FI-204 Aspectos da Teoria de Campos em Física da Matéria Condensada
O modelo de Ising quântico

¶ A transformação de Jordan-Wigner

Nestas notas, apresentamos um problema famoso: o modelo de Ising com campo transverso, conhecido também como modelo de Ising quântico. Ele é examente resolúvel em $1-\text{dim}$. O modelo é formulado com os operadores de Pauli do spin (spin 1/2), com o Hamiltoniano para uma cadeia de spins acoplados dado por

$$\mathcal{H} = -\sum_n \ \sigma_z(n) - \lambda \sum_n \ \sigma_x(n)\sigma_x(n+1) \ , \tag{1}$$

onde ($\sigma_x, \ \sigma_y, \sigma_z$) são os operadores de Pauli e o índice n rotula o sítio do spin numa cadeia com condições periódicas de contorno. O parâmetro λ (mais propriamente $1/\lambda$) é chamado de "campo transverso" e representa o acoplamento entre as componentes σ_x de spins vizinhos. O primeiro termo de (1) fornece a ação de um campo externo na direção transversa σ_z. Na ausência desse termo, o Hamiltoniano (1) representaria o modelo de Ising clássico. Dado que as componentes (σ_x, σ_z) não comutam, o sistema está sujeito a flutuações quânticas.

Consideramos $2N+1$ sítios, com

$$n = -N, (-N+1), ..., -1, 0, 1, ... (N-1), N \ .$$

é cómodo introduzir os operadores escadas para o spin

$$\sigma^+(n) = \tfrac{1}{2}\left[\sigma_x(n) + i \ \sigma_y(n)\right] \ ,$$

$$\sigma^-(n) = \tfrac{1}{2}\left[\sigma_x(n) - i \ \sigma_y(n)\right] \ .$$

A solução exata é obtida passando para a versão fermiônica do Hamiltoniano (1), através da transformação de Jordan-Wigner. Definimos portanto operadores fermiônicos da forma

▶Def.

$$\begin{aligned} c(n) &\equiv \textstyle\prod_{j=-N}^{n-1} \ \exp\left[i\pi\sigma^+(j)\sigma^-(j)\right] \ \sigma^-(n) \ , \\ c^\dagger(n) &\equiv \sigma^+(n) \ \textstyle\prod_{j=-N}^{n-1} \ \exp\left[-i\pi\sigma^+(j)\sigma^-(j)\right] \ . \end{aligned} \tag{2}$$

Em (2), os operadores escadas são modificados por um operador não local (*soliton*) que ajusta uma fase.

§ Matrizes de Pauli

$$\sigma_x(n)\ ,\ \sigma_y(n)\ ,\ \sigma_z(n)$$

a) Para o mesmo sítio, $n' = n$:

$$\{\sigma_i(n), \sigma_j(n)\} = 0, \quad \text{para } i \neq j,$$

$$\sigma_i^2(n) = 1\ ;$$

b) Comutação de Momentum Angular

$$[\sigma_i(n), \sigma_j(n')] = 2i\, \delta_{n,n'}\, \varepsilon_{ijk}\sigma_k(n)$$

c) Operadores escada :

$$\sigma^+(n) \equiv \frac{1}{2}\left[\sigma_x(n) + i\sigma_y(n)\right]$$

$$\sigma^-(n) \equiv \frac{1}{2}\left[\sigma_x(n) - i\sigma_y(n)\right]$$

Satisfazem:

i) $\quad [\sigma^-(n)]^2 = 0\ ,\ [\sigma^+(n)]^2 = 0\ ,$
como férmions

ii) para $n \neq n'$, tipo bósons

$$[\sigma^+(n), \sigma^-(n')] = [\sigma^+(n), \sigma^+(n')] = [\sigma^-(n), \sigma^-(n')] = 0$$

§ Solução exata do modelo de Ising quântico

Usar Hamiltoniano equivalente

$$\mathcal{H} = -\sum \sigma_3(n) - \lambda \sum_n \sigma_1(n)\,\sigma_1(n+1)$$

$(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ são os operadores associados com as matrizes de Pauli $\quad i = 1,2,3 \;(x, y, z)$

Passar para os operadores de subida e descida do spin

$$\sigma^+(n) \equiv \frac{1}{2}\left[\sigma_1(n) + i\,\sigma_2(n)\right],$$

$$\sigma^-(n) \equiv \frac{1}{2}\left[\sigma_1(n) - i\,\sigma_2(n)\right],$$

com $\sigma^-(n) = \left[\sigma^+(n)\right]^\dagger$

$\underline{n}$ rotula o sítio da rede (1-dim)

$$n = -N, -N+1 \ldots, 0, 1 \ldots, N \quad (2N+1 \text{ sítios})$$

▶ Transformação de Jordan-Wigner

Definimos operadores de férmions:

$$\boxed{\begin{aligned} C(n) &\equiv \prod_{j=-N}^{n-1} \exp\left[i\pi\,\sigma^+(j)\sigma^-(j)\right]\; \sigma^-(n) \qquad (1)\\ C^\dagger(n) &= \sigma^+(n) \prod_{j=-N}^{n-1} \exp\left[-i\pi\,\sigma^+(j)\sigma^-(j)\right] \qquad (2)\end{aligned}}$$

Essencialmente, são operadores de descida ou subida modificados por uma fase que carrega um "string"

Os operadores (σ^+, σ^-) anti-comutam no mesmo sítio e os quadrados são nulos, muito parecidos com operadores de férmions. Falta ajustar a anti-comutação em sítios diferentes. Isso é feito com as fases extras.

Para spin ½, temos as identidades abaixo

$$\sigma^-(n)\sigma^+(n) = \frac{1}{2}\left[1-\sigma_3(n)\right] \quad (3)$$

$$\sigma^+(n)\sigma^-(n) = \frac{1}{2}\left[1+\sigma_3(n)\right] \quad (4)$$

$$\exp\left(i\frac{\pi}{2}\sigma_3\right) = \cos\frac{\pi}{2}\cdot \mathbb{1} + i\,\sigma_3 \sin\frac{\pi}{2} = i\sigma_3 \quad (5)$$

Assim, escrevemos

$$C(n) = \prod_{j=-N}^{n-1} \exp\left\{\frac{i\pi}{2}\left[1+\sigma_3(j)\right]\right\} \sigma^-(n)$$

$$= \prod_{j=-N}^{n-1} \left[i^2\sigma_3(j)\right] \sigma^-(n)$$

$$= \prod_{j=-N}^{n-1} \left[-\sigma_3(j)\right] \sigma^-(n)$$

$$C^+(n) = \sigma^+(n) \prod_{j=-N}^{n-1} \left[-\sigma_3(j)\right]$$

¶ Os operadores $(c, c^\dagger)$ definidos acima, satisfazem as relações de anti-comutação de férmions. Obtemos também a transformação inversa (os σ 's em função dos c' s).

O Hamiltoniano (1) na representação fermiônica é dado por:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= -\sum_n \left[2c^\dagger(n)c(n) - 1\right] - \\ &\qquad -\lambda \sum_n \left[c^\dagger(n) - c(n)\right] \left[c^\dagger(n+1) + c(n+1)\right] \ . \end{aligned} \tag{3}$$

$$\sigma^{+}(m)\left\{\left[-\sigma_3(m)\right]\left[-\sigma_3(m+1)\right]\cdots\left[-\sigma_3(n-1)\right]\right\}\sigma^{-}(n)$$

$$= -\left[-\sigma_3(m)\right]\sigma^{+}(m)\left[-\sigma_3(m+1)\cdots\left[-\sigma_3(n-1)\right]\right\}\sigma^{-}(n)$$

$$= -\prod_{j=m}^{n-1}\left[-\sigma_3(j)\right]\sigma^{+}(m)\,\sigma^{-}(n)$$

$$\sigma^{+}(n)\,\sigma^{-}(n) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sigma_3(n)$$

$$\sigma^{-}(n)\,\sigma^{+}(n) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\sigma_3(n)$$

Agora é fácil verificar que os (c, c^+) satisfazem relações de anti-comutações de férmions. Seja $m < n$

$$\{C(n), C^+(m)\} = C(n)\,C^+(m) + C^+(m)\,C(n)$$

$$= \prod_{j=-N}^{n-1} [-\sigma_3(j)]\,\sigma^-(n)\,\sigma^+(m) \prod_{i=-N}^{m-1} [-\sigma_3(i)] +$$

$$+ \sigma^+(m) \prod_{j=-N}^{m-1} [-\sigma_3(j)] \prod_{i=-N}^{n-1} [-\sigma_3(i)]\,\sigma^-(n)$$

$$= \sigma^-(n) \prod_{j=m}^{n-1} [-\sigma_3(j)]\,\sigma^+(m) + \sigma^+(m) \prod_{j=m}^{n-1} [-\sigma_3(j)]\,\sigma^-(n)$$

$$= \prod_{j=m}^{n-1} [-\sigma_3(j)]\,\sigma^-(n)\sigma^+(m) - \prod_{j=m}^{n-1} [-\sigma_3(j)]\,\sigma^+(m)\,\sigma^-(n)$$

e como para sítios diferentes (σ^+, σ^-) comutam,

$$\{C(n), C^+(m)\} = 0 \quad , \quad m < n$$

Seja agora $m \equiv n$

$$\{C(n), C^+(n)\} = \prod_{j=-N}^{n-1} [-\sigma_3(j)]\,\sigma^-(n)\sigma^+(n) \prod_{i=-N}^{n-1} [-\sigma_3(i)] + \dots$$

$$= \sigma^-(n)\sigma^+(n) + \sigma^+(n)\sigma^-(n) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\sigma_3(n) + \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sigma_3(n)$$

$$= 1$$

De maneira que

$$\{C(n), C^{+}(m)\} = \delta_{nm}$$

Também temos $\{C(n), C(m)\} = 0 \quad , \quad m < n$

$$= \prod_{j=N}^{n-1} [-\sigma_3(j)]\, \sigma^{-}(n) \prod_{i=-N}^{m-1} [-\sigma_3(i)]\, \sigma^{-}(m)$$

$$+ \prod_{i=-N}^{m-1} [-\sigma_3(i)]\, \sigma^{-}(m) \prod_{j=-N}^{n-1} [-\sigma_3(j)]\, \sigma^{-}(n)$$

$$= \sigma^{-}(n) \prod_{j=-m}^{n-1} [-\sigma_3(j)]\, \sigma^{-}(m) +$$

$$+ \sigma^{-}(m) \prod_{j=-m}^{n-1} [-\sigma_3(j)]\, \sigma^{-}(n)$$

$$= \prod_{j=-m}^{n-1} [-\sigma_3(j)]\, \sigma^{-}(n)\sigma^{-}(m)$$

$$- \prod_{j=-m}^{n-1} [\sigma_3(j)]\, \sigma^{-}(m)\sigma^{-}(n) = 0$$

e para sítios diferentes $\sigma^{-}(n)\sigma^{-}(m) = \sigma^{-}(m)\sigma^{-}(n)$

Precisamos agora escrever o Hamiltoniano em termo das variáveis fermiônicas. Os termos de acoplamento são do tipo

$$\sigma_1(n)\sigma_1(n+1) = [\sigma^{+}(n) + \sigma^{-}(n)][\sigma^{+}(n+1) + \sigma^{-}(n+1)]$$

spiral

Aqui precisamos da transformação inversa da de Jordan-Wigner. Vejamos

$$c^{+}(n)\,c(n) = \sigma^{+}(n)\cdot\prod_{j=-N}^{n-1}\exp\left[i\pi\,\sigma^{+}(j)\sigma^{-}(j)\right]\cdot\prod_{j=-N}^{n-1}\exp\left[i\pi\,\sigma^{+}(j)\sigma^{-}(j)\right]$$

$$\cdot\,\sigma^{-}(n)$$

$$= \sigma^{+}(n)\,\sigma^{-}(n) = \frac{1}{2}\left[1+\sigma_3(n)\right]$$

$$= N(n)$$ operador número de férmion $(0,1)$,

de maneira que a transformação invertida tem a forma

$$\sigma^{-}(n) = \prod_{j=-N}^{n-1}\exp\left[-i\pi\,c^{+}(j)c(j)\right]\; c(n)$$

$$\sigma^{+}(n) = c^{+}(n)\prod_{j=-N}^{n-1}\exp\left[+i\pi\,c^{+}(j)c(j)\right]$$

Consideremos termos:

$$\sigma^{+}(n)\,\sigma^{-}(n+1) = c^{+}(n)\prod_{j=-N}^{n-1}\exp\left[+i\pi\,c^{+}(j)c(j)\right]\prod_{j=-N}^{n}\exp\left[-i\pi\,c^{+}(j)c(j)\right]$$

$$c(n+1)$$

$$= c^{+}(n)\,\exp\left[-i\pi\,c^{+}(n)\,c(n)\right]\,c(n+1)$$

$$\exp\left[-i\pi\,c^{+}(n)c(n)\right] = \exp\left(-i\pi\left[\frac{1}{2}+\sigma_3(n)\right]\right)$$

$$= -\sigma_3(n) = 1-2\,c^{+}(n)c(n)\;\checkmark$$

$$= c^+(n)\left[1-2c^+(n)c(n)\right]c(n+1)$$

$$= c^+(n)\,c(n+1) \quad , \qquad \text{porque } \left[c^+(n)\right]^2 = 0$$

Assim: $\quad c^+(n)\,c(n+1) = \sigma^+(n)\,\sigma^-(n+1)$

Vamos calcular outro termo:

$$\sigma^-(n)\,\sigma^-(n+1) = \prod_{j=-N}^{n-1} \exp\left[i\pi\, c^+(j)c(j)\right] c(n) \,\cdot$$

$$\cdot \prod_{j=-N}^{n} \exp\left[-i\pi\, c^+(j)c(j)\right] \; c(n+1)$$

$$= \prod_{j=-N}^{n-1} \exp\left[-i\pi\, c^+(j)c(j)\right] \prod_{j=N}^{n-1} \exp\left[i\pi\, c^+(j)c(j)\right] \times$$

$$\times\, c(n)\left(1-2c^+(n)c(n)\right)c(n+1)$$

$$= c(n)c(n+1) - 2\,\underbrace{c(n)c^+(n)c(n)}_{c(n)}c(n+1)$$

$$= -\,c(n)c(n+1) \checkmark$$

Os outros resultados são:

$$\sigma^+(n)\,\sigma^+(n+1) = +\,c^+(n)c^+(n+1)$$

$$\left[\sigma^-(n)\sigma^-(n+1)\right]^+ = \sigma^+(n+1)\,\sigma^+(n)$$

$$\sigma^-(n)\,\sigma^+(n+1) = -\,c(n)c^+(n+1)$$

Em total, o Hamiltoniano na rep. fermiônica fica:

$$\mathcal{H} = -\sum_n \left[2c^\dagger(n)c(n) - 1\right] -$$
$$-\lambda \sum_n \left[c^\dagger(n) - c(n)\right]\left[c^\dagger(n+1) + c(n+1)\right]$$

Este Hamiltoniano é quadrático e pode ser diagonalizado em forma exata.

Passar primeiro para a representação de Fourier

$$a_k = \frac{1}{\sqrt{2N+1}} \sum_{n=-N}^{N} e^{ikn} c(n) ,$$

com $k = 0, \pm \frac{2\pi}{2N+1}, \dots, \pm \frac{2\pi N}{2N+1}$

usando condições periódicas de contorno

$$e^{ik(2N+1)} = 1$$

Transformação inversa:

$$c(n) = \frac{1}{\sqrt{2N+1}} \sum_k e^{-ikn} a_k$$

$$c^\dagger(n) = \frac{1}{\sqrt{2N+1}} \sum_k e^{ikn} a_k^\dagger$$

A transformada de Fourier é uma Transf. Canônica e preserva as relações de anti-comutação (férmions):

¶ O Hamiltoniano (3) é quadrático, mas ainda não é diagonal. Preliminarmente, passamos para a representação de Fourier dos operadores

$$a_k \equiv \frac{1}{\sqrt{2N+1}} \sum_{n=-N}^{N} c(n) \exp(ikn) \ ,$$

onde se acoplam os modos $(k, -k)$ (de maneira semelhante ao problema reduzido de BCS !).

(a) **Resposta:** Note o índice $k > 0$ nas somatórias

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= -2 \sum_{k>0} (1 + \lambda \cos k) \left(a_k^\dagger a_k + a_{-k}^\dagger a_{-k} \right) + \\ &\quad + 2i\lambda \sum_{k>0} \sin k \ \left(a_k^\dagger a_{-k}^\dagger + a_k a_{-k} \right) \ . \end{aligned} \tag{4}$$

$$\mathcal{H} = -\sum_n \left[2\, c^+(n)\, c(n) - 1 \right] -$$

$$- \lambda \sum_n \left[c^+(n)\, c(n+1) - c(n)\, c^+(n+1) \right]$$

$$- \lambda \sum_n \left[c^+(n)\, c^+(n+1) - c(n)\, c(n+1) \right]$$

ou

$$\mathcal{H} = -\sum_n \left[2\, c^+(n)\, c(n) - 1 \right] -$$

$$- \lambda \sum_n \left[c^+(n)\, c(n+1) + c^+(n+1)\, c(n) \right]$$

$$- \lambda \sum_n \left[c(n+1)\, c(n) + c^+(n)\, c^+(n+1) \right]$$

$$\{a^+_k, a_{k'}\} = \delta_{kk'}$$

$$\{a_k, a_{k'}\} = \{a^+_k, a^+_{k'}\} = 0$$

Transformamos para os operadores (a, a^+):

$$\sum_n c^+(n)\, c^+(n+1) = \sum_k e^{-ik} a^+_k a^+_{-k}$$

$$\sum_n c^+(n)\, c(n+1) = \frac{1}{2N+1} \sum_n \sum_k \sum_{k'} e^{ikn} e^{-ik'(n+1)} a^+_k a_{k'}$$

$$= \sum_{k,k'} \delta_{kk'} e^{-ik'} a^+_k a_{k'} = \sum_k e^{-ik} a^+_k a_k$$

$$\sum_n c(n)\, c^+(n+1) = \frac{1}{2N+1} \sum_n \sum_k \sum_{k'} e^{-ikn} e^{ik(n+1)} a_k a^+_{k'}$$

$$= \sum_{k,k'} \delta_{kk'} e^{ik} a_k a^+_{k'} = \sum_k e^{ik} a_k a^+_k$$

$$\sum_n c(n)\, c(n+1) = \frac{1}{2N+1} \sum_n \sum_k \sum_{k'} e^{-ikn} e^{-ik'(n+1)} a_k a_{k'}$$

$$= \sum_{k,k'} \delta_{k,-k'} e^{-ik'} a_k a_{k'} = \sum_k e^{ik} a_k a_{-k}$$

$$\longrightarrow \quad a_k a^+_k = 1 - a^+_k a_k$$

Para o termo diagonal, temos :

$$\sum_n c^\dagger(n)c(n) = \frac{1}{2N+1} \sum_n \sum_k \sum_{k'} e^{ikn} e^{-ik'n} a_k^\dagger a_{k'}$$

$$= \sum_{kk'} \delta_{kk'} a_k^\dagger a_{k'} = \sum_k a_k^\dagger a_k$$

$$\mathcal{H} = -2 \sum_k a_k^\dagger a_k + \sum_n \cdot 1$$

$$-\lambda \sum_k (e^{-ik} a_k^\dagger a_{-k}^\dagger + e^{-ik} a_k a_{-k})$$

$$+\lambda \sum_k [e^{-ik} (1 - a_k^\dagger a_{-k}) + e^{ik} a_k a_{-k}]$$

$$\mathcal{H} = -\sum_k (2 + 2\lambda \cos k) a_k^\dagger a_k$$

$$-\lambda \sum_k (e^{-ik} a_k^\dagger a_{-k}^\dagger - e^{ik} a_k a_{-k})$$

$$+ \text{cte}.$$

Para simetrizar, somamos apenas sobre os modos com $k>0$

$$\mathcal{H} = -2 \sum_k (1 + \lambda \cos k) a_k^\dagger a_k +$$

$$+ 2i\lambda \sum_{k>0}' \operatorname{sen} k \, (a_k^\dagger a_{-k}^\dagger + a_k a_{-k})$$

que mostra explicitamente que o Hamiltoniano é Hermitiano

O Hamiltoniano tem a forma:

$$\mathcal{H} = \sum_{k} \varepsilon(k)\, a_k^{+} a_k \; +$$

$$+ \sum_{k>0} V(k)\left(a_k^{+} a_{-k}^{+} + a_k a_{-k} \right),$$

com

$$\begin{cases} \varepsilon(k) = -2(1+\lambda \cos k), \\ V(k) = 2i\lambda \operatorname{sen} k \, . \end{cases}$$

¶ Para diagonalizar o Hamiltoniano acima (4), usamos o método da equação de movimento e a Transformação de Bogoliubov. O espectro de quase-partícula é obtido através de um problema de autovalores. As excitações sobre o estado fundamental estão separadas por um *gap* Δ_0, que depende parametricamente do campo transverso λ. Encontramos o valor crítico λ_C, onde o *gap* se anula. Calculamos também o expoente crítico β que fornece o comportamento perto do valor crítico

$$\Delta_0\left(\lambda\right) \sim \left|\lambda - \lambda_C\right|^{\beta} \; .$$

Fnalmente, obtemos os parâmetros $(u_k \; , v_k)$ de Bogoliubov em forma fechada.

Procurar eq.'s de mov. Seja $k>0$

$$[\mathcal{H}, a_k] = -2\,(1+\lambda\cos k)\,[a_k^\dagger a_k, a_k]$$

$$+\,2i\lambda\,\mathrm{sen}\,k\left\{[a_k^\dagger a_{-k}^\dagger, a_k] + [a_k a_k, a_k]\right\}$$

Calcular em termo de anti-comutadores:

$$[AB, C] = ABC - CAB = ABC + ACB - ACB - CAB$$

$$= A\{B,C\} - \{A,C\}B$$

$$[a_k^\dagger a_k, a_k] = a_k^\dagger \underbrace{\{a_k, a_k\}}_{0} - \underbrace{\{a_k^\dagger, a_k\}}_{1} a_k = -a_k$$

$$[a_k^\dagger a_{-k}^\dagger, a_k] = -\{a_k^\dagger, a_k\}\, a_{-k}^\dagger = -a_{-k}^\dagger$$

$$[a_k a_{-k}, a_k] = 0$$

$$[\mathcal{H}, a_k] = 2\,(1+\lambda\cos k)\,a_k - 2i\lambda\,\mathrm{sen}\,k\; a_{-k}^\dagger$$

Como seria no caso diagonal?

$$[\mathcal{H}, b_k] = \varepsilon_k\,[b_k^\dagger b_k, k_k] = -\varepsilon_k b_k$$

$$[\mathcal{H}, a_k]^\dagger = -[a_k^\dagger, \mathcal{H}] = 2\,(1+\lambda\cos k)\,a_k^\dagger + 2i\lambda\,\mathrm{sen}\,k\; a_{-k}$$

Vemos nas equações de mov. que temos acoplamento entre

$$(a_k,\; a_{-k}^\dagger) \text{ e } (a_k^\dagger,\; a_{-k})$$

Propomos então transformação canônica do tipo.

Def. Transformação de Bogoliubov

$$\begin{cases} \eta_k = u_k a_k + i v_k a^{+}_{-k}, \\ \eta^{+}_k = u_k a^{+}_k - i v_k a_{-k} \end{cases}$$

com coeficientes (u_k, v_k) reais $\begin{cases} u_{-k} = u_k \\ v_{-k} = -v_k \end{cases}$

i.e.

$$\begin{cases} \eta_{-k} = u_k a_{-k} - i v_k a^{+}_k \\ \eta^{+}_{-k} = u_k a^{+}_{-k} + i v_k a_k \end{cases}$$

Podemos mostrar que a transf. acima é canônica, com a condição

$$u_k^2 + v_k^2 = 1$$

$$\{\eta_k, \eta^{+}_{k'}\} = \{u_k a_k + i v_k a^{+}_{-k},\ u_{k'} a^{+}_{k'} - i v_{k'} a_{-k'}\}$$

$$= u_k u_{k'} \{a_k, a^{+}_{k'}\} + v_k v_{k'} \{a^{+}_{-k}, a_{-k'}\}$$

$$= \delta_{kk'} (u_k^2 + v_k^2)$$

Equações de autovalores:

$$[\mathcal{H}, \eta_k] = -\Lambda_k \eta_k = -\Lambda_k (u_k a_k + i v_k a^{+}_{-k})$$

$$= u_k [\mathcal{H}, a_k] + i v_k [\mathcal{H}, a^{+}_{-k}]$$

$$= u_k \left[2(1+\lambda\cos k) a_k - 2i\lambda \,\mathrm{sen}\, k \; a_{-k}^{+} \right] +$$

$$+ i v_k \left[-2(1+\lambda\cos k) a_{-k}^{+} + 2i\lambda \,\mathrm{sen}\, k \; a_k \right]$$

Obtemos as equações lineares homogêneas:

$$\begin{cases} 2(1+\lambda\cos k) u_k - 2\lambda \,\mathrm{sen}\, k \; v_k = -\Lambda_k u_k \\ -2\lambda \,\mathrm{sen}\, k \; u_k - 2(1+\lambda\cos k) v_k = -\Lambda_k v_k \end{cases}$$

Temos soluções não-triviais para:

$$\begin{vmatrix} \Lambda_k + 2(1+\lambda\cos k) & -2\lambda \,\mathrm{sen}\, k \\ -2\lambda \,\mathrm{sen}\, k & \Lambda_k - 2(1+\lambda\cos k) \end{vmatrix} = 0 ,$$

ou para

$$\Lambda_k^2 - 4(1+\lambda\cos k)^2 - 4\lambda^2 \mathrm{sen}^2 k = 0$$

com autovalores:

$$\Lambda_k = \pm 2\sqrt{1+\lambda^2 + 2\lambda\cos k}$$

Como Λ_k é a energia de uma "quase-partícula" criada acima do estado fundamental, só faz sentido a solução positiva

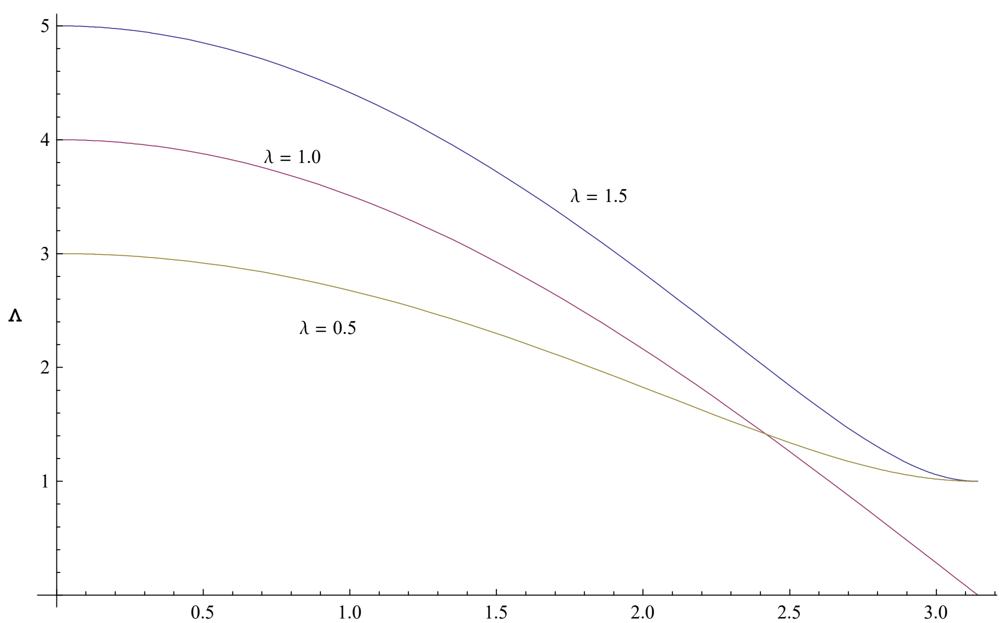
$$\Lambda_k = 2\sqrt{1+\lambda^2+2\lambda\cos k} \geqslant 0$$

```
* Transverse Ising Model, energy of excitations *
```

```
Λ[k_, λ_] = 2 √(1 + λ^2 + 2 λ Cos[k])
```

Out[1]= $2\sqrt{1+\lambda^2+2\,\lambda\,\text{Cos}[k]}$

```
Plot[{Λ[k, 1.5], Λ[k, 1.0], Λ[k, 0.5]}, {k, 0., π}]
```



Antes de encontrarmos a função de onda do estado fundamental, vamos a discutir este resultado. A relação de dispersão para as quase-partículas tem um mínimo para $k = \pm\pi$, onde

$$\Lambda_{k=\pm\pi} = 2|1-\lambda|$$

Este é o gap de massa associado com a quase-partícula do campo. O gap se anula em $\lambda = 1$, com expoente crítico $\nu = 1$. Para a região crítica, estudamos o comportamento do espectro na vizinhança de $k = \pm\pi$. Medindo o momentum a partir de π, escrevemos

$$k = \pi + k'a .$$

Definimos também uma densidade de energia por

$$E(k') = \frac{\Lambda_k}{2a}$$

Perto de $k = \pi$ temos:

$$\frac{1}{2}\Lambda_k = \sqrt{1 + 2\lambda\cos(\pi + k'a) + \lambda^2}$$

$$\cos(\pi + k'a) = -\cos k'a = -\left[1 - \frac{1}{2!}k'^2a^2 + \cdots\right]$$

ou

$$\frac{1}{2}\Lambda_k \cong \sqrt{1 - 2\lambda + \lambda^2 + \lambda(k'^2a^2)}$$

$$= \sqrt{(1-\lambda)^2 + \lambda(k'^2a^2)}$$

com

$$E(k') = \sqrt{\frac{(1-\lambda)^2}{a^2} + \lambda k'^2}$$

Para λ fora da região crítica, $\lambda \neq 1$, e

$$E(k') \underset{a \to 0}{\approx} \frac{|1-\lambda|}{a},$$

não depende de k'. Mas para a condição crítica

$$\lambda = 1$$

$$E(k') = |k'| \quad ,$$

que é o espectro relativístico de partículas sem massa

Encontremos agora a transformação explícita e o estado fundamental. Como temos a condição

$$u_k^2 + v_k^2 = 1 ,$$

uma parametrização natural é dada por

$$\begin{cases} u_k = \cos\theta_k \\ v_k = \operatorname{sen}\theta_k \end{cases}$$

Das eq.'s homogêneas obtemos:

$$\begin{cases} 2\lambda \operatorname{sen} k \, v_k = \left[\Lambda_k + 2(1+\lambda\cos k)\right] u_k \\ 2\lambda \operatorname{sen} k \, u_k = \left[\Lambda_k - 2(1+\lambda\cos k)\right] v_k \end{cases}$$

Def : $C_k \equiv 2\,(1+\lambda\cos k)$

$$\Rightarrow \quad \frac{u_k}{v_k} = \left(\frac{\Lambda_k - C_k}{\Lambda_k + C_k}\right)\frac{v_k}{u_k}$$

ou

$$\left(\frac{v_k}{u_k}\right)^2 = \frac{\operatorname{sen}^2\theta_k}{\cos^2\theta_k} = \tan^2\theta_k = \frac{\Lambda_k + C_k}{\Lambda_k - C_k}$$

É mais conveniente escrever as fórmulas usando o ângulo meio

$$\tan 2\theta_k = \frac{2\tan\theta_k}{1-\tan^2\theta_k} = \frac{2\left(\frac{\Lambda_k+C_k}{\Lambda_k-C_k}\right)^{1/2}}{1-\frac{\Lambda_k+C_k}{\Lambda_k-C_k}}$$

$$= \frac{2\,(\Lambda_k - C_k)}{\cancel{\Lambda_k}-C_k-\cancel{\Lambda_k}-C_k}\left(\frac{\Lambda_k+C_k}{\Lambda_k-C_k}\right)^{1/2}$$

$$= \frac{C_k-\Lambda_k}{C_k}\,\frac{\sqrt{\Lambda_k^2-C_k^2}}{\Lambda_k-C_k} = -\frac{1}{C_k}\sqrt{\Lambda_k^2-C_k^2}$$

temos:

$$\Lambda_k^2 - C_k^2 = 4\,(1+\lambda^2+2\lambda\cos k) - 2^2(1+\lambda\cos k)$$

$$= 4\left[\cancel{1}+\lambda^2+\cancel{2\lambda\cos k}-\cancel{1}-\cancel{2\lambda\cos k}-\lambda^2\cos^2 k\right]$$

$$= 4\lambda^2\operatorname{sen}^2 k \,, \quad \text{de onde}$$

$$\boxed{\tan 2\theta_k = -\frac{\lambda \operatorname{sen} k}{(1+\lambda\cos k)}}$$

Também temos:

$$\text{sen}\,2\theta_k = \frac{2\tan\theta_k}{1+\tan^2\theta_k} \quad , \quad \cos 2\theta_k = \frac{1-\tan^2\theta_k}{1+\tan^2\theta_k}$$

$$1+\tan^2\theta_k = 1 + \frac{\Lambda_k + C_k}{\Lambda_k - C_k} = \frac{2\Lambda_k}{\Lambda_k - C_k}$$

$$1-\tan^2\theta_k = 1 - \frac{\Lambda_k + C_k}{\Lambda_k - C_k} = -\frac{2C_k}{\Lambda_k - C_k}$$

$$\tan\theta_k = \left(\frac{\Lambda_k + C_k}{\Lambda_k - C_k}\cdot\frac{\Lambda_k - C_k}{\Lambda_k - C_k}\right)^{1/2} = \frac{1}{\Lambda_k - C_k}\, 2\lambda\,\text{sen}\,k$$

Assim obtemos:

$$\boxed{\begin{aligned} \text{sen}\,2\theta_k &= \lambda\,\frac{\text{sen}\,k}{\frac{1}{2}\Lambda_k} = \frac{\lambda\,\text{sen}\,k}{\sqrt{1+\lambda^2+2\lambda\cos k}} \\ \cos 2\theta_k &= -\frac{1+\lambda\cos k}{\sqrt{1+\lambda^2+2\lambda\cos k}} \end{aligned}}$$

Queremos agora obter explicitamente o estado fundamental. Na forma diagonal obtida

$$\mathcal{H} = \sum_k \Lambda_k\, \eta_k^\dagger \eta_k + \text{cte.} \quad ,$$

o estado fundamental é o vácuo dos operadores η_k, isto é

Com

$$\cos(2\theta_k) = \cos^2\theta_k - \operatorname{sen}^2\theta_k$$
$$= u_k^2 - v_k^2$$
$$= \frac{\epsilon(k)}{\Lambda(k)}$$

Adicionando

$$u^2 + v_k^2 = 1$$

obtemos:

$$u_k^2 = \frac{1}{2}\left[1 + \frac{\epsilon(k)}{\Lambda(k)}\right],$$

$$v_k^2 = \frac{1}{2}\left[1 - \frac{\epsilon(k)}{\Lambda(k)}\right],$$

em completa analogia com BCS.

¶ Usando analogias com o estado BCS da supercondutividade, construímos o estado fundamental em termos dos operadores $\left(a_k^\dagger, a_k\right)$ e do seu vácuo $|0\rangle$. ■

$$\begin{cases} \eta_k |G\rangle = 0, \\ \eta_{-k} |G\rangle = 0 \end{cases}$$

Uma solução para $|G\rangle$ é da forma:

$$|G\rangle = \prod_{k>0} A_k \, \eta_k \eta_{-k} |0\rangle \, ,$$

onde A_k é uma constante de normalização. Temos que

$$\eta_k \eta_{-k} = (u_k a_k + i v_k a^{\dagger}_{-k})(u_k a_{-k} - i v_k a^{\dagger}_k)$$

$$= u_k^2 a_k a_{-k} + i u_k v_k a^{\dagger}_{-k} a_{-k} + v_k^2 a^{\dagger}_{-k} a^{\dagger}_k$$

$$- i u_k v_k a_k a^{\dagger}_k$$

e operando sobre o vácuo $|0\rangle$ dos a_k

$$\eta_k \eta_{-k} |0\rangle = v_k^2 a^{\dagger}_{-k} a^{\dagger}_k |0\rangle$$

$$- i u_k v_k (1 - a^{\dagger}_k a_k) |0\rangle$$

$$= -i v_k (u_k + i v_k a^{\dagger}_{-k} a^{\dagger}_k) |0\rangle$$

Procuramos as constantes de normalização:

$$1 = \langle G|G\rangle = \prod_{k>0} v_k^2 \langle 0| (u_k - i v_k a_k a_{-k}) |A_k|^2$$

$$\cdot (u_k + i v_k a^{\dagger}_{-k} a^{\dagger}_k) |0\rangle$$

$$= \prod_{k>0} |A_k|^2 v_k^2 \langle 0 | (u_k^2 + v_k^2 a_k a_{-k} a_{-k}^+ a_k^+) | 0 \rangle$$

Observar que:

$$v_k^2 a_{+k} a_{-k} a_{-k}^+ a_k^+ = v_k^2 a_{-k} a_{-k}^+ a_k a_k^+$$

$$= v_k^2 a_{-k} a_{-k}^+ (1 - a_k^+ a_k)$$

$$= v_k^2 (1 - a_{-k}^+ a_{-k})(1 - a_k^+ a_k)$$

$$v_k^2 a_{+k} a_{-k} a_{-k}^+ a_k^+ |0\rangle = v_k^2 |0\rangle$$

$$1 = \langle G | G \rangle = \prod_k v_k^2 |A_k|^2 \langle 0 | (\underbrace{u_k^2 + v_k^2}_{1}) | 0 \rangle$$

$$= \prod_k v_k^2 |A_k|^2 \implies |A_k|^2 = \frac{1}{v_k^2}$$

Sendo a escolha da fase arbitrária, escrevemos para o estado fundamental normalizado

$$\boxed{|G\rangle = \prod_{k>0} (u_k + i v_k a_{-k}^+ a_k^+) |0\rangle}$$

Este estado tem semelhanças grandes com o estado fundamental da teoria BCS para a supercondutividade, onde os pares $(k, -k)$ estão formando a estrutura do mesmo.

Vamos calcular algumas grandezas físicas (ver trabalho de Pfeuty para a solução exata e para a eq. de estado).

Preliminarmente, encontremos a transf. inversa de

$$\begin{cases} \eta_k = u_k a_k + i v_k a_{-k}^{+} \\ \eta_{-k}^{+} = u_k a_{-k}^{+} + i v_k a_k \end{cases}$$

Em forma compacta:

$$\begin{pmatrix} \eta_k \\ \eta_{-k}^{+} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_k & i v_k \\ i v_k & u_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_k \\ a_{-k}^{+} \end{pmatrix}$$

A matriz $\begin{pmatrix} u_k & i v_k \\ i v_k & u_k \end{pmatrix}$ está em $SU(2)$ (matriz de rotação): $\begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}$, $|a|^2 + |b|^2 = 1$

$$\det \begin{pmatrix} u_k & i v_k \\ i v_k & u_k \end{pmatrix} = u_k^2 + v_k^2 = 1$$

A matriz inversa tem formato $\begin{pmatrix} a^* & -b \\ b^* & a \end{pmatrix}$, de maneira que

$$\begin{pmatrix} a_k \\ a_{-k}^{+} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_k & -i v_k \\ -i v_k & u_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_k \\ \eta_{-k}^{+} \end{pmatrix}$$

ou então:

$$\begin{cases} a_k = u_k \eta_k - i v_k \eta_{-k}^{+} \\ a_{-k}^{+} = -i v_k \eta_k + u_k \eta_{-k}^{+} \end{cases}$$

Queremos calcular o valor esperado da componente total

$$S_z = \sum_{-N}^{N} \sigma_z(n)$$

Da transformação de J-W temos o resultado:

$$c^{+}(n)c(n) = \frac{1}{2}\left[1+\sigma_3(n)\right] \Rightarrow 2c^{+}(n)c(n) - 1 = \sigma_3(n)$$

ou

$$S_3 = \sum_{-N}^{N} \left[2c^{+}(n)c(n) - 1\right]$$

Transformando para os a_k's :

$$\sum_n c^{+}(n)\,c(n) = \frac{1}{2N+1} \sum_k \sum_{k'} \sum_n e^{ikn - ik'n} \cdot a_k^{+} a_{k'}$$

$$= \sum_k \sum_{k'} \delta_{kk'}\, a_k^{+} a_{k'} = \sum_k a_k^{+} a_k$$

Assim, obtemos

$$S_3 = 2 \sum_k a_k^{+} a_k - (2N+1)$$

$$= 2 \sum_{k>0} \left(a_k^{+} a_k + a_{-k}^{+} a_{-k}\right) - (2N+1)$$

Calculamos este operador na representação (η, η^{+}):

$$a_k^+ a_k = (u_k \eta_k^+ + i v_k \eta_{-k})(u_k \eta_k - i v_k \eta_{-k}^+)$$

$$= u_k^2 \eta_k^+ \eta_k - i u_k v_k \eta_k^+ \eta_{-k}^+ + i u_k v_k \eta_{-k} \eta_k +$$

$$+ v_k^2 \eta_{-k} \eta_{-k}^+$$

Os termos com η à direita se cancelam operando sobre o estado fundamental. Ficam apenas

$$- i u_k v_k \eta_k^+ \eta_{-k}^+ + v_k^2 \eta_{-k} \eta_{-k}^+$$

$$= - i u_k v_k \eta_k^+ \eta_{-k}^+ + v_k^2 \left[1 - \eta_{-k}^+ \eta_{-k} \right]$$

O mesmo é verdade para os termos com η^+ à esquerda, na hora de fazer o produto escalar $\langle G | \ldots | G \rangle$.
Resultado:

$$\langle G | S_3 | G \rangle = 2 \sum_k v_k^2 - (2N+1)$$

$$= \sum_k (2 v_k^2 - 1)$$

temos $\quad v_k^2 = \operatorname{sen}^2 \theta_k = \frac{1}{2}(1 - \cos 2\theta_k)$

$$= \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos 2\theta_k$$

$$= \frac{1}{2} + \frac{1 + \lambda \cos k}{2\sqrt{1 + \lambda^2 + 2\lambda \cos k}}$$

$$2 v_k^2 - 1 = \frac{1 + \lambda \cos k}{\sqrt{1 + \lambda^2 + 2\lambda \cos k}}$$

$$\langle S_3 \rangle = \sum_k \frac{1+\lambda\cos k}{\sqrt{1+\lambda^2+2\lambda\cos k}}$$

A soma pode ser avaliada usando o limite contínuo:

$$\sum_k \longrightarrow \frac{L}{2\pi}\int dk \,,$$

onde L é o volume do sistema, $L=(2N+1)a$

A magnetização por unidad de volume é

$$\frac{1}{L}\langle S_3 \rangle = m_3 = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} dk \, \frac{1+\lambda\cos k}{\sqrt{1+\lambda^2+2\lambda\cos k}}$$

Valores especiais:

$m_3(0) = 1$,

$m_3(1.) = \frac{2}{\pi}$,

$m_3(\infty) = 0$.