento  $u$  do autovetor  $\psi$  deve ser um vetor de duas componentes  $u = (u_1, u_2)$ . A equação de autovalor-autovetor  $\omega^\pm \Psi = \psi \Psi$  leva a  $n$  equação

$$\begin{aligned} (zA + z^2B \mp z^n B^\dagger)u &= z\psi u \\ (z^2A + z^3B + zB^\dagger)u &= z^2\psi u \\ (z^3A + z^4B + z^2B^\dagger)u &= z^3\psi u \\ &\vdots \\ (z^{n-1}A + z^nA + z^{n-2}B^\dagger)u &= z^{n-1}\psi u \\ (z^nA \mp zB + z^{n-1}B^\dagger)u &= z^n\psi u \end{aligned}$$

É fácil perceber que da segunda equação até a penúltima, temos equações repetidas; pares de equações escritas apenas de forma diferente. Com isso, há de fato três equações

$$(zA + z^2B \mp z^n B^\dagger)u = z\psi u \quad (167)$$

$$(z^2A + z^3B + zB^\dagger)u = z^2\psi u \quad (168)$$

$$(z^nA \mp zB + z^{n-1}B^\dagger)u = z^n\psi u \quad (169)$$

Fazendo-se  $z^n = \mp 1$  (a ordem do sinal está ligada à ordem do sinal em  $\omega^\pm$ ), as equações degeneram-se em uma única

$$(A + zBz^{-1}B^\dagger)u = \psi u \quad (170)$$

Utilizando  $z_k = e^{2i\pi k/n}$ ,  $k = 0, 1, \dots, 2n-1$ , temos dois autovalores  $\psi_k$  para cada  $k$ . Os valores de  $k$  estão ligados ao sinal de  $\omega^\pm$  da seguinte maneira

$$\begin{aligned} k &= 1, 3, \dots, 2n-1, & \text{para } \omega^+ \\ k &= 0, 2, \dots, 2n, & \text{para } \omega^-, \end{aligned}$$

de tal forma que temos  $2n$  autovalores. Pelos lemas anteriores, tomamos os autovalores como  $\psi_k = e^{\pm\gamma_k}$  [19, 21] e determinamos  $\gamma_k$  da seguinte forma:

$$\frac{1}{2} \text{Tr}(A + zBz^{-1}B^\dagger) = \frac{1}{2}(e^{\gamma_k} + e^{-\gamma_k}) = \cosh \gamma_k, \quad (171)$$

por conta da equação (170). Pela positividade da função cosseno hiperbólico, sendo  $\gamma_k$  uma solução,  $-\gamma_k$  também será, como previsto quando escolhermos  $\psi = \exp(\gamma_k)$ . Com isso, temos a liberdade de escolher  $\gamma_k > 0$ . Por fim, utilizando as formas explícitas das matrizes,

$$\cosh \gamma_k = \cosh 2\pi \cosh 2\theta - \cos(\pi k/n) \sinh 2\phi \sinh 2\theta \quad (172)$$

(172) mostra que

$$\gamma_k = \gamma_{2n-k}$$

A derivada  $\partial\gamma_k/\partial k$  [19]

$$\frac{\partial\gamma_k}{\partial k} = \frac{\pi \sin(\pi k/n)}{n \sin \gamma_k} > 0, \quad \text{para } k < n \quad (173)$$

Logo, a sequência  $\{\gamma_k\}_{0 \leq k \leq n}$  é monotonicamente crescente.

Pelo Lema 3 e pela forma como fora definida  $\Omega^\pm$ , os autovalores de  $T^\pm$  são

$$\exp[(1/2)(\pm\gamma_0 \pm \gamma_2 \pm \dots \pm \gamma_{2n-2})], \quad \text{para } T^- \quad (174)$$

$$\exp[(1/2)(\pm\gamma_1 \pm \gamma_3 \pm \dots \pm \gamma_{2n-1})], \quad \text{para } T^+ \quad (175)$$

As escolhas dos sinais  $\pm$  são feitas de forma independente para cada termo e cada configuração de sinais aparece uma única vez [21, 34].

Como já dito, o espectro de autovalores de  $\tilde{T}$  é a união dos espectros das matrizes  $T^\pm$  de tal forma que o maior autovalor de  $\tilde{T}$  é o maior dos autovalores (174), (175). Como  $\{\gamma_k\}_{0 \leq k \leq n}$  é monotonicamente crescente, o maior autovalor é aquele tomado com todos os sinais positivos, da forma como definimos os termos  $\gamma_k$  positivos anteriormente. Novamente pela monotonicidade  $\gamma_1 > \gamma_0$  de tal forma que o maior autovalor de  $\tilde{V}$ ,  $\Lambda$  é

$$\Lambda = e^{(\gamma_1 + \gamma_3 + \dots + \gamma_{2n-1})/2} \quad (176)$$

Retornando à função de partição, devemos avaliar o limite

$$L = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{2n} (\gamma_1 + \gamma_3 + \dots + \gamma_{2n-1}) \quad (177)$$

Definindo

$$\gamma(\nu) \stackrel{\text{def}}{=} \gamma_{2k-1}, \quad \nu = \frac{\pi}{n}(2k-1),$$

a soma  $(1/n) \sum_k^n [\gamma((2k-1)\pi/n)]$  é uma quadratura para a integral [34]

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \gamma(\nu) d\nu,$$

logo

$$L = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \gamma(\nu) d\nu = \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi \gamma(\nu) d\nu \quad (178)$$

$$\cosh \gamma(\nu) = \cosh 2\phi \cosh 2\theta - \cos \nu \sinh 2\phi \sinh 2\theta, \quad \gamma(\nu) > 0 \quad (179)$$

$$\phi = \beta J_h, \quad \tanh \theta = e^{-2\beta J_v} \quad (180)$$

Onsager, em seu trabalho, apresenta uma simplificação para a integral (178).

Para simplificarmos (178), convém notar as seguintes relações quando  $J_v = J_h = J$

$$\sinh 2\theta = 1/\sinh 2\phi \quad (181)$$

$$\cosh 2\theta = \coth 2\phi \quad (182)$$

de onde podemos reescrever (179)

$$\cosh \gamma(\nu) = \cosh 2\phi \coth 2\phi - \cos \nu, \quad \gamma(\nu) > 0 \quad (183)$$

Utilizando a identidade

$$|z| = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi dt \log(2 \cosh z - 2 \cos t), \quad (184)$$

$\gamma(\nu)$  pode ser escrita em termos de uma integral

$$\gamma(\nu) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi d\nu' \log(2 \cosh 2\phi \coth 2\phi - 2 \cos \nu - 2 \cos \nu') \quad (185)$$

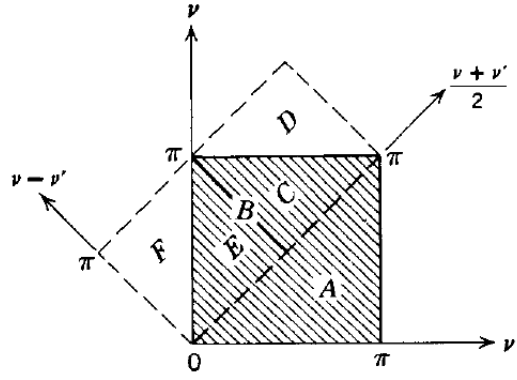


Figura 13: Mudança de variáveis por rotação de  $\pi/4$

nos permitindo reescrever (178) na forma

$$L = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\pi d\nu \int_0^\pi d\nu' \log(2 \cosh 2\phi \coth 2\phi - 2 \cos \nu - 2 \cos \nu') \quad (186)$$

A seguinte mudança de variáveis simplifica o cálculo das integrais acima [19]:

$$\mu_1 = \frac{\nu + \nu'}{2}, \quad \mu_2 = \nu - \nu' \quad (187)$$

A figura 13 mostra que o intervalo de integração permanece o mesmo. Com isso

$$L = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\pi d\mu_1 \int_0^\pi d\mu_2 \log(2 \cosh 2\phi \coth 2\phi - 4 \cos \mu_1 \cos \mu_2) \quad (188)$$

$$= \frac{1}{\pi^2} \int_0^\pi d\mu_1 \int_0^{\pi/2} d\mu_2 \log(2 \cosh 2\phi \coth 2\phi - 4 \cos \mu_1 \cos \mu_2) \quad (189)$$

$$= \frac{1}{\pi^2} \int_0^\pi d\mu_1 \int_0^{\pi/2} d\mu_2 \left[ \log \left( (D / \cos \mu_2 - \cos \mu_1) + \log (2 \cos \mu_2) \right) \right] \quad (190)$$

$$(D = \cosh 2\phi \coth 2\phi) \text{ e usando (184)} \quad (191)$$

$$= \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi/2} d\mu_2 \left[ \log(2 \cos \mu_2) + \cosh^{-1} \left( (D / 2 \cos \mu_2) \right) \right] \quad (192)$$

$$\text{como } \cosh^{-1} = \log(x + \sqrt{x^2 - 1}), \quad (193)$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi d\mu_2 \log [D(1 + \sqrt{1 + (2 \cos \mu_2 / D)^2})] \quad (194)$$

Fazendo uso de (184) novamente e somando com o fator  $\log(2 \sinh(2\beta J_h))/2$  do início da derivação da função de partição, chegamos finalmente à solução de Onsager [34]

$$f = \log(2 \cosh(2\beta J)) + \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi d\phi \log \left[ \frac{1}{2} \left( 1 + \sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \phi} \right) \right] \quad (195)$$

com

$$\kappa = 2 / [\cosh(2\beta J) \coth(2\beta J)]$$

### 6.5.3 Comentários a Respeito da Solução: Magnetização Espontânea

A solução de Onsager trás uma dificuldade na análise da magnetização espontânea. Uma vez que  $M_0$  é definido como

$$M_0 = \lim_{h \rightarrow 0^+} \langle \sigma_j \rangle \quad (196)$$

precisaríamos da solução para o modelo com campo magnético, a princípio.

Contudo, em 1949, Onsager encontrou uma dependência entre  $M_0$  e a razão  $T/T_c$ , cuja prova fora publicada em 1952 por Yang [3]

$$M_0 = \left[ \frac{1+x^2}{(1-x^2)^2} (1-6x^2+x^4)^{1/2} \right]^{1/4} \quad (197)$$

com  $x = \tanh(\beta J)$ .

Yang, em seu artigo, mostrou que próximo à temperatura crítica,  $x_c = \sqrt{2}-1$ , a magnetização era aproximadamente

$$M_0 \approx [4(\sqrt{2}+2)(x_c-x)]^{1/8}, \quad (198)$$

ou seja,

$$M_0 \sim \mathfrak{T}^{1/8}, \quad (199)$$

a magnetização vai com uma lei de potência próximo à região crítica. Um gráfico para a magnetização resultante em função da temperatura crítica tem a seguinte forma [3]

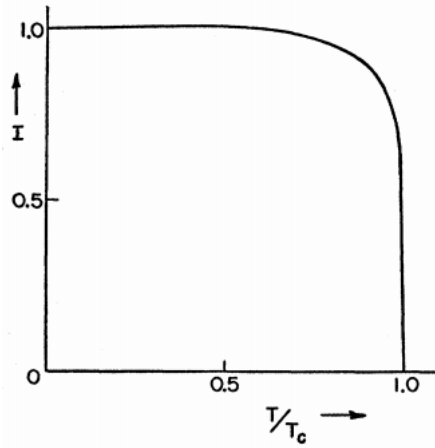


Figura 14: Magnetização espontânea para o modelo de Ising bidimensional

A figura acima mostra o resultado esperado, como discutido na seção 5. Aqui é a primeira vez onde vê-se um modelo que comprovadamente apresentava transição de fase e confirmava as hipóteses de singularidades das derivadas de segunda ordem da energia livre [42]. A solução de Onsager fora a primeira solução para um sistema fortemente interagente e acabou por marcar o começo do estudo dos sistemas exatamente integráveis nesta área.

## 7 Mapeamento para o Modelo Quântico: Spins no Campo Transverso

Como sugerido anteriormente, imaginemos que um dos eixos do modelo é um eixo temporal da mecânica quântica [46]. Podemos tomar o modelo bidimensional como meio de visualização. A matriz  $\hat{T}$  relaciona os spins de uma linha  $\mu$  com a linha seguinte,  $\mu'$ . Na nossa imagem de um eixo como sendo o temporal, podemos ver  $\hat{T}$  como sendo o operador que leva a informação de um instante do tempo para outro instante como sendo análogo à ideia de  $\hat{T}$  carregar a informação de uma linha para a outra. Com isso, podemos associar a  $\hat{T}$  a ideia de um propagador quântico. [46]

Quânticamente temos o propagador  $\hat{U}$  definido pelos elementos  $U(\sigma_f, t_f; \sigma_i, t_i)$  da seguinte forma

$$U(\sigma_f, t_f; \sigma_i, t_i) = \langle \sigma_1^f, \dots, \sigma_k^f | e^{-i\hat{H}(t_f-t_i)/\hbar} | \sigma_1^i, \dots, \sigma_k^i \rangle \leftrightarrow T(\mu_i, \mu_{i+1}) = \langle \mu_{i+1} | \hat{T} | \mu_i \rangle \quad (200)$$

Associaremos assim  $\hat{T}$  com  $\hat{U}$  no limite para o qual o eixo temporal se torna contínuo, ou seja, o espaçamento entre sítios do eixo tomado como temporal, tende para zero. Possíveis correções podem ser necessárias. Esta seção busca desenvolver o mapeamento para uma e duas dimensões clássicas em zero e uma dimensão quântica.

Discretizando o eixo temporal, podemos subdividi-lo em  $N$  intervalos de tamanho  $\delta t$ , entre os instantes inicial e final de tal forma que

$$N\delta t = (t_f - t_i) \quad (201)$$

No entanto, para associar  $N\delta t$  com o argumento da exponencial do propagador, precisamos tomar o tempo como sendo imaginário de tal forma que fazemos a seguinte associação [46]

$$\hat{T}^N = e^{-N\delta\tau\hat{H}/\hbar} = e^{i(t_f-t_i)\hat{H}/\hbar} \quad (202)$$

definindo

$$N\delta\tau = i(t_f - t_i), \quad \tau = -it \quad (203)$$

No limite  $\delta\tau \rightarrow 0$ , podemos escrever

$$e^{-\delta\tau\hat{H}/\hbar} \approx 1 - \frac{\delta\tau}{\hbar}\hat{H} \quad (204)$$

## 7.1 Mapeamento 1D Clássico $\rightarrow$ 0D Quântico

É conveniente reescrever a matriz de transferência de outra maneira. Seja  $S$  tal que

$$S = \sum_n [-K\sigma(n)\sigma(n+1) - g\sigma(n)], \quad K = \beta J, \quad g = \beta h \quad (205)$$

definimos

$$L(n, n') = -\frac{K}{2} [\sigma(n) + \sigma(n')]^2 - \frac{g}{2} [\sigma(n) + \sigma(n')] \quad (206)$$

de tal forma que

$$S = \sum_n L(n, n+1) \quad (207)$$

diferindo por uma constante não importante para o cálculo da função de partição. Assim,

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} e^{-S} = \sum_{\{\sigma\}} \left( \prod_n e^{-L(n, n+1)} \right) \quad (208)$$

Fazendo

$$\langle \sigma(n) | \hat{T} | \sigma(n+1) \rangle = T(n, n+1) = e^{-L(n, n+1)} \quad (209)$$

temos

$$\hat{T} = e^K \begin{pmatrix} e^g & e^{-2K} \\ e^{-2K} & e^{-g} \end{pmatrix} \quad (210)$$

Pra  $h = 0$ , podemos escrever  $\hat{T}$  como

$$\hat{T} = e^K \begin{pmatrix} 1 & e^{-2K} \\ e^{-2K} & 1 \end{pmatrix} = e^K (1 + e^{-2K} \sigma^x) \leftrightarrow \exp \left\{ -\delta\tau \hat{H}_q / \hbar \right\} \quad (211)$$

Definindo  $\hbar = 1$ , podemos identificar  $\delta\tau = e^{-2K}$  de tal forma que, no limite  $\delta\tau \rightarrow 0$ , identificamos a Hamiltoniana quântica para um único spin evoluindo no tempo, na ausência de campo magnético, como

$$\hat{H}_q = E_0 - \frac{\Delta}{2} \sigma^x, \quad (212)$$

associando a  $e^K$ ,  $E_0$ .  $\hbar$  estaria relacionado com o termo  $K^{-1}$ ;  $\hbar \leftrightarrow T$ .  $\hbar \rightarrow 0$  equivaleria a  $T \rightarrow 0$ . Aqui, podemos identificar o ponto  $T = 0$  como sendo um modelo mecânico estatístico sem flutuações. A interpretação da contraparte quântica seria a de um modelo onde as flutuações quânticas vão para zero, onde apenas o caminho clássico contribui para a amplitude de transição entre estados [38], ou seja,  $\hbar \rightarrow 0$ . [22]

O termo  $\Delta/2$  é introduzido para que a Hamiltoniana  $\hat{H}_q$  tenha a mesma função de partição da Hamiltoniana clássica quando tomado como inverso da temperatura

$$\beta_q = \frac{Ne^{-2K}}{\Delta/2} = \frac{Na}{\Delta\xi}, \quad (213)$$

com  $a$  sendo o espaçamento entre os sítios da rede. Da equação (204), identificamos de (211)

$$-\hat{H}_q\delta\tau = e^{-2K}\sigma^x \quad (214)$$

No entanto, a subdivisão em intervalos de tamanho  $\delta\tau$  vale para quando

$$e^{2K} \approx \frac{\xi}{a} \gg 1 \quad [18] \quad (215)$$

e a função de partição para os dois modelos se iguala neste limite de escala descrito pela relação (215). Após trabalharmos a função de correlação, voltaremos a isso e será melhor entendido.

Poderíamos, ainda, escrever um mapeamento considerando o campo  $h \neq 0$ . Adiaremos isso um pouco mais. Aproveitando o caso  $h = 0$ , escolhemos determinar as funções de correlação e trabalhar em cima do ajuste necessário nos parâmetros do sistema para que o mapeamento seja válido; para que a função de partição de um modelo seja mapeada na função de partição do outro de tal forma que o comportamento da parte clássica se relacione com comportamentos da contraparte quântica.

A seguir, determinaremos a função de correlação para o modelo clássico unidimensional e buscaremos entender melhor a ligação entre os modelos e algumas afirmações feitas acima.

A função de correlação entre spins de dois sítios diferentes é

$$\Gamma(i, j) = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \quad (216)$$

para  $M_0 = 0$ . Com isso, podemos escrever, dada a probabilidade de uma configuração

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma\}} \sigma_i \sigma_j e^{-\beta H} \quad (217)$$

Podemos escrever  $e^{-\beta H}$  utilizando-se da matriz de transferência. Então [40]

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma\}} \sigma_i \sigma_j T(\sigma_1, \sigma_2) T(\sigma_2, \sigma_3) \dots T(\sigma_N, \sigma_1) \quad (218)$$

$$= \frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma\}} T(\sigma_1, \sigma_2) \dots \sigma_i T(\sigma_i, \sigma_{i+1}) \dots \sigma_j T(\sigma_j, \sigma_{j+1}) \dots T(\sigma_N, \sigma_1) \quad (219)$$

$$= \frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma\}} \langle \sigma_1 | \hat{T} | \sigma_2 \rangle \dots \sigma_i \langle \sigma_i | \hat{T} | \sigma_{i+1} \rangle \dots \sigma_j \langle \sigma_j | \hat{T} | \sigma_{j+1} \rangle \dots \langle \sigma_N | \hat{T} | \sigma_1 \rangle \quad (220)$$

$$= \frac{1}{Z} \sum_{\{\sigma_1, \sigma_i, \sigma_j\}} \langle \sigma_1 | \underbrace{\hat{T} \hat{T} \dots \hat{T}}_{i \text{ vezes}} | \sigma_i \rangle \sigma_i \langle \sigma_i | \underbrace{\hat{T} \dots \hat{T}}_{j-i \text{ vezes}} | \sigma_j \rangle \sigma_j \langle \sigma_j | \underbrace{\hat{T} \dots \hat{T}}_{N-j \text{ vezes}} | \sigma_1 \rangle \quad (221)$$

$$= \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_1=\pm 1} \langle \sigma_1 | \hat{T}^i \sigma^z \hat{T}^{j-i} \sigma^z \hat{T}^{N-j} | \sigma_1 \rangle \quad (222)$$

$$= \frac{1}{Z} \text{Tr}(\hat{T}^i \sigma^z \hat{T}^{j-i} \sigma^z \hat{T}^{N-j}) \quad (223)$$



onde utilizamos

$$\sum_{\sigma_i=\pm 1} \sigma_i |\sigma_i\rangle \langle \sigma_i| = \sigma^z$$

e assumimos  $j \geq i$ .

Tomemos a base na qual  $\hat{T}$  é diagonal para avaliar (223). Pra a nova formulação de  $\hat{T}$ , os autovalores são

$$\lambda_+ = 2 \cosh(K) \quad (224)$$

$$\lambda_- = 2 \sinh(K) \quad (225)$$

com autovetores

$$|\lambda_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|+1, z\rangle + |-1, z\rangle], \quad |\lambda_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|+1, z\rangle - |-1, z\rangle] \quad (226)$$

onde  $|+1, z\rangle$  e  $|-1, z\rangle$  são os autovetores do operador  $\hat{\sigma}^z$ . Na base  $\{|\lambda_+, \lambda_-\rangle\}$ , os elementos de  $\hat{\sigma}^z$  são dados por

$$\begin{aligned} \langle \lambda_+ | \hat{\sigma}^z | \lambda_+ \rangle &= 0, & \langle \lambda_- | \hat{\sigma}^z | \lambda_- \rangle &= 0 \\ \langle \lambda_+ | \hat{\sigma}^z | \lambda_- \rangle &= 1, & \langle \lambda_- | \hat{\sigma}^z | \lambda_+ \rangle &= 1 \end{aligned}$$

Com isso, (223) toma a forma

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \frac{\lambda_+^{N-j+i} \lambda_-^{j-i} + \lambda_-^{N-j+i} \lambda_+^{j-i}}{\lambda_+^N \lambda_-^N} \quad (227)$$

Pode-se mostrar que

$$\langle \sigma_i \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr}(\hat{\sigma}^z \hat{T}^N) \quad (228)$$

de onde se vê a invariância translacional do sistema mencionada na seção 5.4

No limite termodinâmico,

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \tanh^{j-i}(K) \quad (229)$$

Seja  $a$  o espaçamento entre os sítios da rede, a distância entre dois sítio  $i$  e  $j$  é  $|j - i|a$ , logo, utilizando o resultado da seção 5.4, encontramos

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = e^{-|j-i|a/\xi} = [\tanh(K)]^{j-i} \quad (230)$$

$$\therefore \frac{1}{\xi} = \frac{1}{a} \ln \coth(K) \quad (231)$$

Ao se tomar o limite  $\delta\tau \rightarrow 0$ , um ajuste no acoplamento deve ser feito.

$$\delta\tau = e^{-2K}; \quad \delta\tau \rightarrow 0 \Rightarrow K \rightarrow \infty \quad (232)$$

Logo, para se ajustar os dois modelos, devemos ajustar o acoplamento do sistema de forma a ser muito grande. No limite para  $K$  muito grande

$$\frac{\xi}{a} \approx \frac{1}{2} e^{2K} \gg 1, \quad \frac{\xi}{a} \rightarrow \infty, \quad \text{quando } K \rightarrow \infty \quad [40] \quad (233)$$

Neste momento, é importante inserir o conceito de *limite de escala*.

**Limite de Escala:** O limite de escala de um observável é definido como o valor limite deste observável quando os grandes comprimentos do sistema divergem ou os pequenos comprimentos vão para zero, de outra forma, quando a razão entre os pequenos e grandes comprimentos pode ser negligenciada [40].

Apesar da forma como definimos acima, não explicamos os termos *grandes comprimentos* e *pequenos comprimentos*. Grandes comprimento seriam os comprimentos de correlação, comprimento do sistema ( $L = Na$ ) e a escala de medida, definida em  $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$  como  $|j - i|a$ .  $a$  é o único comprimento pequeno.

Como definido para o limite de escala, devemos fazer os grandes comprimentos divergirem para infinito deixando os pequenos constantes ou tomar os pequenos comprimentos indo para zero, mantendo-se os grandes comprimentos constantes. As duas formas são equivalentes devido ao fato de a física depender da razão entre os comprimentos.

Para trabalharmos utilizando o conceito de limite de escala, devemos expressar os termos do sistema, como constantes de acoplamento, em função dos comprimentos de escala, no limite de escala. Utilizando a relação (233), podemos expressar  $K$  em termos da razão  $\xi/a$ . O termo  $g$  ligado ao acoplamento com o campo externo, deve ser tratado olhando para a função de correlação e determinando-se a forma de se tratar.

Como sugerido em [40], estudamos o modelo em termos de

$$\tilde{g} = \frac{g}{a} \quad (234)$$

tomando o limite quando  $a \rightarrow 0$  mas  $\tilde{g}$  é mantido constante.

Normalmente, escolheremos tomar o limite  $a \rightarrow 0$ , visto que a ideia original era a de identificar o eixo clássico como sendo o eixo temporal da mecânica quântica e tomar o limite para o qual os espaçamentos entre os sítios vai para zero.

### 7.1.1 Mapeamento Para $\hbar \neq 0$

Definimos  $T_1$  e  $T_2$  tal que

$$\hat{T} = T_2^{1/2} T_1 T_2^{1/2} \quad (235)$$

Explicitamente, temos

$$T_1 = \begin{pmatrix} 1 & e^{-2K} \\ e^{-2K} & 1 \end{pmatrix} \quad T_2 = \begin{pmatrix} e^g & 0 \\ 0 & e^{-g} \end{pmatrix} \quad (236)$$

Podemos escrever  $T_1$  e  $T_2$  em termos das razões entre os comprimentos grandes e pequenos, tomando o limite  $a \rightarrow 0$ .

$$T_1 = 1 + e^{-2} \hat{\sigma}^x \quad (237)$$

$$\approx 1 + (a/2\xi) \hat{\sigma}^x \quad (238)$$

$$\approx e^{(a/2\xi) \hat{\sigma}^x}, \quad a \rightarrow 0 \quad (239)$$

$$T_2 = e^{a\tilde{g}\hat{\sigma}^z} \quad (240)$$

Utilizando a relação

$$e^{a\hat{\sigma}} e^{a\hat{\sigma}'} = e^{a(\hat{\sigma}\hat{\sigma}')} (1 + \mathcal{O}(a^2)),$$

podemos escrever, no limite  $a \rightarrow 0$ .

$$T_1 T_2 \approx e^{-\delta\tau \hat{H}_q} \quad (241)$$

com

$$\hat{H}_q = -\frac{\Delta}{2} \hat{\sigma}^x - \tilde{g} \hat{\sigma}^z \quad (242)$$

identificando

$$\Delta = \frac{1}{\xi}, \quad \delta\tau = a$$

Como o traço de um operador é cíclico, podemos escrever

$$Tr[(T_2^{1/2}T_1T_2^{1/2})^N] = Tr[(T_1T_2^{1/2}T_2^{1/2})^N] \Rightarrow Z = Tr(\hat{T}^N) \approx Tr(e^{-\delta\tau N\hat{H}_q}) \quad (243)$$

de onde identificamos

$$\beta_q = N\delta\tau = Na \quad (244)$$

que justificam a equação (213), utilizando a relação  $\Delta\xi = 1$ .

A função de partição do modelo clássico fora mapeada para a função de partição do modelo quântico, como mostra (243). Com isso, podemos utilizar os resultados do modelo clássico unidimensional para o modelo quântico, fazendo-se as substituições necessárias e tomando o limite de escala, para o qual o modelo passa a valer.

O Correlator entre dois tempos imaginários distintos,  $G$  é definido como

$$G(\tau_1, \tau_2) = \begin{cases} \frac{1}{Z} Tr(e^{-\beta_q \hat{H}_q} \hat{\sigma}^z(\tau_1) \hat{\sigma}^z(\tau_2)) & \tau_1 > \tau_2 \\ \frac{1}{Z} Tr(e^{-\beta_q \hat{H}_q} \hat{\sigma}^z(\tau_2) \hat{\sigma}^z(\tau_1)) & \tau_1 < \tau_2 \end{cases} \quad (245)$$

com

$$\hat{\sigma}^z(\tau) = e^{\hat{H}_q \tau} \hat{\sigma}^z e^{-\hat{H}_q \tau}$$

Mais explicitamente, para o primeiro caso de (245)

$$G(\tau_1, \tau_2) = \frac{1}{Z} Tr(e^{N\delta\tau \hat{H}_q} e^{\hat{H}_q \tau_1} \hat{\sigma}^z e^{-\hat{H}_q \tau_1} e^{\hat{H}_q \tau_2} \hat{\sigma}^z e^{-\hat{H}_q \tau_2}) \quad (246)$$

Sendo  $\tau_1 = -\delta\tau j$  e  $\tau_2 = -\delta\tau i$ , temos

$$G(\tau_1, \tau_2) = \frac{1}{Z} Tr(e^{N\delta\tau \hat{H}_q} e^{\hat{H}_q(-\delta\tau j)} \hat{\sigma}^z e^{-\hat{H}_q(-\delta\tau j)} e^{\hat{H}_q(-\delta\tau i)} \hat{\sigma}^z e^{-\hat{H}_q(-\delta\tau i)}) \quad (247)$$

Identificando  $\hat{T}$  com  $e^{-\delta\tau \hat{H}_q}$  e utilizando a propriedade cíclica do traço, podemos identificar  $G$  como a função de correlação entre spins, no limite para o qual vale o mapeamento [22, 46, 40];

$$G(\tau_1, \tau_2) = \lim_{\delta\tau \rightarrow 0} \langle \sigma(\tau_1) \sigma(\tau_2) \rangle \quad (248)$$

Aqui, relacionamos a função de correlação da Mecânica Estatística com o Propagador da *Teoria Quântica de Campos*. Outras quantidades podem ser relacionadas. O  $\Delta$ , inverso do comprimento de correlação, pode ser relacionado com o *gap de massa*, por exemplo. A relação das quantidades da Mecânica Estatística e da Teoria de Campos serão apresentadas no relatório final. Contudo, cabe citar as relações que serão estabelecidas. São elas [22]:

Mecânica Estatística	Teoria de Campos
Densidade de de energia livre	Densidade de energia do vácuo
Função de Correlação	Propagador
Recíproco do comprimento de correlação	Gap de massa
Estado de Equilíbrio	Estado Fundamental

Tabela 2: Relação entre quantidades da Mecânica Estatística e da Teoria de Campos

Na próxima subseção, desenvolveremos o mapeamento de duas dimensões clássicas e uma dimensão quântica. Por meio de alguns métodos, procuraremos determinar o diagrama de fases do sistema e entender certas propriedades do mesmo.

Por fim, convém entender o significado de cada termo da Hamiltoniana  $\hat{H}_q$ . Na base canônica, que corresponde à base dos autovetores de  $\hat{\sigma}^z$ , o operador  $\hat{\sigma}^x$  age como um operador de "flip", ou seja

$$\hat{\sigma}^x |-1, z\rangle = |+1, z\rangle, \quad \hat{\sigma}^x |+1, z\rangle = |-1, z\rangle$$

$\hat{H}_q$  descreve a dinâmica de um spin sujeito a dois campos, um campo longitudinal  $\tilde{g}$  e um campo transverso  $\Delta$ . Como o operador  $\hat{\sigma}^x$  é responsável por "flipar" o spin, podemos ver o termo  $\Delta\hat{\sigma}^x/2$  como o operador que leva o spin do estado fundamental, alinhado com o campo longitudinal, para o estado excitado, ou seja,  $\Delta$  seria o *gap* de energia entre o estado fundamental e o estado excitado, para um campo longitudinal nulo.

## 7.2 Mapeamento 2D Clássico $\rightarrow$ 1D Quântico

Para o mapeamento em duas dimensões, consideremos a Hamiltoniana isotrópica, como feito na subseção 6.5. Definimos  $S$  semelhantemente ao caso unidimensional, com  $x$  sendo o eixo horizontal e  $\tau$  o eixo vertical.

$$S = - \sum_{x,\tau} [\beta_\tau \sigma_x^{\tau+1} \sigma_x^\tau + K \sigma_{x+1}^\tau \sigma_x^\tau], \quad (249)$$

$$\beta_\tau = \beta J_v, \quad K = \beta J_h$$

Podemos reescrever  $S$  da seguinte forma [22]

$$S = \sum_{x,\tau} [(\beta_\tau/2)(\sigma_x^{\tau+1} - \sigma_x^\tau)^2 - (K/2)(\sigma_{x+1}^\tau \sigma_x^\tau + \sigma_{x+1}^{\tau+1} \sigma_x^{\tau+1})] \quad (250)$$

Se tomarmos a soma de (250) apenas em  $x$  estaremos descrevendo a interação entre todos os termos no eixo horizontal  $x$  e a interação desta linha  $\mu_\tau = (\sigma_1^\tau, \dots, \sigma_{N_x}^\tau)$  com a linha  $\mu_{\tau+1}$ , além da interação entre os componentes da linha  $\mu_{\tau+1}$ . Com isso definimos  $L$ , que descreve as interações citadas acima, da seguinte forma

$$L(\tau, \tau') = (\beta_\tau/2) \sum_x [\sigma^\tau(x) - \sigma^{\tau'}(x)] - (K/2) \sum_x [\sigma^\tau(x+1) \sigma^\tau(x) + \sigma^{\tau'}(x+1) \sigma^{\tau'}(x)]; \quad (251)$$

assim

$$S = \sum_\tau L(\tau, \tau + 1)$$

Seja  $N$ , ao invés de  $N_x$ , o número de sítios em cada linha, ou seja, horizontalmente. Então, há  $2^N$  configurações de spins, de tal forma que há  $2^N$  argumentos para a matriz de transferência o que nos permite ver a matriz como uma matriz  $2^N \times 2^N$ .

$$T(\sigma'_1, \dots, \sigma'_N; \sigma_1, \dots, \sigma_N) = \langle \sigma'_1, \dots, \sigma'_N | \hat{T} | \sigma_1, \dots, \sigma_N \rangle = \langle \mu' | \hat{T} | \mu \rangle \quad (252)$$

De (252) é fácil perceber que um elemento diagonal é aquele no qual o estado da linha  $\mu'$  é o mesmo da linha  $\mu$ , ou seja, não houve nenhum "flip" de algum spin entre uma linha e outra. Antecipando o mapeamento que faremos, entre dois instantes diferentes de tempo separados por  $\delta\tau$ , não houve nenhum flip de spins, para elementos da diagonal.

Seguindo a ideia anterior, podemos interpretar a matriz  $\hat{T}$  em termos do números de "flips" ocorridos e assim construir a Hamiltoniana quântica no limite  $\tau$ -contínuo. Denotaremos um elemento matricial de  $n$  "flips" como

$$\hat{T} \Big|_{n \text{ flips}}$$

Como

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} e^{-S} = \sum_{\{\sigma\}} \left( \prod_\tau e^{-L(\tau)} \right),$$

identificamos a matriz de transferência como

$$T(\tau, \tau + 1) = e^{-L(\tau, \tau+1)} \quad (253)$$

Importante notar que as notações  $\mu$  e  $\tau$  para designar linhas foram confundidas justamente visando associar ao eixo vertical o eixo temporal imaginário. Por meio de (253),

$$T(\tau, \tau + 1)|_{\text{n flips}} = \exp \left[ -L(\tau, \tau + 1)|_{\text{n flips}} \right] \quad (254)$$

Seguindo a ideia de [22], temos

$$L|_{0 \text{ flips}} = -K \sum_x \sigma^\tau(x) \sigma^\tau(x + 1) \quad (255)$$

$$L|_{1 \text{ flip}} = 2\beta_\tau - \frac{K}{2} \sum_x [\sigma^\tau(x) \sigma^\tau(x + 1) + \sigma^{\tau+1}(x) \sigma^{\tau+1}(x + 1)] \quad (256)$$

$$L|_{\text{n flip}} = 2n\beta_\tau - \frac{K}{2} \sum_x [\sigma^\tau(x) \sigma^\tau(x + 1) + \sigma^{\tau+1}(x) \sigma^{\tau+1}(x + 1)] \quad (257)$$

de tal forma que os elementos de  $\hat{T}$  são

$$T|_{0 \text{ flips}} = \exp \left[ -K \sum_x \sigma^\tau(x) \sigma^\tau(x + 1) \right] \quad (258)$$

$$T|_{1 \text{ flip}} = \exp(-2\beta_\tau) \cdot \exp \left\{ \frac{K}{2} \sum_x [\sigma^\tau(x) \sigma^\tau(x + 1) + \sigma^{\tau+1}(x) \sigma^{\tau+1}(x + 1)] \right\} \quad (259)$$

$$T|_{\text{n flips}} = \exp(-2n\beta_\tau) \cdot \exp \left\{ \frac{K}{2} \sum_x [\sigma^\tau(x) \sigma^\tau(x + 1) + \sigma^{\tau+1}(x) \sigma^{\tau+1}(x + 1)] \right\} \quad (260)$$

Para entender o que as fórmulas acima dizem, é conveniente lembrar do mapeamento para o modelo clássico unidimensional e as matrizes de Pauli. Antes, porém, devemos relembrar as relações (202) e (204). Para os elementos acima, escrevemos

$$T|_{0 \text{ flips}} = e^{-\delta\tau \hat{H}}|_{0 \text{ flips}} \approx 1 - \delta\tau \hat{H}|_{0 \text{ flips}} \quad (261)$$

$$T|_{1 \text{ flip}} = e^{-\delta\tau \hat{H}}|_{1 \text{ flip}} = \langle \sigma_1, \dots, \sigma'_j, \dots, \sigma_N | e^{-\delta\tau \hat{H}} | \sigma_1, \dots, \sigma_j, \dots, \sigma_N \rangle |_{1 \text{ flip}}, \quad \sigma_j \neq \sigma'_j \quad (262)$$

$$\approx \langle \sigma_1, \dots, \sigma'_j, \dots, \sigma_N | 1 - \delta\tau \hat{H} | \sigma_1, \dots, \sigma_j, \dots, \sigma_N \rangle \quad (263)$$

$$\approx \langle \sigma_1, \dots, \sigma'_j, \dots, \sigma_N | -\delta\tau \hat{H} | \sigma_1, \dots, \sigma_j, \dots, \sigma_N \rangle \quad (264)$$

$$\approx -\delta\tau \hat{H}|_{1 \text{ flip}} \quad (265)$$

$$T|_{\text{n flips}} = e^{-\delta\tau \hat{H}}|_{\text{n flips}} \quad (266)$$

$$\approx -\delta\tau \hat{H}|_{\text{n flips}} \quad (267)$$

O desaparecimento do termo 1 na aproximação  $1 - \delta\tau \hat{H}$  em (265) e (267) se deve a ortogonalidade dos kets de linhas diferentes, como exemplificado em (263)-(265). As relações acima serão úteis na discussão do mapeamento para o modelo quântico.

Para um elemento diagonal da matriz de transferência, temos

$$T(\tau, \tau + 1)|_{0 \text{ flips}} = \exp \left[ -K \sum_x \sigma^\tau(x) \sigma^\tau(x + 1) \right] = \exp \left[ -\delta\tau \hat{H}|_{0 \text{ flips}} \right] \quad (268)$$

A equação (268) nos diz duas coisas: (1) que  $\delta\tau \sim K$  e (2) os elementos diagonais de  $\hat{H}$  dão energia de uma configuração de spins  $|\psi\rangle_\tau = |\sigma_1, \dots, \sigma_N\rangle_\tau$ , energia essa dada por

$$E(|\psi\rangle) = \sum_x \sigma_x^\tau \sigma_{x+1}^\tau$$

Então, precisamos construir  $\hat{H}$  tal que, na ausência de flips, tenhamos a energia do sistema. Podemos escrever o seguinte (omitindo o termo de linha  $\tau$ ):

$$\hat{H} |\sigma_1, \dots, \sigma_N\rangle = \left( \sum_x \sigma_x \sigma_{x+1} \right) |\sigma_1, \dots, \sigma_N\rangle \quad (269)$$

$$= \sigma_1 \sigma_2 |\sigma_1, \dots, \sigma_N\rangle + \sigma_2 \sigma_3 |\sigma_1, \dots, \sigma_N\rangle + \dots + \sigma_{N-1} \sigma_N |\sigma_1, \dots, \sigma_N\rangle \quad (270)$$

Não utilizamos as condições de contorno periódicas na equação acima, porém é fácil generalizar adicionando apenas mais um termo.

Podemos imaginar que cada spin  $|\sigma_i\rangle$  reside em um espaço de Hilbert  $\mathcal{H}_i$  de base  $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ , para cada  $i$  de 1 até  $N$ . Desta forma, escreveríamos

$$|\sigma_1 \sigma_2\rangle = |\sigma_1\rangle \otimes |\sigma_2\rangle$$

para o estado composto de dois spins com  $|\sigma_1 \sigma_2\rangle \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  e, de forma mais geral,

$$|\sigma_1, \dots, \sigma_N\rangle = |\sigma_1\rangle \otimes \dots \otimes |\sigma_N\rangle = |\sigma_1, \sigma_2\rangle \otimes \dots \otimes |\sigma_N\rangle = |\sigma_1, \sigma_2\rangle \otimes |\sigma_3, \dots, \sigma_N\rangle, \dots \quad (271)$$

Utilizando (271), podemos reescrever (270) como

$$\hat{H} |\{\sigma\}\rangle = (\sigma_1 \sigma_2 |\sigma_1 \sigma_2\rangle) \otimes \dots \otimes |\sigma_3, \dots, \sigma_N\rangle + |\sigma_1\rangle \otimes (\sigma_2 \sigma_3 |\sigma_2, \sigma_3\rangle) \otimes |\sigma_4, \dots, \sigma_N\rangle \quad (272)$$

$$+ \dots + |\sigma_1, \dots, \sigma_{N-2}\rangle \otimes (\sigma_{N-1} \sigma_N |\sigma_{N-1} \sigma_N\rangle) \quad (273)$$

$$= \sum_{k=1}^N \left[ |\sigma_1, \dots, \sigma_{k-2}\rangle \otimes (\sigma_{k-1} \sigma_k |\sigma_{k-1}, \sigma_k\rangle) \otimes |\sigma_{k+1}, \dots, \sigma_N\rangle \right] \quad (274)$$

$$= \sum_{k=1}^N \left[ \sigma_{k-1} \sigma_k |\sigma_1, \dots, \sigma_N\rangle \right] \quad (275)$$

O termo  $\sigma_{k-1} \sigma_k |\sigma_{k-1}, \sigma_k\rangle$  poderia ser reescrito com a aplicação do operador  $\hat{\sigma}_{k-1}^z \hat{\sigma}_k^z$  (ainda não definidos)

$$\hat{\sigma}_{k-1}^z \hat{\sigma}_k^z |\sigma_{k-1}, \sigma_k\rangle = \hat{\sigma}_{k-1}^z |\sigma_{k-1}\rangle \otimes \hat{\sigma}_k^z |\sigma_k\rangle = \sigma_{k-1} \sigma_k |\sigma_{k-1}, \sigma_k\rangle \quad (276)$$

Generalizando, poderíamos definir  $\hat{\sigma}_{k-1}^z \hat{\sigma}_k^z$  agindo sobre  $\mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N$

$$\hat{\sigma}_{k-1}^z \hat{\sigma}_k^z |\sigma_1, \dots, \sigma_N\rangle = \sigma_{k-1} \sigma_k |\sigma_1, \dots, \sigma_N\rangle \quad (277)$$

Utilizando a equação (277), podemos escrever

$$\hat{H}|_{0 \text{ flips}} = - \sum_k \hat{\sigma}_k^z \hat{\sigma}_{k+1}^z \quad (278)$$

Se definirmos

$$|\uparrow\rangle \stackrel{\text{def}}{=} |+1, z\rangle, \quad |\downarrow\rangle \stackrel{\text{def}}{=} |-1, z\rangle, \quad (279)$$

os operadores  $\{\hat{\sigma}_k^z\}_k$  são justamente as matrizes de Pauli generalizadas para o espaço produto  $\mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_N$  definidos pela equação (276).

Para o caso unidimensional, quanto  $\delta\tau \rightarrow 0$ , tivemos uma divergência no acoplamento  $J$ . Como estamos considerando o eixo vertical como temporal, é de se esperar uma divergência no acoplamento  $J_v$ , em vista do fato de que configurações de spin (uma linha num certo instante do tempo  $\tau$ ) entre dois instantes separados por uma distância  $\delta\tau$  tendem a estarem mais fortemente relacionadas conforme  $\delta\tau \rightarrow 0$ . De outro modo, estamos dizendo que duas configurações de spins, em diferentes locais do tempo, estão relacionadas entre si de tal forma que a relação é mais forte quanto mais próximas temporalmente estiverem os dois estados de spins; as duas configurações.

As equações (259) e (265) juntas dão

$$T|_{1 \text{ flip}} = \exp(-2\beta_\tau) \cdot \exp \left\{ \frac{K}{2} \sum_x [\sigma^\tau(x) \sigma^\tau(x+1) + \sigma^{\tau+1}(x) \sigma^{\tau+1}(x+1)] \right\} \approx -\delta\tau \hat{H}|_{1 \text{ flip}} \quad (280)$$

Com o argumento acima, podemos estabelecer a relação  $\delta\tau \sim \exp(-2\beta_\tau)$  [22]. De fato, como feito para o caso unidimensional, podemos identificar [22, 10]

$$\delta\tau = \exp(-2\beta_\tau) \quad (281)$$

A equação acima também estabelece uma proporcionalidade entre  $K$  e  $\exp(-2\beta_\tau)$ , no limite  $\tau$ -contínuo. Com isso, podemos escrever [22]

$$K = \lambda \exp(-2\beta_\tau) = \lambda \delta\tau \quad (282)$$

Utilizando tais relações e a matriz  $\hat{\sigma}^x$  para representar os flips de spins, podemos reescrever as equações (261)-(267)

$$T|_{0 \text{ flips}} = 1 + \delta\tau \left[ \lambda \sum_j \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z \right] + \mathcal{O}(\delta\tau^2) \quad (283)$$

$$T|_{1 \text{ flip}} = 1 + \delta\tau \left[ \lambda \sum_j \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z + \hat{\sigma}_k^x \right] + \mathcal{O}(\delta\tau^2) \quad (284)$$

$$\approx \delta\tau \quad (285)$$

$$T|_{n \text{ flips}} = 1 + \delta\tau \left[ \lambda \sum_j \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z + \sum_{k_1, \dots, k_n} \hat{\sigma}_{k_n}^x \right] + \delta\tau^2 \sum_{i \neq j} \hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_j^x + \dots \quad (286)$$

$$\approx \delta\tau^n \quad (287)$$

Utilizamos os operadores  $\hat{\sigma}^x$  para representar o "flip" dos spins por ser a ação que o mesmo adquire na base dos autoestados de  $\hat{\sigma}^z$ , a base escolhida. Os termos  $\delta\tau^k$ , onde  $k$  é o número de flips de deve à relação  $\delta\tau = \exp(-2\beta_\tau)$  e os termos  $\exp(-2k\beta_\tau)$  para os elementos de  $T$  com  $k$  flips em (261)-(267).

Das equações (283) - (287) podemos ver que, no limite  $\delta\tau \rightarrow 0$  devemos ignorar termos de mais alta potência em  $\delta\tau$ . Com isso, os únicos termos restantes no limite  $\tau$ -contínuo são os termos de "não flip" e flip único [10], ou seja

$$\hat{H} = - \sum_j (\hat{\sigma}_j^x + \lambda \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z) \quad (288)$$

Podemos encarar a Hamiltoniana acima como uma generalização encontrada para o caso unidimensional. Poderíamos colocar uma constante multiplicando a somatória de tal forma a determinar a escala de energia. Deixaremos a Hamiltoniana na forma acima visando simplificar estudos futuros.

Alguns comentários a respeito do ajuste das constantes de acoplamento são necessário. A relação entre  $\beta$  e  $\beta_\tau$  nos mostra que, no limite para  $\tau$ -contínuo, devemos ajustar os acoplamentos de tal forma que o acoplamento temporal seja grande enquanto que o acoplamento espacial torna-se fraco. Tais relações nos levam a considerar um modelo fortemente anisotrópico [22].

### 7.2.1 Auto-dualidade para o Modelo de Ising Quântico

A Hamiltoniana para o Modelo Quântico de Ising Unidimensional é

$$\hat{H}(\sigma; \lambda) = - \sum_j (\hat{\sigma}_j^x + \lambda \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z), \quad (289)$$

Como feito na sub-subseção 6.5.1, faremos uma transformação dual seguindo a ideia de superpor a rede do modelo por outra transladada vertical e horizontalmente por um fato de  $a/2$ , onde  $a$  é a distância entre os sítios. No entanto, quanticamente a rede se tornou uma cadeia de spins evoluindo no tempo imaginário, então, necessitamos apenas da translação no eixo espacial. Da mesma forma que fora feita para o modelo clássico, esta sub-subseção busca um mapeamento entre do comportamento para baixas e altas temperaturas.

Começamos definindo operadores duais, agindo na rede dual da seguinte forma [22]

$$\mu_1(i) = \sigma^z(i+1)\sigma^z(i), \quad \mu_3(i) = \prod_{j<i} \sigma^x(j) \quad (290)$$

onde os "circunflexos" acima dos sigmas foram retirados, no entanto, ainda representando os operadores da Hamiltoniana. É fácil provar que os operadores  $\mu_1$  e  $\mu_2$  tem as mesmas propriedades algébricas das matrizes de Pauli, ou seja

$$\{\mu_1(i), \mu_3(i)\} = 0, \quad [\mu_1(i), \mu_3(j)] = 0, \quad i \neq j \quad (291)$$

A interpretação para os operadores  $\mu_k$  são simples: a aplicação de  $\mu_1$  diz se dois spins adjacentes estão ou não alinhados e a aplicação de  $\mu_3(i)$  causa um "flip" nos spins à esquerda de  $i$ . Dá interpretação para  $\mu_3$ , podemos escrever

$$\sigma^x(i) = \mu_3(i+1)\mu(i)$$

com isso, na linguagem dos novos operadores, a Hamiltoniana se torna

$$H = - \sum_i \mu_3(i)\mu_3(i+1) - \lambda \sum_i \mu_1(i) \quad (292)$$

$$= \lambda \left[ - \sum_i \mu_1(i) - \lambda^{-1} \sum_i \mu_3(i)\mu_3(i+1) \right] \quad (293)$$

Nota-se facilmente que o conteúdo interno aos colchetes em (293) tem a mesma forma da Hamiltoniana original, fazendo-se as substituições  $\sigma \rightarrow \mu$ ,  $\lambda \rightarrow \lambda^{-1}$ . Utilizando-se a mesma notação da equação (289), podemos escrever [22]

$$H(\sigma; \lambda) = \lambda H(\mu; \lambda^{-1}) \quad (294)$$

Devido ao fato de os operadores  $\sigma$  e  $\mu$  terem a mesma álgebra, (294) é uma relação de simetria para o modelo original por si só (sem considerar a rede dual, a princípio) [22]. (294) também nos dá uma relação para os autovalores da Hamiltoniana

$$E(\lambda) = \lambda E(\lambda^{-1}) \quad (295)$$

Precisamos, contudo, entender o significado do parâmetro  $\lambda$ .

A curva (109) derivada na sub-subseção 6.5.1, quando no contexto atual, associando  $K$  a  $\beta_\tau$ , nos dá

$$\sinh(2K) \sinh(2\beta_\tau) = 1 \quad (296)$$

No limite  $\tau$ -contínuo, temos  $\beta_\tau \rightarrow \infty$  e  $K \rightarrow 0$ , o que implica em

$$\sinh 2\beta_\tau \rightarrow \frac{1}{2} e^{2\beta_\tau} \quad (297)$$

$$\sinh 2K \rightarrow 2K \quad (298)$$

$$\therefore \sinh(2K) \sinh(2\beta_\tau) \rightarrow K \exp(2\beta_\tau), \quad (299)$$



ou, de outra forma

$$K = \exp(-2\beta_\tau), \quad (300)$$

a mesma equação obtida em (282) para  $\lambda = 1$ . Como simplesmente aplicamos a auto-dualidade do modelo clássico no limite de ajuste dos acoplamentos para o mapeamento para o modelo quântico, a conclusão é que na transição de fase  $\lambda$  assume o valor 1. Isso caracteriza o parâmetro  $\lambda$  como algo semelhante a temperatura, além da derivação do valor crítico de  $\lambda$ .  $\lambda$  é associado, mais precisamente ao inverso da temperatura, porém comumente chamado de temperatura. [22]

É interessante notar que a equação (295) nos diz que se  $\lambda$  é uma temperatura crítica,  $\lambda^{-1}$  também será [22]. A suposição de que a temperatura crítica é única leva ao mesmo resultado,  $\lambda_c = 1$ . Em vista da interpretação do parâmetro  $\lambda$ , (294) é a relação de auto-dualidade para o modelo quântico; é a relação entre baixas e altas temperaturas.

## 8 A linguagem da Segunda Quantização

### 8.1 Introdução: Quantização Canônica, Primeira e Segunda Quantização

Inicialmente, estudamos Mecânica Quântica com base na formulação Hamiltoniana da Mecânica Clássica. Na Mecânica Hamiltoniana, o estados de uma partícula está determinado, em cada instante de tempo, por sua posição no espaço de fase  $(p, q)$ , onde  $p$  representa os momentos generalizados,  $p = (p_1, \dots, p_n)$  e  $q$  as posições generalizadas,  $q = (q_1, \dots, q_n)$  [13]. Na teoria, existe uma estrutura a qual é chamada *colchetes de Poisson* definidos como

$$\{\alpha, \beta\} = \sum_i \left( \frac{\partial \alpha}{\partial q_i} \frac{\partial \beta}{\partial p_i} - \frac{\partial \alpha}{\partial p_i} \frac{\partial \beta}{\partial q_i} \right), \quad (301)$$

assim, a variação temporal de uma quantidade  $\alpha(p, q)$  pode ser definida em termos dos colchetes de Poisson

$$\frac{d\alpha}{dt} = \{\alpha, H\}, \quad (302)$$

com  $H$  sendo a Hamiltoniana do sistema clássico. Chama-se *transformação canônica*, uma transformação de coordenadas  $(p, q) \rightarrow (p', q')$  que preserve as equações de Hamilton e, por conseguinte, a relação dos colchetes de Poisson [13]. A passagem da Mecânica Clássica à Mecânica Quântica é feita por meio do processo de *quantização canônica*<sup>3</sup>.

**Quantização Canônica:** O processo consistem em definir operadores  $\hat{p}$  e  $\hat{q}$  nos quais as quantidade clássicas  $p$  e  $q$  são mapeadas por meio de um "mapeamento quântico"  $Q$  que leva os colchetes de Poisson ao comutador quântico da seguinte forma

$$\{p, q\} \mapsto \frac{1}{i\hbar} [\hat{p}, \hat{q}] \quad (303)$$

De forma mais geral,  $p$  e  $q$  podem representar quaisquer quantidades clássicas. Tal processo é assumido ser verdadeiro [8]. Contudo, nem sempre vale a existência de tal mapa  $Q$  (Theorema de Groenewold) [15].

Como dito,  $\hat{p}$  e  $\hat{q}$  são operadores (de momento e posição generalizadas, respectivamente). Tais operadores agem em um *Espaço de Hilbert*. Um sistema quântico, portanto, é descrito em termos de um ou mais elementos pertencentes a um dado espaço  $\mathcal{H}$ . Classicamente, o sistema era determinado por um ponto no espaço de fase, na formulação Hamiltoniana. Quanticamente,

---

<sup>3</sup>O nome se deve à formulação de Heisenberg que deriva a dinâmica do sistema quântico de forma similar à feita classicamente pelos colchetes de Poisson.

o sistema é descrito por um *estado quântico*  $|\psi\rangle$  pertencente ao espaço em questão [39]. Os operadores  $\hat{p}$  e  $\hat{q}$  agem sobre tais estados, então. Para os operadores de posição e momento, define-se uma base de estados  $|p\rangle$  e  $|q\rangle$ , respetivamente, de tal forma que as ações de  $\hat{p}$  e  $\hat{q}$  em tais espaço são óbvias.

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle \quad (304)$$

$$\hat{q}|q\rangle = q|q\rangle \quad (305)$$

Definindo uma base canônica  $\{|x\rangle\}$ , onde  $|x\rangle$  assume o valor 1 na posição  $x$  e 0 nas demais. Podemos então expandir qualquer estado  $|\alpha\rangle$  em tal base. A  $x$ -ésima coordenada de  $|\alpha\rangle$ , denotada  $\alpha(x)$ , nos permite definir o produto interno entre dois elementos  $|\psi\rangle$  e  $|\phi\rangle$ , para o caso contínuo, como

$$\langle\phi|\psi\rangle = \int_x \phi^*(x)\psi(x)dx \quad (306)$$

Podemos expandir  $|\psi\rangle$  na base  $\{|x\rangle\}$ , ou em outra base base,  $\{|p\rangle\}$  por exemplo, como

$$|\psi\rangle = \int_p |p\rangle \langle p|\psi\rangle dp = \int_p \langle p|\psi\rangle |p\rangle dp \quad (307)$$

A interpretação física do termo  $|\langle\phi|\psi\rangle|^2$  é a resposta à pergunta "qual a probabilidade de um dado estado inicial  $|\psi\rangle$  ser encontrado (transformado) no estado  $|\phi\rangle$ ?". Com isso, podemos definir a medida de um observável (operador), por exemplo,  $\hat{p}$  como sendo um de seus autoestados  $p$ . O elemento  $|\psi(p)|^2 = |\langle p|\psi\rangle|^2 dp$  é interpretado como a probabilidade de se encontrar o estado  $|\psi\rangle$  no estado com momento entre  $p$  e  $p + dp$  [39]. Com tal interpretação e da equação (307), interpretamos  $\psi(p)$  como um "peso probabilístico" do estado  $|p\rangle$ . Para se definir uma medida de probabilidade, requer-se

$$\int_p |\psi(p)|^2 dp = 1 \quad (308)$$

O estado  $|\psi\rangle$  pode ser utilizado para descrevermos um sistema de muitas partículas. Um caso especial são as partículas idênticas<sup>45</sup>. A função de estado das posições,  $\psi(\mathbf{r})$ , passa a ser uma função combinada que descreve os estados. Em um caso específico de dois corpos,  $\langle\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2|\psi\rangle = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  [39]. A expressão anterior sugere perguntas do tipo "qual partícula está em qual estado?", "qual o estado da partículas 1". Se, no entanto, as partículas são idênticas, tais perguntas não têm sentido pois as partículas são indistinguíveis; não podemos nomear partículas 1 e 2, como feito.

O processo descrito anteriormente é chamado *primeira quantização*. O grande ponto que queremos destacar são as perguntas da primeira quantização, como exemplificado acima. Há, contudo, um segundo formalismo<sup>6</sup> para se trabalhar a Mecânica Quântica onde as perguntas são trocadas por outras que têm sentido em tais casos, a chamada *segunda quantização*.

Na linguagem da segunda quantização, as partículas são descritas por um vetor de estado da forma

$$|n_1, n_2, \dots, n_k, \dots\rangle,$$

representando que  $n_j$  partículas estão no estado  $j$ . O formalismo da segunda quantização consiste na definição dos chamados *operadores de criação e destruição* os quais, como o nome sugere, criam e destroem partículas em determinados estados. Por exemplo, se uma partícula está no estado  $j$  e em seguida, de alguma forma, passa a estar no estado  $k$ ,  $k \neq j$ , o processo para descrever tal dinâmica consiste em destruir a partícula no estado  $j$  e criar a partícula no estado  $k$ . Desta forma, uma partícula passa a ser interpretada como *um estado ocupado*.

A seguir, desenvolveremos os operadores de criação e destruição para um caso específico, o oscilador harmônico. As ideia aqui mencionadas, e as que estão pode vir, serão melhores compreendidas com o entendimento da próxima subseção.

<sup>4</sup>Partículas idênticas são indistinguíveis quanticamente.

<sup>5</sup>As afirmações feitas a seguir serão melhores entendidas ao se falar a respeito de bósons e férmions.

<sup>6</sup>Há vários outros, na realidade.

## 8.2 O Oscilador Harmônico Quântico e Operadores de Criação e Destruição

Como objetivo, temos a apresentação dos operadores de criação de destruição possibilitando uma melhor compreensão do trabalho seguinte.

Para o oscilador harmônico simples quântico 1-dimensional, pela quantização canônica, a Hamiltoniana toma a forma

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \quad (309)$$

Se definirmos os operadores [5]

$$\tilde{x} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x}, \quad \tilde{p} = \sqrt{\frac{1}{m\omega\hbar}}\hat{p}, \quad (310)$$

os mesmos são adimensionais, por isso o aparecimento de  $\hbar$ , e podem ser utilizados para representar  $\hat{H}$ . Podemos então escrever o seguinte:

$$\hat{H} = \hbar\omega\tilde{H}, \quad \tilde{H} = \frac{1}{2}(\tilde{x}^2 + \tilde{p}^2) \quad (311)$$

Resolver o problema de autovalores e autovetores de  $\tilde{H}$  é resolver o problema para  $\hat{H}$ , como mostram as equações acima. Não sabendo muito sobre o espectro e multiplicidade geométrica dos autovalores, escrevemos a equação de autovalor-auto-vetor como

$$\tilde{H}|\alpha, i\rangle = \varepsilon_\alpha|\alpha, i\rangle,$$

onde o índice  $i$  é utilizado para possíveis degenerescências e  $\alpha$  indexa os estados. O espectro de  $\tilde{H}$  é obtido como sendo  $E_\alpha = \hbar\omega\varepsilon_\alpha$ .

O porquê de a equação (311) ser utilizada está ligado ao fato de podermos utilizar a relação de comutação entre os operadores e decompor o termo  $\tilde{x}^2 + \tilde{p}^2$  de forma semelhante a como se faz com números  $a^2 + b^2 = (a + ib)(a - ib)$ [5]. Como sabemos

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

e também pode-ser ver que

$$[\tilde{x}, \tilde{p}] = i$$

Definindo [5, 39]

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\tilde{x} + i\tilde{p}) \quad (312)$$

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\tilde{x} - i\tilde{p}) \quad (313)$$

o produto  $\hat{a}^\dagger\hat{a}$  é

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger\hat{a} &= \frac{1}{2}(\tilde{x} - i\tilde{p})(\tilde{x} + i\tilde{p}) \\ &= \frac{1}{2}(\tilde{x}^2 + \tilde{p}^2 + i(\tilde{x}\tilde{p} - \tilde{p}\tilde{x})) \\ &= \frac{1}{2}(\tilde{x}^2 + \tilde{p}^2 + i[\tilde{x}, \tilde{p}]) \\ &= \frac{1}{2}(\tilde{x}^2 + \tilde{p}^2 - 1) \end{aligned}$$

Da última equação, podemos escrever

$$\frac{1}{2}(\tilde{x}^2 + \tilde{p}^2) = \tilde{H} = \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \quad (314)$$

$$\boxed{\hat{H} = \left( \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega} \quad (315)$$

Até o momento, a ideia presente pode ser a de estar mudando a forma do problema sem mudar sua complexidade. No entanto, os estudos seguintes dos operadores  $\hat{a}^\dagger$ ,  $\hat{a}$  mostrarão o contrário. Começemos por demonstrar certas propriedades dos operadores  $\hat{a}^\dagger$  e  $\hat{a}$ .

Facilmente, utilizando o processo feito para o cálculo de  $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ , verifica-se

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \quad (316)$$

Com isso, podemos verificar

$$[\hat{a}^\dagger \hat{a}, \hat{a}] = (\hat{a}^\dagger \hat{a} - \hat{a} \hat{a}^\dagger) \hat{a} = -\hat{a} \quad (317)$$

$$[\hat{a}^\dagger \hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger (\hat{a} \hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger \hat{a}) = \hat{a}^\dagger \quad (318)$$

As relações acima serão úteis futuramente.

Claramente, o operador  $\hat{a}^\dagger \hat{a}$  é positivo, logo, também o são seus autovalores [5, 26]. De outro modo, sendo  $|\alpha, i\rangle^7$  um autovetor de  $\hat{a}^\dagger \hat{a}$  com autovalor associado  $\alpha$ , então  $\alpha \geq 0$ , para todo  $\alpha$ . A seguir, anunciaremos alguns lemas de prova simples seguindo as ideias utilizadas em [5].

**Lema 4.** *O estado  $\hat{a} |\alpha\rangle$  é um autoestado do operador  $\hat{a}^\dagger \hat{a}$  com autovalor associado  $\alpha - 1$ .  $\alpha = 0$  se, e somente se,  $\hat{a} |\alpha\rangle = 0$ .*

**Lema 5.** *O estado  $\hat{a}^\dagger |\alpha\rangle$  é um autoestado do operador  $\hat{a}^\dagger \hat{a}$  com autovalor associado  $\alpha + 1$ . Também,  $\hat{a}^\dagger |\alpha\rangle$  é sempre não nulo.*

**Lema 6.** *O estado associado ao autovalor  $\alpha = 0$  é não degenerado.*

**Lema 7.** *O espectro de  $\hat{a}^\dagger \hat{a}$  é composto de autovalores inteiros não negativos.*

**Lema 8.** *Para todo  $n \in \mathbb{N}_0$ , o autoestado  $|n\rangle$  é não degenerado.*

Para provar os lemas 4 e 5, utilizamos as relações de comutação da página anterior.

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger \hat{a} (\hat{a} |\alpha\rangle) &= \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a} |\alpha\rangle \\ &= (-\hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a}) |\alpha\rangle \\ &= \hat{a} (-1 + \hat{a}^\dagger \hat{a}) |\alpha\rangle \\ &= (\alpha - 1) \hat{a} |\alpha\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger \hat{a} (\hat{a}^\dagger |\alpha\rangle) &= \hat{a}^\dagger (\hat{a} \hat{a}^\dagger) |\alpha\rangle \\ &= \hat{a}^\dagger (1 + \hat{a}^\dagger \hat{a}) |\alpha\rangle \\ &= \hat{a}^\dagger (1 + \alpha) |\alpha\rangle \\ &= (\alpha + 1) (\hat{a}^\dagger |\alpha\rangle) \end{aligned}$$

As relações acima provam apenas uma parte dos lemas. Para o restante, basta tomarmos a norma do estado  $\hat{a} |\alpha\rangle$  e  $\hat{a}^\dagger |\alpha\rangle$ . Devido às relações acima, definimos

---

<sup>7</sup>O índice "i" é usado para possíveis degenerescências.

Para o lema 4: Seja  $\alpha = 0$ , então

$$\|\hat{a}|\alpha\rangle\| = \langle\alpha|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha\langle\alpha|\alpha\rangle = 0 \quad (319)$$

Supondo  $\hat{a}|\alpha\rangle = 0$ , multiplicando à esquerda por  $\hat{a}^\dagger$ , temos

$$\hat{a}^\dagger(\hat{a}|\alpha\rangle) = \hat{a}^\dagger\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle = 0, \quad \therefore \alpha = 0, \quad (320)$$

pois  $|\alpha\rangle$  deve ser não nulo, em vista da definição de autovetores.

Para o lema 5:

$$\|\hat{a}^\dagger|\alpha\rangle\| = \langle\alpha|\hat{a}\hat{a}^\dagger|\alpha\rangle = \langle\alpha|1 + \hat{a}^\dagger\hat{a}|\alpha\rangle = (\alpha + 1)\langle\alpha|\alpha\rangle, \quad (321)$$

com  $\alpha \geq 0$ , ou seja,  $\|\hat{a}^\dagger|\alpha\rangle\| \neq 0$ .

Para o lema 6, projetamos a equação  $\hat{a}|0, i\rangle = 0$  na base  $\{|x\rangle\}$

$$\langle x|\hat{a}|0, i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x + \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right) \psi_{0,i}(x) = 0 \quad (322)$$

$$\left( \frac{m\omega}{\hbar}x + \frac{d}{dx} \right) \psi_{0,i}(x) = 0 \Leftrightarrow \psi_0(x) = ke^{-m\omega x^2/2\hbar} \quad (323)$$

Como o espaço das soluções da equação diferencial tem dimensão 1, o autovalor  $\alpha = 0$  é não degenerado [5].

Por um processo iterativo, é fácil ver que o vetor  $\hat{a}^p|\alpha\rangle$  é um autoestado de  $\hat{a}^\dagger\hat{a}$  com autovalor  $\alpha - p$ . Para um dado  $\alpha$ , suposto não inteiro, podemos determinar  $n \geq 0$  inteiro tal que

$$n < \alpha < n + 1$$

Com isso, consideramos a sequência

$$\{|\alpha\rangle, \hat{a}|\alpha\rangle, \dots, \hat{a}^n|\alpha\rangle\} \quad (324)$$

Como  $\alpha - n > 0$ ,  $\hat{a}|\alpha\rangle$  é um vetor não nulo. Contudo,  $\alpha - n - 1 < 0$ , de tal forma que a ação de  $\hat{a}$  em  $\hat{a}^n|\alpha\rangle$  deveria levar a um vetor não nulo, pelo lema 4 com autovalor  $\alpha - n - 1$ , negativo. Isso contradiz o fato de todo autovalor de  $\hat{a}^\dagger\hat{a}$  ser não negativo. A conclusão é que o espectro de  $\hat{a}^\dagger\hat{a}$  é composto de inteiros não negativos.

Utilizando a prova acima para o lema 7, podemos utilizar o lema 6 para mostrar que todo estado  $|n\rangle$  é não degenerado, aplicando-se  $\hat{a}^\dagger$  diversas vezes ao estado  $|0\rangle$ .

Pela ideia acima, podemos escrever qualquer estado  $|n\rangle$  como

$$|n\rangle = k_n(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle \quad (325)$$

É fácil determinar  $k_n$  da seguinte forma

$$\langle n|n\rangle = |c_n|^2 \langle n-1|\hat{a}\hat{a}^\dagger|n-1\rangle = n|c_n|^2 = 1 \quad (326)$$

$$\therefore c_n = \frac{1}{\sqrt{n}}, \quad (327)$$

logo

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\hat{a}^\dagger|n-1\rangle = \dots = \frac{1}{\sqrt{n}}\frac{1}{\sqrt{n-1}}\dots\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle \quad (328)$$

o que dá, para  $k_n$

$$k_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} \quad (329)$$

A ação dos operadores  $\hat{a}^\dagger$  e  $\hat{a}$  na base  $\{|n\rangle\}$  pode ser identificada como, seguindo o cálculo do coeficiente  $c_n$  acima

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad (330)$$

$$\hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \quad (331)$$

Com as informações acima, podemos associar a um autoestado de  $\hat{H}$ ,  $|E_n\rangle$  o estado  $|n\rangle$  que é autovetor de  $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ . Então

$$\hat{H} |n\rangle = (\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1/2) \hbar \omega |n\rangle = (n + 1/2) \hbar \omega |n\rangle = E_n |n\rangle \quad (332)$$

Utilizando as expressões para  $\hat{x}$  e  $\hat{p}$  em termos dos operadores de criação e destruição, podemos trabalhar em cima dos estados  $|n\rangle$  com maior facilidade em vistas da ação dos operadores sobre tais estados. Os dois grandes destaques do que fora feito são: a determinação da base e espectro de  $\hat{H}$  sem resolver a equação de Schrödinger e a facilidade que é introduzida pelos operadores de criação e destruição [5, 39] (exemplificaremos a seguir).

Poderíamos nos perguntar a respeito do valor médio de  $\hat{p}$ , ou  $\hat{p}^2$  na base  $\{|n\rangle\}$ . Utilizando as equações (310), (312) e (313), podemos escrever

$$\hat{p} = \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} i (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \quad (333)$$

$$\hat{p}^2 = \frac{m\omega\hbar}{2} [ -(\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger - (\hat{a})^2 ] \quad (334)$$

Então, o cálculo dos valores médios fica:

$$\langle n | \hat{p} | n \rangle = \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} i \langle n | \hat{a}^\dagger - \hat{a} | n \rangle \quad (335)$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} i [ \sqrt{n+1} \langle n | n+1 \rangle - \sqrt{n} \langle n | n-1 \rangle ] = 0 \quad (336)$$

$$\langle n | \hat{p}^2 | n \rangle = \frac{m\omega\hbar}{2} \langle n | -(\hat{a}^\dagger)^2 - (\hat{a})^2 + \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger | n \rangle \quad (337)$$

$$= \frac{m\omega\hbar}{2} \langle n | \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger | n \rangle \quad (338)$$

$$= \frac{m\omega\hbar}{2} [ n \langle n | n \rangle + (n+1) \langle n | n \rangle ] \quad (339)$$

$$= \left( n + \frac{1}{2} \right) m\omega\hbar \quad (340)$$

Como se pode ver, os operadores  $\hat{a}$ ,  $\hat{a}^\dagger$  tornam simples o processo de determinação de quantidades na base dos autoestados de  $\hat{H}$ . É interessante notar que somente termos produtos com o mesmo número de  $\hat{a}$  e  $\hat{a}^\dagger$  contribuem, pois um número diferente leva a estados ortogonais.

Para finalizar, é importante mencionar a interpretação dos operadores de criação e destruição e comentar sobre o estado fundamental  $|0\rangle$ . O estado  $|n\rangle$  representa um oscilador no  $n$ -ésimo estado excitado. Os operadores  $\hat{a}^\dagger$  e  $\hat{a}$  poder ser vistos como os operadores que levam o oscilador para um estado mais elevado ou menos, respectivamente. De outro modo, pode-se interpretar os operadores como sendo um operador que destrói um estado ( $\hat{a}$ ) e um operador que cria um novo estado ( $\hat{a}^\dagger$ ). Entretanto, os operadores de criação e destruição são melhores entendidos no contexto de mais de um oscilador harmônico quântico.

Para  $N$  osciladores, a Hamiltoniana final toma a forma

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^N \hbar \omega_j \left( \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j + \frac{1}{2} \right) \quad (341)$$

Um estado do sistema de  $N$  osciladores é descrito pelo vetor de estado  $|n_1, \dots, n_N\rangle$  que diz quantos osciladores há em cada estado. Os operadores de criação e destruição  $\hat{a}_j^\dagger$  e  $\hat{a}_j$  agem apenas no  $j$ -ésimo oscilador. Cada oscilador pode ser visto como uma partícula. Para a posição  $j$ , temos  $n_j$  partículas, cada uma com energia  $\hbar\omega_j$  acima do estado fundamental,  $\hbar\omega_j/2$ , de tal modo que a energia total é  $\hbar\omega_j(n_j + 1/2)$ . Com essa interpretação, o estado  $|0\rangle = |0_1, \dots, 0_N\rangle$  é o estado onde não há partículas. Devido a isso, tal estado é chamado de *vácuo*. Os operadores  $\hat{a}_j^\dagger$  e  $\hat{a}_j$  recebem a interpretação de operadores que destroem e criam partículas<sup>8</sup>. Se os índices  $j$  forem posições em um espaço, a destruição de uma partícula na posição  $k$  pelo operador  $\hat{a}_k$  e a criação de uma partícula idêntica na posição  $k'$  por  $\hat{a}_{k'}^\dagger$  pode ser interpretado como a partícula tendo se movimentado da posição  $k$  para a posição  $k'$ . Temos assim a interpretação de uma partícula como sendo um estado ocupado. Poderíamos definir operadores contínuos que criam e destroem partículas em certas localidades no espaço dos momentos ou posições  $\hat{a}^\dagger(x)$ ,  $\hat{a}(\vec{p})$ , por exemplo.

As ideias mencionadas acima são uma forma de introduzir as ideias da segunda quantização para bósons e férmions. De fato, utilizamos operadores de criação e destruição para as partículas seguindo tal ideia.

Ao final, por meio da transformada de Jordan-Wigner e tais operadores, poderemos ligar a Hamiltoniana Quântica de Ising unidimensional com operadores de criação e destruição fermiônicos e resolver o modelo quântico com base no conhecimento que se tem a respeito de férmions.

A próxima subseção se encarrega de discutir um pouco a respeito dos operadores para férmions e bóson.

### 8.3 Bósons e Férmions

Diversas diferenças podem ser citadas entre os dois tipos fundamentais de partículas, os bósons e os férmions. De forma simples para o objetivo deste projeto, ambas as entidades seguem certas relações de comutação canônicas para os operadores de criação e destruição, porém, diferentes para cada tipo.

Os operadores de criação e destruição podem ser descritos em termos de estados. Por exemplo, o operador  $\hat{a}^\dagger(\phi)$  cria um novo estado  $\phi$  [1, 20]

$$\hat{a}^\dagger(\phi) |\psi_1, \dots, \psi_N\rangle = |\phi, \psi_1, \dots, \psi_N\rangle,$$

entretanto, utilizando-se a representação de número,  $|n_1, \dots, n_N\rangle$ , podemos definir os operadores agindo sobre as posição  $j$ ,  $j = 1, \dots, N$ , de modo semelhante ao discutido ao final da subseção 8.2. Dados estados  $\alpha_1, \dots, \alpha_N$ , os operadores  $\hat{a}_j^\dagger$  e  $\hat{a}_j$  criam e destroem, respetivamente, partículas no estado  $\alpha_j$ .

**Bósons:** Para os bósons, as relações são [20]

$$[\hat{b}_i, \hat{b}_j^\dagger] = \delta_{ij} \quad [\hat{b}_i, \hat{b}_j] = 0 \quad (342)$$

Um outro ponto de diferença entre bósons e férmions está no chamado *princípio de exclusão de Pauli* que diz o seguinte: dois férmions com os mesmos números quânticos não podem existir, ou, de outra forma, dois férmions não podem coexistir no mesmo estado [20]. Para partículas bosônicas, não há restrição de tal forma que o estado  $|n_1, \dots, n_j, \dots\rangle$  é tal que  $n_k \geq 0$ , para todo  $k > 1$ . Para férmions, o princípio da exclusão implica em  $n_k = 0, 1$ .

**Férmions:** Para os férmions as relações de comutação são as seguintes:

$$\{\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger\} = \delta_{ij} \quad \{\hat{a}_i, \hat{a}_j\} = 0 \quad (343)$$

---

<sup>8</sup>Devido às operações na representação de números,  $|n_1, \dots, n_j, \dots\rangle$ , os operadores de criação e destruição também recebem o nome de operadores de levantamento e abaixamento, respectivamente.

De tais relações, podemos derivar propriedades interessantes. O próprio princípio de exclusão se apresenta como uma consequência das relações de comutação para férmions. Basta observar que  $(\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j)^2 = \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j$  [33]

$$\begin{aligned}\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j &= \hat{a}_j^\dagger (1 - \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j) \hat{a}_j \\ &= \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j - (\hat{a}_j^\dagger)^2 (\hat{a}_j)^2 \\ &= \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j\end{aligned}$$

A última igualdade se faz devido à relação  $\{\hat{a}_j, \hat{a}_j\} = 0$ ;  $\hat{a}_j$  e  $\hat{a}_j^\dagger$  são nilpotentes. Segue-se então que o espectro de  $\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j$  é  $\{0, 1\}$ . Outros fatos importantes podem ser derivadas das relação canônicas de comutação. Demonstraremos apenas mais dois fatos que são importantes: que  $\hat{a}_j^\dagger$ ,  $\hat{a}_j$ , com tais condições de comutação, são de fato operadores de levantamento e abaixamento e quais as ações de  $\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j$  sobre os estados  $|n_1, \dots, n_k\rangle$ .

Do espectro de  $\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j$ , devemos ter estados  $|\psi\rangle$  que sejam autoestados de  $\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j$  com autovalores 0 ou 1. Suponha de início que  $|\psi\rangle$  seja um autoestado de autovalor 1. Então, deve ser  $\hat{a}_j |\psi\rangle$  um autoestado do mesmo operador com autovalor 0. É fácil verificar, pois

$$\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j (\hat{a}_j |\psi\rangle) = (\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_j) |\psi\rangle = 0, \quad (344)$$

por conta do produto  $\hat{a}_j \hat{a}_j$ .

Suponto que  $|\psi\rangle$  seja o estado de autovalor 0, então  $\hat{a}_j^\dagger |\psi\rangle$  deve ser um autoestado de autovalor 1.

$$\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j (\hat{a}_j^\dagger |\psi\rangle) = \hat{a}_j^\dagger (\hat{a}_j \hat{a}_j^\dagger) |\psi\rangle \quad (345)$$

$$= \hat{a}_j^\dagger (1 - \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j) |\psi\rangle \quad (346)$$

$$= \hat{a}_j^\dagger |\psi\rangle - (\hat{a}_j^\dagger)^2 \hat{a}_j |\psi\rangle \quad (347)$$

$$= \hat{a}_j^\dagger |\psi\rangle \quad (348)$$

Determinaremos, por fim, a ação dos operadores  $\hat{a}_j$  e  $\hat{a}_j^\dagger$  sobre os estados  $|\vec{n}\rangle$ . Podemos escrever o vetor de estado  $|n_1, \dots, n_k\rangle$  como

$$|\vec{n}\rangle = |n_1, \dots, n_k\rangle = (\hat{a}_1^\dagger)^{n_1} \dots (\hat{a}_k^\dagger)^{n_k} |0\rangle \quad (349)$$

O raciocínio aplicado para um dos operadores  $\hat{a}_j$ ,  $\hat{a}_j^\dagger$  pode ser aplicado ao outro para determinar sua ação.

Faremos o caso para  $\hat{a}_j$  apenas, pelo dito ao final da página anterior. De início, suponha  $n_j = 0$ , então, podemos verificar o seguinte

$$\hat{a}_j |\vec{n}\rangle = \hat{a}_j (\hat{a}_1^\dagger)^{n_1} \dots (\hat{a}_{j-1}^\dagger)^{n_{j-1}} (\hat{a}_{j+1}^\dagger)^{n_{j+1}} \dots (\hat{a}_k^\dagger)^{n_k} |0\rangle \quad (350)$$

$$= (-1)^{n_1} (\hat{a}_1^\dagger)^{n_1} \hat{a}_j (\hat{a}_2^\dagger)^{n_2} \dots (\hat{a}_k^\dagger)^{n_k} |0\rangle \quad (351)$$

$$= (-1)^{n_1+n_2} (\hat{a}_1^\dagger)^{n_1} (\hat{a}_2^\dagger)^{n_2} \hat{a}_j (\hat{a}_3^\dagger)^{n_3} \dots (\hat{a}_k^\dagger)^{n_k} |0\rangle \quad (352)$$

$$\vdots \quad (353)$$

$$= (-1)^{P_{\vec{n}}^j} (\hat{a}_1^\dagger)^{n_1} \dots (\hat{a}_{j-1}^\dagger)^{n_{j-1}} \hat{a}_j (\hat{a}_{j+1}^\dagger)^{n_{j+1}} \dots (\hat{a}_k^\dagger)^{n_k} |0\rangle \quad (354)$$

$$= (-1)^{P_{\vec{n}}^j} (\hat{a}_1^\dagger)^{n_1} \dots (\hat{a}_{j-1}^\dagger)^{n_{j-1}} \hat{a}_j |0_1, \dots, 0_{j-1}, 0_j, n_{j+1}, \dots, n_k\rangle \quad (355)$$

$$= 0 \quad (356)$$

Na equação (354), podemos ver que, quando o operador  $\hat{a}_j$  é aplicado sobre o ket

$$|0_1, \dots, 0_{j-1}, 0_j, n_{j+1}, \dots, n_k\rangle,$$



o resultado é a aniquilação do estado. Na mesma equação, o termo  $P_{\vec{n}}^j$  representa as inversões, ou permutações, da ordem dos produtos entre os operadores  $\hat{a}_j$  e os posteriores, em (350). Pode-se ver das equações acima que

$$P_{\vec{n}}^j = \sum_{k=1}^{n-1} n_k \quad (357)$$

Suponha, agora, que  $n_j = 1$ , então temos

$$\hat{a}_j |\vec{n}\rangle = \hat{a}_j (\hat{a}_1^\dagger)^{n_1} \dots (\hat{a}_{j-1}^\dagger)^{n_{j-1}} (\hat{a}_j^\dagger)^{n_j} (\hat{a}_{j+1}^\dagger)^{n_{j+1}} \dots (\hat{a}_k^\dagger)^{n_k} |0\rangle \quad (358)$$

$$= -(-1)^{P_{\vec{n}}^j} (\hat{a}_1^\dagger)^{n_1} \dots (\hat{a}_{j-1}^\dagger)^{n_{j-1}} (\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j) (\hat{a}_{j+1}^\dagger)^{n_{j+1}} \dots (\hat{a}_k^\dagger)^{n_k} |0\rangle \quad (359)$$

$$= -(-1)^{P_{\vec{n}}^j} |n_1, \dots, n_{j-1}, 0_j, n_{j+1}, \dots, n_k\rangle \quad (360)$$

O sinal negativo adicional aparece por conta da troca de posição com o termo  $\hat{a}_j^\dagger$ .

A seguir, mostraremos que mediante uma transformação entre nos operadores, a Hamiltoniana de Ising pode ser escrita em termos de operadores que seguem as mesmas relações de comutação. Como o desenvolvimento acima fora feito matematicamente, segue então que podemos aplicar tais fatos para qualquer problema a despeito de qual, bastando apenas satisfazer as relações de comutações de férmions. Faremos isso nas próximas páginas.

## 8.4 A Transformada de Jordan-Wigner

No ano de 1928, um artigo publicado por P. Jordan e E. Wigner mostrou que há um isomorfismo entre os espaços de Hilbert para férmions sem spins e sistemas de spin- 1/2, em uma dimensão [45]. Seja  $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$  uma base para o espaço  $\mathcal{H}_{1/2}$ , o espaço de spins-1/2, definindo  $|0\rangle = |\downarrow\rangle$  e  $|1\rangle = |\uparrow\rangle$ , podemos definir os operadores  $\hat{\sigma}^+$  e  $\hat{\sigma}^-$  de forma a levar um estado em outro; operadores de sistema de dois níveis conhecidos

$$\hat{\sigma}^+ |0\rangle = |1\rangle \quad \hat{\sigma}^- |1\rangle = |0\rangle$$

É fácil determinar a forma dos operadores  $\hat{\sigma}^+$  e  $\hat{\sigma}^-$ , na base escolhida

$$\hat{\sigma}^+ = |1\rangle \langle 0|, \quad \hat{\sigma}^- = |0\rangle \langle 1| \quad (361)$$

Com isso, podemos calcular o anti-comutador entre esses operadores

$$\{\hat{\sigma}^-, \hat{\sigma}^+\} = \hat{\sigma}^- \hat{\sigma}^+ + \hat{\sigma}^+ \hat{\sigma}^- \quad (362)$$

$$= |0\rangle \langle 1|1\rangle \langle 0| + |1\rangle \langle 0|0\rangle \langle 1| \quad (363)$$

$$= |0\rangle \langle 0| + |1\rangle \langle 1| \quad (364)$$

$$= 1 \quad (365)$$

Como visto na subseção 8.3, os operadores de criação e destruição para férmions seguem a mesma álgebra. Para o espaço de um único férmion há somente dois operadores  $\hat{a}^\dagger$ ,  $\hat{a}$  de tal forma que a única relação de comutação é

$$\{\hat{a}, \hat{a}^\dagger\} = 1$$

De fato, os dois casos tem uma simetria  $SU(2)$  [29] de tal modo que podemos mapear um problema sobre o outro. O estado de spin para cima ou para baixo, pode ser mapeado em um estado no qual há a presença ou ausência do férmion, em nosso espaço de um férmion. Seja  $\{|0_f\rangle, |1_f\rangle\}$  a base para o espaço de Hilbert de um férmion, denotado  $\mathcal{F}_1$ , podemos fazer o seguinte mapeamento

$$|0_f\rangle \mapsto |0\rangle \quad |1_f\rangle \mapsto |1\rangle \quad (366)$$

$$\hat{\sigma}^+ = \hat{a}^\dagger \quad \hat{\sigma}^- = \hat{a} \quad (367)$$

As outras matrizes de spins, podem ser escritas em termos das matrizes  $\hat{\sigma}^+$  e  $\hat{\sigma}^-$

$$\hat{\sigma}^z = |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1| = 1 - 2\hat{a}^\dagger\hat{a} \quad (368)$$

$$\hat{\sigma}^x = \hat{\sigma}^+ + \hat{\sigma}^- = \hat{a}^\dagger + \hat{a} \quad (369)$$

$$\hat{\sigma}^y = -i(\hat{\sigma}^+ - \hat{\sigma}^-) = -i(\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \quad (370)$$

Quando há mais de um spin, no entanto, não pode-se mapear diretamente da forma como fizemos, visto que os operadores de spins comutam quando em sítios diferentes [2]. O trabalho de Jordan e Wigner foi determinar um meio de que tal mapeamento entre os espaço de spins e férmion fosse feito. Verificou-se que adicionando um termo chamado *string*, conseguia-se fazer tal mapeamento. Fez-se a seguinte modificação [2]

$$\hat{\sigma}_j^+ = \hat{a}_j^\dagger e^{i\hat{\phi}_j^+} \quad \hat{\sigma}_j^- = e^{i\hat{\phi}_j^-} \hat{a}_j \quad \hat{\sigma}_j^z = 1 - 2\hat{a}_j^\dagger\hat{a}_j, \quad (371)$$

com os termos  $\hat{\phi}_j^\pm$  sendo

$$\hat{\phi}_j^\pm = \pm i \sum_{k < j} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \quad (372)$$

Há uma segunda forma, mais intuitiva de se construir a Transformada de Jordan-Wigner, definindo-se os operadores  $\hat{a}^\dagger$ ,  $\hat{a}$  em termos das matrizes  $\hat{\sigma}^z$ ,  $\hat{\sigma}^+$  e  $\hat{\sigma}^-$ , partindo da ação dos operadores na base de representação de número [33].

Como visto na subseção 8.3, a ação do operador  $\hat{a}_j$  sobre um estado  $|n_1, \dots, n_k\rangle$  quando  $n_j = 1$  é dar como resultado o vetor cuja entrada  $n_j$  é trocada para 0 e multiplicando-se por um fator  $-(-1)^{P_{\vec{n}}^j}$ , com

$$P_{\vec{n}}^j = \sum_{l=1}^{j-1} n_l$$

Formalizando, seja  $|\vec{n}\rangle = |n_1, \dots, n_k\rangle$  e  $|\vec{n}'\rangle = |n_1, \dots, 0_j, \dots, n_k\rangle$ , queremos determinar  $\hat{a}_j$  tal que

$$\hat{a}_j |\vec{n}\rangle = -(-1)^{P_{\vec{n}}^j} |\vec{n}'\rangle \quad (373)$$

temos então

$$\hat{a}_j |\vec{n}\rangle = \hat{u}_1 |n_1\rangle \otimes \dots \otimes \hat{a} |1_j\rangle \otimes \dots \otimes \hat{u}_k |n_k\rangle \quad (374)$$

$$= -(-1)^{n_1 + \dots + n_{j-1}} |n_1, \dots, 0_j, \dots, n_k\rangle \quad (375)$$

Para começar a construção, tomemos o sinal fora negativo multiplicando o termo  $(-1)^{n_1 + \dots + n_{j-1}}$  modificando (374) colocando-se um sinal negativo multiplicando, ficando com

$$\hat{a}_j |\vec{n}\rangle = -[\hat{u}_1 |n_1\rangle \otimes \dots \otimes \hat{a} |1_j\rangle \otimes \dots \otimes \hat{u}_k |n_k\rangle] \quad (376)$$

$$= -(-1)^{n_1 + \dots + n_{j-1}} |n_1, \dots, 0_j, \dots, n_k\rangle \quad (377)$$

Após isso, podemos atribuir o sinal  $(-1)^{n_l}$  a cada um dos termos  $|n_l\rangle$  da equação (377)

$$\hat{a}_j |\vec{n}\rangle = -[\hat{u}_1 |n_1\rangle \otimes \dots \otimes \hat{a} |1_j\rangle \otimes \dots \otimes \hat{u}_k |n_k\rangle] \quad (378)$$

$$= -[(-1)^{n_1} |n_1\rangle \otimes \dots \otimes (-1)^{n_{j-1}} |n_{j-1}\rangle \otimes |0_j\rangle \otimes |n_{j+1}\rangle \otimes \dots \otimes |n_k\rangle] \quad (379)$$

Das equações (378) e (379), podemos escolher  $\hat{u}_l = I$ , para  $l > j$ . Da mesma forma que fizemos na subseção 7.2, podemos escolher os operadores  $\hat{u}_p = \hat{\sigma}^z$ , para  $p < j$  se definirmos a base  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$  da representação em número para a base dos autoestados do operador  $\hat{\sigma}^z$ .

Juntando as ideias acima, podemos escrever uma forma para o operador  $\hat{a}_j$  [33]

$$\hat{a}_j = - \left( \bigotimes_{k=1}^{n-1} \hat{\sigma}_k^z \right) \otimes \hat{\sigma}^- \otimes \mathbf{1}^{\otimes(k-j)} \quad (380)$$

Definindo  $\hat{\sigma}_j^\pm = I^{\otimes j-1} \otimes \hat{\sigma}^\pm \otimes I^{\otimes k-j}$  e escrevendo  $\hat{\sigma}^z = Z$ , podemos escrever  $\hat{a}_j$  como

$$\hat{a}_j = - \left( \prod_{k=1}^{j-1} Z_k \right) \hat{\sigma}^- \quad (381)$$

Pela ação de  $\hat{a}^\dagger$  na base  $\{|\vec{n}\rangle\}$  e pelo mesmo raciocínio feito acima,

$$\hat{a}_k^\dagger = - \left( \prod_{k=1}^{j-1} Z_k \right) \hat{\sigma}^+ \quad (382)$$

Convém, por motivos futuros, determinar os produtos  $\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j$  e  $\hat{a}_j \hat{a}_j^\dagger$

$$\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j = (\hat{\sigma}_1^z \otimes \dots \otimes \hat{\sigma}_{k-1}^z \otimes \hat{\sigma}_j^+ \otimes I \otimes \dots \otimes I) (\hat{\sigma}_1^z \otimes \dots \otimes \hat{\sigma}_{j-1}^z \otimes \hat{\sigma}_j^- \otimes I_{j+1} \otimes \dots \otimes I_k) \quad (383)$$

$$= (\hat{\sigma}_1^z)^2 \otimes \dots \otimes (\hat{\sigma}_{j-1}^z)^2 \otimes \hat{\sigma}_j^+ \hat{\sigma}_j^- \otimes I \otimes \dots \otimes I \quad (384)$$

$$= \hat{\sigma}_j^+ \hat{\sigma}_j^- \quad (385)$$

Da mesma forma

$$\hat{a}_j \hat{a}_j^\dagger = \hat{\sigma}_j^- \hat{\sigma}_j^+ \quad (386)$$

Com as equações (385) e (386), podemos escrever

$$Z_j = \hat{a}_j \hat{a}_j^\dagger - \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j = 1 - 2\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j = (\hat{a}_j - \hat{a}_j^\dagger)(\hat{a}_j^\dagger + \hat{a}_j) \quad (387)$$

A partir de agora, utilizaremos  $X$ ,  $Y$ ,  $Z$  para escrever as matrizes de Pauli e  $\hat{\sigma}^\pm = S^\pm$ .

Para escrever o operador  $X_j$ , precisamos fazer algumas manipulações. Seja  $|s_1, \dots, s_n\rangle$  um estado de  $n$  spins, o operador  $X_j$  tem a seguinte ação sobre tal estado

$$X_j |s_1, \dots, s_n\rangle = |s_1\rangle \otimes \dots \otimes X |s_j\rangle \otimes \dots \otimes |s_n\rangle,$$

logo,

$$X_j = I \otimes \dots \otimes I \otimes \overset{\substack{\uparrow \\ \text{j-ésima posição}}}{X} \otimes I \otimes \dots \otimes I \quad (388)$$

$$= \underbrace{I \otimes \dots \otimes I}_{\text{q vezes}} \otimes (S^+ + S^-) \otimes \underbrace{I \otimes \dots \otimes I}_{\text{p vezes}} \quad (389)$$

$$= [I^{\otimes q} \otimes S^+ \otimes I^{\otimes p}] + [I^{\otimes q} \otimes S^- \otimes I^{\otimes p}] \quad (390)$$

podemos reescrever  $I^{\otimes q} \otimes S^\pm \otimes I^{\otimes p}$ , utilizando as propriedades das matrizes de Pauli da seguinte maneira

$$\begin{aligned} I^{\otimes q} \otimes S^- \otimes I^{\otimes p} &= [(Z)^2]^{\otimes q} \otimes S^- \otimes I^{\otimes p} \\ &= (Z \otimes \dots \otimes Z \otimes \overset{\substack{\uparrow \\ j}}{I} \otimes I \otimes \dots \otimes I) (Z \otimes \dots \otimes Z \otimes \overset{\substack{\uparrow \\ j}}{S^\pm} \otimes I \otimes \dots \otimes I) \\ &= \left[ \bigotimes_{k=1}^{j-1} Z \right] \hat{a}_j^\pm \end{aligned}$$

onde  $\hat{a}_j^+ = \hat{a}_j^\dagger$  e  $\hat{a}_j^- = \hat{a}_j$ . Por fim, escrevemos

$$X_j = \left[ \bigotimes_{k=1}^{j-1} Z \right] \hat{a}_j^\dagger + \left[ \bigotimes_{k=1}^{j-1} Z \right] \hat{a}_j = \left[ \bigotimes_{k=1}^{j-1} Z \right] (\hat{a}_j^\dagger + \hat{a}_j) = \left( \prod_{k < j} Z_k \right) (\hat{a}_j^\dagger + \hat{a}_j) \quad (391)$$

A forma determinada para  $X_j$  não é muito conveniente. No entanto, a forma do produto  $X_j X_{j+1}$  é mais simples e podemos fazer uso da mesma, como será mostrado futuramente. Para isso, determinamos a forma do produto em termos dos operadores  $\hat{a}_j$  e  $\hat{a}_j^\dagger$ .

$$X_j X_{j+1} = I \otimes \dots \otimes \overset{j}{\uparrow} X \otimes \overset{j+1}{\uparrow} X \otimes \dots \otimes I \quad (392)$$

$$= I \otimes \dots \otimes (S^+ + S^-) \otimes (S^+ + S^-) \otimes \dots \otimes I \quad (393)$$

$$= \sum_{\alpha, \beta = \pm} I^{\otimes j-1} \otimes S^\alpha \otimes S^\beta \otimes I^{\otimes k-j} \quad (394)$$

$$= \sum_{\alpha, \beta = \pm} ((Z^2)^{\otimes j-1} \otimes S^\alpha \otimes I \otimes I^{\otimes k-j}) ((Z^2)^{\otimes j-1} \otimes I \otimes S^\alpha \otimes I^{\otimes k-j}) \quad (395)$$

$$= \sum_{\alpha, \beta = \pm} (Z^{\otimes j-1} \otimes S^\alpha \otimes I \otimes I^{\otimes k-j}) (Z^{\otimes j-1} \otimes (Z^2) \otimes S^\alpha \otimes I^{\otimes k-j}) \quad (396)$$

$$= \sum_{\alpha, \beta = \pm} \hat{a}_j^\alpha Z_j \hat{a}_{j+1}^\beta = \hat{a}_j^\dagger Z_j \hat{a}_{j+1}^\dagger + \hat{a}_j^\dagger Z_j \hat{a}_{j+1} + \hat{a}_j Z_j \hat{a}_{j+1}^\dagger + \hat{a}_j Z_j \hat{a}_{j+1} \quad (397)$$

$$= (\hat{a}_j^\dagger + \hat{a}_j) Z_j (\hat{a}_{j+1}^\dagger + \hat{a}_{j+1}) = (\hat{a}_j^\dagger + \hat{a}_j) (1 - 2\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j) (\hat{a}_{j+1}^\dagger + \hat{a}_{j+1}) \quad (398)$$

$$X_j X_{j+1} = (\hat{a}_j^\dagger - \hat{a}_j) (\hat{a}_{j+1}^\dagger + \hat{a}_{j+1}) \quad (399)$$

Para a última equação, usamos as relações de comutação para mostrara que

$$(\hat{a}_j^\dagger + \hat{a}_j) (-2\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j) (\hat{a}_{j+1}^\dagger + \hat{a}_{j+1}) = -2\hat{a}_j (\hat{a}_{j+1}^\dagger + \hat{a}_{j+1})$$

Para aplicar as formas de  $Z_j$  e  $X_j X_{j+1}$  em termos dos operadores de criação e destruição fermiônicos, precisamos fazer uma rotação no espaço dos spins em torno do eixo  $\sigma^y$  (podemos fazer isso por conta da auto-dualidade do modelo) de tal forma que

$$\begin{aligned} Z &\rightarrow X \\ X &\rightarrow -Z, \end{aligned}$$

com isso, a Hamiltoniana toma a seguinte forma

$$\hat{H} = -J \sum_j (\hat{a}_j^\dagger - \hat{a}_j) (\hat{a}_{j+1}^\dagger + \hat{a}_{j+1}) - \lambda (\hat{a}_j - \hat{a}_j^\dagger) (\hat{a}_j^\dagger + \hat{a}_j) \quad (400)$$

Nos resta a tarefa de diagonalizar a Hamiltoniana acima para escrever a energia livre. Faremos isso por meio da *transformação de Bogoliubov* [29].

## 8.5 Diagonalizando a Hamiltoniana Quântica de Ising

Para diagonalizarmos (400), é conveniente suprimir o índice  $j + 1$  de alguma forma. Faremos isso por meio da Transformada de Fourier. Fazemos

$$\hat{a}_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikj} \hat{a}_k, \quad \hat{a}_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikj} \hat{a}_k^\dagger, \quad (401)$$

temos o seguinte:

$$\hat{a}_j \hat{a}_j^\dagger = \frac{1}{N} \sum_{k,q} e^{i(k-q)j} \hat{a}_k \hat{a}_q^\dagger = \hat{a}_k \hat{a}_k^\dagger \quad (402)$$

$$\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k = \frac{1}{N} \sum_{k,q} e^{-i(k-q)j} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_q = \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \quad (403)$$

$$\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_{j+1}^\dagger = \frac{1}{N} \sum_{k,q} e^{-ikj} e^{-iq(j+1)} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_q^\dagger = e^{ik} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{-k}^\dagger \quad (404)$$

$$\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_{j+1} = \frac{1}{N} \sum_{k,q} e^{iq} e^{-i(k-q)j} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_q = e^{ik} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_{-k} \quad (405)$$

$$\hat{a}_j \hat{a}_{j+1}^\dagger = \frac{1}{N} \sum_{k,q} e^{-iq} e^{i(k-q)j} \hat{a}_k \hat{a}_q^\dagger = e^{-ik} \hat{a}_k \hat{a}_k^\dagger \quad (406)$$

$$\hat{a}_j \hat{a}_{j+1} = \frac{1}{N} \sum_{k,q} e^{iq} e^{i(k+q)j} \hat{a}_k \hat{a}_q = e^{-ik} \hat{a}_k \hat{a}_{-k} \quad (407)$$

Com isso, chegamos a seguinte Hamiltoniana

$$\hat{H} = \sum_{k=-\pi}^{\pi} [2J(\lambda - \cos k) \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + iJ \sin k (\hat{a}_{-k}^\dagger \hat{a}_k^\dagger + \hat{a}_{-k} \hat{a}_k) - h] \quad (408)$$

$$= \sum_{k=-\pi}^{\pi} (h - J \cos k) (\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k - \hat{a}_{-k} \hat{a}_{-k}^\dagger) + iJ \sin k (\hat{a}_{-k}^\dagger \hat{a}_k^\dagger + \hat{a}_{-k} \hat{a}_k) \quad (409)$$

A soma de  $-\pi$  a  $\pi$  (primeira zona de Brillouin) poderia ser trocada por uma soma dos valores de  $k > 0$  (até  $\pi$ ) devido ao fato do acoplamento entre os modos  $k$  e  $-k$  na Hamiltoniana. O custo de se somar apenas para os valores positivos de  $k$  é o fator 2 multiplicando a somatória. A soma é feita em passos de  $2\pi/N$

A Hamiltoniana acima pode ser diagonalizada por meio da *transformação de Bogoliubov* como faremos a seguir.

O argumento da soma em (409), pode ser escrito na seguinte forma:

$$\begin{bmatrix} \hat{a}_k^\dagger & \hat{a}_{-k} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h - J \cos k & iJ \sin k \\ iJ \sin k & J \cos k - h \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{a}_k \\ \hat{a}_{-k}^\dagger \end{bmatrix} \quad (410)$$

Pela forma da Hamiltoniana, é fácil ver que a transformação

$$\hat{a}_{-k}^\dagger = -i\tilde{a}_{-k}^\dagger \quad \hat{a}_{-k} = -i\tilde{a}_{-k}$$

remove os números  $i$  da equação, de tal forma que o produto matricial acima pode ser reescrito como

$$\begin{bmatrix} \hat{a}_k^\dagger & \tilde{a}_{-k} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h - J \cos k & J \sin k \\ J \sin k & J \cos k - h \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{a}_k \\ \tilde{a}_{-k}^\dagger \end{bmatrix} \quad (411)$$

A matriz acima tem a forma da matriz de Bogoliubov-de-Gennes da supercondutividade [31]. Podemos, portanto, utilizar a transformada de Bogoliubov para diagonalizar tal matriz e assim diagonalizar a Hamiltoniana [28].

## A Transformada de Bogoliubov para a Hamiltoniana Quântica de Ising 1D

definimos um conjunto de operadores  $\{c_k\}$  definidos como [28]

$$\hat{a}_k = u_k \hat{c}_k - i v_k \hat{c}_{-k}^\dagger \quad (412)$$

de tal forma que  $u_k$  e  $v_k$  tenham as seguintes propriedades

$$u_k^2 + v_k^2 = 1, \quad u_{-k} = u_k, \quad v_{-k} = -v_k \quad (413)$$

Das propriedades acima, podemos identificar os  $u_k$  e  $v_k$  com as funções seno e cosseno [29].

Definindo a transformação

$$\hat{a}_k = \cos(\theta_k)\hat{c}_k + \sin(\theta_k)\hat{c}_{-k}^\dagger \quad \tilde{a}_{-k}^\dagger = -\sin(\theta_k)\hat{c}_k + \cos(\theta_k)\hat{c}_{-k}^\dagger \quad (414)$$

vemos que a mesma tem as propriedades acima pedidas e também que é basicamente uma rotação

$$\begin{bmatrix} \hat{a}_k \\ \tilde{a}_{-k}^\dagger \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} \cos \theta_k & \sin \theta_k \\ -\sin \theta_k & \cos \theta_k \end{bmatrix}}_U \begin{bmatrix} \hat{c}_k \\ \hat{c}_{-k}^\dagger \end{bmatrix}$$

O fator  $-i$  multiplicando o termo  $v_k$  foram omitido pois os inserimos anteriormente quando fizemos fizemos a transformação que inseriu os termos  $\tilde{a}_{-k}^\dagger$  e  $\tilde{a}_{-k}$ . Uma importância da transformação feita é que as relações de comutação continuam valendo. Assim, a Hamiltoniana é escrita

$$\hat{H} = \sum_{k=-\pi}^{\pi} \begin{bmatrix} \hat{c}_k^\dagger & \hat{c}_{-k} \end{bmatrix} U^T \underbrace{\begin{bmatrix} h - J \cos k & J \sin k \\ J \sin k & J \cos k - h \end{bmatrix}}_M U \begin{bmatrix} \hat{c}_k \\ \hat{c}_{-k}^\dagger \end{bmatrix} \quad (415)$$

O produto  $U^T M U$ , pode ser escrito explicitamente como

$$U^T M U = \begin{bmatrix} (h - J \cos k) - (J \sin k) \sin 2\theta_k & (h - J \cos k) \sin 2\theta_k + (J \sin k) \cos 2\theta_k \\ (h - J \cos k) \sin 2\theta_k + (J \sin k) \cos 2\theta_k & -[(h - J \cos k) - (J \sin k) \sin 2\theta_k] \end{bmatrix}$$

Podemos escolher  $\theta_k$  de tal forma que esse produto seja diagonal. Para tal, requer-se

$$(h - J \cos k) \sin 2\theta_k + (J \sin k) \cos 2\theta_k = 0 \quad (416)$$

$$\therefore \tan 2\theta_k = \frac{J \sin k}{J \cos k - h} \quad (417)$$

Os autovalores de  $M$  podem ser facilmente calculados

$$p(\alpha) \left| \begin{array}{cc} h - J \cos k - \alpha & J \sin k \\ J \sin k & -(h - J \cos k) - \alpha \end{array} \right| = (\alpha - (h - J \cos k))(\alpha + (h - J \cos k)) - (J \sin k)^2$$

$$p(\alpha) = 0 \Leftrightarrow \alpha = \pm \sqrt{(h - J \cos k)^2 + (J \sin k)^2}$$

de outra forma,

$$\alpha_{\pm} = \pm \sqrt{(h - J)^2 + 4Jh \sin^2(k/2)} \quad (418)$$

A Hamiltoniana toma a seguinte forma

$$\hat{H} = \sum_{k=-\pi}^{\pi} \left\{ \begin{bmatrix} \hat{c}_k^\dagger & \hat{c}_{-k} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_+ & 0 \\ 0 & \alpha_- \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{c}_k \\ \hat{c}_{-k}^\dagger \end{bmatrix} \right\} \quad (419)$$

$$\hat{H} = \sum_{k=-\pi}^{\pi} \sqrt{(h - J)^2 + 4Jh \sin^2(k/2)} (\hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k - \hat{c}_{-k} \hat{c}_{-k}^\dagger) \quad (420)$$

O resultado acima nos permite calcular a energia do estado fundamental. Antes de calcularmos, é interessante mostrar o porquê queremos encontrar tal energia.

Quando fizemos o mapeamento clássico-quântico, definimos a matriz de transferência e identificamos como

$$\hat{T}^{N_\tau} = e^{-\beta_q \hat{H}},$$

onde  $\beta_q$  seria uma forma de inverso da temperatura quântico [18] e  $N_\tau$  o número de sítios na direção temporal. Podemos escrever o seguinte, da matriz de transferência

$$\hat{T} = \sum_i e^{-E_i \delta\tau} |i\rangle \langle i| \Leftrightarrow \hat{T}^{N_\tau} = \sum_i \exp(-N_\tau E_i \delta\tau) |i\rangle \langle i| \quad (421)$$

No limite  $N_\tau \rightarrow \infty$ , a menor energia, a energia do estado fundamental, domina enquanto que o peso das demais decai exponencialmente de modo que podemos escrever

$$\hat{T}^{N_\tau} \rightarrow e^{E_0 \beta_q} |0\rangle \langle 0|, \quad N_\tau \rightarrow \infty \quad (422)$$

de modo que, neste limite, a função de partição se torna [22]

$$Z = e^{-\beta_q E_0} \quad (423)$$

Contudo, anterior definimos a energia livre na forma

$$Z = e^{-\beta F},$$

de onde também definimos a densidade de energia livre  $f$ . Podemos escrever  $\beta F$  como

$$\beta F = \beta f V, \quad (424)$$

com  $V$  sendo o volume do espaço;  $F$  é então uma quantidade extensiva. A energia  $E_0$  também pode ser vista como a energia pertencente ao volume  $V$  do sistema quântico, podemos associar uma densidade  $\omega_0$  de energia do vácuo quântico escrevendo  $E_0 = \omega_0 V$  de tal forma que, podemos identificar [22]

$$\beta F = \beta E_0 \Rightarrow f = \omega_0 \quad (425)$$

ou seja, a densidade de energia livre para o modelo clássico é equivalente a densidade de energia do vácuo quântico no modelo quântico, quando tomado o limite  $N_\tau \rightarrow \infty$ .

O que fora feito na última página é uma das ligações entre as variáveis do sistema estatístico com o sistema quântico. Faremos isso de forma geral no relatório final quando trabalharmos um pouco com teoria quântica de campos.

Por meio do argumento anterior, convém determinar a energia do estado fundamental para assim associar a densidade de energia livre. A energia do estado fundamental é tal que

$$\hat{H} |0\rangle = E_0 |0\rangle$$

$$E_0 |0\rangle = \sum_{k=-\pi}^{\pi} \sqrt{(h-J)^2 + 4hJ \sin^2(k/2)} (\hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k - \hat{c}_{-k} \hat{c}_{-k}^\dagger) |0\rangle \quad (426)$$

$$= \sum_{k=-\pi}^{\pi} \sqrt{(h-J)^2 + 4hJ \sin^2(k/2)} (\hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k - 1 + \hat{c}_{-k}^\dagger \hat{c}_{-k}) |0\rangle \quad (427)$$

$$= - \sum_{k=-\pi}^{\pi} \sqrt{(h-J)^2 + 4hJ \sin^2(k/2)} |0\rangle \quad (428)$$

$$\therefore E_0 = - \sum_{k=-\pi}^{\pi} \sqrt{(h-J)^2 + 4hJ \sin^2\left(\frac{k}{2}\right)} \quad (429)$$

Como dito anteriormente, a somatória é realizada em passos de  $\delta k = 2\pi/N$ . Podemos multiplicar e dividir (429) por  $\delta k$

$$E_0 = -\frac{\delta k}{\delta k} \sum_{k=-\pi}^{\pi} \sqrt{(h-J)^2 + 4hJ \sin^2\left(\frac{k}{2}\right)} = -\frac{N}{2\pi} \sum_{k=-\pi}^{\pi} \delta k \sqrt{(h-J)^2 + 4hJ \sin^2\left(\frac{k}{2}\right)} \quad (430)$$

Podemos interpretar a soma acima como uma aproximação de uma integral. A densidade de energia do vácuo quântico e, conseqüentemente, a densidade de energia livre, para  $N$  grande, podem ser escritas como

$$f = \omega_0 = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk \sqrt{(h-J)^2 + 4hJ \sin^2\left(\frac{k}{2}\right)} \quad (431)$$

Podemos derivar certas quantidade por meio de (431) e da Hamiltoniana. Começemos pela variação na energia quando popula-se um estado de momento  $q$  ou  $-q$ .

Da Hamiltoniana, podemos ver que quando um estado de momento de módulo  $q$  é populado. O aumento na energia é de

$$E_q - E_0 = 2\sqrt{(h-J)^2 + 4hJ \sin^2\left(\frac{q}{2}\right)} \quad (432)$$

O *gap* de energia dado pela excitação mínima possível é dado para o valor de  $q$  que minimiza a variação de energia  $E_q - E_0$ , logo, ocorre para  $q = 0$ , dando o resultado

$$\Delta = E_{q=0} - E_0 = 2\sqrt{(J\lambda - J)^2 + 4\lambda J^2 \sin(0)} = 2J|1 - \lambda| \quad (433)$$

Como sugerido na seção 7 [18, 22, 29],

$$\frac{1}{\xi} = \Delta \Rightarrow \xi = \frac{1}{2J|1 - \lambda|} \quad (434)$$

Logo, o comprimento de correlação diverge para  $\lambda = 1$ , o mesmo resultado encontrado na subseção 7.2.1. O expoente crítico para  $\xi$  como definido em 5.4 assume o valor  $\nu = 1$ , concordando com o valor da tabela 1, uma das propriedades da solução de Onsager.

Outras quantidades relevantes podem ser derivadas para ver a relação com a solução de Onsager. De fato, os expoentes críticos são os mesmo [29]. A densidade de energia livre encontrada nos permite estudar as características do sistema quântico modelado pela Hamiltoniana Quântica de Ising. Relembrando um pouco a discussão inicial a respeito de classes de universalidades, o fato de os expoentes críticos para ambos os modelos serem iguais é o que nos permite estudar o sistema quântico na, ou próximo à, transição por meio do modelo estatístico em duas dimensões. Em comparação com a solução de Onsager, a solução para o modelo quântico fora muito menos trabalhosa. Há ainda uma outra forma pela qual poderíamos resolver o modelo e fazer a ligação com um tipo especial de férmions a qual citaremos a seguir e que será explanada no relatório final do projeto.

### 8.5.1 Férmions de Majorana e o Modelo de Ising na Transição de Fase

Começemos citando um pouco a respeito do conceito de *quasi-partícula*. Basicamente, desenvolve-se uma ideia de partícula para entidades que não são partículas fundamentais de forma a facilitar o estudo de um certo problema. Esse conceito, permite o uso da linguagem da segunda quantização, que acaba por ser o meio de se simplificar o trabalho sobre o problema em específico.

Uma tipo especial de quasi-partícula, um férmion sugerido por *Ettore Majorana*, em 1937, se tornou de interesse geral por ter características peculiares [17]. Os férmions de Majorana, como vieram a ser chamados, tem como uma de suas característica serem suas próprias antipartículas.



Tanto do ponto de vista teórico como do ponto de vista experimental, férmions de Majorana se tornaram de grande interesse, em especial para a computação quântica. Em 2016, tais férmions foram pela primeira vez mensurados experimentalmente [17].

Nosso interesse nos férmions de Majorana está no fato de que o modelo quântico de Ising pode ser descrito como um modelo de férmions de Majorana, na transição de fase.

Como os férmions de Majorana são suas próprias antipartículas, isso deve se repercutir em seus operadores de criação e aniquilação. Uma partícula sendo criada pelo operador  $\hat{a}^\dagger$  agindo sobre o vácuo é destruída pela aplicação do operador  $\hat{a}$  sobre si. Podemos ver tal interação como a interação partícula-antipartícula; quando as duas se encontram, ocorre a aniquilação. Logo, férmions de Majorana, então, são tais que seus operadores de criação de destruição são operadores hermitianos, ou seja

$$(\hat{\xi}_i)^\dagger = \hat{\xi}_i,$$

onde  $\hat{\xi}_i$  representa um campo de um férmion de Majorana [2].

Podemos notar da Hamiltoniana

$$\hat{H} = -J \sum_j (\hat{a}_j^\dagger - \hat{a}_j)(\hat{a}_{j+1}^\dagger + \hat{a}_{j+1}) - \lambda(\hat{a}_j - \hat{a}_j^\dagger)(\hat{a}_j^\dagger + \hat{a}_j)$$

que os termos  $(\hat{a}_j^\dagger + \hat{a}_j)$  e  $(\hat{a}_{j+1}^\dagger + \hat{a}_{j+1})$  são hermitianos enquanto que os demais operadores entre parênteses são anti-hermitianos. Podemos então dividir os termos  $(\hat{a}_j^\dagger - \hat{a}_j)$  e  $(\hat{a}_j - \hat{a}_j^\dagger)$  por  $i$  de tal forma a serem conjugados hermitianos.

Logo, podemos identificar a Hamiltoniana acima como uma Hamiltoniana de *férmions de Majorana* definindo os campos [2]

$$\hat{\xi}_1(j) = \frac{\hat{a}_j^\dagger + \hat{a}_j}{\sqrt{2}} \quad \hat{\xi}_2(j) = \frac{\hat{a}_j^\dagger - \hat{a}_j}{\sqrt{2}i} \quad (435)$$

É fácil verificar a seguinte relação de comutação

$$\{\hat{\xi}_k(j), \hat{\xi}_{k'}(j')\} = \delta_{k,k'} \delta_{j,j'} \quad (436)$$

Podemos escrever os operadores  $\hat{a}_j$  e  $\hat{a}_j^\dagger$  em termos dos operadores acima produzindo

$$\hat{a}_j^\dagger = \frac{\hat{\xi}_1(j) + i\hat{\xi}_2(j)}{\sqrt{2}} \quad \hat{a}_j = \frac{\hat{\xi}_1(j) - i\hat{\xi}_2(j)}{\sqrt{2}} \quad (437)$$

Nota-se que as equações acima são um caso especial para a transformação de Bogoliubov, descrita em (412).

Em termos da rede de férmions de Majorana, a Hamiltoniana de Ising toma a forma [2]

$$\hat{H} = -iJ \sum_j \hat{\xi}_2(j)[\hat{\xi}_1(j+1) - \hat{\xi}_1(j)] - (\lambda - 1)\hat{\xi}_2(j)\hat{\xi}_1(j) \quad (438)$$

Para tomarmos o limite do contínuo e o limite de transição de fase, precisamos de certas adaptações que serão descritas de forma completa no relatório final. Deixando de lado as passagens futuras, no limite do contínuo da rede, a Hamiltoniana se escreve como

$$\hat{H} = \int dx [-ic\hat{\xi}_2(x)\partial_x\hat{\xi}_1(x) + im\hat{\xi}_2(x)\hat{\xi}_1(x)] \quad (439)$$

Tal Hamiltoniana pode ser resolvida, porém mais importante do que isso, ela nos permite identificar o limite do contínuo do Modelo de Ising Quântico, na transição de fase, como um modelo livre de férmions de Majorana [2].

## 9 Observáveis Quânticos: Contraparte Clássica e o Emaranhamento Quântico

Até o presente momento, estudamos o Modelo de Ising e o mapeamento do mesmo para um sistema clássico. Seguindo as mesmas ideias, podemos mapear observáveis quânticos em clássicos de tal forma que estaremos aptos a chegar ao objetivo final do projeto: entender a relação entre o emaranhamento no sistema quântico e a relação com o sistema estatístico clássico.

Iniciaremos abordando o emaranhamento quântico em algumas linhas para introduzir e justificar o que se segue.

Posteriormente, abordamos o mapeamento da função de partição do sistema quântico para o sistema clássico. Em seguida, desenvolveremos uma forma geral para tal procedimento. Aplicaremos o mapeamento para alguns observáveis específicos, o que nos permitirá fazer uma simulação computacional do modelo clássico para obter os observáveis quânticos.

A parte de simulação será dividida em fundamentação teórica e resultados, trabalhando com o modelo de Ising isotrópico e passando para o modelo anisotrópico de onde poderemos obter as informações desejadas para o problema quântico.

Por fim, com os resultados anteriores, retomaremos à discussão sobre o emaranhamento, buscando entender o emaranhamento por meio do modelo clássico.

Considerações finais acerca das simulações serão apresentadas na subseção 9.5, onde serão mencionadas as vantagens da presente abordagem, do ponto de vista computacional.

### 9.1 O Emaranhamento Quântico

Nesta subseção, desenvolveremos os conhecimentos básicos necessários para entender o restante da seção 9.

Um sistema quântico é descrito por um estado quântico  $|\psi\rangle$  em um espaço de Hilbert  $\mathcal{H}$ . Sistemas compostos, isto é, sistemas que se decompõem naturalmente em dois ou mais subsistemas são descritos pelo espaço *produto tensorial* dos espaços de cada subsistema;  $\mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_n$ ,  $n \geq 2$  [44].

Se a base para o espaço  $\mathcal{H}_i$  é  $\{|\phi_j^i\rangle\}_j$ , então a base para o espaço  $\mathcal{H}$  é descrita por todas as combinações dos produtos tensoriais dos elementos da base dos espaços  $\mathcal{H}_i$ ;  $\{|\phi_{i_1}^1\rangle \otimes \dots \otimes |\phi_{i_n}^n\rangle\}_{i_1, \dots, i_n}$ .

Consideremos, para o que se segue, um sistema composto de dois subsistemas. Os resultados podem ser trivialmente generalizados para  $n$  subsistemas componentes.

Seja  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ . Suponha que o vetor sistema  $i$ , correspondente ao espaço  $\mathcal{H}_i$  é preparado no estado  $|\psi_i\rangle$ , de tal forma que o estado quântico do sistema composto é

$$|\Psi_s\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle.$$

Se um observador decide por realizar uma medida local em um dos subsistemas, digamos o designado por  $\mathcal{H}_1$ , isso equivale a aplicação do operador  $\hat{A} \otimes \mathbb{1}$  sobre o estado  $|\Psi_s\rangle$ , onde  $\mathbb{1}$  é o operador identidade agindo sobre o segundo subsistema. A aplicação do observável resulta no seguinte:

$$(\hat{A} \otimes \mathbb{1}) |\Psi_s\rangle = \hat{A} |\psi_i\rangle \otimes |\psi_2\rangle = \left( \sum_i a_i \langle a_i | \psi_1 \rangle |a_i\rangle \right) \otimes |\psi_2\rangle. \quad (440)$$

O resultado acima mostra uma projeção do primeiro subsistema sobre os autoestados  $|a\rangle$  do operador  $\hat{A}$ ; o segundo subsistema permanece inalterado. Se medimos o resultado  $a$  para o observável  $\hat{A}$ , extraímos informação sobre o primeiro sistema, mas nada podemos dizer acerca do segundo.

Considere agora o seguinte estado

$$|\Psi_e\rangle = \frac{|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle + |\phi_1\rangle \otimes |\phi_2\rangle}{\sqrt{2}}.$$

$|\psi_i\rangle$  e  $|\phi_i\rangle$  são dois estados para os sistemas  $i$  ( $i = 1, 2$ ).

Ambos  $|\Psi_s\rangle$  e  $|\Psi_e\rangle$  pertencem ao espaço  $\mathcal{H}$ . Aplicando o mesmo operador ao estado  $|\Psi_e\rangle$ , temos

$$(\hat{A} \otimes \mathbb{1}) |\Psi_e\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \left( \sum_i a_i \langle a_i | \psi_1 \rangle |a_i\rangle \right) \otimes |\psi_2\rangle + \left( \sum_i a_i \langle a_i | \phi_1 \rangle |a_i\rangle \right) \otimes |\phi_2\rangle \right].$$

Se tomamos  $|\psi_1\rangle$  e  $|\phi_1\rangle$  como sendo autoestados do operador  $\hat{A}$ , sendo o resultado da medida  $a_j$ , sabemos que o estado  $|\Psi_e\rangle$  colapsa para o estado

$$|\Psi'_e\rangle = |a_j\rangle \otimes |\chi\rangle,$$

onde  $|\chi\rangle = |\psi_2\rangle$  se  $|a_j\rangle = |\psi_1\rangle$  e  $|\chi\rangle = |\phi_2\rangle$  se  $|a_j\rangle = |\phi_1\rangle$ . Note que por sabermos  $a_j$ , a medida de qualquer operador  $\mathbb{1} \otimes \hat{B}$  sobre  $|\Psi_e\rangle$  após a realização da medida de  $\hat{A} \otimes \mathbb{1}$ , realizada de forma imediata, tem o resultado previsível; conseguimos extrair informação do segundo subsistema apenas realizando medidas sobre o primeiro [44].

Um ponto importante é que os sistemas podem estar separados por uma distância arbitrariamente grande. Se estiverem em um estado como da forma  $|\Psi_e\rangle$ , a uma medida realizada sobre um dos subsistemas permite prever com certeza o resultado da medida do outro. Quando um sistema tem tal propriedade, o mesmo é dito estar *emaranhado* [26, 44].

Para tais sistemas, pode-se mostrar que estados emaranhados, como  $|\Psi_e\rangle$  não podem ser separados de forma a serem escritos como o produto de dois estados  $|\alpha_1\rangle \otimes |\alpha_2\rangle$ , onde  $\alpha_i \in \mathcal{H}_i$ .

Como exemplo, considere o estado

$$|s\rangle = \frac{|01\rangle - |10\rangle}{\sqrt{2}},$$

onde  $\{|1\rangle, |0\rangle\}$  são auto estados do operador  $\hat{\sigma}^z$  e utilizamos a notação  $|a_1 a_2\rangle = |a_1\rangle \otimes |a_2\rangle$ .

Note que se tentar escrever o estado  $|s\rangle$  como o produto de estados  $\alpha_i |0\rangle + \beta_i |1\rangle$  chegaremos ao seguinte

$$|\phi\rangle = \alpha_1 \alpha_2 |00\rangle + \alpha_1 \beta_2 |01\rangle + \alpha_2 \beta_1 |10\rangle + \beta_1 \beta_2 |11\rangle.$$

Para que  $|\phi\rangle = |s\rangle$ , é necessário que  $\alpha_1 \alpha_2 = \beta_1 \beta_2 = 0$ , o que implica em  $\alpha_1 = 0$  ou  $\alpha_2 = 0$  e  $\beta_1 = 0$  ou  $\beta_2 = 0$ . Mas, se  $\alpha_1 = 0$  ou  $\beta_2 = 0$ , então  $\alpha_1 \beta_2 = 0$ , o que não pode ocorrer. Por outro lado, se  $\alpha_2 = 0$  ou  $\beta_1 = 0$ , então  $\alpha_1 \beta_2$  se anula.

Com isso, segue que não há  $\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2$  tais que  $(\alpha_1 |0\rangle + \beta_1 |1\rangle) \otimes (\alpha_2 |0\rangle + \beta_2 |1\rangle) = |s\rangle$ .

Em termos de *operadores densidades*, se  $\rho_1$  e  $\rho_2$  são os operadores de cada sistema, o operador densidade do sistema composto,  $\rho$  não pode ser escrito como  $\rho_1 \otimes \rho_2$  [44].

As ideias anteriores levam a fórmular a ideia de *separabilidade* de estados quânticos. Se um estado é separável, então medidas de subsistemas do sistemas composto não são correlacionadas. Aos estados não emaranhados, chamamos de *separáveis*, como  $|\Psi_s\rangle$ .

O objetivo deste trabalho é estudar o emaranhamento quântico de um sistema quântico descrito pela Hamiltoniana quântica unidimensional de Ising, estudando o sistema clássico equivalente em duas dimensões. Um meio de se fazer isso é estudando a correlação da medida entre os subsistemas, isto é, os spins do sistema. Em 9.3.6 mostraremos que as correlações para os operadores  $\hat{\sigma}^z$  e  $\hat{\sigma}^x$  aplicados a dois sítios  $i$  e  $j$  distintos sofre uma transição de fase, havendo uma fase de máxima correlação para a medida.

Um outro estudo que pode ser feito para a correlação é por meio das *desigualdades de Bell*. O estado  $|s\rangle$  apresentado acima é chamado *singlete*; é um dos chamados *pares EPR*, nome em homenagem a Einstein, Podolsky e Rosen que notaram as peculiaridades de tais estados em um artigo publicado em 1935, comumente chamado de *artigo EPR* [26].

O objetivo do artigo EPR era argumentar que a mecânica quântica era incompleta, por meio do que foi chamado *elementos de realidade*. A crença sustentada pelos autores era a de que qualquer

elemento de realidade deveria estar representado em qualquer teoria física completa. Para que uma dada propriedade fosse um elemento de realidade, os autores consideraram que a possibilidade de prever com certeza o valor de uma medida imediatamente antes da realização da mesma fosse uma condição suficiente. Para o caso de um estado singles, a medida de spin ao longo de um eixo  $\vec{v}$  ( $\vec{v} \cdot \vec{\sigma}$ ; apêndice A) do primeiro subsistema resultaria em  $\pm 1$ . Assim, sabe-se que a medida do segundo spin logo após a realização da primeira medida retornará valor  $\mp 1$ . Por isso ser sempre possível, esta propriedade física deveria ser um elemento de realidade [26]. A mecânica quântica não permite o cálculo do observável  $\vec{v} \cdot \vec{\sigma}$ , de tal forma que a teoria quântica deveria ser tomada como incompleta.

O argumento de EPR fora refutado por meio da avaliação experimental de uma das chamadas desigualdades de Bell, que são resultados clássicos sobre valores esperados de experimentos, não condizentes com a mecânica quântica. A avaliação experimental ocorreu 30 anos após a publicação do trabalho.

Uma das desigualdades de Bell pode ser derivada da seguinte ideia. Considere que duas partículas são preparadas em um estado. Uma das partículas é entregue a um observador, chamemos de Alice, e outra entregue a Bob. Considere que Alice esteja apta a medir os observáveis  $Q$  e  $R$  e Bob possa medir  $S$  e  $T$ . Para simplificar, considere que os resultados das medidas destes quatro observáveis possa ser apenas  $+1$  ou  $-1$ . Considere a seguinte quantidade:

$$QS + RS + RT - QT = (Q + R)S + (R - Q)T.$$

é fácil ver que

$$(Q + R)S = 0 \quad \text{ou} \quad (R - Q)T = 0$$

e, logo,

$$QS + RS + RT - QT = \pm 2.$$

Suponha que Alice e Bob realizem a medida no mesmo instante (de forma não-causal) [26]. Suponha também que antes da medida eram determinados e que a probabilidade de  $Q = q$ ,  $R = r$ ,  $S = s$  e  $T = t$  é  $p(q, r, s, t)$ .

Sendo  $\mathbf{E}(\cdot)$  o valor esperado (clássico), então

$$\mathbf{E}(QS + RS + RT - QT) = \sum_{q,r,s,t} p(q, r, s, t)(qs + rs + rt - qt) \leq 2 \sum_{q,r,s,t} p(q, r, s, t) = 2.$$

Como  $\mathbf{E}(\cdot)$  é distributivo sobre soma, segue que

$$\mathbf{E}(QS) + \mathbf{E}(RS) + \mathbf{E}(RT) - \mathbf{E}(QT) \leq 2. \quad (441)$$

A desigualdade (441) é chamada uma das desigualdades de Bell<sup>9</sup> [26].

Considere agora os observáveis

$$Q = \hat{\sigma}_1^z, \quad S = \frac{-\hat{\sigma}_2^z - \hat{\sigma}_2^x}{\sqrt{2}},$$

$$R = \hat{\sigma}_1^x, \quad T = \frac{\hat{\sigma}_2^z - \hat{\sigma}_2^x}{\sqrt{2}}.$$

Para o estado singleto  $|s\rangle$ , um cálculo rápido mostra que

$$\langle QS \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \langle RS \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \langle RT \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \langle QT \rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}},$$

onde  $\langle \cdot \rangle$  denota o valor esperado quântico, de modo que

$$\langle QS \rangle + \langle RS \rangle + \langle RT \rangle - \langle QT \rangle = 2\sqrt{2} > 2. \quad (442)$$

---

<sup>9</sup>Desigualdade CHSH, em homenagem aos seus descobridores.

O resultado em (442) contradiz a desigualdade (441), de modo que uma avaliação experimental pode determinar se o pensamento de EPR está correto ou se a mecânica quântica está correta. O resultado do experimento realizado corroborou a teoria quântica, revelando mais estranheza no mundo quântico. Este resultado põe a prova as suposições de não-causalidade e de realismo feitas anteriormente para derivar a desigualdade de Bell (441) [26].

À soma  $QS + RS + RT - QT$ , chamemos *observável de Bell*, por simplicidade para as seções que se seguem. O estudo deste observável de Bell revelará que a transição de fase do modelo quântico é a região de temperatura onde a desigualdade é violada.

Em vista do estudo do observável de Bell definido acima e das correlações dos operadores de spin, estudaremos a seguir o mapeamento clássico-quânticos dos seguintes observáveis:  $\hat{\sigma}_i^z$ ,  $\hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z$ ,  $\hat{\sigma}_i^x$ ,  $\hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_j^x$  e  $\hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^x$ .

## 9.2 Mapeando Observáveis Quânticos em Clássicos

Para um observável  $\hat{A}$ , o valor esperado pode ser calculado como

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} \left( e^{-\beta_q \hat{H}} \hat{A} \right).$$

Tal traço não é trivial, à primeira vista, para qualquer operador  $\hat{A}$ . Assim, devemos desenvolver um método para o cálculo de tal traço. Note que o cálculo de

$$\text{Tr} \left( e^{-\beta_q \hat{H}} \right)$$

é simples:

$$\text{Tr} \left( e^{-\beta_q \hat{H}} \right) = \sum_i \langle i | e^{-\beta_q \hat{H}} | i \rangle = \sum_i e^{-\beta E_i},$$

onde os estados  $|i\rangle$  representam os autoestados de  $\hat{H}$ . Podemos partir dessa ideia e escrever  $e^{-\beta_q(\hat{H} + \mu \hat{A})}$ , onde  $\mu$  é um variável auxiliar introduzida. Expandindo em Taylos, podemos facilmente mostrar que

$$\frac{-1}{\beta_q} \frac{\partial e^{-\beta_q(\hat{H} + \mu \hat{A})}}{\partial \mu} \Big|_{\mu=0} = \hat{A} e^{-\beta_q \hat{H}}, \quad (443)$$

de tal forma que

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left( \hat{A} e^{-\beta_q \hat{H}} \right) &= -\frac{1}{\beta_q} \sum_i \left\langle i \left| \frac{\partial (e^{-\beta_q \hat{H}})}{\partial \mu} \right| i \right\rangle \Big|_{\mu=0}, \\ &= -\frac{1}{\beta_q} \frac{\partial}{\partial \mu} \sum_i \langle i | e^{-\beta_q \hat{H}} | i \rangle \Big|_{\mu=0}, \\ &= -\frac{1}{\beta_q} \frac{\partial}{\partial \mu} \text{Tr} \left( e^{-\beta_q \tilde{H}} \right) \Big|_{\mu=0}, \end{aligned}$$

onde  $\tilde{H} = \hat{H} + \mu \hat{A}$ . O traço que ocorre na expressão acima é significativamente mais fácil de se calcular devido ao *Teorema de Trotter*:

**Teorema de Trotter.** *Sejam  $\hat{A}$  e  $\hat{B}$  operadores auto-adjuntos, limitados inferiormente, então, para algum  $s$ ,*

$$e^{-\beta_q(\hat{A} + \hat{B})} = s - \lim_{L \rightarrow \infty} \left( e^{-\frac{\beta_q}{L} \hat{A}} e^{-\frac{\beta_q}{L} \hat{B}} \right)^L.$$

A convergência dos operadores no teorema acima é uma convergência do tipo forte. O método da introdução de variáveis auxiliares feito acima é chamado *método das fontes* e as variáveis como  $\mu$  são chamadas fontes. Poderíamos inserir um conjunto de várias fontes  $\mu_i$  se desejássemos calcular o valor esperado do produto de operadores (faremos isso posteriormente).

Nas condições do teorema, podemos utilizar a fórmula alternativa para o valor esperado de  $\hat{A}$  via traço de  $e^{-\beta_q \hat{H}}$ . Antes de calcularmos o mapeamento de um operador em geral, façamos para o operador Hamiltoniano  $\hat{H}$ . Tal cálculo tem dois objetivos: exemplificar o método que desenvolveremos de forma mais geral, de forma a entender os detalhes e identificar qual deverá ser a forma da função de partição quântica  $Z_q$  em comparação com a clássica  $Z_{cl}$ .

### 9.2.1 Mapeando-se $Z_q$ em $Z_{cl}$

Podemos escrever  $Z_q$  como  $\sum_{\{\sigma\}} \langle \sigma | e^{-\beta_q \hat{H}} | \sigma \rangle$ . Dividiremos  $\hat{H}$  em duas partes

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1,$$

com

$$\hat{H}_0 = -J \sum_i \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z, \quad \hat{H}_1 = -J\lambda \sum_i \hat{\sigma}_i^x.$$

$Z_q$  então é escrito como

$$Z_q = \sum_{\{\sigma\}} \left\langle \sigma \left| e^{-\beta_q \hat{H}_0 - \beta_q \hat{H}_1} \right| \sigma \right\rangle. \quad (444)$$

Iremos decompôr  $e^{-\beta_q \hat{H}_0 - \beta_q \hat{H}_1}$  utilizando o resultado do teorema enunciado anteriormente. Para isso, notamos que para  $L$  grande, vale

$$e^{-\beta_q \hat{H}_1 - \beta_q \hat{H}_0} \approx \left( e^{-\frac{\beta_q}{L} \hat{H}_1} e^{-\frac{\beta_q}{L} \hat{H}_0} \right)^L \stackrel{\text{def}}{=} \left( e^{-\delta\tau \hat{H}_1} e^{-\delta\tau \hat{H}_0} \right)^L,$$

onde definimos  $\delta\tau = \beta_q/L$ . A função de partição (quântica) pode ser reescrita como

$$Z \approx \sum_{\{\sigma\}} \left\langle \sigma \left| \prod_{j=1}^L e^{-\delta\tau \hat{H}_1} e^{-\delta\tau \hat{H}_0} \right| \sigma \right\rangle.$$

Entre cada um dos operadores  $e^{-\delta\tau \hat{H}_1} e^{-\delta\tau \hat{H}_0}$  podemos inserir identidades 1 de forma a simplificar a expressão acima. Façamos para o caso geral.

Seja  $\mathcal{O}$  um operador qualquer, utilizando condições periódicas de contorno, podemos escrever

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma} \langle \sigma | \mathcal{O} 1 \mathcal{O} 1 \dots \mathcal{O} 1 \mathcal{O} | \sigma \rangle &= \sum_{\sigma} \sum_{\sigma^1} \dots \sum_{\sigma^{N-1}} \langle \sigma | \mathcal{O} | \sigma^1 \rangle \langle \sigma^1 | \mathcal{O} | \sigma^2 \rangle \dots \langle \sigma^{N-1} | \mathcal{O} | \sigma \rangle, \\ &= \sum_{\sigma^1} \sum_{\sigma^2} \dots \sum_{\sigma^N} \langle \sigma^1 | \mathcal{O} | \sigma^2 \rangle \langle \sigma^2 | \mathcal{O} | \sigma^3 \rangle \dots \langle \sigma^N | \mathcal{O} | \sigma^1 \rangle, \\ &= \sum_{\sigma^1} \sum_{\sigma^2} \dots \sum_{\sigma^N} \langle \sigma^N | \mathcal{O} | \sigma^{N-1} \rangle \langle \sigma^{N-1} | \mathcal{O} | \sigma^{N-2} \rangle \dots \langle \sigma^1 | \mathcal{O} | \sigma^N \rangle, \\ &= \sum_{\sigma^1} \dots \sum_{\sigma^N} \left( \prod_{j=1}^L \langle \sigma^{j+1} | \mathcal{O} | \sigma^j \rangle \right), \\ &= \sum_{\{\sigma^j\}} \left( \prod_{j=1}^L \langle \sigma^{j+1} | \mathcal{O} | \sigma^j \rangle \right). \end{aligned}$$

No cálculo acima, escrevemos  $\sigma$  ao invés de  $\{\sigma\}$  para evitar poluição. Podemos aplicar o resultado acima para  $Z_q$ . Antes, porém, note que  $|\sigma\rangle = |\sigma_1, \dots, \sigma_N\rangle$  de tal modo que a soma sobre todas as configurações de  $\sigma$  é equivalente a escrever  $\sum_{\{\sigma_i\}}$ .

Para  $Z_q$ ,

$$Z_q \approx \sum_{\{\sigma_i^j\}} \left( \prod_{j=1}^L \langle \sigma^{j+1} | e^{-\delta\tau \hat{H}_1} e^{-\delta\tau \hat{H}_0} | \sigma^j \rangle \right).$$

Em  $\langle \sigma^{j+1} | e^{-\delta\tau \hat{H}_1} e^{-\delta\tau \hat{H}_0} | \sigma^j \rangle$ , o termo  $e^{-\delta\tau \hat{H}_0}$  age sobre  $\langle \sigma^j |$  produzindo

$$\langle \sigma^{j+1} | e^{-\delta\tau \hat{H}_1} e^{-\delta\tau \hat{H}_0} | \sigma^j \rangle = e^{\delta\tau \sum_{i=1}^N \sigma_i^j \sigma_{i+1}^j} \langle \sigma^{j+1} | e^{-\delta\tau \hat{H}_1} | \sigma^j \rangle. \quad (445)$$

Para o termo restante dentro do *braket*, necessitamos de um pouco mais de raciocínio. Lembrando que, pelo teorema espectral, vale

$$e^{k\hat{\sigma}^x} = e^k |+\rangle \langle +| + e^{-k} |-\rangle \langle -|,$$

com

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle], \quad |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle],$$

sendo  $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$  a base de  $\hat{\sigma}^z$ . Das projeções da base  $\{|+\rangle, |-\rangle\}$  na base de  $\hat{\sigma}^z$ , temos

$$\begin{aligned} \langle \sigma_i^{j+1} | e^{k\hat{\sigma}^x} | \sigma_i^j \rangle &= e^k \langle \sigma_i^{j+1} | + \rangle \langle + | \sigma_i^j \rangle + e^{-k} \langle \sigma_i^{j+1} | - \rangle \langle - | \sigma_i^j \rangle, \\ &= \frac{e^k + (\sigma_i^{j+1} \sigma_i^j) e^{-k}}{2} \end{aligned}$$

, vemos que  $\langle \sigma_i^{j+1} | e^{k\hat{\sigma}^x} | \sigma_i^j \rangle$  é igual a  $\cosh(k)$  quando o produto dos  $\sigma$  é igual a 1 e  $\sinh(k)$  quando o produto é igual a  $-1$ . Uma forma de reescrever isso é a seguinte:

$$\begin{cases} \sqrt{\cosh(k) \sinh(k)} \sqrt{\coth(k)}, & \text{se } \sigma_i^j \sigma_i^{j+1} = 1, \\ \sqrt{\cosh(k) \sinh(k)} \sqrt{\tanh(k)}, & \text{se } \sigma_i^j \sigma_i^{j+1} = -1, \end{cases}$$

ou, de uma forma mais compacta

$$\Lambda e^{\gamma \sigma_i^j \sigma_i^{j+1}},$$

com

$$\Lambda = \sqrt{\cosh(k) \sinh(k)}, \quad \gamma = -\ln[\tanh(k)].$$

Fazendo uso da última representação,

$$\langle \sigma^{j+1} | e^{-\delta\tau \hat{H}_1} | \sigma^j \rangle = \prod_{i=1}^N \langle \sigma_i^{j+1} | e^{-\delta\tau \hat{H}_1} | \sigma_i^j \rangle \Lambda e^{\gamma \sigma_i^j \sigma_i^{j+1}} = \Lambda^N e^{\sum_{i=1}^N \gamma \sigma_i^j \sigma_i^{j+1}}.$$

Substituindo os resultados anteriores em  $Z_q$ , chegamos a

$$Z_q \approx \Lambda^{NL} e^{\delta\tau J \sum_{i,j} \sigma_i^j \sigma_{i+1}^j + \gamma \sum_{i,j} \sigma_i^j \sigma_i^{j+1}}. \quad (446)$$

Comparemos agora com a função de partição clássica:

$$Z_{cl} = \sum_{\{\sigma\}} e^{\beta J_x \sum_{i,j} \sigma_i^j \sigma_{i+1}^j + \beta J_y \sum_{i,j} \sigma_i^j \sigma_i^{j+1}} \quad (447)$$

$$Z_q \approx \Lambda^{NL} \sum_{\{\sigma\}} e^{\delta\tau J \sum_{i,j} \sigma_i^j \sigma_{i+1}^j + \gamma \sum_{i,j} \sigma_i^j \sigma_i^{j+1}}. \quad (448)$$

Aqui,  $\beta$  denota o inverso da temperatura para o modelo clássico. O resultado acima nos permite identificar a função de partição clássica com a função de partição quântica fazendo se identificarmos

$$\begin{aligned} \delta\tau J &= \beta J_x, & N &= N_x, \\ \gamma &= \beta J_y, & L &= N_y. \end{aligned}$$

Também vemos que, durante o mapeamento de um observável, devemos chegar à forma acima, com o termo  $\Lambda^{NL}$  da forma como aparece. Se por acaso, não aparecer, ou for de algum modo diferente, devemos manipular as expressões para que cheguem na forma acima.

O modelo clássico apresenta uma transição de fase no limite  $N_x \rightarrow \infty$ ,  $N_y \rightarrow \infty$ . O elemento  $\Lambda^{NL}$  vai se aproximando de zero.

O limite  $N_y \rightarrow \infty$  equivale a  $\delta\tau \rightarrow 0$ , se  $\beta_q$  é mantido fixo. Se se deixa a temperatura do sistema quântico variar,  $\delta\tau$  pode ser mantido fixo. Seguindo a ideia 5.4, podemos mandar os elementos "pequenos" para zero ou, equivalentemente, mandar os elementos "grandes" para infinito, chegando aos mesmos resultados.

Munidos do processo acima, podemos determinar uma técnica de mapeamento para outros observáveis e aplicar às quantidades de interesse. Faremos isso a seguir.

## 9.2.2 Procedimento Geral

Para o mapeamento de todos os observáveis, partiremos de uma ideia semelhante a feita anteriormente. Para calcular o mapeamento do operador  $\hat{A}$ , basta que saibamos a ação de  $e^{k\hat{A}}$  sobre uma configuração  $|\sigma_1, \dots, \sigma_N\rangle$  de spins (equivalentemente, saber a ação de  $\hat{A}$ ).

Porcedemos da seguinte forma:

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr} (\hat{A} e^{-\beta \hat{H}}) = \text{Tr} \left[ -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} e^{-\beta(\hat{H} + \mu \hat{A})} \right] = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \text{Tr} e^{-\beta(\hat{H} + \mu \hat{A})} \Big|_{\mu=0}.$$

Por questão de simplicidade, definimos  $Q_A(\mu) = \text{Tr} e^{-\beta(\hat{H} + \mu \hat{A})}$ .

Com base nas ideias anteriores, procedemos fazendo

$$\begin{aligned} Q_A(\mu) &= \sum_{\{\sigma\}} \langle \{\sigma\} | e^{-\beta(\hat{H} + \mu \hat{A})} | \{\sigma\} \rangle, \\ &\approx \sum_{\{\sigma\}} \left\langle \{\sigma\} \left| \left[ e^{-\frac{\beta_q}{N_y} \hat{H}_1} e^{-\frac{\beta_q}{N_y} \hat{H}_0} e^{-\frac{\beta_q}{N_y} \mu \hat{A}} \right]^{N_y} \right| \{\sigma\} \right\rangle, \\ &\approx \sum_{\{\sigma\}} \left\langle \{\sigma\} \left| \prod_{j=1}^{N_y} \left[ e^{-\frac{\beta_q}{N_y} \hat{H}_1} e^{-\frac{\beta_q}{N_y} \hat{H}_0} e^{-\frac{\beta_q}{N_y} \mu \hat{A}} \right] \right| \{\sigma\} \right\rangle, \\ &\approx \sum_{\{\sigma\}} \left[ \prod_{j=1}^{N_y} \left\langle \{\sigma^{j+1}\} \left| e^{-\delta\tau \hat{H}_1} e^{-\delta\tau \hat{H}_0} e^{-\delta\tau \mu \hat{A}} \right| \{\sigma^j\} \right\rangle \right], \\ &\approx \Lambda^{NL} \sum_{\{\sigma\}} \left[ \prod_{j=1}^{N_y} \left\langle \{\sigma^{j+1}\} \left| e^{-\delta\tau \mu \hat{A}} \right| \{\sigma^j\} \right\rangle e^{\delta\tau J \sum_{i,j} \sigma_i^j \sigma_{i+1}^j + \gamma \sum_{i,j} \sigma_i^j \sigma_i^{j+1}} \right], \\ &\approx \sum_{\{\sigma\}} \left[ \prod_{j=1}^{N_y} \left\langle \{\sigma^{j+1}\} \left| e^{-\delta\tau \mu \hat{A}} \right| \{\sigma^j\} \right\rangle e^{-\beta H_{cl}} \right]. \end{aligned}$$

$H_{cl}$  representa a Hamiltoniana clássica, nas expressões acima. A última expressão acima se traduz como o valor esperado clássico. Isso nos permite escrever

$$\langle \hat{A} \rangle_q = \left\langle -\frac{1}{\beta_q} \frac{\partial}{\partial \mu} \prod_{j=1}^{N_y} \left\langle \{\sigma^{j+1}\} \left| e^{-\delta\tau \mu \hat{A}} \right| \{\sigma^j\} \right\rangle \right\rangle_{cl}. \quad (449)$$

Os subscritos  $q$  e  $cl$  são utilizados para indicar os valores esperados quânticos e clássicos.

Apesar da expressão acima, por vezes é interessante fazer todo o processo análogo ao feito para o mapeamento de  $Z_q$ .



### 9.2.3 Mapeando-se $\hat{\sigma}_k^z$

O mapeamento do operador  $\hat{\sigma}_k^z$  pode ser feito com base no procedimento geral desenvolvido em 9.2.2. Começemos por estudar o termo  $\langle \{\sigma^{j+1}\} | e^{-\delta\tau\mu\hat{\sigma}_k^z} | \{\sigma^j\} \rangle$ . O operador  $e^{\delta\tau\mu\hat{\sigma}_k^z}$  age sobre  $|\{\sigma\}\rangle$  da seguinte maneira:

$$e^{-\delta\tau\mu\hat{\sigma}_k^z} |\sigma_1^j, \dots, \sigma_N^j\rangle = e^{-\delta\tau\mu\sigma_k^j} |\sigma_1^j, \dots, \sigma_N^j\rangle.$$

Com isso, da mesma forma que feito para a função de partição em 9.2.1 (ainda com base em 9.2.2),

$$\begin{aligned} \langle \hat{\sigma}_k^z \rangle_q &= \left\langle -\frac{1}{\beta_q} \frac{\partial}{\partial \mu} \prod_j e^{-\delta\tau\mu\sigma_k^j} \right\rangle_{cl}, \\ &= \left\langle -\frac{1}{\beta_q} \frac{\partial}{\partial \mu} e^{-\sum_j \delta\tau\mu\sigma_k^j} \right\rangle_{cl}, \\ &= \left\langle -\frac{1}{\beta_q} \left( -\delta\tau \sum_j \sigma_k^j \right) e^{-\sum_j \delta\tau\mu\sigma_k^j} \right\rangle_{cl}, \\ &= \left\langle -\frac{1}{\beta_q} \left[ -\left( \frac{\beta_q}{N_y} \right) \sum_j \sigma_k^j \right] \right\rangle_{cl}, \\ \langle \hat{\sigma}_k^z \rangle_q &= \left\langle \frac{1}{N_y} \sum_{j=1}^{N_y} \sigma_k^j \right\rangle_{cl}. \end{aligned} \quad (450)$$

O resultado em (450) tem uma interpretação simples; o valor esperado do operador  $\hat{\sigma}_k^z$  é o valor esperado da média do spins na coluna  $k$ . Pode-se pensar em tal valor médio como a média temporal. A interpretação do observável clássico é condinzente com o lado esquerdo da equação. No limite termodinâmico,  $N_y \rightarrow \infty$  e a soma interna ao valor esperado clássico tende para a média temporal em todo o tempo.

### 9.2.4 Mapeando-se $\hat{\sigma}_k^z \hat{\sigma}_l^z$

O procedimento é semelhante ao da sub-subseção 9.2.3. Em alguns casos, a nova Hamiltoniana  $\tilde{H}$  pode ser escrita com a introdução de duas variáveis fontes  $\mu$  e  $\nu$ . Entretanto, a ação do operador  $e^{k\hat{\sigma}_k^z \hat{\sigma}_l^z}$  é muito simples<sup>10</sup> tal que os cálculos podem ser realizados com apenas uma variável fonte.

Temos que

$$e^{-\delta\tau\mu\hat{\sigma}_k^z \hat{\sigma}_l^z} |\sigma_1^j, \dots, \sigma_N^j\rangle = e^{-\delta\tau\mu\sigma_k^j \sigma_l^j} |\sigma_1^j, \dots, \sigma_N^j\rangle,$$

logo, como em 9.2.3,

$$\begin{aligned} \langle \hat{\sigma}_k^z \hat{\sigma}_l^z \rangle_q &= \left\langle -\frac{1}{\beta_q} \frac{\partial}{\partial \mu} e^{-\delta\tau\mu \sum_j \sigma_k^j \sigma_l^j} \right\rangle_{cl}, \\ &= \left\langle -\frac{1}{\beta_q} \frac{\partial}{\partial \mu} \left[ -\left( -\frac{\beta_q}{N_y} \right) \sum_j \sigma_k^j \sigma_l^j \right] e^{-\delta\tau\mu \sum_j \sigma_k^j \sigma_l^j} \right\rangle_{cl}, \\ &= \left\langle \frac{1}{N_y} \sum_{j=1}^{N_y} \sigma_k^j \sigma_l^j \right\rangle_{cl}. \end{aligned}$$

Baseando-se em 9.2.3, poderíamos esperar tal resultado. A interpretação segue a mesma ideia anterior;  $\langle \hat{\sigma}_k^z \hat{\sigma}_l^z \rangle_q$  corresponde ao valor esperado da média temporal do produto dos spins nas coluna  $k$  e  $l$  da rede clássica.

<sup>10</sup>Para o operador  $\hat{\sigma}_k^x \hat{\sigma}_l^x$  não é tão trivial de tal modo que a introdução de duas fontes é mais interessante.

### 9.2.5 Mapeando-se $\hat{\sigma}_k^x$

Para mapear o operador  $\hat{\sigma}_k^x$  comecemos por definir uma Hamiltoniana  $\tilde{H}$  dada por

$$\tilde{H} = -J \sum_i (\hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z + \lambda \hat{\sigma}_i^x) - J\mu \hat{\sigma}_k^x = -J \sum_i (\hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z + \lambda_i \hat{\sigma}_i^x).$$

Os  $\lambda_i$  definidos na última equação são tais que  $\lambda_k = \lambda + \mu$  e  $\lambda_{i \neq k} = \lambda$ . Com isso, podemos escrever

$$\langle \hat{\sigma}_k^x \rangle_q = \frac{1}{\beta_q J} \frac{\partial}{\partial \mu} \text{Tr} \left( e^{-\beta(\tilde{H} - J\mu \hat{\sigma}_k^x)} \right). \quad (451)$$

Vamos definir, por praticidade,  $Q \stackrel{\text{def}}{=} \text{Tr} \left( e^{-\beta(\tilde{H} - J\mu \hat{\sigma}_k^x)} \right)$ . Temos então o seguinte:

$$\begin{aligned} Q &= \text{Tr} \left( e^{-\beta(\tilde{H} - J\mu \hat{\sigma}_k^x)} \right), \\ &= \sum_{\{\sigma\}} \left\langle \{\sigma\} \left| \prod_{j=1}^{N_y} \left[ e^{\delta\tau J \sum_i \lambda_i \hat{\sigma}_i^x} e^{\delta\tau J \sum_i \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z} \right] \right| \{\sigma\} \right\rangle, \\ &= \sum_{\{\sigma\}} \prod_{j=1}^{N_y} \langle \{\sigma^{j+1}\} | e^{\delta\tau J \sum_i \lambda_i \hat{\sigma}_i^x} e^{\delta\tau J \sum_i \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z} | \{\sigma^j\} \rangle, \\ &= \sum_{\{\sigma\}} \prod_i^{N_x} \Lambda_i^{N_y} \left[ e^{\delta\tau J \sum_i \sigma_i^j \sigma_{i+1}^j + \sum_i \gamma_i \sigma_i^j \sigma_i^{j+1}} \right], \\ &= \sum_{\{\sigma\}} \left[ \Lambda^{N_y(N_x-1)} \Lambda_k^{N_y} e^{\delta\tau J \sum_{i,j} \sigma_i^j \sigma_{i+1}^j + \gamma \sum_{i,j} \sigma_i^j \sigma_i^{j+1}} \cdot e^{(\gamma_k - \gamma) \sum_j \sigma_k^j \sigma_k^{j+1}} \right], \\ &= \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta H_{cl}} \left( \frac{\Lambda_k}{\Lambda} \right)^{N_y} \cdot e^{(\gamma_k - \gamma) \sum_j \sigma_k^j \sigma_k^{j+1}}. \end{aligned}$$

Nas expressões acima,  $\gamma$  se refere ao mesmo definido anteriormente,  $-\frac{1}{2} \ln[\tanh(\delta\tau J \lambda)]$  e  $\gamma_k$  corresponde a troca de  $\lambda$  por  $\lambda + \mu$ . A mesma ideia se aplica a  $\Lambda$  e  $\Lambda_k$ . A derivada  $\partial_\mu Q$  depende de duas outras derivadas:  $\partial_\mu \Lambda_k$  e  $\partial_\mu e^{(\gamma_k - \gamma) \sum_j \sigma_k^j \sigma_k^{j+1}}$ .

Para  $\partial_\mu \Lambda_k$ , vale  $\partial_\mu \Lambda_k^2 = 2\Lambda_k \partial_\mu \Lambda_k$  e

$$\begin{aligned} \partial_\mu \Lambda_k^2 &= \cosh(\delta\tau J \lambda_k) \partial_\mu \sinh(\delta\tau J \lambda_k) + \sinh(\delta\tau J \lambda_k) \partial_\mu \cosh(\delta\tau J \lambda_k), \\ &= \delta\tau J [\cosh^2(\delta\tau J \lambda_k) + \sinh^2(\delta\tau J \lambda_k)]; \\ \partial_\mu \Lambda_k &= \frac{1}{\Lambda_k} \left( \frac{\delta\tau J}{2} \right) \cosh(2\delta\tau J \lambda_k). \end{aligned}$$

Calculando  $\partial_\mu e^{(\gamma_k - \gamma) \sum_j \sigma_k^j \sigma_k^{j+1}}$ , encontramos o seguinte:

$$\begin{aligned} \partial_\mu e^{(\gamma_k - \gamma) \sum_j \sigma_k^j \sigma_k^{j+1}} &= e^{(\gamma_k - \gamma) \sum_j \sigma_k^j \sigma_k^{j+1}} \sum_j \sigma_k^j \sigma_k^{j+1} \partial_\mu (\gamma_k); \\ \partial_\mu \gamma_k &= -\frac{1}{2} \frac{1}{\tanh(\delta\tau J \lambda_k)} \times \text{sech}^2(\delta\tau J \lambda_k) \delta\tau J, \\ &= -\frac{\delta\tau J}{2} \frac{1}{\sinh(\delta\tau J) \cosh(\delta\tau J)}, \\ &= -\frac{\delta\tau J}{2} \frac{1}{\Lambda_k^2}. \\ \partial_\mu e^{(\gamma_k - \gamma) \sum_j \sigma_k^j \sigma_k^{j+1}} &= -\frac{1}{\Lambda_k^2} \left( \frac{\delta\tau J}{2} \right) \sum_j \sigma_k^j \sigma_k^{j+1} e^{(\gamma_k - \gamma) \sum_j \sigma_k^j \sigma_k^{j+1}}. \end{aligned}$$

Podemos juntar as informações anteriores para finalmente calcular  $\partial_\mu Q$ .

$$\begin{aligned}\partial_\mu Q &= \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta H_{cl}} \frac{1}{\Lambda^{N_y}} \frac{\partial}{\partial \mu} \left( \Lambda_k^{N_y} \cdot e^{(\gamma_k - \gamma) \sum_j \sigma_k^j \sigma_k^{j+1}} \right), \\ &= \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta H_{cl}} \frac{1}{\Lambda^{N_y}} \left[ N_y \Lambda_k^{N_y-2} \left( \frac{\delta \tau J}{2} \right) \left( \cosh(2\delta \tau J \lambda_k) - \sum_j \sigma_k^j \sigma_k^{j+1} \right) \right] \cdot e^{(\gamma_k - \gamma) \sum_j \sigma_k^j \sigma_k^{j+1}}.\end{aligned}$$

Fazendo  $\mu = 0$ , temos que  $\Lambda_k \rightarrow \Lambda$ ,  $\gamma_k \rightarrow \gamma$  e  $\lambda_k \rightarrow \lambda$ . Assim,

$$\partial_\mu Q = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta H_{cl}} \cdot \frac{N_y}{\Lambda^2} \left( \frac{\delta \tau J}{2} \right) \left[ \cosh(2\delta \tau J \lambda) - \sum_j \sigma_k^j \sigma_k^{j+1} \right]. \quad (452)$$

Das analogias anteriores,  $\delta \tau J = \beta J_x$ . O termo  $\delta \tau J \lambda$  é menos trivial para se escrever em termo das variáveis clássicas.

Partindo de  $\gamma = \beta J_y$ , escrevemos

$$\begin{aligned}e^{-2\beta J_y} &= \tanh(\delta \tau J \lambda), \\ \tanh^{-1}(e^{-2\beta J_y}) &= \tanh^{-1}(\tanh(\delta \tau J \lambda)), \\ \delta \tau J \lambda &= \frac{1}{2} [\ln(1 + e^{-\beta J_y}) - \ln(1 - e^{-\beta J_y})], \\ 2\delta \tau J \lambda &= \ln[\tanh(\beta J_y)].\end{aligned}$$

Notemos também o seguinte:

$$\cosh(x) \sin(x) = \frac{e^x + e^{-x}}{2} \frac{e^x - e^{-x}}{2} = \frac{1}{2} \sinh(2x),$$

e, portanto,

$$\Lambda^2 = \frac{\sinh(2\delta \tau \lambda J)}{2}.$$

Dois últimos resultados importantes são:

$$\sinh(\ln x) = \frac{x^2 - 1}{2x}, \quad \cosh(\ln x) = \frac{x^2 + 1}{2x}.$$

Associando  $\sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta H_{cl}} \mathcal{O} = \langle \mathcal{O} \rangle_{cl}$  e utilizando os resultados anteriores, vê-se que

$$\begin{aligned}\partial_\mu Q \Big|_{\mu=0} &= \left\langle \frac{N_y \beta J_x}{\sinh(\ln[\tanh(\beta J_y)])} \left( \cosh(\ln[\tanh(\beta J_y)]) - \sum_j \sigma_k^j \sigma_k^{j+1} \right) \right\rangle_{cl}, \\ &= \left\langle N_y \beta J_x \left( \frac{\tanh^2(\beta J_y) + 1}{\tanh^2(\beta J_y) - 1} + \frac{2 \tanh(\beta J_y)}{1 - \tanh^2(\beta J_y)} \cdot \sum_j \sigma_k^j \sigma_k^{j+1} \right) \right\rangle_{cl}.\end{aligned}$$

Retomando a fórmula anterior, o valor esperado de  $\hat{\sigma}^x$  é dado pela divisão da última expressão acima por  $\beta_q J$ . Mas  $\beta_q J = \delta \tau J N_y$ , de modo que, utilizando-se propriedades das funções hiperbólicas,

$$\langle \hat{\sigma}_k^x \rangle_q = \left\langle \frac{\text{sech}^2(\beta J_y) - 2}{\text{sech}^2(\beta J_y)} + 2 \sinh(\beta J_y) \cdot \sum_j \sigma_k^j \sigma_k^{j+1} \right\rangle_{cl},$$

ou,

$$\langle \hat{\sigma}_k^x \rangle_q = 1 - 2 \cosh^2(\beta J_y) + 2 \sinh(\beta J_y) \left\langle \sum_j \sigma_k^j \sigma_k^{j+1} \right\rangle_{cl}, \quad (453)$$

$$= 2 \sinh(\beta J_y) \left[ \left\langle \sum_j \sigma_k^j \sigma_k^{j+1} \right\rangle_{cl} - 1 \right] - 1. \quad (454)$$

A menos dos termos diretamente dependentes da temperatura e do acoplamento vertical e constantes, vemos que o valor esperado de  $\hat{\sigma}_k^x$  pode ser visto como o valor esperado de se encontrar um *flip* na coluna  $k$ , no modelo clássico. Note que para uma temperatura de transição finita, o termo  $\sinh(\beta J_y)$  é finito. Mostraremos posteriormente que o termo  $\sum \sigma_k^j \sigma_k^{j+1}$  diverge na transição de fase, (ao invés de sua derivada como ocorre para outros observáveis) de tal modo que o comportamento de  $\langle \hat{\sigma}_k^x \rangle_q$  é totalmente determinado por esse termo. Assim, podemos ignorar os termos restantes e adotar

$$\langle \hat{\sigma}_k^x \rangle_q = \left\langle \frac{1}{N_y} \sum_j \sigma_k^j \sigma_k^{j+1} \right\rangle_{cl}. \quad (455)$$

O termo  $1/N_y$  é apenas um fator de normalização. O mesmo segue a ideia do mapeamento de  $\hat{\sigma}_k^z$  e  $\hat{\sigma}_l^z \hat{\sigma}_l^z$ .

### 9.2.6 Mapeando-se $\hat{\sigma}_k^x \hat{\sigma}_l^x$

O mapeamento do operador  $\hat{\sigma}_k^x \hat{\sigma}_l^x$  é semelhante ao mapeamento de  $\hat{\sigma}_k^x$  se ao invés de seguir a ideia em 9.2.4, introduzirmos duas variáveis para servir de fonte.

Tomemos  $\tilde{H} = \hat{H} - J\mu\hat{\sigma}_k^x - J\mu\hat{\sigma}_l^x$ . Com tal hamiltoniana,

$$\prod_j \langle \{\sigma^{j+1}\} | e^{-\beta_q \tilde{H}} | \{\sigma^j\} \rangle = e^{-\beta H_{cl}} \left( \frac{\Lambda_1}{\Lambda} \right)^{N_y} \cdot e^{(\gamma_1 - \gamma) \sum_j \sigma_k^j \sigma_k^{j+1}} \cdot \left( \frac{\Lambda_2}{\Lambda} \right)^{N_y} e^{(\gamma_2 - \gamma) \sum_j \sigma_l^j \sigma_l^{j+1}}.$$

Derivando-se o resultado acima com relação a  $\mu$  e com relação a  $\nu$ , é fácil ver que o resultado será da forma de um produto dos termos multiplicando  $e^{-\beta H_{cl}}$  na equação (452);

$$\frac{\partial^2}{\partial \mu \partial \nu} \left[ \prod_j \langle \{\sigma^{j+1}\} | e^{-\beta_q \tilde{H}} | \{\sigma^j\} \rangle \right] = e^{-\beta H_{cl}} \frac{\partial}{\partial \mu} \left[ \left( \frac{\Lambda_1}{\Lambda} \right)^{N_y} e^{(\gamma_1 - \gamma) \sum_j \sigma_k^j \sigma_k^{j+1}} \right] \cdot \frac{\partial}{\partial \nu} \left[ \left( \frac{\Lambda_2}{\Lambda} \right)^{N_y} e^{(\gamma_2 - \gamma) \sum_j \sigma_l^j \sigma_l^{j+1}} \right].$$

Assim, é fácil ver que o resultado obtido interno ao valor esperado clássico  $\langle \rangle_{cl}$  será o produto dos termos encontrados anteriormente, um dos termos com a soma em  $\sigma_k^j \sigma_k^{j+1}$  e outro termo com a soma em  $\sigma_l^j \sigma_l^{j+1}$ . Das considerações finais em 9.2.5, podemos então adotar

$$\langle \hat{\sigma}_k^x \hat{\sigma}_l^x \rangle_q = \left\langle \frac{1}{N_y^2} \left( \sum_j \sigma_k^j \sigma_k^{j+1} \right) \left( \sum_j \sigma_l^j \sigma_l^{j+1} \right) \right\rangle_{cl} \quad (456)$$

A interpretação do resultado acima é como uma “mistura” da interpretação de  $\langle \hat{\sigma}_k^z \hat{\sigma}_l^z \rangle$  e  $\langle \hat{\sigma}_k^x \rangle$ ; o valor esperado  $\langle \hat{\sigma}_k^x \hat{\sigma}_l^x \rangle$  classicamente representa o valor esperado de se encontrarem *flips* simultâneos nas colunas  $k$  e  $l$ .

### 9.2.7 Mapeando-se $\hat{\sigma}_k^z \hat{\sigma}_l^x$

Com os resultados de 9.2.3 e 9.2.5, calcular o valor esperado  $\langle \hat{\sigma}_k^z \hat{\sigma}_l^x \rangle$  em termos de observáveis clássicos é trivial. A resposta pode ser facilmente imaginada antes do cálculo e, como se verá, o resultado está de acordo.

Tomemos  $\tilde{H} = \hat{H} + \mu\hat{\sigma}_k^z - J\nu\hat{\sigma}_l^x$ . O termo  $\langle \{\sigma^{j+1}\} | e^{-\delta\tau\nu\hat{\sigma}_l^x} e^{-\delta\tau\mu\hat{\sigma}_k^z} | \{\sigma^j\} \rangle$  pode ser escrito como

$$e^{-\delta\tau\sigma_k^j} \langle \{\sigma^{j+1}\} | e^{-\delta\tau\nu\hat{\sigma}_l^x} | \{\sigma^j\} \rangle.$$

Utilizando os resultados em 9.2.5, temos que

$$\text{Tr} e^{-\beta_q \tilde{H}} = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta H_{cl}} \cdot e^{\sum_j \sigma_k^j} \cdot \left( \frac{\Lambda_l}{\Lambda} \right) e^{(\gamma_l - \gamma) \sum_j \sigma_l^j \sigma_l^{j+1}}.$$

Derivando com relação a  $\mu$  e  $\nu$  e fazendo  $\mu = \nu = 0$  e sob as considerações dos outros termos em 9.2.5, chegamos a

$$\langle \hat{\sigma}_k^z \hat{\sigma}_l^x \rangle_q = \left\langle \frac{1}{N_y^2} \left( \sum_{j=1}^{N_y} \sigma_k^j \right) \left( \sum_{j=1}^{N_y} \sigma_l^j \sigma_l^{j+1} \right) \right\rangle_{cl}. \quad (457)$$

Observe que, para  $k \neq l$ , os operadores  $\hat{\sigma}_l^x$  e  $\hat{\sigma}_k^z$  comutam, de tal forma que o observável  $\langle \hat{\sigma}_k^x \hat{\sigma}_l^z \rangle_q$  é obtido simplesmente pela troca de  $k$  por  $l$  e  $l$  por  $k$  na expressão (457). Este resultado é utilizado posteriormente para o cálculos do valor esperado  $\langle \hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_{i+1}^z \rangle$  presente na desigualdade de Bell 441.

A interpretação deste observável é que o mesmo indica uma forma de “correlação” entre *flips* na coluna  $l$  e o alinhamento dos spins na coluna  $k$ .

### 9.3 Simulação Computacional do Modelo de Ising

Esta subseção tem por objetivo apresentar os fundamentos teóricos e apresentar brevemente a implementação de uma simulação computacional do Modelo de Ising.

Começaremos apresentando a teoria por trás, justificando os algoritmos escolhidos e sua convergência. Em seguida, apresentaremos alguns resultados para o modelo isotrópico de forma a entender os limites da simulação, discutir alguns efeitos de se ter uma rede finita e mostrar a concordância da solução teórica com a simulação.

Por fim, os resultados para a rede isotropica serão apresentados de forma a obter os observáveis determinados em 9.2.

#### 9.3.1 Conhecimentos Preliminares em Teoria da Medida e Integração

Como veremos nesta subseção, o Modelo de Ising é uma *cadeia de markov ergódica*, valendo o *Teorema Ergódico*. Para entendermos o significado e a importância destes fatos, são necessários conhecimentos preliminares em Teoria da Medida e Integração. Ao final veremos que estes fatos estão intimamente ligados ao algoritmo utilizado, justificando os mesmos. Esta sub-subseção baseia-se inteiramente em [43]

Começemos por entender o conceito de uma  $\sigma$ -álgebra.

**Definição 1.** *Seja  $X$  um conjunto não vazio e  $\mathcal{P}(X)$  o conjunto das partes de  $X$ . O subconjunto  $\Sigma \subseteq \mathcal{P}(X)$  é chamado uma  $\sigma$ -álgebra se*

1.  $X \in \Sigma$ , com  $X$  sendo o conjunto universo, no dado contexto.
2.  $\Sigma$  é fechado sob complementação, isto é, se  $A \in \Sigma$ , então  $A^c \in \Sigma$ .
3.  $\Sigma$  é fechado sob uniões contáveis, isto é, se  $A_1, \dots, A_n \in \Sigma$ , então  $\bigcup_{i=1}^n A_i \in \Sigma$ .

O conceito de  $\sigma$ -álgebra tem importância básica em teoria da medida. Para o presente trabalho, o interesse se dá apenas para a definição de uma *medida*; definida sobre uma  $\sigma$ -álgebra de um conjunto.

**Definição 2.** *Seja  $X$  um conjunto não vazio e  $\Sigma \subseteq \mathcal{P}(X)$  uma  $\sigma$ -álgebra sobre  $X$ . Uma **medida**  $\mu$  é um mapa  $\mu: \Sigma \rightarrow I \subseteq \mathbb{R}$  satisfazendo*

1. *Não negatividade:* para todo  $A \in \Sigma$ ,  $\mu(A) \geq 0$ .
2. *Medida nula para  $\emptyset$ :*  $\mu(\emptyset) = 0$ .
3. *Aditividade contável:*  $\mu(\bigcup_{i=1}^n A_i) = \sum_{i=1}^n \mu(A_i)$ , para  $\{A_i\}_{i=1}^n$  sendo conjuntos dois a dois disjuntos em  $\Sigma$ .

Um caso especial da definição 2 é quando  $I = [0, 1]$ . Em tal caso,  $\mu$  é chamada uma *medida de probabilidade*. A partir daqui, todas as medidas citadas serão tomadas (subentendidamente) como probabilidades. O conceito de medida juntamente com o conceito de *transformação mensurável* serão a base para definir conceitos e chegar ao Teorema Ergódico.

Antes de tratar de transformações, definamos três nomenclaturas.

**Definição 3.** Chama-se um **conjunto mensurável** a todo subconjunto  $A \subseteq \Sigma$ .

**Definição 4.** Chama-se um **espaço mensurável** a toda dupla ordenada  $(X, \Sigma)$ , onde  $X$  é um conjunto não vazio e  $\Sigma$  é uma  $\sigma$ -álgebra sobre  $X$ .

**Definição 5.** Chama-se um **espaço de medida** a toda tripla  $(X, \Sigma, \mu)$  em que  $X$  é um conjunto não vazio,  $\Sigma$  é uma  $\sigma$ -álgebra sobre  $X$  e  $\mu$  é uma medida sobre o espaço mensurável  $(X, \Sigma)$ .

Com as definições acima, podemos definir *transformações mensuráveis* e *transformações que preservam a medida*.

**Definição 6.** Sejam  $(X, \Sigma)$  e  $(Y, \Pi)$  espaços mensuráveis. A aplicação  $T: (X, \Sigma) \rightarrow (Y, \Pi)$  é chamada uma **transformação mensurável** se

$$T^{-1}(A) = \{x \in X | T(x) \in A\} \in \Sigma, \quad \forall A \in \Pi.$$

Costumeiramente, abrevia-se  $T: X \rightarrow Y$ .

**Definição 7.** A transformação  $T: (X, \Sigma) \rightarrow (X, \Sigma)$  é dita ser uma **transformação mensurável que preserva a medida**, ou simplesmente, uma transformação que preserva a medida, se

$$\mu(T^{-1}(A)) = \mu(A), \quad \forall A \in \Sigma.$$

À quadrupla  $(X, \Sigma, \mu, T)$  chamamos **sistema dinâmico que preserva a medida**.

Com as definições anteriores, estamos aptos a definir o que é uma *transformação ergódica*. Este conceito, juntamente com os demais mencionados, serão retomado ao final de todas as definições e serão aplicados ao Modelo de Ising. Isso também servirá como uma forma de retomar as definições acima tornando-as de entendimento mais natural.

**Definição 8.** Seja  $(X, \Sigma, \mu, T)$  um sistema dinâmico que preserva medida. A transformação  $T$  é dita ser **ergódica** se, para cada  $A \in \Sigma$ , com  $T^{-1}(A) = A$ , ou  $\mu(A) = 1$  ou  $\mu(A) = 0$ .

As definições acima consistem em metade dos conceitos necessários para o entendimento do Teorema Ergódico. A outra metade depende dos conceitos de integração. Trataremos a seguir as ideias para definirmos a integral de Lebesgue e finalmente chegar ao Teorema Ergódico.

Considere  $(X, \Sigma, \mu)$  um espaço de medida. O que se segue se passa sobre tal espaço.

**Definição 9.** Seja  $\mathbb{R}$  o conjunto dos números reais. Definamos duas entidades chamadas infinito positivo e infinito negativo, denotadas  $+\infty$  e  $-\infty$ , com as propriedades

$$\begin{aligned} +\infty &> x, \quad \forall x \in \mathbb{R}, \\ -\infty &< x, \quad \forall x \in \mathbb{R}. \end{aligned}$$

O conjunto  $\bar{\mathbb{R}} = \mathbb{R} \cup \{-\infty, +\infty\}$  é chamado **conjunto dos reais estendidos**.

Em alguns casos, denota-se  $+\infty$  simplesmente por  $\infty$ .

**Definição 10.** Seja  $A \in \Sigma$ . A função  $\mathbf{I}_A(x)$  definida como

$$\begin{aligned}\mathbf{I}_A: X &\rightarrow \{0, 1\} \\ x &\mapsto [x \in A]\end{aligned}$$

é chamada **função indicadora** do conjunto  $A$ . O símbolo  $[\cdot]$  denota os colchetes de Iverson, os quais assume valor 1 se a proposição interna aos colchetes é verdadeira e 0 caso seja falsa, adotado o contexto lógico matemático clássico.

**Definição 11.** Sejam  $A_k \subseteq A$ ,  $A \in \Sigma$ ,  $\mathbf{I}_{A_k}(x)$  uma função indicadora de  $A_k$  em  $X$ . A função

$$\begin{aligned}\phi: A &\rightarrow \bar{\mathbb{R}} \\ x &\mapsto \phi(x) = \sum_{k=1}^n \alpha_k \mathbf{I}_{A_k}(x)\end{aligned}$$

é chamada uma **função simples**.

Com as três definições supraescritas, podemos chegar ao conceito da integral de Lebesgue. Para tal, é importante deixar bem convencionado que

$$+\infty \cdot 0 = -\infty \cdot 0 = 0 \cdot +\infty = 0 \cdot -\infty = 0.$$

Podemos então definir a integral de Lebesgue de uma função simples e passar ao caso mais geral.

**Definição 12.** Seja  $\phi: A \rightarrow \bar{\mathbb{R}}$  uma função simples (a mesma definida em 11) e  $A_k \subseteq A$  conjuntos mensuráveis. Diz-se que  $\phi$  é **Lebesgue integrável** em  $A$  se

$$\sum_{k=1}^n |\alpha_k| \mu(A_k) < +\infty.$$

A **Integral de Lebesgue** é então definida como

$$\int_E \phi \, d\mu = \sum_{k=1}^n \alpha_k \mu(A_k).$$

A integral de Lebesgue se estende para uma classe mais ampla de funções; as *funções mensuráveis*, as quais são o caso para os observáveis que buscamos para o Modelo de Ising.

**Definição 13.** Seja  $f: X \rightarrow Y$  uma função e sejam  $(X, \Sigma)$ ,  $(Y, \Pi)$  espaços mensuráveis.  $f$  é dita ser  $(\Sigma, \Pi)$ -**mensurável**, (ou simplesmente mensurável, quando as  $\sigma$ -álgebras estão implícitas), se

$$f^{-1}(A) \in \Sigma, \quad \forall A \in \Pi.$$

A definição acima, de outro modo, diz que a *pré-imagem* de todo conjunto  $\Pi$ -mensurável é  $\Sigma$ -mensurável, para uma função  $(\Sigma, \Pi)$ -mensurável. Duas propriedades importantes é que se duas funções são mensuráveis, então seu produto ou a combinação linear de ambas também será.

**Definição 14.** Sejam  $\bar{\mathbb{R}}_+$  o conjunto extendido dos reais não negativos e  $f: A \rightarrow \bar{\mathbb{R}}_+$ , com  $A$   $\Sigma$ -mensurável. Seja ainda  $\phi$  uma função simples. A Integral de Lebesgue para  $f$  é definida em  $A$  como:

$$\int_A f \, d\mu = \sup_{\phi(x) \leq f(x)} \int_A \phi \, d\mu.$$

A integral acima assume valor  $+\infty$  se a função não é Lebesgue integrável. Nota-se que a definição acima vale para um função não negativa. Para estender o resultado acima para as demais funções, com a imagem não exclusiva em  $\bar{\mathbb{R}}_+$ , definimos as partes chamadas de positiva e negativa, denotadas  $f^+$  e  $f^-$ , respectivamente, como

$$f^+(x) = \begin{cases} f(x), & f(x) \geq 0, \\ 0, & f(x) < 0. \end{cases} \quad f^-(x) = \begin{cases} -f(x), & f(x) < 0, \\ 0, & f(x) \geq 0. \end{cases}$$

Sendo  $f$  mensurável,  $f^+$  e  $f^-$  também o serão e vale  $f(x) = (f^+ - f^-)(x)$ .

**Definição 15.** *Seja  $f$  mensurável e  $A \in \Sigma$ . Se, como definido em 14, ambas as funções  $f^+$  e  $f^-$  forem Lebesgue integrável, isto é, a integral de Lebesgue converge para um valor finito, então, a integral de Lebesgue para  $f$  é definida como*

$$\int_A f \, d\mu = \int_A f^+ \, d\mu - \int_A f^- \, d\mu.$$

Com os resultados acima, podemos entender o Teorema Ergódico, exceto pela expressão final do teorema que se entender por meio da definição 16:

**Definição 16.** *Seja  $p(x)$  uma proposição, com  $x \in X$ . Diz-se que*

$$p(x) \text{ para } \mu\text{-quase todo ponto } x \in X$$

*se, e somente se, o conjunto  $\{x \in X | p(x) \text{ é falsa}\}$  possui medida nula, com relação à medida  $\mu$  do espaço de medida  $(X, \Sigma, \mu)$ .*

A definição acima se faz para entender questões como a probabilidade de se sortear um ponto em um conjunto contínuo ser nula. Dizemos que de modo quase certo, nas ideias da definição acima e sob uma medida pré-definida, a probabilidade é zero.

Finalmente, estamos aptos a enunciar o Teorema Ergódico.

**Teorema 1.** *Seja  $(X, \Sigma, \mu, T)$  um sistema dinâmico que preserva medida e  $f$  uma função  $\mu$ -integrável, no sentido de Lebesgue. Então, as seguintes médias*

$$\text{Média temporal: } \hat{f}(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n f(T^k x),$$

$$\text{Média espacial: } \bar{f}(x) = \frac{1}{\mu(X)} \int f \, d\mu$$

*são iguais em  $\mu$ -quase todo ponto  $x \in X$ .*

Nota:  $T^k x$  denota  $k$  iterações da transformação  $T: X \rightarrow X$  a começar pelo elemento  $x$ .

**Aplicação ao Modelo de Ising:** A aplicação das definições acima e do resultado do Teorema 1 ao Modelo de Ising justificarão a sub-subseção 9.3.2 a seguir. Como dito anteriormente, a esta parte também serve para tornar mais claras e naturais as ideias anteriores.

Considere o Modelo de Ising Clássico. Tomemos como  $X$  o conjunto das possíveis configurações da rede de Ising, em outras palavras,  $X$  será o espaço de fase. Uma  $\sigma$ -álgebra trivial é o próprio conjunto das partes  $\mathcal{P}(X)$ . Definimos a medida de probabilidade  $\mu_\beta$  em cada ponto de  $X$  com sendo

$$\mu_\beta(x) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H(x)},$$

com  $x \in X$ ; um ponto do espaço de fase. A medida adotada é a distribuição de Boltzmann, como deveria ser. Podemos adotar  $\mu_\beta(A)$ , com  $A = \{x_1, \dots, x_n\}$  como  $\sum_i \mu_\beta(x_i)$  para que efetivamente tenha-se uma medida.



Logo, o espaço de fase juntamente com a  $\sigma$ -álgebra  $\Sigma = \mathcal{P}(X)$  e com medida  $\mu_\beta$  constituem o espaço de medida (de probabilidade)  $(X, \Sigma, \mu_\beta)$ .

Seja  $T$  uma transformação qualquer que transforma pontos do espaço de fase, isto é

$$T: X \rightarrow X$$

$$x_i \mapsto Tx_i = x_j,$$

com  $x_q = \{\sigma_q\}$  e  $q = i, j$ . Um exemplo simples é a transformação que causa um *flip* em um spin de uma posição específica, quando aplicada a uma configuração do sistema. Este será o caso considerado para a simulação a ser descrita em 9.3.2.

Como a medida  $\mu$  para pontos individuais depende apenas do ponto, claramente a quadrupla  $(X, \Sigma, \mu_\beta, T)$  é um sistema dinâmico que preserva medida. Se considerarmos  $T$  como sendo uma transformação que não permite um ponto ser transformado em si próprio quando aplicada, teremos que  $T$  é ergódica. Com isso, desejarmos calcular um observável macroscópico, amostrando o espaço de fase, podemos simplesmente amostrar o mesmo observável no tempo, isto é, em diversas configurações que forem evoluindo por meio da transformação  $T$ , resultado do Teorema Ergódico (Teorema 1). Este será o chamado *método de Monte Carlo*, desenvolvido na sub-subseção 9.3.2.

**Cadeias de Markov:** Existe ainda um último resultado importante a ser enunciado para o Modelo de Ising que segue da definição 17 a seguir.

**Definição 17.** *Seja  $\{\Gamma\} = \{\Gamma_1, \Gamma_2, \dots\}$  uma sequência de variáveis aleatórias e seja  $p_{ij}$  a probabilidade de a variável aleatória  $\Gamma$  ser transformada de  $\Gamma_i$  para  $\Gamma_j$ , para o sistema dinâmico em questão. Se  $p_{ij}$  depender apenas dos estados inicial  $\Gamma_i$  e final  $\Gamma_j$ , então, a sequência  $\{\Gamma_k\}$  chama-se uma **cadeia de Markov**.*

Chama-se  $p_{ij}$  de probabilidade de transição do estado  $\Gamma_i$  para  $\Gamma_j$ .

Sendo  $\{\Gamma_k\}$  uma *sequência de configurações* para a evolução temporal do Modelo de Ising, como cada configuração depende apenas da energia da mesma (para um dado  $\beta$ ), é fácil ver que a evolução temporal descreve uma cadeia markoviana.

A ergodicidade do Modelo de Ising também poderia ser visto do Teorema 2:

**Teorema 2.** *Seja  $\{\Gamma_k\}$  uma cadeia de Markov e seja*

$$p_{ij}^{(n)} = \mu_\beta(\Gamma_{m+n} = \{\sigma_j\} | \Gamma_m = \{\sigma_i\})$$

*a probabilidade de transição da configuração  $i$  para a configuração  $j$ , após  $n$  passos (aplicações de uma transformação  $T$ ), a partir da configuração  $\{\sigma_i\}$ . Se  $p_{ij}^{(n)} > 0$ , para todo  $i, j$  e para todo  $n$ , então a transformação em questão é ergódica.*

Por fim, de ser o Modelo de Ising uma cadeia markoviana ergódica, vale o Teorema 3:

**Teorema 3.** *Para uma cadeia markoviana ergódica, o limite*

$$\pi_j = \lim_{n \rightarrow \infty} p_{ij}^{(n)}$$

*existe e  $\pi_j$  são as únicas soluções não negativa de*

$$\begin{cases} \pi_j = \sum_{k=1}^N \pi_k p_{kj}, \\ \sum_{j=1}^N \pi_j = 1. \end{cases}$$

Note que no limite que define  $\pi_j$ , o índice  $i$  é irrelevante. O significado deste teorema é que uma configuração  $\{\sigma_j\}$  da rede tem probabilidade  $\pi_j$  de ocorrer independentemente da configuração inicial, após sucessivas aplicações de uma transformação  $T$  em questão, quando o número de aplicações de  $T$  cresce suficientemente.

O Teorema 3 nos garante a convergência do *Algoritmo de Metropolis*, apresentado em 9.3.2.

### 9.3.2 O Método de Monte Carlo e o Algoritmo de Metropolis

Com os resultados da sub-subseção 9.3.1, esta sub-subseção se dedica propriamente ao Método de Monte Carlo e ao Algoritmo de Metropolis, desenvolvendo a implementação para a simulação do Modelo de Ising Clássico de forma teórica. Ao final, apresentaremos o endereço de um repositório no *github* do discente deste projeto onde podem ser encontrados os códigos da implementação apresentada nesta sub-subseção. Outros resultados como simulações visuais e os gráficos obtidos podem ser encontrados em tal repositório, porém, citaremos os mesmos apenas na sub-subseção 9.3.5. Adotou-se a estratégia do uso de um repositório online porque os códigos utilizados para a simulação se dividiam em seis arquivos. Além disso, há uma simulação visual para a dinâmica do modelo que pôde ser implementada em um arquivo *html*, permitindo a hospedagem em uma *url*, facilitando o acesso para o leitor.

**Monte Carlo:** Começemos esta sub-subseção por apresentar o Método de Monte Carlo.

Monte Carlo é um método de simulação de problemas envolvendo aleatoriedade. O método utilizado atualmente foi cunhado na década de 1940 para o estudo de processos nucleares. Na época o ENIAC acabara de ser construído, sendo então utilizado para trabalhar com calculos de Monte Carlo. O nome do método se deve ao Cassino de Monte Carlo, em Monaco.

Em sistemas físicos, muitos processos são aleatórios, ou pelo menos são aparentemente aleatórios, como o movimento Browniano. O método desempenha um papel particularmente importante na Mecânica Estatística, devido ao problema fundamental da Mecânica Estatística ser o cálculo de médias de certas quantidades, em especial, no equilíbrio térmico<sup>11</sup> [32].

A simulação de Monte Carlo se dá da seguinte forma: Escolhem-se configurações aleatórias da rede, de acordo com a distribuição de probabilidade de cada configuração para que os estados de que mais contribuem estejam presentes em mais vezes. Então calcula-se a chamada média temporal definida no teorema 1 [32]. Tal teorema nos garante a possibilidade de amostrar o espaço de fase amostrando-se sobre diversas configurações escolhidas da forma descrita.

**Algoritmo de Metropolis:** O método acima nos põe à frente de um outro problema: como escolher configurações aleatórias, baseadas na distribuição de probabilidade do sistema. Para as *cadeias markovianas* isso pode ser feito com base teorema 3. O teorema afirma que a probabilidade de um estado  $j$  após  $N$  passos, para  $N$  suficientemente grande, é independente do estado inicial e dada por

$$\pi_j = \sum_{k=1}^N \pi_k p_{kj}, \quad (458)$$

onde  $\pi_j$  é a probabilidade do estado  $j$ , começando de um estado  $i$ , após um número suficientemente grande de aplicações de uma escolhida transformação  $T$  para o sistema em questão e  $p_{kj}$  é a probabilidade de transição do estado  $k$  para o estado  $j$  [32]. Como, após um número grande de passos, a amostragem do sistema deve tender para a distribuição de Boltzmann, temos que  $\pi_j = \mu_\beta(\{\sigma_j\})$ , isto é, a probabilidade da configuração  $j$ . Devemos então determinar as probabilidades  $p_{kj}$  de tal forma a satisfazer (458).

Até o momento não se mencionou nada acerca da função de partição do sistema, necessária para calcular as probabilidades  $\mu_\beta(\{\sigma\})$ . Para as cadeias de Markov, pode-se tomar as probabilidades de transição independente da função de partição, resolvendo tal problema [32]. Para ver isso, note que a equação (458), quando a ser resolvida para os  $p_{kj}$  trata-se de um sistema de equações lineares, de tal forma que a multiplicação de todas as equações do sistema pela função de partição, eliminando as mesmas dos coeficientes  $\pi_k$  da equação, não altera o resultados dos  $p_{kj}$ .

Veja também que, se existirem  $n$  configurações do sistema, para cada configuração fixa, existem  $n - 1$  configurações para as quais o sistema pode evoluir, de modo que há  $n(n - 1)$  transições

---

<sup>11</sup>Fora do equilíbrio, comumente, usa-se o nome *cinética física*.

posíveis entre estados. Claramente, há mais incógnitas  $p_{kj}$  do que coeficientes  $\pi_k$ , de modo que o sistema não tem solução única. Em tal caso, tem-se uma certa liberdade na busca pela solução do problema. Reescrevendo explicitamente a equação (458), podemos fazer uso de tal propriedade para encontrar a solução. Multiplicando pela função de partição de ambos os lados, temos

$$e^{-\beta H(\{\sigma_j\})} = \sum_{k=1}^N e^{\beta H(\{\sigma_k\})} p_{kj}.$$

Uma forma de se ter, após a soma, o resultado do lado direito é dividir cada elemento  $e^{-\beta H(\{\sigma_k\})}$  da soma por si e multiplicar por  $e^{-\beta H(\{\sigma_j\})}$ . Além disso, devemos dividir o resultado por  $N$ . Explicitamente,

$$p_{kj} = \frac{1}{N} \frac{e^{-\beta H(\{\sigma_j\})}}{e^{-\beta H(\{\sigma_k\})}} \Rightarrow \sum_{k=1}^N e^{-\beta H(\{\sigma_k\})} \frac{1}{N} e^{-\beta [H(\{\sigma_j\}) - H(\{\sigma_k\})]} = e^{-\beta H(\{\sigma_j\})}.$$

Simplifiquemos a notação escrevendo a diferença de energia  $H(\{\sigma_j\}) - H(\{\sigma_k\})$  como  $\delta H_{kj}$ . Assim,

$$p_{kj} = \frac{1}{N} e^{-\beta \delta H_{kj}}. \quad (459)$$

Há, contudo, um pequeno problema com a equação acima. A depender da diferença de energia  $\delta H_{kj}$ , a probabilidade acima pode ser maior do que 1. Para isso, temos uma correção baseada na equação 9. A dinâmica do sistema se dá por meio as ideias de minimização da energia e maximização da entropia. A energia livre de Helmholtz  $F = U - TS$  pode ser minimizada por meio da minimização da energia interna  $U$ . Entretanto, para uma temperatura  $T$ , podem ocorrer flutuações devidas a entropia  $S$ . A dinâmica de tais sistemas leva a distribuição de Boltzmann, ou seja, os  $p_{kj}$  acima devem seguir a mesma ideia. Sendo assim, se a diferença de energia  $\delta H_{kj}$  for negativa, isto é, *se a energia do novo estado for menor do que a do estado antigo*, adotamos  $p_{kj} = 1/N$ , caso seja negativa, utilizamos a probabilidade descrita em 459 [32].

A dinâmica feita por meio das probabilidades  $p_{kj}$  pode ser executada computacionalmente, escolhendo configurações aleatórias da rede. Entretanto, tal procedimento é ainda muito custoso. Para contornar este problema, fazemos uso do Algoritmo de Metropolis. Para o Modelo de Ising, isso se dá sorteando-se uma posição na rede e verificando-se se há aceitação de um *flip* em tal posição ou não. A aceitação segue a ideia dos estados  $p_{kj}$ , com uma diferença. A probabilidade de aceitação  $\mathcal{A}$  do novo estado (*flip* em uma dada posição) é

$$\mathcal{A}(\{\sigma_i\} \rightarrow \{\sigma_j\}) = \begin{cases} 1, & \text{se } \delta H_{ij} \leq 0, \\ e^{-\beta \delta H_{ij}}, & \text{se } \delta H_{ij} > 0, \end{cases} \quad (460)$$

onde  $\delta H_{ij}$  é a diferença de energia entre as configurações  $\{\sigma_j\}$  e  $\{\sigma_i\}$  e a transição é feita de  $\{\sigma_i\}$  para  $\{\sigma_j\}$  [32]. Com  $\mathcal{A}$  aplicada a cada passo, a probabilidade entre os estados inicial e final, após todos os  $N$  passos, é dada por  $p_{ij}$ , uma vez que para uma cadeia de Markov, as probabilidades dependem apenas dos estados imediatamente antes e após a transformação do sistema.

Os resultados acima nos fornecem os passos para a simulação da dinâmica da rede e o cálculo de observáveis. Em resumo, temos o seguinte:

1. Escolhe-se uma configuração inicial qualquer para a rede, em equilíbrio térmico.
2. Sorteia-se uma posição aleatória na rede e verifica-se a aceitação ou rejeição de um *flip* nesta posição, pesada pela probabilidade  $\mathcal{A}$  (equação (460)).
3. Repete-se o passo (2)  $N$  vezes, a depender do tamanho da rede.
4. Terminado o passo (3), calculam-se os observáveis desejados.

5. Repetem-se os passos de (2) a (4)  $N'$  vezes, a depender da rede.

Note que os procedimentos feitos acima devem ser feitos em equilíbrio a uma temperatura  $T$ . Para isso, fazemos um processo chamado *termalização*, que consiste basicamente em aplicar o Algoritmo de Metropolis algumas vezes, sem calcular nenhum observável. Denomina-se este procedimento de *termalização*. Todas estas ideias estão sintetizadas no fluxograma 25, presente na última página do trabalho.

### 9.3.3 Dificuldades e Cuidados para a Simulação

**Inicialização da rede:** Há uma questão sobre a inicialização da rede. A rede pode ser inicializada aleatoriamente, porém, como pode ser visto por meio de uma simulação visual (veja 9.5 para o endereço contendo a simulação visual criada), a aplicação de um campo magnético externo à temperatura abaixo da temperatura crítica tem o mesmo resultado que a inicialização de todos os spins alinhados, visto que no estágio de *termalização*, os spins tendem para o estado onde estão totalmente alinhados e dificilmente ocorre de algum spin sofrer um *flip*. Em contrapartida, para a temperatura acima da de transição de fase, as flutuações devidas ao acoplamento com o banho são tais que os *flips* ocorrem com muita frequência para valores suficientemente baixos de campo magnético, de tal modo que no limite quando o campo vai a zero, a dinâmica se comporta de forma independente do campo. O comportamento na transição é semelhante.

Com base em tudo o que foi falado acima, a visualização da transição de fase pode ser feita simplesmente inicializando a rede no estado de mais baixa energia; a presença do campo durante a fase de *termalização* e o desligamento do campo é responsável apenas por uma escolha de uma direção preferencial dos spins, que é imposta inicializando a rede com os spins alinhados. Na sub-subseção 9.3.5, apresentaremos os resultados obtidos de forma a justificar empiricamente a argumentação aqui feita.

**Efeitos de rede finita:** Teoreticamente, transições de fase apenas ocorrem no limite termodinâmico. Para a simulação, isso requeriria simular um número infinito de spins, o que claramente não é possível. Devido ao tamanho da rede ser finita, ocorrem certas patologias, como por exemplo uma não-descontinuidade de certas quantidades durante a transição de fase.

Existe uma forma de se contornar o problema da rede finita, baseada em um método conhecido como *finite size scalling*. Para uma temperatura fixa, calculamos o valor de um dado observável variando-se o tamanho da rede. Estudamos o comportamento de tal observável em função do inverso do tamanho da rede. Pode-se fazer tal estudo de forma gráfica, fazendo um *plot* do observável  $\mathcal{O}$  versus  $1/N$ , onde  $N$  é o número de spins da rede. O limite termodinâmico corresponde ao corte no eixo horizontal do gráfico, quando teoricamente  $1/N = 0$ .

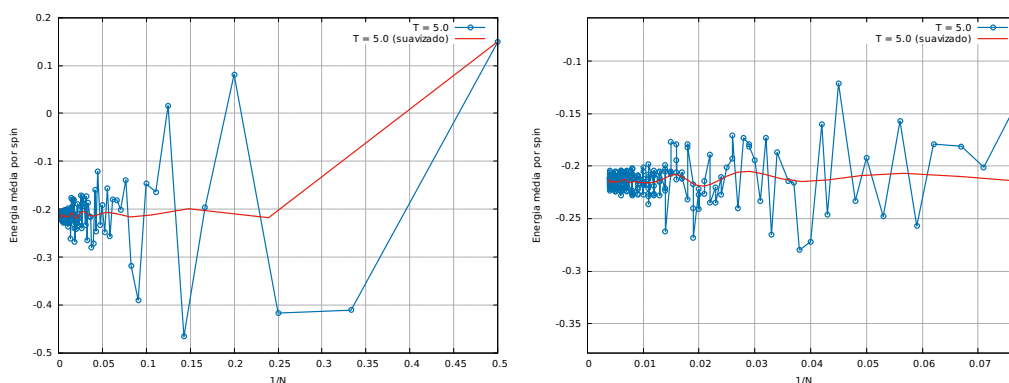


Figura 15: Energia média por spin em função do inverso do número  $N$  de spins em cada direção. Temperatura igual a 5.0

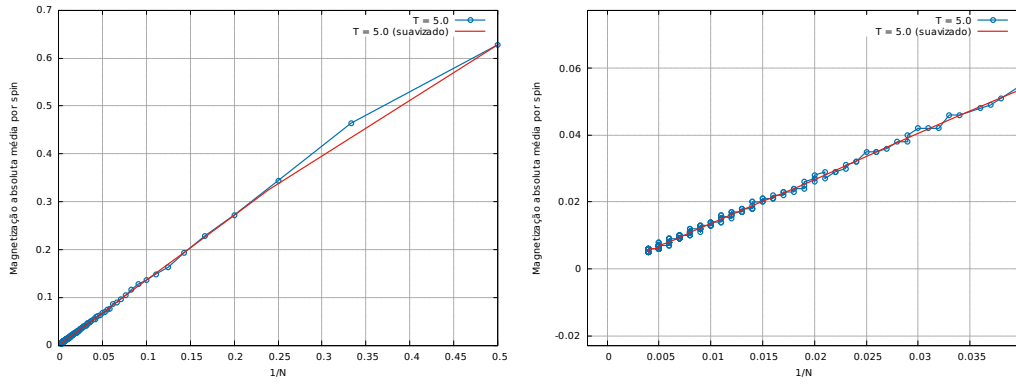


Figura 16: Magnetização absoluta média por spin em função do inverso do número  $N$  de spins em cada direção. Temperatura igual a 5.0

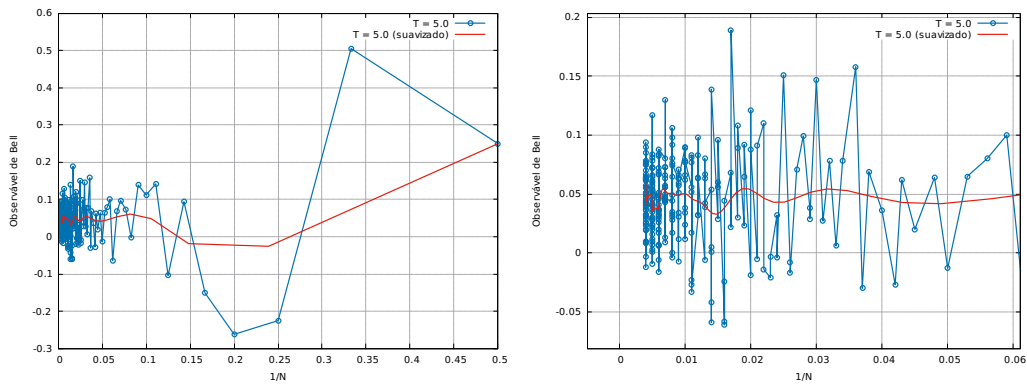


Figura 17: Observável para a desigualdade de Bell 441 em função do inverso do número  $N$  de spins em cada direção. Temperatura igual a 5.0

As figuras 15–17 mostram os observáveis *energia média por spin*, *magnetização absoluta média por spin* e *o observável da desigualdade de Bell a ser estudada* (vide 9.1) em função do inverso do número de spins em cada uma das dimensões da rede. Os cálculos foram feitos para uma temperatura igual a 5,00 ( $J = k_B = 1$ ). Do gráfico da magnetização, claramente vemos que o valor da mesma para o limite termodinâmico deve ser zero. Para a energia e para o observável da desigualdade de Bell, vemos uma redução da variância, conforme  $1/N$  se aproxima de 0.

Os resultados apresentados acima valem para qualquer temperatura acima da transição de fase. O que nos permite escolher um valor de  $N$  grande e interpretar os resultados com base nas observações feitas por meio destes gráficos. Um valor *grande*, significa quando o valor do observável esteja próximo do limite termodinâmico e a mudança de temperatura cause pequenas variações.

A seguir, tem-se os mesmos gráficos para uma temperatura igual a 1,00.

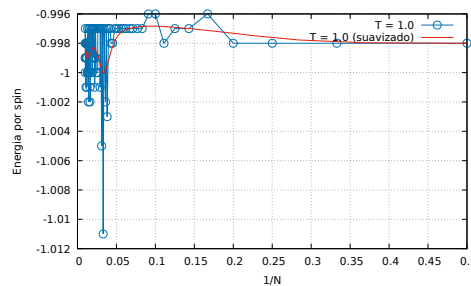


Figura 18: Energia média por spin em função do inverso do número  $N$  de spins em cada direção. Temperatura igual a 1.0

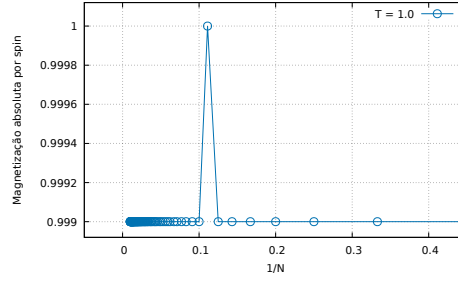


Figura 19: Energia média por spin em função do inverso do número  $N$  de spins em cada direção. Temperatura igual a 1.0

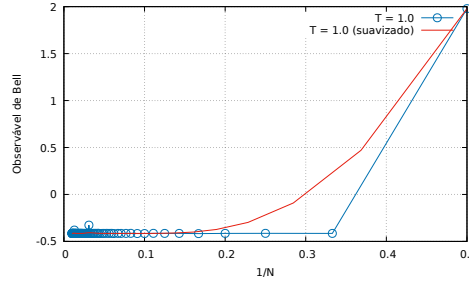


Figura 20: Energia média por spin em função do inverso do número  $N$  de spins em cada direção. Temperatura igual a 1.0

Das figuras 18–20, vê-se que o sistema tem um comportamento que parece convergir mais rapidamente quando comparado com um valor acima da temperatura de transição de fase. A magnetização, por exemplo, parece convergir para um valor próximo de 1. A variância da energia decai mais rapidamente e a convergência também se torna melhor para o observável da desigualdade de Bell.

Da mesma forma, estamos justificados a escolher um valor muito grande para  $N$ . Como os valores acima e abaixo da temperatura crítica são diferentes, isso nos diz que haverá uma descontinuidade. Os resultados são apresentados nas sub-subseções 9.3.5 e 9.3.6.

### 9.3.4 Limitações e Alternativas ao Método de Monte Carlo

O Método de Monte Carlo é um procedimento “*guloso*” de simulação. Juntamente com o Algoritmo de Metropolis, o número de passos é de ordem  $\mathcal{O}(N^2)$ , onde  $N$  é o tamanho da rede ( $N_x \times N_y$ ). Com isso, o tempo necessário para a execução do mesmo cresce muito rapidamente com o tamanho da rede.

O Modelo de Ising é um problema de complexidade NP-completo, de tal modo que a ordem dos passos não é algo que possa ser considerado ruim. Entretanto, atualmente existem alternativas melhores.

A fase de termalização, por exemplo, poderia ser feita muito mais rapidamente se uma *rede neural* fosse treinada de forma a receber uma configuração de entrada e uma temperatura e retornar direto uma configuração possível após o processo de termalização.

Ainda seguindo as ideias de *machine learning*, algoritmos genéticos poderiam ser implementados para buscar o estado fundamental da rede. Algoritmos baseados em comportamento de formigas ou herança genética poderiam ser aplicados para amostrar as configurações do sistema de forma menos custosa, economizando tempo e processamento.

### 9.3.5 Resultados e Discussões para a Rede Isotrópica

Os resultados para a rede isotrópica, juntamente com a discussão em 9.3.3 nos permite uma forma de comparação com a solução exata de forma a corroborar e verificar a teoria desenvolvida.

As figuras abaixo mostram a energia média por spin e magnetização absoluta média por spin, em função da temperatura, para variados valores do tamanho da rede  $N = N_x \times N_y$ .

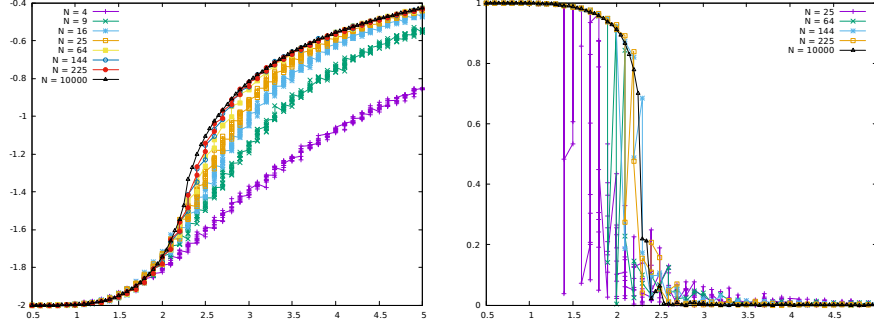


Figura 21: Energia média por spin (esquerda) e magnetização absoluta média por spin (direita) em função da temperatura, variando-se o número  $N$  de spins em cada direção da rede.

Para a energia média, a sequência de funções apresentadas parece convergir para uma função tal que a derivada tenha uma descontinuidade na região de temperatura entre 2 e 2,5. Nota-se, no entanto, que para valores grandes de  $N$ , a convergência se torna mais lenta. Em algumas quantidades, a convergência da sequência de funções ocorre logaritmicamente em função de  $\sqrt{N}$ , como é o caso da susceptibilidade magnética [12].

A magnetização, no entanto, nos permite observar uma descontinuidade de forma muito mais confiável. A figura abaixo apresenta uma comparação com a solução exata e a simulação para  $100 \times 100$  spins.

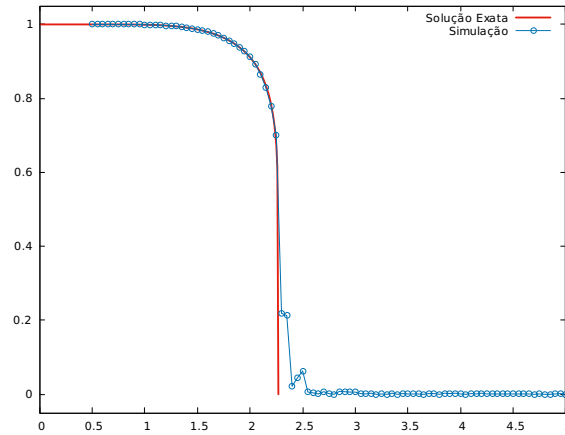


Figura 22: Magnetização absoluta média em função da temperatura. A curva em azul mostra a simulação para  $100 \times 100$  spins e a curva em vermelho a solução exata.

A figura 22 nos permite identificar a transição de fase, à temperatura teoricamente esperada. A concordância com o resultado teórico também nos permite escolher a cadeia de  $100 \times 100$  spins para as próximas simulações, sob as ideias de 9.3.3. Assim, podemos modificar a simulação para introduzir anisotropias na rede de forma a estudar os observáveis quânticos de interesse.

### 9.3.6 Resultados para a Rede Anisotrópica - Observáveis Quânticos

Com todos os resultados anteriormente apresentados, podemos finalmente calcular os observáveis quânticos de interesse e estudar o emaranhamento por meio do sistema clássico.

Começemos por analisar as funções de correlação

$$\Gamma_z(i, j) = \langle \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z \rangle - \langle \hat{\sigma}_i^z \rangle \langle \hat{\sigma}_j^z \rangle,$$

$$\Gamma_x(i, j) = \langle \hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_j^x \rangle - \langle \hat{\sigma}_i^x \rangle \langle \hat{\sigma}_j^x \rangle.$$

Em especial, analisaremos o comportamento dos observáveis acima em função da temperatura para  $j = i + 1$ , em vista dos observáveis que abordamos em 9.1.

A figura 23 apresenta o resultado da simulação para os observáveis acima.

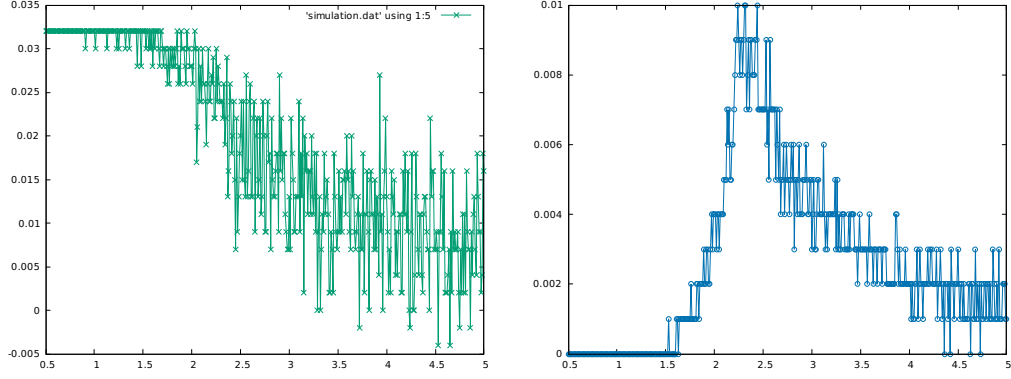


Figura 23: Correlações para os operadores  $\hat{\sigma}^z$  (imagem à esquerda) e  $\hat{\sigma}^x$  (imagem à direita) em função da temperatura.

Notamos que os dados para  $\Gamma_z$  parecem ter uma variância muito grande para a rede de  $100 \times 100$  spins simulada. Não obstante, podemos notar uma constância nos valores abaixo da temperatura 2, 0. O gráfico para o observável  $\Gamma_x$  mostra uma aparente divergência próximo à temperatura de transição de fase, a despeito dos efeitos de rede finita.

É interessante notar que o tipo de divergência aparente para  $\Gamma_z$  e  $\Gamma_x$  sugere que na soma em 441, a divergência do observável de Bell deva se dar na forma do operador  $\Gamma_x$ .

Abaixo, a figura 24, mostra o observável de Bell em 441. É possível notar que na região da transição de fase, o valor esperado parece divergir.

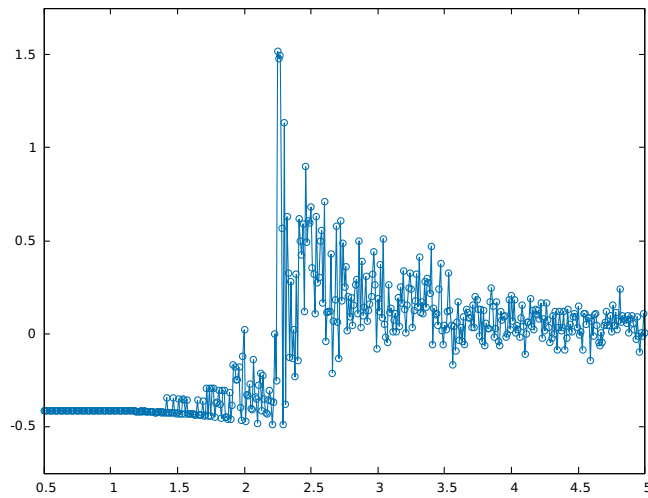


Figura 24: Observável para a desigualdade de Bell em função da temperatura.



## 9.4 Resultados da Simulação para a Rede Anisotrópica e o Emaranhamento do Sistema Quântico Equivalente

As descontinuidades mostradas nos três gráficos acima mostrados indicam que as funções de correlação, ou suas derivadas, sofrem uma descontinuidade durante a transição de fase. Comparando-se os observáveis  $\Gamma_z$  e  $\Gamma_x$ , vemos que abaixo da transição de fase, a correlação  $\Gamma_z$  é alta, indicando que os primeiros vizinhos tendem a estar alinhados enquanto que  $\Gamma_x$  vai a zero.  $\Gamma_x = 0$  implica que o valor esperado da ocorrência de um *flip* nas posições  $i$  e  $i + 1$  é separável, como esperava-se. O resultado para medidas de spins correlacionadas indicam o emaranhamento do sistema, como visto em 9.1.

Para o observável relativo à desigualdade de Bell, a divergência do mesmo como se apresenta sugere que a desigualdade de Bell é violada durante a transição de fase. Fora da transição, o sistema respeita a desigualdade.

O resultado para a desigualdade de Bell sugere que o emaranhamento do sistema ocorre mais fortemente durante a transição de fase. Dito de outra forma, durante a transição as medidas de emaranhamento, como, por exemplo, a entropia de Von Neumann, deve divergir ou atingir seu valor máximo<sup>12</sup>. Mais ainda, os resultados para as funções de correlação  $\Gamma_z$  e  $\Gamma_x$  indica que abaixo da temperatura de transição de fase, o sistema estaria emaranhando, na maior parte do tempo.

Com isso, podemos entender a transição de fase do Modelo de Ising Quântico como sendo uma transição do tipo localidade—não localidade, ou fortemente emaranhado—fracamente emaranhado; podemos pensar nas fases como sendo fases de maior ou menor probabilidade de se encontrar estados emaranhados durante uma medida.

## 9.5 Considerações Finais acerca das Simulações Realizadas

**Códigos para simulação:** Os códigos e resultados das simulações realizadas se encontram no seguinte repositório, no GitHub: <https://github.com/AlexEnrique/IC-alex>. Dentro deste repositório, encontram-se três *branches* de nomes `master`, `IsingJS-v1.2` e `relatorioFinal`.

A *branch* `master` contém os arquivos códigos escritos em linguagem C para os resultados das simulações apresentados nas seções 9.3.5 e 9.3.6.

Na *branch* `IsingJS-v1.2`, encontram-se códigos em JavaScript para uma simulação visual da rede clássica isotrópica. Os detalhes sobre a simulação estão descritos na página de entrada da *branch* (<https://github.com/AlexEnrique/IC-alex/tree/IsingJS-v1.2>). A leitura das instruções apresentadas na página da *branch* é necessária para o maior proveito da simulação. A simulação visual se encontra no seguinte endereço: <https://alexenrique.github.io/IC-alex/JS-2dIsing/>, também explicitado no repositório. Os códigos fontes podem ser baixados e manipulados.

A *branch* `relatorioFinal` contém este pdf.

**Código da simulação em C:** O código da simulação em C é dividido em 7 arquivos. O arquivo `functions.h` contém todas as funções utilizadas para os cálculos. O arquivo principal recebe o nome de `main.c` a leitura deste arquivo permite entender todo o algoritmo citado em 9.3.2 e o que cada função do programa faz. O arquivo `definitions.h` contém as constantes definidas utilizando o comando `#define`, utilizadas por outros arquivos. Existem dois arquivos de nomes `observables_structure.h` e `lattice_structure.h` que contêm as estruturas de dados dos observáveis calculados e da rede, juntamente com os parâmetros requeridos. Por fim, o arquivo `random_generator.h` é um gerador de números aleatórios. Para a geração dos números aleatórios, utilizou-se a biblioteca *GNU Scientific Library* (GSL), visto que o período do algoritmo deveria ser muito alto para uma boa simulação e a correlação entre os números gerados deveria ser muito

<sup>12</sup>A divergência ocorre para quantidades extensivas e o valor máximo deve ocorrer para quantidades que não dependam do tamanho da rede, como ocorre para a magnetização por spin.

baixa. Para evitar problemas devido a essas questões optou-se pelo algoritmo desenvolvido por M. Luscher em “*A portable high-quality random number generator for lattice field theory calculations*”, *Computer Physics Communications*, (1994).

Há uma pasta chamada **AlternativeRNG** que utiliza o gerador de números aleatórios da biblioteca **stdlib.h** do *C*, caso o leitor deseje rodar o código sem baixar a biblioteca GSL. Porém, não é recomendado o seu uso para redes grandes, com mais de  $10 \times 10$  spins.

Por fim, o arquivo de nome **FiniteSizeScaling.c** se assemelha ao programa **main.c**. Tal programa foi responsável por produzir os gráficos da sub-subseção 9.3.3.

**Vantagens da simulação do sistema estatístico clássico:** Para finalizar esta seção, apresentamos, brevemente, as vantagens do cálculo de observáveis por meio do sistema estatístico correspondente. Começemos por analisar o cálculo da energia.

A aplicação do operador Hamiltoniano sobre uma dada configuração para o sistema clássico é por si só um trabalho custoso, visto que tal procedimento se dá por meio de álgebra matricial. O uso da amplitude de transição entre estados para a simulação do sistema, apresentada em 460, requer o cálculo da variação de energia do sistema, procedimento que novamente utiliza-se de cálculos com matrizes. Claramente, apesar de um possível número maior de spins e configurações para a rede, a aplicação do Algoritmo de Metropolis é muito mais custosa para a simulação do modelo quântico.

Além dos problemas como o cálculo da energia, outros observáveis como a magnetização e os próprios observáveis estudados ao longo desta seção requerem cálculos muito custosos. Para um sistema quântico com  $N$  spins, as matrizes são de ordem  $2^N$ . Claramente, o número de operações é muito maior do que para o sistema clássico ao computar observáveis e as variações nos mesmos.

Com isso, o trabalho apresentado neste projeto, computacionalmente se apresenta como um ganho elevado em eficiência, reduzindo o tempo necessário para uma simulação. Isso nos permite trabalhar com redes de tamanho muito elevado, obtendo melhores resultados, em menor tempo.

## 10 Conclusão

Na Física, e em outras áreas da Ciência, o estudo de sistemas complexos, compostos por várias entidades as quais são permitidas interagirem entre si, levam a comportamentos coletivos emergentes específicos para cada sistema.

Por exemplo, podemos descrever a física de um elétron por meio da *eletrodinâmica quântica* (*QED*). Entretanto, para um sistema de muitos elétrons, e talvez outras partículas, o uso da QED se torna inviável. Padrões e comportamentos emergentes apenas no coletivo podem ser de grande importância de estudo e, no entanto, dificilmente perceptíveis, por meio de tal abordagem.

As transições de fase são fenômenos característicos de sistemas de muitos corpos [30]. Para o estudo de tais sistemas, novas abordagens e técnicas foram, e ainda são, desenvolvidas.

Classicamente, a área de estudo para sistemas compostos de um número elevado de elementos é a Mecânica Estatística. O uso da Mecânica Estatística em conjunto com a Mecânica Quântica possibilita aos físicos um meio para o estudo e entendimento da física de muitos corpos em escala microscópica. Tal união vem a ser chamada *Mecânica Estatística Quântica*. Apresentar algumas das ideias básicas acerca da tentativa de caminhar sobre os dois domínios foi um dos objetivos deste projeto.

O estudo e as técnicas abordadas neste trabalho permitiram a identificação do emaranhamento para o Modelo Quântico de Ising abaixo da temperatura de transição de fase, mostrando também que a transição correspondia a região de máximo emaranhamento. Isso foi possível graças ao estudo da função de correlação para os operadores  $\hat{\sigma}^z$  e  $\hat{\sigma}^x$  e de uma das desigualdades de Bell, simulando computacionalmente os observáveis clássicos correspondentes; procedimento possível graças ao mapeamento clássico-quântico.

O emaranhamento quântico é talvez um dos fenômenos mais curiosos da Física. De fato, até mesmo grandes nomes sentiam-se incomodados com tal resultado. A “estranheza” vai ainda mais longe; atualmente, existem hipóteses buscando ligar as chamadas *pontes de Einstein-Rosen* aos pares EPR [23, 24]. Desenvolver técnicas para o estudo do emaranhamento, como a aplicação do mapeamento clássico-quântico, corresponde a pequenos passos para um melhor entendimento a respeito da Física contemporânea e talvez do nosso universo.

## A Produto Direto, Matrizes de Pauli e Derivações

O Produto tensorial de matrizes ou produto direto, é uma forma de produto entre elementos de um espaço vetorial. Representado comumente pelo símbolo  $\otimes$ . Discutiremos apenas o caso particular do produto tensorial entre matrizes (produto de Kronecker).

A importância de tal produto se dá na mecânica quântica por ser o formalismo matemático utilizado para descrever sistemas compostos. Sendo  $\mathcal{H}_i$ ,  $i = 1, \dots, n$ , espaços de Hilbert descrevendo sistemas diferentes, o sistema composto por todos os  $n$  sistemas é dado pelo espaço  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_n$ . Sistemas de muitos corpos são descritos desta forma, portas quânticas e outros tópicos, justificando a importância do produto tensorial.

Seja  $A$  uma matriz  $m \times n$  e  $B$  uma matriz  $p \times q$ , o tensor direto é

$$\begin{aligned} \otimes : (M_{m \times n} \times M_{p \times q})(\mathbb{C}) &\longrightarrow M_{mp \times nq}(\mathbb{C}) \\ (A, B) &\longmapsto A \otimes B \end{aligned}$$

De forma mais simplória, talvez

$$A \otimes B = \begin{bmatrix} a_{11}B & \cdots & a_{1n}B \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}B & \cdots & a_{mn}B \end{bmatrix} \quad (461)$$

Observando que a matriz acima é uma matriz definida por blocos.

### Propriedades Básicas

Como o produto de Kronecker é um caso especial do produto tensorial, o mesmo goza de certas propriedades herdadas do anterior. Em resumo, temos:

$\otimes$  é *bilinear* e *associativa*

$$\begin{aligned} A \otimes (B + C) &= A \otimes B + A \otimes C, \\ (A + B) \otimes C &= A \otimes C + B \otimes C, \\ (kA) \otimes B &= A \otimes (kB) = k(A \otimes B), \\ (A \otimes B) \otimes C &= A \otimes (B \otimes C) \end{aligned}$$

para qualquer  $A, B, C \in M(\mathbb{C})^{13}$  e  $k \in \mathbb{C}$ .

Como se pode ver por (461), em geral

$$A \otimes B \neq B \otimes A; \quad A \otimes B = P(B \otimes A)Q \text{ para } P, Q \in M(\mathbb{C})$$

Se  $AB$  representa o produto convêncional das matrizes  $A$  e  $B$ , então

$$(A \otimes B)(C \otimes D) = (AC) \otimes (BD)$$

---

<sup>13</sup> $M(\mathbb{C})$  representa o espaço das matrizes sobre o corpo dos complexos, de forma geral, enquanto que  $M_{m \times n}(\mathbb{C})$  é o espaço das matrizes do tipo  $m \times n$ .

Se  $A$  e  $B$  são matrizes inversíveis, então

$$(A \otimes B)^{-1} = A^{-1} \otimes B^{-1}$$

Para o produto direto, vale também o seguinte:

$$(A \otimes B)^\dagger = A^\dagger \otimes B^\dagger$$

## Bases

Sejam  $U$  e  $V$  dois espaços vetoriais de bases  $\mathcal{B}_U = \{|u_1\rangle, \dots, |u_m\rangle\}$  e  $\mathcal{B}_V = \{|v_1\rangle, \dots, |v_n\rangle\}$ , então, para o espaço  $U \otimes V$  definido como

$$U \otimes V = \text{span}\{|u\rangle \otimes |v\rangle\}, \quad |u\rangle \in U, |v\rangle \in V$$

pode-se definir uma base  $\mathcal{B}_{U \otimes V}$  da seguinte forma:

$$\mathcal{B}_{U \otimes V} = \{|u, v\rangle = |u\rangle \otimes |v\rangle : |u\rangle \in \mathcal{B}_U, |v\rangle \in \mathcal{B}_V\}$$

As notações  $|uv\rangle = |u, v\rangle = |u\rangle |v\rangle$  são formas, às vezes convenientes, de se representar o produto  $|u\rangle \otimes |v\rangle$ .

Sejam  $A$  e  $B$  operadores lineares tais que

$$A : U \longrightarrow U; \quad B : V \longrightarrow V,$$

então

$$(A \otimes B) |u, v\rangle = (A |u\rangle) \otimes (B |v\rangle)$$

Com tudo o que fora considerado, pode-se escrever o seguinte

$$\langle u_i, v_i | A \otimes B | u_j, v_j \rangle = \langle u_i | A | u_j \rangle \langle v_i | B | v_j \rangle$$

Podemos generalizar a expressão acima da seguinte forma:

Sejam  $V_1, \dots, V_n$ , espaços vetoriais de bases  $\mathcal{B}_i = \{|v_i^j\rangle\}_j$ ,  $i = 1, \dots, n$  e  $A_i$ ,  $i = 1, \dots, n$  operadores lineares sobre  $V_i$ , respectivamente, então

$$\langle v_1^i, \dots, v_n^i | A_1 \otimes \dots \otimes A_n | v_1^j, \dots, v_n^j \rangle = \prod_k \langle v_k^i | A_k | v_k^j \rangle$$

Por meio da ideia de base, podemos provar e generalizar  $(A \otimes B)(C \otimes D) = (AC) \otimes (BD)$

$$\begin{aligned} \langle i, i' | (A \otimes B)(C \otimes D) | j, j' \rangle &= \sum_{k, k'} \langle i, i' | A \otimes B | k, k' \rangle \langle k, k' | C \otimes D | j, j' \rangle \\ &= \sum_{k, k'} \langle i | A | k \rangle \langle i' | B | k' \rangle \langle k | C | j \rangle \langle k' | D | j' \rangle \\ &= \sum_{k, k'} \langle i | A | k \rangle \langle k | C | j \rangle \langle i' | B | k' \rangle \langle k' | D | j' \rangle \\ &= \sum_{k, k'} \langle i | AC | j \rangle \langle i' | BD | j' \rangle = \langle i, i' | (AC) \otimes (BD) | j, j' \rangle \end{aligned}$$

Da mesma forma, podemos demonstrar

$$\left( \bigotimes_{i=1}^n A_i \right) \left( \bigotimes_{i=1}^n B_i \right) = \bigotimes_{i=1}^n (A_i B_i)$$

## Matrizes de Pauli

As matrizes

$$\begin{aligned}\sigma^0 = I &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} & \sigma^x = \sigma^1 &= \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \\ \sigma^y = \sigma^2 &= \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} & \sigma^z = \sigma^3 &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}\end{aligned}$$

são chamadas *matrizes de Pauli*. As matrizes acima são todas hermitianas, unitárias, diagonalizáveis e ortogonais, propriedades que serão de interesse futuro, em especial, a ortogonalidade pois  $\{\sigma^0, \sigma^1, \sigma^2, \sigma^3\}$  é então uma base ortogonal para  $M_{2 \times 2}(\mathbb{C})$ .

Para o caso não relativístico, o spin de uma partícula, pode ser representado por um estado  $|s\rangle$  da forma

$$|s\rangle = \alpha |\uparrow\rangle + \beta |\downarrow\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle$$

Para um sistema composto de  $n$  spins  $|s_i\rangle$ , o estado do sistema é representado por um vetor de estado quântico descrito do seguinte modo:

$$|s_1, \dots, s_n\rangle = |s_1\rangle \otimes \dots \otimes |s_n\rangle$$

A matriz  $\sigma^x$  agindo sobre um spin é responsável por um *flip* no mesmo, ou seja, um spin *up* torna-se *down* e *vice-versa*. Sendo assim, se quisermos "flippar" um dado spin  $|s\rangle$  basta fazermos a operação  $\sigma^x |s\rangle$ . Para o sistema composto descrito acima, se quisermos flippar o  $i$ -ésimo spin, basta aplicar a matriz  $\sigma^x$  ao spin  $|s_i\rangle$

$$|s_1, \dots, \sigma^x s_i, \dots, s_n\rangle = |s_1\rangle \otimes \dots \otimes \sigma^x |s_i\rangle \otimes \dots \otimes |s_n\rangle$$

Pelo descrito anteriormente, a operação acima é equivalente à aplicação do operador  $\sigma_i^x$ , definido como

$$\sigma_i^x = I \otimes \dots \otimes \underset{\substack{\uparrow \\ i\text{-ésimo fator}}}{\sigma^x} \otimes \dots \otimes I \quad (n \text{ fatores})$$

sobre o estado  $|s_1, \dots, s_n\rangle$ :

$$\sigma_i^x |s_1, \dots, s_n\rangle = |s_1, \dots, \sigma^x s_i, \dots, s_n\rangle$$

Para um operador agindo sobre vários estados  $|s_i\rangle$ ,  $i \in \Lambda$  onde  $\Lambda$  é um conjunto de índices, escrevemos  $\sigma_\Lambda^x$  onde as matrizes  $\sigma^x$  aparecem nas posições que pertencem a  $\Lambda$  e a identidade  $I$  nas demais; apenas uma generalização da ideia anterior.

Podemos definir os mesmos operadores para as demais matrizes de Pauli, excluindo-se a identidade por razões óbvias.

## Propriedades Básicas

$$\begin{aligned}(\sigma^i)^2 &= I, \quad i = 0, \dots, 3 \\ [\sigma^j, \sigma^k] &= 2i \sum_{l=1}^3 \epsilon_{jkl} \sigma^l; \quad \{\sigma^i, \sigma^j\} = 0 \\ \sigma^j \sigma^k &= \delta_{jk} I + i \sum_{l=1}^3 \epsilon_{jkl} \sigma^l \\ \sigma^i \sigma^{(i+1)3} &= i \sigma^{(i+2)3}, \quad i = 1, 2, 3\end{aligned}$$

Utilizamos a notação  $(a+b)_3$  para representar  $[(a+b) \bmod 3] + 1$ , o sucessor da soma módulo 3 entre  $a$  e  $b$ .

## $\alpha$ -Matrizes e Propriedades

Definimos as  $\sigma_\alpha^i$ ,  $i = 1, 2, 3$  matrizes como

$$\begin{aligned}\sigma_\alpha^x &= I \otimes \dots \otimes \underset{\substack{\uparrow \\ \alpha\text{-ésimo fator}}}{\sigma^x} \otimes \dots \otimes I \quad (n \text{ fatores}) \\ \sigma_\alpha^y &= I \otimes \dots \otimes \underset{\substack{\uparrow \\ \alpha\text{-ésimo fator}}}{\sigma^y} \otimes \dots \otimes I \quad (n \text{ fatores}) \\ \sigma_\alpha^z &= I \otimes \dots \otimes \underset{\substack{\uparrow \\ \alpha\text{-ésimo fator}}}{\sigma^z} \otimes \dots \otimes I \quad (n \text{ fatores})\end{aligned}$$

Pode-se verificar que

$$\begin{aligned}[\sigma_\alpha^x, \sigma_\beta^x] &= [\sigma_\alpha^y, \sigma_\beta^y] = [\sigma_\alpha^z, \sigma_\beta^z] = 0, \quad \alpha \neq \beta \\ [\sigma_\alpha^x, \sigma_\beta^y] &= [\sigma_\alpha^y, \sigma_\beta^x] = [\sigma_\alpha^y, \sigma_\beta^z] = 0, \quad \alpha \neq \beta\end{aligned}$$

Vale também

$$e^{\phi M} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\phi^n}{n!} M^n = I \sum_{n \text{ par}} \frac{\phi^n}{n!} + M \sum_{n \text{ ímpar}} \frac{\phi^n}{n!} = I \cosh(\phi) + M \sinh(\phi)$$

onde  $M$  é uma das  $\alpha$ -matrizes definidas acima ou as matrizes  $\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z$ .

Da fórmula acima, é fácil ver que, se  $\vec{v} = (v_1, v_2, v_3)$  é um vetor de 3 coordenadas e  $\vec{\sigma} = (\sigma^1, \sigma^2, \sigma^3)$ , então

$$\exp(i\theta \vec{v} \cdot \vec{\sigma}) = \cos(\theta) I + i \sin(\theta) \vec{v} \cdot \vec{\sigma}$$

Medidas do observável

$$\vec{v} \cdot \vec{\sigma} = v_1 \sigma^1 + v_2 \sigma^2 + v_3 \sigma^3$$

são comumente chamadas de *medidas de spin ao longo do eixo  $\vec{v}$* .

# Referências

- [1] A. L. Fetter and J. D. Walecka. *Quantum Theory of Many-Particle Systems*. Dover, 2003.
- [2] Alexander O. Gogolin, Alexander A. Nersesyan, and Alexei M. Tsvelik. *Bosonization and Strongly Correlated Systems*. Cambridge, 1998.
- [3] C. N. Yang. The spontaneous magnetization of a two-dimensional ising model. *Physical Review (Series I)*, 85, March 1952.
- [4] B. A. Cipra. An introduction to the ising model. *The American Mathematical Monthly*, 1987.
- [5] Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, and Franck Laloe. *Quantum Mechanics*. Hermann and John Wiley and Sons, 1977.
- [6] Claude Itzykson and Jean-Michel Drouffe. *Statistical Field Theory*, volume 1.
- [7] Daniel V. Schroeder. *An introduction to thermal physics*. Addison Wesley, us ed edition, 1999.
- [8] P. A. M. Dirac. *Principles of Quantum Mechanics, The*. International series of monographs on physics. Oxford University Press, 4th revised edition, 1978.
- [9] E. Ising. Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik*, 31:253–258, 1925.
- [10] E. Fradkin and L. Susskind. Order and disorder in gauge systems and magnets. *Phys. Rev. D*, 17:2637–2658, May 1978.
- [11] Gastão A. Braga and Francisco Fontenele Araujo Jr. O limite termodinâmico e independência das condições de contorno para o modelo de ising d-dimensional. 1999.
- [12] N. Giordano. *Computational physics*. 1997.
- [13] H. Goldstein, C. P. Poole, and J. L. Safko. *Classical mechanics*. Addison Wesley, 3 edition, 2001.
- [14] H. Grabert, P. Hänggi, and P. Talkner. Is quantum mechanics equivalent to a classical stochastic process? *Phs. Rev. A*, 1979.
- [15] H. Groenewold. On the principles of elementary quantum mechanics. *Physica*, 12, 1946.
- [16] H. A. Kramers, and G. H. Wannier. Statistics of the two-dimensional ferromagnet. part i. 60, 1941.
- [17] Q. L. He, L. Pan, A. L. Stern, E. Burks, X. Che, G. Yin, J. Wang, B. Lian, Q. Zhou, E. S. Choi, K. Murata, X. Kou, T. Nie, Q. Shao, Y. Fan, Shou-Cheng Zhang, K. Liu, J. Xia, and K. L. Wang. Chiral majorana edge state in a quantum anomalous hall insulator-superconductor structure. June 2016.
- [18] T. H. Hsieh. From d-dimensional quantum to  $d + 1$ -dimensional classical systems.
- [19] Huang and Kerson. *Statistical Mechanics*. John Wiley and Sons, 1987.
- [20] John W. Negele and Henri Orland. *Quantum many-particle systems*. Advanced Book Classics. Perseus Books, 1998.
- [21] B. Kaufman. Crystal statistics ii. partition function evaluated by spinor algebra. *Physical Review*, 76, October 1949.

- [22] J. B. Kogut. An introduction to lattice gauge theory and spin systems. *Rev. Mod. Phys.*, 51:659–713, Oct 1979.
- [23] Leonard Susskind. Computational complexity and black hole horizons. February 2014.
- [24] Leonard Susskind. Dear qubitizers, gr=qm. August 2017.
- [25] B. M. McCoy and J.-M. Maillard. The importance of the ising model. *Progress of Theoretical Physics*, 127(5):791, 2012.
- [26] Michael A. Nielsen and Isaac L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge, 2000.
- [27] Michael A. Nielsen and Isaac L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge, 2000.
- [28] Ming-wen Xiao. Theory of transformation for the diagonalization of quadratic hamiltonians. August 2009.
- [29] P. Molignini. Analyzing the two dimensional ising model with conformal field theory. 2013.
- [30] V. H. H. Moshe Gitterman. *Phase transitions: a brief account with modern applications*. World Scientific Publishing Company, 2004.
- [31] N. N. Bogoljubov, V. V. Tolmachov, and D. V. Širkov. A new method in the theory of superconductivity. *Fortschritte der Physik*, 6, 1958.
- [32] M. Newman. *Computational Physics*. 2012.
- [33] M. A. Nielsen. The fermionic canonical commutation relations and the jordan-wigner transform. July 2005.
- [34] L. Onsager. Crystal statistics i a two-dimensional model with and order-disorder transition. *Physical Review*, 65, February 1944.
- [35] H. J. Pain. *The Physics of Vibrations and Waves*. Wiley, 6 edition, 2005.
- [36] R. Peierls and M. Born. On ising’s model of ferromagnetism. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 32, 10 1936.
- [37] R. J. Baxter. *Exactly solved models in statistical mechanics*. London: Academic Press, 1982.
- [38] R. P. Feynman and A. R. Hibbs. *Quantum Mechanics and Path Integrals*. McGraw-Hill, 1965.
- [39] R. Shankar. *Principles of quantum mechanics*. Plenum, 1994.
- [40] S. Sachdev. *Quantum Phase Transitions*. Cambridge University Press, 2007.
- [41] J. Sirker. Entanglement measures and the quantum-to-classical mapping. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2012(12):P12012, 2012.
- [42] Somendra M. Bhattacharjee and Avinash Khare. Fifty years of the exact solution of the two-dimensional ising model by onsager. February 2008.
- [43] T. Tao. *An introduction to measure theory*. draft edition, 2011.



- [44] A. Uhlmann, B. Crell, A. Buchleitner, C. Viviescas, and M. Tiersch. *Entanglement and Decoherence: Foundations and Modern Trends*. Lecture Notes in Physics 768. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1 edition, 2009.
- [45] P. J. E. Wigner. Über das paulische Äquivalenzverbot. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, 47, 1928.
- [46] M. M. C. Wong. The mapping from 2d ising model to quantum spin chain. 2005.

Figura 25: Fluxograma para os algoritmo de Monte Carlo e Metropolis. O procedimento descrito é realizado para uma temperatura fixa, não especificada.

