UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS

Angelo Antonio Vernaschi Zampronio

Transições de fase quânticas em sistemas integráveis unidimensionais

São Carlos
2024

Angelo Antonio Vernaschi Zampronio

Transições de fase quânticas em sistemas integráveis unidimensionais

Trabalho de conclusão de curso apresentado ao Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo para obtenção do título de Bacharel em Física Computacional.

Orientador: Prof. Dr. José Abel Hoyos Neto - IFSC/USP.

São Carlos
2024

1 Resumo

Este trabalho apresenta um estudo sobre a transição de fase quântica, investigando a competição entre interações da matéria e flutuações quânticas por meio do modelo de Ising em campo transverso. A análise foi conduzida em duas etapas principais: a diagonalização do Hamiltoniano e o cálculo dos observáveis termodinâmicos, como calor específico, funções de correlação e magnetização. A diagonalização foi realizada aplicando transformações de Jordan-Wigner e de Fourier, resultando em um Hamiltoniano de férmions sem spin, posteriormente simplificado pela transformação de Bogoliubov.

Os resultados evidenciam as não-analiticidades nos observáveis, indicando a ocorrência de transições de fase e permitindo a determinação de expoentes críticos que corroboram a classe de universalidade do modelo de Ising em duas dimensões. Os valores obtidos para os expoentes críticos estão em conformidade com a literatura, destacando a relevância do modelo para descrever fenômenos críticos.

2 Introdução

O objetivo deste trabalho é estudar o fenômeno de transição de fase quântica, em que ocorre uma competição entre as interações da matéria e a flutuação quântica. Esta última pode ser tão intensa que destrói as estruturas organizadas. Atualmente, uma grande parte do campo da física de matéria condensada se dedica ao estudo desse fenômeno tanto teórica quanto experimentalmente.

Para explorar e discutir esse fenômeno, será analisado o Hamiltoniano do modelo de Ising em campo transverso, com foco na determinação de observáveis como calor específico, funções de correlação e magnetização no limite termodinâmico. O objetivo central é examinar o comportamento desses observáveis nas proximidades da transição de fase, que será determinada através da diagonalização do Hamiltoniano com o uso das transformações de Jordan-Wigner, Fourier e Bogoliubov, seguindo, em grande parte, o estudo apresentado em [3]. Durante a análise, serão determinados os expoentes críticos que regem a divergência dos observáveis na transição de fase, com base nos resultados apresentados por [2] e [1].

3 Metodologia

A análise da cadeia de Ising em campo transverso será conduzida em duas etapas principais: a diagonalização do Hamiltoniano que caracteriza a dinâmica do sistema e o cálculo subsequente dos observáveis.

Para diagonalizar o Hamiltoniano, inicialmente será aplicada a transformação de Jordan-Wigner, que permite mapear operadores de spin 1/2 em operadores de férmions sem spin. Em seguida, o sistema será simplificado por meio de uma transformação de Fourier no espaço de momento. Essas transformações resultam em um Hamiltoniano de férmions livres cuja conservação de número não é garantida. Por fim, Hamiltonianos desse tipo podem ser diagonalizados por meio da transformação de Bogoliubov.

Na etapa de cálculo dos observáveis, o sistema será levado ao limite termodinâmico para estudar o comportamento do gap, calor específico, função de correlação e magnetização próximos à transição de fase, determinando os expoentes críticos que regem a divergência desses parâmetros. Na análise da função de correlação, serão empregados o teorema de Wick, o teorema de Szegö e resultados apresentados por [1]. Por fim, na análise da magnetização, serão utilizados os resultados do trabalho de [2] para guiar a investigação.

4 Resultados

4.1 Diagonalização

Considere o Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -J\sum_i \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x - h\sum_i \sigma_i^z \tag{1}$$

Aqui, σ_i são as matrizes de Pauli, representando operadores de spin-1/2 em cada sítio i da cadeia. O parâmetro $J > 0$ é a constante de troca e quantifica a interação ferromagnética entre spins vizinhos. O segundo termo de (1) representa a flutuação quântica, com $h > 0$ sendo o campo transverso. Quando $J \ll h$, o estado fundamental se torna uma coleção de spins independentes que flutuam entre os estados "up"e "down", caracterizando o estado paramagnético. Por outro lado, quando $h \ll J$, as interações entre os spins prevalecem, e o estado fundamental se torna um estado ferromagnético duplamente degenerado no limite termodinâmico ($N \to \infty$).

Escrevendo as matrizes de Pauli em termos de operadores de abaixamento e levantamento, temos

$$\sigma_i^x = a_i^\dagger + a_i; \quad \sigma_i^z = 2a_i^\dagger a_i - 1$$

$$\mathcal{H} = -J\sum_i [a_i^\dagger a_i + a_i^\dagger a_{i+1} + h.c] - Jg\sum_i (2a_i^\dagger a_i - 1) \to$$

$$\frac{\mathcal{H}}{J} = -\sum_i [a_i^\dagger a_i + a_i^\dagger a_{i+1} + h.c] - g \sum_i (2a_i^\dagger a_i - 1) \rightarrow$$

$$\mathcal{H} = -\sum_i [a_i^\dagger a_i + a_i^\dagger a_{i+1} + h.c] - g \sum_i (2a_i^\dagger a_i - 1) \tag{2}$$

onde defini $g \equiv h/J$, um acoplamento adimensional que será usado para ajustar o Hamiltoniano através da transição de fase.

Nos cálculos seguintes, desconsiderarei as condições de contorno do sistema. Isso se justifica pelo fato de que todos os resultados serão obtidos no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$), no qual as condições de contorno, assumidas como periódicas, não afetam os resultados.

4.1.1 Transformada de Wigner-Jordan

Um problema com os operadores a_i é que eles não são operadores de férmions. Essa representação precisa ser modificada se houver mais de um spin, pois operadores de spin independentes comutam, mas férmions independentes anticomutam. Jordan e Wigner descobriram uma maneira de resolver essa dificuldade em uma dimensão, anexando um fator de fase chamado de "string"aos férmions.

$$a_j^\dagger = c_j^\dagger e^{i\phi_j}; \quad \phi_j = \pi \sum_{l<j} n_l$$

Aqui, o operador $e^{i\phi_j}$ é conhecido como operador de corda (string).

A propriedade importante da corda é que ela anticomuta com qualquer operador fermiônico à esquerda de sua extremidade livre. Quando acoplada ao operador de spin-1/2, é possível demonstrar que os operadores c anticomutam e, portanto, são operadores de férmions sem spin.

Substituindo no Hamiltoniano, obtemos

$$\mathcal{H} = -\sum_i [c_i^\dagger c_i - c_i c_{i+1}^\dagger + h.c] - g \sum_i (2c_i^\dagger c_i - 1) \tag{3}$$

4.1.2 Transformada de Fourier

Agora, vamos aplicar uma transformada de Fourier nos férmions para o espaço de momento:

$$c_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikja} p_k, \quad p_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{-ikja} c_j \tag{4}$$

Aqui, p_k destrói uma excitação de spin no espaço de momento, com momento k. A posição do spin é descrita por ja, onde j representa o sítio, e definimos a como a distância entre os sítios. Posteriormente, para o cálculo da função de correlação, será necessário tomar o limite $a \to 0$; nos demais casos, basta considerar $a = 1$. Aplicando a transformada em (3),

$$\mathcal{H} = -\sum_q [e^{-iqa} p^\dagger_{-q} p^\dagger_q + e^{iqa} p^\dagger_q p_q + e^{-iqa} p^\dagger_q p_q - e^{iqa} p_{-q} p_q] - g \sum_q (2 p^\dagger_q p_q - 1) =$$

$$= -\sum_q [e^{-iqa} p^\dagger_{-q} p^\dagger_q - e^{iqa} p_{-q} p_q + (e^{iqa} + e^{-iqa} + 2g) p^\dagger_q p_q - g]$$

$$\mathcal{H} = -\sum_q [e^{-iqa} p^\dagger_{-q} p^\dagger_q - e^{iqa} p_{-q} p_q + 2(cos(qa) + g) p^\dagger_q p_q] + const \tag{5}$$

$$const = -\sum_q g$$

Agora, vamos simplificar o hamiltoniano tomando $q > 0$ na soma:

$$\mathcal{H} = -\sum_{q>0} [(e^{-iqa} p^\dagger_{-q} p^\dagger_q + e^{iqa} p^\dagger_q p^\dagger_{-q}) - (e^{iqa} p_{-q} p_q + e^{-iqa} p_q p_{-q}) +$$

$$+2(\cos(qa) + g)(p^\dagger_q p_q + p^\dagger_{-q} p_{-q})] + cost =$$

$$= -\sum_{q>0} [(e^{iqa} - e^{-iqa}) p^\dagger_q p^\dagger_{-q} - (e^{iqa} - e^{-iqa}) p_{-q} p_q + 2(cos(qa) + g)(p^\dagger_q p_q + 1 - p_{-q} p^\dagger_{-q})] + const =$$

$$= -\sum_{q>0} [2i \sin(qa) p^\dagger_q p^\dagger_{-q} - 2i \sin(qa) p_{-q} p_q +$$

$$+2(\cos(qa) + g) p^\dagger_q p_q - 2(\cos(qa) + g) p_{-q} p^\dagger_{-q} + 2(\cos(qa) + g)] + const$$

$$\mathcal{H} = -\sum_{q>0} [2i \sin(qa)(p^\dagger_q p^\dagger_{-q} - p_{-q} p_q) + 2(\cos(qa) + g)(p^\dagger_q p_q - p_{-q} p^\dagger_{-q})] + const \tag{6}$$

$$const = \sum_q \cos(qa)$$

Perceba que o hamiltoniano possui termos com 2 operadores de criação e aniquilação, ou seja, não há conservação no número de partículas. Hamiltonianos deste tipo podem ser diagonalizados por uma transformada conhecida como transformada de Bogoliubov, que mistura os operadores de criação e aniquilação, eliminando tais pares e conservando as relações de comutação.

4.1.3 Transformada de Bogoliubov

Primeiro, irei colocar (6) em forma matricial

$$\mathcal{H} = \sum_{q>0} 2 \begin{pmatrix} p_{-q} & p_q^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (\cos(qa)+g) & i\sin(qa) \\ -i\sin(qa) & -(\cos(qa)+g) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_{-q}^\dagger \\ p_q \end{pmatrix} \tag{7}$$

A transformada consiste na seguinte mudança de variáveis

$$\begin{pmatrix} \eta_q \\ \eta_{-q}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_q & iv_q \\ iv_q & u_q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_q \\ p_{-q}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_q p_q & iv_q p_{-q}^\dagger \\ iv_q p_q & u_q p_{-q}^\dagger \end{pmatrix}$$

Onde as funções u_q e v_q são determinadas pelos seguintes critérios:

$$\{\eta_i, \eta_j^\dagger\} = \delta_{i,j} \quad \{\eta_i, \eta_j\} = \{\eta_i^\dagger, \eta_J^\dagger\} = 0$$

Isto é, os novos operadores devem ser férmions. É fácil ver que tais relações levam a: $u_q^2 + v_q^2 = 1$.

Usando a transformada inversa:

$$\begin{pmatrix} p_q \\ p_{-q}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_q & -iv_q \\ -iv_q & u_q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_q \\ \eta_{-q}^\dagger \end{pmatrix} \tag{8}$$

Com isso, é possível reescrever o hamiltoniano na forma:

$$\mathcal{H} = \sum_{q>0} -2 \begin{pmatrix} \eta_q^\dagger & \eta_{-q} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_q & iv_q \\ iv_q & u_q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (\cos(qa)+g) & i\sin(qa) \\ -i\sin(qa) & -(\cos(qa)+g) \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} u_q & -iv_q \\ -iv_q & u_q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_q \\ \eta_{-q}^\dagger \end{pmatrix} \tag{9}$$

Para diagonalizar o Hamiltoniano, aplica-se a condição de que a equação de autovalor a seguir seja satisfeita:

$$\begin{pmatrix} \cos(qa)+g & i\sin(qa) \\ -i\sin(qa) & -(\cos(qa)+g) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_q \\ -iv_q \end{pmatrix} = -\omega_q \begin{pmatrix} u_q \\ -iv_q \end{pmatrix} \tag{10}$$

Onde ω_q é o autovalor da matriz central, dado por

$$\omega_q = \sqrt{g^2 + 2g\cos(qa) + 1} \tag{11}$$

Resolvendo (10), podemos finalmente determinar as funções u_q e v_q:

$$u_q = \frac{\sin(qa)}{\sqrt{2\omega_q(\omega_q + (\cos(qa)+g))}}, \quad v_q = \frac{\sin(qa)}{\sqrt{2\omega_q(\omega_q - (\cos(qa)+g))}} \tag{12}$$

Aplicando no Hamiltoniano, chegamos a

$$\mathcal{H} = 2\sum_{q>0} \omega_q(\eta_q^\dagger \eta_q - \eta_{-q}\eta_{-q}^\dagger) = 2\sum_{q>0} \omega_q \eta_q^\dagger \eta_q + E_0 \tag{13}$$

O estado fundamental é dado por:

$$E_0 = 2\sum_{q>0} -\omega_q \eta_{-q}\eta_{-q}^\dagger = -\sum_q \omega_q \tag{14}$$

E o primeiro estado excitado é duplamente degenerado, dado por

$$E_1 = E_0 + 2\omega_{\pm\pi/2a}$$

O gap do sistema é dado por

$$E_1 - E_0 \equiv \Delta = 2\omega_{\pm\pi/2a} = 2|g-1| \tag{15}$$

Observe que, quando $g \to 1$, o gap se fecha, indicando a transição de fase do sistema entre uma fase desordenada ($h > J$, paramagnética) e uma fase ordenada ($J > h$, ferromagnética). Dessa forma, identificamos que a transição de fase ocorre para $h = J$ e determinamos o expoente crítico que governa a divergência do gap:

$$\lim_{g=1} \Delta \propto |g-1|^\phi = |g-1|^1 \to \phi = 1 \tag{16}$$

4.2 Observáveis e expoentes críticos

4.2.1 Calor específico

Aqui, o calor específico será definido de uma maneira diferente. Como estamos considerando $T = 0$, o parâmetro de variação escolhido será h. Assim como a temperatura em um sistema convencional, h quantifica a desordem da dinâmica do sistema: $h \gg J$ representa um estado desordenado, da mesma forma que uma temperatura alta o faria.

$$C = \frac{\partial U}{\partial h} \tag{17}$$

onde U é a energia do estado fundamental. Tal energia em temperatura nula é dada simplesmente por:

$$U = \langle H_{GS} \rangle = E_0 = -\sum \omega_q \tag{18}$$

No limite termodinâmico, isto é, $N \to \infty$, podemos escrever U como:

$$\lim_{r \to \infty} U = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \omega_q dq \tag{19}$$

Assim, temos que o calor específico é dado por:

$$C = \frac{\partial U}{\partial h} = -\frac{1}{2\pi} \frac{\partial}{\partial h} \int_{-\pi}^{\pi} \sqrt{(h/J)^2 + 2(h/J)cos(q) + 1} dq \tag{20}$$

Observe que a integral não diverge, derivando uma vez, temos

$$C = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{(h/J) + cos(q)}{\sqrt{(h/J)^2 + 2(h/J)cos(q) + 1}} dq =$$

$$= -\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{(h/J)}{\sqrt{(h/J)^2 + 2(h/J)cos(q) + 1}} dq = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{g}{\sqrt{g^2 + 2gcos(q) + 1}} dq$$

Fazendo a seguinte substituição e mudança de variável

$$\cos q = 1 - 2\sin^2 q/2 \quad q/2 = x$$

$$\frac{g}{\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{1}{\sqrt{(g+1)^2 - 4g\sin^2 x}} dx =$$

$$= \frac{2}{\pi} \frac{g}{g+1} \int_{0}^{\pi/2} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{4g}{(g+1)^2} \sin^2 x}} dx$$

Vamos definir $k = \frac{2\sqrt{g}}{g+1}$ e com isso, temos uma integral elíptica de primeira espécie:

$$C = \frac{-2g}{\pi(g+1)} \int_0^{\pi/2} \frac{1}{\sqrt{1-k^2 sin^2(x)}} dx = \frac{2g}{\pi(g+1)} I(k)$$

Vamos analizar a integral

$$I(k) = \int_0^{\pi/2} \frac{1}{\sqrt{1-k^2\sin^2 x}} dx$$

Fazendo a substituição de variáveis $k \sin x = t$, temos

$$\int_0^1 \frac{1}{\sqrt{(1-t^2)(k^2-t^2)}} dt$$

Substituindo $k' = \sqrt{1-k^2}$ perceba que $k' \to 0$ quando $k \to 1$ e

$$\int_0^1 \frac{1}{\sqrt{(1-t^2)(1-k'^2-t^2)}} dx \approx \int_0^1 \frac{1}{|1-t^2|} dt$$

que claramente diverge para $g = 1$ (ponto crítico).

$$k' = \sqrt{1 - \frac{4g}{(g+1)^2}} = \frac{|g-1|}{g+1}$$

Vamos fazer $g = 1 + \epsilon \to k' = \frac{\epsilon}{2+\epsilon}$, tomando $\epsilon \to 0$

$$\lim_{\epsilon \to 0} \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{(1-t^2)(1-\frac{\epsilon^2}{(2+\epsilon)^2}-t^2)}} dx = \int_0^1 \frac{1}{1-t^2} dx = \lim_{t \to 1} \frac{1}{2} \ln \frac{1+t}{1-t} =$$

$$= \frac{1}{2} \ln \frac{1+k}{1-k} = \frac{1}{2} \ln \frac{1+\sqrt{1+\epsilon}(\sqrt{1+\epsilon}+2)}{1+\sqrt{1+\epsilon}(\sqrt{1+\epsilon}-2)}$$

$$\lim_{\epsilon \to 0} I = -\frac{1}{2} \ln\left[1+\sqrt{1+\epsilon}(\sqrt{1+\epsilon}-2)\right] = \lim_{\epsilon \to 0} -\frac{1}{2} \ln\left[1+\sqrt{1+\epsilon}(\sqrt{1+\epsilon}-2)\right]$$

Vamos analizar o comportamento de I para $\epsilon \to 0$ observando o limite

$$\lim_{\epsilon \to 0} \frac{\ln\left[1+\sqrt{1+\epsilon}(\sqrt{1+\epsilon}-2)/\right]}{\ln(\epsilon)}$$

Usando L'hopital duas vezes

$$\lim_{\epsilon \to 0} \frac{\epsilon}{\sqrt{1+\epsilon}(\sqrt{1+\epsilon}-1)} = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{1}{1-\frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{1+\epsilon}}} = 2$$

Assim, $I \approx -\ln(|g-1|)$

$$C = \frac{-2g}{\pi(g+1)} I \propto \frac{2g}{\pi(g+1)} \ln(|1-g|) \propto \ln(|1-g|)$$

Com isso, para $g \to 1$, C diverge como:

$$\lim_{g \to 1} C \propto \ln(1-g) \tag{21}$$

Definindo o expoente crítico α como $C \propto |1-g|^{-\alpha}$ temos que, para uma divergência logarítmica, $\alpha = 0$.

4.2.2 Função de correlação

A função de correlação spin-spin longitudinal é definida por:

$$C^x_{ij} = \langle \phi_0 | \, S^x_i S^x_j \, | \phi_0 \rangle \tag{22}$$

Em termos de fermions de Jordan-Wigner ($com j > i$)

$$C^x_{ij} = \langle \phi_0 | \, (c^\dagger_i + c_i) exp(-i\pi \sum_{l=0}^{j-1} c^\dagger_l c_l)(c^\dagger_j + c_j) \, | \phi_0 \rangle$$

Na representação em que $c^\dagger_l c_l$ é diagonal, podemos observar que:

$$exp(-i\pi c^\dagger_l c_l) = -(c^\dagger_l - c_l)(c^\dagger_l + c_l) = (c^\dagger_l + c_l)(c^\dagger_l - c_l)$$

Definindo $A_l = c^\dagger_l + c_l$ e $B_l = c^\dagger_l - c_l$ e notando que $A^2_l = 1$, temos:

$$C^x_{ij} = \langle \phi_0 | \, B_i A_{i+1} B_{i+1} ... A_{j-1} B_{j-1} A_j \, | \phi_0 \rangle \tag{23}$$

Para calcular (23), vamos utilizar o teorema de Wick, que nos permite reescrever o valor médio de um produto de operadores, estes respeitando as mesmas leis de comutação, em termos de pares de contrações.

Teorema de Wick Se $O_1, ...O_{2n}$ são operadores como descrito anteriormente, então

$$\langle \phi_0 | \, O_1, ..., O_{2n} \, | \phi_0 \rangle = \sum_{\text{all pairings}} (-1)^p \prod_{\text{all pairs}} (\text{contraction of the pair}) \tag{24}$$

Observando que

$$\langle A_i \, A_j \rangle = \delta_{ij} \quad \langle B_i \, B_j \rangle = -\delta_{ij}$$

As únicas contrações não nulas são $\langle A_j B_i \rangle$ e $\langle B_i A_j \rangle$, e o produto destas serão todos da forma

$$\langle B_{i+1} A_{i+1} \rangle \langle B_{i+1} A_{i+2} \rangle ... \langle B_{j-1} A_j \rangle$$

Aqui, vamos definir

$$\langle B_i \, A_j \rangle = -\langle A_j \, B_i \rangle \equiv G_{ij}$$

Todos os outros termos podem ser obtidos a partir deste, permutando os A's entre si, mantendo os B's fixos. Como o número de cruzamentos de B's por A's é sempre par, o sinal associado a uma dada permutação é $(-1)^{p'}$, onde p' é a assinatura da permutação dos A's. Assim, temos

$$C^x_{ij} = \sum_P (-1)^{p'} G_{i,P(i+1)} \cdots G_{j-1,P(j)}$$

em forma matricial:

$$\begin{aligned} C^x_{i,i+r} &= \det \begin{pmatrix} G_{i,i+1} & G_{i,i+2} & \cdots & G_{i,i+r} \\ G_{i+1,i+1} & G_{i+1,i+2} & \cdots & G_{i+1,i+r} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ G_{i+r-1,i+1} & G_{i+r-1,i+2} & \cdots & G_{i+r-1,i+r} \end{pmatrix} = \\ &= \det \begin{pmatrix} G_{-1} & G_{-2} & \cdots & G_{-r} \\ G_0 & G_{-1} & \cdots & G_{-r+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ G_{r-2} & G_{r-3} & \cdots & G_{-1} \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{25}$$

Vamos determinar G_{ij}, usando (8) e (4) temos

$$p_q = u_q \eta_q - i v_q \eta^\dagger_{-q}$$

e

$$c^\dagger_j = \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_q e^{-iqja} (u_q \eta_q - i v_q \eta^\dagger_{-q})$$

Com isso,

$$c^\dagger_j + c_j = \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_q (e^{iqja} u_q \eta^\dagger_q + e^{-iqja} u_q \eta_q - i e^{-iqja} v_q \eta^\dagger_{-q} + i e^{iqja} v_q \eta_{-q})$$

e

$$c_j^\dagger - c_j = \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_q (e^{iqja} u_q \eta_q^\dagger - e^{-iqja} u_q \eta_q + i e^{-iqja} v_q \eta_{-q}^\dagger + i e^{iqja} v_q \eta_{-q})$$

Assim,

$$G_{ij} = \langle (c_i^\dagger - c_i)\,(c_j^\dagger + c_j) \rangle =$$

$$= \frac{1}{N} \sum_q \{ e^{-iqa(i-j)} [(u_q^2 + i u_q v_q) \langle \eta_q^\dagger \eta_q \rangle + (v_q^2 - i u_q v_q) \langle \eta_{-q} \eta_{-q}^\dagger \rangle] - \}$$

$$-e^{iqa(i-j)} [(u_q^2 - i u_q v_q) \langle \eta_q \eta_q^\dagger \rangle + (v_q^2 + i u_q v_q) \langle \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} \rangle] \}$$

A ocupação média de férmions em temperatura T é dada por:

$$\langle \eta_q^\dagger \eta_q \rangle_\beta = \langle \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} \rangle_\beta = [e^{2\omega_q \beta} + 1]^{-1}$$

Com isso, e definindo $r \equiv (i - j)$

$$G_{ij} \equiv G_r(\beta) = \frac{1}{N} \sum_q e^{iqra} (1 - 2u_q^2 + 2i u_q v_q) \tanh(\beta \omega_q)$$

Substituindo (11) e (12) temos:

$$G_r(\beta) = \frac{1}{N} \sum_q e^{iqr} (\frac{g + e^{iqa}}{g + e^{-iqa}})^{1/2} \tanh(\beta \omega_q) \tag{26}$$

Tomando $N \to \infty$:

$$G_r(\beta) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dq e^{iqr} (\frac{g + e^{iqa}}{g + e^{-iqa}})^{1/2} \tanh(\beta \omega_q) \tag{27}$$

Para o estado fundamental ($\beta = \infty$):

$$G_r(\infty) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dq e^{iqr} (\frac{g + e^{iqa}}{g + e^{-iqa}})^{1/2}$$

4.2.3 Determinante

Para calcular o determinante (25), vamos definir

$$D_p = G_{i,i-1+p} = G_{p-1} =$$

$$= \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi/a}^{\pi/a} dq e^{iq(r-1)} (\frac{g+e^{iqa}}{g+e^{-iqa}})^{1/2} \tanh(\beta\omega_q) =$$

$$= \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi/a}^{\pi/a} dq e^{iqr} (\frac{ge^{-iqa}+1}{ge^{iqa}+1})^{1/2} \tanh(\beta\omega_q)$$

$$D_p = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi/a}^{\pi/a} dq e^{iqr} (\frac{ge^{-iqa}+1}{ge^{iqa}+1})^{1/2} \tanh(\beta\omega_q) \tag{28}$$

Em termos de (28), podemos reescrever o determinante como:

$$C^x_{i,i+r} = \det \begin{pmatrix} D_0 & D_{-1} & \cdots & D_{-r+2} & D_{-r+1} \\ D_1 & D_0 & \cdots & \cdots & D_{-r+2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ D_{r-2} & \vdots & \ddots & \vdots & D_{-1} \\ D_{r-1} & D_{r-2} & \cdots & D_1 & D_0 \end{pmatrix} \tag{29}$$

Perceba que este é um determinante de Toeplitz, isto é, cada diagonal descendente da esquerda para a direita tem valor constante. Com isso, podemos usar o teorema de Szegö para calcula-lo.

Teorema de Szegö: Seja $\hat{D}(e^{iq})$ e $ln\hat{D}(e^{iq})$ funções ciclicas e contínuas em $[-\pi, \pi]$

$$D_p = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dq}{2\pi} \hat{D}(e^{iq}) e^{iqp}, \quad d_p = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dq}{2\pi} \hat{D} \ln\big(e^{iq}\big) e^{iqp} \tag{30}$$

O determinante de Toeplitz

$$\Delta_r = \det \begin{pmatrix} D_0 & D_{-1} & \cdots & D_{-r+1} \\ D_1 & D_0 & \cdots & D_{-r+2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ D_{r-1} & D_{r-2} & \cdots & D_0 \end{pmatrix}$$

é dado por:

$$\lim_{r\to\infty} \frac{\Delta_r}{e^{rd_0}} = \exp\left[\sum_{p=1}^{\infty} p d_{-p} d_p\right] \tag{31}$$

4.2.4 Comprimento de correlação

O comprimento de correlação ξ caracteriza a distância além da qual as correlações entre elementos de um sistema se tornam desprezíveis. Em termos de função correlação $C(r)$ entre dois spins separados por uma distância r, essa função geralmente decai exponencialmente com a distância

$$C_r \propto e^{-r/\xi}$$

Perto do ponto crítico, o comprimento de correlação exibe um comportamento da forma $\xi \propto |1-g|^{-\nu}$, o que reflete o surgimento de uma correlação de longo alcance entre todos os elementos do sistema.

Podemos ver da equação (31) que

$$C^x_{i,i+r} = \lim_{r\to\infty} \exp\left[\sum_{p=1}^{\infty} p d_{-p} d_p\right] e^{-r/(-1/d_0)} = Ae^{-r/\xi}$$

onde $A = exp[\sum_{p=1}^{\infty} p d_{-p} d_p]$.

Deste modo,

$$\frac{1}{\xi} = -d_0 = -\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi/a}^{\pi/a} ln(\frac{ge^{-iqa}+1}{ge^{iqa}+1})^{1/2} dq - \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi/a}^{\pi/a} \ln(\tanh(\beta\omega_q))dq \quad (32)$$

Note que, para $g > 1$, o primeiro termo de (32) é zero

$$\int_{-\pi/a}^{\pi/a} \ln\left(\frac{ge^{-iqa}+1}{ge^{iqa}+1}\right)^{1/2} dq = \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \ln\left(ge^{-iqa}+1\right)^{1/2} dq - \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \ln\left(ge^{iqa}+1\right)^{1/2} dq = 0$$

$$\xi|_{g>1} = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi/a}^{\pi/a} \ln\Big(\coth\Big(\beta\sqrt{g^2+2g\cos(qa)+1}\Big)\Big)dq$$

Já para $g \leq 1$, o denominador dentro do logaritmo pode se anular, tornando $ln(D(\hat{e^{iq}}))$ não mais continuo, o que impede a aplicação direta do teorema de Szegö. Neste caso, utilizarei os resultados de [1] para estender o resultado obtido para $g > 1$ ao intervalo $g \leq 1$, por meio do método de continuação analítica no espaço das constantes de acoplamento.

Assim, vamos definir $m = |1-g|/2a^2$ e $c = 2a$. Ao fazer $a \to 0$ mantendo β, m e c fixos, e definindo uma nova variável de integração $y = \beta cq$, obtemos

$$\frac{1}{\xi} = \frac{1}{\beta c} f(\beta mc^2),$$

onde

$$f(s) = \int_0^\infty \frac{dy}{\pi} \ln\coth\frac{\sqrt{y^2+s^2}}{2} + |s|\theta(-s)$$

Pode-se mostrar que a função $f(s)$ é não apenas contínua, mas também suave em $s = 0$. Este fato mostra que a cadeia de Ising transversa não possui singularidade em temperaturas finitas. Em alguns limites,

$$f(s) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2s}{\pi}}e^{-s} & (s \to \infty) \\ \frac{\pi}{4} & (s = 0) \\ \sqrt{\frac{2s}{\pi}}e^{-|s|} + |s| & (s \to -\infty) \end{cases} .$$

Substituindo isso em (32) e recuperando os parâmetros originais, obtemos

$$\frac{1}{\xi} = \begin{cases} \frac{1}{a}\sqrt{\frac{1-g}{\pi}}e^{-2\beta(1-g)} & (g < 1,\ \beta \to \infty) \\ \frac{\pi}{4}\frac{1}{2\beta a} & (g = 1) \\ \frac{1}{a}\sqrt{\frac{|1-g|}{\pi}}e^{-2\beta|1-g|} + \frac{|1-g|}{a} & (g > 1,\ \beta \to \infty) \end{cases} .$$

Em temperatura nula, temos $\xi = a/(1-g) \propto |1-g|^{-1}$ para $g > 1$, de modo que o expoente ν é igual a 1.

4.2.5 Função de correlação transversa

Similarmente, podemos calcular a função de correlação transversa definida como

$$C^z_{i,i+r} = \langle\phi_0| S^z_i S^z_{i+r} |\phi_0\rangle - (m^z)^2 = \langle\phi_0| A_i B_i A_{i+r} B_{i+r} |\phi_0\rangle - (G_{ii})^2 =$$

$$(G_{ii}G_{i+r,i+r} - G_{i,i+r}G_{i+r,i}) - (G_{ii})^2 = G_0^2 - G_r G_{-r} - G_0^2 = -G_r G_{-r}$$

Assim, devemos determinar

$$C^z_r = -G_r G_{-r} \tag{33}$$

No limite termodinâmico ($N \to \infty$), vamos analizar C^z para o estado fundamental no ponto crítico ($g \to 1$).

$$G_r = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} dq e^{iqr}(\frac{g+e^{iq}}{g+e^{-iq}})^{1/2}$$

No ponto crítico,

$$G_r = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi/a}^{\pi/a} dqe^{iqr}(\frac{1+e^{iq}}{1+e^{-iq}})^{1/2} = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} dqe^{iq(r+1/2)}$$

$$G_r = \frac{2(-1)^r}{\pi(2r+1)}$$

Assim,

$$C_r^z = -\frac{2(-1)^r}{\pi(2r+1)}\frac{2(-1)^{-r}}{\pi(-2r+1)} = \frac{1}{4\pi^2}\frac{1}{4r^2-1}$$

4.2.6 Magnetização $\mathbf{m}^x$

Para calcular a magnetização do sistema, irei usar a seguinte relação:

$$\lim_{r\to\infty} C_r^x = (m^x)^2 \tag{34}$$

estudando o comportamento deste limite para os casos $g > 1$ e $g < 1$.
No caso $g > 1$ e $r >> 1$ podemos deduzir da equação (4.26) de [2] que

$$C_r^x \approx \frac{1}{4}(1-g^2)^{-1/4}\pi^{-1/2}r^{-1/2}g^r[1-\frac{1}{8}r^{-1}(1+g^2)(1-g^2)^{-1}]$$

e portanto, no limite

$$\lim_{r\to\infty} C_r^x = 0 \to \lim_{r\to\infty} m^x = 0 \tag{35}$$

este é o caso paramagnetico do sistema, em que o estado fundamental é uma coleção de spins indepententes flutuando entre os estados "up"e "down", demostrando a influência de $(h > J)$ na desordem da dinâmica.

Agora, para o caso $g < 1$, podemos deduzir dos resultados de [2](equação (3.36)), que no limite termodinâmico,

$$\lim_{r\to\infty} C_r^x = (1-g^2)^{1/4} = (1+g)(1-g)^{1/4} \propto (1-g)^{1/4} \tag{36}$$

Aqui, irei definir outro expoente crítico, dado por

$$C_r^x \propto |1-g|^{+d-2+\eta}$$

onde d é a dimensão do sistema. Embora a cadeia de spins seja unidimensional, o sistema possui uma dimensão efetiva $d = 2$ devido aos graus de liberdade dos spins nas direções z e x. Assim, dado $d = 2$, temos de (36) que $\eta = 1/4$.

Utilizando (34) e (36), temos

$$m^x \propto (1-g)^{1/8} \tag{37}$$

Mostrando que na fase ordenada a interação vence as flutuações quânticas ($J > h$), permitindo uma magnetização finita no sistema.

Em conclusão,

$$\lim_{r\to\infty} m^x = \begin{cases} 0, & g \geq 1 \\ (1-g)^{1/8}, & g < 1 \end{cases}$$

e portanto, na vizinhança do ponto crítico, $m^x \propto |1-g|^{\beta} = |1-g|^{1/8}$ o que define o expoente de magnetização como $\beta = 1/8$.

5 Conclusão

A conclusão deste trabalho destaca a observação de não-analiticidades nos observáveis, característica fundamental das transições de fase. Além disso, foram determinados diversos expoentes críticos, todos em conformidade com aqueles previstos para a classe de universalidade do modelo de Ising clássico em duas dimensões. Esses resultados reforçam a correspondência do modelo estudado com o comportamento esperado para sistemas críticos. O sucesso dessa análise se deve à utilização da transformação de Wigner-Jordan e ao mapeamento em férmions livres, que evidencia a integrabilidade do modelo.

Na dinâmica descrita pelo Hamiltoniano do modelo de Ising em campo transverso, determinamos a transição de fase que acontece para $h = J \to g = 1$. Nesta transição, calculamos os expoentes críticos, dados pelas equações abaixo:

$$\Delta \propto |1-g|^{\phi} = |1-g|^{1} \to \phi = 1$$

$$C \propto |1-g|^{-\alpha} = \ln(1-g) \to \alpha = 0$$

$$\xi \propto |1-g|^{\nu} = |1-g|^{-1} \to \nu = 1$$

$$C^x \propto |1-g|^{d-2+\eta} = |1-g|^{1/4} \to \eta|_{d=2} = 1/4$$

$$m^x \propto |1-g|^{\beta} = |1-g|^{1/8} \to \beta = 1/8$$

$$\phi = \nu z \to z = 1$$

Todas de acordo com a literatura.

Uma conclusão importante sobre a força das flutuações no sistema pode ser observada comparando os expoentes críticos calculados neste trabalho, de forma exata, em relação aos expoentes críticos obtidos por meio da teoria de campo médio em $d = 2$. Na teoria de campo médio, os expoentes críticos são calculados desprezando flutuações de segunda ordem do sistema. Como os expoentes calculados por meio do campo médio são diferentes dos aqui apresentados, isso indica que as flutuações de segunda ordem não são desprezíveis, ressaltando sua importância na dinâmica do sistema.

Referências

[1] Sachdev, S.: *Universal, finite-temperature, crossover functions of the quantum transition in the Ising chain in a transverse field*. Nucl. Phys. B 464(3), 576–595 (1996).

[2] McCoy, B.M.: *Spin correlation functions of the X–Y model*. Rev. 173, 531–541 (1968).

[3] E. Lieb, T. Schultz, and D. Mattis: *Two Soluble Models of an Antiferromagnetic Chain*. Ann. Phys. 16, 407 (1961).