

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
Instituto de Física

Daniel Zorrer

Hamiltoniano de Heisenberg: Diagonalização Exata e Ansatz de
Bethe Coordenado

Porto Alegre
2023

Daniel Zorrer

Hamiltoniano de Heisenberg: Diagonalização Exata e Ansatz de
Bethe Coordenado

Trabalho de Conclusão de Curso submetido à Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como requisito necessário para obtenção do grau de Bacharel em Física.

Porto Alegre, setembro de 2023

Agradecimentos

Aos meus pais, Isac e Rose, por estarem sempre ao meu lado e me proporcionarem a oportunidade de trilhar esta jornada;

Ao meu orientador, prof. Dr. Gerardo Martínez, pela paciência com minhas dificuldades, valiosos esclarecimentos e opiniões sempre sinceras;

Ao prof. Dr. Sílvio Dahmen, pelas agradáveis conversas e por todo o auxílio prestado, seja em matéria do presente trabalho ou de minha jornada profissional;

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e, por acréscimo, ao povo brasileiro, por proporcionarem o financiamento necessário para a realização deste trabalho;

A todos os colegas, professores, técnicos e funcionários da UFRGS que contribuíram para que eu chegasse até aqui;

Finalmente, agradeço Àquele que é somente ato, não mesclado de potência.

Resumo

No presente trabalho, realizou-se um estudo acerca do Hamiltoniano quântico unidimensional de Heisenberg de spin $1/2$ para sistemas compostos por dois, três e quatro sítios. Primeiramente o modelo foi resolvido, tanto na sua variante isotrópica quanto anisotrópica, através do método da Diagonalização Exata, obtendo-se, dessa forma, as autoenergias e autoestados associados. Nesse ínterim, buscou-se descrever o comportamento do sistema quando da interação com um campo magnético externo, tendo sido observado, dentre outros, o levantamento das degenerescências energéticas. Posteriormente resolveu-se novamente o modelo, via o Ansatz de Bethe Coordenado: os resultados energéticos foram interpretados em termos de mágnons, *i.e.* excitações elementares da rede de spins. Quando da situação de dois ou mais sítios, pôde-se reformular o problema na abordagem de muitos corpos, que requerem a resolução das chamadas Equações de Bethe e, por acréscimo, a obtenção dos números quânticos de Bethe. Por fim, realizou-se uma breve discussão sobre o significado físico dos resultados obtidos.

Palavras-chave: Magnetismo quântico, Hamiltoniano de Heisenberg, Ansatz de Bethe.

Abstract

In the present work, a study was carried out on the one-dimensional quantum Heisenberg Hamiltonian of spin $1/2$ for systems composed of two, three and four sites. Firstly, the model was solved, both in its isotropic and anisotropic variants, using the Exact Diagonalization method, thus obtaining the associated eigenenergies and eigenstates. In the meantime, an attempt was made to describe the behavior of the system when interacting with an external magnetic field, having observed, among others, the lifting of the energetic degeneracies. After that, the model was solved once again, now using the Coordinate Bethe Ansatz: the energetic results were interpreted in terms of magnons, *i.e.* elementary excitations of the spin lattice. When dealing with two or more sites, the problem could be reformulated in the multi-body approach, which required the resolution of the so-called Bethe Equations and, in addition, obtaining the Bethe quantum numbers. Finally, there was a brief discussion about the physical meaning of the results obtained.

Keywords: Quantum magnetism, Heisenberg Hamiltonian, Bethe Ansatz.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	8
2	SPIN	11
2.1	Cadeias quânticas de spins	12
2.2	Condições de contorno periódicas	13
3	HAMILTONIANO DE HEISENBERG	14
3.1	Adição de campo magnético externo	14
3.2	Modelo Anisotrópico (XXZ)	16
3.3	Modelo Isotrópico (XXX).	16
4	DOIS SÍTIOS	17
4.1	Diagonalização	18
4.2	Autoenergias	19
4.3	Interação com campo magnético externo	21
4.4	Autoestados	22
5	TRÊS SÍTIOS	23
5.1	Autoenergias	26
5.2	Interação com campo magnético externo	29
5.3	Autoestados	30
6	QUATRO SÍTIOS	31
6.1	Autoenergias	32
6.2	Interação com campo magnético externo	34
6.3	Autoestados	36
7	ANSATZ DE BETHE COORDENADO	37
7.1	Caso $M=0$	37
7.2	Caso $M=1$	38
7.3	Caso $M=2$	39
7.4	Caso geral	47
8	EPÍLOGO	54

9	CONSIDERAÇÕES FINAIS	55
A	APÊNDICE: INTERAÇÃO DE TROCA	56
B	APÊNDICE: SIMETRIAS	59
	Referências	60

1 Introdução

O fenômeno da atração de corpos eletrizados é conhecido, pelo menos, desde a Grécia Antiga: Tales de Mileto (640-546 A.C.) registrou um fenômeno peculiar, no qual âmbar atritado atraía certos objetos, como pequenos pedaços de palha e penas. Passados quase vinte séculos, o médico e polímata inglês William Gilbert (1544-1603) dedicou-se ao estudo sistemático desses fenômenos, sendo o primeiro a reconhecer, com clareza, a diferença entre fenômenos de natureza elétrica e magnética. Etimologicamente, a palavra *elétrico* provém do grego *elektron*, isto é, âmbar. Já a palavra *magnético* advém do topônimo *Magnesia*, região da Hélade onde se encontrava um minério dotado de propriedades magnéticas.

Posteriormente, em 1729, o tintureiro – físico e astrônomo amador – Stephen Gray (1666-1736) observou que a atração e repulsão elétrica podiam ser, digamos, transferidas de um corpo para outro quando estes eram ligados por certos materiais, particularmente metais. Isso representou a descoberta da condução elétrica, mostrando que a eletricidade tinha, afinal, existência própria, *i.e.* não surgia apenas mediante a fricção de um corpo. Alguns anos mais tarde, em 1737, o químico francês Charles du Fay (1698-1739) descreveu, pioneiramente, a existência da atração e repulsão em termos de cargas elétricas.

Em 1747, o futuro *Founding Father* Benjamin Franklin (1706-1790) propôs a existência de um só fluido para os fenômenos elétricos, o que implicava na chamada *lei da conservação de carga*. Nesse contexto, o excesso e a deficiência de tal fluido podiam ser caracterizados pelos sinais mais e menos, respectivamente: a bem da verdade foi uma escolha não muito fortuita, tendo em vista que contemporaneamente sabe-se que são os elétrons – carga negativa – que são transferidos em um processo, por exemplo, de atrito.

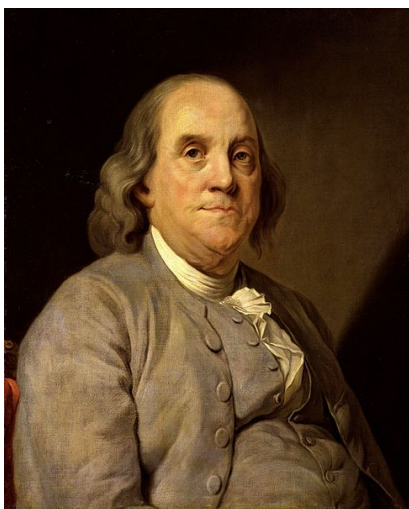


Figura 1 – Benjamin Franklin

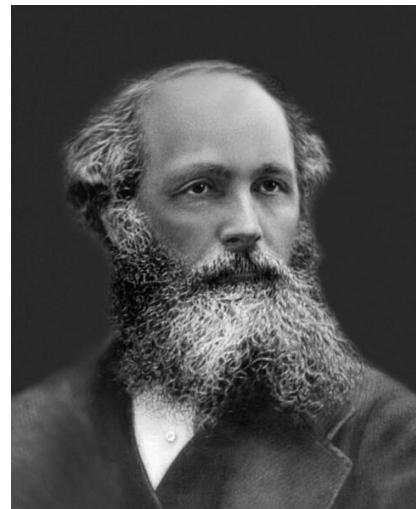


Figura 2 – James Clerk Maxwell

Nesse contexto, um amigo de Franklin, o clérigo britânico Joseph Priestley (1733-1804), concluiu, com base em experimentos de outra natureza, que a força entre duas cargas variava com o inverso do quadrado da distância entre elas. A confirmação experimental da chamada *lei do inverso dos quadrados para as interações elétricas* ocorreria por meio do trabalho do físico francês Charles Augustin de Coulomb (1736-1806).

Entre o crepúsculo do século XIX e o alvorecer do século XX, muito progresso havia sido realizado na tarefa de compreender o fenômeno da eletricidade e do magnetismo: com base no trabalho de uma plêiade de gênios, James Clerk Maxwell (1831-1879) havia formulado suas famosas leis, condensando, por assim dizer, os fenômenos elétricos e magnéticos em uma nova área da física, o Eletromagnetismo. Apesar desses avanços, o mecanismo microscópico por trás de tais fenômenos ainda não era compreendido.



Figura 3 – Werner Heisenberg



Figura 4 – Hans Bethe

Tal explicação viria somente com o advento da Mecânica Quântica, em meados do século XX. Em 1926, de forma independente, os físicos Paul A. M. Dirac (1902-1984) e Werner Karl Heisenberg (1901-1976) mostraram que o Princípio da Exclusão de Pauli conduzia a uma interação efetiva entre os spins eletrônicos dos átomos, resultando num *overlapping* das funções de onda. Tal fenômeno foi denominado interação de troca (*exchange interaction*) e constituiu a base para o famoso Hamiltoniano quântico de Heisenberg, proposto originalmente em 1928 por Werner Heisenberg como um modelo lúdico (*toy model*) para o estudo do magnetismo.

Neste trabalho, o modelo de Heisenberg será resolvido até o caso de quatro sítios através da Diagonalização Exata: adotando condições de contorno periódicas, o hamiltoniano será escrito no formato matricial, a depender do número de sítios do sistema, e então será realizada uma diagonalização por blocos. Através de transformações de similaridade obter-se-á uma matriz diagonal, onde cada elemento da diagonal principal corresponde a uma autoenergia do sistema. Por fim, serão apresentados os autoestados correspondentes. Nesse contexto, é importante salientar que as condições de contorno periódicas não são

as únicas possíveis, *i.e.* existem outras variantes, *e.g.* condições abertas e antiperiódicas. Estas, no entanto, levam a resultados diferentes.

Posteriormente o referido modelo será novamente resolvido, desta vez utilizando o Ansatz de Bethe Coordenado, proposto em 1931 pelo físico – também alemão – Hans Albrecht Bethe (1906-2005). Trata-se de uma técnica analítica que visa determinar as autoenergias e autoestados do sistema através da resolução de uma equação de autovalores e autovetores, onde estes últimos são escritos em termos de ondas planas, cada qual dotada de um *quasimomentum*. Nesse ínterim, é possível encontrar a energia de uma excitação elementar da rede de spins – o *mágnon* – associada ao *flip* de um spin da cadeia. Para o caso de dois ou mais spins flipados, ocorre a superposição das funções de onda correspondentes a cada *mágnon*, de modo que é realizada uma soma sobre todas as possíveis permutações do sistema, o que implica que o problema é reduzido a uma interação de dois corpos. Essa estrutura de funções de onda superpostas significa que o sistema é integrável, ou seja, admite um conjunto completo de integrais de movimento, possuindo, dessa forma, grandezas conservadas. Estas somente são acessíveis através da variante algébrica do Ansatz de Bethe.

O presente trabalho restringiu-se ao estudo do Ansatz de Bethe Coordenado em detrimento do Ansatz de Bethe Algébrico, tendo em vista a natureza, por assim dizer, de cada método. De maneira simplificada, é possível interpretar as soluções obtidas via Ansatz Coordenado através de excitações elementares da rede (*mágnons*), ao passo que o Ansatz Algébrico utiliza um *approach* mais formal, levando a caminhos e conclusões diferentes, os quais estão além do escopo desta monografia.

Nosso estudo alcançou um grau de desenvolvimento ao ponto de conseguirmos comparar os dois métodos expostos, a Diagonalização Exata e o Ansatz de Bethe Coordenado, para o caso de três e quatro sítios no caso do Hamiltoniano de Heisenberg isotrópico, encontrando grande consistência entre ambos procedimentos, como mostra a comparação das tabelas 2 e 3, na página 47 do Capítulo 7, com os resultados da diagonalização exata dos Capítulos 5 e 6.

2 Spin

No contexto da Mecânica Clássica, um corpo rígido possui associado a si dois tipos de momentum angular, a saber: orbital, relacionado ao movimento do centro de massa, e rotacional – *spin*, em inglês –, relacionado ao movimento em torno do centro de massa. Em última análise, trata-se do mesmo fenômeno visto sob pontos de vista distintos: o momentum angular rotacional nada mais é do que a soma total dos momenta angulares orbitais de todos os componentes do referido corpo, na medida que estes realizam um movimento circular ao redor de um eixo hipotético que cruza o centro de massa do objeto.

No contexto da Mecânica Quântica, algo semelhante ocorre: no caso do átomo de hidrogênio, por exemplo, o movimento do elétron ao redor do núcleo implica haver um momentum angular orbital associado. No entanto, pelo fato do elétron não possuir uma estrutura constitutiva que possua correspondência direta com o "mundo" clássico, não faz sentido pensar em um momentum angular rotacional descrito da mesma maneira que no parágrafo anterior. Nesse ínterim, o *spin* surge como uma propriedade intrínseca das partículas elementares, ou seja, algo que pode ser mensurado mas que não possui analogia direta com o mundo macroscópico.

Feitas as devidas divagações fenomênicas, é hora de apresentar uma concepção mais pragmática do spin. De acordo com Jiang [1], o spin é um grau de liberdade extra das partículas definido num espaço vetorial abstrato com uma representação da álgebra $\mathfrak{su}(2)$. Esta é definida pelas seguintes relações de comutação:

$$[S^\alpha, S^\beta] = i\hbar\epsilon^{\alpha\beta\gamma}S^\gamma \quad ; \quad \alpha, \beta, \gamma = 1, 2, 3,$$

onde $\epsilon^{\alpha\beta\gamma}$ é o símbolo de Levi-Civita. A representação fundamental – mais simples – é aquela na qual as componentes dos operadores de spin são escritos em termos das matrizes de Pauli, σ^x , σ^y , σ^z , ou seja,

$$S^x = \frac{\hbar}{2}\sigma^x \quad , \quad S^y = \frac{\hbar}{2}\sigma^y \quad , \quad S^z = \frac{\hbar}{2}\sigma^z \quad ,$$

onde

$$\sigma^x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad , \quad \sigma^y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad , \quad \sigma^z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

O espaço de representação é complexo e bidimensional, $V = \mathbb{C}^2$, cujos dois vetores base são denotados por

$$|\uparrow\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad , \quad |\downarrow\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad ,$$

que representam, respectivamente, as configurações de spin up e spin down. Um vetor genérico em V assume a forma $c_1 |\uparrow\rangle + c_2 |\downarrow\rangle$, onde c_1 e c_2 são números complexos.

Nesse contexto, é interessante introduzir os operadores escada, $S^\pm = S^x \pm iS^y$, e de projeção, cuja representação matricial é

$$S^+ = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad S^- = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

A ação destes em vetores da base pode ser elucidada pelos exemplos a seguir:

$$\begin{aligned} S^+ |\uparrow\rangle &= 0, & S^- |\uparrow\rangle &= \hbar |\downarrow\rangle, & S^z |\uparrow\rangle &= \frac{\hbar}{2} |\uparrow\rangle, \\ S^+ |\downarrow\rangle &= \hbar |\uparrow\rangle, & S^- |\downarrow\rangle &= 0, & S^z |\downarrow\rangle &= -\frac{\hbar}{2} |\downarrow\rangle. \end{aligned}$$

2.1 Cadeias quânticas de spins

Para definir uma cadeia de spins, considera-se uma rede unidimensional composta por L sítios, cada qual separado por uma distância unitária ($\Delta x = 1$).

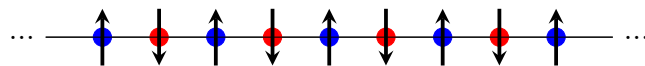


Figura 5 – Cadeia unidimensional de spins.

Cada um destes sítios comporta uma partícula – um *férmion* de spin $\frac{1}{2}$ – que interage com seus vizinhos próximos (*nearest neighbours*). A representação formal das possíveis configurações de spin é dada pelos vetores $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$, sendo que a interação destes é descrita por um Hamiltoniano quântico – de Heisenberg –, no escopo do presente trabalho.

Como foi visto na seção anterior, cada spin é representado por um espaço vetorial $V = \mathbb{C}^2$. Consequentemente, uma cadeia de spins é o produto direto de cada espaço vetorial, nomeadamente $\mathcal{H} = V_1 \otimes V_2 \otimes \dots \otimes V_L$, onde V_n é o espaço vetorial correspondente ao n -ésimo sítio. Mais formalmente,

$$\mathcal{H} = \bigotimes_{n=1}^L V_n, \quad (2.1)$$

cuja base consiste no produto direto dos vetores $|\uparrow\rangle_n$ e $|\downarrow\rangle_n$. Nesse contexto, \mathcal{H} é denominado espaço de Hilbert da cadeia de spins, cuja dimensão é 2^L .

2.2 Condições de contorno periódicas

No contexto da cadeia de spins definida na seção anterior, torna-se imperativo, tendo em vista o tratamento analítico do problema, impor as condições de contorno periódicas (*Periodic Boundary Conditions*, em inglês); trata-se de uma escolha muito conveniente e razoável, fisicamente falando. Dessa forma, pode-se reescrever a relação (2.1) da seguinte maneira

$$\mathcal{H} = \bigotimes_{n \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} V_n,$$

onde $\frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}$ representa o grupo multiplicativo de inteiros módulo L (*Multiplicative group of integers modulo L*). A base, ortogonal, consiste no produto direto dos operadores locais de spin, a saber, $|\uparrow\rangle_n$ e $|\downarrow\rangle_n$. Nesse contexto, cada sítio $n \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}$ possui um espaço vetorial de dimensão finita associado bem como um operador de spin $S_n = (S_n^x, S_n^y, S_n^z)$ em V_n , que satisfaz a álgebra $\mathfrak{su}(2)$. A condição de contorno periódica implica que $S_{n+L} = S_n$. De acordo com Lamers [2], cada V_n é uma cópia de \mathbb{C}^2 cuja base é dada por uma combinação de spins up e down, a saber, $V_n = \mathbb{C}|\uparrow\rangle_n \oplus \mathbb{C}|\downarrow\rangle_n$, cujos coeficientes são complexos.

O subscrito de S_n correlaciona-se com o fator V_n , no qual esse operador local de spin atua não-trivialmente:

$$S_n = \mathbb{1}_1 \otimes \dots \otimes \mathbb{1} \otimes \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}_n \otimes \mathbb{1} \otimes \dots \otimes \mathbb{1}_L. \quad (2.2)$$

Trata-se de uma notação muito utilizada no contexto da integrabilidade quântica e que será muito útil nas seções posteriores.

As relações entre os operadores locais de spin podem ser condensadas numa álgebra de Lie global que governa toda a cadeia de spins, *i.e.* $[S_k^\alpha, S_l^\beta] = i\hbar\delta_{k,l} \sum_{\gamma=x,y,z} \epsilon^{\alpha\beta\gamma} S_l^\gamma$, onde a constante da estrutura $\mathfrak{su}(2)$ totalmente antissimétrica é fixada por $\epsilon^{xyz} = 1$. A relação de comutação acima é, às vezes, chamada *ultralocal* pois os operadores de spin de diferentes sítios comutam. Por razões computacionais, é conveniente trabalhar com os operadores escada $S_l^\pm \equiv S_l^x \pm iS_l^y$ que, juntamente com S_l^z , satisfazem

$$[S_k^z, S_l^\pm] = \pm\hbar\delta_{k,l}S_l^\pm \quad , \quad [S_k^+, S_l^-] = 2\hbar\delta_{k,l}S_l^z \quad , \quad [S_k^\pm, S_l^\pm] = 0.$$

Num linguajar mais matemático, pode-se dizer que uma cadeia de spins é um espaço de Hilbert \mathcal{H} portando, para cada $l \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}$, uma representação $\mathfrak{su}(2)$ irredutível. Neste caso, trata-se da representação bidimensional (2.2). É interessante notar que \mathcal{H} também possui uma representação $\mathfrak{su}(2)$ 'global', dada pelo operador de spin total, a qual é redutível.

3 Hamiltoniano de Heisenberg

O hamiltoniano quântico de Heisenberg, proposto em 1928 por Werner Heisenberg (1901-1976), é escrito como

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} S_i \cdot S_j, \quad (3.1)$$

onde $J_{i,j}$ representa o chamado termo de troca (*exchange interaction*, vide Apêndice A), S_i e S_j são os operadores de spin e o símbolo $\langle i,j \rangle$ representa o somatório sobre vizinhos próximos, sendo que a soma é realizada sobre todos os possíveis pares de spin.

O sistema favorece o alinhamento paralelo dos spins se $J_{i,j} > 0$, o que corresponde ao caso ferromagnético. O inverso ocorre para $J_{i,j} < 0$, ou seja, favorece o alinhamento antiparalelo, que se refere ao caso antiferromagnético. No caso unidimensional, tem-se que $j = i + 1$, ou seja, o próximo vizinho está separado por um sítio.

Assim, o hamiltoniano (3.1) pode ser reescrito na forma

$$H = - \sum_i J_{i,i+1} S_i \cdot S_{i+1}. \quad (3.2)$$

No contexto quântico, o operador de spin é dado por $S = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$, que pode ser decomposto em $S^x = \frac{\hbar}{2} \sigma^x$, $S^y = \frac{\hbar}{2} \sigma^y$ e $S^z = \frac{\hbar}{2} \sigma^z$. Para fins de simplificação adota-se $\hbar = 1$, de modo que

$$H = -\frac{1}{4} \sum_{i=1}^N [J_x \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + J_y \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y + J_z \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z], \quad (3.3)$$

denominado modelo XYZ para o caso $J_x \neq J_y \neq J_z$.

Uma representação alternativa muito útil do hamiltoniano (3.2) diz respeito aos operadores escada (*ladder*). Fixando $J_{i,i+1} = J$, o referido hamiltoniano pode ser reescrito na forma

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{i=1}^N [S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+ + 2S_i^z S_{i+1}^z]. \quad (3.4)$$

3.1 Adição de campo magnético externo

Seja novamente o hamiltoniano descrito pela equação (3.2). O campo magnético, escrito em função da coordenada espacial, acopla-se ao spin do elétron, de modo que o hamiltoniano assume a forma

$$H = - \sum_i J_{i,i+1} S_i \cdot S_{i+1} + \sum_i \vec{B}(\vec{r}_i) \cdot S_i.$$

Escolhendo convenientemente o eixo z como eixo de ação do campo magnético, tem-se que

$$H = - \sum_i J_{i,i+1} S_i \cdot S_{i+1} + \vec{B} \cdot \sum_i S_i^z. \quad (3.5)$$

Reescrevendo em termos da equação (3.3), tem-se que

$$H = -\frac{1}{4} \sum_{i=1}^N [J_x \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + J_y \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y + J_z \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z] + \vec{B} \cdot \sum_{i=1}^N S_i^z.$$

Atribuindo $\vec{B} = 2h\hat{z}$, tem-se

$$H = -\frac{1}{4} \sum_{i=1}^N [J_x \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + J_y \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y + J_z \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z] + 2h \sum_{i=1}^N S_i^z. \quad (3.6)$$

Para fins de clareza, o termo referente ao somatório das projeções de spin no eixo z pode ser reescrito da seguinte maneira

$$S_{tot}^z = \sum_{i=1}^N S_i^z, \quad (3.7)$$

de modo a deixar explícito que se trata da projeção total do spin no eixo z . A este termo, usualmente atribui-se a denominação de *magnetização* do sistema.

Tendo em vista a simplificação do tratamento matricial do problema, o termo referente ao campo magnético será inicialmente ignorado, isto é, inicialmente será utilizado o modelo descrito pela equação (3.3). Posteriormente, a componente referente ao campo magnético será adicionada a cada estado de maneira coerentemente com sua respectiva magnetização.

O hamiltoniano acima exposto descreve uma cadeia virtualmente infinita, cujo tratamento matemático é muito complicado. De modo a simplificar o problema, impõem-se as chamadas condições de contorno periódicas (*P.B.C.*), assunto discutido no capítulo anterior.

3.2 Modelo Anisotrópico (XXZ)

Seja o hamiltoniano descrito pela equação (3.3). Supondo que as constantes de troca sejam iguais e maiores do que zero, $J_x = J_y = J_z = J > 0$, que corresponde ao comportamento ferromagnético do sistema, obtém-se

$$H = -\frac{J}{4} \sum_{i=1}^N [\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y + \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z].$$

Especificamente no modelo anisotrópico, acrescenta-se à componente z o termo Δ , denominado parâmetro anisotrópico, de modo que

$$H = -\frac{J}{4} \sum_{i=1}^N [\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y + \Delta(\sigma_i^z \sigma_{i+1}^z)]. \quad (3.8)$$

Justamente por causa do termo anisotrópico, o hamiltoniano acima exposto comuta com S^z mas não com S^2 , cuja demonstração pode ser encontrada no Apêndice (B). Isso implica que o número quântico referente à atuação do operador de Casimir não é adequado (bom) para rotular os diferentes setores da matriz correspondente ao hamiltoniano. De uma maneira mais formal, o termo anisotrópico quebra a simetria $SU(2)$, que é substituída pela $U(1)$.

3.3 Modelo Isotrópico (XXX)

Seja, novamente, o hamiltoniano descrito pela equação (3.3). Quando $J_x = J_y = J_z = J$, tem-se o chamado modelo isotrópico ou completamente isotrópico. Matematicamente,

$$H = -\frac{J}{4} \sum_{i=1}^N (\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y + \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z). \quad (3.9)$$

Esse hamiltoniano comuta tanto com S^z quanto com S^2 (vide Apêndice (B)), o que implica que neste modelo os spins não têm orientação preferencial. O espectro energético é altamente degenerado, *i.e.* cada autovalor de energia possui associado a si autoestados multipletos de $\mathfrak{su}(2)$.

O caso $J > 0$ favorece o alinhamento dos spins, o que corresponde ao caso ferromagnético, estudado por Hans Bethe em 1931. Já quando $J < 0$, os spins tendem a se antialinharem, fazendo com que a magnetização macroscópica desapareça. Trata-se do regime antiferromagnético, estudado pelo físico francês Louis Néel (1904-2000), de forma pioneira, em 1948. O escopo do presente trabalho se restringirá ao caso $J = 1$.

4 Dois sítios

Utilizando como ponto de partida os resultados obtidos no nosso grupo de pesquisa pelo Pedro Barbisan Widniczck em seu Trabalho de Conclusão de Curso [3], podemos iniciar a discussão acerca da interação de spins numa cadeia de poucos sítios.

Sejam duas partículas A e B, mais especificamente *férmions*, de spin $\frac{1}{2}$, representadas pelos kets

$$|\uparrow\rangle_A \quad , \quad |\uparrow\rangle_B ,$$

onde a projeção do spin no eixo z de cada partícula é igual a $+\frac{1}{2}\hbar$. Por estarmos trabalhando com o caso unidimensional, os spins possuem somente um grau de liberdade, de modo que a outra possível configuração é dada por

$$|\downarrow\rangle_A \quad , \quad |\downarrow\rangle_B ,$$

cuja projeção, naturalmente, é $-\frac{1}{2}\hbar$. A partir de agora, usaremos $\hbar = 1$.

Dito isto, é possível construir as seguintes configurações

$$|\uparrow\uparrow\rangle \equiv |\uparrow\rangle_A \otimes |\uparrow\rangle_B \quad , \quad |\uparrow\downarrow\rangle \equiv |\uparrow\rangle_A \otimes |\downarrow\rangle_B ,$$

$$|\downarrow\uparrow\rangle \equiv |\downarrow\rangle_A \otimes |\uparrow\rangle_B \quad , \quad |\downarrow\downarrow\rangle \equiv |\downarrow\rangle_A \otimes |\downarrow\rangle_B ,$$

que estão associadas a um espaço de Hilbert de dimensão $2^2 = 4$.

Inicialmente será tratado o caso anisotrópico, que é mais complexo. Aplicando as condições de contorno periódicas,

$$H = -\frac{1}{4} [\sigma_1^x \sigma_2^x + \sigma_1^y \sigma_2^y + \Delta \sigma_1^z \sigma_2^z + \sigma_2^x \sigma_1^x + \sigma_2^y \sigma_1^y + \Delta \sigma_2^z \sigma_1^z]. \quad (4.1)$$

Aqui, os observáveis são os operadores de spin de cada sítio, dados, de acordo com Doikou [4], por $\sigma_1^x \equiv \sigma^x \otimes \mathbb{1}$ e $\sigma_2^x \equiv \mathbb{1} \otimes \sigma^x$. Raciocínio análogo aplica-se às componentes y e z . Assim, pode-se reescrever o hamiltoniano (4.1) explicitando os produtos diretos, de modo que

$$H = -\frac{1}{4} [(\sigma^x \otimes \mathbb{1})(\mathbb{1} \otimes \sigma^x) + (\sigma^y \otimes \mathbb{1})(\mathbb{1} \otimes \sigma^y) + \Delta(\sigma^z \otimes \mathbb{1})(\mathbb{1} \otimes \sigma^z) \\ + (\mathbb{1} \otimes \sigma^x)(\sigma^x \otimes \mathbb{1}) + (\mathbb{1} \otimes \sigma^y)(\sigma^y \otimes \mathbb{1}) + \Delta(\mathbb{1} \otimes \sigma^z)(\sigma^z \otimes \mathbb{1})]. \quad (4.2)$$

Efetando os produtos diretos indicados, tem-se, inicialmente para o sítio 1, que

$$\sigma_1^x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_1^y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\sigma_1^z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

Analogamente, os operadores do sítio 2 são dados por:

$$\sigma_2^x = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_2^y = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{bmatrix},$$

$$\sigma_2^z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

Substituindo os resultados acima na equação (4.1), obtém-se a forma matricial do hamiltoniano de dois sítios, a saber

$$H = -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} \Delta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\Delta & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -\Delta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Delta \end{bmatrix}. \quad (4.3)$$

4.1 Diagonalização

Para o caso de dois sítios, a base de configurações, conforme visto anteriormente, é $\vec{\varphi} = [|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle]$, de modo que a forma matricial do hamiltoniano (4.3) na referida base é dada por $H_\varphi = \vec{\varphi}^\dagger H \vec{\varphi}$.

Por causa da relação de comutação $[H, S_{tot}^z] = 0$, é possível utilizar a projeção total do spin no eixo z (magnetização) para rotular cada subespaço invariante. Assim, o hamiltoniano assume a forma bloco diagonal

$$H_\varphi = \vec{\varphi}^\dagger H \vec{\varphi} = \begin{bmatrix} \boxed{H_\varphi^{S_{tot}^z=+1}} & 0 & 0 \\ 0 & \boxed{H_\varphi^{S_{tot}^z=0}} & 0 \\ 0 & 0 & \boxed{H_\varphi^{S_{tot}^z=-1}} \end{bmatrix}.$$

4.2 Autoenergias

Neste subtópico serão obtidas as energias do sistema através da diagonalização da matriz correspondente ao hamiltoniano anisotrópico.

Subespaço $S_{tot}^z = \pm 1$

Para o caso $S_{tot}^z = +1$,

$$|\uparrow\uparrow\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \langle\uparrow\uparrow| = [1 \ 0 \ 0 \ 0].$$

Sanduichando o hamiltoniano, obtém-se a autoenergia para a presente configuração,

$$\langle\uparrow\uparrow|H|\uparrow\uparrow\rangle = [1 \ 0 \ 0 \ 0] \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{bmatrix} \Delta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\Delta & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -\Delta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = -\frac{\Delta}{2}.$$

Já para o caso $S_{tot}^z = -1$, o procedimento é análogo exceto pelo fato de que agora o *bra* é $\langle\downarrow\downarrow|$ e o *ket* $|\downarrow\downarrow\rangle$. Assim:

$$\langle\downarrow\downarrow|H|\downarrow\downarrow\rangle = -\frac{\Delta}{2}.$$

Subespaço $S_{tot}^z = 0$

Para o presente caso, há duas componentes da base,

$$|\uparrow\downarrow\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad ; \quad |\downarrow\uparrow\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Analogamente:

$$\langle\uparrow\downarrow| = [0 \ 1 \ 0 \ 0] \quad ; \quad \langle\downarrow\uparrow| = [0 \ 0 \ 1 \ 0].$$

O setor da matriz que representa o hamiltoniano correspondente a $S_{tot}^z=0$ claramente não possui formato bloco diagonal. Logo, é necessário realizar uma transformação de similaridade para obter a matriz com o formato adequado.

Seja a definição de transformação de similaridade, $B = M^{-1}AM$, onde A, B e M são matrizes quadradas. Após alguma álgebra, obtém-se

$$M = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Também

$$M^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}.$$

Então

$$B = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ -2 \end{pmatrix} \begin{bmatrix} -\Delta & 2 \\ 2 & -\Delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Logo,

$$B = -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} -\Delta + 2 & 0 \\ 0 & -\Delta - 2 \end{bmatrix},$$

cujos componentes da diagonal principal correspondem às autoenergias do caso em questão.

Portanto, o hamiltoniano bloco diagonal assume a forma

$$H_\varphi = -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} \Delta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\Delta + 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\Delta - 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Delta \end{bmatrix},$$

cujos componentes da diagonal principal correspondem às autoenergias do sistema.

Separadamente,

$$E_1 = E_2 = -\frac{\Delta}{2}, \quad E_3 = \frac{(\Delta - 2)}{2}, \quad E_4 = \frac{(\Delta + 2)}{2}.$$

Graficamente,

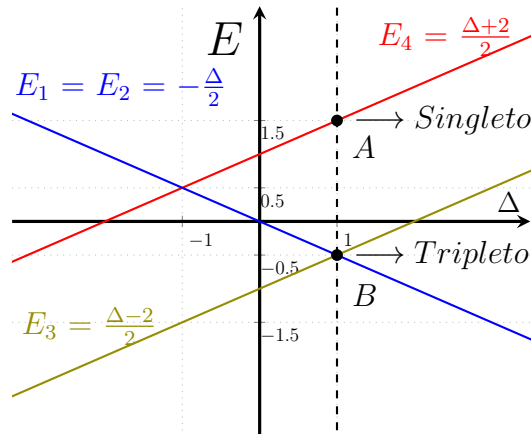


Figura 6 – Gráfico E vs Δ para dois sítios

Pode-se observar que o termo anisotrópico Δ quebra a degenerescência do tripleto. Na situação em que $\Delta = 1$, correspondente ao caso isotrópico (modelo XXX), ocorre uma degenerescência tripla (tripleto), indicado pelo ponto B. Por causa da simetria do sistema, no caso antissimétrico ($\Delta = -1$) ocorre novamente degenerescência tripla e singlete, agora invertidos.

Para o caso geral em que $J > 0$, o estado de menor energia é dado pelo tripleto, que possui todas as magnetizações possíveis ($+1, 0, -1$), de modo que o estado é ferromagnético.

Já para $J < 0$, o estado de menor energia é o singlete, que possui magnetização nula (spins antissimétricos); trata-se do caso antiferromagnético.

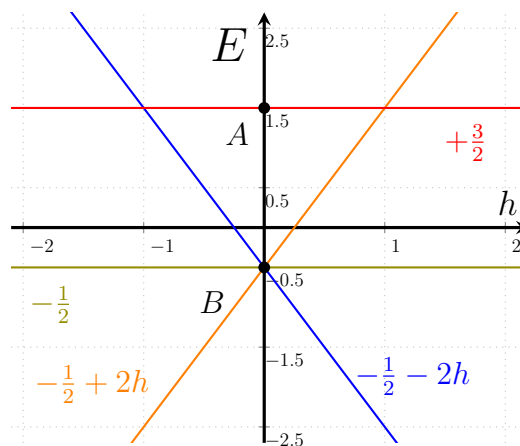
4.3 Interação com campo magnético externo

Para descrever a interação do sistema com um campo magnético externo, é necessário levar em conta a projeção total do spin no eixo z , conforme indicado pelo hamiltoniano (3.6). Adicionando o referido componente do campo magnético, tem-se que

$$\begin{aligned} E_1 &= -\frac{\Delta}{2} + 2h & , & & E_2 &= -\frac{\Delta}{2} - 2h \\ E_3 &= \frac{(\Delta - 2)}{2} & , & & E_4 &= \frac{(\Delta + 2)}{2}. \end{aligned}$$

Graficando o caso isotrópico ($\Delta = 1$),

Gráfico E vs h para dois sítios ($\Delta = 1$ e $J = 1$)



A adição de um campo magnético externo levanta a degenerescência do tripleto, indicada pelo ponto B. Tanto o singlete (ponto A) como um dos três componentes do tripleto não interagem com o campo magnético externo pois suas respectivas magnetizações são nulas.

4.4 Autoestados

Por estarmos trabalhando com o modelo anisotrópico, os autoestados do sistema são classificados pelos kets $|E, S^z, j\rangle$, onde E refere-se à energia da configuração, S^z à projeção do spin no eixo z e j às eventuais degenerescências energéticas. Fazendo uso da equação característica $H\mathbf{x} = E_i\mathbf{x}$, onde $i \in (1, 2, 3, 4)$, obtém-se

$$\left|-\frac{\Delta}{2}, +1, 1\right\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix},$$

$$\left|\frac{(\Delta-2)}{2}, 0, 1\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle] = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 \\ +1 \\ +1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \left|\frac{(\Delta+2)}{2}, 0, 1\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle] = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 \\ +1 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

$$\left|-\frac{\Delta}{2}, -1, 2\right\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

5 Três sítios

Para o presente caso, consideremos um sistema de três partículas – *férmions* – A, B e C, de spin $\frac{1}{2}$, representadas pelos kets

$$|\uparrow\rangle_A \quad , \quad |\uparrow\rangle_B \quad , \quad |\uparrow\rangle_C$$

onde a projeção do spin no eixo z de cada partícula é igual a $+\frac{1}{2}$. Por estarmos trabalhando com o caso unidimensional, os spins possuem somente um grau de liberdade, de modo que a outra possível configuração é dada por

$$|\downarrow\rangle_A \quad , \quad |\downarrow\rangle_B \quad , \quad |\downarrow\rangle_C$$

cuja projeção, naturalmente, é $-\frac{1}{2}$.

As possíveis configurações são

$$\begin{aligned} |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle &\equiv |\uparrow\rangle_A \otimes |\uparrow\rangle_B \otimes |\uparrow\rangle_C & , & & |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle &\equiv |\downarrow\rangle_A \otimes |\downarrow\rangle_B \otimes |\downarrow\rangle_C , \\ |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle &\equiv |\uparrow\rangle_A \otimes |\uparrow\rangle_B \otimes |\downarrow\rangle_C & , & & |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle &\equiv |\downarrow\rangle_A \otimes |\downarrow\rangle_B \otimes |\uparrow\rangle_C , \\ |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle &\equiv |\uparrow\rangle_A \otimes |\downarrow\rangle_B \otimes |\uparrow\rangle_C & , & & |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle &\equiv |\downarrow\rangle_A \otimes |\uparrow\rangle_B \otimes |\downarrow\rangle_C , \\ |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle &\equiv |\downarrow\rangle_A \otimes |\uparrow\rangle_B \otimes |\uparrow\rangle_C & , & & |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle &\equiv |\uparrow\rangle_A \otimes |\downarrow\rangle_B \otimes |\downarrow\rangle_C , \end{aligned}$$

que estão associadas a um espaço de Hilbert de dimensão $2^3 = 8$.

Aplicando as condições de contorno periódicas, o hamiltoniano anisotrópico assume a forma

$$H = -\frac{1}{4} [(\sigma_1^x \sigma_2^x + \sigma_2^x \sigma_3^x + \sigma_3^x \sigma_1^x) + (\sigma_1^y \sigma_2^y + \sigma_2^y \sigma_3^y + \sigma_3^y \sigma_1^y) + \Delta(\sigma_1^z \sigma_2^z + \sigma_2^z \sigma_3^z + \sigma_3^z \sigma_1^z)] . \quad (5.1)$$

Novamente os observáveis são os operadores de spin de cada sítio, dados, de acordo com Doikou [4], por $\sigma_1^x = \sigma^x \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}$, $\sigma_2^x = \mathbb{1} \otimes \sigma^x \otimes \mathbb{1}$ e $\sigma_3^x = \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \sigma^x$. Raciocínio análogo aplica-se às componentes y e z . Assim,

$$\begin{aligned} H = -\frac{1}{4} [& (\sigma^x \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1})(\mathbb{1} \otimes \sigma^x \otimes \mathbb{1}) + (\mathbb{1} \otimes \sigma^x \otimes \mathbb{1})(\mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \sigma^x) + (\mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \sigma^x)(\sigma^x \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}) \\ & + (\sigma^y \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1})(\mathbb{1} \otimes \sigma^y \otimes \mathbb{1}) + (\mathbb{1} \otimes \sigma^y \otimes \mathbb{1})(\mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \sigma^y) + (\mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \sigma^y)(\sigma^y \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}) \\ & + (\sigma^z \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1})(\mathbb{1} \otimes \sigma^z \otimes \mathbb{1}) + (\mathbb{1} \otimes \sigma^z \otimes \mathbb{1})(\mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \sigma^z) + (\mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \sigma^z)(\sigma^z \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1})] \end{aligned} \quad (5.2)$$

Efetuando, explicitamente, os produtos diretos, obtém-se

$$\sigma_1^x \sigma_2^x = \sigma_x \otimes \sigma_x \otimes \mathbb{1} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\sigma_3^x \sigma_1^x = \sigma_x \otimes \mathbb{1} \otimes \sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\sigma_2^x \sigma_3^x = \mathbb{1} \otimes \sigma_x \otimes \sigma_x = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Para a componente y do *spin*:

$$\sigma_1^y \sigma_2^y = \sigma_y \otimes \sigma_y \otimes \mathbb{1} = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\sigma_3^y \sigma_1^y = \sigma_y \otimes \mathbb{1} \otimes \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\sigma_2^y \sigma_3^y = \mathbb{1} \otimes \sigma_y \otimes \sigma_y = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Por fim, para a componente z , tem-se:

$$\sigma_1^z \sigma_2^z = \sigma_z \otimes \sigma_z \otimes \mathbb{1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\sigma_3^z \sigma_1^z = \sigma_z \otimes \mathbb{1} \otimes \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\sigma_2^z \sigma_3^z = \mathbb{1} \otimes \sigma_z \otimes \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Substituindo os resultados acima na relação (5.2), obtém-se o hamiltoniano na forma matricial

$$H = -\frac{1}{4} \begin{bmatrix} 3\Delta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\Delta & 2 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & -\Delta & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\Delta & 0 & 2 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 2 & 0 & -\Delta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & -\Delta & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 2 & -\Delta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3\Delta \end{bmatrix}. \quad (5.3)$$

Para o caso de três sítios, a base de configurações é dada por

$$\vec{\varphi} = [|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle].$$

No mesmo espírito do que foi feito no caso de dois sítios, é possível escrever o hamiltoniano (5.3) na base $\vec{\varphi}$. O cálculo detalhado das energias, conforme esquematizado acima, será realizado na próxima seção.

5.1 Autoenergias

Nesta seção será realizado o cálculo das energias para cada magnetização do sistema.

Subespaço $S_{tot}^z = \pm\frac{3}{2}$

Para o setor $S_{tot}^z = +\frac{3}{2}$, os brakets correspondentes são

$$|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \langle\uparrow\uparrow\uparrow| = [1 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0].$$

Sanduichando o hamiltoniano, obtém-se

$$\langle \uparrow\uparrow\uparrow | H | \uparrow\uparrow\uparrow \rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \left(-\frac{1}{4} \right) \begin{bmatrix} 3\Delta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\Delta & 2 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & -\Delta & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\Delta & 0 & 2 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 2 & 0 & -\Delta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & -\Delta & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 2 & -\Delta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3\Delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix},$$

de modo que

$$\langle \uparrow\uparrow\uparrow | H | \uparrow\uparrow\uparrow \rangle = -\frac{3\Delta}{4}.$$

Para o setor correspondente à magnetização $S_{tot}^z = -\frac{3}{2}$, os braketos correspondentes são $\langle \downarrow\downarrow\downarrow |$ e $| \downarrow\downarrow\downarrow \rangle$. Assim,

$$\langle \downarrow\downarrow\downarrow | H | \downarrow\downarrow\downarrow \rangle = -\frac{3\Delta}{4}.$$

Subespaço $S_{tot}^z = \pm\frac{1}{2}$

O setor do hamiltoniano correspondente à magnetização $\pm\frac{1}{2}$ é

$$-\frac{1}{4} \begin{bmatrix} -\Delta & 2 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 2 & -\Delta & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\Delta & 0 & 2 & 2 \\ 2 & 2 & 0 & -\Delta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & -\Delta & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 2 & -\Delta \end{bmatrix}.$$

A matriz acima não é diagonal, de modo que é necessário aplicar a transformação de similaridade $B = M^{-1}AM$ para obter tal formato. Após alguma álgebra,

$$M = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 \end{bmatrix},$$

cuja matriz inversa é

$$M^{-1} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{3} & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{3} & \frac{2\sqrt{2}}{3} \\ 0 & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{3} & 0 & \frac{2\sqrt{2}}{3} & -\frac{\sqrt{2}}{3} \\ -\frac{\sqrt{2}}{3} & -\frac{\sqrt{2}}{3} & 0 & \frac{2\sqrt{2}}{3} & 0 & 0 \\ -\frac{\sqrt{2}}{3} & \frac{2\sqrt{2}}{3} & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Aplicando-se a transformação de similaridade mencionada, obtém-se a matriz diagonal

$$B = -\frac{1}{4} \begin{bmatrix} -\Delta - 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\Delta - 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\Delta - 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\Delta - 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 4 - \Delta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4 - \Delta \end{bmatrix}.$$

Portanto, o hamiltoniano bloco-diagonal assume a forma

$$H_\varphi = -\frac{1}{4} \begin{bmatrix} 3\Delta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\Delta - 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\Delta - 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\Delta - 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\Delta - 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4 - \Delta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4 - \Delta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3\Delta \end{bmatrix},$$

sendo que as autoenergias (degeneradas) encontram-se na diagonal principal. Assim,

$$E_1 = E_2 = -\frac{3\Delta}{4}, \quad E_3 = E_4 = E_5 = E_6 = \frac{(\Delta + 2)}{4}, \quad E_7 = E_8 = \frac{(\Delta - 4)}{4}.$$

Graficamente,

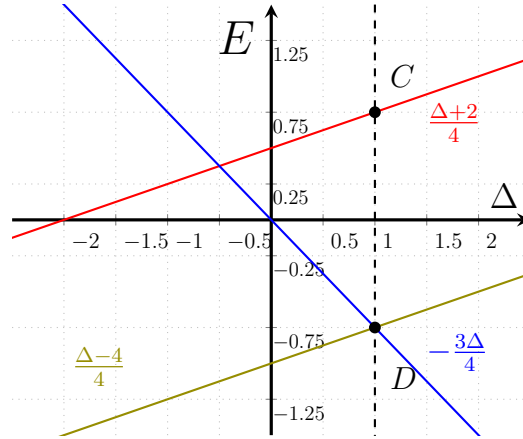


Figura 7 – Gráfico E vs Δ para três sítios

É interessante notar que a autoenergia $\frac{(\Delta+2)}{4}$ possui degenerescência quádrupla, sendo que o ponto C indica o caso isotrópico ($\Delta = 1$). Tanto as autoenergias $\frac{(\Delta-4)}{4}$ quanto $-\frac{3\Delta}{4}$ possuem degenerescência dupla, sendo que no ponto D (caso isotrópico) ambas se encontram, ocasionando uma degenerescência quádrupla. Essa elevada degenerescência é consequência direta da álgebra $\mathbf{su}(2)$.

5.2 Interação com campo magnético externo

Para descrever a interação do sistema com um campo magnético externo, é necessário levar em conta a projeção total do spin no eixo z , conforme indicado pela equação (3.6). Para fins de clareza, as próximas subseções tratarão de cada setor do hamiltoniano separadamente, cada qual correspondente a uma magnetização. Será adicionada, para cada energia, sua respectiva componente do campo magnético, reescrevendo aquela através da notação previamente apresentada. Com vistas à simplificação do problema, será analisado o caso isotrópico, *i.e.*, $\Delta=1$.

Subespaço $S_{tot}^z = \pm\frac{3}{2}$

$$E_1 = E_2 = -\frac{3}{4} + 2h \left(\pm\frac{3}{2} \right) = -\frac{3}{4} \pm 3h.$$

Subespaço $S_{tot}^z = \pm\frac{1}{2}$

$$E_3 = E_4 = E_5 = E_6 = \frac{(\Delta + 2)}{4} + 2h \left(\pm\frac{1}{2} \right) = +\frac{3}{4} \pm h.$$

Também

$$E_7 = E_8 = \frac{(\Delta - 4)}{4} + 2h \left(\pm\frac{1}{2} \right) = -\frac{3}{4} \pm h.$$

Graficamente:

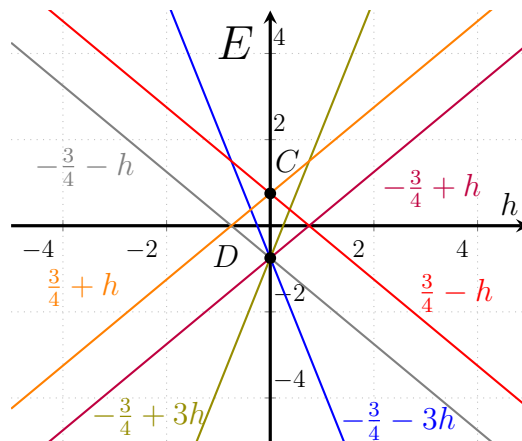


Figura 8 – Gráfico E vs h para três sítios ($\Delta = 1$ e $J = 1$)

A adição de um campo magnético externo levanta a degenerescência quádrupla do ponto D e também do ponto C. Isso mostra que todos os autoestados interagem com o campo magnético externo.

Dos casos analisados (2, 3 e 4 sítios), o sistema de três sítios é o único no qual todas as componentes interagem com o campo magnético externo. De forma geral, isso ocorre

para quaisquer sistemas cujo número de sítios seja ímpar, pois nesse contexto simplesmente não haverá configuração spinorial cuja projeção total de spin seja nula. Em outras palavras, para um número ímpar de sítios – ocupados por *férmions* de spin $\frac{1}{2}$ – a magnetização do sistema, *i.e.* o somatório das projeções de spin no eixo z de cada partícula, nunca será nula.

5.3 Autoestados

Novamente os autoestados são dados pelos kets $|E, S^z, j\rangle$. A forma de obtenção destes não será apresentada em detalhes pois o escopo do presente trabalho diz respeito ao espectro energético das soluções do hamiltoniano.

$$\begin{aligned}
\left| -\frac{3\Delta}{4}, +\frac{3}{2}, 1 \right\rangle &= |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle, & \left| \frac{\Delta+2}{4}, +\frac{1}{2}, 1 \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} [|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle - |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle], \\
\left| -\frac{3\Delta}{4}, -\frac{3}{2}, 2 \right\rangle &= |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle, & \left| \frac{\Delta+2}{4}, -\frac{1}{2}, 2 \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} [|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle - |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle], \\
\left| \frac{\Delta-4}{4}, +\frac{1}{2}, 1 \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} [|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle], & \left| \frac{\Delta+2}{4}, +\frac{1}{2}, 3 \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} [|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle - 2|\downarrow\uparrow\uparrow\rangle], \\
\left| \frac{\Delta-4}{4}, -\frac{1}{2}, 2 \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} [|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle]. & \left| \frac{\Delta+2}{4}, -\frac{1}{2}, 4 \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} [|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle - 2|\uparrow\downarrow\downarrow\rangle].
\end{aligned}$$

6 Quatro sítios

Sejam quatro partículas – *férmions* – de spin $\frac{1}{2}$, representadas pelos kets $|\uparrow\rangle_A$, $|\uparrow\rangle_B$, $|\uparrow\rangle_C$ e $|\uparrow\rangle_D$, cujas projeções no eixo z são iguais a $+\frac{1}{2}$. Por estarmos trabalhando com o caso unidimensional, segue-se que as outras possíveis configurações são $|\downarrow\rangle_A$, $|\downarrow\rangle_B$, $|\downarrow\rangle_C$ e $|\downarrow\rangle_D$, cujas projeções, naturalmente, são iguais a $-\frac{1}{2}$.

A base $\vec{\varphi}$, cuja dimensão é $2^4 = 16$ pode ser esquematizada de acordo com as magnetizações de cada componente, conforme a tabela a seguir.

S_{tot}^z	Configurações
+2	$ \uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$
+1	$ \uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle, \uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle, \uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle, \downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$
0	$ \uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle, \downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle, \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle, \downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle, \uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle, \downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$
-1	$ \downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle, \downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle, \downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle, \uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle$
-2	$ \downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle$

Tabela 1 – Esquema das possíveis configurações spinoriais com relação às projeções totais de spin no eixo z

Aplicando as condições de contorno periódicas, o hamiltoniano anisotrópico correspondente ao presente caso toma a seguinte forma

$$H = -\frac{1}{4}[(\sigma_1^x \sigma_2^x + \sigma_2^x \sigma_3^x + \sigma_3^x \sigma_4^x + \sigma_4^x \sigma_1^x) + (\sigma_1^y \sigma_2^y + \sigma_2^y \sigma_3^y + \sigma_3^y \sigma_4^y + \sigma_4^y \sigma_1^y) + \Delta(\sigma_1^z \sigma_2^z + \sigma_2^z \sigma_3^z + \sigma_3^z \sigma_4^z + \sigma_4^z \sigma_1^z)]. \quad (6.1)$$

Novamente os observáveis são os operadores de spin de cada sítio, de modo que

$$\begin{aligned} \sigma_1^x &= \sigma^x \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} & \sigma_3^x &= \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \sigma^x \otimes \mathbb{1} \\ \sigma_2^x &= \mathbb{1} \otimes \sigma^x \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} & \sigma_4^x &= \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \sigma^x. \end{aligned}$$

Para as componentes y e z , o raciocínio é análogo. Efetuando os produtos diretos, à semelhança do que foi feito nas seções anteriores, obtém-se a seguinte matriz

$$H = -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} 2\Delta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -2\Delta & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & -2\Delta & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\Delta \end{bmatrix}.$$

Na base de configurações $\vec{\varphi}$ e utilizando a transformação de base $H_\varphi = \vec{\varphi}^\dagger H \vec{\varphi}$, o hamiltoniano pode ser escrito na forma bloco-diagonal

$$H_\varphi = \begin{bmatrix} H_\varphi^{S_{tot}^z=+2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & H_\varphi^{S_{tot}^z=+1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & H_\varphi^{S_{tot}^z=0} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & H_\varphi^{S_{tot}^z=-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & H_\varphi^{S_{tot}^z=-2} \end{bmatrix},$$

cujas autoenergias serão obtidas na próxima seção.

6.1 Autoenergias

Do mesmo modo que foi feito nas seções anteriores, a energia de cada setor será obtido através do "sanduíche" da matriz que representa o hamiltoniano entre o respectivo braket de cada setor. Tendo em vista que estes são vetores linha e coluna, respectivamente, de dimensão 16, ao passo que o hamiltoniano, conforme apresentado anteriormente, possui dimensão 16x16, o cálculo detalhado será omitido tendo em vista a limitação de espaço do presente trabalho. O procedimento matemático é relativamente simples, análogo àquele desenvolvido para o caso de dois e três sítios.

Subespaço $S_{tot}^z = \pm 2$

Para o setor $S_{tot}^z = +2$ autoenergia é dada por

$$E_1 = \langle \uparrow\uparrow\uparrow\uparrow | H | \uparrow\uparrow\uparrow\uparrow \rangle = -\Delta.$$

Já para o setor $S_{tot}^z = -2$, a autoenergia é dada por

$$E_2 = \langle \downarrow\downarrow\downarrow\downarrow | H | \downarrow\downarrow\downarrow\downarrow \rangle = -\Delta.$$

Subespaço $S_{tot}^z = \pm 1$

Claramente a matriz correspondente a este setor não é diagonal, de modo que se faz necessário aplicar uma transformação de similaridade. Utilizando o mesmo procedimento algébrico descrito anteriormente, por ocasião de sistemas com menor número de sítios, obtém-se a correspondente matriz bloco diagonal

$$H_\varphi = -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} -2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Assim, as autoenergias são

$$E_3 = E_{13} = E_4 = E_{14} = 0, \quad E_5 = E_{15} = 1, \quad E_6 = E_{16} = -1.$$

Subespaço $S_{tot}^z = 0$

Aplicando uma transformação de similaridade, obtém-se a matriz bloco diagonal correspondente ao hamiltoniano

$$H_\varphi = -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2\Delta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\Delta - \sqrt{\Delta^2 + 8} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 8} \end{bmatrix}.$$

As respectivas autoenergias são

$$\begin{aligned} E_7 &= \Delta & E_{11} &= \frac{1}{2}(\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 8}) \\ E_8 = E_9 = E_{10} &= 0 & E_{12} &= \frac{1}{2}(\Delta - \sqrt{\Delta^2 + 8}). \end{aligned}$$

Graficando os resultados acima:

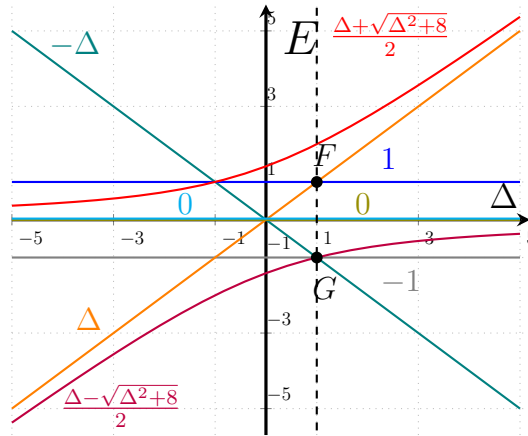


Figura 9 – Gráfico E vs Δ para quatro sítios

É importante notar que há dependências de Δ que não são mais lineares. Novamente observa-se elevada degenerescência na variante isotrópica ($\Delta=1$) do modelo: em $E = 0$, ocorre degenerescência de sete energias; no ponto F, 3 energias degeneradas; no ponto G, 5 energias degeneradas.

6.2 Interação com campo magnético externo

Novamente valendo-se da equação (3.6), pode-se obter as energias do sistema quando da interação com um campo magnético externo.

Subespaço $S_{tot}^z = \pm 2$

$$E_1 = -\Delta + 2h(+2) = -1 + 4h.$$

$$E_2 = -\Delta + 2h(-2) = -1 - 4h.$$

Subespaço $S_{tot}^z = \pm 1$

$$E_3 = 0 + 2h(+1) \implies E_3 = +2h$$

$$E_{13} = 0 + 2h(-1) \implies E_{13} = -2h$$

$$E_4 = 0 + 2h(+1) \implies E_4 = +2h$$

$$E_{14} = 0 + 2h(-1) \implies E_{14} = -2h$$

$$E_5 = +1 + 2h(+1) \implies E_5 = +1 + 2h$$

$$E_{15} = +1 + 2h(-1) \implies E_{15} = +1 - 2h$$

$$E_6 = -1 + 2h(+1) \implies E_6 = -1 + 2h$$

$$E_{16} = -1 + 2h(-1) \implies E_{16} = -1 - 2h$$

Subespaço $S_{tot}^z = 0$

Neste contexto, nenhum componente interage com o campo magnético externo. Explicitamente:

$$E_7 = \Delta + 2h(0) \implies E_7 = +1$$

$$E_8 = 0 + 2h(0) \implies E_8 = 0$$

$$E_9 = 0 + 2h(0) \implies E_9 = 0$$

$$E_{10} = 0 + 2h(0) \implies E_{10} = 0$$

$$E_{11} = \frac{1}{2}(\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 8}) + 2h(0) \implies E_{11} = +2$$

$$E_{12} = \frac{1}{2}(\Delta - \sqrt{\Delta^2 + 8}) + 2h(0) \implies E_{12} = -1.$$

Assim,

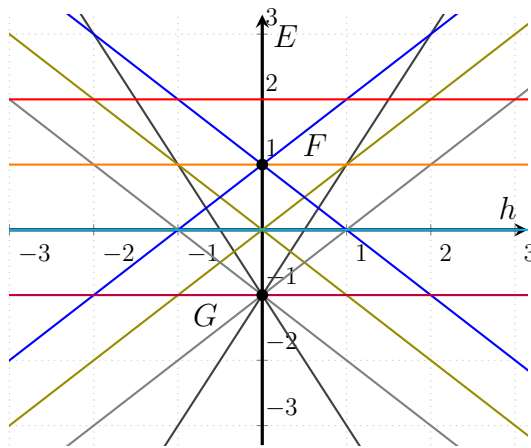


Figura 10 – Gráfico E vs h para quatro sítios ($\Delta = 1$ e $J = 1$)

No gráfico acima, no ponto $E = 0$, quatro componentes interagem, cada qual com uma degenerescência dupla. Já no ponto F e G ocorre o levantamento completo das degenerescências. Não obstante isso, nem todos os autoestados interagem com o campo magnético externo: isso ocorre pois há configurações cujas magnetizações são nulas (número par de sítios). Tendo em vista a simplificação visual, optou-se por não inserir as autoenergias explicitamente.

6.3 Autoestados

Novamente os autoestados são dados pelos kets $|E, S^z, j\rangle$. A forma de obtenção destes não será apresentada em detalhes pois o escopo do presente trabalho diz respeito ao espectro energético das soluções do hamiltoniano.

$$\begin{aligned}
|-\Delta, +2, 1\rangle &= |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle, & |0, 0, 3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle - |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle], \\
|-\Delta, -2, 2\rangle &= |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle, & |0, 0, 4\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle], \\
|\Delta, 0, 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle - |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle], & |0, 0, 5\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle], \\
|0, +1, 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle], & |0, -1, 6\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}[|\downarrow\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle], \\
|0, +1, 2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}[|\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle]. & |0, -1, 7\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow\downarrow\downarrow\rangle - |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle].
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
|1, +1, 1\rangle &= \frac{1}{2}[|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle]; & |-1, +1, 1\rangle &= \frac{1}{2}[|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle], \\
|1, -1, 1\rangle &= \frac{1}{2}[|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle - |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle]. & |-1, -1, 1\rangle &= \frac{1}{2}[|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle].
\end{aligned}$$

Finalmente,

$$\left| \frac{1}{2} (\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 8}), 0, 1 \right\rangle \propto |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle - \frac{1}{2}(\Delta + \sqrt{\Delta^2 + 8})(|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle),$$

$$\left| \frac{1}{2} (\Delta - \sqrt{\Delta^2 + 8}), 0, 1 \right\rangle \propto |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle - \frac{1}{2}(\Delta - \sqrt{\Delta^2 + 8})(|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle).$$

Os dois autoestados acima não estão devidamente normalizados.

7 Ansatz de Bethe Coordenado

Embora seja possível resolver exatamente o modelo de Heisenberg através da Diagonalização Exata, o esforço necessário para tanto aumenta em conformidade com o tamanho do sistema (vide caso de quatro sítios). Nesse contexto, o Ansatz de Bethe surge como uma ditosa alternativa: além de diminuir o esforço analítico dispendido na obtenção das soluções, é possível interpretá-las em termos de excitações elementares da cadeia de spins (*mágnons*). Ademais, em muitos casos os autovalores e as propriedades físicas derivadas podem ser avaliados no limite termodinâmico. É interessante pontuar que a terminologia *Coordenado* refere-se à forma como o problema é tratado, isto é, fazendo uso das posições e momenta de cada componente da cadeia quântica para determinar o espectro energético e respectivas funções de onda.

No mesmo espírito do que foi realizado nas seções anteriores, é possível dividir o espaço de Hilbert total do sistema em componentes menores. Novamente as simetrias vêm em nosso auxílio, permitindo "quebrar" o problema em componentes menores. Trata-se da simetria de translação ao longo da rede, qualquer que seja o número de sítios, e simetria de rotação ao redor do eixo z , gerada por S^z . Assim, de acordo com Lamers [2], o grupo de simetria é dado por $\mathcal{G} = \mathbb{Z} \times U_z(1) \subseteq \mathbb{Z} \times SU(2)$, sendo que o subíndice z implica que, no caso anisotrópico, o foco está na simetria $U(1)$, ao redor do eixo de quantização.

Em termos matemáticos, essas simetrias podem ser usadas para decompor \mathcal{H} numa soma direta de \mathcal{G} representações irredutíveis, ou "setores". No presente caso, cada setor é caracterizado de acordo com o número M de spins flipados, onde $M \in (0, 1, \dots, L)$. Assim,

$$\mathcal{H} = \bigoplus_{M=0}^L \mathcal{H}_M,$$

que corresponde à forma bloco diagonal do hamiltoniano. Dito de outra forma, é possível decompôr o espaço de Hilbert de dimensão 2^L em $(L + 1)$ setores caracterizados pelos seus respectivos números de spins flipados.

7.1 Caso $M=0$

Seja o subespaço invariante \mathcal{H}_0 , sem spins flipados e gerado pelo vetor $|0\rangle = |\uparrow \dots \uparrow\rangle$, também chamado de *pseudo-vácuo*. A aplicação do hamiltoniano resulta em

$$H |0\rangle = -\frac{J}{2} \sum_{m \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} (S_m^+ S_{m+1}^- + S_m^- S_{m+1}^+ + 2S_m^z S_{m+1}^z) |0\rangle.$$

Pelo fato do estado base ser constituído somente de spins orientados em uma direção, a atuação dos operadores subida e descida retorna um valor nulo. Já a atuação dos operadores S^z implica que $\sum_{m \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} S_m^z S_{m+1}^z |0\rangle = \sum_{m \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} S_m^z S_{m+1}^z |\uparrow \dots \uparrow\rangle = \frac{L}{4} |0\rangle$.

Assim, a atuação do hamiltoniano no estado base resulta em $H|0\rangle = -\frac{JL}{4}|0\rangle$, de modo que a energia deste estado é $E_0 = -\frac{JL}{4}$.

7.2 Caso $M=1$

Para o presente caso será considerado um subespaço invariante \mathcal{H}_1 , gerado pelos vetores compostos por um spin *down* em qualquer posição da rede periódica e $L-1$ spins *up*. Os vetores base são denotados por $|n\rangle = S_n^- |0\rangle$.

Através da simetria translacional do sistema pode-se supor, de acordo com Plantz [5], que os autovetores possuem o seguinte formato: $|\psi_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{n \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} e^{ikn} |n\rangle$, onde $k \in \frac{2\pi}{L}m$, com $m = 0, \dots, L-1$. Trata-se da função de onda (*wave-function*) de um mágnon livre numa rede periódica unidimensional de dimensão L , cujo espaçamento entre sítios foi definido como unitário, *i.e.* $\Delta x = 1$. É possível perceber que $|\psi_k\rangle$ é um autoestado do operador de translação à esquerda (*left-translation operator*), definido como $T|n\rangle = |n-1\rangle$. Portanto, $T|\psi_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{n \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} e^{ikn} |n-1\rangle$. A aplicação de uma transformação de Fourier implica em $T|\psi_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{n \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} e^{ik(n+1)} |n\rangle = e^{ik} |\psi_k\rangle$.

De modo a encontrar os autovalores correspondentes, o hamiltoniano é aplicado em um estado base $|m\rangle$ no qual o spin flipado encontra-se na m -ésima posição da rede. Aplicando o procedimento para cada componente separadamente,

$$\begin{aligned} \sum_{n \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} S_n^+ S_{n+1}^- |m\rangle &= \sum_{n \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} S_n^+ S_{n+1}^- |\uparrow \dots \uparrow \downarrow \uparrow \dots \uparrow\rangle = |\uparrow \dots \uparrow \uparrow \downarrow \uparrow \dots \uparrow\rangle = |m+1\rangle \\ \sum_{n \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} S_n^- S_{n+1}^+ |m\rangle &= \sum_{n \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} S_n^- S_{n+1}^+ |\uparrow \dots \uparrow \downarrow \uparrow \dots \uparrow\rangle = |\uparrow \dots \uparrow \downarrow \uparrow \dots \uparrow\rangle = |m-1\rangle \\ \sum_{n \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} S_n^z S_{n+1}^z |m\rangle &= \sum_{n \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} S_n^z S_{n+1}^z |\uparrow \dots \uparrow \downarrow \uparrow \dots \uparrow\rangle = \frac{L-4}{4} |m\rangle \end{aligned}$$

Utilizando o mesmo raciocínio aplicado acima e escrevendo explicitamente a ação do hamiltoniano no estado $|\psi_k\rangle$, obtém-se

$$\begin{aligned} H|\psi_k\rangle &= -\frac{J}{2} \sum_{m \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} (S_m^+ S_{m+1}^- + S_m^- S_{m+1}^+ + 2S_m^z S_{m+1}^z) \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{n \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} e^{ikn} |n\rangle = \\ &= -\frac{J}{2} \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{n \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} e^{ikn} \left(|n+1\rangle + |n-1\rangle + \frac{L-4}{2} |n\rangle \right). \end{aligned}$$

Assim,

$$\begin{aligned}
-\frac{2}{J}H|\psi_k\rangle &= \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{n \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} e^{ikn} |n+1\rangle + \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{n \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} e^{ikn} |n-1\rangle + \frac{1}{\sqrt{L}} \frac{L-4}{2} \sum_{n \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} e^{ikn} |n\rangle \\
-\frac{2}{J}H|\psi_k\rangle &= \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{n \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} e^{ik(n-1)} |n\rangle + \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{n \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} e^{ik(n+1)} |n\rangle + \frac{1}{\sqrt{L}} \frac{L-4}{2} \sum_{n \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} e^{ikn} |n\rangle \\
-\frac{2}{J}H|\psi_k\rangle &= \left(e^{-ik} + e^{ik} + \frac{L-4}{2} \right) \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{n \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} e^{ikn} |n\rangle \\
-\frac{2}{J}H|\psi_k\rangle &= \left(2\cos(k) - 2 + \frac{L}{2} \right) |n\rangle \implies -\frac{2}{J}E_k|\psi_k\rangle \equiv 2 \left(\cos(k) - 1 + \frac{L}{4} \right) |\psi_k\rangle.
\end{aligned}$$

Deste resultado, extrai-se que $E_k = -J \left[\cos(k) - 1 + \frac{L}{4} \right]$.

A energia de um *magnon* é dada por $(E_k - E_0)$. Utilizando resultados anteriores, é possível obter $E_k - E_0 = -J \left[\cos(k) - 1 + \frac{L}{4} \right] - \left[-\frac{JL}{4} \right] = -J\cos(k) + J$. Portanto,

$$E_k - E_0 = J [1 - \cos(k)] \equiv E_1(k).$$

7.3 Caso M=2

Para o presente caso, considera-se o subespaço \mathcal{H}_2 , cuja dimensão é $\frac{L(L-1)}{2}$. O estado base será denotado por $|n_1, n_2\rangle \equiv S_{n_1}^- S_{n_2}^- |0\rangle$. O estado geral pode ser escrito na forma $|\psi\rangle = \sum_{n_2 > n_1} f(n_1, n_2) |n_1, n_2\rangle$, isto é, uma combinação linear dos vetores base de \mathcal{H}_2 . Os índices $n_2 > n_1$ são usados pois $|n_1, n_2\rangle = |n_2, n_1\rangle$ e $|n_1, n_1\rangle = 0$. A condição de contorno periódica então se torna $f(n_1, n_2) = f(n_2, n_1 + L)$. Aplicando o hamiltoniano no estado base, obtém-se

$$H|\psi\rangle = -\frac{J}{2} \sum_{n_2 > n_1} f(n_1, n_2) \sum_{m \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} (S_m^+ S_{m+1}^- + S_m^- S_{m+1}^+ + 2S_m^z S_{m+1}^z) |n_1, n_2\rangle.$$

A ação dos operadores difere para o caso de spins adjacentes, *i.e.* dois spins flipados contíguos, e não-adjacentes. Para fins de detalhamento, a álgebra será realizada separadamente num estado base $|m_1, m_2\rangle$.

Spins flipados adjacentes

O spin no sítio m_1 não pode ser transladado para a direita porque o spin no sítio m_2 , à direita, já está flipado.

$$\sum_{n \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} S_n^+ S_{n+1}^- |m_1, m_2\rangle = \sum_{n \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} S_n^+ S_{n+1}^- |\uparrow \dots \uparrow \downarrow \uparrow \uparrow \dots \uparrow\rangle = |\uparrow \dots \uparrow \downarrow \downarrow \uparrow \dots \uparrow\rangle$$

$$= |m_1, m_2 + 1\rangle = |m_1, m_1 + 2\rangle.$$

Já o spin no sítio m_2 não pode ser transladado para a esquerda pois o spin no sítio m_1 já está orientado para baixo.

$$\begin{aligned} \sum_{n \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} S_n^- S_{n+1}^+ |m_1, m_2\rangle &= \sum_{n \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} S_n^- S_{n+1}^+ |\uparrow \dots \uparrow \downarrow \uparrow \dots \uparrow\rangle = |\uparrow \dots \uparrow \downarrow \uparrow \dots \uparrow\rangle \\ &= |m_1 - 1, m_2\rangle = |m_1 - 1, m_1 + 1\rangle. \end{aligned}$$

Por fim a projeção de spin no eixo z

$$\sum_{n \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} S_n^z S_{n+1}^z |m_1, m_2\rangle = \sum_{n \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} S_n^z S_{n+1}^z |\uparrow \dots \uparrow \downarrow \uparrow \dots \uparrow\rangle = \frac{L-4}{4} |m_1, m_2\rangle.$$

Spins flipados não-adjacentes

Realizando a álgebra explicitamente,

$$\begin{aligned} \sum_{n \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} S_n^+ S_{n+1}^- |m_1, m_2\rangle &= \sum_{n \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} S_n^+ S_{n+1}^- |\uparrow \dots \uparrow \downarrow \uparrow \dots \uparrow\rangle = |\uparrow \dots \uparrow \downarrow \uparrow \dots \uparrow\rangle \\ &+ |\uparrow \dots \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \dots \uparrow\rangle = |m_1 + 1, m_2\rangle + |m_1, m_2 + 1\rangle. \end{aligned}$$

Pode-se ver que o operador acima translaciona o sistema para a direita, da mesma forma que no caso $M = 1$. Desta vez, no entanto, a operação ocorre no sítio m_1 da mesma forma que no sítio m_2 . Também:

$$\begin{aligned} \sum_{n \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} S_n^- S_{n+1}^+ |m_1, m_2\rangle &= \sum_{n \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} S_n^- S_{n+1}^+ |\uparrow \dots \uparrow \downarrow \uparrow \dots \uparrow\rangle = |\uparrow \dots \uparrow \downarrow \uparrow \dots \uparrow\rangle \\ &+ |\uparrow \dots \uparrow \downarrow \uparrow \dots \uparrow\rangle = |m_1 - 1, m_2\rangle + |m_1, m_2 - 1\rangle. \end{aligned}$$

De modo similar ao caso anterior, o operador acima realiza uma translação para a esquerda, ambos de m_1 e m_2 .

Já a projeção no eixo z

$$\sum_{n \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} S_n^z S_{n+1}^z |m_1, m_2\rangle = \sum_{n \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} S_n^z S_{n+1}^z |\uparrow \dots \uparrow \downarrow \uparrow \dots \uparrow\rangle = \frac{L-8}{4} |m_1, m_2\rangle.$$

Ainda sobre a ação do hamiltoniano no estado geral: supondo $|\psi\rangle$ um autovetor, é possível obter as equações relacionando os autovalores às amplitudes $f(n_1, n_2)$. Uma forma de fazê-lo é escrever o resultado na forma

$$H |\psi\rangle = \sum_{n_2 > n_1 + 1} \alpha(n_1, n_2) |n_1, n_2\rangle + \sum_{n \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} \beta(n) |n, n + 1\rangle.$$

Utilizando a estratégia apresentada anteriormente, o hamiltoniano acima foi dividido em duas partes: a primeira diz respeito ao caso dos spins (sítios) não-adjacentes. Já a segunda, em contraste, representa o caso onde eles são adjacentes. Suponto $|\psi\rangle$ um autovetor com autovalor associado E , então é possível obter as seguintes relações:

$$\alpha(n_1, n_2) = Ef(n_1, n_2) \quad ; \quad n_2 > n_1 + 1$$

$$\beta(n) = Ef(n, n + 1).$$

Explicitamente,

$$H|\psi\rangle = -\frac{J}{2} \sum_{n_2 > n_1} f(n_1, n_2) \sum_{m \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} (S_m^+ S_{m+1}^- + S_m^- S_{m+1}^+ + 2S_m^z S_{m+1}^z) |n_1, n_2\rangle.$$

Utilizando resultados anteriores,

$$\begin{aligned} -\frac{2}{J}H|\psi\rangle &= \sum_{n_2 > n_1+1} f(n_1, n_2) \left[|n_1 + 1, n_2\rangle + |n_1, n_2 + 1\rangle + |n_1 - 1, n_2\rangle + |n_1, n_2 - 1\rangle + \frac{L-8}{2} |n_1, n_2\rangle \right] \\ &+ \sum_{n \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} f(n, n + 1) \left[|n, n + 2\rangle + |n - 1, n + 1\rangle + \frac{L-4}{2} |n, n + 1\rangle \right] \end{aligned} \quad (7.1)$$

Deslocando a soma de modo a obter $|n_1, n_2\rangle$ em cada termo,

$$\begin{aligned} -\frac{2}{J}H|\psi\rangle &= \sum_{n_2 > n_1+2} f(n_1 + 1, n_2) |n_1, n_2\rangle + \sum_{n_2 > n_1} f(n_1, n_2 + 1) |n_1, n_2\rangle + \sum_{n_2 > n_1} f(n_1 - 1, n_2) |n_1, n_2\rangle \\ &+ \sum_{n_2 > n_1+2} f(n_1, n_2 - 1) |n_1, n_2\rangle + \sum_{n_2 > n_1+1} \frac{L-8}{2} f(n_1, n_2) |n_1, n_2\rangle \\ &+ \sum_{n \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} f(n, n + 1) \left[|n, n + 2\rangle + |n - 1, n + 1\rangle + \frac{L-4}{2} |n, n + 1\rangle \right] \end{aligned} \quad (7.2)$$

Agora a soma sobre n_1 e n_2 será modificada, de modo que $n_2 > n_1 + 1$

$$\sum_{n_2 > n_1} f(n_1 - 1, n_2) |n_1, n_2\rangle = \sum_{n_2 > n_1+1} f(n_1 - 1, n_2) |n_1, n_2\rangle - \left[\sum_{n \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} f(n, n + 1) |n, n + 2\rangle \right],$$

$$\sum_{n_2 > n_1} f(n_1, n_2 + 1) |n_1, n_2\rangle = \sum_{n_2 > n_1+1} f(n_1, n_2 + 1) |n_1, n_2\rangle - \left[\sum_{n \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} f(n + 1, n + 2) |n, n + 2\rangle \right].$$

Também,

$$\sum_{n_2 > n_1+2} f(n_1, n_2 - 1) |n_1, n_2\rangle = \sum_{n_2 > n_1+1} f(n_1, n_2 - 1) |n_1, n_2\rangle + \left[\sum_{n \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} f(n - 1, n + 1) |n, n + 1\rangle \right],$$

$$\sum_{n_2 > n_1+2} f(n_1 + 1, n_2) |n_1, n_2\rangle = \sum_{n_2 > n_1+1} f(n_1 + 1, n_2) |n_1, n_2\rangle + \left[\sum_{n \in \frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}} f(n, n + 2) |n, n + 1\rangle \right].$$

Substituindo os resultados anteriores na eq. (7.2), obtém-se

$$\begin{aligned}
& -\frac{2}{J}H|\psi\rangle = \\
& \sum_{n_2 > n_1 + 1} f(n_1 - 1, n_2) |n_1, n_2\rangle - \sum_{n \in \frac{Z}{LZ}} f(n, n+1) |n, n+2\rangle + \sum_{n_2 > n_1 + 1} f(n_1, n_2 - 1) |n_1, n_2\rangle \\
& + \sum_{n \in \frac{Z}{LZ}} f(n-1, n+1) |n, n+1\rangle + \sum_{n_2 > n_1 + 1} f(n_1 + 1, n_2) |n_1, n_2\rangle - \sum_{n \in \frac{Z}{LZ}} f(n+1, n+2) |n, n+2\rangle \\
& + \sum_{n_2 > n_1 + 1} f(n_1, n_2 + 1) |n_1, n_2\rangle + \sum_{n \in \frac{Z}{LZ}} f(n, n+2) |n, n+1\rangle + \frac{L-8}{2} \sum_{n_2 > n_1 + 1} f(n_1, n_2) |n_1, n_2\rangle \\
& + \sum_{n \in \frac{Z}{LZ}} f(n, n+1) |n, n+2\rangle + \sum_{n \in \frac{Z}{LZ}} f(n, n+1) |n-1, n+1\rangle + \frac{L-4}{2} \sum_{n \in \frac{Z}{LZ}} f(n, n+1) |n, n+1\rangle.
\end{aligned}$$

Finalmente,

$$\begin{aligned}
& -\frac{2}{J}H|\psi\rangle = \\
& \sum_{n_2 > n_1 + 1} \left[f(n_1 - 1, n_2) + f(n_1, n_2 - 1) + f(n_1 + 1, n_2) + f(n_1, n_2 + 1) + \frac{L-8}{2} f(n_1, n_2) \right] |n_1, n_2\rangle \\
& + \sum_{n \in \frac{Z}{LZ}} \left[f(n-1, n+1) + f(n, n+2) + \frac{L-4}{2} f(n, n+1) \right] |n, n+1\rangle.
\end{aligned} \tag{7.3}$$

Ao ler o coeficiente α , que diz respeito aos sítios não-adjacentes, isto é,

$$\begin{aligned}
& \sum_{n_2 > n_1 + 1} \left[f(n_1 - 1, n_2) + f(n_1, n_2 - 1) + f(n_1 + 1, n_2) + f(n_1, n_2 + 1) + \frac{L-8}{2} f(n_1, n_2) \right] |n_1, n_2\rangle \\
& \equiv -\frac{2}{J} E f(n_1, n_2) |n_1, n_2\rangle,
\end{aligned}$$

pode-se inferir que

$$-\frac{J}{2} \left[f(n_1 - 1, n_2) + f(n_1, n_2 - 1) + f(n_1 + 1, n_2) + f(n_1, n_2 + 1) + \frac{L-8}{2} f(n_1, n_2) \right] = E f(n_1, n_2).$$

Portanto,

$$\begin{aligned}
& (E - E_0) f(n_1, n_2) = \\
& -\frac{J}{2} \left[f(n_1 - 1, n_2) + f(n_1, n_2 - 1) + f(n_1 + 1, n_2) + f(n_1, n_2 + 1) + \frac{L}{2} f(n_1, n_2) - 4f(n_1, n_2) \right] \\
& - \left(-\frac{JL}{4} \right) f(n_1, n_2).
\end{aligned} \tag{7.4}$$

Finalmente,

$$(E - E_0) f(n_1, n_2) = \frac{J}{2} [4f(n_1, n_2) - f(n_1 - 1, n_2) - f(n_1, n_2 - 1) - f(n_1 + 1, n_2) - f(n_1, n_2 + 1)]. \tag{7.5}$$

Ao ler o coeficiente β , que diz respeito ao caso de sítios adjacentes, isto é,

$$\sum_{n \in \frac{Z}{LZ}} \left[f(n-1, n+1) + f(n, n+2) + \frac{L-4}{2} f(n, n+1) \right] |n, n+1\rangle \equiv -\frac{2}{J} E f(n, n+1) |n, n+1\rangle,$$

pode-se inferir que

$$Ef(n, n+1) = -\frac{J}{2} \left[f(n-1, n+1) + f(n, n+2) + \frac{L-4}{2} f(n, n+1) \right].$$

Então

$$(E - E_0)f(n, n+1) = -\frac{J}{2} \left[f(n-1, n+1) + f(n, n+2) + \frac{L}{2} f(n, n+1) - 2f(n, n+1) \right] + \left(\frac{JL}{4} \right) f(n, n+1).$$

Finalmente,

$$(E - E_0)f(n, n+1) = \frac{J}{2} [2f(n, n+1) - f(n-1, n+1) - f(n, n+2)].$$

Para ir adiante, é necessário conhecer a forma dos coeficientes $f(n_1, n_2)$. Considerando o caso $M = 1$, um bom chute seria tomar o produto de ondas planas, isto é, $f(n_1, n_2) = Ae^{i(k_1 n_1 + k_2 n_2)}$. Essa tentativa é muito insatisfatório na medida que ignora completamente a interação presente no hamiltoniano. Para incluir esse efeito, Hans Bethe propôs, em 1931, seu famoso ansatz, $f(n_1, n_2) = Ae^{i(k_1 n_1 + k_2 n_2)} + Be^{i(k_2 n_1 + k_1 n_2)}$, denominado Coordenado.

Fisicamente, o ansatz acima possibilita dar-mo-nos conta de que os mágnos interagem entre si e, ao fazê-lo, trocam momenta. A incrível ideia de Hans Bethe foi supor que nas regiões onde os spins para baixo estão separados, a solução deveria ter o formato de uma onda plana, pois somente interações de vizinhos próximos são consideradas. Uma possível maneira de enxergar essas ondas planas é reescrever o estado genérico como

$$|\psi\rangle = A \sum_{n_2 > n_1} e^{i(k_1 n_1 + k_2 n_2)} |n_1, n_2\rangle + B \sum_{n_1 > n_2} e^{i(k_1 n_2 + k_2 n_1)} |n_1, n_2\rangle.$$

Isso leva a um produto de ondas planas nas regiões $n_2 > n_1$ e $n_1 > n_2$, mas quando passa-se por essas regiões a amplitude muda por causa da interação. Da equação $Ef(n_1, n_2) = \alpha(n_1, n_2)$, para $n_2 > n_1 + 1$, foi mostrado que

$$(E - E_0)f(n_1, n_2) = \frac{J}{2} [4f(n_1, n_2) - f(n_1 - 1, n_2) - f(n_1, n_2 - 1) - f(n_1 + 1, n_2) - f(n_1, n_2 + 1)].$$

Aplicando o Ansatz de Bethe para o caso acima, obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{2}{J}(E - E_0)f(n_1, n_2) = & 4Ae^{i(k_1 n_1 + k_2 n_2)} - Ae^{-ik_1} e^{i(k_1 n_1 + k_2 n_2)} - Ae^{-ik_2} e^{i(k_1 n_1 + k_2 n_2)} - Ae^{ik_1} e^{i(k_1 n_1 + k_2 n_2)} - Ae^{ik_2} e^{i(k_1 n_1 + k_2 n_2)} \\ & + 4Be^{i(k_1 n_2 + k_2 n_1)} - Be^{-ik_2} e^{i(k_1 n_2 + k_2 n_1)} - Be^{-ik_1} e^{i(k_1 n_2 + k_2 n_1)} - Be^{ik_2} e^{i(k_1 n_2 + k_2 n_1)} - Be^{ik_1} e^{i(k_1 n_2 + k_2 n_1)}, \end{aligned} \quad (7.6)$$

de modo que

$$\begin{aligned} \frac{2}{J}(E - E_0)f(n_1, n_2) = & 4f(n_1, n_2) - e^{-ik_1} [Ae^{i(k_1 n_1 + k_2 n_2)} + Be^{i(k_1 n_2 + k_2 n_1)}] - e^{-ik_2} [Ae^{i(k_1 n_1 + k_2 n_2)} + Be^{i(k_1 n_2 + k_2 n_1)}] \\ & - e^{ik_1} [Ae^{i(k_1 n_1 + k_2 n_2)} + Be^{i(k_1 n_2 + k_2 n_1)}] - e^{ik_2} [Ae^{i(k_1 n_1 + k_2 n_2)} + Be^{i(k_1 n_2 + k_2 n_1)}]. \end{aligned}$$

(7.7)

Assim,

$$\frac{2}{J}(E - E_0)f(n_1, n_2) = f(n_1, n_2)[4 - e^{-ik_1} - e^{-ik_2} - e^{-ik_1} - e^{-ik_2}]$$

$$\frac{2}{J}(E - E_0)f(n_1, n_2) = f(n_1, n_2)[4 - 2\cos(k_1) - 2\cos(k_2)]$$

$$(E - E_0) = J[2 - \cos(k_1) - \cos(k_2)] = \sum_{i=1}^2 E_1(k_i).$$

Pode-se ver que a energia total é a soma de duas energias de mágnons livres com momenta k_1 e k_2 , respectivamente; isso é notável pois os mágnons interagem entre si. No entanto, a interação resultará nos momenta k_i , diferentes do caso dos mágnons livres. Conseqüentemente, a energia também será diferente do caso não interagente.

Fazendo uso da equação do caso $n_2 > n_1 + 1$:

$$(E - E_0)f(n_1, n_2) = \frac{J}{2}[4f(n_1, n_2) - f(n_1 - 1, n_2) - f(n_1, n_2 - 1) - f(n_1 + 1, n_2) - f(n_1, n_2 + 1)].$$

Considerando $n_2 = n_1 + 1$:

$$(E - E_0)f(n_1, n_1 + 1) = \frac{J}{2}[4f(n_1, n_2) - f(n_2 - 2, n_2) - f(n_2 - 1, n_2 - 1) - f(n_2, n_2) - f(n_2 - 1, n_2 + 1)].$$

Considerando $n_1 = n$, artifício que não possui significado físico, e subtraindo a equação do caso $n \in \frac{\mathbb{Z}}{LZ}$, isto é, dos vizinhos próximos:

$$(E - E_0)f(n, n + 1) = \frac{J}{2}[4f(n, n + 1) - f(n - 1, n + 1) - f(n, n) - f(n + 1, n + 1) - f(n, n + 2)]$$

menos

$$(E - E_0)f(n, n + 1) = \frac{J}{2}[2f(n, n + 1) - f(n - 1, n + 1) - f(n, n + 2)],$$

de modo que

$$\frac{J}{2}[2f(n, n + 1) - f(n, n) - f(n + 1, n + 1)] = -\frac{J}{2}[f(n, n) + f(n + 1, n + 1) - 2f(n, n + 1)] = 0.$$

Finalmente, pode-se obter

$$f(n, n) + f(n + 1, n + 1) - 2f(n, n + 1) = 0.$$

Inserindo o Ansatz de Bethe na expressão acima, obtém-se

$$(A + B)e^{in(k_1+k_2)} + (A + B)e^{i(k_1+k_2)(n+1)} - 2(Ae^{i(k_1n+k_2(n+1))} + Be^{i(k_2n+k_1(n+1))}) = 0$$

Simplificando, $(A + B) + (A + B)e^{i(k_1+k_2)} - 2(Ae^{ik_2} + Be^{ik_1}) = 0$. Após alguma álgebra, pode-se isolar os coeficientes

$$\frac{A}{B} = -\frac{1 + e^{i(k_1+k_2)} - 2e^{ik_1}}{1 + e^{i(k_1+k_2)} - 2e^{ik_2}}.$$

Supondo $k_1, k_2 \in \mathbb{R}$ e após alguma álgebra, obtém-se

$$\left| \frac{A}{B} \right|^2 = \left[\frac{1 + e^{(k_1+k_2)} - 2e^{ik_1}}{1 + e^{(k_1+k_2)} - 2e^{ik_2}} \right] \left[\frac{1 + e^{(k_1+k_2)} - 2e^{ik_2}}{1 + e^{(k_1+k_2)} - 2e^{ik_1}} \right] = 1.$$

O resultado acima mostra que $\frac{A}{B}$ é uma fase e pode ser reescrito como

$$e^{i\theta} \equiv \frac{A}{B} = - \frac{1 + e^{i(k_1+k_2)} - 2e^{ik_1}}{1 + e^{i(k_1+k_2)} - 2e^{ik_2}}. \quad (7.8)$$

Essa condição é incorporada ao Ansatz na forma de fatores extra, que correspondem à fase em questão, de modo que

$$f(n_1, n_2) = e^{i(k_1 n_1 + k_2 n_2 + \frac{\theta_{12}}{2})} + e^{i(k_2 n_1 + k_1 n_2 + \frac{\theta_{21}}{2})}. \quad (7.9)$$

De outra maneira,

$$f(n_1, n_2) = e^{i(k_1 n_1 + k_2 n_2)} + \frac{e^{-i\frac{\theta}{2}}}{e^{i\frac{\theta}{2}}} e^{i(k_2 n_1 + k_1 n_2)} = e^{i(k_1 n_1 + k_2 n_2)} + S(k_1, k_2) e^{i(k_2 n_1 + k_1 n_2)},$$

sendo $S(k_1, k_2)$ denominado matriz de espalhamento de dois corpos: trata-se de um escalar que pode ser concebido como a razão entre a onda espalhada e aquela transmitida. Contém virtualmente toda a informação a respeito do referido espalhamento.

Os ângulos de fase em questão, $\theta_{12} = -\theta_{21} \equiv \theta$, dependem dos ainda indeterminados k_1 e k_2 . Utilizando algumas identidades trigonométricas, é possível reescrever a equação (7.8) na forma real

$$2 \cot \left(\frac{\theta}{2} \right) = \cot \left(\frac{k_1}{2} \right) - \cot \left(\frac{k_2}{2} \right). \quad (7.10)$$

As condições de contorno periódicas implicam na condição $f(n_1, n_2) = f(n_2, n_1 + L)$, que só é satisfeita se

$$e^{ik_1 L} = e^{i\theta} \quad ; \quad e^{ik_2 L} = e^{-i\theta}.$$

Isso significa que quando um mágnon percorre a cadeia inteira, ganha uma fase θ devido à interação com outro mágnon. Esse é o chamado ângulo de espalhamento, consequência da invariância translacional do sistema. De outra maneira:

$$k_1 L = \theta + 2\pi m_1 \quad ; \quad k_2 L = -\theta + 2\pi m_2, \quad (7.11)$$

onde os inteiros $m_i \in (0, 1, \dots, L-1)$ são os chamados *Números quânticos de Bethe*.

Da conservação de momentum, pode-se extrair que

$$k = k_1 + k_2 = \frac{2\pi}{L}(m_1 + m_2). \quad (7.12)$$

Trata-se de uma reminiscência da superposição de dois mágnons livres, assemelhando-se, dessa forma, ao caso energético. A interação entre os mágnons, por sua vez, reflete-se na fase θ e nos momenta k_1 e k_2 , ao invés de um único momentum k , correspondente ao caso $M = 1$. Este existe independentemente do Ansatz de Bethe pelo fato de estar associado à simetria translacional do hamiltoniano, ao passo que aqueles especificam a função de onda do ansatz.

Os valores permitidos da dupla (m_1, m_2) restringem-se a $0 \leq m_1 \leq m_2 \leq L - 1$. Permutar m_1 e m_2 simplesmente alterna k_1 e k_2 , produzindo a mesma solução. Há $\frac{L(L+1)}{2}$ pares que satisfazem a restrição apresentada, mas somente $\frac{L(L-1)}{2}$ são soluções de (7.10) e (7.11). Estas podem ser determinadas analiticamente, no caso de poucos sítios, ou computacionalmente. Algumas são reais ($k_1, k_2 \in \mathbb{R}$), enquanto outras são complexas. De acordo com Karbach e Müller [6], é possível dividir as soluções em três categorias, a saber:

- **Classe C_1 :** neste caso, um dos números de Bethe é zero, digamos, m_1 . Então há três possibilidades para o outro número, *i.e.* $m_2 = (0, 1, \dots, L - 1)$. Existe uma solução real para todas as L combinações, $k_1 = 0$, $k_2 = \frac{2\pi}{L}m_2$, $\theta = 0$.
- **Classe C_2 :** neste caso, m_1 e m_2 são diferentes de zero e diferem por dois ou mais, *i.e.* $m_2 - m_1 \geq 2$. Há $\frac{L(L-5)}{2} + 3$ pares, sendo que todos eles correspondem a uma solução com m_1 e m_2 reais. Para determiná-los, é necessário combinar as equações (7.10), (7.11) e (7.12) numa única equação não-linear para k_1 , a saber,

$$2\cot\frac{Lk_1}{2} = \cot\frac{k_1}{2} - \cot\frac{k - k_1}{2}, \quad (7.13)$$

para um dado $k = \frac{2\pi}{L}n$, onde $n = (0, 1, \dots, L - 1)$. Substituindo o resultado em (7.11), obtém-se k_2 e θ .

- **Classe C_3 :** esta classe possui os números de Bethe, m_1 e m_2 , diferentes de zero, os quais são iguais ou diferem por um fator unitário. Existem $2L - 3$ pares, mas somente $N - 3$ são soluções das equações (7.10) e (7.11), sendo que a maior parte delas são complexas. Para encontrá-las, é necessário escrever $k_1 = \frac{k}{2} + i\nu$, $k_2 = \frac{k}{2} - i\nu$ e $\theta = \varphi + i\chi$. Utilizando as equações (7.10) e (7.11) para um k fixo, pode-se obter a relação

$$\cos\left(\frac{k}{2}\right) \sinh(L\nu) = \sinh[(L-1)\nu] + \cos(\varphi)\sinh(\nu), \quad (7.14)$$

onde $\varphi = \pi(m_1 - m_2)$ e $\chi = L\nu$ é inferida a partir da solução. É suficiente considerar $\nu > 0$. A energia de qualquer solução completa é reescrita na forma $E - E_0 = 2J [1 - \cos(\frac{k}{2}) \cos(h\nu)]$.

Uma análise mais detalhada da equação (7.14) mostra que uma solução complexa existe para $m_2 = m_1$ se $m_1 + m_2 = 2, 4, \dots, \frac{L}{2} - 2, \frac{3L}{2} + 2, \dots, 2L - 2$.

Para $m_2 = m_1 + 1$, uma solução complexa existe se $m_1 + m_2 = \tilde{m}, \tilde{m} + 2, \dots, \frac{L}{2} - 1, \frac{3L}{2} + 3, \dots, 2L - \tilde{m} + 2$, onde $\tilde{m} \approx \frac{\sqrt{L}}{\pi}$. No último caso, existem soluções reais adicionais de (7.13) se $m_1 + m_2 = 3, 5, \dots, \tilde{m} - 2, 2L - \tilde{m} + 2, \dots, 2L - 3$. Os m_1, m_2 apresentados acima correspondem a $L - 4$ soluções da classe C_3 . No entanto, há mais uma solução correspondente à classe C_3 : esta, que possui $k = \pi$ e $m_1 = m_2 = \frac{L}{4}$, é facilmente ignorada na análise numérica pois tanto k_1 quanto k_2 possuem uma parte imaginária infinita.

A título de exemplo, apliquemos o raciocínio apresentado acima para encontrar as autoenergias de alguns casos específicos. Utilizando novamente a referência [6], obtemos os números expostos a seguir.

Classe	m_1	m_2	k_1	k_2	E
C_1	0	0	0	0	$-\frac{3}{4}$
	0	1	0	$\frac{2\pi}{3}$	$+\frac{3}{4}$
	0	2	0	$\frac{4\pi}{3}$	$+\frac{3}{4}$

Tabela 2 – Energias do modelo isotrópico ($\Delta = 1$ e $J = 1$) para o caso $L=3$ e $M=2$ (2 spins flipados), correspondentes ao setor $S_{tot}^z = +\frac{1}{2}$.

A tabela acima dá as energias separadas dos casos $S_{tot}^z = +\frac{1}{2}$ e $S_{tot}^z = -\frac{1}{2}$, *i.e.* por causa da simetria do problema, o espectro energético do setor $S_{tot}^z = \pm\frac{1}{2}$ é duplicado, por assim dizer.

Para o caso de 4 sítios e 2 spins flipados, obtém-se as 6 autoenergias correspondentes ao bloco de magnetização nula, conforma exposto na tabela a seguir.

Classe	m_1	m_2	k_1	k_2	E
C_1	0	0	0	0	-1
	0	1	0	$\frac{\pi}{2}$	0
	0	2	0	π	+1
	0	3	0	$\frac{3\pi}{2}$	0
C_2	1	3	$\frac{2\pi}{3}$	$\frac{4\pi}{3}$	2
C_3	1	1	$\frac{\pi}{2} + i\infty$	$\frac{\pi}{2} - i\infty$	0

Tabela 3 – Energias do modelo isotrópico ($\Delta = 1$ e $J = 1$) para o caso $L=4$ e $M=2$ (2 spins flipados), correspondentes ao setor $S_{tot}^z = 0$.

7.4 Caso geral

Seja $M \in (0, 1, \dots, L)$ arbitrário e o subespaço \mathcal{H}_M , cuja dimensão é $\binom{L}{M}$, gerado pelos vetores compostos por M spins down nos sítios n_i , com $i \in (1, \dots, M)$. Estes vetores

base são denotados por $|n_1, \dots, n_M\rangle = S_{n_1}^- \dots S_{n_M}^- |0\rangle$. Dessa forma, um estado geral pode ser escrito da seguinte maneira:

$$|\psi\rangle = \sum_{L \geq n_M \geq \dots \geq n_1 \geq 1} f(n_1, \dots, n_M) |n_1, \dots, n_M\rangle.$$

Para encontrar o espectro energético, é necessário generalizar o Ansatz coordenado. Pode-se fazê-lo, de acordo com Plantz [5], da seguinte forma:

$$f(n_1, \dots, n_M) = \sum_{P \in S_M} A_P \exp \left[i \sum_{j=1}^M k_{P(j)} n_j \right],$$

onde S_M representa o grupo de permutação sobre o conjunto $(1, \dots, M)$.

Tomemos o caso de dois sítios como exemplo:

$$\begin{aligned} f(n_1, n_2) &= \sum_{P \in S_2} A_P \exp \left[i \sum_{j=1}^2 k_{P(j)} n_j \right] = A_{S_1} e^{i(k_{P(1)} n_1 + k_{P(2)} n_2)} + A_{S_2} e^{i(k_{P(2)} n_1 + k_{P(1)} n_2)} \\ &\propto f(n_1, n_2) = A e^{i(k_1 n_1 + k_2 n_2)} + B e^{i(k_2 n_1 + k_1 n_2)}. \end{aligned}$$

É conveniente generalizar o ansatz do caso de dois sítios, (7.9), da seguinte maneira

$$f(n_1, \dots, n_M) = \sum_{P \in S_M} \exp \left[i \sum_j^M k_{P(j)} n_j + \frac{i}{2} \sum_{l < j} \theta_{P(l)P(j)} \right], \quad (7.15)$$

por razões que ficarão claras mais adiante. Por hora, $\sum_{l < j} \theta_{P(l)P(j)}$ será tratado como qualquer função de quasimomenta k_i e permutação P .

Atuando com o hamiltoniano em $|\psi\rangle = \sum_{L \geq \dots \geq n_1 \geq 1} f(n_1, \dots, n_M) |n_1, \dots, n_M\rangle$, impõe-se $|\psi\rangle$ como autovetor e substitui-se (7.15) no resultado, conforme foi feito no caso $M = 2$. Após alguma álgebra, obtém-se

$$E_M(k) - E_0 = J \sum_{i=1}^M [1 - \cos(k_i)] = JM - J \sum_{i=1}^M \cos(k_i) = \sum_{i=1}^M E_1(k_i),$$

onde $E_1(k_i) \equiv E_k - E_0 = J[1 - \cos(k_i)]$.

Pode-se ver que a relação de dispersão acima comporta-se de forma aditiva: a energia total é composta de contribuições separadas para cada k_i . Isso não significa, no entanto, que seja simplesmente uma soma de contribuições de mágnons livres, pois os quasimomenta k_i são determinados pelas equações de Bethe. De qualquer maneira, M conta o número de mágnons, uma quantidade preservada: não há produção nem aniquilação destes.

A ação do hamiltoniano em $|\psi\rangle$ leva às seguintes condições em $\theta_{j,l}$

$$\exp(i\theta_{j,l}) = -\frac{1 + e^{i(k_j+k_l)} - 2e^{ik_j}}{1 + e^{i(k_j+k_l)} - 2e^{ik_l}}, \quad (7.16)$$

que é a generalização do caso de dois sítios. Aplicando as condições de periodicidade $f(n_1, \dots, n_M) = f(n_2, \dots, n_M, n_1 + L)$, obtém-se

$$\begin{aligned} f(n_1, \dots, n_M) &= \sum_{P \in S_M} \exp \left[i \sum_{j=1}^M k_{P(j)} n_j + \frac{i}{2} \sum_{l < j} \theta_{P(l)P(j)} \right] \\ &= \sum_{P \in S_M} \exp \left[i \sum_{j=1}^{M-1} k_{P(j)} n_{j+i} + ik_{P(M)}(n_1 + L) + \frac{i}{2} \sum_{l < j} \theta_{P(l)P(j)} \right]. \end{aligned}$$

Sejam $P \in S_M$ arbitrários. É interessante notar que todas as permutações aparecem em ambos os lados da equação. Dessa forma, os coeficientes em frente da expressão $\exp \left[i \sum_{j=1}^M k_{P(j)} n_j \right]$, à esquerda, devem ser iguais aos coeficientes da mesma exponencial à direita. Seja P' uma permutação tal que $P'(j) = P(j+1)$ e $P'(M) = P(1)$. Segue-se que

$$\begin{aligned} \sum_{P \in S_M} \exp \left[i \sum_{j=1}^M k_{P(j)} n_j + \frac{i}{2} \sum_{l < j} \theta_{P(l)P(j)} \right] &= \\ \exp \left[i \sum_{j=1}^{M-1} k_{P'(j)} n_{j+1} + ik_{P'(M)} n_1 + \frac{i}{2} \sum_{l < j} \theta_{P(l)P'(j)} + ik_{P'(M)} L \right] &= \\ \exp \left[i \sum_{j=1}^{M-1} k_{P(j+1)} n_{j+1} + ik_{P(1)} n_1 + \frac{i}{2} \sum_{l < j} \theta_{P(l+1)P(j+1)} + \frac{i}{2} \sum_{l=2}^M \theta_{P(l)P(1)} + ik_{P(1)} L \right] \end{aligned}$$

e, portanto,

$$\exp \left[\frac{i}{2} \sum_{l < j} \theta_{P(l)P(j)} \right] = \exp \left[\frac{i}{2} \sum_{l < j} \theta_{P(l+1)P(j+1)} + \frac{i}{2} \sum_{l=2}^M \theta_{P(l)P(1)} + ik_{P(1)} L \right]$$

O primeiro somatório à direita anula todos os termos na soma à esquerda, exceto quando $l = 1$. Tomando o segundo somatório da direita, passando-o para a esquerda e utilizando $\theta_{ij} = -\theta_{ji}$, obtém-se

$$\exp \left[i \sum_{j=2}^M \theta_{P(1)P(j)} \right] = \exp[ik_{P(1)}L].$$

Sendo $P \in S_M$ arbitrário, a relação acima deve valer para qualquer índice $P(1)$, podendo-se escrevê-la como

$$\prod_{j \neq l} e^{i\theta_{jl}} = e^{ik_l L}, \quad (7.17)$$

onde o produto é sobre j , somente.

Ao percorrer a rede, cada vez que uma partícula l passa por uma partícula j , aquela adquire uma fase $\theta_{l,j}$, analogamente àquilo que acontecia no caso $M = 2$. Trata-se de um resultado notável: fisicamente, diz que o espalhamento de M mágnons é redutível a um problema de dois corpos, isto é, sucessivos processos de espalhamento de dois mágnons (*scattering factorization*) governados pela matriz de espalhamento $S(k_1, k_2)$, correspondente ao caso de dois corpos. Essa característica torna o modelo especial na medida em que é possível inferir o comportamento de um sistema de muitos corpos mediante o conhecimento prévio do caso de dois corpos. Em contrapartida, se o espalhamento fosse redutível ao problema de um único corpo, então os mágnons poderiam ser mover livremente pela rede.

É interessante pontuar que o fato de não haver produção ou aniquilamento de mágnons e do espelhamento ser redutível a um problema de dois corpos denota a existência de simetrias ocultas, por assim dizer, bem como quantidades conservadas.

De forma genérica, consideremos as configurações iniciais dos quasimomenta (mágnons) no processo de espalhamento $P \in S_M$:

Final	$k_{P(1)}$	$k_{P(2)}$	\dots	$k_{P(M)}$
Inicial	k_1	k_2	\dots	k_M

Graficamente, é possível conectar os quasimomenta iguais através de flechas, de maneira que não hajam pontos onde 3 ou mais linhas se interseccionem. Há diferentes maneiras de fazê-lo: para cada par $n < m$ que é permutado por P , ocorre uma intersecção $k_n - k_m$, contribuindo com um fator de $S(k_n, k_m)$ para A_P (coef. do Ansatz). Na figura a seguir, por exemplo, é representado um processo de espalhamento de 3 mágnons. Em termos de notação, é importante salientar que, na representação esquemática abaixo, cada p corresponde a um k .

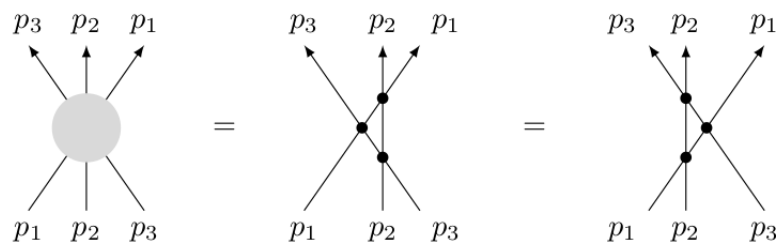


Figura 11 – Representação esquemática do espalhamento de três corpos, onde os mágnons 1 e 3 são permutados. Há duas maneiras disso ocorrer, como pode ser visto. Retirado de Lamers [2]

Voltando às contas e tomando o logaritmo da equação (7.17), obtém-se

$$k_\ell L = 2\pi m_\ell + \sum_{j \neq \ell} \theta_{\ell,j}, \quad (7.18)$$

as chamadas equações gerais de Bethe (*Bethe general equations*). Novamente, a interação introduz desvios de fase nos quasimomenta com respeito aos quasimomenta dos mágnons livres. Assim, o momentum total é dado por

$$K = \frac{2\pi}{L} \sum_{j=1}^M m_j,$$

que novamente se assemelha à soma de mágnons livres. Similarmente ao caso $M = 2$, encontrar os autovetores implica encontrar $(m_1, \dots, m_N) \in \left(\frac{\mathbb{Z}}{L\mathbb{Z}}\right)^M$ tal que as equações (7.16) e (7.18) tenham solução para algum $(k_1, \dots, k_M) \in \mathbb{C}^M$.

O *espalhamento fatorizado* é usualmente uma consequência das quantidades conservadas. Um defeito, por assim dizer, do Ansatz de Bethe Coordenado é que não é possível encontrar tais quantidades; é possível, no entanto, via Ansatz de Bethe Algébrico.

String hypothesis

Já foi visto que o Ansatz de Bethe admite soluções complexas. Em geral, estas devem ser encontradas numericamente, o que pode implicar num esforço computacional muito grande. Não obstante essa situação, uma simples estrutura emerge se tomarmos o limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$. Trata-se da hipótese das cordas (*string hypothesis*).

Neste contexto, uma grandeza muito importante é a chamada rapidez (*rapidity*). De acordo com Plantz [5]:

$$\lambda_j = \cot \frac{k_j}{2} = i \frac{\exp \left[\frac{ik_j}{2} \right] - \exp \left[-\frac{ik_j}{2} \right]}{\exp \left[\frac{ik_j}{2} \right] + \exp \left[\frac{ik_j}{2} \right]},$$

de modo que

$$k_j = \frac{1}{j} \ln \left[\frac{\lambda_j + 1}{\lambda_j - 1} \right]. \quad (7.19)$$

É possível escrever as equações de Bethe em termos dessas grandezas. Tomemos o caso $M = 2$. Utilizando o k_j descrito acima, é possível reescrever o lado esquerdo das equações de Bethe, a saber, $e^{ik_1 L} = e^{i\theta}$ e $e^{ik_2 L} = e^{-i\theta}$, de modo que:

$$\exp \left[\ln \left(\frac{\lambda_j + i}{\lambda_j - i} \right) L \right] \Rightarrow e^{i\theta} = \left(\frac{\lambda_j + i}{\lambda_j - i} \right)^L \quad ; \quad \exp \left[\ln \left(\frac{\lambda_l + i}{\lambda_l - i} \right) L \right] \Rightarrow e^{-i\theta} = \left(\frac{\lambda_l + i}{\lambda_l - i} \right)^L.$$

Reescrevendo (7.8) em termos das *rapidities*, obtém-se

$$e^{i\theta} = - \frac{e^{i(k_j+k_l)} + 1 - 2e^{ik_1}}{e^{i(k_1+k_2)} + 1 - 2e^{ik_2}}.$$

Utilizando os k 's definidos anteriormente e realizando alguma álgebra, obtém-se

$$e^{i\theta} = - \frac{\lambda_j - \lambda_l + 2i}{\lambda_j - \lambda_l - 2i},$$

de modo que

$$\left(\frac{\lambda_j + i}{\lambda_j - i}\right)^L = \frac{\lambda_j - \lambda_l + 2i}{\lambda_j - \lambda_l - 2i}, \quad (7.20)$$

onde $j, l \in (1, 2), j \neq l$. É interessante notar que, nesta formulação do problema, o lado direito depende somente da diferença de *rapidities*.

Consideremos agora o caso onde $Im(\lambda_j) \neq 0$, correspondente aos estados ligados. Tomando o limite termodinâmico de (7.20) o lado esquerdo tende ou para 0 ou para ∞ . A recíproca também deve ser verdadeira para o lado direito, de modo que $\lambda_1 - \lambda_2 = \pm 2i$.

Impondo que o momentum total $k_1 + k_2$ seja real, o que implica $\lambda_1 = \lambda_2^*$, obtém-se $\lambda_{1,2} = \lambda \pm 2i$, onde $\lambda \in \mathbb{R}$. Para o momentum total, $K_{1/2} = k_1 + k_2$, encontra-se, usando (7.19), que

$$e^{iK_{1/2}} = \frac{\lambda + 2i}{\lambda - i}.$$

Definindo a energia $\epsilon = -J \frac{dK}{d\lambda}$, encontra-se

$$\epsilon_{1/2} = \frac{4J}{\lambda^2 + 4} = \frac{J}{2}(1 - \cos K_{1/2}).$$

É interessante notar que $\epsilon_{1/2}(K) < \epsilon_0(K - k) + \epsilon_0(k), \forall (K, k) \in [0, 2\pi)$, onde ϵ_0 é a energia de um mágnon individual. Isso quer dizer que o estado ligado é energeticamente favorável quando comparado a um estado de dois mágnons livres. No entanto, é imperativo salientar que o estado ligado se comporta como uma entidade única, de momentum $K_{1/2}$ e energia $\epsilon_{1/2}$, *i.e.* não é possível fazer uma analogia em termos de duas partículas distintas com momentum k_1 e k_2 , respectivamente.

Voltando para o caso M geral e *rapidities* complexas, deparamo-nos com a hipótese das cordas (*string hypothesis*). Esta conjectura que é possível particionar as M *rapidities* de um autovetor do Hamiltoniano na r-upla complexa (*r-complexes*), também conhecidas como cordas. Tal r-upla complexa, onde $r \in \frac{1}{2}\mathbb{N}U(0)$, consiste de $2r + 1$ *rapidities* cujas partes reais, λ_r , e imaginárias se distribuem equidistantemente ao redor da linha real, obedecendo á relação $\lambda_{r,m} = \lambda_r + 2im$. Aqui, $m \in (-r, -r + 1, \dots, r - 1, r)$, de modo que a solução se assemelha a uma corda (*string*) de pontos (*rapidities*) equidistantes no plano complexo. Pictoricamente:

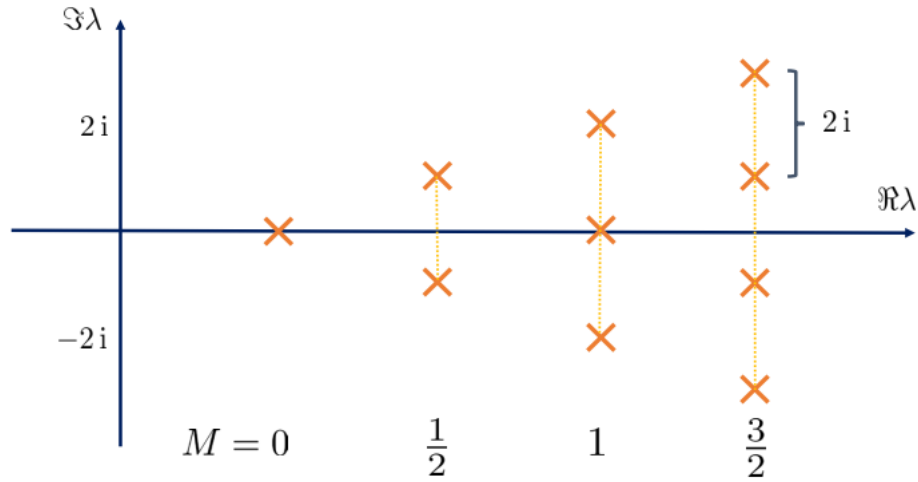


Figura 12 – Representação pictórica da hipótese das cordas (*strings*). Assume-se que as soluções das Eqs. de Bethe podem ser agrupadas em cordas com mesma parte real e parte imaginária equidistante (complexas). Soluções unicamente reais correspondem a $M=0$; um par de soluções reais, $M=\frac{1}{2}$ e assim por diante. Retirado de Franchini [7], pág. 42.

De acordo com Plantz [5], o momentum da r -upla complexa é

$$K_r = \frac{1}{i} \ln \left[\frac{\lambda_r + i(2r + 1)}{\lambda_r - i(2r + 1)} \right],$$

que depende somente de λ_r . A energia correspondente da parte complexa é

$$\epsilon_r = \frac{J}{2r + 1} (1 - \cos k_r).$$

Portanto, a validade da hipótese das cordas implica que podemos, de fato, tratar a parte complexa dos estados ligados como entidades singulares. Trata-se do mesmo raciocínio apresentado anteriormente, nominalmente para o caso $M = 2$.

Outros processos podem ser descritos em termos complexos, *e.g.* o processo onde um mágnon se espalha de um r complexo (scatters off a r -complex). A respectiva matriz de espalhamento, de acordo com Plantz [5], pode ser escrita como o produto de todas as fases espalhadas com os mágnons no complexo, de modo que

$$S_{0,r}(\lambda_0 - \lambda_r) = \frac{\lambda_0 - \lambda_r + 2ir}{\lambda_0 - \lambda_r - 2ir} \frac{\lambda_0 - \lambda_r + 2i(r + 1)}{\lambda_0 - \lambda_r - 2i(r + 1)}.$$

Embora não se saiba com exatidão se as soluções obtidas pelo método exposto nesta seção exaurem o espaço de Hilbert correspondente, há consenso sobre a hipótese de que ele provê uma descrição acurada da termodinâmica do sistema.

8 Epílogo

A aplicabilidade do Ansatz de Bethe Coordenado estende-se para além do modelo unidimensional isotrópico de Heisenberg: trata-se de uma ferramenta poderosa, que pode ser utilizada para o estudo e resolução de um grande número de modelos unidimensionais. A título de exemplo, em 1938 o físico sueco Lamek Hulthén (1909-1995) tornou-se pioneiro no estudo do *ground state* antiferromagnético do modelo de Heisenberg no limite termodinâmico.

Já o estudo das excitações do vácuo antiferromagnético foi realizado em conjunto pelo físico francês Jacques des Cloizeaux e pelo seu colega J.J. Pearson, em artigo publicado em 1962 [8]. Neste, mostraram que o espectro energético exato de uma cadeia infinita de spins obedece à relação $\frac{\pi}{2}|\text{sen}(q)|$, onde $q = k - k_0$, sendo k_0 o valor de k (quasimomento) relacionado ao *ground-state* do sistema. Em termos topológicos, o referido espectro possui não só periodicidade de 2π , decorrente da simetria translacional da rede, mas também uma dupla periodicidade exata de valor π . Trata-se de um resultado surpreendentemente similar àquele obtido por Anderson [9] [10], a saber, $|\text{sen}(q)|$. Neste, a dupla periodicidade é artificialmente produzida ao duplicar-se a translação básica e, conseqüentemente, dividir pela metade o tamanho da Zona de Brillouin.

Alguns anos mais tarde, em 1966, os físicos sino-americanos Chen Ning Yang (1922-) e Chen Ping Yang (1930-2018) generalizaram o ansatz para resolver o modelo XXZ. Finalmente, em 1977, através de uma notável série de publicações, o físico britânico Rodney James Baxter (1940-) conseguiu obter a solução do modelo XYZ, o que representou o ponto de partida para que, em meados da década de 70, a chamada Escola de Leningrado – atual São Petersburgo –, liderada pelo lendário físico russo Ludvig Dmitrievich Faddeev (1934-2017), desenvolvesse o Método de espalhamento inverso quântico (*Quantum Inverse Scattering Method: QISM*) ou Ansatz de Bethe Algébrico. Trata-se de um método inovador e especial, por assim dizer, na medida em que remonta à própria estrutura algébrica dos modelos integráveis.

Ao longo do tempo o método *QISM* encontrou aplicação em diversos modelos heterogêneos, o que indicava a existência de uma estrutura algébrica mais fundamental, que abrangia todos os referidos modelos. Nesse contexto, em 1985, o matemático ucraniano Vladimir Gershonovich Drinfeld (1954-) propôs a existência de tal estrutura algébrica, denominada grupo quântico (*quantum group*). De acordo com o trabalho independente do matemático japonês Michio Jimbo (1951-), publicado em 1986, tal grupo trata-se de uma álgebra de Hopf especial. Atualmente, o assunto Grupos Quânticos constitui um importante tema de pesquisa na área de Física-Matemática.

9 Considerações finais

Neste trabalho foi realizado um estudo sobre o Hamiltoniano de Heisenberg quântico unidimensional. Tal modelo foi resolvido no contexto de poucos sítios – até quatro –, tanto para o caso isotrópico quanto anisotrópico, através da Diagonalização Exata, obtendo-se as autoenergias e autoestados correspondentes. Posteriormente, analisou-se o comportamento do sistema quando da interação com um campo magnético externo: para um número par de sítios, nem todos os autoestados interagiram com o referido campo, o que é consequência da magnetização do referido sistema, descrita pela relação (3.7). Já para um número ímpar de sítios, observou-se que todos os autoestados interagem com o campo magnético aplicado, consequência, novamente, da magnetização do sistema.

Com vistas a uma eventual aplicação computacional, *i.e.* cadeia quântica no limite termodinâmico, optou-se por resolver o modelo novamente, desta vez somente na variante isotrópica, através do Ansatz de Bethe Coordenado. Numa hipotética cadeia quântica infinita com uma configuração spinorial inicialmente homogênea, foi-se flipando os spins e obtendo-se os autoestados e autoenergias correspondentes. No entanto, a partir do caso de dois spins flipados, tornou-se necessário lançar mão do referido Ansatz, obtendo-se o espectro energético do sistema em termos da energia de quasipartículas denominadas mágnons. Tal problema pode ser, como de fato foi, reduzido ao caso de dois corpos, no qual é necessário resolver as Equações de Bethe de modo a encontrar os Números quânticos de Bethe, que podem ser tanto de natureza real quanto complexa. A partir destes, é possível inferir o quasimomentum associado a cada mágnon e, por acréscimo, obter a energia associada à configuração spinorial em questão. Para um número de sítios maior, generaliza-se o raciocínio aplicado no caso de dois sítios.

Em linhas gerais, é possível dizer que foi obtido grande êxito nos objetivos estabelecidos: a resolução do modelo de Heisenberg através da Diagonalização exata permitiu revisar e compreender em maior profundidade conceitos fundamentais da Mecânica Quântica, nomeadamente a relação entre as simetrias do sistema e a diagonalização do hamiltoniano por blocos. Além disso, grande *insight* físico foi adquirido através do estudo do Ansatz de Bethe Coordenado: graças à forma como este método trata o problema, foi possível interpretar as soluções obtidas em termos de *quasipartículas* (mágnons) e *quasimomenta* associados. Ademais, foi possível fazer um elo, mesmo que singelo, entre as propriedades de simetria da rede quântica e elementos de Teoria de Grupos, possibilitando, dessa forma, obter uma visão mais formal e panorâmica, por assim dizer, do problema.

A Apêndice: interação de troca

Tomemos como exemplo um sistema genérico composto de dois elétrons. A sua função de onda total deve ser antissimétrica com respeito à troca dessas partículas. Ocorre que a referida função de onda envolve o produto de uma parte espacial e outra spinorial, sendo que a parte espacial deve ser simétrica se a parte spinorial for antissimétrica e viceversa. Caso a parte espacial da função de onda for antissimétrica, então, geralmente, as partículas estão mais distanciadas entre si do que estariam caso a parte espacial fosse simétrica. Isso se deve ao Princípio de Pauli e é comum tal fenômeno ser denominado *Repulsão de Pauli*.

Pelo fato das partículas possuírem separações médias diferentes, as quais dependem da simetria das configurações dos spins, obtém-se diferentes energias para estados com diferentes simetrias. A descrição exata disso está relacionada a detalhes microscópicos do hamiltoniano. A título de exemplo, o tunelamento quântico entre partículas em diferentes sítios é aumentado conforme a distância entre os referidos sítios é diminuída. Por outro lado, a repulsão Coulombiana entre dois elétrons, de natureza eletrostática, é maior conforme a separação é reduzida. Isso ilustra o fato de que a energia do sistema é afetada pela simetria dos spins, em particular se a função de onda spinorial for simétrica ou antissimétrica com respeito à troca (*exchange*) dessas partículas.

Para o estudo da simetria spinorial das funções de onda no caso de duas partículas de spin $\frac{1}{2}$ – elétrons –, é necessário definir o operador de permutação P_{AB} , o qual troca a orientação dos spins A e B. Explicitamente,

$$\begin{aligned} P_{AB} |\uparrow\uparrow\rangle &= |\uparrow\uparrow\rangle & , & & P_{AB} |\uparrow\downarrow\rangle &= |\downarrow\uparrow\rangle \\ P_{AB} |\downarrow\downarrow\rangle &= |\downarrow\downarrow\rangle & , & & P_{AB} |\downarrow\uparrow\rangle &= |\uparrow\downarrow\rangle . \end{aligned}$$

A definição do operador de permutação é $P_{AB} = 2(S_A \cdot S_B) + \frac{1}{2}$. A atuação do operador em $|\uparrow\downarrow\rangle$ faz com que

$$P_{AB} |\uparrow\downarrow\rangle = 2(S_A \cdot S_B) |\uparrow\downarrow\rangle + \frac{1}{2} |\uparrow\downarrow\rangle \quad (\text{A.1})$$

Após alguma álgebra, pode-se escrever o termo de interação spin-spin da seguinte forma

$$\begin{aligned} S_A \cdot S_B |\uparrow\downarrow\rangle &= S_A^z S_B^z |\uparrow\downarrow\rangle + \frac{1}{2} (S_A^+ S_B^- |\uparrow\downarrow\rangle + S_A^- S_B^+ |\uparrow\downarrow\rangle) \\ S_A \cdot S_B |\uparrow\downarrow\rangle &= \frac{1}{2} \left(-\frac{1}{2} \right) |\uparrow\downarrow\rangle + \frac{1}{2} |\downarrow\uparrow\rangle \\ S_A \cdot S_B |\uparrow\downarrow\rangle &= -\frac{1}{4} |\uparrow\downarrow\rangle + \frac{1}{2} |\downarrow\uparrow\rangle . \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Substituindo o resultado (A.2) na equação (A.1),

$$P_{AB} |\uparrow\downarrow\rangle = 2 \left(-\frac{1}{4} |\uparrow\downarrow\rangle + \frac{1}{2} |\downarrow\uparrow\rangle \right) + \frac{1}{2} |\uparrow\downarrow\rangle$$

$$P_{AB} |\uparrow\downarrow\rangle = |\downarrow\uparrow\rangle.$$

O resultado acima leva à conclusão de que o operador permutação, que troca os spins, é basicamente a velha interação spin-spin $S_A \cdot S_B$. Na verdade, esse é o motivo pelo qual $S_A \cdot S_B$ chama-se interação de troca.

Quando o operador de permutação atua nos estados base, troca-se os rótulos de A e B. Para estados $|\uparrow\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\downarrow\rangle$, vê-se que estes são autoestados do operador permutação com autovalor 1; eles são simétricos com respeito à troca dos spins A e B. No entanto, $|\uparrow\downarrow\rangle$ e $|\downarrow\uparrow\rangle$ não são autoestados desse operador.

Consideremos, pois, a seguinte combinação linear:

$$|\pm\rangle = \frac{1}{2} [|\uparrow\downarrow\rangle \pm |\downarrow\uparrow\rangle].$$

A atuação de P_{AB} em $|+\rangle$ é descrita por

$$P_{AB} |+\rangle = \frac{2}{\sqrt{2}} S_A \cdot S_B [|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle] + \frac{1}{2\sqrt{2}} [|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle].$$

Utilizando o resultado 7,

$$P_{AB} |+\rangle = \sqrt{2} \left[\frac{1}{2} |\uparrow\downarrow\rangle - \frac{1}{4} |\uparrow\downarrow\rangle + \frac{1}{2} |\downarrow\uparrow\rangle - \frac{1}{4} |\downarrow\uparrow\rangle \right] + \frac{\sqrt{2}}{4} [|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle]$$

$$P_{AB} |+\rangle = \frac{\sqrt{2}}{4} [|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle] + \frac{\sqrt{2}}{4} [|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle]$$

de modo que

$$P_{AB} |+\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2} [|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle] \implies P_{AB} |+\rangle = +1 |+\rangle, \quad (\text{A.3})$$

ou seja, a atuação do operador de permutação no estado $|+\rangle$ retorna um autovalor +1.

No caso da atuação do operador P_{AB} em $|-\rangle$, obtém-se

$$P_{AB} |-\rangle = \frac{2}{\sqrt{2}} S_A \cdot S_B [|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle] + \frac{1}{2\sqrt{2}} [|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle].$$

Novamente utilizando o resultado 7, obtém-se

$$P_{AB} |-\rangle = \sqrt{2} \left[-\frac{1}{4} |\uparrow\downarrow\rangle + \frac{1}{2} |\downarrow\uparrow\rangle + \frac{1}{4} |\downarrow\uparrow\rangle - \frac{1}{2} |\uparrow\downarrow\rangle \right] + \frac{\sqrt{2}}{4} [|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle]$$

$$P_{AB} |-\rangle = \sqrt{2} \left[-\frac{3}{4} |\uparrow\downarrow\rangle + \frac{3}{4} |\downarrow\uparrow\rangle \right] + \frac{\sqrt{2}}{4} [|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle],$$

de modo que

$$P_{AB} |-\rangle = -\frac{2\sqrt{2}}{4} |\uparrow\downarrow\rangle + \frac{2\sqrt{2}}{4} |\downarrow\uparrow\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} [|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle] \implies P_{AB} |-\rangle = -1 |1\rangle. \quad (\text{A.4})$$

Dos resultados (A.3) e (A.4), pode-se extrair a seguinte relação genérica

$$P_{AB} |\pm\rangle = \pm |\pm\rangle,$$

onde $|+\rangle$ é simétrico com respeito à troca de spins A e B, enquanto $|-\rangle$ é antissimétrico. Pelo fato do hamiltoniano de Heisenberg poder ser escrito em termos do operador de permutação, ele retorna diferentes energias para os estados $|+\rangle$ e $|-\rangle$ pois estes possuem diferentes simetrias sob troca de partículas. Estados com diferentes comportamentos, em termos de simetrias, terão diferentes energias.

Finalmente, $|+\rangle \equiv |S_{tot} = 1, S^z = 0\rangle$ e $|-\rangle \equiv |S_{tot} = 0, S^z = 0\rangle$, o que significa que o hamiltoniano de Heisenberg muda as energias a depender do spin total do sistema quando este número quântico for uma grandeza conservada.

B Apêndice: simetrias

Seja o hamiltoniano indicado pela equação (3.1). Reescrevendo-o para um sistema de N partículas, explicitando as componentes do operador de spin e adicionando o termo anisotrópico Δ ao eixo z, obtém-se

$$H = -J \sum_{i=1}^N [S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + \Delta(S_i^z S_{i+1}^z)].$$

O hamiltoniano anisotrópico acima comuta com a *magnetização* do sistema, indicada pela equação (3.7). De acordo com van der Wurff [11], tem-se que

$$\begin{aligned} [H, \sum_j S_j^z] &= \\ -J \sum_{i,j=1}^L ([S_i^x, S_j^z] S_{i+1}^x + S_i^x [S_{i+1}^x, S_j^z] + [S_i^y, S_j^z] S_{i+1}^y + S_i^y [S_{i+1}^y, S_j^z] + \Delta[S_i^z, S_j^z] S_{i+1}^z + \Delta S_i^z [S_{i+1}^z, S_j^z]) \\ &= -Ji\hbar \sum_{i,j=1}^L (-S_i^y S_{i+1}^x - S_i^x S_{i+1}^y + S_i^x S_{i+1}^y + S_i^y S_{i+1}^x) = 0. \end{aligned}$$

O mesmo não ocorre para S^x . Seja $S_{tot}^x = \sum_j S_j^x$,

$$\begin{aligned} [H, \sum_j S_j^x] &= \\ -J \sum_{i,j=1}^L ([S_i^x, S_j^x] S_{i+1}^x + S_i^x [S_{i+1}^x, S_j^x] + [S_i^y, S_j^x] S_{i+1}^y + S_i^y [S_{i+1}^y, S_j^x] + \Delta[S_i^z, S_j^x] S_{i+1}^z + \Delta S_i^z [S_{i+1}^z, S_j^x]) \\ &= -Ji\hbar \sum_{i,j=1}^L (-S_i^z S_{i+1}^y - S_i^y S_{i+1}^z + \Delta S_i^y S_{i+1}^z + \Delta S_i^z S_{i+1}^y) \neq 0. \end{aligned}$$

O mesmo ocorre para a componente S^y do spin. Dessa forma, o hamiltoniano anisotrópico não comuta com o operador S^2 , somente com S^z .

Para o caso isotrópico, o hamiltoniano comuta tanto com S^2 quanto com S^z . A veracidade dessa afirmativa é facilmente testável, bastando, para tanto, efetuar a substituição $\Delta = 1$ nos modelos acima expostos.

Referências

- [1] Yunfeng Jiang. Heisenberg spin chain and Bethe ansatz. https://yauc.seu.edu.cn/_upload/article/files/0b/e0/206fa9724645829f4e9b4c29aed9/1dacdfffb-9dcb-4fde-8646-6e66794c8d76.pdf.
- [2] Jules Lamers. Introduction to quantum integrability. In *Proceedings of 10th Modave Summer School in Mathematical Physics, PoS(Modave2014)*. Sissa Medialab, 2015.
- [3] Pedro Barbisan Widniczek. Hamiltoniana de Heisenberg e magnetismo quântico em sistemas de poucos sítios. Trabalho de Conclusão de Curso, Instituto de Física/UFRGS, 2021.
- [4] A. Doikou. Introduction to quantum integrability. *International Journal of Modern Physics A*, World Scientific, v.25(17):3307–3351, 2010.
- [5] N.W.M. Plantz. The Coordinate Bethe Ansatz for the Heisenberg XXX model. <http://andreghenriques.com/Seminars/SpinChainsTalk1.pdf>.
- [6] Michael Karbach and Gerhard Muller. Introduction to the Bethe ansatz I, arXiv cond-mat/9809162, 1998.
- [7] Fabio Franchini. *An Introduction to Integrable Techniques for One-Dimensional Quantum Systems*. Springer International Publishing, 2017.
- [8] Jacques des Cloizeaux and J. J. Pearson. Spin-wave spectrum of the antiferromagnetic linear chain. *Phys. Rev.*, 128:2131–2135, Dec 1962.
- [9] P. W. Anderson. Antiferromagnetism. Theory of Superexchange Interaction. *Phys. Rev.*, 79:350–356, July 1950.
- [10] P. W. Anderson. New Approach to the Theory of Superexchange Interactions. *Phys. Rev.*, 115:2–13, July 1959.
- [11] E.C.I. van der Wurff. Student Seminar on Quantum Integrability - Lecture 4: the Heisenberg XXZ model. <http://andreghenriques.com/Seminars/SpinChainsTalk2.pdf>.
- [12] S. I. Tolmay. Coordinate Bethe Ansatz and Quantum Group Symmetry of the spin- $\frac{1}{2}$ XXZ Heisenberg Spin Chain. *Department of Physics, University of Pretoria*.
- [13] Scheie A. Lake B. Laurell, P. Quantum wake dynamics in Heisenberg antiferromagnetic chains. *Nature Communications*, 13, October 2022.

- [14] Minoru Takahashi and Masuo Suzuki. One-Dimensional Anisotropic Heisenberg Model at Finite Temperatures. *Progress of Theoretical Physics*, 48(6):2187–2209, 12 1972.
- [15] Minoru Takahashi. Low-Temperature Specific Heat of Spin-1/2 Anisotropic Heisenberg Ring. *Progress of Theoretical Physics*, 50(5):1519–1536, 11 1973.
- [16] Dylan van Zyl and Konstantinos Zoubos. Introduction to the Heisenberg $XXX_{1/2}$ spin-chain. <https://www.semanticscholar.org/paper/Introduction-to-the-Heisenberg-XXX-1-2-Spin-Chain-Zoubos/9cd4c589ee177d41880a68ff16e71eedf13c5002>.
- [17] Tobias Kaestli. The Coordinate Bethe Ansatz for the Heisenberg Spin Chain. https://ethz.ch/content/dam/ethz/special-interest/phys/theoretical-physics/itp-dam/documents/gaberdriel/proseminar_fs2018/14_Kaestli.pdf.
- [18] David J. Griffiths. *Introduction to Quantum Mechanics*. Prentice Hall, Upper Saddle River, New Jersey, 1995.
- [19] Paulo Pureur. *Estado Sólido (3ª ed.)*. Instituto de Física/UFRGS, Porto Alegre - RS, 2022.
- [20] Fabio Franchini. Notes on Bethe Ansatz techniques. <https://people.sissa.it/~ffranchi/BAnotes.pdf>.
- [21] L.D. Fadeev. Algebraic aspects of the Bethe Ansatz. 10(13):1845–1878, may 1995.
- [22] Rodney James Baxter. *Exactly solved models in statistical mechanics*. Academic Press, Bury St Edmunds, Suffolk, 1982.
- [23] C. N. Yang. Some exact results for the many-body problem in one dimension with repulsive delta-function interaction. *Phys. Rev. Lett.*, 19:1312–1315, Dec 1967.
- [24] Silvio Renato Dahmen. *Non-hermitian Integrable Quantum Chains and Their Applications to Equilibrium Crystal Shapes and Reaction Diffusion Problems*. PhD thesis, Universität Bonn, Physikalisches Inst., 1997.
- [25] Andrew Mitchell. Quantum Theory of Condensed Matter (PHYC40200). [https://hub.ucd.ie/usis/!W_HU_MENU.P_PUBLISH?p_tag=MODULE&MODULE=PHYC40200,2022/2023 season](https://hub.ucd.ie/usis/!W_HU_MENU.P_PUBLISH?p_tag=MODULE&MODULE=PHYC40200,2022/2023%20season).
- [26] Paul A. Tipler. *Física, vol. 2*. Editora Guanabara Dois S.A., Rio de Janeiro - RJ, 1978.
- [27] Jhonny Richard Huamani Chaviguri. Ansatz de Bethe: modelo de Lieb-Liniger. <https://www.ifsc.usp.br/~hoyos/courses/2018/SFI5734/Bethe-Ansatz-Chaviguri.pdf>.