

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

**Cálculos Analíticos Exatos
em Sistemas Finitos**

Luís Prado Júnior

*Este exemplar corresponde à redação final da Tese
defendida pelo aluno Sr. Luís Prado Júnior, e
aprovado pela Comissão julgadora*

Campinas, 13 de outubro de 1994

Guillermo Cabrera

dissertação submetida ao
Instituto de Física "Gleb Wataghin"
sob orientação do Professor
Dr. Guillermo G. Cabrera
para a obtenção do título de Mestre em Física

Agradecimentos

Meu muito obrigado ao Prof. Dr. Guillermo Cabrera pelo incentivo e excelente orientação neste mestrado.

Agradeço meus pais e amigos, com os quais sempre pude contar, e à minha banca examinadora, composta pelos professores: Dr. Salomon, Dr. Luzzi e Dr. Capelas, pelas sugestões e correções no texto preliminar.

Tenho também um especial agradecimento ao Instituto de Física Gleb Wataglin, que proporcionou ótimas condições de infra-estrutura e de pessoal, para minha formação acadêmica e para o desenvolvimento deste trabalho, e a agência financiadora Capes, que me ofereceu uma bolsa no decorrer do curso.

Resumo

O estado fundamental de alguns sistemas quânticos e finitos de spins $1/2$, em 1, 2 e 3 dimensões, descritos pelo hamiltoniano de Heisenberg anti-ferromagnético, é investigado de maneira algébrica e exata. O subespaço de spin total S que contém o estado fundamental é determinado através do teorema de ordenamento de energia de Lieb e Mattis, e sua simetria é estudada fazendo-se uso do teorema de Oguchi e Kitatani. A alta dimensionalidade do subespaço que contém o estado fundamental é reduzida explorando as propriedades de simetria do sistema. Isto é feito de maneira sistematizada utilizando técnicas de teoria de grupos e operadores de permutação. Os estados fundamentais obtidos exatamente são utilizados em cálculos de grandezas físicas como energia e correlações entre spins.

Abstract

The ground state of spin-1/2 quantum finite systems is investigated in exact analytical way. The examples included correspond to cases in one, two and three dimensions, all of them described by the antiferromagnetic Heisenberg Hamiltonian. The manifold of total spin S , that contains the ground state, is determined throughout the energy ordering theorem of Lieb and Mattis, and its symmetry is studied using the theorem of Oguchi and Kitatani. The high dimensionality of the subspace that contains the ground state is reduced exploring the symmetry properties of the system. This is done in a systematic way using group theory techniques and the permutation operators. The ground states, obtained in exact form, are used to calculate physical quantities like energy and correlations of spins.

Conteúdo

1	Introdução	5
2	Subespaço e Paridade do Estado Fundamental	8
2.1	Teorema de Lieb-Mattis revisado	8
2.2	Teorema da Paridade de Oguchi-Kitatani	12
3	Técnicas em Teoria de Grupos	17
4	Cadeias Lineares e Clusters	24
4.1	Cadeias Lineares	24
4.2	Clusters Bidimensionais	33
4.3	Cluster Tridimensional	38
5	Conclusão	42
6	Apêndice	45
6.1	Grupo Simétrico	45
6.2	Moldes de Young	48
6.3	Caracteres do Grupo S_8	49

Capítulo 1

Introdução

O Modelo de Heisenberg Antiferromagnético (AFH), introduzido em 1928 [8], vem sendo estudado intensivamente, por se tratar de um modelo mais simples para descrever sistemas quânticos altamente correlacionados e localizados de spins. Este modelo hamiltoniano emerge de hamiltonianos eletrônicos mais gerais, escritos em segunda quantização na representação de funções de Wannier para bandas semi-cheias [16], quando consideramos um limite de alta localidade e apenas termos de *exchange* [5] [18].

Vários materiais magnéticos *quasi*-unidimensionais, tais como os compostos $CuCl_2 \cdot 2N.C_5H_5$ (dicloro-bi-piridina cobre II) e $Cu(NH_3)_4SO_4 \cdot H_2O$ (monohidrato sulfato de cobre tetramina) [14], e *quasi*-bidimensionais com comportamento supercondutor, como os materiais que apresentam planos de CuO_2 [3], são descritos com o modelo AFH, com spins 1/2.

Além da descrição experimental direta do comportamento dos materiais citados acima, o interesse em se estudar o comportamento de correlações de spins para sistemas finitos está relacionado de forma íntima com propriedades de magnetização, transições de fase [4] e flutuações quânticas em sistemas infinitos. Há uma forte tendência em identificar a magnetização com a ordem de longo alcance, σ , definida da forma,

$$\sigma \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{R_{i,j} \rightarrow \infty} \langle S_i^z S_j^z \rangle,$$

onde N é o número de spins, S_i^z é a projeção em z do operador de spin no

sítio i , $R_{i,j}$ é a distância entre os sítios i e j na rede e $\langle \rangle$ significa uma média que pode ser a temperatura finita ou com o estado fundamental.

Para baixas temperaturas é utilizada a aproximação de campo molecular, onde cada spin é visto como sendo estatisticamente independente, i. é, $\langle S_i^z S_j^z \rangle_0 = \langle S_i^z \rangle_0 \langle S_j^z \rangle_0$. Nesse caso a magnetização, M , e σ são diretamente relacionadas,

$$M^2 = \sigma.$$

De forma análoga se define a ordem ou correlação de curto alcance μ ,

$$\mu = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle S_0^z S_1^z \rangle.$$

Os valores não nulos de μ estão relacionados com destruição de simetrias por flutuações quânticas [12].

Esses aspectos nos trazem a motivação em investigar a estrutura exata de estados fundamentais para sistemas AFH finitos de spins 1/2 em diversas geometrias de redes com condições de contorno periódicas. Trabalhamos com o hamiltoniano AFH isotrópico, que é da forma

$$\mathcal{H} = \sum_{ij} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (1.1)$$

onde $J_{ij} \geq 0$ são constantes de acoplamento antiferromagnético.

Optamos por trabalhar no ponto isotrópico por ser este um limite de grande interesse e de difícil análise via outros métodos. A energia do estado fundamental neste ponto possui uma lei logarítmica de escala [10], com relação ao número de spins na rede.

A maior dificuldade em se estudar analiticamente o estado fundamental destes tipos de sistemas finitos é a grande dimensionalidade dos hamiltonianos a serem diagonalizados. Temos que o número de estados cresce de forma exponencial com o número de spins, 2^N . Isto nos leva a explorar a principal propriedade que estes sistemas nos oferecem; a simetria. A maneira mais sistematizada para se aproveitar esta rica propriedade é utilizar técnicas de teoria de grupos. Com a redução do subespaço que contém o estado fundamental nas representações irredutíveis do grupo que deixa o hamiltoniano

invariante, obtemos uma grande redução na dimensionalidade. Isto nos possibilita obter analiticamente os estados fundamentais de diversos sistemas inicialmente bastante complexos.

No segundo capítulo revisaremos dois teoremas de grande importância para o nosso estudo. O primeiro deles (teorema de Lieb e Mattis) fornece um ordenamento para os autovalores de energia segundo o subespaço de spin total. O segundo (teorema de Oguchi e Kitatani) descreve a simetria dos autoestados do hamiltoniano de Heisenberg. Com os dois teoremas poderemos encontrar o subespaço de spin total que se encontra o estado fundamental, bem como sua simetria (simétrica ou antissimétrica). Isto nos facilita enormemente a investigação do estado fundamental.

No terceiro capítulo apresentamos um tratamento geral para a simetria do hamiltoniano de Heisenberg em termos de operadores de permutação e técnicas em teoria de grupos. Discutimos um exemplo do tratamento algébrico de forma mais detalhada, para um *cluster* bidimensional com $N = 4$ spins, onde extraímos do grupo das permutações S_4 , um subgrupo, denotado por T_4 , das permutações que deixam o hamiltoniano invariante. Evidenciamos algumas vantagens no uso de baixas simetrias para reduzirmos o hamiltoniano. Também discutimos neste capítulo um critério de solubilidade analítica, onde analisamos as possibilidades de obtenção de soluções não-numéricas.

Fazemos no quinto capítulo algumas discussões acerca do trabalho e dos resultados obtidos. Também esboçamos, através de um esquema, um possível tratamento utilizando métodos algébricos e numéricos de forma acoplada, para a investigação de sistemas finitos com número maior de spins.

Um resumo dos principais resultados da teoria de grupos utilizada no trabalho é oferecido nos apêndices. Fazemos uma introdução do grupo simétrico com suas classes induzidas e ressaltamos, através do teorema de Cayley, sua importância na teoria de representações de grupos finitos. Introduzimos também os moldes de Young e os seus projetores associados as representações irredutíveis.

Capítulo 2

Subespaço e Paridade do Estado Fundamental

2.1 Teorema de Lieb-Mattis revisado

Tendo estabelecido no capítulo anterior nosso hamiltoniano (eq.(1.1)) de interesse a ser investigado, introduzimos nesta seção o teorema de ordenamento para as energias segundo o spin total S [11]. Vamos considerar que nosso sistema finito possui um número par de sítios, que pode ser dividido em duas subredes, A e B (fig.2.1), sendo que estas possuem o mesmo número de sítios com spin $1/2$.

Teorema de Lieb-Mattis: Os autovalores de energia para o Hamiltoniano de Heisenberg antiferromagnético são ordenados, segundo os subespaços de spin total S , da forma

$$E(S + 1) > E(S).$$

Demonstração

A demonstração deste teorema é feita em duas partes. Na primeira delas se demonstra que o estado fundamental em cada subespaço de projeção de spin total M é não degenerado. Na segunda parte é demonstrado que o estado

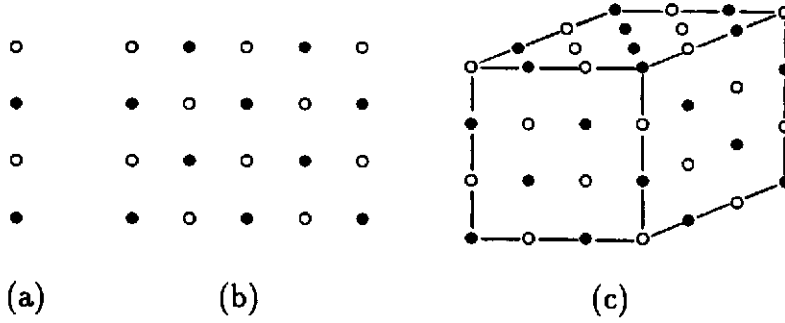


Figura 2.1: Exemplos de geometrias com duas subredes para 1, 2 e 3 dimensões ((a),(b) e (c) respectivamente).

fundamental, para esse mesmo subespaço, está em $M = S$. A partir dessas duas etapas obtemos de maneira óbvia a ordenação desejada.

Tomando a seguinte transformação canônica sobre o Hamiltoniano de Heisenberg antiferromagnético,

$$S_{i(A)}^x \rightarrow -S_{i(A)}^x, \quad (2.1)$$

$$S_{i(A)}^y \rightarrow -S_{i(A)}^y,$$

$$S_{i(A)}^z \rightarrow S_{i(A)}^z, \quad (2.2)$$

na subrede A (deixando a subrede B invariante), temos $\mathcal{H}$ escrito na forma

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1, \quad (2.3)$$

onde as partes diagonal (na base representada pela projeção dos spins no eixo z) e não diagonal são dadas respectivamente por

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{ij} J_{ij} S_i^z S_j^z$$

e

$$\mathcal{H}_1 = - \sum_{ij} J_{ij} S_i^+ S_j^- + h.c.$$

Seja $\{|a_k\rangle\}$ uma base de estados para o espaço de projeção de spin total M . Representando os *kets* da base com N setas (ex., $|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\ldots\downarrow\rangle$), onde a ordem destas é a mesma que recebe os sítios na rede, podemos verificar facilmente que os elementos de matriz de $\mathcal{H}_1$ são sempre não positivos,

$$\langle a_s | \mathcal{H}_1 | a_k \rangle \equiv H_{1,sk} \leq 0. \quad (2.4)$$

Denotando o estado fundamental do presente subespaço através do *ket* $|GS\rangle_M$, temos que este pode ser escrito na base $\{|a_k\rangle\}$ da forma

$$|GS\rangle_M = \sum_k a_k |a_k\rangle. \quad (2.5)$$

Denotando os autovalores de $\mathcal{H}_0$ por e_k podemos escrever a equação de Schrödinger como

$$e_k a_k - \sum_s |H_{1,ks}| a_s = E_M a_k. \quad (2.6)$$

A energia variacional de qualquer outra função deve exceder E_M , senão ela seria o estado fundamental. Mas o estado definido por

$$|GS\rangle'_M \equiv \sum_k |a_k| |a_k\rangle, \quad (2.7)$$

possui energia variacional idêntica a E_M . A *prima facie* poderíamos pensar que teríamos um estado fundamental (no subespaço M) degenerado. Analisando a equação de Schrödinger para este estado obtemos

$$e_k |a_k| - \sum_s |H_{1,ks}| |a_s| = E_M |a_k|. \quad (2.8)$$

Utilizando o fato de que $e_k - E_M > 0$, para qualquer k , pois E_M é a menor energia, temos combinando a eq.(2.6) e a eq.(2.8) a seguinte igualdade

$$|\sum_s |H_{1k,s}| a_s| = \sum_s |H_{1k,s}| |a_s|. \quad (2.9)$$

Esta igualdade se cumpre termo a termo se

$$a_s \geq 0, \text{ para todo } s. \quad (2.10)$$

Mas, se para algum s o coeficiente $a_s = 0$, por aplicações sucessivas de $\mathcal{H}$ temos que todos os demais são nulos, pois senão o hamiltoniano se separaria em partes não interagentes de spin. Isto enfraquece a condição (2.10) para

$$a_s > 0, \text{ para todo } s \quad (2.11)$$

Temos, portanto, que em geral os coeficientes a_k são todos não negativos. Isto implica que o estado com energia E_M é não-degenerado, pois, para construirmos um estado ortogonal a ele e com a mesma energia, devemos fazer alterações de sinais que não são permitidas pela condição (2.11).

Consideremos agora um caso especial do Hamiltoniano estudado, onde as constantes de acoplamento J_{ij} estão fixadas da seguinte maneira:

$$J_{i(A)j(A)} = J_{i(B)j(B)} = 0$$

e

$$J_{i(A)j(B)} = J,$$

onde J é uma constante positiva.

Os autovalores de energia para este Hamiltoniano especial podem ser facilmente calculados. Da seguinte manipulação algébrica com os operadores de spin,

$$\vec{S}_{i(A)} \cdot \vec{S}_{j(B)} = \frac{1}{2}(\vec{S}_{i(A)} + \vec{S}_{j(B)})^2 - \frac{1}{2}(\vec{S}_{i(A)}^2 + \vec{S}_{j(B)}^2),$$

obtemos que em cada subespaço S o menor valor possui a forma

$$\begin{aligned}
E(S) &= \frac{J}{2} (S(S+1) - S_A(S_A+1) - S_B(S_B+1)) \\
&= \frac{J}{2} (S(S+1) - 2S_A(S_A+1))
\end{aligned} \tag{2.12}$$

onde $S_A \equiv \sum_{i(A)} 1/2 = S_B$.

Temos para este hamiltoniano especial que, para cada subespaço de projeção total M , o estado fundamental deste satisfaz a propriedade (2.11). E nem todos estados fundamentais são ortogonais ao estado fundamental de $\mathcal{H}$. O hamiltoniano especial possui um estado fundamental $S = M$ para cada subespaço M . Portanto, $\mathcal{H}$ também possui, e isto conclui a demonstração. $\square$

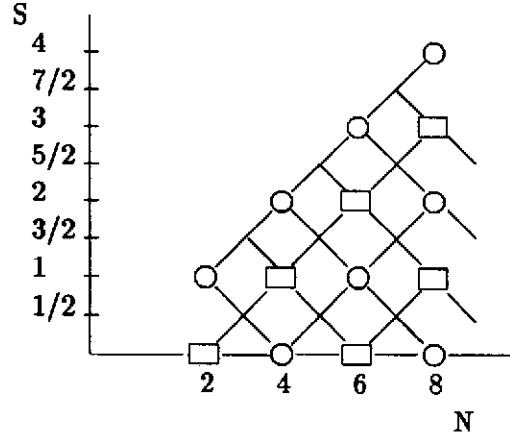
2.2 Teorema da Paridade de Oguchi-Kitatani

Na seção anterior vimos que o estado fundamental para o nosso sistema de interesse se encontra no subespaço com spin total $S = 0$. Neste subespaço o único valor possível para a projeção do spin total é $M = 0$. Nesta seção investigaremos as paridades dos estados com diferentes S no subespaço com $M = 0$ através do teorema de Oguchi-Kitatani [15] e, conseqüentemente, teremos a paridade do estado fundamental.

Teorema da Paridade de Oguchi-Kitatani: As autofunções com $M = 0$ para um número par de spins (N) possuem paridades que se alternam entre pares e ímpares para os diferentes valores de spin total S (fig. 2.2).

Demonstração

Através da teoria formal de adição de momentum angular [17] podemos escrever para um número N par de spins (spin total inteiro) as seguintes equações de recorrência,


 Figura 2.2: Diagrama de paridades: $\square$ estados ímpares, $\circ$ estados pares.

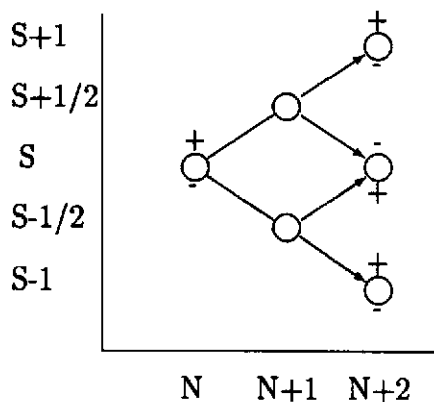
$$\begin{aligned} \left| S + \frac{1}{2}; M + \frac{1}{2} \right\rangle_{N+1} &= \sqrt{\frac{S+M+1}{2S+1}} |S; M\rangle_N |\uparrow\rangle \\ &\quad + \sqrt{\frac{S-M}{2S+1}} |S; M+1\rangle_N |\downarrow\rangle \end{aligned} \quad (2.13)$$

$$\begin{aligned} \left| S - \frac{1}{2}; M + \frac{1}{2} \right\rangle_{N+1} &= -\sqrt{\frac{S-M}{2S+1}} |S; M\rangle_N |\uparrow\rangle \\ &\quad + \sqrt{\frac{S+M+1}{2S+1}} |S; M+1\rangle_N |\downarrow\rangle \end{aligned} \quad (2.14)$$

onde adicionamos uma partícula de spin $\frac{1}{2}$, representada pelas setas.

Utilizando as relações (2.13) e (2.14) duas vezes e fazendo $M = 0$ obtemos os quatro casos seguintes (fig. 2.3)

$$\begin{aligned} |S; 0\rangle_{N+2} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sqrt{\frac{S+1}{2S+1}} |S; 0\rangle_N (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \right. \\ &\quad \left. - \sqrt{\frac{S}{2S+1}} (|S; -1\rangle_N |\uparrow\uparrow\rangle - |S; 1\rangle_N |\downarrow\downarrow\rangle) \right], \end{aligned} \quad (2.15)$$

Figura 2.3: Adição de 2 spins no sistema de N spins.

$$|S; 0\rangle_{N+2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[-\sqrt{\frac{S}{2S+1}} |S; 0\rangle_N (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) - \sqrt{\frac{S+1}{2S+1}} (|S; -1\rangle_N |\uparrow\uparrow\rangle - |S; 1\rangle_N |\downarrow\downarrow\rangle) \right], \quad (2.16)$$

$$|S+1; 0\rangle_{N+2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sqrt{\frac{S+1}{2S+1}} |S; 0\rangle_N (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) + \sqrt{\frac{S}{2S+1}} (|S; -1\rangle_N |\uparrow\uparrow\rangle + |S; 1\rangle_N |\downarrow\downarrow\rangle) \right], \quad (2.17)$$

$$|S-1; 0\rangle_{N+2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sqrt{\frac{S}{2S+1}} |S; 0\rangle_N (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) + \sqrt{\frac{S+1}{2S+1}} (|S; -1\rangle_N |\uparrow\uparrow\rangle + |S; 1\rangle_N |\downarrow\downarrow\rangle) \right], \quad (2.18)$$

O termo $(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$ da eq.(2.15) é ímpar. Portanto, se $|S; 0\rangle$ for par (ímpar), o primeiro termo do membro direito de equação será ímpar (par).

Afirmamos que, neste caso, também o segundo membro da equação é ímpar (par). Verificamos isto escrevendo o segundo termo na forma

$$(|S; -1\rangle_N |\uparrow\uparrow\rangle - |S; 1\rangle_N |\downarrow\downarrow\rangle) = \sum_{n=1}^N (S_n^- |S; 0\rangle_N |\uparrow\uparrow\rangle - S_n^+ |S; 0\rangle_N |\downarrow\downarrow\rangle), \quad (2.19)$$

Se o estado $|S; 0\rangle_N$ é par (ímpar), este se escreve através da combinação linear $\sum_i c_i (|i\rangle \pm T|i\rangle)$, com

$$|i\rangle = P_i | \underbrace{\uparrow\uparrow\uparrow \dots \uparrow}_{\frac{N}{2}} \underbrace{\downarrow\downarrow\downarrow \dots \downarrow}_{\frac{N}{2}} \rangle, \quad (2.20)$$

onde P_i é um operador que gera uma permutação e T é o operador de inversão temporal ($T|\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle$, $T|\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle$).

Com isto o membro direito da eq.(2.19) é escritos na forma

$$\sum_i c_i \sum_{n=1}^N \left((S_n^- |i\rangle |\uparrow\uparrow\rangle \mp S_n^+ T(|i\rangle |\uparrow\uparrow\rangle)) - (S_n^+ |i\rangle |\downarrow\downarrow\rangle \mp S_n^- T(|i\rangle |\downarrow\downarrow\rangle)) \right) \quad (2.21)$$

Usando a propriedade do operador de inversão temporal, $S_n^+ T = T S_n^-$, $S_n^- T = T S_n^+$, reecrevemos (2.21) na forma ímpar (par)

$$\sum_i c_i \sum_{n=1}^N \left((S_n^- |i\rangle |\uparrow\uparrow\rangle \mp T(S_n^+ |i\rangle |\uparrow\uparrow\rangle)) - (S_n^+ |i\rangle |\downarrow\downarrow\rangle \mp T(S_n^- |i\rangle |\downarrow\downarrow\rangle)) \right) \quad (2.22)$$

Uma mesma análise se aplica aos outros casos, i.é. eqs.(2.16), (2.17) e (2.18). Quando temos o estado $|S; 0\rangle_N$ par (ímpar) devemos ter os estados $|S; 0\rangle_{N+2}$ ímpar (par) e $|S \pm 1; 0\rangle_{N+2}$ par (ímpar). A construção de todas as paridades do diagrama da fig. 2.2 pode ser feita a partir do sistema com $N = 2$. Como os estados $|1; 0\rangle_2$ é par e $|0; 0\rangle_2$ é ímpar, teremos pelo teorema que os estados $|0; 0\rangle_4$, $|1; 0\rangle_4$ e $|2; 0\rangle_4$ serão par, ímpar e par, respectivamente. Também teremos a partir destes estado, com $N = 4$, que os estados, $|3; 0\rangle_6$,

$|2; 0\rangle_6$, $|1; 0\rangle_6$ e $|0; 0\rangle_6$, serão, par, ímpar, par e ímpar, respectivamente. Assim sucessivamente, para um número N qualquer, temos que o teorema se verifica por indução finita. $\square$

Sabemos, pelo primeiro teorema demonstrado neste capítulo, que o estado fundamental pertence ao subespaço de spin total $S = 0$, portanto, *o estado fundamental para o Hamiltoniano de Heisenberg (em qualquer dimensão) é ímpar para $N = 2, 6, 10, \dots$ e par para $N = 4, 8, 12, \dots$*

Este é o resultado central deste capítulo, que nos permitirá obter extrema simplificação na investigação dos estados fundamentais e suas energias.

Capítulo 3

Técnicas em Teoria de Grupos

Como estamos interessados em obter soluções analíticas exatas para o estado fundamental em diversas geometrias de redes e números de spins N , devemos explorar de forma bastante sistematizada as propriedades de simetria do Hamiltoniano de Heisenberg. Este estudo será apresentado nesta seção através do uso de técnicas de teoria de grupos e de operadores de permutação, que nos possibilita uma sensível redução da dimensionalidade do subespaço que contém o estado fundamental.

Sendo nosso sistema quântico de spins localizado e com uma determinada geometria, podemos enumerar de maneira conveniente os N sítios da rede, com condições de contorno periódicas e classificar todas permutações entre sítios que não modificam o Hamiltoniano.

Seja uma permutação qualquer

$$\mathcal{T} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \dots & N \\ r_1 & r_2 & r_3 & \dots & r_N \end{pmatrix}, \quad (3.1)$$

temos que $\mathcal{T}$ não modifica o sistema inicialmente enumerado se,

$$[\mathcal{T}, \mathcal{H}] = 0. \quad (3.2)$$

É claro que o conjunto das permutações que satisfazem (3.2), o qual denotaremos por T_N , está contido no grupo das permutações de N elemen-

tos S_N . Portanto, para mostrarmos que T_N é um subgrupo de S_N , devemos provar apenas que as permutações $\mathcal{T}$, pertencentes a T_N , satisfazem a propriedade de fechamento. Isto se verifica de maneira imediata através da relação de comutação

$$[\mathcal{T}_1\mathcal{T}_2, \mathcal{H}] = \mathcal{T}_1[\mathcal{T}_2, \mathcal{H}] + [\mathcal{T}_1, \mathcal{H}]\mathcal{T}_2 = 0, \quad (3.3)$$

onde $\mathcal{T}_1$ e $\mathcal{T}_2$ pertencem ao T_N .

Uma vez analisada a estrutura de classes do grupo T_N , podemos escrever sua tabela de caracteres e reduzir os subespaços de spin total nas suas representações irredutíveis. Esta redução é feita identificando as representações dos subespaços de spin total com as do grupo de permutações S_N . Utilizando os projetores de Young ($\square, \square\square, \square\square\square \dots$) podemos encontrar as funções pertencentes ao subespaço $S = 0$, que contém o estado fundamental. A redução final da simetria do estado fundamental está na projeção das funções em $S = 0$ na representação irredutível simétrica ($N = 4, 8, 12, \dots$) ou anti-simétrica ($N = 2, 6, 10, \dots$), em conformidade com o teorema de Oguchi-Kitatani, visto no capítulo anterior.

Como exemplo do tratamento descrito acima, descreveremos de maneira detalhada a análise do sistema bidimensional com $N = 4$ e constante de acoplamento J entre primeiros vizinhos (fig. 3.1).

Verificamos inicialmente, por inspeção, que dentre as $4! = 24$ permutações possíveis, pertencentes ao S_N , apenas as 8 seguintes satisfazem (3.2)

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 3 & 4 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 4 & 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 1 & 4 & 3 \end{pmatrix}, \\ \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 4 & 3 & 2 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 4 & 3 & 2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 3 & 2 & 1 & 4 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 3 & 4 & 1 & 2 \end{pmatrix},$$

Estas possuem respectivamente os seguintes diagramas de permutações,

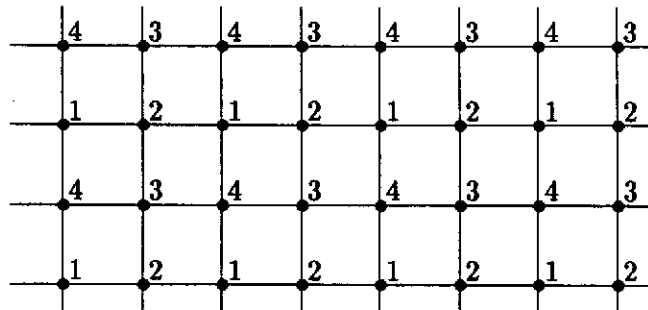
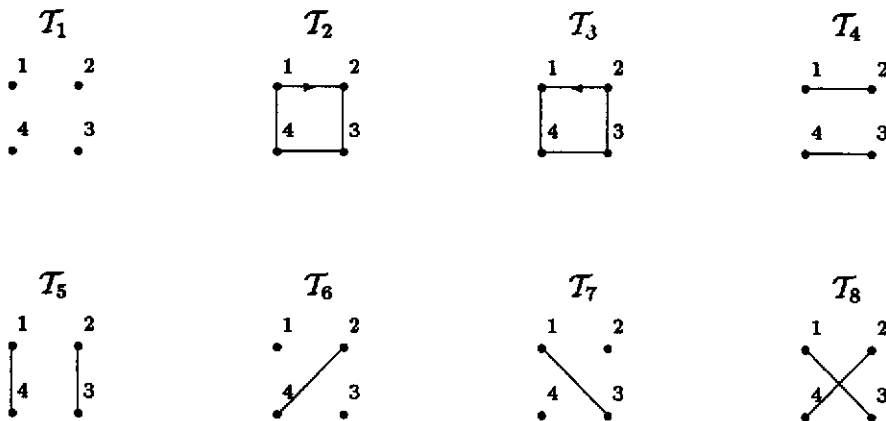


Figura 3.1: Sistema bidimensional com $N = 4$ e condições de contorno periódicas



onde temos numerado as permutações por conveniência.

Devemos agrupar as permutações em classes que deverão ser em número não superior a 5, pois, sabemos que o grupo S_4 possui 5 classes. Temos que T_1 é a operação identidade e, portanto, está sozinha em sua classe. As operações T_2 e T_3 são cíclicas e pertencem a mesma classe. T_4 e T_5 estão na mesma classe, pois, uma se transforma na outra através das operações T_2 e T_3 . T_6 e T_7 também estão na mesma classe pelo mesmo argumento anterior.

A operação T_8 está separada da classe de T_4 e T_5 , pois, a operação que leva $(12)(34)$ em $(13)(24)$, i. é, T_4 em T_8 é $(2)(134)$, que não pertence ao grupo T_4 .

Temos então, a estrutura de classes

$$\begin{aligned} C_1 &= \{T_1\} \\ C_2 &= \{T_2, T_3\} \\ C_3 &= \{T_4, T_5\} \\ C_4 &= \{T_8\} \\ C_5 &= \{T_6, T_7\} \end{aligned} \quad (3.4)$$

que é isomorfa ao grupo C_{4v} , onde, segundo a notação de Hamermesh [7] reconhecemos as classes

$$\begin{aligned} C_1 &\longleftrightarrow E & C_2 &\longleftrightarrow c_4 & C_3 &\longleftrightarrow \sigma_v \\ C_4 &\longleftrightarrow c_2 & C_5 &\longleftrightarrow \sigma_d \end{aligned}$$

A partir deste isomorfismo escrevemos a tabela de caracteres do grupo T_4 (tab. 3.1) e reduzimos as representações Γ^S dos subespaços de spin total em representações irredutíveis do grupo do quadrado. As dimensões das representações Γ^S 's são obtidas através do número de tabelas regulares de Young para cada subespaço. Assim, temos

$$\begin{array}{llll} S=0 & \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array} & \longleftrightarrow & \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline 3 & 4 \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 3 \\ \hline 2 & 4 \\ \hline \end{array} & \dim = 2 \\ S=1 & \begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \square & & \\ \hline \end{array} & \longleftrightarrow & \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 3 \\ \hline 4 & & \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 3 & 4 \\ \hline 2 & & \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 4 \\ \hline & 3 & \\ \hline \end{array} & \dim = 3 \\ S=2 & \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline \square & \square & \square & \square \\ \hline \end{array} & \longleftrightarrow & \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 3 & 4 \\ \hline \end{array} & \dim = 1 \end{array}$$

T_4	E C_1	c_4 C_2	σ_v C_3	c_2 C_4	σ_d C_5	
Γ_1	1	1	1	1	1	
Γ_2	1	1	-1	1	-1	
Γ_3	1	-1	1	1	-1	
Γ_4	1	-1	-1	1	1	
Γ_5	2	0	0	-2	0	
$\boxplus \Gamma^{(S=0)}$	2	0	2	2	0	$\Gamma_1 + \Gamma_3$
$\boxminus \Gamma^{(S=1)}$	3	-1	-1	-1	1	$\Gamma_4 + \Gamma_5$
$\boxtimes \Gamma^{(S=2)}$	1	1	1	1	1	Γ_1

Tabela 3.1: Tabela de caracteres do grupo T_4 e as decomposições nas representações irredutíveis

Os demais caracteres das representações Γ^S são obtidos a partir da tabela de caracteres do grupo S_4 [7], através de uma identificação das operações de simetria.

Segundo o teorema de Oguchi-Kitatani, o estado fundamental é uma função que pertence ao subespaço $S = 0$ com simetria Γ_1 (representação simétrica). Notemos que na decomposição do subespaço $S = 0$ só temos uma vez a representação Γ_1 , portanto, não será necessário se fazer qualquer diagonalização.

Utilizando o projetor de Young [7]

$$P_{\boxplus} = [e - (12)][e - (34)][e + (13)][e + (24)] \quad (3.5)$$

encontramos uma função no subespaço $S = 0$ através da aplicação

$$P_{\boxplus} |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle = |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle - |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle - |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle. \quad (3.6)$$

Projetando esta função da representação Γ_1 obtemos, finalmente o estado fundamental $|GS\rangle_{N=4}$

$$P_{\Gamma_1}(P_{\boxplus})|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{12}}(2(|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle) - |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle - |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle) = |GS\rangle. \quad (3.7)$$

Calculando a energia do estado fundamental, em unidades da constante J , obtemos para este sistema o valor $E_g = -4$.

O tratamento de sistemas mais complexos, ou seja, com número maior de spins, segue a forma prescrita e exemplificada acima. Como mencionado anteriormente, temos um crescimento exponencial no número de funções quando aumentamos N . Isso em nada influencia a técnica prescrita para redução de dimensionalidade via teoria de grupos, porém, gera complexidades operacionais. Estas estão presentes na obtenção do grupo de simetria do Hamiltoniano (T_N), na obtenção das funções projetadas nas representações irredutíveis e em diagonalizações, caso a representação irredutível que contém o estado fundamental apareça mais de uma vez na decomposição do subespaço de $S = 0$. Um critério de solubilidade analítica segue de forma direta do tratamento descrito. Uma vez decomposto o subespaço de $S = 0$ nas representações irredutíveis de T_N , se o número de vezes que a representação simétrica (anti-simétrica), para $N=4,8,12,\dots$ (para $N=2,6,10,\dots$) aparecer for menor ou igual a 4, o estado fundamental poderá ser investigado analiticamente. Mencionaremos o uso deste critério em exemplos do próximo capítulo.

Como parte auxiliar na investigação da simetria do Hamiltoniano temos os diagramas de conexões [9]. Nesses cada interação spin-spin, no sistema de N spins, é representada por uma linha, como mostra a fig. 3.2. Para cadeias lineares com N spins os diagramas de conexões fornecem uma estrutura de grupo C_{Nv} .

Devido a complexidades de se investigar todas as permutações que formam o grupo T_N , podemos trabalhar em baixa simetria, i.é, não explorando todas operações de simetria de $\mathcal{H}$. Isto nos possibilita a utilização de tabelas de caracteres conhecidas ou de fácil construção. Assim, os diagramas

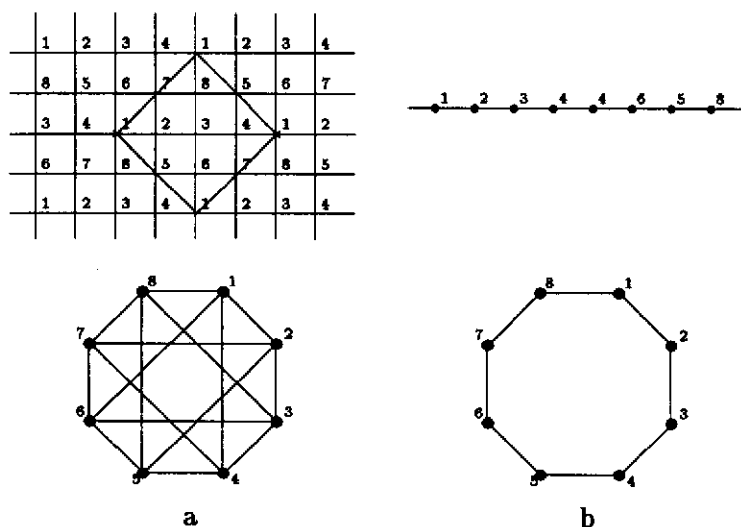


Figura 3.2: Exemplo de diagramas de conexões para 8 sítios: (a) cluster bidimensional e (b) cadeia linear

de conexões nos sugere, por exemplo, que podemos trabalhar com simetria C_N ao invés de simetria C_{N_v} para cadeias lineares. Da mesma forma, podemos trabalhar com simetria C_N para clusters bidimensionais, tendo como compromisso uma redução não tão eficiente da dimensionalidade.

Capítulo 4

Cadeias Lineares e Clusters

4.1 Cadeias Lineares

Nesta seção aplicaremos as técnicas de teoria de grupos apresentadas nos capítulos anteriores para calcular analiticamente os estados fundamentais exatos de algumas cadeias lineares de Heisenberg antiferromagnéticas com condições de contorno periódicas. Estes estados serão utilizados no cálculo de algumas grandezas físicas como energia e correlações de spin.

As cadeias lineares, com N spins e condições de contorno periódicas, possuem simetria análoga a dos grupos C_{Nv} , como vimos através dos diagramas de conexões. Vamos, porém, trabalhar apenas com a simetria cíclica C_N .

Iniciando com o sistema mais simples, $N = 2$, escrevemos a tabela de caracteres e os subespaços S decompostos,

O estado fundamental é anti-simétrico e pela tabela de caracteres vemos que só há uma possibilidade,

$$|GS\rangle_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle). \quad (4.1)$$

N=2		
C_2	E	C_2
A	1	1
B	-1	-1
$\Gamma^{S=0}$	1	-1
$\Gamma^{S=1}$	1	1
		B
		A

Tabela 4.1: Tabela de caracteres para o grupo C_2 e as decomposições nas representações irredutíveis

N=4				
C_4	E	C_4	C_2	C_4^3
A	1	1	1	1
B	1	-1	1	-1
E	1	i	-1	$-i$
$\bar{E}$	1	$-i$	-1	i
$\Gamma^{S=0}$	2	0	2	0
$\Gamma^{S=1}$	3	-1	-1	-1
$\Gamma^{S=2}$	1	1	1	1
				$A + B$
				$B + E + \bar{E}$
				A

Tabela 4.2: Tabela de caracteres para o grupo C_4 e as decomposições nas representações irredutíveis

Para $N = 4$ temos a tabela de caracteres e a decomposição dos 3 subespaços S

O estado fundamental é simétrico e após a projeção de um estado em $S = 0$ na representação irredutível A , obtemos

$$|GS\rangle_4 = \frac{1}{\sqrt{12}} [2(|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle) - |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle - |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle - |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle], \quad (4.2)$$

que possui a mesma forma que para o cluster bidimensional.

N=6 C_6	E	C_6	C_3	C_2	C_3^2	C_6^5	
A	1	1	1	1	1	1	
B	1	-1	1	-1	1	-1	
E_1	1	ϵ	$-\epsilon^*$	-1	$-\epsilon$	ϵ^*	
$\bar{E}_1$	1	ϵ^*	$-\epsilon$	-1	$-\epsilon^*$	ϵ	
E_2	1	$-\epsilon^*$	$-\epsilon$	1	$-\epsilon^*$	$-\epsilon$	
$\bar{E}_2$	1	$-\epsilon$	$-\epsilon^*$	1	$-\epsilon$	$-\epsilon^*$	
$\Gamma^{S=0}$	5	0	2	-3	2	0	$A + 2B + E_1 + \bar{E}_1$
$\Gamma^{S=1}$	9	0	0	3	0	0	$2A + B + E_1 + \bar{E}_1 + 2E_2 + 2\bar{E}_2$
$\Gamma^{S=2}$	5	-1	-1	-1	-1	-1	$B + E_1 + \bar{E}_1 + E_2 + \bar{E}_2$
$\Gamma^{S=3}$	1	1	1	1	1	1	A

Tabela 4.3: Tabela de caracteres para o grupo C_6 e as decomposições nas representações irredutíveis

Seguindo para o sistema de $N = 6$, temos que investigar um estado fundamental composto de $\binom{6}{3} = 20$ funções. Escrevendo novamente a tabela de caracteres com a redução dos 4 subespaços S , temos

Como a representação irredutível antisimétrica B aparece 2 vezes, temos pelo critério de solubilidade que podemos investigar o estado fundamental analiticamente. Após a projeção dos estados em $S = 0$ na representação B , obtemos dois estados

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{8}} [-|\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle - |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle], \quad (4.3)$$

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{72}} [3(|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle) - 2(|\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle) \quad (4.4)$$

$$\begin{aligned}
& -|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle \\
& -|\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle \\
& + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle.
\end{aligned}$$

Com estes estados representamos o Hamiltoniano restrito ao subespaço co $S = 0$ e simetria B

$$\mathcal{H}_{S=0,B} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{3}{2} \\ -\frac{3}{2} & -2 \end{pmatrix} \quad (4.5)$$

Diagonalizando $\mathcal{H}_{S=0,B}$ obtemos o estado fundamental para o sistema de 6 spins

$$\begin{aligned}
|GS\rangle_6 = & \frac{3}{8\sqrt{13-2\sqrt{13}}} \left((1+\sqrt{13}) (|\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle) \right. \\
& + 2(|\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle \\
& + |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle \\
& - |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle) \\
& + (3-\sqrt{13}) (|\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle \\
& \left. + |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle) \right). \quad (4.6)
\end{aligned}$$

O último sistema linear que iremos tratar é o caso de $N = 8$. A dimensionalidade do espaço de projeção total M é igual a $\binom{8}{4} = 70$. A tabela de caracteres do grupo C_8 nos permite uma redução à dimensão 3 na diagonalização do estado fundamental, que pertence a representação irredutível A .

Utilizando novamente os projetores de Young e o projetor da representação irredutível A , obtemos os três estados simétricos no subespaço $S = 0$,

N=8								
C_8	E	C_8	C_4	C_2	C_4^3	C_8^3	C_8^5	C_8^7
A	1	1	1	1	1	1	1	1
B	1	-1	1	1	1	-1	-1	-1
E_1	1	ϵ	i	-1	- i	$-\epsilon^*$	$-\epsilon$	ϵ^*
$\bar{E}_1$	1	ϵ^*	- i	-1	i	$-\epsilon$	$-\epsilon^*$	ϵ
E_2	1	i	-1	1	-1	- i	i	- i
$\bar{E}_2$	1	- i	-1	1	-1	i	- i	i
E_3	1	$-\epsilon$	i	-1	- i	ϵ^*	ϵ	$-\epsilon^*$
$\bar{E}_3$	1	$-\epsilon^*$	- i	-1	i	ϵ	ϵ^*	$-\epsilon$
$\Gamma^{S=0}$	14	0	2	6	2	0	0	0
$\Gamma^{S=1}$	28	0	0	-4	0	0	0	0
$\Gamma^{S=2}$	20	0	0	4	0	0	0	0
$\Gamma^{S=3}$	7	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
$\Gamma^{S=4}$	1	1	1	1	1	1	1	1

$$\begin{aligned}
\Gamma^{S=0} &= 3A + 3B + E_1 + \bar{E}_1 + 2E_2 + 2\bar{E}_2 + E_3 + \bar{E}_3 \\
\Gamma^{S=1} &= 3A + 3B + 4E_1 + 4\bar{E}_1 + 3E_2 + 3\bar{E}_2 + 4E_3 + 4\bar{E}_3 \\
\Gamma^{S=2} &= 3A + 3B + 2E_1 + 2\bar{E}_1 + 3E_2 + 3\bar{E}_2 + 3E_3 + 3\bar{E}_3 \\
\Gamma^{S=3} &= B + E_1 + \bar{E}_1 + E_2 + \bar{E}_2 + E_3 + \bar{E}_3 \\
\Gamma^{S=4} &= A
\end{aligned} \tag{4.7}$$

Tabela 4.4: Tabela de caracteres para o grupo C_8 e as decomposições nas representações irredutíveis

[illegible]

$$\begin{aligned}
& +14(|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle \\
& + |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle \\
& + |\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle \\
& + |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle \\
& + |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle \\
& + |\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle)) \\
& -31(|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle \\
& + |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle \\
& + |\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle \\
& + |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle \\
& + |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle \\
& + |\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle)) \\
& +19(|\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle \\
& + |\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle \\
& + |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle \\
& + |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle \\
& + |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle \\
& + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle))
\end{aligned}$$

Segundo estes estados, o Hamiltoniano restrito a $S = 0$ e a representação irredutível A é representado por,

$$\mathcal{H}_{S=0,A} = \begin{pmatrix} -\frac{15}{8} & \frac{12}{\sqrt{57}\sqrt{6}} & \frac{315}{4\sqrt{6}\sqrt{570}} \\ \frac{12}{\sqrt{57}\sqrt{6}} & -\frac{42}{57} & -\frac{240}{\sqrt{57}\sqrt{570}} \\ \frac{315}{4\sqrt{6}\sqrt{570}} & -\frac{240}{\sqrt{57}\sqrt{570}} & -\frac{211}{152} \end{pmatrix}, \quad (4.11)$$

A diagonalização de $\mathcal{H}_{S=0,A}$ nos leva ao estado fundamental deste sistema linear,

[illegible]

N	E_g	E_g/N	$\langle S_z(1)S_z(2) \rangle$	$\langle S_z(1)S_z((N/2) + 1) \rangle$
2	-1.5000	-0.75000	-0.25000	
4	-2.0000	-0.50000	-0.16667	-0.083333
6	-2.8028	-0.46713	-0.15571	-0.077256
8	-3.6511	-0.45639	-0.15213	-0.062984
∞		-0.44315		

Tabela 4.5: Tabela dos valores de, energia do estado fundamental, energia do estado fundamental por número de sítios, correlação entre primeiros vizinhos e correlação entre vizinhos mais distantes, obtidos exatamente para as cadeias estudadas.

Tendo estudado de forma analítica exata os estados fundamentais destes sistemas lineares, podemos calcular grandezas físicas como, energia do estado fundamental e correlações de spins. Exibimos na tabela 4.5 estes resultados, onde o último valor da tabela representa o cálculo analítico exato, para um sistema infinito, via ansatz de Bethe [2].

4.2 Clusters Bidimensionais

Tendo estudado, como exemplo no capítulo anterior, o sistema planar de quatro sítios, investigaremos nesta seção outros sistemas bidimensionais de interesse.

O primeiro deles é o sistema planar com 6 sítios esquematizado na fig. 4.1.

O diagrama de conexões nos sugere uma simetria de grupo C_{6v} , que será explorada na redução da dimensionalidade. A tabela de caracteres é dada por

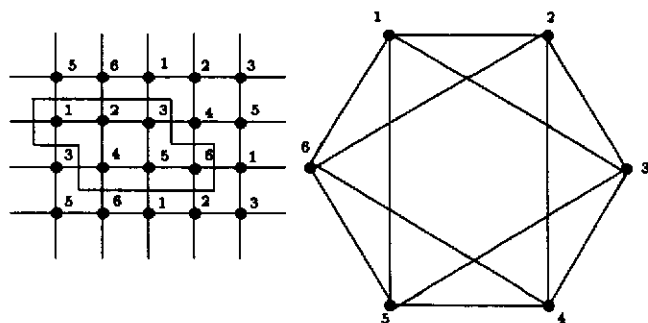


Figura 4.1: Simetria da rede quadrada com 6 sítios e seu diagrama de conexões.

C_{6v}	E	$2C_6$	$2C_3$	C_2	$3\sigma_v$	$3\sigma_d$
A_1	1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	1	-1	-1
B_1	1	-1	1	-1	1	-1
B_2	1	-1	1	-1	-1	1
E_1	2	1	-1	-2	0	0
E_2	2	1	-1	2	0	0
$\Gamma^{S=0}$	5	0	2	-3	-3	1

Tabela 4.6: Tabela de caracteres para o grupo C_{6v} e as decomposições nas representações irredutíveis

onde a redução do subespaço $S = 0$ fornece

$$\Gamma^{S=0} = A_2 + 2B_2 + E_1. \quad (4.13)$$

Usando os projetores de Young e o projetor da representação anti-simétrica, obtemos os dois seguintes estados

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle = & \frac{1}{6\sqrt{5}} [-3(|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle) \\ & + (|\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle - |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle \\ & + |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle \\ & + |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle) \\ & + 5(|\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle \\ & + |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle)]. \end{aligned} \quad (4.14)$$

$$\begin{aligned} |\psi_2\rangle = & \frac{1}{\sqrt{20}} [2(|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle) \\ & + (|\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle \\ & + |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle \\ & + |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle)]. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Com estes estados representamos o Hamiltoniano restrito ao subespaço $S = 0$ e simetria B , temos

$$\mathcal{H}_{S=0,B} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{5} & -\frac{3}{5} \\ -\frac{3}{5} & -\frac{9}{5} \end{pmatrix}. \quad (4.16)$$

Diagonalizando $\mathcal{H}_{S=0,B}$ obtemos o estado fundamental para este cluster de 6 spins

$$\begin{aligned}
|GS\rangle_6 = \frac{1}{6\sqrt{6}} [& 3(|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle) \\
& + 2(|\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle \\
& + |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle \\
& + |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle) \\
& + (|\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle \\
& + |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle)].
\end{aligned} \tag{4.17}$$

O segundo sistema a ser investigado nesta seção é o cluster bidimensional com 8 sítios, cuja geometria e diagrama de conexões foram exibidas na fig.3.3 do terceiro capítulo.

Podemos investigar o estado fundamental analiticamente deste sistema usando uma simetria mais baixa, ou seja, reduzindo a dimensionalidade utilizando apenas as operações do grupo cíclico. Neste sentido, temos aproveitado a decomposição feita anteriormente para o grupo C_8 , quando estudamos as cadeias lineares. Utilizando as mesmas 3 funções exibidas anteriormente calculamos os elementos de matriz para este novo Hamiltoniano e obtemos,

$$\mathcal{H}_{S=0,A} = \begin{pmatrix} -\frac{21}{4} & \frac{27}{\sqrt{57}\sqrt{6}} & \frac{105}{2\sqrt{6}\sqrt{570}} \\ \frac{27}{\sqrt{57}\sqrt{6}} & -\frac{36}{57} & -\frac{165}{\sqrt{57}\sqrt{570}} \\ \frac{105}{2\sqrt{6}\sqrt{570}} & -\frac{165}{\sqrt{57}\sqrt{570}} & -\frac{322}{152} \end{pmatrix}, \tag{4.18}$$

A diagonalização fornece uma energia de estado fundamental por sítio com valor $E_g/N = -0.75$ e estado fundamental

$$\begin{aligned}
|GS\rangle_8 = & 0.44721(|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle) \\
& + 0.074536(|\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle \\
& + |\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle \\
& + |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle)
\end{aligned} \tag{4.19}$$

$$\begin{aligned}
& +0.074536(|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle \\
& + |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle) \\
& +0.074536(|\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle \\
& + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle \\
& + |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle) \\
& +0.074536(|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle \\
& + |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle \\
& + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle \\
& + |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle \\
& + |\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle) \\
& -0.11180(|\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle \\
& + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle \\
& + |\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle \\
& + |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle \\
& + |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle \\
& + |\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle) \\
& -0.11180(|\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle \\
& + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle \\
& + |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle \\
& + |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle \\
& + |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle \\
& + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle)
\end{aligned}$$

O valor obtido para a energia do estado fundamental é bastante próximo do valor calculado numericamente por Ishino *et alli* [9] para sistemas maiores ($N=10, 16, \dots, 20$).

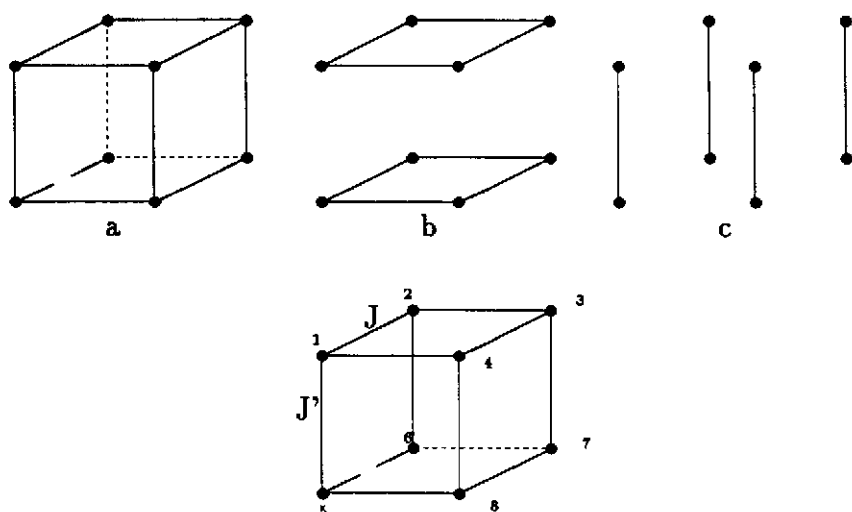


Figura 4.2: Geometria do cluster nos casos limites: interações iguais (a), $J = J'$, interações planas (b), $J' = 0$ e interações lineares (c), $J = 0$.

4.3 Cluster Tridimensional

Vamos aplicar nesta seção as técnicas de grupo prescritas anteriormente para calcular a energia do estado fundamental de um cluster cúbico não isotrópico. O Hamiltoniano com condições de contorno periódicas para este sistema é dado por

$$\mathcal{H} = J(S_1.S_2 + S_1.S_4 + S_2.S_3 + S_3.S_4 + S_5.S_6 + S_5.S_8 + S_6.S_7 + S_7.S_8) + J'(S_5.S_1 + S_6.S_2 + S_7.S_3 + S_8.S_4) \quad (4.20)$$

onde $J, J' > 0$ e a geometria está representada na fig.4.2.

Temos inicialmente $2^8 = 256$ funções para investigar o estado fundamental. O grupo do Hamiltoniano $G(\mathcal{H})$, gerado por todas as permutações que deixam $\mathcal{H}$ invariante, é o grupo D_{4h} (tabela abaixo utilizando a notação de Hamermesh [7]), pois temos planos de simetria horizontais. As dimensões dos espaços S_{tot} são obtidas de maneira gráfica utilizando os diagramas de Young. A tabela de caracteres é obtida facilmente a partir de comparações entre as operações do grupo de permutações (S_8 , apêndice) e o pontual (D_{4h}).

D_{4h}	E	$2C_4$	C_2	$2C'_2$	$2C''_2$	i	$2S_4$	σ_h	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
A_{2g}	1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1
B_{1g}	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	1	-1
B_{2g}	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1
E_g	2	0	-2	0	0	2	0	-2	0	0
A_{1g}	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
A_{2g}	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1
B_{1g}	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1
B_{2g}	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1
E_u	2	0	-2	0	0	-2	0	2	0	0
$\Gamma_{S=0}$	14	2	6	6	6	6	2	6	6	2
$\Gamma_{S=1}$	28	0	-4	-4	-4	-4	0	-4	-4	4
$\Gamma_{S=2}$	20	0	4	4	4	4	0	4	4	4
$\Gamma_{S=3}$	7	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	3
$\Gamma_{S=4}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1

Tabela 4.7: Tabela de caracteres para o grupo D_{4h} e das representações de spin total

Usando a relação de ortogonalidade dos caracteres decompomos as representações de S nas representações irredutíveis do grupo pontual na seguinte forma

$$\begin{aligned}
 \Gamma_{S=0} &= 5A_{1g} + 2B_{1g} + B_{2g} + E_g + A_{1u} + B_{2u} + E_u \\
 \Gamma_{S=1} &= 2A_{2g} + 2B_{2g} + 4E_g + A_{1u} + 3A_{2u} + 3B_{1u} + B_{2u} + 4E_u \\
 \Gamma_{S=2} &= 4A_{1g} + 2B_{1g} + 2B_{2g} + 2E_g + A_{1u} + A_{2u} + B_{1u} + B_{2u} + 2E_u \\
 \Gamma_{S=3} &= B_{2g} + E_g + A_{2u} + B_{1u} + E_u \\
 \Gamma_{S=4} &= A_{1g}.
 \end{aligned}$$

Na redução apresentada obtivemos um total de 5 estados pertencentes a representação irredutível simétrica e com $S = 0$. O critério de solubilidade analítica, apresentado anteriormente, não nos diz nada a respeito da possibilidade de encontrarmos, via métodos algébricos, a solução exata para o estado fundamental. Devemos, portanto, reduzir a dimensionalidade segundo os métodos aplicados anteriormente, e diagonalizar numericamente o Hamiltoniano restrito a $S = 0$ e A .

Obtemos como solução para a energia do estado fundamnetal o gráfico da fig. 4.3, onde observamos os seguintes limites relativos aos acoplamentos (via constantes J e J') intra e extra-planos:

- i. $J = J'$ cluster cúbico com 8 sítios $E_g = -8.8$
- ii. $J' = 0$ 2 clusters planos de 4 sítios $E_g = 2 \times (-4) = -8$
- iii. $J = 0$ 4 clusters lineares de 2 sítios $E_g = 4 \times -1.5 = -6$

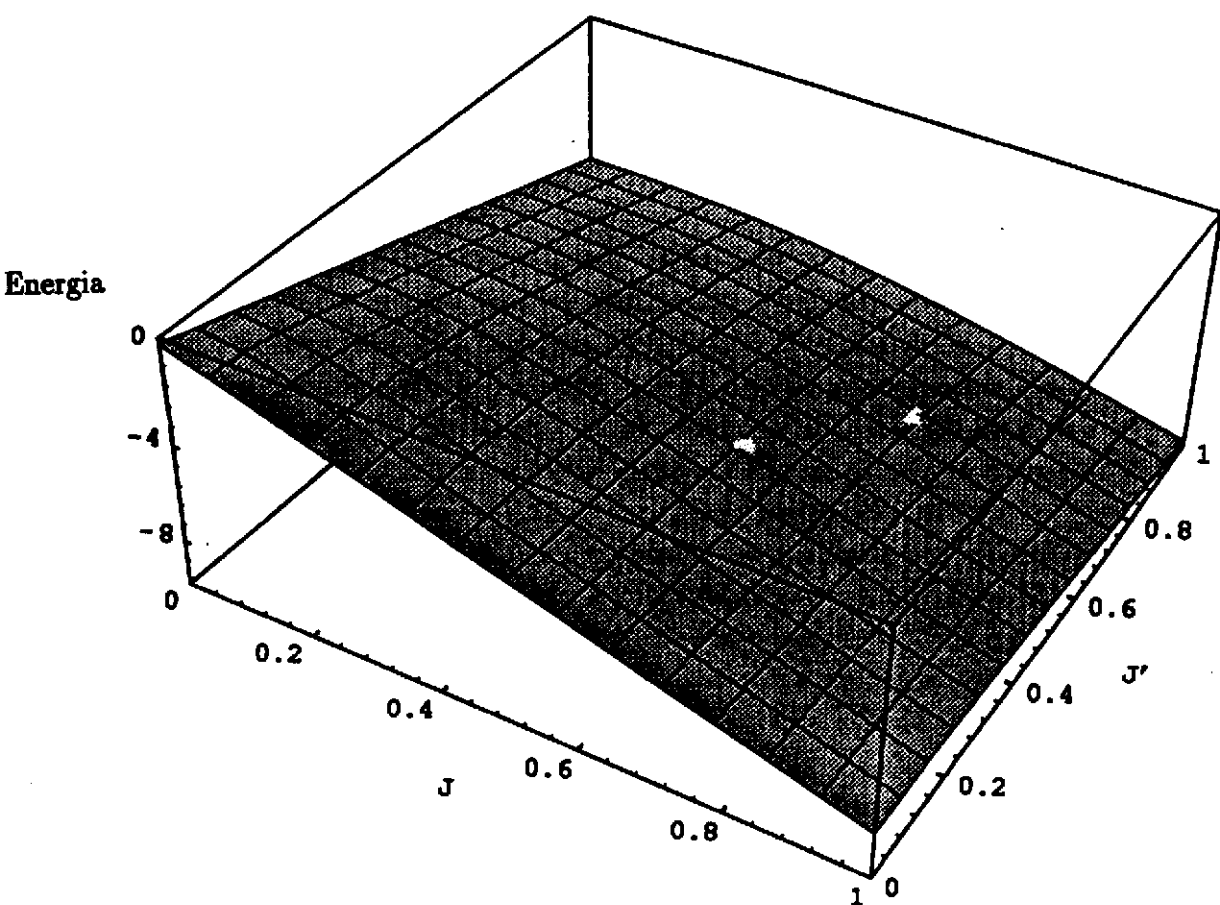


Figura 4.3: Energia do estado fundamental para vários acoplamentos

Capítulo 5

Conclusão

Temos visto no segundo capítulo, a partir da revisão do teorema de Lieb, que o ordenamento da energia para o hamiltoniano de Heisenberg, segundo os subespaços de spin total S , é da forma $E(S+1) > E(S)$. Associamos este resultado ao teorema de Oguchi-Kitatani, o qual prevê um comportamento alternado para a paridade das funções de onda com relação aos subespaços S , e obtemos que os estados fundamentais estão no subespaço de $S = 0$ e são simétricos, para $N=4,8,12\dots$ e anti-simétricos, para $N=2,6,10\dots$

Prescrevemos no terceiro capítulo a técnica em teoria de grupos utilizada na redução da dimensionalidade dos subespaços que contêm os estados fundamentais para os diversos sistemas. Um exemplo para $N = 4$ foi explicitado de forma minuciosa, onde as permutações que deixaram o hamiltoniano invariante formaram um grupo com estrutura de classes idêntica ao grupo C_{4v} . A partir da determinação do grupo de simetria T_N foi reduzida a representação com $S = 0$ e projetado o estado fundamental simétrico. Enfatizamos, também neste capítulo, um critério de solubilidade analítica, que prevê, a partir da redução da representação com $S = 0$ a possibilidade de diagonalização exata do estado fundamental. Estudamos outras maneiras de se reduzir a dimensionalidade usando baixa simetria, com a vantagem de se trabalhar com grupos e tabelas de caracteres conhecidos ou de construção trivial.

Uma coleção de aplicações e resultados da técnica proposta foi exi-

bida no quarto capítulo. Os sistemas em cadeias lineares, para $N=2,4,6$ e 8 , forneceram resultados exatos. Podemos notar que, devido à convergência logarítmica [4] no *scaling* na região de estudo (hamiltoniano de Heisenberg isotrópico), o valor da energia do estado fundamental para $N=8$ já se faz bastante próximo do valor calculado para uma rede infinita via *ansatz* de Bethe [1]. Também vale mencionar que os valores calculados para energias e correlações estão em perfeita concordância com os cálculos numéricos de Medeiros [13] [14]. Os *clusters* planares estudados, para $N=4,6$ e 8 , forneceram resultados bons, para $N=4$ e 8 , pois, cálculos numéricos para $N=10$ [9] fornecem o valor aproximado de $E_g/N = -0.73$. Para $N=6$ o sistema se comportou de forma oscilatória (se pensarmos em uma possível lei de escala), porém, nada podemos afirmar, por não termos trabalhado com sistemas maiores. Temos grande confiança nestes resultados, pois, obtivemos valores idênticos através de cálculos variacionais. O único sistema tridimensional calculado mostrou resultados bastante interessantes. Notamos um comportamento que já *a priori* esperávamos, i.é, a interação entre planos faz diminuir a energia do estado fundamental.

O tratamento de sistemas finitos com número maior de spins seria uma extensão possível para o presente trabalho. Este tratamento requer o uso de diagonalizações numéricas associadas a algoritmos algébricos, os quais se baseiam em analogia estreita à prescrição feita no terceiro capítulo. Um esquema deste tipo de tratamento é proposto na fig.5.1, abaixo.

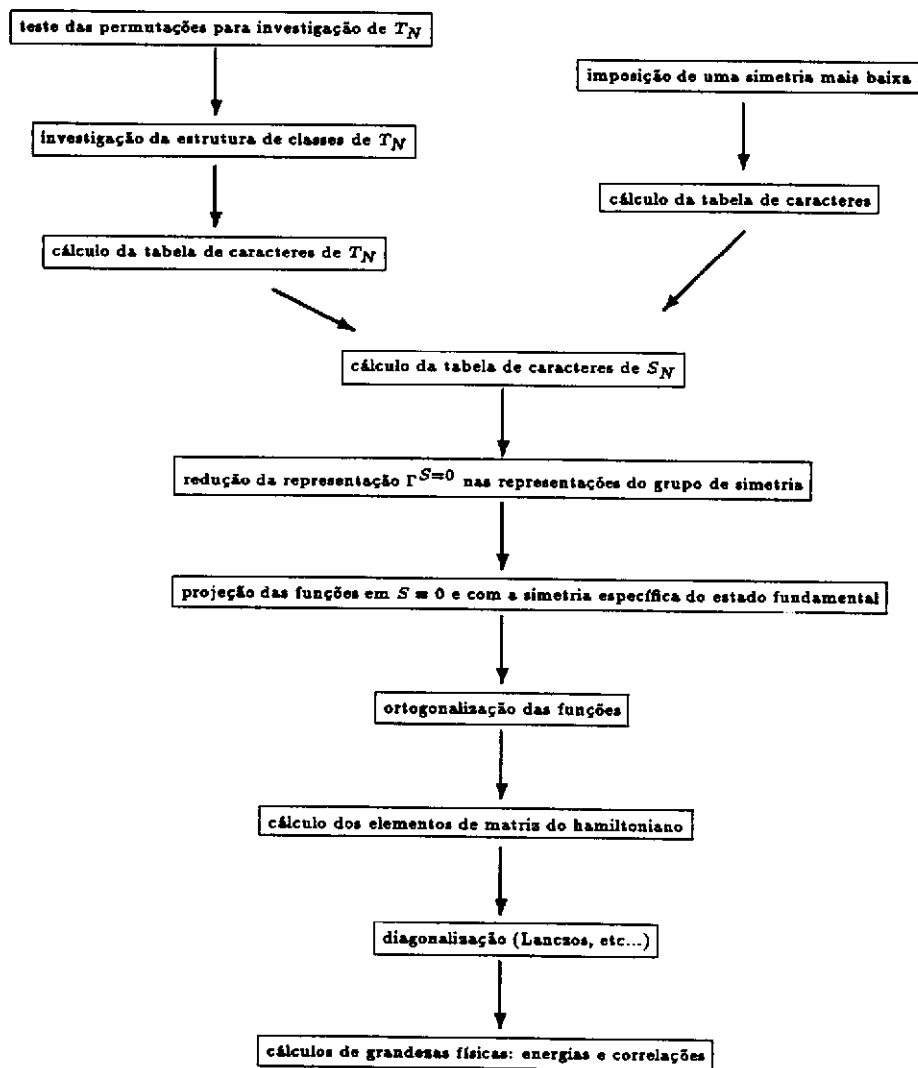


Figura 5.1: Esquema proposto para o tratamento de sistemas maiores.

Capítulo 6

Apêndice

Utilizamos ao longo do trabalho diversas definições e resultados que se encontram bem estabelecidos na teoria de grupos. Devido as variações de notações encontradas na literatura e a especificidade de alguns resultados usados, fazemos neste apêndice um resumo das principais aspectos da teoria de grupos utilizada no trabalho.

6.1 Grupo Simétrico

O grupo simétrico $S_n = (\mathcal{P}, \otimes)$ é definido como sendo o conjunto de todas permutações possíveis de n objetos ($\mathcal{P}$) com a operação binária $\otimes$ (às vezes chamada por simplicidade de produto) definida como sendo a composição de permutações.

Não há dificuldades em se demonstrar, através da definição acima, que S_n é um grupo [6] e que todo elemento do conjunto $\mathcal{P}$ pode ser escrito como um produto de permutações cíclicas disjuntas.

Exemplo: Seja S_6 o grupo de permutação de 6 objetos. A maneira mais convencional de se representar um elemento s de S_6 é da forma

$$s = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ a_1 & a_2 & a_3 & a_4 & a_5 & a_6 \end{pmatrix}$$

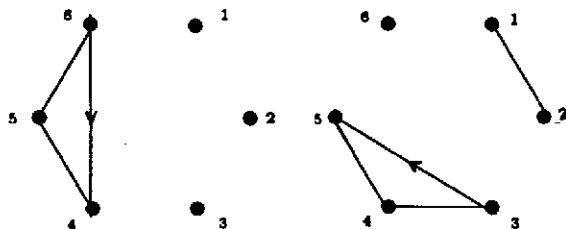


Figura 6.1: (a) permutação $(1)(2)(3)(456)$ e (b) permutação $(12)(354)(6)$.

Assim, a permutação $s_1 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 1 & 2 & 3 & 5 & 6 & 4 \end{pmatrix}$ mantém os elementos 1, 2 e 3 fixos e permuta de forma cíclica os elementos 4, 5 e 6 (fig.6.1 (a)); e a permutação $s_2 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 2 & 1 & 5 & 3 & 4 & 6 \end{pmatrix}$ permuta os elementos 1 e 2, permuta de forma cíclica os elementos 3, 4 e 5 e mantém o elemento 6 fixo (fig 6.1 (b)). Outra maneira bastante usada de se denotar os elemento de S_n é através de ciclos disjuntos, assim $s_1 = (1)(2)(3)(456)$, possui três ciclos de um elemento e 1 ciclo de três elementos; $s_2 = (12)(354)(6)$, possui 1 ciclo de 2 elementos 1 ciclo de três elementos e 1 ciclo de 1 elemento.

Podemos definir em $\mathcal{P}$ (como em qualquer conjunto) uma relação de equivalência $\sim$. Definiremos $\sim$ em $\mathcal{P}$ da forma, sejam $p_1, p_2 \in \mathcal{P}$, temos

$p_1 \sim p_2 \iff p_1$ possuir a mesma estrutura de decomposição em ciclos disjuntos que p_2 .

$\sim$ é uma relação de equivalência, pois é reflexiva, simétrica e transitiva. Com esta relação induzimos uma estrutura de classes através do grupo quociente $S_n / \sim$.

Exemplo: O grupo simétrico S_6 possui com a relação de equivalência $\sim$, definida acima, as seguintes classes:

$(x)(x)(x)(x)(x)(x)$	6 1-ciclos	(1^6)
$(x)(x)(x)(x)(xx)$	4 1-ciclos e 1 2-ciclo	$(1^4, 2)$
$(x)(x)(x)(xxx)$	3 1-ciclos e 1 3-ciclo	$(1^3, 3)$
$(x)(x)(xx)(xx)$	2 1-ciclos e 2 2-ciclos	$(1^2, 2^2)$
$(x)(x)(xxxx)$	2 1-ciclos e 1 4-ciclo	$(1^2, 4)$
$(xx)(xx)(xx)$	3 2-ciclos	(2^3)
$(x)(xx)(xxx)$	1 1-ciclo, 1 2-ciclo e 1 3-ciclo	$(1, 2, 3)$
$(x)(xxxxx)$	1 1-ciclo e 1 5-ciclo	$(1, 5)$
$(xx)(xxxx)$	1 2-ciclo e 1 4-ciclo	$(2, 4)$
$(xxx)(xxx)$	2 3-ciclos	(3^2)
$(xxxxxx)$	1 6-ciclo	(6)

onde na última coluna representamos a estrutura de ciclos, que escrevemos simbolicamente como $(\nu) = (1^{\nu_1}, 2^{\nu_2}, \dots, n^{\nu_n})$.

Uma partição de n está definida por um conjunto de números $[\lambda] = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$, tais que,

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= \nu_1 + \nu_2 + \dots + \nu_n \\ \lambda_2 &= \nu_2 + \nu_3 + \dots + \nu_n \\ &\dots \dots \\ \lambda_n &= \nu_n\end{aligned}$$

Cada partição de n está associada a uma particular estrutura de ciclos e, portanto, a uma classe conjugada de S_n . Como o número de Representações Irredutíveis (RI) é igual ao número de classes conjugadas, podemos usar as partições $[\lambda]$ para identificar as RI's.

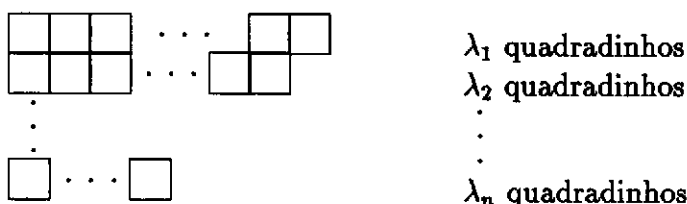
A grande importância dos grupos simétricos dentro da teoria de grupos é devida à existência de isomorfismos entre qualquer grupo finito de ordem n com um subgrupo de S_n . Esse resultado, enunciado formalmente através do *teorema de Cayley* limita a procura de estruturas diferentes para um grupo de ordem n .

Teorema de Cayley: Seja $G = (\mathcal{G}, \otimes)$ um grupo de ordem n , tal que $\mathcal{G}$ possui um número finito de elementos, então existe um grupo T_n , subgrupo de S_n , tal que G é isomorfo a T_n .

A demonstração do teorema é imediata, pois a tabela de multiplicação do grupo G é composta de rearranjos diferentes do grupo. Assim, todo elemento de G pode ser associado com uma permutação. $\square$

6.2 Moldes de Young

Dada uma partição $[\lambda] = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$, que representa uma RI de S_n , associamos a ela um *molde de Young*, definido através do seguinte diagrama,



A dimensão de cada RI associada à $[\lambda]$ pode ser obtida a partir do número de *tabelas regulares de Young* possíveis. Uma *tabela regular de Young* é um molde de Young (para uma RI de S_n) preenchido com os números $(1, 2, 3, \dots, n)$ da seguinte forma: para cada linha os numerais não decrescem quando indo da esquerda para a direita e para cada coluna os numerais não decrescem de cima para baixo.

Exemplo: Para a RI $[3100]$ de S_4 temos o molde de Young , que possui 3 tabelas regulares: , , e . Com isso temos que esta RI tem dimensão 3.

As tabelas regulares de Young foram definidas de maneira a possibilitar a obtenção dos projetores nas RI, que chamaremos, por praticidade, de *projetores de Young*. Os projetores são obtidos a partir de dois operadores, P e Q . P é definido como sendo o produto, percorrendo todas as linhas do diagrama, das somas de todas permutações possíveis em cada linha. De forma parecida Q é definido como sendo o produto, percorrendo todas as colunas do diagrama, das somas, pesadas pela paridade ($\times(-1)$ se o ciclo tiver um número par de elementos), de todas permutações possíveis em cada coluna. O projetor de Young para a RI associada a tabela regular será dado por

$$Y = kQP$$

onde k é uma constante de proporcionalidade.

Exemplo: a tabela regular $\begin{smallmatrix} 1 & 2 & 4 \\ 3 & 5 \end{smallmatrix}$ possui $P = [e + (12) + (14) + (24) + (124) + (142)][e + (35)]$ e $Q = [e - (13)][e - (25)]$ e o projetor de Young na RI é proporcional ao produto QP . A tabela regular $\begin{smallmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{smallmatrix}$ da RI antissimétrica possui $P = e$ e $Q = [e - (12) - (13) - (23) + (123) + (132)]$ e o projetor de Young na RI é o determinate de Slater.

6.3 Caracteres do Grupo S_8

Os sistemas de 8 sítios foram estudados através da redução dos espaços de spin total nas representações irredutíveis dos diversos grupos de simetria pontual. Esta redução é feita através da tabela de caracteres do grupo das permutações, cujos elementos foram calculados via métodos standards [7] e estão listados na seguinte tabela.

	1	28	210	420	105	112	1120	1120	1680	1120	420	1260	3360	2520	1260	1344	2688	4032	3360	3360	5760	5040
	1^8	$1^6, 2$	$1^4, 2^2$	$1^2, 2^3$	2^4	$1^5, 3$	$1^2, 3^2$	$2, 3^2$	$1, 2^2, 3$	$1^3, 2, 3$	$1^4, 4$	4^2	$1, 3, 4$	$1^2, 2, 4$	$2^2, 4$	$1^3, 5$	$3, 5$	$1, 2, 5$	$1^2, 6$	$2, 6$	$1, 7$	8
(8)	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
(7,1)	7	5	3	1	-1	4	1	-1	0	2	3	-1	0	1	-1	2	-1	0	1	-1	0	-1
(6,2)	20	10	4	2	4	5	-1	1	1	1	2	0	-1	0	2	0	0	0	-1	1	-1	0
(5,3)	28	10	4	2	-4	1	1	1	1	1	-2	0	1	0	-2	-2	1	0	-1	-1	0	0
(4,4)	14	4	2	0	6	-1	2	-2	-1	1	-2	2	1	0	2	-1	-1	-1	0	0	0	0

Tabela 6.1: Caracteres calculados para o grupo S_8

Lista de Figuras

2.1	Exemplos de geometrias com duas subredes para 1, 2 e 3 dimensões ((a),(b) e (c) respectivamente).	9
2.3	Adição de 2 spins no sistema de N spins.	14
3.1	Sistema bidimensional com $N = 4$ e condições de contorno periódicas	19
3.2	Exemplo de diagramas de conexões para 8 sítios: (a) cluster bidimensional e (b) cadeia linear	23
4.1	Simetria da rede quadrada com 6 sítios e seu diagrama de conexões.	34
4.2	Geometria do cluster nos casos limites: interações iguais (a), $J = J'$, interações planas (b), $J' = 0$ e interações lineares (c), $J = 0$	38
4.3	Energia do estado fundamental para vários acoplamentos . . .	41
5.1	Esquema proposto para o tratamento de sistemas maiores. . .	44
6.1	(a) permutação (1)(2)(3)(456) e (b) permutação (12)(354)(6). .	46

Lista de Tabelas

3.1	Tabela de caracteres do grupo T_4 e as decomposições nas representações irredutíveis	21
4.1	Tabela de caracteres para o grupo C_2 e as decomposições nas representações irredutíveis	25
4.2	Tabela de caracteres para o grupo C_4 e as decomposições nas representações irredutíveis	25
4.3	Tabela de caracteres para o grupo C_6 e as decomposições nas representações irredutíveis	26
4.4	Tabela de caracteres para o grupo C_8 e as decomposições nas representações irredutíveis	28
4.5	Tabela dos valores de, energia do estado fundamental, energia do estado fundamental por número de sítios, correlação entre primeiros vizinhos e correlação entre vizinhos mais distantes, obtidos exatamente para as cadeias estudadas.	33
4.6	Tabela de caracteres para o grupo C_{6v} e as decomposições nas representações irredutíveis	34
4.7	Tabela de caracteres para o grupo D_{4h} e das representações de spin total	39
6.1	Caracteres calculados para o grupo S_8	50

Bibliografia

- [1] N. W. Ashcroft e N. D. Mermin, *Solid State Physics*, Hold Rinehart, N.Y. (1976).
- [2] H. Bethe, *Z. Phys.* **71**, 205 (1931).
- [3] R. J. Birgeneau, *Am. J. Phys.* **58**, 1 (1990).
- [4] G. G. Cabrera, *Int. J. Mod. Phys. B* **4**, 1671 (1990).
- [5] E. Fradkin, *Field Theories of Condensed Matter Systems*, Addison-Wesley, N.Y. (1991).
- [6] A. Garcia e I. Lequain, *Álgebra: Um Curso de Introdução*, IMPA, Rio de Janeiro (1988).
- [7] M. Hamermesh, *Group Theory and Its Application to Physical Problems*, Addison-Wesley (1964).
- [8] W. Heisenberg, *Z. Phys.* **49**, 619 (1928).
- [9] T. Ishino, R. Saito e H. Kamimura, *J. Phys. Soc. Jpn.* **59**, 3886 (1990).
- [10] M. Lagos, M. Kiwi, E. R. Gagliano e G. G. Cabrera, *Sol.State Comm.* **70**, 431 (1989).
- [11] E. Lieb e D. Mattis, *J. Math. Phys.* **3**, 749 (1962).
- [12] D. C. Mattis, *The Theory of Magnetism I and II*, Springer-Verlag, Berlin (1981).

- [13] D. Medeiros e G. G. Cabrera, *Phy. Rev B* **44**, 848 (1991).
- [14] D. Medeiros, *Efeitos de Tamanho em Cadeias de Heisenberg-Ising com Interações Antiferromagnéticas*, Tese de Doutorado, Unicamp - IFGW (1990).
- [15] T. Oguchi e H. Kitatani, *Prog. Theor. Phys.* **79**, 235 (1988).
- [16] L. Prado Jr., *Sobre Modelos de Sólidos Magnéticos e a Susceptibilidade Magnética para Férmions Livres*, Monografia do Curso de Física Estatística, Unicamp - IFGW (1993).
- [17] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, N.Y. (1985).
- [18] R. M. White, *Quantum Theory of Magnetism*, Springer-Verlag, Berlim (1983).