Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Biblioteca Universitária
Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

C962d Cruz, Hélade Barreto Campelo.
Dinâmica do modelo XY isotrópico com campo transverso em uma dimensão (cadeia aberta) / Hélade Barreto Campelo Cruz. – 1980.
47 f.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física, Fortaleza, 1980.
Orientação: Prof. Dr. Lindberg Lima Gonçalves.

1. Anisotropia. I. Título.

CDD 530

"DINÂMICA DO MODELO XY ISOTRÓPICO COM CAMPO TRANSVERSO EM UMA DIMENSÃO (CADEIA ABERTA)"

Hélade Barreto Campelo Cruz

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará, como parte dos requisitos para a obtenção do grau de Mestre em Ciência.

Comissão Julgadora:

Lindberg Lima Gonçalves (UFC)
Orientador

[redacted] Zagury (PUC)

Francisco Alcides Germano (UFC)

Aprovada em, 11 de Abril de 1980.

A meus pais

AGRADECIMENTOS

Agradeço a todos os colegas, professores e funcionários que me auxiliaram na execução deste trabalho, em particular aos Professores:

Lindberg Lima Gonçalves (Orientador)
Luiz Carlos Campelo Cruz
Júlio Auto Neto

Agradeço também à Coordenação do Curso de Mestrado em Física e a UFC pelo apoio prestado.

ÍNDICE

R E S U M O

O presente trabalho discute a dinâmica do modelo XY isotrópico unidimensional, de extremides livres, com e sem aplicação de campo magnético. Expressões analíticas são encontradas para as correlações transversa e longitudinal dependentes do tempo, nos limites extremos de temperatura ($T=0$ e $T=\infty$). As propriedades dinâmicas no interior da cadeia e a influência da fronteira nas mesmas são tratadas com particular atenção.

A B S T R A C T

This work discusses the dynamics of the one dimensional isotropic XY model (free end chain) with (and without) a transverse magnetic field. Analytical expressions are found for the time dependent transverse and longitudinal correlations at the extreme temperature limits ($T=0$ and $T=\infty$). The bulk dynamic properties and the boundary effects are specially considered.

INTRODUÇÃO

O modelo XY unidimensional, introduzido por Lieb, Schultz e Mattis (1961), consiste de uma cadeia linear de spins $\frac{1}{2}$ com interação apenas entre os vizinhos próximos. Ele é particularmente interessante pelo fato de ser um dos poucos modelos estatísticos, não triviais, para o qual se conseguem resultados exatos. Suas propriedades de equilíbrio foram tratadas por Lieb, Schultz e Mattis (1961) os quais calcularam as funções termodinâmicas e a correlação longitudinal estática, para um sistema anisotrópico com condições de contorno cíclica e de extremidades livres. As funções termodinâmicas foram ainda estudadas por Katsura (1962). Pfeuty(1970) calculou a correlação transversa no limite $T = 0$, para spins infinitamente afastados numa cadeia fechada perfeitamente anisotrópica, na presença de um campo magnético.

A dinâmica da cadeia linear fechada, apenas parcialmente conhecida, foi discutida por vários autores. A cadeia anisotrópica sob a ação de um campo magnético transverso foi analizada por Niemeijer (1967) e por Katsura, Horiguchi e Suzuki (1970) que fizeram o cálculo da correlação longitudinal dependente do tempo e por Mc Coy, Barouch e Abraham(1971) que calcularam a correlação transversa para o limite de baixas temperaturas ($T = 0$) e valores particulares de alguns parâmetros. Brandt e Jacoby (1976) estudaram a correlação transversa em temperatura infinita para cadeia isotrópica na ausên cia de campo magnético. A correlação transversa foi ainda estudada por Capel, Van Dongen e Siskens (1974), também em temperatura infinita mas para uma cadeia anisotrópica.

As dificuldades envolvidas no cálculo da dinâmica da cadeia fechada são apresentadas por Capel et al(1974) os quais, pelo cálculo da susceptibilidade transversa, mostraram que os resultados encontrados quando utilizadas condições c-cíclicas e a-cíclicas nem sempre coincidem, mesmo quando os cálculos são feitos no limite termodinâmico.

Trabalho recente (Pesch and Mikeska, 1978) apresenta cálculo para cadeia aberta, com os primeiros resultados sobre a influência da fronteira nas correlações dinâmicas.

Neste trabalho estuda-se a cadeia com extremidades livres, onde as dificuldades acima mencionadas para cadeia cíclica não são encontradas. A perda da simetria de translação acarreta entretanto outras dificuldades no cálculo, entre as quais a complexidade das auto-funções.

Especial atenção é dada aos efeitos da fronteira nas propriedades dinâmicas do sistema. Estes efeitos são estudados através do conhecimento das funções de correlação dependentes do tempo. Estas funções são de particular importância na medida da seção de choque de espalhamento inelástico de neutrons por sistemas magnéticos.

O desenvolvimento do trabalho é feito em três capítulos.

No primeiro capítulo a hamiltoniana do sistema, sob a ação de um campo magnético, é diagonalizada em termos de operadores de Fermi.

No segundo capítulo discute-se a dinâmica do sistema sem aplicação de campo magnético (Gonçalves and Cruz, 1979). A correlação longitudinal $<S_n^z(t)S_\ell^z(0)>$ é estudada, calculado seu comportamento para spins no interior da cadeia e analizada a influência da fronteira. A análise da correlação transversa $<S_n^x(t)S_\ell^x(0)>$ é levada a efeito apenas no limite de altas temperaturas ($T = \infty$). O cálculo da auto-correlação transversa é feito usando uma nova combinação de operadores de Fermi.

No terceiro capítulo discutem-se as modificações introduzidas nas correlações transversa e longitudinal, quando um campo magnético é aplicado ao sistema. A correlação longitudinal $<S_n^z(t)S_\ell^z(0)>$ é calculada para valores arbitrários de temperatura, sendo encontradas, para a mesma, expressões analíticas nos limites de altas temperaturas ($T = \infty$) com campo magnético arbitrário e baixas temperaturas ($T = 0$) apenas para $H \geq |J|$. A correlação transversa $<S_n^x(t)S_\ell^x(0)>$ é estudada nos dois limites extremos de temperatura. Para $T = 0$ o estudo é feito apenas no caso de $H \geq |J|$, sendo encontrada uma expressão analítica exata para a correlação entre spins em posições arbitrárias da rede. No limite de altas temperaturas, $T = \infty$, a correlação é calculada para valores arbitrários de H, sendo a auto-correlação encontrada apenas para spins no in terior da cadeia.

CAPÍTULO 1

CADEIA XY ISOTRÓPICA COM CAMPO TRANSVERSO

O modelo XY, introduzido por Lieb, Shultz and Mattis, (1961), consiste de uma cadeia linear de N spins 1/2 localizados nas posições $i (1 \leq i \leq N)$, com interação apenas entre os vizinhos mais próximos.

Admitindo que a interação entre os ions não seja uniforme, a hamiltoniana que descreve o sistema anti-ferromagnético, tratado como uma cadeia aberta, quando sujeito a um campo magnético uniforme H, pode ser escrita (tomando $\hbar=1$) como:

$$\mathcal{H} = \sum_{j=1}^{N-1} J_j \left[(1+\gamma) S_j^x S_{j+1}^x + (1-\gamma) S_j^y S_{j+1}^y \right] - \sum_{j=1}^{N} H S_j^z \qquad (1\text{-}1)$$

onde γ é um parâmetro que caracteriza o grau de anisotropia no plano XY; S_ℓ^x, S_ℓ^y, S_ℓ^z são as matrizes de spin de Pauli:

$$S_\ell^x = (1/2) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \; ; \; S_\ell^y = (1/2) \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \; ; \; S_\ell^z = (1/2) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad (1\text{-}2)$$

e J_j, constante de troca, tomada sempre positiva, favorece o arranjo anti-paralelo dos spins.

No presente estudo, considera-se um caso particular da hamiltoniana (1-1) qual seja, aquele em que as constantes de troca J_j são independentes da posição do spin ($J_j = J$). Uma segunda simplificação é ainda feita, quando se considera isotrópica a interação no plano XY, ou seja $\gamma=0$.

A hamiltoniana que será discutida pode portan to ser escrita como:

$$\mathcal{H} = \sum_{j=1}^{N-1} J(S_j^x S_{j+1}^x + S_j^y S_{j+1}^y) - H \sum_{j=1}^{N} S_j^z \qquad (1\text{-}3)$$

1-a. DIAGONALIZAÇÃO DA HAMILTONIANA

A fim de diagonalizar a hamiltoniana (1-3) introduz-se inicialmente operadores de levantamento e abaixamento (Lieb, Shultz e Mattis, 1961)

$$a_\ell^\dagger = S_\ell^x + iS_\ell^y \qquad a_\ell = S_\ell^x - iS_\ell^y \qquad (1\text{-}4)$$

em termo dos quais os operadores de spin de Pauli são:

$$S_\ell^x = (1/2)(a_\ell^\dagger + a_\ell), \quad S_\ell^y = (1/2i)(a_\ell^\dagger - a_\ell), \quad S_\ell^z = a_\ell^\dagger a_\ell - (1/2) \qquad (1\text{-}5)$$

Esses operadores se comportam parcialmente como operadores de Fermi e parcialmente como operadores de Bose, no sentido de que $\{a_\ell, a_\ell^\dagger\} = 1 \qquad a_\ell^2 = (a_\ell^\dagger)^2 = 0$

$$[a_\ell^\dagger, a_j] = [a_\ell^\dagger, a_j^\dagger] = [a_\ell, a_j] = 0, \quad \ell \neq j \qquad (1\text{-}6)$$

e em função dos mesmos a hamiltoniana pode ser escrita como:

$$\mathcal{H} = (J/2) \sum_{j=1}^{N-1} (a_j^\dagger a_{j+1} + a_j a_{j+1}^\dagger) - H \sum_{j=1}^{N} (a_j^\dagger a_j - 1/2) \qquad (1\text{-}7)$$

A hamiltoniana (1-7) não pode ser diagonalizada diretamente por uma transformação canônica, em virtude das características (1-6) apresentadas pelos operadores a's. Torna-se portanto nescessário introduzir uma nova família de operadores que sejam operadores de fermions. Isto é conseguido através da transformação de Jordan-Wigner (Jordan-Wigner, 1928), definida por:

$$a_j^\dagger = \left[\exp(i\pi \sum_{\ell=1}^{j-1} c_\ell^\dagger c_\ell)\right] c_j^\dagger, \qquad a_1^\dagger = c_1^\dagger \qquad \text{e}$$

$$a_j = \left[\exp\left(-i\pi\sum_{\ell=1}^{j-1} c_\ell^\dagger c_\ell\right)\right] c_j \quad , \quad a_1 = c_1 \qquad (1\text{-}8)$$

onde os c's são os operadores de Fermi.

Por substituição direta encontra-se a partir de (1-7) que

$$\mathcal{H} = (J/2)\sum_{j=1}^{N-1}(c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j) - H\sum_{j=1}^{N} c_j^\dagger c_j + NH/2 \qquad (1\text{-}9)$$

Em função de $c^\dagger$ e c, os operadores de spin de Pauli são escritos como:

$$S_j^x = (1/2)\left[\prod_{i=1}^{j-1}(c_i^\dagger + c_i)(c_i^\dagger - c_i)\right](c_j^\dagger + c_j)$$

$$S_j^y = (1/2i)\left[\prod_{i=1}^{j-1}(c_i^\dagger + c_i)(c_i^\dagger - c_i)\right](c_j^\dagger - c_j)$$

$$S_j^z = (-1/2)(c_j^\dagger + c_j)(c_j^\dagger - c_j) \qquad (1\text{-}10)$$

A hamiltoniana (1-9) é do tipo

$$\mathcal{H} = \sum_{ij}(c_i^\dagger A_{ij} c_j + c_i^\dagger B_{ij} c_j^\dagger) + \text{h.c.} \qquad (1\text{-}11)$$

e o processo usado para diagonalizá-la, será o proposto por Lieb, Shultz e Mattis, (1961), segundo o qual os operadores que diagonalizam (1-11) são dados por:

$$\eta_k = \sum_i \left[(1/2)(\Phi_{ki} + \Psi_{ki})c_i + (1/2)(\Phi_{ki} - \Psi_{ki})c_i^\dagger\right] \qquad (1\text{-}12)$$

onde $\Phi_k = (\Phi_{k1}, \Phi_{k2}, \ldots, \Phi_{kN})$ e $\Psi_k = (\Psi_{k1}, \Psi_{k2}, \ldots, \Psi_{kN})$ são soluções das equações matriciais

$$\Phi_k(A-B) = \Lambda_k \Phi_k$$

$$\Psi_k(A+B) = \Lambda_k \Psi_k \qquad (1\text{-}13)$$

Λ_k sendo autovalor da hamiltoniana (1-11).

Para o presente problema encontra-se que as formas de A e B são expressas como a seguir.

$$B = \left[0\right] \quad , \qquad \text{e}$$

$$
A=\left(\begin{array}{cccccccc}
-H & J/2 & 0 & & & & & \\
J/2 & -H & J/2 & 0 & & \mathbf{0} & & \\
0 & J/2 & -H & J/2 & 0 & & & \\
\hline
 & & & & 0 & J/2 & -H & J/2 & 0 \\
 & \mathbf{0} & & & & 0 & J/2 & -H & J/2 \\
 & & & & & & 0 & J/2 & -H
\end{array}\right) \qquad (1\text{-}14)
$$

Das equações (1-13) e (1-14) obtem-se

$$\Phi_k=\Psi_k \qquad (1\text{-}15)$$

e portanto $\Phi_k A=\Lambda_k\Phi_k$ (1-16)

Consequentemente, $\eta_k=\sum_i \Phi_{ki}c_i$ (1-17)

O cálculo dos autovalores e autovetores de A é discutido por Mc Coy and Wu (1973) e é apresentado no apêndice A.

A hamiltoniana do sistema pode portanto ser escrita na forma diagonal como:

$$\mathcal{H}=\sum_k \Lambda_k\eta_k^{\dagger}\eta_k+NH/2 \qquad (1\text{-}18)$$

onde, conforme os resultados encontrados no apêndice referido acima, tem-se:

$$\Lambda_k= J\cos k- H \qquad \eta_k=\sum_\ell \Phi_{k\ell}c_\ell \qquad (1\text{-}19)$$

sendo

$$\Phi_{k\ell}=\left[2/(N+1)\right]^{1/2} \operatorname{sen} k\ell \ , \ k=n\pi/(N+1),\ n=1,2,..,N \qquad (1\text{-}20)$$

CAPÍTULO 2

CÁLCULO DAS FUNÇÕES DE CORRELAÇÃO PARA O SISTEMA SEM CAMPO MAGNÉTICO

Neste capítulo discute-se a dinâmica do sistema sem aplicação do campo (Gonçalves and Cruz, 1979). É feito um estudo de correlação $<S_n^z(t)\ S_\ell^z(0)>$, calculado seu comportamento para spins no interior da cadeia e a influência da fronteira nesta correlação. A análise de $<S_n^x(t)\ S_\ell^x(0)>$ é levada a efeito apenas no limite de altas temperaturas ($T=\infty$), sendo, a auto-correlação, calculada apenas para spins do interior da cadeia.

2-a. CÁLCULO DA FUNÇÃO DE CORRELAÇÃO LONGITUDINAL DEPENDENTE DO TEMPO

A hamiltoniana para o sistema sem campo, toma a forma mais simples:

$$H = \sum_{j=1}^{N-1} J(S_j^x S_{j+1}^x + S_j^y S_{j+1}^y) \qquad (2\text{-}1)$$

e é obviamente diagonalizada pelos mesmos operadores η_k definidos pela equação (1-19). Pode-se portanto escrever (2-1) na forma diagonal,

$$H = \sum_k \Lambda_k \eta_k^\dagger \eta_k \qquad (2\text{-}2)$$

onde

$$\Lambda_k = J\cos k \qquad (2\text{-}3)$$

A correlação longitudinal $<S_n^z(t)\ S_\ell^z(0)>$ é escrita, de acordo com (1-10), como:

$$<S_n^z(t)\ S_\ell^z(0)> =$$

$$=(1/4)<\left[c_n^\dagger(t)+c_n(t)\right]\left[c_n^\dagger(t)-c_n(t)\right]\left[c_\ell^\dagger(0)+c_\ell(0)\right]\left[c_\ell^\dagger(0)-c_\ell(0)\right]> \qquad (2\text{-}4)$$

Pela definição de novos operadores A e B (Lieb, Shultz and Mattis, 1961) a equação (2-4) toma a forma

$$<S_n^z(t)\ S_\ell^z(0)>=(1/4)<A_n(t)B_n(t)A_\ell(0)B_\ell(0)> \qquad (2\text{-}5)$$

onde $A_i=c_i^\dagger+c_i$, $B_i=c_i^\dagger-c_i$ (2-6)

Estes operadores satisfazem as relações seguintes:

$$\{A_j,B_\ell\}=0$$
$$A_j^2=I\ ,\quad B_j^2=-I$$
$$\{A_j,A_\ell\}=\{B_j,B_\ell\}=0 \quad \text{se} \quad j\neq\ell \qquad (2\text{-}7)$$

O teorema de Wick (veja por exemplo Lieb et al, 1961) pode então ser usado para o cálculo de (2-5). Este teorema permite escrever a média de um produto qualquer de operadores de Fermi em termos das chamadas contraçẽs de pares, ou seja, em furção do valor esperado do produto de apenas dois operadores. Genericamente, se $\theta_1,\theta_2,...,\theta_{2N}$ são operadores que satisfazem regras de anticomutação, o teorema de Wick estabelece que

$$<\theta_1,...,\theta_{2N}>=\sum_{\substack{\text{todos os}\\ \text{emparelhamentos}}}(-1)^p\prod_{\substack{\text{todos}\\ \text{pares}}}<\theta_i\theta_j> \qquad (2\text{-}8)$$

onde p ẽ a ordem da permutação nescessãria para trazer os operadores da configuração original atẽ a configuração onde os pares contraidos são trazidos para posições vizinhas.

A equação (2-5) pode então ser escrita como

$$<S_n^z(t)S_\ell^z(0)>=$$
$$=(1/4)\Big[<A_n(0)B_n(0)><A_\ell(0)B_\ell(0)>-<A_n(t)A_\ell(0)><B_n(t)B_\ell(0)>+$$
$$+<A_n(t)B_\ell(0)><B_n(t)A_\ell(0)>\Big] \qquad (2\text{-}9)$$

As contrações bãsicas são calculadas no apêndi ce B e as relações encontradas para as mesmas são apresentadas a seguir:

$$<A_n(0)B_\ell(0)>=0 \qquad (2\text{-}10)$$

$$<A_n(t)A_\ell(0)>=-<B_n(t)B_\ell(0)>=$$

$$= 2/(N+1)\sum_k \operatorname{sen}kn\operatorname{sen}k\ell\left[\cos(tJ\cos k)-i\operatorname{sen}(tJ\cos k)\operatorname{th}\left(J\cos k/(2KT)\right)\right]$$

$$<B_n(t)A_\ell(0)>=-<A_n(t)B_\ell(0)>=$$

$$=2/(N+1)\sum_k \operatorname{sen}kn\operatorname{sen}k\ell\left[i\operatorname{sen}(tJ\cos k)-\cos(tJ\cos k)\operatorname{th}\left(J\cos k/(2KT)\right)\right],$$

(2-11) e (2-12)

onde K é a constante de Boltzman

A correlação longitudinal para um valor arbitrario de temperatura é então dada por

$$<S_n^z(t)S_\ell^z(0)>=\frac{1}{4}\left\{\left[\frac{2}{N+1}\sum_k \operatorname{sen}kn\operatorname{sen}k\ell\left[\cos(tJ\cos k)-i\operatorname{sen}(tJ\cos k)\operatorname{th}\left(\frac{J\cos k}{2KT}\right)\right]\right]^2+\right.$$

$$\left.-\left[\frac{2}{N+1}\sum_k \operatorname{sen}kn\operatorname{sen}k\ell\left[i\operatorname{sen}(tJ\cos k)-\cos(tJ\cos k)\operatorname{th}\left(\frac{J\cos k}{2KT}\right)\right]\right]^2\right\} \qquad (2\text{-}13)$$

Para o limite de baixas temperaturas (T=0), encontra-se a partir de (2-13) quando $N\to\infty$ que

$$<S_n^z(t)S_\ell^z(0)>=(1/4)\left[F_{n-\ell}(tJ)-(-1)^\ell F_{n+\ell}(tJ)\right]^2 \qquad (2\text{-}14)$$

onde $F=J+iE$, J é a função de Bessel de primeira espécie e E é a função de Weber (vide apêndice B)

A correlação para spins no interior da cadeia é obtida tomando-se o limite de $\ell\to\infty$ e mantendo-se $n-\ell=R$ constante. Obtem-se então a partir de (2-14) que

$$\lim_{\ell\to\infty} <S_n^z(t)S_\ell^z(0)>=(1/4)\left[F_R(tJ)\right]^2 \qquad (2\text{-}15)$$

resultado semelhante ao encontrado por Katsura, Horiguchi and Suzuki, (1970), com a única ressalva de que foram encontradas funções de Weber ao invés de funções de Struve.

A influencia da fronteira pode ser analizada então a partir do estudo do comportamento assintótico da equação (2-14).

Para tempos pequenos obtem-se

$$<S_n^z(t)S_\ell^z(0)> \simeq$$

$$\simeq \frac{1}{4}\left\{\frac{1-\cos R\pi}{R\pi} - \frac{(1+\cos R\pi)tJ}{\pi(1-R^2)} - (-1)^\ell\left[\frac{1-\cos R\pi}{\pi(R+2\ell)} - \frac{(1+\cos R\pi)tJ}{\pi\left[1-(R+2\ell)^2\right]}\right]\right\}^2 \qquad (2\text{-}16)$$

Como se pode ver (Katsura et al, 1970), não há influencia relevante da fronteira.

Para R finito e valores grandes de tempo, encontra-se entretanto que

$$<S_n^z(t)S_\ell^z(0)> \simeq (-1/2)\left[1-(-1)^\ell\right](1+\cos R\pi)^2/(\pi Jt)^2 \qquad (2\text{-}17)$$

Neste limite, a correlação é fortemente afetada pela fronteira, uma vez que a dependencia temporal varia de t^{-1} para spins no interior da cadeia (Katsura et al, 1970) para t^{-2} para spins próximos às extremidades.

Para o limite de altas temperaturas ($T\simeq\infty$), a correlação longitudinal obtida a partir de (2-13) é

$$<S_n^z(t)S_\ell^z(0)> = (1/4)\left[J_{n-\ell}(tJ)-(-1)^\ell J_{n+\ell}(tJ)\right]^2 \qquad (2\text{-}18)$$

onde $J_{n-\ell}$ e $J_{n+\ell}$ são funçoẽs de Bessel de primeira espécie.

A correlação para spins no interior da cadeia reproduz o resultado encontrado por Katsura para a cadeia fechada (Katsura, Horiguchi and Suzuki, 1970) qual seja:

$$\lim_{\ell\to\infty} <S_n^z(t)S_\ell^z(0)> = (1/4)\left[J_R(tJ)\right]^2 \qquad (2\text{-}19)$$

Como no caso de baixas temperaturas, aqui novamente a influencia da fronteira é pesquizada através da expansão assintótica da correlação respectiva. O resultado encontrado para tempos pequenos é:

$$<S_n^z(t)S_\ell^z(0)> \simeq \frac{1}{4}\left[\frac{(tJ)^R}{2^R R!} - \frac{(-1)^\ell (tJ)^{R+2\ell}}{2^{R+2\ell}(R+2\ell)!}\right]^2 \qquad (2\text{-}20)$$

Constatando-se novamente que a influencia da fronteira é irrelevante (Katsura et al, 1970).

Para valores grandes de tempo e R finito,

$$<S_n^z(t)S_\ell^z(0)> \simeq \left[2/(\pi J^3 t^3)\right]\left[\mathrm{sen}^2(tJ - R\pi/2)\right]\ell^2(\ell+R)^2 \qquad (2\text{-}21)$$

Vê-se portanto (Katsura et al, 1970), que a dependencia temporal das correlações é fortemente influenciada pela fronteira, pois varia de t^{-1} para spins no interior da cadeia para t^{-3} para spins próximos das extremidades.

2-b. CÁLCULO DA FUNÇÃO DE CORRELAÇÃO TRANSVERSA DEPENDENTE DO TEMPO

O cálculo da correlação transversa é um pouco mais complexo, e no presente trabalho é feito um estudo apenas para o limite de altas temperaturas.

A equação (1-10) permite escrever $<S_n^x(t)\,S_\ell^x(0)>$ como:

$$<S_n^x(t)S_\ell^x(0)> =$$

$$= \frac{1}{4}<\left[\prod_{j=1}^{n-1}\left(c_j^\dagger(t)+c_j(t)\right)\left(c_j^\dagger(t)-c_j(t)\right)\right]\left(c_n^\dagger(t)+c_n(t)\right)\left[\prod_{j=1}^{\ell-1}\left(c_j^\dagger(0)+c_j(0)\right)\left(c_j^\dagger(0)-c_j(0)\right)\right]\left(c_\ell^\dagger(0)+c_\ell(0)\right)> \qquad (2\text{-}22)$$

sendo a mesma, dada em função dos operadores A e B, definidos por (2-6), como:

$$<S_n^x(t)S_\ell^x(0)>=(1/4)<\left[\prod_{j=1}^{n-1} A_j(t)B_j(t)\right] A_n(t)\left[\prod_{j=1}^{\ell-1} A_j(0)B_j(0)\right] A_\ell(0)> \quad (2\text{-}23)$$

O desenvolvimento da equação acima, pela aplicação do teorema de Wick, mostra que se $\ell \neq n$ todos os emparelhamentos contêm pares cuja média é nula (vide apêndice B). Tem-se portanto que a correlação temporal $<S_n^x(t)S_\ell^x(0)>$ é nula se $\ell \neq n$. Este resultado é independente da fronteira e é idêntico ao encontrado por Brandt and Jacoby (1976) para o caso da cadeia fechada.

A função de auto-correlação é entretanto não nula e usando o teorema de Wick é possível expressá-la em termos de um Pfafian (Caianiello, 1953) o qual pode ser calculado como a raiz quadrada do determinante de uma matriz de bloco anti-simétrica (Mc Coy and Wu, 1973). Entretanto, como foi evidenciado por Pesch and Mikeska (1978), mesmo quando o interesse é o cálculo da correlação no interior da cadeia, encontra-se uma dificuldade adicional que é o fato do determinante encontrado não ser um determinante de Toeplitz de bloco (existe elementos a_{ij} que mesmo no limite $\ell \to \infty$ dependem de $i+j$). Esta dificuldade pode entretanto ser contornada usando a propriedade de "cluster" e calculando a correlação para 4 spins. De acordo com Capel (1974) tem-se que:

$$<S_n^x(t)S_\ell^x(t)S_n^x(0)S_\ell^x(0)> \simeq <S_n^x(t)S_n^x(0)><S_\ell^x(t)S_\ell^x(0)> \quad (2\text{-}24)$$

desde que $R=n-\ell$ seja grande.

Admitindo-se ℓ e n suficientemente grandes, encontra-se a partir de (2-24) que

$$<S^x(t)S^x(0)>_{\substack{\text{no interior}\\ \text{da cadeia}}}=\lim_{n\to\infty}\lim_{\ell\to\infty}<S_n^x(t)S_\ell^x(t)S_n^x(0)S_\ell^x(0)>^{1/2} \tag{2-25}$$

e seguindo o mesmo desenvolvimento de (2-22) obtem-se

$$<S^x(t)S^x(0)>_{\substack{\text{no interior}\\ \text{da cadeia}}}=$$
$$=(1/4)\lim_{n\to\infty}\lim_{\ell\to\infty}\left[<\left(\prod_{j=\ell}^{n-1}B_j(t)A_{j+1}(t)\right)\left(\prod_{j=\ell}^{n-1}B_j(0)A_{j+1}(0)\right)>\right]^{1/2} \tag{2-26}$$

Novamente pelo uso do teorema de Wick é possível escrever (2-26) como um determinante de Toeplitz de bloco, cujo valor assintótico é a correlação no centro da cadeia.

O cálculo deste determinante embora possível é de grande complexidade. Para o limite de temperatura $T=\infty$, simplificações fundamentais são conseguidas através da transformação canônica

$$\tilde{\theta}=U^{\dagger}\theta U \tag{2-27}$$

onde U é o operador unitário

$$U=\exp\left[(-i\pi/2)\sum_{j=1}^{N} j c_j^{\dagger} c_j\right] \tag{2-28}$$

Os operadores transformados $\tilde{A}$ e $\tilde{B}$ (vide apêndice C) têm, em função dos operadores A e B, a representação seguinte:

$$\tilde{A}_j=\cos(j\pi/2)A_j+i\ \mathrm{sen}(j\pi/2)B_j \qquad \text{e}$$
$$\tilde{B}_j=\cos(j\pi/2)B_j+i\ \mathrm{sen}(j\pi/2)A_j \tag{2-29}$$

Da análise de (2-29), encontra-se que para o caso de ℓ e n pares, (2-26) pode ser escrita em função dos novos operadores como:

$$\langle S^x(t)S^x(0)\rangle_{\text{no interior da cadeia}} =$$

$$=(1/4)\lim_{n\to\infty}\lim_{\ell\to\infty}\left[\left\langle\left(\prod_{j=\ell}^{n-1}\bar{B}_j(t)\bar{A}_{j+1}(t)\right)\left(\prod_{j=\ell}^{n-1}\bar{B}_j(0)\bar{A}_{j+1}(0)\right)\right\rangle\right]^{1/2} \qquad (2\text{-}30)$$

O valor médio (2-30) é expresso como um Pfafian e a matriz anti-simétrica associada ao mesmo é

$$M=\begin{array}{cccc|c}
0 & \langle\bar{B}(0)\bar{A}(0)\rangle & \langle\bar{B}(t)\bar{B}(0)\rangle & \langle\bar{B}(t)\bar{A}(0)\rangle & n-\ell \\
n-\ell & 0 & \langle\bar{A}(t)\bar{B}(0)\rangle & \langle\bar{A}(t)\bar{A}(0)\rangle & n-\ell \\
 & n-\ell & 0 & \langle\bar{B}(0)\bar{A}(0)\rangle & n-\ell \\
 & & n-\ell & 0 & n-\ell \\
 & & & n-\ell &
\end{array} \qquad (2\text{-}31)$$

abaixo da diagonal principal a matriz M deve ser completada anti-simetricamente.

A simplificação fundamental introduzida pela relação (2-27), é o fato desta transformação anular a contração $\langle\bar{A}_j(t)\bar{B}_\ell(0)\rangle$, (vide apêndice C), mantendo válidas as relações encontradas para as contrações estáticas (apêndice B). Isto permite, após algumas operações simples, escrever

$$\det M=\det\left(\begin{array}{cccc|c}
0 & 0 & 0 & -\langle\bar{A}(t)\bar{A}(0)\rangle & n-\ell \\
n-\ell & 0 & \langle\bar{A}(t)\bar{A}(0)\rangle & 0 & n-\ell \\
 & n-\ell & 0 & 0 & n-\ell \\
 & & n-\ell & 0 & n-\ell \\
 & & & n-\ell &
\end{array}\right) \qquad (2\text{-}32)$$

tendo-se portanto

$$<S^x(t)S^x(0)>_{\text{no interior da cadeia}}=$$

$$=(1/4)\lim_{n\to\infty}\lim_{\ell\to\infty}\det\left[<\bar{A}(t)\bar{A}(0)>\right] \qquad (2\text{-}33)$$

O determinante da equação (2-33) é um determinante de Toeplitz gerado por funções de Bessel J_j. Seu valor assintótico é calculado usando o teorema de Szego e Kac (Hartwig and Fisher, 1969), obtendo-se para a autocorrelação no interior da cadeia (apêndice D), a expressão

$$<S^x(t)S^x(0)>=(1/4)\exp(-J^2t^2/4) \qquad (2\text{-}34)$$

que é o resultado já conhecido para o caso da cadeia fechada (Brandt and Jacoby, 1976).

A mesma abordagem, em princípio, pode ser usada para outros limites de temperatura. A transformação canônica discutida acima não pode entretanto ser usada para o limite de temperatura T=0, uma vez que ela torna a contração $<\bar{A}_j(o)\bar{A}_\ell(0)>$ diferente de $\delta_{j\ell}$.

CAPÍTULO 3

CÁLCULO DAS FUNÇÕES DE CORRELAÇÃO PARA O SISTEMA SOB A AÇÃO DE UM CAMPO MAGNÉTICO TRANSVERSO

O objetivo do presente capítulo é analizar as modificações introduzidas nas correlações transversa e longitudinal, quando um campo magnético é aplicado ao sistema.

A correlação longitudinal $<S_j^z(t)S_\ell^z(0)>$ é calculada para valores arbitrários de temperatura, sendo encontradas para a mesma, expressões analíticas nos limites de altas temperaturas ($T=\infty$) com campo magnético arbitrário e baixas temperaturas ($T=0$) apenas para $H \geqslant |J|$.

A correlação transversa $<S_n^x(t)S_\ell^x(0)>$ é estudada nos dois limites extremos de temperatura, sendo considerado em $T=0$ apenas o caso $H \geqslant |J|$.

3-a. CÁLCULO DA FUNÇÃO DE CORRELAÇÃO LONGITUDINAL DEPENDENTE DO TEMPO.

Conforme visto no capítulo 2, equação (2-9), a correlação longitudinal pode ser escrita como

$$<S_n^z(t)S_\ell^z(0)>=\frac{1}{4}\left\{<A_n(0)B_n(0)><A_\ell(0)B_\ell(0)>-<A_n(t)A_\ell(0)><B_n(t)B_\ell(0)>+\right.$$
$$\left.+<A_n(t)B_\ell(0)><B_n(t)A_\ell(0)>\right\} \qquad (3-1)$$

onde A e B são definidos pela equação (2-6).

As contrações estão discutidas no apêndice B e os resultados encontrados em temperaturas finitas são:

$$<A_m(0)B_m(0)>=\left[-2/(N+1)\right]\sum_k\left[\operatorname{sen}^2 km\right]\operatorname{th}\left[(J\cos k-H)/2KT\right] \qquad (3-2)$$

$$<A_n(t)B_\ell(0)>=-<B_n(t)A_\ell(0)>=$$

$$=\frac{2}{N+1}\sum_k \text{sen}k\ell\,\text{sen}kn\left\{i\,\text{sen}\left[t(J\cos k-H)\right]-\cos\left[t(J\cos k-H)\right]\text{th}\left(\frac{J\cos k-H}{2KT}\right)\right\} \tag{3-3}$$

$$<A_n(t)A_\ell(0)>=-<B_n(t)B_\ell(0)>=$$

$$=\frac{2}{N+1}\sum_k \text{sen}k\ell\,\text{sen}kn\left\{\cos\left[t(J\cos k-H)\right]-i\,\text{sen}\left[t(J\cos k-H)\right]\text{th}\left(\frac{J\cos k-H}{2KT}\right)\right\} \tag{3-4}$$

onde K é a constante de Boltzmann.

A correlação longitudinal para um valor arbitrário de temperatura é então dada por:

$$<S_n^z(t)S_\ell^z(0)>=$$

$$=\frac{1}{(N+1)^2}\Bigg[\left[\sum_k(\text{sen}^2 nk)\,\text{th}\left(\frac{J\cos k-H}{2KT}\right)\right]\left[\sum_k(\text{sen}^2 \ell k)\,\text{th}\left(\frac{J\cos k-H}{2KT}\right)\right]+$$
$$+\left[\sum_k \text{sen}k\ell\,\text{sen}kn\left\{\cos\left[t(J\cos k-H)\right]-i\,\text{sen}\left[t(J\cos k-H)\right]\text{th}\left(\frac{J\cos k-H}{2KT}\right)\right\}\right]^2+$$
$$-\left[\sum_k \text{sen}k\ell\,\text{sen}kn\left\{i\,\text{sen}\left[t(J\cos k-H)\right]-\cos\left[t(J\cos k-H)\right]\text{th}\left(\frac{J\cos k-H}{2KT}\right)\right\}\right]^2\Bigg] \tag{3-5}$$

No limite de baixas temperaturas ($T=0$) a expressão anterior pode ser calculada analiticamente, para $H \geqslant |J|$, sendo seu valor dado por

$$<S_n^z(t)S_\ell^z(0)>=1/4 \tag{3-6}$$

resultado êste que é obviamente independente da posição dos spins. Para tal limite de temperatura a correlação longitudinal se comporta como se o sistema estudado fosse um sistema de spins livres.

No limite de altas temperaturas ($T=\infty$) a equação (3-5) pode ser calculada analiticamente, para valores arbitrá rios de H, obtendo-se (vide apêndice B):

$$<S_n^z(t)S_\ell^z(0)>=(1/4)\left[J_{n-\ell}(tJ)-(-1)^\ell J_{n+\ell}(tJ)\right]^2 \tag{3-7}$$

Êste resultado é idêntico ao encontrado no capítulo anterior, equação (2-20), tendo-se portanto que

$$<S_n^z(t)S_\ell^z(0)>_{com\ campo}=<S_n^z(t)S_\ell^z(0)>_{sem\ campo} \tag{3-8}$$

Para spins no interior da cadeia, (3-7) reproduz o resultado encontrado por Niemeijer (1967) para o caso da cadeia fechada. A influência da fronteira em (3-7), já discutida no capítulo anterior, mostra ser representativa apenas para valores grandes de tempo ($t\to\infty$), quando a dependencia temporal muda de t^{-1} para spins no interior da cadeia, para t^{-3} para spins próximos às extremidades.

3-b. CÁLCULO DA CORRELAÇÃO TRANSVERSA DEPENDENTE DO TEMPO

No limite de altas temperaturas ($T=\infty$), a correlação transversa pode ser calculada facilmente a partir da explicitação da dependencia temporal introduzida pelo campo. Para tanto, considere-se inicialmente a hamiltoniana do problema

$$H=H_0+H_1$$

onde $H_0=\sum_{j=1}^{N-1} J(S_j^x S_{j+1}^x+S_j^y S_{j+1}^y)$ e $H_1=\sum_{j=1}^{N} HS_j^z$ (3-9)

A constatação de que H_0 e H_1 comutam, possibilita a fatoração da exponencial que traduz a dependência temporal do spin. A correlação transversa pode portanto ser desenvolvida como segue:

$$<S_n^x(t)S_\ell^x(0)> = <e^{iH_0t}e^{-iHt\Sigma S_m^z}S_n^x(0)e^{-iH_0t}e^{iHt\Sigma S_m^z}S_\ell^x(0)> \quad (3\text{-}10)$$

Usando-se regras de comutação entre as componentes de spin encontra-se:

$$<S_n^x(t)S_\ell^x(0)> = <e^{iH_0t}e^{-2iHtS_n^z}S_n^x(0)e^{-iH_0t}S_\ell^x(0)> \quad (3\text{-}11)$$

e pela aplicação da idebtidade (Davydov, 1965)

$$e^{-2iHtS^z} = \cos tH - 2i(\operatorname{sen} tH)S^z,$$

obtem-se após algum cálculo que

$$<S_n^x(t)S_\ell^x(0)> = \cos tH <S_n^{x_0}(t)S_\ell^x(0)> + \operatorname{sen} tH <S_n^{y_0}(t)S_\ell^x(0)> \quad (3\text{-}12)$$

Na equação (3-12) é introduzida a notação $S^{\xi_0}(t)$, (com $\xi=x,y$), para indicar que a dependencia temporal é devida unicamente a H_0. As correlações $<S_i^{\xi_0}(t)S_j^\zeta(0)>$ da equação acima são idênticas às calculadas para o sistema sem campo, uma vez que a dependencia temporal é devida somente a H_0 e a exponercial $e^{-\beta H}$ pode ser tomada igual a unidade, já que a presente análise trata do limite $T=\infty$. A correlação $<S_n^{y_0}(t)S_\ell^x(0)>$ pode ser escrita em função dos operadores $\mathbb{B}$ definidos no apêndice C, equações (C-5) e (C-6), obtendo-se que

$$<S_n^{y_0}(t)S_\ell^x(0)> =$$

$$= \frac{1}{4} < \mathbb{A}_1(t)\,\mathbb{B}_1(t) \ldots \mathbb{A}_{n-1}(t)\,\mathbb{B}_{n-1}(t)\,\mathbb{B}_n(t)\,\mathbb{A}_1(0)\,\mathbb{B}_1(0) \ldots \mathbb{A}_{\ell-1}(0)\,\mathbb{B}_{\ell-1}(0)\,\mathbb{A}_\ell(0) > \quad (3\text{-}13)$$

Aplicando o teorema de Wick a equação acima, e tendo em conta os resultados encontrados no apêndice C para as contrações dos operadores $\tilde{\theta}$, verifica-se imediatamente que a quantidade $<S_n^{y_o}(t)S_\ell^x(0)>$ é nula e a equação (3-12) se reduz a:

$$<S_n^x(t)S_\ell^x(0)>=\cos tH<S_n^{x_o}(t)S_\ell^x(0)> \qquad (3\text{-}14)$$

A expressão (3-14) demonstra portanto que o efeito da aplicação do campo é apenas introduzir na correlação um fator temporal periódico. Para sítios diferentes a correlação continua nula enquanto que para o mesmo sítio, no interior da cadeia, obtem-se:

$$<S^x(t)S^x(0)>=\frac{1}{4}\left[\cos tH\right]\exp(-J^2t^2/4) \qquad (3\text{-}15)$$

Este resultado é idêntico ao obtido por Brandt e Jacoby (1977) para a cadeia cíclica.

Considere-se agora, no limite de baixas temperatura (T=0), a auto-correlação transversa a qual pode ser escrita como (Pesch and Mikeska, 1978):

$$<S_\ell^x(t)S_\ell^x(0)>=\frac{1}{4}<\prod_{k=1}^{\ell}A_k(t)\prod_{p=1}^{\ell-1}B_p(t)\prod_{i=1}^{\ell}A_i(0)\prod_{j=1}^{\ell-1}B_j(0)> \qquad (3\text{-}16)$$

O valor médio (3-16) é dado por um Pfaffian ao qual está associada a matriz antisimétrica M dada por (Pesch and Mikeska, 1978)

$$M=\begin{array}{ccccc} 0 & <A(t)B(t)> & <A(t)A(0)> & <A(t)B(0)> & \ell \\ \ell & 0 & <B(t)A(0)> & <B(t)B(0)> & \ell-1 \\ & \ell-1 & 0 & <A(0)B(0)> & \ell \\ & & \ell & 0 & \ell-1 \\ & & & \ell-1 & \end{array} \qquad (3\text{-}17)$$

As contrações calculadas no apêndice B têm, no limite de baixas temperaturas e $H \gg |J|$, as relações seguintes:

$$<A_j(0)B_i(0)> = \delta_{ij} \tag{3-18}$$

$$<A(t)A(0)> = <A(t)B(0)> = -<B(t)A(0)> = -<B(t)B(0)> \tag{3-19}$$

as quais permitem escrever a matriz M na forma mais simples mostrada abaixo,

$$M = \begin{array}{ccccc}
0 & \delta & <A(t)A(0)> & <A(t)A(0)> & \ell \\
\ell & 0 & -<A(t)A(0)> & -<A(t)A(0)> & \ell-1 \\
 & \ell-1 & 0 & \delta & \ell \\
 & & \ell & 0 & \ell-1 \\
 & & & \ell-1 &
\end{array} \tag{3-20}$$

O cálculo da correlação (3-16), implica no cálculo do determinante da matriz M, o qual é levado a efeito pela aplicação sucessiva de operações básicas que são: (1º) *Adição entre linhas e colunas*, que nos dá

$$\det M = \begin{vmatrix}
0 & \delta & <A(t)A(0)> & 0 \\
-\delta & 0 & 0 & 0 \\
-<A(t)A(0)> & 0 & 0 & \delta \\
0 & 0 & -\delta & 0
\end{vmatrix} \tag{3-21}$$

(2º) *Permutação entre linhas e colunas*, obtendo-se

$$\det M = \begin{vmatrix}
-\delta & 0 & 0 & 0 \\
0 & \delta & <A(t)A(0)> & 0 \\
0 & 0 & -\delta & 0 \\
-<A(t)A(0)> & 0 & 0 & \delta
\end{vmatrix} \tag{3-22}$$

(3º) *Expansão em menores*, que possibilita encontrar o resultado final apresentado a seguir

$$\det M = \langle A_\ell(t)A_\ell(0)\rangle^2 \qquad (3\text{-}23)$$

A teoria dos Pfaffians (Mc Coy and Wu, 1973) estabelece que a correlação (3-16) é dada por

$$\langle S_\ell^x(t)S_\ell^x(0)\rangle=(1/4)\left[\det M\right]^{1/2} \qquad (3\text{-}24)$$

obtendo-se portanto a partir de (3-23) e pelo conhecimento das contrações calculadas no apêndice B que, no limite de baixas temperaturas (T=0), a auto-correlação é dada por

$$\langle S_\ell^x(t)S_\ell^x(0)\rangle=(1/4)\left[\cos tH - i\,\mathrm{sen}\,tH\right]\left[J_0(tJ)-(-1)^\ell J_{2\ell}(tJ)\right] \qquad (3\text{-}25)$$

Para o cálculo da correlação transversa entre spins de sitios diferentes, note-se inicialmente que as relações de comutação dos operadores A e B possibilitam escrever (2-23) como

$$\langle S_n^x(t)S_\ell^x(0)\rangle=\frac{1}{4}\left\langle\left[\prod_{j=1}^{n-1}(-B_j(t))A_j(t)\right]A_n(t)\left[\prod_{j=1}^{\ell-1}A_j(0)B_j(0)\right]A_\ell(0)\right\rangle \qquad (3\text{-}26)$$

Fazendo $-B(t)=\alpha(t)$, e $B(0)=\beta(0)$ (3-27)

obtem-se

$$\langle S_n^x(t)S_\ell^x(0)\rangle=\frac{1}{4}\left\langle\left[\prod_{j=1}^{n-1}\alpha_j(t)A_j(t)\right]A_n(t)\left[\prod_{j=1}^{\ell-1}A_j(0)\beta_j(0)\right]A_\ell(0)\right\rangle \qquad (3\text{-}28)$$

As contrações encontradas pela aplicação do teorema de Wick à equação (3-28) podem ser identificadas a partir da equação (3-19), com contrações entre operadores A's, como é mostrado a seguir:

$$\langle\alpha_j(t)A_i(t)\rangle=\langle -B_j(t)A_i(t)\rangle=\langle A_j(t)A_i(t)\rangle$$

$$\langle\alpha_j(t)A_i(0)\rangle=\langle -B_j(t)A_i(0)\rangle=\langle A_j(t)A_i(0)\rangle$$

$$<\alpha_j(t)\beta_i(0)>=<-B_j(t)B_i(0)>=<A_j(t)A_i(0)>$$

$$<A_j(t)\beta_i(0)>=<A_j(t)B_i(0)>=<A_j(t)A_i(0)>$$

$$<A_j(0)\beta_i(0)>=<A_j(0)B_i(0)>=<A_j(0)B_i(0)> \qquad (3\text{-}29)$$

Isto demonstra portanto que, do ponto de vista das contraçoes, é possível fazer a identificação

$$\alpha_j(t)=A_j(t) \quad e \quad \beta_j(0)=A_j(0) \qquad (3\text{-}30)$$

obtendo para a correlação referida em (3-28) a expressão

$$<S_n^x(t)S_\ell^x(t)>=\frac{1}{4}<\left[\prod_{j=1}^{n-1}A_j(t)A_j(t)\right]A_n(t)\left[\prod_{j=1}^{\ell-1}A_j(0)A_j(0)\right]A_\ell(0)> \qquad (3\text{-}31)$$

Como $A_j(0)A_j(0)=I$, segue-se que

$$<S_n^x(t)S_\ell^x(0)>=(1/4)<A_n(t)A_\ell(0)> \qquad (3\text{-}32)$$

e tem-se então

$$<S_n^x(t)S_\ell^x(0)>=$$

$$=\frac{1}{4}\exp(-itH)\left\{\exp\left[i(n-\ell)\frac{\pi}{2}\right]J_{n-\ell}(tJ)-\exp\left[i(n+\ell)\frac{\pi}{2}\right]J_{n+\ell}(tJ)\right\} \qquad (3\text{-}33)$$

É importante ressaltar que a equação acima reproduz a equação (3-25) para a auto-correlação. Note-se também que o resultado encontrado em (3-31) equivale, em última análise, a se tomar $B\equiv A$.

A correlação no interior da cadeia é obtida tomando-se o limite para ℓ infinito e mantendo-se $R=n-\ell$ constante. O resultado encontrado é

$$<S_n^x(t)S_\ell^x(0)>_{\text{no interior da cadeia}}=$$

$$=(1/4)\exp(-itH)\exp\left[i(n-\ell)\pi/2\right]J_{n-\ell}(tJ) \qquad (3\text{-}34)$$

Esta equação mostra que o resultado obtido por Abraham (1972) é exato para êste limite de temperatura. A expansão assintótica de (3-34) para valores grandes de tempo ($t\to\infty$) apresenta uma dependencia temporal de $t^{-1/2}$, resultado que coincide com o encontrado por Mc Coy, Barouch and Abraham (1971).

A influência da fronteira na correlação é analizada a partir da expansão assintótica da equação (3-33). Para valores pequenos de tempo tem-se:

$$<S_n^x(t)S_\ell^x(0)>\simeq$$

$$\simeq\frac{1}{4}\exp(-itH)\exp(iR\frac{\pi}{2})\left\{\frac{(tJ)^R}{2^R R!}-(-1)^\ell\frac{(tJ)^{R+2\ell}}{2^{R+2\ell}(R+2\ell)!}\right\} \qquad (3-35)$$

e como se constata não há influência relevante da fronteira. Para valores grandes de tempo, obtem-se

$$<S_n^x(t)S_\ell^x(0)>\simeq$$

$$\simeq\exp(-itH)\exp(iR\frac{\pi}{2})\ell(R+\ell)\left(\frac{1}{2\pi t^3J^3}\right)^{1/2}\mathrm{sen}(tJ-\frac{R\pi}{2}-\frac{\pi}{4}) \qquad (3-36)$$

Neste limite vê-se portanto que a correlação é fortemente afetada pela fronteira. A dependencia temporal varia de $t^{-1/2}$ para spins no interior da cadeia para $t^{-3/2}$ para spins próximos às extremidades.

CONCLUSÃO

Foi estudada a correlação longitudinal para valores arbitrários de temperatura, sendo encontradas para a mesma, expressões analíticas nos dois limites extremos de $T=0$ e $T=\infty$. A análise da influencia da fronteira mostrou que a mesma só é representativa no limite de tempos muito grandes ($t\to\infty$) e que portanto apenas em $\omega=0$ a resposta do sistema é fortemente afetada pela fronteira.

Na ausência de campo magnético, a correlação transversa para o sistema, foi estudada apenas no limite de altas temperaturas ($T=\infty$), reproduzindo para spins no interior da cadeia o resultado já conhecido para a cadeia fechada.

Para o sistema sob a ação de um campo magnético, estudou-se a correlação transversa nos dois limites extremos de temperatura, logrando-se encontrar uma expressão analítica exata no limite $T=0$ e $H\geqslant|J|$, para spins em posiçẽs arbitrárias. O estudo da influencia da fronteira mostrou, mais uma vez, que a mesma só é efetiva para valores infinitos de tempo.

APÊNDICE A

SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO MATRICIAL (1-16)

Considere-se a equação de autovalor

$$\Phi_k A=\Lambda_k \Phi_k \tag{A-1}$$

onde $\Phi_k=(\Phi_{k1}, \Phi_{k2},..., \Phi_{kN})$ e A é a matriz (1-14).

A equação matricial (A-1) é equivalente ao sistema de equações

$$-H\Phi_{k1}+(J/2)\Phi_{k2}=\Lambda_k\Phi_{k1}$$

$$(J/2)\Phi_{k1}-H\Phi_{k2}+(J/2)\Phi_{k3}=\Lambda_k\Phi_{k2}$$

$$(J/2)\Phi_{k(N-2)}-H\Phi_{k(N-1)}+(J/2)\Phi_{kN}=\Lambda_k\Phi_{k(N-1)}$$

$$(J/2)\Phi_{k(N-1)}-H\Phi_{kN}=\Lambda_k\Phi_{kN} \tag{A-2}$$

que se reduz a

$$(J/2)\Phi_{k(\ell-1)}-H\Phi_{k\ell}+(J/2)\Phi_{k(\ell+1)}=\Lambda_k\Phi_{k\ell} \tag{A-3}$$

com as condições de contorno

$$\Phi_{k0}=\Phi_{k(N+1)}=0 \tag{A-4}$$

Admitindo para (A-3) soluções do tipo $\Phi_{k\ell}=\alpha_k^{\ell}$, (Mc Coy and Wu, 1973), tem-se que

$$\alpha_k^2-(2/J)(H+\Lambda_k)\alpha_k+1=0 \tag{A-5}$$

e a solução geral para a equação acima é

$$\Phi_{k\ell}=a\alpha_{k_I}^{\ell}+b\alpha_{k_{II}}^{\ell} \tag{A-6}$$

onde $\alpha_{k_I}\alpha_{k_{II}}=1$ e $\alpha_{k_I}+\alpha_{k_{II}}=(2/J)(H+\Lambda_k)$ (A-7)

Das condições de contorno (A-4), segue-se que:

$$a+b=0 \quad e$$

$$a\alpha_{k_I}^{N+1}+b\alpha_{k_{II}}^{N+1}=0 \tag{A-8}$$

donde pela condição (A-7) ter-se

$$\alpha_{k_I}^{2(N+1)}=1 \tag{A-9}$$

e portanto

$$\alpha_{k_I}=\exp\left[in\pi/(N+1)\right] \tag{A-10}$$

A solução normalizada de (A-6) é então

$$\Phi_{k\ell}=\left[2/(N+1)\right]^{1/2}\text{sen}k\ell \tag{A-11}$$

onde $k=n\pi/(N+1)$, com $n=1, 2, 3, \ldots, N$

Os autovalores de A são obtidos a partir da expressão (A-7), sendo dados por

$$\Lambda_k=J\cos k-H \tag{A-12}$$

APÊNDICE B

CÁLCULO DAS CONTRAÇÕES BÁSICAS

B-I. Inversibilidade da transformação $\eta_k=\sum_{i=1}^{N}\Phi_{ki}c_i$

Sabe-se que (Tyablikov, 1967) dada uma transformação canônica

$$\eta_k=\sum_{i=1}^{N}(g_{ki}c_i+h_{ki}c_i^\dagger) \tag{B-1}$$

as condições para que a mesma seja inversível são:

$$\sum_k g_{ki}h_{ki}=0 \tag{B-2}$$

$$\sum_k g_{kj}g_{k\ell}=\delta_{\ell j} \tag{B-3}$$

Mostrou-se no capítulo 1, equação (1-19), que a transformação que diagonaliza a hamiltoniana (1-9) é:

$$\eta_k=\sum_{i=1}^{N}\Phi_{ki}c_i \tag{B-4}$$

onde $\Phi_{ki}=\left[2/(N+1)\right]^{1/2}\operatorname{sen}ki$, $k=n\pi/(N+1)$, $n=1,\ 2,\dots,\ N$ e a condição (B-2) segue de imediato.

Por outro lado

$$\sum_k \Phi_{k\ell}\Phi_{kj}=\left[2/(N+1)\right]\sum_{n=1}^{N}\operatorname{sen}\left[nj\pi/(N+1)\right]\operatorname{sen}\left[n\ell\pi/(N+1)\right] \tag{B-5}$$

Se $j=\ell$ obtem-se

$$\sum_k \Phi_{kj}\Phi_{k\ell}=\left[-1/(N+1)\right]\sum_{n=1}^{N}\left\{\cos\left[(j+\ell)\pi n/(N+1)\right]-1\right\} \tag{B-6}$$

e após algum cálculo

$$\sum_k \Phi_{kj}\Phi_{k\ell}=1 \tag{B-7}$$

Se $j \neq \ell$ procede-se analogamente e demonstra-se que

$$\sum_k \Phi_{k\ell}\Phi_{kj} = 0 \tag{B-7'}$$

A transformação (B-4) é portanto inversível e tem-se

$$c_j = \sum_k \Phi_{kj}\eta_k \tag{B-8}$$

onde Φ_{kj} e k têm os valores definidos em (B-4).

B-II. Cálculo das contrações para o sistema sem campo.

Cálculo de $<A_n(t)A_\ell(0)>$:

$$<A_n(t)A_\ell(0)> = <\left[c_n^\dagger(t)+c_n(t)\right]\left[c_\ell^\dagger(0)+c_\ell(0)\right]> \tag{B-9}$$

Por (B-8) tem-se então, $<A_n(t)A_\ell(0)>=$

$$= \sum_{kk'} \left\langle e^{iHt}(\Phi_{k'n}\eta_{k'}^\dagger+\Phi_{k'n}\eta_{k'})e^{-iHt}(\Phi_{k\ell}\eta_k^\dagger+\Phi_{k\ell}\eta_k)\right\rangle \tag{B-10}$$

obtendo-se após cálculos simples

$$<A_n(t)A_\ell(0)> = \sum_k \Phi_{kn}\Phi_{k\ell}\left[\cos\Lambda_k t - i\,th(\beta\Lambda_k/2)\,sen\Lambda_k t\right] \tag{B-11}$$

No limite termodinâmico e após substituições dos valores de Φ_{kj} e Λ_k obtem-se, $<A_n(t)A_\ell(0)>=$

$$= \frac{1}{\pi}\int_0^\pi \left[\cos(n-\ell)k-\cos(n+\ell)k\right]\left[\cos(tJ\cos k)-i\,sen(tJ\cos k)\,th\left(\frac{J\cos k}{2KT}\right)\right]dk \tag{B-12}$$

onde K é a constante de Boltzmann

Cálculo de $<B_n(t)A_\ell(0)>$:

$$<B_n(t)A_\ell(0)> = <\left[c_n^\dagger(t)-c_n(t)\right]\left[c_\ell^\dagger(0)+c_\ell(0)\right]> \tag{B-13}$$

De (B-8) segue que $<B_n(t)A_\ell(0)>=$

$$= \sum_{kk'} \left\langle e^{iHt}(\Phi_{k'n}\eta_{k'}^\dagger-\Phi_{k'n}\eta_{k'})e^{-iHt}(\Phi_{k\ell}\eta_k^\dagger+\Phi_{k\ell}\eta_k)\right\rangle \tag{B-14}$$

Donde ter-se

$$<B_n(t)A_\ell(0)> = \sum_k \Phi_{kn}\Phi_{k\ell}\left[i\,\mathrm{sen}(\Lambda_k t) - \cos(\Lambda_k t)\,\mathrm{th}(\beta\Lambda_k/2)\right] \quad (B-15)$$

No limite termodinâmico e após as substituições dos valores de Φ_{kj} e Λ_k obtem-se

$$<B_n(t)A_\ell(0)> =$$

$$=(1/\pi)\int_0^\pi \left[\cos(n-\ell)k - \cos(n+\ell)k\right]\left[i\,\mathrm{sen}(tJ\cos k) - \cos(tJ\cos k)\,\mathrm{th}\left(\frac{J\cos k}{2KT}\right)\right]dk$$

(B-16)

Da análise do desenvolvimento de $<A_n(t)A_\ell(0)>$ e $<B_n(t)A_\ell(0)>$ nota-se evidentemente que

$$<B_n(t)B_\ell(0)> = -<A_n(t)A_\ell(0)> \quad (B-17)$$

e

$$<A_n(t)B_\ell(0)> = -<B_n(t)A_\ell(0)> \quad (B-18)$$

Quando tratadas no limite $T=\infty$, levando em conta que $\mathrm{th}(J\cos k/2KT)=0$, (B-12) se reduz a

$$<A_n(t)A_\ell(0)> = (1/\pi)\left[\int_0^\pi \cos(n-\ell)k\cos(tJ\cos k)\,dk - \int_0^\pi \cos(n+\ell)k\cos(tJ\cos k)\,dk\right] \quad (B-19)$$

Donde, tendo em consideração (B-17), encontrar-se (Gradshteyn, 1965):

$$<A_n(t)A_\ell(0)> = -<B_n(t)B_\ell(0)> =$$

$$= \cos\left[(n-\ell)\pi/2\right]J_{n-\ell}(tJ) - \cos\left[(n+\ell)\pi/2\right]J_{n+\ell}(tJ) \quad (B-20)$$

Para este mesmo limite de temperatura (B-16) é escrito como:

$$<B_n(t)A_\ell(0)> =$$

$$= \frac{i}{\pi}\left[\int_0^\pi \cos(n-\ell)k\,\mathrm{sen}(tJ\cos k)\,dk - \int_0^\pi \cos(n+\ell)k\,\mathrm{sen}(tJ\cos k)\,dk\right] \quad (B-21)$$

e por (B-18), (Gradshteyn, 1965), temos

$$<B_n(t)A_\ell(0)>=-<A_n(t)B_\ell(0)>=$$

$$=i\left\{\text{sen}\left[(n-\ell)\frac{\pi}{2}\right]J_{n-\ell}(tJ)-\text{sen}\left[(n+\ell)\frac{\pi}{2}\right]J_{n+\ell}(tJ)\right\} \qquad \text{(B-22)}$$

onde J é a função de Bessel de primeira espécie.

Para o limite de temperatura T=0, tem-se

$$\text{th}\left[(J\cos k)/(2KT)\right]=\begin{cases} 1 & \text{para} \quad 0\leqslant k<\pi/2 \\ -1 & \text{"} \quad (\pi/2)<k\leqslant\pi \end{cases} \qquad \text{(B-23)}$$

e a equação (B-12) pode então ser escrita como:

$$<A_n(t)A_\ell(0)>=\frac{1}{\pi}\left[\int_0^\pi \cos(n-\ell)k\cos(tJ\cos k)dk-\int_0^\pi \cos(n+\ell)k\cos(tJ\cos k)dk\right]+$$
$$-\frac{i}{\pi}\left[\int_0^{\pi/2}\left[\cos(n-\ell)k-\cos(n+\ell)k\right]\text{sen}(tJ\cos k)dk-\int_{\pi/2}^{\pi}\left[\cos(n-\ell)k-\cos(n+\ell)k\right]\text{sen}(tJ\cos k)dk\right]$$

(B-24)

E, após algun desenvolvimento algébrico encontra-se

$$<A_n(t)A_\ell(0)>=-<B_n(t)B_\ell(0)>=$$

$$=\cos\left[(n-\ell)\pi/2\right]F_{n-\ell}(tJ)-\cos\left[(n+\ell)\pi/2\right]F_{n+\ell}(tJ) \qquad \text{(B-25)}$$

Da mesma forma,

$$<B_n(t)A_\ell(0)>=$$

$$=\frac{1}{\pi}\left\{-\int_0^{\pi/2}\left[\cos(n-\ell)k-\cos(n+\ell)k\right]\cos(tJ\cos k)dk+\int_{\pi/2}^{\pi}\left[\cos(n-\ell)k-\cos(n+\ell)k\right]\cos(tJ\cos k)dk\right\}+$$
$$+\frac{i}{\pi}\int_0^{\pi}\left[\cos(n-\ell)k-\cos(n+\ell)k\right]\text{sen}(tJ\cos k)dk \qquad \text{(B-26)}$$

obtendo-se após algum cálculo (Gradshteyn, 1965)

$$<B_n(t)A_\ell(0)>=-<A_n(t)B_\ell(0)>=$$

$$=i\left\{\text{sen}\left[(n-\ell)\pi/2\right]F_{n-\ell}(tJ)-\text{sen}\left[(n+\ell)\pi/2\right]F_{n+\ell}(tJ)\right. \qquad \text{(B-27)}$$

A função F que aparece nas equações (B-25) e (B-27) é dada por

$F=J+iE$, onde J é a função de Bessel de primeira espécie e E é a função de Weber.

As contrações estáticas podem ser obtidas a partir de (B-20), (B-22), (B-25) e (B-27) fazendo nas mesmas $t=0$.

B-III. Cálculo das contrações para o sistema com campo magnético.

Para o sistema sob a ação de um campo magnético tem-se pela equação (1-19) e (1-20) que:

$$\Lambda_k = J\cos k - H \qquad \text{(B-28)}$$

e, $\Phi_{k\ell} = \left[2/(N+1)\right]^{1/2} \operatorname{sen} k\ell$, onde $k=n\pi/(N+1)$ e $n=1,2,..,N$

A substituição desses valores na equação referida por (B-11) dá como resultado para o limite termodinâmico

$$\langle A_n(t)A_\ell(0)\rangle =$$

$$=\frac{1}{\pi}\int_0^{\pi} \operatorname{sen} k\ell \operatorname{sen} kn \left\{\cos\left[t(J\cos k-H)\right] - i\operatorname{sen}\left[t(J\cos k-H)\right] \operatorname{th}\left(\frac{J\cos k-H}{2KT}\right)\right\} dk \qquad \text{(B-29)}$$

Da mesma maneira, segue-se de (B-15) que

$$\langle B_n(t)A_\ell(0)\rangle =$$

$$=\frac{1}{\pi}\int_0^{\pi} \operatorname{sen} k\ell \operatorname{sen} kn \left\{\cos\left[t(J\cos k-H)\right] \operatorname{th}\left(\frac{J\cos k-H}{2KT}\right) - i\operatorname{sen}\left[t(J\cos k-H)\right]\right\} dk \qquad \text{(B-30)}$$

Quando tratadas no limite $T=\infty$, pelo fato de se ter $\operatorname{th}\left[(J\cos k-H)/(2KT)\right]=0$, (B-29) se reduz a

$$\langle A_n(t)A_\ell(0)\rangle =$$

$$=\frac{1}{\pi}\left[\int_0^{\pi} \cos(n-\ell)k \cos\left[t(J\cos k-H)\right] dk - \int_0^{\pi} \cos(n+\ell)k \cos\left[t(J\cos k-H)\right] dk\right] \qquad \text{(B-31)}$$

donde, tendo em consideração (B-17) encontrar-se:

$$<A_n(t)A_\ell(0)>=-<B_n(t)B_\ell(0)>=$$

$$=\cos\left[(n-\ell)\frac{\pi}{2}-tH\right]J_{n-\ell}(tJ)-\cos\left[(n+\ell)\frac{\pi}{2}-tH\right]J_{n+\ell}(tJ) \qquad (B-32)$$

Para este mesmo limite de temperatura (B-30) é escrita como: $<B_n(t)A_\ell(0)>=$

$$=-\frac{i}{\pi}\left[\int_0^\pi \cos(n-\ell)k\,\mathrm{sen}\left[t(J\cos k-H)\right]dk-\int_0^\pi \cos(n+\ell)k\,\mathrm{sen}\left[t(J\cos k-H)\right]dk\right] \qquad (B-33)$$

e por (B-18), segue que (Gradshteyn, 1965)

$$<B_n(t)A_\ell(0)>=-<A_n(t)B_\ell(0)>=$$

$$=-i\left\{\mathrm{sen}\left[(n-\ell)\frac{\pi}{2}-tH\right]J_{n-\ell}(tJ)-\mathrm{sen}\left[(n+\ell)\frac{\pi}{2}-tH\right]J_{n+\ell}(tJ)\right\} \qquad (B-34)$$

Para o limite de temperatura $T=0$ e $H\geq J$ tem-se que $\mathrm{th}\left[(J\cos k-H)/(2KT)\right]=-1$ e a equação (B-29) pode ser escrita como: $<A_n(t)A_\ell(0)>=$

$$=\frac{1}{\pi}\int_0^\pi \mathrm{sen}k\ell\,\mathrm{sen}kn\left\{\cos\left[t(J\cos k-H)\right]+i\,\mathrm{sen}\left[t(J\cos k-H)\right]\right\}dk \qquad (B-35)$$

e, nesse mesmo limite a equação (B-30) fica

$$<B_n(t)A_\ell(0)>=$$

$$=-\frac{1}{\pi}\int_0^\pi \mathrm{sen}k\ell\,\mathrm{sen}kn\left\{\cos\left[t(J\cos k-H)\right]+i\,\mathrm{sen}\left[t(J\cos k-H)\right]\right\}dk \qquad (B-36)$$

A análise das equações (B-17), (B-18), (B-35) e (B-36) mostra que para $T=0$ obtem-se (Gradshteyn, 1965)

$$<A_n(t)A_\ell(0)>=-<B_n(t)B_\ell(0)>=-<B_n(t)A_\ell(0)>=<A_n(t)B_\ell(0)>=$$

$$=\exp(-itH)\left\{\exp\left[i(n-\ell)\frac{\pi}{2}\right]J_{n-\ell}(tJ)-\exp\left[i(n+\ell)\frac{\pi}{2}\right]J_{n+\ell}(tJ)\right\} \qquad (B-37)$$

As contrações estáticas podem ser obtidas a par tir de (B-32), (B-34) e (B-37) tomando-se nas mesmas t=0

APÊNDICE C

A TRANSFORMAÇÃO CANÔNICA $\theta\to\tilde{\theta}$

Considere-se o operador

$$U=e^{-i\sum_{\ell=1}^{N}\varepsilon_\ell c_\ell^\dagger c_\ell} \qquad (C-1)$$

onde c e $c^\dagger$ são operadores de Fermi. Êsse operador, assim definido, é unitário, uma vez que obviamente

$$U^\dagger=U^{-1} \qquad (C-2)$$

e a transformação

$$\theta\to\tilde{\theta}=U\theta U^{-1} \qquad (C-3)$$

é portanto canônica.

O efeito desta transformação sôbre os operadores A e B, definidos pela equação (2-6), pode ser analizado a partir do estudo do operador $\tilde{c}^\dagger$ o qual é dado por:

$$\tilde{c}^\dagger=e^{i\sum_{\ell}\varepsilon_\ell c_\ell^\dagger c_\ell}\, c_j^\dagger\, e^{-i\sum_{\ell}\varepsilon_\ell c_\ell^\dagger c_\ell} \qquad (C-4)$$

O uso da expansão

$$e^A B e^{-A}=B+[A,B]+\frac{1}{2}[A,[A,B]]+\ldots \qquad (C-5)$$

permite escrever $\tilde{c}_j^\dagger$ como

$$\tilde{c}_j^\dagger=e^{i\varepsilon_j}c_j^\dagger \qquad (C-6)$$

Esta transformação é particularmente interessante para $\varepsilon_\ell=\pi\ell/2$, pois neste caso obtêm-se relações entre os operadores A e $\tilde{A}$, B e $\tilde{B}$ que simplificam o cálculo da correlação transversa $\langle S_j^x(t)S_\ell^x(0)\rangle$.

Para o valor de ε_ℓ definido no parágrafo anterior, encontra-se que

$$\bar{A}_j = e^{i\frac{\pi}{2}j} c_j^{+} + e^{-i\frac{\pi}{2}j} c_j \tag{C-7}$$

e

$$\bar{B}_j = e^{i\frac{\pi}{2}j} c_j^{+} - e^{-i\frac{\pi}{2}j} c_j \tag{C-8}$$

expressões que em função de A e B são escritas como:

$$\bar{A}_j = \left[\cos(j\pi/2)\right] A_j + i\left[\mathrm{sen}(j\pi/2)\right] B_j \tag{C-9}$$

$$\bar{B}_j = \left[\cos(j\pi/2)\right] B_j + i\left[\mathrm{sen}(j\pi/2)\right] A_j \tag{C-10}$$

A partir das equações acima, vê-se imediatamente que

$$\bar{A}_j = \begin{cases} (-1)^{j/2} A_j & \text{se } j \text{ par} \\ i(-1)^{(j-1)/2} B_j & \text{se } j \text{ impar} \end{cases} \tag{C-11}$$

$$\bar{B}_j = \begin{cases} (-1)^{j/2} B_j & \text{se } j \text{ par} \\ i(-1)^{(j-1)/2} A_j & \text{se } j \text{ impar} \end{cases} \tag{C-12}$$

$$\bar{A}_j \bar{B}_\ell = \begin{cases} (-1)^{\ell+j} A_j B_\ell & \text{se } j,\ell \text{ pares} \\ (-1)^{(j+\ell)/2} B_j A_\ell & \text{se } j,\ell \text{ impares} \\ i(-1)^{(2j+\ell-1)/2} A_j A_\ell & \text{se } j \text{ par e } \ell \text{ impar} \end{cases} \tag{C-13}$$

$$\bar{A}_j \bar{A}_\ell = \begin{cases} (-1)^{\ell+j} A_j A_\ell & \text{se } j,\ell \text{ pares} \\ (-1)^{(j+\ell)/2} B_j B_\ell & \text{se } j,\ell \text{ impares} \\ i(-1)^{(2j+\ell-1)/2} A_j B_\ell & \text{se } j \text{ par e } \ell \text{ impar} \end{cases} \tag{C-14}$$

$$\bar{B}_j \bar{B}_\ell = \begin{cases} (-1)^{\ell+j} B_j B_\ell & \text{se } j,\ell \text{ par} \\ (-1)^{(j+\ell)/2} A_j A_\ell & \text{se } j,\ell \text{ impares} \\ i(-1)^{(2j+\ell-1)/2} B_j A_\ell & \text{se } j \text{ par e } \ell \text{ impar} \end{cases} \tag{C-15}$$

As equações que acabamos de relacionar evidenciam que qualquer produto de operadores A's e B's poderá ser transformado num produto de $\bar{A}$'s e $\bar{B}$'s. A correlação transversa pode consequentemente ser escrita em função dos novos operadores.

As médias dos operadores transformados são facilmente encontradas em função das médias dos operadores não transformados, na forma

$$<\bar{A}_j(t)\bar{A}_\ell(0)>=-<\bar{B}_j(t)\bar{B}_\ell(0)>=$$

$$= \cos\left[(j-\ell)\pi/2\right] <A_j(t)A_\ell(0)>-i\,\text{sen}\left[(j-\ell)\pi/2\right] <A_j(t)B_\ell(0)> \quad (C-16)$$

e

$$<\bar{A}_j(t)\bar{B}_\ell(0)>=-<\bar{B}_j(t)\bar{A}_\ell(0)>=$$

$$=\cos\left[(j-\ell)\pi/2\right] <A_j(t)B_\ell(0)>-i\,\text{sen}\left[(j-\ell)\pi/2\right] <A_j(t)A_\ell(0)> \quad (C-17)$$

O cálculo das expressões acima para o sistema sem campo apresenta os resultados seguintes: (1) No limite de baixas temperaturas, T=0

$$<\bar{A}_j(t)\bar{A}_\ell(0)>=-<\bar{B}_j(t)\bar{B}_\ell(0)>=$$

$$= \cos\left[(j-\ell)\pi\right] F_{j-\ell}(tJ)-\cos(j\pi)F_{j+\ell}(tJ) \quad (C-18)$$

$$<\bar{A}_j(t)\bar{B}_\ell(0)>=-<\bar{B}_j(t)\bar{A}_\ell(0)>=0 \quad (C-19)$$

e (2) no limite de altas temperaturas, $T=\infty$

$$<\bar{A}_j(t)\bar{A}_\ell(0)>=-<\bar{B}_j(t)\bar{B}_\ell(0)>=$$

$$= \cos\left[(j-\ell)\pi\right] J_{j-\ell}(tJ)-\cos(j\pi)J_{j+\ell}(tJ) \quad (C-20)$$

$$<\bar{A}_j(t)\bar{B}_\ell(0)>=-<\bar{B}_j(t)\bar{A}_\ell(0)>=0 \quad (C-21)$$

onde F=J+iE, J é a função de Bessel de primeira espécie e E é a função de Weber (vide apêrdice B).

APÊNDICE D

CÁLCULO DO DETERMINANTE DE TOEPLITZ

O teorema de Szegö-Kac estabelece que se

$$D_N = \left| C_{i-j} \right|_0^{N-1}$$

é um determinante de Toeplitz cujos elementos C_n satisfazem as condições:

a) $\sum_{n=-\infty}^{\infty} |C_n| < \infty$

b) $\sum_{n=-\infty}^{\infty} |n| |C_n|^2 < \infty$

c) $C(\theta) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n e^{in\theta} \neq 0 \quad \forall \theta$

d) $\nu(C) = (2\pi)^{-1} \left[\arg\{C(2\pi)\} - \arg\{C(0)\} \right] = 0$

então, $$\lim_{N\to\infty} \left[\ln(D_N) - NK_0 \right] = \sum_{n=0}^{\infty} n K_n K_{-n} \qquad \text{(D-1)}$$

onde $$K_n(C) = (1/2\pi) \int_0^{2\pi} \ln C(\theta)\, e^{-in\theta} d\theta$$

O determinante da equação (2-33) é um determinante de Toeplitz cujos elementos são:

$$C_n = (-1)^n J_n(tJ) \qquad \text{(D-2)}$$

As condições (a) e (b) são satisfeitas neste caso (Perk and Capel, 1977) uma vez que

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} |(-1)^n J_n(tJ)| \leq 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} |J_n(tJ)| \leq 1 + 2 \left(\sum_{n=1}^{\infty} n^{-2} \right)^{1/2} \left(\sum_{n=1}^{\infty} n^2 J_n^2(tJ) \right)^{1/2} = 1 + \frac{\pi t J}{\sqrt{6}} < \infty$$

$$e, \quad \sum_{n=-\infty}^{\infty} |n| |(-1)^n J_n(tJ)|^2 \leq 2 \sum_{n=1}^{\infty} n^2 J_n^2(tJ) = \frac{J^2 t^2}{2} < \infty$$

As relações (c) e (d) verificadas a seguir mostram a viabilidade da aplicação do teorema.

Considere-se

$$C(\theta) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-1)^n J_n(tJ) e^{in\theta} \tag{D-3}$$

o qual pode ser escrito como

$$C(\theta) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(tJ) e^{in(\theta+\pi)} \tag{D-4}$$

mas, é conhecido que (Gradshteyn, 1965)

$$e^{iz\cos\phi} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(z) e^{in(\phi+\pi/2)} \tag{D-5}$$

e a comparação de (D-4) e (D-5) mostra que

$$C(\theta) = e^{itJ\cos(\theta+\pi/2)} \tag{D-6}$$

a condição (c) sendo portanto satisfeita. A verificação da relação (d) é imediata uma vez que

$$C(0) = C(2\pi) = 1 \tag{D-7}$$

O determinante (2-33) pode portanto ser calculado usando-se a equação (D-1). A substituição de (D-6) na expressão que define $K_n(C)$ mostra que

$$K_0 = -(itJ/2\pi) \int_0^{2\pi} \operatorname{sen}\theta \, d\theta = 0 \tag{D-8}$$

e

$$K_n = -(itJ/2\pi) \int_0^{2\pi} \operatorname{sen}\theta \, e^{-in\theta} d\theta = -(tJ/2)\delta_{1n} \tag{D-9}$$

e o determinante procurado é portanto

$$D_N = \exp(-t^2 J^2/4) \tag{D-10}$$

REFERÊNCIAS

Abraham D. B. - Studies in Applied Mathematics, vol. LI, nº 2, 179-209, june 1972.

Brandt U. and Jacoby K., Z Physik B 25, 181-187, 1976 e Z Physik B 26, 245-252, 1977.

Caianiello E. R., Il Nuovo Cimento, vol. X, nº 12, 1634, 1953

Capel H. W., Van Dongen E. J. and Siskens J., Physica 76A , 445, 1974.

Davydov A.S. - Quantum Mechanics, pag.240, Addyson Wesley Publishing Company, Inc, 1965.

Gradshteyn I. S., Ryzhik I. M. - Table of Integrals Series and Products, pags. 402 e 973, Academic Press, New York and London, 1965.

Gonçalves L. L. and Cruz H. B. a ser publicado, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 1979.

Hartwig R. E., Fisher M. E., Archive for Rational Mechanics an Analysis, 32, 1969.

Jordan P. and Wigner E., Z Physik 47, 631, 1928.

Katsura S. - The Physical Review, vol. 127, nº 5, 1508-1518 , September 1, 1962.

Katsura S., Horiguchi T. and Suzuki M., Physica 46, 67-86 , 1970.

Lieb E. H., Schultz T. and Mattis D. C., Annals of Physics 16, 407, 1961.

Mc Coy B. M., Barouch E. and Abraham D. B., Physical Review, vol. 4, nº 6, 2331-2341, December 1971.

Mc Coy B. M. and Wu T. T. - The two-dimensional Ising Model pag. 47, 67, Havard University Press,Cambridg, Massachusetts, 1973.

Niemeijer, Physica 36, 377, 1967.

Perk J. H. H. and Capel H. W. Physica 89A, 265, 1977.

Pesch W. and Mikeska H. J., Z Physic B30, 177-182, 1978.

Pfeuty P. , Annals of Physics 57, 79-90, 1970.

Tyablikov S. V. - Methods in the quantum theory of Magnetism, pag. 106, Plenum Press, New York, 1967.