

Centro de Matemática da Universidade do Porto
 Centro de Física do Porto

Curso Livre sobre Teoria do Campo

Aviso... Este texto é provisório e destina-se ao uso dos participantes do Curso Livre. Não reclama qualquer tipo de originalidade e pode conter erros. Agradeço qualquer tipo de crítica ou sugestão.

Modelo de Ising

João Nuno Tavares¹

Índice:

1	Modelo de Ising	1
2	Observáveis	4
3	Função de correlação	6
4	Matriz de transferência	7
5	Modelo de Ising 1d. Formalismo operacional	14
6	Tabela de analogias entre EQFT e Mecânica Estatística Clássica	19

1 Modelo de Ising

Consideremos a rede discreta $\Lambda = \mathbf{Z}^d$ e o conjunto:

$$\Omega \stackrel{\text{def}}{=} \{ \phi : \Lambda \longrightarrow \{-1, +1\} \} \quad (1.1)$$

de todas as *configurações de spin*. Ao valor $\phi(\mathbf{s}) \in \{\pm 1\}$, $\mathbf{s} \in \Lambda$, chamamos o (*valor de*) *spin no sítio* \mathbf{s} da rede.

¹Centro de Matemática da Universidade do Porto; jntavar@fc.up.pt; Work supported by *Fundação para a Ciência e a Tecnologia* (FCT) through the *Centro de Matemática da Universidade do Porto* (CMUP). Available as a PDF file from <http://www.fc.up.pt/cmup>.

Para um subconjunto $V \subset \Lambda$, representámos por $\phi_V : V \rightarrow \mathcal{S}$, a restrição de ϕ a V , e por Ω_V o conjunto de todas as configurações definidas em V . Quando V é um subconjunto finito com N elementos existem 2^N configurações possíveis em V . O Hamiltoniano é definido por:

$$\boxed{\mathcal{H}(\phi) \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{s} \in \Lambda} \mathcal{J}(\mathbf{r}, \mathbf{s}) \phi(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{s})} \quad (1.2)$$

onde:

$$\mathcal{J}(\mathbf{r}, \mathbf{s}) = \begin{cases} \mathcal{J} & \text{se } \mathbf{r} \text{ e } \mathbf{s} \text{ são sítios vizinhos, i.e., } \|\mathbf{r} - \mathbf{s}\| = 1 \\ 0 & \text{nos outros casos} \end{cases} \quad (1.3)$$

Note que a interacção entre spins vizinhos $\mathbf{r}, \mathbf{s} \in \Lambda$, é dada por:

$$-\mathcal{J} \phi(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{s}) = \begin{cases} -\mathcal{J} & \text{se os spins estão alinhados} \\ +\mathcal{J} & \text{se são opostos} \end{cases}$$

Portanto, se $\mathcal{J} > 0$, obtemos uma energia mais baixa para configurações *magnetizadas*, i.e., com um grande número de spins alinhados. Em particular, a *energia do vácuo*, isto é, a energia mínima, é a que corresponde às configurações em que todos os spins estão alinhados - ou $\phi(\mathbf{s}) \equiv -1$ ou $\phi(\mathbf{s}) \equiv +1, \forall \mathbf{s} \in \Lambda$. Temos pois duas configurações possíveis (vácuo degenerado).

Quando $\mathcal{J} > 0$ o modelo diz-se *ferromagnético* e quando $\mathcal{J} < 0$ *antiferromagnético*. É claro que o modelo é invariante por translacções e admite uma simetria $G = \mathbf{Z}_2$, isto é, \mathcal{H} é invariante pelo grupo com dois elementos: Id e a simetria τ definida por $(\tau\phi)(\mathbf{s}) = -\phi(\mathbf{s})$.

O modelo definido pelo Hamiltoniano:

$$\boxed{\mathcal{H}(\phi) \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{s} \in \Lambda} \mathcal{J}(\mathbf{r}, \mathbf{s}) \phi(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{s}) - \sum_{\mathbf{s} \in \Lambda} B(\mathbf{s}) \phi(\mathbf{s})} \quad (1.4)$$

diz-se o *modelo de Ising com campo externo* $B : \Lambda \rightarrow \mathbb{R}$. Neste caso, o modelo é invariante apenas por translacções. Usualmente $B \equiv$ constante.

Por exemplo, para a rede unidimensional $\Lambda = \mathbf{Z}$, e com condições de fronteira periódicas $\phi(0) = \phi(N), \forall \phi$, o que equivale a considerar uma rede circular Λ_N , com N pontos (o chamado *anel de Ising*), o Hamiltoniano é dado por:

$$\mathcal{H}(\phi) = -\mathcal{J} \sum_{s=0}^{N-1} \phi(s) \phi(s+1) - \sum_{s=0}^{N-1} B(s) \phi(s) \quad (1.5)$$

Para a rede bidimensional $\Lambda = \mathbf{Z}^2$, também com condições de fronteira periódicas:

$$\begin{aligned} \phi(r, 0) &= \phi(r, m), & r &= 0, 2, \dots, n-1 \\ \phi(0, s) &= \phi(n, s), & s &= 1, 2, \dots, m-1, \quad \forall \phi \end{aligned}$$

o que equivale a considerar uma rede toroidal com $N = mn$ pontos (o chamado *Toro de Ising*), o Hamiltoniano é dado por:

$$\mathcal{H}(\phi) = -\mathcal{J} \left(\sum_{r=0}^{n-1} \sum_{s=0}^{m-1} \phi(r, s) \phi(r, s+1) + \sum_{s=0}^{m-1} \sum_{r=0}^{n-1} \phi(r, s) \phi(r+1, s) \right) - \sum_{r=0}^{n-1} \sum_{s=0}^{m-1} B(r, s) \phi(r, s) \quad (1.6)$$

Consideremos agora, para cada valor de $\beta = \frac{1}{T} > 0$, onde T é a temperatura, o estado de equilíbrio definido pela medida de probabilidade de Gibbs:

$$p_\beta(\phi) = \frac{e^{-\beta\mathcal{H}(\phi)}}{\mathcal{Z}(\beta)} \quad (1.7)$$

onde $\mathcal{Z}(\beta)$ é a função de partição do modelo, definida por:

$$\mathcal{Z}_N(\beta) = \mathcal{Z}_N(\beta, \mathcal{J}, B) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{\phi \in \Omega} e^{-\beta\mathcal{H}(\phi)} \quad (1.8)$$

O sinal – em (1.7), implica que os estados com energia mais baixa são mais prováveis. Um valor pequeno de β (i.e., temperatura elevada) tende a uniformizar a distribuição, tornando todas as configurações sensivelmente equiprováveis, enquanto que um valor elevado de β (i.e., temperatura baixa) tende a acentuar as probabilidades dos estados com energia mais baixa.

O modelo de Ising diz-se *exactamente solúvel* se pudermos calcular exactamente a sua função de partição \mathcal{Z} . Apesar da sua aparente simplicidade, de momento apenas se sabe que o modelo unidimensional e o modelo bidimensional, na ausência do campo externo B , são exactamente solúveis! É claro que a dificuldade reside no facto de o número total de configurações, 2^N , ser muito grande quando N é grande.

A título de exemplo, analisemos o modelo de Ising unidimensional linear, também chamado *cadeia linear* de Ising, na ausência do campo B (isto é, fazendo $B = 0$), e com apenas dois spins ($N = 2$) (com condições de fronteira livres). Neste caso, há quatro configurações possíveis, que representámos por:

$$\begin{aligned} \phi_1 &= \{\uparrow, \uparrow\} = \{+1, +1\} & \phi_2 &= \{\uparrow, \downarrow\} = \{+1, -1\} \\ \phi_3 &= \{\downarrow, \uparrow\} = \{-1, +1\} & \phi_4 &= \{\downarrow, \downarrow\} = \{-1, -1\} \end{aligned}$$

cujas energias são:

$$\mathcal{H}(\phi_1) = \mathcal{H}(\phi_4) = -\mathcal{J}, \quad \mathcal{H}(\phi_2) = \mathcal{H}(\phi_3) = +\mathcal{J}$$

A correspondente função de partição é dada por:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_2 &= e^{\beta\mathcal{J}} + e^{-\beta\mathcal{J}} + e^{-\beta\mathcal{J}} + e^{\beta\mathcal{J}} \\ &= 2e^K + 2e^{-K}, \quad \text{onde } K = \beta\mathcal{J} \\ &= 4 \cosh(K) \end{aligned} \quad (1.9)$$

Anàlogamente, para um modelo linear com três spins ($N = 3$), há $2^3 = 8$ configurações possíveis e um cálculo directo mostra que:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_3 &= 2e^{2K} + 2e^{-2K} + 4 \\ &= 2(e^K + e^{-K})^2 = 8(\cosh \beta\mathcal{J})^2 \\ &= (e^K + e^{-K}) \mathcal{Z}_2 = (2 \cosh K) \mathcal{Z}_2 \end{aligned} \quad (1.10)$$

Esta última relação entre \mathcal{Z}_3 e \mathcal{Z}_2 , sugere a seguinte fórmula de recorrência (para o modelo de Ising linear com condições de fronteira livres):

$$\mathcal{Z}_N = (2 \cosh K) \mathcal{Z}_{N-1} \quad (1.11)$$

que pode ser verificada com um cálculo simples. Portanto:

$$\mathcal{Z}_N(\beta) = 2^N (\cosh K)^{N-1}, \quad K = \beta\mathcal{J} \quad (1.12)$$

2 Observáveis

A função de partição $\mathcal{Z}(\beta) = \sum_{\phi \in \Omega} e^{-\beta \mathcal{H}(\phi)}$ tem uma importância crucial em Mecânica Estatística, já que quantidades observáveis macroscópicas estão genéricamente relacionadas com derivadas de \mathcal{Z} .

Mas antes de vermos isto, convém interpretarmos os modelos que temos vindo a analisar, em particular o modelo de Ising, de um outro ponto de vista. Para cada $\mathbf{s} \in \mathbf{Z}^d$, podemos definir a variável aleatória *spin em s*, $\phi_{\mathbf{s}} : \Omega \rightarrow \mathcal{T}$, através de:

$$\phi_{\mathbf{s}}(\phi) = \phi(\mathbf{s}), \quad \phi \in \Omega \quad (2.1)$$

Desta forma o modelo é visto como um *campo estocástico* $\{\phi_{\mathbf{s}}\}_{\mathbf{s} \in \mathbf{Z}^d}$, definido no espaço de probabilidade Ω , munido da medida de Gibbs.

Consideremos, em particular, o modelo de Ising, com a distribuição de Gibbs, definida num volume finito $V \subset \Lambda$, usualmente um hipercubo $[0, L]^d$. Podemos então definir:

- *Energia livre* (de Boltzman) $\mathcal{F}(\beta)$:

$$\boxed{\mathcal{F}(\beta) = -\frac{1}{\beta} \log \mathcal{Z}(\beta)} \quad (2.2)$$

- *Energia livre por spin, no limite termodinâmico*, f_{∞} :

$$\boxed{f_{\infty}(\beta) = -\frac{1}{\beta} \lim_{|V| \rightarrow \infty} \frac{1}{|V|} \log \mathcal{Z}(\beta)}$$
(2.3)

Por exemplo, para o modelo de Ising linear, tem-se:

$$\begin{aligned} f_{\infty}(\beta) &= -\frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \left[2^N (\cosh \beta \mathcal{J})^{N-1} \right] \\ &= -\frac{1}{\beta} \log (2 \cosh \beta \mathcal{J}) \end{aligned} \quad (2.4)$$

que é uma função analítica de $\beta = 1/T$, para $T > 0$, o que traduz o facto de que *o modelo de Ising linear não exhibe transição de fase*.

- *Energia interna* $U = U(\beta, V, B, \mathcal{J}) \dots$ é o valor médio de \mathcal{H} :

$$\boxed{U = \langle \mathcal{H} \rangle_{\beta} = \frac{1}{\mathcal{Z}(\beta)} \sum_{\phi \in \Omega} \mathcal{H}(\phi) e^{-\beta \mathcal{H}(\phi)}} \quad (2.5)$$

- *Spin total* ... é a variável aleatória $S = S(\beta, B, V, \mathcal{J}) : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, definida por:

$$\boxed{S = \sum_{\mathbf{s}} \phi_{\mathbf{s}}} \quad \text{isto é} \quad S(\phi) = \sum_{\mathbf{s}} \phi_{\mathbf{s}}(\phi) = \sum_{\mathbf{s}} \phi(\mathbf{s}) \quad (2.6)$$

- *Magnetização em s* $\in V \dots$ é o valor esperado da variável aleatória $\phi_{\mathbf{s}}$:

$$\boxed{M(\mathbf{s}) = \langle \phi_{\mathbf{s}} \rangle_{\beta} = \frac{1}{\mathcal{Z}(\beta)} \sum_{\phi \in \Omega} \phi(\mathbf{s}) e^{-\beta \mathcal{H}(\phi)}} \quad (2.7)$$

Num modelo de Ising com campo externo variável $B(\mathbf{s})$, e Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}(\phi) = -\mathcal{J} \sum_{[ss']} \phi(\mathbf{s}) \phi(\mathbf{s}') - \sum_{\mathbf{s} \in \Lambda} B(\mathbf{s}) \phi(\mathbf{s}) \quad (2.8)$$

um cálculo directo mostra que:

$$\boxed{M(\mathbf{s}) = -\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial B(\mathbf{s})}} \quad (2.9)$$

- *Magnetização (total)* $M \dots$ é o valor esperado do spin total S :

$$M = \langle S \rangle_\beta = \sum_{\mathbf{s} \in V} M(\mathbf{s}) = \sum_{\mathbf{s} \in V} \langle \phi_{\mathbf{s}} \rangle_\beta = \frac{1}{Z(\beta)} \sum_{\phi \in \Omega} \sum_{\mathbf{s} \in V} \phi(\mathbf{s}) e^{-\beta \mathcal{H}(\phi)} \quad (2.10)$$

- *Magnetização média por spin*:

$$m = \frac{M}{|V|} = \frac{1}{|V|} \langle \sum_{\mathbf{s}} \phi_{\mathbf{s}} \rangle_\beta \quad (2.11)$$

Num modelo de Ising com campo externo constante B , e Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}(\phi) = -\mathcal{J} \sum_{[ss']} \phi(\mathbf{s}) \phi(\mathbf{s}') - B \sum_{\mathbf{s} \in \Lambda} \phi(\mathbf{s}) \quad (2.12)$$

um cálculo directo mostra que:

$$m = -\frac{1}{|V|} \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial B} \quad (2.13)$$

Consideremos a magnetização média por spin como uma função de $T = 1/\beta$ e B (constante): $m = m(T, B)$. Se, para uma temperatura constante T , o limite de m , quando $B \rightarrow 0$, é não nulo:

$$\lim_{B \rightarrow 0} m(T, B) \neq 0, \quad T \text{ constante} \quad (2.14)$$

diz-se que existe *magnetização espontânea* à temperatura T . Para modelos de Ising, isto acontece apenas para temperaturas T , inferiores a uma certa *temperatura crítica* T_c (no modelo de Ising unidimensional $T_c = 0$, como veremos). Para $T > T_c$, $\lim_{B \rightarrow 0} m(T, B) = 0$ e não há magnetização espontânea.

O fenómeno de magnetização espontânea, para um certo $T < T_c$, indica que o estado de equilíbrio do sistema não herdou a simetria \mathbf{Z}_2 do Hamiltoniano (recordemos que, para $B = 0$, \mathcal{H} tem simetria \mathbf{Z}_2 - permuta de spins up \leftrightarrow down). Diz-se portanto que, para $T < T_c$, a simetria foi *quebrada espontaneamente*. m serve de *parâmetro de ordem (local)*, permitindo distinguir as duas fases do sistema.

Quando $T \rightarrow T_c^-$, m anula-se. Em muito sistemas físicos, em particular nos modelos de Ising, anula-se como uma potência²:

$$m(T) \sim (T_c - T)^\beta, \quad \text{quando } T \rightarrow T_c^- \quad (2.15)$$

onde β é o chamado *expoente crítico de magnetização*. Para o modelo de Ising bidimensional $\beta = 1/8$.

- *Magnetização média, no limite termodinâmico*:

$$\mathbf{m}_\infty = \lim_{|V| \rightarrow \infty} \frac{M}{|V|} \quad (2.16)$$

² Símbolos de Landau:

- $f(t) = O(g(t))$, quando $t \rightarrow a$, significa que $f(t)/g(t)$ é limitada quando $t \rightarrow a$.
- $f(t) = o(g(t))$, quando $t \rightarrow a$, significa que $f(t)/g(t) \rightarrow 0$, quando $t \rightarrow a$.
- $f(t) \sim g(t)$, quando $t \rightarrow a$, significa que $f(t)/g(t) \rightarrow 1$, quando $t \rightarrow a$.
- $f(t) \propto g(t)$ (proporcionalidade assintótica), significa que $f(t) \sim kg(t)$, para alguma constante não nula.

- *Susceptibilidade magnética por spin ...* indica como a magnetização média (por spin) responde a um campo externo “infinitesimal”:

$$\begin{aligned}
\chi &\stackrel{\text{def}}{=} \left. \frac{\partial m}{\partial B} \right|_{B=0} \\
&= \frac{\beta}{|V|} \{ \langle S^2 \rangle_\beta - \langle S \rangle_\beta^2 \} \\
&= \frac{\beta}{|V|} \text{Var}(S)
\end{aligned} \tag{2.17}$$

Esta fórmula mostra que a susceptibilidade magnética é proporcional à variância do spin total e mede as suas flutuações.

3 Função de correlação

Dados dois pontos quaisquer $\mathbf{r}, \mathbf{s} \in \Lambda$, define-se a *função de correlação* $C_\beta(\mathbf{r}, \mathbf{s})$ através de:

$$C_\beta(\mathbf{r}, \mathbf{s}) = \langle \phi_{\mathbf{r}} \phi_{\mathbf{s}} \rangle_\beta = \frac{1}{Z(\beta)} \sum_{\phi \in \Omega} \phi(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{s}) e^{-\beta \mathcal{H}(\phi)} \tag{3.1}$$

quer não é mais do que a correlação entre os spins em \mathbf{r} e \mathbf{s} , respectivamente, e portanto mede a influência recíproca entre esses dois spins.

Os spins em \mathbf{r} e \mathbf{s} não estão correlacionados quando $\langle \phi_{\mathbf{r}} \phi_{\mathbf{s}} \rangle_\beta = \langle \phi_{\mathbf{r}} \rangle_\beta \langle \phi_{\mathbf{s}} \rangle_\beta$. É por isso preferível medir a correlação entre os spins em \mathbf{r} e \mathbf{s} , através da *função de correlação conexa*, *covariância* ou *função de Green* $G_\beta(\mathbf{r}, \mathbf{s})$, definida por:

$$G_\beta(\mathbf{r}, \mathbf{s}) = \langle \phi_{\mathbf{r}} \phi_{\mathbf{s}} \rangle_\beta - \langle \phi_{\mathbf{r}} \rangle_\beta \langle \phi_{\mathbf{s}} \rangle_\beta \tag{3.2}$$

de tal forma que os spins em \mathbf{r} e \mathbf{s} não estão correlacionados quando $G_\beta(\mathbf{r}, \mathbf{s}) = 0$.

Quando a distância $|\mathbf{s} - \mathbf{r}|$ cresce é de esperar que a correlação decresça, para $\beta = 1/T$ constante. Por outro lado, a função de correlação $G_\beta(\mathbf{r}, \mathbf{s})$, como função da temperatura $T = 1/\beta$, e para uma distância $|\mathbf{s} - \mathbf{r}|$ fixa, aumenta quando $T \rightarrow 0$ (ou $\beta \rightarrow \infty$).

Num modelo de Ising com campo externo variável B , e Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}(\phi) = -\mathcal{J} \sum_{[ss']} \phi(\mathbf{s}) \phi(\mathbf{s}') - \sum_{\mathbf{s} \in \Lambda} B(\mathbf{s}) \phi(\mathbf{s}) \tag{3.3}$$

um cálculo directo mostra que:

$$G_\beta(\mathbf{r}, \mathbf{s}) = -\frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial B(\mathbf{r}) \partial B(\mathbf{s})} \tag{3.4}$$

É claro que, para o modelo de Ising, $M(\mathbf{s}) = \langle \phi_{\mathbf{s}} \rangle_\beta \equiv \mathbf{m}$, constante $\forall \mathbf{s} \in \Lambda$, e $G_\beta(\mathbf{r}, \mathbf{s}) = \langle \phi_{\mathbf{r}} \phi_{\mathbf{s}} \rangle_\beta - \mathbf{m}^2$. Por invariância sob translações, é claro que:

$$G_\beta(\mathbf{r}, \mathbf{s}) = G_\beta(\mathbf{r} - \mathbf{s})$$

e portanto basta considerar a função:

$$\Gamma(\mathbf{r}) \stackrel{\text{def}}{=} G_\beta(\mathbf{0}, \mathbf{r}) = \langle \phi_{\mathbf{0}} \phi_{\mathbf{r}} \rangle_\beta - \langle \phi_{\mathbf{0}} \rangle_\beta \langle \phi_{\mathbf{r}} \rangle_\beta \tag{3.5}$$

A temperaturas muito elevadas, o que se espera é que as flutuações térmicas dominem a eventual tendência que spins distantes tenham para cooperar. De facto, o que se observa é que, para $T > T_c$, $\Gamma(\mathbf{r})$ decai exponencialmente com a distância entre spins:

$$\Gamma(\mathbf{r}) \sim e^{-\frac{|\mathbf{r}|}{\xi(T)}}, \quad \text{para } T > T_c \text{ e } |\mathbf{r}| \text{ grande} \quad (3.6)$$

onde $\xi(T)$ representa o *comprimento de correlação* do sistema. $\xi(T)$ é pois uma medida do tamanho dos agregados de spins que cooperam entre si, i.e., que se correlacionam uns com os outros. Para altas temperaturas, $\xi(T)$, medido em unidades da malha da rede, é aproximadamente 1. Para temperaturas $T < T_c$:

$$\Gamma(\mathbf{r}) \sim \langle \phi_{\mathbf{0}} \rangle_{\beta}^2, \quad |\mathbf{r}| \gg 1$$

Agora já não existem correlações de longo alcance e o sistema aparece magnetizado. Por exemplo, no modelo de Ising $\Gamma(\mathbf{r}) = G(\mathbf{0}, \mathbf{r})$ é exponencialmente pequena.

Na temperatura crítica T_c , $\Gamma(\mathbf{r})$ decai como uma potência da distância $|\mathbf{r}|$ entre spins:

$$\Gamma(\mathbf{r}) \sim |\mathbf{r}|^{-(d-2+\eta)}, \quad \text{para } T = T_c \text{ e } |\mathbf{r}| \text{ grande} \quad (3.7)$$

onde η é um outro expoente crítico (no modelo de Ising $2d$, $\eta = 1/4$). Portanto, “*apenas na temperatura crítica é que o sistema tem correlações de longo alcance*”, facto que desempenhará um papel essencial em QFT.

Para que as equações (3.6) e (3.7) sejam compatíveis, é necessário que o comprimento de correlação $\xi(T)$ divirja, quando $T \rightarrow T_c^+$, isto é:

$$\xi(T) \sim (T - T_c)^{-\nu} \quad (3.8)$$

onde ν é um outro expoente crítico ($\nu = 1$ no modelo de Ising $2d$).

Algumas conclusões a tirar:

- Na temperatura crítica T_c , várias funções termodinâmicas exibem um comportamento singular (não analítico).
- Este comportamento singular está relacionado com correlações de longo alcance e com grandes flutuações.
- O comportamento singular pode ser caracterizado por certos expoentes (ou índices) críticos.
- Embora no Hamiltoniano inicial apenas intervêm interações de curto alcance, podem ocorrer fenómenos cooperativos que provocam correlações de longo alcance.

4 Matriz de transferência

Vamos agora expôr o método da *matriz de transferência* que é o análogo do formalismo operacional em QFT.

Consideremos um intervalo “temporal” limitado $I = [a, b] \subset \mathbb{R}$, e uma subdivisão de I em N subintervalos iguais, cada um com comprimento $\epsilon = \frac{b-a}{N}$. Designemos a rede assim obtida por:

$$\Lambda_{\epsilon} = \{t_0 = a < t_1 = a + \epsilon < t_2 = a + 2\epsilon < \dots < t_i = a + i\epsilon < \dots < t_N = b\}$$

Suponhamos que a rede original Λ , é do tipo $\Lambda = \Lambda_\epsilon \times \mathcal{S}$, i.e., é composta por $N + 1$ secções, $\mathcal{S}_i = \{t_i\} \times \mathcal{S}$, $i = 0, \dots, N$, onde \mathcal{S} pode ser um ponto, uma rede linear, plana, etc...

Para cada configuração $\phi \in \Omega$, designemos por:

$$\sigma_i = \phi|_{t_i \times \mathcal{S}}$$

a restrição de ϕ à secção \mathcal{S}_i , de tal forma que $\sigma_i(\mathbf{s}) = \phi(t_i, \mathbf{s})$, $\mathbf{s} \in \mathcal{S}$, e suponhamos ainda que as interacções ocorrem apenas dentro de cada secção e entre secções vizinhas \mathcal{S}_i e \mathcal{S}_{i+1} . O Hamiltoniano de uma configuração $\phi = \{\sigma_0, \sigma_1, \dots, \sigma_N\} \in \Omega$ pode então ser escrito na forma:

$$\mathcal{H}(\phi) = \sum_{i=0}^{N-1} \mathcal{E}(\sigma_i, \sigma_{i+1}) + \sum_{i=0}^N \mathcal{V}(\sigma_i) \quad (4.1)$$

Suponhamos, em primeiro lugar, que *fixámos as configurações de fronteira* σ_0 e σ_N . A função de partição correspondente é então dada por:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}(\sigma_N | \sigma_0) &= \sum_{\{\sigma_1, \dots, \sigma_{N-1}\}} e^{-\beta \{ \sum_{i=0}^N \mathcal{V}(\sigma_i) + \sum_{i=0}^{N-1} \mathcal{E}(\sigma_i, \sigma_{i+1}) \}} \\ &= \sum_{\{\sigma_1, \dots, \sigma_{N-1}\}} e^{-\beta \mathcal{V}(\sigma_0)/2} e^{-\beta \{ \mathcal{V}(\sigma_0)/2 + \mathcal{E}(\sigma_0, \sigma_1) + \mathcal{V}(\sigma_1)/2 \}} e^{-\beta \{ \mathcal{V}(\sigma_1)/2 + \mathcal{E}(\sigma_1, \sigma_2) + \mathcal{V}(\sigma_2)/2 \}} \dots \\ &\quad \dots e^{-\beta \{ \mathcal{V}(\sigma_{N-1})/2 + \mathcal{E}(\sigma_{N-1}, \sigma_N) + \mathcal{V}(\sigma_N)/2 \}} e^{-\beta \mathcal{V}(\sigma_N)/2} \\ &= e^{-\beta \mathcal{V}(\sigma_0)/2} \left[\sum_{\{\sigma_1, \dots, \sigma_{N-1}\}} T(\sigma_0, \sigma_1) T(\sigma_1, \sigma_2) \dots T(\sigma_{N-1}, \sigma_N) \right] e^{-\beta \mathcal{V}(\sigma_N)/2} \end{aligned} \quad (4.2)$$

Por outro lado, se supômos condições de fronteira periódicas $\sigma_0 = \sigma_N$, e se somármos também sobre as configurações $\sigma_0 = \sigma_N$, obtemos para a correspondente função de partição:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \sum_{\{\sigma_0, \dots, \sigma_{N-1}\}} e^{-\beta \{ \sum_{i=0}^{N-1} \mathcal{E}(\sigma_i, \sigma_{i+1}) + \mathcal{V}(\sigma_i) \}} \\ &= \sum_{\{\sigma_0, \dots, \sigma_{N-1}\}} e^{-\beta \{ \mathcal{V}(\sigma_0)/2 + \mathcal{E}(\sigma_0, \sigma_1) + \mathcal{V}(\sigma_1)/2 \}} e^{-\beta \{ \mathcal{V}(\sigma_1)/2 + \mathcal{E}(\sigma_1, \sigma_2) + \mathcal{V}(\sigma_2)/2 \}} \dots \\ &\quad \dots e^{-\beta \{ \mathcal{V}(\sigma_{N-1})/2 + \mathcal{E}(\sigma_{N-1}, \sigma_0) + \mathcal{V}(\sigma_0)/2 \}} \\ &= \sum_{\{\sigma_0, \dots, \sigma_{N-1}\}} T(\sigma_0, \sigma_1) T(\sigma_1, \sigma_2) \dots T(\sigma_{N-1}, \sigma_0) \end{aligned} \quad (4.3)$$

onde:

$$T(\sigma_i, \sigma_{i+1}) = \exp -\beta \left\{ \mathcal{E}(\sigma_i, \sigma_{i+1}) + \frac{\mathcal{V}(\sigma_i) + \mathcal{V}(\sigma_{i+1})}{2} \right\} \quad (4.4)$$

É conveniente interpretar as fórmulas (4.8) e (4.3) com o formalismo seguinte - consideremos um espaço vectorial \mathbf{V} , gerado por todas as configurações possíveis $\sigma : \mathcal{S} \rightarrow \mathcal{T}$, para as quais usamos a notação de Dirac, notando-as por $|\sigma\rangle$. Neste espaço definimos um operador \mathbf{T} , chamado *operador de transição*, cuja *matriz de transferência*, na base $\{|\sigma\rangle\}$, é definida por:

$$\langle \sigma | \mathbf{T} | \sigma' \rangle = T(\sigma, \sigma') = \exp -\beta \left\{ \mathcal{E}(\sigma, \sigma') + \frac{\mathcal{V}(\sigma) + \mathcal{V}(\sigma')}{2} \right\} \quad (4.5)$$

Com este formalismo a função de partição (4.3) pode ser escrita na forma:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_N(\beta) &= \sum_{\{\sigma_0, \dots, \sigma_{N-1}\}} \langle \sigma_0 | \mathbf{T} | \sigma_1 \rangle \langle \sigma_1 | \mathbf{T} | \sigma_2 \rangle \dots \langle \sigma_{N-1} | \mathbf{T} | \sigma_0 \rangle \\ &= \sum_{\{\sigma_0\}} \langle \sigma_0 | \mathbf{T}^N | \sigma_0 \rangle \\ &= \text{tr } \mathbf{T}^N \end{aligned} \quad (4.6)$$

obtendo-se assim o importante resultado:

$$\boxed{\mathcal{Z}_N(\beta) = \text{tr } \mathbf{T}^N} \quad (4.7)$$

Anàlogamente, (4.8) pode ser escrita na forma:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}(\boldsymbol{\sigma}_N | \boldsymbol{\sigma}_0) &= e^{-\beta \mathcal{V}(\boldsymbol{\sigma}_0)/2} \left[\sum_{\{\boldsymbol{\sigma}_1, \dots, \boldsymbol{\sigma}_{N-1}\}} T(\boldsymbol{\sigma}_0, \boldsymbol{\sigma}_1) T(\boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2) \cdots T(\boldsymbol{\sigma}_{N-1}, \boldsymbol{\sigma}_N) \right] e^{-\beta \mathcal{V}(\boldsymbol{\sigma}_N)/2} \\ &= e^{-\beta \mathcal{V}(\boldsymbol{\sigma}_0)/2} \sum_{\{\boldsymbol{\sigma}_1, \dots, \boldsymbol{\sigma}_{N-1}\}} \langle \boldsymbol{\sigma}_0 | \mathbf{T} | \boldsymbol{\sigma}_1 \rangle \langle \boldsymbol{\sigma}_1 | \mathbf{T} | \boldsymbol{\sigma}_2 \rangle \cdots \langle \boldsymbol{\sigma}_{N-1} | \mathbf{T} | \boldsymbol{\sigma}_N \rangle e^{-\beta \mathcal{V}(\boldsymbol{\sigma}_N)/2} \\ &= \exp \left\{ -\beta \frac{\mathcal{V}(\boldsymbol{\sigma}_0) + \mathcal{V}(\boldsymbol{\sigma}_N)}{2} \right\} \sum_{\{\boldsymbol{\sigma}_1, \dots, \boldsymbol{\sigma}_{N-1}\}} \langle \boldsymbol{\sigma}_0 | \mathbf{T} | \boldsymbol{\sigma}_1 \rangle \langle \boldsymbol{\sigma}_1 | \mathbf{T} | \boldsymbol{\sigma}_2 \rangle \cdots \langle \boldsymbol{\sigma}_{N-1} | \mathbf{T} | \boldsymbol{\sigma}_N \rangle \\ &= \exp \left\{ -\beta \frac{\mathcal{V}(\boldsymbol{\sigma}_0) + \mathcal{V}(\boldsymbol{\sigma}_N)}{2} \right\} \langle \boldsymbol{\sigma}_0 | \mathbf{T}^{N-1} | \boldsymbol{\sigma}_N \rangle \end{aligned} \quad (4.8)$$

A matriz \mathbf{T} é simétrica e portanto diagonalizável com espectro real $\lambda_0 > \lambda_1 \geq \cdots \geq \lambda_D$, onde $D = \dim \mathbf{V}$. Portanto a função de partição (4.7) é dada por:

$$\boxed{\mathcal{Z}_N(\beta) = \sum_{k=0}^D (\lambda_k)^N} \quad (4.9)$$

Além disso, como todas as entradas da matriz \mathbf{T} são positivas, segue-se, do Teorema de Perron Frobenius³, que o valor próprio máximo λ_0 é não degenerado (o seu espaço próprio tem dimensão 1) e é uma função analítica dos seus argumentos. Em particular, no caso presente, λ_0 é pois uma função analítica de $\beta = 1/T > 0$.

Se agora tomámos o limite termodinâmico parcial, fazendo o número de secções N tender para ∞ , obtemos para a energia livre parcial (por secção):

$$\begin{aligned} -\beta \mathcal{F}_D(\beta) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\log \mathcal{Z}_N(\beta)}{N} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \left[\lambda_0^N \left(1 + \sum_{i=1}^D (\lambda_i/\lambda_0)^N \right) \right] \\ &= \log \lambda_0 + \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \left[1 + \sum_{i=1}^D (\lambda_i/\lambda_0)^N \right] \\ &= \log \lambda_0 \end{aligned} \quad (4.10)$$

Para sistemas cuja dimensionalidade q é superior ou igual a 2, devemos calcular um segundo limite, quando $D \rightarrow \infty$, para calcular o limite termodinâmico real.

▷ **Exemplo 4.1 (Modelo de Ising 2d)** ... Como exemplo concreto, consideremos de novo a rede bidimensional quadrada $\Lambda_2 = \{(i, s) \in \mathbf{Z}^2 : 0 \leq i \leq N-1, 0 \leq s \leq M-1\}$, com condições de fronteira periódicas:

$$\begin{aligned} \phi(0, s) &= \phi(N, s), & s &= 0, 2, \dots, M-1 \\ \phi(i, 0) &= \phi(i, M), & i &= 0, 2, \dots, N-1, \quad \forall \phi \end{aligned}$$

³Teorema de Perron Frobenius: “.....”.

o que equivale a considerar uma rede toroidal com MN pontos (o chamado “Toro de Ising”), com Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}(\phi) = -\mathcal{J} \left(\sum_{s=0}^{M-1} \sum_{i=0}^{N-1} \phi(i, s)\phi(i+1, s) + \sum_{i=0}^{N-1} \sum_{s=0}^{M-1} \phi(i, s)\phi(i, s+1) \right) - B \sum_{i=0}^{N-1} \sum_{s=0}^{M-1} \phi(i, s) \quad (4.11)$$

Para cada configuração $\phi : \Lambda_N \rightarrow \{\pm 1\}$, e cada $i = 0, \dots, N-1$, representemos por σ_i a restrição de ϕ à secção (a coluna) i da rede, de tal forma que:

$$\sigma_i(s) = \phi(i, s), \quad s = 0, \dots, M-1 \quad (4.12)$$

Para cada i fixo, existem 2^M configurações σ_i , e portanto o espaço vectorial $\mathbf{V} = \text{span}\{|\sigma\rangle\}$ tem dimensão $D = 2^M$. Cada uma tem a sua própria energia dada por:

$$\begin{aligned} \mathcal{V}(\sigma_i) &= -\mathcal{J} \sum_{s=0}^{M-1} \phi(i, s)\phi(i, s+1) - B \sum_{s=0}^{M-1} \phi(i, s) \\ &= -\mathcal{J} \sum_{s=0}^{M-1} \sigma_i(s)\sigma_i(s+1) - B \sum_{s=0}^{M-1} \sigma_i(s) \end{aligned} \quad (4.13)$$

bem como uma energia de interacção com a secção vizinha $i+1$, dada por:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(\sigma_i, \sigma_{i+1}) &= -\mathcal{J} \sum_{s=0}^{M-1} \phi(i, s)\phi(i+1, s) \\ &= -\mathcal{J} \sum_{s=0}^{M-1} \sigma_i(s)\sigma_{i+1}(s) \end{aligned} \quad (4.14)$$

O Hamiltoniano (4.11) pode então ser escrito na forma (4.1):

$$\mathcal{H}(\phi) = \sum_{i=0}^{N-1} \left[\mathcal{V}(\sigma_i) + \mathcal{E}(\sigma_i, \sigma_{i+1}) \right] \quad (4.15)$$

e portanto a função de partição na forma:

$$\mathcal{Z}_N(\beta) = \text{tr } \mathbf{T}^N \quad (4.16)$$

Aqui \mathbf{V} é o espaço vectorial gerado pelas possíveis $D = 2^M$ configurações σ_i (para i fixo), e a matriz de transferência é a matriz $2^M \times 2^M$, definida por (4.5), isto é:

$$\langle \sigma | \mathbf{T} | \sigma' \rangle = e^{-\beta\{\mathcal{V}(\sigma)/2 + \mathcal{E}(\sigma, \sigma') + \mathcal{V}(\sigma')/2\}} \quad (4.17)$$

onde \mathcal{V} e \mathcal{E} são dadas por (4.13) e (4.14), respectivamente. Para prosseguir a análise temos que calcular o valor próprio máximo de uma matriz simétrica $2^M \times 2^M$!

O cálculo anterior pode ser generalizado para dimensões superiores. Assim por exemplo, para redes cúbicas tridimensionais, definimos as configurações σ_j , em cada plano bidimensional, reconstruindo a rede pelas suas secções planas. Agora $\mathcal{V}(\sigma_j)$ será a energia do plano j enquanto que $\mathcal{E}(\sigma_j, \sigma_{j+1})$ representa a energia de interacção entre dois planos vizinhos.

▷ **Exemplo 4.2 (O anel de Ising)** ... Para $M = 1$, temos um anel de Ising, e a matriz \mathbf{T} é a matriz 2×2 , dada por:

$$\begin{aligned}\langle \sigma | \mathbf{T} | \sigma' \rangle &= e^{\beta \mathcal{J} \sigma \sigma' + \beta B (\sigma + \sigma') / 2} \\ &= e^{K \sigma \sigma' + h (\sigma + \sigma') / 2} \quad \text{onde } \sigma, \sigma' = \pm 1\end{aligned}\quad (4.18)$$

isto é:

$$\begin{aligned}\mathbf{T} &= \begin{bmatrix} \langle -1 | \mathbf{T} | -1 \rangle & \langle -1 | \mathbf{T} | +1 \rangle \\ \langle +1 | \mathbf{T} | -1 \rangle & \langle +1 | \mathbf{T} | +1 \rangle \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} e^{K-h} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K+h} \end{bmatrix}\end{aligned}\quad (4.19)$$

(onde pusemos $K = \beta \mathcal{J}$ e $h = \beta B$). Os valores próprios são:

$$\lambda_0, \lambda_1 = e^K \cosh(h) \pm \sqrt{e^{2K} \sinh^2(h) + e^{-2K}}$$

Em particular, para $h = 0$:

$$\lambda_0 = 2 \cosh K, \quad \lambda_1 = 2 \sinh K$$

e a função de partição é portanto, por (4.9), igual a:

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}_N(K, h = 0) &= (\lambda_0)^N + (\lambda_1)^N \\ &= (2 \cosh K)^N + (2 \sinh K)^N\end{aligned}\quad (4.20)$$

Se N é muito grande, o primeiro termo é muito maior que o segundo e portanto, no limite termodinâmico, como se viu em (4.10), tem-se que:

$$\begin{aligned}-\beta f_\infty &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \mathcal{Z}_N(K, 0) \\ &= \log \lambda_0 \\ &= \log(2 \cosh K)\end{aligned}\quad (4.21)$$

No caso geral, a *energia livre por spin* f_∞ , no limite termodinâmico, é dada por:

$$\begin{aligned}-\beta f_\infty(K, h) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \mathcal{Z}_N(\beta) \\ &= \log \lambda_0 \\ &= \log[e^K \cosh(h) + (e^{2K} \sinh^2(h) + e^{-2K})^{1/2}]\end{aligned}\quad (4.22)$$

■.

Calculemos agora a média de um observável $X_{\mathbf{r}}$, que depende de um sítio fixo $\mathbf{r} \in \mathcal{S}_i$ (por exemplo $X_{\mathbf{r}} = \phi_{\mathbf{r}}$), usando o operador de transição $\mathbf{T} : \mathbf{V} \rightarrow \mathbf{V}$:

$$\langle X_{\mathbf{r}} \rangle_\beta = \frac{1}{\mathcal{Z}(\beta)} \sum_{\phi \in \Omega} X(\mathbf{r}) e^{-\beta \mathcal{H}(\phi)}\quad (4.23)$$

onde $\mathcal{H}(\phi)$, para $\phi = \{\sigma_0, \sigma_1, \dots, \sigma_{N-1}\} \in \Omega$, é do tipo (4.1):

$$\mathcal{H}(\phi) = \sum_{i=0}^{N-1} \left[\mathcal{V}(\sigma_i) + \mathcal{E}(\sigma_i, \sigma_{i+1}) \right]$$

e estamos a supôr que $\sigma_0 = \sigma_N$ e que $\mathcal{T} \subset \mathbb{R}$.

Procedendo de forma análoga à que foi usada para deduzir (4.8), podemos escrever:

$$\begin{aligned} \langle X_{\mathbf{r}} \rangle_{\beta} &= \sum_{\{\sigma_0, \dots, \sigma_{N-1}\}} X(\mathbf{r}) e^{-\beta \sum_{i=0}^{N-1} [\mathcal{V}(\sigma_i) + \mathcal{E}(\sigma_i, \sigma_{i+1})]} \\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \sum_{\{\sigma_0, \dots, \sigma_{N-1}\}} e^{-\beta \{\mathcal{V}(\sigma_0)/2 + \mathcal{E}(\sigma_0, \sigma_1) + \mathcal{V}(\sigma_1)/2\}} \dots X(\mathbf{r}) e^{-\beta \{\mathcal{V}(\sigma_i)/2 + \mathcal{E}(\sigma_i, \sigma_{i+1}) + \mathcal{V}(\sigma_i)/2\}} \dots \\ &\quad \dots e^{-\beta \{\mathcal{V}(\sigma_N)/2 + \mathcal{E}(\sigma_N, \sigma_1) + \mathcal{V}(\sigma_1)/2\}} \\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \sum_{\{\sigma_0, \dots, \sigma_{N-1}\}} \langle \sigma_0 | \mathbf{T} | \sigma_1 \rangle \dots \langle \sigma_{i-1} | \mathbf{T} | \sigma_i \rangle X(\mathbf{r}) \langle \sigma_i | \mathbf{T} | \sigma_{i+1} \rangle \dots \langle \sigma_{N-1} | \mathbf{T} | \sigma_0 \rangle \end{aligned} \quad (4.24)$$

Se $\mathbf{X}_{\mathbf{r}} : \mathbf{V} \rightarrow \mathbf{V}$ é o operador diagonal que representa o observável local $X_{\mathbf{r}}$, de tal forma que:

$$\mathbf{X}_{\mathbf{r}} |\sigma\rangle = X(\mathbf{r}) |\sigma\rangle \quad (4.25)$$

podemos escrever (4.24) na forma:

$$\begin{aligned} \langle X_{\mathbf{r}} \rangle_{\beta} &= \mathcal{Z}_N^{-1} \sum_{\{\sigma_0, \dots, \sigma_{N-1}\}} \langle \sigma_0 | \mathbf{T} | \sigma_1 \rangle \dots \langle \sigma_{i-1} | \mathbf{T} \mathbf{X}_{\mathbf{r}} | \sigma_i \rangle \langle \sigma_i | \mathbf{T} | \sigma_{i+1} \rangle \dots \langle \sigma_{N-1} | \mathbf{T} | \sigma_0 \rangle \\ &= \mathcal{Z}_N^{-1} \text{tr} \mathbf{T}^i \mathbf{X}_{\mathbf{r}} \mathbf{T}^{N-i} \end{aligned}$$

e como o traço é cíclico e atendendo a que $\mathcal{Z} = \text{tr} \mathbf{T}^N$, obtemos finalmente:

$$\boxed{\langle X_{\mathbf{r}} \rangle_{\beta} = \frac{\text{tr}(\mathbf{T}^N \mathbf{X}_{\mathbf{r}})}{\text{tr} \mathbf{T}^N}} \quad (4.26)$$

Calculemos agora as funções de correlação usando o operador de transição \mathbf{T} . Consideremos dois sítios $\mathbf{r} \in \mathcal{S}_i$, na secção i , e $\mathbf{s} \in \mathcal{S}_{i+n}$, na secção $i+n$, e calculemos a correlação $\langle \phi_{i,\mathbf{r}} \phi_{i+n,\mathbf{s}} \rangle_{\beta}$, usando o operador $\mathbf{T} : \mathbf{V} \rightarrow \mathbf{V}$:

$$\langle \phi_{i,\mathbf{r}} \phi_{i+n,\mathbf{s}} \rangle_{\beta} = \frac{1}{\mathcal{Z}(\beta)} \sum_{\phi \in \Omega} \phi(i, \mathbf{r}) \phi(i+n, \mathbf{s}) e^{-\beta \mathcal{H}(\phi)} \quad (4.27)$$

onde $\mathcal{H}(\phi)$, para $\phi = \{\sigma_0, \sigma_1, \dots, \sigma_{N-1}\} \in \Omega$, é do tipo (4.1):

$$\mathcal{H}(\phi) = \sum_{i=0}^{N-1} \left[\mathcal{V}(\sigma_i) + \mathcal{E}(\sigma_i, \sigma_{i+1}) \right]$$

e estamos a supôr mais uma vez que $\sigma_0 = \sigma_N$ e que $\mathcal{T} \subset \mathbb{R}$.

Procedendo de forma análoga à que foi usada para deduzir (4.8), podemos escrever:

$$\langle \phi_{i,\mathbf{r}} \phi_{i+n,\mathbf{s}} \rangle_{\beta} = \sum_{\{\sigma_0, \dots, \sigma_{N-1}\}} \sigma_i(\mathbf{r}) \sigma_{i+n}(\mathbf{s}) e^{-\beta \sum_{i=0}^{N-1} [\mathcal{V}(\sigma_i) + \mathcal{E}(\sigma_i, \sigma_{i+1})]}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \sum_{\{\sigma_0, \dots, \sigma_{N-1}\}} e^{-\beta\{\mathcal{V}(\sigma_0)/2 + \mathcal{E}(\sigma_0, \sigma_1) + \mathcal{V}(\sigma_1)/2\}} \dots \sigma_i(\mathbf{r}) e^{-\beta\{\mathcal{V}(\sigma_i)/2 + \mathcal{E}(\sigma_i, \sigma_{i+1}) + \mathcal{V}(\sigma_{i+1})/2\}} \dots \\
&\quad \dots \sigma_{i+n}(\mathbf{s}) e^{-\beta\{\mathcal{V}(\sigma_{i+n})/2 + \mathcal{E}(\sigma_{i+n}, \sigma_{i+n+1}) + \mathcal{V}(\sigma_{i+n})/2\}} \dots e^{-\beta\{\mathcal{V}(\sigma_{N-1})/2 + \mathcal{E}(\sigma_{N-1}, \sigma_0) + \mathcal{V}(\sigma_0)/2\}} \\
&= \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \sum_{\{\sigma_0, \dots, \sigma_{N-1}\}} \langle \sigma_0 | \mathbf{T} | \sigma_1 \rangle \dots \langle \sigma_{i-1} | \mathbf{T} | \sigma_i \rangle \sigma_i(\mathbf{r}) \langle \sigma_i | \mathbf{T} | \sigma_{i+1} \rangle \dots \\
&\quad \dots \langle \sigma_{i+n-1} | \mathbf{T} | \sigma_{i+n} \rangle \sigma_{i+n}(\mathbf{s}) \langle \sigma_{i+n} | \mathbf{T} | \sigma_{i+n+1} \rangle \dots \langle \sigma_{N-1} | \mathbf{T} | \sigma_0 \rangle
\end{aligned} \tag{4.28}$$

Definindo um operador diagonal $\mathbf{S}_r : \mathbf{V} \rightarrow \mathbf{V}$, através de $\mathbf{S}_r |\sigma\rangle = \sigma(\mathbf{r}) |\sigma\rangle$, podemos escrever (4.28) na forma:

$$\begin{aligned}
\langle \phi_{i,\mathbf{r}} \phi_{i+n,\mathbf{s}} \rangle_\beta &= \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \sum_{\{\sigma_0, \dots, \sigma_{N-1}\}} \langle \sigma_0 | \mathbf{T} | \sigma_1 \rangle \dots \langle \phi_{i-1} | \mathbf{T} \mathbf{S}_r | \sigma_i \rangle \langle \phi_i | \mathbf{T} | \sigma_{i+1} \rangle \dots \\
&\quad \dots \langle \phi_{i+n-1} | \mathbf{T} \mathbf{S}_s | \sigma_{i+n} \rangle \langle \sigma_{i+n} | \mathbf{T} | \sigma_{i+n+1} \rangle \dots \langle \sigma_{N-1} | \mathbf{T} | \sigma_0 \rangle \\
&= \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \text{tr } \mathbf{T}^i \mathbf{S}_r \mathbf{T}^n \mathbf{S}_s \mathbf{T}^{N-(i+n)}
\end{aligned}$$

e como o traço é cíclico e atendendo a que $\mathcal{Z} = \text{tr } \mathbf{T}^N$, obtemos finalmente:

$$\boxed{\langle \phi_{i,\mathbf{r}} \phi_{i+n,\mathbf{s}} \rangle_\beta = \frac{\text{tr}(\mathbf{S}_r \mathbf{T}^n \mathbf{S}_s \mathbf{T}^{N-n})}{\text{tr } \mathbf{T}^N}} \tag{4.29}$$

▷ **Exemplo 4.3** ... Como aplicação, analisemos agora o caso do anel de Ising com N spins, com campo externo nulo ($h = 0$), por simplicidade. Por invariância sob translações, basta calcular $\langle \phi_0 \phi_n \rangle$. Com o Hamiltoniano dado por (1.5), vem que:

$$\begin{aligned}
\langle \phi_0 \phi_n \rangle |_{(K, h=0)} &= \frac{\text{tr}(S_0 \mathbf{T}^n S_n \mathbf{T}^{N-n})}{\text{tr } \mathbf{T}^N} \\
&= \dots \\
&= \frac{\tanh^n K + \tanh^{N-n} K}{1 + \tanh^N K} \\
&\rightarrow \tanh^n K, \quad \text{quando } N \rightarrow \infty
\end{aligned} \tag{4.30}$$

De facto, para $h = 0$ a matriz de transferência é:

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}(K) = \begin{bmatrix} e^K & e^{-K} \\ e^{-K} & e^K \end{bmatrix} = e^K \mathbf{1} + e^{-K} \boldsymbol{\sigma}_1$$

onde usámos as chamadas **matrizes de Pauli** $\boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2, \boldsymbol{\sigma}_3$, definidas por:

$$\boldsymbol{\sigma}_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{4.31}$$

\mathbf{T} é simétrica e pode ser diagonalizada pela matriz ortogonal:

$$\mathbf{U} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{1} + i \boldsymbol{\sigma}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$$

obtendo-se:

$$\mathbf{U} \mathbf{T} \mathbf{U}^{-1} = e^K \mathbf{1} + e^{-K} \boldsymbol{\sigma}_3 = 2 \begin{bmatrix} \cosh K & 0 \\ 0 & \sinh K \end{bmatrix}$$

Por outro lado, o operador de spin é representado pela matriz σ_3 :

$$\mathbf{S}_0 = \mathbf{S}_n = \sigma_3$$

e como:

$$\mathbf{U}\tau_3\mathbf{U}^{-1} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

obtemos finalmente que:

$$\begin{aligned} \langle \phi_0 \phi_n \rangle |_{(K, h=0)} &= \frac{\text{tr} (S_0 \mathbf{T}^n S_n \mathbf{T}^{N-n})}{\text{tr} \mathbf{T}^N} \\ &= \frac{\text{tr} \left[(\mathbf{U}\tau_3\mathbf{U}^{-1})(\mathbf{U}\mathbf{T}\mathbf{U}^{-1})^n (\mathbf{U}\tau_3\mathbf{U}^{-1})(\mathbf{U}\mathbf{T}\mathbf{U}^{-1})^{N-n} \right]}{\text{tr} (\mathbf{U}\mathbf{T}\mathbf{U}^{-1})^N} \\ &= \frac{\tanh^n K + \tanh^{N-n} K}{1 + \tanh^N K} \\ &\rightarrow \tanh^n K, \quad \text{quando } N \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (4.32)$$

Portanto;

$$\Gamma(n) = G_\beta(0, n) = \langle \phi_0 \phi_n \rangle = \tanh^n K \quad (4.33)$$

e o comprimento de correlação é:

$$\begin{aligned} \xi^{-1} &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left(-\frac{1}{n} \log \Gamma(n) \right) \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left(-\frac{1}{n} \log \tanh^n K \right) \\ &= -\log \tanh K \end{aligned}$$

isto é:

$$\xi(T) = \frac{1}{-\log \tanh K}, \quad K = \mathcal{J}/T$$

Note que $\xi \rightarrow \infty$, quando $T \rightarrow 0$, o que significa que a transição de fase dá-se à temperatura nula, enquanto que $\xi \rightarrow 0$, quando $T \rightarrow \infty$.

5 Modelo de Ising 1d. Formalismo operacional

Como vimos, a função de partição pode ser escrita na forma:

$$\mathcal{Z}_N = \text{tr} \mathbf{T}^N$$

Se \mathbf{T} tiver todos os valores próprios positivos, podemos definir um *Hamiltoniano* “quântico” $\mathbf{H} : \mathbf{V} \rightarrow \mathbf{V}$, através de:

$$\boxed{\mathbf{T} = e^{-\epsilon \mathbf{H}}} \quad (5.1)$$

onde, por conveniência posterior, se fez intervir o valor ϵ da malha da rede “temporal”.

▷ **Exemplo 5.1** ... Por exemplo, no anel de Ising, supondo que $h = 0$, por simplicidade, a matriz de transferência é dada por:

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} e^K & e^{-K} \\ e^{-K} & e^K \end{bmatrix} = e^K \mathbf{1} + e^{-K} \sigma_1$$

onde usamos as chamadas *matrizes de Pauli* $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$, definidas por:

$$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (5.2)$$

Como os valores próprios são positivos, podemos escrever:

$$\mathbf{T} = e^{-\epsilon \mathbf{H}} = \mathbf{1} - \epsilon \mathbf{H} + o(\epsilon^2)$$

onde:

$$\boxed{\mathbf{H} = k_\epsilon \mathbf{1} + K_\epsilon^* \sigma_1} \quad (5.3)$$

Calculando $-\epsilon \mathbf{H} = \log \mathbf{T}$, concluímos que:

$$k_\epsilon = \frac{1}{2\epsilon} \log \frac{\sinh 2K}{2}, \quad K_\epsilon^* = -\frac{\log \tanh K}{2\epsilon} \quad (5.4)$$

Para $\epsilon = 1$, a relação entre K e K^* é particularmente importante. Pode ser escrita na forma simétrica:

$$(\sinh 2K^*) \sinh K = 1$$

o que mostra que, se definirmos:

$$\boxed{K^* = \mathcal{D}(K) \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{\log \tanh K}{2}} \quad (5.5)$$

então $\mathcal{D}(\mathcal{D}(K)) = K$, isto é, \mathcal{D} é uma dualidade. ■

Continuando - uma vez escrita a matriz de transferência na forma $\mathbf{T} = e^{-\epsilon \mathbf{H}}$, a função de partição é dada por:

$$\boxed{\begin{aligned} \mathcal{Z}_N &= \text{tr} \mathbf{T}^N = \text{tr} (e^{-\epsilon \mathbf{H}})^N = \text{tr} e^{-N\epsilon \mathbf{H}} && (= e^{-\beta \mathcal{F}_N}) \\ &= \sum_\alpha e^{-N\epsilon E_\alpha} && (E_0 \leq E_1 \leq E_2 \leq \dots) \end{aligned}} \quad (5.6)$$

onde E_α representam os valores próprios de \mathbf{H} , a que chamamos *níveis de energia*, cuja relação com os valores próprios λ_α , de \mathbf{T} é:

$$\boxed{E_\alpha = -\frac{1}{\epsilon} \log \lambda_\alpha} \quad (5.7)$$

Em particular:

$$E_0 = -\frac{1}{\epsilon} \log \lambda_0$$

é o nível mais baixo da energia ou *energia do vácuo*.

Definindo o “tamanho” L , do “eixo temporal”, por:

$$L = N\epsilon \quad (5.8)$$

de tal forma que $N = L/\epsilon$, podemos ainda escrever:

$$\boxed{\mathcal{Z} = \sum_\alpha e^{-LE_\alpha}} \quad (5.9)$$

Note que L é o inverso da temperatura $L = 1/T$. Quando N é muito grande (e ϵ constante), a soma é dominada pela energia do vácuo E_0 , de tal forma que a energia livre é:

$$-\beta\mathcal{F}_N = \log \mathcal{Z}_N = -N\epsilon E_0$$

Em particular a energia livre por spin f_∞ , no limite termodinâmico, é dada por:

$$-\beta f_\infty(K, h) = \log \lambda_0 = -\epsilon E_0 \quad (5.10)$$

A primeira correcção, devida ao tamanho do sistema, é dada pelo nível seguinte de energia E_1 e é:

$$-\beta\mathcal{F}_N = \log \mathcal{Z}_N = -N\epsilon E_0 + e^{-N\epsilon(E_1-E_0)} + \dots \quad (5.11)$$

Esta igualdade (5.11) diz-nos que, se o salto de energia⁴:

$$m \stackrel{\text{def}}{=} E_1 - E_0$$

fôr estritamente positivo, então o termo de correcção $e^{-N\epsilon(E_1-E_0)}$ decai exponencialmente com o tamanho do sistema. Esta é a primeira manifestação de uma relação geral entre correlações espaciais e o salto de energia m . No anel de Ising, as correlações são provocadas pelas condições de fronteira periódicas, que relacionam pontos a uma distância $L = N\epsilon$, onde $\epsilon > 0$ é a malha da “rede temporal”.

Definindo o comprimento de correlação ou coerência ξ , através de:

$$\xi = \frac{1}{\epsilon(E_1-E_0)} = \frac{1}{m\epsilon} \quad (5.12)$$

podemos escrever o termo de correcção na forma:

$$e^{-N\epsilon(E_1-E_0)} = e^{-N/\xi} \quad (5.13)$$

Note que, quando $m \rightarrow 0$ (com ϵ fixo), o comprimento de correlação ξ diverge para ∞ , e vice-versa.

No anel de Ising (com $h = 0$), o comprimento de correlação é:

$$\xi = \frac{1}{\epsilon(E_1 - E_0)} = \frac{1}{-\epsilon(\log \lambda_1 - \log \lambda_0)} = -\frac{1}{\epsilon \log \tanh K} \quad (5.14)$$

As regiões onde o comprimento de correlação ξ é muito grande adquirem especial significado, porque são estas onde podemos ignorar a existência de uma discretização. Por outras palavras, se olharmos para regiões onde as correlações envolvem distâncias muito superiores à malha da rede ϵ , então a rede fica “escondida” pela escala enorme dos efeitos que estamos a considerar.

Não esqueçamos que um comprimento de correlação ξ muito grande está ligado a uma pequeno salto de energia $m = E_1 - E_0$. Portanto, os sistemas de interesse do ponto de vista da QFT, são aqueles em que $m = E_1 - E_0$ é muito pequeno.

Consideremos agora a média de um observável $X_{\mathbf{r}}$, que depende de um sítio fixo $\mathbf{r} \in \mathcal{S}_i$ (por exemplo $X_{\mathbf{r}} = \phi_{\mathbf{r}}$), que, como vimos na secção anterior, é dado por 4.26):

$$\langle X_{\mathbf{r}} \rangle_\beta = \frac{\text{tr}(\mathbf{T}^N \mathbf{X}_{\mathbf{r}})}{\text{tr} \mathbf{T}^N} \quad (5.15)$$

⁴energy gap

Substituindo nesta expressão $\mathbf{T} = e^{-\epsilon\mathbf{H}}$, vem que:

$$\begin{aligned}\langle X_{\mathbf{r}} \rangle_{\beta} &= \mathcal{Z}_N^{-1} \text{tr}(\mathbf{T}^N \mathbf{X}_{\mathbf{r}}) = \mathcal{Z}_N^{-1} \text{tr}(e^{-N\epsilon\mathbf{H}} \mathbf{X}_{\mathbf{r}}) \\ &= \mathcal{Z}_N^{-1} \sum_{\alpha} e^{-N\epsilon E_{\alpha}} \langle \alpha | \mathbf{X}_{\mathbf{r}} | \alpha \rangle\end{aligned}\quad (5.16)$$

onde $\{|\alpha\rangle\}$ representa uma base de vectores próprios de \mathbf{H} . Quando N é muito grande, a soma é dominada pelo nível mais baixo E_0 , de tal forma que, no limite:

$$\boxed{\langle X_{\mathbf{r}} \rangle_{\beta} = \langle 0 | \mathbf{X}_{\mathbf{r}} | 0 \rangle} \quad (5.17)$$

isto é: *no limite termodinâmico, a média de um observável estatístico, é igual ao valor do elemento diagonal do correspondente operador quântico, no estado de vácuo.*

Como exemplo, vejámos o valor da magnetização em r , no anel de Ising. Aqui $X_r = \phi_r$ e $\mathbf{X}_{\mathbf{r}} = \sigma_3$. Portanto, por (5.16):

$$\begin{aligned}\langle \phi_r \rangle &= \frac{\text{tr}(e^{-N\epsilon\mathbf{H}} \sigma_3)}{\text{tr}(e^{-N\epsilon\mathbf{H}})} \\ &= \frac{\text{tr}(e^{-N\epsilon(k_{\epsilon}\mathbf{1} + K_{\epsilon}^* \sigma_1)} \sigma_3)}{\text{tr}(e^{-N\epsilon(k_{\epsilon}\mathbf{1} + K_{\epsilon}^* \sigma_1)})} \\ &= \frac{\text{tr}(e^{-N\epsilon K^* \sigma_1} \sigma_3)}{\text{tr}(e^{-N\epsilon K^* \sigma_1})} \\ &= 0\end{aligned}\quad (5.18)$$

já que (ver (5.4)):

$$\mathbf{H} = k_{\epsilon}\mathbf{1} + K_{\epsilon}^* \sigma_1 = \frac{1}{2\epsilon} \log \frac{\sinh 2K}{2} \mathbf{1} - \frac{\log \tanh K}{2\epsilon} \sigma_1$$

Calculemos agora $\langle \phi_0 \phi_n \rangle |_{(K, h=0)}$, mas substituindo $\mathbf{T} = e^{-\epsilon\mathbf{H}}$ em (4.29):

$$\begin{aligned}\langle \phi_0 \phi_n \rangle &= \mathcal{Z}_N^{-1} \text{tr}(\mathbf{S}_0 \mathbf{T}^n \mathbf{S}_n \mathbf{T}^{N-n}) \\ &= \mathcal{Z}_N^{-1} \text{tr}(\mathbf{S}_0 e^{-n\epsilon\mathbf{H}} \mathbf{S}_n e^{-(N-n)\epsilon\mathbf{H}})\end{aligned}\quad (5.19)$$

Suponhâmos que $\{|\alpha\rangle\}$ é uma base de vectores próprios de \mathbf{H} , de tal forma que:

$$e^{-\epsilon\mathbf{H}} = \sum_{\alpha} |\alpha\rangle \langle \alpha| e^{-\epsilon E_{\alpha}} \quad \text{e} \quad \mathbf{1} = \sum_{\alpha} |\alpha\rangle \langle \alpha| \quad (5.20)$$

e ainda que E_0 e E_1 são não degenerados. Então (5.19) fica na forma:

$$\langle \phi_0 \phi_n \rangle = \mathcal{Z}_N^{-1} \sum_{\alpha} e^{-(N-n)\epsilon E_{\alpha}} \langle \alpha | \mathbf{S}_0 e^{-n\epsilon\mathbf{H}} \mathbf{S}_n | \alpha \rangle \quad (5.21)$$

Suponhâmos que $\ell = \text{dist}(0, n) = n\epsilon$ está fixa, e consideremos o limite termodinâmico quando $N \rightarrow \infty$. Nesse limite, apenas a energia do vácuo, E_0 , contribui, de tal forma que podemos fazer a substituição:

$$e^{-N\epsilon\mathbf{H}} \longrightarrow |0\rangle \langle 0| e^{-\epsilon E_0} \quad (5.22)$$

Portanto, nesse limite, a função de correlação simplifica-se na forma:

$$\langle \phi_0 \phi_n \rangle = \langle 0 | \mathbf{S}_0 e^{-n\epsilon(\mathbf{H}-E_0)} \mathbf{S}_n | 0 \rangle \quad (5.23)$$

Usando novamente o facto de que $1 = \sum_{\alpha} |\alpha\rangle\langle\alpha|$, podemos ainda escrever:

$$\langle \phi_0 \phi_n \rangle = \langle 0 | \mathbf{S}_0 | 0 \rangle \langle 0 | \mathbf{S}_n | 0 \rangle + \sum_{\alpha > 0} \langle 0 | \mathbf{S}_0 | \alpha \rangle e^{-n\epsilon(E_{\alpha}-E_0)} \langle \alpha | \mathbf{S}_n | 0 \rangle \quad (5.24)$$

Recordemos agora que $\langle 0 | \mathbf{S}_0 | 0 \rangle = \langle \phi_0 \rangle$, $\langle 0 | \mathbf{S}_n | 0 \rangle = \langle \phi_n \rangle$ e ainda a definição de função de correlação conexa ou função de Green:

$$G(0, n) = \langle \phi_0 \phi_n \rangle - \langle \phi_0 \rangle \langle \phi_n \rangle$$

Fazendo as correspondentes substituições, obtemos:

$$G(0, n) = \sum_{\alpha > 0} \langle 0 | \mathbf{S}_0 | \alpha \rangle e^{-n\epsilon(E_{\alpha}-E_0)} \langle \alpha | \mathbf{S}_n | 0 \rangle \quad (5.25)$$

Como E_0 é a *energia do vácuo*, a soma (5.25) contém exponenciais que decaem quando $n \rightarrow \infty$ (com ϵ fixo). No limite, quando $n \rightarrow \infty$, apenas a exponencial $e^{-n\epsilon(E_1-E_0)}$ contribui. Portanto, se o vácuo e o primeiro estado excitado são não degenerados, obtemos, nesse limite:

$$G(0, n) \longrightarrow \langle 0 | \mathbf{S}_0 | 1 \rangle e^{-n\epsilon(E_1-E_0)} \langle 1 | \mathbf{S}_n | 0 \rangle \quad (5.26)$$

isto é:

$$G(0, n) \longrightarrow \langle 0 | \mathbf{S}_0 | 1 \rangle \langle 1 | \mathbf{S}_n | 0 \rangle e^{-\frac{n}{\xi}} \quad (5.27)$$

recordando a definição do comprimento de correlação $\xi = \frac{1}{\epsilon(E_1-E_0)}$.

Em EQFT, o salto de energia $m = E_1 - E_0$ é a massa m do quanta do campo - é a energia de uma partícula em repouso. A relação entre a massa e o comprimento de correlação é pois:

$$\xi = \frac{1}{m\epsilon} \quad (5.28)$$

Quando $\xi \rightarrow \infty$, a massa $m \rightarrow 0$ (para ϵ constante). Por outras palavras os valores próprios $E_{\alpha}, \alpha \geq 2$, desaparecem no ponto crítico.

6 Tabela de analogias entre EQFT e Mecânica Estatística Clássica

QFT Euclideana	↔	Mecânica Estatística Clássica
Campos quânticos	↔	Variáveis de spin
Fonte	↔	Campo magnético (B -campo)
Ação Euclideana	↔	Energia de configuração
$\exp(-\Delta t H)$	↔	Matriz de Transferência no caso de interações de alcance finito
Integral funcional (Feynman)	↔	Soma sobre configurações
Valor esperado do vácuo do campo	↔	Magnetização
Função 2-pontual a momento zero	↔	Susceptibilidade magnética
Massa física (energy gap)	↔	(comprimento de correlação) ⁻¹
Teoria de massa nula	↔	Teoria crítica
Função \mathcal{Z} geradora de funções de correlação	↔	Função de partição num campo B , dependente da posição
Função W geradora de funções conexas de correlação	↔	Energia livre num campo B , dependente da posição
Função geradora de vértices próprios	↔	Potencial termodinâmico, função da magnetização

References

- [1] Le Bellac M., “*Quantum and Statistical Field Theory.*” Oxford U.P., Inc., 1998.
- [2] Binney J.J., Dowrick N.J., Fisher A.J., Newman M.E.J., “*The Theory of Critical Phenomena.*” Oxford U.P., Inc., 1993.
- [3] Kogut J.B., “An Introduction to Lattice Gauge Theory and Spin Systems”. *Reviews of Modern Physics*, vol. 51, 1979, 650-714.
- [4] Kadanoff L.P., “*Statistical Physics.*”, World Scientific, 2000.
- [5] Parisi G., “*Statistical Field Theory.*”, Addison-Wesley, 1987.
- [6] Thompson C.J., “*Mathematical Statistical Mechanics.*”, Princeton U. Press, 1972.